

ISSN 0367-5203

ВОПРОСЫ
АТОМНОЙ
НАУКИ И
ТЕХНИКИ

**Российский
федеральный
ядерный
центр –
ВНИИЭФ**

СЕРИЯ

**Математическое моделирование
физических процессов**

2014

ВЫПУСК 1

ФГУП
"РОССИЙСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ
ЯДЕРНЫЙ ЦЕНТР —
ВНИИЭФ"

ВОПРОСЫ
АТОМНОЙ НАУКИ
И ТЕХНИКИ

СЕРИЯ:

Математическое моделирование
физических процессов

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ СБОРНИК

ВЫПУСК 1

Издается с 1978 г.

Саров — 2014

Главный редактор

Шагалиев Рашит Мирзагалиевич, доктор физ.-мат. наук, снс (РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров)

Заместители главного редактора:

Бондаренко Юрий Александрович, кандидат физ.-мат. наук, снс (РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров),

Тишкин Владимир Федорович, доктор физ.-мат. наук, профессор (ИММ РАН, г. Москва)

Ответственный секретарь

Соколовская Елена Валентиновна (РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров)

Члены редколлегии:

Бартенев Юрий Германович, доктор физ.-мат. наук, мнс (РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров),

Быков Александр Николаевич, кандидат физ.-мат. наук (РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров),

Залялов Наиль Надырович, кандидат физ.-мат. наук (РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров),

Зубов Анатолий Дмитриевич, доктор физ.-мат. наук, снс (РФЯЦ-ВНИИТФ, г. Снежинск),

Иванов Николай Владимирович, кандидат физ.-мат. наук, мнс (РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров),

Ковалев Валерий Леонидович, доктор физ.-мат. наук, профессор

(МГУ им. М. В. Ломоносова, г. Москва),

Козманов Михаил Юрьевич, доктор физ.-мат. наук, снс (РФЯЦ-ВНИИТФ, г. Снежинск),

Соловьев Александр Александрович, доктор физ.-мат. наук, мнс (РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров),

Спиридонов Валентин Федорович, доктор физ.-мат. наук, мнс (РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров),

Холостов Алексей Александрович (РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров),

Чекалин Анатолий Николаевич, доктор физ.-мат. наук, доцент

(НИИММ им. Н. Г. Чеботарева, КФУ, г. Казань),

Чубариков Владимир Николаевич, доктор физ.-мат. наук, профессор

(МГУ им. М. В. Ломоносова, г. Москва)

Адрес редакции: 607188, г. Саров Нижегородской обл.,

пр. Мира, 37, тел. (83130)28406,

e-mail: sokol@vniief.ru

УДК 519.6

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗВИТИЯ РЕГУЛЯРНЫХ ЛОКАЛЬНЫХ ВОЗМУЩЕНИЙ И ТУРБУЛЕНТНОГО ПЕРЕМЕШИВАНИЯ ЗА УДАРНОЙ ВОЛНОЙ РАЗЛИЧНОЙ ИНТЕНСИВНОСТИ

В. П. Стаценко, Ю. В. Янилкин, О. Г. Синькова, О. О. Топорова
(РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров)

С помощью методик ЭГМК и ТРЭК исследуется развитие турбулентного перемешивания и регулярного локального возмущения на границе раздела *воздух*– SF_6 при взаимодействии с распространяющейся в ударной трубе волной с числами Маха в SF_6 от 1,7 до 9,1. Рассмотрены случаи с локальным возмущением в виде треугольной канавки и полуцилиндра. Расчеты проводились с помощью прямого двумерного и трехмерного численного моделирования. Результаты расчетов сравниваются с известными экспериментальными данными.

Ключевые слова: прямое численное моделирование, локальное возмущение, зона турбулентного перемешивания, контактная граница, число Маха.

Введение

Развитие турбулентного перемешивания (ТП) вследствие неустойчивости Рихтмайера–Мешкова на границе раздела двух жидкостей или газов при прохождении через нее ударной волны (УВ) связано со случайными начальными возмущениями на этой границе. В работе [1] численно исследовалось ТП, возникающее на контактной границе (КГ) *воздух*– SF_6 при взаимодействии с распространяющейся в ударной трубе волной с большими числами Маха в воздухе ($M_v > 5$). Расчеты проводились как с помощью k - ε модели турбулентности, так и посредством прямого (без использования каких-либо моделей турбулентности) двумерного (2D) и трехмерного (3D) численного моделирования. Результаты расчетов сравнивались с известными данными опытов [2].

Однако на КГ возможны и регулярные начальные локальные возмущения (ЛВ) с достаточно большими амплитудами и длинами волн. Вопрос об их влиянии на развитие турбулентности, в частности, зоны турбулентного перемешивания (ЗТП), а также об обратном влиянии ЗТП на развитие такого ЛВ представляет определенный интерес, тем более, что ранее были проведены экспериментальные исследования [3].

В данной работе приводятся результаты численного исследования опытов [3] с помощью прямого 2D и 3D моделирования. В дополнение к экспериментальным данным анализируются параметры турбулентности, а также счетные (схемные) эффекты, возникающие при численном моделировании.

1. Постановка расчетов

Начальная геометрия задачи показана на рис. 1 (для 2D расчетов ниже вместо координаты Z используется координата X). Ее верхнюю часть занимает газовая взрывчатая смесь (ГВС, стехиометрическая ацетилен-кислородная смесь), давление P_0 в которой варьируется, что приводит к разным числам Маха УВ в воздухе и в SF_6 и разному полному энерговыделению при фиксированном значении удельного энерговыделения $Q = 72\,700$ (здесь и далее используется следующая система единиц измерения: масса — г; время — мс; длина — см). В некоторых опытах вместо ГВС использовался нагретый воздух. В таблице для каждого расчета указано, какое вещество взять в качестве драйвера. Ниже ГВС располагается воздух, и далее — SF_6 при атмосферном давлении. Температура в началь-

ный момент всюду одинакова, в каждом газе используется УРС идеального газа со своим значением γ (см. рис. 1). В таблице указаны также значения числа Маха УВ в SF_6 ($M_{УВ}$), они примерно равны его значениям в соответствующих опытах.

При расчетах считалось, что зажигание ГВС производится либо в точке $z^* = L_1 + L_2 + L_3$, $x = 2$, $y = 2$ (в двумерном случае $z^* \equiv x^*$), как в эксперименте, либо во всей плоскости z^* . Заметим, что результаты расчетов от способа инициирования практически не зависят. В соответствии с опытами $L_1 = 45$; $L_3 = 30$; $L_2 = 116,9 \div 126,1$ в разных расчетах.

Вблизи центра сечения трубы ($H/2 = 2$) задавались двумерные ЛВ границы *воздух*– SF_6 , показанные на рис. 2; в таблице указан вид возмущения в конкретных расчетах. Кроме того, в слое толщиной в две ячейки на всей КГ вносились случайные возмущения плотности: $\rho = \rho_0 \pm \delta\rho$ ($\delta\rho = 0,1\rho_0$), знак выбирался с помощью генератора случайных чисел. В некоторых расчетах генератор случайных чисел варьировался, но какой именно использовался в том или ином случае, ниже не отмечается, так как результаты расчетов слабо зависят от начального спектра возмущений.

Рассматриваемые течения — двумерные, поэтому основные расчеты проведены по 2D коду.

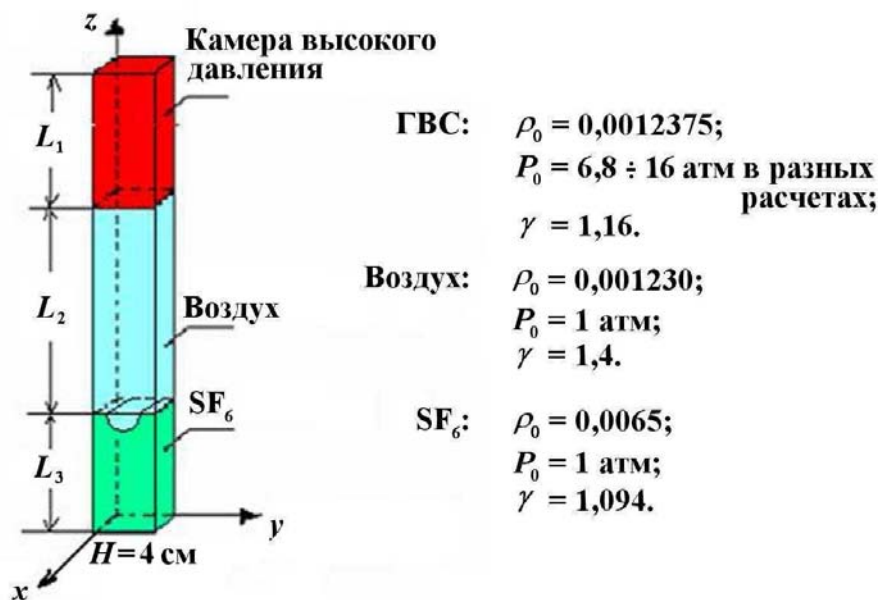


Рис. 1. Геометрия задачи и начальные газодинамические параметры газов

Параметры расчетов

Номер расчета	Размерность расчета	Счетная сетка	Вещество в камере высокого давления	$M_{УВ}$	Вид ЛВ
1	2D	100 × 1 050	ГВС	9,1	канавка
2	2D	100 × 1 050	ГВС	3,7	канавка
3	2D	100 × 1 050	воздух	1,7	канавка
4	3D	100 × 100 × 1 050	ГВС	3,7	канавка
5	3D	200 × 200 × 2 100	ГВС	3,7	канавка
6*	3D	100 × 100 × 1 050	ГВС	3,7	канавка
7	2D	100 × 1 050	ГВС	3,7	полуцилиндр
8	2D	100 × 1 050	ГВС	9,1	полуцилиндр
9	2D	100 × 1 050	воздух	1,7	полуцилиндр

* Расчет 6 отличается от расчета 4 другим спектром начальных случайных возмущений на КГ.

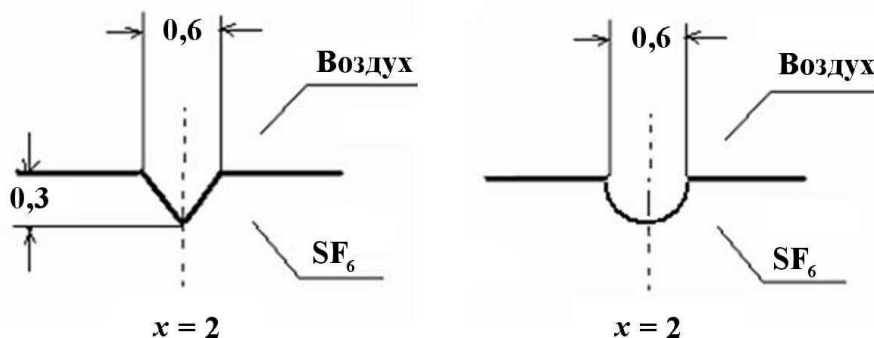


Рис. 2. Геометрия начального возмущения: слева — треугольная канавка, справа — полуцилиндр

Однако в силу того, что турбулентность всегда трехмерна, для некоторых задач дополнительно выполнены и 3D расчеты с целью уточнения полученных по 2D коду результатов.

Число ячеек счетной сетки — $N_x \times N_y \times N_z$ в трехмерном случае либо $N_x \times N_y$ в двумерном случае — также указано в таблице. Использовалась квазиравномерная счетная сетка с минимальными размерами счетных ячеек, равными $4/N_y$. В некоторых 2D расчетах для их удешевления использовалась дробная сетка, адаптивно встраивающаяся в окрестности границы *воздух*— SF_6 .

2. Результаты расчетов опытов с ЛВ треугольная канавка

$M_{ув} = 1,7$. На рис. 3 сверху показано развитие плоской части границы *воздух*— SF_6 и ЛВ в виде растровых картин концентрации воздуха, полученных в расчете 3. Характерным является расширение вершины ЛВ и, напротив, "схлопывание" концов основания после прохождения УВ через границу (см. рис. 3, а). Теоретическое объяснение этому дано в Приложении 1. Отметим, что дальнейшее развитие ЛВ после отмеченного схлопывания концов основания приводит к выбрасыванию в воздух его смеси с SF_6 (см. рис. 3, б). Похожая картина наблюдается и в соответствующем опыте (см. рис. 3, в).

Прохождение УВ по области SF_6 приводит к росту как ЛВ, так и (в небольшой степени) ЗТП.

В расчете фронт УВ, движущейся по области SF_6 , при рассматриваемом числе Маха отстоит далеко от передней границы ЗТП по сравнению

с ее шириной $L_T = z_2 - z_1$ ¹. Это подтверждается зависимостями от времени ширины ЗТП, а также расстояний от задней границы ЗТП до фронта УВ $L_{УВ} = z_2 - z_{УВ}$ и до передней границы ЛВ $L_{ЛВ} = z_2 - z_{ЛВ}$ (рис. 4). Как видно, ширина ЗТП L_T мала по сравнению с расстоянием $L_{ЛВ}$. В свою очередь, это расстояние мало по сравнению с $L_{УВ}$. Сравнение с экспериментальными временными зависимостями показывает, что при имеющемся в целом качественном согласии результатов расстояние от задней границы ЗТП до передней границы ЛВ в расчете приблизительно вдвое больше, чем в опыте.

$M_{ув} = 3,7$. На рис. 3 снизу показано развитие плоской части границы *воздух*— SF_6 и ЛВ в виде растровых картин концентрации воздуха, полученных в 2D расчете 2. Как и для $M_{ув} = 1,7$, характерным является расширение вершины ЛВ и схлопывание концов основания после прохождения УВ через границу (см. рис. 3, з). Отличие от малого $M_{ув}$ заключается в том, что возмущение при этом "расплющивается", так что горизонтальный размер становится заметно больше, а вертикальный — меньше. Дальнейшее развитие ЛВ после отмеченного схлопывания концов основания также приводит к выбрасыванию в воздух его смеси с SF_6 (см. рис. 3, д), но оно менее ярко выражено, чем для малого $M_{ув}$. Близкая картина наблюдается и в соответствующем опыте (см. рис. 3, е).

На рис. 5 показаны (R, t) -диаграммы передней границы ЛВ, передней и задней границ ЗТП и

¹Границы ЗТП (передняя z_1 и задняя z_2) определялись по уровню концентрации одного из веществ: $\beta_1 = \varepsilon \ll 1$, $\beta_2 = 1 - \varepsilon$, положение фронта УВ — по максимуму счетной вязкости.

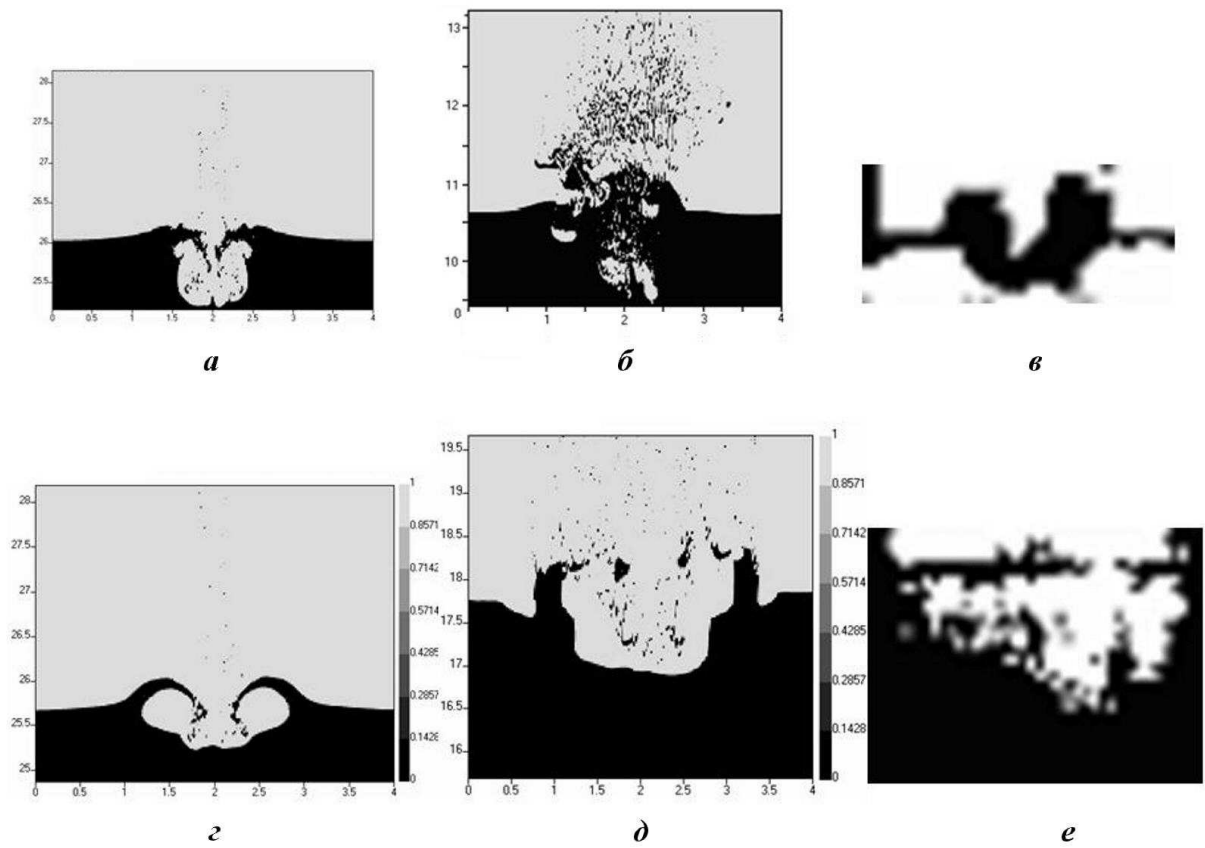


Рис. 3. Картины концентрации воздуха: сверху — $M_{УВ} = 1,7$: $a - t = 2,5$; $б - t = 4$; $в - \text{опыт}, t = 2,58$; снизу — $M_{УВ} = 3,7$: $г - t = 1,5$; $д - t = 1,7$; $е - \text{опыт}, t = 1,74$

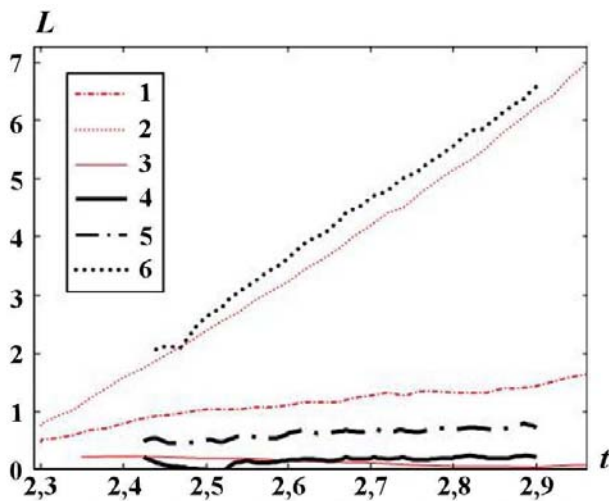


Рис. 4. Сравнение временных зависимостей, полученных в расчете 3 (1–3) и опыте (4–6): 3, 4 — ширина ЗТП; 2, 6 — расстояние от заданной границы ЗТП до фронта УВ; 1, 5 — расстояние от задней границы ЗТП до передней границы ЛВ

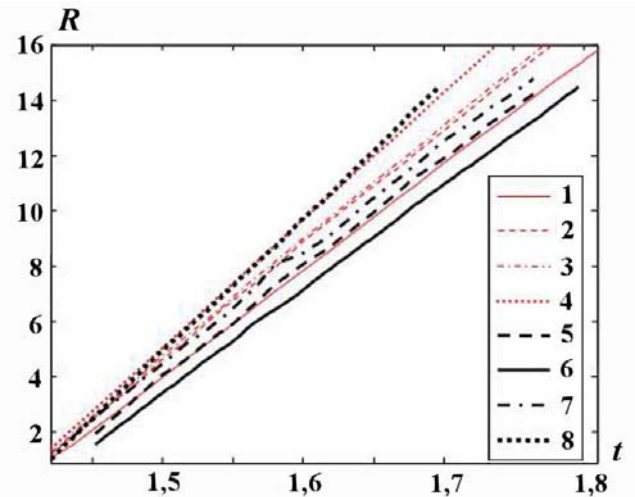


Рис. 5. Сравнение (R, t) -диаграмм, полученных в расчете 2 (1–4) и опыте (5–8): 3, 7 — передняя граница ЛВ; 2, 5 — передняя граница ЗТП; 1, 6 — задняя граница ЗТП; 4, 8 — фронт УВ

фронта УВ, полученные в расчете 2. Очевидно, границы ЗТП и ЛВ заметно ближе к фронту УВ, нежели для предыдущего случая с меньшим числом $M_{УВ}$.

Отметим, что при данном числе $M_{УВ}$ расчет без ЛВ (см. расчет из [1] на рис. 6) приводит к заметно меньшей ширине ЗТП. При меньшем числе $M_{УВ}$ такой эффект также намечается, но ширина ЗТП слишком мала, чтобы утверждать это с уверенностью.

Сравнение с опытом показывает (см. рис. 5), что при имеющемся в целом согласии результатов (особенно для фронта УВ) положения ЗТП и передней границы ЛВ, полученные в расчете, "опережают" опытные данные. В опыте, как и в расчете, фронт УВ, движущейся по области SF_6 , при данном числе Маха ближе к передней границе ЗТП по сравнению со случаем $M_{УВ} = 1,7$. Это подтверждается зависимостями от времени ширины ЗТП L_T , а также расстояний от задней границы ЗТП до фронта УВ $L_{УВ}$ и до передней границы ЛВ $L_{ПЛВ}$ (см. рис. 6). Как видно, L_T сопоставимо с $L_{ПЛВ}$. В свою очередь, $L_{ПЛВ}$ сопоставимо с расстоянием $L_{УВ}$ от задней границы ЗТП до фронта УВ.

Для данной задачи проведены также 3D расчеты 4–6 (см. таблицу). Полученное в этих расчетах характерное развитие плоской части границы *воздух*– SF_6 и ЛВ представлено на рис. 7 в

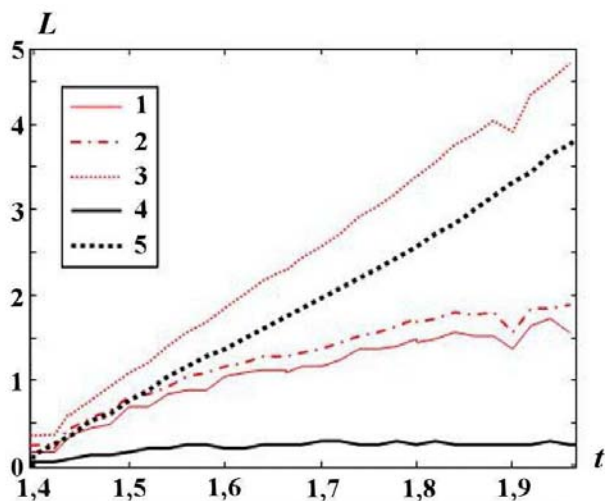


Рис. 6. Временные зависимости, полученные в расчете 2 (1–3) и расчете из [1] (4, 5): 1, 4 — ширина ЗТП; 3, 5 — расстояние от задней границы ЗТП до фронта УВ; 2 — расстояние от задней границы ЗТП до передней границы ЛВ

виде растровых картин концентрации воздуха в сечении $x = 2$. Сравнение результатов 3D расчетов на подробной (расчет 5) и грубой (расчет 6) счетных сетках показывает схожесть развития ЛВ, но на подробной сетке турбулентность более развита. Сравнение с 2D расчетами показывает, что в целом картины течения похожи друг на друга, трехмерность в основном сказывается лишь на большей турбулизации течения. Отметим также наличие "зеброобразной" картины развития возмущения в 3D расчетах, что объясняется схемными эффектами (см. Приложение 2, где дано объяснение этого факта).

Прохождение УВ по области SF_6 приводит к росту как ЛВ, так и ЗТП.

Из рис. 8 видно, что временные зависимости расстояния от задней границы ЛВ до фронта УВ² в расчетах 5 и 6 близки. Амплитуды ЛВ вначале также близки, но на более поздней стадии на подробной сетке (расчет 5) они несколько больше, чем на грубой (расчет 6). Причина этого заключается в том, что, как видно из рис. 7, на более подробной сетке развивается турбулентность, размывающая переднюю и в небольшой степени заднюю границы, в то время как на грубой сетке турбулентность подавляется схемной вязкостью.

В 3D расчете 4, как и в 2D расчете, фронт УВ, движущейся по области SF_6 , при данном числе Маха ближе к передней границе ЗТП по сравнению со случаем $M_{УВ} = 1,7$. Результаты 3D и 2D расчетов близки между собой. Это подтверждает рис. 9, где приведены зависимости от времени ширины ЗТП (L_T), а также расстояний от задней границы ЗТП до фронта УВ ($L_{УВ}$) и до передней границы ЛВ ($L_{ПЛВ}$)³. Как видно, L_T близко к $L_{ПЛВ}$. В свою очередь, на исследуемой стадии $L_{ПЛВ}$ сопоставимо с расстоянием $L_{УВ}$ от задней границы ЗТП до фронта УВ.

Сравнение указанных величин в расчете на подробной и грубой сетках показано на рис. 10. При некоторых количественных отличиях в целом согласие удовлетворительное. То же относится к сравнению временных зависимостей ЗТП, но при $t \gtrsim 0,27$ намечается превышение рассчитанных значений над данными опыта. На-

²Здесь и далее координаты отсчитываются от начального положения границы *воздух*– SF_6 .

³Здесь и далее время отсчитывается от момента прихода УВ на КГ.

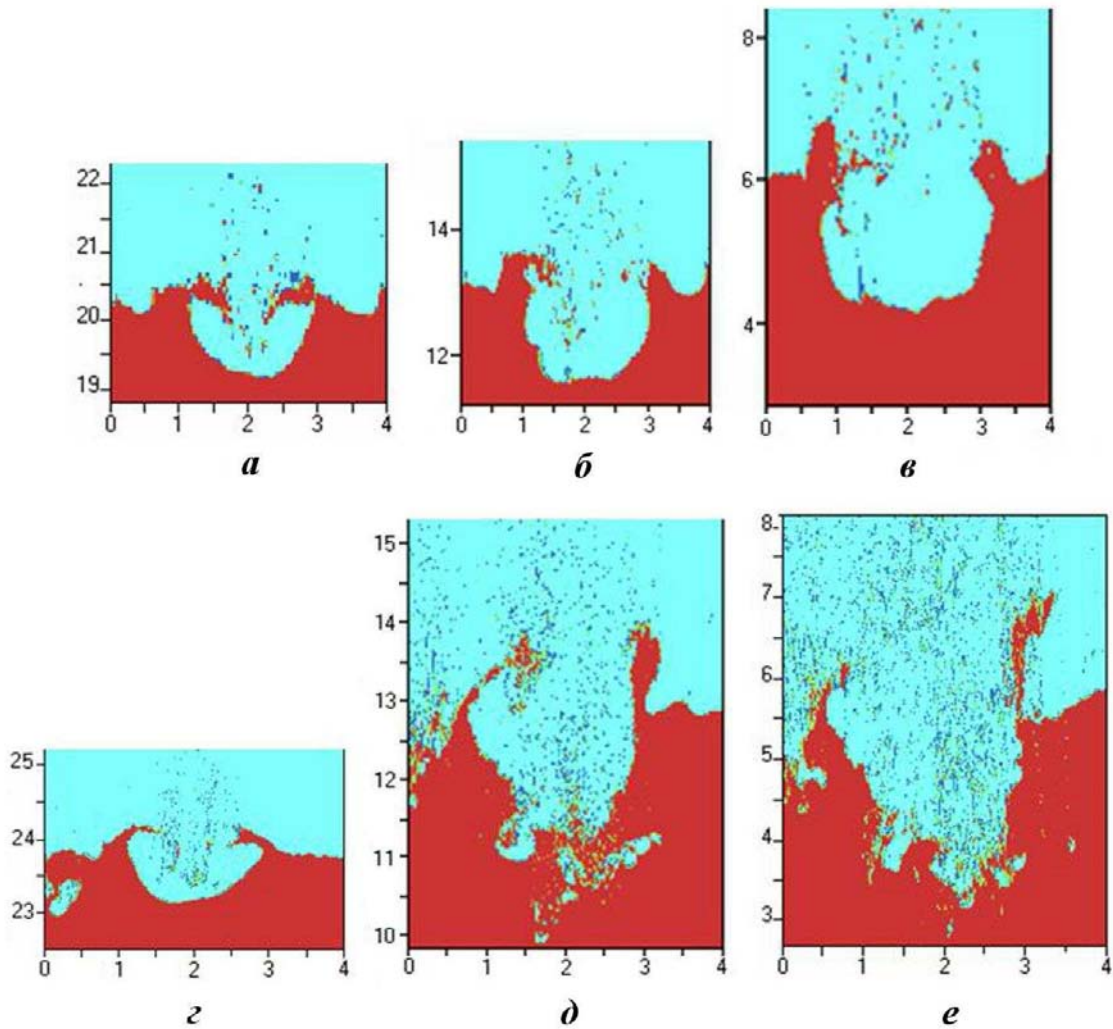


Рис. 7. Растровые картины концентрации воздуха в сечении $x = 2$: сверху — расчет 6, снизу — расчет 5; $a, г - t = 1,6$; $б, д - t = 1,9$; $в, е - t = 2,1$

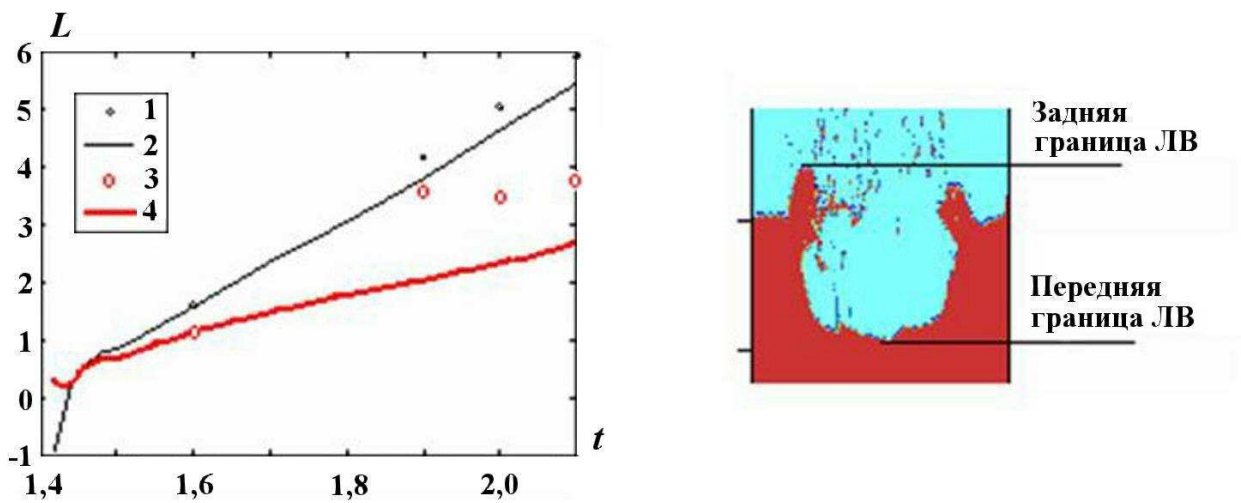


Рис. 8. Временные зависимости, полученные в расчетах 5 (1, 3) и 6 (2, 4): 1, 2 — расстояние от задней границы ЛВ до фронта УВ; 3, 4 — амплитуда ЛВ

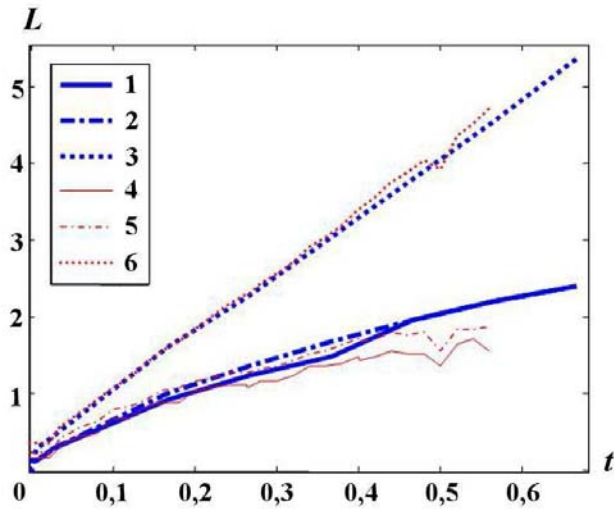


Рис. 9. Сравнение временных зависимостей, полученных в 3D расчете 4 (1–3) и 2D расчете 2 (4–6): 1, 4 — ширина ЗТП; 3, 6 — расстояние от задней границы ЗТП до фронта УВ; 2, 5 — расстояние от задней границы ЗТП до передней границы ЛВ

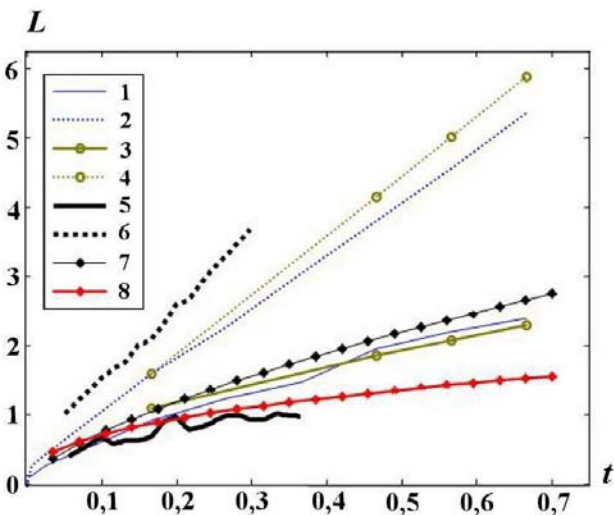


Рис. 10. Временные зависимости ширины ЗТП (1, 3, 5, 7, 8) и расстояния от задней границы ЗТП до фронта УВ (2, 4, 6): 1, 2 — 3D расчет 4; 3, 4 — 3D расчет 5; 5, 6 — опыт; 7 — оценка по формуле (П6); 8 — оценка по формуле (П11), $u_{\tau 0} \approx 8$

против, измеренное расстояние от задней границы ЗТП до фронта УВ больше рассчитанного. Указанные отличия, однако, имеют порядок погрешности измерений.

На рис. 10 приводятся также теоретические оценки для ширины ЗТП, полученные в Приложении 3. Результаты расчетов ширины ЗТП по

формуле (П11) оказываются ближе к измерениям, в то время как формула (П6) лучше согласуется с 3D расчетами.

На рис. 11 приводятся зависимости от времени максимальной в ЗТП турбулентной скорости, полученной в 3D расчете и согласно теоретическим оценкам (см. Приложение 3). Расчетная зависимость в целом близка к полученным по обеим формулам: (П8) и (П12).

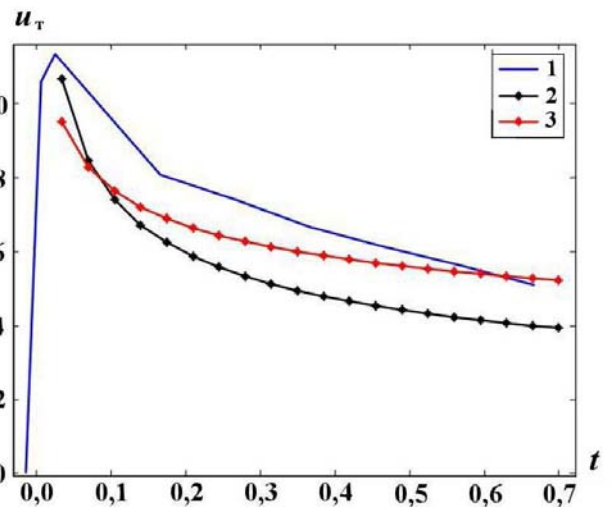


Рис. 11. Зависимости от времени турбулентной скорости: 1 — 3D расчет 4; 2 — по формуле (П8); 3 — по формуле (П12), $u_{\tau 0} \approx 8$

$M_{УВ} = 9,1$. Полученный в 2D расчете 1 общий вид развития плоской части границы *воздух*— SF_6 и ЛВ представлен растровыми картинками концентрации воздуха на рис. 12. Как и для меньших чисел $M_{УВ}$, характерным является расширение вершины ЛВ и схлопывание концов основания после прохождения УВ через границу. Отличие от $M_{УВ} = 3,7$ заключается в том, что возмущение здесь расплющивается в еще большей степени. При этом дальнейшее развитие ЛВ приводит к "прилипанию" к стенкам расположенного вблизи него SF_6 . Дальнейшее прохождение УВ по области SF_6 приводит к рассеиванию ЛВ, так что формируется ЗТП с приблизительно одномерным (меняющимся по длине трубы) распределением SF_6 . Заметим, что в соответствующем опыте также трудно выделить ЗТП в обычном понимании.

На рис. 13 показаны расчетные и экспериментальные (R, t) -диаграммы передней границы ЛВ, передней и задней границ ЗТП и фрон-

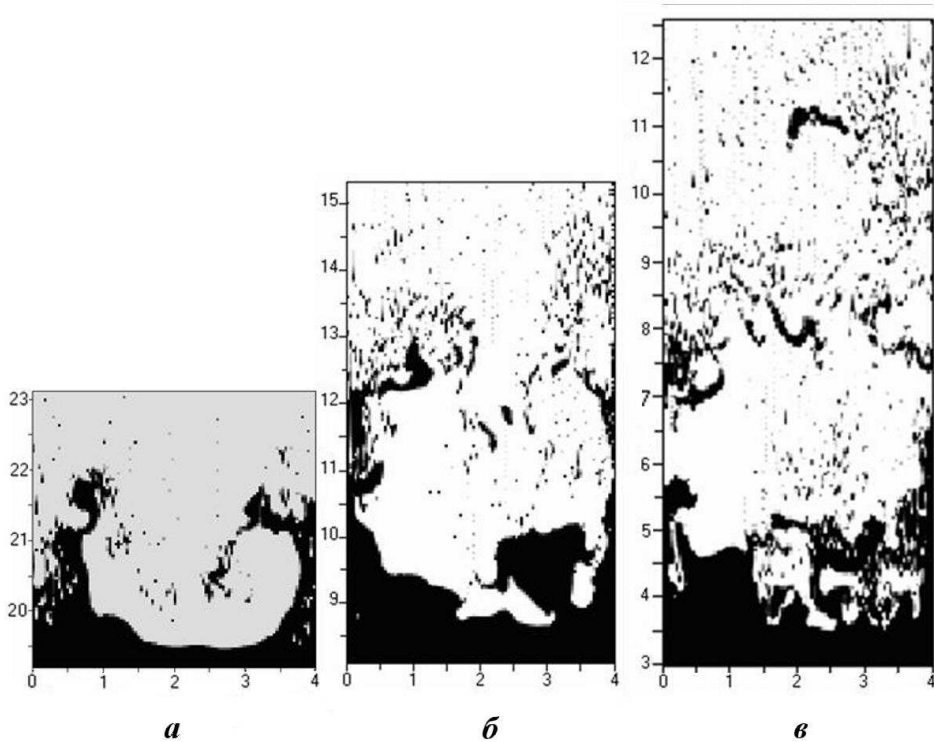


Рис. 12. Растровые картины концентрации воздуха в расчете 1: $a - t = 0,8$; $b - t = 0,9$; $v - t = 0,95$

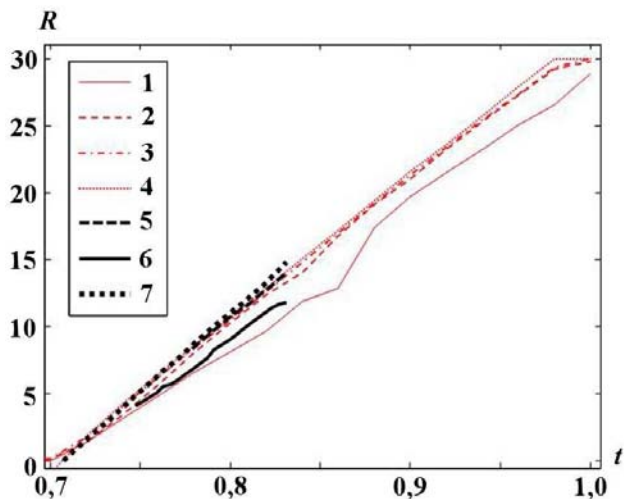


Рис. 13. Сравнение (R, t) -диаграмм, полученных в 2D расчете 1 (1–4) и опыте (5–7): 3 — передняя граница ЛВ; 2, 5 — передняя граница ЗТП; 1, 6 — задняя граница ЗТП; 4, 7 — фронт УВ

та УВ. В целом расчет согласуется с измерениями. В опыте, как и в расчете, передние границы ЗТП и ЛВ практически сливаются с фронтом УВ, движущейся по области SF_6 , и лишь на поздние моменты времени намечается отставание ЛВ от фронта УВ. Это связано с относитель-

но малым временем нахождения УВ в SF_6 при столь больших числах Маха. Если бы область SF_6 имела большую длину, это время увеличилось бы, а отставание передней границы ЗТП от фронта УВ стало бы более заметным.

3. Результаты 2D расчетов с ЛВ полуцилиндр

Опыты с ЛВ данного вида выполнены для различных чисел Маха, как меньших, так и больших числа Маха, называемого в [2] критическим: $M_{вкр} \approx 5,5$.

$M_{ув} = 1,7$. Полученный в 2D расчете 9 общий вид развития плоской части границы *воздух*– SF_6 и ЛВ представлен растровыми картинками концентрации воздуха на рис. 14 сверху. В целом они похожи на полученные в разд. 2 для ЛВ в виде треугольной канавки. Измеренная ширина ЗТП настолько мала, что оказывается меньше погрешности измерений. Поэтому на рис. 15 показана лишь полученная в расчете временная зависимость расстояния от задней границы ЗТП до передней границы ЛВ в сравнении с измерениями. Согласие можно считать

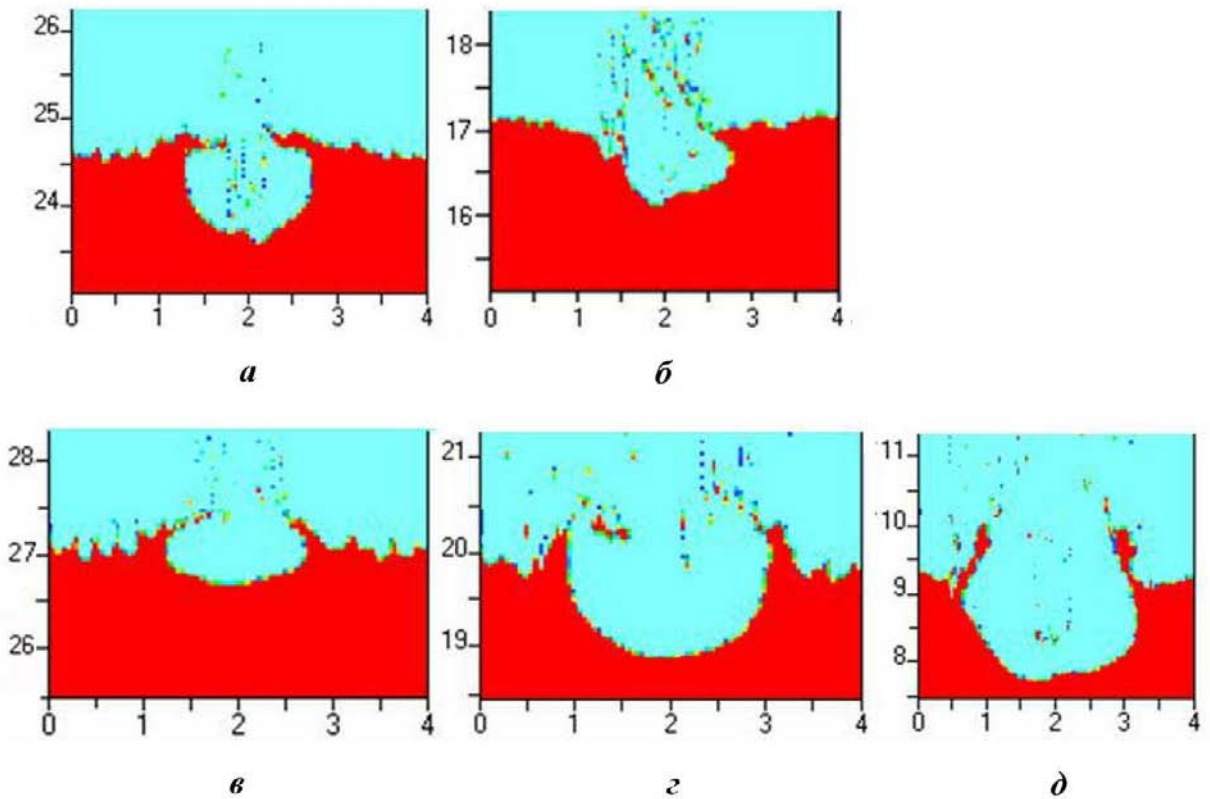


Рис. 14. Растровые картины концентрации воздуха: сверху — расчет 9: $a - t = 2,6$; $б - t = 3,2$; снизу — расчет 7: $в - t = 1,5$; $г - t = 1,7$; $д - t = 2$

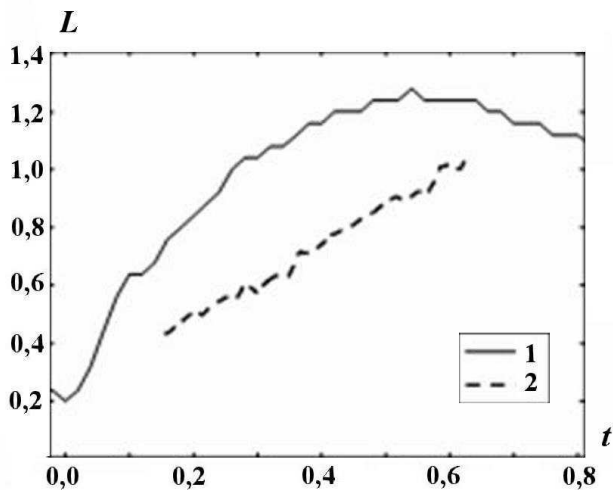


Рис. 15. Временные зависимости расстояния от задней границы ЗТП до передней границы ЛВ: 1 — расчет 7; 2 — опыт

удовлетворительным, учитывая погрешность измерений около 0,5 см.

Зависимости от времени ширины ЗТП (рис. 16, a), а также максимальной в ЗТП

турбулентной скорости (рис. 16, $б$), полученные в расчете, оказываются в целом близки соответствующим теоретическим оценкам (см. формулы (П11) и (П12) в Приложении 3).

$M_{ув} = 3,7$. Полученный в 2D расчете 7 общий вид развития плоской части границы *воздух*– SF_6 и ЛВ представлен растровыми картинками концентрации воздуха на рис. 14 снизу. Как и для ЛВ *треугольная канавка* (см. разд. 2), характерным является расширение вершины ЛВ и схлопывание концов основания после прохождения УВ через границу. Дальнейшее развитие ЛВ и ЗТП также аналогично результатам разд. 2.

Обработка результатов расчетов показывает, что (R, t) -диаграммы УВ и передней границы ЛВ в расчете и опыте близки, однако передняя граница ЛВ несколько опережает переднюю границу ЗТП и со временем удаляется от фронта УВ. Точность определения ширины ЗТП в опыте невелика, поэтому можно вести речь лишь о тенденции сближения с расчетом, о чем свидетельствует рис. 17. В то же время отметим, что

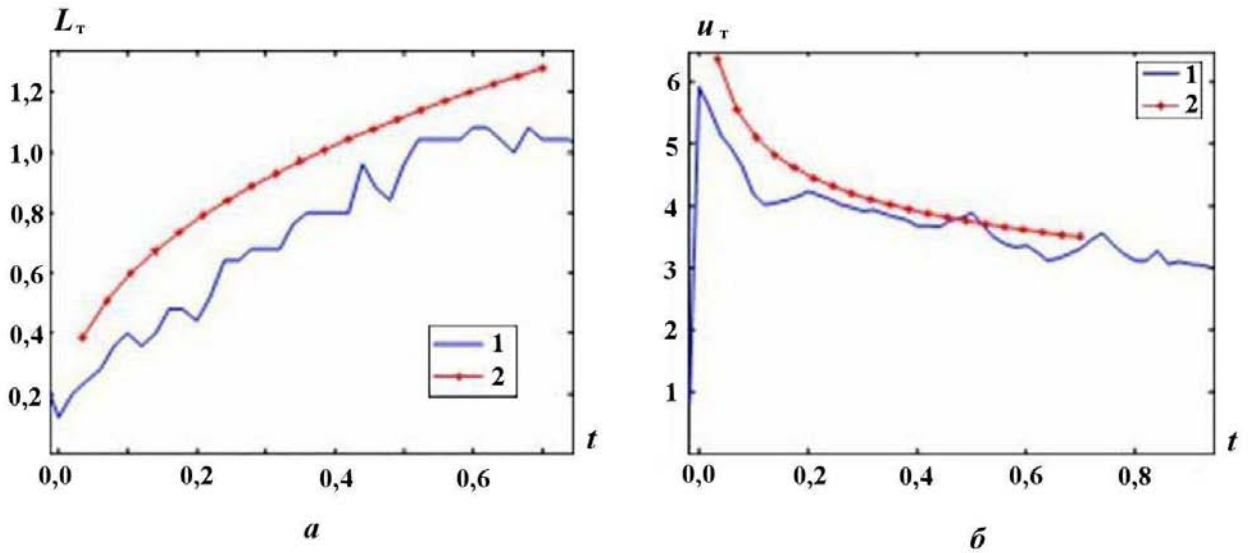


Рис. 16. Ширина ЗТП (а) и турбулентная скорость (б): 1 — расчет; 2 — по формулам (П11) и (П12), $u_{t0} \approx 4,85$

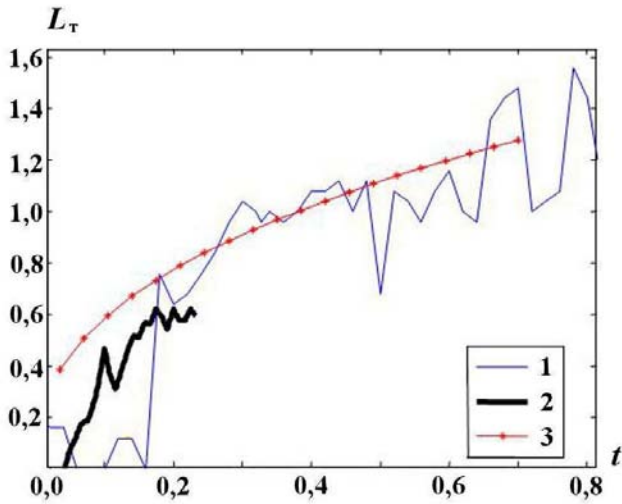


Рис. 17. Зависимость от времени ширины ЗТП: 1 — расчет 7; 2 — опыт; 3 — по формуле (П11), $u_{t0} \approx 4,85$

расчетная зависимость ширины ЗТП близка к полученной по формуле (П11) из Приложения 3 (см. рис. 16, а).

$M_{UV} = 9,1$. Полученный в 2D расчете 8 общий вид развития плоской части границы *воздух-SF₆* и ЛВ представлен растровыми картинками концентрации воздуха на рис. 18. В отличие от предыдущих вариантов сразу после прихода УВ на КГ ЛВ сильно расплющивается и фактически становится частью ЗТП, которая на этот момент остается вблизи фронта УВ и воздействует на него. На более поздней стадии намечается отставание ЛВ и ЗТП от фронта УВ, результаты же измерений выполнены лишь для относительно малых моментов времени, при которых фронт УВ и передние границы ЗТП и ЛВ совпадают. В целом результаты расчета аналогичны случаю $M_{UV} = 9,1$, рассмотренному в

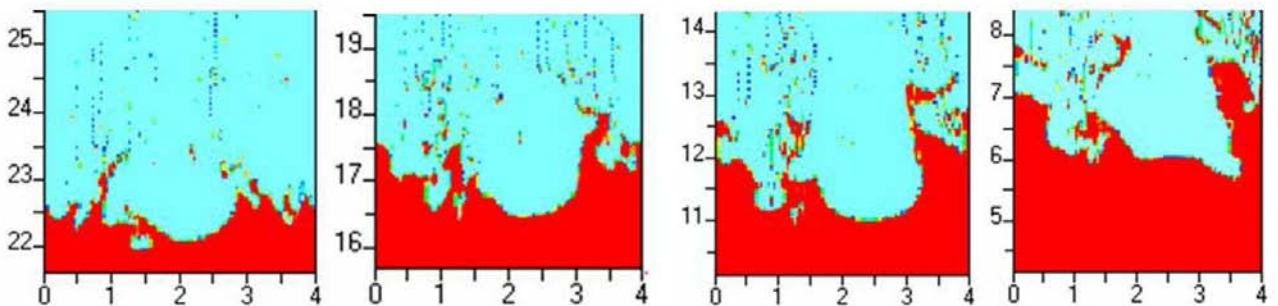


Рис. 18. Картинки концентрации воздуха, $t = 0,8; 0,85; 0,9; 0,95$ (слева направо) в расчете 8

разд. 2: передние границы ЗТП и ЛВ близки к фронту УВ. Закон роста ЗТП неплохо описывается теоретической формулой (П6) (рис. 19).

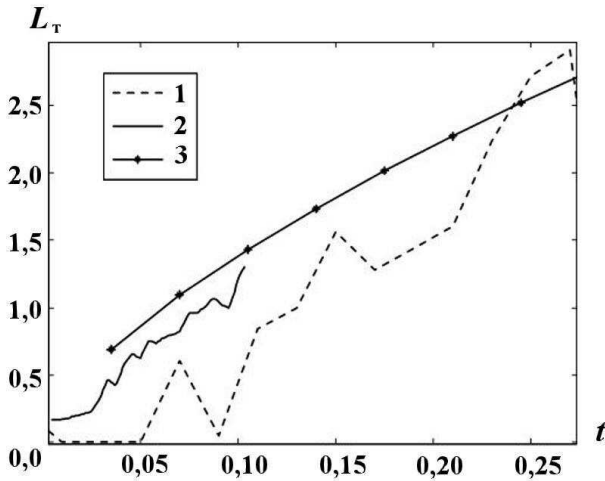


Рис. 19. Зависимости от времени ширины ЗТП: 1 — расчет; 2 — опыт; 3 — по формуле (П6), $u_{\tau 0} \approx 20$

Выводы

При прямом 2D и 3D численном моделировании задачи с ЛВ получены согласующиеся с опытными данными результаты. При этом картины развития ЛВ и ЗТП в целом качественно близки для обоих видов начального ЛВ: треугольной канавки и полуцилиндра.

Результаты 3D и 2D расчетов в целом близки друг к другу, при этом в 3D расчете на более грубой сетке имеется более длительная стадия, на которой заметна роль схемной вязкости.

Отметим также, что турбулентность в ЗТП затухает со временем в согласии с теоретическими оценками ширины ЗТП и турбулентной скорости.

Приложение 1.

Приближенно-аналитическое рассмотрение задачи

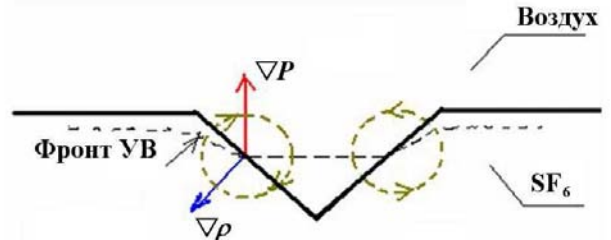
Как отмечено выше, характерным для ЛВ треугольная канавка является расширение вершины ЛВ и, напротив, схлопывание концов основания после прохождения УВ через границу. Это понятно из схемы, показанной на рис. П1.

Относительная ориентация $\nabla \rho$ и ∇P такова, что на возмущенной части границы создаются

вихри (см. рис. П1). Это следует из уравнения для завихренности $\vec{\omega}$, получающегося из уравнения Эйлера в форме Громеки—Лемба [4]

$$\frac{d\vec{\omega}}{dt} = (\vec{\omega} \cdot \nabla) \vec{u} - \vec{\omega} \operatorname{div} \vec{u} + \frac{[\nabla \rho \times \nabla P]}{\rho^2}.$$

На КГ, но вне ЛВ регулярная (т. е. с размерами порядка ЛВ) завихренность, очевидно, не генерируется. Образующаяся на ЛВ завихренность $\omega_i^{(0)}$ направлена по X (вдоль образующей ЛВ): $i = x$. Она сосредоточена на КГ, имеющей эффективную толщину $L_{КГ}$. Эта толщина увеличивается по двум причинам: во-первых, вследствие схемных эффектов; во-вторых, из-за развития случайных начальных возмущений. При этом в самом начале эволюции КГ отмечается развитие неустойчивости, т. е. появление всех компонент завихренности. Пространственные масштабы их изменения, однако, малы по сравнению с соответствующими масштабами $\omega_x^{(0)}$. В силу своей малости скорости $u_k^{(1)}$, соответствующие компонентам $\omega_k^{(1)}$, удовлетворяют уравнению неразрывности $\frac{\partial u_k^{(1)}}{\partial x_k} = 0$.



П1. Схема движения в области ЛВ после прохождения УВ

Приложение 2.

Оценка схемных эффектов

Для выяснения роли схемных эффектов вследствие наличия схемной вязкости воспользуемся ее оценкой [5] (k — индекс суммирования):

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_i u_k) + \frac{\partial P}{\partial x_i} = \\ = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{h}{4} \rho u_k \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right) + \theta_i (h^2, \tau^2). \end{aligned} \quad (\text{П1})$$

Правые части уравнений (П1) можно трактовать как производные от компонентов "тензора"

напряжений аппроксимационной (схемной) вязкости. Их можно записать в виде

$$\sigma_{ik} = \frac{1}{4} h \rho u_k \frac{\partial u_i}{\partial x_k}. \quad (\text{П2})$$

Слово "тензор" взято в кавычки, поскольку ни (П1), ни (П2) не являются тензорами. Тем не менее формула (П2) аналогична по виду выражению для компонент тензора вязких напряжений, входящих в уравнения Навье—Стокса. При этом роль коэффициента молекулярной вязкости (являющегося скаляром) здесь играет коэффициент схемной вязкости, являющийся вектором и зависящий от скорости потока u_k и размера счетной ячейки h :

$$\nu_{ck} = \frac{1}{4} h u_k.$$

После прихода (в момент t_0) УВ на КГ массовая скорость имеет на ЛВ фактически две (в основном регулярные) компоненты u_z и u_y . Компонента же u_x мала по сравнению с ними, поскольку определяется малыми случайными возмущениями; соответственно, малы и ее производные.

Таким образом, коэффициент схемной вязкости анизотропен, а именно имеет две большие компоненты, лежащие в плоскости, нормальной к образующей ЛВ:

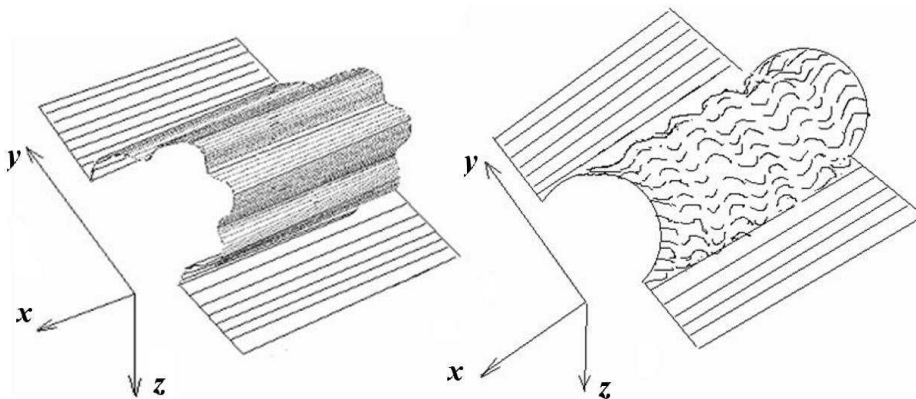
$$\nu_{cz} \approx \frac{1}{4} h u_z; \quad \nu_{cy} \approx \frac{1}{4} h u_y, \quad (\text{П3})$$

в то время как третья компонента $\nu_{cx} \approx \frac{1}{4} h u_x$ мала по сравнению с ними. Это означает, что по

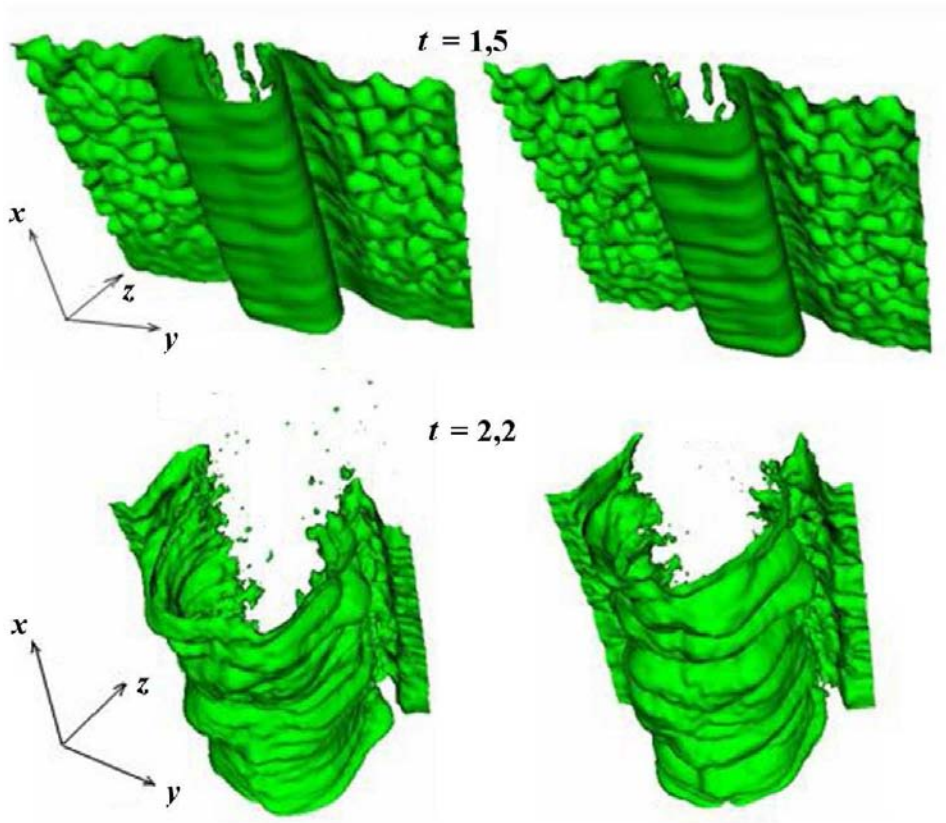
направлению X все компоненты в меньшей степени подавляются схемной вязкостью, нежели по направлениям Z и Y . Другими словами, возмущения продольно-гофрированного вида (рис. П2 слева) подавляются схемной вязкостью гораздо сильнее, чем поперечно-гофрированные (рис. П2 справа). Действительно, именно последние (с волновым вектором, направленным по X) наблюдаются на начальной (после прохождения УВ через КГ *воздух-SF₆*) стадии численного расчета (см. рис. П3, П4). При этом картина развития возмущений не зависит от того, каков был начальный спектр случайных возмущений. Из рис. П3 видно, что результаты весьма близки для двух вариантов с разными генераторами случайных чисел (расчеты 4 и 6). Число гармоник на ЛВ уменьшается (длина волны растет), а при $t = 2,2$ регулярная структура возмущений нарушается.

На КГ вне ЛВ имеется лишь одна регулярная компонента скорости; соответственно, анизотропен коэффициент схемной вязкости: он имеет лишь одну компоненту, параллельную оси трубы. Следовательно, здесь не должно быть выделенного направления в развитии случайных возмущений, что и наблюдается на рис. П3, П4.

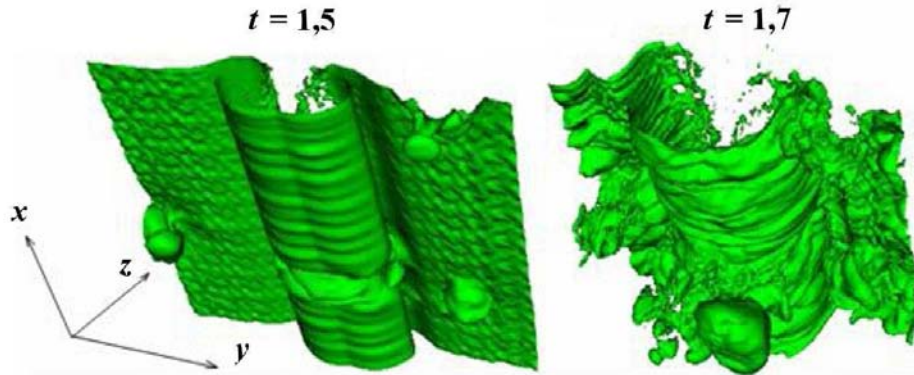
Отметим также, что в расчете на более подробной сетке (см. рис. П4) число гармоник на ЛВ на момент времени $t = 1,5$ заметно больше ($N_\lambda \approx 17 \div 18$), нежели в расчете на более грубой сетке ($N_\lambda \approx 12$), а переход регулярных возмущений к нерегулярному виду происходит гораздо раньше — уже к моменту $t = 1,7$. На начальной стадии величина $L_{КГ}$ определяется коэффициентом



П2. Характерные формы возмущений



П3. Изоповерхности концентрации $\beta_{SF_6} = 0,5$: слева — расчет 4; справа — расчет 6



П4. Изоповерхности концентрации $\beta_{SF_6} = 0,5$, расчет 6 (подробная сетка)

том схемной вязкости (П3) $\nu_c \approx \frac{1}{4}hu$ (где $u \sim \sim u_z \approx 30$):

$$L_{\text{КТ}} \sim L_{\nu_c} \sim \sqrt{\nu_c(t - t_0)}.$$

Полагая, что длина волны гармоника $\lambda \sim L_{\nu_c}$, находим число гармоник:

$$N_\lambda \approx \frac{H}{2L_{\nu_c}} \approx \sqrt{\frac{NH}{u(t - t_0)}}, \quad (\text{П4})$$

где N — число счетных узлов на ширине H трубы. Учитывая, что $H = 4$, $N = 100$ в расчете на грубой и $N = 200$ на подробной сетке, а $u \approx 30$, получаем для момента $t = 1,5$ соответствующие

значения: $N_\lambda \approx 11,5$ и $N_\lambda \approx 16,3$. Это согласуется с полученными выше значениями. Для $N = 100$, $t = 2$ формула (П4) дает $N_\lambda \approx 5$, что также согласуется с рис. П4.

Соответствующие схемные числа Рейнольдса:

$$\text{Re}_c \equiv \frac{L_{\nu_c} u}{\nu_c} \approx 2 \sqrt{\frac{u(t-t_0)N}{H}}.$$

Для $N = 100$ и $t = 2$ получается такое же число $\text{Re}_c \approx 40$, как для $N = 200$ и $t = 1,7$, что, по-видимому, обеспечивает переход к нерегулярной (турбулентной) структуре возмущений — это согласуется с полученными результатами.

Приложение 3.

Аналитические оценки ширины ЗТП

Отметим, что законы движения фронта УВ и роста ЗТП различны. Действительно, как показано в [1, 2], скорость фронта УВ на рассматриваемых масштабах турбулентности практически не успевает заметно ослабевать, т. е. $L_{УВ}$ практически линейно по времени. Что касается ширины ЗТП L_T , то скорость ее роста уменьшается весьма заметно по мере превышения начального масштаба турбулентности $l_T(t_{КГ}) = l_{T0}$.

Данный масштаб можно оценить как $l_T = \alpha H$ (примем $\alpha = 1/6$), а поскольку боковые границы в рассматриваемой задаче — жесткие стенки, он не меняется на всем времени развития ЗТП.

Модуль момента характерного вихря:

$$M_T \sim \rho u_T l_T^4,$$

где u_T — турбулентная скорость. Число таких вихрей в ЗТП

$$N_T \sim \frac{L_T H^2}{l_T^3}.$$

Полный момент ЗТП $M_{ЗТП} \sim M_T \sqrt{N_T} \sim u_T \sqrt{L_T}$ обязан сохраняться, т. е.

$$u_T^2 L_T = \text{const.} \quad (\text{П5})$$

Можно сделать два разных предположения для нахождения u_T .

Первое выражается в виде $u_T \sim \frac{dL_T}{dt}$. Тогда из (П5) следует

$$\frac{L_T}{L_{T0}} = \left(\frac{t}{t_0} \right)^{2/3}, \quad (\text{П6})$$

причем полагается

$$L_{T0} = L_T(t_0), \quad t_0 = \frac{l_{T0}}{u_{T0}}. \quad (\text{П7})$$

Из (П5), (П6) следует

$$\frac{u_T}{u_{T0}} \sim \left(\frac{t}{t_0} \right)^{-1/3}. \quad (\text{П8})$$

Второе предположение заключается в относительно медленном изменении u_T со временем. Тогда можно записать

$$L_T \sim \sqrt{D_T t}, \quad (\text{П9})$$

где коэффициент турбулентной вязкости $D_T \sim l_T u_T$. Но $l_T = \alpha H = \text{const}$, следовательно, $D_T \sim u_T$. Тогда из (П9)

$$u_T \sim \frac{L_T^2}{t}. \quad (\text{П10})$$

Но поскольку по-прежнему должно выполняться (П6), то из (П10) следует

$$\frac{L_T}{L_{T0}} = \left(\frac{t}{t_0} \right)^{2/5} \quad (\text{П11})$$

с начальными значениями (П7), где согласно 3D расчетам $u_{T0} \approx 8$ (в 2D расчетах $u_{T0} \approx 4,85$). С учетом (П10)

$$\frac{u_T}{u_{T0}} \sim \left(\frac{t}{t_0} \right)^{-1/5}, \quad (\text{П12})$$

что оправдывает сделанное выше предположение.

Список литературы

1. Синькова О. Г., Стаценко В. П., Янилкин Ю. В. Численное исследование развития турбулентного перемешивания на контактной границе *воздух—SF6* при распространении ударной волны с большими числами Маха // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2007. Вып. 2—3. С. 3—17.
2. Bliznetsov M. V., Nevmerzhitky N. V., Razin A. N. et al. Research on turbulent mixing development at the gas-gas interface with mach number of the shock wave in the range of 2—9 // 9-th Conf. "Physics of Turbulent Mixing of Compressible Media". England, Cambridge. July 2004.

3. *Невмержицкий Н. В., Разин А. Н., Сотсков Е. А. и др.* Исследование развития турбулентного перемешивания и возмущений в газах с повышенной сжимаемостью при числах Маха ударной волны от 2 до 9 // Межд. конф. "IX Забабахинские науч. чтения." Снежинск, 2007.
4. *Седов Л. И.* Механика сплошной среды. Т. 2. М.: Наука, 1973.
5. *Синькова О. Г., Стаценко В. П., Янилкин Ю. В.* Численное моделирование опыта

по исследованию турбулентного перемешивания после неоднократного прохождения ударной волны через границу раздела // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2004. Вып. 3. С. 17–22.

Статья поступила в редакцию 29.04.13.

УДК 539.4

КИНЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ КОМПАКТИРОВАНИЯ ПОВРЕЖДЕННОСТИ В СРЕДАХ С ПРОЧНОСТЬЮ

О. Н. Игнатова, В. А. Раевский, И. С. Целиков
(РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров)

Предложена модель компактирования поврежденной среды, основанная на описании схлопывания одиночной поры с учетом упругопластических свойств среды. Для описания схождения пор, распределенных по объему вещества, рассматривается движение одной сферической ячейки в идеально-пластической несжимаемой среде. В этом приближении получено аналитическое решение для зависимости интегральной поврежденности от давления, сдвиговой прочности и начальной поврежденности.

Получены уравнения, описывающие кинетику компактирования для случаев произвольной зависимости давления от времени и переменного предела текучести.

Ключевые слова: поврежденность, компактирование, модель, давление, предел текучести, среда с прочностью.

Введение

При численном моделировании высокоскоростного деформирования материалов, сопровождающегося разрушением и последующим компактированием дефектов (пор) при воздействии волн сжатия, возникают большие трудности. Компактирование дефектов, образующихся в результате действия импульсных растягивающих напряжений, исследовано недостаточно. Существующие в настоящее время модели компактирования [1, 2] являются либо слишком сложными для их реализации в численных методиках, либо не отражают всех эффектов, происходящих при закрытии пор.

В данной работе предлагается достаточно простая кинетическая модель компактирования поврежденной среды, основанная на описании схлопывания одиночной поры с учетом упругопластических свойств среды. Такой подход предложен Кэрроллом и Холтом [1].

Основные соотношения. Результаты численного моделирования

Предположив, что при компактировании объем вещества не меняется ($N = \text{const}$), представим поврежденную среду как систему одинаковых пор, находящихся примерно на одинаковом расстоянии от соседних пор, подобно атомам в кристаллической решетке. Тогда можно выделить элементарную ячейку вещества радиусом $R_{\text{я}}$ с одной порой радиусом R и рассмотреть сжатие этой ячейки внешним давлением (рис. 1). Пусть вещество обладает прочностью Y_0 с учетом вязкости, что будет препятствовать движению границы поры. Уравнение движения поры для такой модели компактирования, предложенной Кэрроллом и Холтом [1], представляет собой дифференциальное уравнение второго порядка по времени, что достаточно сложно для анализа и получения решений в явном виде.

Внутренний и наружный радиусы ячейки связаны с плотностью пор соотношением

$$V_i = \frac{1}{N} = \frac{4}{3}\pi (R_{\text{я}}^3 - R^3), \quad (1)$$

где V_i — объем сплошного вещества в одной ячейке, который считается неизменным; R — внутренний радиус ячейки; $N = 1/V_i$ приблизительно соответствует количеству пор в единице объема.

Для поврежденности ω получается следующее уравнение:

$$\omega = \left(\frac{R}{R_{\text{я}}} \right)^3 = \frac{1}{1 + \frac{3}{4\pi N R^3}}. \quad (2)$$

Для описания схлопывания одиночной поры воспользуемся решением задачи о движении вакуумного пузырька радиусом R_0 в бесконечном объеме несжимаемой идеальной жидкости, полученным Рэлеем [3]. В этой задаче кинетическая энергия жидкости равна работе по перемещению вещества под действием внешнего давления. Если материал, в котором находится пора, обладает прочностью, то работа сил давления $A_{\text{д}}$ переходит в кинетическую энергию и частично расходуется на выделение тепла в результате совершения пластической работы $A_{\text{п}}$:

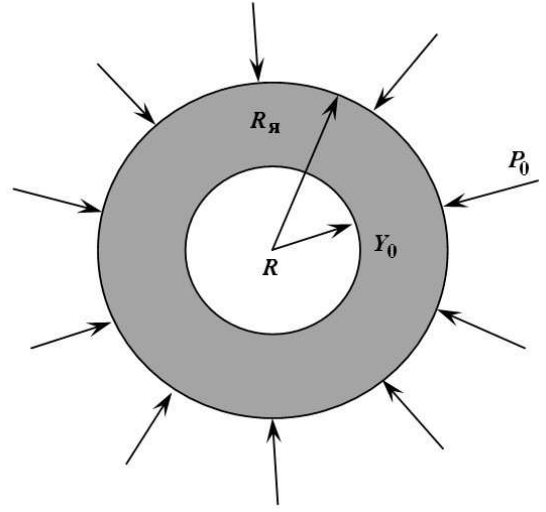


Рис. 1. Схема элементарной ячейки с наружным $R_{\text{я}}$ и внутренним R радиусами в веществе с прочностью Y_0 под воздействием давления P_0

$$\frac{2\pi\rho(R_{\text{я}} - R)R^3\dot{R}^2}{R_{\text{я}}} = \frac{4}{3}P_0\pi(R_0^3 - R^3) - A_{\text{п}}(t). \quad (3)$$

Левая часть уравнения (3) есть кинетическая энергия вещества, а правая состоит из работы давления $A_{\text{д}}$ и пластической работы $A_{\text{п}}$; R — текущий радиус поры с начальным радиусом R_0 и радиусом ячейки $R_{\text{я}}$; P_0 — давление; ρ — плотность вещества. В случае отсутствия прочности уравнение (3) переходит в задачу о схлопывании одиночной поры в идеальной несжимаемой жидкости, решенную Рэлеем. Согласно уравнению (3) движение границы поры будет происходить до тех пор, пока пластическая работа меньше работы сил давления, и прекратится в случае $A_{\text{п}} = A_{\text{д}}$.

Изменение работы пластического деформирования $A_{\text{п}}$ в случае постоянного предела текучести Y_0 приближенно может быть рассчитано по следующему уравнению:

$$A_{\text{п}} \approx \int_V^{V_0} \int_0^t Y_d \dot{\epsilon}_i dt dV \approx -Y_0 \int_0^t dt \int_R^{R_{\text{я}}} 4\pi r^2 \frac{2\dot{R}R^2}{r^3} dr \approx \frac{8\pi}{3} Y_0 \int_{R_0}^R R^2 \ln \left(\frac{3}{4\pi N R^3} + 1 \right) dR, \quad (4)$$

где Y_d и $\dot{\epsilon}_i$ — предел текучести и скорость деформации соответственно. Уравнение (4) получено с учетом того, что при сферическом сжатии несжимаемого вещества скорость деформации связана с радиусом: $\dot{\epsilon}_i \cong \left| \frac{\partial U(r)}{\partial r} \right| = \frac{2R^2\dot{R}}{r^3}$. При схлопывании пор объем V остается неизменным, но изменяется внутренний радиус поры и наружный эффективный радиус ячейки $R_{\text{я}}$, в которой находится данная пора. В случае постоянного предела текучести можно интегрированием (4) получить точное уравнение для пластической работы:

$$A_{\text{п}} \approx \frac{8}{9}\pi Y_0 \left[R_0^3 \ln \left(1 + \frac{3}{4\pi N R_0^3} \right) - R^3 \ln \left(1 + \frac{3}{4\pi N R^3} \right) + \frac{3}{4\pi N} \ln \frac{4\pi N R_0^3 + 3}{4\pi N R^3 + 3} \right]. \quad (5)$$

После несложных преобразований получаем дифференциальное уравнение изменения радиуса поры от времени:

$$\dot{R} = -\sqrt{\frac{(A_{\text{д}} - A_{\text{п}}) R_{\text{я}}}{2\pi\rho R^3 (R_{\text{я}} - R)}}. \quad (6)$$

Из уравнения (6) видно, что остановка движения границы поры произойдет в случае $A_d = A_n$. После преобразования (6) получим условие остановки поры:

$$\frac{P}{Y_0} = \frac{2}{3} \frac{R_0^3 \ln \left(1 + \frac{3}{4\pi N R_0^3} \right) - R^3 \ln \left(1 + \frac{3}{4\pi N R^3} \right) + \frac{3}{4\pi N} \ln \frac{4\pi N R_0^3 + 3}{4\pi N R^3 + 3}}{R_0^3 - R^3}. \quad (7)$$

С учетом (2) получим уравнение, определяющее зависимость начальной и конечной поврежденностей от отношения давления к пределу текучести:

$$\frac{P}{Y_0} = \frac{2}{3} \frac{\omega \ln \omega - \omega_0 \ln \omega_0 + (1 - \omega)(1 - \omega_0) \ln \frac{1 - \omega}{1 - \omega_0}}{\omega_0 - \omega}. \quad (8)$$

Как следует из (8), процесс компактирования определяется только безразмерными интегральными характеристиками ω_0 , ω , P/Y_0 . Очевидно, что для каждого ω_0 существует минимальное критическое значение P_k/Y_0 , при котором возможно полное компактирование, т. е. $R = 0$. Оно определяется соотношением

$$\frac{P_k}{Y_0} = -\frac{2}{3} \left(\ln \omega_0 - \frac{1 - \omega_0}{\omega_0} \ln \frac{1}{1 - \omega_0} \right). \quad (9)$$

Кроме того, существует другой критический уровень — отношение P_0/Y_0 , при котором поврежденность вообще не будет изменяться. Это условие $\frac{dA_d}{dR} - \frac{dA_n}{dR} = 0$, из которого после вычислений получаем следующее соотношение:

$$\frac{P_0}{Y_0} = \frac{2}{3} \ln \frac{1}{\omega_0}. \quad (10)$$

На рис. 2 показаны расчетные зависимости поврежденности ω от отношения P/Y , полученные по уравнениям (7)–(10). Видно, что существуют три характерные области: полного, неполного компактирования и так называемая *мертвая зона*, в которой не происходит никакого движения. Для полного компактирования необходимо воздействие давлением больше минимального критического, т. е. $P \geq P_k = -\frac{2}{3} Y_0 \left(\ln \omega_0 - \frac{1 - \omega_0}{\omega_0} \ln \frac{1}{1 - \omega_0} \right)$. Если давление меньше критического, $\frac{P_0}{Y_0} < \frac{P}{Y_0} < \frac{P_k}{Y_0}$, то поврежденность уменьшается до значения, определяемого уравнением (8).

Интересным следствием уравнения (8) является сильная зависимость результатов компактирования от последовательности воздействия импульсами давления. Если первый импульс давления P_1 имеет амплитуду такую, что $P_0 < P_1 < P_k$, то поврежденность уменьшается с ω_0 до ω_1 . При этом для полного компактирования ω_1 следующий импульс давления должен быть больше: $P_2 > P_1$, т. е. проявляется свойство неаддитивности процесса компактирования.

Расчетные зависимости поврежденности от времени в случае действия постоянного давления $P = 3$ ГПа при разной прочности, полученные по уравнениям (2), (6), показаны на рис. 3. Расчеты сделаны для меди с параметрами $\rho_0 = 8,93$ г/см³; $R_0 = 0,05$ см; $R_{я} = 0,074$ см ($\omega = 0,3$; $N = 852$ см⁻³). Из рис. 3 видно, что с увеличением прочности время компактирования увеличивается. Для сравнения на рисунке приведена зависимость $\omega(t)$, полученная по модели компактирования из работы [2]:

$$\left\{ \begin{array}{l} P = 0 \quad \text{при} \quad \omega > \omega_0; \\ P = P_k \left[1 - \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^{1/2} \right] \\ \omega = 0 \quad \text{при} \quad P > P_k. \end{array} \right. \quad \text{или} \quad \omega = \omega_0 \left(1 - \frac{P}{P_k} \right)^2 \quad \text{при} \quad P < P_k \quad \text{и} \quad \omega < \omega_0; \quad (11)$$

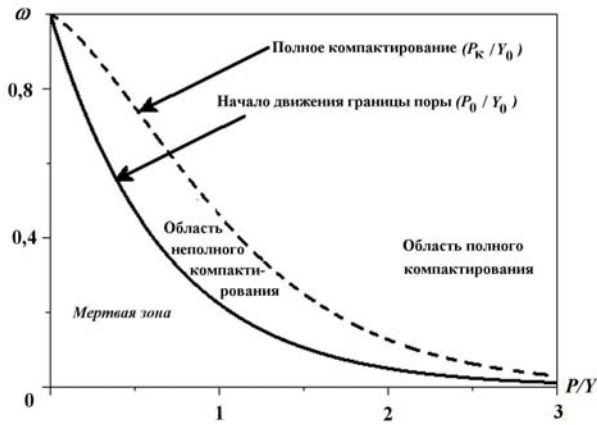


Рис. 2. Расчетные зависимости поврежденности от P_k/Y_0 и P_0/Y_0

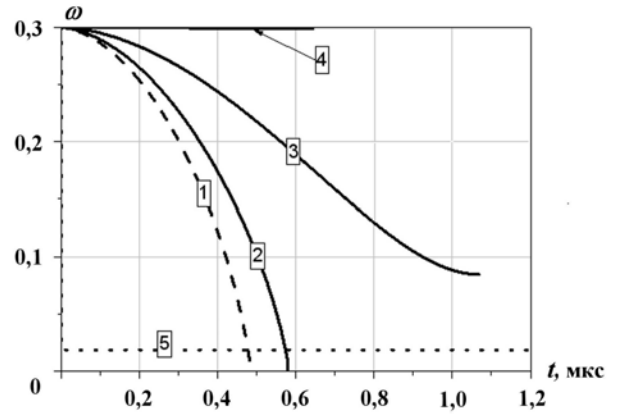


Рис. 3. Зависимости поврежденности от времени при разной прочности ($P_0 = 3$ ГПа; $R_0 = 0,05$ см): 1 — $Y = 0$; 2 — $Y_0 = 1,0$ ГПа; 3 — $Y_0 = 2,5$ ГПа; 4 — $Y_0 = 3,81$ ГПа; 5 — по модели из работы [2]

При расчете по этой модели для меди выбраны постоянные параметры: $P_k = 4$ ГПа, $\omega_0 = 0,3$. Уравнение (11) не зависит от прочности, откуда следует, что компактирование происходит всегда при $P < P_k$, тогда как согласно уравнениям (1)–(10) может быть такое сочетание P/Y , при котором поврежденность не изменится (кривая 4 на рис. 3).

Тестирование уравнения (6) проведено по двумерной эйлеровой методике счета для компактирования одиночной поры в меди ($\rho_0 = 8,93$ г/см³) с параметрами $R_0 = 0,05$ см и $R_0 = 0,0015$ см и соответствующими радиусами ячейки $R_{я} = 0,074$ см и $R_{я} = 0,0022$ см. В обоих случаях поврежденность одинакова: $\omega = 0,3$. В расчетах задавалась одна ячейка (см. рис. 1) с прочностью Y_0 под действием постоянного давления P_0 .

На рис. 4, 5 показаны зависимости радиуса от времени, полученные при расчете по двумерной эйлеровой методике и по уравнению (6). Видно, что зависимости близки по форме и времени полного компактирования, что свидетельствует о корректности выбранного подхода.

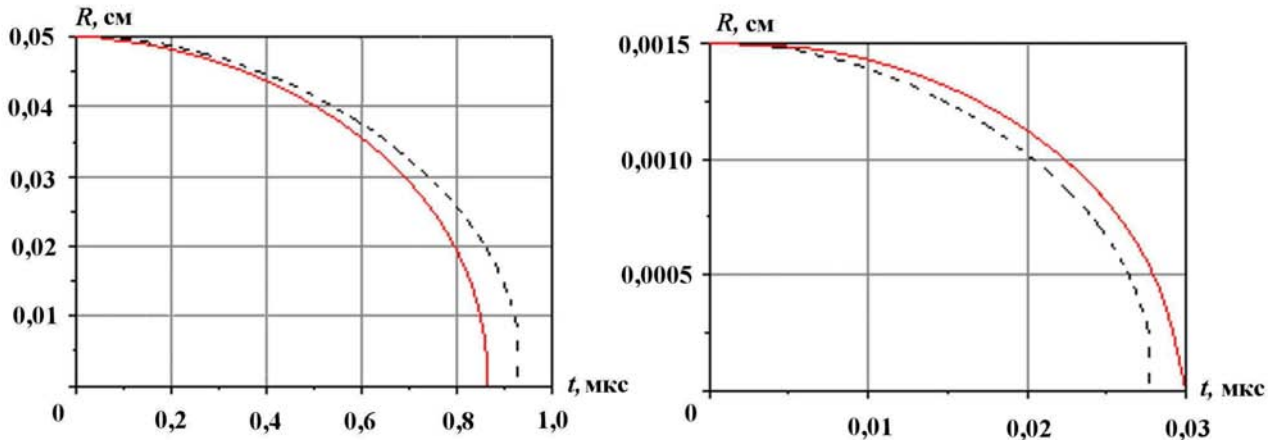


Рис. 4. Зависимости радиуса от времени, $P = 1,0$ ГПа; $Y = 0,05$ ГПа: — — расчет по двумерной методике; — — расчет по уравнению (6)

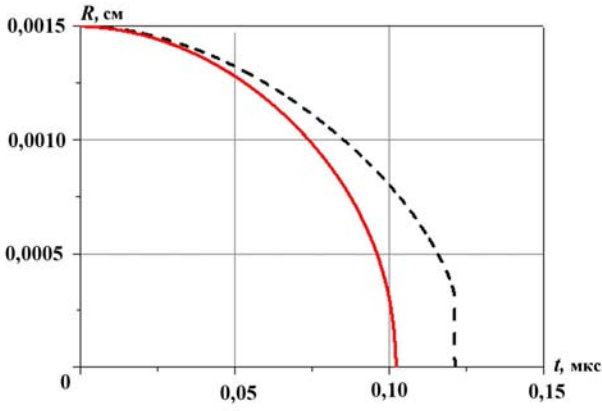


Рис. 5. Зависимости радиуса от времени, $P = 0,1$ ГПа; $Y = 0,05$ ГПа: --- расчет по двумерной методике; — — — расчет по уравнению (6)

Отметим, что уменьшение размера поры с $R_0 = 0,05$ см до $R_0 = 0,0015$ см уменьшает время компактирования с $t \sim 0,9$ мкс до $t \sim 0,03$ мкс. Уменьшение действующего на пору давления в десять раз приводит к увеличению времени компактирования примерно в 4 раза.

В случае, когда на границе ячейки давление переменное, следует рассматривать уравнение

$$\frac{2\pi\rho(R_{\text{я}} - R)R^3\dot{R}^2}{R_{\text{я}}} = 4\pi \int_0^t P(t)R^2\dot{R}dt - A_{\text{п}}(t).$$

В случае переменного предела текучести уравнение для пластической работы усложняется:

$$A_{\text{п}} \approx \int_0^t dt \int_R^{R_{\text{я}}} 8\pi Y_d(\varepsilon_i, \dot{\varepsilon}_i, T) \frac{\dot{R}R^2}{r} dr = \frac{8\pi}{3} \int_0^t Y_d \ln\left(1 + \frac{3}{4\pi R^3 N}\right) R^2 \dot{R} dt.$$

Уравнение для изменения радиуса поры в общем случае имеет вид

$$\dot{R} = - \sqrt{\frac{R_{\text{я}}}{\rho R^3 (R_{\text{я}} - R)} \left\{ \int_0^t \left[2C_1 P(t) - \frac{4}{3} C_2 Y_d(\varepsilon_i, \dot{\varepsilon}_i, T) \ln\left(1 + \frac{3}{4\pi N R^3}\right) \right] R^2 \dot{R} dt \right\}}, \quad (12)$$

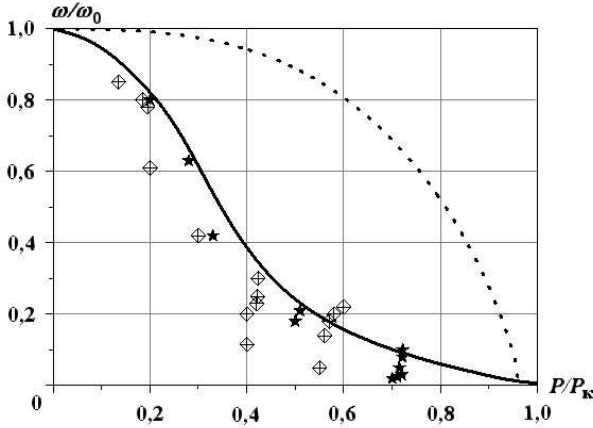


Рис. 6. Экспериментальные и расчетные зависимости ω/ω_0 от P/P_K : ⊠ — эксперимент [5], $\omega_0 = 0,356$; ★ — эксперимент [5], $\omega_0 = 0,15$; — — — расчет с переменным пределом текучести; - - - — расчет по уравнениям (2)–(6) с постоянным пределом текучести $Y = 0,1$ ГПа

где C_1 и C_2 — постоянные коэффициенты, введенные для корректировки уравнения (12). Для группы пор следует использовать уравнение компактирования отдельной поры (12) и далее рассчитывать поврежденность по уравнению (2).

Проведены расчеты зависимости поврежденности от давления в меди с использованием переменного (учитывающего влияние деформирования) и постоянного пределов текучести — по эйлеровой методике с моделью прочности РИНГ [4] и с использованием уравнений (2)–(6) при $Y_0 = 0,1$ ГПа; $\rho_0 = 8,93$ г/см³; $R_0 = 0,0015$ см; $R_{\text{я}} = 0,0022$ см; $\omega = 0,3$.

На рис. 6 показаны расчетные зависимости ω/ω_0 от P/P_K в сравнении с экспериментальными данными из работы [5]. Видно, что расчет с моделью прочности РИНГ, учитывающей сложную зависимость предела текучести от параметров напряженно-деформированного состояния, позволяет описать большинство экспериментальных резуль-

татов. Лучшего согласия с экспериментами можно добиться, подбирая постоянные коэффициенты C_1 и C_2 в (12), благодаря которым учитывается отличие компактирования сферических пор от реальных. В качестве определяющих моделей среды можно использовать уравнения [6]

$$\tilde{Y}_d = (1 - \omega) Y_d; \quad \tilde{G} = (1 - \omega) G; \quad \tilde{P} = (1 - \omega) P \left(\frac{\rho}{1 - \omega}, T \right).$$

Заключение

Предложена кинетическая модель компактирования поврежденности, которая учитывает влияние временной зависимости действующего давления, прочности, начальной поврежденности и кинетики процесса. Аналитические решения, полученные для постоянных значений давления и прочности, согласуются с численными расчетами, что свидетельствует о корректности используемого подхода. Анализ решений показывает сложную картину процесса компактирования.

Основные выводы следующие:

1. Процесс компактирования зависит не только от давления и прочности, но и от начальной поврежденности: чем меньше поврежденность, тем больше давление, которым необходимо воздействовать на вещество для его полного компактирования.
2. Существует два критических значения отношения давления к прочности:
 - 1) минимальный уровень P_0/Y , при котором возможно уменьшение поврежденности; при $P/Y \ll P_0/Y$ поврежденность не изменяется;
 - 2) уровень P_k/Y , при котором происходит полное компактирование.

Согласно полученному решению уменьшение поврежденности до конечного значения происходит в интервале $P_0/Y \ll P/Y < P_k/Y$.

3. Процесс и конечное состояние материала зависят не только от давления, но и от его временной зависимости. Это обусловлено инерцией сжатия пор.

Список литературы

1. *Carrol M. M., Holt A. C.* Static and dynamic pore-collapse relations for ductile porous materials // J. Appl. Phys. 1972. Vol. 43. P. 1626—1635.
2. *Огородников В. А., Садовой А. А., Софронов В. Н. и др.* Кинетическая модель пластического разрушения с учетом диссипативных процессов // Хим. физика. 2002. Т. 21, № 9. С. 104—109.
3. *Rayleigh* // Phil. Mag. 1917. Vol. 34. P. 94.
4. *Глушак Б. Л., Игнатова О. Н., Надёжин С. С., Раевский В. А.* Релаксационная модель сдвиговой прочности пяти металлов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2012. Вып. 2. С. 25—36.
5. *Boade R. R.* Compression of porous copper by shock waves // J. Appl. Phys. 1968. Vol. 39, No 12. P. 5639—5702.
6. *Подурец М. А.* Термодинамическая модель пористого тела // Мат. моделирование. 1996. Т. 8, № 2. С. 29—31.

Статья поступила в редакцию 15.05.13.

УДК 533.9

ШЕСТИПОТОКОВАЯ ДВУМЕРНАЯ МЕТОДИКА ЭГАК-МП6 ДЛЯ РАСЧЕТА ОБРАЗОВАНИЯ И ДВИЖЕНИЯ РАЗРЕЖЕННОЙ ПЛАЗМЫ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

И. М. Анисина, М. Ю. Егужова, В. А. Жмайло, О. Е. Кочеткова, Ю. В. Янилкин
(РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров)

Приводится многопотоковая модель для расчета образования и движения разреженной плазмы в геомагнитном поле (*многопотоковое* магнитно-газодинамическое приближение). Представлена двумерная методика ЭГАК-МП6, использующая эту модель в шестипотоковом варианте. Приводятся результаты расчетов по этой методике ядерного взрыва в операции "Морская звезда". Результаты расчетов сравниваются с имеющимися экспериментальными данными.

Ключевые слова: ядерный взрыв, операция "Морская звезда", магнитное поле, методика ЭГАК-МП6.

Введение

В 1958—1962 гг. в нашей стране и США было проведено несколько серий ядерных взрывов (ЯВ) в верхних (выше 150 км) слоях атмосферы [1, 2]. Многообразие и масштабность эффектов, которые проявились в этих опытах, позволяют рассматривать их в качестве уникальных источников данных по физике ионосферы, магнитосферы и общей физике плазмы. В течение многих лет эти эффекты привлекают внимание исследователей: основные экспериментальные данные приведены в работах [3—8], расчетно-теоретическому описанию посвящены работы [4, 9—16].

Среди теоретических подходов в основном используются три.

Первый (и наиболее строгий) — *гибридная* модель. В этой модели движение ионов описывается уравнениями Власова, а электроны рассматриваются как *безмассовая жидкость*. Такой подход [9, 10] весьма эффективен при расчетах начальной стадии взрыва ($t \leq 2\pi/\omega_i$, где $\omega_i \approx 10^{-2}$ с — ионная ларморовская частота), однако его реализация для более поздних моментов времени оказывается довольно сложной. Кроме того, возникают трудности с учетом столкновений между частицами.

Второй подход [15, 16] состоит в использовании стандартных уравнений магнитной газовой динамики (МГД). Такие уравнения достаточно оправданны для *столкновительной* плазмы, однако в рассматриваемых задачах, когда пробеги частиц гораздо больше их ларморовских радиусов, их применение трудно обосновать. Тем не менее данный подход допускает сравнительно простую численную реализацию и позволяет рассчитывать развитие ЯВ до больших ($t \gg 1$ с) моментов времени.

Третий подход (он рассматривается в данной работе) основан на *многопотоковом* МГД-приближении для решения исходной системы уравнений Максвелла—Больцмана. При этом подходе в рассматриваемом течении выделяется несколько *потоков*: безмассовых электронов и тяжелых частиц (заряженных и нейтральных, *быстрых* и *медленных*, частиц продуктов взрыва (ПВ) и атмосферы). Подробное описание этого подхода приведено в [17] и разд. 1 данной работы. На его основе были созданы численные методики с использованием моделей разной сложности [10, 11, 17, 18].

В настоящей работе описана двумерная лагранжево-эйлерова шестипотоковая методика ЭГАК-МП6, которая является наиболее полной (с точки зрения учета физических процессов) из развиваемых в настоящее время многопотоковых методик.

1. Многопоточковая модель. Полное описание шестипоточковой модели

Наиболее строгая математическая формулировка задачи о движении плазмы в магнитном поле сводится к записи системы уравнений Больцмана с интегралами столкновений, учитывающими довольно большое число различных типов взаимодействий между частицами, а также взаимодействие заряженных частиц с внешним геомагнитным полем. Для самосогласованного учета эффектов поля исходная система уравнений должна быть дополнена уравнениями Максвелла.

Итак, исходная система уравнений имеет следующий вид:

– уравнения Больцмана–Власова для частиц сорта α

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \vec{v} \nabla f_\alpha + \frac{e_\alpha}{m_\alpha} \vec{F} \frac{\partial f_\alpha}{\partial \vec{v}} = J_\alpha(\vec{v}), \quad (1)$$

где $f_\alpha(\vec{v}, \vec{r}, t)$ – функция распределения; e_α и m_α – заряд и масса частиц сорта α ;

– сила Лоренца

$$\vec{F} = \vec{E} + \frac{1}{c} [\vec{v} \times \vec{H}]; \quad (2)$$

– интеграл столкновений частиц сортов α и β

$$J_\alpha(\vec{v}) = \sum_\beta J_{\alpha\beta}(\vec{v}). \quad (3)$$

Система замыкается квазистационарными уравнениями Максвелла

$$\frac{\partial \vec{H}}{\partial t} = -c \operatorname{rot} \vec{E}; \quad \operatorname{rot} \vec{H} = \frac{4\pi \vec{j}}{c} \quad (4)$$

и законом Ома [19]

$$e \left(\vec{E} + \frac{1}{c} [\vec{u}_e \times \vec{H}] \right) = \vec{R}_e. \quad (5)$$

Здесь \vec{R}_e – сила трения между электронами и тяжелыми частицами; \vec{H} – вектор напряженности магнитного поля; \vec{j} – плотность электрического тока; $\vec{u}_e = \vec{u}_i - \vec{j}/(en_e)$, где \vec{u}_i – среднемассовая скорость ионов.

Для численного решения системы (1)–(5) используются различные приближенные подходы.

Как отмечалось выше, многопоточковая МГД-модель предусматривает выделение в рассматриваемом течении нескольких потоков: безмассовых электронов, а также тяжелых частиц (заряженных и нейтральных, быстрых и медленных, частиц ПВ и атмосферы). Количество потоков может меняться в зависимости от требований решаемой задачи и количества рассматриваемых веществ. Учитываются основные механизмы столкновительного и бесстолкновительного взаимодействия между потоками.

Формально этот подход состоит в использовании некоторых приближенных представлений для функций распределения $f_\alpha(\vec{v}, \vec{r}, t)$. Наиболее известный пример такого подхода в кинетической теории газов – метод моментов Грэда [20].

Подробно процесс получения уравнений многопоточковой модели описан в [17]. Исходным является так называемое бимодальное представление для описания функции распределения f_α для каждого рассматриваемого вещества:

$$f_\alpha(\vec{r}, \vec{v}, t) = \sum_{j=1,2} n_\alpha^{(j)} \varphi_\alpha^{(j)}, \quad (6)$$

где

$$\varphi_\alpha^{(j)} = \frac{1}{\left[(c_\alpha^j)^2 \pi \right]^{3/2}} \exp \left(- (x_\alpha^j)^2 \right), \quad (x_\alpha^j)^2 = \frac{(\vec{v} - \vec{u}_\alpha^{(j)})^2}{2 (c_\alpha^j)^2}, \quad (c_\alpha^j)^2 = \frac{T_\alpha^{(j)}}{m_\alpha};$$

$n_{\alpha}^j(\vec{r}, t)$ — плотность; \vec{u}_{α}^j — скорость; $T_{\alpha}^{(j)}$ — температура частиц соответствующего потока. Представлению (6) соответствует разделение частиц (каждого из сортов α) на две группы: медленных и быстрых, получивших значительную энергию от ЯВ. Такое представление является приближенным, однако, как показывают соответствующие оценки и расчеты, оно позволяет получать непрерывные переходы к большому числу различных предельных случаев задач о взрыве (газодинамика и вакуум; течения с большими и малыми числами Маха, в том числе *альфвеновское*; течения нейтрального и полностью ионизированного газа и т. п.) [21, 22].

Подставив (6) в исходную систему (1) и выполнив соответствующее интегрирование, можно получить систему уравнений для среднемассовых характеристик каждого из введенных выше потоков. Для замыкания этой системы необходимо конкретизировать вид интегралов столкновений $J_{\alpha\beta}(\vec{v})$ и вычислить соответствующие моменты от этих интегралов. Количество типов частиц и интервал относительных скоростей их движения, которые реализуются в задаче, приводят к необходимости рассматривать практически все типы столкновений, известных в атомной физике. Для упрощения задачи приходится выбирать в качестве основных те или иные из них. Этот выбор в значительной мере определяет модель образования и движения плазмы в данной задаче.

На основании данных о сечениях атомных столкновений и оценок их возможной роли в рассматриваемых течениях в модель включены следующие типы столкновений:

1. Упругие столкновения между тяжелыми частицами. Учитываются кулоновские сечения для столкновений между ионами и сечения, полученные для экранированного кулоновского потенциала, для столкновений с участием нейтральных атомов.
2. Упругие столкновения между электронами и тяжелыми частицами. Для ионов используется кулоновское сечение, для атомов — сечение, полученное с учетом уравнений [23].
3. Неупругие столкновения между тяжелыми частицами. В качестве основных рассматриваются перезарядка и ионизация. Сечение перезарядки выбирается с учетом данных [24, 25]. Исходя из них и из предположения, что ввиду большой доли возбужденных частиц, участвующих в столкновениях, перезарядка идет резонансным образом, для сечения используется формула Сена [26]. Что касается сечений по ионизации, то используются самые простые формулы, а именно полученные В. П. Фирсовым в 60-е годы [27]. Исследования показывают, что они неплохо описывают эксперимент (с точностью до "двойки"), особенно в области относительных скоростей, где сечение максимально [28].
4. Неупругие столкновения с участием электронов. Сечения ионизации и возбуждения атомов электронным ударом описываются соотношением из работы [29], причем считается, что эти процессы идут из основных состояний. Учитывается также фоторекомбинация (согласно [29]).

Вычисление моментов от интегралов столкновений перечисленных типов является довольно сложной задачей, учитывая, что каждый из таких моментов зависит от большого числа аргументов (температуры, скорости, плотности потоков), а сечения столкновений также имеют сложный вид. Поэтому при таких вычислениях используется ряд приближений. Основное из них состоит в том, что необходимые уравнения для моментов получаются как интерполяционные между двумя предельными случаями, в которых для данных интегралов столкновений можно получить сравнительно строгие выражения, — это случаи холодных потоков и потоков с малой относительной скоростью.

В модели, используемой в методике ЭГАК-МП6, разделение плазмы на потоки проводится по следующим признакам: частицы ПВ и атмосферы, заряженные и нейтральные частицы, быстрые и медленные — всего 8 потоков плюс безмассовые электроны. В целях некоторого упрощения задачи и с учетом особенностей возникающего течения (см. ниже) число рассчитываемых потоков в данной модели уменьшено с 8 до 6 за счет того, что быстрые и медленные потоки в каждом из сортов частиц ПВ (заряженных и нейтральных) объединены в один поток.

Таким образом, в данной модели рассчитывается движение и взаимодействие следующих потоков: 1) ионы ПВ; 2) нейтральные атомы ПВ; 3) быстрые ионы атмосферы; 4) быстрые нейтральные атомы атмосферы; 5) медленные ионы атмосферы; 6) медленные атомы атмосферы. Кроме этих потоков, рассчитывается безмассовый электронный компонент плазмы.

Каждый из указанных потоков характеризуется своими значениями плотности, скорости и температуры. Для потока решаются следующие уравнения:

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho_k \vec{u}_k) = S_k = \sum_j S_{jk}; \quad (7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_k \vec{u}_k) + \operatorname{div}(\rho_k \vec{u}_k \vec{u}_k) + \nabla p_k + \frac{\chi_k \rho_k}{\rho_e \varphi_k} \left(\nabla p_e - \frac{1}{c} [\vec{j} \times \vec{H}] \right) = \sum_j \left(S_{jk} \vec{u}_j + \vec{F}_{kj} \right) + \vec{U}_k + \vec{G}_k; \quad (8)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_k \varepsilon_k) + \operatorname{div}(\rho_k \varepsilon_k \vec{u}_k) + p_k \operatorname{div} \vec{u}_k = \sum_j \left[S_{jk} \left(\varepsilon_j + \frac{w_{kj}^2}{2} \right) + \vec{F}_{kj} \vec{u}_j \xi_{jk} + Q_{kj} \right] + Q_{ke} + Q_{ke}^{inel}. \quad (9)$$

Для электронов

$$\rho_e = \sum_k \frac{\rho_k \chi_k}{\varphi_k}; \quad \rho_e \vec{u}_e = \sum_k \frac{\rho_k \vec{u}_k \chi_k}{\varphi_k}; \quad (10)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_e \varepsilon_e) + \operatorname{div}(\rho_e \varepsilon_e \vec{u}_e) + p_e \operatorname{div} \vec{u}_e = - \sum_k Q_{ke} - \sum_k Q_{ke}^{inel} - \sum_k \vec{u}_k \vec{U}_k. \quad (11)$$

В уравнениях (7)–(11) ρ_k , n_k , \vec{u}_k , ε_k , p_k , χ_k — характеристики k -го потока: плотность, концентрация, скорость, энергия, давление и степень ионизации соответственно. При этом считается, что все заряженные потоки однократно ионизованы, а степень ионизации нейтральных потоков равна 0, т. е.

$$\chi_k = \begin{cases} 1, & k = 1, 3, 5; \\ 0, & k = 2, 4, 6. \end{cases} \quad \text{Также использованы обозначения: } \vec{w}_{kj} = \vec{u}_j - \vec{u}_k; \quad \varphi_k = m_k/m_0 - \text{относи-}$$

тельная масса частиц потока k , где m_k — обезразмеренная масса атома для потока k , m_0 — масса стандартного атома; $B_0 = 1/m_0$ — параметры, возникающие при обезразмеривании.

Уравнения для магнитного поля \vec{H} и тока \vec{j} в случае идеально проводящей плазмы:

$$\frac{\partial \vec{H}}{\partial t} = \operatorname{rot} [\vec{u}_e \times \vec{H}]; \quad \vec{j} = \frac{c}{4\pi} \operatorname{rot} \vec{H}. \quad (12)$$

Уравнения состояния тяжелых частиц такие же, как для идеального газа (все эти частицы считаются одноатомными):

$$p_k = \varepsilon_k (\gamma - 1) \rho_k; \quad \varepsilon_k = \frac{1}{m_k} \frac{T_k}{(\gamma - 1)};$$

уравнения состояния для электронов:

$$p_e = \rho_e T_e \frac{1}{m_0}; \quad \varepsilon_e = \frac{1}{m_0} \left(\frac{T_e}{\gamma - 1} + J \right),$$

где $\rho_e = n_e m_0$; $J = \sum_{k=1,3,5} n_k J_k / n_e$, J_k — потенциалы первой ионизации атомов ПВ и воздуха соответственно.

В данной модели выполняются законы сохранения массы, импульса, полной энергии.

Источники, представленные в правых частях уравнений (7)–(11), описывают обмен массами, изменение импульсов и внутренней энергии потоков в результате различных взаимодействий: неупругих, таких как ионизация, перезарядка, рекомбинация, и упругих. Характер взаимодействий зависит от их сечений.

Например, источник S_{jk} , описывающий обмен массами, представляется в виде

$$S_{jk} = \tilde{S}_{jk} + \delta S_{jk},$$

где \tilde{S}_{jk} описывает переходы частиц между потоками j и k за счет изменения заряда, а δS_{jk} — переход частиц атмосферы из медленных в быстрые потоки за счет упругих столкновений и ларморовского ускорения (для ионов). Для четных k (для корректной записи индексы разделены запятой)

$$\tilde{S}_{k-1,k} = 0; \quad \tilde{S}_{k,k} = -A_k \rho_k; \quad \tilde{S}_{k+1,k} = B_{k+1} \rho_{k+1};$$

для нечетных k

$$\tilde{S}_{k-1,k} = A_{k-1} \rho_{k-1}; \quad \tilde{S}_{k,k} = -B_k \rho_k; \quad \tilde{S}_{k+1,k} = 0.$$

Здесь

$$A_k = \sum_{j=1}^6 A_{jk} + A_{ek}, \quad A_{jk} = \theta_{jk} n_j (1 - \chi_j), \quad A_{ek} = \Omega_k n_e;$$

$$B_k = \sum_{j=1}^6 B_{jk} + B_{ek}, \quad B_{jk} = \Lambda_{kj} n_j + \theta_{kj} n_j \chi_j, \quad B_{ek} = \Lambda_{ke} n_e;$$

θ_{jk} — коэффициент перезарядки между частицами потоков j и k ; Ω_k — скорость рекомбинации; Λ_{kj} — скорость ионизации частиц потока k частицами потока j ; Λ_{ke} — скорость ионизации электронным ударом. В матрице δS_{jk} отличны от нуля только δS_{53} и $\delta S_{55} = -\delta S_{53}$. Здесь $\delta S_{53} = \hat{\omega} \rho_5 n_3$, где $\hat{\omega} = 0$ в области 1, $\hat{\omega} = \omega/\rho_e$ в области 2 (области 1 и 2 заняты электронами ПВ и атмосферы соответственно).

Слагаемые \vec{F}_{kj} в уравнениях движения (8) описывают изменение импульса потока k за счет упругих столкновений его частиц с частицами потока j :

$$\vec{F}_{kj} = \frac{\mu_{kj}}{m_k} \rho_k N_j \vec{w}_{kj} \nu_{jk}, \quad \mu_{kj} = \frac{\varphi_k \varphi_j}{\varphi_k + \varphi_j},$$

где ν_{jk} — коэффициент, характеризующий частоту упругих столкновений между потоками.

Аналогично, источники Q_{kj} и Q_{ke} описывают эффекты упругих столкновений при непосредственном упругом взаимодействии частиц k и j (или электронов):

$$Q_{kj} = \frac{2\mu_{kj}}{M_{kj}} \rho_k n_j \nu_{jk} \left(\varepsilon_j \frac{m_j}{m_k} - \varepsilon_k \right), \quad M_{kj} = \varphi_k + \varphi_j; \quad Q_{ke} = 2m_e \rho_k n_e \nu_{ek} \left(B_k \frac{T_e}{\gamma - 1} - \varepsilon_k \right).$$

Члены \vec{U}_k и Q_{ke}^{inel} описывают изменение импульса и энергии потоков в результате ионизации столкновениями тяжелых частиц:

$$Q_{ke}^{inel} = \begin{cases} -\frac{B_0}{\gamma - 1} \sum_{j=1}^6 \left[\zeta_{kj} (I_{kj} \Delta_{kj} + I_{jk} \Delta_{jk}) + \zeta_{k+1j} I_{k+1j} \Delta_{k+1,j} \right], & k - \text{нечетное;} \\ -\frac{B_0}{\gamma - 1} \sum_{j=1}^6 \zeta_{kj} I_{jk} \Delta_{jk}, & k - \text{четное,} \end{cases}$$

где $\zeta_{kj} = 2\varepsilon_k / y_{kj}^2$, $y_{kj}^2 = (\vec{u}_j - \vec{u}_k)^2 + 2(\varepsilon_j + \varepsilon_k)$; $I_{kj} = n_k \Lambda_{kj} n_j (1 - \chi_k)$, Δ_{kj} — энергия ионизации частицы k при столкновении с частицей j ;

$$\vec{U}_k = \frac{B_0}{\gamma - 1} \sum_{j=1}^6 \left[\frac{\vec{w}_{kj}}{y_{kj}^2} (I_{kj} \Delta_{kj} + I_{jk} \Delta_{jk}) \right] \quad \forall k, \quad \vec{w}_{ki} = \vec{u}_k - \vec{u}_i.$$

Вектор \vec{G}_k в (8) характеризует магнитное ламинарное взаимодействие между потоками:

$$\vec{G}_k = \frac{m_0 \chi_k \rho_k \omega_0}{m_k H_0} \left[(\vec{u}_k - \vec{u}_e) \times \vec{H} \right],$$

где $\omega_0 = eH_0 / (m_0 c)$, e — заряд электрона, c — скорость света.

Конкретные выражения для источников здесь не приводятся ввиду их громоздкости.

2. Методика ЭГAK-МП6

При численной реализации данной системы уравнений в рамках методики ЭГAK предполагается, что вся область рассматриваемого течения может включать в себя несколько потоков частиц разного сорта (компонентов)*. Каждый из компонентов обладает своими полем скоростей и термодинамическими параметрами: плотностью, энергией, давлением и др., характеризующими данный сорт частиц. Потоки частиц взаимодействуют друг с другом по определенным законам, обмениваясь импульсом, массой и энергией. Используется единая для всех компонентов счетная сетка, состоящая из четырехугольных ячеек, которая может двигаться в процессе счета по определенным исполнителям расчета алгоритмам; в простейшем случае сетка является неподвижной. В методике предполагается, что плотности, концентрации, компоненты магнитного поля и энергии определены в ячейке, скорости определены в узлах.

Перед началом очередного шага по времени все величины для компонентов заданы на единой счетной сетке. Численное решение системы уравнений производится с использованием метода расщепления на несколько этапов:

- 1) расчет *магнитной добавки* в уравнении движения;
- 2) решение уравнений газовой динамики для каждого компонента в лагранжевых переменных (лагранжев этап газовой динамики);
- 3) расчет магнитного поля;
- 4) учет конвективных потоков для всех величин (эйлеров этап);
- 5) учет взаимодействия между компонентами.

Расчет магнитной добавки в уравнении движения. В уравнение движения (8) входит изменение скорости за счет магнитной добавки:

$$\frac{d\vec{u}_i}{dt} = \frac{\chi_i}{\rho_e \varphi_i} \frac{1}{c} [\vec{j} \times \vec{H}].$$

Уравнение изменения скорости за счет магнитной силы $\vec{f}_m = [\vec{j} \times \vec{H}]$ для осесимметричного движения и магнитного поля $\vec{H} = (H_r, 0, H_z)$ можно представить в виде

$$\begin{aligned} \frac{du_r}{dt} &= H_z \left(\frac{\partial H_r}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial r} \right) = H_z \frac{\partial H_r}{\partial z} - \frac{1}{2} \frac{\partial H_z^2}{\partial r}; \\ \frac{du_z}{dt} &= H_r \left(\frac{\partial H_z}{\partial r} - \frac{\partial H_r}{\partial z} \right) = H_r \frac{\partial H_z}{\partial r} - \frac{1}{2} \frac{\partial H_r^2}{\partial z}. \end{aligned}$$

Для аппроксимации частных производных воспользуемся интегральным представлением [30]. Применяя эти формулы к четырехугольнику (в рассматриваемом случае это ромб 2031, представленный на рис. 1), получаем

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial x} &= \frac{1}{A} \left[\frac{F_0}{2} (y_0 - y_2) + \frac{F_1}{2} (y_3 - y_0) + \frac{F_3}{2} (y_1 - y_3) + \frac{F_2}{2} (y_2 - y_1) \right]; \\ \frac{\partial F}{\partial y} &= -\frac{1}{A} \left[\frac{F_0}{2} (x_0 - x_2) + \frac{F_1}{2} (x_3 - x_0) + \frac{F_3}{2} (x_1 - x_3) + \frac{F_2}{2} (x_2 - x_1) \right]. \end{aligned}$$

Здесь F_0, F_1, F_2, F_3 — значения функции F в узлах 0, 1, 2, 3 соответственно; A — площадь ромба.

Полученные значения аппроксимируют производные в узле C , окруженном четырьмя прилегающими к нему ячейками. На данном этапе происходит передача полученных значений на соседние процессоры.

*Дальнейшая замена термина *поток* на термин *компонент* делается во избежание путаницы с магнитным потоком и потоками других физических величин (объема, массы и т. д.), используемыми в настоящей работе.

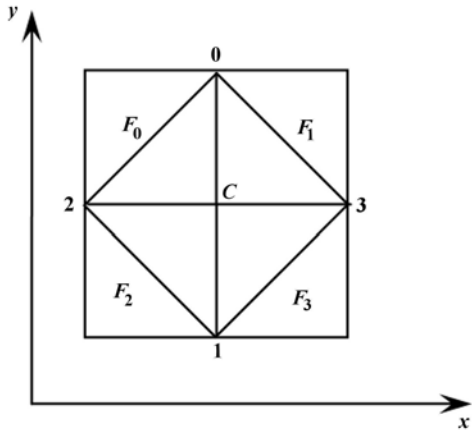


Рис. 1. Применение интегральной формулы к сеточному шаблону

Лагранжев этап газовой динамики. Лагранжев этап представляет собой решение уравнений газовой динамики для каждого компонента и электронов в лагранжевых переменных.

Исходная система уравнений (7)–(9) с нулевыми правыми частями для ионов, решаемая на данном этапе, эквивалентна следующей:

$$\frac{d\vec{u}_i}{dt} = -\frac{1}{\rho_i} \text{grad } P_i - \frac{\chi_i}{\rho_e \varphi_i} \text{grad } P_e; \quad (13)$$

$$\frac{d\rho_i}{dt} = -\rho_i \text{div} \vec{u}_i; \quad (14)$$

$$\frac{de_i}{dt} = -\frac{P_i}{\rho_i} \text{div} \vec{u}_i; \quad (15)$$

$$\frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{u}_i. \quad (16)$$

При численной реализации системы (13)–(16) в уравнения (13), (15) к давлению добавляется счетная вязкость компонента. В данном случае это квадратичная искусственная вязкость, $q_i = k\rho_i(h_i \text{div} u_i)^2$, i — номер компонента. Система уравнений (13)–(16) замыкается уравнением состояния среды для каждого компонента: $P_i = P_i(\rho_i, e_i)$.

Исходная система уравнений для электронов эквивалентна следующей:

$$\rho_e = \sum_i \frac{\chi_i \rho_i}{\varphi_i}; \quad (17)$$

$$\rho_e \vec{u}_e = \sum_i \frac{\chi_i \rho_i \vec{u}_i}{\varphi_i}; \quad (18)$$

$$\frac{de_e}{dt} = -\frac{P_e}{\rho_e} \text{div} \vec{u}_e. \quad (19)$$

Здесь суммирование ведется только по нечетным i ; $\varphi_i = m_i/m_0$, где m_0 — константа. При численной реализации системы (17)–(19) в уравнение (19) к давлению добавляется счетная вязкость электронов. Система уравнений (17)–(19) замыкается уравнением состояния среды для электронного компонента: $P_e = P_e(\rho_e, e_e)$.

Перед началом счета по компонентам рассчитывается *электронная добавка* $\chi_i \text{grad } P_e / (\rho_e \varphi_i)$ в уравнении движения, которая затем прибавляется к приращению скорости, рассчитанному на данном этапе.

Разностная схема решения уравнений газовой динамики описана в работе [31]. Остановимся лишь на изменениях, связанных с распараллеливанием. Поскольку вычисления производятся только по явным схемам, можно воспользоваться типовой схемой поточечного распараллеливания [32].

Все вычисления лагранжева этапа разбиваются на шесть подэтапов:

1. Определение давления электронов $P_e = P_e(\rho_e, e_e)$ в центрах счетных ячеек, рассчитываемых на данном процессоре (для краткости — ячеек данного процессора), а также ячеек двух доступных слоев *перекрывтия процессоров* (в дальнейшем такие слои будем называть *внешними*). Передача данных на соседние процессоры на этом подэтапе нет.
2. Вычисления, аппроксимирующие уравнения движения, связанные с градиентом давления электронов. Результатом являются значения ускорений электронов в центрах граней ячеек данного процессора и двух внешних слоев. Передача данных нет.
3. Определение давления каждого компонента $P_i = P_i(\rho_i, e_i)$ в центрах ячеек данного процессора, а также ячеек двух внешних слоев. Передача данных нет.

4. Вычисления, аппроксимирующие уравнения движения для компонентов. Результат вычислений — значения ускорений в центрах граней ячеек данного процессора и двух внешних слоев. Передач данных нет.
5. Определение новых скоростей в узлах счетной сетки для каждого компонента и электронов и передача полученных значений на соседние процессоры.
6. Определение новых координат узлов сетки (они разные для разных компонентов) и выполнение вычислений, аппроксимирующих уравнения неразрывности и энергии для ячеек данного процессора и двух внешних слоев. Результатом являются значения энергий, плотностей и объемных концентраций для компонентов. Передач данных нет.

МГД-этап. На этом этапе выполняется расчет изменения магнитного поля (12). Схема расчета основана на использовании интегрального вида уравнения (12). В работе В. М. Головизнина и др. [33] для двумерной МГД применяется закон сохранения магнитного потока через лагранжевы поверхности, являющиеся диагоналями ячеек сетки. Аналогичная идея применена авторами настоящей статьи в двумерной МГД в коде ЭГЭК.

Итак, соотношения, полученные из уравнения (12)

$$\frac{\partial H_r}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} (u_{er} H_z - u_{ez} H_r); \quad \frac{\partial H_z}{\partial t} = -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r (u_{er} H_z - u_{ez} H_r) \right],$$

выражают закон сохранения магнитного потока через любую замкнутую лагранжеву поверхность для *вмороженного* в среду магнитного поля. Это свойство потока используется для разностной аппроксимации.

На лагранжевом этапе расчета сохраняются магнитные потоки Φ_0 , Φ_1 через поверхности от вращения на один радиан вокруг оси симметрии диагоналей счетной ячейки (рис. 2):

$$\Phi_0^{n+1} = \Phi_0^n; \quad \Phi_1^{n+1} = \Phi_1^n. \quad (20)$$

Положительным направлением будем считать направление при повороте диагоналей l_0 , l_1 против часовой стрелки.

Выражения для магнитных потоков в координатной записи выглядят следующим образом:

$$\begin{aligned} \Phi_0 &= (-H_z \Delta r_{03} + H_r \Delta z_{03}) r_{03}; \\ \Phi_1 &= (-H_z \Delta r_{12} + H_r \Delta z_{12}) r_{12}, \end{aligned} \quad (21)$$

где $\Delta r_{mn} = r_m - r_n$; $\Delta z_{mn} = z_m - z_n$; $r_{mn} = (r_m + r_n) / 2$.

Запишем с учетом сохранения потоков (20) и формул (21) выражения для вычисления нового магнитного поля:

$$H_z^{n+1} = \frac{1}{2S^{n+1}} \left(\frac{\Phi_0^n \Delta z_{12}}{r_{03}} - \frac{\Phi_1^n \Delta z_{03}}{r_{12}} \right)^{n+1}; \quad H_r^{n+1} = \frac{1}{2S^{n+1}} \left(\frac{\Phi_0^n \Delta r_{12}}{r_{03}} - \frac{\Phi_1^n \Delta r_{03}}{r_{12}} \right)^{n+1},$$

где $S^{n+1} = \frac{1}{2} (\Delta z_{03} \Delta r_{12} - \Delta r_{03} \Delta z_{12})^{n+1}$.

Некоторые особенности реализации связаны с предполагаемой вмороженностью магнитного поля в электроны. Электроны находятся во всей области, поэтому возникает проблема отслеживания контактной границы электронов, находящихся в ПВ. В настоящей работе ее положение определяется по скорости электронов. На данном этапе передаются массивы с радиусами электронов и значения величин hx , hy .

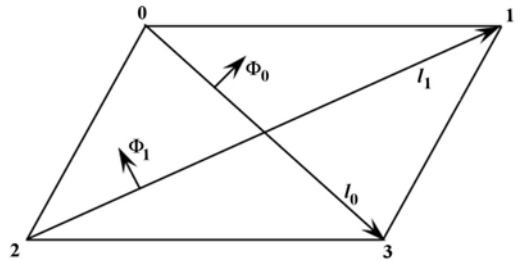


Рис. 2. Сеточный шаблон для расчета магнитного поля

Эйлеров этап газовой динамики. На этом этапе строится новая счетная сетка, которая является единой для всех компонентов (как правило, сетка возвращается в свое первоначальное положение). Пересчитывается магнитная энергия по каждому координатному направлению:

$$E_{mr} = \frac{H_r^2}{2}; \quad E_{mz} = \frac{H_z^2}{2}.$$

Новым значениям составляющих вектора магнитного поля присваивается знак, который у них был после расчета лагранжева этапа. Также производится учет конвективных потоков для всех компонентов, т. е. решаются уравнения

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla (\vec{u}_i \rho_i) = 0; \quad \frac{\partial}{\partial t} (\rho_i \vec{u}_i) + \nabla (\rho_i \vec{u}_i \vec{u}_i) = 0; \quad \frac{\partial \rho_i e_i}{\partial t} + \nabla (\rho_i e_i \vec{u}_i) = 0.$$

При этом в качестве начальных данных используются значения величин, полученные на лагранжевом этапе вычислений.

Разностная схема на данном этапе практически ничем не отличается от используемой на этапе адвекции в газодинамической методике ЭГМК [31]. Заметим только, что имеются схемы как первого порядка аппроксимации (донорный метод), так и третьего порядка (метод РРМ).

Отметим особенности, связанные с распараллеливанием. Поскольку все схемы эйлерова этапа также являются явными, то и здесь можно воспользоваться типовой схемой поточечного распараллеливания [32].

Все вычисления на данном этапе разбиваются на пять подэтапов:

1. Определение покомпонентных потоков объема ΔV_i через грани ячеек, а также новых объемных концентраций β_i для всех ячеек текущего процессора. Передач данных на соседние процессоры на этом подэтапе нет.
2. Вычисление потоков массы компонентов и новых плотностей. Одновременно с вычислениями происходит передача на соседние процессоры рассчитанных величин (потоков объема и массы через стороны, новых значений концентраций и плотностей) для гранично-процессорных точек.
3. Интерполяция всех остальных величин, определенных на единицу массы (или объема) ячейки или единицу массы (или объема) компонента, включая внутреннюю энергию. Передач данных нет.
4. Расчет потоков импульса для всех ячеек процессора, а также всех ячеек одного (ближайшего) внешнего слоя. Расчет потоков импульса для одного внешнего слоя позволяет избежать передач потоков между процессорами при расчете значений узловых скоростей. На этом подэтапе производится передача значений величин, рассчитанных на подэтапе 3.
5. Пересчет составляющих вектора скорости каждого компонента для всех ячеек процессора и ячеек двух внешних слоев, а также передача рассчитанных скоростей на соседние процессоры.

Этап обмена между компонентами. В общем виде система уравнений, описывающих обмен массой, импульсом и энергией каждого из компонентов k со всеми остальными компонентами и электронами, выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_k}{\partial t} &= \sum_j S_{jk}; \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho_k \vec{u}_k) &= \sum_j \left(S_{jk} \vec{u}_j + \vec{F}_{jk} \right) + \vec{G}_k + \vec{U}_k; \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho_k \varepsilon_k) &= \sum_j \left[S_{jk} \left(\varepsilon_j + \frac{w_{kj}^2}{2} \right) + \vec{F}_{kj} \vec{w}_{kj} \xi_j + Q_{kj} \right] + Q_{ke} + Q_{ke}^{inel}; \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho_e \varepsilon_e) &= - \sum_k Q_{ke} + \frac{B}{\gamma - 1} \sum_k \sum_j I_{kj} \Delta_{kj}. \end{aligned}$$

Детальное описание правых частей приведено в разд. 1. Вычисления производятся с данными, полученными на предыдущем этапе, которым ниже соответствуют переменные без временного индекса или с индексом n .

Разностный аналог системы уравнений имеет следующий вид:

$$m_k^{n+1} = m_k^n + \tau \sum_j S_{jk} V \beta_{sec}, \quad (22)$$

где $\beta_{sec} = \beta_k + \beta_j - 1$ есть объем пересечения двух компонентов; $m_k^n = \rho_k V \beta_k$ — масса компонента k ; V — объем ячейки. Взаимодействие происходит между компонентами 1 и 2, 3 и 4, 5 и 6, 3 и 5. Из (22) имеем

$$\rho_k^{n+1} = \frac{m_k^{n+1}}{V_k \beta_k}.$$

Была исследована также неявная разностная схема для масс компонентов, подобная описанной в [17].

Интегрируя систему уравнений движения по объему ячейки импульса (она включает в себя четвертинки окружающих данный узел ячеек, см. [31]) и используя явную разностную схему первого порядка аппроксимации, получаем систему разностных уравнений

$$u_k^{n+1} = \frac{m_k^{n*} u_k^n + \tau \beta_{sec} V \left(\sum_j S_{jk}^* u_j + F_{jk} + G_k + U_k \right)}{m_k^{(n+1)*}},$$

где $\tau = \Delta t$ — шаг по времени; m_k^* — масса k -го компонента; верхний индекс * у m_k и S_{jk} показывает, что значения массы и плотности здесь рассчитываются как средние арифметические по четырем ячейкам, окружающим узел, в котором рассчитывается скорость. Также отметим, что в связи с появлением азимутальной составляющей скорости в уравнении движения для r -й составляющей скорости появляется сила, равная $F_r = u_\varphi^2 / r$, а для φ -й компоненты — сила скорости $F_\varphi = u_\varphi u_r / r$.

Для аппроксимации уравнений энергии компонентов используется явная разностная схема первого порядка аппроксимации. Интегрируя уравнения энергии по объему ячейки, получаем следующую систему разностных уравнений:

$$m_k^{n+1} \varepsilon_k^{n+1} - m_k^n \varepsilon_k^n = \tau V \beta_{sec} \sum_j \left[S_{jk} \left(\varepsilon_j + \frac{w_{kj}^2}{2} \right) + F_{kj} w_{kj} \xi_j + Q_{kj} \right] + \tau V \beta_{sec} (Q_{ke} + Q_{ke}^{inel}),$$

откуда

$$\varepsilon_k^{n+1} = \frac{m_k^n \varepsilon_k^n + \tau V \beta_{sec} \sum_j \left[S_{jk} \left(\varepsilon_j + \frac{w_{kj}^2}{2} \right) + F_{kj} w_{kj} \xi_j + Q_{kj} \right] + \tau V \beta_{sec} (Q_{ke} + Q_{ke}^{inel})}{m_k^{n+1}}.$$

Заметим, что при вычислении энергии компонентов на $(n+1)$ -м временном шаге плотности, скорости и концентрации также берутся с предыдущего этапа вычислений.

Для аппроксимации уравнений энергии электронов используется явная разностная схема первого порядка аппроксимации. Интегрируя уравнения энергии электронов по объему ячейки, получаем

$$\varepsilon_e^{n+1} = \frac{m_e^n \varepsilon_e^n - \tau V \beta_{sec} \left(\sum_k Q_{ke} + \frac{B}{\gamma - 1} \sum_k \sum_j I_{kj} \Delta_{kj} \right)}{m_e^{n+1}}.$$

Поскольку все схемы данного этапа являются явными, можно воспользоваться типовой схемой поточечного распараллеливания [32].

Все вычисления разбиваются на три подэтапа:

1. Пересчет составляющих вектора скорости каждого компонента, измененных за счет обменов, для всех ячеек процессора и двух внешних слоев, а также передача рассчитанных скоростей на соседние процессоры.
2. Пересчет энергии каждого компонента, измененной за счет обменов, для всех ячеек процессора и двух внешних слоев, а также передача рассчитанных энергий на соседние процессоры.
3. Пересчет плотности каждого компонента, измененной за счет обменов, для всех ячеек процессора и двух внешних слоев, а также передача рассчитанных плотностей на соседние процессоры.

3. Расчеты операции "Морская звезда"

В качестве примера применения методики ЭГАК-МП6 был рассчитан американский взрыв "Морская звезда" — ЯВ с энерговыделением $q = 1400$ кт, который был произведен 9 июля 1962 г. в Тихом океане на высоте 400 км над о. Джонсон. В 2006 г. появилась статья [8], в которой содержится большое количество экспериментальных данных по операции "Морская звезда". По методике ЭГАК-МП6 были проведены секторные расчеты этой операции в направлениях вертикально вверх, вниз и горизонтально поперек линий магнитного поля.

Постановка расчетов. Начальные данные для этих расчетов задавались следующим образом. Считалось, что при $t = 0$ ПВ разлетелись на расстояние $R_0 = 5$ км. Их плотность постоянна по радиусу. Полная масса $M = 1000$ кг, полная энергия разлетающейся плазмы $E_0 = \frac{1}{6} E_{tot}$, где $E_{tot} = 1,4$ Мт, т. е. $E_0 \sim 10^9$ МДж. Предполагалось, что 90 % массы ПВ составляет масса ионов ПВ с учетом закалки (первый поток), а 10 % — масса нейтральных частиц ПВ (второй поток). Полагалось, что доля внутренней энергии ПВ составляет 10 % от полной начальной энергии ПВ, а доля кинетической энергии — 90 %. Профиль скорости линейный по радиусу. Скорость границы составляла $v_0 = 1730$ км/с.

Магнитное поле $\vec{H} = (H_x, H_y)$ в области $r > R_0$ задавалось как суперпозиция однородного магнитного поля \vec{H}_0 и поля магнитного диполя с радиусом R_0 , ориентированного по \vec{H}_0 . Принималось, что линии магнитного поля \vec{H}_0 направлены горизонтально и $\vec{H}_0 = 0,25$ Э;

$$H_x = H_0 \left[1 + \frac{R_0^3}{2} \frac{y^2 - 2x^2}{(x^2 + y^2)^{5/2}} \right]; \quad H_y = -1,5 H_0 x y \frac{R_0^3}{(x^2 + y^2)^{5/2}},$$

где $R_0 = 5$; $H_0 = 0,7$, что соответствует напряженности магнитного поля \vec{H}_0 в 0,25 Э. Характеристики атмосферы задавались в соответствии со справочником [34] и работой [8].

Подробнее постановка расчетов описана в работе [17].

На рис. 3, взятом из работы [8], представлены данные о размерах магнитной каверны в вертикальной плоскости XU в различные моменты времени.

На рис. 4 расчетные размеры каверны сравниваются с данными работы [8]. На рис. 5—7 представлены расчетные графики напряженности магнитного поля в сравнении с экспериментом. Значения напряженности нормированы на H_0 .

Заключение

Основные результаты работы состоят в следующем:

- разработана физическая модель для описания течений разреженной плазмы в магнитном поле, основанная на многопоточковом МГД-приближении;
- один из вариантов модели (шестипоточковый) реализован в виде двумерной лагранжево-эйлеровой методики ЭГАК-МП6;

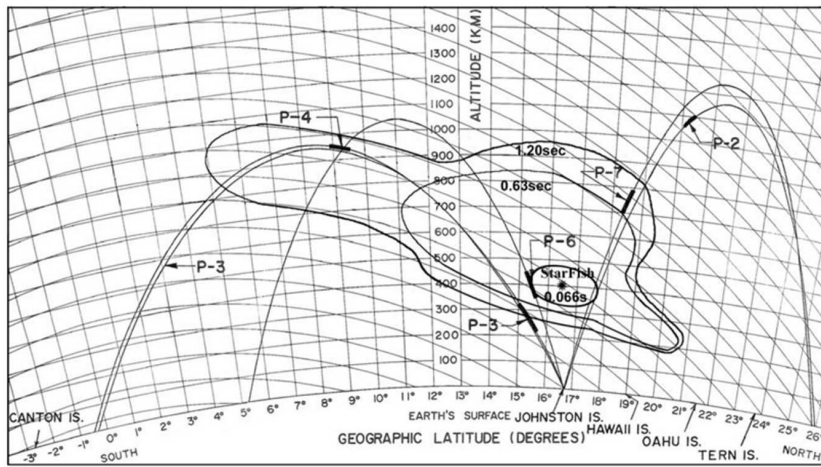


Рис. 3. Форма каверны в моменты времени $t = 0,066; 0,63; 1,2$ с; P-2, P-3, P-4 — ракеты, запущенные для измерения параметров области взрыва

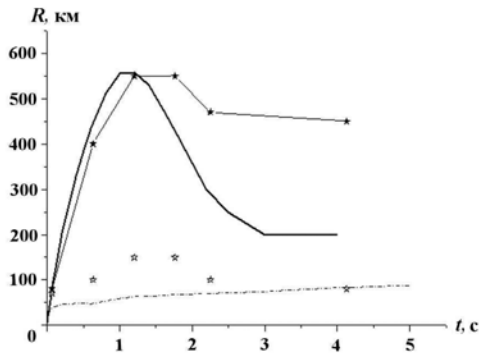


Рис. 4. Зависимости от времени радиусов каверны в направлениях вверх и вниз: —*— — вверх, данные из статьи [8]; — — вверх, расчет ЭГАК-МП6; * — вниз, данные из статьи [8]; ---- — вниз, расчет ЭГАК-МП6

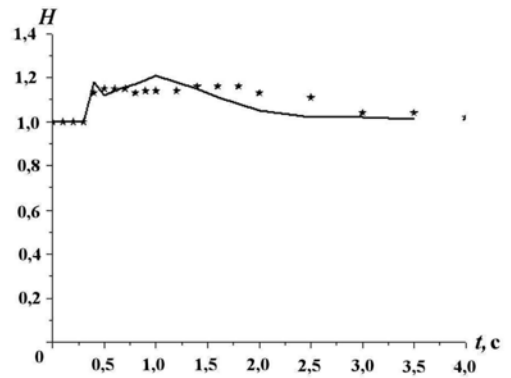


Рис. 5. Зависимость от времени напряженности магнитного поля: — — расчет ЭГАК-МП6; * — данные измерений ракетой P-2

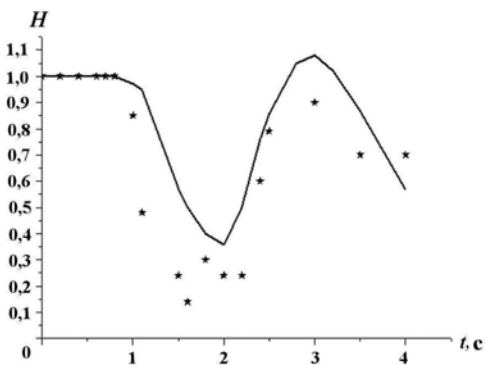


Рис. 6. Зависимость от времени напряженности магнитного поля: — — расчет ЭГАК-МП6; * — данные измерений ракетой P-4

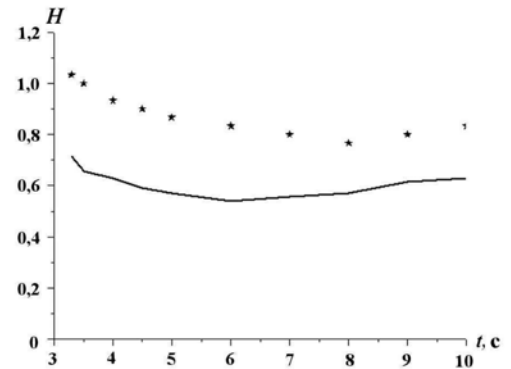


Рис. 7. Зависимость от времени напряженности магнитного поля: — — расчет ЭГАК-МП6; * — данные измерений ракетой P-3

– проведены секторные расчеты динамики плазмы и магнитного поля для опыта "Морская звезда", получено хорошее согласие с результатами измерений в опыте.

Приведенные результаты показывают, что методика ЭГАК-МП6 может применяться для расчета эффектов образования и движения плазмы в магнитном поле. В дальнейшем предполагается развитие физической модели и методики ЭГАК-МП6 и проведение как таких расчетов ЯВ, так и расчетов лазерных экспериментов по исследованию взаимодействия потоков разреженной плазмы с магнитным полем для верификации методики и валидации модели.

Список литературы

1. Ядерные испытания СССР. Т. 2. Лос-Аламос: Begell-Atom, 1998. С. 51–73.
2. *Hoerlin H.* US High-Altitude Test Experiments. LASL, LA-6405, 1976. Los Alamos National Laboratory Research Library, NM 87544.
3. Операция "Морская звезда". Сборник статей. М.: Атомиздат, 1964.
4. *Хесс В.* Радиационный пояс и магнитосфера. М.: Атомиздат, 1972.
5. *Berg R. A.* A Starfish Happening. Lockheed Missiles and Space Co. March, 1967. Rep. DASA—1925, AD-955681.
6. *Гаврилов Б. Г., Гайнуллин К. Г., Жмайло В. А. и др.* Геомагнитные эффекты от расширяющегося плазменного образования высотного ЯВ // ФГВ. 2004. Т. 40, № 6. С. 31–41.
7. *Bomke H. A., Balton I. A., Grote H. H., Harris A. K.* Near and distant observation of the 1962 Johnston Island high-altitude nuclear tests // J. of Geophys. Res. 1964. Vol. 69, No 15. P. 3125–3140.
8. *Dyal P.* Particle and field measurements of the starfish diamagnetic cavity // Ibid. 2006. Vol. 111. P. A12211.
9. *Голубев А. И., Соловьев А. А., Терехин В. А.* О бесстолкновительном разлете ионизированного облака в однородную замагниченную плазму // ПМТФ. 1978. № 5. С. 33–43.
10. *Башурин В. П., Голубев А. И., Терехин В. А.* О бесстолкновительном торможении ионизированного облака, разлетающегося в однородную замагниченную плазму // Там же. 1983. № 5. С. 10–17.
11. *Антоненко Э. М., Башурин В. П., Долголева Г. В., Жмайло В. А.* Метод расчета "двухпоточковых" вязких течений неравновесной плазмы в магнитном поле // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1995. Вып. 1–2. С. 48–53.
12. *Губков Е. В., Жмайло В. А., Самигулин М. С.* Образование и движение плазмы при сильных взрывах в магнитосфере (операция "Морская звезда") // Тез. докл. науч. конф. "II Забавинские научные чтения". Снежинск, 1995.
13. *Башурин В. П., Богуненко Ю. Д., Гайнуллин К. Г. и др.* Физические эффекты ЯВ в атмосфере // Высокие плотности энергии. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 1997.
14. *Жмайло В. А.* Физические эффекты космических ЯВ // Теоретики ВНИИЭФ. Прошлое и настоящее. Саров, 2003. С. 56–60.
15. *Холодов Я. А., Холодов А. С., Ступицкий Е. Л., Репин А. Ю.* Численное исследование поведения плазменного облака в верхней ионосфере // Математическое моделирование. 2005. Т. 17, № 11. С. 43–62.
16. *Ступицкий А. Е., Холодов А. С.* Моделирование динамики плазменного сгустка высокой удельной энергии в верхней атмосфере // Геомагнетизм и аэронавигация. 2012. Т. 52, № 4. С. 435–456.

17. Жмайло В. А., Анисина И. М., Будников В. И. и др. Физические эффекты ядерного взрыва в операции "Морская звезда" // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2008. Т. 13. С. 16–37.
18. Залялов А. Н., Жмайло В. А., Широков А. Е., Соболев И. В. Расчеты магнитного поля и потоков электронов в области взрыва операции "Морская звезда" // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2012. Вып. 3. С. 47–57.
19. Куликовский А. Г., Любимов Г. А. Магнитная гидродинамика. М.: Логос, 2005.
20. Grad H. On the kinetic theory of rare gases // Comm. Pure and Appl. Phys. 1949. Vol. 2. P. 331.
21. Башурин В. П., Долголева Г. В., Кочубей Ю. К., Терехин В. А. Кинетическое описание сильного взрыва в разреженном газе // ПМТФ. 1986. № 2. С. 80–85.
22. Бахрах С. М., Губков Е. В., Жмайло В. А., Терехин В. А. Разлет плазменного облака в однородном магнитном поле // Там же. 1974. № 4. С. 146–150.
23. Ландау Л. Д., Лившиц Е. М. Квантовая механика. М.: Наука, 1974.
24. Смирнов Б. М. Асимптотические методы в теории атомных столкновений. М.: Атомиздат, 1973.
25. Гольданский В. М., Никитин Е. Е., Смирнов Б. М. Теория столкновений атомных частиц. М.: Наука, 1981.
26. Сена Л. А. Столкновения электронов и ионов с атомами газа. Л.-М.: Физматгиз, 1948.
27. Фирсов В. П. Естественная трактовка средней энергии возбуждения электронов при атомных столкновениях // ЖЭТФ. 1959. Т. 36. С. 1517–1520.
28. Fleschmann H. H., Dehmel R. C., Lee S. K. Direct-transition features in stripping collisions of heavy neutral atoms and ions // Phys. Rev. A. 1972. Vol. 5, No 4. P. 1784–1798.
29. Вайнштейн Л. А., Соболев И. И., Юлов Е. А. Возбуждение атомов и уширение спектральных линий. М.: Наука, 1979.
30. Бронштейн И. Н., Семендяев К. И. Справочник по математике для инженеров и учащихся втузов. М.: Наука, 1986.
31. Янилкин Ю. В., Беляев С. П., Бондаренко Ю. А. и др. Эйлеровы численные методики ЭГАК и ТРЭК для моделирования многомерных течений многокомпонентной среды // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2008. Вып. 12. С. 54–68.
32. Беляев С. П. Метод мелкозернистого распараллеливания с динамической балансировкой на примере задачи газовой динамики и вычислительные эксперименты на параллельной системе // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2000. Вып. 1. С. 45–49.
33. Головизнин В. М., Коршия Т. К., Самарский А. А., Фаворский А. В. О вариационно-разностных схемах двумерной магнитной гидродинамики: Препринт № 57. М.: ИПМ АН СССР, 1977.
34. Околосветное космическое пространство. Справочник / Под ред. Ф. С. Джонсон. М.: Мир, 1966.

Статья поступила в редакцию 30.04.13.

УДК 533.9

АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ МОДЕЛЬНОЙ ЗАДАЧИ О ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С ПЛОСКИМ СЛОЕМ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛАЗМЫ

А. И. Голубев, Н. П. Пятаков
(РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров)

Сформулирована модельная задача о взаимодействии лазерного излучения с плоским слоем пространственно-однородной электронной плазмы. При этом сделан ряд предположений, позволяющих перейти от кинетического уравнения Власова для электронной плазмы к простой гидродинамической модели.

Получено аналитическое решение модельной задачи. Оно может быть использовано для тестирования программ, с помощью которых выполняются численные исследования взаимодействия лазерного излучения с плазмой, и для предварительных оценок пространственных шагов при таких исследованиях.

Ключевые слова: бесстолкновительная плазма, уравнения Максвелла, уравнение Власова, гидродинамическая модель.

Введение

Численное моделирование широко применяется при проведении исследований во многих областях физики плазмы. Одной из таких областей является взаимодействие лазерного излучения с плазмой. Отметим, что при этом, как правило, для моделирования поведения плазмы используется численный метод *частица в ячейке* [1].

Для указанных задач трудно получить априорные оценки характерных пространственных масштабов изменения решения, и поэтому сложно заранее сделать обоснованный выбор пространственных шагов, требуемых при их расчете. Важность вопроса о выборе счетных параметров при численном моделировании взаимодействия лазерного излучения с плазмой подтверждается тем, что в каждой публикации по данной теме обычно приводятся сведения о пространственных шагах использованных сеток и, зачастую, о числе модельных частиц в ячейке (см., например, [2–4]).

В данной работе сформулирована и решена аналитически модельная задача о взаимодействии лазерного излучения с плоским слоем пространственно-однородной электронной плазмы. При ее формулировке сделан ряд предположений, позволяющих перейти от кинетического уравнения Власова для электронной плазмы к простой гидродинамической модели.

Полученное аналитическое решение может оказаться полезным для тестирования программ, с помощью которых выполняются численные исследования взаимодействия лазерного излучения с плазмой, и для предварительных оценок пространственных шагов при таких исследованиях.

Уравнения модельной задачи

Напомним, что математическая модель, используемая при численном исследовании взаимодействия лазерного излучения с бесстолкновительной плазмой, как правило, включает в себя релятивистские кинетические уравнения Власова для функций распределения ионов и электронов $f_\alpha(t, \mathbf{r}, \mathbf{p})$ (индекс α обозначает сорт частиц) и уравнения Максвелла для напряженностей электромагнитного

поля $\mathbf{E}(t, \mathbf{r})$ и $\mathbf{H}(t, \mathbf{r})$. Здесь t — время, (\mathbf{r}, \mathbf{p}) — координаты в фазовом пространстве. В дальнейшем при записи этих уравнений будем использовать декартову систему координат (x, y, z) .

Сформулируем модельную задачу, последовательно упрощая систему кинетических уравнений и уравнений Максвелла. Прежде всего предположим, что ионные компоненты плазмы на рассматриваемой стадии взаимодействия лазерного излучения с плазмой остаются неподвижными. Тогда останется только кинетическое уравнение Власова для функции распределения электронов, так что индекс α в дальнейшем будем опускать. Будем также полагать, что все входящие в уравнения величины не зависят от переменных y, z , а дополнительные условия таковы, что компоненты E_z, H_x, H_y электромагнитного поля равны нулю. В этом случае получаем типичную пространственно-одномерную математическую модель, которая находит широкое применение при изучении различных задач физики плазмы.

Уравнения этой модели имеют вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v_x \frac{\partial f}{\partial x} - (E_x + v_y H_z) \frac{\partial f}{\partial p_x} - (E_y - v_x H_z) \frac{\partial f}{\partial p_y} = 0; \quad (1)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} + j_x = 0; \quad (2)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} + j_y = -\frac{\partial H_z}{\partial x}; \quad \frac{\partial H_z}{\partial t} = -\frac{\partial E_y}{\partial x}. \quad (3)$$

Функция распределения в (1) зависит от переменных t, x, p_x, p_y . Скорость \mathbf{v} , кинетическая энергия электронов ε , а также их плотность тока \mathbf{j} и концентрация n вычисляются по формулам

$$\mathbf{v} = \frac{\mathbf{p}}{\sqrt{1 + p^2}}, \quad \varepsilon = \sqrt{1 + p^2} - 1, \quad \text{где } p^2 = p_x^2 + p_y^2; \quad (4)$$

$$\mathbf{j} = - \int \int dp_x dp_y \mathbf{v} f(t, x, p_x, p_y); \quad n = \int \int dp_x dp_y f(t, x, p_x, p_y). \quad (5)$$

Уравнения пространственно-одномерной математической модели (1)–(5) записаны в специальной системе единиц измерения, связь которой с системой единиц СГС, обычно используемой при записи исходных уравнений, имеет вид ($[s]$ означает единицу измерения величины s)

$$[t] = \tau_*; \quad [x] = x_* = c\tau_*; \quad [p] = p_* = m_e c; \quad [f] = \frac{n_*}{p_*^2}; \quad [\varepsilon] = m_e c^2; \quad [E] = [H] = E_* = \frac{m_e c}{e\tau_*}.$$

Здесь e, m_e — заряд и масса электрона; время τ_* равно обратной плазменной частоте ω_p , $\tau_* = \omega_p^{-1} = (4\pi n_* e^2 / m_e)^{-1/2}$.

Далее предполагается, что решение уравнений (1)–(3) вычисляется в области $D = \{x_{\min} \leq x \leq x_{\max}\}$ при следующих дополнительных условиях:

– в начальный момент времени $t = 0$ электроны холодные, т. е.

$$f(t = 0, x, p_x, p_y) = n_0(x) \delta(p_x) \delta(p_y);$$

– в начальный момент времени все компоненты электромагнитного поля в области D равны нулю;

– граничные условия для компонент электромагнитного поля заданы в виде

$$x = x_{\min}: E_y + H_z = 0; \quad x = x_{\max}: -E_y + H_z = 2\beta\varphi(t), \quad (6)$$

где β — некоторый параметр, характеризующий интенсивность линейно поляризованного лазерного излучения;

– электроны могут свободно переходить через границы области D .

При оценке точности результатов численного моделирования взаимодействия лазерного излучения с плазмой полезно использовать уравнение баланса энергии в системе *плазма — электромагнитное поле*. Из уравнений (1)—(3) нетрудно получить следующее уравнение для суммы плотности кинетической энергии w_k и плотности энергии поля w_p :

$$\frac{\partial}{\partial t}(w_k + w_p) = -\frac{\partial}{\partial x} \int \int dp_x dp_y \varepsilon v_x f - \frac{\partial}{\partial x} H_z E_y,$$

где $w_p = (E^2 + H^2)/2$; $w_k = \int \int dp_x dp_y \varepsilon f$; $E^2 = E_x^2 + E_y^2$; $H^2 = H_z^2$. После интегрирования этого уравнения по области $D = \{x_{\min} \leq x \leq x_{\max}\}$ и по времени t получим искомое уравнение баланса энергии:

$$W(t) + W_{k1}(t) + W_{k2}(t) + W_{f1}(t) + W_f^r(t) = W(t=0) + W_f^\beta(t). \quad (7)$$

Здесь введены следующие обозначения:

$$W(t) = \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} (w_k + w_p) dx;$$

$$W_{k1}(t) = -\int_0^t dt' \int \int dp_x dp_y \varepsilon v_x f(t', x_{\min}, p_x, p_y); \quad W_{k2}(t) = \int_0^t dt' \int \int dp_x dp_y \varepsilon v_x f(t', x_{\max}, p_x, p_y);$$

$$W_{f1}(t) = \int_0^t dt' E_y^2|_{x=x_{\min}}; \quad W_f^r(t) = \int_0^t dt' P_2^r, \quad P_2^r = (E_y|_{x=x_{\max}} + \beta\varphi)^2; \quad W_f^\beta(t) = \int_0^t dt' P_2^\beta, \quad P_2^\beta = (\beta\varphi)^2.$$

Компоненты вектора Пойнтинга на границах области D преобразованы с учетом дополнительных условий (6).

Из уравнения (7) следует, что коэффициент отражения $R(t)$ лазерного излучения от слоя плазмы равен

$$R(t) = \frac{W_f^r(t)}{W_f^\beta(t)}. \quad (8)$$

Сформулированная таким образом одномерная задача (1)—(3), (6) остается достаточно сложной для аналитического исследования. Перейдем от нее к более простой задаче, которую назовем модельной.

Будем считать движение электронов нерелятивистским; тогда в кинетическом уравнении (1) можно полагать, что $|H_z v_x| \ll |E_y|$. Дополнительно опустим в этом уравнении (конечно, без особых на то оснований) слагаемое с производной по x и не будем учитывать влияние на движение электронов компоненты $F_x = -(E_x + v_y H_z)$ силы Лоренца. Существенным упрощением в модельной задаче является отсутствие движения электронов вдоль оси x . Это означает, что их концентрация n остается неизменной по времени, т. е. $n = n_0(x)$. Кроме того, для холодной плазмы в качестве следствия упрощенного кинетического уравнения можно получить уравнение для компоненты j_y плотности тока

$$\frac{\partial j_y}{\partial t} = E_y n. \quad (9)$$

Отметим, что для модельной задачи имеет место уравнение баланса энергии вида (7) с той лишь разницей, что в нем потоки кинетической энергии через границы области D равны нулю: $W_{k1}(t) = W_{k2}(t) = 0$, а плотность энергии поля равна $w_p = (E_y^2 + H_z^2)/2$.

Аналитическое решение уравнений модельной задачи

Аналитическое решение уравнений (3), (9) с условиями (6) получим, полагая, что область D имеет вид $D = \{-\infty < x \leq x_{\max}\}$ ($x_{\max} > 0$), а плазма занимает область $x < 0$. Перейдем от переменной t

к новой переменной (к *задержанному* времени) $\tau = x + t - x_{\max}$, $\tau \geq 0$. Уравнение (9) при этом не изменится (только следует t заменить на τ), а уравнения (3) примут вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_y}{\partial \tau} + j_y &= -\frac{\partial H_z}{\partial x} - \frac{\partial H_z}{\partial \tau}; \\ \frac{\partial H_z}{\partial \tau} &= -\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_y}{\partial \tau}. \end{aligned} \quad (10)$$

Введем в рассмотрение инварианты Римана $F = H_z - E_y$; $G = H_z + E_y$. Из системы (10) для них получим

$$\frac{\partial F}{\partial x} + j_y = 0; \quad 2\frac{\partial G}{\partial \tau} + \frac{\partial G}{\partial x} + j_y = 0. \quad (11)$$

Согласно (6) дополнительные условия для функций F , G имеют вид

$$F(\tau, x = x_{\max}) = 2\beta\varphi(\tau); \quad G(\tau, x = -\infty) = 0. \quad (12)$$

Отметим, что, поскольку при $0 < x < x_{\max}$ $j_y = 0$, то из (11), (12) следует, что на этом интервале $F(\tau, x) = 2\beta\varphi(\tau)$.

Проще всего аналитическое решение поставленной задачи можно найти, сформулировав предварительно краевую задачу для компоненты E_y . Дифференцируя первое уравнение в (11) по переменной τ и учитывая определение инварианта F и второе уравнение из (10), получаем следующее уравнение для E_y :

$$2\frac{\partial^2 E_y}{\partial \tau \partial x} + \frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} = n_0 E_y. \quad (13)$$

Дополнительное условие для E_y при $x = -\infty$ получается из условия для G (12) и второго уравнения (10); оно имеет вид $\frac{\partial E_y}{\partial x} \rightarrow 0$ при $x \rightarrow -\infty$. Дополнительное условие при $x = x_{\max}$ получается после дифференцирования по τ условия (12) для функции F и учета второго уравнения (10); оно имеет вид

$$2\frac{\partial E_y}{\partial \tau} + \frac{\partial E_y}{\partial x} = -2\beta\frac{d\varphi}{d\tau}.$$

Сформулированная краевая задача будет решена аналитически для случая, когда в области $x < 0$, занимаемой плазмой, концентрация электронов постоянна: $n = n_0 = \text{const}$.

Используем для ее решения преобразование Лапласа. Положим

$$E(p, x) = \int_0^{\infty} e^{-p\tau} E_y d\tau; \quad g(p) = \beta \int_0^{\infty} e^{-p\tau} \varphi d\tau,$$

где p — аргумент преобразования Лапласа. Применяя преобразование Лапласа к уравнению (13), получаем обыкновенное дифференциальное уравнение для E

$$\frac{d^2 E}{dx^2} + 2p\frac{dE}{dx} = n_0 E, \quad (14)$$

которое следует решать при дополнительных краевых условиях

$$\frac{dE}{dx} \rightarrow 0 \quad \text{при } x \rightarrow -\infty; \quad 2pE + \frac{dE}{dx} = -2pg \quad \text{при } x = x_{\max}.$$

При этом на границе $x = 0$ должны быть непрерывны функция E и ее производная по x (это следует из непрерывности на этой границе функций E_y , H_z).

Нетрудно убедиться, что решение уравнения (14), удовлетворяющее краевым условиям, имеет следующий вид:

$$\text{при } x > 0 \quad E = -g + B_2 e^{-2px}; \quad \text{при } x < 0 \quad E = A_2 e^{\lambda_2 x}, \quad \lambda_2 = \sqrt{p^2 + n_0} - p. \quad (15)$$

Постоянные A_2 и B_2 определяются из условий непрерывности функции $E(x)$ и ее производной на границе $x = 0$:

$$-g + B_2 = A_2; \quad -2pB_2 = \lambda_2 A_2. \quad (16)$$

С учетом формул (15) и соотношений (16) искомое решение уравнения (14) может быть представлено в следующей форме:

$$\text{при } x > 0 \quad E = g \left(\frac{\sqrt{p^2 + n_0} - p}{\sqrt{p^2 + n_0} + p} e^{-2px} - 1 \right); \quad \text{при } x < 0 \quad E = -2g \frac{p}{\sqrt{p^2 + n_0} + p} e^{(\sqrt{p^2 + n_0} - p)x}. \quad (17)$$

Поскольку согласно второму уравнению в системе (10) образ по Лапласу H для компоненты H_z связан с E соотношением $H = -E - p^{-1} \frac{dE}{dx}$, то для H находим

$$\text{при } x > 0 \quad H = g \left(\frac{\sqrt{p^2 + n_0} - p}{\sqrt{p^2 + n_0} + p} e^{-2px} + 1 \right); \quad \text{при } x < 0 \quad H = 2g \frac{\sqrt{p^2 + n_0}}{\sqrt{p^2 + n_0} + p} e^{(\sqrt{p^2 + n_0} - p)x}. \quad (18)$$

Сначала, исходя из формул (17), (18), получим временное представление решения в области $x > 0$. Отметим, что при $x = 0$

$$E = e(p) = -2g \frac{p}{\sqrt{p^2 + n_0} + p}. \quad (19)$$

С учетом этого выражения формулу (17) для E при $x > 0$ можно записать в виде

$$E = -g(p) + g(p) e^{-2px} + e(p) e^{-2px}.$$

Отметим, что прообраз $\psi(\tau)$ для функции $e(p)$ можно представить в виде [5]

$$\psi(\tau) = -2\beta \int_0^\tau \frac{d\varphi(t')}{dt'} \frac{J_1(\sqrt{n_0}(\tau - t'))}{\sqrt{n_0}(\tau - t')} dt', \quad (20)$$

где $J_1(x)$ — функция Бесселя первого рода первого порядка. Следовательно, временное представление для E_y при $x > 0$ можно записать следующим образом:

$$E_y(\tau, x) = -\beta\varphi(\tau) + \left(\beta\varphi(\tau - 2x) + \psi(\tau - 2x) \right), \quad (21)$$

где слагаемые в правой части отличны от нуля только при положительных значениях аргументов.

Временное представление для H_z при $x > 0$ легко найти из соотношения $H_z = F + E_y = 2\beta\varphi(\tau) + E_y$:

$$H_z(\tau, x) = \beta\varphi(\tau) + \left(\beta\varphi(\tau - 2x) + \psi(\tau - 2x) \right). \quad (22)$$

Формулы (20)—(22) дают при $x > 0$ аналитическое решение модельной задачи с плотностью тока (9). Отметим, что слагаемые в скобках в (21), (22) соответствуют излучению, отраженному от плазмы.

Для аналитического решения (21), как и следовало ожидать,

$$P_2^r(t) = \left(\beta\varphi(t - 2x_{\max}) + \psi(t - 2x_{\max}) \right)^2,$$

причем $P_2^r(t) = 0$ при $t < 2x_{\max}$.

Теперь, снова исходя из формул (17), (18), получим временное представление решения в области $x < 0$. Согласно (17) в этой области $E(p, x) = e(p) e^{(\sqrt{p^2 + n_0} - p)x}$. Учитывая вид прообраза для

экспоненты в этой формуле ([5], формула (23)), временное представление $E_y(\tau, x)$ при $x < 0$ можно записать следующим образом:

$$E_y(\tau, x) = \psi(\tau) + \sqrt{n_0}x \int_0^\tau \psi(\tau - t') \frac{J_1\left(\sqrt{n_0}\sqrt{(t' - x)^2 - x^2}\right)}{\sqrt{(t' - x)^2 - x^2}} dt'. \quad (23)$$

Выражение для компоненты $H_z(\tau, x)$ в области $x < 0$ несложно написать, если учесть, что в ней согласно (18), (19) $H(p, x) = (2g(p) + e(p))e^{(\sqrt{p^2 + n_0} - p)x}$. Следовательно,

$$H_z(\tau, x) = 2\beta\varphi(\tau) + \psi(\tau) + \sqrt{n_0}x \int_0^\tau (2\beta\varphi(\tau - t') + \psi(\tau - t')) \frac{J_1\left(\sqrt{n_0}\sqrt{(t' - x)^2 - x^2}\right)}{\sqrt{(t' - x)^2 - x^2}} dt'. \quad (24)$$

Формулы (20)–(24) дают искомое аналитическое решение модельной задачи в области $D = \{-\infty < x \leq x_{\max}\}$; напомним, что в них $\tau = x + t - x_{\max}$, $\tau \geq 0$. В этом решении в силу линейности модельной задачи компоненты электромагнитного поля пропорциональны параметру β , характеризующему интенсивность лазерного излучения.

Полученное аналитическое решение имеет довольно сложный вид. Однако современные пакеты прикладных программ дают возможность вычислить значения компонент $E_y(\tau, x)$, $H_z(\tau, x)$ при требуемых значениях аргументов по приведенным выше формулам без особых усилий со стороны пользователя этих пакетов. Авторами статьи для этих целей использовался пакет Mathcad 14.

Замечание. В книге [1] для тестирования программ, в которых реализована пространственно-одномерная математическая модель (1)–(3), предлагается так называемая задача о предвестнике [6]. В ней рассматривается распространение имеющей малую амплитуду электромагнитной волны с частотой ω из вакуума в разреженную немагнитную плазму, плазменная частота которой $\omega_p < \omega$. В этом случае в плазме можно наблюдать сигналы (предвестники), опережающие основную часть волны. В книге [6] (формула (22.13)) приведено полученное А. Зоммерфельдом приближенное аналитическое решение этой задачи. Отметим, что в книге [1] в аналогичной формуле (7.2) допущена опечатка; чтобы согласовать эту формулу с формулой (22.13) из [6] (и восстановить в ней правильную размерность), выражение (7.2) для $f(x, t)$ в [1] следует (в обозначениях книги [1]) дополнительно умножить на функцию $x^{-1/2}$.

Покажем, что это же решение для предвестника может быть найдено в рамках рассмотренной выше модельной задачи, если при этом сделать те же предположения, что в книге [6].

Пусть зависимость $\varphi(t)$ в (6) задана в виде $\varphi(t) = \sin(\omega t)$. Будем, следуя А. Зоммерфельду, пренебрегать отражением волны от границы плазмы $x = 0$ и получим решение модельной задачи в области $x < 0$ для малых моментов времени τ , таких что $\omega\tau \ll 1$. В этом случае можно считать, что при выполнении обратного преобразования Лапласа основной вклад даст область значений параметра $p \gg \sqrt{n_0}$. Тогда при значениях $x < 0$ вместо исходного выражения для E (17) можно записать $E \approx -g \exp(n_0 x / 2p)$. Учитывая, что прообразом функции $p^{-1} \exp(-n_0 |x| / 2p)$ служит $J_0(\sqrt{2n_0 |x|} \tau)$ [5], где $J_0(x)$ — функция Бесселя первого рода нулевого порядка, получаем для $E_y(\tau, x)$ при $x < 0$ следующее выражение:

$$E_y(\tau, x) \approx -\beta \int_0^\tau \frac{d\varphi(t')}{dt'} J_0\left(\sqrt{2n_0 |x|}(\tau - t')\right) dt' = -\beta\omega \int_0^\tau \cos(\omega t') J_0\left(\sqrt{2n_0 |x|}(\tau - t')\right) dt'.$$

Для моментов времени τ , таких что $\omega\tau \ll 1$, последовательно имеем

$$E_y(\tau, x) \approx -\beta\omega \int_0^\tau J_0\left(\sqrt{2n_0 |x|} t'\right) dt' = -\frac{\beta\omega}{n_0 |x|} \int_0^{\sqrt{2n_0 |x|} \tau} t' J_0(t') dt' = -\frac{\beta\omega}{\sqrt{n_0}} \sqrt{2 |x|^{-1}} \tau J_1\left(\sqrt{2n_0 |x|} \tau\right).$$

Эта формула (с учетом отличий в принятых обозначениях и в выборе направления распространения волны) совпадает с формулой Зоммерфельда (22.13) [6] и с исправленной формулой (7.2) [1].

Обсуждение результатов численного моделирования

В дальнейшем более подробно рассмотрим важный частный случай, для которого зависимость $\varphi(t)$ в (6) имеет вид $\varphi(t) = \sin(\omega t)$, а частота лазерного излучения ω меньше плазменной частоты ω_p . При этом будем считать, что единица измерения концентрации электронов равна $n_* = n_0$, так что в формулах (20)–(24) надо положить $n_0 = 1$ и под частотой ω понимать отношение частоты лазерного излучения к плазменной частоте. При дальнейшем рассмотрении предполагается, что длительность лазерного импульса $\tau_i = 10\pi/\omega$, так что $\varphi(t) = 0$ при $\omega t > 10\pi$.

Для иллюстрации на рис. 1, 2 приведены временные зависимости для компонент E_y и H_z соответственно, полученные при разных частотах ω лазерного излучения на границе плазмы $x = 0$.

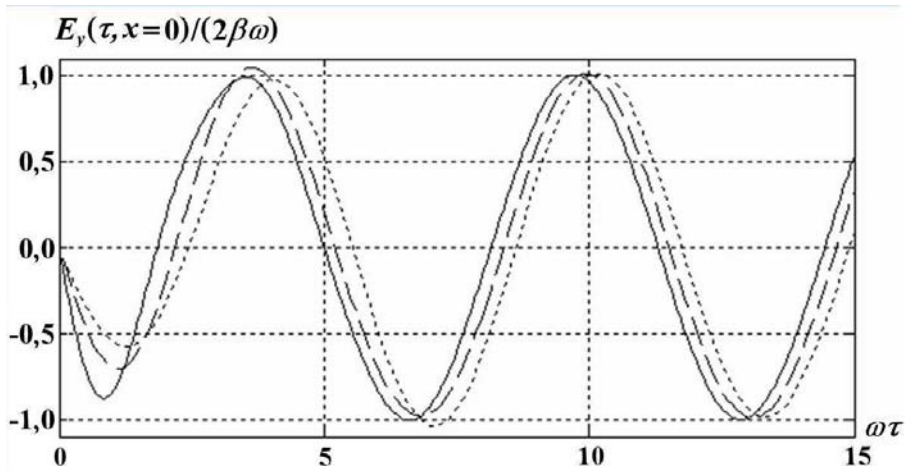


Рис. 1. Временные зависимости компоненты E_y на границе плазмы для разных частот: — — — $\omega/\omega_p = 0,3$; — — — — $\omega/\omega_p = 0,5$; - - - - $\omega/\omega_p = 0,7$

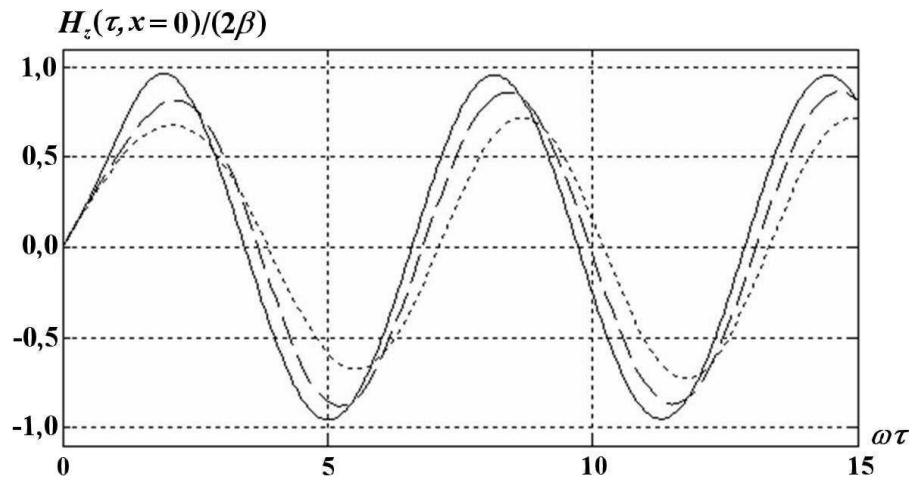


Рис. 2. Временные зависимости компоненты H_z на границе плазмы для разных частот: — — — $\omega/\omega_p = 0,3$; — — — — $\omega/\omega_p = 0,5$; - - - - $\omega/\omega_p = 0,7$

Видно, что наиболее изменена по сравнению с остальными форма первой полуволны во временной зависимости для компоненты E_y (см. рис. 1).

На рис. 3, 4 для разных частот ω приведены при фиксированных значениях времени t_m зависимости этих компонент от переменной x в области $x < 0$, занимаемой плазмой. Значения t_m — моменты времени, при которых компоненты E_y и H_z на границе плазмы $x = 0$ достигают вторых максимумов (согласно рис. 1, 2 для компоненты E_y $\omega(t_m - x_{\max}) = 10$, для компоненты H_z $\omega(t_m - x_{\max}) = 8,5$). Как и следовало ожидать, в области $x < 0$ происходит сильное затухание этих компонент.

При интерпретации полученных результатов воспользуемся дисперсионным соотношением, связывающим частоту ω и волновой вектор k электромагнитной волны, распространение которой описывается линейной системой уравнений (3), (9). Полагая, что все искомые величины в этой системе имеют пространственно-временную зависимость вида $\exp(i(-\omega t + kx))$, $i^2 = -1$, для амплитуд E_{y0} , H_{z0} , j_{y0} получим следующую однородную систему уравнений:

$$\omega E_{y0} - j_{y0} - kH_{z0} = 0; \quad kE_{y0} - \omega H_{z0} = 0; \quad nE_{y0} + \omega j_{y0} = 0,$$

где $n = 1$ (в системе СГС вместо n будет ω_p^2 , вместо k — произведение kc). Условие существования нетривиального решения этой системы приводит к хорошо известному дисперсионному соотноше-

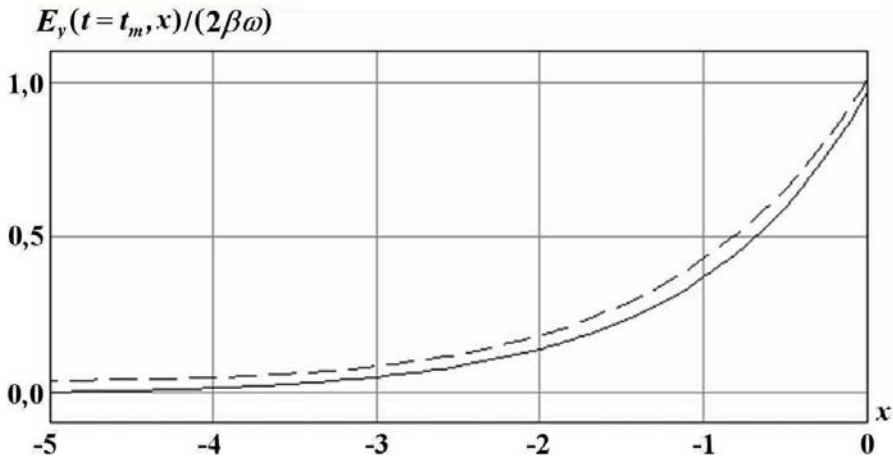


Рис. 3. Зависимость компоненты E_y от координаты x для разных частот: — — $\omega/\omega_p = 0,3$; - - - - $\omega/\omega_p = 0,5$

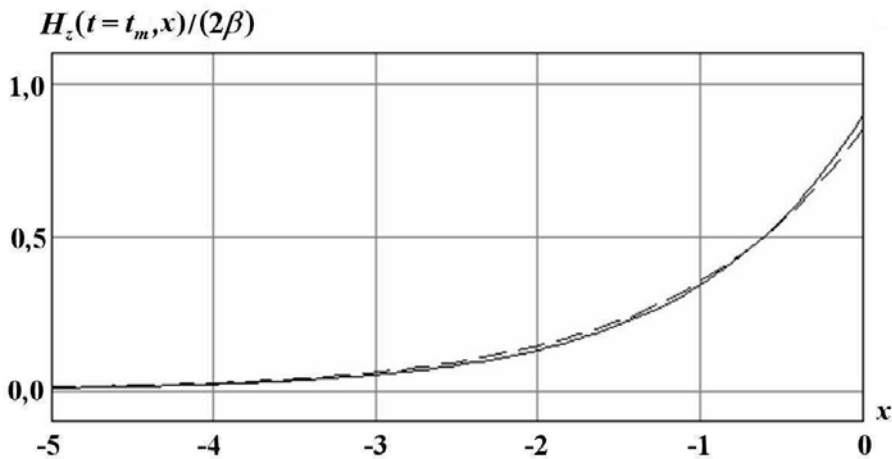


Рис. 4. Зависимость компоненты H_z от координаты x для разных частот: — — $\omega/\omega_p = 0,3$; - - - - $\omega/\omega_p = 0,5$

нию для распространения поперечных волн в холодной плазме в отсутствие внешнего магнитного поля [7]: $k^2 = \omega^2 - 1$.

Согласно этому дисперсионному соотношению уменьшение в ϵ раз амплитуды волны с частотой $\omega < 1$ при распространении ее в плазменном слое происходит на характерном масштабе $x_0 = (1 - \omega^2)^{-1/2}$. Для частоты $\omega = 0,3$ этот масштаб равен $x_0 = 1,05$, для частоты $\omega = 0,5$ $x_0 = 1,15$. Отметим, что амплитуды компонент E_y и H_z на рис. 3, 4 уменьшаются в $\epsilon^2 = 7,4$ раза на интервале $-2,05 < x < 0$ для частоты $\omega = 0,3$ и на интервале $-2,35 < x < 0$ для частоты $\omega = 0,5$. Длины этих интервалов хорошо согласуются со значениями $2x_0$, полученными выше из дисперсионного соотношения.

В таблице для различных частот ω приведены значения коэффициента отражения $R(\omega)$ лазерного излучения (8) на момент времени $t = \tau_i = 10\pi/\omega$; в рассматриваемом случае этот коэффициент вычисляется по формуле

$$R(\omega) = \frac{2}{\tau_i} \int_0^{\tau_i} \left(\sin \omega t + \frac{\psi(t)}{\beta} \right)^2 dt.$$

Приведенные данные иллюстрируют хорошо известный факт, что при частотах лазерного излучения, много меньших плазменной частоты, происходит почти полное отражение этого излучения от слоя плазмы, а при частотах, превышающих плазменную частоту, отражение становится малым.

При постановке модельной задачи исходная система (1)–(3) уравнений Власова–Максвелла была существенно упрощена. Поэтому возникает естественный вопрос, как согласуется аналитическое решение модельной задачи с решением исходной пространственно-одномерной математической модели (1)–(3). Для ответа на этот вопрос проведем сравнение аналитического решения (20)–(24) модельной задачи с численным решением уравнений исходной одномерной модели (1)–(3).

Алгоритм решения этих уравнений содержит три этапа, типичных для численного моделирования динамики плазмы:

- 1) решение уравнений Максвелла при заданной плотности тока \mathbf{j} ;
- 2) расчет изменения распределения электронов в фазовом пространстве (решение уравнений движения для модельных частиц);
- 3) вычисление плотности тока по известному распределению электронов.

На каждом этапе применялись численные методы, хорошо зарекомендовавшие себя при моделировании поведения плазмы. Для решения уравнений Максвелла (3) использовалась разностная схема *крест* (см., например, [8]). Траектории модельных частиц определялись из системы уравнений движения, для численного решения которых применялась схема Бориса [1]. При вычислении силы, действующей на частицу, использовалась линейная интерполяция значений соответствующих величин из узлов ячейки разностной сетки, в которой находится частица в данный момент времени. Эта же интерполяция применялась и при определении плотности тока в узлах сетки при заданном распределении модельных частиц в расчетной области [1]. При задании распределений модельных частиц, соответствующих начальным условиям, использовался так называемый *спокойный старт* [9]. При этом каждой модельной частице приписывался вес, равный числу реальных частиц плазмы, находящихся в объеме фазового пространства, занимаемом данной модельной частицей в начальный момент времени. Веса модельных частиц не меняются при их движении.

Далее будет представлено сравнение аналитического решения с численным решением уравнений исходной одномерной модели для задачи, в которой концентрация электронов, частота лазерного излучения и длительность лазерного импульса соответственно равны $n_0 = 1,5 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$, $\omega = 2,07 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$, $\tau_i = 5(2\pi/\omega)$, а интенсивность лазерного излучения может иметь значения $I_1 =$

Зависимость коэффициента отражения от частоты лазерного излучения

ω/ω_p	0,2	0,4	0,6	0,8	1,0	1,2	1,4	1,6	1,8	2,0
$R(\omega/\omega_p)$	0,998	0,987	0,958	0,895	0,532	0,124	0,059	0,035	0,025	0,019

$= 10^{17}$ Вт/см², $I_2 = 10^{18}$ Вт/см², близкие к релятивистским. В этой задаче безразмерное значение частоты $\omega = 0,3$; значения параметра β равны соответственно $\beta_1 = 0,074$, $\beta_2 = 0,23$.

Численное решение этой задачи получено в расчетной области D с границами $x_{\min} = -100$, $x_{\max} = 300$. Шаг по переменной x выбирался равным $\Delta x = 0,125$ (в единицах системы СГС $\Delta x = 0,125c/\omega_p$); шаг по времени полагался равным $\Delta t = 0,5\Delta x$; в начальный момент времени в каждую ячейку разностной сетки помещалось равное количество частиц $nr = 4$ (эти счетные параметры выбраны по результатам расчетов на сходимость).

На рис. 5, 6 для двух указанных выше значений интенсивности лазерного излучения приведены временные зависимости для компонент E_y и H_z , вычисленные на границе плазмы $x = 0$ с использованием аналитического решения модельной задачи и на основе численного решения уравнений исходной одномерной модели (1)–(3) при интенсивностях I_1, I_2 . Видно, что даже при интенсивности лазерного излучения $I = I_2 = 10^{18}$ Вт/см² аналитическое и численное решения для компонент E_y и H_z все еще неплохо согласуются между собой. Отметим, что в представленных выше расчетах с интенсивностями I_1, I_2 счетный дисбаланс δ в энергии (вычисленный как абсолютное значение от-

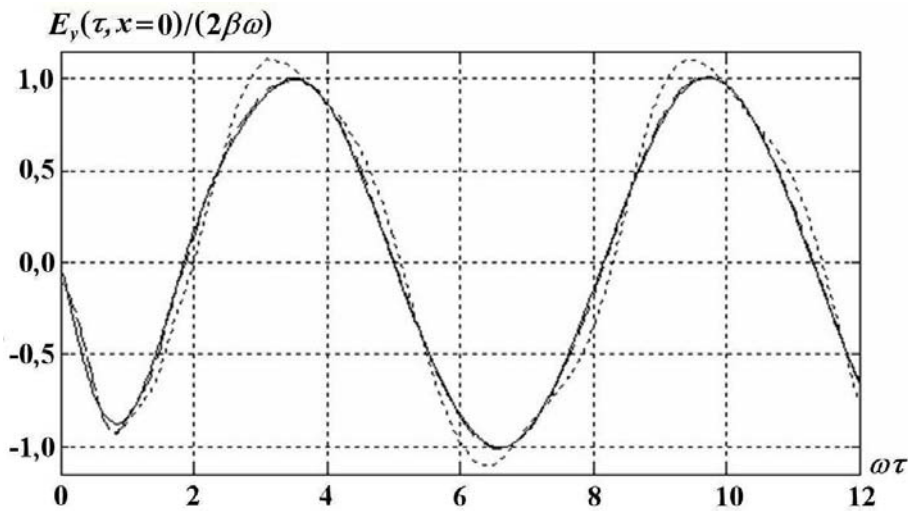


Рис. 5. Временные зависимости компоненты E_y на границе плазмы: — — аналитическое решение модельной задачи; — — — численное решение уравнений (1)–(3) при интенсивности излучения 10^{17} Вт/см²; - - - численное решение уравнений (1)–(3) при интенсивности 10^{18} Вт/см²

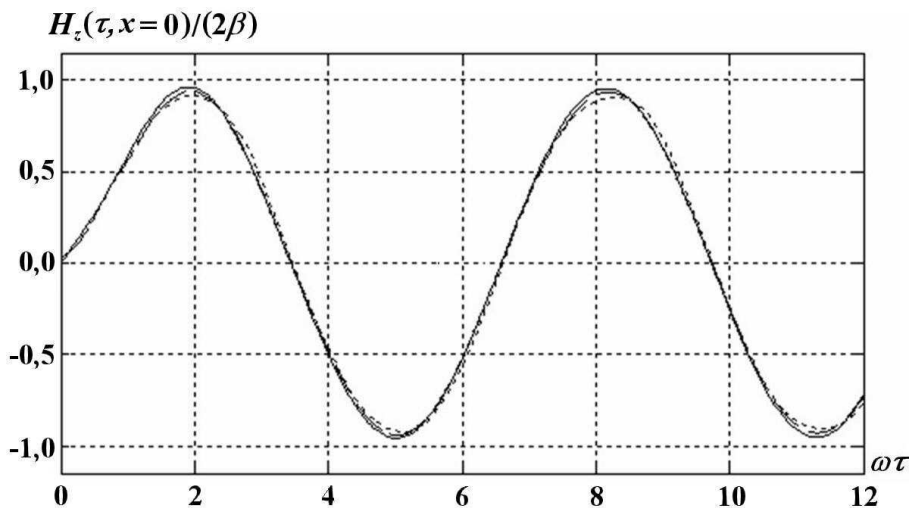


Рис. 6. Временные зависимости компоненты H_z на границе плазмы: — — аналитическое решение модельной задачи; — — — численное решение уравнений (1)–(3) при интенсивности излучения 10^{17} Вт/см²; - - - численное решение уравнений (1)–(3) при интенсивности 10^{18} Вт/см²

ношения разности левой и правой частей уравнения (7) к правой его части) не превышал значения $\delta = 8 \cdot 10^{-5}$.

Заключение

Аналитическое решение модельной задачи, полученное в данной работе, прежде всего использовалось авторами для тестирования программ, с помощью которых выполняются численные исследования взаимодействия лазерного излучения с плазмой. При этом, например, в программу, предназначенную для решения уравнений (1)–(3), вносились соответствующие несложные изменения, которые позволяли получать непосредственно численное решение модельной задачи.

Кроме того, аналитическое решение оказалось полезным и при анализе результатов численного моделирования взаимодействия лазерного излучения с плазмой при значениях интенсивности излучения, приближающихся к релятивистским.

Авторы благодарят Б. П. Якутова за постоянную поддержку и полезные обсуждения работы.

Список литературы

1. Бэдсел Ч., Ленгдон А. Физика плазмы и численное моделирование. М.: Энергоатомиздат, 1989.
2. Буланов С. В., Есиркенов Т. Ж., Каменец Ф. Ф. и др. О создании пучков с высоким качеством в процессе ускорения ионов мощным лазерным излучением // Физика плазмы. 2002. Т. 28, № 12. С. 1059–1076.
3. Andreev A. A., Platonov K. Yu. Nonlinear absorption of a short intense laser pulse in a nonuniform plasma // Physics of Plasma. 2003. Vol. 10, No 1. P. 220–226.
4. Yan X. Q., Lin C., Sheng Z. M. et al. Generating high-current monoenergetic proton beams by a circularly polarized laser pulse in the phase-stable acceleration regime // Phys. Rev. Lett. 2008. Vol. 100. P. 135003(1–4).
5. Бейтмен Г., Эрдейи А. Таблицы интегральных преобразований. Т. 1. Преобразования Фурье, Лапласа, Меллина. М.: Наука, 1969.
6. Зоммерфельд А. Оптика. М.: Изд-во иностр. лит-ры, 1953.
7. Франк-Каменецкий Д. А. Лекции по физике плазмы. М.: Атомиздат, 1964.
8. Калиткин Н. Н. Численные методы. М.: Наука, 1978.
9. Рошаль А. С. Моделирование заряженных пучков. М.: Атомиздат, 1979.

Статья поступила в редакцию 06.08.13.

УДК 519.63:539.17

РАСЧЕТ ИЗОТОПНОГО СОСТАВА РЕАКТОРНЫХ УСТАНОВОК ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ПРОЦЕССОВ ВЫГОРАНИЯ И ОСТАТОЧНОГО ЭНЕРГОВЫДЕЛЕНИЯ ЯДЕРНОГО ТОПЛИВА В ПРОГРАММНОМ КОМПЛЕКСЕ CONCORD

С. В. Мжачих, А. В. Алексеев, А. Н. Гребенников, Е. А. Гусев,
А. А. Ермаков, Е. А. Ириничев, С. С. Касаткин, Н. А. Крутько
(РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров)

Эволюция физических характеристик работающего реактора определяется главным образом изменением нуклидного состава топлива. Знание изотопного состава также крайне важно, так как именно на его основе проводится обоснование безопасности обращения с отработанным ядерным топливом при его хранении, транспортировке и переработке.

Дается описание программного модуля, предназначенного для расчета процесса ядерной кинетики в реакторных установках на тепловых и быстрых нейтронах, который входит в состав программного комплекса CONCORD. Приводятся источники данных модуля, описываются используемые методы и модели расчета.

Ключевые слова: ядерный реактор, кинетика изотопов, математическое моделирование, осколки деления, выгорание актиноидов, жесткая система дифференциальных уравнений, разностная схема Розенброка–Ваннера.

Введение

Состав топлива энергетического или какого-либо специального ядерного реактора претерпевает непрерывные изменения как из-за радиоактивных распадов его компонентов, так и из-за превращений, обусловленных взаимодействиями нейтронов с этими компонентами: реакций радиационного захвата нейтронов, процессов нейтронного размножения ($n, 2n$) и ($n, 3n$), реакций с вылетом заряженных частиц.

В результате работы реактора в составе уранового топлива образуются новые активно делящиеся тяжелые изотопы: долгоживущие атомы ^{241}Pu , $^{242\text{m}2}\text{Am}$, ^{243}Cm и атомы ^{233}U , ^{236}Np , ^{239}Pu , ^{245}Cm , которые на практике можно считать стабильными. Эти ядра вносят свой вклад в энерговыделение, и учет их накопления необходим для правильного прогнозирования характеристик реактора на разных этапах его работы. Крайне важным является также знание изотопного состава выгружаемого отработанного ядерного топлива (ОЯТ). Так, например, содержащиеся в ОЯТ актиноиды ^{232}U , $^{242,244}\text{Cm}$ в большей степени определяют радиационный фон вблизи отработанной ТВС [1]. Если интерес представляет нейтронная активность ОЯТ по процессу спонтанного деления, то требуется информация о концентрации изотопов $^{242,244,246}\text{Cm}$, ^{252}Cf . Согласно работе [1] для реактора ВВЭР-1000 их вклад составляет около 97%.

Еще одной причиной изменения первоначального состава топлива являются реакции деления актиноидов нейтронами, в результате которых накапливаются осколки деления. В самом общем представлении продукты деления можно разбить на две категории: осколки-шлаки и выделенные осколки. Выделенные осколки деления, в свою очередь, можно разделить на три группы: изотопы-отравители, экологически опасные изотопы и изотопы — источники запаздывающих нейтронов (ЗН) деления.

К отравителям относят осколки, имеющие значительное сечение радиационного захвата. Такие ядра образуются как непосредственно в результате деления актиноидов, так и в результате нейтронно-ядерных (Н-Я) и радиоактивных превращений самих осколков. Они способны оказывать существенное влияние на формирование пространственно-энергетического распределения поля нейтронного потока в активной зоне реакторной установки, особенно в режимах изменения мощности реактора. Например, к этой группе могут быть отнесены изотопы ^{105}Rh , ^{135}Xe , ^{149}Sm , активно поглощающие тепловые нейтроны.

Экологически опасные осколки имеют значительный выход γ -излучения и тем самым должны учитываться в задачах обоснования безопасного обращения с ОЯТ при его хранении, транспортировании и переработке. Примером таких осколков могут служить атомы ^{85}Kr , ^{90}Sr , ^{125}Sb , ^{137}Cs , $^{137\text{m}}\text{Ba}$, ^{144}Ce , $^{154,155}\text{Eu}$, дающие наибольший вклад в гамма-фон ОЯТ [1]. Экологически опасные осколки могут быть отделены при регенерации ОЯТ для дальнейшего захоронения или трансмутации.

Так называемые ЗН деления рождаются при радиоактивном преобразовании ядер-осколков, точнее, для некоторых осколков процесс β^- -распада сопровождается испусканием одного или нескольких нейтронов. Например, для изотопа ^{92}As , по данным библиотеки ENDF/B-7.1, существует канал β^- -распада с образованием четырех нейтронов. Все осколки этого типа являются короткоживущими с периодом полураспада τ от нескольких миллисекунд (например, $\tau = 7$ мс для ^{100}Kr) до нескольких десятков секунд (например, $\tau = 55,65$ с для ^{87}Br).

Накопление осколков-шлаков ведет к падению запаса реактивности и определяет период возможной работы реактора без перегрузки топлива. К группе осколков-шлаков можно отнести, например, стабильные атомы ^{99}Tc , ^{101}Ru , ^{103}Rh , $^{105,108}\text{Pd}$, ^{109}Ag , $^{131,134,136}\text{Xe}$, ^{133}Cs , ^{141}Pr , $^{143,144,145}\text{Nd}$, ^{152}Sm и долгоживущий изотоп ^{147}Pm . Эти изотопы вместе с уже упоминавшимся стабильным изотопом ^{149}Sm вносят заметный вклад в общее макросечение среды на конечной стадии кампании реакторной установки.

Требования к точности численного моделирования изотопной кинетики в настоящее время возрастают, и связано это с тенденцией увеличения глубины выгорания актиноидов как для штатного диоксид-уранового топлива, так и для перспективных видов керамического топлива. Появление компьютеров с возможностями параллельной и векторной обработки данных, а также усложнение расчетных моделей ставят перед математиками задачу разработки новых эффективных методов расчета процесса кинетики ядер [2].

Программный комплекс CONCORD [3] разрабатывался как средство проведения *двумерных ячеичных* многогрупповых расчетов ядерных реакторов и эволюции их физических характеристик, связанных с изменением нуклидного состава топлива в процессе его выгорания. В настоящее время расчет кинетики изотопов в комплексе CONCORD осуществляется программным модулем, получившим название КРИСТАЛЛ (Код Расчета Изотопного Состава ТВС).

Модуль КРИСТАЛЛ может быть использован для расчета как тепловых, так и быстрых реакторов. Основные задачи, решаемые с помощью модуля:

- нестационарный расчет изотопного состава ТВС на стадии критичности реактора при известном поле нейтронной плотности;
- расчет нестационарного источника ЗН деления в топливных стержнях (ТВЭЛ, ТВЭГ) на стадии критичности реактора;
- нестационарный расчет изотопного состава и остаточного энерговыделения (тепловыделения) для отработанных ТВС;
- нестационарный расчет источников нейтронного и γ -излучения для отработанных ТВС.

Работа по расчету источника γ -излучения еще не завершена.

Рассчитываемые процессы радиоактивного преобразования ядра

Все рассчитываемые в модуле КРИСТАЛЛ процессы можно разделить на два типа: нейтронно-ядерные и процессы радиоактивного преобразования ядра.

В модуле КРИСТАЛЛ учитываются следующие радиоактивные процессы:

- распад с эмиссией электрона (β^- -распад);
- распад с эмиссией электрона и одного или нескольких нейтронов ($\beta^- n, \dots, \beta^- 4n$);
- распад с эмиссией позитрона (β^+ -распад) или захват ядром электрона с оболочки (ec);
- изомерный переход (it);
- распад с эмиссией α -частицы (α -распад);
- распад с эмиссией протона (p-распад);
- распад с эмиссией нейтрона (n-распад, свойственный легким ядрам);
- спонтанное деление (sf) с образованием ядер-осколков, нейтронов и γ -квантов.

Основными источниками данных о распадах ядер являются библиотеки оцененных данных ENDF/B-7.1 и JEF-3.1.1, причем в указанном порядке с точки зрения приоритета данных. Если каких-либо данных в этих библиотеках нет, они берутся из библиотек JENDL-4 или ROSFOND.

С помощью специально разработанных программных средств из библиотек оцененных данных читается необходимая информация, которая затем помещается в соответствующие текстовые файлы. На текущий момент эти файлы содержат:

- 1) общие данные о радиоактивных процессах (для 3742 изотопов и изомеров от ^1H до ^{260}Fm , включая стабильные, — из библиотек ENDF/B-7.1, JEF-3.1.1);
- 2) число нейтронов процесса sf (имеются данные для 28 атомов актиноидов — из ENDF/B-7.1, JEF-3.1.1);
- 3) спектр нейтронов процесса sf (имеются данные только для ^{252}Cf);
- 4) независимые (прямые) выходы осколков процесса sf (на данном этапе исследования востребованы данные только для ^{242}Cm , которые есть в JEF-3.1.1);
- 5) спектр ЗН деления χ_k^{dn} (имеются данные для 289 короткоживущих атомов-осколков).

В файле с общими данными (см. п. 1) имеются:

- период полураспада τ_k (с) и число процессов \hat{i}_k для ядра k ;
- доля C_k^i процесса i в одном акте преобразования ядра k $\left(\sum_{i=1}^{\hat{i}_k} C_k^i = 1 \right)$;
- уровень возбуждения ядра-потомка k' (0, 1, 2) для процесса i на ядре k ;
- калорийность E_k^i (МэВ) процесса i ;
- целое число нейтронов ν_k^i (0, 1, 2, 3, 4), образуемых на процессе i .

Рассчитываемые нейтронно-ядерные процессы

Основными процессами Н-Я взаимодействия, которые учитываются в модуле КРИСТАЛЛ, являются:

- нейтронные захваты: (n, γ), (n, α) и др.;
- деление ядра (f) нейтроном с образованием ядер-осколков, нейтронов и γ -квантов;
- упругое нейтронное рассеяние (sel).

Вообще говоря, процесс упругого рассеяния не меняет концентрации изотопов, но в модуле КРИСТАЛЛ происходит подсчет актов данного процесса. Если нейтронный спектр захватывает область больше ~ 5 МэВ, то список процессов нужно дополнить так называемыми пороговыми процессами:

- нейтронного размножения: (n, 2n), (n, 3n);
- захвата нейтрона с эмиссией быстрого иона: (n, p), (n, α) и др.;
- неупругого нейтронного рассеяния: (n, n'), (n, n'p), (n, n' α) и др.

В качестве источника данных для расчета Н-Я процессов используются современные библиотеки оцененных данных, такие как ENDF/B-6, ENDF/B-7.1, JEF-3.1.1, JENDL-4, ROSFOND. Для сравнительных расчетов константы могут быть подготовлены на базе старых данных (ENDL-82 и т. п.). Далее оцененные данные преобразуются в групповые. В расчетах по комплексу CONCORD единственным источником групповых констант взаимодействий нейтронов с разными сортами атомов является архив GEMUS [4].

Модулю КРИСТАЛЛ для расчета требуются следующие данные об изотопах, сохраняемые в библиотеке архива:

- сечения процессов, заданные на сетке по температуре T атомов и на сетке по сечению разбавления σ_0 ;
- калорийности процессов, из которых в дальнейшем получают энерговыделение (кинетическую энергию вторичных атомов). Включать или нет энергию высвобождаемых γ -квантов в это энерговыделение — зависит от модели расчета.

Точнее, на вход модуля КРИСТАЛЛ подаются массивы групповых сечений и энерговыделения для всех типов атомов и всех веществ (пространственных зон) задачи. То есть вопросы интерполяции сеточных величин решаются в вызывающей программе.

Для расчета концентрации ядер, которые являются продуктами реакции деления, необходима информация о прямых выходах (ПВ) осколков. Значения выходов выбираются из библиотек оцененных данных и сохраняются в текстовых файлах комплекса CONCORD. Данные задаются для трех значений энергии нейтрона (0,0253 эВ, 500 кэВ (400 кэВ), 14 МэВ). В настоящее время в модуле КРИСТАЛЛ используются данные для 29 делящихся изотопов: $^{227,229,232}\text{Th}$, ^{231}Pa , $^{232-238}\text{U}$, $^{237,238}\text{Np}$, $^{238-242}\text{Pu}$, $^{241,242m2,243}\text{Am}$, $^{242-246,248}\text{Cm}$ (все из ENDF/B-7.1), ^{230}Th (из ROSFOND) и ^{242g}Am (из JENDL-4).

Разным сортам делящихся ядер соответствует разное число атомов-осколков. Например, в библиотеке ENDF/B-7.1 минимальное число атомов-осколков, равное 966, приходится на изотоп ^{227}Th , тогда как максимум, равный 1208, соответствует изотопу ^{239}Pu . Сумма ПВ ядер-осколков равна 2. В библиотеках JEF-3.1.1 и JENDL-4 имеются выходы для легких изотопов с атомным весом $A \leq 6$ (возможен ^{21}Ne), при этом сумма ПВ ядер-осколков немного больше 2.

Данные с описанием рассчитываемых Н-Я процессов вносят вручную в отдельный текстовый файл комплекса CONCORD. Заметим, что для некоторых Н-Я реакций можно задавать несколько каналов протекания, отличающихся числом и типом вторичных частиц.

Уравнения и метод их решения

Если учитывать самое широкое множество Н-Я и радиоактивных процессов, то связь между типами атомов становится очень сложной и носит неявный характер, т. е. для расчета концентрации определенного типа атомов требуется знать концентрацию как атомов-предшественников, так и атомов-потомков. Однако если пренебречь некоторыми процессами, например пороговыми реакциями $(n, 2n)$, $(n, 3n)$, (n, p) , (n, α) , которые практически не сказываются на работе тепловых реакторов, а также исключить из рассмотрения кинетику процессов α - и β^+ -распадов, то система становится явной и допускает аналитическое решение.

Заметим, что среди продуктов деления только некоторые атомы могут распадаться с испусканием α -частицы (например, ^{144}Nd , ^{146}Sm , ^{152}Gd). Однако для них период полураспада настолько велик, что позволяет рассматривать их в расчете как стабильные. Что касается актиноидов, то в практических расчетах кампании достаточно учитывать α -распад лишь для изотопов ^{242}Cm ($\tau = 162,79$ сут), ^{243}Cm ($\tau = 29,1$ год), ^{244}Cm ($\tau = 18,1$ год), концентрация которых в составе топлива мала. Заметим также, что концентрация изотопов $^{238-240}\text{Pu}$ мало зависит от процесса распада упомянутых изотопов Cm, поэтому собственно кинетику α -распада, т. е. превращения изотопов Cm в изотопы Pu, можно не учитывать. Процесс β^+ -распада также не относится к основным, так как он, как правило, характерен для атомов, образованных в реакции $(n, 2n)$. Отметим, что для реакторов на быстрых нейтронах роль пороговых процессов значительно возрастает.

В модуле КРИСТАЛЛ задача расчета изотопной кинетики формулируется в полной постановке, т. е. с учетом неявной зависимости между атомами. В пространственной точке (зоне) решается следующая система дифференциальных уравнений:

$$\frac{\partial \varphi_k}{\partial t} = \sum_{k'} \varphi_{k'} \lambda_{k'} Y_{k' \rightarrow k} + \sum_{k'} \varphi_{k'} \sum_g \psi_g \sum_{p_{k'}} \sigma_{k',g}^{p_{k'}} Y_{k' \rightarrow k,g}^{p_{k'}} - \varphi_k \left(\lambda_k + \sum_g \psi_g \sigma_{k,g}^t \right) + \left\{ Q_k^{\text{fp}} \text{ для осколков} \right\}, \quad k = 1, \dots, \widehat{k}. \quad (1)$$

Здесь (в квадратных скобках указаны единицы измерения)

φ_k — концентрация атомов сорта k [10^{24} см^{-3}];

ψ_g — плотность потока нейтронов группы g [$10^{24} \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$];

$\lambda_k = \tau_k^{-1} \ln 2$ — временная постоянная распада атома k [с^{-1}];

$Q_k^{\text{fp}} = \sum_g \psi_g \sum_{k'} \varphi_{k'} \sigma_{k',g}^f Y_{k' \rightarrow k,g}^f$ — источник ядра-осколка сорта k (по делению всех ядер k') [$10^{24} \text{ см}^{-3} \text{ с}^{-1}$];

$Y_{k' \rightarrow k,g}^f$ — выход (эффе́ктивный) ядер-осколков сорта k в одном акте деления ядра сорта k' нейтроном группы g ;

$Y_{k' \rightarrow k,g}^{p_{k'}}$ — выход ядер сорта k в одном акте процесса $p_{k'}$ взаимодействия нейтрона группы g с ядром сорта k' ;

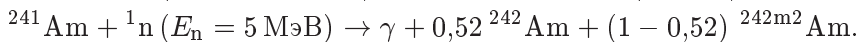
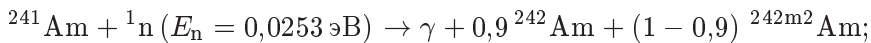
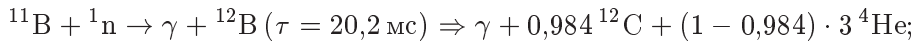
$Y_{k' \rightarrow k}$ — выход ядер сорта k в одном акте преобразования ядра k' ;

$\sigma_{k',g}^{p_{k'}}$ — сечение процесса $p_{k'}$ взаимодействия нейтрона группы g с ядром сорта k' [$1 \text{ барн} = 10^{-24} \text{ см}^2$];

$\sigma_{k,g}^f, \sigma_{k,g}^t$ — соответственно сечение деления и полное сечение изотопа сорта k .

Сделаем некоторые замечания относительно величин, участвующих в записи уравнения (1).

1. Значения $Y_{k' \rightarrow k,g}^{p_{k'}}$ не всегда равны 1, и в общем случае $Y_{k' \rightarrow k,g}^{p_{k'}}$ имеет энергетическую зависимость. Приведем примеры таких процессов (символ \Rightarrow означает распад изотопа):



2. Значения $Y_{k' \rightarrow k}$ также не всегда равны 1. В качестве примера можно привести распад ^{12}B (см. выше). Еще один пример:



3. При расчете величины $\sigma_{k,g}^t$ и второго слагаемого в правой части уравнения (1) учитывается процесс упругого рассеяния нейтрона. Этот процесс не меняет концентрации атомов, для него $Y_{k \rightarrow k,g}^{\text{sel}} \equiv 1$, и, как видно из уравнения (1), при расчете второго слагаемого правой части его можно не принимать во внимание. В этом случае при расчете третьего слагаемого нужно из полного сечения $\sigma_{k,g}^t$ вычесть сечение рассеяния $\sigma_{k,g}^{\text{sel}}$.

В расчетах задач реакторной кинетики следует учитывать, что некоторая часть атомов изотопного состава ТВС находится в изомерном состоянии. Изомеры образуются как непосредственно при делении ядер, так и в результате Н-Я процессов и распадов. В настоящее время имеются данные для расчета некоторых атомов с первым и вторым уровнем возбуждения ядра. Обратим внимание на то, что для медленных нейтронов вероятность образования изомера в процессе (n, γ) слабо зависит от энергии и может быть представлена в расчете константой. Однако в общем случае, особенно это касается пороговых процессов, вероятность следует задавать групповым вектором.

Дифференциальная система уравнений (1) относится к *жесткому* типу. Строгого определения понятия жесткости нет, но обычно под ним подразумевают наличие как быстро затухающих, так и медленно меняющихся компонентов решения [5]. В рассматриваемом случае жесткость является следствием широкого диапазона значений для периода полураспада.

Жесткие системы достаточно трудны для численного решения и требуют специальных методов. В модуле КРИСТАЛЛ система уравнений вида $\frac{d\varphi}{dt} = A\varphi$ решается с помощью разностной схемы Розенброка, обобщенной Ваннером. Выбор этого метода, называемого также ROW-методом, был сделан на основании рекомендации из работы [5]. Схема относится к классу устойчивости $L1$. В общем случае формулы перехода от слоя $t = t^n$ к слою $t = t^{n+1} = t^n + \tau$ записываются следующим образом:

$$\varphi^{n+1} = \varphi^n + \tau \sum_{i=1}^s \beta_i \mathbf{k}_i; \quad (E - \tau \gamma_{ii} A) \mathbf{k}_i = A \left(\varphi^n + \tau \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} \mathbf{k}_j \right) + \tau A \sum_{j=1}^{i-1} \gamma_{ij} \mathbf{k}_j, \quad i = 1, \dots, s. \quad (2)$$

Здесь E — единичная матрица; s — число стадий схемы. Полагаем, что на интервале $[t^n, t^{n+1}]$ матрица A от t не зависит.

В модуле КРИСТАЛЛ реализован вариант двухстадийной ($s = 2$) и трехпараметрической схемы (2) с ошибкой аппроксимации вида $O(\tau^2)$. Решение для такой разностной схемы будет иметь следующий вид:

$$\varphi^{n+1} = \varphi^n + \tau \left[(1 - b) \mathbf{k}_1 + b \mathbf{k}_2 \right].$$

Вычисление векторов \mathbf{k}_1 и \mathbf{k}_2 сводится к последовательному решению двух систем линейных уравнений

$$\begin{aligned} R_1 \mathbf{k}_1 &= \mathbf{z}, \quad \text{где } \mathbf{z} = A\varphi^n; \quad R_1 = E - \tau \gamma_{11} A; \\ R_2 \mathbf{k}_2 &= (1 - \chi) \mathbf{z} + \chi \mathbf{k}_1, \quad \text{где } \chi = \frac{a + \gamma_{21}}{\gamma_{11}}; \quad R_2 = E - \tau \gamma_{22} A. \end{aligned} \quad (3)$$

Для расчета коэффициентов используем следующие формулы:

$$\gamma_{11} = c; \quad \gamma_{22} = \frac{1 - 2c}{2(1 - c)}; \quad \gamma_{21} = \frac{1 - 2c}{2b} - \frac{2c^2 - 4c + 1}{2(1 - c)} - a,$$

где a, b, c — параметры схемы. На сегодняшний день в модуле КРИСТАЛЛ реализованы три схемы с различными наборами коэффициентов, для которых $R_1 = R_2$:

- 1) схема Розенброка: $a = 2^{1/2}$; $b = (1 - 2^{-1/2})/2$; $c = 1 - 2^{-1/2}$ ($\gamma_{21} = 0$; $\gamma_{22} = \gamma_{11}$);
- 2) схема Ваннера: $a = 1$; $b = 1/2$; $c = 1 + 2^{-1/2}$ ($\gamma_{21} = -c/b$; $\gamma_{22} = \gamma_{11}$);
- 3) схема Калиткина: $a = -3^{-1/2}$; $b = 1$; $c = 1 + 2^{-1/2}$ ($\gamma_{21} = 1/2 - c - a$; $\gamma_{22} = \gamma_{11}$).

Специальным упорядочением изотопов добиваемся того, чтобы верхняя треугольная часть матрицы A стала сильно разреженной, причем ее редкие ненулевые элементы были бы малы. Эти элементы отвечают процессам $(n, 2n)$, (n, p) , (n, α) , а также β^+ - и α -распадам, на атомах-предшественниках. Как правило, эти процессы не определяют значений концентраций долгоживущих ядер. Таким образом, матрицы R_1 и R_2 , которые в используемых разностных схемах не отличаются, близки к треугольным и, следовательно, для расчета систем (3) эффективен итерационный метод Зейделя.

Кинетика актиноидов

Рассмотрим множество изотопов и изомеров, которое рассчитывается с помощью модуля КРИСТАЛЛ. Изменение во времени нейтронно-физических свойств активной зоны определяется главным образом эволюцией изотопного состава топливных стержней (ТВЭЛ и ТВЭГ). Изотопы, относящиеся к актиноидам, претерпевают серьезные превращения из-за взаимодействия с нейтронным потоком, при этом образуются новые изотопы актиноидной группы, стабильные и нестабильные, и атомы — продукты деления. Помимо расчета изотопного состава топлива, интерес может представлять расчет *выгорания* стабильных изотопов — сильных поглотителей тепловых нейтронов, таких как ^{10}B , ^{113}Cd , ^{151}Eu , $^{155,157}\text{Gd}$, ^{164}Dy , которые представлены в материалах СВП и регулирующих

стержней. Заметим, что в топливных стержнях и стержнях ПЭЛ могут "нарабатываться" другие долгоживущие изотопы-поглотители, например, ^{149}Sm (стабильный), ^{151}Sm , $^{152,155}\text{Eu}$.

Для расчета кинетики изотопов топлива в модуле КРИСТАЛЛ используется стандартная цепочка U-Np-Pu-Am-Cm из 50 сортов атомов, относящихся к урановому типу. Для расчета более дальних (тяжелых) актиноидов к указанной цепочке могут быть добавлены изотопы Bk, Cf, Fm. В расчетах реакторов с ториевым топливом могут быть учтены также изотопы Th и Pa. Таким образом, полная цепочка рассчитываемых изотопов и изомеров химических элементов от Th до Fm насчитывает примерно 100 типов атомов.

В зависимости от класса решаемой задачи цепочки актиноидов могут быть сокращены. Например, при расчете реакторов на тепловых нейтронах это можно сделать за счет нуклидов, образуемых на двойном процессе (n , $2n$). Однако и здесь надо учитывать специфику задачи. Так, если после расчета кампании требуется провести расчет радиационного фона ОЯТ, то изотоп ^{232}U является важным и его следует оставить в цепочке.

В модуле КРИСТАЛЛ имеется возможность расчета кинетики ядер в каждом топливном стержне (ТВЭЛ, ТВЭГ) и при необходимости в каждом стержне ПЭЛ. При этом для каждого вещества i в каждом стержне j используется свое значение плотности нейтронного потока $\psi_{i,j}$, полученное усреднением по соответствующим пространственным точкам. Для расчета стержней применяются методы параллельной обработки данных.

Кинетика продуктов деления

Недавно в модуле КРИСТАЛЛ появилась новая возможность расчета атомов топлива. Теперь эффективные осколки-шлаки и цепочки выделенных осколков могут замещаться системой атомов — продуктов деления. Новая модель обладает рядом достоинств по сравнению с традиционным способом расчета.

Во-первых, модель позволяет рассчитывать эволюцию нейтронно-ядерных свойств осколков деления, тогда как характеристики взаимодействия нейтронов с эффективными осколками-шлаками статичны.

Во-вторых, появляется возможность расчета темпа тепловыделения осколков непосредственно по их концентрации, что позволяет решать задачу остаточного энерговыделения ТВС. Используется следующая формула:

$$W(\vec{r}, t) = \sum_k \varphi_k^{\text{fp}}(\vec{r}, t) \lambda_k \sum_i C_k^i E_k^i,$$

где φ_k^{fp} — концентрация осколка сорта k ; E_k^i — калорийность процесса распада i для атома k .

Как уже говорилось, имеются данные о выходах более 1000 осколков. Однако использовать все эти атомы в расчете не всегда разумно. В настоящее время для расчета системы осколков разработаны несколько моделей, согласованных между собой и отличающихся размерностью системы дифференциальных уравнений.

Самая полная модель, которую авторы называли FULL, включает в себя атомы от ^{67}Fe до ^{174}Yb с кумулятивным выходом (КВ) $Y^{\text{cum}} \geq 10^{-8}$ для всех актиноидов и энергией нейтронов $E_n \leq 500$ кэВ. Теперь из множества модели FULL исключим те изотопы и изомеры, период полураспада которых меньше 5 секунд. Новое множество вместе с моделью его расчета назовем 5s. Аналогично получаем модели 50s ($\tau > 50$ с), 10m ($\tau > 10$ мин), 33m ($\tau > 33$ мин). После нескольких численных экспериментов оптимальной для расчета кампании ТВС реактора типа ВВЭР признана модель 10m.

Все сорта атомов, которые рассчитываются в модуле КРИСТАЛЛ, можно условно разделить на следующие типы в зависимости от полноты исходных данных:

- 1) *полный* изотоп (изомер) — имеются данные:
 - о радиоактивном преобразовании ядра;
 - нейтронные сечения и калорийности Н-Я процессов;
 - энергоугловое распределение вторичных нейтронов;

- 2) *неполный* изотоп (изомер) — по сравнению с полным изотопом отсутствуют данные об энергоугловом распределении, а данные по сечениям относятся только к процессам поглощения нейтрона;
- 3) *пустой* изотоп (изомер) — имеются данные только о радиоактивном преобразовании ядра;
- 4) эффективные легкий и тяжелый осколки-шлаки — в отличие от полных изотопов не имеется данных о распаде.

В табл. 1 представлено число рассчитываемых атомов-осколков для каждой из перечисленных выше моделей. При этом легкие ядра-осколки (их примерно 20), данные о которых есть в библиотеках JEF-3.1.1 и JENDL-4, не учитываются. В таблице учтены как атомы, непосредственно рожденные в процессе деления, так и атомы, которые образуются только в результате радиоактивных процессов (для них ПВ нулевой, но есть КВ).

Исследования показали, что можно директивно присвоить неполный тип многим изотопам-осколкам, которые имеют данные по энергоугловому распределению вторичных нейтронов. На точности расчета нейтронного переноса это практически не сказывается, но позволяет значительно экономить размер используемой программой оперативной памяти. Заметим, что в расчете общего макросечения среды, требуемого при моделировании кинетики нейтронов, учитываются сечения всех осколков (полного и неполного типов).

Как видно из табл. 1, модели отличаются числом пустых изотопов. При этом в расчетах кампании ТВС реактора типа ВВЭР-1000 множество из 209 полных изотопов можно без видимой потери точности расчета сократить до 110 атомов. Установлено, что на оставшиеся полные изотопы приходится не меньше 0,999 от числа всех Н-Я актов на всех 313 осколках деления, причем это утверждение истинно для любого момента времени кампании и не зависит от типа ТВС.

Как уже было сказано, разработанные модели расчета осколков являются согласованными. Поясним, что под этим подразумевается.

Во-первых, для всех моделей сумма ПВ всех осколков есть константа (2, если нет учета легких ядер). При переходе от сложной модели к более простой выход (ПВ или КВ) исключаемых ядер перераспределяется среди ядер из рассчитываемого множества. Вводится понятие эффективного выхода (ЭВ) осколка. В простейших случаях ЭВ совпадает с ПВ или КВ, но в общем случае ЭВ задается формулой, в которой операндами являются ЭВ атомов-предшественников. Формула может быть универсальной для нескольких элементов множества, но может быть и уникальной.

Во-вторых, при исключении ядра могут возникать новые эффективные радиоактивные процессы для ядер-предшественников. Калорийности таких процессов учитывают калорийности процессов исключенного ядра. То же самое можно сказать и о числах рождаемых легких частиц (n , p , α).

В-третьих, для согласования моделей был пересчитан КВ для всех ядер-осколков. Дело в том, что данные КВ библиотеки ENDF/B-7.1 не согласованы с данными ПВ (возможно, КВ откорректирован для какой-то конкретной расчетной модели). Использование данных КВ библиотеки приводило к тому, что результаты расчетов остаточного энерговыделения ТВС по разным моделям для большого времени охлаждения не совпадали.

Для создания и редактирования моделей была разработана специальная интерактивная программа MODELER с графическим интерфейсом, которая позволяет рассчитывать ЭВ и параметры эффективных процессов, а также пересчитывать значения КВ.

Таблица 1

Число рассчитываемых сортов атомов-осколков в разных моделях

Тип изотопа	Модель				
	33m	10m	50s	5s	FULL
Полный	209	209	209	209	209
Неполный	104	104	104	104	104
Пустой	60	101	210	349	713
Всего	373	414	523	662	1 026

Прямой метод расчета источника ЗН деления

Традиционно данные о ЗН деления читались из соответствующих файлов библиотек оцененных данных. Эти данные отсортированы по так называемым группам запаздывания. В библиотеке ENDF/B-7.1 число групп запаздывания равно 6, тогда как в библиотеке JEF-3.1.1 это число равно 8. Каждой группе соответствует некоторое множество короткоживущих атомов — осколков деления, которым свойственны процессы типа $\beta^- \nu_n$ ($\nu = 1, 2, 3, 4$). В оцененных данных группа характеризуется своими спектральными данными о числе ЗН и их энергетическом распределении. Если источник ЗН рассчитывается в нестационарном приближении, то дополнительно нужна информация об усредненных значениях периода полураспада осколков, соответствующих разным группам запаздывания. Если источник ЗН стационарен, то данные по группам запаздывания можно эффективно просуммировать до расчета задачи, сформировав тем самым псевдопроцесс *запаздывающего* деления (df). Заметим, что данные, о которых идет речь, относятся к делящемуся изотопу, т. е. выборка из библиотек оцененных данных нужна для всех актиноидов задачи.

С помощью программы КРИСТАЛЛ можно рассчитать нестационарный и стационарный источники ЗН еще одним способом — непосредственно по данным о β^- -распаде короткоживущих атомов-осколков. Заметим, что эти источники полностью согласованы между собой. Для решения задачи привлечем множество FULL, которое наиболее полно представляет короткоживущие атомы.

Для расчета нестационарного источника ЗН используем следующую формулу:

$$Q_g^{\text{dn}} = \sum_k \varphi_k^{\text{fp}} \lambda_k \nu_k^{\text{dn}} X_{k,g}^{\text{dn}}, \quad (4)$$

где

$$\nu_k^{\text{dn}} = \sum_i C_k^i \nu_k^i; \quad X_{k,g}^{\text{dn}} = \int_{E_g}^{E_{g-1}} \chi_k^{\text{dn}} dE, \quad \sum_g X_{k,g}^{\text{dn}} = \int_0^{\infty} \chi_k^{\text{dn}} dE = 1;$$

ν_k^{dn} — усредненное по всем процессам β^- -распада число ЗН для атома k .

Рассмотрим установившийся (стационарный) режим образования осколков — источников ЗН. Положим в уравнении (1) $\frac{\partial \varphi_k}{\partial t} = 0$ и исключим слагаемые, отвечающие за нейтронно-ядерные взаимодействия, так как они ничтожно малы по отношению к слагаемым, отвечающим за радиоактивные преобразования ядер. Получим равенства для короткоживущих осколков:

$$\varphi_k^{\text{fp}} \lambda_k = \sum_{g'} \psi_{g'} \sum_{k'} \varphi_{k'} \sigma_{k',g'}^{\text{f}} Y_{k' \rightarrow k,g'}^{\text{cum}},$$

где $Y_{k' \rightarrow k,g'}^{\text{cum}}$ есть КВ ядра-осколка k при делении актиноида k' нейтроном группы g' . Подставив правую часть равенства в формулу (4), получим выражение для расчета стационарного источника ЗН по данным псевдопроцесса df на актиноидах:

$$Q_g^{\text{dn}} = \sum_{g'} \psi_{g'} \sum_{k'} \varphi_{k'} \sigma_{k',g'}^{\text{f}} \nu_{k',g'}^{\text{df}} \xi_{k',g' \rightarrow g}^{\text{df}},$$

где

$$\nu_{k',g'}^{\text{df}} = \sum_k Y_{k' \rightarrow k,g'}^{\text{cum}} \nu_k^{\text{dn}}; \quad \xi_{k',g' \rightarrow g}^{\text{df}} = \frac{1}{\nu_{k',g'}^{\text{df}}} \sum_k Y_{k' \rightarrow k,g'}^{\text{cum}} \nu_k^{\text{dn}} X_{k,g}^{\text{dn}}, \quad \sum_g \xi_{k',g' \rightarrow g}^{\text{df}} = 1. \quad (5)$$

Отсюда видно, что величины $\nu_{k',g'}^{\text{df}}$ и $\xi_{k',g' \rightarrow g}^{\text{df}}$ псевдопроцесса запаздывающего деления можно рассчитать, используя независимые источники данных, — по группам запаздывания оцененных данных или по формулам (5). Естественно, возникает вопрос: насколько близки значения рассчитанных таким образом величин между собой? Это сравнение выполнялось следующим образом.

Процесс запаздывающего деления формировался для библиотеки групповых данных с числом групп 192. Сравнивались значения $\nu_{k',g'}^{\text{df}}$, полученные на базе стационарного решения системы

атомов-осколков с использованием выходов современных библиотек (ENDF/B-7.1, JEF-3.1.1, JENDL-4), и сумма ЗН по всем группам запаздывания. Данные по группам запаздывания были взяты из библиотеки ENDF/B-7.1. Выбор этой библиотеки определяется, во-первых, ее новизной, и, во-вторых, наличием данных для широкого множества актиноидов. Схема превращений осколков в радиоактивных процессах также взята из библиотеки ENDF/B-7.1.

На рис. 1 представлены зависимости ν^{df} от E (энергия нейтрона), рассчитанные для изотопа ^{235}U . Видно, что ближе всего к кривой 3, которая получена традиционным способом, лежит кривая, построенная на базе стационарного решения по данным библиотеки JEF-3.1.1.

По результатам сравнения были выработаны рекомендации по использованию данных о выходах осколков (табл. 2).

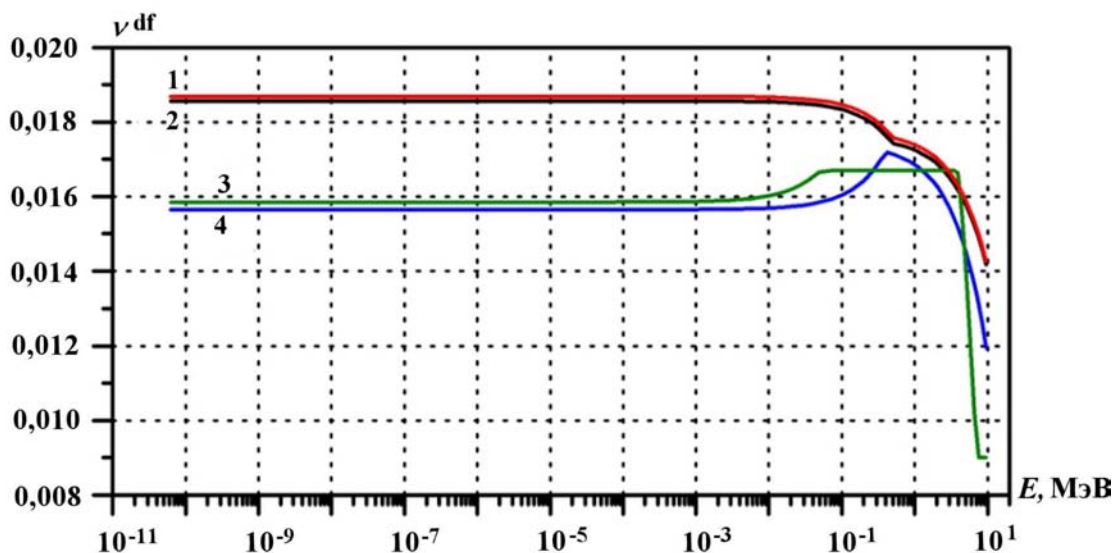


Рис. 1. Энергетические зависимости для числа ЗН процесса запаздывающего деления ^{235}U , рассчитанные с использованием разных данных: 1 — стационарное решение, выходы из ENDF/B-7.1; 2 — стационарное решение, выходы из JENDL-4; 3 — сумма по группам запаздывания (ENDF/B-7.1); 4 — стационарное решение, выходы из JEF-3.1.1

Таблица 2

Рекомендованные библиотеки оцененных данных для расчета выходов осколков

Актиноид	Библиотека
$^{227,229}\text{Th}$; ^{231}Pa ; $^{232,233,236,237}\text{U}$; ^{241}Pu ; ^{242}Cm	ENDF/B-7.1
^{230}Th	ROSFOND
^{232}Th ; $^{234,235,238}\text{U}$; $^{237,238}\text{Np}$; $^{239,242}\text{Pu}$; $^{241,242m2}\text{Am}$; ^{243}Cm	JEF-3.1.1
$^{238,240}\text{Pu}$; $^{242,243}\text{Am}$; $^{244,245,246,248}\text{Cm}$	JENDL-4

Численное исследование точности ROW-метода на задаче расчета кампании ТВС

В качестве тестовой задачи возьмем задачу расчета кампании ТВС реактора ВВЭР-1000. Среди атомов, образуемых в процессе деления актиноидов, есть такие, концентрация которых может быть рассчитана как разностным методом, так и точно, т. е. посредством решения соответствующего дифференциального уравнения.

Рассмотрим рис. 2, на котором представлена схема превращений осколков, относящихся к изобарам 149–153. Заметим, что концентрация стабильного изотопа ^{151}Eu фактически определяется только β^- -распадом долгоживущего изотопа ^{151}Sm . Действительно, соседи слева, атомы $^{149,150,150\text{m}}\text{Eu}$, непосредственно в акте деления не рождаются (по данным ENDF/B-7.1), к тому же они не образуются на распадах короткоживущих осколков, так как "экранированы" стабильными изотопами ^{149}Sm и ^{150}Sm . Следовательно, на изотоп ^{151}Eu соседи слева фактически не влияют. Сосед изотопа ^{151}Eu справа, долгоживущий изотоп ^{152}Eu , также экранирован стабильным атомом ^{152}Sm , а его непосредственный выход в акте деления пренебрежимо мал. Для атомов $^{152,152\text{m}1,152\text{m}2}\text{Eu}$ существует слабая зависимость от атома ^{153}Eu . Сам по себе процесс $^{153}\text{Eu}(n, 2n)^{152,152\text{m}1,152\text{m}2}\text{Eu}$ для тепловых реакторов малозначим, так как является высокопороговым ($\sim 9\text{ МэВ}$). Тем не менее в расчете процесс лучше учитывать, так как изотоп ^{153}Eu является стабильным и его концентрация со временем растет.

Из рис. 2. также следует, что концентрация стабильного изотопа ^{152}Gd фактически зависит только от его соседей по изобаре. Таким образом, если считать известными концентрации изотопов ^{151}Sm

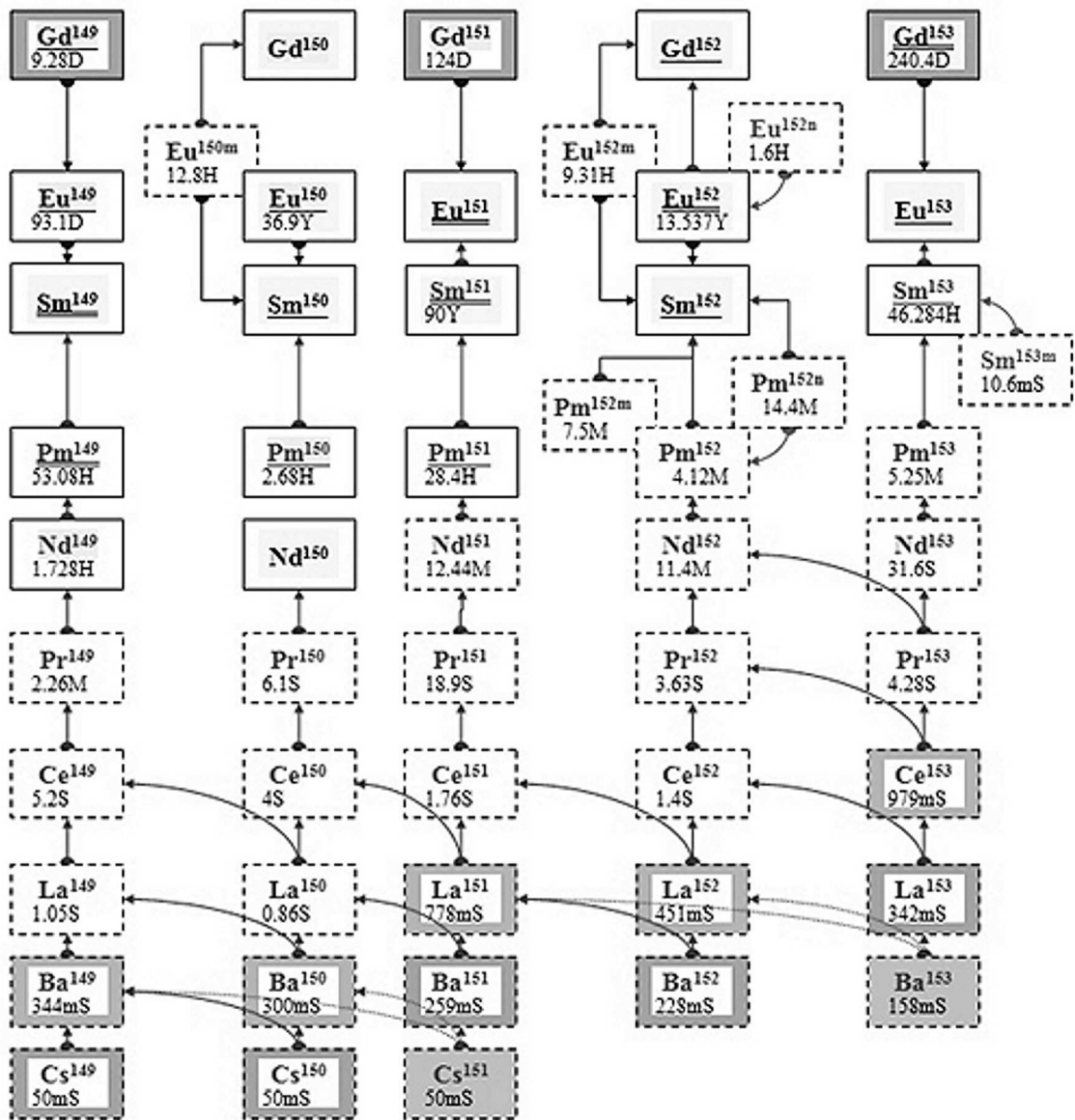


Рис. 2. Схема радиоактивных превращений для атомов-осколков деления, относящихся к изобарам 149–153

и ^{153}Eu , то концентрации атомов ^{151}Eu , $^{152\text{m}2}\text{Eu}$, ^{152}Eu , $^{152\text{m}1}\text{Eu}$, ^{152}Gd можно рассчитать последовательно из соответствующих дифференциальных уравнений. Более того, учитывая достаточно большой период полураспада изотопа ^{151}Sm ($\tau \approx 90$ лет), можно заключить, что значения концентрации изотопов ^{151}Sm и ^{151}Eu через какое-то время будут отличаться друг от друга на несколько порядков.

Таким образом, сравнение разностного и точного решений для изотопа ^{151}Eu позволит оценить практическую точность ROW-метода.

С этой целью был использован следующий метод расчета. Изотопная кинетика кампании ТВС рассчитывалась, как обычно, с помощью ROW-метода. Параллельно рассчитывались концентрации пяти изотопов, которые перечислены выше, при этом считались известными разностные значения концентраций для изотопов ^{151}Sm и ^{153}Eu . Атомы, концентрации которых рассчитывались из дифференциальных уравнений, никак не влияют на расчет кампании; будем называть их изотопами-дублерами.

Результаты расчетов приведены в табл. 3. Представлены относительные отклонения значений концентраций для изотопов-дублеров от соответствующих значений, рассчитанных с помощью ROW-метода. Как видно, для стабильных изотопов ^{151}Eu , ^{152}Gd , долгоживущего изотопа $^{152\text{g}}\text{Eu}$, а также короткоживущего изомера $^{152\text{m}1}\text{Eu}$ совпадение можно считать очень хорошим. Для другого короткоживущего изомера $^{152\text{m}2}\text{Eu}$ совпадение можно считать удовлетворительным. Однако следует учесть, что для всего временного интервала кампании, за исключением небольшого начального участка, концентрация атомов $^{152\text{m}2}\text{Eu}$ была на 5–8 порядков меньше по сравнению с концентрацией других изотопов-дублеров.

Таблица 3

Относительные отклонения значений концентраций (%) для изотопов-дублеров, полученных в точном расчете, от соответствующих значений разностного расчета

Отклонение	^{151}Eu	$^{152\text{g}}\text{Eu}$	$^{152\text{m}1}\text{Eu}$	$^{152\text{m}2}\text{Eu}$	^{152}Gd
В конце расчета	0,001	0,001	0,002	-0,476	-0,005
Максимальное значение	0,021	0,040	0,040	1,194	0,069

Высокая точность расчета, продемонстрированная ROW-методом на данном тесте, является следствием не только точности аппроксимации разностной схемы Розенброка–Ваннера, но и выверенной тактики предсказания шага по времени.

Некоторые возможности программы по расчету энерговыделения ОЯТ

Продемонстрируем некоторые возможности программы для расчета класса задач охлаждения ТВС. Исследовался ТВС реактора ВВЭР-1000.

На рис. 3 представлены зависимости мощности тепловыделения от времени охлаждения, полученные при расчетах с разными моделями учета короткоживущих атомов-осколков. Из рисунка хорошо видны области применимости этих моделей. Видно также, что все зависимости с течением времени сходятся к одной. Однако это стало возможным только после того, как авторы отказались от КВ из библиотек оцененных данных и рассчитали эти данные сами по значениям ПВ с помощью программы MODELER.

Рис. 4 иллюстрирует вклад P радиоактивных процессов — α -распадов, β^- -распадов, изомерных переходов — в мощность тепловыделения все той же ТВС. Представлена также кривая для актиноидов (для суммы по всем процессам). Как видно из рисунка, примерно через 3 недели после начала охлаждения ОЯТ процессы β^- -распада актиноидов перестают оказывать влияние на энерговыделение. При дальнейшем охлаждении, примерно через 80 лет, процесс α -распада актиноидов становится доминирующим для темпа энерговыделения ОЯТ, причем доля процесса со временем стремительно возрастает. Подобные исследования были описаны в работе [6].

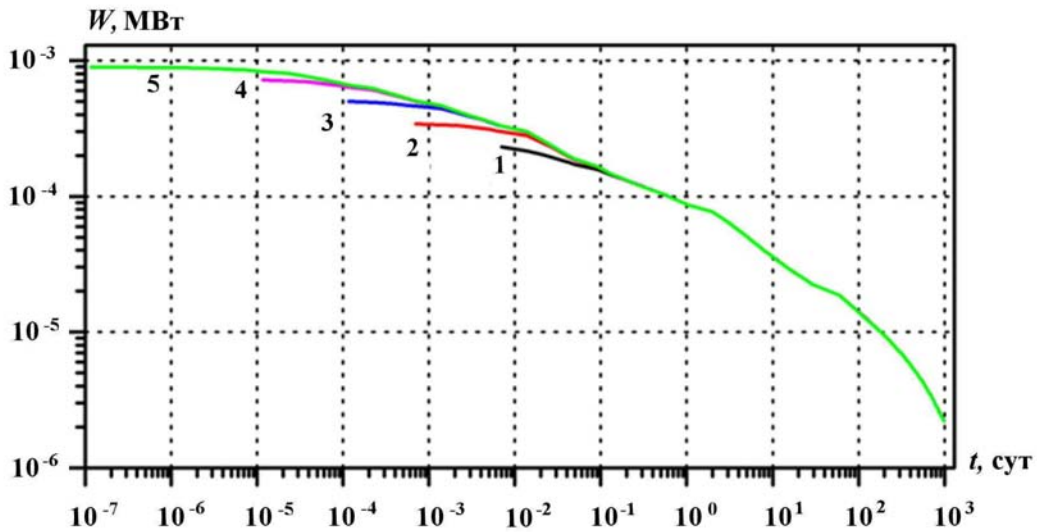


Рис. 3. Временные зависимости мощности остаточного энерговыделения ТВС для разных моделей расчета осколков: 1 — модель 33m; 2 — модель 10m; 3 — модель 50s; 4 — модель 5s; 5 — модель FULL

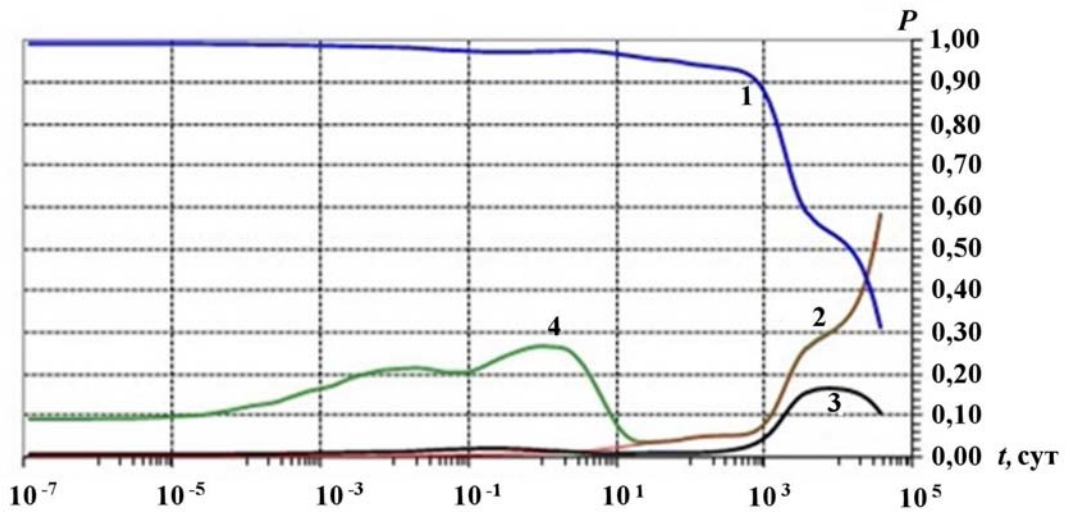


Рис. 4. Вклад радиоактивных процессов в мощность тепловыделения ТВС в расчете до 100 лет: 1 — β^- -распад, включая $\beta^- \alpha$, $\beta^- n$, ..., $\beta^- 4n$; 2 — α -распад; 3 — изомерный переход; 4 — все распады на актиноидах

На рис. 5 представлены изотопы и изомеры, которые дают основной вклад в интегральное энерговыделение ОЯТ (~94 %). Данные в виде диаграммы представляют собой доли от энерговыделения, соответствующие разным сортам атомов. Приводятся значения для двух моментов времени — 3 года и 10 лет. Результаты аналогичных исследований можно найти в работе [7]. Пользователи программы CONCORD могут исследовать процессы спонтанного деления в ОЯТ.

На рис. 6 отображены результаты расчета дифференциального выхода нейтронов для процесса sf на момент 3 года с начала охлаждения ТВС. Данные, представленные в виде диаграммы, соответствуют изотопам, которые на фиксированный момент времени наиболее активны в рассматриваемом процессе. Видно, что источник нейтронов фактически определяется изотопом ^{244}Cm . Подобные исследования были описаны в работе [1].

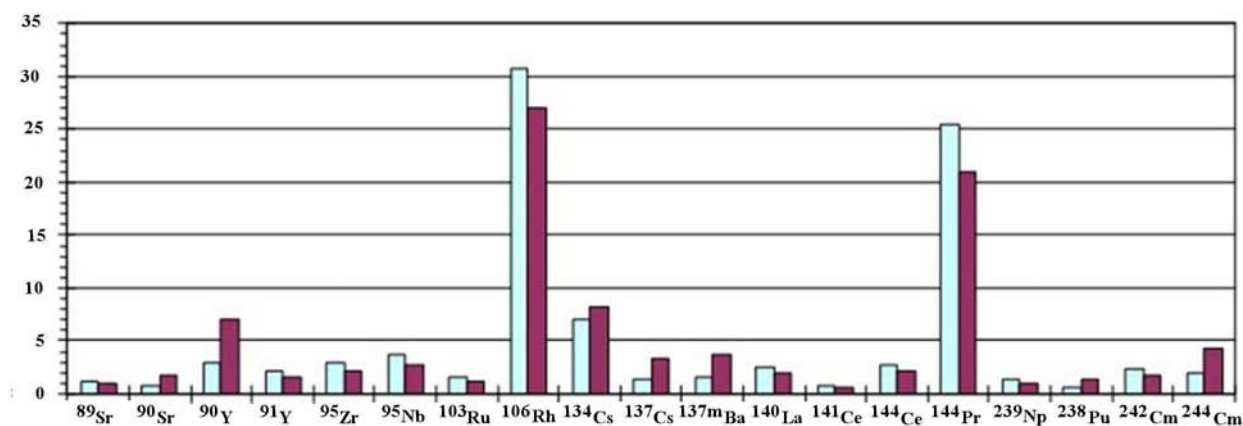


Рис. 5. Вклад ядер (в %) в энерговыделение ОЯТ: ■ — на момент времени 3 года; ■ — на момент времени 10 лет

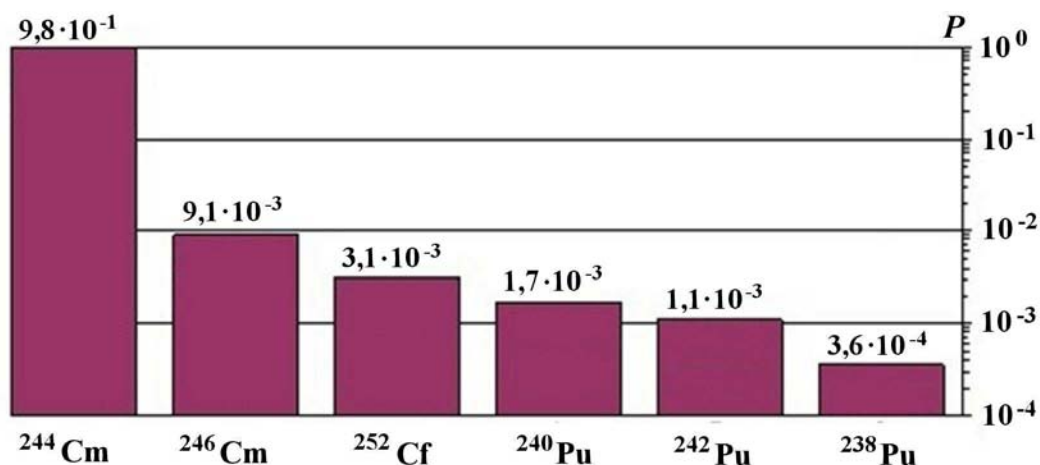


Рис. 6. Вклад (в долях) изотопов в дифференциальный выход нейтронов процесса sf на момент 3 года

Заключение

Сформулируем основные выводы:

1. В РФЯЦ-ВНИИЭФ разработан программный модуль КРИСТАЛЛ для расчета процесса кинетики ядер в реакторах на тепловых и быстрых нейтронах. Модуль интегрирован в программные комплексы CONCORD [3] и TDMCC [8].
2. Модуль позволяет работать с широким множеством Н-Я и радиоактивных процессов. Основными источниками данных для модуля являются современные библиотеки оцененных данных.
3. Модуль позволяет рассчитывать полную систему продуктов деления, при этом число рассчитываемых ядер-осколков может быть больше 1 000 (значение определяется только наличием данных).
4. Имеется возможность прямого метода расчета нестационарного и стационарного источников ЗН деления по данным процессов β^- -распада короткоживущих осколков. Заметим, что при этом данные о группах запаздывания не используются.
5. При расчете вероятностей образования изомеров в результате Н-Я взаимодействий учитывается энергетическая зависимость.

6. Программный модуль позволяет рассчитывать кинетику изотопов в каждом топливном стержне и стержне ПЭЛ, используя параллельные вычисления. Имеется возможность расчета кинетики ядер в радиальных слоях стержней.
7. Имеется возможность исследовать этап остаточного энерговыделения ТВС. Можно рассчитывать источник нейтронов спонтанного деления.
8. Для расчета системы изотопов применяется разностная схема Розенброка—Ваннера второго порядка точности. Эффективность метода расчета подтверждена на практике.

Для анализа оцененных данных активно использовалась информационно-справочная система NDX [9].

Работа над модулем КРИСТАЛЛ потребовала разработки программных средств выборки необходимых оцененных данных, а также создания нескольких автономных графических программ — обработчиков информации. Например, с помощью интерактивной программы MODELER формировались входные данные для разных моделей расчета, которые затем сохранялись в соответствующих текстовых файлах. При необходимости эти файлы можно легко откорректировать вручную. Объем данных модуля КРИСТАЛЛ, задаваемых пользователем для решения (по комплексу CONCORD) конкретной задачи, минимален и в основном включает в себя указания по выбору моделей и режимов расчета.

С помощью другой интерактивной программы ISOREL можно визуально контролировать корректность ввода некоторых данных задачи, относящихся к расчету изотопной кинетики. При запуске программы ISOREL на экран монитора выводятся данные файла, записанного модулем КРИСТАЛЛ по окончании этапа расчета начальных данных задачи. Заметим, что данные этого файла являются проекцией числовых массивов оперативной памяти, используемых на этапе регулярного счета. Информация представляется в виде электронного графа, задающего связи между рассчитываемыми атомами для разных физических областей ТВС.

Список литературы

1. Шаманин И. В., Беденко С. В., Павлюк А. О., Лызко В. А. Использование программы ORIGEN-ARP при расчете изотопного состава отработанного топлива реактора ВВЭР-1000 // Изв. Томского политех. ун-та. 2010. Т. 317, № 4. С. 25—28.
2. Модестов Д. Г. Интегрирование уравнений эволюции ядерного состава вещества в постоянных радиационных полях // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2012. Вып. 1. С. 17—28.
3. Алексеев А. В., Касаткин С. С., Бочков А. И. Комплекс программ расчета ячеечных констант CONCORD. Параллельная версия // Нейтронно-физические и теплофизические проблемы ядерной энергетики с замкнутым топливным циклом. "Нейтроника-2011". Обнинск, 24—26 октября 2011 г.
4. Гребенников А. Н., Иванникова В. Н., Крутько Н. А., Фарафонов Г. Г. Современное состояние системы константного обеспечения нейтронно-физических расчетов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1999. Вып. 4. С. 76—82.
5. Калиткин Н. Н. Численные методы решения жестких систем // Математическое моделирование. 1995. Т. 7, № 3. С. 8—11.
6. Блохин Д. А., Митенкова Е. Ф. Подготовка библиотек распадных данных для пакета ORIGEN // Труды научной сессии "МИФИ-2010". Т. 1. Физико-технические проблемы ядерной энергетики. М.: МИФИ, 2010. С. 67—70.
7. Забродская С. В., Хомяков Ю. С., Цибуля А. А. Расчет выгорания с использованием программы ORIGEN в вычислительном комплексе CONKEMO // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы. 2001. Вып. 2. С. 98—110.

8. Семёнова Т. В., Гусев Е. А., Житник А. К. и др. Новые возможности программы TDMSS. Расчет выгорания топлива // Нейтронно-физические проблемы атомной энергетики. Т. 2. Обнинск: ГНЦ РФ-ФЭИ, 2012. С. 398—413.
9. Гребенников А. Н., Фарафонов Г. Г., Алексеев А. В. и др. Технология подготовки групповых макроскопических констант и методика их уточнения в процессе расчета задач переноса нейтронов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2005. Вып. 4. С. 15—24.

Статья поступила в редакцию 10.06.13.

УДК 519.245

УЧЕТ НЕРАЗРЕШЕННЫХ РЕЗОНАНСОВ ПРИ РЕШЕНИИ УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА НЕЙТРОНОВ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

Е. В. Артемьева, Н. В. Иванов, А. Г. Малькин, Т. В. Семенова
(РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров)

Для ряда изотопов существует область энергий с неразрешенными резонансами. Особенность этой области состоит в том, что в ней сечения в каждой точке по энергии являются случайными функциями, значения которых определяются статистическими законами распределения параметров резонансов. Рассматриваются два метода учета неразрешенных резонансов: метод вероятностных таблиц и прямой метод. Необходимость учета неразрешенных резонансов в задачах переноса нейтронов подтверждается численными расчетами.

Ключевые слова: метод Монте-Карло, перенос нейтронов, неразрешенные резонансы.

Введение

При решении задач переноса нейтронов методом Монте-Карло обычно используются поточечные системы данных по законам взаимодействия нейтрона с атомами элементов. Они готовятся из оцененных данных, хранящихся в библиотеках. Наиболее широко известны библиотеки ENDF/B, которые включают в себя набор модулей NJOY [1] для преобразования оцененных данных в поточечную систему данных. С помощью модуля RECONR строится набор узлов по энергии, достаточный для использования линейной интерполяции с заданной точностью, и оцененные данные преобразуются в поточечную систему данных, составной частью которой являются сечения взаимодействия.

При выборе узлов ось энергий разбивается на четыре области: 1) гладкого поведения сечений при малых энергиях; 2) разрешенных резонансов; 3) неразрешенных резонансов; 4) гладкого поведения сечений при высоких энергиях. Во всех областях, кроме области неразрешенных резонансов, оцененные данные прямо преобразуются в поточечные сечения. В области неразрешенных резонансов сечения являются суммой вкладов сотен резонансов. Существующий уровень техники не позволяет измерить положение и ширину каждого из них. Именно поэтому данная область энергий называется областью неразрешенных резонансов. В настоящее время в этой области экспериментальные сечения измеряются с грубым разрешением, т. е. получаются усреднением по интервалам энергий, содержащих несколько сотен резонансов. В нейтронных библиотеках неразрешенные резонансы принято описывать статистическим образом. При этом предполагается, что средние значения параметров резонансов являются достаточно гладкими функциями энергии. Отклонение параметров от средних значений описывается статистическими законами, которые имеют вид распределения χ^2 с заданным числом степеней свободы.

Основная особенность области неразрешенных резонансов состоит в том, что здесь сечения не являются однозначными функциями энергии, а дополнительно зависят от статистических законов распределения параметров резонансов. Это означает, что в каждой точке по энергии имеется некоторое распределение значений сечений, т. е. сечения являются случайными функциями. Случайность сечений создает определенные трудности при решении задач переноса нейтронов, в частности, мешает само уравнение переноса нейтронов. К тому же известно, что если при конструировании

реакторов на тепловых нейтронах можно ограничиться обычным уравнением переноса с грубо разрешенными сечениями, то при создании реакторов на быстрых нейтронах, где спектр нейтронов сосредоточен в области неразрешенных резонансов, требуется учет взаимного влияния резонансов и статистического характера сечений.

В одной из первых статей [2] по проблеме неразрешенных резонансов отмечено, что все трудности можно преодолеть с помощью метода Монте-Карло. По заданным статистическим законам разыгрывается набор резонансов и рассчитывается соответствующая поточечная система сечений. С этой системой сечений решается задача переноса. Затем строится новая реализация сечений, и снова решается задача переноса. Окончательное решение получается усреднением результатов серии расчетов. Однако этот способ никогда не использовался из-за больших вычислительных затрат.

В той же статье был развит приближенный способ учета неразрешенных резонансов, названный методом вероятностных таблиц. Метод сводится к построению вероятностных таблиц распределения значений сечений на интервалах энергий, содержащих сотни неразрешенных резонансов. Он представляет собой обобщение метода подгрупп [3], однако в отличие от этого метода здесь распределение значений сечений формируется не только их изменением по энергии, но и случайностью параметров резонансов. Метод широко используется, но построение вероятностных таблиц связано с выбором ряда параметров, влияние которых трудно оценить при решении задач переноса нейтронов. Это является недостатком метода вероятностных таблиц.

В связи с развитием вычислительной техники (созданием многопроцессорных систем) становится реальной идея прямого учета неразрешенных резонансов, предложенная в [2]. Статья содержит описание двух методов учета неразрешенных резонансов и примеры их использования в программе TDMCC [4].

1. Формулы расчета резонансных сечений

В области неразрешенных резонансов сечения трех процессов — упругого рассеяния, деления и γ -захвата — вычисляются как сумма гладкой подложки и резонансных вкладов. Сумму резонансных вкладов будем называть резонансным сечением. Сечения других процессов предполагаются гладкими и рассчитываются модулем RECONR стандартным образом. Для описания резонансных вкладов используется одноуровневый формализм Брейта—Вигнера.

Модуль RECONR создает отдельный файл с поточечной системой средних параметров резонансов. В их число входят ширины указанных выше процессов, среднее расстояние между центрами резонансов и степени свободы соответствующих статистических распределений χ^2 . Наличие других (конкурирующих) процессов учитывается заданием распределения их суммарной ширины.

Каждой паре квантовых чисел (l, J) составного ядра соответствует свой тип резонансов, обозначаемый ниже индексом λ . Квантовые числа имеют следующий смысл: l — орбитальный момент количества движения, J — полный угловой момент. В зависимости от энергии нейтрона учитывается до трех значений орбитального момента: $l = 0, 1, 2$. В совокупности получается около пяти типов резонансов, каждый из которых описывается своим набором параметров.

Таким образом, расчет одного случайного значения резонансного сечения для энергии E сводится к розыгрышу случайных значений параметров резонансов и вычислению двойной суммы: внешнее суммирование выполняется по типам резонансов, внутреннее — по всем резонансам одного типа, вклад которых заметен в данной точке по энергии. Формулы для расчета случайных значений резонансных сечений в точке E имеют следующий вид:

$$\sigma_s(E, \omega) = \sigma_p(E) + \sum_{\lambda} \sum_r \sigma_{\lambda r}^m \left[\left(\frac{\Gamma_{\lambda r}^n}{\Gamma_{\lambda r}} - 2 \sin^2 \theta_l \right) \frac{\frac{\Gamma_{\lambda r}^2}{4}}{\frac{\Gamma_{\lambda r}^2}{4} + (E - E_{\lambda r})^2} + \sin 2\theta_l \frac{\frac{\Gamma_{\lambda r} (E - E_{\lambda r})}{2}}{\frac{\Gamma_{\lambda r}^2}{4} + (E - E_{\lambda r})^2} \right];$$

$$\sigma_p(E) = \sum_l \frac{4\pi}{k^2} (2l + 1) \sin^2 \theta_l;$$

$$\sigma_f(E, \omega) = \sum_{\lambda} \sum_r \sigma_{\lambda r}^m \frac{\Gamma_{\lambda r}^f}{\Gamma_{\lambda r}} \frac{\frac{\Gamma_{\lambda r}^2}{4}}{\frac{\Gamma_{\lambda r}^2}{4} + (E - E_{\lambda r})^2};$$

$$\sigma_{\gamma}(E, \omega) = \sum_{\lambda} \sum_r \sigma_{\lambda r}^m \frac{\Gamma_{\lambda r}^{\gamma}}{\Gamma_{\lambda r}} \frac{\frac{\Gamma_{\lambda r}^2}{4}}{\frac{\Gamma_{\lambda r}^2}{4} + (E - E_{\lambda r})^2}.$$

Здесь σ_p — гладкий потенциальный компонент сечения упругого рассеяния, обусловленный резонансами; σ_s , σ_f , σ_{γ} — резонансные компоненты в сечениях упругого рассеяния, деления и γ -захвата; θ_l — фаза рассеяния. Внешнее суммирование ведется примерно по пяти типам резонансов: $\lambda = (l, J)$. С ростом расстояний центров $E_{\lambda r}$ резонансов от точки E их вклады в сечение быстро убывают, тем не менее внутренняя сумма содержит обычно сотни членов. Каждый резонанс характеризуется несколькими параметрами: нейтронной шириной $\Gamma_{\lambda r}^n = \Gamma_{\lambda r}^n(E, \omega)$, шириной деления $\Gamma_{\lambda r}^f = \Gamma_{\lambda r}^f(E, \omega)$, шириной γ -захвата $\Gamma_{\lambda r}^{\gamma} = \Gamma_{\lambda r}^{\gamma}(E, \omega)$ и полной шириной $\Gamma_{\lambda r} = \Gamma_{\lambda r}^n + \Gamma_{\lambda r}^f + \Gamma_{\lambda r}^{\gamma} + \Gamma_{\lambda r}^x$, где $\Gamma_{\lambda r}^x(E, \omega)$ — ширина конкурирующих процессов. Расположение резонансов на энергетической оси описывается расстояниями $D_{\lambda r}(E, \omega)$ между центрами $E_{\lambda r}$ резонансов. Множитель $\sigma_{\lambda r}^m(E, \omega)$ имеет смысл максимального вклада отдельного резонанса:

$$\sigma_{\lambda r}^m = \frac{4\pi}{k^2} \frac{2J+1}{I+1} \frac{\Gamma_{\lambda r}^n}{\Gamma_{\lambda r}},$$

где I — полный спин ядра; $k = 2,19677 \cdot 10^{-3} A\sqrt{E}/(A+1) 10^{-12}/\text{см}$ — волновое число нейтрона, A — отношение массы изотопа к массе нейтрона.

В приведенных формулах аргумент ω является элементом некоторого вероятностного пространства и служит для обозначения случайного характера соответствующих функций. Фиксированным значениям аргумента ω отвечают выборочные значения функций. Выборочные значения параметров резонансов определяются из статистических законов.

Законы распределения ширин имеют вид распределения χ^2 с ν степенями свободы:

$$P_{\nu}(y) = \frac{\nu}{2G^{\frac{\nu}{2}}} \left(\frac{\nu y}{2}\right)^{\nu/2-1} e^{-\nu y/2}, \quad y = \frac{\Gamma_{\lambda r}^c}{\bar{\Gamma}_{\lambda r}^c}, \quad \int_0^{\infty} P_{\nu}(y) dy = 1,$$

где $G(x)$ — гамма-функция; $\bar{\Gamma}_{\lambda r}^c$ — средняя ширина процесса c .

Расстояние между резонансами одного типа подчиняется распределению Вигнера:

$$P(z) = \frac{\pi}{2} e^{-\pi z^2/4}, \quad z = \frac{D_{\lambda r}}{\bar{D}_{\lambda r}}, \quad \int_0^{\infty} P(z) z dz = 1,$$

где $\bar{D}_{\lambda r}(E)$ — среднее расстояние между резонансами.

1.1. Формулы расчета тепловых сечений. Приведенные формулы расчета резонансных сечений определяют холодные сечения, т. е. их можно использовать только для нулевой температуры среды. Чтобы получить сечения для температуры T , надо усреднить холодные сечения по скоростям движения ядер среды. Распределение скоростей ядер обычно описывается распределением Максвелла. Процесс усреднения приводит к так называемому доплеровскому уширению резонансов. Сечения с учетом уширения резонансов называют тепловыми сечениями при температуре T .

В литературе существует несколько алгоритмов численного усреднения поточечных систем сечений [5]. Однако в области неразрешенных резонансов эти алгоритмы трудно реализовать из-за случайности значений холодных сечений. С другой стороны, в формулах для резонансных сечений предполагается, что параметры резонансов являются достаточно гладкими функциями энергии.

Например, модуль RECONR для построения поточечной системы данных по параметрам резонансов использует не более 250 узлов по энергии, хотя для некоторых элементов область неразрешенных резонансов составляет около 100 кэВ. Поэтому при усреднении сечений в точке E резонансные параметры считаются постоянными, равными своим значениям при рассматриваемой энергии E . В результате формулы для расчета тепловых сечений удастся выразить через реальную и мнимую компоненты интеграла ошибок [6]:

$$\sigma_s(E, \omega) = \sum_l \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \theta_l + \sum_\lambda \sum_r \sigma_{\lambda r}^m \left[\left(\frac{\Gamma_{\lambda r}^n}{\Gamma_{\lambda r}} - 2 \sin^2 \theta_l \right) \psi(a, x) + \sin 2\theta_l \chi(a, x) \right];$$

$$\sigma_f(E, \omega) = \sum_\lambda \sum_r \sigma_{\lambda r}^m \frac{\Gamma_{\lambda r}^f}{\Gamma_{\lambda r}} \psi(a, x); \quad \sigma_\gamma(E, \omega) = \sum_\lambda \sum_r \sigma_{\lambda r}^m \frac{\Gamma_{\lambda r}^\gamma}{\Gamma_{\lambda r}} \psi(a, x).$$

Введенные здесь функции ψ и χ связаны с комплексным интегралом ошибок $W(a, x)$ соотношениями

$$\psi(a, x) = a\sqrt{\pi} \operatorname{Re} W(x, a); \quad \chi(a, x) = a\sqrt{\pi} \operatorname{Im} W(x, a); \quad W(a, x) = \frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-t^2} dt}{x + ia - t}.$$

Здесь $a = \Gamma_{\lambda r}/(2\Delta)$; $x = (E - E_{\lambda r})/\Delta$, где $\Delta = \sqrt{4kTE/A}$ — доплеровская ширина для температуры T ; k — константа Больцмана.

Подробный вывод приведенных формул расчета тепловых сечений можно найти в монографии [7].

1.2. Формулы расчета экспериментальных сечений. В области неразрешенных резонансов экспериментальные сечения известны только с грубым разрешением. Это означает, что результат измерения в точке E представляет собой средние от реальных значений сечений по окрестности этой точки, содержащей сотни неразрешенных резонансов.

Получим схему расчета экспериментальных сечений из формул расчета холодных резонансных сечений. Для этого возьмем окрестность ΔE точки E , содержащую достаточно большое число резонансов, и усредним по ней холодные сечения. Усреднение сводится к интегрированию по энергии каждого резонанса в этой окрестности. Отметим, что при усреднении грубость измерений позволяет считать параметры резонансов постоянными, равными своим значениям в центре окрестности.

Из свойств распределения расстояний между резонансами следует, что в окрестности ΔE будет в среднем около $N_\lambda = \Delta E/\bar{D}_\lambda$ резонансов типа λ . Кроме того, считая окрестность ΔE достаточно большой, пределы интегрирования при усреднении резонансов можно распространить до бесконечности. Нетрудно видеть, что тогда интеграл от каждого резонанса будет равен π и внутренняя сумма будет состоять из N_λ слагаемых, значения которых имеют одинаковый статистический закон распределения. Это означает, что после усреднения внутренняя сумма будет равна произведению $\pi N_\lambda \langle \cdot \rangle$, где символом $\langle \cdot \rangle$ обозначено усреднение по статистическим законам распределения ширин резонансов.

В результате приходим к следующим формулам расчета экспериментальных сечений в точке E :

$$\sigma_s(E) = \sum_l \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \theta_l + \frac{2\pi^2}{k^2} \sum_\lambda \frac{2J+1}{I+1} \frac{1}{\bar{D}_\lambda} \left(\left\langle \frac{\Gamma_\lambda^n \Gamma_\lambda^n}{\Gamma_\lambda} \right\rangle - 2\bar{\Gamma}_\lambda^n \sin^2 \theta_l \right);$$

$$\sigma_f(E) = \frac{2\pi^2}{k^2} \sum_\lambda \frac{2J+1}{I+1} \frac{1}{\bar{D}_\lambda} \left\langle \frac{\Gamma_\lambda^n \Gamma_\lambda^f}{\Gamma_\lambda} \right\rangle; \quad \sigma_\gamma(E) = \frac{2\pi^2}{k^2} \sum_\lambda \frac{2J+1}{I+1} \frac{1}{\bar{D}_\lambda} \left\langle \frac{\Gamma_\lambda^n \Gamma_\lambda^\gamma}{\Gamma_\lambda} \right\rangle.$$

Отметим, что эти формулы получены из формул для холодных резонансных сечений. Для тепловых сечений формулы надо усреднить по распределению Максвелла с температурой T .

Из сделанных выше предположений следует, что экспериментальные холодные сечения имеют гладкое поведение как функции энергии. Учитывая это, можно показать, что при невысоких температурах около 1эВ тепловые сечения с грубым разрешением достаточно хорошо совпадают с соответствующими холодными сечениями. Аналогичный результат получается, если попытаться

вывести тепловые сечения грубого разрешения путем усреднения по окрестности ΔE тепловых резонансных сечений, приведенных в подразд. 1.1.

Из этого наблюдения следует, что рассчитанные значения резонансных сечений в точке E полезно перенормировать на сечения грубого разрешения в этой точке, взятые из соответствующей библиотеки нейтронных данных, чтобы иметь полное совпадение рассчитанных и библиотечных данных грубого разрешения.

2. Два метода учета неразрешенных резонансов

Здесь рассматриваются два способа учета неразрешенных резонансов при решении задач переноса нейтронов методом Монте-Карло. Первый способ — это широко используемый метод вероятностных таблиц [8–10]. Он является обобщением метода подгрупп [3], развитого для учета разрешенных резонансов в групповых методах решения задач переноса. Обобщение связано с тем, что в области неразрешенных резонансов распределение значений сечений на интервале энергий формируется не только их зависимостью от энергии, но и статистическими законами распределения параметров резонансов. Второй метод основан на идее прямого учета резонансов, высказанной в 1972 г. в статье [2].

2.1. Метод вероятностных таблиц. Из-за случайности сечений естественным инструментом построения вероятностных таблиц является метод Монте-Карло. В библиотеке NJOY имеется модуль PURR, который рассчитывает вероятностные таблицы распределения значений сечений методом Монте-Карло. Таблицы рассчитываются в узловых точках по энергии, совпадающих с узлами, в которых заданы параметры резонансов. Предполагается, что между узловыми точками распределения значений сечений определяются с помощью линейной интерполяции.

Вероятностные таблицы определяют распределение значений сечений на интервале энергий $[E_{\min}, E_{\max}]$ из некоторой окрестности узла E . Предполагается, что интервал удовлетворяет двум условиям: он содержит достаточно много резонансов, и в нем параметры резонансов можно считать постоянными, равными своим значениям в узле E . Второе условие означает, что вклад отдельного резонанса в сечение зависит только от разности энергий нейтрона и резонанса, поэтому точку отсчета энергии можно выбрать произвольно. Вклад отдельного резонанса быстро убывает с ростом разности энергий нейтрона и резонанса.

В сечения из интервала энергий $[E_{\min}, E_{\max}]$ дают вклад также резонансы, лежащие вне интервала. Поэтому полезно ввести дополнительную окрестность $[E_{low}, E_{high}]$, определяемую границами учитываемых резонансов. В модуле PURR левая граница резонансов выбирается у всех узлов равной $E_{low} = 16$ эВ. Правая граница резонансов определяется по формуле $E_{high} = E_{low} + N_r d_{\min}$, где $N_r = 1000$ — заданное максимальное число резонансов, d_{\min} — минимальное среднее расстояние между резонансами.

Интервал энергий $[E_{\min}, E_{\max}]$ для расчета таблиц сечений выбирается следующим образом:

$$E_{\min} = E_{low} + N_o d; \quad E_{\max} = E_{high} - N_o d, \quad \text{где } N_o \approx 300, \quad d = \left(\sum_{\lambda} \frac{1}{\bar{D}_{\lambda}} \right)^{-1}.$$

При $N_o \gg 1$ сечения практически не зависят от положения самого левого резонанса, поэтому его можно выбрать произвольным образом. В модуле PURR самый левый резонанс в окрестности $[E_{low}, E_{high}]$ вычисляется по формуле $E_{\lambda 1} = E_{low} + \bar{D}_{\lambda} \xi$, где λ — тип резонанса, $\xi \in [0, 1]$ — случайное число. Положения следующих резонансов определяются из рекуррентного соотношения $E_{\lambda r} = E_{low} + \bar{D}_{\lambda} \zeta$, где $\zeta = \sqrt{-4 \ln \xi / \pi}$ — случайная величина, распределенная по закону Вигнера.

Для учета температуры среды T вероятностные таблицы должны определять распределение значений тепловых сечений на интервале $[E_{\min}, E_{\max}]$. Алгоритм расчета таблиц основан на проведении серии испытаний методом Монте-Карло. Каждое испытание состоит из построения в окрестности $[E_{low}, E_{high}]$ выборочной системы резонансов и расчета из этой системы значений тепловых сечений в равномерно выбранных точках E_i интервала $[E_{\min}, E_{\max}]$. Предполагается, что достаточно примерно $N = 5000$ случайных точек E_i для описания изменения сечений как функций энергии. Для упрощения алгоритма точки E_i полезно упорядочить по возрастанию.

Формулы расчета значений сечений содержат два суммирования: внешнее — по типам резонансов, внутреннее — по последовательности резонансов одного типа.

Для вычисления внутренней суммы последовательно разыгрываются положения $E_{\lambda r}$ резонансов типа λ . Для каждого нового резонанса разыгрываются значения всех ширин: нейтронной $\Gamma_{\lambda r}^n$, ширины деления $\Gamma_{\lambda r}^f$, ширины γ -захвата $\Gamma_{\lambda r}^\gamma$ и ширины конкурирующих процессов $\Gamma_{\lambda r}^x$, после чего вычисляется $\Gamma_{\lambda r}$ — полная ширина резонанса: $\Gamma_{\lambda r} = \Gamma_{\lambda r}^n + \Gamma_{\lambda r}^f + \Gamma_{\lambda r}^\gamma + \Gamma_{\lambda r}^x$. Очевидно, что вклад в сечения отдельного резонанса будет заметен только в точках E_i , близких к энергии резонанса $E_{\lambda r}$. Критерием близости в модуле PURR выбран промежуток энергии $\Delta E = c_1 \Gamma_{\lambda r} + \max \{c_1 \Gamma_{\lambda r}, c_2 \Delta\}$, где $c_1 \approx 32$; $c_2 \approx 20$; Δ — ширина Доплера в узле E при температуре T . Расчет внутренней суммы заканчивается, когда энергия очередного резонанса оказывается больше правой границы E_{high} .

Учет внешней суммы сводится к повторению описанного алгоритма до исчерпания всех типов резонансов. В результате в точках E_i получаются случайные значения резонансных сечений. К ним при необходимости добавляются плавные сечения подложки. Очевидно, что процесс получения сечений сопровождается построением выборочной системы резонансов с параметрами, разыгранными по заданным законам распределения.

Отметим, что имеются некоторые трудности при оценке вероятностных таблиц на испытаниях. Таблицы определяют вероятность появления на интервале $[E_{min}, E_{max}]$ полного сечения из заданной полосы значений. Предполагается, что границы полос выбраны так, чтобы в соседних полосах вероятности мало отличались, и что число полос невелико, около 20. Очевидно, что практически невозможно заранее выбрать границы полос. В модуле PURR предлагается выбирать границы полос на первом испытании путем анализа полученной структуры полного сечения на интервале энергий $[E_{min}, E_{max}]$. При известных границах оценка таблиц сводится к подсчету числа попаданий в полосы рассчитанных в точках E_i значений полного сечения. Одновременно оцениваются средние значения в полосах сечений для процессов рассеяния, деления и γ -захвата.

После окончания заданного числа испытаний L выполняется нормировка результатов серии испытаний. Накопленные по полосам суммы сечений процессов нормируются на число попаданий в данную полосу значений полного сечения. В результате получаются средние значения сечений процессов в каждой полосе. Вероятностные таблицы получаются с помощью нормировки чисел попаданий в полосы значений полного сечения. При этом нормировка равна произведению NL , где N — число используемых точек E_i на интервале $[E_{min}, E_{max}]$. Средние значения сечений процессов по полосам можно рассматривать как условные средние для соответствующей вероятности значения полного сечения.

Входными данными для расчета таблиц служат два файла. В первом файле находятся данные по сечению подложки, а во втором файле записаны параметры статистических законов для каждого типа резонанса.

2.2. Метод прямого учета неразрешенных резонансов. Идея прямого учета резонансов была предложена в 1972 г. в статье [2]. Она заключается в проведении серии расчетов задачи переноса. Каждый из расчетов выполняется с табличными сечениями, вычисленными по случайному независимому набору параметров резонансов, и решение задачи находится усреднением результатов серии расчетов. В такой формулировке и при существовавшем уровне развития ЭВМ идея была практически нереализуема из-за больших вычислительных затрат на расчет серии задачи и большого объема памяти для хранения таблиц с резонансными сечениями.

В настоящее время объем памяти около 1—2 млн слов на изотоп не является запретным, тем более что число изотопов, для которых требуется учитывать неразрешенные резонансы, невелико.

Рассмотрим вторую проблему — затраты на проведение серии расчетов. В современных программах Монте-Карло траектории нейтронов моделируются пачками с заданным числом частиц. Отсюда сразу следует идея моделировать в области неразрешенных резонансов каждую пачку или группу пачек по случайному независимому набору сечений. Нетрудно видеть, что эта процедура приводит к автоматическому усреднению результатов решения задачи по независимым наборам резонансных сечений.

Для реализации процедуры требуется перед началом моделирования пачки рассчитывать новую независимую таблицу резонансных сечений. Очевидно, что для расчета новых таблиц сечений удоб-

но использовать параллельные вычисления. Алгоритм расчета независимых резонансных сечений можно взять из процедуры расчета вероятностных таблиц, где независимые таблицы резонансных сечений создаются на каждом испытании. Отметим, что эти таблицы сечений имеют одну особенность: они рассчитываются в случайно выбранных точках по энергии. В данном случае резонансные сечения удобно рассчитывать на равномерной сетке. В принципе, в окрестности каждого узла задания параметров резонансов сетка может выбираться со своим шагом по энергии. Нетрудно видеть, что таблицы сечений в окрестности одного узла или группы узлов можно вычислять независимо на отдельных процессорах.

Таким образом, в настоящее время имеется возможность решать задачи с прямым учетом неразрешенных резонансов без приближений, присущих методу вероятностных таблиц.

3. Результаты тестирования

Предложенные методы учета неразрешенных резонансов были реализованы в программе TDMCC [4] и протестированы на ряде задач. Первые две задачи были взяты из работ [8, 11] и позволили провести сравнение полученных результатов с результатами программы MCNP [11]. Также были выполнены расчеты двух модельных задач атомной энергетики.

3.1. Сравнение с программой MCNP. Первая задача использовалась при тестировании метода вероятностных таблиц в программе MCNP [11]. Представлена бесконечная однородная среда со следующим составом (в процентах атомов): 8,9286 ^{239}Pu , 89,2857 ^{238}U , 1,7857 Н. Плотность полагается равной 1. Значения коэффициентов размножения нейтронов без учета неразрешенных резонансов, полученные по программам MCNP и TDMCC, равны соответственно 1,49337 (0,00165) и 1,48931 (0,001) (в скобках указано стандартное отклонение). В табл. 1 приводятся аналогичные результаты, полученные с учетом неразрешенных резонансов.

В качестве второй задачи использовался тест BIG TEN [8]. Геометрия системы представляет собой два вложенных друг в друга цилиндра. Ядро имеет радиус 26,67 см и полудлину 27,94 см. Радиус отражателя 41,91 см, полудлина 48,26 см. Состав ядра: ^{234}U (0,00005), ^{235}U (0,00484), ^{238}U (0,04268); состав отражателя: ^{235}U (0,0001), ^{238}U (0,04797). Значения коэффициентов размножения нейтронов без учета неразрешенных резонансов, полученные по программам MCNP и TDMCC, равны соответственно 1,0069 (0,0005) и 1,006983 (0,002). Результаты расчетов с учетом неразрешенных резонансов представлены в табл. 2.

Таблица 1

Результаты расчета первой задачи

Критический параметр	MCNP, метод вероятностных таблиц	TDMCC, метод прямого учета	TDMCC, метод вероятностных таблиц
$k_{эф}$ с учетом неразрешенных резонансов	1,51068 (0,00129)	1,513182 (0,001)	1,512849 (0,001)
$\Delta k_{эф}$	0,01731	0,023872	0,023539

Таблица 2

Результаты расчета второй задачи

Критический параметр	MCNP, метод вероятностных таблиц	TDMCC, метод прямого учета	TDMCC, метод вероятностных таблиц
$k_{эф}$ с учетом неразрешенных резонансов	1,0112 (0,0005)	1,011381 (0,002)	1,011127 (0,002)
$\Delta k_{эф}$	0,0043	0,004398	0,004144

Достаточная близость результатов расчета двух задач, полученных авторами, и результатов по программе MCNP, взятых из статей [8, 10], свидетельствует о корректном использовании алгоритма модуля PURR библиотеки NJOY.

3.2. Модельные задачи атомной энергетики. Следующие две задачи демонстрируют необходимость учета неразрешенных резонансов при рассмотрении важного для физики реакторов вопроса — температурного эффекта, или эффекта Доплера. Эффект Доплера играет существенную роль в реакторах. В результате деления ядер температура в реакторе изменяется, а значит, изменяется и соотношение между высотой и шириной резонансов (известно, что влияние теплового движения ядер (атомов) среды сводится к уменьшению высоты и увеличению ширины резонансов).

Рассмотрим систему, которая представляет собой бесконечную среду, состоящую из чередующихся плоских слоев, моделирующих топливную зону с отражателем. Топливная зона представляет собой диоксид урана плотностью $10,6 \text{ г/см}^3$ с обогащением 15 % по ^{235}U . В качестве отражателя в одной задаче использовался карбид бора, в другой — диоксид урана с обогащением 90 %. Исходные данные задач приведены в табл. 3.

Расчеты проводились для температур 273, 500, 1000, 1500, 2000 К. Результаты представлены в табл. 4, где $k_{эф0}$, $k_{эф1}$, $k_{эф2}$ — эффективные коэффициенты размножения нейтронов без учета неразрешенных резонансов, с учетом прямым методом и методом вероятностных таблиц соответственно; $\Delta k_{эф1} = k_{эф1} - k_{эф0}$; $\Delta k_{эф2} = k_{эф2} - k_{эф0}$. Точность всех расчетов $\sim 0,003$ %.

Как видно из табл. 4, с ростом температуры разница между эффективными коэффициентами размножения нейтронов, полученными с учетом и без учета резонансов, уменьшается.

На рис. 1, 2 для двух задач представлены графики отклонений коэффициента размножения нейтронов от начального значения с ростом температуры. Из рисунков видно, что при учете нераз-

Таблица 3

Исходные данные двух модельных задач атомной энергетики

Задача	Топливо		Отражатель	
	Ядерные концентрации, $10^{24}/\text{см}^3$	Толщина слоя, см	Ядерные концентрации, $10^{24}/\text{см}^3$	Толщина слоя, см
1	O ($4,735423 \cdot 10^{-2}$)	17	C ($2,673694 \cdot 10^{-2}$)	3
	^{238}U ($2,012555 \cdot 10^{-2}$)		^{10}B ($5,347388 \cdot 10^{-2}$)	
	^{235}U ($3,551567 \cdot 10^{-3}$)		^{11}B ($5,347388 \cdot 10^{-2}$)	
2	O ($4,735423 \cdot 10^{-2}$)	10	O ($4,775370 \cdot 10^{-2}$)	10
	^{238}U ($2,012555 \cdot 10^{-2}$)		^{238}U ($2,387685 \cdot 10^{-3}$)	
	^{235}U ($3,551567 \cdot 10^{-3}$)		^{235}U ($2,148916 \cdot 10^{-2}$)	

Таблица 4

Результаты расчетов двух модельных задач

Задача	T, К	$k_{эф0}$	$k_{эф1}$	$k_{эф2}$	$\Delta k_{эф1}$	$\Delta k_{эф2}$
1	273	0,85319	0,85543	0,85544	0,00224	0,00225
	500	0,85274	0,85455	0,85453	0,00181	0,00179
	1000	0,85221	0,85362	0,85364	0,00141	0,00143
	1500	0,85195	0,85318	0,85319	0,00124	0,00124
	2000	0,85176	0,85296	0,85293	0,00120	0,00117
2	273	1,96164	1,96544	1,96545	0,00380	0,00381
	500	1,96141	1,96438	1,96438	0,00297	0,00297
	1000	1,96108	1,96348	1,96347	0,00240	0,00238
	1500	1,96084	1,96294	1,96300	0,00210	0,00215
	2000	1,96076	1,96262	1,96268	0,00186	0,00191

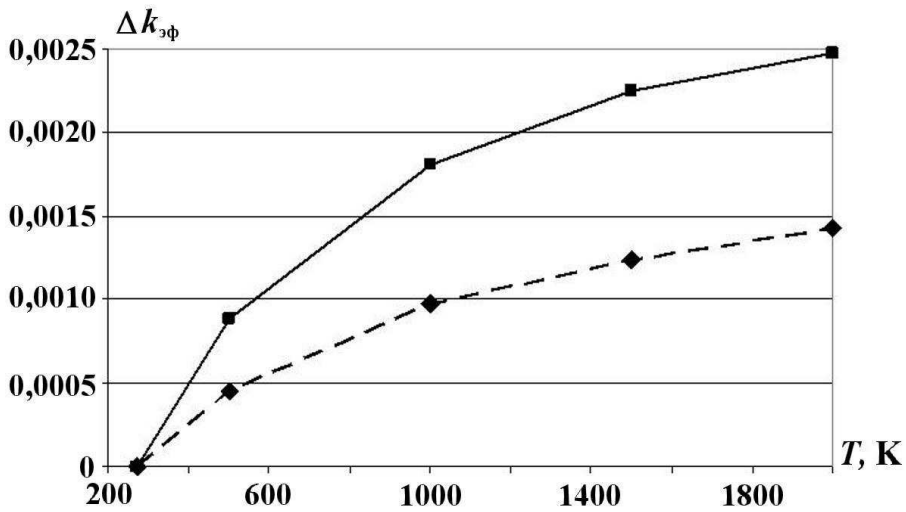


Рис. 1. Отклонения коэффициента размножения нейтронов от начального значения с ростом температуры для модельной задачи с отражателем из карбида бора: ---◆--- без учета неразрешенных резонансов; —■— с учетом неразрешенных резонансов

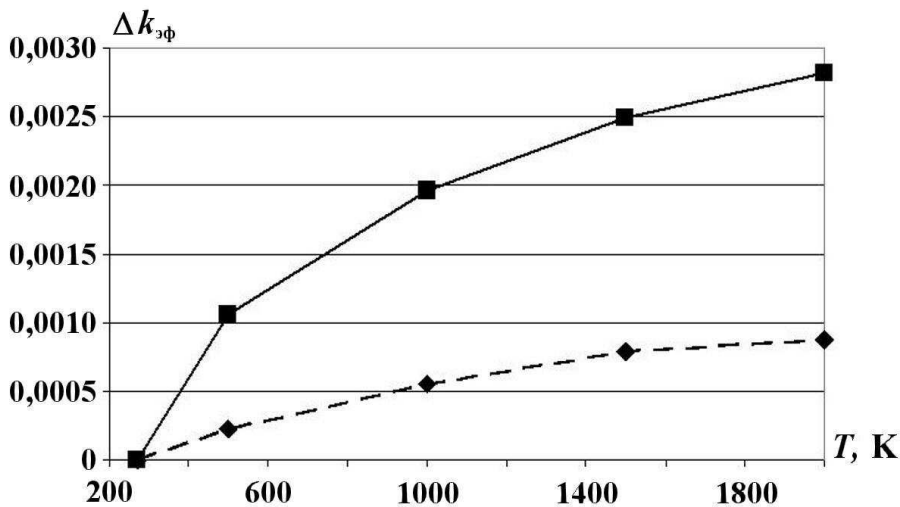


Рис. 2. Отклонения коэффициента размножения нейтронов от начального значения с ростом температуры для модельной задачи с отражателем из 90 % ^{235}U : ---◆--- без учета неразрешенных резонансов; —■— с учетом неразрешенных резонансов

решенных резонансов температурная зависимость эффективного коэффициента размножения нейтронов выражена более ярко.

Проведенные расчеты показывают, что в ряде задач на перенос нейтронов учет неразрешенных резонансов оказывает существенное влияние на результаты. Метод прямого учета неразрешенных резонансов и метод вероятностных таблиц дают близкие результаты.

Список литературы

1. MacFarlane R., Muir D. The NJOY Nuclear Data Processing System. Version 91. Los Alamos National report LA-12740-M, 1994.

2. *Levitt B.* The probability table method for treating unresolved neutron resonances in Monte-Carlo calculations // Nucl. Sci. and Eng. 1972. Vol. 49. P. 450—457.
3. *Николаев М. Н., Хохлов В. Ф.* Система подгрупповых констант: Бюллетень информационного центра по ядерным данным. Вып. 4. М.: Атомиздат, 1967. С. 392.
4. Программа TDMCC (Time Dependent Monte-Carlo Code). Свидетельство о государственной регистрации № 2010614412 // Электронный бюллетень. 2010. № 2. <http://www.fips.ru>.
5. *Cullen D., Weisbin C.* Exact Doppler broadening of tabulated cross sections // Nucl. Sci. and Eng. 1976. Vol. 60. P. 199—229.
6. *Абрамовиц М., Стиган И.* Справочник по специальным функциям. М.: Наука, 1979. С. 119.
7. *Белл Д., Глестон С.* Теория ядерных реакторов. М.: Атомиздат, 1974. С. 336.
8. *Little R., MacFarlane R.* ENDF/B-VI Neutron Library for MCNP with Probability Tables. Los Alamos National report LA-UR-98-5718, 1998.
9. *Zheng S., Vergnaud T., Nimal J.* Neutron cross-sections probability tables in TRIPOLI-3 Monte-Carlo transport code // Nucl. Sci. and Eng. 1998. Vol. 128. P. 321.
10. *Martin N., Hebert A.* A Monte-Carlo lattice code with probability tables and optimized energy meshes // Ibid. 2011. Vol. 167. P. 177—195.
11. *Carter L., Little R., Hendricks J., MacFarlane R.* New Probability Table Treatment in MCNP for Unresolved Resonances. Los Alamos National report LA-UR-98-26, 1998.

Статья поступила в редакцию 18.07.13.

УДК 519.6

МОДЕЛЬ ВЕРТИКАЛЬНОЙ СТРАТИФИКАЦИИ ТЕПЛОГИДРАВЛИЧЕСКОГО КОДА СОКРАТ-БН

И. С. Вожаков, Э. В. Усов, Д. Г. Архипов, А. А. Бутов, М. Е. Кузнецова
(Новосибирский филиал ИБРАЭ РАН,
НГУ, Институт теплофизики СО РАН, г. Новосибирск)

В рамках двухжидкостного приближения с равными давлениями фаз предлагается модель, позволяющая физически корректно описывать динамику двухфазного вертикально стратифицированного течения. Данная модель основана на модификации конечно-разностной аппроксимации конвективных членов в уравнениях сохранения массы и градиентов давления с учетом наличия четко выраженной границы раздела фаз. Демонстрируются примеры корректного расчета задач со стратифицированным двухфазным потоком.

Ключевые слова: вертикальная стратификация, двухжидкостная модель, СОКРАТ-БН.

Введение

Численное моделирование штатных и аварийных режимов работы в настоящее время является одним из основных методов обоснования безопасной эксплуатации проектируемых реакторных установок. Необходимо отметить, что особенностью реакторных установок типа БН является наличие газовых полостей в первом и втором контурах, основным назначением которых является компенсация температурных расширений теплоносителя. Полости заполнены инертными газами с низкой температурой конденсации. Кроме того, источниками газов могут стать продукты деления, выходящие из поврежденных ТВЭЛов. Для расчета задач с такими полостями была разработана представленная в данной статье модель вертикальной стратификации.

Известно, что использование схем сквозного счета для численного решения системы уравнений двухжидкостной модели в условиях больших градиентов объемного содержания фаз может приводить к физически некорректному описанию эволюции двухфазного потока. Наиболее показательны задачи, в которых наблюдается расслоение (стратификация) потока, вызванное воздействием гравитационных или инерционных сил. Более того, при наличии стратификации предположение о равенстве давлений жидкой и газовой фаз в пределах одной расчетной ячейки, используемое во многих теплогидравлических кодах (TRAC [1], KOPCAP [2]), вообще говоря, неверно.

Для иллюстрации рассмотрим задачу о подъеме границы раздела *жидкость—газ* в вертикальном канале в приближении несжимаемой жидкости (рис. 1). Уравнение сохранения массы жидкости будет иметь вид

$$\frac{\partial \alpha_f}{\partial t} + \frac{\partial (\alpha_f v_f)}{\partial z} = 0, \quad (1)$$

где α_f — объемная доля жидкости; v_f — скорость жидкости.

Запишем уравнение (1) для ячейки $j + 1$, аппроксимируя частную производную по пространству, например, разностью против потока (скалярные величины определяются в центрах ячеек, векторные — на границах):

$$\frac{\alpha_{f,j+1}^n - \alpha_{f,j+1}}{\Delta t} = - \frac{\alpha_{f,j+1} v_{f,j+3/2} - \alpha_{f,j} v_{f,j+1/2}}{\Delta z}.$$

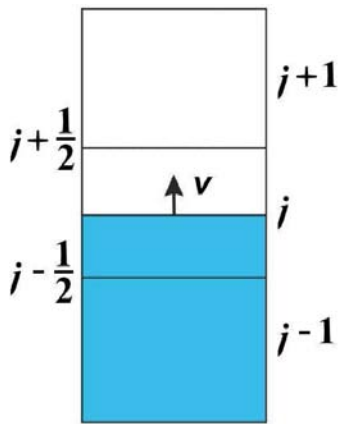


Рис. 1. Движение границы раздела фаз в вертикальном канале

Можно заметить, что такой подход приведет к появлению жидкости в ячейках, находящихся выше границы раздела *жидкость—газ*. Данная ситуация возникает вследствие использования предположения о равномерном заполнении ячеек фазами, что, конечно, неверно в случае стратифицированного потока.

Классическим решением проблемы размывания границы раздела фаз является переход от метода конечных разностей к методу конечных объемов, который позволяет физически корректно аппроксимировать конвективные потоки между ячейками [3–5]. Однако необходимо отметить, что использование только этого метода при моделировании движения стратифицированных потоков вскрывает новые недостатки двухжидкостной модели [6–8], так что требуется комплексный подход к решению проблемы.

Появление границы раздела фаз значительно сказывается на динамике системы вследствие изменения градиентов давления. Рассмотрим столб жидкости в вертикальном канале, на нижней границе которого установлена непроницаемая перегородка. Из постановки задачи следует, что скорости как столба жидкости, так и газа, находящегося над ним, должны быть равны нулю. Уравнение сохранения импульса смеси, записанное для верхней границы стратифицированной ячейки, в которой находится неподвижная жидкость, имеет вид

$$\rho_{j+1/2} \frac{\partial v_{j+1/2}}{\partial t} = - \left(\frac{\partial P}{\partial z} \right)_{j+1/2} + \rho_{j+1/2} g = 0,$$

где $\rho = \alpha_g \rho_g + \alpha_f \rho_f$ — плотность смеси (α_g, α_f — объемные доли газа и жидкости); v — скорость смеси; P — давление; g — ускорение свободного падения. Гравитационный член компенсируется перепадом давления, что должно обеспечивать неподвижность смеси. В то же время ввиду равенства давлений фаз такой же градиент давления присутствует и в уравнении сохранения импульса газа:

$$\rho_{g,j+1/2} \frac{\partial v_{g,j+1/2}}{\partial t} = - \left(\frac{\partial P}{\partial z} \right)_{j+1/2} + \rho_{g,j+1/2} g + F_{j+1/2} \neq 0,$$

где ρ_g, v_g — плотность и скорость газа; $F = k|v_g - v_f|$ — сила межфазного трения.

Целью настоящей работы являлось создание в рамках двухжидкостного приближения с равными давлениями фаз модели вертикальной стратификации, которая бы физически корректно описывала большинство явлений, наблюдаемых в данном режиме, и внедрение данной модели в теплогидравлический модуль кода СОКРАТ-БН [9].

Модель вертикальной стратификации

Модель вертикальной стратификации построена в первую очередь на предположении о существовании плоской поверхности раздела фаз, местоположение которой определяется на основании анализа распределения газосодержания по ячейкам канала. При обнаружении стратификации потока модельные уравнения корректируются с учетом резких градиентов содержания фаз в пределах одной расчетной ячейки.

Для иллюстрации обратимся к рис. 2, на котором схематично изображена часть вертикального канала. В соответствии с моделью стратификации концентрации пузырьков в жидкости ниже границы раздела фаз в ячейках j и $j-1$ полагаются равными, а объем жидкости выше границы в ячейках j и $j+1$ считается малым настолько, что им можно пренебречь. Объемная доля смеси α_{level} в стратифицированной ячейке j определяется долями жидкости и пузырьков, находящихся в ней:

$$\alpha_{level} = \alpha_{f,j} + \alpha_{bubble}.$$

Из равенства концентраций пузырьков в ячейках j и $j - 1$ находим их объемную долю в стратифицированной ячейке:

$$\frac{\alpha_{bubble}}{\alpha_{f,j} + \alpha_{bubble}} = \frac{\alpha_{g,j-1}}{\alpha_{g,j-1} + \alpha_{f,j-1}} \Rightarrow \alpha_{bubble} = \alpha_{f,j} \frac{\alpha_{g,j-1}}{\alpha_{f,j-1}}$$

Следовательно, известна и доля смеси в стратифицированной ячейке:

$$\alpha_{level} = \frac{\alpha_{f,j}}{\alpha_{f,j-1}}$$

Условия, в которых данные рассуждения оказываются применимы, определяют критерии модели вертикальной стратификации:

- 1) объемная доля газа в ячейке $j + 1$ больше объемной доли газа, соответствующей границе дисперсного режима течения, принятого в теплогидравлическом модуле кода СОКРАТ-БН ($\alpha_{g,j+1} > \alpha_{disp} = 0,957$);
- 2) объемная доля газа в ячейке j больше, чем в ячейке $j - 1$ ($\alpha_{g,j} > \alpha_{g,j-1}$);
- 3) объемная доля газа в ячейке j меньше, чем в ячейке $j + 1$ ($\alpha_{g,j} < \alpha_{g,j+1}$).

При обнаружении стратификации в ячейке потоки массы газа и жидкости корректируются с учетом резкого градиента объемного паросодержания (считается, что через верхнюю границу ячейки течет смесь со свойствами из верхней ячейки, а через нижнюю границу — со свойствами из нижней ячейки), т. е. конвективные члены в уравнениях сохранения массы записываются следующим образом:

$$\frac{\partial (\alpha_i \rho_i v_i)_j}{\partial z} = \frac{\alpha_{i,j+1} \rho_{i,j+1} v_{i,j+1/2} - \alpha_{i,j-1} \rho_{i,j-1} v_{i,j-1/2}}{\Delta z}$$

В соседних ячейках потоки массы также корректируются для согласования.

Как уже было сказано, появление границы раздела фаз сказывается на динамике системы вследствие изменения градиентов давления. Более того, она не может быть описана стандартным методом в рамках двухжидкостной модели с одинаковыми давлениями фаз. Решить данную проблему удалось перенесением места расчета давления из центра стратифицированной ячейки на свободную поверхность и изменением контрольного объема для расчета скоростей на границах.

На рис. 3 показано, как выбирается контрольный объем (обозначен пунктирной линией) для записи уравнения сохранения импульса на границе ячейки, а также обозначены место расчета скоростей (\times) и места расчета давлений в ячейках (\bullet) в случае стратификации потока.

Используя предположение о равномерном распределении фаз в контрольном объеме, получаем значения скалярных величин на границах ячейки:

$$\alpha_{i,j\pm 1/2} = \alpha_{i,j\pm 1}; \quad \rho_{i,j\pm 1/2} = \rho_{i,j\pm 1}$$

После определения высоты уровня жидкости в стратифицированной ячейке можно корректно рассчитать градиенты давления на ее границах:

$$\left(\frac{\partial P}{\partial z} \right)_{j-1/2} = \frac{P_j - P_{j-1}}{\Delta z \left(\alpha_{level} + \frac{1}{2} \right)}$$

$$\left(\frac{\partial P}{\partial z} \right)_{j+1/2} = \frac{P_{j+1} - P_j}{\Delta z \left[(1 - \alpha_{level}) + \frac{1}{2} \right]}$$

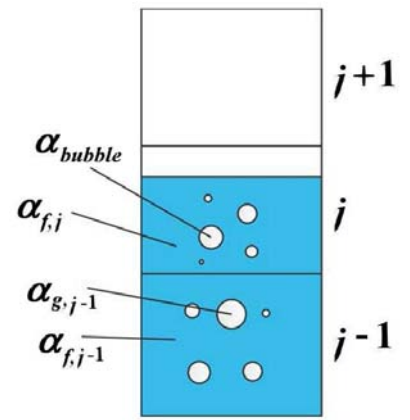


Рис. 2. Стратификация потока в вертикальном канале

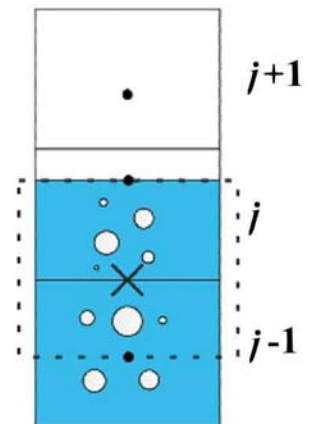


Рис. 3. Контрольный объем для расчета скорости на границах стратифицированной ячейки

Вследствие дискретности расчета пересечение границ ячеек поверхностью раздела фаз вызывает нефизичные скачки давления. В этом случае для верного описания динамики системы уравнения сохранения массы корректируются с учетом выхода уровня раздела фаз за границы ячейки. Если в ячейке зафиксировано превышение объемным содержанием фазы максимального значения, то в уравнения сохранения массы добавляется член, который отвечает за переброс избытка фазы из одной ячейки в другую, и проводится пересчет уравнений без изменения временного шага. Минимальные значения объемного содержания для газовой и жидкой фаз равняются $\alpha_{g,\min} = 10^{-6}$ и $\alpha_{f,\min} = 5 \cdot 10^{-8}$ ($\alpha_{g,\max} = 1 - \alpha_{f,\min}$). Если содержание фазы опустилось до минимального значения, фаза считается фоновой.

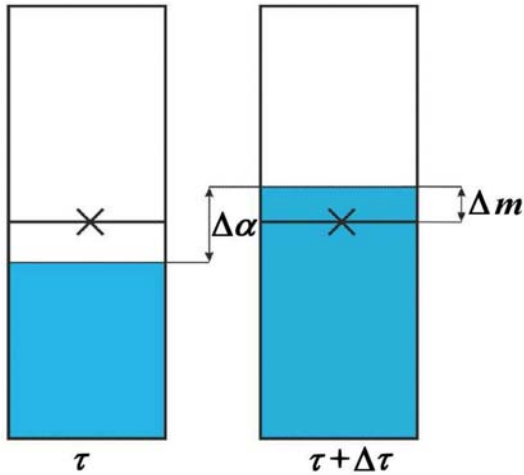


Рис. 4. Пересечение уровнем раздела фаз границы ячейки

На рис. 4 схематично изображено пересечение фазой границы ячейки. На временном слое τ содержание фазы в ячейке составляло $\alpha(\tau)$, причем было меньше максимального значения. На следующем временном слое содержание фазы в ячейке стало больше максимального значения и составило $\alpha(\tau + \Delta\tau) = \alpha^{new}$. Таким образом, за время расчетного шага фаза должна была полностью заполнить текущую ячейку и начать заполнять следующую, но этого не произошло ввиду дискретности расчета, и весь избыток массы остался в ячейке, в результате чего произошел рост давления. Для того чтобы расчет производился корректно, избыток массы $\Delta m = \rho(\alpha^{new} - \alpha_{\max})$ вычитается из текущей ячейки и переносится в следующую.

Дополнительный член в уравнениях сохранения массы записывается следующим образом:

$$\frac{\partial(\alpha_i \rho_i)_j}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha_i \rho_i v_i)_j}{\partial z} = \Delta m_{i,j}.$$

В случае превышения содержанием газовой фазы максимального значения

$$\alpha_{g,j}^{new} > \alpha_{g,\max} \Rightarrow flag_j = 1$$

добавочный член имеет вид

$$\frac{\Delta m_{g,j}}{\rho_{g,j}} = -(\alpha_{g,j}^{new} - \alpha_{g,\max}) flag_j,$$

что соответствует удалению излишка массы газа из ячейки j . Излишек массы переносится либо в ячейку $j + 1$, либо в ячейку $j - 1$ в зависимости от направления скорости:

$$\frac{\Delta m_{g,j+1}}{\rho_{g,j+1}} = -\frac{\Delta m_{f,j+1}}{\rho_{f,j+1}} = \begin{cases} (\alpha_{g,j}^{new} - \alpha_{g,\max}) flag_j, & \text{если } v_{f,j-1/2} + v_{f,j+1/2} \geq 0; \\ 0, & \text{если } v_{f,j-1/2} + v_{f,j+1/2} < 0; \end{cases}$$

$$\frac{\Delta m_{g,j-1}}{\rho_{g,j-1}} = -\frac{\Delta m_{f,j-1}}{\rho_{f,j-1}} = \begin{cases} 0, & \text{если } v_{f,j-1/2} + v_{f,j+1/2} \geq 0; \\ (\alpha_{g,j}^{new} - \alpha_{g,\max}) flag_j, & \text{если } v_{f,j-1/2} + v_{f,j+1/2} < 0. \end{cases}$$

В случае превышения содержанием жидкой фазы максимального значения

$$\alpha_{g,j}^{new} < \alpha_{g,\min} \Rightarrow flag_j = -1$$

добавочный член имеет вид

$$\frac{\Delta m_{g,j}}{\rho_{g,j}} = -\frac{\Delta m_{f,j}}{\rho_{f,j}} = -(\alpha_{g,\min} - \alpha_{g,j}^{new}) flag_j,$$

что соответствует удалению излишка массы газа из ячейки j . Излишек массы переносится либо в ячейку $j + 1$, либо в ячейку $j - 1$ в зависимости от направления скорости:

$$\frac{\Delta m_{g,j+1}}{\rho_{g,j+1}} = -\frac{\Delta m_{f,j+1}}{\rho_{f,j+1}} = \begin{cases} (\alpha_{g,\min} - \alpha_{g,j}^{new}) flag_j, & \text{если } v_{g,j-1/2} + v_{g,j+1/2} \geq 0; \\ 0, & \text{если } v_{g,j-1/2} + v_{g,j+1/2} < 0; \end{cases}$$

$$\frac{\Delta m_{g,j-1}}{\rho_{g,j-1}} = -\frac{\Delta m_{f,j-1}}{\rho_{f,j-1}} = \begin{cases} 0, & \text{если } v_{g,j-1/2} + v_{g,j+1/2} \geq 0; \\ (\alpha_{g,\min} - \alpha_{g,j}^{new}) flag_j, & \text{если } v_{g,j-1/2} + v_{g,j+1/2} < 0. \end{cases}$$

Тестирование модели

На рис. 5 представлена динамика объемного паросодержания в ячейках, полученная в результате моделирования подъема уровня жидкости в вертикальном канале. Видно, что противопоточная аппроксимация конвективных членов в уравнениях сохранения массы размывает границу раздела фаз по расчетной области, в то время как использование модели стратификации приводит к последовательному заполнению ячеек жидкостью.

На рис. 6, а, б представлена динамика давления, полученная в результате моделирования подъема уровня жидкости в вертикальном канале. Давление измеряется в нижней ячейке канала. Использование разработанной модели позволяет избежать возникновения скачков давления при заполнении ячеек жидкостью.

Модель стратификации позволяет корректно рассчитывать такие задачи, как, например, колебание уровня жидкости в U-образном канале (манометре). На рис. 7 представлена динамика

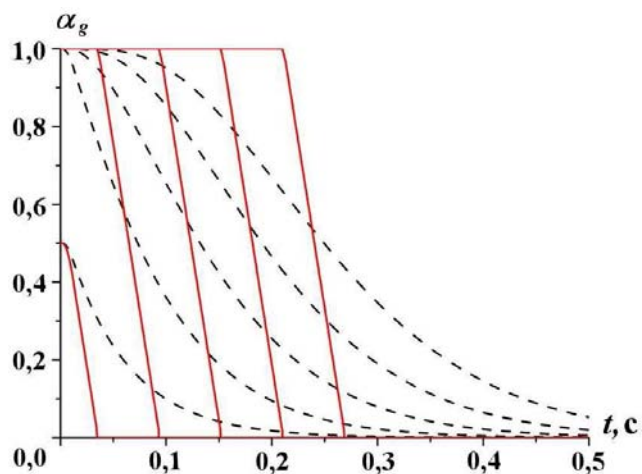


Рис. 5. Динамика паросодержания в ячейках, рассчитанная без модели стратификации (---) и с использованием данной модели (—)

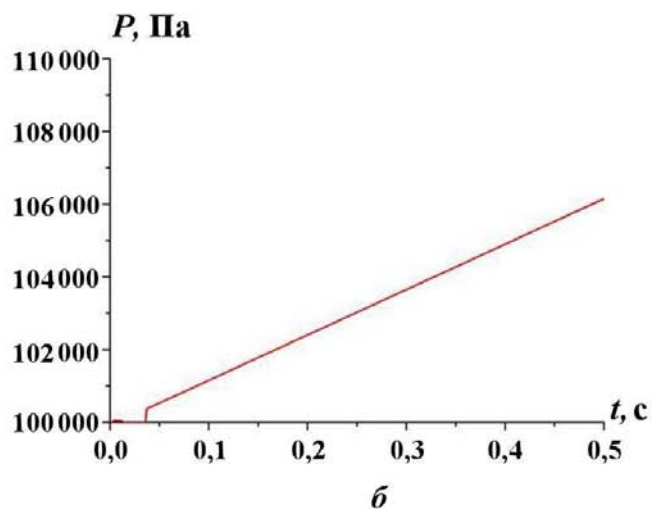
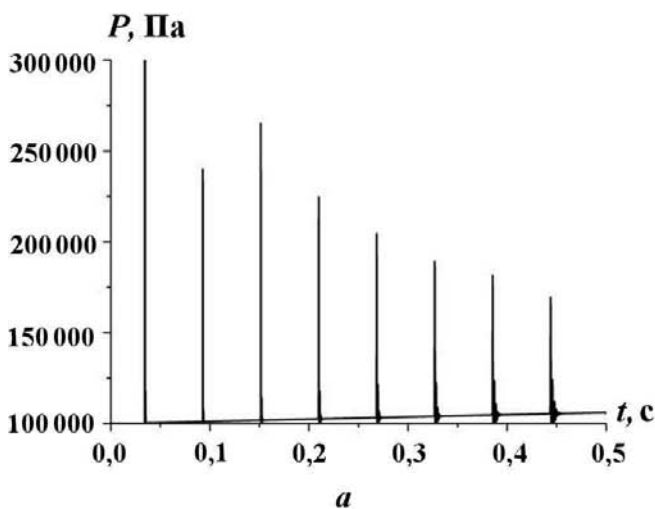


Рис. 6. Динамика давления в ячейке, рассчитанная без модели стратификации (а) и с использованием данной модели (б)

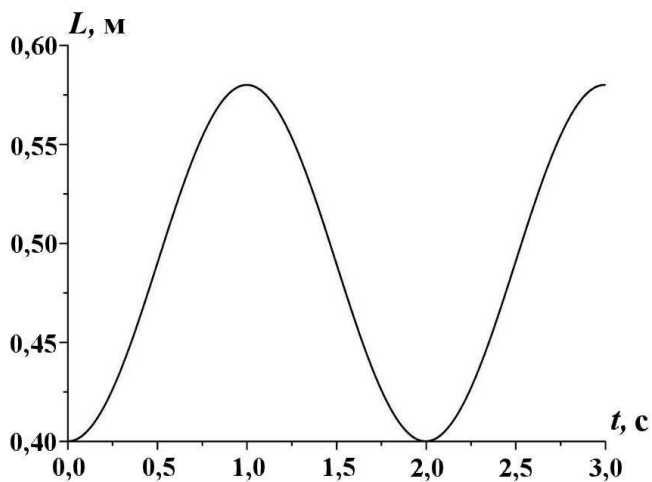


Рис. 7. Динамика уровня жидкости в одном из колен манометра

уровня жидкости в одном из колен канала. Заметим, что расчетный период колебаний соответствует теоретическому значению, которое можно найти из соотношения

$$T = 2\pi\sqrt{\frac{L}{2g}} \approx 2 \text{ с.}$$

Здесь $L = 2 \text{ м}$ — полная длина столба жидкости в канале.

Модель стратификации позволила также произвести моделирование кипения неподвижной жидкости в большом объеме с наличием поверхности раздела фаз. Решением такой задачи должно быть выкипание жидкости и, как следствие, равномерное падение ее уровня. Канал состоит из двух ячеек, причем нижняя — обогреваемая и полностью заполнена жидкостью (рис. 8). Верхняя ячейка заполнена жидкостью на 10% от своего объема. На рис. 9 представлена зависимость паросодержания от времени в ячейках расчетного канала. Видно, что после закипания жидкости устанавливается равновесная концентрация пузырьков и происходит равномерное уменьшение уровня жидкости сначала в верхней ячейке, а затем в нижней.

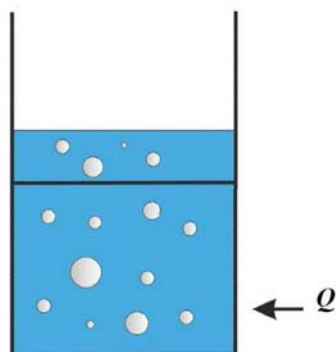


Рис. 8. Моделирование кипения жидкости

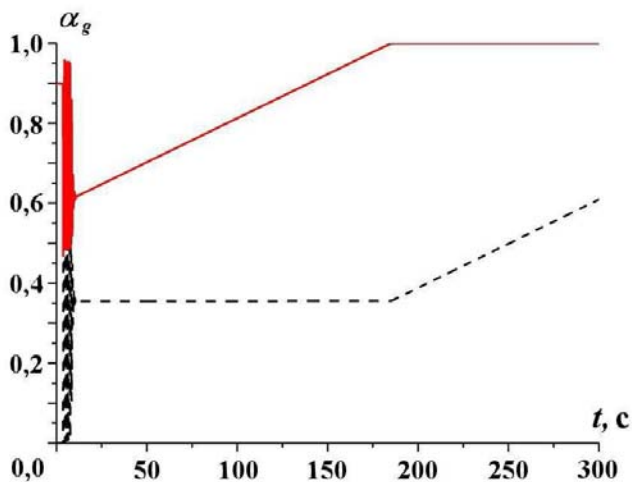


Рис. 9. Динамика паросодержания в нижней (---) и верхней (—) ячейках канала

Заключение

Разработана новая модель вертикальной стратификации двухфазного потока в рамках двухжидкостного приближения с равным давлением фаз для теплогидравлического модуля кода СОКРАТ-БН. Показано, что использование модели стратификации позволяет корректно описывать движение границы раздела фаз, избегая ее размывания по расчетной области и скачков давления при заполнении ячеек. Применимость данной модели продемонстрирована на таких тестах, как подъем уровня жидкости в вертикальном канале, колебания жидкости в дифференциальном манометре, а также выкипание жидкости в большом объеме.

Список литературы

1. *Spore J. W., Elson J. S., Jolly-Woodruff S. J. et al.* TRAC-M/FORTRAN 90 (Version 3.0) Theory Manual. Los Alamos National Laboratory, Pennsylvania State University, 2000.
2. *Драгунов Ю. Г., Быков М. А., Василенко В. А., Мигров Ю. А.* Опыт применения и развитие расчетного кода КОРСАР для обоснования безопасности АЭС с ВВЭР // Теплоэнергетика. 2006. № 1. С. 43–47.
3. *Chorin A. J.* Flame advection and propagation algorithms // J. Comp. Phys. 1980. Vol. 35. P. 1–11.
4. *Hyman J. M.* Numerical methods for tracking interfaces // Physica D. 1984. Vol. 12. P. 396–407.
5. *Hirt C. W., Nichols B. D.* Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries // J. Comp. Phys. 1981. Vol. 39. P. 201–225.
6. *Abe Y., Akimoto H., Kamo H., Murao Y.* Elimination of numerical pressure spikes induced by two-fluid model // J. of Nucl. Sci. and Technology. 1993. Vol. 30, No 12. P. 1214–1224.
7. *Frepoli C., Mahaffy J. H., Ohkawa K.* Notes on the implementation of a fully-implicit numerical scheme for a two-phase three-field flow model // Nucl. Eng. and Design. 2003. Vol. 225. P. 191–217.
8. *Aktas B., Mahaffy J. H.* A two-phase level tracking method // Ibid. 1996. Vol. 162. P. 271–280.
9. *Кудашов И. Г., Лежнин С. И., Семенов В. Н. и др.* Моделирование процессов кипения натрия в одномерном двухжидкостном приближении кодом СОКРАТ-БН // Атомная энергия. Т. 111. Вып. 3. С. 137–139.

Статья поступила в редакцию 27.07.13.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

Алексеев Алексей Владимирович — РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров, начальник научно-исследовательской лаборатории, *e-mail*: avaj@vniief.ru

Анисина Инга Михайловна — РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров, научный сотрудник, *e-mail*: i_anisina@vniief.ru

Артемьева Елена Валентиновна — РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров, научный сотрудник, *e-mail*: E.V.Artemeva@itmf.vniief.ru

Архипов Дмитрий Григорьевич — Институт теплофизики СО РАН, г. Новосибирск, научный сотрудник, *e-mail*: arkipovdm@yandex.ru

Бутов Антон Александрович — Новосибирский филиал ИБРАЭ РАН, г. Новосибирск, инженер, *e-mail*: nebelfleck@gmail.com

Вожаков Иван Сергеевич — Новосибирский филиал ИБРАЭ РАН, г. Новосибирск, инженер, *e-mail*: vozhakov@gmail.com

Голубев Александр Иванович — РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров, главный научный сотрудник, *e-mail*: golub@vniief.ru

Гребенников Андрей Николаевич — РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров, заместитель начальника научно-исследовательского отделения, *e-mail*: grand@vniief.ru

Гусев Евгений Александрович — РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров, научный сотрудник, *e-mail*: ea_gusev@vniief.ru

Егужова Марина Юрьевна — РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров, научный сотрудник, *e-mail*: M.Yu.Eguzhova@vniief.ru

Ермаков Андрей Алексеевич — РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров, научный сотрудник, *e-mail*: A.A.Ermakov@vniief.ru

Жмайло Вадим Андреевич — РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров, главный научный сотрудник, *e-mail*: vaz@vniief.ru

Иванов Николай Владимирович — РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров, ведущий научный сотрудник

Игнатова Ольга Николаевна — РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров, ведущий научный сотрудник, *e-mail*: root@gdd.vniief.ru

Ириничев Евгений Альбертович — РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров, старший научный сотрудник, *e-mail*: irinich@md08.vniief.ru

Касаткин Сергей Сергеевич — РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров, инженер-программист, *e-mail*: S.S.Kasatkin@itmf.vniief.ru

Кочеткова Ольга Евгеньевна — РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров, научный сотрудник

Кузнецова Марина Евгеньевна — Новосибирский филиал ИБРАЭ РАН, г. Новосибирск, инженер, *e-mail*: kuznetsovamarina89@gmail.com

Крутько Николай Александрович — РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров, старший научный сотрудник, *e-mail*: nak@md08.vniief.ru

Малькин Александр Геннадьевич — РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров, научный сотрудник

Мжачих Сергей Викторович — РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров, начальник научно-исследовательской лаборатории, *e-mail*: msv@md08.vniief.ru

Пятаков Николай Петрович — РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров, младший научный сотрудник, *e-mail*: N.P.Pyatakov@itmf.vniief.ru

Раевский Виктор Алексеевич — РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров, начальник отдела, заместитель директора ИФВ, *e-mail*: postmaster@ifv.vniief.ru

Семенова Татьяна Викторовна — РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров, начальник научно-исследовательского сектора, *e-mail*: tvsem@md08.vniief.ru

Стаценко Вячеслав Павлович — РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров, ведущий научный сотрудник, *e-mail*: V.P.Statsenko@vniief.ru

Синькова Ольга Геннадьевна — РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров, старший научный сотрудник, *e-mail*: O.G.Sinkova@itmf.vniief.ru

Топорова Олеся Олеговна — РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров, научный сотрудник,

e-mail: O.O.Toporova@itmf.vniief.ru

Усов Эдуард Викторович — Новосибирский филиал ИБРАЭ РАН, г. Новосибирск, научный сотрудник, *e-mail:* usovev@ngs.ru

Целиков Игорь Сергеевич — РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров, старший научный сотрудник,

e-mail: postmaster@ifv.vniief.ru

Янилкин Юрий Васильевич — РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров, начальник научно-исследовательской лаборатории, *e-mail:* yan@md08.vniief.ru

СОДЕРЖАНИЕ

CONTENTS

Стаценко В. П., Янилкин Ю. В., Синькова О. Г., Топорова О. О. Численное моделирование развития регулярных локальных возмущений и турбулентного перемешивания за ударной волной различной интенсивности 3

Statsenko V. P., Yanilkin Yu. V., Sin'kova O. G., Toporova O. O. Numerical simulations of regular local perturbation and turbulent mixing development behind various-intensity shock waves 3

Игнатова О. Н., Раевский В. А., Целиков И. С. Кинетическая модель компактирования поврежденности в средах с прочностью 18

Ignatova O. N., Raevsky V. A., Tselikov I. S. A kinetic model of damage recompaction in materials with strength 18

Анисина И. М., Егужова М. Ю., Жмайло В. А., Кочеткова О. Е., Янилкин Ю. В. Шестипотоковая двумерная методика ЭГАК-МП6 для расчета образования и движения разреженной плазмы в магнитном поле 24

Anisina I. M., Eguzhova M. Yu., Zhmailo V. A., Kochetkova O. E., Yanilkin Yu. V. The EGAK-MP6 six-flux 2D-code for simulations of rarefied plasma formation and motion in magnetic field 24

Голубев А. И., Пятаков Н. П. Аналитическое решение модельной задачи о взаимодействии лазерного излучения с плоским слоем электронной плазмы 38

Golubev A. I., Pyatakov N. P. An analytical solution to the benchmark problem of laser interaction with a flat layer of electron plasma 38

Мжачих С. В., Алексеев А. В., Гребеников А. Н., Гусев Е. А., Ермаков А. А., Ириничев Е. А., Касаткин С. С., Крутько Н. А. Расчет изотопного состава реакторных установок при моделировании процессов выгорания и остаточного энерговыделения ядерного топлива в программном комплексе CONCORD 49

Mzhachikh S. V., Alexeev A. V., Grebennikov A. N., Gusev E. A., Ermakov A. A., Irinichev E. A., Kasatkin S. S., Krut'ko N. A. Calculations of the isotopic composition of reactor fuel in burnup and residual energy release simulations using the CONCORD software package 49

Артемяева Е. В., Иванов Н. В., Малькин А. Г., Семенова Т. В. Учет неразрешенных резонансов при решении уравнения переноса нейтронов методом Монте-Карло 65

Artemieva E. V., Ivanov N. V., Mal'kin A. G., Semenova T. V. Accounting for unresolved resonances in Monte-Carlo simulations of the neutron transport equation 65

Вожяков И. С., Усов Э. В., Архипов Д. Г., Бутов А. А., Кузнецова М. Е. Модель вертикальной стратификации теплогидравлического кода СОКРАТ-БН 75

Vozhakov I. S., Usov E. V., Arkhipov D. G., Butov A. A., Kuznetsova M. E. The vertical stratification model in the SOKRAT-BN thermal hydraulic code 75

Ответственный за выпуск Е. В. Соколовская

Редакторы Н. Ю. Зимакова,
Е. Н. Старченко

Корректоры Е. А. Окатьева,
А. В. Федоренко

Подписано в печать 04.02.14
Офсетн. печ. Усл. печ. л. ~ 10
Тираж 1000 экз. Зак. тип. 2182-2012 7 статей Индекс 3642

Формат 60×84/8
Уч.-изд. л. ~ 13

Учредитель: ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ"
Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-29789 от 04 октября 2007 г.

Оригинал-макет подготовлен
в Математическом отделении ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ"

Отпечатано в ИПК ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ"
607188, г. Саров Нижегородской обл., ул. Силкина, 23

УДК 519.6

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗВИТИЯ РЕГУЛЯРНЫХ ЛОКАЛЬНЫХ ВОЗМУЩЕНИЙ И ТУРБУЛЕНТНОГО ПЕРЕМЕШИВАНИЯ ЗА УДАРНОЙ ВОЛНОЙ РАЗЛИЧНОЙ ИНТЕНСИВНОСТИ / В. П. Стаценко, Ю. В. Янилкин, О. Г. Синькова, О. О. Топорова // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2014. Вып. 1. С. 3—17.

С помощью методик ЭГАК и ТРЭК исследуется развитие турбулентного перемешивания и регулярного локального возмущения на границе раздела *воздух*— SF_6 при взаимодействии с распространяющейся в ударной трубе волной с числами Маха в SF_6 от 1,7 до 9,1. Рассмотрены случаи с локальным возмущением в виде треугольной канавки и полуцилиндра. Расчеты проводились с помощью прямого двумерного и трехмерного численного моделирования. Результаты расчетов сравниваются с известными экспериментальными данными (рис. 23, табл. — 1, список лит. — 5 назв.).

Ключевые слова: прямое численное моделирование, локальное возмущение, зона турбулентного перемешивания, контактная граница, число Маха.

УДК 539.4

КИНЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ КОМПАКТИРОВАНИЯ ПОВРЕЖДЕННОСТИ В СРЕДАХ С ПРОЧНОСТЬЮ / О. Н. Игнатова, В. А. Раевский, И. С. Целиков // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2014. Вып. 1. С. 18—23.

Компактирование дефектов, образующихся в результате действия импульсных растягивающих напряжений, в настоящее время исследовано недостаточно. Часто в расчетах используются упрощенные математические модели, не отражающие всех эффектов, происходящих при закрытии пор.

Предлагается модель компактирования поврежденной среды, основанная на описании схлопывания одиночной поры с учетом упругопластических свойств среды. Для описания схождения пор, распределенных по объему вещества, рассматривается движение одной сферической ячейки в идеально-пластической несжимаемой среде. В этом приближении получено аналитическое решение для зависимости интегральной поврежденности от давления, сдвиговой прочности и начальной поврежденности.

Получены уравнения, описывающие кинетику компактирования для случаев произвольной зависимости давления от времени и перемещения предела текучести (рис. 6, список лит. — 6 назв.).

Ключевые слова: поврежденность, компактирование, модель, давление, предел текучести, среда с прочностью.

УДК 533.9

ШЕСТИПОТОКОВАЯ ДВУМЕРНАЯ МЕТОДИКА ЭГАК-МП6 ДЛЯ РАСЧЕТА ОБРАЗОВАНИЯ И ДВИЖЕНИЯ РАЗРЕЖЕННОЙ ПЛАЗМЫ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ / И. М. Анисина, М. Ю. Егужова, В. А. Жмайло, О. Е. Кочеткова, Ю. В. Янилкин // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2014. Вып. 1. С. 24–37.

Приводится многопотоковая модель для расчета образования и движения разреженной плазмы в геомагнитном поле (*многопотоковое* магнитно-газодинамическое приближение). Представлена двумерная методика ЭГАК-МП6, использующая эту модель в шестипотоковом варианте. Приводятся результаты расчетов по этой методике ядерного взрыва в операции "Морская звезда". Результаты расчетов сравниваются с имеющимися экспериментальными данными (рис. 7, список лит. — 34 назв.).

Ключевые слова: ядерный взрыв, операция "Морская звезда", магнитное поле, методика ЭГАК-МП6.

УДК 533.9

АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ МОДЕЛЬНОЙ ЗАДАЧИ О ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ С ПЛОСКИМ СЛОЕМ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛАЗМЫ / А. И. Голубев, Н. П. Пятаков // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2014. Вып. 1. С. 38–48.

Сформулирована модельная задача о взаимодействии лазерного излучения с плоским слоем пространственно-однородной электронной плазмы. При этом сделан ряд предположений, позволяющих перейти от кинетического уравнения Власова для электронной плазмы к простой гидродинамической модели.

Получено аналитическое решение модельной задачи. Оно может быть использовано для тестирования программ, с помощью которых выполняются численные исследования взаимодействия лазерного излучения с плазмой, и для предварительных оценок пространственных шагов при таких исследованиях (рис. 6, табл. — 1, список лит. — 9 назв.).

Ключевые слова: бесстолкновительная плазма, уравнения Максвелла, уравнение Власова, гидродинамическая модель.

УДК 519.63:539.17

РАСЧЕТ ИЗОТОПНОГО СОСТАВА РЕАКТОРНЫХ УСТАНОВОК ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ПРОЦЕССОВ ВЫГОРАНИЯ И ОСТАТОЧНОГО ЭНЕРГОВЫДЕЛЕНИЯ ЯДЕРНОГО ТОПЛИВА В ПРОГРАММНОМ КОМПЛЕКСЕ CONCORD / С. В. Мжачих, А. В. Алексеев, А. Н. Гребенников, Е. А. Гусев, А. А. Ермаков, Е. А. Ирничев, С. С. Касаткин, Н. А. Крутько // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2014. Вып. 1. С. 49—64.

Эволюция физических характеристик работающего реактора определяется главным образом изменением нуклидного состава топлива. Знание изотопного состава также является крайне важным, так как именно на его основе проводится обоснование безопасности обращения с отработанным ядерным топливом при его хранении, транспортировке и переработке.

Дается описание программного модуля, предназначенного для расчета процесса ядерной кинетики в реакторных установках на тепловых и быстрых нейтронах, который входит в состав программного комплекта CONCORD. Приводятся источники данных модуля, описываются используемые методы и модели расчета (рис. 6, табл. 3, список лит. — 9 назв.).

Ключевые слова: ядерный реактор, кинетика изотопов, математическое моделирование, осколки деления, выгорание актиноидов, жесткая система дифференциальных уравнений, разностная схема Розенброка—Ваннера.

УДК 519.245

УЧЕТ НЕРАЗРЕШЕННЫХ РЕЗОНАНСОВ ПРИ РЕШЕНИИ УРАВНЕНИЯ ПЕРЕНОСА НЕЙТРОНОВ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО / Е. В. Артемьева, Н. В. Иванов, А. Г. Малькин, Т. В. Семенова // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2014. Вып. 1. С. 65—74.

Для ряда изотопов существует область энергий с неразрешенными резонансами. Особенность этой области состоит в том, что в ней сечения в каждой точке по энергии являются случайными функциями, значения которых определяются статистическими законами распределения параметров резонансов. Рассматриваются два метода учета неразрешенных резонансов: метод вероятностных таблиц и прямой метод. Необходимость учета неразрешенных резонансов в задачах переноса нейтронов подтверждается численными расчетами (рис. 2, табл. 4, список лит. — 11 назв.).

Ключевые слова: метод Монте-Карло, перенос нейтронов, неразрешенные резонансы.

УДК 519.6

МОДЕЛЬ ВЕРТИКАЛЬНОЙ СТРАТИФИКАЦИИ ТЕПЛОГИДРАВЛИЧЕСКОГО КОДА СОКРАТ-БН / И. С. Вожаков, Э. В. Усов, Д. Г. Архипов, А. А. Бутов, М. Е. Кузнецова // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2014. Вып. 1. С. 75—81.

В рамках двухжидкостного приближения с равными давлениями фаз предлагается модель, позволяющая физически корректно описывать динамику двухфазного вертикально стратифицированного течения. Данная модель основана на модификации конечно-разностной аппроксимации конвективных членов в уравнениях сохранения массы и градиентов давления с учетом наличия четко выраженной границы раздела фаз. Демонстрируются примеры корректного расчета задач со стратифицированным двухфазным потоком (рис. 9, список лит. — 9 назв.).

Ключевые слова: вертикальная стратификация, двухжидкостная модель, СОКРАТ-БН.

NUMERICAL SIMULATIONS OF REGULAR LOCAL PERTURBATION AND TURBULENT MIXING DEVELOPMENT BEHIND VARIOUS-INTENSITY SHOCK WAVES / V. P. Statsenko, Yu. V. Yanilkin, O. G. Sin'kova, O. O. Toporova // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2014. No 1. P. 3–17.

Development of turbulent mixing and regular local perturbation at an air/SF₆ interface driven by a shock traveling through a shock tube with Mach 1.7 to 9.1 in SF₆ is explored using the EGAK and TREK codes. We consider the cases of v-shaped and hemicylindrical local perturbation. The calculations were done using 2D and 3D direct numerical simulations. Simulation results were compared with known experimental data.

Key words: direct numerical simulations, turbulent mixing, local perturbation, turbulent mixing zone, interface, Mach number.

A KINETIC MODEL OF DAMAGE RECOMPACTION IN MATERIALS WITH STRENGTH / O. N. Ignatova, V. A. Raevsky, I. S. Tselikov // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2014. No 1. P. 18–23.

Recompaction of defects produced by pulsed tensile stresses is not clearly understood today. Simulations are often done using simplified mathematical models that fail to reproduce all recompaction effects.

We propose a damage recompaction model based on the description of the recovery of a single void accounting for the elastoplastic properties of matter. To describe the convergence of voids distributed in the bulk, we consider motion of one special cell in ideally plastic incompressible matter. Using this approximation, we obtained an analytical solution representing the dependence of integral damage on pressure, shear strength and initial damage.

Equations are derived to describe the kinetics of damage recompaction for the case of an arbitrary pressure-time relationship and varied yield strength.

Key words: damage, recompaction, model, pressure, yield strength, matter with strength.

THE EGAK-MP6 SIX-FLUX 2D-CODE FOR SIMULATIONS OF RAREFIED PLASMA FORMATION AND MOTION IN MAGNETIC FIELD / I. M. Anisina, M. Yu. Eguzhova, V. A. Zhmailo, O. E. Kochetkova, Yu. V. Yanilkin // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2014. No 1. P. 24–37.

The paper describes a multi-flux model for simulations of rarefied plasma formation and motion in the geomagnetic field (the multi-flux magneto-hydrodynamic approximation). The 2D-code EGAK-MP6 presented in the paper employs a six-flux modification of this model. Results of Starfish nuclear explosion simulations using the code are reported. The simulation results are compared with existing experimental data.

Key words: nuclear explosion, Starfish test, EGAK-MP6 code, magnetic field.

AN ANALYTICAL SOLUTION TO THE BENCHMARK PROBLEM OF LASER INTERACTION WITH A FLAT LAYER OF ELECTRON PLASMA / A. I. Golubev, N. P. Pyatakov // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2014. No 1. P. 38—48.

A benchmark problem of laser interaction with a flat layer of spatially uniform electron plasma is specified. A number of assumptions are made to move from Vlasov's kinetic equation for electron plasma to a simple hydrodynamic model.

An analytical solution to the problem is obtained. It can be used to test programs for numerical analysis of laser/plasma interaction and for preliminary estimation of spatial steps in such analysis.

Key words: collisionless plasma, Maxwell's equations, Vlasov's equation, hydrodynamic model.

CALCULATIONS OF THE ISOTOPIC COMPOSITION OF REACTOR FUEL IN BURNUP AND RESIDUAL ENERGY RELEASE SIMULATIONS USING THE CONCORD SOFTWARE PACKAGE / S. V. Mzhachikh, A. V. Alexeev, A. N. Grebennikov, E. A. Gusev, A. A. Ermakov, E. A. Irinichev, S. S. Kasatkin, N. A. Krut'ko // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2014. No 1. P. 49—64.

Evolution of physical characteristics of an operating reactor is basically governed by the variation of the nuclide composition of its fuel. In addition, it is extremely important to know the isotopic composition, because it underlies safety studies of handling spent nuclear fuel during its storage, transportation and reprocessing. We describe a software module of the CONCORD package that serves to simulate the process of nuclear kinetics in slow and fast reactors. Sources of data of the module are listed, and methods and models employed are described.

Key words: nuclear reactor, isotope kinetics, mathematical modeling, fission fragments, actinide burnup, stiff differential system, Rosenbrock-Wanner difference scheme.

ACCOUNTING FOR UNRESOLVED RESONANCES IN MONTE-CARLO SIMULATIONS OF THE NEUTRON TRANSPORT EQUATION / E. V. Artemieva, N. V. Ivanov, A. G. Mal'kin, T. V. Semenova // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2014. No 1. P. 65—74.

For a number of isotopes there exists an energy range with unresolved resonances. A special feature of this range is that cross sections at each energy point in this range are random functions, the values of which are determined by statistic laws of distribution of resonance parameters. Two methods of accounting for the unresolved resonances are considered: the method of probability tables and the direct method. The necessity of accounting for the unresolved resonances in neutron transport problems is illustrated by numerical simulations.

Key words: Monte-Carlo method, neutron transport, unresolved resonances.

THE VERTICAL STRATIFICATION MODEL IN THE SOKRAT-BN THERMAL HYDRAULIC CODE / I. S. Vozhakov, E. V. Usov, D. G. Arkhipov, A. A. Butov, M. E. Kuznetsova // VANT. Ser.: Mat. Mod. Fiz. Proc. 2014. No 1. P. 75—81.

We propose a model that enables physically consistent description of the dynamics of a two-phase vertical stratified flow using a two-fluid approximation with equal phase pressures. This model is based on a modification of the finite-difference approximation of convective terms in the mass and pressure gradient conservation equations accounting for the presence of a distinct boundary between the phases. Examples of consistent stratified two-phase flow simulations are presented.

Key words: vertical stratification, two-fluid model, SOKRAT-BN.

ВНИМАНИЮ АВТОРОВ

Редакция н/т сборника "Вопросы атомной науки и техники" серии "Математическое моделирование физических процессов" просит авторов, направляющих статьи в журнал, придерживаться следующих правил.

1. Автор представляет редакции 2 экземпляра рукописи основного текста статьи на русском языке, а также аннотацию и реферат с обязательным указанием ключевых слов. Текст набирается на компьютере (шрифт не менее 12 пунктов) на одной стороне листа формата А4 через два интервала. Рекомендуемый объем статьи — не более 25 страниц указанного формата, включая рисунки. Все страницы должны быть пронумерованы. Рукопись должна быть подписана всеми авторами.

Редакции также передается (по электронной почте) соответствующий текстовый файл в формате .doc (WinWord).

2. Статью обязательно должны сопровождать следующие документы:

1) направление от организации, в которой выполнена работа, с указанием информации о первичном или повторном опубликовании материала статьи (отдельных ее страниц);

2) разрешение на открытое опубликование от организации, в которой выполнена работа.

Название статьи и список авторов, указанные в документах, должны соответствовать указанным в представленной рукописи.

Необходимо также сообщить полные имена и отчества, должности и электронные адреса авторов и обязательно указать номер телефона и/или e-mail для обратной связи.

3. Название статьи должно быть конкретным и лаконичным. Перед названием необходимо указать УДК. Разделы и подразделы статьи должны иметь заголовки.

4. Необходимо соблюдать единство терминологии, соответствующее стандартам по теме статьи.

5. Для нумерации формул, на которые имеются ссылки в тексте, используются последовательные натуральные числа. Формулы, на которые нет ссылок, не нумеруются.

6. Все обозначения должны расшифровываться. Не рекомендуется использовать одинаковые обозначения для разных величин и разные обозначения для одной и той же величины.

Для различия букв с одинаковым или сходным начертанием (например, a и α ("альфа"), v и ν ("ню"), s и S) желательны делать соответствующие пометки.

Векторные величины необходимо выделять жирным шрифтом или отмечать стрелкой.

7. Рисунки должны быть четкими и обязательно иметь подрисовочные подписи. Текстовые надписи на самих рисунках не рекомендуются, их заменяют символьными (цифровыми) обозначениями, которые объясняются в тексте или подрисовочной подписи.

Таблицы должны иметь заголовки.

На все таблицы и рисунки в тексте статьи должны быть ссылки.

8. Список литературы должен быть составлен по порядку ссылок в тексте. Ссылки на неопубликованные работы (отчеты) не допускаются.

В библиографическое описание источника обязательно включаются фамилии и инициалы авторов, название книги или статьи. Для книг указывается город, издательство и год издания, для статей — название журнала, год издания, том, выпуск (номер), страницы начала и конца статьи. Описания иностранных источников должны быть напечатаны латинским шрифтом. Если источник размещен в Интернете, указывается адрес сайта.

9. Все материалы по статьям должны направляться по адресу:

607188 г. Саров Нижегородской обл., пр. Мира, 37, РФЯЦ-ВНИИЭФ, отделение 08.

В редакцию журнала ВАНТ, сер. "Математическое моделирование физических процессов".

Тел. (83130)2-84-06; e-mail: sokol@vniief.ru

В случае несоблюдения указанных правил редакция журнала оставляет за собой право задержать публикацию или отклонить ее без рассмотрения.

Плата за публикацию с авторов не взимается.

При принятии статьи к публикации права на ее использование переходят к издателю.
