

Таблица 6. Значения k_0 , k_1

Вариант	k_0	k_1
1.1	1,3522069	1,3522066
1.2	1,3508869	1,3508863
1.3	1,3509182	1,3509180
2.1	1,0613341	1,0610736
2.2	1,0613037	0,9449672
2.3	1,0596718	1,0592955

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кандиев Я.З., Орлов В.Г., Серова Е.В. Методика одновариантных и многовариантных расчетов слабосвязанных систем методом Монте-Карло. Тезисы докл. XII Забабахинских научных чтений. Снежинск, 2014, с. 267.
2. Кандиев Я.З., Лобанова Л.В., Орлов В.Г., Серова Е.В. Методика расчетов слабосвязанных систем методом Монте-Карло по программе ПРИЗМА-ДСП. — Атомная энергия, 2017, т. 123, вып. 6, с. 339—344.
3. Armishaw M., Blomquist R., Natio Y. Source Convergence in Critically Safety Analyses. Phase I: Results of Four Test Problems. OECD/NEA № 5431, 2006.
4. Yoshitaka N., Jinan Y. Pin-cell Array with Irradiated Fuel: Test Problem 2. OECD/NEA № 5431, 2006, p. 37—56.

Поступило в Редакцию 31.07.17

УДК 621.039.51

ЗАДАЧИ ИЗОТОПНОЙ КИНЕТИКИ НА ПОЛНОМ БАЗИСЕ ЭЛЕМЕНТОВ ВЫХОДА ПРОДУКТОВ ДЕЛЕНИЯ

Митенкова Е.Ф., Соловьева Е.В. (ИБРАЭ РАН, г. Москва),
Маничев В.Б., Фельдман Э.О. (МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва)

Повышение эффективности работ, связанных с обращением с отработавшим ядерным топливом, предусматривает увеличение точности вычисляемого нуклидного состава облученного топлива. Это предполагает не только проведение уточняющих расчетов, к которым относятся, например, полномасштабные (потвзельные) расчеты выгорания стандартными методами с ограниченной базой ядерных данных, но и разработку прецизионных методов на основе библиотек ядерно-физических данных при максимально полном использовании ядерных данных [1, 2]. Прецизионные методы должны обеспечивать гарантированную точность результатов с обоснованием их устойчивости, что крайне важно в отсутствие точных аналитических решений и недостаточной базы экспериментальных данных для большей части вычисляемых нуклидов.

Математическое моделирование выгорания описывается системой обыкновенных дифференциальных уравнений, размерность которой зависит от числа учитываемых элементов. Использование в расчетной модели ограниченной базы нуклидов с кумулятивными значениями в цепочках перехода оправдано для конкретных типов задач с жестко определенными временными параметрами. Так, энергораспределение, которое рассчитывается на основе состава облученного топлива, полученного в расчетах с традиционным набором из 200—400 нуклидов, согласуется с экспериментальными и эксплуатационными данными в условиях нормальной эксплуатации реакторов. При отсутствии подобной информации

для новых реакторных систем полноценные расчеты без ограничений на используемые нуклиды и временные характеристики облучения представляются наиболее предпочтительными. Прецизионные расчеты, использующие расширенные модели независимого выхода продуктов деления, цепочки переходов с учетом значимых нейтронных реакций, включая реакции с возбуждением типа (n, x^*) и процессы с коротко- и долгоживущими элементами, обуславливают математические проблемы решения жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений большой размерности, к которым относятся задачи изотопной кинетики реакторных систем. При моделировании выгорания на полном базисе элементов выхода продуктов деления матрицы имеют размерность 2500×2500 и более с различающимися до 20 порядков элементами. Для решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений с ограниченным базисом элементов, не содержащим коротко- и долгоживущие элементы, прямые методы типа Рунге—Кутты или Эйлера с постоянным шагом интегрирования не обеспечивают устойчивых решений [3]. Отсутствие асимптотической теории для жестких систем общего вида и незнание качественного поведения траектории дифференциального уравнения не позволяют оценивать погрешности расчета [4]. Из-за отсутствия универсального метода способы решения жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений во многом зависят от специфики используемых матриц. При этом чувствительность решения к малым изменениям в матрице также является источником

дополнительных трудностей. Возможным подходом к решению жестких систем большой размерности может стать применение AL-устойчивых неявных методов, которые реализованы в отечественной программе MZK на основе сверхточных решателей из библиотеки SADEL [5], показавших преимущества решения жестких систем по сравнению с зарубежными решателями [6, 7].

Анализ накопления нуклидов в облученном уран-плутониевом топливе в расчетах по программам ORIGEN2 [8] и MZK. Программы семейства ORIGIN являются одними из распространенных универсальных программ решения задач изотопной кинетики, не имеющих ограничений на число элементов и переходных цепочек превращений. Два разных вычислительных метода — асимптотический и Гаусса—Зейделя в программе ORIGEN2 без четкой регламентации использования на разных временных сетках делает невозможным расчет гарантированной погрешности накопления нуклидов, а для отдельных нуклидов может приводить к некорректным значениям, что подтверждается концентрацией нуклидов в цепочках переходов с короткоживущими элементами [9]. В полномасштабных расчетах выгорания с помощью кодов MCNP—MONTEBURNS—ORIGEN2 одним из базовых является шаг облучения. С учетом мощности реактора и кампании шаг облучения в зависимости от специфики задач составляет 1, 20, 40, 80 или 100 сут [2, 10]. Для этих значений имеются расчеты по программам ORIGEN2, MZK и MATLAB. Исходный состав уран-плутониевой композиции, г·ат: ^{235}U 4,86, ^{238}U 8,53, ^{239}Pu 3,15, ^{240}Pu 0,16, ^{241}Pu 0,0125 соответствует топливной загрузке металлического топлива экспериментальной ТВС, облученной в БОР-60, нейтронный поток $2,72 \cdot 10^{15} \text{ с}^{-1}$ полагается постоянным в течение всего времени облучения [2]. Для сравнения удельной концентрации ρ , рассчитанной по программам ORIGEN2 и MZK, применяется коэффициент различия $K_{\text{раз}} = \max(\rho_{\text{ORIG}}, \rho_{\text{MZK}}) / \min(\rho_{\text{ORIG}}, \rho_{\text{MZK}})$. Результаты расчета по программе MZK приведены с погрешностью 0,1% (табл. 1—3).

В расчетах по программам ORIGEN2 и MZK при согласованной удельной концентрации для большей части продуктов деления заметны различия для отдельных элементов. Коэффициенты различия в табл. 1 указывают на характерную погрешность расчета удельной концентрации по программе ORIGEN2 ~ 10% относительно результатов MZK. При увеличении времени облучения наблюдается немонокотное изменение $K_{\text{раз}}$ (см. табл. 2). Кроме того, разная удельная концентрация в ORIGEN2 при разных расчетных параметрах [9] приводит к различиям минимального и максимального $K_{\text{раз}}$, которые проявляются для разных нуклидов в разные моменты

Т а б л и ц а 1. Накопление продуктов деления и $K_{\text{раз}}$ для $T_{\text{обл}} = 1$ сут

Нуклид	ρ_{ORIG} , г·ат.	ρ_{MZK} , г·ат.	$K_{\text{раз}}$
^{69}Ga	$3,469 \cdot 10^{-9}$	$3,181 \cdot 10^{-9}$	1,09
^{72}Ge	$1,175 \cdot 10^{-9}$	$1,084 \cdot 10^{-9}$	1,08
^{73}Ge	$2,973 \cdot 10^{-8}$	$2,785 \cdot 10^{-8}$	1,07
^{80}Se	$4,684 \cdot 10^{-6}$	$4,145 \cdot 10^{-6}$	1,13
^{81}Se	$1,270 \cdot 10^{-7}$	$1,157 \cdot 10^{-7}$	1,10
^{101}Ru	$1,935 \cdot 10^{-3}$	$1,681 \cdot 10^{-3}$	1,15
^{110}Cd	$5,495 \cdot 10^{-10}$	$5,151 \cdot 10^{-10}$	1,08
^{111}Cd	$5,005 \cdot 10^{-7}$	$4,522 \cdot 10^{-7}$	1,11
^{112}Cd	$1,716 \cdot 10^{-6}$	$1,575 \cdot 10^{-6}$	1,09
^{116}Cd	$5,877 \cdot 10^{-6}$	$5,159 \cdot 10^{-6}$	1,14
^{121}Sn	$5,033 \cdot 10^{-6}$	$4,257 \cdot 10^{-6}$	1,18
^{121}Sb	$1,722 \cdot 10^{-6}$	$1,457 \cdot 10^{-6}$	1,18
^{126}Te	$3,084 \cdot 10^{-7}$	$3,036 \cdot 10^{-7}$	1,02
^{128}Te	$1,460 \cdot 10^{-5}$	$1,395 \cdot 10^{-5}$	1,05
^{146}Pr	$1,760 \cdot 10^{-6}$	$1,975 \cdot 10^{-6}$	1,12
^{148}Pr	$9,805 \cdot 10^{-8}$	$1,059 \cdot 10^{-7}$	1,08
^{145}Nd	$7,280 \cdot 10^{-5}$	$6,760 \cdot 10^{-5}$	1,08
^{150}Nd	$2,745 \cdot 10^{-5}$	$2,495 \cdot 10^{-5}$	1,10
^{159}Eu	$9,246 \cdot 10^{-9}$	$8,521 \cdot 10^{-9}$	1,09

Т а б л и ц а 2. Динамика изменения $K_{\text{раз}}$ от времени облучения

Нуклид	$T_{\text{обл}}$, сут			
	1	40	100	1000
^{83}Kr	1,09	1,01	1,10	1,02
^{101}Ru	1,15	1,15	1,16	1,02
^{107}Ru	1	1,02	1,02	1,05
^{109}Ag	1,07	1,18	1,06	1,03
^{125}Sb	1,09	1,02	1,02	1,11
^{134m}I	1,71	1,01	1,72	1,05
^{110}Cd	1,08	1,24	1,07	1,03
^{138}Ba	1,01	1,06	1,10	1,11
^{134}Ce	1,01	1,02	1,03	1,07
^{145}Nd	1,08	1,03	1,04	1,02
^{146}Nd	1,01	1,17	1,16	1,01

на временной шкале $T_{\text{обл}} \leq 1000$ сут, обуславливая увеличение погрешности (см. табл. 3). Все это, а также зависимость $K_{\text{раз}}$ от начального состава облучаемой композиции затрудняет систематику и не позволяет точно определить суммарную погрешность. Анализ дает основания для вычисления парциальных погрешностей, определяя тем самым минимальный базовый уровень общей погрешности для элементов продуктов деления.

Таблица 3. Минимальный и максимальный $K_{\text{раз}}$ для $T_{\text{обл}} \leq 1000$ сут

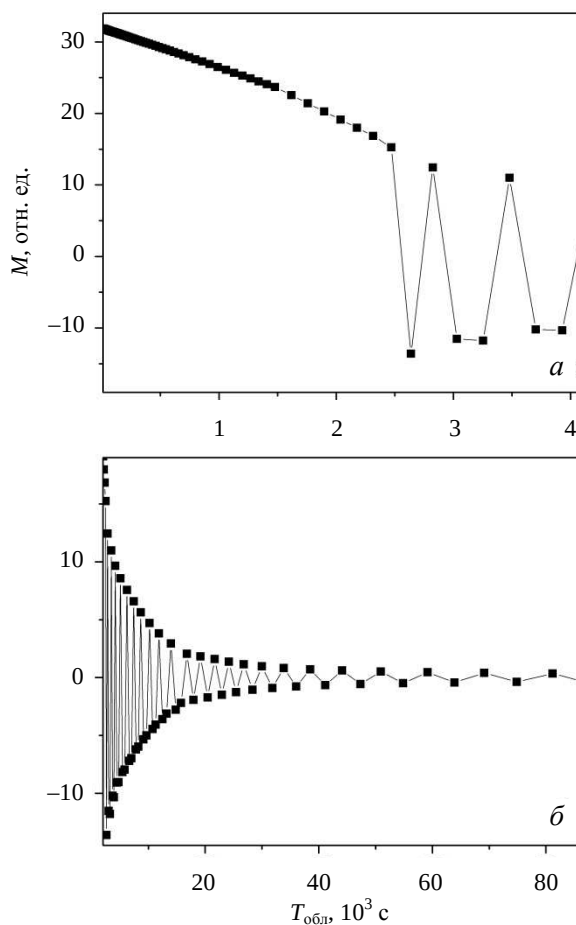
Нуклид	$K^{\min}$	$K^{\max}$
^{77}Ge	1,01	1,11
^{72}As	1,05	1,25
^{78}Kr	1,03	1,13
^{79}Kr	1,05	1,12
^{82}Rb	1,04	1,22
^{109}Ru	1,04	1,15
^{109m}Ru	1,05	1,21
^{106}Rh	1,03	1,17
^{113}Rh	1,03	1,10
^{108}Pd	1,03	1,09
^{109}Pd	1,04	1,13
^{121}I	1,06	1,23
^{124}I	1,05	1,20
^{134}Xe	1,01	1,06
^{134m}Xe	1,04	1,23
^{130}Cs	1,05	1,24
^{139}Cs	1,02	1,13
^{148}Pr	1,02	1,12
^{148m}Pr	1,04	1,21
^{145}Nd	1,02	1,14
^{150}Nd	1,02	1,07
^{153}Tb	1,06	1,23
^{157}Tb	1,04	1,18

Достоверность и точность результатов по программе MZK подтверждается расчетами с помощью пакета математических программ MATLAB. В поверочных расчетах используются многшаговые решатели систем для явных и неявных дифференциальных уравнений с переменным шагом интегрирования ode15s и ode15i [11]. Сравнение подтверждает согласованность конечных результатов с использованием решателей ode15s и ode15i между собой, а также с MZK в пределах заданной погрешности.

Методические расчеты. Различия $K_{\text{раз}}$ при большом времени облучения обусловлены особенностями вычислительных алгоритмов ORIGEN2 и MZK. Анализ расхождений показывает, что использование нескольких вычислительных методов в ORIGEN2 не позволяет при любых временных характеристиках облучения и соотношениях скоростей приход—уход получать корректные решения на любом отрезке временной шкалы. Расхождения также связаны с возможностью появления комплексных собственных значений для отдельных элементов рассматриваемой матрицы. Программа MZK позволяет

рассчитывать траектории для всех переменных системы обыкновенных дифференциальных уравнений. В то же время в программе ORIGEN2 стандартные методы обеспечивают вычисление переменных только в конечной точке интервала интегрирования, предполагая гладкий характер изменения. Расчеты по программе MZK с разной точностью и MATLAB с помощью решателей ode15i и ode15s , основанных на переменном шаге и формулах обратного дифференцирования, могут приводить к колебательному решению (см. рисунок). Ненулевые мнимые значения обуславливают синусоидальный характер решения, который приводит к различиям на некоторых интервалах заданной временной шкалы. Следует учитывать возможность появления подобных колебательных решений на разных временных интервалах для разных нуклидов.

Заключение. В расчетах по программам MZK и MATLAB, с одной стороны, и ORIGEN2, с другой, для большей части нуклидов получены согласованные значения. Расхождения в ORIGEN2 для отдельных элементов объясняются некорректными вычислениями в пограничной области временной шкалы, когда метод Гаусса—Зейделя с постоянным шагом интегрирования уже не работает, а экспоненциаль-



Динамика изменения массы ^{131}Sn , рассчитанная по MZK для облучения до 4000 с (а) и от 4000 с до 1 сут (б)

ный асимптотический метод не может обеспечить решение на заданном временном интервале. Анализ показывает, что прямые методы с постоянным шагом интегрирования для решения задач изотопной кинетики на полном базисе элементов выхода продуктов деления, включая коротко- и долгоживущие элементы, обуславливают погрешность вычисления удельной концентрации продуктов деления не менее 10% при выгорании ~2% тяж. ат. и 20% при выгорании от 8% тяж. ат. Статистические данные пошаговых вычислений по программе MZK позволяют провести математическое обоснование корректности и гарантированной точности получаемых значений, независимые расчеты по MATLAB служат дополнительным подтверждением их достоверности и точности. Программу MZK можно рассматривать в качестве независимой (реперной) программы при сравнительном анализе расчета по другим кодам. В перспективе ее применение для практических расчетов возможно при ее реализации для многопроцессорного режима, а также включении специализированных алгоритмов обработки и хранения разреженных матриц большой размерности.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Митенкова Е.Ф., Новиков Н.В., Соловьева Е.В. Библиотеки с расширенным представлением выхода продуктов деления в расчетах нуклидного состава топлива в быстром спектре. — Атомная энергия, 2014, т. 117, вып. 6, с. 341—346.
2. Митенкова Е.Ф., Новиков Н.В. Минимальная погрешность расчета накопления газообразных продуктов деления в металлическом топливе, облучаемом в быстром спектре. — Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика ядерных реакторов, 2016, вып. 1, с. 77—90.
3. Хайрер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. М.: Мир, 1999. 685 с.
4. Вычислительные процессы и системы. Под ред. Г.И. Марчука. М.: Наука, 1991, вып. 8. 385 с.
5. Жук Д.М., Маничев В.Б., Сахаров М.К. SADEL — библиотека «сверхточных» решателей для программного комплекса ПА10 (SADEL—PA10). — В сб.: Труды МЭС-2012. М., ИППМ РАН, 2012, с. 147—153.
6. Маничев В.Б., Жук Д.М. Базовый набор тестовых задач для решателей систем ОДУ. — Технологии инженерных и информационных систем, 2016, т. 2, № 4, с. 70—84.
7. Маничев В.Б., Жук Д.М., Витюков Ф.Т. Достоверное и точное численное моделирование динамических систем при невысоких требованиях к математической точности конечных результатов. — Информационные технологии, 2014, № 4, с. 27—33.
8. Croff A. ORIGEN2: a versatile computer code for calculating the nuclide compositions and characteristics of nuclear materials. — Nucl. Technol., 1983, v. 62, p. 335—352.
9. Соловьев А.В., Митенкова Е.Ф., Новиков Н.В., Соловьева Е.В. Решение задач изотопной кинетики с полным числом элементов выхода продуктов деления. — Атомная энергия, 2016, т. 120, вып. 3, с. 165—170.
10. Kuzavkov N., Mitenkova E., Novikov N. e.a. HTTR's start-up core benchmark physics calculations. — In: 3st Research Coordination Meeting for the Coordinated Research Programme Evaluation of High Temperature Gas Cooled Reactor Performance IAEA Headquarters. Vienna, 2003, p. 35—47.
11. Shampine L., Reichelt M. The MATLAB ODE Suite. — SIAM. Sci. Comp., 1997, v. 18, p. 1—22.

Поступило в Редакцию 20.06.17

Рефераты статей

Продолжение. Начало см. на с. 46

УДК 621.039.536.24.08

Кузина Ю.А., Сорокин А.П. **Теплоотдача и неравномерность температуры в пучках стержней с разным дистанционированием, охлаждаемых тяжелым жидкометаллическим теплоносителем.** — Атомная энергия, 2018, т. 124, вып. 1, с. 13—18.

Рассматриваются теплоотдача и неравномерность температуры по периметру стержней в свободных решетках твэлов с тяжелым жидкометаллическим теплоносителем. Анализируются экспериментальные данные для сборки гладких стержней, сборок твэлов с винтовыми ребрами и поперечными решетками.

Исследования показывают, что в решетке гладких твэлов неравномерность температуры по его периметру почти отсутствует в отличие от высокой общей азимутальной неравномерности температуры в сборке с дистанционированием винтовыми ребрами. Дистанционирование ребрами привело к значительному снижению теплоотдачи. В сборке с поперечными дистанционирующими решетками

теплоотдача возрастает лишь в области расположения решеток, между ними — примерно равна теплоотдаче в пучке гладких твэлов. Внутри дистанционирующей решетки проявляются периодические неравномерности температуры по периметру твэлов, вызванные их касанием элементов решетки. Рекомендуются соотношения для расчета теплоотдачи (чисел Нуссельта) и неравномерности температуры по периметру твэлов при рассмотренных способах дистанционирования твэлов. Рис. 9, список лит. 9 назв.

УДК 541.15+621.039.577

Архипов О.П., Кабакчи С.А. **Феномен гистерезиса при радиоллизе теплоносителя реактора с водой под давлением и его влияние на критическую концентрацию водорода.** — Атомная энергия, 2018, т. 124, вып. 1, с. 19—23.

Методом математического моделирования исследовано влияние теплофизических неравномерностей активной зоны реакторной установки на закономерности радиационно-химических процессов в водном теплоносителе первого контура энергетических реакторов с водой под