

Хасанов М.*, Отарбек Н.

Казахский национальный университет им. аль-Фараби,
г. Алматы, Казахстан, *e-mail: manas_khassanov@mail.ru

РАСЧЕТ КОЛИЧЕСТВА ТЕПЛА, ИСПУСКАЕМОГО КАТАЛИТИЧЕСКИМ СОСТАВОМ (Pb, Bi, Po) ПРИ РАЗНЫХ ЗНАЧЕНИЯХ НЕЙТРОННОГО ПОТОКА В ПРОГРАММНОМ КОМПЛЕКСЕ "IBUS"

В работе рассматривается расчет количества тепла при взаимодействии тепловых нейтронов с элементами каталитического состава, состоящих из изотопов Pb^{206} , Pb^{207} , Pb^{208} , Pb^{209} , Bi^{209} , Bi^{210} , Po^{210} при разных значениях нейтронного потока в программном комплексе "IBUS". Концентрация нейтронов изменяется в среде со временем облучения до достижения стабильного состояния и зависит от нейтронного потока. Это стабильное состояние зависит от величины потока нейтронов, которая изменяется в диапазоне 10^{13} и 10^{16} на cm^2 .

Для моделирования процесса взаимодействия тепловых нейтронов с различными изотопами и для расчета изменения концентрации облучаемых изотопов в зависимости от времени, а также для расчета концентрации нарабатываемых продуктов и для многих других задач, связанных с облучением изотопов тепловыми нейтронами был создан программный комплекс "IBUS" (Isotopes Burn Up Software) на языке программирования C# с применением детерминированного метода расчета. В данной работе с помощью программного комплекса "IBUS" было рассчитано количество тепла, испускаемый каталитическим составом (Pb, Bi, Po) в единичном объеме в единицу времени Дж/см³с. Начальные концентрации изотопов каталитического состава, задаваемые как начальные входные параметры для программы, были взяты из работ [1-7].

Ключевые слова: каталитический состав, программный комплекс "IBUS", циклическая реакция.

Khassanov M. *, Otarbek N.

Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan, *e-mail: manas_khassanov@mail.ru

Heat density calculation of the interaction of thermal neutrons with catalytic composition (Pb, Bi, Po) for variety value of the neutron flux by "IBUS" software

The purpose of this work is to simulate by the "IBUS" software the heat release during the interaction of thermal neutrons with catalytic composition, which consist of isotopes Pb^{206} , Pb^{207} , Pb^{208} , Pb^{209} , Bi^{209} , Bi^{210} , Po^{210} for different values of the neutron flux. During the simulation, the concentration of the neutrons is not constant and depend on time until catalytic composition reaches the stable state which means the concentration is not changes any more. This stable state depends on the value of the neutron flux, which is changes in the range 10^{13} and 10^{16} per cm^2 .

For simulating the change of concentration process and for calculating the concentration of isotopes products the "IBUS" (Isotopes Burn Up Software) software was developed on C# using deterministic methods. The program can also be used to calculate the concentration of products to be produced and for many other problems associated with the irradiation of isotopes by thermal neutrons. Using this code we calculated heat density J/cm³sec of catalytic composition (Pb, Bi, Po). The initial concentrations of each isotope of the catalytic composition was calculated in works [1-7].

Key words: catalytic composition, "IBUS" software, cyclic reaction.

Хасанов М. *, Отарбек Н.

¹Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті,
Алматы қ., Қазақстан, *e-mail: manas.khassanov@mail.ru

Жылулық нейтрондардың катализдық қоспамен (Pb, Bi, Po) нейтрон ағынының әр түрлі мәнінде әсерлесу кезіндегі бөлінетін жылуды "IBUS" компьютерлік бағдарламалау кешенімен есептеу

Жұмыстың мақсаты жылулық нейтрондардың Pb²⁰⁶, Pb²⁰⁷, Pb²⁰⁸, Pb²⁰⁹, Bi²⁰⁹, Bi²¹⁰, Po²¹⁰ изотоптарынан тұратын катализдік қоспамен нейтрон ағынының әр түрлі мәнінде әсерлесу кезіндегі бөлінетін жылуды "IBUS" компьютерлік бағдарламалау кешені арқылы есептеу. Бұл ортадағы нейтрондардың концентрациясы тұрақты және уақыттан тәуелсіз деп есептеледі. Бұл тұрақты күй нейтрондық ағынның шамасына байланысты, ол 10¹³ және 10¹⁶ см² ауқымында өзгереді. Нейтрондармен әрекеттесу нәтижесінде изотоптардың концентрациясының өзгерісін есептеу үшін және де әсерлесу нәтижесінде пайда болған жаңа изотоптардың концентрациясын есептеу жүргізу үшін C# бағдарлау тілінде "IBUS" компьютерлік бағдарламалық кешені құрылды. Бағдарлама өндірілетін өнімнің шоғырлануын және жылу нейтрондары арқылы изотоптардың сәулеленуіне байланысты басқа да көптеген міндеттерді есепке алу үшін пайдалануға болады. Бастапқы мезеттегі катализдік қоспадағы әр изотоптың концентрациясы [1-7] жұмыстардан алынған.

Түйін сөздер: катализдік қоспа, "IBUS" компьютерлік бағдарламалық кешені, циклдык реакция.

Введение

В физике и технике часто встречаются задачи на определения изменения концентрации изотопов, продуктов реакций, выделяемой энергии и т.д. при облучения нейтронами систем, состоящих из разных изотопов в различных интервалах времени.

Рассмотрим реакцию нейтронного катализа с упрощенной моделью, в которой существует один единственный канал распада для всех неустойчивых изотопов и учитывается только реакция захвата изотопами нейтронов. С помощью этой упрощенной модели дифференциальное уравнение для численной плотности изотопов может быть получено следующим образом [8-11]:

$$\frac{dN_i(t)}{dt} = -\lambda_i N_i(t) - \sigma_i \varphi N_i(t) + \sum_{j \neq i}^n [-\lambda_j P_{j \rightarrow i} N_j(t)] + \sum_{j \neq i}^n [\sigma_j \varphi Q_{j \rightarrow i} N_j(t)], \quad (1)$$

где λ_i и σ_i обозначают константу распада и сечение захвата нейтронов нуклидом i , соответственно, $P_{j \rightarrow i}$ и $Q_{j \rightarrow i}$ – вероятности нуклида j для преобразования в нуклид i за счет распада и реакции захвата нейтронов, φ – поток тепловых нейтронов. Общее значение тепловыделения, генерируемое распадом H записывается как

$$H(t) = \sum_i^n [E_i \lambda_i N_i(t)]. \quad (2)$$

Дифференциальные уравнения для плотностей нуклидов могут быть представлены в матричной форме как

$$\frac{d\mathbf{N}(t)}{dt} = \mathbf{A}\mathbf{N}(t), \quad (3)$$

где \mathbf{N} – вектор плотности, определяемый как $\mathbf{N}(t) = \{N_1, N_2, N_3 \dots N_i\}$, а \mathbf{A} – матрица сжигания. Решение уравнения (3) можно записать в виде

$$\mathbf{n}(t) = \mathbf{n}(0)\exp(\mathbf{A}t), \quad (4)$$

где $\exp(\mathbf{A}t)$ – матричная экспонента [16-20]. Матричную экспоненту можно вычислить численно несколькими способами. Они будут объяснены позже.

Условия равновесия для каталитического состава записывается как

$$\frac{d\mathbf{N}}{dt} = \mathbf{A}\mathbf{N} = 0. \quad (5)$$

Уравнение (5) предполагает, что матрица \mathbf{A} должна иметь собственное значение, равной нулю, при достижении состава равновесного состояния. Плотность в состоянии равновесия представляет собой собственный вектор, соответствующий нулевому собственному значению [15]. Плотность в равновесном состоянии также может быть легко получена, если при числовых расчетах взять предел $t \rightarrow \infty$ [12-14].

Мы можем принять значения λ , σ , P , Q и вычислить численную зависимость от времени N_i нуклидов, включенных в цепь нейтронного катализа. При этом должна наблюдаться взаимосвязь между выраженной тепловой плотностью (на единицу объема) и уровнем потока тепловых нейтронов в равновесном состоянии. Исходными композициями интересующей нас среды могут быть природный состав свинца. При этом нам необходимо знать, сколько времени требуется для достижения состояния равновесия. Этот период, как показано ниже, зависит от нейтронного потока.

Программный комплекс "IBUS"

Если речь идёт о нескольких изотопах, то, применяя уравнение Бэйтмана (1), для каждого

изотопа можно построить систему дифференциальных уравнений и решить задачу аналитическим методом. Но когда число изотопов достигает сотен или тысячи, или же даже когда число возможных продуктов реакции могут достигать сотен или тысячи, то в этом случае процесс построения систем дифференциальных уравнений становится весьма затруднительным, не говоря уже о решении такой системы уравнений.

Для устранения этих трудностей нами был разработан программный комплекс "IBUS" (Isotopes Burn Up Software). Программный комплекс "IBUS" имеет очень удобный интерфейс (Рисунок 1) и предоставляет возможность работать со всеми изотопами, которые определены в базе данных ENDF/BVII.1.

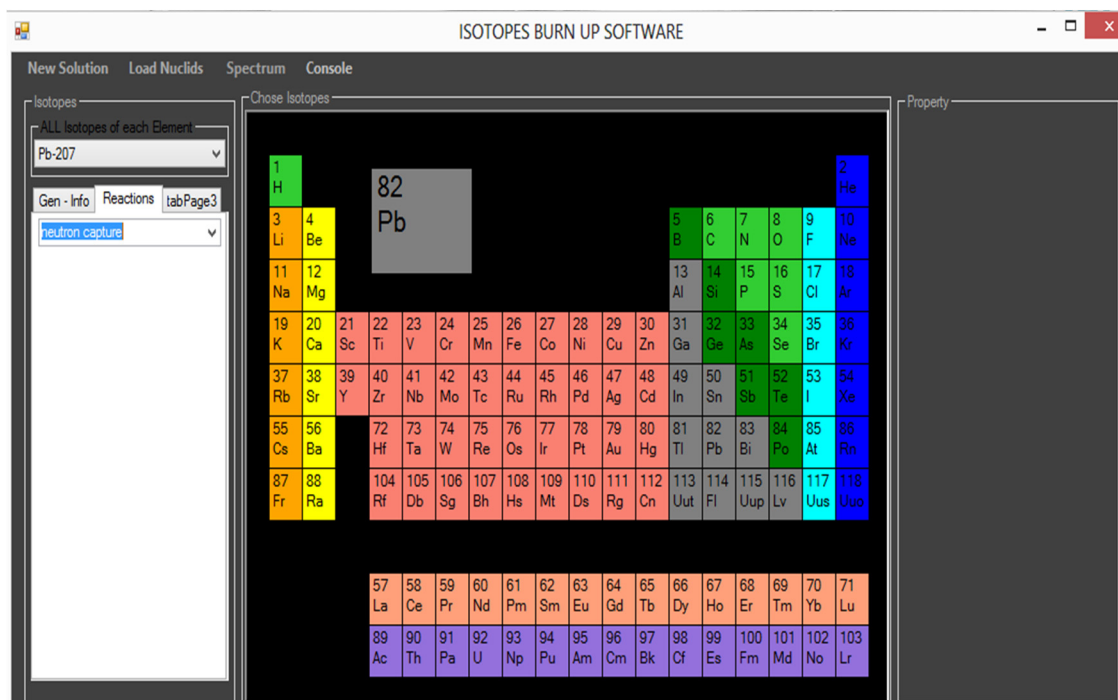


Рисунок 1 – интерфейс программного комплекса "IBUS"

Данный программный комплекс предназначен для решения задач по определению изменений концентраций изотопов, для определения продуктов реакции под действием тепловых нейтронов. Для этого программный комплекс

"IBUS" считывает данные из файлов ENDF/BVII.1. о всех существующих изотопах в базе данных и в автоматическом режиме строит матрицу сжигания (burn up matrix) для всех изотопов (2).

$$A = \begin{pmatrix} -\lambda_1 - F\sigma_1 & \lambda_2 P_{2 \rightarrow 1} + Q_{2 \rightarrow 1} F\sigma_{2 \rightarrow 1} & \dots & \lambda_n P_{n \rightarrow 1} + Q_{n \rightarrow 1} F\sigma_{n \rightarrow 1} \\ \lambda_1 P_{1 \rightarrow 2} + Q_{1 \rightarrow 2} F\sigma_{1 \rightarrow 2} & -\lambda_2 - F\sigma_2 & \dots & \lambda_n P_{n \rightarrow 2} + Q_{n \rightarrow 2} F\sigma_{n \rightarrow 2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \lambda_1 P_{1 \rightarrow n} + Q_{1 \rightarrow n} F\sigma_{1 \rightarrow n} & \lambda_2 P_{2 \rightarrow n} + Q_{2 \rightarrow n} F\sigma_{2 \rightarrow n} & \dots & -\lambda_n - F\sigma_n \end{pmatrix} \quad (6)$$

После того как матрица сжигания построена, программа, пользуясь матричным равенством (4) и, используя метод PADE, находит матрицу, элементы которого представляют концентрацию изотопов после облучения и концентрацию наработанных изотопов [20-25].

Также программный комплекс предоставляет возможность вычислять количества тепла выделяемой при облучение нейтронами.

Расчет тепла, испускаемый каталитическим составом

В работе [1] были найдены и изучены наиболее подходящие элементы для каталитического состава и вычислены концентрации элементов для этого состава. В качестве входных параметров для программного комплекса "IBUS" были переданы начальные концентрации изотопов образующий нейтронный катализ, процентное соотношение которых приведено в таблице 1.

Таблица 1 – Процентное соотношение изотопов

Изотоп	процентное содержание изотопов
Po ²¹⁰	1,6 %
Pb ²⁰⁶	0,0435 10 ⁻⁷ %
Po ²¹¹	0,0126 10 ⁻⁷ %
Pb ²⁰⁷	0,0317 %
Pb ²⁰⁸	97,53 %
Pb ²⁰⁹	0,01898 %
Bi ²¹⁰	0,673 %
Bi ²⁰⁹	0,07 %

После внесения входных параметров в программный комплекс "IBUS", программа запускает расчет разных значений нейтронного потока, результаты которого приведены на рисунке 2.

На рисунке 3 представлена зависимость количество тепла, выделяемое каталитическим составом для различных значений потоков нейтрона в зависимости от времени. Как видно из рисунка 3, количество тепла выделяемой каталитическим составом растет линейным образом в зависимости от нейтронного потока.

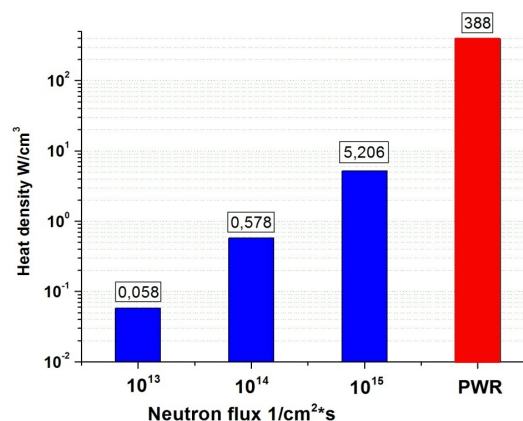


Рисунок 2 – Количество тепла, выделяемой каталитическим составом для различных значений потоков нейтрона

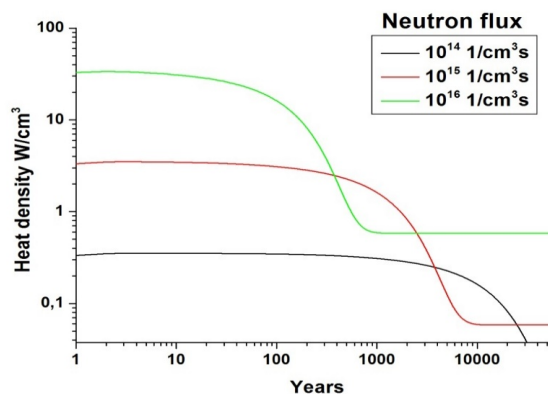


Рисунок 3 – Количество тепла, выделяемое каталитическим составом для различных значений потоков нейтрона в зависимости от времени

Заключение

Таким образом, результаты расчетов показали, что даже при потоке нейтронов 10¹⁵ количества тепла, выделяемое каталитическим составом почти в 75 раз меньше тепла, выделяемого в реакторах типа PWR. При потоке нейтронов 10¹⁶ тепло, выделяемое в реакторах типа PWR больше в 20 раз. Дальнейшее увеличение нейтронного потока технический не представляется возможным на данный момент.

Литература

- 1 Абишев М., Хасанов М., Кенжебаев Н. О циклической реакции с участием тепловых нейтронов // Вестник НАН РК. – 2013. – № 6. – С. 15-19.
- 2 Кунаков С., Кенжебаев Н. Моделирование накопление трития в бериллиевом материале при нейтронном облучении // Известия НАН РК. – 2014. – №2. – С. 82-86.
- 3 Burbidge E., Burbidge G.R., Fowler W.A., Hoyle F. Synthesis of the Elements in Stars // Reviews of Modern Physics – 1957. – Vol.29. – №4. – С.547.
- 4 Хаустов И.Н., Тихомиров С.Т., Бейзин С.Д. Функция возбуждения и выходы изотопов висмута и свинца в реакции ^{203}Tl с ионами ^3He // Известия АН КазССР. – 1990. – №2. – С.3.
- 5 Bateman H. Solution of a System of Differential Equations Occurring in the Theory of Radio-active Transformations // Proc. Cambridge Phil. Soc. IS. – 1910. – №423. – С.12-19.
- 6 Otto Schwerer. EXFOR Formats Description for Users. – IAEA Nuclear Data Section, 2014. – 3 p.
- 7 Oppenheimer J. R and Volkoff G. M. On massive neutron cores // Phys. Rev. - 1939. - Vol. 55(4). - P.374-381.
- 8 Kepler S.O., Romero A.D., Pelisoli I., Ourique G. White Dwarf Stars // International Journal of Modern Physics: Conference Series. – 2017. – Vol. 45. – P.1760023 (23).
- 9 Kepler S.O., Koester D., Ourique G. A white dwarf with an oxygen atmosphere // Science. – 2016. – Vol. 352, – Iss. 6281. – P. 67-69.
- 10 Schutz B.F. A first course in general relativity. – Cambridge: Cambridge University Press, 1985. –376 p.
- 11 Misner C.W., Thorne K.S. and Wheeler J.A. Gravitation. – San Francisco: W.H. Freeman and Co., 1973. –1215 p.
- 12 Tolman R. C. Static solutions of Einstein's field equations for spheres of fluid // Phys. Rev. – 1939. – Vol. 55 (4). – P. 364-373.
- 13 Oppenheimer J.R. and Volkoff G. M. On massive neutron cores // Phys. Rev. – 1939. – Vol. 55 (4). – P. 374-381.
- 14 Зельдович Я.Б., Новиков И.Д. Теория тяготения и эволюция звезд. – М.: Наука, 1971. – 484 с.
- 15 Зельдович Я.Б., Блинные С.И., Шакура Н.И. Физические основы строения и эволюции звезд. – М.: Издательство МГУ, 1981. – 160 с.
- 16 Бошкаев К.А., Жами Б.А., Калымова Ж.А., Балгимбеков Г.Ш., Таукенова А.С., Бришева Ж.Н., Койшыбаев Н. Теоретическое определение основных параметров белых карликов // Известия НАН РК. Серия физ.-мат. – 2016. – Т. 3 (307). – С.49-60.
- 17 Boshkayev K., Quevedo H. and Zhami B. I-Love-Q relations for white dwarf stars // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. – 2017. – Vol. 464. – Iss. 4. – P. 4349-4359.
- 18 Boshkayev K., Rueda J.A., Zhami B., KalymovaZh., Balyymbekov G., International Journal of Modern Physics: Conference Series. – 2016. – Vol. 42. – P. 1660129 (7).
- 19 Бошкаев К.А., Жами Б.А., Калымова Ж.А., Бришева Ж.Н. Статические белые карлики с учетом эффектов конечных температур и общей теории относительности // Известия НАН РК. Серия физ.-мат. – 2017. – Т. 6 (316). – С. 27-38.
- 20 De Carvalho S.M., Rotondo M., Rueda J.A. and Ruffini R. Relativistic Feynman-Metropolis-Teller treatment at finite temperatures // Phys. Rev. C – 2014. – Vol. 89. – P. 015801 (10).
- 21 Fort E., Thuong T.Q., and Lafond D. В нейтронных данных структурных материалов для быстрых реакторов. K.H. Bockhoff – Oxford: Pergamon Press, 1977. - С.190.
- 22 Hond L.D., Beer H., and Kappeler F. // Proc. 22 Colloque Int. d' Astrophysique, Liege. – 1977. – С.79.
- 23 Cameron A.G.W. Abundances of the elements in the solar system // Space Sci. Rev. – 1973. – Vol. 15. – P.121-146; Cameron A.G.W. Elemental and nuclidic abundances in the solar system // in Essays in Nuclear Astrophysics, eds. C. A. Barnes, D. D. Clayton, and D. N. Schramm. – Cambridge: Cambridge University Press, 1982. – P.23-43
- 24 Clayton D.D. Spectrum of carbonaceous-chondrite fission xenon // Geochim. Cosmochim. Acta. – 1976. – Vol.40. – P. 563-565; Clayton D.D. Cosmic radioactivity: a gamma-ray search for the origins of atomic nuclei // in Essays in Nuclear Astrophysics, eds. C. A. Barnes, D. D. Clayton, and D. N. Schramm. – Cambridge: Cambridge University Press, 1982. – P.401-426.
- 25 Clayton D.D., Fowler W.A., Hull T.E., and Zimmerman B.A. // Ann. Phys. – 1961. – Vol.12. – P.331.

References

- 1 M. Abishev, M. Hasanov, and N. Kenzhebaev, Journal of National Academy of Sciences of Kazakhstan, 6, 12-16, (2013). (in Russ).
- 2 S. Kunakov and N. Kenzhebaev. Proceedings of the National Academy of Sciences of Kazakhstan, 2, 82-86, (2014). (in Russ).
- 3 E. Burbidge, G.R. Burbidge, W.A. Fowler, and F. Hoyle, Reviews of Modern Physics, 4, 547-554, (1957).
- 4 I.N. Khaustov, S.V. Tikhomirov, and S.D. Baisin, Proceedings of the Academy of Sciences of the Kazakh SSR, 2, 3-8, (1990). (in Russ).
- 5 H. Bateman, Proc. Cambridge Phil. Soc. IS, 423, 12-19, (1910).
- 6 O. Schwerer, IAEA Nuclear Data Section, 3, 345, (2014).
- 7 J.R. Oppenheimer and G.M. Volkoff, Phys. Rev., 55(4), 374-381, (1939).
- 8 S.O. Kepler, A.D. Romero, I. Pelisoli and G. Ourique, International Journal of Modern Physics: Conference Series, 45, 1760023, (2017).
- 9 S.O. Kepler, D. Koester, and G. Ourique, Science, 352 (6281), 67, (2016).

- 10 B.F. Schutz, *A first course in general relativity* (Cambridge University Press, Cambridge, 1985).
- 11 C.W. Misner, K.S. Thorne and J.A. Wheeler, *Gravitation*, (W.H. Freeman and Co., San Francisco, 1973).
- 12 R.C. Tolman, *Phys. Rev.*, 55(4), 364, (1939).
- 13 J.R. Oppenheimer and G.M. Volkoff, *Phys. Rev.*, 55(4), 374, (1939).
- 14 Ya. B. Zel'dovich and I.D. Novikov, *Teoriya tyagoteniya I evoliutsii zvezd* (Moskva: Nauka, 1971), 484 p. (in Russ).
- 15 Ya.B. Zel'dovich, S.I. Blinnikov, and N.I. Shakura, *Fizicheskie osnovy stroeniya I evoliutsii zvezd*, (Moskva: Izdatel'stvo MGU, 1981), 160 p.
- 16 K.A. Boshkayev, B.A. Zhami, Zh.A. Kalymova, G.Sh. Balgimbekov, A.S. Taukenova, Zh. N. Brisheva and N. Koyshybaev, *News of NAS RK, physico-mathematical series*, 3 (307), 49 (2016).
- 17 K. Boshkayev, H. Quevedo and B. Zhami, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 464 (4), 4349 (2017).
- 18 K. Boshkayev, J.A. Rueda, B. Zhami, Zh. Kalymova and G. Balgymbekov, *International Journal of Modern Physics: Conference Series* 42, 1660129, (2016).
- 19 K.A. Boshkayev, B.A. Zhami, Zh.A. Kalymova and Zh. N. Brisheva, *News of NAS RK, physico-mathematical series*, 6 (316), 27, (2017).
- 20 S.M. de Carvalho, M. Rotondo, J.A. Rueda and R. Ruffini, *Phys. Rev. C.*, 89, 015801 (2014).
- 21 Fort, E., Thuong, T.Q., and Lafond, D., in *Neutron Data of Structural Materials for Fast Reactors*, ed. K. H. Bockhoff (Oxford: Pergamon Press, 1977), p. 190.
- 22 Hond, L. D., Beer, H., and Kappeler, F., *Proc. 22 Colloque Int. d' Astrophysique, Liege*, p. 79. (1979).
- 23 A.G.W. Cameron, *Space Sci. Rev.*, 15, 121-146 (1973); A.G.W. Cameron, in *Essays in Nuclear Astrophysics*, eds. C. A. Barnes, D. D. Clayton, and D. N. Schramm (Cambridge: Cambridge University Press, 1982), pp.23-43.
- 24 D.D. Clayton, *Geochim. Cosmochim. Acta*, 40, 563-565, (1976); D.D. Clayton, in *Essays in Nuclear Astrophysics*, eds. C. A. Barnes, D. D. Clayton, and D. N. Schramm (Cambridge: Cambridge University Press, 1982), pp.401-426.
- 25 D.D. Clayton, W.A. Fowler, T.E. Hull, and Zimmerman B.A., *Ann. Phys.*, 12, 331 (1961).