

ПОДХОД К МАТЕМАТИЧЕСКОМУ МОДЕЛИРОВАНИЮ ТРАНСМУТАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В ЯДЕРНЫХ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УСТАНОВКАХ

Аннотация.

Актуальность и цели. Изучение и моделирование ядерной кинетики нуклидных превращений при нейтронном облучении в ядерных энергетических установках особо актуально на сегодня в решении проблемы замыкания ядерного топливного цикла для обеспечения экономичности ядерной энергетики. Цель работы: описать и исследовать принципиально новую математическую модель в моделировании ядерно-физических процессов в реакторных материалах при облучении.

Материалы и методы. Из непрерывной задачи решения линейной системы обыкновенных дифференциальных уравнений на основе введенных определений отношения взаимности нуклидов и отношения накопления на множестве сильно связанных подмножеств нуклидов сделан переход к задаче дискретной оптимизации схемы нуклидных превращений. Предложенная авторами модель описания ядерной кинетики нуклидных превращений представляет собой трансмутационную схему, получаемую в виде ориентированного мультиграфа. Введено усреднение для оценки нейтронно-физических характеристик реакторного облучения посредством усреднения потока по определенным микрокампаниям в работе ядерной энергетической установки.

Результаты. В терминах теории графов сформулирована задача дискретной оптимизации схемы нуклидных превращений – оригинальная своей постановкой среди известных задач дискретной оптимизации в целом, а также для отрасли атомной энергетики в частности, которая относится к классу NP-трудных проблем. Предложен способ усреднения оценки нейтронно-физических характеристик реакторного облучения за период нескольких микрокампаний в задаче ядерной трансмутации.

Выводы. Приоритетное направление модернизации и технологического развития экономики России заключается в развитии ядерных технологий, а именно в реализации замкнутого топливного цикла со смешанным топливом на быстрых энергетических реакторах. Рассмотренная модель для расчета кинетики нуклидных превращений в материалах при реакторном облучении нейтронами может быть успешно использована для математического моделирования трансмутационных процессов с накоплением и выгоранием актинидов в активной зоне быстрого реактора.

Ключевые слова: задача ядерной трансмутации, математическая модель, ориентированный мультиграф, система обыкновенных дифференциальных уравнений.

A. R. Belozerova, B. F. Mel'nikov

APPROACH TO MATHEMATICAL SIMULATION OF TRANSMUTATIONAL PROCESSES IN NUCLEAR POWER PLANTS

Abstract.

Background. At the present time the study and simulation of nuclear kinetics or nuclide transformations in the process neutron irradiation in power reactor facilities are especially topical for solution of the problem of nuclear fuel cycle abridgement to provide profitability of nuclear power. The purpose of this article consists in describing and investigating essentially new mathematical models in simulation of nuclear-physical processes in reactor materials irradiation.

Materials and methods. The initial model of the problem is similar to a linear system of the ordinary differential equations. Relations of nuclide reciprocity and accumulation on a nuclide set of nuclide strong-coherent subsets were entered. With the help of relations a transition from the initial continuous model to a discrete model was made. The discrete model describes nuclear kinetics as an oriented multigraph. The authors averaged the estimation of neutron-physical characteristics of reactor irradiation by means of averaging a stream at certain micro-campaigns in the process of power reactor facility functioning.

Results. The problem of discrete optimization of the nuclide transformations was formulated in terms of the graph theory. The discrete problem is original in the discrete optimization theory. The problem concerns a class of NP-difficult problems. The authors author a method of averaging the estimation of neutron-physical characteristics of reactor irradiations for the period of several micro-campaigns in the problem of nuclear transmutations.

Conclusions. The priority direction of modernization and technological development of the Russian economy consists in development of nuclear technologies, namely in realization of the closed fuel cycle with mixed fuel in fast power reactors. The considered model of calculation of nuclide transformations into materials at reactor irradiation can be successfully used for mathematical modelling of nuclear-physical processes with accumulation and burning out actinides in a fast reactor core.

Key words: nuclear transmutation problem, mathematical model, directed multigraph, ordinary differential equations system.

1. Постановка задачи

Влияние процессов ядерной трансмутации ([1] и др.) на основные ядерно-физические характеристики материалов ядерных энергетических установок (ЯЭУ) требует детального изучения и количественной оценки изменения нуклидного состава этих материалов при реакторном облучении. При этом значимость трансмутационных процессов наиболее ярко выражена для тех материалов, в которых изменение химического состава может непосредственно влиять на изменение эксплуатационных свойств материалов и приводить к ограничению ресурса изделий, ответственных за безопасную эксплуатацию ЯЭУ, что в первую очередь связано с материалами отражателя, замедлителя и поглотителя нейтронов. К таким материалам относится бериллий, гафний и их соединения.

Накопление газообразных продуктов ядерной трансмутации при длительном реакторном облучении этих материалов может приводить к изменению их структурно-фазового состояния, что также необходимо учитывать при обосновании работоспособности конструктивных элементов ЯЭУ. Для конструкционных материалов (типа коррозионно-стойких сталей и никель-содержащих материалов [1]) важно определение динамики накопления радиогенных изотопов гелия и водорода в зависимости от условий реакторного облучения.

В данной статье отражены результаты математического моделирования, выполненного авторами для задачи ядерной трансмутации в конструкционных материалах при реакторном облучении. Сформулирована задача дискретной оптимизации *схемы трансмутации* – оригинальная своей постановкой среди известных задач дискретной оптимизации в целом, а также для рассматриваемой отрасли атомной энергетики в частности.

С точки зрения теории сложности алгоритмов задача дискретной оптимизации *схемы трансмутации* относится к труднорешаемым – в смысле сложности по времени. Под труднорешаемой проблемой [2] в теоретической информатике принято понимать задачу, для которой все известные алгоритмы решения имеют не менее чем экспоненциальную вычислительную сложность. Эффективное решение труднорешаемой задачи, в том числе в худшем случае, может быть достигнуто недетерминированным алгоритмом, причем даже в том случае, когда нет четкого понимания сути задачи. При этом важно отметить, что *разработка алгоритмов* труднорешаемых задач более важна для успеха в их решении, чем любое текущее усовершенствование компьютерных технологий ([3] и др.).

В нашем случае общая проблематика такова. Согласно [4] трансмутации в ядерных реакторах происходят в результате ядерных реакций, вызываемых нейтронами, а также в результате спонтанных распадов радионуклидов. То есть под воздействием нейтронного облучения происходит трансмутация нуклидного состава материала, протекают процессы активации и газонакопления – и все это приводит к изменениям нуклидного состава. Задача расчета этих изменений (трансмутаций) возникает в широком круге теоретических исследований и прикладных работ, связанных с ядерными реакторами.

2. Основные понятия. Исходные уравнения образования нуклидов

Под скоростью реакции A_n^i превращения нуклида i в нуклид n понимается доля ядер нуклида i , превратившихся в нуклид n в единицу времени. Скорость реакции A_n^i определяется интегрированием по энергии нейтронов:

$$A_n^i = \int_0^{\infty} \sigma_n^i(E) \cdot \Phi(E) dE, \text{ где } \sigma_n^i(E) - \text{дифференциальное сечение реакции,}$$

$\Phi(E)$ – дифференциальная плотность потока нейтронов. В данной работе радиоактивные распады рассматриваются наряду с ядерными реакциями как каналы нуклидных превращений. Скорость распада радионуклида i в нуклид n записывается так: $A_n^i = \lambda = \frac{\ln(2)}{T_{1/2}}$, где λ – постоянная распада; $T_{1/2}$ – период полураспада.

Пусть x_i – концентрация ядер нуклида i . Исходные уравнения нуклидных изменений в материале под облучением получаются из условия баланса и имеют следующий вид:

$$\begin{cases} \frac{dx_i}{dt} = \sum_k A_i^k x_k - \sum_l A_l^i x_i, & i = 1, 2, \dots, N. \end{cases} \quad (1)$$

Физический смысл отдельных членов в уравнении (1) таков:

– член слева – изменение концентрации ядер x_i нуклида i в единицу времени;

– первый член справа – концентрация ядер нуклида i , образовавшегося путем всех возможных превращений $k \rightarrow i$ за единицу времени (суммирование по k распространяется на все случаи, для которых $A_i^k \neq 0$);

– второй член справа – концентрация ядер нуклида i , уничтоженных за единицу времени (суммирование по l распространяется на все случаи, для которых $A_l^i \neq 0$);

– N – общее число нуклидов в цепочке трансмутации [4].

При этом x_i – концентрация ядер, в качестве ее размерности принято рассматривать млн^{-1} . Таким образом, она обозначает количество определенного вида ядер на 10^6 ядер состава. Начальные условия для задачи трансмутации определяются стартовым нуклидным составом материала и записываются в виде

$$x_i(0) = \begin{cases} x_{i,0}, & \text{если } i \text{ содержится в исходном веществе,} \\ 0, & \text{если нет,} \end{cases}$$

где $x_{i,0}$ – концентрация ядер нуклида i в начальный момент времени.

На атомном уровне математической моделью нуклидных превращений каждого ядра в материале (происходящих в результате ядерных реакций с нейтронами и в результате радиоактивных распадов) является случайный процесс с непрерывным временем и дискретными состояниями. При изучении радиационного воздействия на материалы применять эту микроскопическую математическую модель нереально, так как рассматриваются образцы, содержащие 10^{20} – 10^{26} нуклидов. В этом случае общепринятой макроскопической математической моделью служит система дифференциальных уравнений (1). Каждая переменная этой системы уравнений описывает динамику количества (или концентрации) ядер соответствующего нуклида. Матрица скоростей реакций состоит из двух слагаемых, первое слагаемое представляет ядерные реакции с облучающим нейтронным потоком, второе слагаемое представляет скорости нуклидных превращений для всех каналов, обусловленных радиоактивными распадами. Второе слагаемое не зависит от условий облучения и определяется лишь константами радионуклидов.

3. Задача ядерной трансмутации в терминах теории графов

Итак, задачей расчета ядерной трансмутации является задача Коши для системы линейных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами размерности n и с начальными условиями для вектора нуклидного состава. Из непрерывной задачи решения линейной системы обыкновенных дифференциальных уравнений на основе вводимых далее определений (отношения взаимности нуклидов и отношения накопления на множестве сильно связанных подмножеств нуклидов) сделан переход к задаче дискретной оптимизации (ЗДО) схемы нуклидных превращений. Далее ЗДО разветвленной блочной схемы нуклидных превращений формализована в терминах теории графов.

Итак, сначала приведем несколько определений относительно структуры схемы нуклидных превращений.

Определение 1. *Набором нуклидов* называется множество всех нуклидов, включенных в схему превращений.

Определение 2. Два нуклида из набора называются *взаимными*, если в графе существуют направленные пути из первого нуклида во второй и из второго нуклида в первый (при этом рассматриваются и пути нулевой длины, т.е. всякий нуклид взаимен самому себе).

Данное определение на наборе нуклидов задает специальное бинарное отношение. Очевидно, что оно является рефлексивным, симметричным и транзитивным и, следовательно, является отношением эквивалентности и определяет разбиение набора на *классы* взаимных нуклидов.

Определение 3. Класс взаимных нуклидов называется *компонентой*, или блоком.

Определение 4. Компонента *B* *накапливается* из компоненты *C* тогда и только тогда, когда для некоторого нуклида *c* из *C* и нуклида *b* из *B* в графе существует направленный путь из *c* в *b*.

Бинарное отношение накопления на множестве компонент транзитивно. Если компонента *B* накапливается из компоненты *C* и *C* накапливается из *B*, то $B = C$. Следовательно, отношение накопления антисимметрично и является на множестве блоков отношением частичного порядка.

Очевидно, что каждая компонента является сильно связанным подмножеством вершин ориентированного мультиграфа *G*.

4. Примеры представления графов в задаче ядерной трансмутации

В рассматриваемой нами задаче ядерной трансмутации изучается система связей между различными объектами (нуклидами). Объекты являются *вершинами* и отмечаются точками, а связи между вершинами являются *дугами* и отмечаются стрелками с соответствующими точками (рис. 1, *a*).

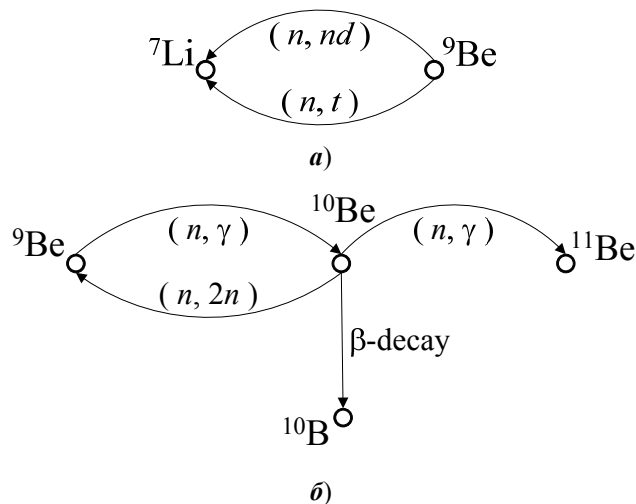


Рис. 1. Графы в задаче ядерной трансмутации:

a – фрагмент из схемы трансмутации ${}^9\text{Be}$ с образованием ${}^7\text{Li}$;
b – фрагмент из схемы трансмутации ${}^9\text{Be}$ с образованием ${}^{11}\text{Be}$

Все применяемые далее понятия теории графов согласованы с [5]. *Графом* называется алгебраическая система $G = \langle M, R \rangle$, где R – двухместный предикатный символ. Элементы носителя M называются *вершинами* графа G , а элементы бинарного отношения $R \subseteq M^2$ – *дугами*. Таким образом, дугами являются пары вершин $(a, b) \in R$. При этом дуга (a, b) называется *исходящей из вершины a и заходящей в вершину b* .

Пример 1. Изображение графа G с множеством вершин $M = \{ {}^7\text{Li}, {}^9\text{Be} \}$

и множеством дуг $R = \{ (n, nd), (n, t) \}$ представлено на рис. 1, **a**, где (n, nd) – захват нейтрона n с испусканием нейтрона n и дейтерия d ($d = {}^2\text{H}$); (n, t) – захват нейтрона n с испусканием трития t ($t = {}^3\text{H}$). В задаче представления трансмутаций в некотором материале при облучении в виде графа имеется несколько дуг: (n, t) , (n, nd) , исходящих из вершины ${}^9\text{Be}$ и заходящих в вершину ${}^7\text{Li}$, – такие дуги называются кратными (рис. 1, **a**). При этом мы используем понятие мультиграфа.

Мультиграфом G называется тройка $\langle M, U, P \rangle$, в которой M – множество вершин, U – множество дуг, а $P \subseteq M \times U \times M$ – 3-местный предикат, называемый инцидентором и представляемый следующим образом: $(a, u, b) \in P$ тогда и только тогда, когда дуга u исходит из вершины a и заходит в вершину b . Граф $G = \langle M, R \rangle$ называется ориентированным (орграфом), если найдется дуга $(a, b) \in R$, такая что $(b, a) \notin R$.

Пусть S_M, S_P – множества меток. *Пометкой* или *распределением меток* мультиграфа $G = \langle M, U, P \rangle$ называется пара функций $f: M \rightarrow S_M$ (*распределение меток вершин*) и $g: P \rightarrow S_P$ (*распределение меток дуг*). Пятёрка $\langle M, U, P, f, g \rangle$ называется *взвешенным* или *помеченным* графом. Для вершины $a \in M$ элемент $f(a)$ называется *весом вершины a* , а для дуги $(a_i, u, a_j) \in P$ элемент $g(a_i, u, a_j)$ – *весом дуги (a_i, u, a_j)* . Каждая вершина графа из множества M соответствует определенному нуклиду; при этом в дальнейшем изложении термины «нуклид» и «вершина» являются синонимами. Также синонимами являются термины «дуга графа» из множества U и «канал превращения нуклида» (распадам радионуклидов и реакциям нейтронов с ядрами), для которых $(a, u, b) \in P$ тогда и только тогда, когда дуга u исходит из вершины a и заходит в вершину b . Для вершины $a \in M$ элемент $f(a)$ – вес вершины a , соответствующий концентрации определенного для вершины a нуклида, т.е. количество атомов нуклида на 10^6 атомов состава (млн^{-1}). Каждая дуга графа соответствует каналу превращения, обусловленному ядерной реакцией или распадом, т.е. для дуги $u \in U$ элемент $g(u)$ – вес дуги u , который определяется значением скорости превращения. Размерность скорости – с^{-1} , обычный диапазон значений – $[10^{-30} \dots 10^{-15}]$.

Пример 2. Пусть

$$M = \{ {}^9\text{Be}, {}^{10}\text{Be}, {}^{11}\text{Be}, {}^{10}\text{B} \},$$

$$U = \{(n, \gamma), (n, 2n), (\beta - decay)\},$$

$$P = \left\{ \left({}^9\text{Be}(n, \gamma) {}^{10}\text{Be} \right), \left({}^{10}\text{Be}(n, 2n) {}^9\text{Be} \right), \right.$$

$$\left. \left({}^{10}\text{Be}(n, \gamma) {}^{11}\text{Be} \right), \left({}^{10}\text{Be}(\beta - decay) {}^{10}\text{B} \right) \right\},$$

$$f: M \rightarrow S_M,$$

где S_M – множество меток со значениями концентраций вершин-нуклидов для природной композиции бериллия; $g: P \rightarrow S_P$, где S_P – множество меток со значениями скоростей ядерных реакций в бериллии в условиях облучения ячейки 52 активной зоны реактора СМ с газовым заполнением;

$$f({}^9\text{Be}) = 10^6, \quad f({}^{10}\text{Be}) = 0, \quad f({}^{11}\text{Be}) = 0, \quad f({}^{10}\text{B}) = 0,$$

$$g\left({}^9\text{Be}(n, \gamma) {}^{10}\text{Be}\right) = 1,84 \cdot 10^{-12}, \quad g\left({}^{10}\text{Be}(n, 2n) {}^9\text{Be}\right) = 1,03 \cdot 10^{-12},$$

$$g\left({}^{10}\text{Be}(n, \gamma) {}^{11}\text{Be}\right) = 2,82 \cdot 10^{-13}, \quad g\left({}^{10}\text{Be}(\beta - decay) {}^{10}\text{B}\right) = 1,37 \cdot 10^{-14}.$$

Помеченный граф $\langle M, U, P, f, g \rangle$ изображен на рис. 1,б и представляет собой фрагмент схемы ядерной трансмутации в бериллии перед облучением. Заметим, что условие сохранения баланса ядер до и после реакторного облучения для рассматриваемой модели заключается в том, что

$$\sum_{i=1}^n f(m_i) = 10^6 - \text{const}, \quad m_i \in M.$$

Пример 3. Граф, представленный на рис. 1,б, имеет три сильно связанные компоненты, задаваемые множествами вершин $\{{}^9\text{Be}, {}^{10}\text{Be}\}$, $\{{}^{11}\text{Be}\}$ и $\{{}^{10}\text{B}\}$ – поскольку матрицы достижимости S и контрдостижимости Q графа имеют следующий вид:

$$(b_{ij}) = E + A_G + A_G^2 + \dots + A_G^n =$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} +$$

$$+ \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & 2 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$C = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, Q = C^T = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}, C \times Q = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

5. Физические основы стационарной задачи ядерной трансмутации

Условие стационарности в постановке исходной задачи подразумевает точечную трансмутацию и не допускает возможности учета выгорания топлива, приводящего к изменению нейтронного спектра. Мощность реактора и пространственные распределения групповых потоков остаются неизменными. Влияние этого приближения на основные нейтронно-физические характеристики реактора нужно учитывать в виде допусков и поправок на конечный результат расчета ядерной трансмутации. Желательно получить необходимые поправки в дальнейших исследованиях при верификации расчетных моделей и тестовых вариантов.

В расчетах стационарной задачи ядерной трансмутации изменения нейтронного спектра не учитываются, поэтому согласно [4] и приведенным выше обозначениям выпишем цепочку накопления произвольного радионуклида за весь период облучения произвольного конструкционного материала, предполагая, что период облучения состоит из временных промежутков работы реактора на мощности и его остановок:

$$\left. \begin{aligned} x_1 &= x_0 \cdot e^{R_1 t_1} \\ x_2 &= x_1 \cdot e^{-\lambda t_2} \\ x_3 &= x_2 \cdot e^{R_2 t_3} \\ x_4 &= x_3 \cdot e^{-\lambda t_4} \\ &\dots \end{aligned} \right\} x_n = x_0 \cdot e^{R_1 t_1 - \lambda t_2 + R_2 t_3 - \lambda t_4 + \dots - R_k t_{2k-1} - \lambda t_{2k}}. \quad (2)$$

При этом для решения стационарной задачи ядерной трансмутации нужно усреднить значение скорости накопления радионуклида. Для этого вводится среднее значение скорости в виде R ; таким образом, формула определения концентрации искомого радионуклида переписывается в виде $x_n = x_0 \cdot e^{Rt}$, где R – усредненное значение скорости образования радионуклида с учетом ядерного накопления и убыли искомого нуклида. Выразим скорость образования произвольного радионуклида через среднее сечение и плотность потока нейтронов реакторного облучения, получим $\bar{\sigma} \cdot \Phi \cdot t = \ln \left(\frac{x_n}{x_0} \right)$. С другой стороны, из (2) аналогично проведенным рассуждениям получим

$$\bar{\sigma} \cdot \Phi \cdot t = R_1 \cdot t_1 - \lambda \cdot t_2 + R_2 \cdot t_3 - \lambda \cdot t_4 + \dots - R_k \cdot t_{2k-1} - \lambda \cdot t_{2k}.$$

Заметим, что общее время расчета t складывается из периодов облучения $t_1, t_3, t_5, t_7, \dots, t_{2k-1}$, где $k = (n + 1)/2$ – количество так называемых микро-

кампаний [4], в течение которых искомый материал находился под реакторным облучением, а также периодов остановки реактора $t_2, t_4, t_6, t_8, \dots, t_{2k}$ между соответствующими микрокампаниями, т.е.

$$t = t_1 + t_2 + t_3 + \dots + t_{2k-1} + t_{2k} = \sum_1^{2k} t_i.$$

Поэтому

$$\begin{aligned} \bar{\sigma} \cdot \varphi \cdot t &= R_1 \cdot t_1 + R_2 \cdot t_3 + \dots + R_k \cdot t_{2k-1} - \lambda \cdot t_2 - \lambda \cdot t_4 \dots - \lambda \cdot t_{2k}, \text{ или} \\ \bar{\sigma} \cdot \varphi \cdot t &= \bar{\sigma} \cdot \varphi_1 \cdot t_1 + \bar{\sigma} \cdot \varphi_2 \cdot t_3 + \dots + \bar{\sigma} \cdot \varphi_k \cdot t_{2k-1} - \lambda \cdot t_2 - \lambda \cdot t_4 \dots - \lambda \cdot t_{2k}, \\ \varphi &= \frac{\bar{\sigma} \cdot \varphi_1 \cdot t_1 + \bar{\sigma} \cdot \varphi_2 \cdot t_3 + \dots + \bar{\sigma} \cdot \varphi_k \cdot t_{2k-1} - \lambda \cdot t_2 - \lambda \cdot t_4 \dots - \lambda \cdot t_{2k}}{\bar{\sigma} \cdot t}, \\ \varphi &= \frac{\varphi_{\text{ном}} \cdot (i_1 \cdot t_1 + i_2 \cdot t_3 + \dots + i_k \cdot t_{2k-1})}{t} - \frac{\lambda \cdot (t_2 + t_4 + \dots + t_{2k})}{\bar{\sigma} \cdot t}, \end{aligned} \quad (3)$$

где $\bar{\sigma} = \frac{1}{\varphi} \int_{E_0}^{E_{\max}} \sigma(E) \cdot f(E) dE$.

Исходя из выведенной формулы (3) для усреднения потока по всем микрокампаниям, для ее оценки можно воспользоваться приближением до первого члена:

$$\varphi = \frac{\varphi_{\text{ном}} \cdot (i_1 \cdot t_1 + i_2 \cdot t_3 + \dots + i_k \cdot t_{2k-1})}{t},$$

где $i_1, i_2, i_3, i_4, \dots, i_k$ – доля отклонения плотности нейтронного потока от номинала по микрокампаниям.

Итак, нами введено усреднение для оценки нейтронно-физических характеристик реакторного облучения, что позволяет свести задачу ядерной трансмутации из ее общей постановки в стационарный вид.

6. Специфика методической и вычислительной погрешностей

Диапазон скоростей реакций весьма широк, это приводит к системам дифференциальных уравнений с высоким коэффициентом жесткости – до $\sim 10^{30}$. Для численного решения применен метод полного вычисления собственных значений и собственного базиса матрицы системы. Матрица системы дифференциальных уравнений приводится посредством подходящей нумерации нуклидов к блочно-треугольному виду с размерностью диагональных блоков не более заданной величины $\text{Dim}_{\max}$. Для большинства схем с числом нуклидов, превышающим $\text{Dim}_{\max}$, требуется упростить схему, чтобы удовлетворить этому требованию. Размерность системы в расчетах может достигать 50 и более. Отсюда возникает задача дискретной оптимизации: выполнить необходимые упрощения схемы так, чтобы дополнительная методическая погрешность, обусловленная сделанными упрощениями, была минимальной. Чтобы обеспечить приемлемые значения вычислительных погрешностей, на сложность схемы накладываются ограничения. При выполнении

данных ограничений матрица системы имеет блочно-треугольный вид, размерность диагональных блоков не превышает установленного максимального значения (в последней версии компьютерной программы максимальная допустимая размерность блока $Dim_{\max} = 10$). Задача вычисления собственных значений и собственного базиса факторизуется по диагональным блокам. Такой подход преследует цель достичь баланса методической и вычислительной погрешностей в расчете трансмутаций. Блочно-треугольный вид матрицы позволяет снизить вычислительную погрешность, но для этого необходимо упростить схему нуклидных превращений.

7. Математическая постановка задачи ядерной трансмутации

Схема ядерной трансмутации в облучаемом материале представляет взвешенный (помеченный) ориентированный мультиграф $G = \langle M, U, P, f, g \rangle$. Путем операции добавления к графу $G = \langle M, U, P, f, g \rangle$ вершины *Other* образуется граф $G' = \langle M \cup \{Other\}, U, P, f, g \rangle$. Таким образом, в схему ядерной трансмутации вводится дополнительная *коллекторная вершина*, в которую перенаправляются некоторые каналы превращений. Значение переменной в системе уравнений (1), соответствующей *коллекторной вершине*, дает динамическую гарантированную оценку методической погрешности [6, 7]. Задача дискретной оптимизации схемы ядерной трансмутации состоит в том, чтобы *минимизировать методическую погрешность*, обусловленную упрощениями схемы для обеспечения блочно-треугольного представления матрицы.

Иными словами, задачу ядерной трансмутации можно описать следующим образом. Удаляя из заданного ориентированного мультиграфа $G = \langle M, U, P, f, g \rangle$ дуги, нужно прийти к такому подграфу G' , в котором количество вершин в любом блоке не превышало бы заданного числа $Dim_{\max}$, и при этом $P' \subset P$. С учетом того, что для каждой отбрасываемой дуги (a, u, b) потеря концентрации равна интегралу превращения по соответствующему каналу за рассматриваемое время облучения материала, необходимо отброшенные дуги перенаправить в коллекторную вершину *Other*. Из введенных нами определений следует, что операции удаления дуги (a, u, b) и добавления дуги $(a, u, Other)$ к графу G' состоят в образовании графа

$$G'' = \langle M \cup \{Other\}, U, P \cup \{(a, u, Other)\} \setminus \{(a, u, b)\}, f, g \rangle,$$

причем элемент $g(u)$ – вес дуги u сохраняется. Цель задачи ядерной трансмутации состоит в минимизации значения концентрации коллекторной вершины *Other* для графа $G'' = \langle M \cup \{Other\}, U, P \cup \{(a, u, Other)\} \setminus \{(a, u, b)\}, f, g \rangle$.

Заключение

Возникает вопрос: что необходимо сделать для возможности *практического* решения описанных в данной статье NP-трудных проблем с помощью детерминированных алгоритмов. Для этого мы в следующей публикации предполагаем рассмотреть *эвристический* подход ([8, 9] и др.), при котором

снимается требование о том, чтобы алгоритм обязательно находил точное решение заданной проблемы. В этом случае алгоритм находит допустимое, но не обязательно оптимальное решение, так как оно обладает некоторыми менее жесткими, но при этом рациональными и обоснованными свойствами. К такому свойству можно отнести требование о том, чтобы стоимость решения находилась внутри некоторых заранее заданных границ или была бы не слишком далека от оптимальной.

Например, обычно условно можно считать, что:

- для химии, металлургии сплавов и смежных с ними наук в качестве малой методической погрешности принимается значение 1000 млн^{-1} ;

- для спектрометрии, нейтронной дозиметрии, в нейтронно-физических расчетах при сопровождении эксплуатации реакторов и смежных с ними наук – вследствие необходимости значительно более точных расчетов – в качестве малой методической погрешности принимается значение $0,1 \text{ млн}^{-1}$.

Итак, в следующей публикации предполагается:

- привести описание точного алгоритма для ЗДО малых размерностей;
- описать подходы к построению *эвристических* алгоритмов решения сформулированной нами ЗДО; прежде всего применение незавершенного метода ветвей и границ, а также алгоритмов локального поиска;

- привести конкретные результаты, а именно краткое описание получаемых трансмутационных схем и значения оценок методической погрешности (получаемых в результате работы разных эвристических оптимизационных алгоритмов).

Список литературы

1. **Ма, Б. М.** Материалы ядерных энергетических установок / Б. М. Ма. – М. : Энергоатомиздат, 1987. – 408 с.
2. **Громкович, Ю.** Теоретическая информатика. Введение в теорию автоматов, теорию вычислимости, теорию сложности, теорию алгоритмов, рандомизацию, теорию связи и криптографию / Ю. Громкович. – СПб. : БХВ-Петербург, 2010. – 336.
3. **Hromkovič, J.** Algorithmics for Hard Problems: Introduction to Combinatorial Optimization, Randomization, Approximation, and Heuristics / J. Hromkovič. – 2nd Ed. – Springer, 2001.
4. **Герасимов, А. С.** Справочник по образованию нуклидов в ядерных реакторах / А. С. Герасимов, Т. С. Зарицкая, А. П. Рудик. – М. : Энергоатомиздат, 1989. – 575 с.
5. **Харари, Ф.** Теория графов / Ф. Харари. – М. : Мир, 1973. – 301 с.
6. **Shimansky, G. A.** TRANS_MU computer code for computation of transmutant formation kinetics in advanced structural materials for fusion reactors / G. A. Shimansky. – J. Nucl. Mater. – 1999. – № 271–272. – P. 30–34.
7. **Белозерова, А. Р.** Оптимизация схемы расчета трансмутации методом ветвей и границ / А. Р. Белозерова, Г. А. Шиманский // Физическое моделирование изменения свойств реакторных материалов в номинальных и аварийных условиях : сб. рефератов семинара. – Димитровград : ГНЦ РФ НИИАР, 2005. – С. 75–77.
8. **Мельников, Б.** Мультиэвристический подход к задачам дискретной оптимизации / Б. Мельников // Кибернетика и системный анализ (НАН Украины). – 2006. – № 3. – С. 32–42.
9. **Мельников, Б.** Параллельная реализация мультиэвристического подхода в задаче сравнения генетических последовательностей / Б. Мельников, А. Панин //

Вектор науки Тольяттинского государственного университета. – 2012. – № 4. – С. 83–86.

References

1. Ma B. M. *Materialy yadernykh energeticheskikh ustanovok* [Materials of nuclear power plants]. Moscow: Energoatomizdat, 1987, 408 p.
2. Gromkovich Yu. *Teoreticheskaya informatika. Vvedenie v teoriyu avtomatov, teoriyu vychislivosti, teoriyu slozhnosti, teoriyu algoritmov, randomizatsiyu, teoriyu svyazi i kriptografiyu* [Theoretical informatics. Introduction into the theory of automata, the theory of computability, the theory of complexity, the theory of algorithms, randomization, the theory of communication cryptography]. Saint Petersburg: BKhV-Peterburg, 2010, 336.
3. Hromkovič J. *Algorithmics for Hard Problems: Introduction to Combinatorial Optimization, Randomization, Approximation, and Heuristics*. 2nd Ed. Springer, 2001.
4. Gerasimov A. S., Zaritskaya T. S., Rudik A. P. *Spravochnik po obrazovaniyu nuklidov v yadernykh reaktorakh* [Reference book on nuclide formation in nuclear reactors]. Moscow: Energoatomizdat, 1989, 575 p.
5. Kharari F. *Teoriya grafov* [Graph theory]. Moscow: Mir, 1973, 301 p.
6. Shimansky G. A. *J. Nucl. Mater.* 1999, no. 271–272, pp. 30–34.
7. Belozeroва A. R., Shimansky G. A. *Fizicheskoe modelirovanie izmeneniya svoystv reaktornykh materialov v nominal'nykh i avariynnykh usloviyakh: sb. referatov seminara* [Physical simulation of reactor material properties changes in nominal emergency conditions: collected reports of the seminar]. Dimitrovgrad: GNTs RF NIIAR, 2005, pp. 75–77.
8. Mel'nikov B. *Kibernetika i sistemnyy analiz (NAN Ukrainy)* [Cybernetics and system analysis (National Academy of Sciences of Ukraine)]. 2006, no. 3, pp. 32–42.
9. Mel'nikov B., Panin A. *Vektor nauki Tol'yatinskogo gosudarstvennogo universiteta* [Science vector of Togliatti State University]. 2012, no. 4, pp. 83–86.

Белозерова Алла Равильевна

кандидат физико-математических наук,
старший научный сотрудник,
Государственный научный центр
Научно-исследовательского института
атомных реакторов (Россия, Ульяновская
область, г. Димитровград-10)

E-mail: lmnii@niiar.ru

Belozeroва Alla Ravil'evna

Candidate of physical and mathematical
sciences, senior staff scientist, State
Scientific Center of the Research Institute
of Nuclear Reactors (10-Dimitrovgrad,
Ulyanovsk region, Russia)

Мельников Борис Феликсович

доктор физико-математических наук,
профессор, кафедра прикладной
математики и информатики,
Тольяттинский филиал Самарского
государственного университета
(Россия, г. Тольятти,
ул. Юбилейная, 31Г)

E-mail: B.Melnikov@tltsu.ru

Mel'nikov Boris Feliksovich

Doctor of physical and mathematical
sciences, professor, sub-department
of applied mathematics and informatics,
Togliatti branch of Samara State University
(31g Yubileynaya street, Togliatti, Russia)

УДК 519.176, 519.622.2, 519.688

Белозерова, А. Р.

Подход к математическому моделированию трансмутационных процессов в ядерных энергетических установках / А. Р. Белозерова, Б. Ф. Мельников // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2014. – № 2 (30). – С. 88–100.