

反應堆數字計算問題的介紹

金星南 孫紹麟

引言

要建造一个經濟適用、安全可靠的反應堆，首先必須作理論計算，尽量地多考慮些方案，再由理論計算和實驗來選擇最佳的方案。在這過程中，必須解決很多數學問題，並要進行大量的數字計算。

當反應堆建成之後，在運轉的過程中，為了運行得安全、可靠和經濟，我們必須研究其中的燃耗情況和裂變產物積累的情況，為此也需解決一系列數學問題，並作大量的數字計算。

解決反應堆的上述數學問題，有很多近似方法。但是，各種方法都有一定的缺陷和局限性，尋找更簡單、更可靠而又廣泛有效的反應堆計算的方法，還有待今后的努力。

反應堆靜態計算的數字計算問題

描述反應堆內中子運動規律的基本方程是定態波茲曼方程，它的形式為

$$\begin{aligned} \vec{Q} \cdot \nabla \phi(\vec{r}, v, \vec{Q}) + \Sigma \phi(\vec{r}, v, \vec{Q}) = \\ = \iint d\nu' d\vec{Q}' \Sigma(v', \vec{Q}' \rightarrow v, \vec{Q}) \phi(\vec{r}, v', \vec{Q}') + \\ + S(\vec{r}, v, \vec{Q}). \end{aligned} \quad (1)$$

其中 $\phi(\vec{r}, v, \vec{Q})$ 是“角”中子通量； Σ 是宏觀總截面； $\Sigma(v', \vec{Q}' \rightarrow v, \vec{Q})$ 是由速度為 v' 、 \vec{Q}' 的中子散射到速度為 v 、 \vec{Q} 的中子的截面； $S(\vec{r}, v, \vec{Q})$ 是中子源。

在反應堆中，我們常應用單速近似的波茲曼方程，它的形式為

$$\vec{Q} \cdot \nabla \phi(\vec{r}, \vec{Q}) + \Sigma \phi(\vec{r}, \vec{Q}) = \int d\vec{Q}' \Sigma(\vec{Q}', \vec{Q}) \phi(\vec{r}, \vec{Q}') + S(\vec{r}, \vec{Q}). \quad (2)$$

對於這單速波茲曼方程的解法，現在主要的有下列三種近似法：

1. 球諧展開法——擴散近似

球諧展開法是將 $\phi(\vec{r}, \vec{Q})$ 與 $\xi(\vec{r}, \vec{Q})$ 按勒証特多項式展開，而將角度變數經積分積掉。若展開式只保留到 N ($N = 1, 2, \dots$) 項，則稱為 P_N 近似。 P_1 近似，即通常所謂的擴散近似。在此近似下，方程(2)可以化為

$$D \nabla^2 \phi(\vec{r}) - \Sigma \phi(\vec{r}) + S(\vec{r}) = 0; \quad (3)$$

其中 $\phi(\vec{r}) = \int_{4\pi} \phi(\vec{r}, \vec{Q}) d\vec{Q}$ 是中子通量；

$$S(\vec{r}) = \int_{4\pi} S(\vec{r}, \vec{Q}) d\vec{Q};$$

D 是介質的擴散系數。

擴散近似對於體積較大，“角”中子通量基本上各向同性，以及中子通量梯度足夠小的堆才適用。

2. 卡爾遜的 S_n 方法

在 S_n 方法中，我們把中子運動方向分成偶數間隔，並假設在每個間隔之內 $\phi(\vec{r}, \vec{Q}), S(\vec{r}, \vec{Q})$

和 $\Sigma_i (\vec{Q}' \cdot \vec{Q})$ 都是各向同性的。这样方程(2)要对每一个 \vec{Q}_i (第 i 个角度間隔) 求解, 方程(2)就为一組微分方程所代替。

3. 双球諧展开法 (Yvon 方法或双 P_n 方法)

这方法和前面所提到的球諧展开法很相似。其不同之点在于在此法中, 对应于 $\mu < 0$ 以及 $\mu > 0$ (設問題是一維的, μ 为中子运动方向与中子的徑向量之間夹角的余弦) 两区域内定义两个“角”中子通量, 而每个区域内的“角”中子通量, 分別用宗量为 $2\mu + 1$ 以及 $2\mu - 1$ 的勒証特多项式展开。这方法的收敛性一般說来比 P_N 近似好, 双 P_2 近似比 P_3 近似好; 計算量也比较少。特别是在交界面附近, 双 P_N 近似較 P_N 近似要好得多。这方法用来处理小反应堆的問題是很合适的。

以上是計算在靜态情况下的反应堆的几个主要方法。这些方法只是把最普遍的波爾茲曼方程化为在各种特殊情況下的較易求解的方程。为了解在上面情况下所求得的方程, 我們还需要在下面的某种情况的假設下进行計算, 得到數字結果。

第一种假設为年龄近似的假設。在这假設下, 对于热中子一般是用扩散方程(3)来描述的, 而对于能量超过热能的中子, 在它們的慢化过程中, 假定能量的損失是連續的。在輸运方程(1)中, 积分号下的 $\Sigma_i \phi$ 可以对能量展为泰勒級数, 而且只保留头二項, 另一方面对于 $\phi \cdot \Sigma_i S$ 仍用 P_1 近似, 那末方程(1)就可以化为年龄方程

$$\nabla^2 q(\vec{r}, \tau) - \frac{\partial q(\vec{r}, \tau)}{\partial r} = 0, \quad (4)$$

其中 q 为慢化密度, τ 为中子寿命。方程(3)和(4)結合起来, 就可以作反应堆的靜态計算, 此即所謂扩散年龄近似。

扩散年龄近似, 对于原子量 $A \geq 2$ 的原子核的介质來說是相当好的; 但当介质中含有氢原子时, 由于中子和氢原子核作一次碰撞就有可能损失全部能量, 因之連續慢化模型的应用, 就显得勉強。在計算水-水堆时, 我們就不能用扩散年龄近似, 而用其它方法, 比較常用的是所謂 S. G. 方法。在 S. G. 方法中, 中子与重原子核碰撞仍用連續慢化的假定, 但中子与氢核的碰撞, 則另作严格的处理。当然計算水-水堆还有其它的近似方法, 但一般說来都比較复杂, 而且准确度也不如 S. G. 方法。

在很多情况下, 我們把反应堆中連續的中子能譜分成許多能量間隔, 或者說把中子按能量分成好多羣。在每一羣中, 中子的能量假定是单一的, 而能量較高一羣的中子, 經過一定的碰撞后, 落到下一羣的中子中去。

前面所提到的扩散近似法、 S_n 方法、双球諧展开法都可以用多羣方法来求得反应堆的數字解。

扩散近似多羣方法在計算較大的反应堆时是比較准确的。对某种球形堆所作的計算結果指出, 当半径为 25 厘米时, 誤差为 2—2.5%, 但当半径減小到 10 厘米时, 誤差就增到 9%。球諧展开法 P_n ($N > 1$) 近似的多羣方法要比扩散近似多羣方法复杂得多。

S_n 多羣方法, 一般只須算到 S_4 。图 1 是固体钚系統, 在十羣情况下, S_2, S_4, S_6, S_8 的比較。由此图可見, 在 S_4 的情况下, 临界半径的誤差就降到 1%, 而 n 增大时, 效果并不显著。图 2 是扩散多羣临界半径与 S_4 多羣临界半径之比对 S_4 多羣临界半径所划出的曲線, 从这个图上見到, 在大堆情况下, 扩散多羣和 S_n 多羣的結果趋于一致, 这时采用扩散近似就可以节省很多工作量¹⁾。一般說来, S_2 要比扩散近似好, S_4 近似比 P_3 近似好。

1) 文中图 1 和图 2 取自 Reaction Physics Constants, ANL-5800, 442—443 頁。

多羣計算中的一个重要問題是参数的选择問題。必須根据中子与物质作用的截面和中子能量的关系来正确地选择各羣中的参数。原則上說，羣数取得愈多愈准确。但实际上由于中子的截面与能量的关系知道得不够确切，所以即使增加羣的数目，也无济于事。

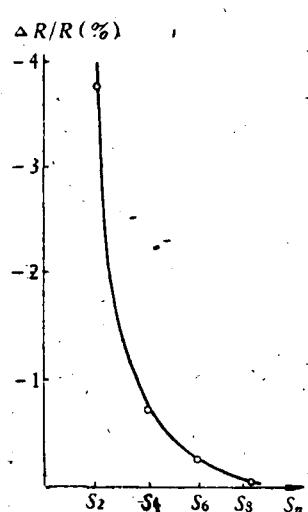


图1 根据十羣計算的临界半径的相对誤差同 S_n 的关系

对于石墨、重水反应堆的計算，用二羣方法可以得到較滿意的結果。

反应堆靜态計算的量是很大的，特別是在理論設計的初期，选择方案的时候，重复的計算就更多。在选择方案时，采用电子模拟計算机是特別簡單的。

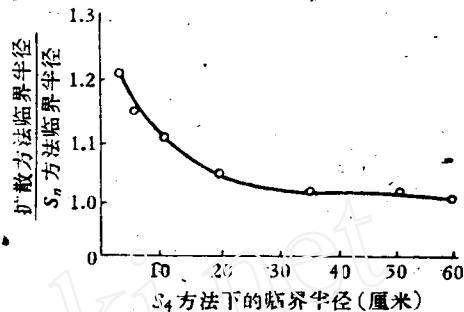


图2 扩散方法与 S'_n 方法临界半径的比值
同 S'_n 方法下临界半径的关系

但是电子模拟計算机的精确度是不高的，所以选出了最后的方案后，还必须进行精确的計算。在計算量不大的情况下，使用台式計算机即可；但在計算量大的情况下，需用数字电子計算机。由于数字电子計算机运转的成本很貴，所以不便滥用。总之，在反应堆数字計算中，計算工具要由小到大，大、中、小相结合，同时并用，不能認為有了数字电子計算机，其它計算工具就可以不使用了。

反应堆动态計算的数字計算問題

在反应堆动态計算中，我們常常碰到下列諸問題：功率密度 p （或中子数）随時間的变化、燃耗成分的变化、中毒和結渣以及溫度效应的計算。在所有这些問題中，所包含的数学問題是非常类似的。故为简单起見，仅举功率密度随時間的变化問題作为例子。

求功率密度随時間改变的时候，需要解一組常微分方程系：

$$\left. \begin{aligned} \frac{dp}{dt} &= \frac{\delta k}{l} p - \frac{\beta}{l} p + \sum_{i=1}^6 \lambda_i D_i, \\ \frac{dD_i}{dt} &= \frac{k\beta_i}{l} p - \lambda_i D_i \quad (i = 1, 2, \dots, 6), \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

其中 p 为反应堆的功率密度， D_i 为第 i 种緩发中子的母元素对功率密度的貢獻， λ_i 为第 i 种母元素的衰变常数， l 为瞬发中子的平均寿命， β 为有效緩发中子比率， β_i 为第 i 种母元素的相对产額，而 $\delta k = k - k_0 = f(t)$ 是反应性的变化。方程系(5)的复杂程度取决于 $f(t)$ 的具体形式：

1. 当 $f(t)$ 为常数时，方程系(5)是七个一阶常系数線性微分方程系。当 $\frac{dp}{dt} \ll \beta \frac{p}{l}$ (这

对于一般在稳定态附近变化的反应堆是能滿足的)时，这方程系有解析解。

2. 当 $f(t)$ 是 t 的已知函数时，方程系(5)成为一組非常系数的線性微分方程系，只有在少

(下轉 246 頁)

油冷阳极的X光管。由于它耐压高，阳极可以更换，就使它具备了其它X光管所不可能具有的特点：1)剂量率大，由图11可以看出，在同样电流下，若能量由20万电子伏提高到30万电子伏则剂量率可增加4倍以上；2)功率大，靶子可以更换。

参 考 文 献

[1] 西洛琴斯基：高压工程第一卷 p. 157. 电力工业出版社，1956年版。

(上接240页)

数特殊情况下，才有解析解，现在多用数字法近似地求解。

3. 严格说来，由于温度效应的存在， f 除与时间有关外，还与功率密度 p 有关。这样，求解方程系(5)就更为麻烦，一般都采用近似方法来求解。

反应堆动态计算，用模拟计算机是很适宜的；特别是当时间为独立变数时，用模拟计算机能把整个随时间变化的过程模拟出来。当然，如要求更高的精确度的解，须采用数字电子计算机。

反应堆计算的新方法——蒙特-卡罗(M. C.)方法

蒙特-卡罗方法是一种直接模拟物理现象的数学方法。在很多问题中，尤其是那些物理过程清楚，但是不能列出数学方程的问题，用蒙特-卡罗方法来处理是比较适当的。

中子或 γ 射线对物质的相互作用，问题虽较复杂，但物理过程是清楚的。象这种问题，都可利用蒙特-卡罗方法来计算。采用这种方法时，人们需要随机地跟踪大量的中子或光子的历史，而对每个中子或光子都应从其产生一直跟踪下去，直到被吸收为止。其中每一种物理过程——散射、吸收、裂变等——的概率分布是由随机抽样来确定的。当跟踪了大量的中子或光子后，进行平均就可得到所需的结果。但是蒙特-卡罗方法的精确度是以所跟踪的粒子数来决定的，与所跟踪的粒子数的平方根成反比。因之，为了要得到更精确的结果，就必须跟踪更大量的粒子，这样就需要大量的计算。所以蒙特-卡罗方法的发展是与快速数字电子计算机的发展紧密联系着的。

蒙特-卡罗方法是反应堆计算方法中较有效的方法之一。但一般说来，这种方法的计算量较大，所以不便滥用。目前蒙特-卡罗方法已被广泛用于反应堆屏蔽的计算中。用蒙特-卡罗方法来计算栅格参数和临界大小，目前也已开始。从已有的结果看来，精确度是相当高的。里其米尔(R. D. Richtmyer)，凡诺顿(R. Van Norton)和华尔夫(A. Wolfe)^[1]用蒙特-卡罗方法计算某反应堆的共振几率，得到 $p = 0.8566 \pm 0.0025$ ，而实验值为 0.838 ± 0.003 。

近来贝尔格(M. G. Berger)和杜盖脱(G. Doggett)^[2]还提出一种半解析蒙特-卡罗方法。在这方法中，把能解析处理的部分都尽量用解析方法处理，它是蒙特-卡罗方法的发展。在计算时间和结果的精确度等方面都较蒙特-卡罗方法更为优越。这种方法在屏蔽问题上已有人应用过。

结 论

从上面的讨论可以看到，在反应堆事业中，数字计算是应用得非常广泛的。并且对于新的问题提出了新的数字计算方法的要求，蒙特-卡罗方法就是一个很好的例子。这些问题的解决，我们还不能认为是最完善的，还必须进行大量的工作，来改善我们的计算方法。

参 考 文 献

[1] R. D. Richtmyer, R. Van Norton and A. Wolfe: Proceedings of the second United Nations International Conference on the Peaceful Uses of Atomic Energy, Geneva, (1958) P. 2489, 第16卷, 180.

[2] M. G. Berger and G. Doggett: J. Res. NBS, 56, 89 (1956).