

## **Лекция 24. Математическое моделирование сложных объектов**

1. Физически «безопасный» ядерный реактор.
2. Гидрологический «барьер» против загрязнения грунтовых вод.
3. Экологически приемлемые технологии сжигания углеводородного топлива.

### **1. Физически «безопасный» ядерный реактор.**

Ядерная энергетика служит одной из основ индустрии многих развитых стран, занимая в ряде из них первое, в сравнении с другими видами энергетике, место по выработке электроэнергии. Проблемы ее безопасности сложны и разнообразны: захоронение отходов и уменьшение потребности в добыче урана, эффективное использование обедненного и освобождающегося при ядерном разоружении урана и, конечно же, предотвращение тяжелых аварий на реакторах.

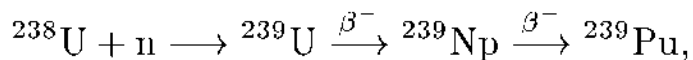
В реакторах любого типа определяющими физическими процессами являются нейтронно-ядерные реакции, приводящие к выделению энергии в его активной зоне, и отвод от этой зоны тепла, используемого затем для получения электроэнергии. Работающий реактор поддерживается в критическом состоянии, когда число выделяющихся нейтронов таково, что вырабатываемая мощность практически не зависит от времени. В подкритическом режиме нейтронов появляется меньше, чем теряется, и реакция деления быстро затухает. В надкритическом состоянии, наоборот, нейтронный выход слишком велик, и это может привести к разогреву и «взрыву» активной зоны.

В обычных реакторах критическое состояние физически неустойчиво, оно поддерживается искусственно с помощью очень сложной системы управления. Без такой системы происходит выход либо на подкритический, либо на надкритический режимы. Реактор делается с запасом реактивности (надкритичность), который компенсируется введением в активную зону специальных стержней, поглощающих «лишние» нейтроны. Если же по мере выгорания топлива реактивность уменьшается, то управляющие стержни частично выводятся из системы и нейтронный поток вырастает до величины, необходимой для плановой работы реактора.

Характерное время отклонения от критического состояния определяется в основном периодом запаздывающих нейтронов, т. е. нейтронов, выделяющихся из осколков деления лишь некоторое время спустя после реакции распада. Этот период менее одной минуты, что предъявляет весьма жесткие требования к системе управления. Именно за это короткое время она должна «принять» и реализовать соответствующее решение при возникновении непредвиденных ситуаций.

Главная идея физически безопасного реактора – компоненты топлива должны быть подобраны так, чтобы, во-первых, его характерное время было заметно больше минуты и, во-вторых, чтобы в режиме его работы появились элементы саморегулирования.

Этого можно достичь, если в реакторе среди прочих реакций будет достаточно заметной следующая цепочка превращений:



где через  ${}^{238}\text{U}$ ,  ${}^{239}\text{U}$ ,  ${}^{239}\text{Np}$ ,  ${}^{239}\text{Pu}$  обозначены соответствующие изотопы урана, нептуния и плутония, символом  $n$  нейтрон, символ  $\beta^-$  означает бета-распад (испускание электрона ядром). В этом случае образующийся в результате плутоний является основным и используемым сразу топливом. Характерное время такой реакции — время двух бета-распадов, равное приблизительно 2,5 суткам, т. е. оно почти на четыре порядка больше, чем для запаздывающих нейтронов.

Эффект саморегуляции связан с тем, что увеличение (по каким-то причинам) потока нейтронов приведет к быстрому выгоранию плутония, уменьшению его концентрации и соответственно потока нейтронов (образование же новых ядер  ${}^{239}\text{Pu}$  будет идти в прежнем темпе примерно в течение 2,5 суток). Если же, наоборот, поток нейтронов в результате внешнего вмешательства резко уменьшится, то уменьшится скорость выгорания и увеличится темп наработки плутония с последующим увеличением числа выделяющихся в реакторе нейтронов через приблизительно такое же (равное нескольким суткам) время.

Описанные превращения протекают и в традиционных реакторах, однако в них они являются второстепенными для энерговыделения, поскольку используются в основном для накопления плутония. Ответ на вопрос, существует ли такая смесь  $\text{U}$  и  $\text{Pu}$ , при которой данная реакция становится доминирующей, может быть получен только с помощью математического моделирования этой сложнейшей системы.

Достаточно полная математическая модель активной зоны реактора должна включать в себя модели нестационарных пространственно трехмерных процессов переноса нейтронов в сильно неоднородной среде, выгорания топлив и реакторной кинетики, а также модель отвода тепла.

Однако для проверки осуществимости выдвинутой физической идеи, причем с хорошей количественной точностью, можно ограничиться более простой моделью. Первое упрощение – отдельный анализ нейтронно-ядерных процессов и процесса теплоотвода (оно оправдано при больших временах регулирования). Собственно нейтронные процессы вполне допустимо изучать не в трехмерной, а в одномерной геометрии рассматривая их к тому же в диффузионном и одnogрупповом приближении (последнее означает, что соответствующим образом осредняются спектральные характеристики нейтронов).

Получающиеся при этих упрощениях уравнения переноса нейтронов по своему типу в некотором смысле близки к уравнениям теплопередачи. Они решаются совместно с уравнениями реакторной кинетики для шести групп предшественников запаздывающих нейтронов (уравнения типа радиоактивного распада, но с учетом «источников» нейтронов) и уравнениями выгорания для почти двадцати типов изотопов U, Pu, Np и других элементов. Разделение этих трех моделей невозможно, поскольку большинство искомых величин фигурирует во всех уравнениях. Метод решения — полудискретная (пространственная) аппроксимация исходной модели с последующим численным интегрированием по времени получающейся сложной системы обыкновенных дифференциальных уравнений высокой размерности.

Типичный вычислительный эксперимент состоит в задании начальной критической сборки (т. е. смеси веществ и геометрии активной зоны таких, чтобы получившийся реактор был критическим) и изучении эволюции со временем основных характеристик реактора. Заметим: начальная сборка находится с помощью специального предварительного вычислительного эксперимента.

Один из вариантов сборки в цилиндрической геометрии следующий:

Зона 1	Зона 2
<sup>239</sup> Pu — 8% <sup>238</sup> U — 92% Сталь Na	<b>Обедненный природный уран</b> ( <sup>235</sup> U — 0,33%, <sup>238</sup> U — 99,77%) Сталь Na
$r_1 = 89,48$ см	$r_2 = 200$ см

Сборка разбита на две зоны разных размеров с разным содержанием плутония и изотопов урана (присутствие в гомогенной смеси натрия соответствует наличию теплоносителя, сталь соответствует конструкционным элементам).

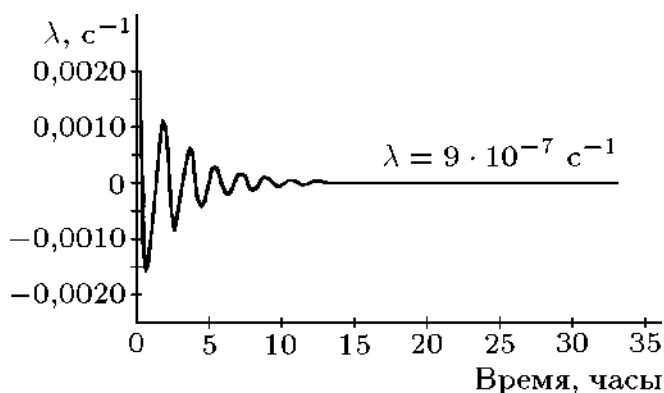


Рис. 86

Эксперименты с моделью отвечают и на вопрос об устойчивости реактора к сильным возмущениям (авариям). Например, возможен выброс части теплоносителя (натрия) из активной зоны в результате самопроизвольного или насильственного разрыва оболочки трубопровода. На рис. 86 приведена зависимость величины  $\lambda$  от времени после

подобной аварии. Она моделировалась следующим образом: в момент  $t = 63$  сут. из первой зоны в интервале  $0 \leq r \leq 15,4$  см за 15 мин с постоянной скоростью был выведен весь натрий. Это привело к возникновению

колебаний характерного времени (при этом его минимальное значение составляло 8 мин, что вполне достаточно для реальной коррекции работы реактора). В дальнейшем возникшее возмущение гасится самим реактором без какого-либо внешнего воздействия (саморегулировка) и через 32 ч его характерное время стабилизируется, становясь равным, как и прежде, примерно 10 сут. Эксперименты с моделью обосновывают также и некоторые другие преимущества рассматриваемого реактора, например, нет необходимости добавлять в активную зону новые порции плутония взамен выгоревшего (поэтому нет нужды в транспортировке и иных манипуляциях с одной из основных компонент ядерного оружия).

Таким образом, математическое моделирование и вычислительный эксперимент позволяют не только качественно, но и количественно изучать один из перспективных способов повышения безопасности ядерной энергетики.

## 2. Гидрологический «барьер» против загрязнения грунтовых вод.

Снабжение крупных городов и промышленных центров доброкачественной водой для питья и водой для технических нужд давно стало острой техно-экологической проблемой.

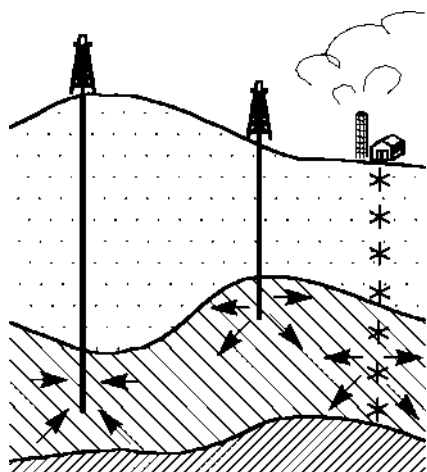


Рис. 87

Для ее решения помимо открытых и потому легко загрязняемых источников (реки, озера, водохранилища) активно используются подземные воды влагосодержащих пластов. Они менее подвержены антропогенным воздействиям, однако и для них вопросы, связанные с зачастую неизбежным загрязнением, остаются актуальными. Один из них — локализация вредных примесей, проникающих в часть пласта с тем, чтобы вода в других частях оставалась чистой и пригодной для потребления.

Эту цель можно достичь, используя часть грунтовых вод для создания на пути распространения загрязнений своеобразного гидрологического барьера. Общая его схема показана на рис. 87: между источником загрязнения (звездочки) и водозаборными скважинами устанавливаются специальные скважины, накачивающие (достаточно чистую) воду в пласт и повышающие ее уровень (барьер). Накачка создает принудительное движение грунтовых вод вправо и влево от барьера (стрелки). Фильтрующаяся направо часть потока сносит назад текущую ей навстречу воду с примесями, препятствуя дальнейшему продвижению загрязнений вдоль пласта.

Математическая модель,

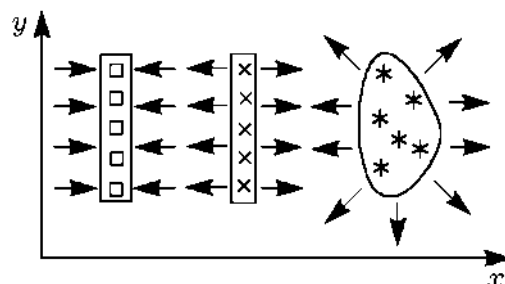


Рис. 88

реализующая эту схему, содержит уравнения фильтрации грунтовых вод и уравнения распространения примесей, дополненные соответствующими входными данными (свойствами грунта, воды и примесей, сведениями о геометрии рассматриваемой области, краевыми условиями и т. д.). При относительно небольшом содержании примесей в воде они не оказывают на ее движение заметного влияния, и поэтому фильтрацию можно рассматривать отдельно от динамики распространения загрязнений. При некоторых допущениях, главным из которых является предположение о достаточной протяженности пласта, движение воды описывается в рамках модели Буссинеска.

Окончательный ответ о целесообразности гидрологического барьера может быть получен лишь после дополнительных исследований по моделированию изучаемых процессов, в том числе с учетом свойств конкретных грунтов, различных способов расположения скважин, экономических аспектов и т. д. Очевидно, что те или иные решения рассматриваемой проблемы должны опираться на математическое моделирование и вычислительный эксперимент, поскольку масштабы явления исключают натурные эксперименты, а лабораторные испытания в силу отсутствия подобия дают лишь ограниченную информацию.

### **3. Экологически приемлемые технологии сжигания углеводородного топлива.**

Большая часть используемой в промышленности и быту энергии производится в топочно-сжигающих устройствах — котлах ТЭЦ, газовых турбинах, двигателях внутреннего сгорания и т. д. Химическая энергия сжигаемых в воздухе углеводородов (бензин, керосин, мазут, метан) либо реализуется непосредственно для обогрева, либо преобразуется в механическую или электрическую энергию. Общее свойство всех этих процессов заключается в том, что воздух содержит не только кислород (окислитель), но и заметную долю «побочного» вещества — азота. С участием последнего в процессе горения образуются соединения, которые, в отличие от нейтрального азота, химически активны (главные из них — оксиды азота  $\text{NO}$  и  $\text{NO}_2$ ). Вред от попадания оксидов в атмосферу разнообразен: они служат главным источником возникновения кислотных дождей, существенно способствуют истончению озонового слоя атмосферы, токсичны для дыхания и т. д.

Обычно используются два метода снижения выбросов оксидов азота. Первый из них — очистка продуктов горения. Соответствующее оборудование весьма эффективно, но одновременно и очень дорого. Стоимость современных фильтров достигает до 10-30% от стоимости самой ТЭЦ, в такой же пропорции увеличиваются расходы на ее текущую эксплуатацию. Основная идея второго метода — организация процесса горения таким способом, при котором образование оксидов азота было бы минимальным при сохранении энергетических характеристик установки.

Осуществление этого подхода означало бы заметное снижение затрат на газоочистку продуктов горения от NO и NO<sub>2</sub> (полностью подавить их образование нельзя).

Происходящие в топочных устройствах процессы очень сложны. В них происходит множество химических превращений большого числа различных веществ, выделение и поглощение энергии, газодинамическое движение смесей, турбулентное перемешивание компонент горючего с воздухом и продуктами горения и т. д. Динамика этих явлений сильно зависит от режима подачи топлива, конфигурации котлов, расположения горелок и других характеристик топок. Поэтому поиск экологически допустимых режимов их работы не может опираться ни на чисто теоретические представления, ни на натурные эксперименты — дорогие, длительные и небезопасные.

Удовлетворительная по своей полноте математическая модель работы котла ТЭЦ включает в себя две взаимосвязанных части. Первая из них — локальное описание химической кинетики для 32 компонент смеси, в особенности тех реакций, которые играют наибольшую роль в образовании токсичных загрязнителей. Вторая часть — нестационарная пространственно двумерная модель макропроцессов тепломассопереноса (диффузия веществ, теплопередача, конвективное движение и т. д.). Она осложняется также необходимостью учета реальной геометрии котла (П-образная форма), наличием в нем нескольких ярусов горелок, служащих для впрыскивания топлива и воздуха, и другими факторами. Из вычислительных экспериментов с такой моделью находятся все необходимые характеристики горения при различных режимах работы котла и отбираются оптимальные.

Охарактеризуем один из фрагментов математического моделирования описанных явлений, ограничившись первой частью — исследованием кинетики образования NO и NO<sub>2</sub> при горении CH<sub>4</sub> (метана), смешанного с воздухом (смесь считается изотермической и пространственно однородной). Полная модель включает в себя 196 прямых и столько же обратных реакций для 32 участвующих в горении веществ: O<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, O, N, NO, NO<sub>2</sub> и т. д. В математическом отношении она представляет собой систему из  $196 \times 2 = 392$  обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающих прибыль и убыль компонент в результате соответствующих прямых и обратных реакций. Интегрирование ее по времени при известных начальных концентрациях веществ дает подробную динамику процесса. При этом прослеживаются не только суммарная концентрация того или иного вещества, но и все пути его образования, что особенно важно для анализа механизмов появления токсичных примесей (один из эффективных методических приемов, облегчающих расчеты: по результатам пробных вычислений отмечают реакции, вносящие незначительный вклад в процесс и поэтому впоследствии в модели не учитываемые).

Опишем один из типичных вычислительных экспериментов, проводившихся в близких к реальным условиям. Смесь находится при атмосферном давлении, ее температура равна 2000 К, а начальный состав в момент  $t = 0$  задается в следующих долях:  $[N_2] \approx 0,7$ ,  $[O_2] \approx 0,2$ ,  $[CH_4] \approx 0,1$ .

Расчет проводился до установления равновесия, т. е. до тех пор, когда концентрация любой из компонент перестает изменяться.

В данном эксперименте итоговая концентрация NO на много порядков превышает концентрацию других вредных примесей. Поэтому основное внимание должно быть направлено на уменьшение именно этой компоненты. Существенно также то, что содержание NO монотонно увеличивается со временем. Значит, проблему уменьшения выхода NO проще решать, подавляя его образование (если же NO уже образовался, то обеспечить его исчезновение гораздо труднее).

Кроме того, к моменту, когда горение метана практически закончилось, в смеси присутствует лишь 13% от общего количества образующегося в итоге NO (основная часть вредных примесей появляется после того, как уже завершились энергетически полезные реакции сжигания метана).

Сильная временная разномасштабность этих двух процессов указывает на одну из принципиальных возможностей существенного уменьшения NO в продуктах горения. Необходимо как можно быстрее (в идеале сразу же после выгорания метана) удалить продукты горения из зоны пламени и резко охладить. В результате дальнейшие химические превращения, в том числе и образование NO, прекратятся, причем без потери энергетической мощности установки.

Следует обратить внимание на ряд других важных свойств процесса, например, выход NO монотонно уменьшается при уменьшении температуры горения, выход закиси азота  $N_2O$  (озоноразрушающее вещество) заметен лишь на промежуточных стадиях процесса, в дальнейшем она превращается в безвредный  $N_2$ , и т. д. Эти выводы очень полезны для выработки рекомендаций по конструированию экологически приемлемых энергетических установок.

Литература:

1. Самарский, А.А Математическое моделирование. Идеи. Методы. Примеры / А. А. Самарский, А. П. Михайлов. 2-е изд., испр. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2002. – 320 с.