

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ
Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования
«ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Ю.В. Данейкин, А.В. Хадкевич, К.В. Юшицин

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ЯДЕРНОГО РЕАКТОРА**

*Рекомендовано в качестве учебного пособия
Редакционно – издательским советом
Томского политехнического университета*

Издательство
Томского политехнического университета
2008

УДК
ББК

Данейкин Ю.В.

Математическое моделирование ядерного реактора: учебное пособие/ Ю.В. Данейкин, А.В. Хадкевич, К.В. Юшицин. – Томск: Издательство Томского политехнического университета, 2008. – 100 с.

В пособии изложены основные принципы построения математических моделей. Даны принципы моделирования процессов происходящих при работе ядерного реактора. Дано представление об изменении изотопного состава топлива. Рассмотрена задача о диффузии нейтронов. Даны основы метода Монте – Карло в задачах переноса излучения.

Предназначено для студентов, обучающихся по направлению 010700 «Физика», специальности 140305 «Ядерные реакторы и энергетические установки»

УДК
ББК

Рецензенты

© Данейкин Ю.В., Хадкевич А.В., Юшицин К.В., составление, 2008
© Составление. Томский политехнический университет
© Оформление. Издательство Томского политехнического университета

Оглавление

ВВЕДЕНИЕ	5
1. Основные принципы работы ядерного реактора	
1.1 Основные принципы, касающиеся работы ядерного реактора	7
1.2 Коэффициент размножения и критическое состояние реактора	8
1.3 Кинетика реактора	11
1.4 Система управления и защиты ядерного реактора	13
1.5 Водно-водяной энергетический реактор	17
1.6 Реактор РБМК	20
2. Основные понятия математического моделирования	
2.1 Понятие о математической модели	26
2.2 Дискретные математические модели	33
2.3 Непосредственная формальная аппроксимация	37
3 Численное исследование	
3.1 Изменение изотопного состава ядерного топлива	40
3.2 Накопление тяжёлых ядер в реакторе	42
3.3 Накопление продуктов деления в реакторе	46
3.4 Выгорание и воспроизводство ядерного топлива	49
3.5 Стационарное отравление реактора	51
3.6 Нестационарное отравления ксеноном Ксеноновая нестабильность	53
3.7 Стационарное отравление самарием	55
3.8 Моделирование потоков в групповом диффузионном приближении	59
4. Метод Монте – Карло в задачах переноса излучений	
4.1 Задача переноса частиц	66
4.2 Замедление нейтронов	67
4.3 Диффузия нейтронов	69
4.4 Альбеда нейтронов	70
4.5 Метод монте – карло	71
4.6 Источники нейтронов	74
4.7 Перенос нейтронов	76
4.8 Алгоритмы монте-карло	79
4.9 Моделирование источника	80
4.10 Моделирование свободного пробега частицы	80
4.11 Определение параметров столкновения	81

4.12 Определение параметров частиц после столкновения	82
4.13 Вычисление характеристик поля излучения по случайным траекториям	84
Приложение	88
Список литературы	103

ВВЕДЕНИЕ

Самоподдерживающаяся управляемая цепная реакция деления ядер (кратко — цепная реакция) была впервые осуществлена в декабре 1942 г. Группа физиков Чикагского университета, возглавляемая Э. Ферми, построила первый в мире ядерный реактор, названный СР-1. Он состоял из графитовых блоков, между которыми были расположены шары из природного урана и его двуокиси. Быстрые нейтроны, появляющиеся после деления ядер ^{235}U , замедлялись графитом до тепловых энергий, а затем вызывали новые деления ядер. Реакторы, подобные СР-1, в которых основная доля делений происходит под действием тепловых нейтронов, называют реакторами на тепловых нейтронах. В их состав входит очень много замедлителя по сравнению с ураном.

В СССР теоретические и экспериментальные исследования особенностей пуска, работы и контроля реакторов были проведены группой физиков и инженеров под руководством академика И. В. Курчатова. Первый советский реактор Ф-1 выведен в критическое состояние 25 декабря 1946 г. Реактор Ф-1 набран из графитовых блоков и имеет форму шара диаметром примерно 7,5 м. В центральной части шара диаметром 6 м по отверстиям в графитовых блоках размещены урановые стержни. Результаты исследований на реакторе Ф-1 стали основой проектов более сложных по конструкции промышленных реакторов. В 1949 г. введён в действие реактор по производству плутония, а 27 июня 1954 г. вступила в строй первая в мире атомная электростанция электрической мощностью 5 МВт в г. Обнинске.

Невозможно себе представить современное проектирование и строительство ядерных реакторов без предварительного применения математических моделей для моделирования процессов происходящих в будущем реакторе. Технические системы, существующие в нынешнее время уже невозможно исследовать обычными теоретическими методами. Прямой натурный эксперимент занимает достаточно много времени, может быть сложен в организации и дорог в проведении. Зачастую проведение натурального эксперимента является опасным или вообще невозможным, когда же дело касается ядерного реактора, то проведение такого эксперимента тем более опасно.

Рассматривая изучение технологических процессов с такой точки зрения можно прийти к выводу, что в данном случае исследование гораздо проще и менее затратно провести исследование с помощью математической модели интересующих нас процессов или явлений.

Сущность моделирования состоит в замене исходного объекта его «образом» - математической моделью, которая построена на основе физических законов, которому подчиняется интересующий нас процесс или явление.

Нельзя рассматривать моделирование как подмену научных исследовательских методологий. Напротив, само моделирование является методологией, но методологией уникальной, которая синтезирует в себе не только научные подходы свойственные, например, физике, к изучению интересующих нас объектов, но и различных математических подходов и методов, реализуемых при моделировании, а также подходов присущих программированию, поскольку исследование математические модели трудно представить без применения ЭВМ.

1. ОСНОВНЫЕ ПРИНЦИПЫ РАБОТЫ ЯДЕРНОГО РЕАКТОРА

1.1 ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ, КАСАЮЩИЕСЯ РАБОТЫ ЯДЕРНОГО РЕАКТОРА

Любой ядерный реактор состоит из следующих частей:

- активная зона с ядерным топливом и замедлителем;
- отражатель нейтронов, окружающий активную зону;
- теплоноситель;
- система регулирования цепной реакции, в том числе аварийная защита;
- радиационная защита;
- система дистанционного управления.

Основная характеристика реактора — его выходная мощность. Мощность в 1 МВт соответствует цепной реакции, при которой происходит $3 \cdot 10^{16}$ делений в 1 сек.

Активная зона ядерного реактора — пространство, в котором происходит контролируемая цепная реакция деления ядер тяжёлых изотопов урана или плутония. В ходе цепной реакции выделяется энергия в виде нейтронного и γ -излучения, β -распада, кинетической энергии осколков деления.

В состав активной зоны входят:

- ядерное топливо (Основой ЯТ является ядерное горючее — делящееся вещество)
- замедлитель (в реакторах на тепловых нейтронах)
- теплоноситель, передающий образующееся тепло за пределы реактора, например для привода электрических генераторов.
- устройства систем управления и защиты реактора (СУЗ)

Делящееся вещество может быть конструктивно отделено от замедлителя и других элементов активной зоны (гетерогенный реактор), либо быть в смеси с ними (гомогенный реактор).

В качестве замедлителя используют следующие вещества:

- вода (легководный реактор, водо-водяной реактор);
- тяжёлая вода;
- графит (графито-водный реактор, графито-газовый реактор);
- бериллий;

- органические жидкости.

В качестве теплоносителя применяются:

- вода (легководный реактор, водо-водяной реактор);
- водяной пар (кипящий реактор);
- тяжёлая вода;
- органические жидкости (реактор с органическим теплоносителем);
- гелий;
- углекислый газ;
- жидкие металлы (преимущественно натрий) (реактор с жидкометаллическим теплоносителем);

Снаружи активная зона окружается отражателем для нейтронов, состоящим, как правило, из того же вещества, что и замедлитель. Наличие отражателя необходимо для повышения эффективности использования ядерного топлива и других параметров реактора, так как отражатель возвращает назад в зону часть вылетевших из активной зоны нейтронов.

Теоретически, наилучшей формой активной зоны является шар, как фигура имеющая наименьшую площадь поверхности для заданного объёма, однако по конструктивным соображениям, активную зону чаще всего выполняют в виде цилиндра или по форме приближающейся к цилиндру.

Отражатель нейтронов — конструктивная часть ядерного реактора, окружающая активную зону. Основное назначение отражателя — предотвращение утечки нейтронов в окружающую среду. В отдельных случаях, отражатель может также называться зоной воспроизводства.

1.2 КОЭФФИЦИЕНТ РАЗМНОЖЕНИЯ И КРИТИЧЕСКОЕ СОСТОЯНИЕ РЕАКТОРА

Поскольку каждая новая цепь начинается одной частицей, то размножение цепей есть размножение частиц. Величина коэффициента размножения показывает — увеличивается, убывает или остается неизменным полное число нейтронов в реагирующем объёме по прошествии среднего времени цикла обращения нейтрона.

Каждый нейтрон, участвующий в цепном процессе, претерпевает цикл обращения: рождается в реакции деления, некоторое время существует в свободном состоянии, затем либо теряется, либо порождает новый акт деления и даёт нейтроны следующего поколения. Сменяющиеся поколения нейтронов разделены актами деления.

Критическое состояние характеризуется условием $k = 1$. При $k < 1$ состояние вещества называется подкритическим и цепная реакция быстро затухает, если в начальный момент в среде существовало какое-то число нейтронов, а если в начальный момент нейтронов не было, то цепная реакция вообще невозможна. В надкритическом состоянии $k > 1$ и цепная реакция лавинообразно нарастает до тех пор, пока в силу каких-либо причин не станет $k < 1$. Поскольку тяжёлые ядра могут делиться самопроизвольно, то какое-то малое число нейтронов всегда присутствует в среде, включающей тяжёлые нуклиды, а значит, всегда находится первый нейтрон, начинающий цепной процесс. Кроме того, свободные нейтроны появляются повсюду как продукты ядерных реакций, возбуждаемых космическими частицами, так что при достижении состояния с $k > 1$ цепная реакция деления начинается сама по себе и немедленно.

Достижение критического состояния представляет наибольший интерес с точки зрения получения контролируемого источника энергии. В критическом состоянии число нейтронов не меняется во времени. Следовательно, число актов деления в единицу времени, а значит, и энерговыделение постоянны. Абсолютная величина энерговыделения при этом может быть установлена в любое значение с помощью системы управления цепной реакцией. Вблизи критического состояния допускается небольшое и несложно осуществимое превышение k над единицей. Введение в размножающую среду дополнительного количества делящегося материала приводит к избыточному размножению цепей реакций, т. е. сопровождается повышением k . Напротив, введение поглотителя нейтронов увеличивает число обрывов цепей и снижает k . Кроме того, возможно применение веществ — отражателей нейтронов, перемещение которых вблизи размножающей среды уменьшает или увеличивает потери нейтронов из-за утечки, что также изменяет число обрывов цепей. Манипуляции указанными элементами управления позволяют начинать цепную реакцию, достигать любой уровень мощности, поддерживать стационарный режим в критическом состоянии и пре-

кращать цепной процесс. Установка с контролируемой цепной реакцией деления и представляет собой ядерный реактор. Та часть реактора, которая содержит делящийся материал и собственно в которой протекает цепная самоподдерживающаяся реакция деления, называется активной зоной реактора.

Обращение коэффициента размножения в единицу достигается сбалансированием размножения нейтронов с их потерями. Причин потерь фактически две: захват без деления и утечка нейтронов за пределы размножающей среды. Вклад в потери процесса β - распада нейтрона пренебрежимо мал из-за очень большой разницы между временем нейтронного цикла в реакторе ($< 10^{-3}$ сек) и временем жизни свободного нейтрона ($\approx 10^2$ сек). Конкуренция между процессами деления и радиационного захвата прежде всего определяется соотношением количеств делящегося и других материалов в активной зоне реактора. Утечка же нейтронов, в первую очередь, зависит от размеров и геометрической формы активной зоны. По этой причине задача определения условий, при которых $k = 1$, обычно разбивается на две части — сначала определяется коэффициент размножения в среде без утечки. Отсутствие утечки означает бесконечно большой объём вещества, а соответствующий ему коэффициент размножения называется коэффициентом размножения в бесконечной среде k_0 . Очевидно, что $k < k_0$, поскольку в конечном объёме вследствие утечки, потери нейтронов обязательно больше, чем в бесконечном. Поэтому, если в веществе данного состава $k_0 < 1$, то цепная самоподдерживающаяся реакция невозможна как в бесконечном, так и в любом конечном объёме. Таким образом k_0 определяет принципиальную способность среды размножать нейтроны.

Если $k_0 > 1$, то всегда существует объём конечных размеров, в котором может быть достигнуто условие

$$k = k_0 \omega \quad (1.1)$$

где ω - есть доля полного числа образующихся в реакторе нейтронов, поглощённых в активной зоне реактора или вероятность избежать нейтрону утечки из конечного объёма. Доля потерянных вследствие утечки нейтронов при этом равна $1 - \omega$. Число ω зависит от геометрических размеров и может быть как угодно мало при уменьшении объёма активной зоны.

В самом деле, поскольку любая единица объёма вещества поглощает нейтроны, то число поглощений пропорционально объёму, или $R_{эфф}^3$, где $R_{эфф}$ эффективный линейный размер тела. Утечка нейтронов происходит только через поверхность тела, и поэтому число ушедших из конечного объёма нейтронов пропорционально поверхности тела, или $\propto R_{эфф}^2$. Поэтому соотношение между поглощением и утечкой, пропорциональное $R_{эфф}^3 / R_{эфф}^2 = R_{эфф}$ снижается при уменьшении объёма тела и стремится к нулю при $R_{эфф} \rightarrow 0$. При этом и $\omega \rightarrow 0$. Значит, в случае $k_0 > 1$ условие (2.1) всегда может быть выполнено.

Геометрические размеры активной зоны, которым соответствует $k = 1$, называются критическими размерами. Соответствующий объём активной зоны также называется *критическим*, а масса делящегося материала в критическом объёме – *критической массой*. Определение критических параметров размножающих сред составляет основную физическую задачу ядерного реактора, а необходимый при получении $k = 1$ расчет фактора ω в (2.1) связан с решением задачи о диффузии нейтронов в веществе реактора. В заданном объёме с известным ω критическое состояние может быть достигнуто также путем подбора состава среды с необходимым k_0 . Относительная концентрация делящегося материала, в активной зоне реактора, обращающая (1) в единицу, также называется критической.

1.3 КИНЕТИКА РЕАКТОРА

Изменение числа нейтронов в некритическом реакторе определяется отклонением k от единицы и временем нейтронного цикла τ . Если в некоторый момент времени в реакторе имеется n нейтронов, то по определению коэффициента размножения, их число, по прошествии одного цикла, обращения станет равным kn , а приращение за время цикла, составит $(kn - n) = n(k - 1)$. Следовательно, изменение числа нейтронов в единицу времени

$$\frac{dn}{dt} = \frac{n(k-1)}{\tau} \quad (1.2)$$

Решение этого уравнения даёт зависимость числа нейтронов от времени

$$n(t) = n_0 \exp \frac{k-1}{\tau t} \quad (1.3)$$

где n_0 — число нейтронов в момент $t = 0$. Наибольшее время цикла характерно для реакторов на тепловых нейтронах, где оно достигает $\tau = 10^{-3}$ сек. Если предположить, что $k = 1.01$, то через каждую секунду число нейтронов возрастает в $\frac{n(1)}{n_0} = \exp \frac{0.01}{0.001} = e^{10} \approx 20000$ раз, и в такое

же число раз возрастает число делений, т. е. энерговыделение в реакторе. Следовательно, в контролируемой установке превышение k над единицей всего на 0.01 уже недопустимо. Правда, приведённая оценка не учитывает запаздывающих нейтронов и поэтому является завышенной.

Однако если $k - 1$ больше доли запаздывающих нейтронов β , то развитие цепной реакции во времени происходит практически в соответствии с (1.3).

В средах из чистых делящихся материалов времена нейтронных циклов имеют порядок 10^{-8} сек. При $k = 1.1$ один начальный нейтрон через 6 мксек порождает 10^{26} нейтронов, или одно деление — 10^{26} делений, что эквивалентно делению около 40 кг урана в момент $t = 6$ мксек за время нейтронного цикла или 400 кг урана за все 6 мксек. Эта оценка показывает, что скорость нарастания цепной реакции деления может быть необычайно высока, а практически мгновенное энерговыделение представляет собой ядерный взрыв.

Мощности ядерных взрывов обычно оценивают в эквивалентах наиболее распространённого химического взрывчатого вещества - тринитротолуола ТНТ. Выделяющаяся при делении 1 кг урана энергия равна энергии, освобождающейся при взрыве 20000 тонн ТНТ. Существование критической массы в цепных реакциях создаёт определенный предел количеству делящегося вещества, которое может участвовать в процессе, поскольку до начала процесса каждая из частей, соединяемых при получении взрыва, должна быть подкритична. Это ограничивает мощность ядерных взрывов с использованием урана или плутония десятками или сотнями тысяч тонн ТНТ. Термоядерные взрывы такого ограничения не имеют, поскольку синтез легких ядер протекает через механизм теплового возбуждения, которому не присущи критические явления.

1.4 СИСТЕМА УПРАВЛЕНИЯ И ЗАЩИТЫ ЯДЕРНОГО РЕАКТОРА

Реактор, находящийся в критическом состоянии как угодно долго, представляет собой математическую абстракцию. На самом деле, протекающие в реакторе процессы вызывают ухудшение размножающих свойств среды, и без механизма восстановления реактивности реактор не смог бы работать даже малое время. Обращение нейтронов в реакторе включает процесс деления; каждый акт деления означает убыль атома делящегося материала, а значит, и снижение k_0 . Правда, делящиеся атомы частично восстанавливаются за счёт поглощения избытка нейтронов ядрами U^{238} с образованием Pu^{239} . Однако накопление нового делящегося материала обычно не компенсирует потерь делящихся атомов, и реактивность снижается. Кроме того, каждый акт деления сопровождается появлением двух новых атомов, ядра которых, как и любые другие ядра, поглощают нейтроны. Накопление продуктов деления также снижает реактивность. Наконец, просто повышение температуры активной зоны реактора обычно сопровождается снижением реактивности, а активные зоны энергетических реакторов должны быть разогреты до возможно бóльшей температуры, поскольку коэффициент полезного действия тепловой машины в конечном счёте определяется разностью температур источника тепла и холодильника – окружающей среды.

Ядерный реактор может работать с заданной мощностью в течение длительного времени только в том случае, если в начале работы имеет запас реактивности. Освобождение связанной реактивности по мере её снижения в силу естественных причин обеспечивает поддержание критического состояния реактора в каждый момент его работы. Первоначальный запас реактивности создается путём постройки активной зоны с размерами, значительно превосходящими критические. Чтобы реактор не становился надкритичным, одновременно искусственно снижается k_0 размножающей среды. Это достигается введением в активную зону веществ - поглотителей нейтронов, которые могут удаляться из активной зоны в последующем.

Так же как и в элементах регулирования цепной реакции, вещества-поглотители входят в состав материала стержней того или иного поперечного сечения, перемещающихся по соответствующим каналам в

активной зоне. Но если для регулирования достаточно одного-двух или нескольких стержней, то для компенсации начального избытка реактивности число стержней может достигать сотни. Эти стержни называются компенсирующими. Регулирующие и компенсирующие стержни не обязательно представляют собой различные элементы по конструктивному оформлению. Некоторое число компенсирующих стержней может быть стержнями регулирования, однако функции тех и других отличаются.

Регулирующие стержни предназначены для поддержания критического состояния в любой момент времени, для остановки, пуска реактора, перехода с одного уровня мощности на другой. Все эти операции требуют малых изменений реактивности. Компенсирующие стержни постепенно выводятся из активной зоны реактора, обеспечивая критическое состояние в течение всего времени его работы.

Иногда стержни управления делаются не из материалов-поглотителей, а из делящегося вещества или материала-рассеивателя. В тепловых реакторах – это преимущественно поглотители нейтронов, эффективных же поглотителей быстрых нейтронов нет. Такие поглотители, как кадмий, гафний и другие, сильно поглощают лишь тепловые нейтроны благодаря близости первого резонанса к тепловой области, а за пределами последней ничем не отличаются от других веществ по своим поглощающим свойствам. Исключение составляет бор, сечение поглощения нейтронов которого, снижается с энергией значительно медленнее, чем у указанных веществ, по закону $1/v$. Поэтому бор поглощает быстрые нейтроны хотя и слабо, но несколько лучше других веществ.

Материалом-поглотителем в реакторе на быстрых нейтронах может служить только бор, по возможности обогащенный изотопом B^{10} . Помимо бора в реакторах на быстрых нейтронах для стержней управления применяются и делящиеся материалы.

Компенсирующий стержень из делящегося материала выполняет ту же функцию, что и стержень-поглотитель нейтронов: увеличивает реактивность реактора при естественном её снижении. Однако, в отличие от поглотителя, такой стержень в начале работы реактора находится за пределами активной зоны, а затем вводится в активную зону.

Из материалов-рассеивателей в быстрых реакторах употребляется никель, имеющий сечение рассеяния быстрых нейтронов несколько больше сечений других веществ. Стержни-рассеиватели располагаются

по периферии активной зоны и их погружение в соответствующий канал вызывает снижение утечек нейтронов из активной зоны и, следовательно, возрастание реактивности. В некоторых специальных случаях целям управления цепной реакцией служат подвижные части отражателей нейтронов, при перемещении изменяющие утечки нейтронов из активной зоны.

Регулирующие, компенсирующие и аварийные стержни совместно со всем оборудованием, обеспечивающим их нормальное функционирование, образуют систему управления и защиты реактора (СУЗ).

На случай непредвиденного катастрофического развития цепной реакции, а также возникновения других аварийных режимов, связанных с энерговыделением в активной зоне, в каждом реакторе предусмотрено экстренное прекращение цепной реакции, осуществляемое сбрасыванием в активную зону специальных аварийных стержней или стержней безопасности.

Аварийные стержни изготавливаются из поглощающего нейтроны материала. Они сбрасываются под действием силы тяжести в центральную часть активной зоны, где поток наибольший, а значит, и наиболее велика отрицательная реактивность, вносимая в реактор стержнем. Стержней безопасности, как и регулирующих, обычно два или несколько, однако в отличие от регуляторов они должны связывать возможно большую величину реактивности. Роль стержней безопасности может выполнять и часть компенсирующих стержней.

Фактически реакторов без отражателей нейтронов не существует. Активная зона, покоящаяся на фундаменте, уже по крайней мере снизу имеет отражатель, поскольку все вещества отражают нейтроны. Однако понятно, что эффективность отражения нейтронов тем выше, чем больше альbedo вещества-отражателя. Размещение отражателей вблизи тела, в объеме которого диффундируют порождаемые каким-то источником нейтроны, приводит к снижению утечек нейтронов. Часть тех нейтронов, которые в процессе диффузии по достижении поверхности тела покидали его объем, возвращается назад, так как в веществе отражателя нейтроны также участвуют в хаотической диффузии. Отраженные нейтроны снова отражаются от первого объема и т. д., что прежде всего сопровождается повышением нейтронного потока на границе тела и отражателя.

Повышение потока в граничных точках по отношению к потоку внутри тела означает снижение градиента потока на границе или диффузионного тока, равного утечке нейтронов с единицы площади поверхности тела в единицу времени.

Если иметь в виду не произвольную среду с посторонним источником нейтронов, а размножающую в критическом состоянии, то уменьшение утечки при присоединении к активной зоне отражателя увеличивает ω и переводит реактор в надкритическое состояние.

Чтобы при неизменном k_0 реактор снова стал критическим, следует, в свою очередь, снизить ω за счет уменьшения объёма активной зоны. Таким образом, критические размеры реактора с отражателем всегда меньше, чем реактора без отражателя. С практической точки зрения это выгодно. Выделение энергии в реакторе возможно только в критическом состоянии. Когда в силу естественных причин реактор становится подкритичным, энерговыделение прекращается и часть делящегося материала реактора остается неиспользованной. Само собой разумеется, эту часть целесообразно сделать возможно меньшей. Применение отражателей в какой-то мере служит этой цели.

Отражатели тепловых и промежуточных ядерных реакторов изготавливаются из веществ-замедлителей. Такие отражатели слабо поглощают нейтроны и способствуют их замедлению в реакторе. В графитовых и тяжеловодных реакторах в качестве отражателя применяется графит, как наиболее доступный материал с хорошими диффузионными свойствами. При этом экономия активной зоны приблизительно равна длине диффузии нейтронов в графите, т. е. около 50 см.

В реакторах с легкой водой в качестве замедлителя между активной зоной и корпусом реактора, служащим ёмкостью для воды, всегда имеется слой воды в 10 см или более. Этот слой уже является отражателем, обеспечивающим предельно возможную экономию активной зоны. Поэтому за пределами корпуса водяного реактора графитовый отражатель бесполезен, и такие реакторы не имеют отражателя как отдельной конструкции.

Активные зоны реакторов с водяным замедлителем рассеивают нейтроны преимущественно с высокой энергией, а не тепловые. Поэтому экономия активной зоны определяется возвратом промежуточных нейтронов, частично замедленных, и по абсолютной величине достигает 7 см.

Реакторы на промежуточных нейтронах содержат мало замедлителя, и нейтроны, поглощаются веществом прежде, чем становятся тепловыми. Активные зоны этих реакторов рассеивают быстрые и промежуточные нейтроны. Наилучшим отражателем таких нейтронов является бериллий. Также, бериллий является лучшим замедлителем для промежуточных реакторов малых критических размеров, т. е. реакторов с высокой концентрацией делящегося материала, в активной зоне. Обыкновенная вода уступает бериллию, поскольку из-за снижения сечения рассеяния у водорода при энергиях больше 0,1 МэВ легче пропускает через свой объём быстрые нейтроны, чем бериллий.

Реакторы на быстрых нейтронах не должны содержать вещества, замедляющие нейтроны, так как замедление снижает коэффициент воспроизводства, большая величина которого составляет основное физическое преимущество быстрого реактора перед реакторами других типов. Материал отражателей реакторов на быстрых нейтронах — тяжёлые U^{238} или Th^{232} , которые одновременно являются сырьём для воспроизводства новых делящихся материалов. Такие отражатели, конечно, уменьшают критические размеры активных зон, однако основная их функция состоит в накоплении новых делящихся материалов, получающихся при поглощении рассеиваемых активной зоной нейтронов. Поэтому они называются не отражателями нейтронов, а зонами воспроизводства.

1.5 ВОДО-ВОДЯНОЙ ЯДЕРНЫЙ РЕАКТОР

Водо-водяной энергетический реактор — реактор, использующий в качестве замедлителя и теплоносителя обычную воду. На атомных электростанциях России и некоторых других стран широко применяются реакторы марки ВВЭР, работающие по этой схеме.

Активная зона водо-водяного реактора набрана из тепловыделяющих сборок, заполненных пластинчатыми или цилиндрическими тепловыделяющими элементами. Корпус тепловыделяющей сборки изготавливают из листового материала (алюминия, циркония), слабо поглощающего нейтроны. Сборки размещают в цилиндрической клетке, которая вместе со сборками помещается в корпус реактора. Кольцевое пространство между ним и внешней стенкой клетки, заполненное водой,

выполняет роль отражателя. Вода, проходя снизу вверх через зазоры между тепловыделяющими элементами, охлаждает их. Таким образом, она выполняет роль теплоносителя, замедлителя и отражателя. Корпус реактора рассчитывается на прочность, исходя из давления воды. Горловина корпуса закрывается герметической крышкой, которая снимается при загрузке и выгрузке тепловыделяющих сборок.

Таблица 1.1

Характеристики ВВЭР

<i>Характеристика</i>	<i>ВВЭР-210</i>	<i>ВВЭР-365</i>	<i>ВВЭР-440</i>	<i>ВВЭР-1000</i>
<i>Тепловая мощность реактора, МВт</i>	<i>760</i>	<i>1320</i>	<i>1375</i>	<i>3000</i>
<i>К. п. д., %</i>	<i>27,6</i>	<i>27,6</i>	<i>32,0</i>	<i>33,0</i>
<i>Давление пара перед турбиной, атм</i>	<i>29,0</i>	<i>29,0</i>	<i>44,0</i>	<i>60,0</i>
<i>Давление в первом контуре, атм</i>	<i>100</i>	<i>105</i>	<i>125</i>	<i>160,0</i>
<i>Температура воды, °С:</i>				
<i>на входе в реактор</i>	<i>250</i>	<i>250</i>	<i>269</i>	<i>289</i>
<i>на выходе из реактора</i>	<i>269</i>	<i>275</i>	<i>300</i>	<i>324</i>
<i>Диаметр активной зоны, м</i>	<i>2,88</i>	<i>2,88</i>	<i>2,88</i>	<i>3,12</i>
<i>Высота активной зоны, м</i>	<i>2,50</i>	<i>2,50</i>	<i>2,50</i>	<i>3,50</i>
<i>Диаметр ТВЭЛа, мм</i>	<i>10,2</i>	<i>9,1</i>	<i>9,1</i>	<i>9,1</i>
<i>Число ТВЭЛов в кассете</i>	<i>90</i>	<i>126</i>	<i>126</i>	<i>312</i>
<i>Загрузка урана, т</i>	<i>38</i>	<i>40</i>	<i>42</i>	<i>66</i>
<i>Среднее обогащение урана, %</i>	<i>2,0</i>	<i>3,0</i>	<i>3,5</i>	<i>3,3—4,4</i>
<i>Среднее выгорание топлива, МВт-сут/кг</i>	<i>13,0</i>	<i>27,0</i>	<i>28,6</i>	<i>40</i>

В физических водо-водяных реакторах обычно используют воду под атмосферным давлением. Корпуса таких реакторов герметичной крышки не имеют, и вода в них находится под атмосферным давлением (имеет открытый уровень).

Энергетические водо-водяные реакторы (в частности, ВВЭР) должны работать с использованием воды под давлением. Применение воды в качестве теплоносителя и замедлителя определяет ряд специфических особенностей реакторов. Поэтому обычно эти реакторы выделяются в самостоятельную группу и именуется реакторами, охлаждаемыми водой под давлением.

Достоинства

Использование воды в качестве теплоносителя и теплоносителя-замедлителя в ядерных установках имеет ряд преимуществ.

1. Технология изготовления таких реакторов хорошо изучена и отработана.
2. Вода, обладая хорошими теплопередающими свойствами, относительно просто и с малыми затратами мощности перекачивается насосами. (При одинаковых условиях коэффициент теплопередачи для тяжёлой воды на 10% больше по сравнению с коэффициентом теплопередачи для лёгкой воды.)
3. Использование воды в качестве теплоносителя позволяет осуществить непосредственную генерацию пара в реакторе (кипящие реакторы). Лёгкая вода используется также для организации пароводяного цикла во вторичном контуре.
4. Невоспламеняемость и невозможность затвердевания воды упрощает проблему эксплуатации реактора и вспомогательного оборудования.
5. Обычная химобессоленая вода дешева.
6. Использование воды обеспечивает безопасность эксплуатации реактора.
7. В реакторах с водяным теплоносителем-замедлителем при соответствующей конструкции активной зоны можно достичь отрицательного температурного коэффициента реактивности, что предохраняет реактор от произвольного разгона мощности.
8. Позволяет создавать блоки мощностью до 1600 МВт (ограничивается возможностью транспортировки корпуса реактора по железной дороге).

Недостатки

1. Вода взаимодействует с ураном и его соединениями (корродирует) при аварийных ситуациях, поэтому тепловыделяющие элементы должны снабжаться антикоррозионными покрытиями (обычно

цирконий). При повышенных температурах воды конструкционные материалы также должны подбираться с достаточно хорошими антикоррозионными свойствами, или должен вестись специальный водно-химический режим, связывающий кислород образующийся в воде при её радиоллизе. Особенно необходимо отметить высокую интенсивность коррозии многих металлов в воде при температуре выше 300°C.

2. Проблема подбора коррозионно-устойчивых материалов усложняется необходимостью иметь высокое давление воды при повышенных температурах. Необходимость иметь высокое давление в реакторе усложняет конструкцию корпуса реактора и его отдельных узлов.
3. Возможность аварии с течью теплоносителя, и необходимость средств её компенсирующих
4. Стоимость тяжёлой воды велика (Актуально только для реакторов на тяжёлой воде типа CANDU, в СССР такие реакторы не строили). Это требует сведения утечки воды и потерь её к минимуму, что усложняет конструкцию энергетического оборудования и эксплуатацию установки.

Важной проблемой при использовании воды для охлаждения реакторов является наведённая активность, которая определяется активацией атомов кислорода и продуктов коррозии оборудования 1-го контура. Активность собственно самой воды определяется активностью изотопа кислорода-16, период полураспада которого составляет ~ 15 часов, таким образом через 2—4 дня после остановки реактора радиоактивность теплоносителя 1-го контура спадает в сотни раз, и определяется только активностью продуктов коррозии, которые извлекаются из воды на обычных ионообменных фильтрах. Очищенная таким образом вода накапливается в баках запаса чистого конденсата и используется для нужд турбинного отделения.

1.6 РЕАКТОР РБМК

РБМК (Реактор Большой Мощности Канальный) — двухцелевой канальный кипящий графито-водный ядерный реактор.

Разработка этой серии реакторов была начата в 1960-е годы Курчатовским институтом и НИКИЭТ под руководством академика Доллежалея.

Мотивом разработки РБМК явилось, в частности, желание использовать в атомной энергетике большой опыт промышленных канальных водо-графитовых реакторов, накопленный в СССР, и сильно расширить производственную базу атомной энергетике благодаря отказу от сложных в изготовлении и дорогих корпусов реакторов и парогенераторов.

Первый энергоблок с реактором типа РБМК-1000 пущен в 1973 году на Ленинградской АЭС.

Таблица 1.2

Характеристики РБМК

<i>Характеристика</i>	<i>РБМК-1000</i>	<i>РБМК-1500</i>	<i>РБМКП-2000 (проект)</i>	<i>МКЭР-1500 (проект)</i>
<i>Тепловая мощность реактора, МВт</i>	3200	4800	5400	4250
<i>Электрическая мощность блока, МВт</i>	1000	1500	2000	1500
<i>К. п. д. блока, %</i>	31,3	31,3	37,0	35,2
<i>Давление пара перед турбиной, атм</i>	65	65	65	65?
<i>Температура пара перед турбиной, °С</i>	280	280	450	
<i>Размеры активной зоны, м:</i>				
<i>высота</i>	7	7	6	7
<i>диаметр (ширина × длина)</i>	11,8	11,8	7,75 × 24	14
<i>Загрузка урана, т</i>	192	189	220	
<i>Обогащение, % 5U</i>				
<i>испарительный канал</i>	2,6-2,8	2,6-2,8	1,8	2-3,2
<i>перегревательный канал</i>	—	—	2,2	—

<i>Число каналов:</i>				
<i>испарительных</i>	1693	1661	1744	1824
<i>перегревательных</i>	—	—	872	—
<i>Среднее выгорание, МВт·сут/кг:</i>				
<i>в испарительном канале</i>	25,5	25?	20,2	30-45
<i>в перегревателе канале</i>	—	—	18,9	—
<i>Размеры оболочки ТВЭЛа (диаметр×толщина), мм:</i>				
<i>испарительный канал</i>	13,5×0,9	13,5×0,9	13,5×0,9	-
<i>перегревательный канал</i>	—	—	10×0,3	—
<i>Материал оболочек ТВЭЛов:</i>				
<i>испарительный канал</i>	Zr + 2,5 % Nb	Zr + 2,5 % Nb	Zr + 2,5 % Nb	-
<i>перегревательный канал</i>	—	—	Нерж. Сталь	—

В общей сложности сдано в эксплуатацию 17 энергоблоков с РБМК.

По состоянию на 2008 год эксплуатируется 12 энергоблоков с РБМК на четырёх АЭС: по политическим причинам остановлены один энергоблок на Игналинской АЭС и три энергоблока на Чернобыльской АЭС (ещё один - уничтожен при аварии). Ведётся строительство РБМК третьей очереди на пятом энергоблоке Курской АЭС.

Случившаяся 26 апреля 1986 года авария на Чернобыльской АЭС имела серьёзные последствия и заставила существенно доработать реактор с целью повышения безопасности. После этой аварии РБМК нередко стали именоваться «реакторами чернобыльского типа», а в атомной энергетике вообще безопасность стала определяющим фактором, более приоритетным, чем все прочие, например, эффективность выработки электроэнергии.

Вклад АЭС с реакторами РБМК в общую выработку электроэнергии всеми АЭС России составляет порядка 50%.

Одной из целей при разработке реактора РБМК было улучшение топливного цикла. Решение этой проблемы связано с разработкой конструкционных материалов, слабо поглощающих нейтроны и мало отличающихся по своим механическим свойствам от нержавеющей стали. Снижение поглощения нейтронов в конструкционных материалах даёт возможность использовать более дешёвое ядерное топливо с низким обогащением урана (по первоначальному проекту - 1,8%).

РБМК - 1000

Основу активной зоны РБМК-1000 составляет графитовый цилиндр высотой 7 м и диаметром 11,8 м, сложенный из блоков меньшего размера, который выполняет роль замедлителя. Графит пронизан большим количеством вертикальных отверстий, через каждое из которых проходит труба давления (также называемая технологическим каналом (ТК)). Центральная часть трубы давления, расположенная в активной зоне, изготовлена из сплава циркония ($Zr + 2,5 \% Nb$), обладающего высокими механическими и коррозионными свойствами, верхние и нижние части трубы давления — из нержавеющей стали. Циркониевая и стальные части трубы давления соединены сварными переходниками.

В каждом канале установлена кассета, составленная из двух тепловыделяющих сборок (ТВС) — нижней и верхней. В каждую сборку входит 18 стержневых ТВЭЛов. Оболочка ТВЭЛа заполнена таблетками из двуокиси урана. По первоначальному проекту обогащение по урану 235 составляло 1,8%, но по мере накопления опыта эксплуатации РБМК оказалось целесообразным повышать обогащение. Это позволило увеличить управляемость реактора, повысить безопасность и улучшить его экономические показатели. Так, после аварии на Ленинградской АЭС в 1975 г. был осуществлён переход на топливо с обогащением 2,0%, после аварии на Чернобыльской АЭС в 1986 г. — на топливо с обогащением 2,4%. В 90-е годы был начат переход на топливо с обогащением 2,6%. В настоящее время осуществляется переход на топливо с обогащением 2,8%.

Преобразование энергии в блоке АЭС с РБМК происходит по одноконтурной схеме. Кипящая вода из реактора пропускается через барабаны-сепараторы. Затем насыщенный пар (температура 284 °С) под давлением 65 атм поступает на два турбогенератора электрической мощностью по 500 МВт. Отработанный пар конденсируется, после чего циркуляционные насосы подают воду на вход в реактор.

Реактор РБМК-1000 спроектирован для четырёх блочных АЭС: Ленинградской, Курской, Чернобыльской, Смоленской.

5-й энергоблок Курской АЭС строится по новой архитектуре активной зоны (меньше графита, уменьшен коэффициент реактивности и возможный паровой коэффициент), которая исключает чернобыльское развитие событий в случае нештатных ситуаций, а так-же не требует выгорающих поглотителей и сильного обогащения.

РБМК-1500. В блоке АЭС с РБМК-1500 мощность повышена за счёт увеличения мощности технологических каналов. В верхнюю тепловыделяющую сборку установлены специальные решётки, которые производят осевую закрутку потока теплоносителя. Это улучшает теплосъём и мощность канала в 1,5 раза. РБМК-1500 установлены на Игналинской АЭС (Литва).

РБМКП-2000. Кроме РБМК-1000 и РБМК-1500 разработаны РБМКП-2000 с перегревом пара до 450°C. Активная зона РБМКП-2000 имеет форму прямоугольного параллелепипеда. Испарительные и перегревательные каналы в РБМКП-2000 по конструкции мало отличаются от каналов РБМК-1000. Однако оболочки ТВЭЛов в перегревательных каналах изготовлены не из сплава циркония, а из нержавеющей стали; обогащение урана для них повышено до 2,2 %.

Кипящая вода из испарительных каналов поступает в паросепараторы. Насыщенный пар из сепараторов направляется в перегревательные каналы, нагревается там до 450 °С и под давлением 65 атм подаётся к двум турбогенераторам мощностью по 1000 МВт.

МКЭР-1500 (Проект; Особенности — защитная гермооболочка, КПД — 35,2 %, срок службы 50 лет, обогащение 2,4 %, расход природного урана — 16,7 г/МВт·ч (самый низкий в мире), позволяет производить изотоп кобальт-60, используемый в медицине на 5 млн Евро в год.

Достоинства

- Пониженное, по сравнению с корпусными ВВЭР, давление воды в первом контуре;
- Благодаря канальной конструкции отсутствует дорогостоящий корпус;
- Нет дорогостоящих и сложных парогенераторов;
- Нет принципиальных ограничений на размер активной зоны;
- Независимый контур СУЗ;

- Широкие возможности осуществления регулярного контроля состояния узлов активной зоны (например, труб технологических каналов) без необходимости остановки реактора, а также высокая ремонтпригодность;
- Более полное использование ядерного топлива;
- Возможность наработки радионуклидов технического и медицинского назначения, а также радиационного легирования различных материалов;
- Замена топлива без остановки реактора благодаря независимости каналов друг от друга.

Недостатки

- Большое количество трубопроводов и различных вспомогательных подсистем, что требует наличия большого количества высококвалифицированного персонала;
- Необходимость проведения поканального регулирования расходов, что может повлечь за собой аварии, связанные с прекращением расхода теплоносителя через канал;
- Более высокая нагрузка на оперативный персонал по сравнению с ВВЭР, связанная с большими размерами активной зоны и постоянно ведущимися перегрузками топлива в каналах.

2. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

2.1 ПОНЯТИЕ О МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Задача изучения реальных объектов или процессов состоит в выявлении их свойств с целью прогнозирования поведения и управления ими для достижения практически важных условий их поведения. Решение этой задачи существенно упрощается, если вместо самих объектов или процессов изучать их модели.

Математические модели, вследствие их относительной простоты, прежде всего, помогают понять процесс, дают возможность устанавливать качественные и количественные характеристики состояния процесса и на основе этих характеристик предсказать дальнейшее его развитие, т.е. поведение интересующих, «ведущих» в данном процессе без проведения натуральных экспериментальных исследований, в сложных случаях слишком дорогостоящих, а иногда и просто невозможных на данном уровне развития техники.

В последних случаях оказывается весьма перспективным проведение вычислительного эксперимента над математической моделью. Он состоит в том, что по одним параметрам модели вычисляются другие ее параметры и на этой основе делаются выводы о свойствах исследуемого явления.

С точки зрения математической модели ядерный реактор можно рассматривать как сложный конгломерат взаимодействующих процессов, вкладом каждого из которых сложно пренебречь в том или ином случае. Тем не менее, нашей задачей не стоит построить целостную математическую модель, которая будет описывать ядерный реактор как объект в целом. В частности, модель, которая описывает собою реактор как целостный объект, достаточно сложна в разработке, так как она должна описывать не только процессы, которые происходят в активной зоне, но и методы управления цепной реакцией, а для этого необходимо наш объект исследования описывать не как некоторую оторванную часть, но как систему в целом, включая сюда и воздействие систем управления.

Таким образом, мы будем рассматривать некоторые отдельные аспекты работы ядерного реактора, которые разделим на несколько отдельных задач.

Никакое определение не может полностью охватить реально существующую деятельность по математическому моделированию. Несмотря на это для полного понимания сущности рассматриваемого предмета необходимо сделать попытку построить более формализованное определение модели.

Так, например, по А.А. Ляпунову: моделирование – это опосредованное практическое или теоретическое исследование объекта, при котором непосредственно изучается не сам интересующий нас объект, а некоторая вспомогательная искусственная или естественная система (модель):

- находящаяся в некотором объективном соответствии с познаваемым объектом;
- способная замещать его в определенных отношениях;
- дающая при её исследовании, в конечном счете, информацию о самом моделируемом объекте.

Немного уменьшая общность, можно дать определение математической модели, основанное на идеализации «вход — выход — состояние» в следующем виде: «абстрактное математическое представление процесса, устройства или теоретической идеи; оно использует набор переменных, чтобы представлять входы, выходы и внутренние состояния, а также множества уравнений и неравенств для описания их взаимодействия.»

Английский физик-теоретик Р.Пайерлс обобщил типы моделей применяемых в естественных науках и предложил содержательную классификацию моделей из описания которых (всего восемь типов), для нас наиболее актуальными будут всего две.

- Приближение

Если можно построить уравнения, описывающие исследуемую систему, то это не значит, что их можно решить даже с помощью компьютера. Общепринятый прием в этом случае — использование приближений. Среди них модели линейного отклика. Уравнения заменяются линейными. Стандартный пример — закон Ома.

Если мы используем модель идеального газа для описания достаточно разреженных газов, то это — модель типа приближение. При бо-

лее высоких плотностях газа тоже полезно представлять себе более простую ситуацию с идеальным газом для качественного понимания и оценок, но тогда это уже другой тип - упрощение.

- Упрощение.

В моделях типа упрощение отбрасываются детали, которые могут заметно и не всегда контролируемо повлиять на результат. Одни и те же уравнения могут служить моделью типа приближение или упрощение — это зависит от явления, для изучения которого используется модель. Так, если модели линейного отклика применяются при отсутствии более сложных моделей (то есть не производится линеаризация нелинейных уравнений, а просто ищутся линейные уравнения, описывающие объект), то это уже феноменологические линейные модели, и относятся они к типу упрощение.

Примеры: применение модели идеального газа к неидеальному, уравнение состояния Ван-дер-Ваальса, большинство моделей физики твердого тела, жидкостей и ядерной физики. Путь от микроописания к свойствам тел (или сред), состоящих из большого числа частиц, очень длинен. Приходится отбрасывать многие детали. Это приводит к упрощениям.

Для того чтобы принимать решение об использовании того или иного типа модели необходимо найти ответ на вопросы – что мы будем исследовать и как мы будем исследовать.

Таким образом, одним из первых этапов построения математической модели является постановка задачи на самом общем уровне, не прибегая к использованию математического аппарата для формализации сути изучаемого явления. Другими словами на этом этапе осмысливается явление или процесс, который необходимо поместить в рамки модели; выбирается подход, наиболее приемлемый с точки зрения исследователя; рассматриваются идеи о применимости того или иного математического метода пригодного для решения задачи или исследования явления.

Приведем пример. Рассмотрим процесс распада радиоактивного вещества. Обозначим массу этого вещества в момент времени t через m . Требуется найти закон распада

$$m = m(t) \tag{2.1}$$

если известно начальное количество вещества m_0 , т.е. $m(0) = m_0$.

Построим математическую модель рассматриваемого процесса. Будем исходить из того, что скорость распада $\frac{dm}{dt}$ пропорциональна наличному количеству вещества, т.е.

$$\frac{dm}{dt} = km \quad (2.2)$$

Здесь k - некоторый параметр, характеризующий сорт радиоактивного вещества. Уравнение (2.2) есть искомое дифференциальное уравнение распада вещества.

Чтобы найти закон распада, необходимо найти решение уравнения (2.2) удовлетворяющее начальному условию:

$$m(0) = m_0, 0 < t < \infty \quad (2.3)$$

Уравнение (2.2) вместе дополнительным условием (2.3) образуют собой математическую модель рассматриваемой задачи. Запишем ту модель в виде:

$$\frac{dm}{dt} = km, m(0) = m_0.$$

В данном случае модель легко разрешима.

Проинтегрируем дифференциальное уравнение (2.2). Имеем:

$$\frac{dm}{dt} = km \Rightarrow \frac{dm}{m} = kdt \Rightarrow \ln(m) = kt$$

Откуда получаем

$$\ln(m) - kt = C \quad (2.4)$$

где C - произвольная постоянная.

Учитывая, что $m(0) = m_0$ получаем,

$$\ln(m_0) - k \cdot 0 = C \Rightarrow C = \ln(m_0)$$

Подставим полученный результат $C = \ln(m_0)$ в (2.4) получаем

$$\ln(m) - kt = \ln(m_0)$$

Откуда, предварительно применяя потенцирование, получим

$$m = m_0 e^{-kt} \quad (2.5)$$

Полученное соотношение называют *экспоненциальным* законом распада.

Очевидно, что при $t \rightarrow \infty$ $m(t) \rightarrow 0$. Следовательно, уравнение (2.3) вкупе с условиями (2.4) можно рассматривать, как математическую модель распада радиоактивного вещества.

Рассмотрим уравнение (2.3) как математическую модель. Ясно, что наша модель является существенным упрощением, так как мы не рассматриваем факторы, влияющие на распадающееся вещество (поток нейтронов), которые могут иметь место при моделировании процессов происходящих в ядерном реакторе.

В рассмотренном примере математическая модель является достаточно простой и для ее исследования не нужно применять много сил, чтобы достигнуть цели исследования – знания массы радиоактивного вещества в любой момент времени.

Лишь в редких случаях бывает удобным и оправданным построение математических моделей даже относительно простых объектов сразу во всей полноте, с учетом всех факторов, существенных для его поведения. Поэтому естественно применять подход к получению моделей по принципу «от простого – к сложному», когда следующий шаг делается после подробного изучения не очень сложной модели. При этом возникает цепочка все более полных моделей, Каждая последующая из которых обобщает предыдущие, включая их в качестве частного случая.

Рассмотрим следующий пример. Пусть радиоактивный изотоп A массой m_A распадается, образуя изотоп B . Целью исследования ставится вопрос об изменении масс изотопов A и B .

Обозначим через m_A - массу изотопа A , через m_B - изотопа B , через m_C изотопа C соответственно. Пусть в начальный момент времени $t=0$ масса изотопа A равна $m_A(0) = m_{A,0}$. Масса вещества B в начальный момент времени равна нулю, т.к. оно получается в результате распада вещества A . Пусть постоянная распада для вещества A есть λ_A , а для B - λ_B . Запишем систему уравнений, которая будет представлять собой математическую модель динамики изменения масс изотопов. Получим:

$$\begin{cases} \frac{dm_A}{dt} = -\lambda_A m_A \\ \frac{dm_B}{dt} = \lambda_A m_A - \lambda_B m_B \end{cases} \quad (2.6)$$

и добавим сюда начальные условия $m_A(0) = m_{A,0}$, $m_B(0) = 0$. В данном случае решение этой системы уравнений получить достаточно просто в аналитическом виде. В частности для изотопа A закон изменения будет иметь вид (2.5), а для изотопа B :

$$m_B(t) = \frac{\lambda_A m_{A,0}}{\lambda_B - \lambda_A} (e^{-\lambda_A t} - e^{-\lambda_B t}) \quad (2.7)$$

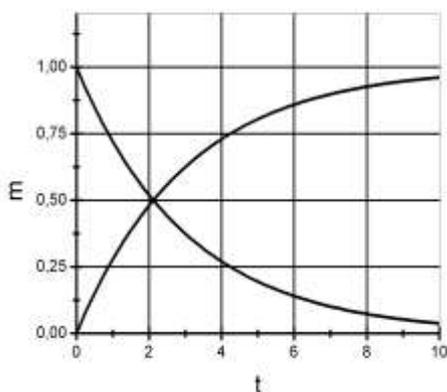


Рис.2.1 Зависимость массы от времени изотопов A и B

На рис. 2.1 показаны кривые, характеризующие динамику изменения массы изотопов A и B (в качестве примера взяты изотопы Np^{238} - убывающая кривая и Pu^{238} - возрастающая кривая). Как видно, даже из этого рисунка можно сделать общие выводы о поведении двух изотопов. Тем не менее, в рассмотренной модели не рассматривается влияние других факторов, как и в примере радиоак-

тивным веществом, но приведенная модель хорошо иллюстрирует иерархичность построения математических моделей.

Если бы рассмотрели более сложную модель, например, ввели в уравнения (2.6) члены, которые учитывают воздействие потока нейтронов, а также воздействие температуры, представляющее собой нелинейную функцию, то математическая модель существенно усложнилась бы и тогда ее решение в аналитическом виде найти было бы или невозможно, или очень трудно.

Используемая математическая модель, в какой науке она не использовалась бы, обязательно должна обладать свойством – *адекватности*. Под адекватностью здесь следует понимать то, что результат, полученный при использовании модели должен укладываться в рамки исследуемого явления и не должен противоречить результатам натурального эксперимента. При построении математических моделей процессов или явлений, которые невозможно наблюдать или регистрировать в реальности, сложно обозначить те границы, в которых модель можно считать адекватной. Тем не менее критерием адекватности в этом случае может

служить непротиворечивость результатов моделирования гипотезе, которая лежит в основе модели.

Таким образом процесс построения модели может быть условно разбит на следующие этапы:

- 1) Конструирование модели начинается со словесно – смыслового описания объекта или явления. Помимо сведений общего характера о природе объекта и целях его исследования эта стадия может содержать некоторые предположения. Данный этап можно называть формулировкой феноменологического описания модели.
- 2) Следующий этап – завершение идеализации объекта. Отбрасываются все факторы и эффекты, которые представляются не самыми существенными для его поведения.
- 3) После выполнения двух первых этапов можно переходить к выбору или формулировке закона, которому подчиняется объект, и его записи в математической форме, с тем, чтобы их справедливость поддавалась количественному контролю.
- 4) Завершает формулировку ее «оснащение». Например, необходимо задать сведения о начальном состоянии объекта (масса в начальный момент времени $t = 0$) или иные его характеристики, без знания которых невозможно определить поведение объекта. Наконец, формулируется цель исследования математической модели.
- 5) Построенная модель исследуется всеми доступными исследователю методами, так как большинство моделей не поддаются чисто теоретическому анализу, и поэтому необходимо широко использовать численные методы.
- 6) В результате исследования модели не только достигается поставленная цель, но и должна быть установлена всеми возможными способами (сравнение с практикой, сопоставление с другими подходами) ее адекватность – соответствие объекту и сформулированным предположениям. Неадекватная модель может дать результат, сколь угодно отличающийся от истинного, и должна быть либо отброшена, либо соответствующим образом модифицирована.

2.2 ДИСКРЕТНЫЕ МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ

Как бы глубоки и разнообразны ни были методы качественного анализа математических моделей, область их применимости весьма ограничена. Это либо простые, главным образом линейные, модели, либо отдельные фрагменты сложных, в том числе нелинейных моделей. Единственным универсальным способом исследования моделей является применение численных методов для нахождения приближенного решения поставленной задачи с помощью средств современной вычислительной техники и информатики.

Доступный «пониманию» компьютера вычислительный алгоритм, т. е. последовательность операций (арифметических, логических и т. д.), в результате выполнения которых находится решение, должен удовлетворять весьма жестким и подчас противоречивым требованиям. К ним относится, прежде всего, необходимость получить решение с заданной точностью за разумное и по возможности минимальное число действий, поскольку время одного расчета должно измеряться минутами и лишь в уникальных случаях — часами. Объемы обрабатываемой при этом информации не могут превышать возможностей емкости машинной памяти, в процессе вычислений нельзя допускать возникновения не воспринимаемых компьютером слишком больших или малых чисел, структура алгоритма должна быть достаточно простой и учитывать архитектуру вычислительной системы и т. д.

Только отвечающие этим требованиям вычислительные алгоритмы позволяют проводить всестороннее численное исследование исходной модели, подвергать ее вычислительному эксперименту, проводя ее анализ в самых разных ситуациях и получая исчерпывающую информацию об изучаемом объекте. Такое понимание математического моделирования означает не просто уточнение количественных характеристик явлений, но также изучение основных их качественных свойств. Последнее важно, прежде всего, для нелинейных объектов, поведение которых может быть весьма разнообразным и неожиданным.

Подчеркнем, что проблемы численного моделирования не снимаются сами собой по мере появления все более мощных и дешевых компьютеров. Это связано, по меньшей мере, с двумя причинами: усложнением выдвигаемых как практикой, так и теорией задач и необходимостью проведения большого числа серий вычислительных экспериментов для достаточно полного изучения объекта.

Поэтому разработка эффективных вычислительных алгоритмов всегда остается одной из ключевых задач математического моделирования. Для их конструирования широко используются методы, идеи и

подходы, применяемые при построении исходных математических моделей. Эта связь хорошо прослеживается на примере очень широкого класса моделей – тех, которые сводятся к дифференциальным уравнениям. Для них процесс создания вычислительных алгоритмов состоит из двух главных этапов: на первом строятся дискретные аналоги исходных моделей и изучаются их свойства, на втором дискретные уравнения решаются численно.

В дальнейшем основное внимание уделим первому этапу, рассмотрев сначала простейшую краевую задачу для уравнения второго порядка на отрезке

$$\frac{d^2u}{dx^2} = -f(x), \quad 0 < x < l, \quad u(0) = u_0 \quad (2.8)$$

предполагая здесь и далее, что ее решение (понимаемое в соответствующем смысле) существует и единственно.

Переход от (2.8) к дискретной модели разбивается на две стадии. Заменяем непрерывную область $0 < x < l$ на дискретную – совокупность конечного числа точек N . Самый простой способ – равномерное деление отрезка $[0, l]$ по правилу $x_i = i \cdot h$, $h = l/N$, $0 \leq i \leq N$. Множество $\bar{\omega}_h = \omega_h \cup \{x=0, x=l\}$, $\omega_h = \{x_i\}$, $i \neq 0, N$, этих точек представляет собой (равномерную) *разностную сетку с шагом h* , точки x_i – ее *узлы*. Все фигурирующие в (2.8) функции рассматриваются теперь как функции не непрерывного аргумента x , а дискретного аргумента x_i ; (*сеточные функции*), например, аналогом решения $u(x)$, $0 \leq x \leq l$, служит аппроксимирующее его *приближенное решение* $y(x_i)$, $0 \leq i \leq N$.

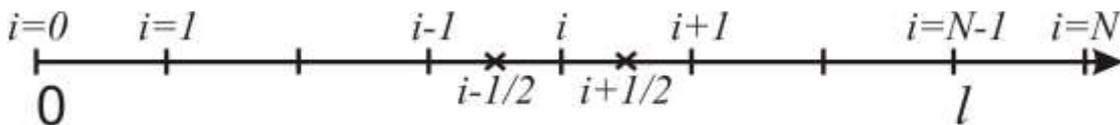


Рис. 2.2 Сетка $\bar{\omega}_h$ на отрезке $[0, l]$

На второй стадии строятся дискретные аналоги дифференциального уравнения (2.8) и входных данных. Наиболее естественная дискретизация дифференциального оператора – замена производных соответствующими конечными разностями. Введем обозначения

$$u_x = \frac{u(x+h) - u(x)}{h}, \quad u_{\bar{x}} = \frac{u(x) - u(x-h)}{h}, \quad u_{\bar{x}x} = \frac{u_x - u_{\bar{x}}}{h} \quad (2.9)$$

Первые два выражения из (2.9) – дискретная аппроксимация производ-

ной $\frac{du}{dx}$, для получения которой достаточно использовать значения функции $u(x)$ лишь в двух точках (двухточечный шаблон). Разлагая $u(x)$ в ряд Тейлора, нетрудно убедиться в том, что:

$$\begin{aligned} \frac{du}{dx}(x) &= u_x + O(h), \quad \frac{du}{dx}(x) = u_{\bar{x}} + O(h), \\ \frac{du}{dx}\left(x + \frac{h}{2}\right) &= u_x + O(h^2), \quad \frac{du}{dx}\left(x - \frac{h}{2}\right) = u_{\bar{x}} + O(h^2) \end{aligned}$$

Другими словами, $\frac{du}{dx}$ в целых узлах сетки $x = x_i$ аппроксимируется выражениями (2.9) с первым порядком аппроксимации, а в полуцелых точках $x = x_{i+1/2}$, $x = x_{i-1/2}$, (в силу симметрии) — со вторым. Для замены второй производной функции u (третье выражение (2.9)) требуется, очевидно, трехточечный шаблон $x - h$, x , $x + h$ причем

$$\frac{d}{dx}\left(\frac{du}{dx}\right) = u_{\bar{x}\bar{x}} + O(h^2) = \frac{u(x+h) - 2u(x) + u(x-h)}{h^2}$$

т.е. аппроксимация имеет второй порядок.

Дискретная аппроксимация входных данных в рассматриваемом случае не представляет труда и осуществляется точно: $\varphi_i = f(x_i) = f_i, i = 0, \dots, N$, $y_0 = y(0) = u_1$, $y_N = y(l) = u_2$.

Объединяя все эти рассуждения, заменим (2.8) системой $N - 1$ разностных уравнений для нахождения $N - 1$ неизвестных значений приближенного решения y_i в узлах x_i сетки ω_h :

$$y_{\bar{x}\bar{x}} = -\varphi \quad \text{или} \quad \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} = -\varphi_i, \quad (2.10)$$

$$i = 1, 2, \dots, N - 1, \quad y_0 = u_1, \quad y_N = u_2$$

Система (2.10) с краевыми условиями называется разностной схемой и служит дискретным аналогом модели (2.8). Ее решение находится относительно просто.

Проиллюстрируем, используя (2.8)-(2.10), элементарные понятия, связанные с разностными схемами. Сеточная функция $z_i = y_i - u_i$, $i = 0, \dots, N$, т. е. разница между точным и приближенным решениями в узлах сетки $x = x_i$ называется *погрешностью*. Если $z_i = O(h^\alpha)$, $i = 0, \dots, N$, $\alpha > 0$ то разностная схема (2.10) *сходится* (с порядком α) и $z_i \rightarrow 0$, $h \rightarrow 0$ для всех i : при измельчении сетки y_i - сколь угодно хо-

рошо аппроксимирует точное решение $u(x)$ в узлах x_i . Между узлами искомое решение можно при необходимости доопределить с помощью обычной интерполяции. В этом случае построение разностной схемы достигает своей цели.

Чтобы установить сходимость схемы (2.10), рассмотрим сеточную функцию

$$\psi_i = u_i'' - u_{\bar{x}x}, i = 1, \dots, N,$$

называемую *погрешностью аппроксимации дифференциального оператора разностным*, или *невязкой* (здесь штрихами обозначено дифференцирование по x , $u_i'' = u''(x_i)$). Если $\psi_i = O(h^\beta)$, $i = 1, \dots, N-1$; $\beta > 0$, то имеет место аппроксимация: непрерывный оператор приближается дискретным с порядком β (здесь, как уже показано выше, $\beta = 2$), и $\psi_i \rightarrow 0$, $h \rightarrow 0$, $i = 1, \dots, N-1$. Функция $f_i - \varphi_i$, $i = 0, \dots, N$ погрешность аппроксимации правой части (в изучаемом примере она тождественно равна нулю, как и погрешность аппроксимации краевых условий).

Вычтем во внутренних узлах сетки $i = 1, \dots, N-1$ уравнение (2.8) из (2.10) и получим

$$y_{\bar{x}x} - u_i'' = -\varphi_i + f_i, i = 1, \dots, N-1,$$

или, учитывая равенства $z_i = y_i - u_i$, $\psi_i = u_i'' - u_{\bar{x}x}$, $\varphi_i = f_i$ придем к системе разностных уравнений для погрешности z_i с нулевыми краевыми условиями:

$$z_{\bar{x}x} = \psi, i = 1, \dots, N-1, z(0) = z(N) = 0 \quad (2.11)$$

правая часть которой – погрешность аппроксимации ψ .

Данное свойство позволяет установить основную связь между уже введенными понятиями сходимости и аппроксимации схемы (2.10) и понятием ее *устойчивости*. Последнее подразумевает, что для любых допустимых входных данных φ , u_1 , u_2 выполняется неравенство

$$\|y\| = \max_i |y_i| \leq C \|\varphi\| = C \max_i |\varphi_i|, i = 0, \dots, N \quad (2.12)$$

где $C > 0$ - постоянная, не зависящая от i и от h (в данном случае устойчивость по правой части).

Схема (2.11) — частный случай (2.10). Поэтому в случае выполнения (2.12) для нее немедленно имеем

$$|z| \leq C|\psi| \text{ или } z_i = O(h^\beta) \rightarrow 0, h \rightarrow 0, i = 0, \dots, N$$

т. е. из свойств аппроксимации ($\psi = O(h^\beta)$) и устойчивости (2.12) разностной схемы (2.10) следует ее сходимость (с тем же порядком, что и порядок аппроксимации, $\alpha = \beta = 2$).

2.3 НЕПОСРЕДСТВЕННАЯ ФОРМАЛЬНАЯ АППРОКСИМАЦИЯ

Этот, исторически первый и, как следует из названия, легко интерпретируемый метод прост, ясен и часто дает дискретные модели хорошего качества. Покажем это, построив разностную аппроксимацию первой краевой задачи на отрезке $[0, l]$ для уравнения теплопроводности

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right), \quad 0 < x < l, \quad 0 < t \leq T \\ u(0, t) &= u_1(t), \quad u(l, t) = u_2(t), \quad 0 \leq t \leq T \\ u(x, 0) &= u_0(x), \quad 0 \leq x \leq l \end{aligned} \quad (2.13)$$

Ее решение $u(x, t)$ предполагается существующим и ищется в области $0 < x < l$ при всех $0 < t \leq T$ (рис. 2.3)

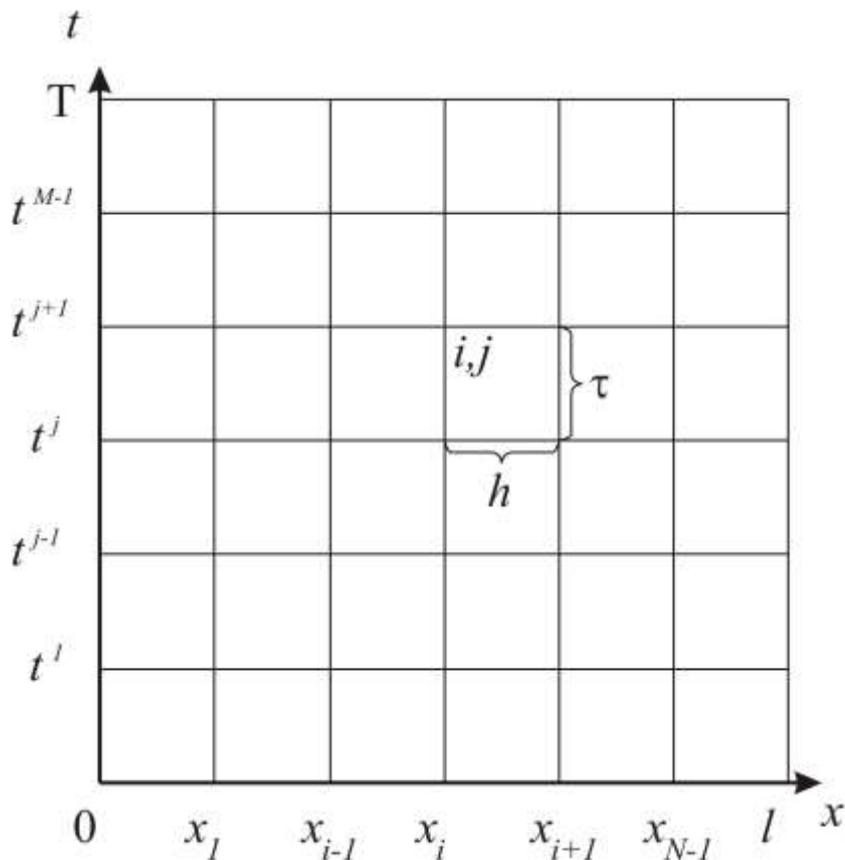


Рис. 2.3 Расчетная область $[0, l] \times [0, T]$ разбитая сеткой

Выберем простейшую дискретизацию расчетной области, разбив ее равномерно $N-1$ вертикальными и M горизонтальными линиями.

Точки их пересечения между собой и с отрезками $[0, l]$, $[0, T]$, $[l, T]$ дают узлы сетки $\omega_{h\tau}$. Такая сетка называется *равномерной с шагом, по пространству* $h = l/N$, $x_i = ih$, $0 \leq i \leq N$, и *по времени* $\tau = T/M$, $t^j = j\tau$, $0 \leq j \leq M$: совокупность узлов с одинаковым индексом j — временным слоем (рис. 2.3). В граничных (принадлежащих отрезкам $[0, l]$, $[0, T]$, $[l, T]$) узлах функция $u(x, t)$ известна из краевых условий (2.13) и аппроксимация очевидна: $y_0^j = u_1(t^j)$, $j = 0, 1, \dots, M$; $y_i^0 = u_0(x_i)$, $0 \leq i \leq N$.

Приближенное решение y_i^j необходимо найти на множестве внутренних узлов $\omega_{h\tau}$ сетки $\bar{\omega}_{h\tau} = \omega_{h\tau} \cup \gamma_{h\tau}$. Проведем естественную аппроксимацию дифференциального оператора разностным, записывая последний одинаково в любой точке (x_i, t^j) сетки $\omega_{h\tau}$. Производную по времени заменим первой разностью:

$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{y_i^{j+1} - y_i^j}{\tau}$$

Учитывая, что в ней фигурируют значения разностного решения с двух временных слоев, вторую производную по x заменим суммой выражений взятых на $(j+1)$ -м и j -м слоях:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \sigma y_{xx}^{j+1} + (1 - \sigma) y_{xx}^j.$$

В итоге вместо (5.1) приходим к *схеме с весами*

$$\begin{aligned} \frac{y_i^{j+1} - y_i^j}{\tau} &= \sigma \frac{y_{i+1}^{j+1} - 2y_i^{j+1} + y_{i-1}^{j+1}}{h^2} + (1 - \sigma) \frac{y_{i+1}^j - 2y_i^j + y_{i-1}^j}{h^2} \\ (x_i, y^j) &\in \omega_{h\tau}, \\ y_0^j &= u_1(0, y^j), \quad y_N^j = u_2(l, t^j), \quad j = 0, 1, \dots, M \\ y_0^j &= u_0(x_i), \quad 0 \leq i \leq N \end{aligned} \tag{2.14}$$

представляющей собой систему $(N-1)M$ линейных алгебраических уравнений для нахождения стольких же значений функции y_i^j . Каждое из уравнений (2.14) записано при $\sigma \neq 0, 1$ на шеститочечном шаблоне с использованием узлов с индексами $(i-1, j+1)$, $(i, j+1)$, $(i+1, j+1)$, $(i-1, j)$, (i, j) , $(i+1, j)$. Погрешность ее аппроксимации в общем случае есть величина $O(\tau + h^2)$, т. е. первого порядка по времени и второго по

пространству. Для *симметричной* схемы с $\sigma = \frac{1}{2}$ порядок аппроксимации по времени увеличивается до $O(\tau^2)$.

При $\sigma = 0,1$ из (2.13) получаются более простые чисто *явная* ($\sigma = 0$ четырехточечный шаблон $(i, j+1), (i-1, j), (i, j), (i+1, j)$. ($\Gamma + 1, j$)) и чисто *неявная* ($\sigma = 1$ четырехточечный шаблон $(i-1, j+1), (i, j+1), (i+1, j+1), (i, j)$) схемы.

При $\sigma = 0,1$ каждое из уравнений схемы (2.14) содержит лишь одну неизвестную величину y_i^{j+1} . Поэтому ее решение легко находится по явным формулам при переходе от j -го к $(j+1)$ -му слою с использованием известных значений решения на границе (на слое $j=0$ решение известно из начальных данных).

В случае неявной схемы (и всех схем $\sigma \neq 0$) разностные уравнения содержат три неизвестных величины: $y_{i-1}^{j+1}, y_i^{j+1}, y_{i+1}^{j+1}$ - на каждом временном слое получается задача типа (2.10). Подобные задачи для трехточечных уравнений вида

$$A_i y_{i-1} - C_i y_i + B_i y_{i+1} = -F_i, \quad i = 1, \dots, N-1 \quad (2.15)$$

$$y_0 = \eta_1 y_1 + \mu_1, \quad y_N = \eta_2 y_{N-1} + \mu_2$$

где $A_i \neq 0, B_i \neq 0, i = 1, \dots, N-1$, при условиях $|C_i| \geq |A_i| + |B_i|, i = 1, \dots, N-1, |\eta_\alpha| \leq 1, \alpha = 1, 2; |\eta_1| + |\eta_2| < 2$ для (2.10) и (2.14) условия выполнены) относительно легко решаются методом прогонки. У решения (2.15) предполагается наличие рекуррентной зависимости вида

$$y_i = \alpha_{i+1} y_{i+1} + \beta_{i+1} \quad (2.16)$$

подстановка которой в (2.16) дает для коэффициентов α_{i+1} и β_{i+1} рекуррентные соотношения

$$\alpha_{i+1} = \frac{B_i}{C_i - \alpha_i A_i}, \quad \beta_{i+1} = \frac{A_i \beta_i + F_i}{C_i - \alpha_i A_i}, \quad i = 1, \dots, N-1$$

Из них с помощью краевого условия при $i=0$ находятся $\alpha_{i+1}, \beta_{i+1}$ во всех узлах сетки (прямая прогонка). Далее, с помощью условия в точке $i=N$ при известных $\alpha_{i+1}, \beta_{i+1}$ по формуле (2.16) вычисляются значения $y_N, y_{N-1}, \dots, y_1, y_0$ (обратная прогонка). Заметим: простота решения алгебраической системы (2.15) обусловлена простой (трехдиагональной) структурой ее матрицы.

3 ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ЯДЕРНОГО РЕАКТОРА

3.1 ИЗМЕНЕНИЕ ИЗОТОПНОГО СОСТАВА ЯДЕРНОГО ТОПЛИВА

В процессе работы ядерного реактора происходит изменение состава топлива, связанное с накоплением в нём осколков деления и с образованием трансурановых элементов, главным образом изотопов Pu , если речь идет о реакторе, использующем так называемый уран-плутониевый ядерно-топливный цикл. Поскольку такие типы ядерных реакторов получили наибольшее распространение, то в данной главе речь пойдет именно о них. В дальнейшем используемый и описанный здесь метод решения может быть обобщён на другие типы ядерных реакторов путём простого расширения базы данных констант для вновь введённых в расчёт элементов. За основу вводимой модели взята топливная композиция, представляющая собой оксид урана UO_2 .

В данном топливе уран в основном представлен двумя изотопами уран-238 и уран-235 (от 2% до 5%). Таким образом, зная все нейтронно-физические характеристики участвующих в ядерных превращениях элементов и средний по активной зоне реактора интегральный поток, можем исследовать динамику изменения состава топливной композиции во времени при различных режимах облучения (режимах работы ядерного реактора).

Для решения поставленной задачи введём следующие предположения:

- Рассматриваемые плотности потоков нейтронов $(10^{10} \div 10^{14}) \frac{1}{\text{см}^2 \cdot \text{с}}$
- Обогащение по 235 изотопу (2-5)%.
- Жёсткость спектра от 0-3.
- Пренебрегаем уменьшением концентрации урана-238 и накоплением плутония-242.
- Считаем что концентрации всех нуклидов кроме урана-235 и урана-238 равны нулю.

В общем случае, когда топливо представлено композицией из Th-U-Pu топлива, справедлива схема радиоактивных превращений представленная на рис. 1

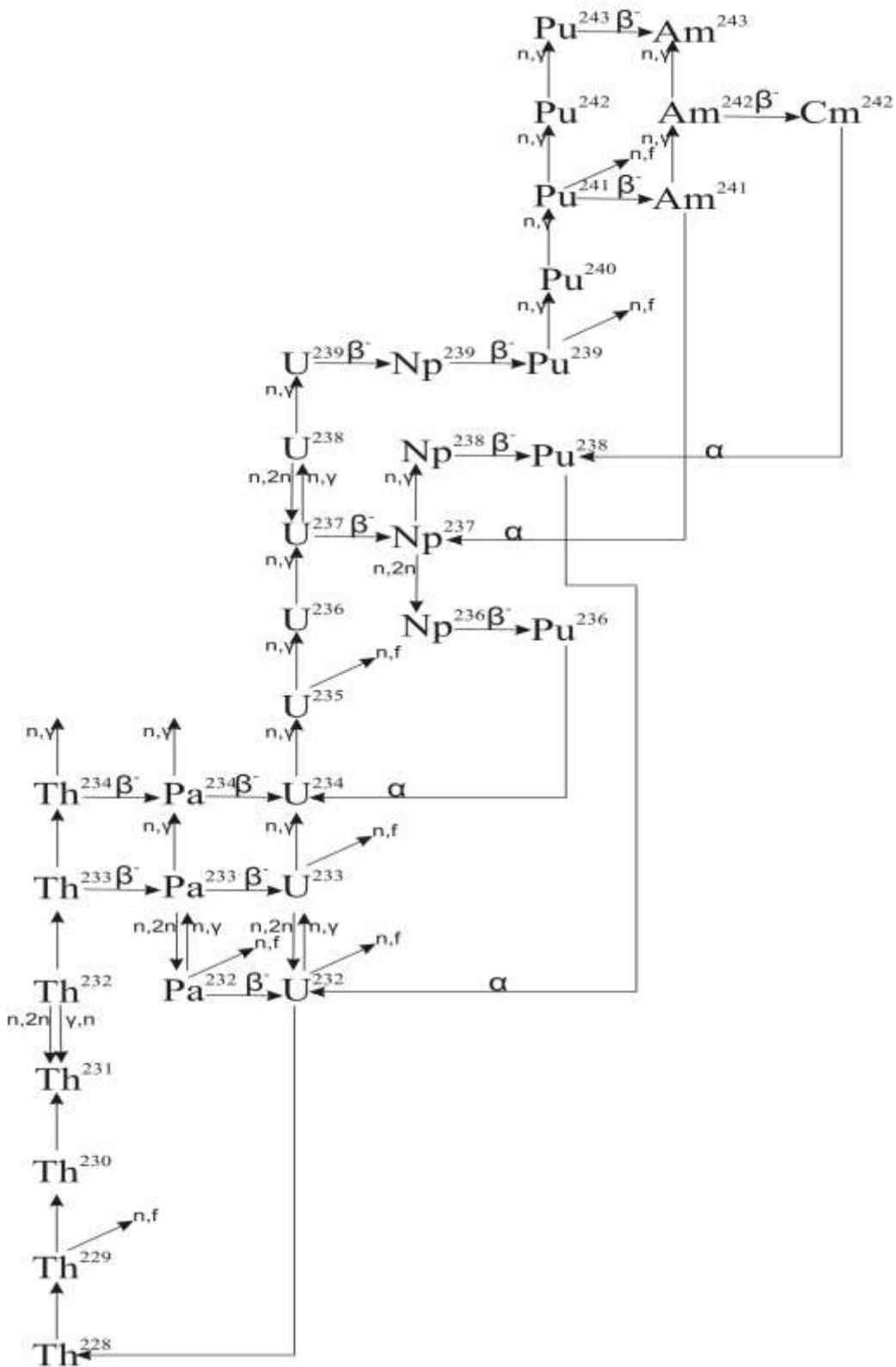


Рис.3.1 Схема ядерно-физических процессов, происходящих в топливе на основе композиции $U^{235} - Pu^{239} - Th^{232}$

При одновременном рассмотрении большого числа нуклидов решение системы дифференциальных уравнений в случае произвольной зависимости от времени её коэффициентов возможно только путём разбиения времени T на ряд таких малых интервалов T_k , в пределах каждого из которых коэффициенты (т.е. одногрупповые сечения и потоки) можно считать постоянными. В этом случае получаем систему с постоянными коэффициентами и схема расчёта концентраций ядер приобретает итерационный характер для известного стартового состава топлива и осуществляется с учётом критичности спектра плотности потока нейтронов; исходя из полученного спектра определяют концентрации актиноидов и продуктов деления за промежутки времени T_k ; полученное поле концентраций принимают за исходное для очередного расчёта спектра плотности потока и т.д.

Ниже описывается алгоритм решения системы дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами применительно к такой модели процесса превращения ядер, когда все нуклиды могут быть занумерованы таким образом, что вклад в концентрацию ядра с данным номером дают только ядра с меньшими номерами.

Очевидно, использование неких усреднённых по времени облучения топлива значений потоков нейтронов и одногрупповых сечений реакций, постоянных в течение всей кампании реактора и для всей загрузки зоны в целом, вряд ли может привести к результату расчёта концентраций, имеющих удовлетворительную точность. Для получения общей картины по реактору, строго говоря, необходимо проводить расчёт изотопного состава для каждого твэла (или более грубо кассеты, пакета), и лишь после суммирования полученных результатов можно судить о количестве интересующих нас ядер во всей активной зоне. Только такой подход позволяет учесть сложный режим работы реальных ядерных реакторов, включающий частичную выгрузку и перестановку кассет в ходе кампании, колебания мощности, аварийные и плановые остановки и т.д.

3.2 НАКОПЛЕНИЕ ТЯЖЁЛЫХ ЯДЕР В РЕАКТОРЕ

Для элементарного объёма облучаемого материала (твэла, кассеты) в предположении постоянства заданной плотности потока нейтронов (а не выделяемой мощности) в течение времени облучения T и при одногрупповом представлении сечений реакции (n, f) , (n, γ) , $(n, 2n)$ для каждого делящегося ядра накопление p актиноидов можно описать

системой p уравнений, в которой i -ое уравнение для числа ядер i -го актиноида облучаемого топлива $U_i(t)$ имеет вид:

$$\frac{dU_i(t)}{dt} = -\lambda_i U_i(t) - (\bar{\sigma}_i^c + \bar{\sigma}_i^f) \Phi U_i(t) + \sum_{j=1}^{i-1} \lambda_{ij} U_j(t) + \sum_{j=1}^{i-1} \bar{\sigma}_{ij}^c \Phi U_j(t) \quad (3.1)$$

при начальных условиях

$$U_i(0) = U_{i,0} \quad (3.2)$$

Здесь i меняется от 1 до p ; j принадлежит ядру-предшественнику i -го ядра, $j < i$; Φ - плотность потока нейтронов со спектром $\varphi(E)$;

$$\Phi = \int_0^{\infty} \varphi(E) dE \quad (3.3)$$

λ_{ij} - вероятность распада j -го ядра путём альфа- или бета- распада, К-захвата, изомерного перехода и т.д. в i -ое ядро; $\bar{\sigma}_i^c, \bar{\sigma}_i^f$ - одногрупповые сечения реакций $(n, f), (n, \gamma), (n, 2n)$ i -го ядра, усреднённые по спектру $\varphi(E)$:

$$\bar{\sigma}_i = \frac{\sum_r \sigma_{ir}(E) \varphi_r(E)}{\sum_r \varphi_r(E)} \quad (3.4)$$

Введя обозначения

$$\lambda_i + (\bar{\sigma}_i^f + \bar{\sigma}_i^c) \Phi \rightarrow \lambda_i, \quad \lambda_{ij} + \bar{\sigma}_{ji}^c \rightarrow \lambda_{ij} \quad (3.5)$$

уравнение (6.1) перепишем более компактно:

$$\frac{dU_i(t)}{dt} = -\lambda_i U_i(t) + \sum_{j=1}^{i-1} \lambda_{ij} U_j(t) \quad (3.6)$$

Решение этого уравнения (6.6) ищем в виде

$$U_i(t) = a_i e^{-\lambda_i t} - \sum_{j=1}^{i-1} b_{ji} U_j(t) \quad (3.7)$$

где коэффициенты a_i и b_{ji} неизвестны и подлежат определению. Из начальных условий получаем

$$a_i = U_{0i} + \sum_{j=1}^{i-1} b_{ji} U_{0j} \quad (3.8)$$

$$\begin{cases} b_{ji} = \frac{\lambda_{ij}}{(\lambda_j - \lambda_i)}, & j = i - 1 \\ b_{ji} = \lambda_{ji} + \sum_{k=j+1}^{i-1} \frac{b_{ki} \lambda_{jk}}{(\lambda_j - \lambda_k)}, & 1 < j < i - 1 \end{cases} \quad (3.9)$$

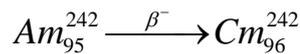
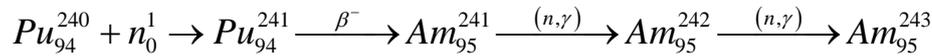
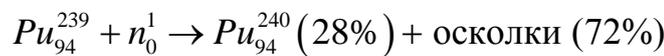
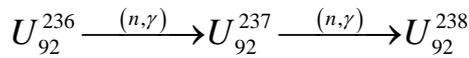
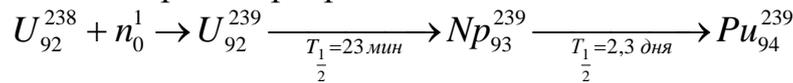
Таким образом, для числа ядер рассматриваемого i -го актиноида в любой момент времени t при начальных условиях (3.2) с учётом последних соотношений получаем

$$U_i(t) = U_{0i} e^{-\lambda_i t} + \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} [U_{0j} e^{-\lambda_j t} - U_j(t)] \quad (3.10)$$

В рассматриваемом случае (топливо представлено изотопами урана-235 и урана-238) цепочка превращений упрощается путём исключения из неё изотопов тория. Оставшаяся часть представляет собой цепочку ядерных превращений для так называемого уран-плутониевого ядерно-топливного цикла.

Вследствие малости сечений реакции по сравнению с конкурирующим процессом (n, γ) пренебрегаем реакцией $(n, 2n)$ и рассматриваем только (n, γ) реакции. Так же не учитываем альфа-распад, так как период полураспада указанных на схеме элементов значительно превышает временной промежуток, на котором рассматривается поставленная задача (за данное время взято характерное время работы реактора между плановыми остановами - 1 год.).

В результате, для решения поставленной задачи можно записать следующие ядерные превращения:



Изменение концентрации актиноидов и продуктов деления в облучаемом топливе в течении кампании T однозначно определяется поведением во времени однокрупной плотности потока нейтронов и однокрупных сечений, а также начальными условиями.

Система уравнений для нахождения концентраций выше описанных нуклидов записывается следующим образом:

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \frac{dU_U^{235}}{dt} = -\sigma_{n,\gamma}^{235} U_U^{235} \Phi - \sigma_{n,f}^{235} U_U^{235} \Phi, \\
 \frac{dU_U^{236}}{dt} = \sigma_{n,\gamma}^{235} U_U^{235} \Phi - \sigma_{n,\gamma}^{236} U_U^{236} \Phi - \lambda^{236} U_U^{236}, \\
 \frac{dU_U^{237}}{dt} = \sigma_{n,\gamma}^{236} U_U^{236} \Phi + \lambda^{236} U_U^{236} - \sigma_{n,\gamma}^{237} U_U^{237} \Phi - \lambda^{237} U_U^{237}, \\
 \frac{dU_U^{238}}{dt} = \sigma_{n,\gamma}^{237} U_U^{237} \Phi + \lambda^{237} U_U^{237} - \sigma_{n,\gamma}^{238} U_U^{238} \Phi, \\
 \frac{dU_U^{239}}{dt} = \sigma_{n,\gamma}^{238} U_U^{238} \Phi - \sigma_{n,\gamma}^{239} U_U^{239} \Phi - \lambda^{239} U_U^{239}, \\
 \frac{dU_{Np}^{239}}{dt} = \sigma_{n,\gamma}^{239} U_U^{239} \Phi + \lambda_U^{239} U_U^{239} - \sigma_{n,\gamma}^{239} U_{Np}^{239} \Phi - \lambda^{239} U_{Np}^{239}, \\
 \frac{dU_{Np}^{239}}{dt} = \sigma_{n,\gamma}^{239} U_U^{239} \Phi + \lambda_U^{239} U_U^{239} - \sigma_{n,\gamma}^{239} U_{Np}^{239} \Phi - \lambda^{239} U_{Np}^{239}, \\
 \frac{dU_{Pu}^{239}}{dt} = \sigma_{n,\gamma}^{239} U_{Np}^{239} \Phi + \lambda_{Np}^{239} U_{Np}^{239} - \sigma_{n,\gamma}^{239} U_{Pu}^{239} \Phi - \sigma_{n,f}^{239} U_{Pu}^{239} \Phi - \lambda^{239} U_{Pu}^{239}, \\
 \frac{dU_{Pu}^{240}}{dt} = \sigma_{n,\gamma}^{239} U_{Pu}^{239} \Phi + \lambda_{Pu}^{239} U_{Pu}^{239} - \sigma_{n,\gamma}^{240} U_{Pu}^{240} \Phi - \lambda^{240} U_{Pu}^{240}, \\
 \frac{dU_{Pu}^{241}}{dt} = \sigma_{n,\gamma}^{240} U_{Pu}^{240} \Phi + \lambda_{Pu}^{240} U_{Pu}^{240} - \sigma_{n,\gamma}^{241} U_{Pu}^{241} \Phi - \lambda^{241} U_{Pu}^{241}, \\
 \frac{dU_{Am}^{241}}{dt} = \sigma_{n,\gamma}^{241} U_{Pu}^{241} \Phi + \lambda_{Pu}^{241} U_{Pu}^{241} - \sigma_{n,\gamma}^{241} U_{Am}^{241} \Phi - \lambda^{241} U_{Am}^{241}, \\
 \frac{dU_{Am}^{242}}{dt} = \sigma_{n,\gamma}^{241} U_{Am}^{241} \Phi + \lambda_{Am}^{241} U_{Am}^{241} - \sigma_{n,\gamma}^{242} U_{Am}^{242} \Phi - \lambda^{241} U_{Am}^{242}, \\
 \frac{dU_{Am}^{243}}{dt} = \sigma_{n,\gamma}^{242} U_{Am}^{242} \Phi + \lambda_{Am}^{242} U_{Am}^{242} + \lambda^{242} U_{Am}^{242}, \\
 \frac{dU_{Cm}^{242}}{dt} = \lambda^{241} U_{Am}^{241}.
 \end{array} \right. \quad (3.11)$$

Сложность решения системы (3.11) заключается в том, что если получать решение данной системы в аналитическом виде, то оно будет чрезвычайно громоздко, поэтому для исследования изменения концентрации изотопов, лучше воспользоваться приближенными методами.

Для исследования изменения концентрации изотопов описываемой системой (3.11) воспользуемся конечными разностями, аппроксимирующими производные первого порядка. Для этого разобьем времен-

ной отрезок $[0, T]$ сеткой с шагом $h = \frac{l}{N}$, $0 \leq i \leq N$, и в каждом узле t_i будем вычислять значение концентрации каждого из изотопов.

Для аппроксимации уравнений (6.11), т.к. они являются дифференциальными уравнениями первого порядка, воспользуемся схемой Эйлера.

Для обыкновенного дифференциального уравнения

$$\frac{du}{dt} = f(t, u)$$

с начальными условиями $u(0) = u_0$, $t_0 = 0$ аппроксимация по схеме Эйлера будет иметь вид:

$$\frac{u_{i+1} - u_i}{h} = f(t_i, u_i), \quad u(0) = u_0$$

Данная схема является явной, поэтому выражая

$$u_{i+1} = u_i + hf(t_i, u_i)$$

для всех $i = \overline{0, N}$ получим последовательно решение во всех узлах t_i .

Применяя этот метод к системе (3.11) получается простая система уравнений, где величина каждого изотопа вычисляется последовательно, при условии, что заданы начальные условия, т.е. начальная концентрация для каждого изотопа. Более подробное описание метода Эйлера находится в приложении.

3.3 НАКОПЛЕНИЕ ПРОДУКТОВ ДЕЛЕНИЯ В РЕАКТОРЕ

Принципиальное отличие данного метода состоит в том, что при описании накопления собственно продуктов деления учитываются как естественный распад и радиационный захват нейтронов, так и деление всех p актиноидов одновременно. То есть в общем случае для работающего реактора в концентрацию любого l -го продукта деления должны вносить вклад все $(l-1)$ ядер-предшественников, так как практически в каждой изобарной цепочке имеются нуклиды с заметным сечением реакции (n, γ) . После остановки реактора, связи, обусловленные взаимодействием нейтронов с продуктами деления, естественно, исчезают.

Накопление q продуктов деления можно описать системой q уравнений, в которой l -ое уравнение для числа ядер l -го нуклида

$N_l(t)$ при введённых выше предположениях относительно плотности потоков нейтронов имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{dN_l(t)}{dt} = & -\lambda_l N_l(t) - \bar{\sigma}_l^c \Phi N_l(t) + \\ & \sum_{i=1}^p \bar{y}_{il} \bar{\sigma}_i^f \Phi U_i(t) + \sum_{m=1}^{i-1} \lambda_{ml} N_m(t) + \sum_{m=1}^{i-1} \bar{\sigma}_{ml}^c \Phi N_m(t) \end{aligned} \quad (3.12)$$

при начальных условиях

$$N_l(0) = N_{0l} \quad (3.13)$$

Здесь l меняется от 1 до q ; m принадлежит ядру-предшественнику, $m < l$; \bar{y}_{il} - независимый выход l -го продукта деления при делении i -го тяжёлого ядра, усреднённый по действующему спектру; λ_{ml} - вероятность распада m -го нуклида в l -ый путём альфа- или бета-распада.

Введя аналогично (3.5) обозначения

$$\begin{aligned} \lambda_l + \bar{\sigma}_l^c \Phi & \rightarrow \lambda_l; \\ \lambda_{ml} + \bar{\sigma}_{ml}^c \Phi & \rightarrow \lambda_{ml}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

уравнение (3.12) перепишем более компактно:

$$\frac{dN_l(t)}{dt} = -\lambda_l N_l(t) + \sum_{i=1}^p \bar{y}_{il} \bar{\sigma}_i^f \Phi U_i(t) + \sum_{m=1}^{i-1} \lambda_{ml} N_m(t) \quad (3.15)$$

Решение уравнения (6.15) для любого l ищем в виде

$$N_l(t) = c_l e^{-\lambda_l t} - \sum_{m=1}^p d_{ml} N_m(t) - \sum_{i=1}^p e_{il} U_i(t) \quad (3.16)$$

Из начальных условий (6.13)

$$c_l = N_{0l} + \sum_{m=1}^p d_{ml} N_{0m} - \sum_{i=1}^p e_{il} U_{0i} \quad (3.17)$$

$$N_m(t) = c_m e^{-\lambda_m t} - \sum_{s=1}^{m-1} d_{sm} N_s(t) - \sum_{i=1}^p e_{im} U_{0i} \quad (3.18)$$

Таким образом, для числа ядер l -го продукта деления в любой момент времени t с учётом начальных условий

$$N_l(t) = \left(N_{0l} + \sum_{m=1}^{i-1} d_{ml} N_{0m} - \sum_{i=1}^p e_{il} U_{0i} \right) e^{-\lambda_l t} - \sum_{m=1}^{l-1} d_{ml} N_m(t) - \sum_{i=1}^p e_{il} U_i \quad (3.19)$$

Окончательное решение получается из (3.19) после обратной замены (3.14).

Так как в решение (3.19) входят зависящие от времени концентрации делящихся актиноидов $U_i(t)$, алгоритм вычисления концентраций продуктов деления имеет следующий вид:

1. Для ядра с номером $i=1$, очевидно, решение имеет вид:

$$U_1(t) = U_{01} e^{-\lambda_1 t};$$

2. выбирается i -ое ядро так, чтобы все j -е уже были рассчитаны;
3. для $j=i-1$ вычисляются коэффициенты $b_{i-1,i}$:

$$b_{i-1,i} = \frac{\lambda_{i-1,i}}{\lambda_{i-1,i} - \lambda_i};$$

4. вычисляются коэффициенты b_{i-2} и т.д. вплоть до $b_{1,i}$;
5. вычисляются $a_i, U_i(t)$;
6. вычисляется концентрация первого продукта $l=1$

$$N_1(t) = \left(N_{01} - \sum_{i=1}^p e_{i1} U_{0i} \right) e^{-\lambda_1 t} - \sum_{i=1}^p e_{i1} U_i;$$

7. выбирается l -й продукт деления из q рассматриваемых так, что все m -е нуклиды ($m < l$) уже рассчитаны;
8. для $m=l-1$ вычисляются коэффициенты $d_{l-1,i}$;

$$d_{l-1,i} = \frac{\lambda_{l-1,i}}{\lambda_{l-1,i} - \lambda_l};$$

9. вычисляются коэффициенты d_{ml} ;
10. для $i=p$ вычисляются коэффициенты e_{pl} ;

$$e_{pl} = \frac{\left(y_{pl} + \sum_{m=1}^{l-1} y_{pm} d_{ml} \right) \bar{\sigma}_p^f \Phi}{\lambda_p - \lambda_l};$$

11. вычисляются коэффициенты e_{il} и т.д. вплоть до e_{ll} ;
12. вычисляются коэффициенты c_i ;
13. вычисляется концентрация $N_l(t)$;
14. для $(l+1)$ -го нуклида пп. 7-12 повторяются.

Основная особенность данного метода заключается в учете изменяющегося за время облучения первоначального состава ядерного топлива, т. е. образовании и делении вторичных делящихся ядер, в результате которого накопление продуктов деления определяется делением большего числа по сравнению с первоначальным числом тяжелых ядер. Другое существенное отличие заключается в отказе от представления сложных (ветвящихся) цепочек радиоактивных превращений как актиноидов, так и продуктов деления в виде нескольких линейных цепочек.

При использовании метода линеаризации, когда один и тот же нуклид, как правило, входит в несколько линейных цепочек, первоначально рассчитываются парциальные концентрации нуклида в каждой линейной цепочке, а истинная концентрация находится как сумма парциальных.

Однако сложности в организации процедуры суммирования парциальных концентраций и подготовке константного обеспечения, в первую очередь наборов независимых выходов и сечений нейтронных реакций, делают метод линеаризации значительно менее удобным по сравнению с предложенным. Таким образом, использование данного алгоритма позволяет одновременно описать процесс накопления и тяжелых ядер, и продуктов деления в условиях дискретного изменения во времени потока нейтронов (разные уровни мощности) для рассматриваемого объема облучаемого топлива.

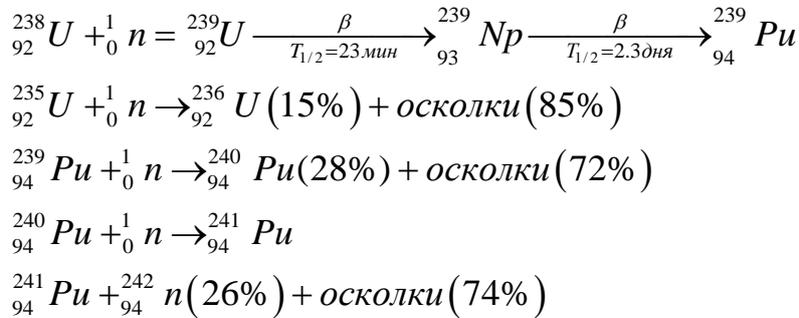
Рассмотрим упрощенный пример накопления продуктов деления в уран-плутониевом ядерно-топливном цикле. Как известно, одним из основных условий эксплуатации энергетического ядерного реактора является поддержание заданной мощности то есть постоянной во времени плотности потока нейтронов. Одной из значимых причин вызывающих изменения потока во времени является отравление, стационарное и не стационарное, и шлакование реактора.

3.4 ВЫГОРАНИЕ И ВОСПРОИЗВОДСТВО ЯДЕРНОГО ТОПЛИВА

В процессе работы ядерного реактора происходит изменение состава топлива, связанное с накоплением в нём осколков деления и с образованием трансурановых элементов, главным образом изотопов Pu . Влияние осколков деления на реактивность ядерного реактора называется отравлением (для радиоактивных осколков) и зашлаковыванием (для стабильных). Отравление обусловлено главным образом ^{135}Xe ко-

торый обладает наибольшим сечением поглощения нейтронов ($2,6 \cdot 10^6$ барн). Период его полураспада $T_{1/2} = 9,2$ ч, выход при делении составляет 6—7%. Основная часть ^{135}Xe образуется в результате распада ^{135}I ($T_{1/2} = 6,8$ ч). При отравлении Кэф изменяется на 1—3%.

Образование трансурановых элементов в Я.Р. происходит по схемам:



Накопление Pu^{239} (ядерного горючего) в начале работы ядерного реактора происходит линейно во времени, причём тем быстрее (при фиксированном выгорании U^{235}), чем меньше обогащение урана. Затем концентрация Pu^{235} стремится к постоянной величине, которая не зависит от степени обогащения, а определяется отношением сечений захвата нейтронов U^{238} и Pu^{239} . Характерное время установления равновесной концентрации $\text{Pu}^{239} \approx 3/\Phi$ лет (Φ в ед. 10^{13} нейтронов/см²·сек). Изотопы ^{240}Pu , ^{241}Pu достигают равновесной концентрации только при повторном сжигании горючего в Я.Р. после регенерации ядерного топлива.

Выгорание ядерного топлива характеризуют суммарной энергией, выделившейся в ядерном реакторе на 1 т топлива. Для ядерных реакторов, работающих на естественном уране, максимальное выгорание ≈ 10 Гвт-сут/т (тяжело-водные ядерные реакторы). В ядерном реакторе со слабо обогащенным ураном (2-3% ^{235}U) достигается выгорание $\approx 20 - 30$ Гвт-сут/т. В ядерном реакторе на быстрых нейтронах – до 100 Гвт-сут/т. Выгорание 1 Гвт-сут/т соответствует сгоранию 0,1% ядерного топлива.

Коэффициентом конверсии K_k называется отношение количества делящихся изотопов Pu, образовавшихся в ядерном реакторе, к количеству выгоревшего U^{235} . Величина K_k увеличивается при уменьшении обогащения и выгорания. Так, для тяжеловодного ядерного реактора на естественном уране, при выгорании 10 Гвт-сут/т $K_k = 0,55$, а при совсем малых выгораниях (в этом случае K_k называется начальным плутониевым коэффициентом) $K_k = 0,8$. Если ядерный реактор сжигает и произ-

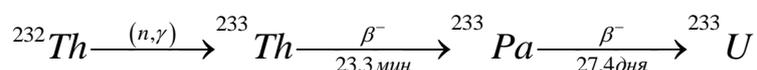
водит одни и те же изотопы (реактор-размножитель), то отношение скорости воспроизводства к скорости выгорания называется коэффициентом воспроизводства K_g . В ядерном реакторе на тепловых нейтронах $K_g < 1$, а для ядерного реактора на быстрых нейтронах K_g может достигать 1.4—1.5.

Приведённые выше цепочки превращений характерны для уранового топливного цикла далее рассмотрим так называемый ториевый цикл.

Ториевый топливный цикл представляет заметный интерес для реакторов на тепловых нейтронах, поскольку основной делящийся изотоп этого топливного цикла U^{233} дает в тепловом спектре нейтронов примерно 0.2 «дополнительных» нейтрона (по сравнению с U^{235} и Pu^{239}), которые можно использовать для повышения эффективности топливного цикла.

U^{233} получается в результате распада Pa^{233} , который образуется при захвате нейтронов Th^{232} . Изотоп Pa^{233} имеет достаточно длительный период полураспада (27 дней), и за это время, присутствуя в активной зоне, он может захватить нейтрон, перейдет в Pa^{234} и быстро распадется в U^{234} . Этот эффект заметно ухудшает эффективность топливоиспользования в ториевом топливном цикле, особенно при увеличении плотности потока нейтронов в активной зоне.

Ядерные реакции приводящие к уран-ториевому топливному циклу:



Протекают за счёт нейтронного облучения сырьевого нуклида Th^{232} в активной зоне ядерного реактора с делящимися нуклидами U^{235} или Pu^{239} . Образуется делящийся нуклид U^{233} , который так же может быть ядерным горючим. Для этого он извлекается из отработавшего топлива и используется при изготовлении ТВЭЛов.

3.5 СТАЦИОНАРНОЕ ОТРАВЛЕНИЕ РЕАКТОРА

Основным элементом вызывающим отравление реактора, в силу характерного для него высокого сечения поглощения нейтронов в тепловой области спектра распределения нейтронов, является Xe^{135} , появ-

уровнем мощности, не меняется, что приводит к росту концентрации ядер Xe .

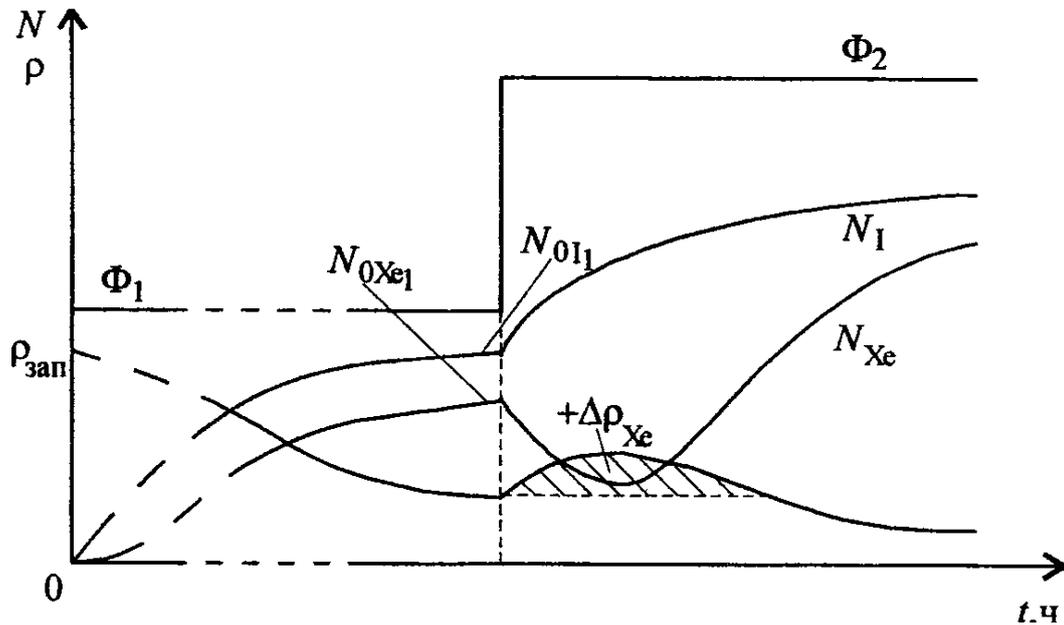


Рис.3.4 Нестационарное отравление Xe при увеличении мощности реактора.

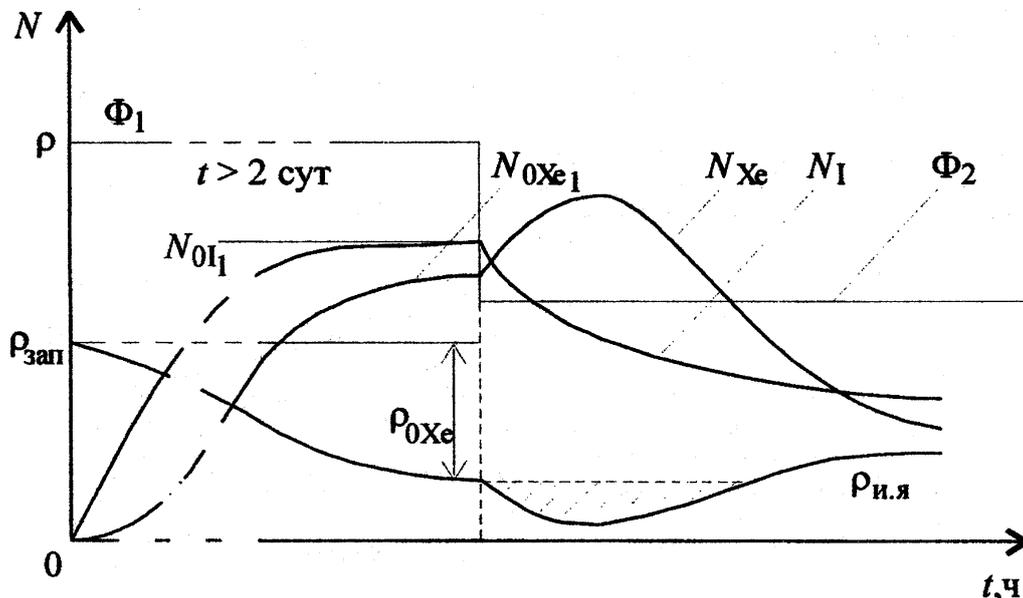


Рис. 3.5 Нестационарное отравление Xe снижении мощности реактора.

Рассмотренные переходные процессы вызывают в энергетических реакторах ксеноновую неустойчивость. Вероятность возникновения ксеноно-

вых колебаний возрастает с увеличением размеров реактора. Наибольшие возмущения нейтронного поля в ВВЭР-1000 возникают в режиме работы с изменением уровня мощности со 100 до 50% на некоторое время с последующим подъемом до 100%.

Случайное увеличение потока нейтронов в ограниченном объеме, вызванное изменением мощности, перемещением стержней или другими причинами, приводит сначала к снижению концентрации ксенона, росту реактивности и дальнейшему повышению мощности. Постепенно концентрация ксенона становится выше первоначальной, реактивность и мощность начинают снижаться, концентрация ксенона расти, и процессе превращается в циклический с периодом ксеноновых колебаний 6-10 ч.

Ксеноновые колебания мощности распространяются по всему объему реактора и могут привести к перегреву ТВЭЛов.

Для предотвращения колебаний реактор должен управляться стержнями по специальной программе или иметь достаточно большие отрицательные температурные коэффициенты реактивности.

Так, для реактора ВВЭР-1000 радиальные и азимутальные деформации распределения мощности могут быть скомпенсированы извлечением или погружением определенных групп поглотителей. Высотные деформации можно компенсировать с помощью специально предусмотренной для этой цели группы управляющих стержней УСП с половинной высотой поглотителя, перемещая их по высоте активной зоны.

3.7 СТАЦИОНАРНОЕ ОТРАВЛЕНИЕ САМАРИЕМ

Стационарное отравление Sm^{149} вычисляется по аналогии с ксеноном.

Баланс ядер прометия и самария в 1 см^3 активной зоны, имеют вид:

$$\frac{dN_{Pm}}{dt} = w_{Pm} \Phi \Sigma_{f_{U^{235}}} - \lambda_{Pm} N_{Pm}$$

$$\frac{dN_{Sm}}{dt} = \lambda_{Pm} N_{Pm} - \sigma_{Sm} N_{Sm} \Phi$$

Теоретически стационарные концентрации прометия и самария достигаются в пределе $t \rightarrow \infty$. Практически временем установления стационарной концентрации можно считать время, когда концентрация Pm будет отличаться от равновесной на 5-10 %. Это соответствует при-

мерно 8-10 сут. Следовательно, равновесные концентрации Pm и Sm определяются соотношениями:

$$N_{0Pm} = w_{Pm} \Sigma_{fU} \frac{\Phi}{\lambda_{Pm}},$$

$$N_{0Sm} = w_{Pm} \Sigma_{fU} \frac{\Phi}{\sigma_{Sm}}$$

Равновесная концентрация Pm пропорциональна потоку нейтрону. Равновесная концентрация самария не зависит от плотности потока нейтронов, но время достижения • прямо пропорционально плотности нейтронного потока.

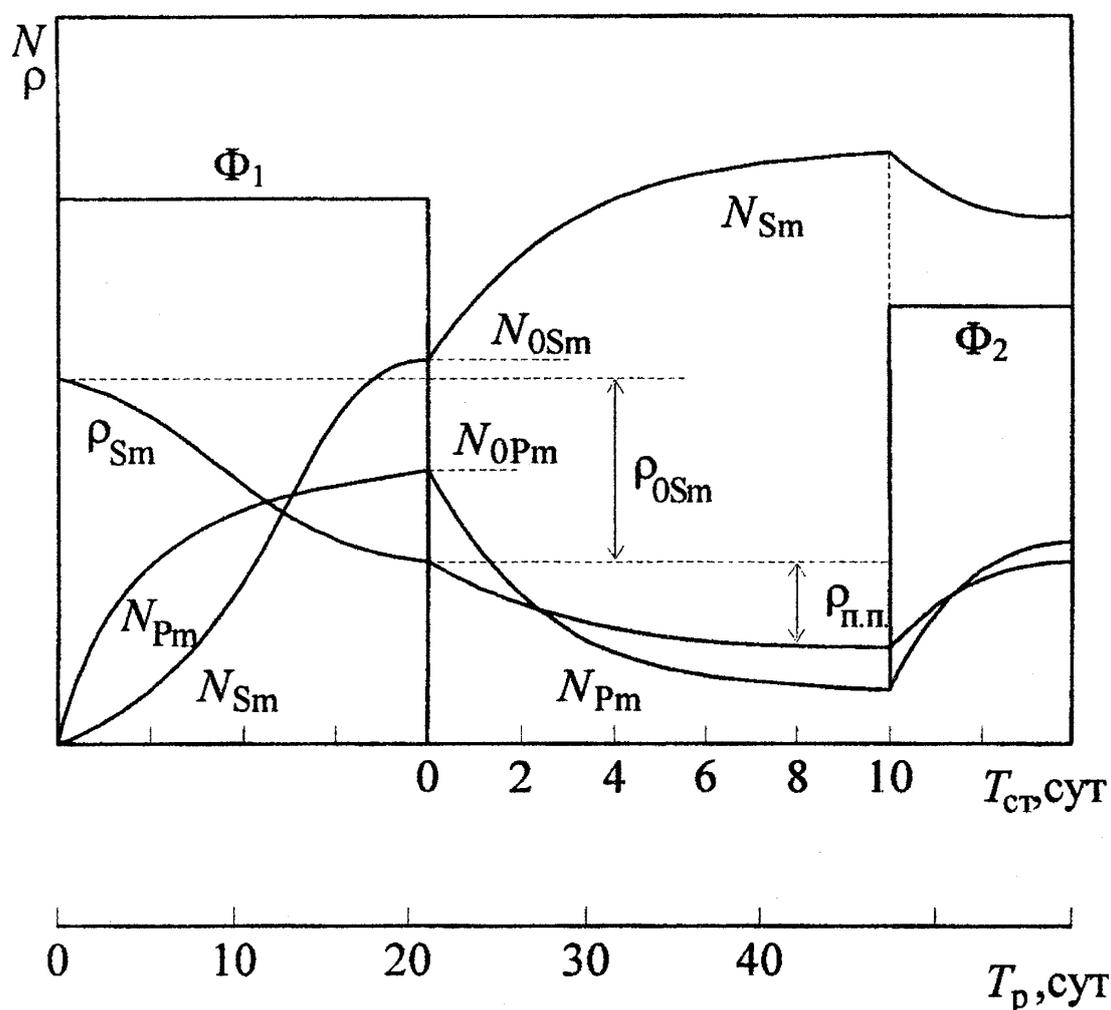


Рис.3.6. Динамика отравления самарием.

В отличие от кинетики отравления ксеноном отравление самарием после выключения реактора непрерывно возрастает, стремясь к предельному значению.

Непрерывный рост отравления в период остановки реактора объясняется тем, что самарий стабилен, а образование его происходит за счёт распада накопившегося прометия.

Максимальный самариевый выбег может достигать 0,25% за время порядка 5 ч после подъема мощности реактора с нуля до 10%, при этом предполагается, что реактор стоял 15 сут. и концентрация самария установилась постоянной.

Изменение мощности реактора с N_1 до N_2 (рис. 1.4) вызывает медленно протекающие переходные процессы, связанные с изменением числа ядер Pm^{149} и Sm^{149} в активной зоне. Скорость убыли непосредственно связана с потоком нейтронов (мощностью), а прибыли - с периодом полураспада Nd и Pm .

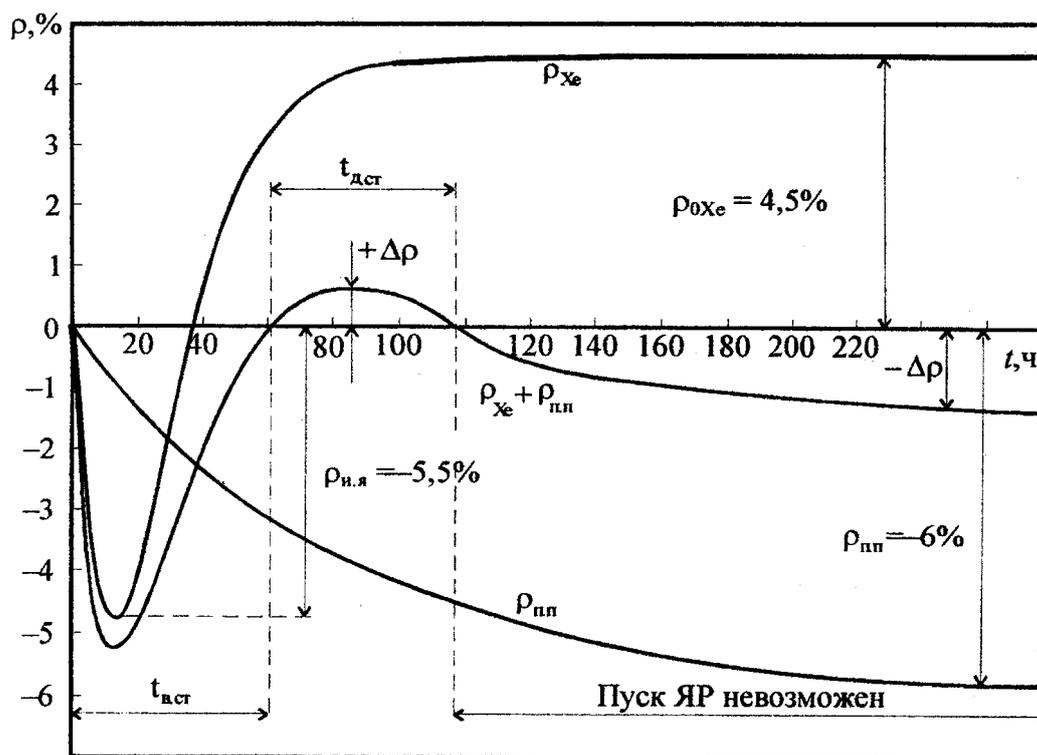


Рис. 3.7 Совместное воздействие Xe и Sm на реактивность реактора.

Учёт спектра нейтронов при расчёте кинетики накопления трансураниевых элементов

При проведении подобного расчёта существенным оказывается резонансное поглощение на ядрах топлива нейтронов над тепловых энергий.

При усреднении сечений по всему спектру нейтронов получаются результаты отличающиеся от реальной кинетики.

$$\bar{\sigma} = \Phi \int_0^{\infty} \sigma(E) \varphi(E) dE = \Phi \left[\int_0^{E_{cp}} \sigma(E) \varphi(E) dE + \int_{E_{cp}}^0 \sigma(E) \varphi(E) dE \right]$$

Будем делить спектр нейтронов на две группы, тепловые и надтепловые, тогда $E_{гр} = E_T = 0.625$ эВ.

При этом введём характеристику $\gamma = \frac{\Phi_B}{\Phi_T}$ - жёсткость спектра,

где

Φ_B - поток быстрых нейтронов.

Φ_T - поток тепловых нейтронов.

Усреднение сечений по спектру быстрых нейтронов связано с характеристикой, которая называется резонансным интегралом «I», величина которого измеряется в барнах.

Тогда усреднённые сечения будут определяться соотношением

$$\bar{\sigma} = \sigma_T + \gamma I$$

Накопление Pu^{239} (ядерного горючего) в начале работы ядерного реактора происходит линейно во времени, причём тем быстрее (при фиксированном выгорании U^{235}), чем меньше обогащение урана, это хорошо видно из первого ядерного превращения описанного выше - чем выше начальная концентрация урана-238 тем выше будет концентрация плутония-239. Затем концентрация Pu^{239} стремится к постоянной величине, которая не зависит от степени обогащения, а определяется отношением сечений захвата нейтронов U^{238} и Pu^{239} . Характерное время установления равновесной концентрации $Pu^{239} \approx 3/\Phi$ лет (Φ в ед. 10^{13} нейтронов/см²·сек). Изотопы Pu^{240} , Pu^{241} достигают равновесной концентрации только при повторном сжигании горючего в реакторе после регенерации ядерного топлива.

3.8 МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОТОКОВ В ГРУППОВОМ ДИФФУЗИОННОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

Диффузия (распространение, растекание) атомов, молекул — это процесс, обусловленный тепловым движением частиц вещества и наличием градиентов их концентрации. В применении к нейтронам понятие диффузии часто распространяют на нетепловое движение и рассматривают совокупность (группу) нейтронов с одинаковой энергией, как угодно отличной от энергии теплового движения ядер.

Диффузия нейтронов аналогична диффузии в газах и подчиняется тем же закономерностям. Во всех диффузионных явлениях, например, таких, как диффузия газовых молекул, диффундирующее вещество распространяется от областей с большей концентрацией к областям с меньшей концентрацией.

Процесс рассеяния нейтронов на ядрах среды имеет статистический характер; перемещение каждого нейтрона в среде хаотично, а его траектория сугубо индивидуальна. Поэтому теория, описывающая движение нейтронов в среде, также носит статистический (вероятностный) характер, когда рассматривается некий «средний» нейтрон.

Диффузия нейтронов в веществе в общем случае сопровождается многократным изменением направления и скорости движения в результате столкновений с ядрами среды. В настоящей главе рассматривается диффузия моноэнергетических нейтронов, т. е. предполагается, что при столкновениях с ядрами нейтроны не изменяют своей энергии.

Рассмотрим нейтроны, движущиеся в среде со скоростью v , и проследим за судьбой одного «среднего» нейтрона. Пусть нейтрон родился в точке 1 и поглотился в точке 2. Между столкновениями нейтрон проходит отрезки пути, длины которых различны. Нетрудно понять, что типичная траектория описывается тремя параметрами, средними для большого числа нейтронов (ансамбля): общей длиной траектории; длиной отрезка между двумя последовательными рассеивающими столкновениями и какой-либо угловой характеристикой акта рассеяния, отражающей взаимное расположение отрезков.

Общая длина, траектории называется средней длиной свободного пробега до поглощения и по определению

$$\lambda_a = \left\langle \sum_{i=1}^k l_i \right\rangle.$$

Суммирование ведется по всем прямолинейным отрезкам от точки 1 до точки 2, а знак $\langle \rangle$ означает усреднение по ансамблю. В сильнопоглощающей среде большая часть траекторий состоит из одного отрезка (нейтроны, как правило, поглощаются раньше, чем испытывают хотя бы одно рассеяние).

Средняя длина отрезка траектории между двумя последовательными рассеяниями называется средней длиной свободного пробега до рассеяния

$$\lambda_s = \left\langle \frac{1}{k-1} \sum_{i=1}^{k-1} l_i \right\rangle.$$

Здесь суммирование ведется по всем отрезкам, кроме последнего. Понятно, что усреднение по ансамблю содержит лишь траектории с числом звеньев, большим единицы. В сильнопоглощающей среде основная часть включенных в сумму траекторий состоит из двух звеньев.

В качестве угловой характеристики акта рассеяния удобно выбрать средний косинус угла рассеяния, который, как будет показано, непосредственно входит в выражения, описывающие смещение нейтрона в процессе диффузии от точки рождения:

$$\overline{\cos\theta} = \left\langle \frac{1}{k-1} \sum_{i=1}^{k-1} l_i \right\rangle.$$

Статистический характер столкновений в процессе диффузии приводит к тому, что нейтрон постепенно удаляется (мигрирует) от места, где он родился.

Имея выражения для плотности результирующего тока нейтронов, можно получить дифференциальное уравнение диффузии из рассмотрения баланса нейтронов в элементе объема. Скорость изменения плотности нейтронов во времени $\frac{\partial n(r,t)}{\partial t}$ определя-

ется соотношением скоростей протекания трех процессов: генерации, поглощения и утечки. Таким образом, баланс нейтронов в элементе объема dV имеет вид

$$\frac{\partial n(r,t)dV}{\partial t} = \text{генерация} - \text{утечка} - \text{поглощение} \quad (3.20)$$

Если генерация нейтронов источником в единицу времени в единице объема равна S , нейтр/(см³с), то в объеме dV она равна SdV , а поглощение - $\Sigma_a \Phi dV$. Под утечкой понимается разность чисел нейтронов, вылетающих и влетающих через поверхность, ограничивающую рассматриваемый элемент объема. Утечку нейтронов из объ-

ема dV вычислим с помощью полученных выше формул для плотности результирующего тока.

Пусть элемент объема dV имеет вид куба со сторонами dx , dy , dz . Подсчитаем сначала утечку через грани куба, перпендикулярные оси z .

Скорость утечки в этом направлении:

$$Y_z = i_{z+dz} dxdy - i_z dxdy = \left(\frac{\partial i_z}{\partial z} \right) dxdydz \quad (3.21)$$

Заменяя плотность результирующего тока вдоль оси r его выражением через градиент потока, находим

$$Y_z = -\frac{\partial}{\partial z} \left[D(r) \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right] dV$$

Аналогично вычисляются скорости утечки через грани, перпендикулярные осям x и y .

$$Y_x = -\frac{\partial}{\partial x} \left[D(r) \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right] dV \quad Y_y = -\frac{\partial}{\partial y} \left[D(r) \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right] dV$$

Очевидно, что полная скорость утечки нейтронов из объема dV в единицу времени равна алгебраической сумме скоростей утечек через все грани, т. е.

$$-dV \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(D(r) \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D(r) \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D(r) \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right) \right] = -\nabla D(r) \nabla \Phi dV.$$

Подставляя полученные выражения для скоростей генерации, поглощения и утечки в уравнение баланса нейтронов (3.21) и сокращая на dV , имеем

$$\frac{\partial n(r,t)}{\partial t} = \frac{\partial \Phi(r,t)}{vdt} = S(r,t) + \nabla D(r) \nabla \Phi(r,t) - \Sigma_a(r) \Phi(r,t)$$

Его называют уравнением диффузии для стационарной задачи.

Так как уравнение диффузии — уравнение второго порядка и его общее решение содержит две произвольные постоянные, то для единственности решения любой конкретной задачи необходимо иметь два граничных условия. Физически очевидно, что нейтронный поток должен быть конечным и неотрицательным. Это, разумеется, не исключает обращения потока нейтронов в нуль.

Итак, сформулируем граничные условия. Представим себе для простоты плоскую границу между двумя различными средами (с индексами $j, j+1$) и рассмотрим единичные площадки AA и BB, расположенные по обе стороны от границы F и очень близко к ней.

Очевидно, что если на границе раздела нет источников, то количество нейтронов, пересекающих площадку AA в направлении слева направо, равно количеству нейтронов, прошедших через площадку BB в том же направлении. Это означает, что односторонние токи должны быть непрерывны:

$$i_{A+}^{(j)} = i_{B+}^{(j+1)}$$

Аналогично записывается равенство односторонних токов для нейтронов, летящих в противоположном направлении:

$$i_{A-}^{(j)} = i_{B-}^{(j+1)}$$

Используя полученные ранее выражения для плотностей односторонних токов, получаем.

$$\left. \begin{aligned} \frac{\Phi_A^{(j)}}{4} - \frac{D_A^{(j)}}{2} \frac{d\Phi_A^{(j)}}{dx} &= \frac{\Phi_B^{(j+1)}}{4} - \frac{D_B^{(j+1)}}{2} \frac{d\Phi_B^{(j+1)}}{dx}; \\ \frac{\Phi_A^{(j)}}{4} - \frac{D_A^{(j)}}{2} \frac{d\Phi_A^{(j)}}{dx} &= \frac{\Phi_B^{(j+1)}}{4} + \frac{D_B^{(j+1)}}{2} \frac{d\Phi_B^{(j+1)}}{dx}. \end{aligned} \right\}$$

Таким образом, решая задачу в диффузионном приближении, мы должны считать, что на границе раздела двух сред потоки и плотности результирующих токов нейтронов равны. Отметим, что градиенты потоков на границе сред непрерывны только в случае равенства коэффициентов диффузии для этих сред.

Граничные условия и остаются справедливыми для границ произвольной формы, если производную по координате в заменить компонентой градиента, направленной по нормали \vec{n} к поверхности F :

$$\begin{aligned} \Phi_A^{(j)} \Big|_F &= \Phi_B^{(j+1)} \Big|_F \\ -D_A^{(j)} \nabla \Phi_A^{(j)} \Big|_F &= -D_B^{(j+1)} \nabla \Phi_B^{(j+1)} \Big|_F \end{aligned}$$

Таким образом, решая задачу в диффузионном приближении, мы должны считать, что на границе раздела двух сред потоки и плотности результирующих токов нейтронов равны.

При характеристике активной зоны как источника излучения следует рассматривать не только энергетические спектры излучения, но и пространственное распределение интенсивности излучения в ней как объемном источнике.

В настоящее время нас интересуют стационарные потоки нейтронов в гомогенном ядерном реакторе, имеющем кроме активной зоны ещё и специальные зоны (отражатель, нейтронные ловушки). Будем рассматривать потоки быстрых и тепловых нейтронов отдельно.

При этом нейтронно-физические параметры будем считать постоянными в пределах каждой группы.

Будем рассматривать баланс нейтронных потоков в каждой точке ЯР который для однозначности будем полагать цилиндрическим и бесконечным.

При этом будем рассматривать ЯР в цилиндрических координатах тогда потоки зависят от $\Phi_o(r)$ и $\Phi_T(r)$.

Если рассматривать элементарный объём в активной зоне, то изменение потока нейтронов обусловлено следующими причинами:

1. Генерация источником быстрых нейтронов (деление).
2. Источником тепловых нейтронов является замедление быстрых нейтронов.

Увод нейтронов из каждой группы.

1. Увод связан с поглощением нейтронов.
2. Для быстрых нейтронов их потеря при замедлении.
3. Диффузия нейтронов за счёт наличия градиента нейтронного потока обуславливающего возможность тока нейтронов.

Для быстрых нейтронов:

$$D_{a.з.}^{\delta} \nabla^2 \Phi^{\delta} - \Sigma_{y\delta}^{\delta} \Phi + \frac{k}{\varphi} \Sigma_f^T \Phi^T = 0 \quad (3.22)$$

$$k_{\infty} = \mu \varphi \theta \eta; \quad \mu = 1$$

Для тепловых нейтронов:

$$D_{a.з.}^T \nabla^2 \Phi^T - \Sigma_a^T \Phi^T + \varphi \Sigma_{y\delta}^{\delta} \Phi^{\delta} = 0 \quad (3.23)$$

Полученная система уравнений (1) должна решаться самосогласованным образом, поскольку уравнение для быстрых нейтронов зависит от потока и наоборот.

Рассмотрим уравнение баланса для специальных зон в ЯР.

Отражатель:

$$D_{отр}^{\delta} \nabla^2 \Phi^T - \Sigma_{y\delta}^{\delta} \Phi^{\delta} + 0 = 0, \quad (3.24)$$

$$D_{отр}^T \nabla^2 \Phi^T - \Sigma_a^T \Phi^T + \varphi_{отр} \Sigma_{y\delta}^{\delta} \Phi^{\delta} = 0$$

При наличии отражателей системы (3.22) и (3.23) необходимо сшивать на границе раздела сред (активная зона - отражатель) по условию равенства токов и потоков на данной границе.

При фиксировании в узлах сеточной функции относящихся к отражателю $k_{\infty} = 0$ уравнения (3.22) и (3.23) становятся одинаковыми, а соответственно (3.22) можно решать непрерывно на всей расчётной сетке, включая как активную зону, так и отражатель. При этом необходимо

учитывать коэффициенты уравнения при переходе через границу соответствующих зон.

Нейтронная ловушка представляет специальную зону, которую обычно располагают в центре активной зоны

Для цилиндрического ЯР, в цилиндрических координатах соответственно при $r=0$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \Phi^{\delta}}{\partial r} &= 0, \\ \frac{\partial \Phi^T}{\partial r} &= 0. \\ r = R_{\text{экт}}, \Phi^T &= 0, \Phi^{\delta} = 0.\end{aligned}$$

Потоки будем нормировать на минимальное значение быстрых нейтронов:

$$\begin{aligned}\Phi^{\delta'} &= \frac{\Phi^{\delta}}{\Phi_{\text{max}}^{\delta}}, \\ \Phi^{T'} &= \frac{\Phi^T}{\Phi_{\text{max}}^T}.\end{aligned}$$

Для нормированных потоков в цилиндрической системе координат

$$\begin{aligned}D^{\delta} \frac{\partial \Phi^{\delta}}{\partial r^2} + \frac{D^{\delta}}{r} \frac{\partial \Phi^{\delta}}{\partial r} - \Sigma_{y\delta}^{\delta} \Phi^{\delta} + \frac{k}{\varphi} \Sigma_f^T \Phi^T &= 0, \\ D^T \frac{\partial \Phi^T}{\partial r^2} + \frac{D^T}{2} \frac{\partial \Phi^T}{\partial r} - \Sigma_a^T \Phi^T + \varphi \Sigma_{y\delta}^{\delta} \Phi^{\delta} &= 0, \\ D_i^{\delta} \frac{\Phi_{i+1} - 2\Phi_i + \Phi_{i-1}}{\square r^2} + \frac{D_i^{\delta}}{r} \frac{\Phi_{i+1} - \Phi_{i-1}}{2\square r} - \Sigma_{y\delta i}^{\delta} \Phi_i^{\delta} + \frac{k_i}{\varphi_i} \Sigma_{fi}^T \Phi_i^T &= 0, \\ D_i^T \frac{\Phi_{i+1} - 2\Phi_i + \Phi_{i-1}}{\square r^2} + \frac{D_i^T}{r} \frac{\Phi_{i+1} - \Phi_{i-1}}{2\square r} - \Sigma_{ai}^T \Phi_i^T + \varphi_i \Sigma_{y\delta i}^{\delta} \Phi_i^{\delta} &= 0, \\ \Phi_0^{\delta} = \Phi_1^{\delta}; \Phi_0^T = \Phi_1^T; \Phi_{\text{lm}}^{\delta} &= 0, \\ \mu_1^{\delta} = 1; \chi_1^{\delta} = 0; \mu_1^T = 1; \chi_1^T = 0; \mu_2^{\delta} = 0; \chi_2^{\delta} = 0; \\ \Phi_{\text{lm}}^T &= 0, \\ \mu_1^T = 0; \chi^T &= 0, \\ A_i^{\delta} \Phi_{i-1}^{\delta} - C_i^{\delta} \Phi_i^{\delta} + B_i^{\delta} \Phi_{i+1}^{\delta} &= -F_i^{\delta}, \\ A_i^T \Phi_{i-1}^T - C_i^T \Phi_i^T + B_i^T \Phi_{i+1}^T &= -F_i^T.\end{aligned}$$

Решение полученных конечно-разностных уравнений обеспечивается методом прогонки. Уравнение (3.24) могут быть решены методом релаксации.

Последний заключается в следующем.

Задаём произвольное приближение для потока нейтронов, которое подставляется в уравнение для быстрых нейтронов. Затем полученное распределение быстрых нейтронов подставляется в уравнение для тепловых нейтронов.

Полученное новое приближение для потока тепловых нейтронов подставляется в уравнение для быстрых. И так до тех пор пока максимальное изменение потока тепловых нейтронов на какой-либо итерации не станет меньше некоторого значения ε .

Неизвестным является k_∞ . Который, по определению, является отношением

$$k = \frac{n_2}{n_1},$$
$$k_i = \frac{\Phi_i^{\sigma(n+1)}}{\Phi_i^{T(n)}}.$$

При этом, при условии сходимости численного решения, коэффициент по активной зоне $k_i^{a.z.} \approx k_{i+1}$.

4. МЕТОД МОНТЕ – КАРЛО В ЗАДАЧАХ ПЕРЕНОСА ИЗЛУЧЕНИЙ

4.1. ЗАДАЧА ПЕРЕНОСА ЧАСТИЦ

Проходя сквозь вещество, нейтроны вызывают различные ядерные реакции и упруго рассеиваются на ядрах. Интенсивностью этих микроскопических процессов, в конечном счете, определяются все макроскопические свойства прохождения нейтронов через вещество, такие, как замедление, диффузия, поглощение и т. д. Так как нейтрон имеет нулевой электрический заряд, он практически не взаимодействует с электронами атомных оболочек. Поэтому атомные характеристики среды не играют никакой роли в распространении нейтронов в веществе. Это чисто ядерный процесс

Сечения различных нейтронно-ядерных реакций зависят от энергии нейтронов, сильно и нерегулярно изменяются от ядра к ядру при изменении A или Z . Сечения взаимодействия нейтронов с ядрами в среднем растут по закону $1/v$ при уменьшении энергии нейтрона. По этому свойству нейтроны разделяются на две большие группы – *медленных* и *быстрых* нейтронов. Граница между этими группами не является строго определённой. Она лежит в области энергии 1000 эВ. Заметим, что “медленность” медленных нейтронов весьма относительна. Даже нейтрон с энергией 0.025 эВ имеет скорость 2 км/сек.

Медленные нейтроны принято подразделять на *холодные*, *тепловые* и *резонансные*. Холодными называют нейтроны с энергиями ниже 0.025 эВ:

$$E_{хол} < 0.025 \text{ эВ.}$$

У холодных нейтронов очень сильно проявляются волновые свойства, т.к. длина волны холодного нейтрона намного больше межатомных расстояний.

Энергия $E_{тепл} = 0.025$ эВ определяет порядок энергий *тепловых* нейтронов. В температурной шкале $E_{тепл} = kT$, где k - постоянная Больцмана, для абсолютной температуры, соответствующей энергии тепловых нейтронов, получается значение $T = 300^\circ$, т.е. комнатная температура. Таким образом, энергия $E_{тепл}$ соответствует наиболее вероятной

скорости нейтронов, находящихся в тепловом равновесии со средой при комнатной температуре. Нейтроны с энергиями от 0.5 эВ до 1 кэВ называют *резонансными*, потому что в этой области для средних и тяжёлых ядер полное нейтронное сечение велико и его зависимость от энергии представляет собой густой частотол резонансов.

Нейтроны с энергиями от 1 до 100 кэВ называют *промежуточными*. Часто в промежуточные включают и резонансные нейтроны. В этой области энергий отдельные резонансы сливаются (исключением являются лёгкие ядра) и сечения в среднем падают с ростом энергии.

К *быстрым* относят нейтроны с энергиями от 100 кэВ до 14 МэВ. В таблице 5 приведены области энергий и порядки величин сечений различных ядерных реакций под действием нейтронов.

4.2 ЗАМЕДЛЕНИЕ НЕЙТРОНОВ

Замедление нейтронов происходит при упругих столкновениях с ядрами, т.к. если до столкновения ядро покоилось, то после столкновения оно приходит в движение, получая от нейтрона некоторую энергию. Поэтому нейтрон замедляется. Однако это замедление нейтронов не может привести к их полной остановке из-за теплового движения ядер. Энергия теплового движения порядка кТ. Если нейтрон замедлился до этой энергии, то при столкновении с ядром он может с равной вероятностью как отдать, так и получить энергию. Нейтроны с энергиями кТ находятся в тепловом равновесии со средой. Поглощение и диффузия нейтронов происходят как во время замедления, так и после окончания этого процесса.

Практическая важность процесса замедления обусловлена тем, что в большинстве нейтронных источников (реактор, радон-бериллиевая ампула и т. д.) нейтроны рождаются в основном с энергиями от десятков кэВ до нескольких МэВ, в то время, как большинство важных в прикладном отношении нейтронных реакций, согласно закону " $1/v$ ", наиболее интенсивно идёт при низких энергиях нейтронов.

Для того чтобы понять основные закономерности процесса замедления нейтронов, рассмотрим сначала среднюю потерю энергии быстрого нейтрона при столкновении с ядром водорода – протоном. Так как

массы нейтрона и протона примерно равны, то баланс энергии при столкновении имеет вид

$$E_0 = \frac{Mv^2}{2} = \frac{Mv_n^2}{2} + \frac{Mv_p^2}{2}$$

где

E_0 , v - начальные энергия и скорость нейтрона,

v_n , v_p - соответственно скорости нейтрона и протона после столкновения.

Поскольку в системе центра инерции рассеяние изотропно, то в среднем протон и нейтрон и в лабораторной системе имеют после столкновения одинаковые энергии (благодаря равенству их масс):

$$E_1 = \frac{Mv_n^2}{2} = \frac{Mv_p^2}{2} = \frac{E_0}{2}$$

где E_1 – средняя энергия нейтрона после столкновения. Таким образом, в водороде энергия нейтрона в среднем уменьшается вдвое при каждом столкновении. Если нейтрон сталкивается не с протоном, а с более тяжёлым ядром, то средняя потеря энергии при столкновении уменьшается. При рассеянии нейтрона на ядре с массовым числом A средняя потеря энергии определяется соотношением

$$E_1 = \frac{1 - \alpha}{2} E_0$$

где

$$\alpha = \frac{4A}{(A+1)^2}$$

например, если замедлителем является углерод C^{12} , то $E_1 \approx 0.8E_0$

Таким образом, в углероде энергия нейтрона в среднем будет уменьшаться вдвое лишь после трёх столкновений. Замедление идёт тем эффективнее, чем легче ядра замедлителя. Кроме того, от хорошего замедлителя требуется, чтобы он слабо поглощал нейтроны, т.е. имел малое сечение поглощения. Малые величины имеют сечения поглощения нейтронов на дейтерии и кислороде. Поэтому прекрасным замедлителем является тяжёлая вода D_2O . Приемлемым, но несколько худшим замедлителем является обычная вода H_2O , так как водород поглощает

нейтроны заметно интенсивнее, чем дейтерий. Неплохими замедлителями являются также углерод, бериллий, двуокись бериллия.

Важной чертой процесса замедления является то, что потеря энергии на столкновение, пропорциональна самой энергии. Так, при столкновении с атомом водорода нейтрон с энергией 1 МэВ теряет 0.5 МэВ, а нейтрон с энергией в 10 эВ – всего 5 эВ. Поэтому длительность замедления и проходимый при замедлении путь обычно слабо зависят от начальной энергии нейтрона. Некоторым исключением являются водородосодержащие вещества. Сечение нейтрон – протон резко падает при повышении энергии выше 100 кэВ. Поэтому длина замедления в водородосодержащих веществах относительно сильно зависит от энергии нейтрона. Время замедления нейтрона невелико. Даже в таком тяжёлом замедлителе, как свинец, нейтрон замедляется от энергии 1 МэВ до 1 эВ за $4 \cdot 10^{-4}$ сек.

Важнейшей характеристикой процесса замедления является *длина замедления*, обозначаемая через $\tau^{1/2}$. Величина τ носит не соответствующее её размерности название *возраста нейтронов*. Смысл этой величины состоит в том, что $\tau = \frac{\bar{r}^{2/3}}{6}$

где

$\bar{r}^{2/3}$ - среднеквадратичное расстояние, на которое нейтрон уходит от источника в процессе замедления в интервале энергий от 1 МэВ до 1 эВ. Длина замедления в хороших замедлителях имеет порядок десятков сантиметров. Начиная с энергий 0.5 - 1 эВ при столкновениях нейтронов с ядрами становится существенной тепловая энергия атомов. Распределение нейтронов начинает стремиться к равновесному, т.е. максвелловскому:

$$\frac{dN}{dE} \approx e^{-\frac{E}{kT}} E^{-1/2}, \quad E < 1 \text{ эВ.}$$

Этот процесс называется *термализацией* нейтронов.

4.3 ДИФФУЗИЯ НЕЙТРОНОВ

Диффузия нейтронов, распространение нейтронов в веществе, сопровождающееся многократным изменением направления и скорости

движения в результате их столкновений с атомными ядрами. диффузия. нейтронов аналогична диффузии в газах и подчиняется тем же закономерностям. Быстрые нейтроны, т. е. нейтроны с энергией, во много раз большей, чем средняя энергия теплового движения частиц среды, при диффузии отдают энергию среде и замедляются. В слабо поглощающих средах нейтроны приходят в тепловое равновесие со средой (тепловые нейтроны). В неограниченной среде тепловой нейтрон диффундирует до тех пор, пока не поглотится одним из атомных ядер. диффузия. тепловых нейтронов характеризуется коэффициентом диффузии D и средним квадратом расстояния от точки образования теплового нейтрона до точки его поглощения, равным $L^2_T = 6Dt$, где t — среднее время жизни теплового нейтрона в среде.

Для характеристики диффузии. быстрых нейтронов употребляют средний квадрат расстояния L^2_B между точкой образования быстрого нейтрона (в ядерной реакции, например реакции деления) и точкой его замедления до тепловой энергии. В табл. приведены для некоторых сред значения L^2_T для тепловых нейтронов и L^2_B для нейтронов, испускаемых при делении урана.

Значения L^2_T и L^2_B для некоторых веществ

Таблица 4.1

Значения L^2_T и L^2_B для некоторых веществ

Вещество	$L^2_T, \text{см}^2$	$L^2_B, \text{см}^2$	$\sqrt{L^2_T + L^2_B}$
Вода H_2O	44	186	15
Тяжёлая вода D_2O	$1,5 \cdot 10^5$	750	390
Бериллий Be	2600	516	56
Графит C	20000	1880	150

4.4 АЛЬБЕДО НЕЙТРОНОВ

Интересным свойством нейтронов является их способность отражаться от различных веществ. Это отражение не когерентное, а диффузное. Его механизм таков. Нейтрон, попадая в среду, испытывает беспорядочные столкновения с ядрами и после ряда столкновений может вылететь обратно. Вероятность такого вылета носит название аль-

бедо нейтронов для данной среды. Очевидно, что альбеде тем выше, чем больше сечение рассеяния и чем меньше сечение поглощения нейтронов ядрами среды. Хорошие отражатели отражают до 90% попадающих в них нейтронов, т.е. имеют альбеде до 0.9. в частности, для обычной воды альбеде равно 0.8. Неудивительно поэтому, что отражатели нейтронов широко применяются в ядерных реакторах и других нейтронных установках. Возможность отражения нейтронов объясняется следующим образом. Вошедший в отражатель нейтрон при каждом столкновении с ядром может рассеяться в любую сторону. Если нейтрон у поверхности рассеялся назад, то он вылетает обратно, т.е. отражается. Если же нейтрон рассеялся в другом направлении, то он может рассеяться так, что уйдёт из среды при последующих столкновениях. Этот же процесс приводит к тому, что концентрация нейтронов резко снижается вблизи границы среды, в которой они рождаются, т.к. вероятность для нейтрона уйти наружу велика.

4.5 МЕТОД МОНТЕ – КАРЛО

Метод Монте-Карло – это численный метод решения математических задач при помощи моделирования случайных величин. Часто этот метод называют также методом случайных испытаний, так как расчет по методу Монте-Карло заключается в случайной выборке из некоторой генеральной совокупности в соответствии с определенными вероятностными законами.

В применении к решению задач теории переноса излучения сущность метода Монте–Карло состоит в том, что сложный стохастический процесс прохождения частиц в веществе рассматривается как последовательность конечного числа элементарных случайных событий. К таким событиям относятся рождение частицы в источнике, движение без взаимодействия на некотором пути, взаимодействие какого–либо типа и, если частица при этом не поглощается, снова движение до следующего взаимодействия. Зная вероятность каждого из этих событий, можно воспроизвести движение (траекторию) определенной частицы в веществе.

Далее из анализа достаточно большого количества траекторий можно определить различные характеристики поля излучения.

Метод Монте-Карло является вероятностным по своей природе, поэтому напомним специфическую терминологию и основные понятия теории вероятностей.

Основное понятие теории вероятностей – *событие*, под которым понимается тот или иной исход эксперимента. События комбинируются с помощью элементарных операций теории множеств. Полученные таким способом события также относятся к возможным исходам данного эксперимента. Событие, включающее все возможные исходы эксперимента называется *достоверным*.

Вероятность события определяется как вещественная функция на множестве событий, удовлетворяющая условиям:

1. $p(\emptyset) = 0, p(\Omega) = 1.$

2. $0 \leq p(\omega) \leq 1.$

3. $p(\bigcup_{i=1}^{\infty} \omega_i) = \sum_{i=1}^{\infty} p_i(\omega_i),$ если $\omega_i \cap \omega_j = \emptyset, i \neq j.$

$F(t) = P(x < t)$ - функция распределения случайной величины.

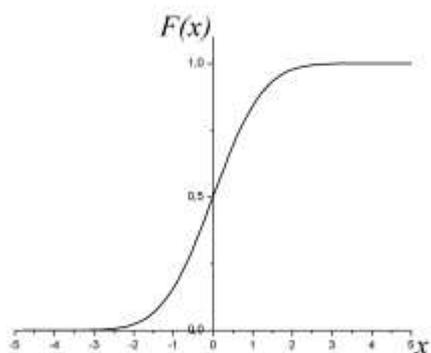
Она показывает вероятность того, что случайная величина будет меньше чем t .

Основные свойства $F(t)$:

1. $F(t)$ - монотонно неубывающая функция.

2. $F(-\infty) = 0, F(+\infty) = 1$

3. $P(a < x \leq b) = F(b) - F(a)$



Функция $f(t) = F'(t)$ называется плотностью функции распределения.

$$f(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta F(t)}{\Delta t}$$

Рис. 4.1 График функции распределения для закона нормального распределения $N(0,1)$

Таким образом $\int_a^b f(t)dt$ показы-

вает вероятность того, что случайная величина x принадлежит интервалу $[a, b]$.

Для решения задач методом Монте–Карло необходимо получать последовательности выборочных значений случайной величины с заданным распределением. Такой процесс часто называют розыгрышем значений случайной величины. Наиболее распространенным методом получения таких последовательностей является метод обратных функций.

Пусть случайная величина X определена в интервале $a < x < b$ и имеет плотность распределения $f(x) > 0$. Покажем, что выборочное значение t случайной величины X можно найти из уравнения

$$F(t) = \int_a^t f(x) dx = \gamma,$$

или

$$t = F^{-1}(\gamma),$$

где F^{-1} - обратная функция.

Так как функция строго возрастает в интервале (a, b) от $F(a) = 0$ до $F(b) = 1$, то это уравнение имеет единственный корень при каждом γ . Не всегда представляется возможным взять интеграл от плотности распределения, и из решения определять необходимые случайные величины. Численно интегрируя уравнение, получаем верхний предел, который и является искомой случайной величиной.

Рассмотрим теперь дискретную случайную величину X , принимающую значения x_i с вероятностями p_i ($p_0 = 0$). Определим выборочное значение случайной величины X следующим образом:

$$\sum_{i=0}^j p_i < \gamma \leq \sum_{i=0}^{j+1} p_i, X = j + 1.$$

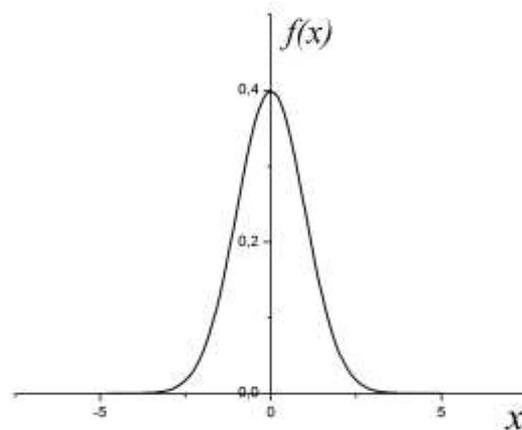


Рис. 4.2 График функции плотности распределения для закона нормального распределения $N(0,1)$

4.6 ИСТОЧНИКИ НЕЙТРОНОВ

В науке и промышленности широко применяется нейтронное облучение различных объектов. Для каждого облучения прежде всего требуется нейтронный источник соответствующей характеристики. Иногда необходимо кратковременное или даже импульсное воздействие, в некоторых случаях обязательно длительное облучение. Более того, взаимодействие нейтронов с веществом зависит не только от того, какие ядра входят в состав этого вещества, но и от энергии нейтронов.

В настоящее время существует большое количество самых различных нейтронных источников, сильно отличающихся по своим свойствам и основным параметрам. Прежде всего, это сам способ получения нейтронов, определяемый тем ядерно - физическим процессом, который лежит в основе данного источника. Общепринятого способа классификации источников нейтронов не существует. Наиболее подходящей является следующая классификация:

- изотопные нейтронные источники;
- источники на основе ускорителей заряженных частиц;
- источники спонтанного и вынужденного деления;
- ядерные реакторы и ядерные взрывы;

Нейтроны в изотопных источниках получают при облучении некоторых легких ядер α -частицами или γ -квантами радиоактивных изотопов.

В источниках на основе ускорителей заряженных частиц используются реакции образования нейтронов в результате взаимодействия ускоренных протонов, дейтронов или α -частиц с ядрами. Электронные ускорители также применяются для получения нейтронов. В этом случае нейтроны рождаются при фотоядерных реакциях, вызываемых γ -квантами торможения быстрых электронов в веществе.

Источники нейтронов спонтанного деления иногда причисляют к изотопным источникам. Но, принимая во внимание специфику спонтанного деления и особенно перспективность его применения в каче-

стве источника нейтронов, целесообразно выделить особое место этому способу получения нейтронов.

Ядерные реакторы – это мощные источники нейтронов. Работа реактора основана, как известно, на управляемой цепной реакции деления тяжелых ядер под действием нейтронов. В результате получается избыточное количество нейтронов, которое используется для более или менее длительного облучения различных материалов.

Ядерные взрывы дают кратковременное, но чрезвычайно мощное нейтронное излучение. Длительность события, связанного с испусканием нейтронов, не превосходит в этом случае миллионной доли секунды, а число нейтронов может превышать количество, образующееся в реакторе средней мощности за год.

Одна из наиболее важных характеристик источников – число нейтронов, испускаемых ими в секунду. Эту величину называют мощностью источника или нейтронным выходом.

Так как взаимодействие нейтронов с веществом в сильной степени зависит от их энергии, очень существенным оказывается энергетический спектр источника. В большинстве ядерных реакций происходящих в нейтронных источниках, образуются быстрые нейтроны. Их энергия зависит от многих факторов, таких как тип ядерной реакции, энергии бомбардирующей частицы, соотношения масс ядер и частиц, участвующих в реакции. Если источник быстрых нейтронов окружить соответствующим замедлителем, то можно получить потоки медленных и тепловых нейтронов.

Угловое распределение нейтронов, испускаемых источником, также является его важной характеристикой. Оно определяется зависимостью числа выходящих из источника нейтронов от угла между направлением их вылета и каким-то заданным направлением в пространстве. Угловое распределение зависит от типа источника, а также от конкретных особенностей его конструкции.

Зная эти параметры источника, можно оценить нейтронные потоки, перенос энергии и другие характеристики нейтронного поля от заданного источника в различных средах.

4.7 ПЕРЕНОС НЕЙТРОНОВ

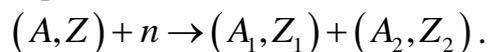
Основным видом взаимодействия нейтронов с веществом является их взаимодействие с атомными ядрами.

Нейтроны в среде могут испытать 4 типа взаимодействий: упругое и неупругое рассеяние, захват нейтрона ядром и захват с последующим делением ядра. Тип взаимодействия зависит главным образом от энергии нейтрона и от элемента, с которым нейтрон взаимодействует. Вероятности каждого из этих взаимодействий определяются их сечениями.

Нейтрон с энергией в несколько сотен КэВ после попадания в ядро может перевести его в возбужденное состояние и снова вылететь из него, но уже с меньшей энергией. Такой процесс называется неупругим рассеянием нейтрона. Граничная энергия зависит от ядра, с которым произошло взаимодействие.

Упругое рассеяние – реакция, в результате которой ядро остается в прежнем состоянии, а нейтрон сохраняет свою первоначальную кинетическую энергию в системе центра масс инерции. Упругое рассеяние нейтронов очень широко используется для регистрации быстрых нейтронов методом наблюдения следов ядер отдачи и во многих других задачах.

Реакция вида $(A, Z) + n \rightarrow (A + 1, Z)$ называется *захватом нейтрона*. Получившийся изотоп чаще всего β -радиоактивен, но может испускать и протоны и α -частицы. При облучении тяжелых ядер нейтронами с энергией $T > 1 \text{ МэВ}$ (для U-235 тепловыми нейтронами) происходит реакция деления тяжелого ядра на два ядра-осколка со средними массами, примерно относящимися как 2:3.



Реакция такого типа называется реакцией деления. Кроме осколков деления может образоваться несколько новых нейтронов или других частиц.

Вероятность той или иной реакции определяется её сечением. При расчетах необходимо иметь функции зависимостей эффективных сечений от энергии нейтронов. Эти функции не всегда получены аналитически, кроме того, решение уравнений с этими функциями очень трудоемкая задача.

При решении широкого круга задач, связанных с переносом нейтронов очень распространены методы многогруппового расчета. Основным преимуществом многогруппового метода расчета является то, что для него не нужны аналитические функции зависимости того или иного параметра от энергии нейтронов.

При использовании многогруппового метода расчета вся область изменения энергии разбивается на ряд энергетических интервалов. Нейтроны, энергия которых лежит в определенном энергетическом интервале, объединяются в одну энергетическую группу. Взаимодействие отдельных групп нейтронов со средой характеризуются набором групповых констант. Различают два типа групповых констант, которые тесно связаны между собой, а в некоторых случаях просто совпадают.

Групповые константы первого типа определяют распространение в пространстве нейтронов отдельных групп и переходы нейтронов между группами, но не изменение энергии нейтронов в пределах отдельных групповых интервалов. Групповые константы этого типа можно непосредственно использовать в самом простом варианте многогруппового расчета, при котором изменение энергии внутри отдельных групп не находит непосредственного отражения в расчете.

Групповые константы второго типа имеют следующий смысл. При проведении многогрупповых расчетов обычно полагают, что эффективные сечения и другие ядерно-физические величины, характеризующие взаимодействие с ядрами среды, в пределах энергетических интервалов отдельных групп не зависят от энергии нейтронов. Иначе говоря, истинные непрерывные энергетические зависимости эффективных сечений и других величин заменяются ступенчатыми функциями. Эти значения получаются рациональным внутригрупповым усреднением истинных функций.

При выборе ширины групп считалось рациональным, чтобы для большинства элементов ширина группы превышала максимальную потерю при упругом рассеянии. В этом случае упругое замедление приводит к переходу в одну соседнюю группу. При принятой ширине групп это условие выполняется для всех элементов, кроме водорода, дейтерия, гелия и лития.

Усреднения эффективных сечений внутри групп приводят к ошибкам, не превышающим возможные ошибки в исходных данных по эффективным сечениям.

В некоторых веществах, для которых роль упругого рассеяния относительно высока, быстрый нейтрон теряет свою энергию в серии последовательных актов упругого соударения с атомами вещества. Процесс замедления продолжается до тех пор, пока кинетическая энергия нейтрона не сравняется с энергией теплового движения атомов замедляющего вещества. В результате движение нейтронов представляет собой хаотическое блуждание в среде, или диффузию. Столкновение нейтрона с ядром – явление случайное, и траектория отдельного нейтрона не может быть предсказана теоретически. Однако в больших объемах однородных сред со слабым поглощением, где каждый нейтрон за время существования в свободном виде испытывает много столкновений, не возникает особенностей в угловых распределениях скоростей нейтронов. В таких средах происходит изотропная диффузия. Изотропная диффузия нейтронов с постоянной энергией представляет собой простейший случай и описывается таким же уравнением, как и для идеального газа.

Длина диффузии – важнейшая диффузионная константа среды, это мера смещения тепловых нейтронов от точки термализации до поглощения в процессе диффузии:

$$L = \frac{1}{6} \overline{r^2}.$$

Диффузия при замедлении – процесс более сложный, чем диффузия тепловых нейтронов, поскольку замедляющиеся нейтроны снижают свою энергию, и функции потока кроме пространственных координат зависят еще от энергии. Характеристикой диффузии замедляющихся нейтронов является возраст нейтрона. Возраст описывает перемещение в пространстве замедляющихся нейтронов и характеризует смещение нейтрона от точки рождения до точки термализации:

$$\tau = \frac{1}{6} \overline{r^2}.$$

4.8 АЛГОРИТМЫ МОНТЕ-КАРЛО

Задачи теории переноса решаются методом Монте-Карло путем моделирования траекторий частиц в среде. В процессе моделирования траекторий можно выделить четыре основных шага:

1. Выборка параметров источника.
2. Выборка длины свободного пробега.
3. Выборка параметров столкновения.
4. Выборка параметров частиц после столкновения.

Цикл 2-4 повторяется до тех пор, пока параметры частицы не выйдут за заданные пределы таких величин, как геометрические границы объекта, минимальная энергия и др. Таким образом, генерируется история одной частицы(её траектория). После её завершения происходит выбор новой частицы из источника.

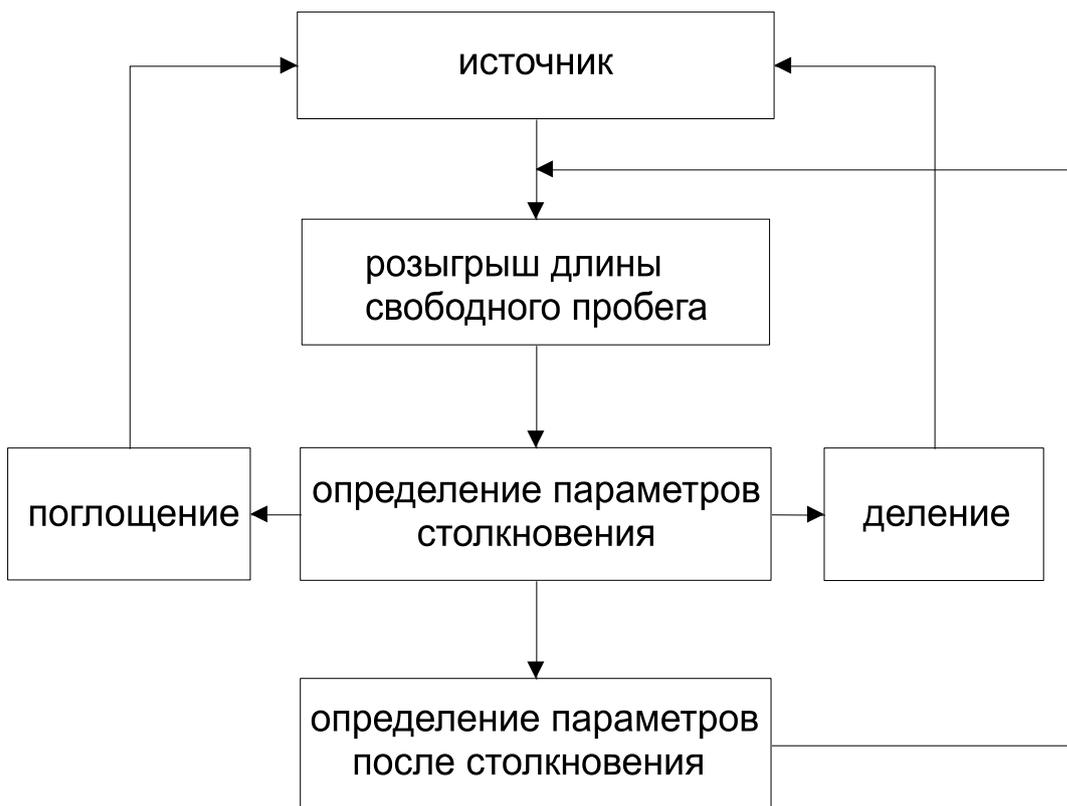


Рис. 4.3 Общая схема расчёта по методу Монте - Карло

4.9 МОДЕЛИРОВАНИЕ ИСТОЧНИКА

Моделирование траектории начинается с розыгрыша её начала, т.е. с определения координат точки рождения частицы, направления её движения и энергии.

Координата точки рождения должна принадлежать геометрическому объему источника. В большинстве задач, связанных с переносом нейтронов, источник имеет простую форму (сферическая, цилиндрическая) или ей вообще можно пренебречь, приняв источник точечным.

Энергию нейтрона можно моделировать двумя способами: используя непрерывную функцию спектра нейтронов или при помощи таблиц. Рассмотрим на примере первый способ.

Энергия нейтронов деления заключается в интервале от нуля электрон-вольт до ≈ 11 МэВ. Для получения выборочного значения энергии решаем уравнение:

$$F(T) = \int_0^T f(x) dx = \gamma,$$

где $f(x)$ – функция плотности распределения энергии нейтронов деления.

Так как функция распределения $F(x)$ строго возрастает в указанном интервале от нуля до единицы, то уравнение имеет единственный корень при каждом γ .

Направление движения частицы также может быть получено несколькими способами, в зависимости от того, какая выбрана система координат – декартова, цилиндрическая или сферическая.

4.10 МОДЕЛИРОВАНИЕ СВОБОДНОГО ПРОБЕГА ЧАСТИЦЫ

Следующим шагом после выбора параметров источника является определение длины пробега частицы вдоль заданного направления до взаимодействия. Длина свободного пробега нейтронов в веществе также случайная величина и не может быть вычислена для определенного нейтрона. Эта величина зависит от концентрации среды, её состава, т. е. от сечений элементов, входящих в состав этой среды и от энергии нейтрона.

В конкретном случае, когда известна энергия нейтрона и полное макроскопическое сечение среды при данной энергии, длина свободного пробега может быть вычислена следующим образом.

Функция плотности распределения длины свободного пробега в однородной бесконечной среде

$$f(x) = \begin{cases} \Sigma \exp(-\Sigma x), & x \geq 0; \\ 0, & x < 0. \end{cases}$$

Для определения выборочного значения длины свободного пробега решаем уравнение

$$F(L) = \int_0^L \Sigma \exp(-\Sigma x) dx = 1 - e^{-\Sigma L} = \gamma$$

отсюда

$$L = -\frac{1}{\Sigma} \ln(1 - \gamma)$$

Т. к. $1 - \gamma$ распределена так же, как и γ , используют формулу

$$L = -\frac{1}{\Sigma} \ln(\gamma)$$

В случае неоднородной среды этот алгоритм не применим.

4.11 ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ СТОЛКНОВЕНИЯ

После того, как установлено, что в данной точке произошло взаимодействие, необходимо определить, с каким изотопом из входящих в состав среды оно произошло, и какая из возможных реакций будет иметь место. Для ответа на эти вопросы необходимо иметь данные как по полным, так и по парциальным сечениям взаимодействия для каждого ядра и во всем рассматриваемом энергетическом диапазоне.

Пусть среда состоит из n изотопов с ядерными плотностями ρ_i (ядер/см³) и полными микроскопическими сечениями σ_i . Полное макроскопическое сечение среды

$$\Sigma = \sum_{i=1}^n \rho_i \sigma_i .$$

Вводим дискретную случайную величину X , принимающую значения от 1 до n с вероятностью $p_i = \frac{\rho_i \sigma_i}{\Sigma}$. Розыгрыш её значения выполняется по схеме

$$\sum_{i=0}^j \rho_i \sigma_i / \Sigma < \gamma \leq \sum_{i=0}^{j+1} \rho_i \sigma_i / \Sigma, X = j + 1$$

Следующий шаг после того, как найден изотоп, с которым происходит столкновение, заключается в розыгрыше типа (или реакции) взаимодействия.

Пусть полное поперечное сечение для k -го изотопа

$$\sigma_k = \sum_{i=1}^m \sigma_{ki},$$

где σ_{ki} – парциальное сечение для i -го типа взаимодействия.

Так же как и в предыдущем случае, вводим дискретную случайную величину и определяем тип взаимодействия на k -м изотопе, решая неравенство

$$\sum_{i=0}^j \sigma_{ki} / \sigma_k < \gamma \leq \sum_{i=0}^{j+1} \sigma_{ki} / \sigma_k.$$

С первого взгляда выбор параметров столкновения кажется простейшей задачей в общей процедуре моделирования. Это, однако, обманчиво, так как задача накопления требуемых данных по поперечным сечениям в подходящем формате не тривиальна.

4.12 ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ЧАСТИЦ ПОСЛЕ СТОЛКНОВЕНИЯ

Следующей задачей является розыгрыш параметров частиц, возникших в результате взаимодействия. Эти параметры включают энергию и направление движения рассеянной первичной частицы, а также тип, число, энергию и направления движения любых вторичных частиц.

Угол рассеяния и потеря энергии частицы связаны между собой. Для определения этих параметров вводим дискретную случайную величину ξ . Розыгрыш её значений проводится по стандартной схеме:

$$\sum_{i=0}^j \sigma_{(k,i)} / \sigma_k < \gamma \leq \sum_{i=0}^{j+1} \sigma_{(k,i)} / \sigma_k, X = j + 1$$

где

$\sigma_{(k,i)}$ – сечение рассеяния нейтрона из k -ой группы в $(k+i)$ -ю,
 σ_k – полное сечение рассеяния для k -ой энергетической группы.

Определив таким образом, в какую группу произошел переход, из таблиц групповых констант находим средний косинус угла рассеяния для данного перехода.

Функция плотности распределения косинуса угла рассеяния имеет вид:

$$f(\mu_s) = \frac{1}{4\pi} \left[1 + \bar{\mu}_s \sum_{l=1}^L (2l+1) P_l(\mu_s) \right],$$

где $P_l(\mu_s)$ – члены полинома Лежандра.

В первом приближении оставляем только один член разложения:

$$f(\mu_s) = \frac{1}{4\pi} [1 + 3\bar{\mu}_s P_1(\mu_s)] = \frac{1}{4\pi} [1 + 3\bar{\mu}_s \cos\theta],$$

Для определения выборочного значения μ_s решим уравнение:

$$\begin{aligned} F(\mu_s) &= \int_0^{2\pi} \int_0^\theta \frac{1}{4\pi} (1 + 3\bar{\mu}_s \cos\theta) \sin(\theta) d\theta d\varphi = \frac{1}{2} \int_0^\theta [\sin\theta + 3\bar{\mu}_s \cos\theta \sin\theta] d\theta = \\ &= \frac{1}{2} \left[-\cos\theta \Big|_0^\theta + 3\bar{\mu}_s \int_0^\theta \cos\theta \sin\theta d\theta \right] = \frac{1}{2} \left[1 - \cos\theta - \int_0^\theta \cos\theta d(\cos\theta) \right] = \\ &= \frac{1}{2} \left[1 - \cos\theta - \frac{3}{2} \bar{\mu}_s \cos^2 \theta \Big|_0^\theta \right] = \frac{1}{2} \left[1 - \cos\theta - \frac{3}{2} \bar{\mu}_s (\cos^2 \theta - 1) \right] = \gamma \end{aligned}$$

$$-\frac{3}{2} \bar{\mu}_s \cos^2 \theta - \cos\theta + 1 + \frac{3}{2} \bar{\mu}_s - 2\gamma = 0;$$

$$\cos^2 \theta + \frac{2}{3\bar{\mu}_s} \cos\theta - 1 - \frac{2}{3\bar{\mu}_s} + \frac{4}{3\bar{\mu}_s} \gamma = 0;$$

$$\cos \theta = \frac{\frac{2}{3\mu_s} \pm \sqrt{\left(\frac{2}{3\mu_s}\right)^2 + 4\left(1 + \frac{2-4\gamma}{3\mu_s}\right)}}{2}$$

$$\theta = \arccos \frac{\frac{2}{3\mu_s} \pm \sqrt{\left(\frac{2}{3\mu_s}\right)^2 + 4\left(1 + \frac{2-4\gamma}{3\mu_s}\right)}}{2}$$

Таким образом, получили угол отклонения нейтрона от первоначального направления. Угол поворота плоскости, в которой произошло отклонение, разыгрываем с равной вероятностью из интервала $[0; 2\pi]$: $\varphi = 2\pi\gamma$.

Переход к лабораторной системе координат осуществляется по формулам сферической геометрии :

$$\Theta_{\text{лаб}} = \arccos(\cos \Theta_{\text{лаб},0} \cos \Theta + \sin \Theta_{\text{лаб},0} \sin \Theta \cos \varphi)$$

$$\varphi_{\text{лаб}} = \varphi_{\text{лаб},0} + \arcsin\left(\frac{\sin \Theta \sin \varphi}{\sin \Theta_{\text{лаб},0}}\right)$$

4.13 ВЫЧИСЛЕНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК ПОЛЯ ИЗЛУЧЕНИЯ ПО СЛУЧАЙНЫМ ТРАЕКТОРИЯМ

Построение траекторий частиц всегда проводится для того, чтобы найти те или иные характеристики поля излучения. Оценки простейших интегральных характеристик можно произвести, исходя непосредственно из определения или физического смысла характеристик и статистической эквивалентности реальных и моделируемых траекторий.

Так, число частиц, вылетающих через элементарную площадку ΔS внешней границы поглотителя в единицу времени,

$$\int (\vec{\Omega} \vec{n}) \Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} \Delta S \quad (4.1)$$

в случае единичного источника может быть определено следующим образом:

$$(\vec{\Omega} \vec{n}) \Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} \Delta S \approx \frac{\Delta N_n}{N} \quad (4.1)$$

где ΔN_n - число траекторий, которые в процессе расчёта пересекли указанную площадку, N - полное число построенных траекторий. Знак \approx указывает на то, что точное равенство достигается при $N \rightarrow \infty$ (см. следующий параграф). Аналогичным образом, число столкновений в малом объёме ΔV определится отношением

$$\int \Sigma \Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} \Delta V \approx \frac{\Delta N_{cm}}{N} \quad (4.3)$$

где ΔN_{cm} - число столкновений в этом объёме, вычисленное по построенным траекториям.

Для вычисления дифференциальных характеристик необходимо разбить соответствующую переменную на интервалы и подсчитать число частиц, принадлежащих каждому интервалу, разделив потом на его величину. Результат такого расчёта, представленный в виде ступенчатой функции, называется *гистограммой*. Так, угловое распределение частиц, проходящих через ΔS , даётся формулой, вытекающей из (4.1), (4.2):

$$\cos \vartheta_k \Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}_k) \Delta S \approx \frac{\Delta N_{cm}(\Delta \Omega_k)}{N \Delta \Omega_k} \quad (4.4)$$

где ϑ_k - угол между направлением вылетающей частицы, принадлежащей k -му интервалу $\Delta \Omega_k$, и внешней нормалью площадки \vec{n} , $\Delta N_{\square}(\Delta \Omega_k)$ - число траекторий, пересекающих площадку ΔS с направлением, принадлежащим интервалу $\Delta \Omega_k$. Из (4.4) получаем оценку дифференциального по углам потока в виде

$$\Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}_k) \approx \frac{\Delta N_{\square}(\Delta \Omega_k)}{N \cos \vartheta_k \Delta \Omega_k \Delta S} \quad (4.5)$$

Аналогичным образом из (4.3) следует оценка

$$\Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}_k) \approx \frac{\Delta N_{cm}(\Delta \Omega_k)}{N \Sigma \Delta \Omega_k \Delta V} \quad (4.6)$$

Из (4.5) и (4.6) могут быть получены формулы для оценки полного потока:

$$\Phi(\vec{r}) = \int \Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} = \sum_k \Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}_k) \Delta \Omega_k \approx \frac{1}{N \Delta S} \sum_k \frac{\Delta N_{\square}(\Delta \Omega_k)}{\cos \vartheta_k} \quad (4.7)$$

и

$$\Phi(\vec{r}) = \frac{1}{N \Sigma \Delta V} \sum_k \Delta N_{cm}(\Delta \Omega_k) \quad (4.8)$$

Каждый член суммы (4.7) можно в свою очередь представить в виде суммы по всем траекториям, пересекающим $\square S$ и принадлежащим $\Delta\Omega_k$:

$$\frac{\Delta N_{\square}(\Delta\Omega_k)}{\cos \vartheta_k} = \sum_i^{\Delta\Omega_k} \frac{1}{\cos \vartheta_i}$$

(Вследствие малости $\Delta\Omega_k$ $\cos \vartheta_i \approx \cos \vartheta_k$). Легко видеть, что полученную теперь двойную сумму можно переписать в виде одной суммы по пересечениям

$$\sum_k \sum_i^{\Delta\Omega_k} \frac{1}{\cos \vartheta_i} = \sum_i \frac{1}{\cos \vartheta_i}$$

От суммы по пересечениям можно перейти к простому суммированию по траекториям, если ввести величину

$$g_n = \begin{cases} \frac{1}{\Delta S \cos \vartheta_n} & \text{если } n\text{-я траектория пересекла } \square S \\ 0, & \text{в противном случае} \end{cases} \quad (4.9)$$

Тогда (4.7) переписется в виде

$$\Phi(\vec{r}) \approx \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N g_n \quad (4.10)$$

Вычисление потока по формулам (4.7) - (4.10) называется *оценкой по пересечениям*.

Из формулы (4.7) следует *оценка потока по столкновениям*:

$$g_n = \begin{cases} \frac{(\Delta N_{cm})_n}{\Sigma \Delta V}, & \text{если траектория испытывала столкновения в объеме } \square V \\ 0, & \text{в противном случае} \end{cases} \quad (4.10)$$

Здесь $(\Delta N_{cm})_n$ - число столкновений n -й траектории в объеме $\square V$, Если выделенный объем достаточно мал, чтобы можно было пренебречь двумя и более столкновениям в нем одной траектории, оценка (4.10) примет вид

$$g_n = \begin{cases} \frac{1}{\Sigma \Delta V}, & \text{если траектория испытывала столкновение в объеме } \square V \\ 0, & \text{в противном случае} \end{cases} \quad (4.11)$$

Исходя из интерпретации потока, как суммарной длины пути, проходимогo частицами единичного объема, получаем *оценку по длине пробега*:

$$g_n = \begin{cases} \frac{L_n}{\Delta V}, & \text{если траектория пересекла } \square V \\ 0, & \text{в противном случае} \end{cases} \quad (4.12)$$

Здесь L_n - длина пути, пройденного n -й траекторией в объёме $\square V$.

Нетрудно заметить, что разные способы вычисления потока определяют различным образом величины g_n , формула же (4.9) остаётся неизменной. В действительности эта формула имеет общий характер и справедлива для любой вычисляемой характеристики поля J . Она означает, что искомая величина в методе Монте-Карло вычисляется, как среднее арифметическое

$$J \approx \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N g_n \quad (4.13)$$

случайной величины g_n , называемой вкладом n -й траектории. Если траектория не попадает в наблюдаемую область, вклад её равен нулю:

$$g_n = \begin{cases} g_n^*, & \text{если траектория попала в выделенную область фазового объема} \\ 0, & \text{в противном случае} \end{cases} \quad (4.14)$$

Величина g_n^* , очевидно, представляет собой вклад траектории в результат при условии её попадания в наблюдаемый объём. В общем случае это также случайная величина, но в отдельных случаях она может быть постоянной. Так, оценку по формуле (4.2) можно переписать в виде (4.13), где

$$g_n = \begin{cases} I, & \text{если траектория пересекла } \Delta S \\ 0 - & \text{в противном случае} \end{cases}$$

Сравнивая это с (4.14) получаем $g_n^* = I$. В формулах (4.8), (4.9) и (4.10) величина g_n^* равна $\frac{1}{\Delta S \cos \vartheta_n}$, $\frac{1}{\Sigma \Delta V}$ и $\frac{L_n}{\Delta V}$ соответственно.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Таблица П.1

Некоторые характеристики изотопов

Изотоп	Период полу-распада	Сечение радиационного захвата, барн.	Сечение деления, барн.
И135	6.7ч	0	-
Xe135	9.2ч	$2.75 \cdot 10^6$	-
Pm149	47.0ч	0	-
Sm149	-	$5.92 \cdot 10^4$	-
Th228	1.1931 года	123	0
Th229	7340 лет	54	30.5
Th230	80000 лет	23.2	0
Th232	100 лет	7.40	0
Th233	22.3 мин	1500	15
Pa232	1.31 сут	760	700
Pa233	27.0сут	21	0
U232	72 года	73.1	75.2
U233	159200 лет	45.5	574.7
U235	70380000 лет	98.3	582.6
U236	23420000 лет	5.2	-
U237	6.75 сут	380	0
U238	99.275 сут	2.71	0
U239	23.5 мин	22	14
Np239	2.35 сут	31	<1
Pu239	24100 лет	269.3	741.2
Pu240	6540 лет	287.0	0.05
Pu241	14.4 года	358.2	1011.1
Pu242	376000 лет	18.5	<0.2
Pu243	4.956ч	87	180
Am241	433 года	0.10	3.14
Am242	152 года	1100	6900
Am243	7370 лет	79.00	0.20
Cm242	162.8 лет	20	<0.5

О НЕКОТОРЫХ МЕТОДАХ ПОЛУЧЕНИЯ ПРОСТЫХ АП- ПРОКСИМАЦИЙ ПРОИЗВОДНЫХ

В различных предметных областях в качестве математических моделей часто встречаются обыкновенные дифференциальные уравнения. Во многих случаях такие уравнения не интегрируются в явном виде, поэтому необходимо использовать методы, которые дают приближенные решения задачи. С примером таких методов знакомятся уже в общей теории обыкновенных дифференциальных уравнений, когда при доказательстве существования решения дифференциального уравнения

$$y' = f(x, y), x \in [x_0, b] \quad (\text{П.1})$$

удовлетворяющего начальному условию

$$y(x_0) = y_0 \quad (\text{П.2})$$

используется метод последовательных приближений Пикара, а задача (1), (2) носит название задачи Коши.

Пусть функция $f(x, y)$ явно заданная, в общем случае нелинейная – функция двух переменных. Решение (1), (2) можно получить как предел последовательности

$$y_0(x), y_1(x), \dots, y_n(x), \dots,$$

где

$$y_n(x) = y_0(x) + \int_{x_0}^x f(\xi, y_{n-1}(\xi)) d\xi, y_0(x) \equiv y_0 \quad (\text{П.3})$$

Функцию $y_n(x)$ с достаточно большим номером n можно принять за приближенное решение задачи (П.1), (П.2). Однако, если правая часть уравнения (П.1) – сложная функция, то применение этого метода наталкивается на большие трудности, поскольку интеграл в (П.3) не берется в квадратурах и решение нельзя получить в аналитическом виде.

Мы будем применять *численные методы*, которая позволяют получить приближенное решение в виде таблицы чисел.

Самым простым численным методом, с помощью которого можно получить приближенное решение задачи (П.1), (П.2), является *метод Эйлера*. Рассмотрим несколько способов получения этого метода.

Геометрический метод. Воспользуемся тем соображением, что в точке x_0 известно и значение решения $y(x_0) = y_0$ (согласно (П.2)) и зна-

чение его производной $y'(x_0) = f(x_0, y_0)$ (согласно (П.1)), можно записать уравнение касательной к графику искомой функции $y = y(x)$ в точке (x_0, y_0) :

$$y = y_0 + f(x_0, y_0)(x - x_0) \quad (\text{П.4})$$

При достаточно малом шаге h ордината

$$y_1 = y_0 + hf(x_0, y_0)$$

этой касательной, полученная подстановкой в правую часть (П.4) значения $x_1 = x_0 + h$, по непрерывности должна мало отличаться от ординаты $y(x_1)$ решения $y(x)$ задачи (П.1),(П.2). Следовательно, точка (x_1, y_1) пересечения касательной (П.3) с прямой $x = x_1$ может быть приближенно принята за новую начальную точку. Через эту точку снова проведем прямую

$$y = y_1 + f(x_1, y_1)(x - x_1),$$

которая уже приближенно отражает поведение касательной к $y = y(x)$ в точке $(x_1, y(x_1))$. Подставляя сюда $x = x_2 (x = x_1 + h)$, получим приближение значения $y(x_2)$ значением

$$y_2 = y_1 + hf(x_1, y_1)$$

и т.д. В итоге этого процесса определяемого формулой:

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i), \quad i = \overline{0, n} \quad (4)$$

и называемого *методом Эйлера*, график решения $y = y(x)$ данной задачи Коши (П.1),(П.2) приближенно представляется ломаной, составленной из отрезков приближенных касательных, откуда происходит и другое название метода Эйлера – *метод ломаных*.

Применение формулы Тейлора. Пусть решением задачи (П.1),(П.2) является некоторая функция $y = y(x)$. Разложим ее в ряд Тейлора в окрестности точки x_0 (ограничиваясь только членами второй степени) и получим

$$y(x) = y(x_0) + y'(x_0)(x - x_0) + \frac{y''(\xi)}{2}(x - x_0)^2$$

Отсюда при $x = x_1$, учитывая (1) и тот факт, что $h = x_1 - x_0$, получаем

$$y(x_1) = y_0 + hf(x_0, y_0) + \frac{y''(\xi_1)}{2}h^2 \quad (\text{П.5})$$

Обратим внимание на последний член выражения (П.5). Обозначим его как $r_1(h) = \frac{y''(\xi_1)}{2}h^2$ и перепишем (П.5) учитывая это соображение:

$$y(x_1) = y_1 + r_1(h) \quad (\text{П.6})$$

Равенство (6) показывает нам, что мы получили не только приближенное представления функции $y(x)$ в точке x_1 , т.е. $y_1 \approx y(x_1)$ но и остаточный член $r_1(h)$, который характеризует собой *локальную ошибку* метода Эйлера, т.е. ошибку, совершаемую на одном шаге.

Очевидно, что при многократном применении формулы (П.4) возможно наложение ошибок. За n шагов, т.е. в точке b образуется *глобальная ошибка*. Изучение таких ошибок мы рассмотрим позже, но пока отметим тот факт, что *порядок глобальной ошибки (относительно шага h) на единицу ниже, чем порядок локальной ошибки, а порядком глобальной ошибки определяется порядок численного метода, используемого при решении задачи Коши*. Таким образом локальная ошибка метода Эйлера, согласно (П.6) есть $o(h^2)$, а глобальная $O(h)$, т.е. метод Эйлера является *методом первого порядка точности*.

Разностный метод получения метода Эйлера также опирается на разложение функции $y = y(x)$, с той лишь разницей, что разложение в ряд Тейлора производится в окрестности точки x_i . Принимая во внимание это соображение, имеем

$$y(x) = y(x_i) + y'(x_i)(x - x_i) + \frac{y''(x_i)}{2}(x - x_i)^2 \quad (\text{П.7})$$

Выразим отсюда $y'(x_i)$

$$y'(x_i) = \frac{y(x) - y(x_i)}{x - x_i} - \frac{y''(\xi)}{2}(x - x_i) \quad (\text{П.8})$$

Первый член правой части равенства (П.8) – разностное отношение аппроксимирующую первую производную вблизи точки x_i , а второй – остаточный член, который характеризует точность такой аппроксимации. При фиксировании в (П.8) точка одновременно фиксируется и неизвестная точка $\xi_i \in (x_{i-1}, x_i)$; таким образом мы приходим к формуле *левой аппроксимации $y'(x_i)$ с остаточным членом*:

$$y'(x_i) = \frac{y_i - y_{i-1}}{h} + \frac{y''(\xi_i)}{2}h \quad (9).$$

Аналогично при $x = x_{i+1}$ из (8) получаем формулу *правой аппроксимации* $y'(x_i)$ с *остаточным членом*:

$$y'(x_i) = \frac{y_{i+1} - y_i}{h} + \frac{y''(\xi_{i+1})}{2}h \quad (10)$$

Отбросив в правых частях формул (П.9), (П.10) член описывающий погрешность, можно получить более простые приближенные равенства:

$$y'(x_i) \approx \frac{y_i - y_{i-1}}{h} \quad (11)$$

$$y'(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - y_i}{h} \quad (12)$$

Рассматривая уравнение (П.1) в точке x_0 с учетом (П.2), имеем равенство

$$y'(x_0) = f(x_0, y_0).$$

Применим к его левой части формулу левой аппроксимации

$$y'(x_0) = \frac{y(x_1) - y(x_0)}{h} - \frac{y''(\xi_1)}{2}$$

и получим

$$\frac{y(x_1) - y(x_0)}{h} = f(x_0, y_0) + \frac{y''(\xi_1)}{2}h,$$

что идентично равенству (П.5), которое дает нам формулу для вычисления y_1 .

Ясно, что для получения общей расчетной формулы (П.4) можно было сразу применить аппроксимацию $y'(x_i)$ по формулам (П.11), (П.12) в равенстве

$$y'(x_i) = f(x_i, y(x_i)) \quad (П.13)$$

заменив неизвестное точное значение $y(x_i)$ известным приближенным значением y_i .

Заметим, что *порядок получающегося таким образом метода численного интегрирования дифференциальной задачи (П.1), (П.2) совпадает с порядком аппроксимации производной в левой части уравнения (П.1)*.

Некоторые полезные модификации метода Эйлера

Рассмотрим некоторые модификации метода Эйлера, которые будут нам полезны.

Проинтегрируем уравнение (1) на интервале $[x_i, x_{i+1}]$:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} y'(x) dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y(x)) dx$$

в результате получим

$$y(x_{i+1}) - y(x_i) = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y(x)) dx \quad (\text{П.14})$$

К интегралу, расположенному в правой части, применим формулу правых прямоугольников

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y(x)) dx \approx (x_{i+1} - x_i) f(x_{i+1}, y(x_{i+1})) \quad (\text{П.15})$$

Теперь, собирая воедино формулы (П.14) и (П.15), а также учитывая, что $x_{i+1} - x_i = h$ и заменяя $y(x_{i+1})$ и $y(x_{i-1})$ на приближенные значения y_{i+1} и y_{i-1} получаем формулу

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_{i+1}, y_{i+1}), \quad i = \overline{0, n} \quad (16)$$

носящую название *неявного метода Эйлера*.

Этот метод является неявным в силу того, что для вычисления неизвестного значения $y_{i+1} \approx y(x_{i+1})$ по известному значению $y_i \approx y(x_i)$ требуется решать уравнение, в общем случае нелинейное. Возникает вопрос, а нужно ли применять этот метод, когда гораздо проще воспользоваться явными формулами? Нужно сказать, что данный метод является абсолютно устойчивым, поэтому его применение оправдано при решении жестких уравнений и систем.

Повторяя рассуждения, проведенные в процессе получения неявного метода Эйлера и применяя на этот раз формулу трапеций:

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{1}{2}(f(a) + f(b))(b - a)$$

получим следующее приближение интеграла в правой части выражения (П.14)

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y(x)) dx = \frac{1}{2} [f(x_i, y(x_i)) + f(x_{i+1}, y(x_{i+1}))] \cdot (x_{i+1} - x_i).$$

Отсюда выводится следующая формула:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} [f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1})], \quad i = \overline{0, n} \quad (\text{П.17})$$

Эта формула также является неявной, как и формула (П.16). Будем называть это метод *методом трапеций*. Следует заметить, что данный метод имеет порядок точности на единицу больший, чем метод Эйлера, поэтому при применении формулы (П.17) можно получить более точное приближение к точному решению. Поскольку этот метод является неявным, то есть небольшая проблема в том, как ее применить. Попробуем совместить метод Эйлера и метод трапеций таким образом, чтобы из неявного метода сделать явный (следовательно, просто применяемый), но сохранить его порядок аппроксимации. Для этого вычислим *первое приближение* используя формулу (П.4), т.е.

$$y_{i+1}^0 = y_i + hf(x_i, y_i)$$

и подставим вычисленное значение y_{i+1}^0 в правую часть формулы (П.17) вместо значения y_{i+1} , откуда получим (учитывая, что $x_{i+1} = x_i + h$)

$$y_{i+1}^{(1)} = y_i + \frac{h}{2} [f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1}^0)]$$

Объединим эти формулы

$$\begin{cases} y_{i+1}^{(k-1)} = y_i + hf(x_i, y_i) \\ y_{i+1}^{(k)} = y_i + \frac{h}{2} [f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1}^{(k-1)})] \end{cases} \quad (\text{П.18})$$

и в итоге получаем метод, известный как *метод Эйлера с пересчетом*.

Параметр k в формулах (П.18) может быть больше единицы, но слишком много раз применять эти формулы, для уточнения результата не рекомендуется, так как совпадение определенного числа разрядов в полученных числах $y_{i+1}^{(k)}$ и $y_{i+1}^{(k-1)}$ говорит о точности относительно y_{i+1} , а вовсе не о том, что с такой точностью найдено значение $y(x_{i+1})$, т.е. точное значение.

Чтобы получить следующую формулу проинтегрируем уравнение (П.1) по отрезку $[x_{i-1}, x_{i+1}]$. Имеем

$$\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} y'(x) dx = \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x, y(x)) dx$$

отсюда следует равенство

$$y(x_{i+1}) = y(x_{i-1}) + \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x, y(x)) dx. \quad (\text{П.19})$$

Применим к интегралу формулу средних прямоугольников

$$\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x, y(x)) dx \approx (x_{i+1} - x_{i-1}) f(x_i, y(x_i)) \quad (\text{П.20})$$

Заменим $y(x_{i+1})$ и $y(x_{i-1})$ на приближенные значения y_{i+1} и y_{i-1} , подставим правую часть выражения (П.20) в (П.19) и получим:

$$y_{i+1} = y_{i-1} + (x_{i+1} - x_{i-1}) f(x_i, y_i)$$

Учтем, что $x_{i+1} - x_{i-1} = 2h$ и окончательно получим:

$$y_{i+1} = y_{i-1} + 2hf(x_i, y_i), \quad i = \overline{0, n-1} \quad (\text{П.21})$$

Формула (П.21) называется *уточненным методом Эйлера или центральной разностной производной*. Данный метод имеет *второй порядок аппроксимации*, что отличает его от всех методов полученных нами ранее, за исключением метода Эйлера с пересчетом, так как он также имеет второй порядок аппроксимации.

Обратим внимание еще на одно принципиальное отличие метода (П.21) от всех других - этот метод является *двухшаговым*. Здесь для вычисления значения y_{i+1} привлекаются два предыдущих значения y_{i-1} и y_i . Двухшаговость этого метода накладывает определенные ограничения, по крайней мере, на начало численного процесса: значение $y_1 \approx y(x_1)$ не может быть найдено непосредственно этим методом с тем же шагом h . Поэтому недостающую вторую начальную для процесса (П.21) приходится получать другим путем, например явным методом Эйлера. При этом возникает один вопрос - дело в том, что явный метод Эйлера имеет первый порядок аппроксимации, а метод (П.21) - второй, следовательно, применяя для нахождения точки y_i явный метод Эйлера, можно сразу привнести ошибку в вычисления. Тогда каким образом применять уточненный метод Эйлера и при этом не потерять в точности при вычислении необходимого начального значения y_i ?

Для решения этой проблемы можно воспользоваться следующими формулами:

$$y_{\frac{1}{2}} = y_0 + \frac{h}{2} f(x_0, y_0), \quad y_1 = y_0 + hf\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_{\frac{1}{2}}\right) \quad (\text{П.22}).$$

Формулы (П.22) позволяют получить приближенное значение y_1 со вторым порядком точности, а имея в распоряжении y_0 и сопряженное по порядку аппроксимации приближенное значение y_1 можно применять метод (П.21) без привнесенных на начальном этапе ошибок.

Предиктор-корректорные методы аппроксимации производных первого порядка.

В заключение нашего небольшого обзора методов аппроксимации производных необходимо упомянуть еще об одном типе численных методов - *методах прогноза – коррекции*.

Под названием *методы прогноза – коррекции* (иначе *предсказания – уточнения, предиктор – корректорные методы*) понимается совместное применение явных и неявных методов одинакового или смежных порядков. По явному методу значение решения $y(x)$ задачи (П.1),(П.2) в расчетной точке x_{i+1} прогнозируется, т.е. находится его, быть может, достаточно грубое приближение, а с помощью неявного метода, в правую часть которого поставляется спрогнозированное значение, оно уточняется (корректируется). Пример приближенного вычисления $y(x_{i+1})$ по такому явно-неявному методу у нас уже есть – метод Эйлера с пересчетом.

Рассмотрим еще несколько предиктор-корректорных методов, которые могут нам пригодиться в вычислениях.

Предиктор-корректорный метод Эйлера относится к методам первого порядка и его вычислительные формулы имеют следующий вид:

$$\begin{cases} y_{i+1}^* = y_i + hf(x_i, y_i) \\ y_{i+1} = y_i + hf(x_{i+1}, y_{i+1}^*) \end{cases} \quad (\text{П.23})$$

Здесь же можно поместить метод Эйлера с пересчетом, который был рассмотрен нами ранее

$$\begin{cases} y_{i+1}^* = y_i + hf(x_i, y_i) \\ y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} [f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1}^*)] \end{cases}$$

Отметим еще и метод Адамса-Башфорта, который имеет второй порядок аппроксимации:

$$\begin{cases} y_{i+1}^B = y_i + \frac{h}{2} [3f(x_i, y_i) - f(x_{i-1}, y_{i-1})] \\ y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} [f(x_{i+1}, y_{i+1}^B) + f(x_i, y_i)] \end{cases} \quad (\text{П.24})$$

Заметим, что вычисление корректора в методе Адамса – Башфорта имеет ту же проблему, что и при использовании метода Эйлера с пересчетом, тем не менее, чтобы воспользоваться этим методом, для вычисления приближенного решения y_i можно воспользоваться формулами (П.22).

СТАТИСТИЧЕСКАЯ ПОГРЕШНОСТЬ МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО.

Проводя повторные расчёты с одинаковым числом построенных траекторий (но, разумеется, с разными наборами случайных чисел), мы будем получать отличные друг от друга значения величины

$$J_n = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N g_n \quad (\text{П.25})$$

Величина J_N , представляет собой сумму случайных величин g_n , и поэтому сама является величиной случайной. По мере увеличения N флуктуации величины J_N будут уменьшаться, и в пределе мы получим

$$\lim_{N \rightarrow \infty} J_n = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N g_n = \langle g \rangle = J \quad (\text{П.26})$$

Мерой отклонения реального результата J_N от «идеального» является дисперсия, определяемая соотношением

$$D\eta = \langle \eta^2 \rangle - \langle \eta \rangle^2 \quad (\text{П.27})$$

$$D(c\eta) = c^2 D\eta, \quad D(\sum_i \eta_i) = \sum_i D\eta_{i-1} \quad (\text{П.28})$$

где c - посянная, η_i - независимые случайные числа. С дисперсией связана среднеквадратичная ошибка.

$$\sigma = \sqrt{D} \quad (\text{П.29})$$

и относительная ошибка

$$\delta = \frac{\sigma}{\langle \eta \rangle} \quad (\text{П.30})$$

Пользуясь выражениями (П.25) - (П.30), найдём относительную ошибку в определении величины J по N траекториям:

$$\delta_N = \frac{\sqrt{DJ_N}}{\langle J_N \rangle} = \frac{\sqrt{\sum_i Dg_n}}{N \langle g \rangle} = \frac{1}{\sqrt{N}} \delta \quad (\text{П.31})$$

где

$$\delta = \frac{\sqrt{Dg}}{\langle g \rangle} \quad (\text{П.32})$$

- относительная ошибка вклада одной траектории. Из формулы (П.31) видно, что относительная статистическая погрешность метода Монте-Карло убывает пропорционально $N^{-1/2}$. Множитель (П.32) определяется условиями задачи и выбранным способом оценки и не зависит от числа построенных траекторий.

Пусть вероятность попадания траектории в наблюдаемый объём равна p :

$$g = \begin{cases} g^* & \text{с вероятностью } P, \\ 0 & \text{с вероятностью } 1 - P. \end{cases}$$

Обозначим через $f_g(x)$ и $f_{g^*}(x)$ соответствующие плотности распределения, удовлетворяющие условию нормировки. Легко видеть, что

$$f_g(x) = Pf_{g^*}(x) + (1 - P)\delta(x) \quad (\text{П.33})$$

Среднее значение и средний квадрат вклада, входящие в определение дисперсии (П.33) выражаются через плотность распределения следующим образом:

$$\langle g \rangle = \int_0^{\infty} xf_g(x)dx \quad (\text{П.34})$$

и

$$\langle g^2 \rangle = \int_0^{\infty} x^2 f_g(x)dx$$

Подставляя (П.33) в (П.34) и учитывая, что последние соотношения справедливы и для g^* , получим:

$$\langle g \rangle = P\langle g^* \rangle \quad (\text{П.35})$$

$$\langle g^2 \rangle = P\langle g^{*2} \rangle$$

Из формул (П.27), (П.35) следует относительная ошибка для одной траектории

$$\delta = \sqrt{\frac{1 - P}{P} + \frac{\langle g^{*2} \rangle - \langle g^* \rangle^2}{P\langle g^* \rangle^2}} \quad (\text{П.36})$$

Оба члена под корнем не отрицательны. Для выяснения роли каждого из них рассмотрим вычисление методом Монте-Карло числа частиц, вылетающих из поглотителя через некоторую поверхность.

В этом случае $g^* = 1$

$$\delta = \sqrt{\frac{1 - P}{P}}$$

общая формула погрешности (П.31) принимает вид

$$\delta_N = \sqrt{\frac{1 - P}{NP}}$$

Следовательно, первый член подкоренного выражения описывает флуктуации числа частиц, попадающих в выделенную область. Второй

член даёт флуктуации характеристик частиц, входящих в выражение для g^* .

Из (П.31) и (П.36) следует важный вывод: для уменьшения погрешности расчёта можно не только увеличить число траекторий N , но и изменять схему расчёта таким образом, чтобы увеличить вероятность P .

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Основы теории и методы расчета ядерных реакторов: Учеб. пособие для вузов/Г.Г.Бартоломей, Г.А. Бать, В.Д. Байбаков, М.С. Алтухов.- 2-е изд., перераб. и доп.- М.: Энергоатомиздат, 1989.-512с.: ил.
2. Кошелев Ф.П. Нейтронно-физический и теплогидравлический расчет реактора на тепловых нейтронах : учебное пособие / Ф. П. Кошелев, И. В. Шаманин ; Под ред. В. И. Бойко. — Томск : Изд-во ТПУ, 1996. — 80 с.
3. Алтухов Д. Е. Расчет нестационарных и переходных нейтронно-физических процессов в реакторе на тепловых нейтронах : учебное пособие / Д. Е. Алтухов, Ф. П. Кошелев, И. В. Шаманин ; Томский политехнический университет. — Томск : Изд-во ТПУ, 1998. — 126 с.
4. Доллежалъ Н. А. Канальный ядерный энергетический реактор / Н. А. Доллежалъ, И. Я. Емельянов. — М. : Атомиздат, 1980. — 208 с. : ил.
5. Крамеров А. Я. Инженерные расчеты ядерных реакторов / А. Я. Крамеров, Я. В. Шевелев. — 2-е изд., перераб. и доп. — М. : Энергоатомиздат, 1984. — 736 с.
6. Белл, Джоржд. Теория ядерных реакторов : пер. с англ. / Д. Белл, С. Глесстон. — М. : Атомиздат, 1974. — 494 с.
7. Климов А. Н. Ядерная физика и ядерные реакторы : учебник / А. Н. Климов. — 3-е изд., перераб. и доп. — М. : Энергоатомиздат, 2002. — 464 с.
8. Групповые константы для расчета реакторов и защиты : Справочник / Л. П. Абагян, Н. О. Базазянц, М. Н. Николаев, А. М. Цибуля ; Под ред. М. Н. Николаева. — М. : Энергоиздат, 1981. — 231 с.
9. Галанин А. Д. Теория гетерогенного реактора / А. Д. Галанин. — М. : Атомиздат, 1971. — 246 с.
10. Потабенко Н. А. Численные методы. Решение задач линейной алгебры и уравнения в частных производных : Тексты лекций / Н. А. Потабенко. — М. : Изд-во МАИ, 1997. — 88 с.

11. Бояршинов, М. Г. Численные методы; Прикладная математика и информатика : учебное пособие / М. Г. Бояршинов. — Пермь : Изд-во Пермского ГТУ, 1998.
12. Самарский, А. А. Численные методы математической физики : учебное пособие / А. А. Самарский, А. В. Гулин. — М. : Научный мир, 2000. — 316 с.
13. Самарский А.А., Михайлов А.П. Математическое моделирование Идеи. Методы. Примеры. – М.: Наука. Физматлит, 1997. – 320 с.

Учебное издание

ДАНЕЙКИН Юрий Викторович
ХАДКЕВИЧ Антон Валерьевич
ЮШИЦИН Константин Владимирович

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЯДЕРНОГО РЕАКТОРА

Учебное пособие

Научный редактор,
доктор наук
профессор

Редактор

Верстка

Дизайн обложки

Подписано к печати 00.00.2008. Формат 60x84/16. Бумага
«Классика».

Печать RISO. Усл.печ.л. 000. Уч.-изд.л. 000.
Заказ . Тираж 000 экз.



Томский политехнический университет
Система менеджмента качества
Томского политехнического университета сертифицирована
NATIONAL QUALITY ASSURANCE по стандарту ISO
9001:2000



ИЗДАТЕЛЬСТВО  ТПУ. 634050, г. Томск, пр. Ленина, 30.