

УДК 621.039

ПОСТРОЕНИЕ СХЕМЫ РАСЧЕТА ЗАДАЧИ ЯДЕРНОЙ КИНЕТИКИ

Д. Г. Модестов
(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИТФ им. академ. Е. И. Забабахина",
г. Снежинск Челябинской области)

Рассматриваются схемы численного решения задач ядерной кинетики. Показано, что в общем случае не существует таких схем выше второго порядка точности. Приведены результаты методических расчетов, которые подтверждают корректность сделанных выводов и показывают степень влияния основных источников ошибок.

Ключевые слова: ядерная кинетика, численные методы, задача Коши, схема интегрирования, уравнение переноса частиц, метод поколений.

Введение

Задачей ядерной кинетики является описание изменения ядерного состава вещества за счет радиоактивных распадов атомных ядер и их взаимодействий с радиационным полем. Подробное описание математической модели можно посмотреть, например, в [1]. Здесь следует заметить, что она представляет собой задачу Коши для некоторой системы обыкновенных дифференциальных уравнений. Не ограничивая общности, будем считать, что данная система автономна и записывается следующим образом:

$$\frac{d}{dt}\mathbf{x} = \mathbf{f}(\mathbf{x}); \quad \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0. \quad (1)$$

Набор концентраций веществ \mathbf{x} является элементом множества X , которое можно считать положительным (или физическим) конусом в векторном пространстве. Правая часть представляется как произведение матрицы скоростей наработок на вектор концентраций:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \Sigma(\mathbf{x})\mathbf{x}. \quad (2)$$

Сама матрица скоростей наработок $\Sigma(\mathbf{x})$ в простейшем случае представляет собой функционал на решении стационарного уравнения переноса излучения при заданном ядерном составе. Обычно это либо неоднородное уравнение переноса, используемое для объектов, находящихся под внешним облучением, либо уравнение условно-критической задачи для реакторных приложений. Решение (1) рассматривается как отображение $\mathbf{x}_0 \rightarrow \mathbf{x}(t)$. Важным свойством этого отображения при $t \geq 0$ является инвариантность его действия на физическом конусе.

Последнее свойство делает затруднительным использование для численного решения задачи (1) многошаговых методов типа Адамса, неустойчивых относительно указанного конуса. Следует также отметить, что система уравнений (1) является жесткой. Соответственно требуются мелкие временные шаги при ее решении явными методами типа Эйлера или Рунге—Кутты. Но вследствие большой трудоемкости методов решения задачи переноса для вычисления компонент матрицы наработок такой подход не получил широкого распространения. Некоторое применение получили неявные методы. В частности, такой подход представлен в работе [2]. Однако чаще всего для нахождения решения (1) применяются специализированные явные одношаговые методы численного интегрирования. Они основаны на предположении малости скорости изменения характеристик радиационного

поля по сравнению со скоростями изменения большинства компонент ядерного состава. Это обстоятельство позволяет использовать большие временные шаги, рассматривая изменение состава на шаге как решение некоторой вспомогательной задачи Коши, построенной на основе постоянных характеристик поля и в некотором смысле приближающей (1).

Некоторые варианты построения расчетных схем представлены в работах [1, 3–11]. Чаще всего используется метод первого порядка точности [3–8]. При этом из-за жесткости системы в качестве решения на временном шаге берется численное решение вспомогательной системы уравнений, полученное с меньшим временным шагом. В большинстве подходов, в частности, представленных в работах [1, 3–6], в качестве правой части вместо (2) рассматривается $\Sigma(\mathbf{x}_0) \mathbf{n}$, т. е. фактически решается задача вычисления матричной экспоненты. Для этого применяются различные методы. В [1, 5, 9] представлены алгоритмы полуаналитического вычисления с различной степенью точности. В работах [3, 5] используется разложение в степенной ряд, в [3, 4, 6] решение получается методами Рунге–Кутты разного порядка. Так как в данном случае не требуется решения уравнения переноса, при некоторых упрощениях трудозатраты представляются приемлемыми. Следует отметить, что неявная схема, используемая в работе [2], также является частным случаем рассматриваемого подхода.

В других подходах, используемых при расчете ядерных реакторов, правая часть уравнения строится таким образом, чтобы с некоторой точностью обеспечить сохранение мощности на шаге интегрирования. Эти подходы и схемы решения уравнений представлены в работах [5, 7].

Кроме первого порядка, в некоторых реализациях используются схемы второго порядка точности. В частности, подобные схемы представлены в работах [10, 11].

В общем случае можно поставить вопрос о построении оптимальной схемы решения, в частности, вопрос о построении схемы высокого порядка точности. Этот вопрос будет рассмотрен ниже.

Расчетные схемы

Учитывая сложившуюся практику, которая связана с особенностями задачи, упомянутыми во Введении, здесь будут рассматриваться явные одношаговые схемы. При этом в качестве элементарного решения на шаге будет рассматриваться функция

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{G}(t, \mathbf{y}), \quad (3)$$

которая является решением вспомогательной задачи Коши для следующей системы уравнений:

$$\frac{d}{dt} \mathbf{x} = \mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y}); \quad \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0. \quad (4)$$

Здесь параметр $\mathbf{y} \in X$ вводится для получения наилучшего приближения к решению системы уравнений (1). Параметр \mathbf{x}_0 в (3) явно не указывается. В дальнейшем подразумевается, что всюду он один и тот же. Условием аппроксимации (1) является следующее соотношение:

$$\mathbf{g}(\mathbf{y}, \mathbf{y}) = \mathbf{f}(\mathbf{y}). \quad (5)$$

Несложно показать, что при справедливости данного соотношения использование $\mathbf{G}(\tau, \mathbf{x}_0)$ как решения задачи (1) на временном шаге приводит к схеме первого порядка точности. Однако возникает вопрос о существовании схем высокого порядка. К сожалению, его рассмотрение не удалось найти в доступной литературе. Поэтому представляется необходимым сделать это в настоящей работе.

Для разрешения указанного вопроса удобно для заданного интервала времени τ определить множество векторов X_τ , включающее \mathbf{x}_0 и инвариантное операций усреднения и временного сдвига (а фактически получающееся последовательным их действием на \mathbf{x}_0):

$$\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in X_\tau \Rightarrow a\mathbf{x}_1 + (1-a)\mathbf{x}_2 \in X_\tau; \quad (6)$$

$$\mathbf{y} \in X_\tau \Rightarrow \mathbf{G}(a\tau, \mathbf{y}) \in X_\tau. \quad (7)$$

Здесь $a \in [0, 1]$ — действительное число. Следует заметить, что если отображение (3) при $0 \leq t \leq \tau$ действует на физическом конусе инвариантно, то и все элементы X_τ на момент времени t принадлежат данному конусу.

При построении расчетной схемы в качестве решения на временном шаге в дальнейшем будут рассматриваться элементы из X_τ . При этом в рамках сложившейся терминологии порядок точности определяется количеством совпадающих членов разложения в степенной ряд решения системы уравнений (1) и приближенного решения. Можно показать, что в общем случае не существует схемы выше второго порядка.

Но прежде удобно ввести некоторые обозначения. Далее будут рассматриваться полилинейные отображения вида $X^n \rightarrow X$, ядром которых являются частные производные от заданной функции. Для упрощения записи указанные объекты, например для функции \mathbf{g} , будут обозначаться как $\frac{\partial^{n+m} \mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial^n \mathbf{x} \cdot \partial^m \mathbf{y}}$. Последняя запись определяет набор компонент следующего вида:

$$\left(\frac{\partial^{n+m} \mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial^n \mathbf{x} \cdot \partial^m \mathbf{y}} \right)_{i_1, \dots, i_n, j_1, \dots, j_m}^k \equiv \frac{\partial^{n+m} g^k(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial x^{i_1} \dots \partial x^{i_n} \cdot \partial y^{j_1} \dots \partial y^{j_m}}.$$

В частности, если \mathbf{x} является решением уравнения (1), то его третья производная записывается следующим образом:

$$\frac{d^3}{dt^3} \mathbf{x} = \frac{\partial^2 \mathbf{f}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}^2} \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x}) + \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{f}(\mathbf{x}). \quad (8)$$

Кроме того, удобно ввести специальную запись для значений производных в начальной точке:

$$\mathbf{g}_{nm} = \lim_{\substack{x \rightarrow x_0 \\ y \rightarrow x_0}} \frac{\partial^{n+m} \mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial^n \mathbf{x} \cdot \partial^m \mathbf{y}}, \quad \mathbf{g} \equiv \mathbf{g}_{00} = \mathbf{g}(\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_0).$$

Действие отображения на набор векторов будет записываться в виде произведения, например

$$A(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n) \equiv A \cdot \mathbf{x}_1 \cdot \dots \cdot \mathbf{x}_n.$$

При этом каждый сомножитель \mathbf{x}_i , в свою очередь, представляет подобную конструкцию. Например, предел выражения (8) с учетом (5) принимает вид

$$\frac{d^3}{dt^2} \mathbf{x} \xrightarrow{t \rightarrow 0} (\mathbf{g}_{20} + 2\mathbf{g}_{11} + \mathbf{g}_{02}) \cdot \mathbf{g}\mathbf{g} + (\mathbf{g}_{10}\mathbf{g}_{10} + \mathbf{g}_{10}\mathbf{g}_{01} + \mathbf{g}_{01}\mathbf{g}_{10} + \mathbf{g}_{01}\mathbf{g}_{01}) \cdot \mathbf{g}. \quad (9)$$

С использованием вышеприведенных обозначений можно сформулировать следующее утверждение.

Утверждение. Если все слагаемые, входящие в (9), т. е. $\mathbf{g}_{ij}\mathbf{g}\mathbf{g}$ ($i + j = 2$) и $\mathbf{g}_{nm}\mathbf{g}_{kp}\mathbf{g}$ ($n + m = k + p = 1$), линейно независимы, то невозможно построение схемы выше второго порядка точности.

Для доказательства удобно определить множества производных от элементов из X_τ по параметру τ : $X_\tau^{(k)} = \frac{d^k}{d\tau^k} X_\tau$. С учетом того, что все элементы X_τ согласно (6) и (7) могут быть представлены суммой

$$\mathbf{x} = \sum a \mathbf{G}(t, \mathbf{y}),$$

где во всех членах $t = b\tau$, а $\mathbf{y} \in X_\tau$, несложно показать по индукции, что элементы $X_\tau^{(k)}$ могут быть представлены следующим рядом:

$$\mathbf{x}^{(k)} = \sum a \frac{\partial^{p+m}}{\partial t^p \partial \mathbf{y}^m} \mathbf{G}(t, \mathbf{y}) \mathbf{y}^{(n_1)} \dots \mathbf{y}^{(n_m)}, \quad (10)$$

где $p + \sum_{j=1}^m n_j = k$; $\mathbf{y}^{(n)} \in X_\tau^{(n)}$. Для определения коэффициентов степенного ряда удобно рассмотреть множества $X_0^{(k)} = \lim_{\tau \rightarrow 0} X_\tau^{(k)}$, имеющие более простую структуру, чем исходные. В частности, $X_0^{(0)}$ состоит из одного элемента \mathbf{x}_0 , $X_0^{(1)}$ — одномерное пространство, определяемое вектором $\mathbf{f}(\mathbf{x}_0)$. А для определения остальных пространств можно ввести следующие обозначения:

$$\mathbf{G}_m^p \equiv \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\partial^{p+m}}{\partial t^p \partial \mathbf{y}^m} \mathbf{G}(t, \mathbf{y}). \quad (11)$$

Перейдя к пределам в правой и левой частях (10) и используя обозначение (11), несложно получить следующее представление для элемента $X_0^{(k)}$:

$$\mathbf{x}^{(k)} = \sum a \mathbf{G}_m^p \mathbf{y}^{(n_1)} \dots \mathbf{y}^{(n_m)}. \quad (12)$$

При этом в силу (4) $m > 0 \Rightarrow \mathbf{G}_m^0 = 0$. Поэтому, так как $k > 0$, всегда $p > 0$. А из этого следует $\sum_{j=1}^m n_j = k - p < k$. То есть $X_0^{(k)}$ представляет собой подмножество векторного пространства, образующими которого являются \mathbf{G}_0^k и полилинейные отображения из $X_0^{(j)}$, где $j < k$, что позволяет последовательно строить пространства, начиная с $X_0^{(1)}$. С учетом того, что последнее является одномерным пространством с базисом $\mathbf{f}(\mathbf{x}_0) = \mathbf{G}_0^1$, в качестве образующих $X_0^{(k)}$ могут выступать произведения \mathbf{G}_m^p . В частности, для $X_0^{(3)}$ имеется пять образующих:

$$\begin{aligned} \mathbf{G}_0^3 &= \mathbf{g}_{20} \mathbf{g} \mathbf{g} + \mathbf{g}_{10} \mathbf{g}_{10} \mathbf{g}; & \mathbf{G}_1^2 \mathbf{G}_0^1 &= \mathbf{g}_{11} \mathbf{g} \mathbf{g} + \mathbf{g}_{10} \mathbf{g}_{01} \mathbf{g}; \\ \mathbf{G}_2^1 \mathbf{G}_0^1 \mathbf{G}_0^1 &= \mathbf{g}_{02} \mathbf{g} \mathbf{g}; & \mathbf{G}_1^1 \mathbf{G}_0^2 &= \mathbf{g}_{01} \mathbf{g}_{10} \mathbf{g}; & \mathbf{G}_1^1 \mathbf{G}_1^1 \mathbf{G}_0^1 &= \mathbf{g}_{01} \mathbf{g}_{01} \mathbf{g}. \end{aligned}$$

Для доказательства утверждения достаточно выделить в (9) образующие $X_0^{(3)}$:

$$\frac{d^3}{dt^3} \mathbf{x} \xrightarrow{t \rightarrow 0} \mathbf{G}_0^3 + \mathbf{G}_1^2 \mathbf{G}_0^1 + \mathbf{G}_2^1 \mathbf{G}_0^1 \mathbf{G}_0^1 + \mathbf{G}_1^1 \mathbf{G}_0^2 + \mathbf{G}_1^1 \mathbf{G}_1^1 \mathbf{G}_0^1 + \mathbf{g}_{11} \mathbf{g} \mathbf{g}.$$

При этом в силу линейной независимости $\mathbf{g}_{11} \mathbf{g} \mathbf{g} \notin X_0^{(3)}$. Таким образом, не существует элемента X_τ , совпадающего с решением системы уравнений (1) с точностью до третьего порядка. Утверждение доказано.

Следует заметить, что формулировка утверждения достаточна, но не необходима для отсутствия схем выше второго порядка точности. Необходимым условием является невозможность представления $\mathbf{g}_{11} \mathbf{g} \mathbf{g}$ в виде линейной комбинации образующих $X_0^{(3)}$ (в общем случае не являющихся базисом).

Можно отметить частные случаи, в которых необходимое условие не имеет места. Это тривиальный случай $\mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{f}(\mathbf{x})$, который дает точное решение, а также $\mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{f}(\mathbf{y})$, который приводит к схемам типа Рунге—Кутты. Также имеется коммутативный случай $\mathbf{g}_{01} \mathbf{g}_{10} = \mathbf{g}_{10} \mathbf{g}_{01}$, который справедлив, например, в одномерных задачах. Однако в остальных случаях, в частности, в задачах ядерной кинетики, указанная независимость представляется, скорее, правилом, чем исключением.

Как было отмечено выше, схема первого порядка получается при использовании $\mathbf{G}(\tau, \mathbf{x}_0)$ в качестве приближенного решения на шаге. Для второго порядка можно предложить несколько вариантов. Наиболее удобной для реализации представляется следующая схема:

$$\mathbf{y} = \mathbf{G}\left(\frac{\tau}{2}, \mathbf{x}_0\right); \quad \mathbf{x}_\tau = \mathbf{G}(\tau, \mathbf{y}). \quad (13)$$

Эта схема использовалась во всех расчетах, результаты которых приводятся далее.

Задача с внешним источником

Так как задача с внешним источником облучения представляется наиболее простой для расчета, чтобы оценить влияние порядка схемы, удобно рассмотреть именно ее. В этом случае в качестве правой части (4) рассматривается

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \Sigma(\mathbf{y}) \mathbf{x},$$

а элементарное решение соответственно имеет вид

$$\mathbf{G}(t, \mathbf{y}) = e^{t\Sigma(\mathbf{y})} \mathbf{x}_0.$$

Для получения данного решения использовались алгоритмы, описанные в работе [1]. Заметим, что в этой работе приведено описание методической задачи выгорания водорода в нейтронном поле, которая относится к рассматриваемому классу. Однако временная зависимость концентраций ядер в ней описывается достаточно гладкими кривыми. Но в методическом плане интерес представляет более сложное поведение концентраций. Поэтому была рассмотрена задача выгорания бора.

Система представляет собой шар из ^{10}B с концентрацией $1 \text{ б}^{-1}\text{см}^{-1}$ и радиусом 10 см. В центре находится точечный источник нейтронов с энергией 1 эВ и интенсивностью 10^{21} частиц в секунду. В расчетах рассматривалась эволюция ядерного состава в течение 100 суток. При этом вся область, изначально содержащая бор, рассматривалась как один пространственный элемент (приближение равномерного перемешивания).

Решение задачи переноса проводилось по программе ПРИЗМА [12] со статистикой в миллион нейтронов источника. Предварительные оценки показали, что в этом случае статистической погрешностью можно было пренебречь. Для решения вспомогательной системы уравнений (4) применялась программа РИСК [13].

Поведение системы определяется выгоранием ^{10}B , который является хорошим поглотителем нейтронов. Поэтому вначале система непрозрачна для излучения. Но при этом происходит интенсивное выгорание ^{10}B с образованием других ядер. В первую очередь нарабатывается ^7Li , из которого в результате цепочки реакций получается ^4He , не взаимодействующий с нейтронами неупруго. Кроме того, со скоростью, меньшей на несколько порядков, нарабатывается ^{11}B , слабо взаимодействующий с нейтронами. С еще меньшей скоростью нарабатываются изотопы водорода, которые дают начало описанным в работе [1] циклам превращений, приводящих к накоплению изотопов гелия.

Через некоторое время после начала облучения, когда исходный изотоп истощается, система достаточно резко просветляется. После этого практически всю динамику определяют реакции гелий-водородного цикла. Поведение концентраций обоих изотопов бора, дейтерия и ^3He видно на рис. 1. Здесь хорошо заметен момент просветления системы, приходящийся на время около 50 сут. После этого наблюдаются примерная стабилизация концентрации ^{11}B , падение концентрации ^3He , индуцированной увеличением нейтронного потока, и связанный с этим резкий рост концентрации дейтерия.

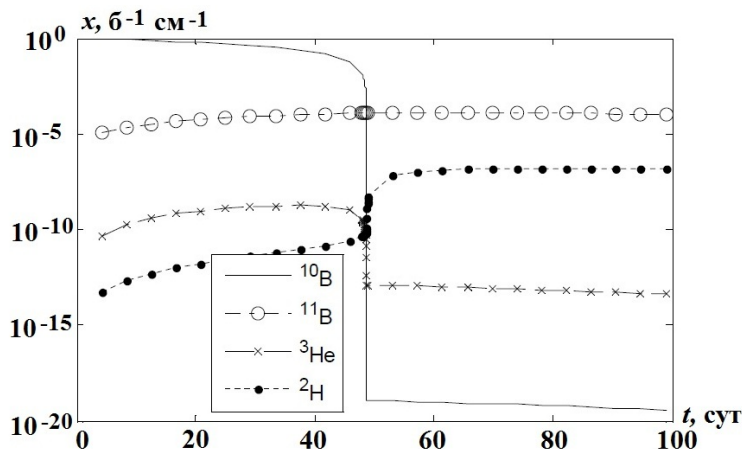


Рис. 1. Эволюция концентраций ^{10}B , ^{11}B , ^3He и ^2H

На рис. 2–5 приведены зависимости рассчитанных концентраций указанных ядер от шага интегрирования. Расчеты проводились по схемам первого и второго порядка. В качестве последней рассматривалась схема (13). Всюду можно отметить более быструю сходимость по шагу интегрирования для схемы второго порядка.

Для получения численной оценки сходимости поведение кривых вблизи $t = 0$ аппроксимировалось следующей зависимостью (k — порядок точности):

$$x = x_k (1 + t\omega_k). \quad (14)$$

Параметры оценивались методом наименьших квадратов. Значения приведены в табл. 1.

Можно отметить заметно меньшее, чем у других ядер, отношение скоростей сходимости у дейтерия, что, впрочем, видно из рис. 5. При этом на рисунке наблюдается пересечение кривых для схем разного порядка точности. В связи с таким поведением возникает вопрос о влиянии порядка точности при больших значениях t . Для его разрешения были рассчитаны точки вплоть до $t = 400$ ч. Результаты показаны на рис. 6. Можно видеть, что схема второго порядка позволяет проводить расчеты с намного большими шагами, чем схема первого порядка точности.

Отметим также заметное отсутствие гладкости у кривых, представленных на рис. 2–5. Оно не связано со статистической погрешностью, которая в данных расчетах незаметна. Такое поведение является прямым следствием достаточно короткого интервала просветления, который хорошо виден

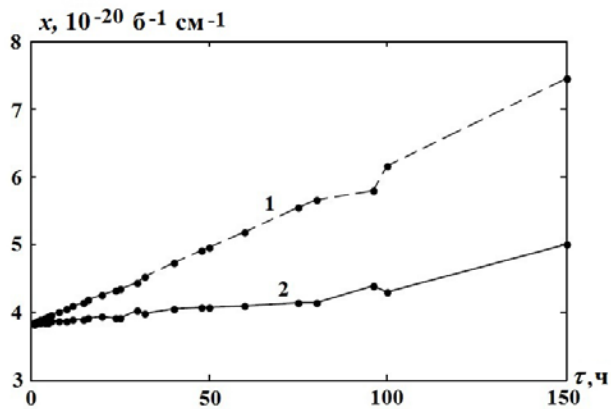


Рис. 2. Зависимость рассчитанной концентрации ^{10}B от шага интегрирования при $t = 100$ сут: 1 — схема первого порядка; 2 — схема второго порядка

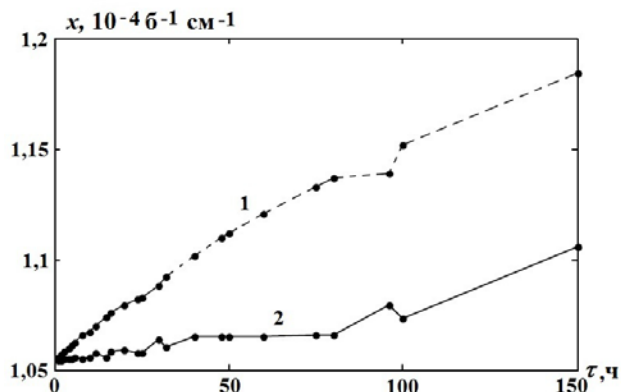


Рис. 3. Зависимость рассчитанной концентрации ^{11}B от шага интегрирования при $t = 100$ сут: 1 — схема первого порядка; 2 — схема второго порядка

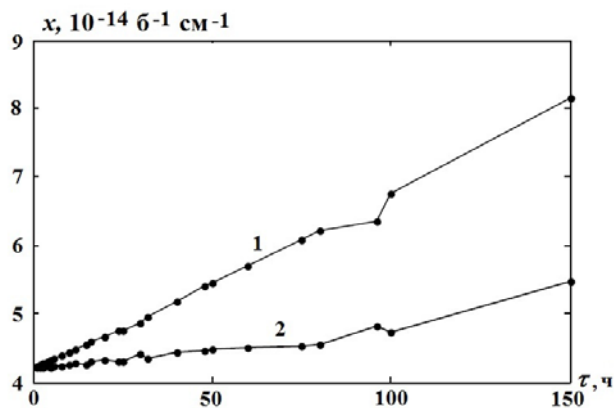


Рис. 4. Зависимость рассчитанной концентрации ^3He от шага интегрирования при $t = 100$ сут: 1 — схема первого порядка; 2 — схема второго порядка

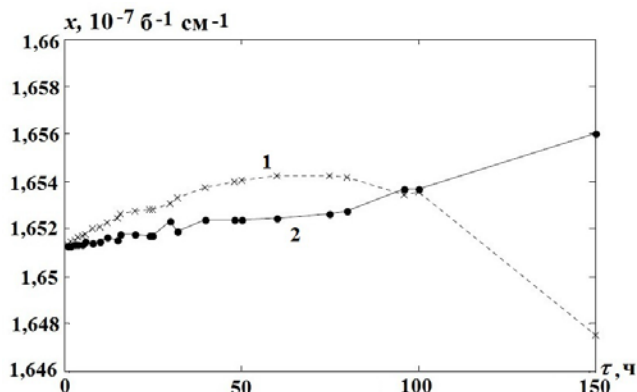


Рис. 5. Зависимость рассчитанной концентрации ^2H от шага интегрирования при $t = 100$ сут: 1 — схема первого порядка; 2 — схема второго порядка

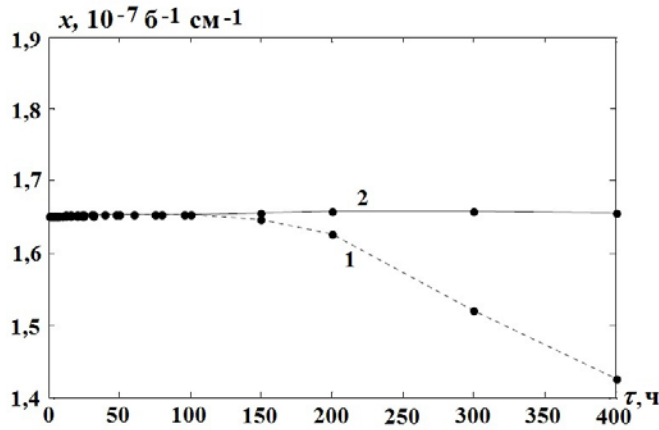


Рис. 6. Зависимость рассчитанной концентрации ^2H от шага интегрирования при $t = 100$ сут в более крупном масштабе: 1 — схема первого порядка; 2 — схема второго порядка

Таблица 1

Параметры формулы (14), оцененные по результатам расчетов методом наименьших квадратов при $t = 100$ сут

| Ядро | $x_1, \text{б}^{-1}\text{см}^{-1}$ | $\omega_1, \text{ч}^{-1}$ | $x_2, \text{б}^{-1}\text{см}^{-1}$ | $\omega_2, \text{ч}^{-1}$ | ω_1/ω_2 |
|-----------------|------------------------------------|---------------------------|------------------------------------|---------------------------|---------------------|
| ^{10}B | $3,8197 \cdot 10^{-20}$ | 0,0059 | $3,8305 \cdot 10^{-20}$ | 0,0011 | 5,4 |
| ^{11}B | $1,0560 \cdot 10^{-4}$ | 0,0013 | $1,0540 \cdot 10^{-4}$ | 0,0002 | 6,5 |
| ^3He | $4,1922 \cdot 10^{-14}$ | 0,0059 | $4,2039 \cdot 10^{-14}$ | 0,0013 | 4,5 |
| ^2H | $1,6515 \cdot 10^{-7}$ | $3,1 \cdot 10^{-5}$ | $1,6513 \cdot 10^{-7}$ | $1,4 \cdot 10^{-5}$ | 2,2 |

на рис. 1. Расчет с шагом интегрирования около или больше этого интервала делает расчетную схему неустойчивой.

Для оценки влияния наличия интервала с быстрым изменением характеристик системы на результаты были проведены расчеты выгорания бора до $t = 40$ сут, т. е., как видно из рис. 1, до просветления. Результаты показаны на рис. 7–10, а оцененные методом наименьших квадратов параметры формулы (14) — в табл. 2.

Видно, что зависимости концентраций от шага интегрирования при $t = 40$ сут представляются гладкими кривыми в отличие от аналогичных зависимостей при $t = 100$ сут, что подтверждает

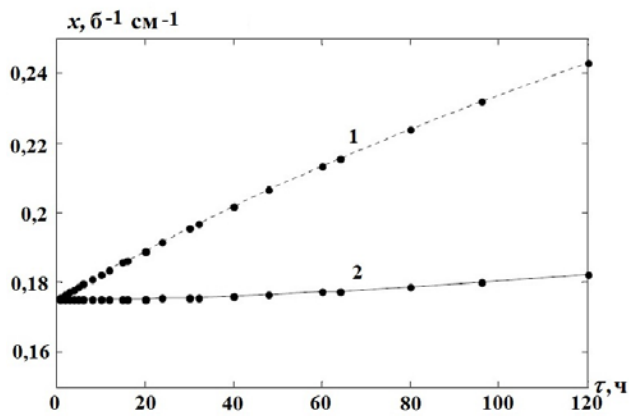


Рис. 7. Зависимость рассчитанной концентрации ^{10}B от шага интегрирования при $t = 40$ сут: 1 — схема первого порядка; 2 — схема второго порядка

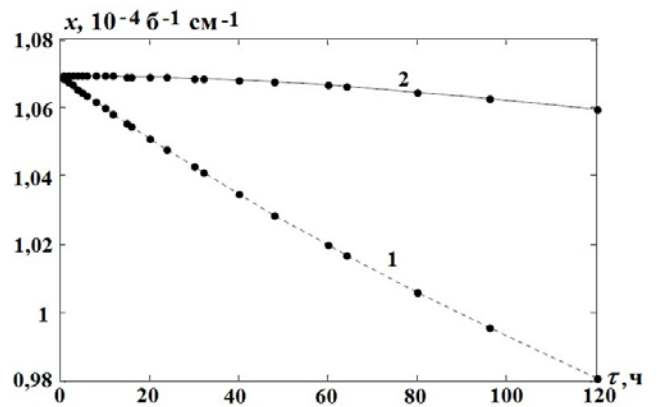


Рис. 8. Зависимость рассчитанной концентрации ^{11}B от шага интегрирования при $t = 40$ сут: 1 — схема первого порядка; 2 — схема второго порядка

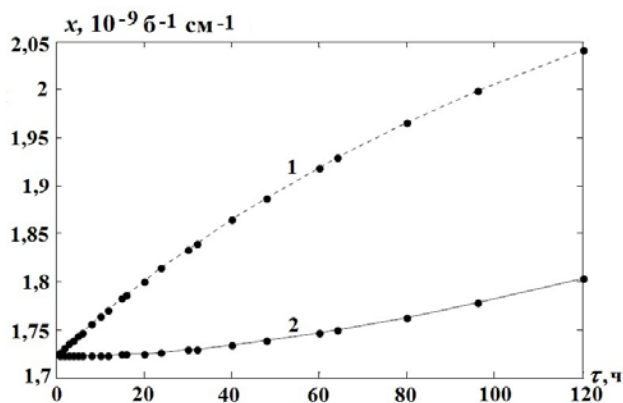


Рис. 9. Зависимость рассчитанной концентрации ${}^3\text{He}$ от шага интегрирования при $t = 40$ сут: 1 — схема первого порядка; 2 — схема второго порядка

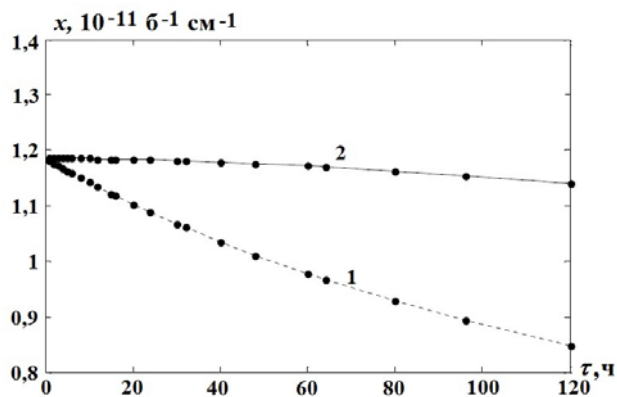


Рис. 10. Зависимость рассчитанной концентрации ${}^2\text{H}$ от шага интегрирования при $t = 40$ сут: 1 — схема первого порядка; 2 — схема второго порядка

Таблица 2

Параметры формулы (14), оцененные по результатам расчетов методом наименьших квадратов при $t = 40$ сут

| Ядро | $x_1, \text{б}^{-1}\text{см}^{-1}$ | $\omega_1, \text{ч}^{-1}$ | $x_2, \text{б}^{-1}\text{см}^{-1}$ | $\omega_2, \text{ч}^{-1}$ | ω_1/ω_2 |
|-------------------|------------------------------------|---------------------------|------------------------------------|---------------------------|---------------------|
| ${}^{10}\text{B}$ | 0,17497 | 0,0042 | 0,17495 | $2,4 \cdot 10^{-5}$ | 175 |
| ${}^{11}\text{B}$ | $1,0694 \cdot 10^{-4}$ | $-8,9 \cdot 10^{-4}$ | $1,0694 \cdot 10^{-4}$ | $-5,2 \cdot 10^{-6}$ | 171 |
| ${}^3\text{He}$ | $1,7223 \cdot 10^{-9}$ | 0,0024 | $1,7221 \cdot 10^{-9}$ | $2,7 \cdot 10^{-5}$ | 89 |
| ${}^2\text{H}$ | $1,1858 \cdot 10^{-11}$ | -0,0037 | $1,1861 \cdot 10^{-11}$ | $-2,2 \cdot 10^{-5}$ | 168 |

сделанное выше предположение о негладкости последних. Однако более интересны характеристики сходимости расчетной схемы, приведенные в табл. 2. Если для всех ядер, кроме, может быть, дейтерия, который рассматривался особо, значения ω_1 , представляющие скорость сходимости схемы первого порядка, близки к значениям из табл. 1, то ω_2 отличаются более чем на порядок. Этот эффект связан с большими значениями производных в момент просветления, что сильнее всего сказывается на схемах высокого порядка точности.

Заключение

Автор статьи подчеркивает, что изменение ядерного состава вещества определяется оператором эволюции, действие которого на начальное состояние описывается жесткой системой уравнений кинетики. Важным свойством этого оператора является инвариантность действия на физическом конусе, причем правые части уравнений кинетики определены только для состояний, лежащих на этом конусе. С учетом данных факторов, а также особенностей рассматриваемых физических процессов наиболее распространенным подходом к расчету изменения ядерного состава является использование элементарного решения. Оно в некотором смысле приближает точное решение, лежит на физическом конусе, и, кроме того, для его нахождения реализуется эффективный численный алгоритм.

При всех положительных сторонах недостатком такого подхода является невозможность построения схемы выше второго порядка точности в общем случае. Частные случаи типа методов Рунге—Кутты не спасают положения, так как ограничение на шаг интегрирования накладывает условие принадлежности физическому конусу, которое из-за жесткости уравнений оказывается более сильным, чем ограничение по погрешности схемы.

Для влияния оценки порядка схемы на точность расчета была рассмотрена методическая задача выгорания бора, которая описывается существенно нелинейной системой уравнений. При этом в решении имеется небольшой временной интервал с быстрым изменением характеристик. По ре-

зультатам расчетов можно видеть, что после этого интервала погрешности схем первого и второго порядка различаются несущественно, что является следствием больших значений производных на указанном интервале. Но если рассматривать меньшие времена, при которых поведение решения не слишком экстремально, что ближе к практике, то наблюдается существенный выигрыш от использования схемы второго порядка точности. В частности, в рассматриваемой задаче данная схема позволяет примерно на два порядка снизить трудоемкость расчета по сравнению со схемой первого порядка.

Следует однако отметить, что в этой задаче практически отсутствуют погрешности задачи переноса. Кроме того, для практики интереснее более реалистичные задачи, в первую очередь связанные с изменением состава топлива в ядерном реакторе. Этим вопросам будет посвящена отдельная статья.

Список литературы

1. *Модестов Д. Г.* Интегрирование уравнений эволюции ядерного состава в постоянных радиационных полях // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2012. Вып. 1. С. 17–28.
2. *Мясичих С. В., Алексеев А. В., Гребенников А. Н., Гусев Е. А., Ермаков А. А., Иреничев 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 // Там же. 2014. Вып. 1. С. 49–64.
3. *Белл Д., Глестон С.* Теория атомных реакторов. М.: Атомиздат, 1974.
4. *Глебов А. П., Калашников А. Г., Кислицына Т. С., Моисеев А. Л.* Методика и программа расчета изменения изотопного состава в одномерном гомогенном реакторе // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика ядерных реакторов. 1988. Вып. 3. С. 49–52.
5. *Herman W., Westfall R. M.* ORIGEN-S: SCALE System Module to Calculate Fuel Depletion, Actinide Transmutation, Fission Product Buildup and Decay, and Associated Radiation Source Terms. NUREG/CR-200. Rev. 5, Vol. 2, Sec. F7. US, 1995.
6. *Селезнев Е. Ф.* Кинетика реакторов на быстрых нейтронах. М.: Наука, 2013.
7. *Модестов Д. Г.* Интегрирование уравнений, описывающих выгорание ядерного топлива // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика ядерных реакторов. 2011. Вып. 3. С. 63–71.
8. *Буколов С. Н.* VEGA — программа для расчета нейтронно-физических характеристик реактора в процессе выгорания // Там же. 2014. Вып. 1–2. С. 22–29.
9. *Колобашкин В. М., Рубцов П. М., Ружанский П. А., Сидоренко В. Д.* Радиационные характеристики облученного ядерного топлива. М.: Энергоатомиздат, 1983.
10. *Юдкевич М. С.* Пакет прикладных программ BURNUP для расчета изотопного состава работающего реактора // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика ядерных реакторов. 2011. Вып. 4. С. 24–28.
11. *Модестов Д. Г.* Адаптивная схема решения уравнений выгорания ядерного топлива с оценкой равновесной концентрации короткоживущих ядер // Там же. 2013. Вып. 3. С. 120–130.
12. *Зацепин О. В., Кандиев Я. З., Кашаева Е. А., Малышкин Г. Н., Модестов Д. Г.* Расчеты методом Монте-Карло по программе ПРИЗМА нейтронно-физических характеристик активной зоны реактора ВВЭР-1000 // Там же. 2011. Вып. 4. С. 64–73.
13. *Модестов Д. Г.* Программа решения задач ядерной кинетики РИСК-2014: Препринт № 243, Снежинск: РФЯЦ-ВНИИТФ, 2014.

Статья поступила в редакцию 15.02.18.

CONSTRUCTING A SCHEME TO SOLVE THE NUCLEI KINETICS PROBLEM /
D. G. Modestov (FSUE "Acad. E. I. Zababakhin RFNC-VNIITF", Snezhinsk, Chelyabinsk
region).

The paper considers numerical schemes for the nuclei kinetics problems. It is demonstrated that, in general, there are no schemes of higher than the second order of accuracy. Results of methodological computations are given, which confirm the validity of conclusions and demonstrate the degree of influence of the major sources of errors.

Keywords: nuclei kinetics, numerical schemes, Cauchy problem, an integration scheme, the particle transport equation, the method of generations.
