

АДАПТИВНАЯ СХЕМА РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ ВЫГОРАНИЯ ЯДЕРНОГО ТОПЛИВА С ОЦЕНКОЙ РАВНОВЕСНОЙ КОНЦЕНТРАЦИИ КОРОТКОЖИВУЩИХ ЯДЕР

Д. Г. Модестов

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИТФ», 456770, г. Снежинск Челябинской обл., ул. Васильева, 13

Одним из способов подавления нефизичных колебаний энерговыделения, наблюдающихся в расчетах с большими временными шагами задач выгорания ядерного топлива в реакторах на тепловых нейтронах, может быть использование равновесной концентрации короткоживущих ядер при определении нейтронно-физических характеристик системы. В работе приводится алгоритм оценки этих концентраций, построение схемы интегрирования, а также результаты ряда методических расчетов, подтверждающих применимость этого алгоритма при решении практических задач.

Ключевые слова: ядерный состав, выгорание топлива, задача Коши, численные методы, схема интегрирования, интегральное многообразие, сингулярное возмущение.

AN ADAPTIVE SCHEME FOR SOLVING NUCLEAR FUEL DEPLETION EQUATIONS WITH THE ESTIMATED EQUILIBRIUM CONCENTRATIONS OF SHORT-LIVED NUCLEI / D. G. MODESTOV //

Non-physical oscillations in released energy estimates, which are observed when nuclear fuel depletion equations are solved with large time steps in thermal reactor calculations, can be eliminated by using the equilibrium concentrations of short-lived nuclei from neutronics analysis. The paper describes an algorithm which is used to estimate the concentrations, the integration scheme, and results of some test calculations which prove that the algorithm is applicable to practical problems.

Key words: nuclear composition, fuel depletion, Cauchy problem, numerical techniques, integration scheme, integral manifold, singular perturbation.

Введение

В некоторых случаях при расчете пространственного распределения изменения компонентов ядерного топлива возникают нефизичные колебания энерговыделения, связанные с большими погрешностями определения концентраций короткоживущих ядер. Можно утверждать, что в наибольшей степени этот эффект характерен для расчетов тепловых реакторов, где он имеет те же причины, что и эффект существования ксеноновых колебаний [1] с периодом порядка полусуток. Соответственно, использование временных шагов, превышающих период колебаний при интегрировании уравнений изменения ядерного состава, может оказаться некорректным.

В качестве примера на рис. 1 приведены зависимости концентрации ^{135}Xe от времени в одной точке реактора ВВЭР-1000, полученные по разным

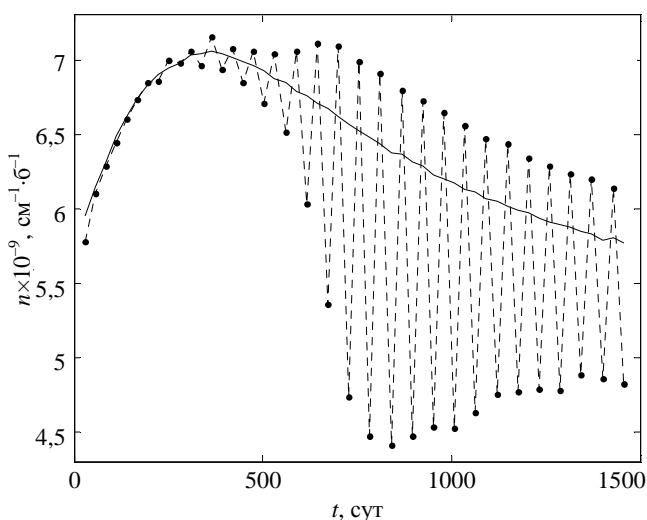


Рис. 1. Зависимость от времени концентрации ^{135}Xe в нижней части центральной ТВС реактора ВВЭР-1000 при расчете с шагом 28 суток: --●-- — явная схема; — — предиктор-корректор

схемам с шагом интегрирования 28 суток. В этих расчетах в качестве математической модели использовалась модель 1-го блока Волгодонской АЭС, описанная в работе [2]. Для решения уравнений ядерной кинетики применялась методика, представленная в [3]. При этом температура материалов и состояния системы управления и защиты (СУЗ) считались постоянными. Для сравнения здесь же приведены результаты расчета с использованием схемы типа предиктор-корректор, подобной той, которая используется в программе BURNUP [4]. Как можно видеть, использование явной схемы для решения данной задачи приводит к возникновению значительных колебаний. Подобное поведение, но с заметно большей амплитудой, наблюдается и у нейтронного поля, и, как следствие, у энерговыделения. Как уже было отмечено, данные колебания вызваны тем, что шаг интегрирования намного превышает характерное время изменения скоростей наработок короткоживущих ядер, в первую очередь, ^{135}Xe и ^{135}I . Уменьшение шага до значений меньше периода полураспада этих ядер приводит к стабилизации процесса, что можно видеть на рис. 2, где приведены результаты досчета рассматриваемой задачи на 5 суток с шагом интегрирования 4 часа. Как можно видеть, концентрация ^{135}Xe , полученная с использованием явной схемы, совершает затухающие колебания, асимптотически приближаясь к значению, полученному по схеме предиктор-корректор. В отличие от явной, последняя схема дает более гладкие результаты при расчете с шагом 28 суток. А досчет с малым шагом, который с точностью до статистики сохраняет значение концентрации, показывает, что этот результат корректен.

Подобное поведение говорит о том, что причиной расчетных колебаний при использовании явной схемы является жесткость уравнений, описывающих изменение ядерного состава. Следует отметить, что использованные при проведении расчетов методы, описанные в работах [3] и [5], позволяют разрешить локальную жесткость, т. е. имеющуюся в пространственной точке и связанную с присутствием короткоживущих ядер. Такой подход достаточно хорошо работает в случае слабой зависимости радиационных полей от небольших изменений ядерного состава. Например, в задачах с внешним источником [5] при расчете реакторов на быстрых нейтронах и т. п. Однако в реакторах типа ВВЭР присутствует дополнительная жесткость, определяемая слабой связью разных частей системы. Таким образом, требуется

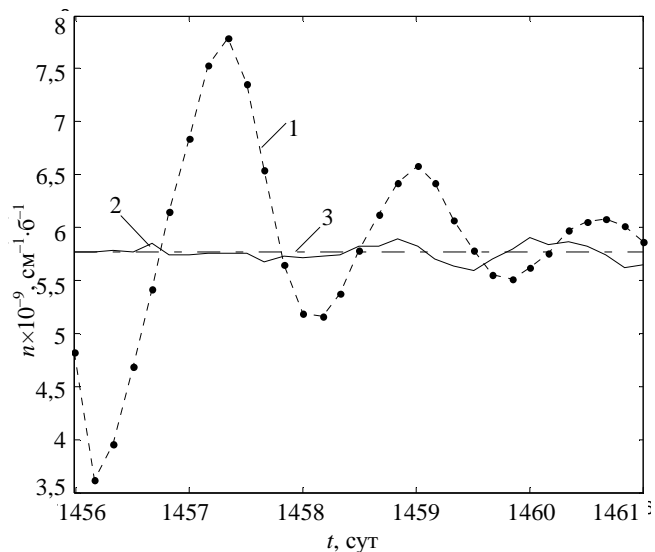


Рис. 2. Зависимость от времени концентрации ^{135}Xe в нижней части центральной ТВС реактора ВВЭР-1000 при расчете с шагом 4 часа: —●— — явная схема; — — предиктор-корректор; - - - значение на момент времени 1456 суток

построение устойчивой схемы решения уравнений изменения ядерного состава в рассматриваемом случае (схема предиктор-корректор имеет свои недостатки, которые будут рассмотрены ниже). Но прежде всего необходимо привести сами уравнения. Сохраняя по возможности обозначения, используемые в [3] и [5], эти уравнения можно записать следующим образом:

$$\frac{d}{dt}n_{\alpha} = \Sigma_{\alpha}(n)n_{\alpha}, \quad (1)$$

где индекс α нумерует пространственные элементы системы, вектор n_{α} представляет ядерные концентрации в пространственном элементе, n является объединением всех этих векторов, а компоненты матрицы Σ_{α} (в [3] и [5] используется обозначение $\Sigma_{\alpha} = \Lambda_{\alpha} + \Omega_{\alpha}$) представляют собой скорости наработок, которые определяются как функционалы на решении некоторой задачи нахождения стационарных физических характеристик рассматриваемой системы с «замороженным» ядерным составом. В частности, здесь, как и в [3], в этом качестве будет рассматриваться условнокритическая нейтронная задача. Для уравнений (1) решается задача Коши с дополнительным условием постоянства тепловой мощности системы. Упомянутые выше схемы решения уравнений (1) с шагом Δt можно записать следующим образом. Явная схема:

$$n_{\alpha}(t + \Delta t) = e^{\Sigma_{\alpha}(n(t))\Delta t} n_{\alpha}(t). \quad (2)$$

Предиктор-корректор:

$$\begin{aligned} \tilde{n}_{\alpha} &= e^{\Sigma_{\alpha}(n(t))\Delta t} n_{\alpha}(t), \\ n_{\alpha}(t + \Delta t) &= e^{\left(\Sigma_{\alpha}(n(t)) + \Sigma_{\alpha}(\tilde{n})\right)\frac{\Delta t}{2}} n_{\alpha}(t). \end{aligned} \quad (3)$$

Интересно рассмотреть применимость данных схем на упрощенной задаче, решение которой можно получить аналитически.

Аналитическое решение простой задачи

Простую задачу, качественно описывающую основные аспекты выгорания топлива в течение небольшого промежутка времени, можно поставить следующим образом. Пусть система состоит из двух пространственных элементов, состав в каждом из которых представляется двумя ядрами: $n = (X, Y)$ (X в некотором смысле аппроксимирует свойства ^{135}Xe , а Y – делящихся ядер). Концентрации Y равны и не меняются во времени. Энерговыделение пропорционально Y и некоторой функции от нейтронного потока, который в свою очередь зависит от разности концентраций X следующим образом:

$$\begin{aligned} w_1 &\sim (1 - g(X_1 - X_2))Y_1, \\ w_2 &\sim (1 - g(X_2 - X_1))Y_2, \end{aligned} \quad (4)$$

где $g(X)$ – нечетная возрастающая функция (наличие отрицательной обратной связи), удовлетворяющая условию $|g(X)| < 1$. Скорость наработки X на Y пропорциональна энерговыделению, и, кроме того, X распадается с постоянной распада λ . Таким образом, уравнения, определяющие изменение компонент X , имеют вид

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\lambda X_1 + \frac{v}{2} [1 - g(X_1 - X_2)] \\ -\lambda X_2 + \frac{v}{2} [1 - g(X_2 - X_1)] \end{pmatrix}, \quad (5)$$

где v – некоторый множитель, согласно (4) пропорциональный мощности системы. Как можно видеть, решение системы (5) при больших временах стремится к стационарному состоянию

$X_1 = X_2 = \frac{v}{2\lambda}$, которое асимптотически устойчиво по Ляпунову. Для решения численными методами

удобно перейти к переменным $X_1 + X_2$ и $X_1 - X_2$. Так как схемы (2) и (3) инвариантны относительно линейных преобразований, такой переход не изменяет свойства этих схем. Но, как можно видеть из (5), $X_1 + X_2$ удовлетворяет линейному уравнению и в любой из схем решается точно. В то же время для $Z = X_1 - X_2$, с использованием обозначения

$$f(Z) = \frac{v}{\lambda} g(Z), \quad (6)$$

справедливо нелинейное уравнение

$$\frac{dZ}{dt} = -\lambda(Z - f(Z)),$$

численные решения которого с постоянным шагом Δt имеют вид:

– явная схема

$$Z_{k+1} = e^{-\lambda\Delta t} Z_k - (1 - e^{-\lambda\Delta t}) f(Z_k); \quad (7)$$

– предиктор-корректор

$$\begin{aligned} Z_{k+1} &= e^{-\lambda\Delta t} Z_k - \\ &- \frac{1 - e^{-\lambda\Delta t}}{2} \left(f(Z_k) + f \left[e^{-\lambda\Delta t} Z_k - (1 - e^{-\lambda\Delta t}) f(Z_k) \right] \right). \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь для удобства обозначено $Z_k \equiv Z(k\Delta t)$. Для простоты удобно рассмотреть наиболее критический случай $\lambda\Delta t \gg 1$, для которого (6) и (7) принимают вид:

– явная схема

$$Z_{k+1} = -f(Z_k). \quad (9)$$

– предиктор-корректор

$$Z_{k+1} = \frac{1}{2} (f[f(Z_k)] - f(Z_k)). \quad (10)$$

При большом числе шагов эти схемы можно рассматривать как применение метода простой итерации [6] к решению уравнения $Z = \varphi(Z)$, где $\varphi(Z) = -f(Z)$ или $\varphi(Z) = \frac{1}{2} (f[f(Z)] - f(Z))$.

Как известно, необходимым условием [6] сходимости к корню Z_0 является $|\varphi'(Z_0)| < 1$. При анализе поведения схем, чтобы не усложнять задачу, будет считаться: $f'(Z)$ монотонно убывает на положительной полуоси. Единственным корнем, имеющим физический смысл, является асимпто-

тическое решение (5), т. е. $Z=0$. Таким образом, при $f'(0) < 1$, учитывая, что условие отрицательной обратной связи, см. выражения (4), дает $f'(Z) \geq 0$, обе схемы сходятся к данному решению. В случае $f'(0) > 1$ явная схема (9) является расходящейся. Но, как можно видеть, в этом случае существуют 2 корня $\pm Z_1$ уравнения $Z = f(Z)$. Причем $f'(Z_1) < 1$. Соответственно, при большом числе шагов последовательность (9) попеременно принимает оба этих значения. Что касается схемы (10), то она сходится к физическому решению при выполнении условия $f'(0)(f'(0)-1) < 2$, или $f'(0) < 2$. В противном случае существуют 2 корня $\pm Z_2$ уравнения $2Z = f(f(Z)) - f(Z)$, которые удовлетворяют соотношению $Z_2 < Z_1$. А последовательность (10) сходится к одному из них.

Таким образом, учитывая, что, согласно (6), производная $f'(0)$ пропорциональна тепловой мощности, можно утверждать, что для каждой схемы существует свое критическое значение мощности, ниже которого получаемое решение является асимптотически верным. Причем с уменьшением шага интегрирования, как можно видеть из (7), (8), это значение увеличивается. При расчете с мощностью выше критической явная схема переходит в колебательный режим. Критическая мощность схемы предиктор-корректор выше, чем для явной. А при превышении этой мощности схема предиктор-корректор дает нефизичное решение.

Последнее представляется наиболее неприятным, так как, если не обращать внимание на нарушение симметрии или рассматривать изначально несимметричную задачу, выявить ошибку будет затруднительно. Таким образом, с одной стороны, схема предиктор-корректор имеет большую область применимости, но с другой – по поведению решения сложно понять, что условия задачи находятся вне этой области.

Решение методической задачи

При переходе к более реалистичным системам качественная картина не меняется. Разве что в схеме предиктор-корректор могут появиться колебательные режимы. Так по рассмотренному выше расчету реактора ВВЭР-1000 (см. рис. 1) можно сделать вывод, что использование явной

схемы в этом случае некорректно. А досчет с малым шагом, результаты которого представлены на рис. 2, показывает, что схема предиктор-корректор дает правильное решение. Хотя расчеты реактора дают информацию о применимости расчетной схемы, для этого лучше использовать более простую и, соответственно, менее затратную модель. Например, рассматриваемую в [3] модель твэла и представляющую собой два вложенных соосных цилиндра: внутренний, диаметром 0,757 см и высотой 353 см, содержащий урановое топливо, и внешний, с водой. В качестве тепловой мощности использовалось значение 0,04345 МВт/кгU. Более подробное описание представлено в [3].

Кроме простоты, к методическим достоинствам этой модели можно отнести ее симметрию относительно поворота оси цилиндра и большую чувствительность к грубости схемы расчета, обусловленную малостью отношения радиуса цилиндра к его высоте. Соответственно, следует ожидать, что схема, применимая для расчета данной модели, будет применима и для расчета всего реактора. При проведении расчетов, в дополнение к [3], топливный цилиндр разбивался по высоте на 10 равнообъемных пространственных элементов, в каждом из которых содержался свой ядерный состав (на начальный момент все составы одинаковы). Концентрации ^{135}Xe в нижней части топлива, полученные решением этой задачи по схемам (2) и (3), на время до 1000 суток представлены на рис. 3.

Приведенные здесь результаты, полученные по явной схеме с шагом в 1 сутки, используются в качестве реперного решения. Впрочем, если при-

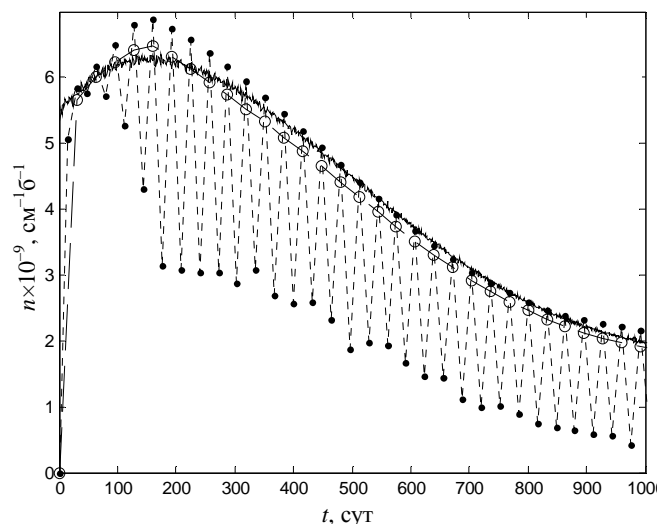


Рис. 3. Зависимость от времени концентрации ^{135}Xe в нижней части топлива, полученная при расчете методической задачи: — — явная схема с $\Delta t = 1$ сут; —●— — явная схема с $\Delta t = 16$ сут; —○— — предиктор-корректор с $\Delta t = 32$ сут

смотреться, это решение имеет колебательный характер. Но амплитуда этих колебаний небольшая, и потому ими можно пренебречь.

На рис. 3 сравниваются схема явная 2 с шагом $\Delta t = 16$ сут и схема предиктор-корректор 3 с шагом $\Delta t = 32$ сут, число нейтронно-физических расчетов в которых одинаково. Как можно видеть, явная схема приводит к значительным колебаниям концентрации, аналогичным тем, что наблюдаются на рис. 1. В то же время схема предиктор-корректор дает достаточно гладкое решение, немного отличающееся от реперного.

Что стоит за этим отличием, можно понять, рассмотрев эволюцию актинидов, которая, впрочем, представляет основной практический интерес. Так как основным источником актинидов является ^{238}U , показательным представляется сравнить его концентрации, рассчитанные с использованием разных методов. Так на рис. 4 приводятся зависимости этих концентраций в нижней части топлива от времени, полученные по схеме 3, с использованием размеров поколения 12800 и 25600 точек деления при расчете нейтронистики. Разные размеры использовались для того, чтобы попытаться выявить наличие нефизичных решений, аналогичных тем, которые возникают в рассмотренной выше упрощенной модели. Как можно видеть на рис. 4, решения с разными размерами поколений лежат по разные стороны от реперного. Если рассмотреть аналогичные величины для верхней части, то кривые, полученные с использованием разных размеров поколений, поменяются местами.

Это можно видеть в табл. 1, где приведены значения расхода, т. е. разности начальной и конечной концентраций ^{238}U в нижней и верхней частях системы на конец расчета. Адаптивная схема будет рассмотрена ниже, а здесь интересно сравнить первые 7 расчетов. Как можно видеть, расход урана, полученный по явной схеме, хорошо совпадает для верхней и нижней областей, что согласуется с симметрией задачи. В то же время значения этой величины для различных реализаций схемы предиктор-корректор отличаются друг от друга. Но при этом хорошо совпадают между собой значения в нижней части системы для расчета 4 и в верхней части для расчета 7. И наоборот. При этом значения величин, полученных в расчетах 4, 5 и 6, хорошо совпадают между собой, т. е. влияние статистических погрешностей невелико. Расчеты 2 и 3, проведенные с другим временным шагом, дают результаты, отличающиеся немного сильнее, но принципиально картина не меняется.

Из данных, представленных в табл. 1, можно сделать вывод, что в рассматриваемой задаче использование схемы предиктор-корректор дает одно из двух нефизичных решений. Причем уменьшение временного шага не приводит к улучшению ситуации. Само физическое решение в этой схеме получается неустойчивым, как и в рассмотренной аналитически упрощенной модели. Поэтому возникает вопрос о построении физически устойчивой схемы решения.

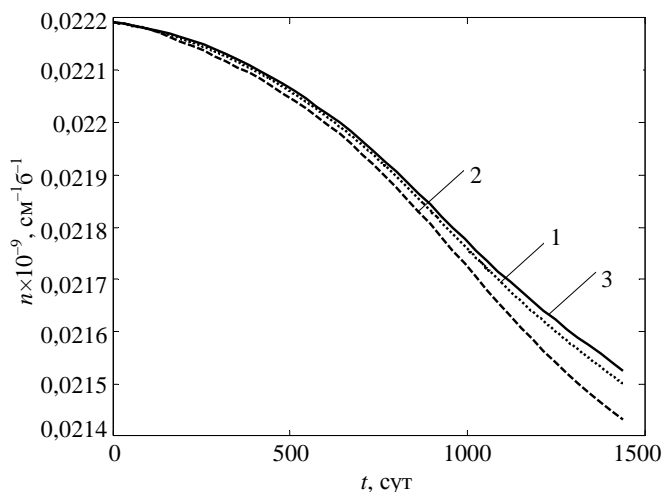


Рис. 4. Зависимость от времени концентрации ^{238}U в нижней части топлива, полученная при расчете методической задачи: 1 – явная схема с $\Delta t = 1$ сут; 2 – предиктор-корректор с $\Delta t = 32$ сут и размером поколения 12800 точек деления; 3 – предиктор-корректор с $\Delta t = 32$ сут и размером поколения 25600 точек деления

Таблица 1

Расход ^{238}U ($10^{-4} \text{ см}^{-1} \cdot \text{б}^{-1}$) на момент времени 1440 сут

Область системы	Расчет							
	1	2	3	4	5	6	7	8
Верх	6,91	6,58	7,41	6,66	6,64	6,64	7,58	6,88
Низ	6,91	7,70	6,62	7,57	7,61	7,61	6,66	6,89

1. схема (2), шаг 1 сут, размер поколения 12800, число поколений 1000.
2. схема (3), шаг 8 сут, размер поколения 12800, число поколений 1000.
3. схема (3), шаг 16 сут, размер поколения 12800, число поколений 1000.
4. схема (3), шаг 32 сут, размер поколения 12800, число поколений 1000.
5. схема (3), шаг 32 сут, размер поколения 12800, число поколений 2000.
6. схема (3), шаг 32 сут, размер поколения 12800, число поколений 3000.
7. схема (3), шаг 32 сут, размер поколения 25600, число поколений 1000.
8. адаптивная схема, максимальный шаг 32 сут.

Равновесный состав

При построении устойчивой схемы, еще раз следует отметить, дополнительная к локальной жесткость возникает из-за слабой связанности системы и наличия ядер, которые, с одной стороны, оказывают сильное влияние на конфигурацию нейтронного поля, а с другой стороны, их концентрации сильно меняются под воздействием этого поля. Поэтому удобно разделить все ядра в заданном пространственном элементе на два класса: короткоживущие и долгоживущие. Величины, относящиеся к первому из них, будут обозначаться индексом 1, ко второму – 2. Для проведения разделения определяется характерное время установления равновесия τ , и короткоживущими считаются ядра, среднее время жизни в реакторе которых меньше этого значения, т. е. когда справедливо

$$-\Sigma_{\alpha}^{ii}(n)\tau > 1. \quad (11)$$

Соответственно, остальные являются долгоживущими. Саму матрицу скоростей наработок ядер можно представить в следующем виде:

$$\Sigma_{\alpha}(n) = \begin{pmatrix} \Sigma_{11,\alpha}(n) & \Sigma_{12,\alpha}(n) \\ \Sigma_{21,\alpha}(n) & \Sigma_{22,\alpha}(n) \end{pmatrix}. \quad (12)$$

В соответствии с таким представлением вектор концентраций в данном пространственном элементе имеет вид $n_{\alpha} = (n_{1,\alpha}, n_{2,\alpha})$. Свойства решений (1) удобно рассматривать с точки зрения сингулярно-возмущенных систем уравнений, теория которых достаточно хорошо разработана (см., например, [7, 8]), т. е. рассматривать систему уравнений с малым параметром ε :

$$\begin{aligned} \varepsilon \frac{dn_{1,\alpha}}{dt} &= \Sigma_{11,\alpha}(n)n_{1,\alpha} + \Sigma_{12,\alpha}(n)n_{2,\alpha}; \\ \frac{dn_{2,\alpha}}{dt} &= \Sigma_{21,\alpha}(n)n_{1,\alpha} + \Sigma_{22,\alpha}(n)n_{2,\alpha}. \end{aligned} \quad (13)$$

Принимая во внимание (11) и предполагая, что спектр Σ_{11} определяется диагональными элементами матрицы, т. е. лежит в области $-\tau^{-1}$ и ниже, а также предполагая достаточную гладкость функций, можно считать, что (13) удовлетворяет условиям теоремы Тихонова, формулировка и доказательство которой приводятся в [7]. Одним из следствий [8] является то, что при малых ε существует притягивающее интегральное многообразие системы (13). Любое решение этой системы асимптотически приближается к этому многообразию

с характерным временем, не большим τ/ε . А само оно лежит вблизи интегрального многообразия невозмущенной системы (т. е. при $\varepsilon = 0$), которое является решением следующего, в общем случае нелинейного уравнения

$$n_{1,\alpha} = -\Sigma_{11,\alpha}^{-1}(n)\Sigma_{12,\alpha}(n)n_{2,\alpha}. \quad (14)$$

Вопрос о справедливости указанного следствия в случае $\varepsilon = 1$, когда (13) переходит в (1), остается открытым. Некоторым его обоснованием может считаться предположение о том, что спектр Σ_{11} лежит ниже спектра Σ_{22} , которое с учетом (11) представляется разумным. Но, скорее всего, ответ может быть получен только по результатам численного эксперимента. Эти результаты будут представлены ниже. Здесь можно отметить, что притягивающее интегральное многообразие упрощенной задачи (5) определяется уравнением $X_1 = X_2 = \frac{\nu}{2\lambda}$, которое имеет вид (14).

При условии существования данного интегрального многообразия, параметры начинающихся на нем траекторий системы (1) изменяются с характерным временем, большим τ . Таким образом, любая траектория условно делится на две последовательных части: первая – быстрое приближение к многообразию (в терминологии сингулярно-возмущенных систем – прохождение пограничного слоя), вторая – сравнительно медленное движение вблизи этого многообразия. Первая часть характеризуется изменением короткоживущей компоненты, при практическом постоянстве долгоживущей, а вторая определяется эволюцией последней. Учитывая такое поведение, а также условие принадлежности к притягивающему интегральному многообразию, которое имеет вид системы уравнений типа (14), можно рассматривать концентрации короткоживущих ядер как равновесные. Такие состояния называют, соответственно, равновесными. Колебания при численном интегрировании (1) с большим временным шагом получаются из-за «проскакивания» равновесного состояния. Соответственно, система все время находится в пограничном слое, и основные компоненты скорости изменения параметров направлены в сторону притягивающего многообразия. Такое поведение хорошо видно на рис. 1 и 3, где показаны проекции траектории ^{135}Xe .

В том случае, если интерес представляют большие времена, намного превышающие характерное время приближения к рассматриваемому многообразию, можно использовать двухэтапную

схему. Первый этап представляет нахождение точки вблизи многообразия, а второй – движение вдоль него с использованием явной схемы. Решение задачи первого этапа будет искажаться в виде, аналогичном уравнению (14):

$$n_{1,\alpha} = \pi_\alpha(n)n_{2,\alpha}.$$

Впрочем в дальнейшем будет удобнее другое, равносильное представление:

$$n_\alpha = P_\alpha(n)n_\alpha, \text{ где } P_\alpha(n) = \begin{pmatrix} 0 & \pi_\alpha(n) \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (15)$$

Как можно видеть, P_α , при заданном ядерном составе всей системы, в указанном пространственном элементе является проектором на некоторое состояние. При этом решением системы уравнений (15) является равновесный состав, определяемый долгоживущей компонентой. Для построения приближенного решения – вычисления действия проектора – удобно сделать несколько приближений, применимость которых будет показана сравнением с реперным расчетом. В качестве первого будет использоваться условие линеаризации, которое состоит в пренебрежении изменением компонент матрицы при движении по искомому многообразию. В контексте определения равновесного состава это приближение кажется не слишком грубым, так как характерное время изменения компонент при указанном движении предполагается намного меньшим, чем τ . В частности, если концентрации долгоживущих ядер не меняются, то первое приближение является точным. Фактически оно сводится к рассмотрению уравнения (1) как линейного. В таком случае, как показано, например, в [8], проектор (15) удовлетворяет следующему уравнению:

$$\Sigma_\alpha P_\alpha = P_\alpha \Sigma_\alpha P_\alpha. \quad (16)$$

Здесь, учитывая сделанное приближение, явно не показывается зависимость от состава. Однако построение процедуры решения этого уравнения затруднительно. Поэтому удобно еще немного огрубить постановку задачи. В качестве второго приближения принимается пренебрежение наработкой долгоживущих ядер на короткоживущих, т. е.

$$\Sigma_{21,\alpha} = 0. \quad (17)$$

Прямым вычислением в этом случае можно показать, что $P_\alpha \Sigma_\alpha P_\alpha = P_\alpha \Sigma_\alpha$ и, соответственно, уравнение (16) становится линейным. Его удобно записать в покомпонентном виде

$$\begin{pmatrix} 0 & \Sigma_{11,\alpha}\pi + \Sigma_{12,\alpha} \\ 0 & \Sigma_{22,\alpha} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \pi\Sigma_{22,\alpha} \\ 0 & \Sigma_{22,\alpha} \end{pmatrix}. \quad (18)$$

Для решения необходимо отметить, что согласно [3, 5] $\Sigma_\alpha = \Lambda_\alpha + \Omega_\alpha$, где Λ_α имеет вид, позволяющий вычислять любые функции по алгоритмам из работы [9], а Ω_α рассматривать как малую добавку. При этом в рамках приближения (17) следует считать, что $\Lambda_{21,\alpha} = \Omega_{21,\alpha} = 0$. В соответствии с таким разложением проектор (15) удобно представить в виде ряда

$$P_\alpha = \sum_k P_\alpha^{(k)}, \quad (19)$$

где $P_\alpha^{(k)}$ по отношению к $P_\alpha^{(k-1)}$ является величиной того же порядка малости, что Ω_α по отношению к Λ_α .

Здесь уместно сделать третье приближение. Для этого необходимо отметить, что $\|\Sigma_{22,\alpha}\| \ll \|\Sigma_{11,\alpha}\|$ и, соответственно, компоненты правой части уравнения (18) можно рассматривать как малую добавку по отношению к слагаемым, стоящим в левой. В частности, если пренебречь правой частью, то получится постановка невозмущенной задачи, которая сама является неплохим приближением. В связи с этим правую часть можно приблизить членами нулевого порядка.

С учетом сделанных приближений уравнение для нахождения проектора принимает вид

$$\Sigma_\alpha P_\alpha = P_\alpha^0 \Lambda_\alpha. \quad (20)$$

Подставляя в это уравнение ряд (19) и выделяя члены одного порядка малости, можно получить рекуррентные соотношения:

$$\Lambda_\alpha P_\alpha^{(0)} = P_\alpha^{(0)} \Lambda_\alpha; \quad (21)$$

$$\Lambda_\alpha P_\alpha^{(k)} = -\Omega_\alpha P_\alpha^{(k-1)}, \quad k > 0. \quad (22)$$

Можно показать, что решение уравнения (21) в классе операторов вида (15) выглядит как

$$P_\alpha^{(0)} = \sigma_1(\Lambda_\alpha), \quad (23)$$

где скалярная функция σ_1 , с учетом (11), определяется следующим образом:

$$\sigma_1(\lambda) = \begin{cases} 1 & , -\lambda\tau \leq 1 \\ 0 & , -\lambda\tau > 1 \end{cases}. \quad (24)$$

Для разрешения (22), принимая во внимание, что матрица Λ_α не обратима, можно найти матрицу $\tilde{\Lambda}_\alpha$, которая, с одной стороны, удовлетворяет условию

$$\tilde{\Lambda}_\alpha \Lambda_\alpha P_\alpha^{(k)} = P_\alpha^{(k)},$$

а с другой – позволяет разрешить уравнение (22). Можно видеть, что при условии (17) этим требованиям удовлетворяет матрица

$$\tilde{\Lambda}_\alpha = \sigma_2(\Lambda_\alpha), \quad (25)$$

где

$$\sigma_2(\lambda) = \begin{cases} 0, & -\lambda\tau \leq 1 \\ \lambda^{-1}, & -\lambda\tau > 1 \end{cases}. \quad (26)$$

С использованием матриц (23) и (25) члены ряда (19) представляются аналитически:

$$P_\alpha^{(k)} = (-\sigma_2(\Lambda_\alpha)\Omega_\alpha)^k \sigma_1(\Lambda_\alpha). \quad (27)$$

Для оценки сходимости ряда (19) следует отметить, что правила упорядочивания, рекомендуемые в [3] для тепловых реакторов, определяют значение $\|\Omega_\alpha\| \approx 1/t$, где t – порядка нескольких лет. В то же время, принимая во внимание (11) и (26), можно оценить норму (25): $\|\tilde{\Lambda}_\alpha\| \approx \tau$. Если выбирать τ порядка суток, что соответствует характерному времени изменения концентрации ксенона, то можно считать, что $\|\sigma_2(\Lambda_\alpha)\Omega_\alpha\| < \frac{\tau}{t} \ll 1$. Соответственно, ряд (19) абсолютно сходится, причем достаточно быстро.

Для практических расчетов представляется удобным задавать число членов этого ряда, пренебрегая остатком. Исходя из вышеприведенной оценки нормы и из результатов методических расчетов, можно утверждать, что для реакторов типа ВВЭР не имеет смысла делать это значение более пяти.

Алгоритм вычисления проектора при заданных скоростях наработок может быть представлен следующим образом.

Алгоритм 1. Вычисление $n_\alpha = P_\alpha n_\alpha$.

Задается: m – число членов ряда (19).

Определяется: n – действие проектора на текущий состав.

1. $k = 0$.
2. $n_\alpha = \sigma_1(\Lambda_\alpha)n_\alpha$, $n' = n$.
3. $n'_\alpha = -\sigma_2(\Lambda_\alpha)\Omega_\alpha n'_\alpha$, $n_\alpha = n_\alpha + n'_\alpha$.
4. $k = k + 1$. Если $k < m$, то $k = 3$.

Используемые здесь функции от матриц предполагается вычислять с помощью методов, предлагаемых в [9]. При построении данного алгоритма были использованы приближения. В качестве проверки их применимости можно сравнить решение эволюции состава, полученное с малым временным шагом, с действием на него проектора. Для этого использовалась однообластная модель из [3]. При расчетах по этой модели использовался следующий сценарий: начиная со свежего состояния топлива, рассчитывалось 10 шагов эволюции состава с временным интервалом в одни сутки. За это время концентрация ^{135}Xe устанавливается в равновесное состояние. После этого вычислялось действие проектора на текущий состав, с разными значениями τ . Результаты приводятся в табл. 2, где $\tau = 0$ соответствует равновесному, т. е. полученному в прямом расчете, значению концентрации. Здесь же приводятся и относительные отклонения от него.

Таблица 2

Зависимость концентрации ^{135}Xe от характерного времени

Параметр	τ , сут			
	0	1	5	10
$n \cdot 10^{-9} \text{ см}^{-1} \cdot \text{б}^{-1}$	6,9631	6,9619	6,9615	6,9614
Δn , %	0	0,017	0,023	0,024

Как можно видеть в табл. 2, относительное отклонение концентрации основного поглотителя составляет сотые доли процента. Можно утверждать, что это значение является мерой тех приближений, которые были сделаны для построения алгоритма 1. Кроме того, по данным табл. 2 видно, что использование разных допустимых значений τ приводит к отклонению одного порядка, т. е. выбор этого значения из достаточно широкого диапазона не приводит существенному изменению результата действия проектора. Впрочем это утверждение касается ядер, время жизни которых меньше минимального значения τ .

Алгоритм 1 используется при вычислении равновесного состава, которое состоит в решении уравнения (15). Наиболее простым для численной реализации является метод простой итерации

$$n_\alpha^{(k)} = P_\alpha \left(n^{(k-1)} \right) n_\alpha^{(k-1)}, \quad (28),$$

где в качестве начального приближения используется текущий ядерный состав. При использовании этого метода для определения момента окончания итераций необходимо вычислять расстояние меж-

ду различными состояниями системы. Этот момент наступает тогда, когда расстояние становится меньше δ_1 – задаваемой погрешности определения равновесного состава. В частности, в приведенных ниже расчетах использовалось понятие расстояния [5], с единичным весом каждого пространственного элемента. Здесь следует также отметить, что для определения нейтронно-физических характеристик в расчетах использовалась программа ПРИЗМА [2], реализующая один из методов статистического моделирования. Это обстоятельство вносит некоторые дополнительные трудности, которые обсуждаются в [10]. Поэтому в расчетах для реализации метода простой итерации использовался алгоритм, предлагаемый в указанной работе.

Адаптивная схема

С применением методики оценки равновесных концентраций можно построить схему численного интегрирования системы уравнений (1) на больших временных интервалах, слабо чувствительную к жесткости этой системы. В основе схемы лежит построение траектории вдоль притягивающего интегрального многообразия в пренебрежении движением в пограничном слое. Последовательность действий при этом выглядит следующим образом. Сначала определяется равновесный состав. Потом вычисляется его изменение в течение определенного временного интервала. Если при этом состав сильно отличается от своего равновесного значения, то временной интервал уменьшается, и действия повторяются с вычисления изменения. Эту схему удобно записать в виде следующего алгоритма.

Алгоритм 2. Адаптивная схема интегрирования уравнений (1).

Задается: δ_1 – погрешность определения равновесного состава, δ_2 – отклонение от равновесности на шаге, Δt_2 – удвоенный максимальный шаг по времени.

Определяется: Δt – временной интервал, n – состав на конец этого интервала.

1. Расчет равновесного состава n с погрешностью δ_1 и оценка $\Sigma_\alpha = \Lambda_\alpha + \Omega_\alpha$.

2. $\Delta t = \Delta t_2$.

3. $\Delta t = \Delta t/2$.

4. Расчет изменения состава $n'_\alpha = e^{\Sigma_\alpha \Delta t} n_\alpha$.

5. Оценка $\Sigma_\alpha = \Lambda_\alpha + \Omega_\alpha$.

6. Расчет действия проектора по алгоритму 1: $n''_\alpha = P_\alpha n'_\alpha$.

7. Если $\Delta t \leq \tau$ или $\rho(n'', n') > \delta_2$, то $k = 3$.

8. $n = n''$.

Здесь на шаге 7 используется естественное ограничение на величину временного интервала, связанное с пренебрежением процессами в пограничном слое. На этом шаге расстояние $\rho(n'', n')$ вычисляется, например, с использованием метрики, предлагаемой в [5]. Следует отметить, что шаги 5–7 фактически представляют одну итерацию при реализации соотношения (28) и, соответственно, один этап при реализации шага 1 алгоритма 2 при переходе к следующему временному интервалу. Таким образом, в этом случае дополнительные вычислительные затраты на проверку равновесности фактически отсутствуют.

Предложенная схема является адаптивной в том смысле, что при большой кривизне притягивающего многообразия, когда прямолинейная траектория далеко уходит от него, происходит уменьшение временного шага таким образом, чтобы нивелировать указанное обстоятельство. Алгоритм 2 требует задания двух погрешностей. При этом видно, что при условии $\delta_2 > \delta_1$ алгоритм является сходящимся, даже без использования ограничения $\Delta t > \tau$.

С использованием адаптивной схемы было проведено несколько расчетов методической задачи. В частности, на рис. 5 приведены значения концентрации ^{135}Xe в нижней части топлива, рас-

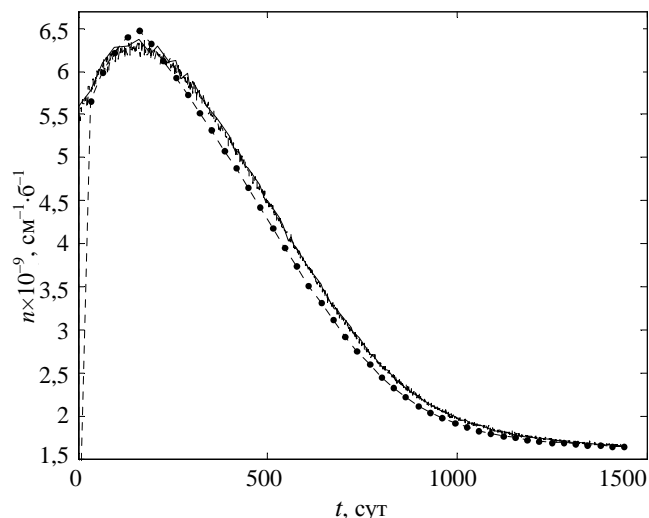


Рис. 5. Зависимость от времени концентрации ^{135}Xe в нижней части топлива, полученная при расчете методической задачи: - - - - явная схема с $\Delta t = 1$ сут; -●- - предиктор-корректор с $\Delta t = 32$ сут; — - адаптивная схема с $\tau = 4$ сут

считанные с использованием разных схем. Здесь можно видеть, что адаптивная схема, в отличие от схемы предиктор-корректор, дает решение, практически не отличающееся от реперного. Соответственно, не получается несимметричного нефизичного решения, как это видно в столбце 6 табл. 1. При построении адаптивной схемы использовалось $\tau = 4$ сут. В соответствии с этим значением подбирались $\delta_1 = 10^{-7}$, $\delta_2 = 5 \times 10^{-7}$ таким образом, чтобы траектория не слишком удалялась от притягивающего многообразия. Практически – чтобы отсутствовали сильные колебания концентраций основных ядер.

При проведении этих расчетов использовалось $\tau = 4$ сут, хотя, на первый взгляд, казалось бы, что для усреднения ксеноновых колебаний достаточно значения этого параметра в 1 сут. Однако расчет, проведенный с таким значением, результаты которого приводятся на рис. 6, показал, что в этом случае, при большой глубине выгорания, возникает колебательный режим. Его можно видеть на рис. 7, где приводятся значения концентрации ^{239}Pu , полученные в тех же расчетах. Здесь можно видеть, что колебания возникают после достижения стационарной концентрации этого ядра. Исходя из этого, можно предположить, что причина данного явления та же, что у существования «нептуниевой ямы» [1], и связана с неравновесностью ^{239}Np . Учитывая, что время жизни в реакторе этого изотопа в основном определяется его распадом и составляет примерно 3,4 сут, значение $\tau = 4$ сут является достаточным для сглаживания нептуниевых колебаний. Впрочем для проверки этого предположения были проведены расчеты

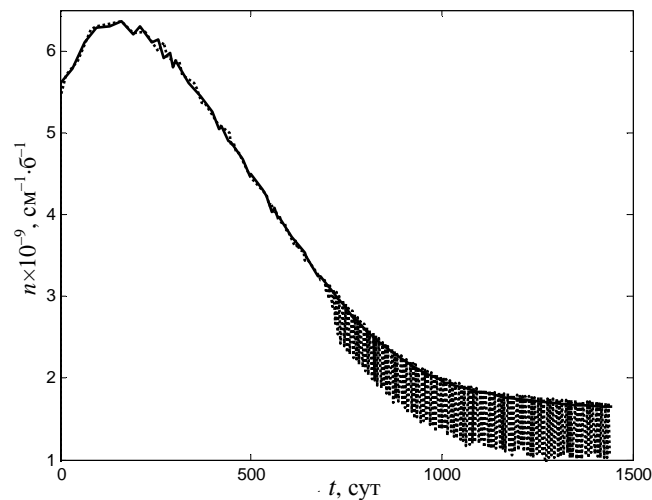


Рис. 6. Зависимость от времени концентрации ^{135}Xe в нижней части топлива, полученная при расчете методической задачи по адаптивной схеме (--- $\tau = 1$ сут; — $\tau = 4$ сут)

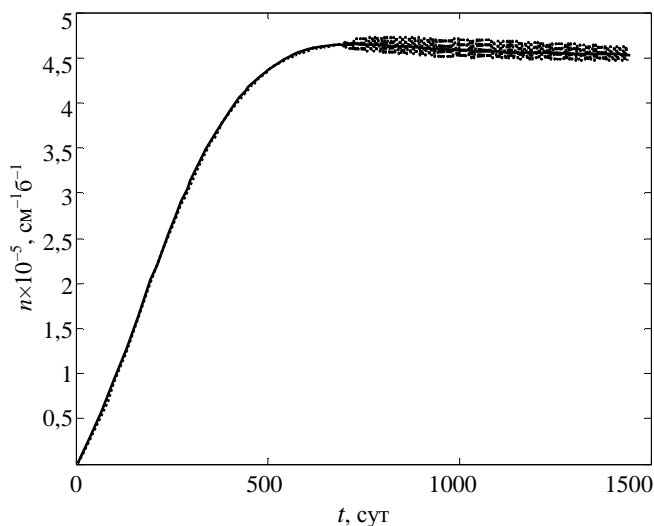


Рис. 7. Зависимость от времени концентрации ^{239}Pu в нижней части топлива, полученная при расчете методической задачи по адаптивной схеме (--- $\tau = 1$ сут; — $\tau = 4$ сут)

с τ , равным 3,37 и 3,42 сут. Результаты практически совпали с τ , равным 1 и 4 сут соответственно, и потому не приводятся. Таким образом, предположение о роли ^{239}Np можно считать справедливым. Соответственно, чтобы обеспечить его равновесность, при проведении расчетов следует выбирать τ больше времени жизни этого изотопа.

Заключение

Как показывают результаты методических расчетов, схемы интегрирования – явная (2) и предиктор-корректор (3) – в некоторых случаях, при использовании больших временных шагов, приводят к нефизичным результатам. В этих же условиях результаты, полученные по адаптивной схеме, описанной алгоритмом 2, согласуются с реперными, полученными интегрированием с малым шагом. Таким образом, адаптивную схему можно применять для интегрирования уравнений выгорания ядерного топлива в течение больших временных промежутков. Недостатком этой схемы можно считать необходимость задания двух погрешностей, значение которых неочевидно из физических соображений. Их выбор делается подбором, на основе методических расчетов. Другим недостатком являются большие вычислительные затраты, которые требуются для нахождения равновесного состояния. В частности, проведенные расчеты показали, что число решений условно-критической задачи для адаптивной схемы примерно в пять раз больше, чем для схемы предик-

тор-корректор с $\Delta t = 32$ сут. Хотя в случае использования метода статистического моделирования для решения этой задачи подход, предлагаемый в [10], позволяет снизить вычислительные затраты при проведении итераций, адаптивная схема все равно остается более затратной (в 2–3 раза). Для рассмотренной методической задачи схема предиктор-корректор с $\Delta t = 8$ сут, которая более затратна, чем адаптивная, дает нефизичное решение (табл. 1). Поэтому можно сравнивать явную схему с $\Delta t = 1$ сут и адаптивную. Здесь последняя в несколько раз выигрывает. Однако при расчете ВВЭР, как можно видеть на рис. 1 и 2, использование схемы предиктор-корректор допустимо. При этом она выигрывает по сравнению с адаптивной.

Другая ситуация возникает при решении более сложной задачи, когда при расчете стационарных физических характеристик с «замороженным» ядерным составом требуется учет обратных связей по теплогидравлическим характеристикам. При этом как минимум требуется проведение согласованного нейтронно-физического и теплогидравлического расчета. Схему этого расчета можно построить в виде реализации метода простой итерации для решения системы уравнений, например, как предлагается в [11]. Представляется возможным встроить в эту схему и дополнительный этап (28), который позволит одновременно определять равновесный состав топлива. При этом этот этап не потребует заметных дополнительных вычислительных затрат, так как они в основном связаны с решением условно-критической задачи, что уже делается при выполнении основных этапов. Хотя вопрос об увеличении числа итераций в таком подходе пока остается открытым. Следует также отметить, что в этом случае отпадает вопрос выбора значения δ_1 . Действительно, так как существует сильная связь между распределениями энерговыделения и концентраций короткоживущих ядер, в первую очередь с ^{135}Xe , установление равновесия для этих величин наступает одновременно. Поэтому можно пользоваться одним критерием для прекращения итераций, в частности, предлагаемой в [11] суп-нормой разности температур на последующих итерациях, которая представляется величиной, имеющей прозрачный физический смысл. Учитывая эти обстоятельства, можно предположить, что наиболее эффективным будет использование адаптивной схемы для решения задач выгорания ядерного топлива с учетом обратных связей по теплогидравлическим характеристикам.

Список литературы

1. Галанин А. Д. Введение в теорию атомных реакторов на тепловых нейтронах. – М.: Энергоатомиздат, 1990.
2. 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 // ВАНТ. Сер. Физика ядерных реакторов, 2011. Вып. 4. С. 64–73.
3. Модестов Д. Г. Интегрирование уравнений, описывающих выгорание ядерного топлива // ВАНТ. Сер. Физика ядерных реакторов, 2011. Вып. 3. С. 63–71.
4. Юдкевич М. С. Пакет прикладных программ BURNUP для расчета изотопного состава работающего реактора // ВАНТ. Сер. Физика ядерных реакторов, 2011. Вып. 4. С. 24–28.
5. Модестов Д. Г. Интегрирование уравнений эволюции ядерного состава в постоянных радиационных полях // ВАНТ. Сер. Математическое моделирование физических процессов, 2012. Вып. 1. С. 17–28.
6. Калиткин Н. Н. Численные методы. – М.: Наука, 1978.
7. Васильева А. Б., Бутузов В. Ф. Асимптотические разложения решений сингулярно возмущенных уравнений. – М.: Наука, 1973.
8. Стрыгин В. В., Соболев В. А. Разделение движений методом интегральных многообразий. – М.: Наука, 1988.
9. Модестов Д. Г. Решение уравнений радиоактивного распада // ВАНТ. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2006. Вып. 3. С. 54–58.
10. Модестов Д. Г. Метод простой итерации со стохастической правой частью // Там же. 2013. Вып. 1. С. 59–68.
11. Модестов Д. Г. О построении схемы расчета стационарного состояния реактора при использовании методов статистического моделирования // ВАНТ. Сер. Физика ядерных реакторов, 2013. Вып. 3. С. 112–119.

Контактная информация –

Модестов Дмитрий Геннадьевич,
старший научный сотрудник НТО-2, РФЯЦ-ВНИИТФ,
тел.: 8(35146) 5-47-30,
e-mail: d.g.modestov@vniitf.ru

Статья поступила в редакцию 17.06.2013.

Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика ядерных реакторов, 2013, вып. 3, с. 120–130.