

ИНТЕГРИРОВАНИЕ УРАВНЕНИЙ, ОПИСЫВАЮЩИХ ВЫГОРАНИЕ ЯДЕРНОГО ТОПЛИВА

Д. Г. Модестов

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИТФ»

Предлагается схема численного интегрирования набора дифференциальных уравнений с дополнительным условием постоянства мощности, которые получаются, в частности, при расчете выгорания топлива в ядерных реакторах. Также предлагается алгоритм разложения матрицы распадов, который, в конечном счете, позволяет решать эти уравнения с приемлемой точностью. Представлены результаты расчета набора методических задач.

Ключевые слова: ядерный состав, изотопный состав, выгорание, реактор, распад, сечение реакции, скорость наработки, задача Коши, численные методы, схема интегрирования, порядок точности, оценка погрешности.

INTEGRATING OF EQUATIONS DESCRIBING A BURN OUT OF NUCLEAR FUEL / D. G. MODESTOV //

We propose a scheme of numerical integrating of a set of differential equations with an additional condition of power constancy obtained, in particular, when calculating burn out of fuel in nuclear reactors. Also proposed is an algorithm of disintegration of decay matrix which finally allows solving of these equations with acceptable precision. Here are given results of calculation of a set of procedure problems.

Key words: nuclear composition, isotopic composition, burn-out, reactor, decay, reaction cross-section, rate of recovery, Cauchy problem, numerical methods, integrating circuit, order of accuracy, error evaluation.

Введение

Для задачи выгорания ядерного топлива в общем случае не может быть найдено точного решения. Приближенное решение, с использованием численных методов, требует построения конечномерного приближения этого решения. Данное приближение главным образом определяется методом расчета радиационных полей в системе. При использовании разностных методов для решения задач переноса, как, например, в [1], ядерные концентрации задаются в конечном наборе пространственных точек, связанных с пространственной сеткой. В том случае, если для расчета применяется метод статистического моделирования, вся система делится на конечное число пространственных областей. Одним из приближений, используемых в таком подходе, является постоянство концентраций в каждой из областей. Таким образом, для описания системы будет использоваться представление системы в виде набора пространственных элементов, под которыми, в зави-

симости от метода решения задачи переноса, подразумевается либо набор пространственных точек, либо набор областей. Для удобства пространственные элементы будут индексироваться греческими буквами. Что касается ядер, то здесь, как и в [2], они будут нумероваться начальным отрезком натуральных чисел. Таким образом, поле концентраций представляется набором чисел n_α^k , являющихся концентрациями ядер k -го типа в пространственном элементе α . При этом символом n_α (без верхнего индекса) в дальнейшем будет обозначаться набор концентраций ядер в соответствующем пространственном элементе.

Чтобы иметь возможность оценивать погрешность решения, необходимо определить метрику на пространстве состояний. Для этого удобно считать n_α элементом конечномерного векторного пространства с нормой l_1 :

$$\|n_\alpha\| = \sum_k |n_\alpha^k|. \quad (1)$$

Следует отметить, что такое определение имеет прозрачный физический смысл. Так, если вектор n_α лежит в физической области (т. е. все $n_\alpha^k \geq 0$), то его норма равна суммарной концентрации всех ядер в данном пространственном элементе. Видим, что норма (1) индуцирует операторную норму, которую можно определить следующим образом:

$$\|A\| = \max_j \sum_i |A^{i,j}|. \quad (2)$$

В математической модели матрица A представляет некоторый процесс, а ее компоненты A^{ij} определяют вклад в концентрацию i -го ядра от концентрации j -го в этом процессе. Соответственно, норму можно интерпретировать как оценку максимально возможного влияния данного процесса при заданном количестве ядер.

Для записи эволюционного уравнения удобно для каждого пространственного элемента определить матрицу \mathcal{K}_α^0 , в общем случае зависящую от времени, которая в дальнейшем будет называться матрицей реакций. Ее явный вид зависит от представления. В том случае, если в качестве пространственного элемента используется область α , то

$$\mathcal{K}_\alpha^{k,j}(t) = \frac{1}{V_\alpha} \int d\mathbf{r} \int dx N(x, \mathbf{r}, t) v(x) \sum_m w_m^{k,j}(x) \sigma_m^j(x), \quad (3')$$

где V_α – объем этой области, x – параметры частицы, $N(x, \mathbf{r}, t)$ – плотность числа частиц излучения, $v(x)$ – их скорость, $\sigma_m^j(x)$ – микроскопическое сечение m -й реакции на j -м ядре, $w_m^{k,j}(x)$ – баланс ядер сорта k на данной реакции (число ядер после реакции – число ядер до реакции). Несколько иное выражение получается, если же в этом качестве используется точка \mathbf{r}_α :

$$\mathcal{K}_\alpha^{k,j}(t) = \int dx N(x, \mathbf{r}_\alpha, t) v(x) \sum_m w_m^{k,j}(x) \sigma_m^j(x). \quad (3'')$$

С учетом введенных обозначений скорость изменения концентраций в каждом пространственном элементе можно записать, используя векторное представление

$$\frac{d}{dt} n_\alpha(t) = \mathcal{K}_\alpha^0 n_\alpha(t) + \mathcal{K}_\alpha^1(t) n_\alpha(t), \quad (4)$$

где \mathcal{K}_α^0 – матрица распадов, явный вид которой приводится в работе [2].

Решение задачи Коши для набора дифференциальных уравнений (4), соответствующих набору пространственных элементов системы, дает значения концентраций на любой момент времени. Хотя эти уравнения имеют достаточно простой вид, нахождение точного решения в общем случае, даже при условии постоянства матрицы реакций, не представляется возможным. Следует отметить, что матрицы \mathcal{K}_α^0 и \mathcal{K}_α^1 в общем случае, с одной стороны, являются плохо обусловленными, а с другой – имеют большую размерность (в рассматриваемом ниже примере – 1508). Поэтому для решения задачи наиболее приемлемым вариантом представляется построение специализированного метода интегрирования. Сразу следует отметить, что алгоритм решения данной задачи в случае, когда $\mathcal{K}_\alpha^1 = 0$, описан в работе [2]. Однако его использование, даже с постоянной \mathcal{K}_α^1 , напрямую невозможно, так как основным свойством матрицы \mathcal{K}_α^0 , которое используется при построении данного алгоритма, является ее треугольный вид, который, в свою очередь, является следствием закона сохранения энергии. Для матрицы \mathcal{K}_α^1 , вследствие приноса энергии в ядро частицами излучения, такое утверждение не справедливо. Однако возможен приближенный расчет, в котором эта матрица рассматривается как малая добавка к \mathcal{K}_α^0 . Степень малости определяет время расчета, и поэтому для построения эффективной процедуры решения удобно, чтобы $\|\mathcal{K}_\alpha^1\|$, определяемая соотношением (2), была как можно меньше. К сожалению, данная матрица может содержать компоненты, имеющие большое значение. Но для большинства практических задач имеется возможность представить

$$\mathcal{K}_\alpha^1 = \Lambda^0 + \Lambda^1, \quad \mathcal{K}_\alpha^1(t) = \Omega_\alpha^0 + \Omega_\alpha^1(t), \quad (5)$$

где матрицы с индексом «0» являются треугольными и не зависящими от времени, а с индексом «1» имеют малую норму. Принципы этого разложения будут рассмотрены ниже.

Прежде построения алгоритма необходимо заметить, что зависимость матрицы реакций от времени определяется распределением нейтронов, которое, в свою очередь, определяется текущим полем концентраций. Последняя зависимость, при решении рассматриваемых задач, состоит в том, что $N(x, \mathbf{r}, t)$ является решением однородного уравнения переноса. В качестве нормировки при этом используется заданное значение мощности,

которое в дальнейшем будет обозначаться как W . Условие нормировки можно записать следующим образом:

$$W = \sum_{\alpha} (Q_{\alpha}, n_{\alpha}), \quad (6)$$

где скобкой обозначено скалярное произведение, а индекс α пробегает все пространственные элементы системы. Аналогично (3), в зависимости от представления компоненты вектора Q_{α} , характеризующие энерговыделение на ядрах в заданном элементе и в общем случае зависящие от времени, вычисляются либо как

$$Q_{\alpha}^i(t) = \int_{\alpha} d\vec{r} \int dx N(x, \vec{r}, t) v(x) \sum_m K_m^i(x) \sigma_m^i(x), \quad (7')$$

если задано областное представление, либо как

$$Q_{\alpha}^i(t) = V_{\alpha} \int dx N(x, \vec{r}, t) v(x) \sum_m K_m^i(x) \sigma_m^i(x), \quad (7'')$$

если представление точечное. В последнем случае V_{α} – это объем, приходящийся на данную пространственную точку, который определяется используемой разностной схемой, а через $K_m^i(x)$ обозначено энерговыделение на m -й реакции с i -м ядром при значении параметров частицы x .

Схема интегрирования

Для решения задачи Коши можно использовать различные приближения. Наиболее простым является предположение (см. [1, с. 445]) о том, что на любой момент существует конечный временной отрезок, в течение которого плотность числа частиц излучения можно считать постоянной. При этом временной интервал разбивается на отрезки, а вычисление компонент матрицы реакций производится в начальные моменты данных отрезков. Можно показать, что решение задачи Коши (4), с учетом разбиения (5) и условия постоянства матрицы (3), соответствует решению интегрального уравнения

$$n_{\alpha}(t) = \left(e^{\Lambda_{\alpha} t} + \sum_{k=1}^m \frac{e^{\Lambda_{\alpha} t} - \sum_{j=0}^{k-1} \frac{(\Lambda_{\alpha} t)^j}{j!}}{\Lambda_{\alpha}^k} \Omega_{\alpha} (\Lambda_{\alpha} + \Omega_{\alpha})^{k-1} \right) n_{\alpha}(0) + \int_0^t d\tau e^{\Lambda_{\alpha}(t-\tau)} \Omega_{\alpha} (\Lambda_{\alpha} + \Omega_{\alpha})^m \int_0^{\tau} d\tau' \frac{(\tau-\tau')^{m-1}}{(m-1)!} n_{\alpha}(\tau'), \quad m \geq 1, \quad (8)$$

где $\Lambda_{\alpha} = \Lambda^0 + \Omega_{\alpha}^0$, $\Omega_{\alpha}(t) = \Lambda^1 + \Omega_{\alpha}^1(t)$. Для построения схемы численного интегрирования удобно пренебречь последним членом в правой части уравнений (8). Обозначив через Δt шаг численного интегрирования, а через \mathcal{N} приближенное решение, можно получить

$$\mathcal{N}_{\alpha}^i(t + \Delta t) = U_{\alpha}(\Delta t) \mathcal{N}_{\alpha}^i(t). \quad (9)$$

Здесь $U_{\alpha}(\Delta t)$ – оператор, который в соответствии с (8) можно представить как

$$U_{\alpha}(\Delta t) = e^{\Lambda_{\alpha} \Delta t} + e^{\Lambda_{\alpha} \Delta t} - \sum_{j=0}^{k-1} \frac{(\Lambda_{\alpha} \Delta t)^j}{j!} + \sum_{k=1}^m \frac{\Lambda_{\alpha}^k}{\Lambda_{\alpha}^k} \Omega_{\alpha} (\Lambda_{\alpha} + \Omega_{\alpha})^{k-1}. \quad (10)$$

Последовательное применение (9) позволяет получать приближенное решение для любых времен. При этом возникает проблема выбора шага интегрирования или связанная с ней проблема оценки точности решения. Эту точность удобно определить как норму невязки, которая, в свою очередь, определяется как разность между точным и приближенным решением. Для этой величины можно получить следующую оценку:

$$\|n_{\alpha}(t) - \mathcal{N}_{\alpha}^i(t)\| \leq t \frac{\Delta t^m}{(m+1)!} \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3(m), \quad (11)$$

где

$$\Delta t = \max_i \Delta t_i, \quad \gamma_1 = \max_{\tau \in [0, \Delta t]} \|e^{\Lambda_{\alpha} \tau}\|,$$

$$\gamma_2 = \max_{\tau \in [0, t]} \|e^{(\Lambda_{\alpha} + \Omega_{\alpha}) \tau}\|,$$

$$\gamma_3(m) = \max_{\tau \in [0, t]} \|\Omega_{\alpha} (\Lambda_{\alpha} + \Omega_{\alpha})^m n_{\alpha}(\tau)\|.$$

Исходя из этого соотношения, можно утверждать, что m имеет смысл порядка точности схемы.

Однако, хотя схема интегрирования (9), (10) позволяет решать поставленную задачу, она представляется не очень эффективной, так как не учитывает изменение матрицы реакций внутри временного интервала. Это изменение можно учесть, предположив, что обычно в задачах выгорания топлива распределение нейтронов по энергии и пространству меняется во времени значительно медленнее, чем число частиц, т. е. всегда существует временной отрезок, на котором с хорошей точностью можно считать

$$N(x, \vec{r}, t) = C(t) N_0(x, \vec{r}), \quad (12)$$

где дополнительно предполагается слабая зависимость нормирующего множителя от времени. Выбор отрезка делается исходя из практики таким образом, чтобы не превысить допустимую погрешность. Ненормированное распределение $N_0(x, \vec{r})$ получается при решении однородного уравнения переноса. Соответственно, величины (3) и (7) представляются в следующем виде:

$$\mathcal{K}_\alpha^0(t) = C(t)\omega_\alpha, \quad Q_\alpha(t) = C(t)q_\alpha, \quad (13)$$

где ω_α и q_α являются функционалами от $N_0(x, \vec{r})$ и, следовательно, не зависят от времени.

Здесь следует остановиться на вычислении множителя $C(t)$, который вычисляется из условия нормировки (6) и соотношения (13). Как видим, этот множитель зависит от ядерных концентраций во всей системе. Поэтому для вычисления его напрямую необходимо сначала определить эти концентрации, т. е. решить всю задачу. Однако гладкость всех концентраций, а также предполагаемая слабая зависимость от времени позволяют использовать разложение нормирующего множителя в степенной ряд

$$C(t) \approx \sum_{k=0}^M c_k \frac{t^k}{k!}, \quad c_k = \left. \frac{d^k C(t)}{dt^k} \right|_{t=0}. \quad (14)$$

В принципе, вычисление коэффициентов разложения, исходя из соотношений (6) и (13), с учетом уравнения (4), является простой, хотя и несколько громоздкой задачей. Но для наглядности представляется удобным привести явное выражение для первых двух из них, что, учитывая слабую зависимость от времени, в большинстве случаев является вполне достаточным,

$$c_0 = \frac{W}{b_0}, \quad c_1 = -\frac{c_0}{b_0} \sum_{\alpha} (q_\alpha, (\mathcal{K}_\alpha^0 + c_0 \omega_\alpha) n_\alpha(0)),$$

$$\text{где } b_0 = \sum_{\alpha} (q_\alpha, n_\alpha(0)).$$

Для решения уравнения (4) удобно выделить главную часть, т. е. сделать разложение матриц, аналогичное (5),

$$\omega_\alpha = \omega_\alpha^0 + \omega_\alpha^1.$$

Исходя из этого разложения, удобно выделить следующие матрицы:

$$\Lambda_\alpha = \Lambda^0 + c_0 \omega_\alpha^0, \\ \Omega_\alpha = \Lambda^1 + c_0 \omega_\alpha^1,$$

которые, учитывая представление нормировочного множителя (14), удовлетворяют следующему соотношению:

$$\mathcal{K}_\alpha^0 C(t) \omega_\alpha = \Lambda_\alpha + \Omega_\alpha + \sum_{k=1}^M c_k \frac{t^k}{k!} \omega_\alpha.$$

Из этого разложения, аналогично выводу оператора временного сдвига (10), можно получить другой оператор, учитывающий временную зависимость матрицы реакций,

$$U_\alpha(\Delta t) = e^{\Lambda_\alpha \Delta t} + \frac{e^{\Lambda_\alpha \Delta t} - 1}{\Lambda_\alpha} \Omega_\alpha + \\ + \sum_{k=0}^M \mathcal{K}_\alpha^k(t_0) \frac{e^{\Lambda_\alpha \Delta t} - \sum_{j=0}^k \frac{(\Lambda_\alpha \Delta t)^j}{j!}}{\Lambda_\alpha^{k+1}} \omega_\alpha, \quad (15)$$

где $\mathcal{K}_\alpha^0(t_0) = \sum_{n=1}^M c_n \frac{t_0^n}{n!}$, $\mathcal{K}_\alpha^k(t_0) = \sum_{n=0}^{M-k} c_{n+k} \frac{t_0^n}{n!}$, $k \neq 0$.

Как видим, эта схема по точности совпадает со схемой первого порядка ($m = 1$) для постоянного числа частиц и в то же время позволяет учитывать постоянство мощности рассчитываемой установки.

Разложение матрицы распадов для задач выгорания ядерного топлива

При работе энергетических ядерных установок, основанных на реакциях вынужденного деления, основными процессами, приводящими к изменению ядерного состава, являются радиационный захват нейтронов и деление последними тяжелых ядер. Соответственно, скорости наработки продуктов данных реакций в общем случае должны быть основными в матрице реакций ω_α , определяемой согласно (13) совместно, впрочем, с диагональными компонентами, описывающими убыль первичных ядер. При этом разложение (5) желательно производить таким образом, чтобы указанные компоненты были отнесены к ω_α^0 , что позволит уменьшить норму ω_α^1 . Основным же условием разложения (5) является то, что ω_α^0 должна быть треугольной. Так как диагональные компоненты не меняют треугольного вида, возможность отнесения их к данной матрице не вызывает сомнения. Чтобы это было возможно и для недиагональных компонент, необходимо ввести отношения частичного порядка (см. [2]) таким обра-

зом, чтобы первичные ядра в указанных реакциях были больше вторичных. С использованием этого отношения разложение (5) строится так, что если j -е ядро не следует за i -м, то компоненты $\omega_{\alpha}^{0,ij}$ являются нулевыми. Несложно показать, что если индексация не противоречит отношению порядка, т. е. выполняется условие

$$j\text{-е ядро} > i\text{-го ядра} \Rightarrow j > i,$$

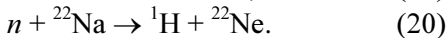
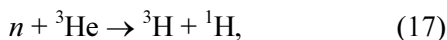
то матрица ω_{α}^0 будет треугольной.

Сразу можно отметить, что деление в данном контексте не вносит особых затруднений, так как для абсолютного большинства осколков получение первичного ядра посредством последовательности распадов и взаимодействий с нейтронами невозможно. Здесь большее опасение внушает количество этих осколков (например, по данным ENDF/B-VII, рекомендованным МАГАТЭ [3], порядка тысячи). Так как алгоритм, приведенный в [2], предназначен для вычисления функций от разреженной матрицы, то большое число компонент может привести к росту временных затрат. Вполне возможно, что приближенный учет вклада в наработку осколков деления позволит сделать схему численного интегрирования (15) более эффективной. Поэтому представляется необходимым вводить отношение порядка только для ядер с достаточно большим выходом. Влияние этой величины на эффективность схемы интегрирования будет рассмотрено ниже.

Что касается ядер, получающихся на поглощении, то желательным является, чтобы было справедливо отношение

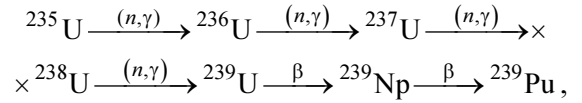
$$(Z, A) > (Z, A+1), \quad (16)$$

где Z – заряд ядра, а A – число нуклонов. Необходимо заметить, что, кроме указанных выше реакций деления и поглощения, имеется еще небольшое число реакций, скорости которых могут быть достаточно велики в данных задачах. Соответственно, для их продуктов желательно выполнение отношения, аналогичного (16). Анализ показывает, что в качестве этих дополнительных реакций достаточно рассматривать следующие четыре:



Как можно видеть, при добавлении подобных реакций невозможно сохранить индуцированную законом сохранения энергии упорядоченность

матрицы распадов \mathcal{K}^0 . Так, например, существование β -распада ${}^3\text{H}$ требует, чтобы было ${}^3\text{H} > {}^3\text{He}$. В то же время включение реакции (17) приводит к противоречащему условию: ${}^3\text{He} > {}^3\text{H}$. Впрочем, чаще встречаются не столь явные противоречия. Например, существует α -распад ${}^{239}\text{Pu}$, который приводит к установке соотношения ${}^{239}\text{Pu} > {}^{235}\text{U}$. Но при учете поглощений существует цепочка реакций,



которая, учитывая (16), требует выполнения обратного условия.

Таким образом, добавить вышеописанные реакции, сохраняя отношение порядка, определяемое матрицей распада \mathcal{K}^0 , невозможно. Однако представляется возможным выделить из этой матрицы небольшую, в смысле малости нормы (2), часть таким образом, чтобы отношение порядка, индуцируемое оставшейся частью, позволяло учесть и указанные реакции, т. е. сделать разложение для матрицы распадов: $\mathcal{K}^0 = \Lambda^0 + \Lambda^1$. При этом в Λ^1 ненулевыми являются только недиагональные компоненты, которые (см., например, [2]) всегда положительны. Для указанного разложения возможен вариант, когда задается некоторое характерное время t , при использовании которого это разложение имеет вид

$$\Lambda^{0,ij} = \begin{cases} \mathcal{K}^{ij} & , (i=j) \vee (\mathcal{K}^{ij}t \geq 1) \\ 0 & , (i \neq j) \wedge (\mathcal{K}^{ij}t < 1) \end{cases}, \quad (21)$$

$$\Lambda^{1,ij} = \begin{cases} 0 & , (i=j) \vee (\mathcal{K}^{ij}t \geq 1) \\ \mathcal{K}^{ij} & , (i \neq j) \wedge (\mathcal{K}^{ij}t < 1) \end{cases}. \quad (22)$$

Учитывая определение нормы, а также разреженность матрицы распадов, можно сделать оценку:

$\|\Lambda^1\| \approx \frac{1}{t}$, которая позволяет выбирать характерное время.

Для построения матрицы ω_{α}^0 отношение частичного порядка на множестве ядер, определяемое Λ^0 , необходимо расширить таким образом, чтобы по возможности выполнялось (16), а также аналогичные соотношения для реакций (17–20). Кроме того, может быть желательно, чтобы ненулевыми компонентами в ω_{α}^0 были и скорости наработок некоторых, наиболее представительных осколков

деления. Для этого можно ввести параметр y , используя который, отношение частичного порядка между j -м ядром и осколком его деления i устанавливается следующим образом:

$$w_i(0) > y \Rightarrow j > i, \quad (23)$$

где $w_i(0)$ – выход i -го ядра на делении j -го нейтроном с нулевой энергией. Следует заметить, что зависимость выхода от энергии обычно достаточно слабая, и если выполняется (23), то аналогичное соотношение будет справедливо и для других энергий, заметно меньше энергии, высвобождаемой при делении (~200 МэВ).

Подытоживая все вышеперечисленное, алгоритм разложения матриц можно описать следующим образом. Задаются матрица реакций \mathcal{K}^0 и параметры разложения: t и y . Вычисляется матрица реакций $\omega_\alpha(t)$. Далее производятся следующие действия:

1. Делается разложение $\mathcal{K}^0 = \Lambda^0 + \Lambda^1$ по формулам (21), (22).
2. Вводится отношение частичного порядка на множестве ядер, определяемое матрицей Λ^0 .
3. В определение этого отношения последовательно добавляются правила (16–20) и (23), не противоречащие текущим правилам.
4. Создается матрица ω_α^0 , ненулевые компоненты которой являются компонентами $\omega_\alpha(0)$, удовлетворяющими введенному отношению частичного порядка.
5. $\omega_\alpha^1(t) = \omega_\alpha(t) - \omega_\alpha^0$.

Следует заметить, что при выполнении пунктов 1–3 не используется матрица реакций, что позволяет при реализации выполнять их только один раз на расчет, что, в свою очередь, позволяет заметно экономить время, особенно в задачах с большим количеством пространственных элементов.

Как видим, получившаяся матрица $\Lambda_\alpha = \Lambda^0 + \Omega_\alpha^0$ является треугольной и разреженной, а $\Omega_\alpha(t) = \Lambda^1 + \Omega_\alpha^1(t)$, по предположению, имеет малую норму. Впрочем, последнее необходимо проверять. В общем случае сделать это невозможно, но далее будет рассмотрен методический расчет модельного реактора, на примере которого можно будет сделать численные оценки. Здесь же считаем необходимым привести параметры, которые представляются наиболее эффективными для расчета реакторных задач:

$$t = 10 \text{ лет,}$$

$$y = 0,1,$$

$$\text{порядок схемы} = 1,$$

и получены по результатам ряда численных расчетов с целью минимизации времени счета. Здесь $y = 0,1$ фактически означает, что наработка осколков деления относится к $\Omega_\alpha(t)$.

Стоит остановиться на значении множителя γ_2 , используемого для оценки погрешности расчета по формуле (11). Не приводя строгого вывода, можно заметить, что по определению нормы $\|e^{(\Lambda_\alpha + \Omega_\alpha)t}\|$ имеет смысл максимально возможного увеличения числа ядер в системе за время t . При этом, если не рассматривать как ядра изотопы водорода и гелия, наработка которых в реакторных задачах не представляет особого интереса, размножение числа частиц идет только на реакциях деления. Учитывая при этом, что осколки деления не являются делящимися материалами, несложно доказать, что в рассматриваемых задачах можно считать $\gamma_2 < 2$. Что касается γ_1 , то при приведенных выше параметрах матрица Λ_α , вследствие отсутствия в ней наработок осколков деления, описывает процесс без размножения ядер. То есть $\gamma_1 = 1$. Но даже при использовании других параметров, учитывая, что для решения рассматриваемых задач с приемлемой для практики точностью требуется не менее десятка шагов, можно считать, что с хорошей точностью $\gamma_1 = 1$ ($\approx \sqrt[10]{2}$).

Модельный реактор на тепловых нейтронах

Наиболее значимым для практики представляется расчет эволюции изотопного состава в энергетических реакторах. Соответственно, возникает проблема выбора схемы численного интегрирования, которая позволит как можно более эффективно проводить расчеты подобного типа. Следует отметить, что в настоящее время наиболее распространенными являются энергетические реакторы на тепловых нейтронах. А среди последних широкое распространение получили реакторы типа ВВЭР. Но расчет реактора является достаточно трудоемкой задачей. Поэтому полномасштабная модель не годится для методических расчетов. Соответственно, удобно построить упрощенную модель, но такую, которая обладает близкими характеристиками с полномасштабной. Наиболее простой представляется расчетная модель,

геометрия которой состоит из двух цилиндров: внешнего и внутреннего. Внутренний цилиндр вложен во внешний строго по середине, т. е. соосно и с одинаковыми расстояниями до торцов. Геометрические параметры внутреннего цилиндра близки к параметрам ТВЭЛа ВВЭР, представленным в [4]: диаметр 0,757 см, высота 353 см. Начальный ядерный состав внутреннего цилиндра соответствует одному из вариантов оксидного топлива обогащения 3,3 % и приводится ниже в табл. 1.

Таблица 1

Начальный состав топлива

Ядро	^{16}O	^{235}U	^{236}U	^{238}U
Концентрация, $\sigma^{-1}\text{см}^{-1}$	4,5918 E-02	7,6701 E-04	2,3207 E-05	2,2192 E-02

Внешний цилиндр высотой 473 см и диаметром 3,6 см подбирался, исходя из характеристик активной зоны ВВЭР, таким образом, чтобы коэффициент размножения нейтронов в системе был немного больше единицы (начальное значение $k_{эф} = 1,015$). Область внешнего цилиндра, исключая внутренний, заполнена водой с молекулярной концентрацией $0,025436 \sigma^{-1}\text{см}^{-1}$ при температуре 570 К. На всей внешней границе поставлено условие зеркального отражения нейтронов.

Расчеты проводились при условии постоянства мощности. Мощность системы оценивалась по следующим характеристикам [4] реактора ВВЭР-1000 в модификации В-187, разработанной для 5-го блока НВАЭС:

тепловая мощность	3 ГВт;
число ТВС	151;
число ТВЭЛ в одной ТВС	317.

Технические характеристики других модификаций различаются несущественно. Из этого можно сделать вывод, что средняя тепловая мощность, приходящаяся на один ТВЭЛ, составляет примерно 4×10^{23} эВ/с. Данное значение и использовалось при проведении расчетов. При этом, чтобы исключить влияние статистической погрешности, для матрицы реакций (3) использовались одни и те же скорости наработки, оцененные в начальный момент времени. Хотя такое приближение не позволяет учитывать изменение нейтронного спектра, связанное с наработкой плутония, но оно несущественно сказывается на характере самого процесса. Поэтому для методических расчетов, предназначенных для выбора параметров схемы численного

интегрирования, данное приближение представляется вполне удовлетворительным.

Сам расчет проводился на время до 208 недель, т. е. порядка четырех лет с параметрами разложения матрицы распадов, приведенными в предыдущем разделе статьи. Изменение ядерного состава рассматривалось только в топливе. Для оценки шага численного интегрирования, по формуле (11), необходимо оценить значение параметра γ_3 . Следует отметить, что величина, определяющая значение этого параметра, сначала растет со временем от почти нулевого значения до максимума, а потом монотонно спадает. Так как поведение вблизи начала отсчета не слишком показательно, представляется, что реальное значение γ_3 определяется точкой на ниспадающем участке. Расчеты показали, что для рассматриваемой задачи

$$\gamma_3(1) \in (2 \times 10^{-20}, 5 \times 10^{-19}) \text{ с}^{-2} \sigma^{-1} \text{ см}^{-1}. \quad (24)$$

Для определения необходимой погрешности можно отметить, что за время процесса изотоп ^{235}U выгорает до концентрации примерно $6 \times 10^{-7} \sigma^{-1}\text{см}^{-1}$. Соответственно с этим значением выбор $\Delta n = 10^{-7}$ представляется вполне достаточным. Используя данную величину, оценку (24) и оценку $\gamma_1 \gamma_2 = 2$, приведенную выше, получаем

$$\Delta t \approx 0,5 - 11 \text{ часов}. \quad (25)$$

Важной характеристикой точности расчета является условие постоянства мощности. Для выполнения этого условия расчет эволюции состава разбивается на циклы, в начале каждого из которых, используя выражение (14), определяется зависимость нормирующего множителя от времени. При этом погрешность, вызванную несохранением мощности, можно оценить, вычисляя последнюю в конечный момент времени цикла по формуле (7). Следует отметить, что в практических расчетах понятие цикла возникает и из других соображений – при линеаризации задачи.

В табл. 2 приводятся значения концентрации ^{235}U в конце процесса при различных параметрах схемы. Данная величина приводится потому, что она, как показали расчеты, наиболее сильно зависит от этих параметров. Здесь используются следующие обозначения:

- Δt – шаг численного интегрирования,
- m – порядок схемы (10),
- M – степень разложения (14),
- $t_{ц}$ – время цикла.

Таблица 2

Конечная концентрация урана
при разных параметрах схемы

Δt	m	M	$t_{ц}$	$^{235}\text{U}, \sigma^{-1}\text{см}^{-1}$
1 час	1	0	1 неде- ля	6,3713E-07
1 час	2	0	1 неде- ля	6,3713E-07
1 час	3	0	1 неде- ля	6,3713E-07
1 час	1	0	1 день	6,1629E-07
1 час	1	0	6 часов	6,1373E-07
1 час	1	0	1 час	6,1303E-07
1 час	1	1	1 неде- ля	6,1286E-07
1 день	1	0	1 неде- ля	6,3717E-07
1 день	2	0	1 неде- ля	6,3713E-07
1 день	1	1	1 неде- ля	6,1288E-07

Шаг интегрирования выбирался с учетом оценки (25). Как видим, при выборе продолжительности цикла в неделю и $M = 0$, т. е. считая нормировочный множитель (12) постоянным, относительная погрешность концентрации равняется приблизительно 4 %, что представляется достаточно большой величиной. Расчетную погрешность можно оценить, заметив, что зависимость конечной концентрации урана от времени цикла при одинаковых остальных параметрах хорошо приближается линейной функцией

$$n = 6,1286\text{E-}07 + 1,444\text{E-}10 t_{ц}, \quad (26)$$

где $t_{ц}$ дается в часах. Такое поведение должно наблюдаться вблизи точного значения, когда членами высших порядков можно пренебречь. Таким образом, первый член вышеприведенной формулы может считаться «точным» значением.

Из табл. 2 видим, что порядок схемы и шаг интегрирования слабо влияют на результат. Гораздо сильнее сказывается время цикла, либо порядок разложения в степенной ряд. При этом варьирование последнего параметра предпочтительнее, так как его увеличение на единицу приводит к вычислению одной дополнительной матричной функции, что практически не сказывается на расчетном времени. Следует отметить, что оба этих параметра, в первую очередь, влияют на точность выполнения условия сохранения мощности (6) во время цикла. Несохраниение мощности можно оценить по ее невязке, т. е. отлнчию от задан-

ного значения в конце цикла. Относительное значение данной величины (ΔQ), а также относительная погрешность концентрации ^{235}U , определенная по табл. 2 и формуле (26), приводятся в табл. 3. Как видим, при $M = 0$ существует явная корреляция между этими величинами: $\Delta^{235}\text{U} \approx 3\Delta Q$. Что касается последней строки, то приведенная там нулевая погрешность концентрации (при учете пяти значащих цифр), при невязке мощности большей, чем в первой строке, объясняется разным поведением расчетной мощности в схемах разной степени. Если при использовании нулевой степени обычно мощность монотонно уменьшается, то при больших степенях она ведет себя немонотонно. Соответственно, коэффициент корреляции получается значительно меньшим. А учитывая еще и то, что при использовании алгоритма расчета матричных функций, предлагаемого в [2], время вычисления тензора примерно в 100 раз превышает время расчета шага, а также то, что это вычисление делается раз за цикл, можно утверждать, что схемы с ненулевой степенью разложения предпочтительны при решении реакторных задач. Впрочем, степень $M = 1$ представляется вполне достаточной.

Таблица 3

Связь невязки мощности в конце цикла
с погрешностью расчета

$t_{ц}$	M	$\Delta Q, \%$	$\Delta^{235}\text{U}, \%$
1 час	0	0,008	0,023
6 часов	0	0,05	0,14
1 день	0	0,18	0,56
1 неделя	0	1,3	3,9
1 неделя	1	0,015	0

Следует отметить, что при решении задач переноса, в рамках задачи изменения ядерного состава, возникает понятие шлака. Этим термином обычно обозначают набор имеющихся в составе ядер, взаимодействием с которыми по разным причинам пренебрегают. При этом наиболее веской причиной является отсутствие данных по взаимодействиям. Так, в рассматриваемой задаче состав, определенный по реакциям, содержащимся в библиотеке ENDF/B-VII, содержал 1508 ядер. В то время как в этой же библиотеке имеются данные по нейтронным реакциям только на 393 ядрах. Соответственно, доля шлака является важной величиной, так как она вносит заметный вклад в погрешность оценки нейтронной плотности, которая, в свою очередь, определяет погрешность

компонент матрицы реакций. Как показывают расчеты, эта доля растет со временем и на конечный момент составляет примерно 0,013 %. Учитывая, что данные об основных поглотителях и делящихся материалах содержатся в указанной библиотеке, можно утверждать, что в шлаке не содержатся ядра с большими сечениями в тепловой области, так что относительная погрешность, вносимая его приближенным учетом, порядка или меньше 10^{-4} .

Заключение

Таким образом, учет зависимости от времени нормирующего множителя матрицы реакций, на основе гипотезы (12), позволяет уменьшить, по сравнению с использованием условия постоянства числа нейтронов, трудоемкость расчетов выгорания топлива в ядерных энергетических устройствах. Применяемая при этом схема (15) не требует дополнительных временных затрат для расчета одного шага, по сравнению со схемой первого порядка (10). Следовательно, в любом случае схема (15) не должна приводить к увеличению времени счета задачи.

Следует отметить, что на основе проведенных методических расчетов можно сделать вывод о несущественном выигрыше при использовании схем высокого порядка точности при решении реакторных задач. Поэтому здесь предлагается только схема первого порядка.

Также на основе методических расчетов можно сказать, что использовавшийся здесь алгоритм разложения матрицы распадов представляется пригодным для решения задач рассматриваемого класса. Учитывая, что при шаге интегрирования получающаяся погрешность порядка 10^{-11} (или в пятом знаке) на уране заведомо превышает погрешность используемых констант, этот шаг вполне допустимо увеличить при проведении прикладных расчетов.

Список литературы

1. Белл Д., Глесстон С. Теория атомных реакторов. – М.: Атомиздат, 1974.
2. Модестов Д. Г. Решение уравнений радиоактивного распада // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2006. Вып. 3. С. 54–58.
3. IAEA Nuclear Data Centre, <http://www-nds.iaea.org>.
4. Шмелев В. Д., Драгунов Ю. Г., Денисов В. П., Васильченко И. Н. Активные зоны ВВЭР для атомных электростанций. – М.: ИКЦ «Академкнига», 2004.

Контактная информация –
Модестов Дмитрий Геннадиевич
тел.: (35146) 54730;
e-mail: dgmodestov@vniief.ru.

Статья поступила в редакцию 29.08.2011.

Вопросы атомной науки и техники.
Сер. Физика ядерных реакторов, 2011, вып. 3, с. 63–71.