

national Workshop «Computational Experiment in Aeroacoustics» Sept. 24–27, 2014, Svetlogorsk, Russia. P. 123–127.

11. Savill A. M. Some recent progress in the turbulence modelling of by-pass transition / Ed. by R. M. C. So, C. G. Speziale and B. E. Launder // Near-Wall Turbulent Flows, Elsevier, 1993. P. 829.

12. Savill A. M. One-point closures applied to transition / Ed. by M. Hallböck et al. // Turbulence and Transition Modelling, Kluwer, 1996. P. 233–268.

13. Шлихтинг Г. Теория пограничного слоя. М.: Наука, 1974.

14. Probst A., Radespiel R., Wolf C., Knopp T., & Schwamborn D. A Comparison of Detached-Eddy Simulation and Reynolds-Stress Modelling Applied to the Flow over a Backward-Facing Step and an Airfoil at Stall // AIAA Paper N 0920 (2010).

15. Benderskiy L. A., Lyubimov D. A. Investigation of flow parameters and noise of subsonic and supersonic jets using RANS/ILES high resolution method // Proceedings of 29th congress of the International Council of the Aeronautical Sciences. Sept. 7–12, St. Petersburg, Russ., 2014.

16. Bridges J., Clifford A. Brown Parametric Testing of Chevrons on Single Flow Hot Jets // AIAA Paper N 2824 (2004).

## МОДУЛЬ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ РАДИОАКТИВНОГО РАСПАДА В СОСТАВЕ ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА НИМФА

*И. Л. Хархордин, М. Г. Стуккей, В. В. Назима*

ООО «Геостройпроект», г. Санкт-Петербург

Расчет эволюции состава и активности системы, содержащей смесь радиоактивных изотопов, необходим при определении возраста горных пород, исследовании динамики водообмена, прогнозе миграции радиоактивных компонентов в подземных водах. В РФЯЦ-ВНИИЭФ совместно с рядом организаций разрабатывается программный комплекс НИМФА, предназначенный для моделирования фильтрации и многокомпонентного массопереноса в подземных водах [1].

### Основные уравнения

Разработанный модуль R\_DECAY предназначен для моделирования многоступенчатого радиоактивного распада в произвольной изотопной системе, содержащей  $N_p$  родительских радиоактивных изотопов,  $N_d$  дочерних радиоактивных изотопов и  $N_s$  стабильных продуктов распада. Изменения их концентраций во времени описывается системой дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \frac{dN_i}{dt} = -\lambda_i N_i, \\ \frac{dN_j}{dt} = \sum_l \rho_l \lambda_l N_l - \lambda_j N_j, \\ \frac{dN_k}{dt} = \sum_l \rho_l \lambda_l N_l, \end{cases} \quad (1)$$

где  $\rho_l$  – вероятность распада родительского изотопа по соответствующему пути,  $N$  – имеющееся количество атомов радиоактивного изотопа,  $\lambda$  – константа радиоактивного распада. Суммирование

в (1) осуществляется по всем изотопам, распад которых приводит к образованию данного дочернего продукта. Начальные условия имеют вид:

$$\{t = 0 | N_i = N_i^0\}. \quad (2)$$

Количества главных родительских изотопов изменяются в соответствии с решением первых  $N_p$  уравнений системы (1):

$$N(t) = N_0 e^{-\lambda t}, \quad (3)$$

где  $N_0$  – начальная концентрация радиоактивного изотопа,  $t$  – время.

Уравнения для остальных компонентов легко приводятся к виду:

$$\frac{dN_i}{dt} + f(t)N_i = g(t), \quad (4)$$

где  $f(t) = \lambda_i = \text{const}$ , а  $g(t)$  – зависит от начальных концентраций всех родительских компонентов и параметров их распада.

Это – линейное уравнение, решение которого при начальных значениях  $(t_0, N_i^0)$  вид [2]:

$$N(t) = e^{-F} \left( N_i^0 + \int_{t_0}^t g(t) e^F dt \right), \quad (5)$$

где

$$F(t) = \int_{t_0}^t f(t) dt. \quad (6)$$

Далее без уменьшения общности решения мы везде полагаем  $t_0 = 0$ .

С учетом (5, 6) могут быть построены аналитические решения для изменения во времени всех дочерних изотопов. Так, если для первой ступени распада решение имеет вид (3), то для второй ступени оно принимает следующую форму:

$$N_2(t) = B_{1,2} (e^{-\lambda_1 t} - e^{-\lambda_2 t}) + N_2^0 e^{-\lambda_2 t},$$

$$B_{1,2} = \frac{p_2 \lambda_1 N_1^0}{\lambda_2 - \lambda_1}. \quad (7)$$

Для третьей ступени распада аналитическое решение имеет следующий вид:

$$N_3(t) = B_{1,3} (e^{-\lambda_1 t} - e^{-\lambda_3 t}) + B_{2,3} (e^{-\lambda_2 t} - e^{-\lambda_3 t}) + N_3^0 e^{-\lambda_3 t}, \quad (8)$$

где

$$B_{1,3} = \frac{p_3 \lambda_2 B_{1,2}}{\lambda_3 - \lambda_1},$$

$$B_{2,3} = \frac{p_3 \lambda_2}{\lambda_3 - \lambda_2} (N_2^0 - B_{1,2}). \quad (9)$$

Таким образом, аналитическое решение для концентрации произвольного дочернего радиоактивного изотопа имеет вид:

$$N_n(t) = \sum_{k < n} B_{k,n} (e^{-\lambda_k t} - e^{-\lambda_n t}) + N_n^0 e^{-\lambda_n t}, \quad (10)$$

где коэффициенты  $B_{k,n}$  вычисляются следующим образом:

$$k < n-1 \quad B_{k,n} = B_{k,n-1} \frac{p_n \lambda_{n-1}}{\lambda_n - \lambda_k}. \quad (11)$$

$$k = n-1 \quad B_{n-1,n} = \frac{p_n \lambda_{n-1}}{\lambda_n - \lambda_{n-1}} \left( N_{n-1}^0 - \sum_{j=0}^{j < n-2} B_{j,n-1} \right). \quad (12)$$

При наличии слияний нескольких цепей распада при члене  $N_{n-1}^0$  в (12) появляется дополнительный множитель, отражающий вероятность протекания процесса по соответствующему пути и равный произведению вероятностей прохода по всем предыдущим звеньям. Для конечного стабильного продукта расчетная формула имеет вид, аналогичный (12), при условии, что  $\lambda_n = 0$ . При наличии нескольких цепей распада, приводящих к образованию одного и того же дочернего изотопа, их влияние суммируется.

### Вычислительный алгоритм

Чтобы построить аналитические решения для изменения содержаний отдельных изотопов во времени для системы произвольного изотопного состава, необходимо определить все возможные цепи распада. Данная задача решается на основе анализа графа распада, который может содержать ветвления (при распаде изотопа по нескольким направлениям) и слияния цепей распада. Характерные элементы подобных графов для конкретных изотопных систем приведены на рис. 1, а граф для произвольной изотопной системы на рис. 2.

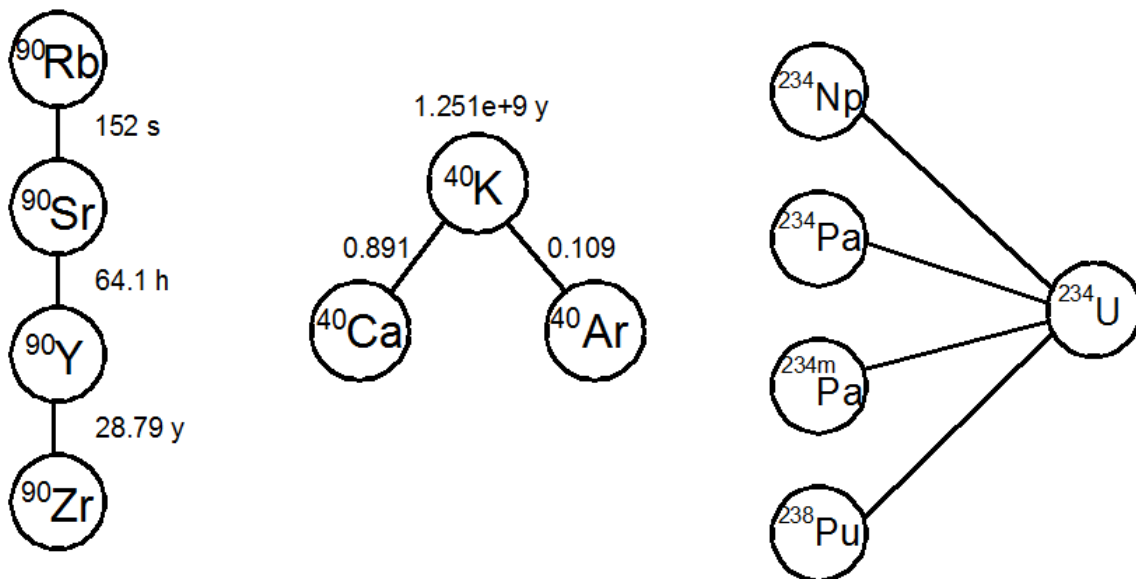


Рис. 1. Характерные элементы графов для описания процессов радиоактивного распада

Алгоритм строится следующим образом. Постановка задачи предполагает, что пользователь может задать только количества изотопов с ненулевым начальным количеством (концентрацией). Таким образом, на первом шаге решения задачи необходимо определить полную изотопную систему, включающую все дочерние радиоактивные и стабильные изотопы.

Далее среди заданных пользователем изотопов ищутся главные родительские изотопы (не являющиеся продуктами распада других изотопов, имеющихся в системе). После этого выполняется построение и анализ всех возможных цепей распада.

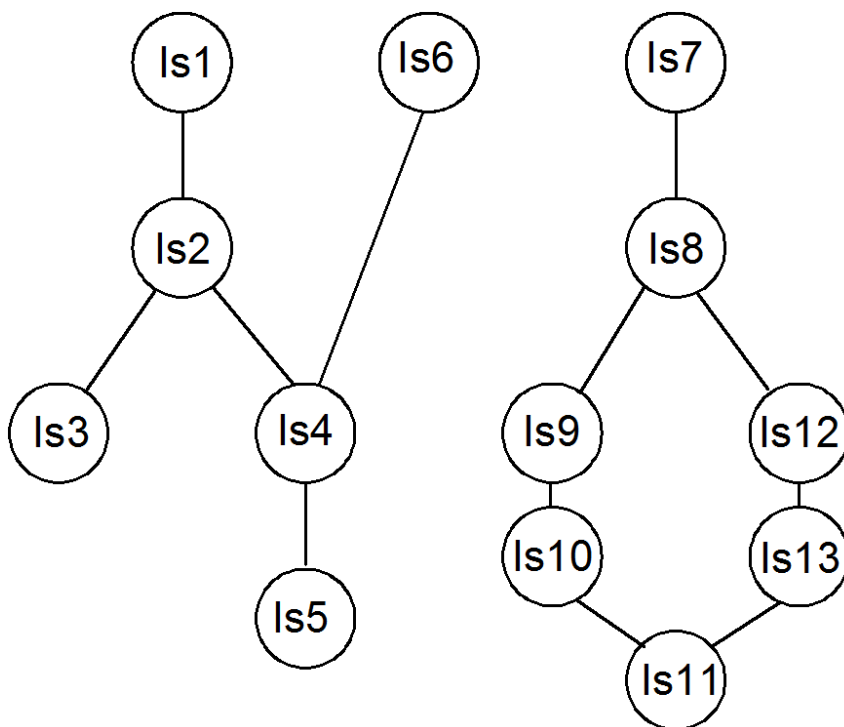


Рис. 2. Пример структуры графа для произвольной изотопной системы

Выделение цепей распада выполняется слева направо и сверху вниз. Так для графа на рисунке 2 могут быть выделены пять цепей распада:

1. **Is1-Is2-Is3**
2. *Is1-Is2-Is4-Is5*
3. **Is6-Is4-Is5**
4. **Is7-Is8-Is9-Is10-Is11**
5. *Is7-Is8-Is12-Is13-Is11*

Каждому участку цепи (изотопу) присваивается статус, зависящий от того, является ли цепь первичной (жирный шрифт), дублирует начальный участок ранее выделенной цепи (курсив), формирует участок, образованный после слияния с ранее выделенной цепью (подчеркнуты). Соответственно, при первичном проходе выполняется инициализация элементов массива, содержащего концентрации изотопов, при проходе дублированных участков концентрации изотопов остаются без изменений, на участках, следующих за слиянием цепей распада, происходит суммирование решений.

### Исходные данные для расчета и база данных по параметрам распада

Исходные данные для расчета изменения во времени концентраций радиоактивных изотопов можно разбить на две группы. К первой группе относятся свойства радиоактивных изотопов, которые поставляются разработчиком ПО в форме соответствующей базы данных. Исходные данные второй группы представляют собой информацию об изотопном составе исследуемой системы. Они содержатся в файле, формируемом пользователем.

Файлы исходных данных сохраняются в текстовом формате и содержат следующие элементы:

- ключевые слова, являющиеся заголовками крупных разделов данных;
- опции – заголовки подразделов, содержащие отдельные параметры;
- {} – ограничивают разделы и подразделы данных;
- [] – ограничивают списки параметров;
- // – начало комментария (до конца строки).

Некоторые ключевые слова и опции приведены в табл. 1, содержащей фрагмент базы данных. Каждое ключевое слово, используемое при описании свойств радионуклидов имеет русский и английский эквиваленты.

База данных содержит информацию о параметрах распада радионуклидов (период полураспада или константа распада) и дочерних продуктах. В настоящий момент база данных содержит информацию по 97 элементам и 1253 изотопам.

Таблица 1

*Фрагмент базы данных по параметрам распада радиоактивных изотопов*

```

base_isotopes_information {
  base_revising_date 22.08.2012
  isotope_data_base_name "rnuclide-1"
}
isotope_decay_properties {
  element Ac {
    .....
    isotope Ac-224 {
      radioactive
      isotope_half_live 2.78 h
      daughter_products [Ra-224, 0.909, Fr-220, 0.091]
    }
    .....
  }
  element Ag {
    isotope Ag-100m {
      radioactive
      isotope_half_live 2.24 m
      daughter_products [Pd-100, 1.0]
    }
    .....
  }
  .....
}

```

Файл с определением изотопной системы имеет сходную структуру и содержит начальные концентрации радиоактивных изотопов и стабильных продуктов распада. Примеры оформления соответствующих файлов для тестовых задач приведены на рис. 3,4 (в рамках).

### Тестирование и проверка

Корректность работы программного модуля была проверена на относительно простых изотопных системах, для которых, с одной стороны, имеются простые аналитические решения, а, с другой, – имеется возможность проверки построения решения для систем, графы которых имеют ветвление или содержат несколько ступеней распада.

1) Система  $^{40}\text{K}$ - $^{40}\text{Ca}$ - $^{40}\text{Ar}$ .

Рассматриваемая система содержит ветвление цепи распада. Природный радиоактивный изотоп  $^{40}\text{K}$  с периодом полураспада 1,251 млрд. лет распадается по двум путям – до  $^{40}\text{Ca}$  и до  $^{40}\text{Ar}$  с вероятностями 0,891 и 0,109, соответственно. На рис. 3 показана постановка (в рамке) и результат решения тестовой задачи в сопоставлении с аналитическим решением. Тест позволил проверить корректность поиска в базе данных информации по изотопной системе и корректную обработку ветвления цепи распада.

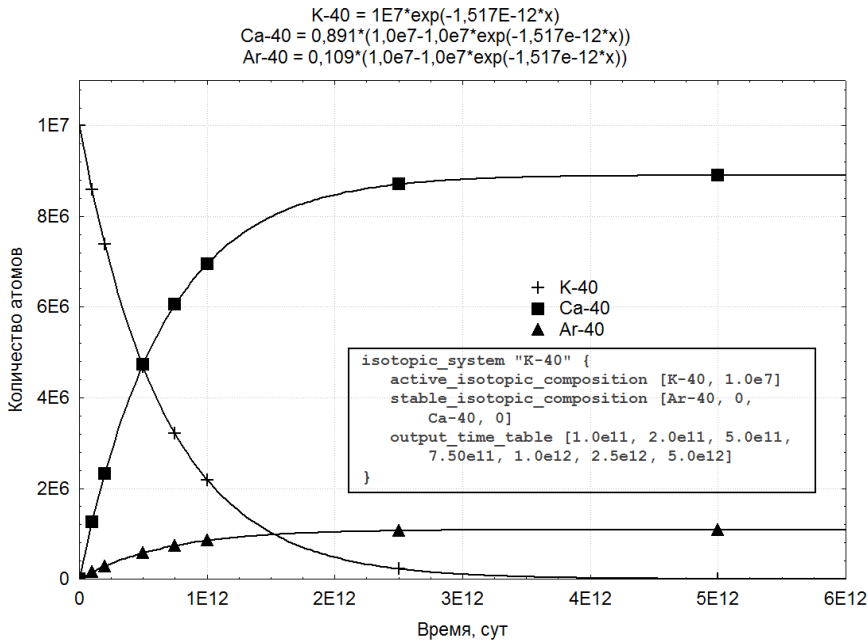


Рис. 3. Постановка и результаты решения тестовой задачи для изотопной системы «K-40»

## 2) Система $^{90}\text{Rb}$ - $^{90}\text{Sr}$ - $^{90}\text{Y}$ - $^{90}\text{Zr}$ .

Изотоп рубидия  $^{90}\text{Rb}$  распадается до стабильного изотопа циркония ( $^{90}\text{Zr}$ ) через три последовательных бета-распада. Целями данного теста были проверка работы алгоритма при построении решения для случая многоступенчатого распада, оценка устойчивости алгоритма при существенных различиях в параметрах распада (от 152 секунд для  $^{90}\text{Rb}$  до 28,79 лет для  $^{90}\text{Sr}$ ), проверка корректности поиска полного состава изотопной системы при ее неполном задании пользователем.

Постановка тестовой задачи и результат ее решения показаны на рис. 4. Контроль точности решения осуществлялся по балансу атомов отдельных изотопов, а также по выходу системы  $^{90}\text{Sr}$ - $^{90}\text{Y}$  на радиоактивное равновесие, когда активности более долгоживущего родительского изотопа и относительно короткоживущего дочернего выравниваются.

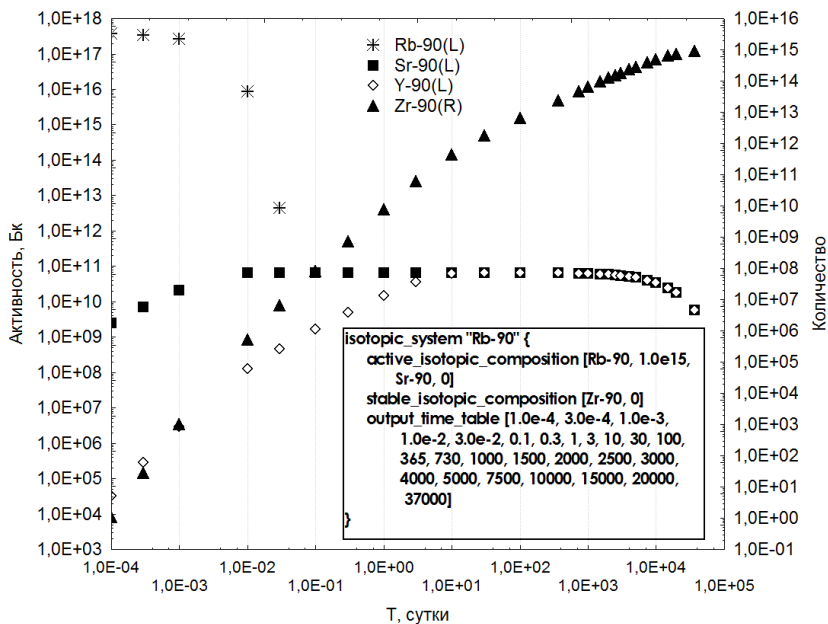


Рис. 4. Постановка и результаты решения тестовой задачи для изотопной системы «Sr-90»

Далее работа программы была проверена на моделировании процессов радиоактивного распада для системы изотопов, порожденной  $^{239}\text{Pu}$  при ненулевых концентрациях отдельных дочерних изотопов. Граф радиоактивного распада для этой системы показан на рис. 5, постановка задачи приведена в табл. 2. Результаты счета частично представлены на рис. 6.

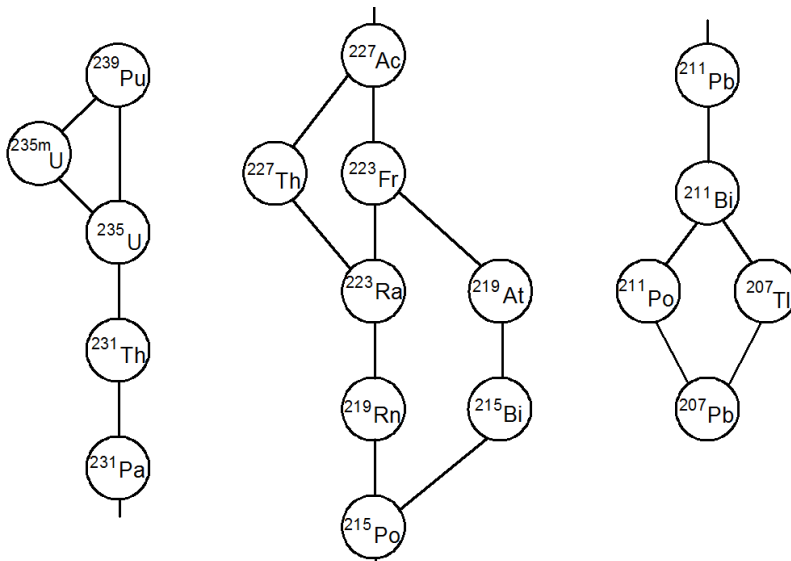
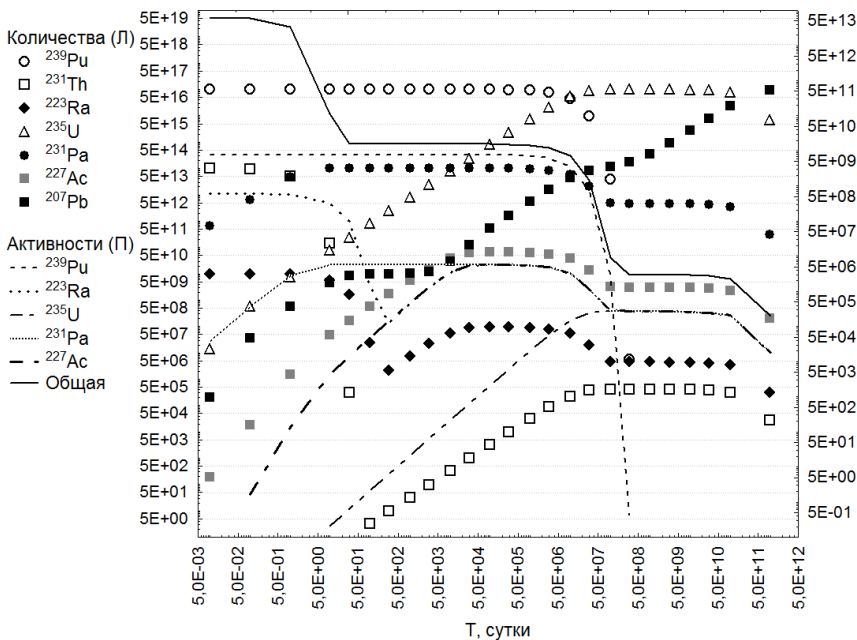


Рис. 5. Граф распада для изотопа  $^{239}\text{Pu}$

Таблица 2

Постановка задачи для изотопной системы Pu-239

```
isotopic_system "Pu-239" {
  active_isotopic_composition [Pu-239, 1.0e17, Th-231, 1.0e14, Ra-223, 1.0e10]
  stable_isotopic_composition [Pb-207, 1000]
  output_time_table [0.01, 0.1, 1, 10, 30, 1.e+2, 3.e+2, 1.e+3, 3.e+3, 1.e+4, 3.e+4, 1.e+5, 3.e+5,
  1.e+6, 3.e+6, 1.e+7, 3.e+7, 1.e+8, 3.e+8, 1.e+9, 3.e+9, 1.e+10, 3.e+10, 1.0e11, 1.0e12]
}
```



Целями данного расчета были оценка корректности построения полного изотопного состава и поиска всех цепей распада для сложной изотопной системы и проверка работы программы при ненулевых концентрациях дочерних изотопов. Так полная система включает 17 радиоактивных и один стабильный изотоп, для которых было выявлено 12 цепей распада. Контроль осуществлялся по балансу атомов и по выходу системы на радиоактивное равновесие.

### **Выводы и перспективы развития модуля**

Разработанный модуль в настоящее время позволяет решать широкий круг практических задач, связанных с моделированием радиоактивного распада в многокомпонентных системах. В рамках дальнейшего развития программного модуля планируется решение следующих задач:

- а) включение в расчет модели спонтанного деления ядер (актуально для трансурановых элементов);
- б) расчет количества выделяющихся частиц – продуктов распада (альфа, бета, нейтрино и др.);
- в) расчет энерговыделения при радиоактивном распаде;
- г) пополнение баз данных параметрами, необходимыми для решения вышеуказанных задач;
- д) разработка интерфейса пользователя для задания параметров изотопных систем и анализа результатов расчетов.

### **Литература**

1. Алейников А. Ю., Бардина М. Н., Глазунов В. А., Горев В. В., Горев И. В. и др. Параллельная версия пакета программ НИМФА // Наука – фундамент решения проблем технологического развития России. Ч. 2. Казань: Казанский университет, 2012. С. 20–43.
2. Камке Э. Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. М.: Наука, 1971.

## **МОНОТОННЫЙ МЕТОД ЧАСТИЦ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ДВУМЕРНЫХ ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ ЗАДАЧ С УЧЕТОМ УПРУГОПЛАСТИКИ И ГОРЕНИЯ ВЗРЫВЧАТЫХ ВЕЩЕСТВ**

*В. А. Шмелев, Ю. В. Янилкин*

Российский Федеральный Ядерный Центр –  
Всероссийский НИИ экспериментальной физики, г. Саров

### **Введение**

Проблема корректного расчета движения многокомпонентной среды является наиболее серьезной проблемой для лагранжево-эйлеровых и эйлеровых методик, особенно в смешанных ячейках в окрестности контактных границ (КГ). Имеются два основных подхода к решению уравнения адвекции для многокомпонентной среды.

Первый из них основан на выделении КГ и определении их положения на каждом счетном шаге. При этом контактная граница может выделяться явным образом или же восстанавливаться на каждом счетном шаге по полю концентраций. На последнем алгоритме основаны методы типа