APPLICATION OF ANALYTIC COMPUTATIONAL SYSTEMS IN REACTOR PHYSICS

P.A. Fomichenko, V.F. Boyarinov, A.V. Vassiliev, V.A. Nevinitsa, P.N. Alekseev
Nuclear Safety Institute, Russian Research Center "Kurchatov Institute", Moscow

ПРИМЕНЕНИЕ СИСТЕМ АНАЛИТИЧЕСКИХ ВЫЧИСЛЕНИЙ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ЯДЕРНЫХ РЕАКТОРАХ

П.А. Фомиченко, В.Ф. Бояринов, А.В. Васильев, В.А. Невиница, П.Н. Алексеев
Институт Проблем Безопасного Использования Ядерной Энергии (ИПБ),
Российский научный центр "Курчатовский институт"

This work presents the experience gained during application of the analytic computational system "Mathematica" for various problems in the field of reactor physics. This system was used for the calculation of the Green function moments, as required by the Surface Pseudo Sources Method, for the derivation of the sensitivity theory equations in reactor dynamics and for the evaluation of the applicability range of the Askew method for the solution of diffusion equations. The analytic computational system "Mathematica" proved to be a very efficient tool for modeling in the reactor physics.

Современные системы аналитических вычислений (Derive, Maple, Mathematica и др.) являются интерактивными системами со встроенным языком программирования высокого уровня. Они могут быть эффективно использованы при решении и анализе широкого класса сложных физических задач благодаря возможности одновременной работы с аналитическими выражениями, численными вычислениями и графическими объектами. В тех случаях, когда аналитическое решение отдельных частей поставленной задачи получить невозможно, системы аналитических вычислений, как правило, позволяют с помощью встроенных математических операций получить численное решение этих частей задачи.

В настоящей работе представлен опыт применения системы аналитических вычислений "Mathematica" для IBM-совместимых PC (Wolfram Research, Inc.) при разработке и верификации расчетных моделей в различных областях физики реакторов.

Расчет моментов функции Грина при решении уравнения переноса нейтронов

Примером комбинированного использования численных и аналитических возможностей пакета "Mathematica" может служить программа, написанная для расчета моментов функции Грина, используемых при решении уравнения переноса нейтронов в ячейках ядерных реакторов методом поверхностных псевдоисточников. Для простоты рассматривается плоская геометрия. В программе вычисляется набор моментов функции Грина $G^c_{n,n'}(x/x')$ для всех n,n', при заданных параметрах $\{c,x,x'\}$. В общем виде момент функции Грина можно представить в виде суммы асимптотического и сингулярного членов:

$$G^c_{n,n'}(x/x') = \xi\left[F^c_{n,n'}(\nu_0,x/x') + \int_0^1 F^c_{n,n'}(\nu,x/x')d\nu\right], \qquad \xi = \begin{cases} 1, & x > x' \\ (-1)^{n+n'}, & x < x' \end{cases} \tag{1}$$

Интеграл по области сингулярных решений $\nu \in [0,\ 1]$ и корни трансцендентного уравнения

$$1 - \frac{c\nu_0}{2}\ln\frac{\nu_0+1}{\nu_0-1} = 0, \tag{2}$$

необходимые для расчета значений $F^c_{n,n'}(\nu_0,x/x')$, могут быть найдены только численно.

Коэффициенты, входящие в $F^c_{n,n'}(\nu_0,x/x')$ и $F^c_{n,n'}(\nu,x/x')$, включая члены полиномов Лежандра, могут быть заданы аналитически и рассчитаны после необходимых преобразований.

В ряде случаев при оперировании во всех расчетах с числами фиксированной точности может произойти потеря точности решения, например при сложении двух констант малого порядка и разных знаков, интегрировании знакопеременной функции, решении уравнения (2) вблизи c=0, и т.д. Эта проблема решается благодаря тому, что "Mathematica" позволяет задавать числа с любой произвольной точностью, а при таких процедурах, как определение корней уравнения (2) или численное интегрирование в (1), можно задавать опции, определяющие точность решения.

Разработка методов теории возмущений для задач динамики реакторов

Методы теории возмущений являются одним из основных расчетных инструментов для анализа влияния неопределенностей в исходных данных и значениях технологических параметров на реакторные величины. Обобщенная теория возмущений представляет собой эффективный математический аппарат для расчета коэффициентов чувствительности (КЧ) этих величин, когда число учитываемых случайных исходных данных больше числа интересующих нас реакторных параметров.

В настоящей работе представлена реализация на языке системы "Mathematica" методики оценки в линейном приближении влияния неопределенности начальных данных на результаты расчета точечной динамики реакторной системы. В частности, особую актуальность в настоящее время приобретает задача подобных оценок для расчета импульсных экспериментов с выгоревшим топливом.

Формулы теории возмущений для расчета КЧ строятся на основе свойств Лагранжиана системы уравнений динамики. Известно, что для оценки КЧ какого-либо реакторного функционала необходимо решить задачу, сопряженную исходной относительно заданного функционала $J_P(a_i)=\int_0^\tau \hat{P}\,\bar{Y}(t)dt$, где $\bar{a}=\{a_i\}$- вектор параметров, $\hat{P}$- оператор, определяющий функционал, $\bar{Y}$- вектор решения исходной системы, τ- время процесса. Зная решение сопряженной задачи, можно вывести формулы для КЧ заданного функционала J_P к $\bar{a}=\{a_i\}$. Очевидно, что в простейших случаях, когда вид $\hat{P}$ элементарен, задача вывода явного вида сопряженных уравнений вполне разрешима вручную. В качестве примеров таких функционалов обычно приводят значение мощности в конце процесса или интегральное энерговыделение.

С применением для построения сопряженных задач комбинирования аналитических и численных процедур в рамках программы на языке "Mathematica" оказалось возможным не только повторить построение формулировок сопряженных задач в элементарных случаях, но и предложить автоматизированную процедуру нахождения КЧ, включающую в себя все этапы от описания функционала до получения численных результатов.

Исследование области применимости метода Askew для решения уравнения диффузии

Решалась задача оценки области применимости метода крупной сетки Askew для решения уравнения диффузии нейтронов на примере расчета бесконечных периодических решеток в одногрупповом приближении. Подход предложен Б.Д. Абрамовым (ФЭИ). Конечно-разностный вид уравнений может быть представлен в матричной форме (i-номер итерации) :

$$\hat{L}\,\bar{\psi}^{i}=\frac{1}{Kef}\hat{Q}\,\bar{\psi}^{i-1} \qquad (3)$$

Переходя к методу крупной сетки Askew и считая, что ψ^i и ψ^{i-1} сколь угодно близки, систему уравнений (3) (с учетом зависимости ее операторов от K_{ef}) можно записать в виде системы $\hat{B}(K_{ef})\bar{\psi}=0$, которая имеет нетривиальное решение при условии

$$det\left[\hat{B}(K_{ef})\right]=0 \qquad (4)$$

Наличие действительных корней уравнения (4), очевидно, является необходимым условием сходимости метода крупной сетки Askew. В самых простых случаях полученное уравнение является уравнением второго порядка, которое имеет решение при неотрицательном дискриминанте. Поиск корней может быть проведен либо численно, либо аналитически. В последнем случае приходится вручную проделывать большой объем выкладок, что является стимулом для применения систем аналитических вычислений.

Рассматриваемая система состоит из ячеек, обладающих одинаковыми физическими свойствами и различающимися только наличием или отсутствием источника вида $q=\nu\Sigma_f\psi/K_{ef}$. Введя обозначения $p=D/(\Sigma H^2)$ и $\mu=1-1/K_{ef}$, получаем уравнение относительно μ с параметром p. Условие (4) дает значения критерия выбора шага p, при которых допустимо использование метода крупной сетки Askew.

Для верификации программы на языке системы "Mathematica" использовались результаты расчетов, выполненых вручную. В ходе сравнения получено полное согласие результатов.

Применение системы "Mathematica" позволило проанализировать влияние на область применимости метода другого параметра, ранее не исследовавшегося, - размера подобласти, по которой записываются исходные балансные уравнения (стандартный вариант - 1/3 расчетного шага). Получены качественные и количественные оценки этого влияния для двумерной квадратной геометрии.

Заключение

На ряде примеров показано, что системы аналитических вычислений, в частности, использованная нами "Mathematica", могут быть успешно использованы при разработке моделей в различных областях физики реакторов.

Большое число математических операций системы "Mathematica" (более 750), включающие такие сложные, как численное интегрирование, суммирование, решение трансцендентных уравнений, полиномиальные преобразования, решение систем алгебраических и дифференциальных уравнений и т.д., а также возможность наращивания набора операций пользователем, существенно облегчают процесс создания программ, а использование возможностей интерактивного интерфейса и работы с графическими объектами позволяет отслеживать ход решения и оперативно анализировать полученные результаты.

Достоинством системы "Mathematica", по сравнению с традиционными математическими пакетами, является возможность оперирования с числами любой точности, а также варьирование задаваемой точности численного решения сложных выражений (например, количества итераций при численном решении уравнения, значащих знаков в ходе расчета, значащих знаков искомого решения, участков разбиения области интегрирования для поиска сингулярностей или резких пиков подинтегральной функции и т.д.)

В итоге программа, написанная на языке "Mathematica", оказывается компактной, наглядной и легко модифицируемой. К числу проблем, которые еще требуют решения, относится прежде всего организация взаимодействия разработчиков моделей по переносу аналитических и численных результатов, полученных с помощью систем аналитических вычислений, в традиционные комплексы программ на алгоритмических языках, используемые в практике расчетов физики реакторов.