

УДК 539.122:518.5

ИНТЕГРИРОВАНИЕ УРАВНЕНИЙ ЭВОЛЮЦИИ ЯДЕРНОГО СОСТАВА ВЕЩЕСТВА В ПОСТОЯННЫХ РАДИАЦИОННЫХ ПОЛЯХ

Д. Г. Модестов
(РФЯЦ-ВНИИТФ)

Предлагаются схемы численного интегрирования набора дифференциальных уравнений, возникающих при решении задач изменения ядерного состава вещества, находящегося в поле постоянного во времени радиационного излучения. Приводятся оценки точности различных схем. Представлены результаты расчета набора методических задач.

Ключевые слова: ядерный состав, изотопный состав, выгорание, реактор, распад, сечение реакции, скорость наработки, задача Коши, численные методы, схема интегрирования, порядок точности, оценка погрешности.

Введение

Среди задач, для которых необходимо определять зависимость ядерного состава вещества от времени, можно выделить те, в которых допустимо пренебречь переносом образующихся ядер. В частности, в их число входят расчет характеристик ядерного реактора, оценка состояния конструкций, находящихся под внешним облучением, описание релаксации после снятия радиационной нагрузки и т. п. В этих задачах основными процессами, приводящими к изменению изотопного состава, являются взаимодействие радиоактивного излучения с атомными ядрами вещества и самопроизвольный распад последних.

Следует отметить, что при решении указанных задач для систем, в которых влияние облучения относительно невелико, можно использовать методы, описанные в работе [1]. Однако такое приближение не всегда допустимо. В частности, оно не работает для таких важных прикладных задач, как расчет энергетических установок, основанных на реакциях вынужденного деления тяжелых ядер нейтронами. За время эксплуатации в этих системах происходит как выгорание первичного ядерного топлива, так и наработка новых элементов. Все это приводит к заметному изменению нейтронного поля, которое, в свою очередь, влечет за собой изменение скоростей наработок. Таким образом, задача становится нелинейной. Подобная же ситуация возникает и тогда, когда рассматривается достаточно толстый слой вещества, находящийся под внешним облучением.

Решение нелинейной задачи в общем случае может быть только приближенным. В рассматриваемых случаях дополнительным приближением обычно является предположение (см., например, [2, с. 445]) о том, что на любой момент существует конечный временной отрезок, в течение которого плотность числа частиц излучения можно считать постоянной. Еще одним предположением является постоянство на этом временном отрезке других физических характеристик системы, например температуры, влияющих на изменение ядерного состава.

С учетом указанных предположений решение строится итерационно. Возможная схема будет следующей. Сначала производится расчет физических характеристик системы, в частности, функционалов от плотности числа частиц излучения на начальный момент времени. Потом рассчитывается ядерный состав на конец заданного временного промежутка в предположении постоянства (или

определенной временной зависимости) остальных физических характеристик. Далее опять производится расчет этих характеристик с новым составом в данный момент времени. На этом же этапе возможны дополнительные управленческие действия, такие как изменение конфигурации системы (например, перегрузка топлива в реакторе, изменение положения регулирующих элементов и т. п.). Затем опять производится пересчет ядерного состава и т. д., пока не будет достигнуто заданное время.

Здесь будет рассматриваться второй этап, т. е. определение изменения ядерного состава при заданных остальных физических характеристиках системы.

Основные уравнения

В качестве математической модели при решении задач изменения ядерного состава обычно рассматривается геометрическое многообразие, на котором задано поле ядерных концентраций. Здесь ядра будут нумероваться, как в [1]. Пусть для определенности $n^k(\vec{r}, t)$ — значение концентрации ядер k -го сорта (сорт характеризуется числом протонов и нейтронов, а также изомерным уровнем) в точке с пространственными координатами \vec{r} в момент времени t .

Одним из процессов, приводящих к изменению ядерного состава, является самопроизвольный распад. Мгновенная скорость изменения концентрации ядер k -го сорта за счет распадов может быть представлена в виде

$$\omega_d^k = \sum_j \bar{\Lambda}^{k,j} n^j(\vec{r}, t), \quad (1)$$

где $\bar{\Lambda}^{k,j}$ — компоненты матрицы распадов $\bar{\Lambda}$, явный вид которых приводится в [1], а здесь определяться не будет. Для дальнейшего важно только то, что $\bar{\Lambda}$ — матрица с постоянными коэффициентами, которая преобразуется к треугольному виду перенумерацией ядер.

Другим процессом, вносящим вклад в изменение состава, является взаимодействие с излучением. Для этого процесса величина, аналогичная (1), связана с плотностью числа частиц излучения следующим образом:

$$\omega_p^k = \sum_j n^j(\vec{r}, t) \int d\mathbf{x} N(\mathbf{x}, \vec{r}, t) v(\mathbf{x}) \sum_m w_m^{k,j}(\mathbf{x}) \sigma_m^j(\mathbf{x}), \quad (2)$$

где \mathbf{x} — набор параметров частицы; $N(\mathbf{x}, \vec{r}, t)$ — плотность частиц излучения; $v(\mathbf{x})$ — скорость частиц; $\sigma_m^j(\mathbf{x})$ — микроскопическое сечение m -й реакции на j -м ядре; $w_m^{k,j}(\mathbf{x})$ — баланс ядер сорта k на данной реакции (число ядер после реакции — число ядер до реакции). Следует заметить, что в важном для практики случае чисто нейтронного излучения в качестве \mathbf{x} можно принять энергию нейтрона.

Как было отмечено выше, здесь будут рассматриваться задачи, в которых изменение ядерного состава происходит только за счет двух указанных процессов. Соответственно скорость изменения концентрации является суммой скоростей (1) и (2):

$$\frac{\partial}{\partial t} n^k(\vec{r}, t) = \sum_j n^j(\vec{r}, t) \left(\bar{\Lambda}^{k,j} + \int d\mathbf{x} N(\mathbf{x}, \vec{r}, t) v(\mathbf{x}) \sum_m w_m^{k,j}(\mathbf{x}) \sigma_m^j(\mathbf{x}) \right). \quad (3)$$

Однако уравнение в виде (3) можно решить только аналитически, что в общем случае невозможно. Для использования численных методов необходимо построить конечномерное приближение поля ядерных концентраций. Это приближение главным образом определяется методом расчета радиационных полей в системе. Так, при использовании разностных методов для решения задач переноса, как, например, в [2], ядерные концентрации задаются в конечном наборе пространственных точек, связанных с пространственной сеткой. Если же для расчета применяется метод статистического моделирования, вся система делится на конечное число пространственных областей. Одним из приближений, используемых при таком подходе, является постоянство концентраций в каждой из

областей. Здесь будет рассматриваться именно оно. Хотя имеются более слабые приближения, они приводят к усложнению схемы расчета, и их рассмотрение представляется темой для отдельной работы.

Таким образом, для описания системы будет использоваться представление системы в виде набора пространственных элементов, под которыми в зависимости от метода решения задачи переноса подразумевается либо набор пространственных точек, либо набор областей. Для удобства пространственные элементы будут индексироваться греческими буквами. Поле концентраций представляется набором чисел n_α^k , являющихся концентрациями ядер k -го сорта в пространственном элементе α . При этом \mathbf{n}_α (без верхнего индекса) в дальнейшем будет обозначать набор концентраций ядер в соответствующем пространственном элементе, а \mathbf{n} (вообще без индексов) — состояние системы. Для записи эволюционного уравнения удобно для каждого пространственного элемента определить матрицу $\tilde{\Omega}_\alpha$, в общем случае зависящую от времени, которая в дальнейшем будет называться матрицей реакций. Ее явный вид зависит от представления. Если в качестве пространственного элемента используется область α , то

$$\tilde{\Omega}_\alpha^{k,j}(t) = \frac{1}{V_\alpha} \int_\alpha d\vec{r} \int d\mathbf{x} N(\mathbf{x}, \vec{r}, t) v(\mathbf{x}) \sum_m w_m^{k,j}(\mathbf{x}) \sigma_m^j(\mathbf{x}), \quad (4)$$

где через V_α обозначен объем этой области. Несколько иное выражение получается, если в качестве пространственного элемента используется точка \vec{r}_α :

$$\tilde{\Omega}_\alpha^{k,j}(t) = \int d\mathbf{x} N(\mathbf{x}, \vec{r}_\alpha, t) v(\mathbf{x}) \sum_m w_m^{k,j}(\mathbf{x}) \sigma_m^j(\mathbf{x}). \quad (5)$$

Как можно видеть, с учетом введенных обозначений уравнение (3) для каждого пространственного элемента можно записать, используя векторное представление:

$$\frac{d}{dt} \mathbf{n}_\alpha(t) = \tilde{\Lambda} \mathbf{n}_\alpha(t) + \tilde{\Omega}_\alpha(t) \mathbf{n}_\alpha(t). \quad (6)$$

Действительно, в случае точечного представления это и есть (3) в конкретной точке. В случае же областного представления для получения (6) нужно проинтегрировать (3) по данной области, учитывая постоянство концентраций в последней.

Решение задачи Коши для набора дифференциальных уравнений (6), соответствующих набору пространственных элементов системы, дает значения концентраций на любой момент времени. Хотя эти уравнения имеют достаточно простой вид, нахождение точного решения в общем случае не представляется возможным. Соответственно целью настоящей работы является построение приближенного решения задачи изменения ядерного состава.

Чтобы иметь возможность оценивать погрешность данного решения, необходимо определить метрику на пространстве состояний. Для этого удобно считать \mathbf{n}_α элементом конечномерного векторного пространства, например, с нормой l_1 из [3]:

$$\|\mathbf{n}_\alpha\| = \sum_k |n_\alpha^k|. \quad (7)$$

Следует отметить, что такое определение имеет прозрачный физический смысл. Так, если вектор \mathbf{n}_α лежит в физической области (т. е. все $n_\alpha^k \geq 0$), то его норма равна суммарной концентрации всех ядер в данном пространственном элементе. Расстояние между состояниями \mathbf{n} и \mathbf{m} удобно определить как

$$\rho(\mathbf{n}, \mathbf{m}) = \max_\alpha \rho_\alpha \|\mathbf{n}_\alpha - \mathbf{m}_\alpha\|, \quad (8)$$

где ρ_α — набор положительных чисел, характеризующих важность каждого пространственного элемента и зависящих от задачи. Не ограничивая общности, можно считать, что $\rho_\alpha \in [0, 1]$. В частности, если все элементы равноправны, то $\rho_\alpha = 1$. С другой стороны, если изменение ядерного

состава в данном пространственном элементе практически не влияет на результаты расчета, то для этого элемента можно положить $\rho_\alpha = 0$. На практике это равносильно тому, что в указанном пространственном элементе не будет проводиться процедура решения.

Несложно видеть, что норма (7) индуцирует операторную норму, которую можно определить следующим образом:

$$\|A\| = \max_j \sum_i |A^{i,j}|. \quad (9)$$

В рассматриваемой математической модели матрица A представляет некоторый процесс, а ее компоненты $A^{i,j}$ определяют в этом процессе вклад в концентрацию i -го ядра от концентрации j -го. Соответственно норму можно интерпретировать как оценку максимально возможного влияния данного процесса при заданном количестве ядер.

Построение схемы решения задачи Коши для набора дифференциальных уравнений (6) будет рассмотрено ниже. Здесь же хотелось отметить то обстоятельство, что матрицы $\tilde{\Lambda}$ и $\tilde{\Omega}_\alpha$ в общем случае являются плохо обусловленными. Поэтому решение задачи Коши методами численного интегрирования типа Рунге—Кутты либо разложения в степенной ряд $e^{(\tilde{\Lambda} + \tilde{\Omega}_\alpha)t}$, предлагаемыми в [2], возможно только на временах, сравнимых с $\left\| \tilde{\Lambda} + \tilde{\Omega}_\alpha \right\|^{-1}$. Если рассматривать времена процессов, встречающиеся в большинстве практических задач, такой подход становится допустимым при условии пренебрежения наработкой короткоживущих ядер.

Впрочем, существуют и другие методы, не столь чувствительные к временному шагу. Наиболее подходящими являются методы решения жестких систем дифференциальных уравнений. Краткий обзор этих методов приводится в статье [4]. В их основе лежит использование неявной схемы интегрирования, которая, в свою очередь, требует обращения матрицы (в простейшем случае $1 - (\tilde{\Lambda} + \tilde{\Omega}_\alpha) \Delta t$). Кроме того, что обращение матрицы большой размерности (в реакторных задачах ~ 1500) является достаточно трудоемкой операцией, наличие положительных собственных значений матрицы $\tilde{\Lambda} + \tilde{\Omega}_\alpha$ может сделать задачу некорректной. Таким образом, использование подобных методов без дополнительных приближений, направленных на снижение размерности задачи, может приводить к значительным временным затратам и, возможно, к большим погрешностям округления (или к аварийным остановкам расчетов) при достаточно больших шагах интегрирования, если определитель обращаемой матрицы близок к нулю.

Сразу следует отметить, что алгоритм решения данной задачи, свободный от указанных недостатков, в случае $\tilde{\Omega}_\alpha = 0$ описан в работе [1]. Однако его использование даже с постоянной $\tilde{\Omega}_\alpha$ напрямую невозможно, так как основным свойством матрицы $\tilde{\Lambda}$, которое используется при построении данного алгоритма, является ее треугольный вид, который, в свою очередь, является следствием закона сохранения энергии. Для матрицы $\tilde{\Omega}_\alpha$ вследствие приноса энергии в ядро частицами излучения данное утверждение не имеет места. Однако возможен приближенный расчет, в котором эта матрица рассматривается как малая добавка к $\tilde{\Lambda}$. Степень малости определяет время расчета, и потому для построения эффективной процедуры решения удобно, чтобы $\left\| \tilde{\Omega}_\alpha \right\|$, определяемая соотношением (7), была как можно меньше. К сожалению, данная матрица может содержать компоненты с большими значениями. Но для большинства практических задач имеется возможность представлений

$$\tilde{\Lambda} = \Lambda^0 + \Lambda^1; \quad \tilde{\Omega}_\alpha(t) = \Omega_\alpha^0 + \Omega_\alpha^1(t), \quad (10)$$

где матрицы с индексом 0 являются треугольными и не зависящими от времени, а матрицы с индексом 1 имеют малую норму. При таком разложении уравнение (6) принимает вид

$$\frac{d}{dt} \mathbf{n}_\alpha(t) = \Lambda_\alpha \mathbf{n}_\alpha(t) + \Omega_\alpha(t) \mathbf{n}_\alpha(t), \quad (11)$$

где $\Lambda_\alpha = \Lambda^0 + \Omega_\alpha^0$; $\Omega_\alpha(t) = \Lambda^1 + \Omega_\alpha^1(t)$. Это уравнение по форме совпадает с (6), но в данном случае слагаемые имеют смешанную физическую природу и, кроме того, Λ_α зависит от пространственного элемента. Такое разложение зависит как от природы излучения, так и от самой системы. Здесь

только следует отметить, что диагональные элементы не нарушают треугольности, и потому их некоторая не зависящая от времени часть может быть всегда отнесена к Λ_α .

Так как решение задачи Коши для (6) строится приближенно, то появляется понятие максимально допустимой погрешности Δn , которое определяет допустимость приближения как выполнение условия

$$\rho(\mathbf{n}, \tilde{\mathbf{n}}) \leq \Delta n, \quad (12)$$

где \mathbf{n} — точное, а $\tilde{\mathbf{n}}$ — приближенное решение. С учетом определения метрики (8) это условие для произвольного пространственного элемента может быть записано в виде

$$\|\mathbf{n}_\alpha - \tilde{\mathbf{n}}_\alpha\| \leq \Delta n_\alpha \equiv \frac{\Delta n}{\rho_\alpha}, \quad (13)$$

где \mathbf{n}_α — точное, $\tilde{\mathbf{n}}_\alpha$ — приближенное решение, а Δn_α является максимально допустимой погрешностью в данном пространственном элементе.

Решение дифференциальных уравнений

Как уже было отмечено во Введении (см. также [2, с 445]), для большинства практических задач можно выбрать временной отрезок, в течение которого плотность числа частиц излучения с хорошей точностью будет постоянной. Величина этого отрезка зависит от задачи и на практике может быть оценена, например, методом численного эксперимента. Здесь будет рассматриваться построение схемы при условии, что этот интервал задан.

В случае постоянства плотности числа частиц, как можно видеть из (4), (5), компоненты матрицы $\tilde{\Omega}_\alpha$ и соответственно Ω_α не зависят ни от времени, ни от состава. Кроме того, уравнения (11) являются линейными и не зависимыми друг от друга (при разных α). Соответственно решение подзадачи для каждого α может быть проведено независимо. Таким образом, будет строиться численная схема для решения задачи Коши для уравнения (11) с точностью, определяемой условием (13).

Перед построением алгоритма необходимо заметить (это утверждение несложно проверить дифференцированием), что решение задачи Коши (11) соответствует решению интегрального уравнения

$$\mathbf{n}_\alpha(t) = e^{\Lambda_\alpha t} \mathbf{n}_\alpha(0) + \int_0^t d\tau e^{\Lambda_\alpha(t-\tau)} \Omega_\alpha \mathbf{n}_\alpha(\tau).$$

Учитывая также справедливость соотношения

$$\mathbf{n}_\alpha(t) = \mathbf{n}_\alpha(0) + (\Lambda_\alpha + \Omega_\alpha) \int_0^t d\tau \mathbf{n}_\alpha(\tau),$$

которое получается интегрированием исходного дифференциального уравнения, можно получить следующие интегральные уравнения:

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_\alpha(t) = & \left(e^{\Lambda_\alpha t} + \sum_{k=1}^m \frac{e^{\Lambda_\alpha t} - \sum_{j=0}^{k-1} \frac{(\Lambda_\alpha t)^j}{j!}}{\Lambda_\alpha^k} \Omega_\alpha (\Lambda_\alpha + \Omega_\alpha)^{k-1} \right) \mathbf{n}_\alpha(0) + \\ & + \int_0^t d\tau e^{\Lambda_\alpha(t-\tau)} \Omega_\alpha (\Lambda_\alpha + \Omega_\alpha)^m \int_0^\tau d\tau' \frac{(\tau - \tau')^{m-1}}{(m-1)!} \mathbf{n}_\alpha(\tau'), \quad m \geq 1, \end{aligned} \quad (14)$$

Следует обратить внимание, что в (14) выражение $\left(e^{\Lambda_\alpha t} - \sum_{j=0}^{k-1} \frac{(\Lambda_\alpha t)^j}{j!} \right) / \Lambda_\alpha^k$ обозначает матрицы, получающиеся подстановкой матрицы Λ_α вместо числа λ в степенной ряд действительных функций

$\left(e^{\lambda t} - \sum_{j=0}^{k-1} \frac{(\lambda t)^j}{j!} \right) / \lambda^k$. Такое обозначение принято потому, что, например, в выражении, записанном как $(e^{\Lambda_\alpha t} - 1) \Lambda_\alpha^{-1}$, обычно подразумевается, что оба сомножителя вычисляются отдельно. Однако в таком контексте оно не имеет смысла, так как матрица Λ_α в общем случае не является обратимой. Относительно вычисления матричных выражений, используемых в (14), можно заметить, что алгоритм вычисления матричной функции $f(\Lambda_\alpha)$, где f — произвольная скалярная функция, регулярная на спектре матрицы Λ_α , описан в работе [1].

Для построения схемы численного интегрирования удобно пренебречь последним членом в правой части уравнений (14). Обозначив через Δt шаг численного интегрирования, а через $\tilde{\mathbf{n}}$, как и в (12), приближенное решение, можно получить

$$\tilde{\mathbf{n}}_\alpha(t + \Delta t) = U_\alpha(\Delta t) \tilde{\mathbf{n}}_\alpha(t). \quad (15)$$

Здесь $U_\alpha(\Delta t)$ — оператор, который в соответствии с (14) можно представить как

$$U_\alpha(\Delta t) = e^{\Lambda_\alpha \Delta t} + \sum_{k=1}^m \frac{e^{\Lambda_\alpha \Delta t} - \sum_{j=0}^{k-1} \frac{(\Lambda_\alpha \Delta t)^j}{j!}}{\Lambda_\alpha^k} \Omega_\alpha (\Lambda_\alpha + \Omega_\alpha)^{k-1}.$$

Последовательное применение (15) позволяет получать приближенное решение для любых времен. При этом возникает проблема выбора шага интегрирования или связанная с ней проблема оценки точности решения. Эту точность удобно определить как норму невязки, которая, в свою очередь, определяется как разность между точным и приближенным решениями. Учитывая (15), несложно получить соотношение между невязками на двух последовательных шагах в следующем виде:

$$\mathbf{n}_\alpha(t_i) - \tilde{\mathbf{n}}_\alpha(t_i) = U_\alpha(\Delta t_i) (\mathbf{n}_\alpha(t_{i-1}) - \tilde{\mathbf{n}}_\alpha(t_{i-1})) + \mathbf{n}_\alpha(t_i) - U_\alpha(\Delta t_i) \mathbf{n}_\alpha(t_{i-1}),$$

где $\Delta t_i = t_i - t_{i-1}$. Соответственно невязка после k шагов интегрирования с учетом того, что $\mathbf{n}_\alpha(0) = \tilde{\mathbf{n}}_\alpha(0)$, может быть представлена в виде суммы:

$$\mathbf{n}_\alpha(t_k) - \tilde{\mathbf{n}}_\alpha(t_k) = \sum_{i=1}^k U_\alpha^{(k-i)}(\Delta t_k, \dots, \Delta t_{i+1}) (\mathbf{n}_\alpha(t_i) - U_\alpha(\Delta t_{i-1}) \mathbf{n}_\alpha(t_{i-1})),$$

где обозначено

$$U_\alpha^{(0)} = 1; \quad U_\alpha^{(k-i)}(\Delta t_k, \dots, \Delta t_{i+1}) = U_\alpha(\Delta t_k) \cdot U_\alpha(\Delta t_{i+1}).$$

Таким образом, принимая во внимание свойства нормы (см., например, [3]), погрешность расчета можно оценить с помощью следующего неравенства:

$$\|\mathbf{n}_\alpha(t_k) - \tilde{\mathbf{n}}_\alpha(t_k)\| \leq \sum_{i=1}^k \left\| U_\alpha^{(k-i)}(\Delta t_k, \dots, \Delta t_{i+1}) \right\| \|\mathbf{n}_\alpha(t_i) - U_\alpha(\Delta t_{i-1}) \mathbf{n}_\alpha(t_{i-1})\|. \quad (16)$$

Здесь удобно рассмотреть оба сомножителя в правой части (16) по отдельности. Для оценки первого можно принять во внимание то, что оператор U_α аппроксимирует экспоненту:

$$U_\alpha(\Delta t) \approx e^{(\Lambda_\alpha + \Omega_\alpha)\Delta t}.$$

Так как проводится оценка точности решения, то представляется допустимым пренебречь погрешностью этого соотношения и считать его точным. Таким образом, получается следующее соотношение:

$$U_\alpha^{(k-i)}(\Delta t_k, \dots, \Delta t_{i+1}) = e^{(\Lambda_\alpha + \Omega_\alpha)(t_k - t_i)}. \quad (17)$$

Что касается второго сомножителя, то его значение определяется отброшенным членом при получении (15) из (14):

$$\mathbf{n}_\alpha(t_i) - U_\alpha(\Delta t_i) \mathbf{n}_\alpha(t_{i-1}) = \int_0^{\Delta t_i} d\tau e^{\Lambda_\alpha(\Delta t_i - \tau)} \Omega_\alpha (\Lambda_\alpha + \Omega_\alpha)^m \int_0^\tau d\tau' \frac{(\tau - \tau')^{m-1}}{(m-1)!} \mathbf{n}_\alpha(\tau' + t_{i-1}).$$

Для его нормы несложно получить следующую оценку:

$$\|\mathbf{n}_\alpha(t_i) - U_\alpha(\Delta t_i) \mathbf{n}_\alpha(t_{i-1})\| \leq \frac{\Delta t_i^{m+1}}{(m+1)!} \max_{\tau \in [0, \Delta t_i]} \|e^{\Lambda_\alpha \tau}\| \|\Omega_\alpha (\Lambda_\alpha + \Omega_\alpha)^m \mathbf{n}_\alpha(\tau + t_{i-1})\|.$$

Подставляя эту оценку в (16), с учетом (17), а также используя тождество $\sum_i \Delta t_i = t$, можно получить следующую оценку погрешности расчета на любой момент времени:

$$\|\mathbf{n}_\alpha(t) - \tilde{\mathbf{n}}_\alpha(t)\| \leq t \frac{\Delta t^m}{(m+1)!} \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3(m), \quad (18)$$

где $\Delta t = \max_i \Delta t_i$; $\gamma_1 = \max_{\tau \in [0, \Delta t]} \|e^{\Lambda_\alpha \tau}\|$; $\gamma_2 = \max_{\tau \in [0, t]} \|e^{(\Lambda_\alpha + \Omega_\alpha)\tau}\|$; $\gamma_3(m) = \max_{\tau \in [0, t]} \|\Omega_\alpha (\Lambda_\alpha + \Omega_\alpha)^m \mathbf{n}_\alpha(\tau)\|$.

Следует сказать несколько слов об используемых константах.

Во-первых, отметим, учитывая определение нормы (9), что $\|e^{\Lambda_\alpha \tau}\|$ приблизительно равно (учитывая, что Ω_α является малой добавкой к Λ_α) максимально возможному увеличению количества ядер за время τ . Однако, даже исключая случай $\|e^{\Lambda_\alpha \tau}\| \leq 1$, в большинстве практических задач шаг интегрирования выбирается так, что за это время изменение количества ядер невелико. Поэтому при оценке точности решения данных задач можно считать $\gamma_1 = 1$.

Применительно к параметру γ_2 подобное утверждение не всегда справедливо, так как здесь максимум определяется на достаточно большом временном промежутке. Но все же в большинстве практических задач оказывается справедливым $\gamma_2 \sim 1$. Для примера можно привести такую важную задачу, как расчет выгорания топлива в ядерном реакторе. В этом случае размножение происходит в основном за счет деления, следовательно, с учетом того, что осколки деления не являются делящимися материалами, для любого временного интервала $\gamma_2 \leq 2$. Таким образом, представляется разумным для оценки данной величины в (18) использовать постоянное значение. Хотя необходимо отметить, что существуют системы, для которых $\gamma_2 \gg 1$ и соответственно оценка погрешности будет завышенной. Впрочем, к решению подобных задач в любом случае следует относиться осторожно, так как оно неустойчиво по начальным данным. Пример одной из таких систем будет рассмотрен ниже.

Что касается последнего множителя $\gamma_3(m)$, то именно в нем, в дополнение к Δt , содержится зависимость от схемы интегрирования. Кроме того, этот множитель является размерным [$\text{с}^{-1-m} \text{б}^{-1} \text{см}^{-1}$] и соответственно невозможно сделать его априорную оценку. Здесь можно только сказать, что оценка $\gamma_3(m)$ максимумом является сильно завышенной. Вполне допустимым представляется использование некоторого среднего значения. Но так как понятие среднего неоднозначно и вычисление его значения представляет определенные методические трудности, для предварительной оценки погрешности остается только приведенное соотношение.

Таким образом, учитывая вышесказанное, представляется удобным при оценке погрешности выделять данные три константы, каждую из которых можно оценивать независимо от других.

Зависимость погрешности (18) от максимального шага численного интегрирования показывает, что m имеет смысл порядка точности схемы. Одновременно данное неравенство позволяет оценить этот шаг. Считая, что в (13) $\rho_\alpha = 1$, данная величина может быть найдена из условия

$$\Delta t \leq \sqrt[m]{\frac{\Delta n_\alpha (m+1)!}{t \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3}}. \quad (19)$$

Здесь $\Delta n_\alpha/t$ играет роль некоторой плотности погрешности и может определяться по значению допустимой погрешности на конечное время всего расчета. Следует отметить, что правая часть (19) получена фактически как оценка снизу и в реальных расчетах может быть выбрана более высокой.

Поэтому данную оценку лучше использовать в качестве некоей характерной величины, подбирая реальную исходя из условия сходимости, которая, в свою очередь, гарантируется неравенством (18). Впрочем, в задачах, для которых время вычисления одного шага (15) не играет главной роли, использование (19) вполне обоснованно.

Представляется необходимым отметить, что при использовании алгоритма, предлагаемого в [1] для вычисления действия функции от матрицы на вектор, время вычисления тензора на несколько порядков больше времени умножения на матрицу. Но так как вычисление тензора производится только один раз, уменьшение шага интегрирования, т. е. увеличение числа шагов, в достаточно широких пределах практически не влияет на время расчета задачи. Таким образом, представляется возможным получать заметное увеличение точности расчета по сравнению с одним шагом без заметного увеличения временных затрат. При этом наиболее эффективно использовать равномерное разбиение временного интервала на шаги интегрирования, так как в рамках указанного алгоритма такой подход позволит проводить вычисление скалярных функций, в частности экспонент, необходимых для вычисления соответствующих матричных функций, только один раз.

Следует отметить следующее обстоятельство. Матрицы $\left(e^{\Lambda_\alpha t} - \sum_{j=0}^{k-1} \frac{(\Lambda_\alpha t)^j}{j!} \right) / \Lambda_\alpha^k$, и в частности $(e^{\Lambda_\alpha t} - 1) / \Lambda_\alpha$, переводят физические векторы, т. е. векторы с неотрицательными компонентами, в физические же. Кроме того, несложно показать, учитывая (4) и (2) (или (5) и (2)), что этим свойством обладает и матрица Ω_α с нулевыми диагональными компонентами. Но так как при любом способе разложения (10) указанные компоненты, не уменьшая эффективности схемы, всегда можно отнести к Λ_α , данное свойство можно считать выполненным. С учетом сказанного при использовании схемы первого порядка (15) во всех практически интересных случаях вектор концентраций остается в физической области (по крайней мере с точностью до погрешности округления чисел). В то же время схемы высших порядков из-за присутствия множителя $(\Lambda_\alpha + \Omega_\alpha)$ таким свойством не обладают. Соответственно с погрешностью (18), определяемой схемой интегрирования, могут появляться отрицательные концентрации некоторых ядер.

Расчет водородной мишени

Для оценки различных схем интегрирования уравнений (11) удобно рассмотреть использование этих схем для решения простой задачи, одной из которых представляется определение ядерного состава при облучении тонкой водородной мишени нейтронами низких энергий. В данном случае процесс затрагивает всего пять изотопов. Кроме того, что при этом имеется возможность решения задачи стандартными методами линейной алгебры, малая размерность получающегося векторного пространства позволяет, в частности, легко проконтролировать ошибки реализации. Таким образом, данная задача представляется наиболее удобной для тестирования методики.

Для определенности в расчетах использовалась энергия 0,0253 эВ. При этой энергии имеются всего пять реакций, приводящих к изменению состава (неядерные вторичные частицы не выписываются):

$$n + {}^1\text{H} \rightarrow {}^2\text{H} : \quad \sigma = 0,3320141 \text{ б}; \quad n + {}^2\text{H} \rightarrow {}^3\text{H} : \quad \sigma = 5,060023 \cdot 10^{-4} \text{ б};$$

$${}^3\text{H} \rightarrow {}^3\text{He} : \quad \frac{1}{\tau} = 1,7828336472 \cdot 10^{-9} \text{ с}^{-1}; \quad (20)$$

$$n + {}^3\text{He} \rightarrow {}^4\text{He} : \quad \sigma = 3,100014 \cdot 10^{-5} \text{ б};$$

$$n + {}^3\text{He} \rightarrow {}^3\text{H} + {}^1\text{H} : \quad \sigma = 5316,024 \text{ б}. \quad (21)$$

Здесь τ — среднее время жизни для реакции распада (20); σ — микроскопические сечения для остальных реакций, которые оценивались как результат решения описанной ниже задачи переноса. Как можно видеть из этих данных, заметное образование гелия может происходить при временах облучения как минимум несколько лет. При этом сам гелий вследствие большого значения сечения реакции (21) накапливаться практически не будет. Но зато в результате этой реакции будет происходить увеличение ядерной концентрации всего состава. Таким образом, задачу облучения водорода условно можно разделить на быстрые реакции, в которых суммарная ядерная концентрация практически не меняется, и медленные, в которых происходит заметный рост этой концентрации.

В качестве модельной системы рассматривался шар радиусом 10^{-5} см, изначально наполненный легким водородом с концентрацией $1 \text{ б}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$. Система считалась холодной, т. е. не учитывалось тепловое движение атомов. В центре шара находился нейтронный источник постоянной мощности (энергия нейтронов $0,0253 \text{ эВ}$). Такая постановка гарантирует, что поток нейтронов через систему практически не зависит от текущего состава и времени. В зависимости от мощности источника N (в нейтрон/с) время процесса определялось по формуле

$$t_{\max} = \frac{10^8}{N} \text{ лет} \quad (22)$$

(1 год = 365,25 дней). Таким образом, во всех расчетах число нейтронов, прошедших через систему, было одинаковым.

Всего было рассмотрено три серии задач: для $N = 10^9$, 10^5 и 10^3 нейтрон/с. Каждая серия состояла из нескольких расчетов, проведенных при разных параметрах численного интегрирования. Для каждой серии расчетов представлены зависимости от времени концентраций изотопов водорода. Во всех расчетах при построении разложения (10) в качестве возмущения рассматривалась только наработка ${}^3\text{He}$ на реакции распада (20).

В приводимых ниже таблицах используются следующие обозначения: Δt — шаг численного интегрирования; m — порядок схемы, ${}^1\text{H}$, ${}^2\text{H}$, ${}^3\text{H}$, ${}^3\text{He}$, ${}^4\text{He}$ — концентрации соответствующих ядер (в единицах $\text{б}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$) на конечный момент времени. Концентрации даются с точностью до пяти значащих цифр, чем определяется максимально необходимая погрешность расчета 10^{-5} с учетом того, что максимальная концентрация порядка 1. При этом для оценки шага интегрирования при заданной погрешности по формулам (19) использовались два определения γ_3 :

$$\gamma_3(m) = \frac{1}{t_{\max}} \int_0^{t_{\max}} \|\Omega_\alpha (\Lambda_\alpha + \Omega_\alpha)^m \mathbf{n}_\alpha(\tau)\|; \quad (23)$$

$$\gamma_3(m) = \max_{\tau \in [0, t_{\max}]} \|\Omega_\alpha (\Lambda_\alpha + \Omega_\alpha)^m \mathbf{n}_\alpha(\tau)\|. \quad (24)$$

В первую очередь удобно рассмотреть источник $N = 10^9$ нейтрон/с. Согласно (22) время процесса составляет 0,1 года; соответственно поток нейтронов $2,38732415 \cdot 10^{-6} \text{ б}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$. Оценка значения $\|e^{(\Lambda_\alpha + \Omega_\alpha)t_{\max}}\|$ показывает, что $\gamma_2 \approx 2$. Забегая немного вперед, можно сказать, что приемлемая точность расчетов достигается за один шаг численного интегрирования. Соответственно в (18) можно положить $\gamma_1 = \gamma_2 = 2$. Значения γ_3 , вычисленные по разным формулам, и соответствующие значения относительных шагов интегрирования приводятся в табл. 1.

Как можно видеть, при любой схеме и любом способе оценки погрешность при интегрировании за 1 шаг не должна превышать 10^{-4} . В то же время погрешность 10^{-5} должна достигаться максимум за несколько шагов. Похожую зависимость можно наблюдать из результатов расчетов за 1 и 10 шагов, которые приведены в табл. 2. Дополнительно здесь же приведено решение за 10 000 шагов, которое можно считать точным. Видно, что реальная погрешность несколько ниже, чем вычисленная по формуле (18), что вполне обоснованно, так как эта формула является оценкой сверху. Кроме

Таблица 1

Оценка значений $\Delta t/t_{\max}$ для источника $N = 10^9$ нейтрон/с

Формула для γ_3	m	γ_3 , $\text{с}^{-1-m} \cdot \text{б}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$	$\Delta t/t_{\max}$	
			$\Delta n = 10^{-4} \text{ б}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$	$\Delta n = 10^{-5} \text{ б}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$
(23)	1	$2,0 \cdot 10^{-20}$	253	25
	2	$6,2 \cdot 10^{-25}$	3	0,9
	3	$5,0 \cdot 10^{-31}$	2	1
(24)	1	$2,0 \cdot 10^{-18}$	2,5	0,25
	2	$1,7 \cdot 10^{-24}$	2	0,5
	3	$1,3 \cdot 10^{-30}$	2	0,8

Таблица 2

Конечные концентрации для источника $N = 10^9$ нейтрон/с

Δt	m	^1H	^2H	^3H	^3He	^4He
t_{\max}	1	$8,1975 \cdot 10^{-2}$	$9,1562 \cdot 10^{-1}$	$2,4042 \cdot 10^{-3}$	0	0
	2	$8,1975 \cdot 10^{-2}$	$9,1562 \cdot 10^{-1}$	$2,4042 \cdot 10^{-3}$	0	0
	3	$8,1981 \cdot 10^{-2}$	$9,1562 \cdot 10^{-1}$	$2,4131 \cdot 10^{-3}$	$6,6973 \cdot 10^{-10}$	$5,2137 \cdot 10^{-14}$
$10^{-1}t_{\max}$	1	$8,1978 \cdot 10^{-2}$	$9,1562 \cdot 10^{-1}$	$2,4088 \cdot 10^{-3}$	$2,8995 \cdot 10^{-10}$	$2,6987 \cdot 10^{-14}$
	2	$8,1978 \cdot 10^{-2}$	$9,1562 \cdot 10^{-1}$	$2,4094 \cdot 10^{-3}$	$3,3782 \cdot 10^{-10}$	$3,0647 \cdot 10^{-14}$
	3	$8,1978 \cdot 10^{-2}$	$9,1562 \cdot 10^{-1}$	$2,4094 \cdot 10^{-3}$	$3,3759 \cdot 10^{-10}$	$3,0851 \cdot 10^{-14}$
$10^{-4}t_{\max}$	3	$8,1978 \cdot 10^{-2}$	$9,1562 \cdot 10^{-1}$	$2,4094 \cdot 10^{-3}$	$3,3846 \cdot 10^{-10}$	$3,0851 \cdot 10^{-14}$
$^3\text{He}(0) = 10^{-4} \text{б}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$		$8,1987 \cdot 10^{-2}$	$9,1571 \cdot 10^{-1}$	$2,5097 \cdot 10^{-3}$	$3,5255 \cdot 10^{-10}$	$6,1728 \cdot 10^{-13}$

того, в табл. 2 приведено решение этой же задачи с $\Delta t = 10^{-4}t_{\max}$, т. е. с точностью, заведомо превышающей 10^{-5} , при возмущении начального состава добавлением изотопа ^3He с концентрацией $10^{-4} \text{б}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$ (соответствует средней распространенности этого изотопа относительно водорода). Как можно видеть, увеличение расстояния между состояниями возмущенной и невозмущенной задач за время процесса, вычисленного по формуле (8), составляет примерно 2, что согласуется с оценкой $\frac{\rho(\Delta n(t_{\max}))}{\rho(\Delta n(0))} \approx \gamma_2$. Другими словами, формально задача является неустойчивой относительно начальных данных, но эта неустойчивость невелика и решение может считаться корректным.

Следующая серия расчетов проводилась для источника $N = 10^5$ нейтрон/с на временном интервале 1 000 лет; поток нейтронов $2,38732415 \cdot 10^{-10} \text{б}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$. Для этой задачи $\gamma_2 \approx 59$. Но при этом решение находилось не менее чем за 1 000 шагов, и соответственно $\gamma_1 \approx \sqrt[1000]{\gamma_2} \approx 1$. Значения γ_3 и соответствующие значения относительных шагов интегрирования приводятся в табл. 3. Из этих данных, в частности, можно сделать вывод, что для решения с приемлемой погрешностью необходимо не меньше 1 000 шагов интегрирования. При этом в отличие от предыдущего случая схемы более высокого порядка приводят к заметному увеличению шага, т. е. уменьшению времени счета. Сами результаты расчетов приведены в табл. 4. При этом решение с $\Delta t = 10^{-7}t_{\max}$ можно считать точным.

Так же, как и в предыдущей серии задач, видно, что реальная погрешность несколько ниже, но в пределах порядка, чем вычисленная по формуле (18). Сравнение с возмущенной задачей, результаты счета которой приведены в последней строке таблицы, показывает, что и здесь $\frac{\rho(\Delta n(t_{\max}))}{\rho(\Delta n(0))} \approx \gamma_2$. Но так как γ_2 здесь достаточно велико, вопрос об устойчивости остается открытым.

Наконец, последняя серия расчетов проводилась с источником $N = 10^3$ нейтрон/с на временном интервале 10 лет в соответствии с (22). Поток нейтронов $2,38732415 \cdot 10^{-12} \text{б}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$. Для этой задачи

Таблица 3

Оценка значений $\Delta t/t_{\max}$ для источника $N = 10^5$ нейтрон/с

Формула для γ_3	m	$\gamma_3,$ $\text{с}^{-1-m} \cdot \text{б}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$	$\Delta t/t_{\max}$	
			$\Delta n = 10^{-4} \text{б}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$	$\Delta n = 10^{-5} \text{б}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$
(23)	1	$2,0 \cdot 10^{-24}$	$1,7 \cdot 10^{-4}$	$1,7 \cdot 10^{-5}$
	2	$6,4 \cdot 10^{-33}$	$7,1 \cdot 10^{-3}$	$2,3 \cdot 10^{-3}$
	3	$5,8 \cdot 10^{-41}$	$8,9 \cdot 10^{-3}$	$4,1 \cdot 10^{-3}$
(24)	1	$2,0 \cdot 10^{-22}$	$1,7 \cdot 10^{-5}$	$1,7 \cdot 10^{-6}$
	2	$1,7 \cdot 10^{-32}$	$4,4 \cdot 10^{-3}$	$1,4 \cdot 10^{-3}$
	3	$1,5 \cdot 10^{-40}$	$6,4 \cdot 10^{-3}$	$3,0 \cdot 10^{-3}$

Таблица 4

 Конечные концентрации для источника $N = 10^5$ нейтрон/с

Δt	m	^1H	^2H	^3H	^3He	^4He
$10^{-3}t_{\max}$	1	$1,1102 \cdot 10^{-1}$	$9,3805 \cdot 10^{-1}$	$2,3589 \cdot 10^{-3}$	$3,3089 \cdot 10^{-6}$	$3,0036 \cdot 10^{-10}$
	2	$1,1188 \cdot 10^{-1}$	$9,3873 \cdot 10^{-1}$	$2,4263 \cdot 10^{-3}$	$3,4083 \cdot 10^{-6}$	$3,0929 \cdot 10^{-10}$
	3	$1,1188 \cdot 10^{-1}$	$9,3873 \cdot 10^{-1}$	$2,4263 \cdot 10^{-3}$	$3,4083 \cdot 10^{-6}$	$3,0930 \cdot 10^{-10}$
$10^{-4}t_{\max}$	1	$1,1179 \cdot 10^{-1}$	$9,3866 \cdot 10^{-1}$	$2,4194 \cdot 10^{-3}$	$3,3983 \cdot 10^{-6}$	$3,0839 \cdot 10^{-10}$
$10^{-5}t_{\max}$	1	$1,1187 \cdot 10^{-1}$	$9,3872 \cdot 10^{-1}$	$2,4256 \cdot 10^{-3}$	$3,4073 \cdot 10^{-6}$	$3,0921 \cdot 10^{-10}$
$10^{-6}t_{\max}$	1	$1,1188 \cdot 10^{-1}$	$9,3873 \cdot 10^{-1}$	$2,4262 \cdot 10^{-3}$	$3,4082 \cdot 10^{-6}$	$3,0929 \cdot 10^{-10}$
$10^{-7}t_{\max}$	1	$1,1188 \cdot 10^{-1}$	$9,3873 \cdot 10^{-1}$	$2,4263 \cdot 10^{-3}$	$3,4083 \cdot 10^{-6}$	$3,0930 \cdot 10^{-10}$
$^3\text{He}(0) = 10^{-4} 6^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$		$1,1401 \cdot 10^{-1}$	$9,4240 \cdot 10^{-1}$	$2,5317 \cdot 10^{-3}$	$3,5564 \cdot 10^{-6}$	$3,4315 \cdot 10^{-10}$

$\gamma_2 \approx 12543$; $\gamma_1 \approx 1$. Значения γ_3 и соответствующие значения относительных шагов интегрирования приводятся в табл. 5. В соответствии с этими значениями решение находилось не менее чем за 10 000 шагов.

Результаты, полученные при различных параметрах счета, приводятся в табл. 6. Здесь также можно сделать вывод, что реальная погрешность несколько ниже, чем вычисленная по формуле (18). Кроме того, выигрыш, получаемый при использовании схем высокого порядка, еще более заметен, особенно при получении решения с высокой точностью. Что касается возмущенной задачи, то здесь

Таблица 5

 Оценка значений $\Delta t/t_{\max}$ для источника $N = 10^3$ нейтрон/с

Фор- мула для γ_3	m	$\gamma_3,$ $\text{с}^{-1-m} \cdot 6^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$	$\Delta t/t_{\max}$				
			$\Delta n =$ $= 1 6^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$	$\Delta n =$ $= 10^{-1} 6^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$	$\Delta n =$ $= 10^{-2} 6^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$	$\Delta n =$ $= 10^{-3} 6^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$	$\Delta n =$ $= 10^{-4} 6^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$
(23)	1	$6,4 \cdot 10^{-26}$	$2,5 \cdot 10^{-4}$	$2,5 \cdot 10^{-5}$	$2,5 \cdot 10^{-6}$	$2,5 \cdot 10^{-7}$	$2,5 \cdot 10^{-8}$
	2	$4,0 \cdot 10^{-36}$	$1,9 \cdot 10^{-3}$	$6,2 \cdot 10^{-4}$	$1,9 \cdot 10^{-4}$	$6,2 \cdot 10^{-5}$	$1,9 \cdot 10^{-5}$
	3	$2,8 \cdot 10^{-44}$	$8,8 \cdot 10^{-4}$	$4,1 \cdot 10^{-4}$	$1,9 \cdot 10^{-4}$	$8,8 \cdot 10^{-5}$	$4,1 \cdot 10^{-5}$
(24)	1	$6,4 \cdot 10^{-24}$	$2,5 \cdot 10^{-6}$	$2,5 \cdot 10^{-7}$	$2,5 \cdot 10^{-8}$	$2,5 \cdot 10^{-9}$	$2,5 \cdot 10^{-10}$
	2	$1,1 \cdot 10^{-35}$	$1,2 \cdot 10^{-3}$	$3,7 \cdot 10^{-4}$	$1,2 \cdot 10^{-4}$	$3,7 \cdot 10^{-5}$	$1,2 \cdot 10^{-5}$
	3	$8,0 \cdot 10^{-44}$	$6,2 \cdot 10^{-4}$	$2,9 \cdot 10^{-4}$	$1,3 \cdot 10^{-4}$	$6,2 \cdot 10^{-5}$	$2,9 \cdot 10^{-5}$

Таблица 6

 Конечные концентрации для источника $N = 10^3$ нейтрон/с

Δt	m	^1H	^2H	^3H	^3He	^4He
$10^{-4}t_{\max}$	1	2,9632	2,8442	$2,7948 \cdot 10^{-3}$	$3,9250 \cdot 10^{-4}$	$2,8058 \cdot 10^{-8}$
	2	3,9635	3,4348	$3,8937 \cdot 10^{-3}$	$5,4694 \cdot 10^{-4}$	$3,7337 \cdot 10^{-8}$
	3	3,9637	3,4350	$3,8939 \cdot 10^{-3}$	$5,4698 \cdot 10^{-4}$	$3,7339 \cdot 10^{-8}$
$10^{-5}t_{\max}$	1	3,8376	3,3619	$3,7530 \cdot 10^{-3}$	$5,2717 \cdot 10^{-4}$	$3,6178 \cdot 10^{-8}$
	2	3,9637	3,4350	$3,8939 \cdot 10^{-3}$	$5,4698 \cdot 10^{-4}$	$3,7339 \cdot 10^{-8}$
$10^{-6}t_{\max}$	1	3,9507	3,4275	$3,8794 \cdot 10^{-3}$	$5,4494 \cdot 10^{-4}$	$3,7220 \cdot 10^{-8}$
$10^{-7}t_{\max}$	1	3,9624	3,4342	$3,8925 \cdot 10^{-3}$	$5,4677 \cdot 10^{-4}$	$3,7327 \cdot 10^{-8}$
$10^{-8}t_{\max}$	1	3,9636	3,4349	$3,8938 \cdot 10^{-3}$	$5,4696 \cdot 10^{-4}$	$3,7338 \cdot 10^{-8}$
$10^{-9}t_{\max}$	1	3,9637	3,4350	$3,8939 \cdot 10^{-3}$	$5,4698 \cdot 10^{-4}$	$3,7339 \cdot 10^{-8}$
$^3\text{He}(0) = 10^{-4} 6^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$		4,6423	4,0099	$4,5434 \cdot 10^{-3}$	$6,3820 \cdot 10^{-4}$	$4,4653 \cdot 10^{-8}$

также выполняется $\frac{\rho(\Delta n(t_{\max}))}{\rho(\Delta n(0))} \approx \gamma_2$. Но γ_2 в данном случае настолько велико, что погрешность решения превышает даже норму начального состояния (т. е. отличие от вакуума). Таким образом, эта задача является неустойчивой относительно начальных данных.

Для проверки правильности, указанные три задачи были решены в системе аналитических вычислений Maple [5]. Ввиду полного совпадения с предпоследними строками табл. 2, 4 и 6 результаты аналитических расчетов здесь не приводятся. Для дополнительного контроля было проведено численное интегрирование с равномерным шагом с использованием явных схем Эйлера и Рунге—Кутты четвертого порядка, а также неявной схемы Эйлера. Все эти решения сходятся к значениям, полученным либо аналитически, либо методом, предлагаемым в настоящей работе. Но при этом явные схемы неустойчивы при числе шагов 10^4 и меньше.

Заключение

В настоящей работе представлен набор схем численного интегрирования уравнений, описывающих изменение ядерного состава в радиационных полях. В качестве основного приближения при построении этих схем использовалась независимость распределения параметров частиц излучения от времени, а основным принципом является выделение из матрицы наработок — суммы матрицы распадов и матрицы реакций — главной части, функции от которой можно вычислять точным методом, описанным в работе [1]. Влияние остатка оценивается приближенным методом численного интегрирования. Таким образом, *хорошее* разбиение, т. е. проведенное так, чтобы норма остатка была минимальной, является основой эффективности выбранной схемы.

Применение описанных методов иллюстрируется рядом методических расчетов для водородной мишени. Из рассмотренных задач видно, что мажорантная оценка погрешности (18) или шага интегрирования (19) может быть использована для оценки параметров расчета.

Результаты расчетов демонстрируют, что для данных задач и при рассматриваемых погрешностях заметный выигрыш от использования схем высокого порядка получается, если задача неустойчивая. Это связано с нивелированием в соотношении (19) влияния параметра γ_2 , значение которого фактически определяет неустойчивость, за счет корня со степенью точности схемы. Но так как в (19) под корнем стоит отношение $\Delta n/\gamma_2$, подобный выигрыш должен наблюдаться и при повышении точности расчета. С другой стороны, при решении устойчивых задач с не очень высокой точностью схема первого порядка может оказаться не менее эффективной, чем схемы более высоких порядков. Это можно видеть по результатам расчетов первой серии методических задач. В этом случае использование схемы первого порядка представляется предпочтительным еще и потому, что она не выводит вектор концентраций из физической области, т. е. области неотрицательных значений.

Список литературы

1. Модестов Д. Г. Решение уравнений радиоактивного распада // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2006. Вып. 3. С. 54–58.
2. Белл Д., Глестон С. Теория атомных реакторов. М.: Атомиздат, 1974.
3. Колмогоров А. Н., Фомин С. В. Элементы теории функций и функционального анализа. М.: Наука, 1976.
4. Калиткин Н. Н. Численные методы решения жестких систем // Математическое моделирование. 1995. Т. 7, № 5. С. 8–11.
5. Maple 6. Решение задач высшей математики и механики. С-Пб.: БХВ-Петербург, 2001.