

М 85501

МИНИСТЕРСТВО РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
по науке, высшей школе и технической политике
Московский ордена Ленина, ордена Октябрьской Революции и
ордена Трудового Красного Знамени Государственный
технический университет им. Н.Э.Баумана



На правах рукописи

ВАГИН Вячеслав Петрович

УДК 519.854.6:

539.1.043:62-758.3

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОЗДЕЙСТВИЯ ПРОТОНОВ ВЫСОКИХ
ЭНЕРГИЙ НА КВАЗИУПОРЯДОЧЕННЫЕ И КОМПОЗИЦИОННЫЕ
МАТЕРИАЛЫ.

05.13.16.- Применение вычислительной техники, математи-
ческого моделирования и математических методов
в научных исследованиях.

01.04.20.- Физика пучков заряженных частиц и ускоритель-
ная техника.

Автореферат
диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Москва 1992 г.

Работа выполнена в Научно-производственном объединении
" Композит ".

Научный руководитель - доктор технических наук,
профессор В.В.Савичев

Научный консультант - доктор физико-математи-
ческих наук
М.Ф.Иванов

Официальные оппоненты - доктор физико-математи-
ческих наук, профессор
В.В.Толмачев,
доктор физико-математи-

Ведущая организ

Защита состоится " 1
на заседании специализи
Н.Э.Баумана по адрес
ул. д. 5.

С диссертацие
МГТУ им. Н.Э.

Автореферат разослан "

M8550-1

Учебный секретарь
специализированного с
к.т.н., доцент

Зак. 38 Тираж 100
Типография МГТУ им.

об

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность. В последние десятилетия область применения потоков заряженных частиц стали не только исследования в ядерной и атомной физике, в физике твердого тела, но и такие технические области, как ядерная энергетика, ускорительная техника, электронное приборостроение, медицина и т. п.

Большой интерес представляют задачи радиационной защиты от потоков заряженных частиц высокой энергии пилотируемых и автоматических космических аппаратов, а также вопросы защиты ядерно-технических наземных установок. Интенсивно разрабатываемые методы электронной и протонной томографии, получения редких изотопов, методы регистрации быстротекущих процессов и лучевой терапии в онкологии это далеко не полный перечень использования частиц высокой энергии для решения прикладных задач.

Применение численного моделирования для решения большинства из перечисленных задач является весьма актуальным по многим причинам. Сложность и высокая стоимость экспериментальных исследований, радиационная опасность экспериментов, а также принципиальная невозможность в некоторых случаях получения экспериментальным путем детальной информации о протекающих процессах делает математическое моделирование серьезным и эффективным инструментом в радиационных исследованиях. Кроме того, значительные успехи теоретической атомной и ядерной физики и развитие вычислительной техники создали необходимую основу для моделирования широкого класса задач, особенно в области прохождения заряженных частиц высокой энергии через композиционные и микроструктурированные преграды, а также в исследовании сопутствующих радиационных эффектов. Способы численного моделирования прохождения заряженных частиц в различных средах достаточно хорошо развиты и включают в себя как детерминистские методы решения уравнения переноса частиц, так и статистические методы Монте-Карло. Несмотря на большие вычислительные объемы, мно-

1

1055501

ИД М И У ИМ П. В. Вагина



1085501

Вагин В.П. Численное моде

гочисленные модификации метода Монте-Карло имеют ряд преимуществ перед другими нестатистическими методами решения задач переноса частиц. Они обладают значительной гибкостью к включению в модель дополнительных видов взаимодействия, учету структурных или иных особенностей материала мишени, а также имеют большую свободу в выборе геометрий исследуемых преград. Несмотря на широкое распространение разнообразных вычислительных методик в этой области, в настоящее время существует большое количество задач радиационной физики, для решения которых применение нетрадиционных моделей, основанных на методах Монте-Карло весьма актуально.

Целью настоящей работы являлось создание на основе методов Монте-Карло оригинальных вычислительных методик, позволяющих моделировать и исследовать прохождение протонов высоких энергий в квазиупорядоченных на микроструктурном уровне, протяженных преградах, а также радиационно-термические эффекты и вторичные нейтронные поля, возникающие в композиционных материалах при воздействии на них протонов высоких энергий.

Научная новизна и практическая значимость. В результате проведенных работ создан комплекс физико-математических моделей и расчетных программ, позволяющих решать значительное количество исследовательских и прикладных задач в области радиационной физики и физики радиационной защиты, а также получены следующие новые результаты:

1. В проведенных вычислительных экспериментах на основе разработанных физико-математической модели и алгоритма расчета прохождения протонов высокой энергии через широкий класс квазиупорядоченных структур, обнаружен и подтвержден экспериментально эффект анизотропии прохождения протонов через квазикристаллические преграды.

2. На основе разработанных физико-математической модели и алгоритма расчета ионизационно-термического воздействия на образцы композиционных материалов (КМ) предложена методика оценки вклада радиоллиза в радиационно-термическую

деструкции.

3. На основе разработанных физико-математической модели и алгоритма расчета нуклон-нуклонного каскада предложена методика корректного разделения протонной и нейтронной компонент вторичного излучения, генерируемого в КМ нуклонами высоких энергий.

Апробация работы. Основные результаты работы доложены на: Всесоюзной конференции "Методы численного моделирования многомерных задач математической физики" / г. Арзамас-16, ВНИИЭФ, 1991 г./, на отраслевой конференции молодых ученых и специалистов "Разработка и создание новых конструкционных материалов" / г. Калининград М.О., ЦНИИМВ, 1987 г./, на научных семинарах отдела "Термомеханика" НИИПМ МГТУ им. Н.Э. Баумана / 1990, 1991 гг./ на семинарах специализированного совета Д.053.15.12 МГТУ им. Н.Э. Баумана / 1991 г./ По результатам диссертации опубликовано 5 печатных (из них 3 закрытых) и 6 рукописных работ, получено одно авторское свидетельство.

Структура и объем диссертации.

Диссертация состоит из введения, трех глав и заключения. Диссертация изложена на 116 страницах машинописного текста, содержит 30 рисунков на 33 страницах, из них 3 таблицы, 108 наименований используемой литературы.

Содержание работы.

Во введении рассмотрены основные задачи диссертационной работы, отмечены те вопросы, которые обусловили её новизну и актуальность. Выделены положения выносимые на защиту, дано краткое описание структуры и содержания работы.

Первая глава носит обзорный характер. В ней проведен анализ теоретических основ физики взаимодействия заряженных частиц высокой энергии с веществом, проведен анализ методов математического моделирования в этой области, а также выбраны

перспективные направления исследования радиационных эффектов, положенные в основу диссертационной работы.

Из основных аспектов взаимодействия заряженных частиц с веществом рассмотрены: теория энергетических потерь быстрых частиц в веществе, теории многократного кулоновского рассеяния, развитие ядерно-электромагнитного каскада в веществе, ориентационные эффекты при прохождении заряженных частиц в кристаллах, а также процессы радиационной и термической деструкции полимеров под действием пучка заряженных частиц.

В главе дан также обзор методов математического моделирования задач переноса заряженных частиц высокой энергии в гетерогенных средах, включающих в себя, как детерминистские способы решения уравнения переноса, так и разнообразные методы Монте-Карло. Детально рассмотрены такие преимущества методов Монте-Карло, как возможность включения или исключения различных видов взаимодействия, достаточная гибкость в геометрии исследуемых преград, а также возможность учета микроструктурных особенностей строения материала-мишени.

На основе анализа литературных данных выбраны следующие задачи математического моделирования, решению которых посвящена данная работа.

Путем проведения вычислительных и физических экспериментов:

1. Исследовать влияние микроструктурных особенностей поликристаллических ориентированных материалов (квазикристаллов) на прохождение в них заряженных частиц высоких энергий.
2. Исследовать влияние радиационных эффектов на процесс ионизационно-термической деструкции композиционных материалов с полимерными включениями при воздействии заряженных частиц высоких энергий.
3. Исследовать спектральные характеристики вторичного нейтронного излучения, генерируемого в композиционных преградах протонами высоких энергий.

Вторая глава работы посвящена численному моделированию прохождения протонов высокой энергии (до 100 МэВ) через квазикристаллические (квазиупорядоченные) и композиционные

материалы без учета ядерных реакций. Для реализации этой задачи была разработана физико-математическая модель и вычислительный алгоритм на основе двухуровневой модификации метода Монте-Карло.

Распространение протонов высоких энергий рассматривалось в структуре поликристаллического материала, отдельные кристаллиты которого имеют средние характерные размеры $\bar{\ell}_x, \bar{\ell}_y, \bar{\ell}_z$, сориентированы относительно плоскости поверхности макрообразца с соответствующей дисперсией угла разориентации и имеющие случайное положение в самой плоскости ориентации. При этом $|\bar{\ell}_z| \leq 100-500 \text{ \AA}$, а направление $\bar{\ell}_z$ совпадает с основной кристаллографической осью решки отдельного кристаллита.

На первом (микроскопическом) уровне моделирования методом Монте-Карло в модифицированной схеме индивидуальных столкновений вычислялась функция анизотропии прохождения протонов высокой энергии через квазикристаллическую структуру $R_{sk}(\theta, E)$ в зависимости от направления распространения заряженной частицы в квазикристалле (угол θ к нормали поверхности мишени) и E - энергии частицы. $R_{sk}(\theta, E)$ представляла собой усредненный по всем возможным столкновениям свободный пробег частиц в исследуемой структуре.

$$R_{sk}(\theta, E) = \frac{1}{R_{sA}(E)N} \sum_{i=1}^N R_{sk_i}(\theta, E)$$

(I)

$$R_{sA}(E) = \frac{1}{N_0 \sigma_{эф}(E)}$$

, где $\sigma_{эф}(E)$

- полное эффективное сечение взаимодействия частиц с атомами структуры в приближении Томаса-Ферми, N_0 - объемная концентрация атомов в квазикристалле, $R_{sk_i}(\theta, E)$ - свободный пробег (пробег между двумя последовательными столкновениями) в трехмерной структуре квазикристалла, заданной с помощью ячейки трансформации и учитывающей взаиморасположение отдельных кристаллитов.

Принимая во внимание случайное расположение кристаллитов в плоскости ориентации и малость величины $|\ell_2| \sim 100 \text{ \AA}$, полагалось, что на расстояниях распространения частиц в квазикристалле по направлению $\sim \ell_2 \sim 1-100 \text{ мкм}$ не происходит поляризации пучка частиц по азимутальным углам и прицельным параметрам.

Повтому моделирование $R_{sk}(\theta, E)$ проводилось путем построения прямолинейного участка траектории частицы в структуре между двумя столкновениями, при чем начальная точка траектории определялась с учетом различного расположения атомов в кристаллите и равномерно распределенного прицельного параметра в предыдущем столкновении. При этом направление распространения частицы задавалось углом θ и равномерно-распределенным азимутальным углом. Учитывались также разориентация кристаллитов и их случайное взаиморасположение.

Усреднение проводилось с общей статистикой испытаний ~ 200000 для фиксированных угла θ и энергии протона E . Статистическая ошибка при этом не превышала 7 %.

Таким образом полученная функция анизотропии $R_{sk}(\theta, E)$ которая имеет вид (рис. 1) и характеризует эффективную плотность взаимодействия частиц с атомами структуры в определенном направлении распространения, использовалась в дальнейшем для моделирования прохождения протонов высокой энергии через протяженные слои квазикристалла.

Для этого на втором (макроскопическом) уровне моделирования методом Монте-Карло в схеме укрупненных столкновений после каждого узла траектории определялась эффективная концентрация материала:

$$N_{эф}(\theta, E) = N_0 R_{sk}(\theta, E)$$

(2),

учитывающая анизотропные свойства структуры. Таким образом в схеме укрупненных столкновений учитывались: многократное рассеяние протонов, флуктуации полных энергетических потерь частиц в среде, а также особенности микроструктуры квазикристалла.

Алгоритм схемы укрупненных столкновений представлял собой

реализацию метода Монте-Карло, аналогичную схемам, разработанным в работах Бергера, Аккермана и др. Кроме того в предложенной нами модели учитывались поправки к полной тормозной способности протонов на молекулярносвязанном водороде, в случае композитов с водородонасыщенными полимерами, а также учитывались микроструктурные особенности в случае квазикристаллических материалов.

В результате проведенных вычислительных экспериментов было обнаружено существование значительной анизотропии прохождения протонов через квазикристаллическую структуру графита (рис 1). В последствии эффект был подтвержден нами экспериментально. На рис. 2 показано хорошее количественное согласие экспериментальных и расчетных значений интенсивности рассеянного квазикристаллической мишенью пучка протонов с энергией 30 МэВ.

Третья глава посвящена исследованию с помощью методов математического моделирования вклада радиационных эффектов (радиолиза) в процесс ионизационно-термической деструкции композиционных материалов (КМ) с полимерными включениями, а также исследованию спектров вторичных нейтронов, генерируемых протонами с энергией до 200 МэВ в композиционных преградах.

Для того, чтобы оценить вклад радиолиза в процесс деструкции КМ с полимерными включениями при воздействии интенсивных пучков протонов высокой энергии, моделировалась ситуация, в которой тонкие цилиндрические образцы КМ ($d \leq 1$ см., $l \approx 1,5-2$ см.) облучались в вакууме с торцевой стороны. Выбранная таким образом геометрия облучений позволила практически исключить продольную диффузию продуктов разложения в образце, т. к. они истекали в вакуум через боковую его поверхность и овести задачу к одномерной:

$$\rho(m_c) c(T, \xi) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} (\lambda(T, \xi)) \frac{\partial T}{\partial x} + Q(x, m_c) \quad (3)$$

$$\rho(m_c) = \rho_n + \frac{m_c m_o}{V_k}; \quad \xi = \frac{\rho(m_c) - \rho_o}{\rho_o - \rho_k}$$

$$Q = Q_p - Q_{\text{пир}} - \Delta Q \quad (4)$$

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial x} = \varepsilon \sigma T^4 \Big|_{x=0} ; \quad \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=l} = -\varepsilon \sigma T^4$$

$$T(x, 0) = T_0(x)$$

(5)

$$\frac{dm_c}{dt} = -\kappa_0 e^{-E/RT} (m_c - m_\infty)^n - 2(1 - m_\infty) \cdot b \cdot$$

$$\times \frac{(T - T_0)}{(T_n - T_0)^2} e^{-\left(\frac{T - T_0}{T_n - T_0}\right)^2}; \quad m_c = m_0 \Big|_{t=0} \quad (6)$$

Где m_c - текущая масса смолы, приведенная к единице, ρ_0, ρ_∞ - начальная и конечная плотности КМ, ρ_n - плотность неизменяющегося наполнителя, λ, ε - нестационарные теплофизические коэффициенты, V_κ - объём композита, ε - степень черноты, σ - коэффициент Стефана-Больцмана, T_0, T_n - температурные параметры, E - энергия активации, n - порядок химической реакции, R - универсальная газовая постоянная, κ - аррениусовский множитель, b - темп нагрева, Q_p - энерго-вклад протонов, $Q_{пир}$ - энергия, ушедшая на деструкцию овязующего, ΔQ - энергия, унесенная вместе с продуктами деструкции в вакуум, m_∞ - масса коксового остатка смолы.

Решение задачи (3-6) проводилось с помощью метода конечных разностей (явная схема), на каждом временном шаге которой методом Монте-Карло вычислялось изменяющееся энерговыделение протонов, а также методом Рунге-Кутты 4-го порядка решалось феноменологическое уравнение термической деструкции Шлэнского (6).

Сопоставляя расчетные и экспериментальные значения температур для стеклопластиков на основе фенол-формальдегидной смолы (рис. 3) было обнаружено их хорошее согласие, что дает право сделать вывод о малосущественности радиолиза по сравнению с чисто термической деструкцией, описываемой уравнением (6) при интенсивностях пучка $10^{13}-10^{14}$ ч/см² и энергией протонов до 50 МэВ. Т.к. значения температур в реперных точках образца весьма чувствительны к виду уравнения деструкции, в случае различия экспериментальных и расчетных значений температур, существует возможность параметризации уравнения (6) и получения макроскопического уравнения деструкции с радиационными

поправками.

Моделирование нуклон-нуклонной составляющей ядерного каскада в композиционных преградах с толщинами меньше ионизационного пробега в них первичных протонов с энергией до 200 МэВ основывалось на разделении ядерных процессов и процессов кулоновского взаимодействия как существенно разнoverоятных. При этом кулоновское взаимодействие частиц моделировалось с учетом многократного рассеяния и флуктуаций энергетических потерь по методике, описанной в главе 2. Моделирование же нуклон-нуклонной составляющей каскада проводилось по инклюзивной схеме Монте-Карло, рассчитывающей дерево траекторий нуклонов без учета транспорта γ - e^- каскада и более тяжелых чем нуклоны фрагментов ядерных реакций (α, d, t и т.п.).

Основными процессами, учтенными в модели для энергий нуклонов до 200 МэВ являлись: упругое и квазиупругое рассеяние, неупругие реакции через составное ядро (образование испарительных частиц), а также каскадные реакции. При моделировании указанных видов взаимодействия использовались: система феноменологических формул ядерных сечений Сычёва, комплекс константного обеспечения АРОМАКО-2Р, а также модули программного комплекса MARS. Спектральные характеристики нуклонов, провзаимодействовавших в преграде ядерным способом, аддитивно входили в суммарные спектры с весом равным полной вероятности ядерного взаимодействия частиц в ней.

В результате проведения вычислительных экспериментов и физических измерений пространственно-энергетических характеристик вторичных нейтронов методами активационной спектрометрии было обнаружено хорошее согласие расчета и эксперимента в области энергии нейтронов до 30-40 МэВ. Однако в более высокоэнергетической области наблюдалось завышение экспериментальных значений, объясняемое вкладом рассеянных мишенью первичных протонов. Таким образом было проведено тестирование предложенной модели, а также получены методические результаты по определению границ корректного использования экспериментальных активационных методик для измерения спектральных характеристик вторичных нейтронов.

генерируемых протонами высокой энергии в композиционных преградах незначительных толщин. (рис.4.)

- В заключении сформулированы основные результаты работы:
1. На основе модифицированных методов Монте-Карло разработана физико-математическая модель и её численная реализация, позволяющая рассчитывать прохождение протонов с энергией до 100 МэВ через протяженные квазикристаллические преграды с учетом их микроструктурных особенностей.
 2. В результате проведенных вычислительных экспериментов впервые обнаружен и экспериментально подтвержден эффект анизотропии прохождения протонов высокой энергии в квазикристаллических структурах графита, исследованы основные количественные зависимости обнаруженного эффекта.
 3. Разработана физико-математическая модель и алгоритм расчета радиационно-термического отжига образцов композиционного материала пучком протонов с энергией до 50 МэВ и интенсивностью до 10^{14} ч/см²·с с учетом деструкции полимерных включений.
 4. Путем проведения вычислительных и физических экспериментов исследован вклад радиоллиза в процесс нестационарной радиационно-термической деструкции стеклопластика на основе фенол-формальдегидной смолы.
 5. Разработана физико-математическая модель и алгоритм расчета спектральных характеристик вторичных нейтронов, генерируемых протонами с энергией до 200 МэВ в композиционных преградах. Путем проведения численных и физических экспериментов исследованы методические возможности экспериментального разделения протонной и нейтронной составляющих излучения, а также установлена адекватность предложенной модели.

По теме диссертации опубликованы
следующие работы:

1. Вагин В.П., Хромых А.В. Расчет энерговыделения и температурных полей в конструкционных материалах при воздействии протонов высоких энергий.// Труды МГТУ.- 1990.- № 542. - Термомеханика -С. 115-123.

2. Вагин В.П., Савичев В.В. Моделирование температурных полей в образцах стеклопластика при воздействии пучка протонов с энергией 30 МэВ. // Вестник МГТУ. Серия Машиностроение. -1991.- № 2. -С.36-41.

3. Вагин В.П., Жаховский В.В., Иванов М.Ф., Савичев В.В. Исследование температурных полей в разлагающемся композиционном материале при воздействии интенсивного пучка протонов с энергией 30 МэВ.// ВАНТ, Сер. Математическое моделирование физических процессов.- 1992. - вып. 2. - С.51-54.

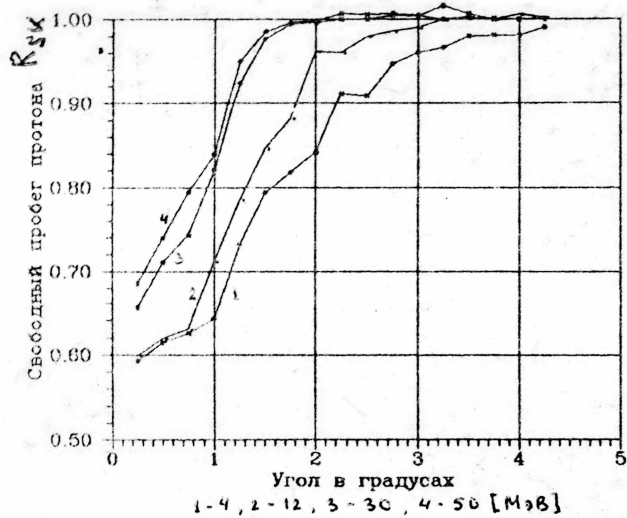
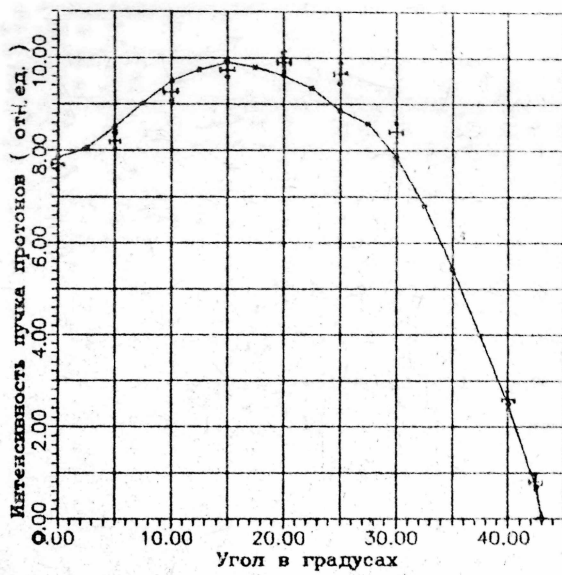


Рис. 1



— — расчет + — эксперимент

Рис. 2

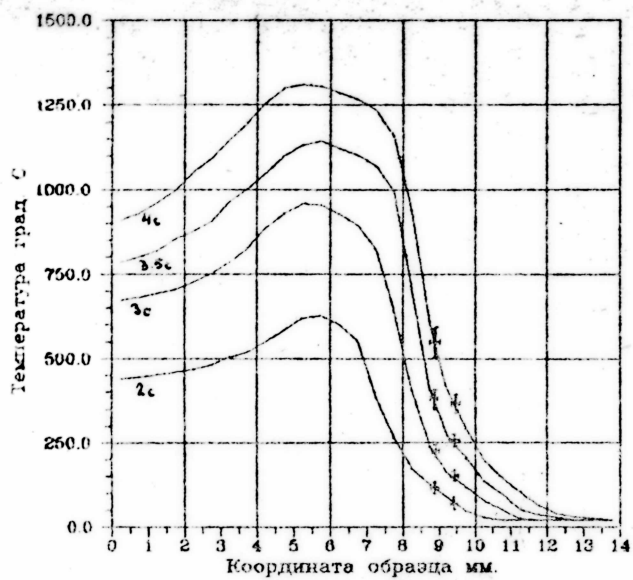
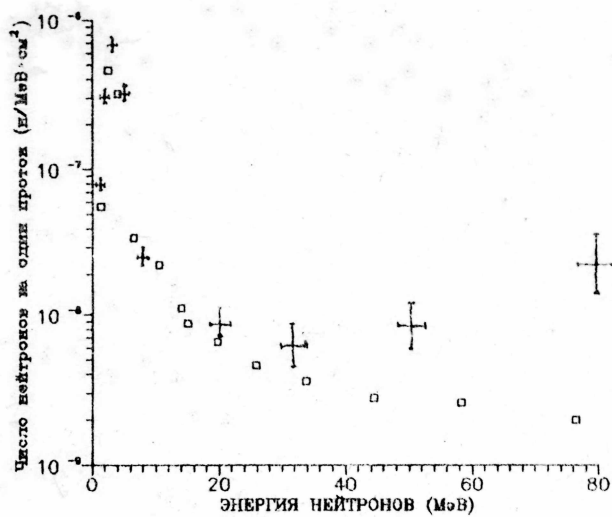


Рис. 3



□ — расчет + — эксперимент

Рис. 4