

非齐次燃耗方程数值解法

付元光 邓力 李刚

Preliminary study on numerical solver of inhomogeneous burnup equations

Fu Yuan-Guang Deng Li Li Gang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 67, 172802 (2018) DOI: 10.7498/aps.67.20172650

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.67.20172650>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2018/V67/I17>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于节块展开法的 **Jacobian-Free Newton Krylov** 联立求解物理-热工耦合问题

Jacobian-Free Newton-Krylov based on nodal expansion method for neutronic-thermal hydraulic coupling problem

物理学报.2016, 65(9): 092801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.092801>

**BEAVRS** 基准模型热零功率状态的 **JMCT** 分析

JMCT Monte Carlo analysis of BEAVRS benchmark: hot zero power results

物理学报.2016, 65(5): 052801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.052801>

反应堆蒙特卡罗临界模拟中均匀裂变源算法的改进

Modified uniform-fission-site algorithm in Monte Carlo simulation of reactor criticality problem

物理学报.2015, 64(5): 052801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.052801>

金属铁中空位团簇演化行为的相场研究

Phase-field modeling of vacancy cluster evolution in Fe

物理学报.2013, 62(18): 182801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.182801>

**Nd: YAG** 激光烧蚀裂解加工技术模拟分析与实验研究

Finite element analysis and experimental studies on fracture splitting processing by Nd: YAG laser ablation

物理学报.2012, 61(9): 092801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.092801>

## 非齐次燃耗方程数值解法\*

付元光<sup>1)2)</sup> 邓力<sup>1)†</sup> 李刚<sup>1)</sup>

1) (北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

2) (中物院高性能数值模拟软件中心, 北京 100088)

(2017年12月14日收到; 2018年4月13日收到修改稿)

非齐次燃耗方程常用于描述具有显著核素迁移效应的核能系统中核素含量随时间的变化规律. 国内外许多燃耗计算程序无法求解方程非齐次项含时的情况. 本文在方程非齐次项能够被有限阶关于时间的泰勒展开逼近这一前提下, 研究了非齐次项含时情况下方程的两种解法. 首先通过 Laplace 变换推导出了方程基于线性子链方法的解析解形式, 然后使用 Carathéodory-Fejér 方法计算出了方程矩阵级数解的近最佳 Chebyshev 有理逼近式. 将两种方法在燃耗计算程序 JBURN 中实现, 并进行了数值计算, 绝大部分计算结果符合很好, 部分结果在较长有效数字内仍能保持一致, 验证了方法的正确性和精度. 同时为求解具有其他非齐次项形式的燃耗方程提供了一种思路.

**关键词:** 非齐次燃耗方程, Laplace 变换, Carathéodory-Fejér 方法, 近最佳 Chebyshev 有理逼近

**PACS:** 28.52.Av, 28.41.Vx, 28.41.Ak

**DOI:** 10.7498/aps.67.20172650

## 1 引言

核系统运行过程中, 核材料不断被辐照, 其核素组成随时间发生着复杂变化. 在核反应堆物理计算中, 通常用燃耗方程来描述核素含量随时间的变化规律:

$$\frac{dN_i}{dt} = -\lambda_i N_i + \sum_{j \neq i} \lambda_{ij} N_j + f_i, \quad (1)$$

$$N_i(0) = N_{i0}, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

其中  $n$  是材料中核素的种类;  $N_i$  是第  $i$  种核素处于任意时刻  $t$  的含量;  $N_{i0}$  是第  $i$  种核素初始时刻的含量;  $\lambda_{ij}$  是第  $j$  种核素反应 (包括中子诱发、衰变等) 产生第  $i$  种核素的转换系数;  $\lambda_i$  是第  $i$  种核素发生反应 (包括中子诱发、衰变等) 的消亡系数;  $f_i$  是第  $i$  种核素的迁移率. 燃耗方程也可写成矩阵-向量形式

$$\frac{d\mathbf{N}}{dt} = \mathbf{A}\mathbf{N} + \mathbf{f}\mathbf{N}(0) = \mathbf{N}_0, \quad (2)$$

其中  $\mathbf{N}$  是  $n$  维核素含量向量,  $\mathbf{N}_0$  是  $\mathbf{N}$  在  $t = 0$  时刻的值,  $\mathbf{A}$  是由系数  $\lambda_{ij}$  和  $\lambda_i$  构成的  $n \times n$  维燃耗矩阵. 在实际问题中, 燃耗方程包含数百至上千种核素, 核素之间存在复杂的转换关系, 严格来讲, 描述核素产生、消亡的系数  $\lambda_{ij}$  和  $\lambda_i$  是随时间变化的, 但变化比较缓慢, 在适当的时间步长内, 可将  $\lambda_{ij}$  和  $\lambda_i$  视为常量, 使燃耗方程成为一阶线性常微分方程组, 再通过数值方法进一步求解.

求解燃耗方程有两大技术路线, 其一是线性子链方法 (TTA) [1-3], 通过解耦核素之间的转换关系, 生成一系列线性子链, 再根据常微分方程理论逐一解析求解每条链; 线性子链算法精度高, 但链的构造过程十分耗时, 同时为保证算法稳定性, 需要更费时的高精度浮点计算支持; 其二是矩阵方法, 通过数值方法求解矩阵  $t\mathbf{A}$  的指数  $e^{t\mathbf{A}}$ , 主要有

\* 能源局重大专项子项 (批准号: 2015ZX06002008)、国防科工局国防基础科研计划 (批准号: C1520110002)、国家磁约束核聚变能源研究专项 (批准号: 2015GB108002) 和国家自然科学基金-广东联合基金 (第二期) 超级计算科学应用专项 (批准号: U1501501) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: deng\_li@iapcm.ac.cn

泰勒展开法<sup>[4]</sup>、Krylov子空间法<sup>[5]</sup>、切比雪夫有理近似法 (CRAM)<sup>[6-8]</sup>、Padé近似法<sup>[9]</sup>等, 矩阵方法求解速度快很多, 部分方法与TTA精度相当. 目前, 大部分燃耗数值计算程序主要借助以上算法求解齐次燃耗方程问题<sup>[10]</sup>, 即在(1)式中令 $f_i = 0$ , 这是由于在常见的核反应堆中, 不同空间区域之间核素迁移不显著, 燃耗区相对独立, 求解齐次方程已能够满足精度. 对于一些新型核能系统(如熔盐堆、液态散裂靶等), 具有显著的核素迁移, 必须求解非齐次燃耗方程. 在众多程序中, ORIGEN<sup>[4]</sup>和CINDER90<sup>[11]</sup>是两款可以求解非齐次燃耗方程的程序, 但仅能处理 $f_i$ 为常量的情况, 这种情况已能够满足大部分实际应用需求. 对于CINDER90, 虽然能给出正确解, 但计算耗时很长; 对于ORIGEN, 如果指定 $f_i < 0$ , 可能导致结果发散.

本文研究了非齐次项 $f_i$ 具有特殊含时形式时方程的解法, 在若干已有程序只能计算 $f_i$ 为常量的基础上, 扩展了 $f_i$ 适用范围. 设 $f_i$ 能够在 $t = 0$ 附近( $t = t_0$ 类似, 只需要一个平移变换)通过有限阶泰勒展开有效逼近, 即

$$\mathbf{f}(t) = \sum_{l=0}^m t^l \mathbf{a}_l, \quad (3)$$

其中 $\mathbf{a}_l$ 是展开项向量, 则非齐次燃耗方程变为

$$\frac{d\mathbf{N}}{dt} = \mathbf{A}\mathbf{N} + \sum_{l=0}^m t^l \mathbf{a}_l. \quad (4)$$

基于方程(4)的形式, 本文使用了两种求解方法: 首先推导出了基于TTA方法的解析解形式, 然后计算了基于矩阵方法的矩阵级数解的近最佳有理逼近表达式, 通过不同方法的计算结果比对, 验证了两种方法求解特定形式非齐次燃耗方程的可行性.

## 2 理论推导

### 2.1 非齐次燃耗方程基于TTA方法的解

TTA方法的基本思想是将核素之间的复杂转换关系解耦成若干线性链, 在一条线性链上, 一个核素只能经由一个母核反应生成, 且该核素发生反应只能生成一个子核, 只有链首核素具有迁移率和初始核子密度, 其余核素都为0. 这种简单的传递关系和初始条件使得描述一条线性子链的微分方程组可解析求解. 逐一求解每一条线性子链, 再把

每条链的贡献累加即得到结果. 描述一条线性子链的微分方程组为

$$\begin{cases} \frac{dN_1}{dt} = -\lambda_1 N_1 + f(t), \\ \frac{dN_2}{dt} = -\lambda_2 N_2 + \gamma_1 N_1, \\ \dots \\ \frac{dN_n}{dt} = -\lambda_n N_n + \gamma_{n-1} N_{n-1}, \end{cases} \quad \begin{cases} N_1(0) = N_{10}, \\ N_2(0) = 0, \\ \dots \\ N_n(0) = 0, \end{cases} \quad (5)$$

其中 $n$ 是链包含的核素数目;  $N_i$ 是链上第 $i$ 个核素在任意 $t$ 时刻的含量;  $\gamma_i$ 是第 $i$ 个核素生成第 $i+1$ 个核素的转换系数( $\gamma_i \leq \lambda_i$ ). 若(5)式中非齐次项满足 $f(t) = \sum_{l=0}^m t^l \mathbf{a}_l$ , 则方程组中第一个方程的非齐次项变成 $m+1$ 项之和, 根据线性常微分方程理论<sup>[12]</sup>, 方程组的解为1个齐次方程组的通解和另 $m+1$ 个非齐次方程组的特解之和, 第 $l$ 个非齐次方程的非齐次项正是 $t^l \mathbf{a}_l$ . 若通解为 $\mathbf{N}^{\text{base}}$ , 特解分别为 $\mathbf{N}^{(l)}$  ( $l = 0, \dots, m$ ), 则方程组的解为

$\mathbf{N}(t) = \mathbf{N}^{\text{base}} + \sum_{l=0}^m \mathbf{N}^{(l)}$ . 对第 $l$ 个非齐次方程组进行Laplace变换, 设变换后的向量为 $\mathbf{n}^{(l)}(p)$ , 其第 $K$ 个分量满足

$$n_K^{(l)} = \frac{\left( \prod_{k=1}^{K-1} \gamma_k \right) \cdot n_1^{(l)}}{\prod_{k=1}^K (p + \lambda_k)}, \quad K = 2, 3, \dots, n, \quad (6)$$

其中 $n_1^{(l)} = \Lambda[t^l \mathbf{a}_l] = \frac{a_l \cdot l!}{p^{l+1}}$ , 代入(6)式, 对比第 $l-1$ 个和 $l$ 个方程组间的关系, 有

$$n_K^{(l)} = \frac{la_l}{a_{l-1}} \cdot \frac{1}{p} n_K^{(l-1)}, \quad K = 1, 2, \dots, n. \quad (7)$$

再对(7)式进行Laplace逆变换, 可得如下递推关系:

$$\frac{d\mathbf{N}^{(l)}}{dt} = \frac{la_l}{a_{l-1}} \mathbf{N}^{(l-1)}, \quad l = 1, 2, \dots, m. \quad (8)$$

(8)式说明第 $l$ 个和第 $l-1$ 个非齐次方程组的解存在递推关系. 综合上述推导得到解方程组的流程:

1) 求解齐次方程组, 先对方程组的第一个方程Laplace变换, 得到第一个变换分量, 并利用递推关系(6)式得到所有变换分量, 再对所有变换分量进行Laplace逆变换, 得到 $\mathbf{N}^{\text{base}}$ ;

2) 求解非齐次方程组, 先解 $l = 0$ 的方程组, 类似1)的流程, 得到 $\mathbf{N}^{(0)}$ , 根据递推关系(8)式, 再对 $\mathbf{N}^{(0)}$ 进行多次积分, 可算出全部 $\mathbf{N}^{(l)}$ ;

3) 将以上所有解相加, 得到最终解.

经过一系列推导, 可得到解的普通形式, 它给出了一条线性链上任意一个核素在任意  $t > 0$  时刻的含量:

$$\left\{ \begin{aligned} N_1^{\text{base}}(t) &= N_{10} e^{-\lambda_1 t}, \\ N_K^{\text{base}}(t) &= N_{10} \cdot \prod_{i=1}^{K-1} \gamma_i \cdot \sum_{j=1}^K \frac{e^{-\lambda_j t}}{\prod_{i=1, i \neq j}^K (\lambda_i - \lambda_j)}, \\ N_1^{(l)}(t) &= \frac{a_l}{(-\lambda_1)^{l+1}} \left[ e^{-\lambda_1 t} - \sum_{i=0}^l \frac{(-\lambda_1 t)^i}{i!} \right], \\ N_K^{(l)}(t) &= \left. \begin{aligned} &\prod_{i=1}^{K-1} \gamma_i \cdot l! a_l \left\{ \sum_{n=0}^l \left[ \sum_{j=1}^K \frac{(-1)^n}{\lambda_j^{n+1} \prod_{i=1, i \neq j}^K (\lambda_i - \lambda_j)} \right. \right. \\ &\left. \left. \cdot \frac{t^{l-n}}{(l-n)!} \right] + \sum_{j=1}^K \frac{e^{-\lambda_j t}}{(-\lambda_j)^{l+1} \prod_{i=1, i \neq j}^K (\lambda_i - \lambda_j)} \right\}, \end{aligned} \right. \end{aligned} \right. \quad (9)$$

$K = 2, 3, \dots, n, \quad l = 0, 1, \dots, m.$

在以上推导中做了  $\lambda_i \neq \lambda_j$  的假设, 现实情况中, 线性链上可能存在多对相同的核素, 使链出现局部闭环, 导致假设不满足. 为防止计算式发散, 必须进行处理. 一种方式是考虑  $\lambda_i = \lambda_j$  的情况运用极限进行重新推导, 得到一组新的解析表达式 [2]; 另一种方式是对相等的  $\lambda_i$  做微小的扰动  $\Delta\lambda$ , 人为确保  $\lambda_i$  互不相等. 有研究表明 [13], 前者对计算精度略有提升, 但会额外引入计算量, 后者对计算精度影响不大. 本文选择相对更容易实现的后者.

### 2.2 非齐次燃耗方程基于有理近似方法的求解

有理近似方法的基本思想是用一个有理分式在  $r_k(x)$  某个区域上逼近目标函数  $f(x)$ , 如

$$f(x) \approx r_k(x) = \frac{P_k(x)}{Q_k(x)}, \quad (10)$$

其中  $P_k, Q_k$  是  $k$  阶实多项式, 无公因子, 一般情况下令  $Q_k$  常数项为 1. (10) 式也可以写成如下形式:

$$f(x) \approx r_k(x) = \alpha_0 + \sum_{i=1}^k \frac{\alpha_i}{x - \theta_i}, \quad (11)$$

其中  $\alpha_0 = \frac{p_k}{q_k}$ ,  $p_k, q_k$  分别是  $P_k, Q_k$  的最高次项系数,  $\{\theta_i\}$  是  $Q_k$  互不相等的零点,  $\alpha_i = \frac{P_k(\theta_i)}{Q_k'(\theta_i)}$ . 有理分式逼近的优点在于通过较低的阶数  $k$  就能达到较高精度, 在函数奇异点附近或无限开区间等情况下, 有理逼近仍能发挥作用 [14].

矩阵函数同样可以用关于矩阵的有理分式逼近, 根据矩阵函数的定义可以将 (11) 式推广到矩阵 [15], 即

$$f(\mathbf{A}) \approx r_k(\mathbf{A}) = \alpha_0 \mathbf{I} + \sum_{i=1}^k \alpha_i (\mathbf{A} - \theta_i \mathbf{I})^{-1}, \quad (12)$$

其中  $\mathbf{I}$  是单位矩阵. 如果  $k$  是偶数, 则  $\{\theta_i\}, \{\alpha_i\}$  分别是  $k/2$  个共轭数对, (12) 式的运算可以减半, 变为

$$f(\mathbf{A}) \approx \alpha_0 \mathbf{I} + 2\text{Re} \left( \sum_{i=1}^{k/2} \alpha_i (\mathbf{A} - \theta_i \mathbf{I})^{-1} \right).$$

对于燃耗方程 (4) 式, 若方程的初始条件为  $N(0) = N_0$ , 将其代入如下递推式:

$$\begin{aligned} N_{m+1} &= N_0 + \int_0^t \left( \mathbf{A} N_m + \sum_{l=0}^m t^l \mathbf{a}_l \right) dt, \\ m &= 0, 1, \dots, \end{aligned} \quad (13)$$

可求出  $N_1$ , 再用  $N_1$  求出  $N_2$ , 一直进行下去, 直到  $m \rightarrow \infty$ , 得矩阵级数形式的解 [16]

$$\begin{aligned} N(t) &= \left( \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(t\mathbf{A})^n}{n!} \right) N_0 \\ &+ \sum_{l=0}^m \left( t^{l+1} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(t\mathbf{A})^n}{(n+l+1)!} \mathbf{a}_l \right). \end{aligned} \quad (14)$$

在实际燃耗问题中, 有些核素的衰变非常快, 致使消亡系数很大, 有些问题中时间步长  $t$  也会取很大, 使得  $\|t\mathbf{A}\| > 10^{20}$ , 直接求解矩阵  $t\mathbf{A}$  的上述级数展开不可承受. 如果找到相应的有理逼近式, 就能避开直接求解的困难. 定义和函数  $H_l(x)$  满足:

$$\left\{ \begin{aligned} H_l(x) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} = e^x, \quad l = -1, \\ H_l(x) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{(n+l+1)!} = \frac{e^x - \sum_{n=0}^l \frac{x^n}{n!}}{x^{l+1}}, \\ & \quad l = 0, 1, \dots, m, \end{aligned} \right. \quad (15)$$

如能找到  $H_1(x)$  的有理逼近式, 根据 (12) 式, 可将级数求和转换成有限项计算:

$$\begin{cases} N(t) = H_{-1}(t\mathbf{A})\mathbf{N}_0 + \sum_{l=0}^m N^{(l)}(t), \\ N^{(l)}(t) = t^{l+1}H_l(t\mathbf{A})\mathbf{a}_l \\ \approx t^{l+1}\left[\alpha_0^{(l)}\mathbf{I}\mathbf{a}_l + \sum_{i=1}^k \alpha_i^{(l)}(\mathbf{A}t - \theta_i^{(l)}\mathbf{I})^{-1}\mathbf{a}_l\right], \end{cases} \quad (16)$$

其中  $\{\alpha_i^{(l)}\}$ ,  $\{\theta_i^{(l)}\}$  是和函数  $H_l(x)$  对应的有理逼近式系数. 求解  $N^{(l)}$  转化成求解  $k$  个线性方程组  $(\mathbf{A}t - \theta_i^{(l)}\mathbf{I})x = \mathbf{a}_l$ .

实函数一般具有唯一的最佳有理逼近<sup>[14]</sup>, 称为最佳 Chebyshev 有理逼近, 寻找方法主要有 Remez 方法<sup>[17]</sup>, Carathéodory-Fejér 方法<sup>[18-20]</sup> (CF 方法) 等. Remez 方法的基本思路是在区间  $[-1, 1]$  上选定  $2k + 2$  个 Chebyshev 多项式零点  $\{c_n\}$ ,  $n = 1, \dots, 2k + 2$ , 在这些点上目标函数和有理逼近式的残差以  $\delta$  水平交替变换, 即  $f(c_n) - \frac{P_k(c_n)}{Q_k(c_n)} = (-1)^n\delta$ ,  $n = 1, \dots, 2k + 2$ , 由

于  $P_k$  有  $k + 1$  个未知系数,  $Q_k$  有  $k$  个, 连同  $\delta$ , 共  $2k + 2$  个未知数, 正好和方程数相等, 于是可求出所有系数和  $\delta$ , 如果  $\delta$  过大则需要调整  $\{c_n\}$  的位置, 并继续求解方程, 直至  $\delta$  收敛到期望水平. Remez 方法是一种迭代过程, 需要求解非线性方程组, 计算量大, 难收敛. CF 方法的基本思路是在区间  $[-1, 1]$  上用 Chebyshev 多项式展开目标函数, 用展开系数构造 Hankel 矩阵, Carathéodory-Fejér 定理具体给出了目标函数和最佳有理逼近式的残差的具体形式, 它可以用 Hankel 矩阵的特征值和特征向量表示, 进而通过残差求出最佳有理逼近式. 事实上, CF 方法求出的仅是最佳逼近式的一个近似逼近, 由于近似逼近向最佳逼近的收敛速度很快, 可认为二者基本等效<sup>[14]</sup>. CF 方法的实现流程较为复杂, 但不需要迭代, 数值稳定性好. CF 方法一般在  $[-1, 1]$  区间上求解目标函数的最佳有理逼近式, 对于燃耗矩阵  $t\mathbf{A}$ , 有研究表明<sup>[6]</sup> 一般情况下其特征值分布在复平面负  $x$  轴上或附近, 因而需要得到目标函数在  $(-\infty, 0)$  上的近似式,

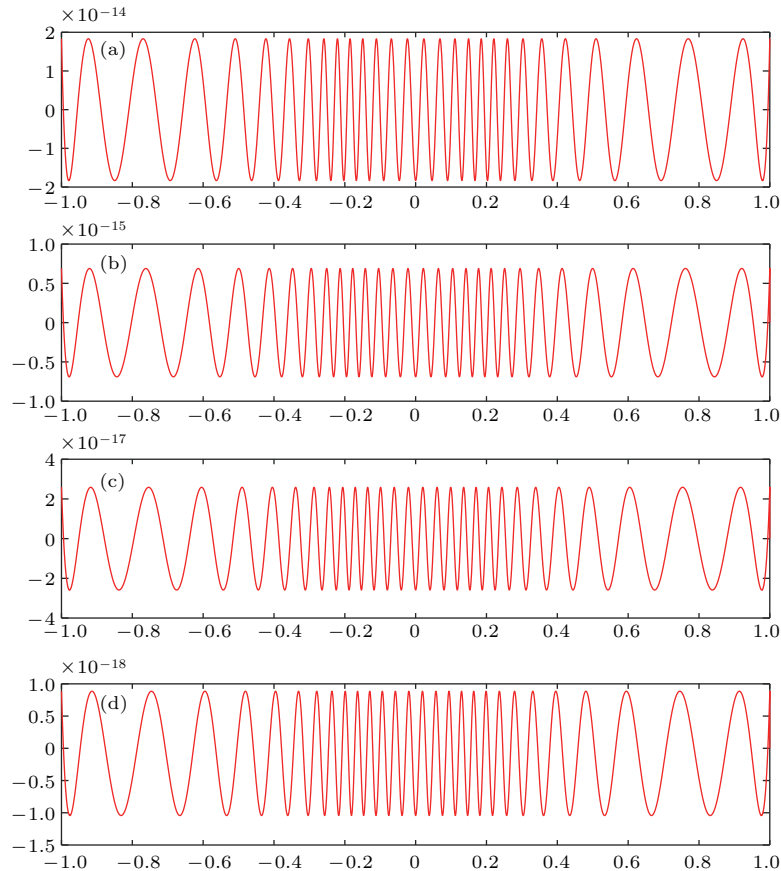


图1  $\Delta(t) = H_1 - r_{14}$  的图像 (a)  $H_{-1}$  的  $\Delta(t)$ ; (b)  $H_0$  的  $\Delta(t)$ ; (c)  $H_1$  的  $\Delta(t)$ ; (d)  $H_2$  的  $\Delta(t)$   
 Fig. 1. Curves of  $\Delta(t) = H_1 - r_{14}$ : (a)  $\Delta(t)$  of  $H_{-1}$ ; (b)  $\Delta(t)$  of  $H_0$ ; (c)  $\Delta(t)$  of  $H_1$ ; (d)  $\Delta(t)$  of  $H_2$ .



用以计算  $tA$  的矩阵函数, 为此可进行变换  $x = \frac{t-1}{t+1}, t \in [-1, 1]$ , 进而对目标函数  $f\left(\frac{t-1}{t+1}\right)$  使用 CF 方法, 再代回  $x$  即求出目标函数  $f(x)$  在  $(-\infty, 0)$  上的最佳逼近式.

本工作借鉴文献 [18] 所述流程, 用 C 语言和高

精度浮点计算库第三方库实现了 CF 方法. 目前只计算了  $H_1(x)$  在  $l = -1, 0, 1, 2$  情况下的最佳有理逼近式, 每个和函数的逼近阶数  $k$  从 2 算到 20. 最佳有理逼近的精度按  $O(9.29^{-k})$  收敛 [18],  $k$  取值过小无法保证精度, 过大则增加计算量,  $k$  取 14 是相对

表 1  $H_1(x)$  的 14 阶有理逼近式系数  
Table 1. Rational approximation coefficients of order 14 of  $H_1(x)$ .

$i$	$\alpha_i$		$\theta_i$		
	实部	虚部	实部	虚部	
$H_{-1}$	0	$1.8321743856 \times 10^{-14}$	0	—	
	1	$9.4390253107 \times 10^{-3}$	$-1.7184791958 \times 10^{-2}$	$3.7032750494 \times 10^0$	$1.3656371871 \times 10^1$
	2	$-7.1542880636 \times 10^{-5}$	$1.4361043349 \times 10^{-4}$	$8.8977731864 \times 10^0$	$1.6630982619 \times 10^1$
	3	$-3.7636003878 \times 10^{-1}$	$3.3518347029 \times 10^{-1}$	$2.0875863824 \times 10^{-1}$	$1.0991260561 \times 10^1$
	4	$4.8071120988 \times 10^0$	$-1.3209793837 \times 10^0$	$2.2697838292 \times 10^0$	$8.4617379730 \times 10^0$
	5	$-2.3498232091 \times 10^1$	$-5.8083591297 \times 10^0$	$3.9933697105 \times 10^0$	$6.0048316422 \times 10^0$
	6	$4.6933274488 \times 10^1$	$4.5643649768 \times 10^1$	$5.0893450605 \times 10^0$	$3.5888240290 \times 10^0$
	7	$-2.7875161940 \times 10^1$	$-1.0214733999 \times 10^2$	$5.6231425727 \times 10^0$	$1.1940690463 \times 10^0$
$H_0$	0	$6.8944296383 \times 10^{-16}$	0	—	
	1	$6.5440260117 \times 10^{-1}$	$-1.2832270822 \times 10^0$	$3.2515207076 \times 10^0$	$8.8794008802 \times 10^0$
	2	$1.6950103692 \times 10^{-5}$	$1.8407950619 \times 10^{-5}$	$-7.8095944003 \times 10^0$	$1.7439142275 \times 10^1$
	3	$-2.2224782352 \times 10^{-3}$	$-3.1546051373 \times 10^{-3}$	$-2.6587124072 \times 10^0$	$1.4320672417 \times 10^1$
	4	$1.7992885377 \times 10^{-2}$	$1.2021513848 \times 10^{-1}$	$8.0133602893 \times 10^0$	$1.1529259279 \times 10^1$
	5	$-7.5350149609 \times 10^0$	$3.0951732326 \times 10^0$	$4.9527072954 \times 10^0$	$6.3037280204 \times 10^0$
	6	$2.2963504666 \times 10^1$	$9.0186818220 \times 10^0$	$6.0329668674 \times 10^0$	$3.7686693138 \times 10^0$
	7	$-1.6598679663 \times 10^1$	$-3.9025784287 \times 10^1$	$6.5586170606 \times 10^0$	$1.2541312162 \times 10^0$
$H_1$	0	$2.5860425352 \times 10^{-17}$	0	—	
	1	$3.6420239133 \times 10^{-6}$	$-9.2035937454 \times 10^{-7}$	$-6.7252445980 \times 10^0$	$1.8243806841 \times 10^1$
	2	$-7.0770448365 \times 10^{-4}$	$8.1357657951 \times 10^{-6}$	$-1.6178085302 \times 10^0$	$1.4980160449 \times 10^1$
	3	$2.1924468602 \times 10^{-2}$	$1.4503399864 \times 10^{-2}$	$1.8089893892 \times 10^0$	$1.2061284941 \times 10^1$
	4	$-7.4824534498 \times 10^{-2}$	$-3.4919861979 \times 10^{-1}$	$4.2328282861 \times 10^0$	$9.2905928669 \times 10^0$
	5	$-1.4055474074 \times 10^0$	$1.7544045749 \times 10^0$	$5.9140006024 \times 10^0$	$6.5966963198 \times 10^0$
	6	$7.3181555355 \times 10^0$	$4.6367472900 \times 10^0$	$6.9807011890 \times 10^0$	$3.9443101677 \times 10^0$
	7	$-6.3590039997 \times 10^0$	$-1.1445940055 \times 10^0$	$7.4994941162 \times 10^0$	$1.3126685690 \times 10^0$
$H_2$	0	$1.0424303869 \times 10^{-18}$	0	—	
	1	$1.9374329403 \times 10^{-7}$	$-4.9978918548 \times 10^{-7}$	$-5.6459608951 \times 10^0$	$1.9042087366 \times 10^1$
	2	$-7.8802249107 \times 10^{-5}$	$8.9993464310 \times 10^{-5}$	$-5.8091337715 \times 10^{-1}$	$1.5632223146 \times 10^1$
	3	$5.0276772354 \times 10^{-3}$	$-6.3806574131 \times 10^{-4}$	$2.8144884163 \times 10^0$	$1.2585289979 \times 10^1$
	4	$-5.3568120678 \times 10^{-2}$	$-5.4356106161 \times 10^{-2}$	$5.2143137665 \times 10^0$	$9.6939773637 \times 10^0$
	5	$-1.3483618592 \times 10^{-1}$	$5.0061190526 \times 10^{-1}$	$6.8778501466 \times 10^0$	$6.8830675570 \times 10^0$
	6	$1.7474494601 \times 10^{-0}$	$-3.3047758178 \times 10^{-1}$	$7.9329343986 \times 10^0$	$4.1155264000 \times 10^0$
	7	$-1.8139942222 \times 10^{-0}$	$-2.7037097557 \times 10^0$	$8.4459610094 \times 10^0$	$1.3696470588 \times 10^0$

折中的做法. 表 1 列出了  $k = 14$  时,  $H_1(x)$  对应的最佳有理逼近系数, 取 11 位有效数字 (实际计算中算到了 30 位有效数字); 图 1 是  $H_l\left(\frac{t-1}{t+1}\right)$  和 14 阶最佳有理逼近式  $r_{14}\left(\frac{t-1}{t+1}\right)$  在  $t \in [-1, 1]$  内的绝对误差  $\Delta(t)$  的图像, 可看出误差以  $\alpha_0$  水平振荡; 图 2 是  $H_1(x)$  与最佳逼近式最大误差随逼近阶数  $k$  的变化情况, 可看出当  $l$  越大, 误差越小, 说明越大的  $l$  对应的  $H_1(x)$  越容易收敛.

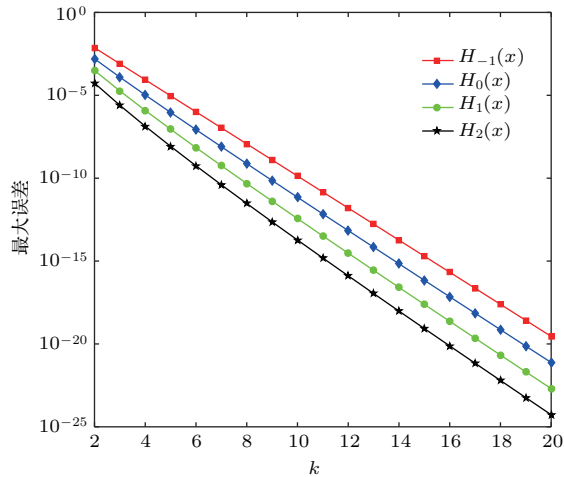


图 2  $H_1-r_k$  最大绝对误差随  $k$  的变化情况

Fig. 2. Maximum absolute error of  $H_1 - r_k$  varying with order  $k$ .

### 2.3 方法适用范围

以上方法都是基于非齐次项满足  $f(t) = \sum_{l=0}^m t^l a_l$  推导出的, 在许多情况下, 非齐次项需要用非常高阶的泰勒展开逼近, 甚至不能被有限阶泰勒展开很好地逼近, 这时使用上述方法计算量非常大, 可能还会失效. 不过, 以上方法的推导过程为更一般情况的处理提供了一种思路, 沿用上述方法流程, 有可能求解非齐次项  $f(t)$  为其他形式时的情况.

对于线性子链方法, 仍旧从方程  $N'_1 = -\lambda_1 N_1 + f(t)$  入手, 对于一些初等函数形式的  $f(t)$  (如  $e^{-at}$ ,  $\sin(at)$ ,  $\delta(t)$ ,  $e^{-at} \sin(bt)$  等), 其 Laplace 变换后为有理分式形式, 于是  $N_1(t)$  的 Laplace 变换也是有理分式, 这种情况下往往存在初等函数形式的 Laplace 逆变换, 可求出  $N_1$ , 进而求出所有  $N_n$ . 然而对于更一般的  $f(t)$ , 对方程 Laplace 变换时可能存在不可积的情况, 使方法失效.

对于有理近似方法, 可以先寻找和燃烧方程 (2) 具有相同形式的代数方程  $y' = -\lambda y + f(t)$  的一个特解  $h(t)$ , 只要  $h(t)$  在问题所关心的  $t$  范围内有界、无奇异, 对于任意  $t$  能明确给出  $h(t)$  的值, 无论  $h(t)$  是何种形式, 即便  $h(t)$  可能存在不可积的情形, 都可以通过 CF 方法求出  $h(t)$  的一个最佳有理逼近式, 从这一点讲有理近似方法的通用性比 TTA 方法要好. 但需要说明, 对于不同  $h(t)$ , 达到期望的逼近精度所需要的有理逼近式阶数也不同, 有些  $h(t)$  需要非常高的逼近阶数, 这会增大计算量. 本文求出了  $f(t) = t^l, l = 0, 1, \dots, m$  情形下的  $h(t)$ , 用 14 阶逼近就可以达到很高的逼近精度, 但对其他形式的  $f(t)$  未必够用.

本文只从操作实现上论述方程求解的可能性, 对于更多形式的  $f(t)$  是否可解, 限于作者水平无法系统展开. 对一些实际工程问题, 如液态散裂靶的运行, 由于束流轰击散裂靶的强度随时间变化并不剧烈, 散裂产物的累积速率相对恒定, 可近似认为非齐次项为常数项, 本文所述方法能够胜任求解.

### 3 数值实验

将以上算法集成到了北京应用物理与计算数学研究所开发的燃烧计算程序 JBURN 中, 通过两个数值算例验证程序功能的正确性. 首先是一个小型矩阵问题, 矩阵规模为  $6 \times 6$ , 非齐次项展开到 2 阶. 各系数和初始条件具体如下:

$$A = \begin{pmatrix} -10^{-7} & 0.5 \times 10^{-6} & 0.5 \times 10^{-6} & 0.005 & 0 & 0 \\ 0 & -10^{-3} & 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \times 10^{-4} & 0.01 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -60 & 10^{-6} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0.05 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -10^4 \end{pmatrix},$$

$$a_0 = \begin{pmatrix} 0.1 \\ 0.3 \\ 0.5 \\ 0.7 \\ 0.9 \\ 1.1 \end{pmatrix} \times 10^{-6}, \quad a_1 = \begin{pmatrix} 0.2 \\ 0.4 \\ 0.6 \\ 0.8 \\ 1 \\ 1.2 \end{pmatrix} \times 10^{-12},$$

$$\mathbf{a}_2 = \begin{pmatrix} 0.01 \\ 0.01 \\ 0.02 \\ 0.03 \\ 0.05 \\ 0.08 \end{pmatrix} \times 10^{-18}, \quad \mathbf{N}(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

其中  $\mathbf{A}$  的特征值全为负, 最大特征值和最小特征值差距 11 个量级, 且  $\mathbf{A}$  能够对角化. 计算  $t = 10^5, 10^6, 10^7$  时刻的解, 此情况下  $t\mathbf{A}$  的范数约为  $10^9-10^{11}$ . 若  $\mathbf{A}$  的特征值对角阵和特征向量为  $\mathbf{\Lambda}$  和  $\mathbf{P}$ , 即  $\mathbf{A} = \mathbf{P}\mathbf{\Lambda}\mathbf{P}^{-1}$ , 代入 (15) 式易得  $H_l(t\mathbf{A}) = \mathbf{P}H_l(t\mathbf{\Lambda})\mathbf{P}^{-1}$ , 根据矩阵函数定义 [15],

$H_l(t\mathbf{A})$  也是对角阵, 它的每个元素可由  $t\mathbf{A}$  的每个元素代入  $H_l(x)$  中直接求出, 以这种方法得到的结果作为基准, 分别使用 TTA 和有理近似方法求解, 结果列于表 2. 可以看出, 两种数值解法与参考解所得结果相差很小, 有些完全一致, 验证了方法的正确性.

第二个算例基于真实的核素反应数据库, 计算 MOX 核材料经  $5.3075 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$  大小的中子通量密度辐照 20 天后各种核素的含量, 材料的具体成分和各种展开系数列于表 3, 其中正展开系数表示核素不断地由外界补给, 负展开系数表示核素向外界流出.

表 2 小型矩阵问题在不同时刻的解  
Table 2. Solution of small matrix problem at different time.

时间/s	$N_i$	TTA	有理近似	参考解
$10^5$	$N_1$	$1.004226147 \times 10^0$	$1.004226147 \times 10^0$	$1.004226156 \times 10^0$
	$N_2$	$3.786166617 \times 10^{-4}$	$3.786166618 \times 10^{-4}$	$3.786166618 \times 10^{-4}$
	$N_3$	$2.786101341 \times 10^{-3}$	$2.786101341 \times 10^{-3}$	$2.786101341 \times 10^{-3}$
	$N_4$	$1.300260013 \times 10^{-8}$	$1.300261847 \times 10^{-8}$	$1.300260013 \times 10^{-8}$
	$N_5$	$6.021385725 \times 10^{-6}$	$6.021385742 \times 10^{-6}$	$6.021385766 \times 10^{-6}$
	$N_6$	$1.004227367 \times 10^{-4}$	$1.004227367 \times 10^{-4}$	$1.004227376 \times 10^{-4}$
$10^6$	$N_1$	$1.103453663 \times 10^0$	$1.103453663 \times 10^0$	$1.103453749 \times 10^0$
	$N_2$	$7.802988826 \times 10^{-4}$	$7802988829 \times 10^{-4}$	$7.802988828 \times 10^{-4}$
	$N_3$	$5.535761548 \times 10^{-3}$	$5.535761548 \times 10^{-3}$	$5.535761548 \times 10^{-3}$
	$N_4$	$2.525012381 \times 10^{-3}$	$2.525014262 \times 10^{-8}$	$2.525012381 \times 10^{-8}$
	$N_5$	$7.442277976 \times 10^{-6}$	$7.442277999 \times 10^{-6}$	$7.442278299 \times 10^{-6}$
	$N_6$	$1.103456003 \times 10^{-4}$	$1.103456004 \times 10^{-4}$	$1.103456089 \times 10^{-4}$
$10^7$	$N_1$	$9.762646602 \times 10^0$	$9.762646616 \times 10^0$	$9.762646617 \times 10^0$
	$N_2$	$5.309448118 \times 10^{-3}$	$5.309448121 \times 10^{-3}$	$5.309448121 \times 10^{-3}$
	$N_3$	$3.748849797 \times 10^{-2}$	$3.748849797 \times 10^{-2}$	$3.748849797 \times 10^{-2}$
	$N_4$	$1.700010618 \times 10^{-7}$	$1.700010618 \times 10^{-7}$	$1.700010368 \times 10^{-7}$
	$N_5$	$6.221330803 \times 10^{-5}$	$6.221330887 \times 10^{-5}$	$6.221330356 \times 10^{-5}$
	$N_6$	$9.762663701 \times 10^{-4}$	$9.762663716 \times 10^{-4}$	$9.762663720 \times 10^{-4}$

表 3 MOX 燃耗算例计算初始条件  
Table 3. Initial conditions of MOX burnup example.

核素	初始含量/ $10^{24}$	0 阶展开系数/ $10^{24} \text{ s}^{-1}$	1 阶展开系数/ $10^{24} \text{ s}^{-2}$
${}^7\text{Li}$	$2.1457 \times 10^{-2}$	$2.1457 \times 10^{-9}$	$1.0729 \times 10^{-16}$
${}^{19}\text{F}$	$4.6375 \times 10^{-2}$	$1.5458 \times 10^{-9}$	$1.1594 \times 10^{-16}$
${}^{232}\text{Th}$	$5.5332 \times 10^{-3}$	$1.1066 \times 10^{-10}$	$9.2220 \times 10^{-18}$
${}^{233}\text{U}$	$3.4816 \times 10^{-5}$	$-4.9737 \times 10^{-13}$	$-4.3520 \times 10^{-20}$
${}^{238}\text{U}$	$6.6150 \times 10^{-4}$	$-7.3500 \times 10^{-12}$	$-6.6150 \times 10^{-19}$



核反应数据库中包含 3400 种核素, 因此矩阵  $A$  的规模为  $3400 \times 3400$ ,  $tA$  的范数约为  $10^{30}$ . 用数值方法求解  $tA$  的特征值和特征向量耗时且不稳定, 因此无法像算例一一样给出参考解, 仅给出 TTA 方法和有理近似方法的计算结果, 其中核素含量小于  $10^{-24}$  时强制设为 0. 图 3 给出了 3400 种核素的计算结果, 并给出计算相对偏差, 从图中可以看出, 绝大部分核素含量的计算结果符合得很好, 偏差小于 10%. 进一步统计, 3400 种核素中有

1251 种核素含量不为 0, 其中 26 个核素的偏差大于 10%. 303 个核素偏差在 0.1%—10% 之间, 481 个核素偏差在  $10^{-3}\%$ —0.1% 之间, 441 个核素的偏差小于  $10^{-3}\%$ . 表 4 列出了工程计算中几种重要重金属和裂变产物核素的含量对比情况, 可以看出, 对于重核而言, 计算偏差非常小, 偏差最大的  $^{243}\text{Am}$  也只有  $5.91 \times 10^{-2}\%$ ; 对于裂变产物而言偏差稍大, 但偏差最大的  $^{151}\text{Sm}$  也不超过 1%, 说明两种方法的精度足够满足工程应用需求.

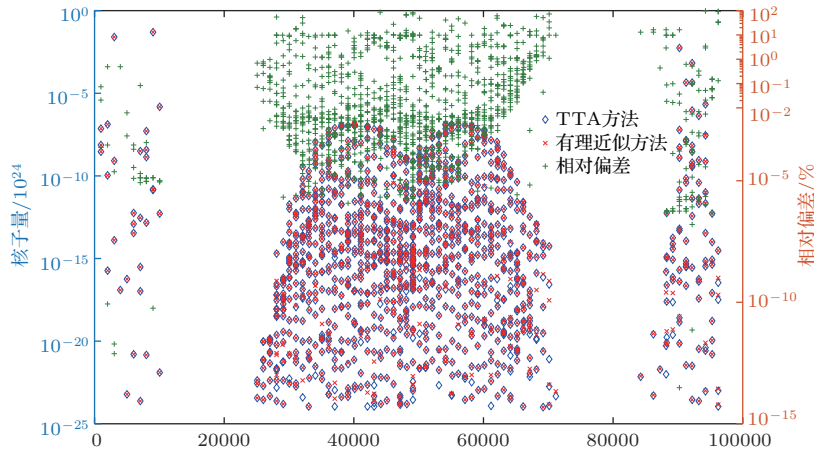


图 3 两种方法计算 MOX 材料燃耗结果与相对偏差

Fig. 3. Results and relative error of MOX burnup calculated by two methods.

表 4 重要重金属与裂变产物核素含量

Table 4. Quantity of important actinides and fission products.

核素	TTA/ $10^{24}$	有理近似/ $10^{24}$	相对偏差/%	核素	TTA/ $10^{24}$	有理近似/ $10^{24}$	相对偏差/%
$^{232}\text{Th}$	$5.6824 \times 10^{-3}$	$5.6824 \times 10^{-3}$	0	$^3\text{H}$	$6.9774 \times 10^{-8}$	$6.9760 \times 10^{-8}$	0.020
$^{233}\text{Th}$	$6.2940 \times 10^{-8}$	$6.2940 \times 10^{-8}$	$5.55 \times 10^{-7}$	$^{95}\text{Mo}$	$1.3665 \times 10^{-9}$	$1.3687 \times 10^{-9}$	0.161
$^{231}\text{Pa}$	$1.4331 \times 10^{-8}$	$1.4331 \times 10^{-8}$	$3.20 \times 10^{-5}$	$^{99}\text{Tc}$	$6.8515 \times 10^{-8}$	$6.8664 \times 10^{-8}$	0.218
$^{233}\text{Pa}$	$4.2875 \times 10^{-5}$	$4.2875 \times 10^{-5}$	$5.60 \times 10^{-7}$	$^{103}\text{Ru}$	$2.9771 \times 10^{-8}$	$2.9779 \times 10^{-8}$	0.026
$^{233}\text{U}$	$4.3915 \times 10^{-5}$	$4.3915 \times 10^{-5}$	$1.60 \times 10^{-7}$	$^{109}\text{Ag}$	$1.9122 \times 10^{-9}$	$1.9244 \times 10^{-9}$	0.637
$^{234}\text{U}$	$9.1326 \times 10^{-7}$	$9.1326 \times 10^{-7}$	$8.23 \times 10^{-7}$	$^{135}\text{Xe}$	$3.8515 \times 10^{-9}$	$3.8516 \times 10^{-9}$	0.004
$^{235}\text{U}$	$6.5423 \times 10^{-9}$	$6.5455 \times 10^{-9}$	$4.89 \times 10^{-2}$	$^{133}\text{Cs}$	$6.3634 \times 10^{-8}$	$6.4231 \times 10^{-8}$	0.938
$^{236}\text{U}$	$4.1101 \times 10^{-10}$	$4.1103 \times 10^{-10}$	$4.87 \times 10^{-3}$	$^{143}\text{Nd}$	$3.1877 \times 10^{-8}$	$3.2044 \times 10^{-8}$	0.524
$^{238}\text{U}$	$6.4513 \times 10^{-4}$	$6.4513 \times 10^{-4}$	$7.12 \times 10^{-12}$	$^{145}\text{Nd}$	$6.3707 \times 10^{-8}$	$6.3736 \times 10^{-8}$	0.046
$^{239}\text{U}$	$3.0259 \times 10^{-9}$	$3.0259 \times 10^{-9}$	$1.66 \times 10^{-6}$	$^{147}\text{Sm}$	$7.3746 \times 10^{-11}$	$7.3512 \times 10^{-11}$	0.318
$^{237}\text{Np}$	$8.9305 \times 10^{-10}$	$8.9305 \times 10^{-10}$	$7.09 \times 10^{-4}$	$^{149}\text{Sm}$	$1.1664 \times 10^{-8}$	$1.1725 \times 10^{-8}$	0.512
$^{238}\text{Pu}$	$9.7469 \times 10^{-12}$	$9.7470 \times 10^{-12}$	$1.06 \times 10^{-3}$	$^{150}\text{Sm}$	$7.6066 \times 10^{-10}$	$7.6400 \times 10^{-10}$	0.439
$^{239}\text{Pu}$	$2.1135 \times 10^{-6}$	$2.1135 \times 10^{-6}$	$1.06 \times 10^{-6}$	$^{151}\text{Sm}$	$5.7715 \times 10^{-9}$	$5.8163 \times 10^{-9}$	0.776
$^{241}\text{Pu}$	$7.7276 \times 10^{-10}$	$7.7276 \times 10^{-10}$	$2.21 \times 10^{-6}$	$^{152}\text{Sm}$	$3.9795 \times 10^{-9}$	$3.9833 \times 10^{-9}$	0.094
$^{241}\text{Am}$	$5.4425 \times 10^{-13}$	$5.4425 \times 10^{-13}$	$4.82 \times 10^{-7}$	$^{153}\text{Eu}$	$1.8711 \times 10^{-9}$	$1.8726 \times 10^{-9}$	0.082
$^{243}\text{Am}$	$1.0136 \times 10^{-14}$	$1.0142 \times 10^{-14}$	$5.91 \times 10^{-2}$	$^{155}\text{Gd}$	$1.9500 \times 10^{-12}$	$1.9525 \times 10^{-12}$	0.128

在计算耗时方面, TTA 方法耗时约 85 s, 有理近似方法仅耗时 0.8 s, 显著快于 TTA 方法, 主要原因是 TTA 方法需要通过回溯算法搜索构造线性子链, 本问题中构造出 300 多万条核素链, 成为最耗时的因素. 一般而言, 对于考虑重金属裂变的问题, 线性子链个数会相当庞大, TTA 方法耗时会显著高于有理近似方法; 对于纯粹的核素衰变问题, 只需要若干个线性子链就能描述, 这时 TTA 方法则会显著快于有理近似方法. 有理近似方法耗时主要在解线性方程环节, 根据 (12) 式, 方程的个数和有理逼近式阶数成正比, 对不同问题, 在相同逼近阶数下, 有理近似方法求解速度没有显著波动.

## 4 结 论

本文初步研究了非齐次燃耗方程的两种数值解法, 用以求解方程非齐次项含时的情况. 在非齐次项能够被有限阶泰勒展开逼近的条件下, 首先基于 Laplace 变换推导出了方程基于线性子链方法的解析表达式, 然后使用 CF 方法计算了矩阵级数解的近最佳有理逼近式. 使用不同方法计算两个数值算例, 结果符合很好, 验证了方法的正确性与精度. 本文的方法在计算精度和效率上能够满足工程计算要求. 方法的实现流程也为非齐次燃耗方程的求解提供了一种思路, 在后续工作中, 可借鉴上述方法, 求解含有其他形式非齐次项的燃耗方程.

## 参考文献

- [1] Bateman 1910 *Cambridge Philos. Soc. Proc.* **15** 423
- [2] Cetnar J 2006 *Ann. Nucl. Energy* **38** 261
- [3] Huang K, Wu H C 2016 *Ann. Nucl. Energy* **87** 637
- [4] Allen G C 1980 *A User's Manual for the ORIGEN2 Computer Code* (Tennessee: Oak Ridge National Laboratory) p179
- [5] Yamamoto A, Tatsumi M, Sugimura N 2007 *J. Nucl. Sci. Technol.* **44** 147
- [6] Pusa M, Leppanen J 2010 *Nucl. Sci. Eng.* **164** 140
- [7] Pusa M 2011 *Nucl. Sci. Eng.* **169** 155
- [8] Cody W J, Meinardus G 1969 *J. Approx. Theory* **2** 50
- [9] Li C J, Zhu X J, Gu C Q 2011 *Appl. Math.* **2** 247
- [10] Cleve M, Charles V L 2003 *SIAM Rev.* **45** 3
- [11] England T R 1961 *CINDER—A One-Point Depletion and Fission Product Program* (Los Alamos: Los Alamos National Laboratory) p1
- [12] He B Q, Wang X H 2007 *Higher Mathematics* (Beijing: Science Press) p298 (in Chinese) [何柏庆, 王晓华 2007 高等数学 (北京: 科学出版社) 第 298 页]
- [13] Isotalo A E, Aarnio P A 2011 *Ann. Nucl. Energy* **38** 261
- [14] Trefethen L N 2011 *Approximation Theory and Approximation Practice* (London: Oxford University) pp61, 168, 171
- [15] Zadeh L A, Desoer C A 1963 *Linear System Theory* (New York: McGraw-Hill Book Company) p593
- [16] Amann H 1990 *Ordinary Differential Equations: An Introduction to Nonlinear Analysis* (New York: Walter de Gruyter) p105
- [17] Pachon R, Trefethen L N 2009 *BIT Numer. Math.* **49** 721
- [18] Trefethen L N, Gutknecht M H 1983 *SIAM J. Numer. Anal.* **20** 420
- [19] Deun J V, Trefethen L N 2011 *Numer. Math.* **51** 1039
- [20] Schmelzer T, Trefethen L N 2007 *Electron. Trans. Numer. Anal.* **28** 1

# Preliminary study on numerical solver of inhomogeneous burnup equations\*

Fu Yuan-Guang<sup>1)2)</sup> Deng Li<sup>1)†</sup> Li Gang<sup>1)</sup>

1) (*Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China*)

2) (*CAEP Software Center for High Performance Numerical Simulation, Beijing 100088, China*)

( Received 14 December 2017; revised manuscript received 13 April 2018 )

## Abstract

The inhomogeneous burnup equation is often used for describing the time evolution of nuclides' depletion in nuclear systems which have a significant nuclide migration effect. However, lots of burnup calculations codes only deal with the homogeneous cases instead of the inhomogeneous ones, among them there are a few codes that can work only when the inhomogeneous term of the equation is constant. Based on the condition that the inhomogeneous term can be approximated by finite-order Taylor expansion, two methods are introduced to solve the inhomogeneous burnup equation whose inhomogeneous term is time dependent. For the first method, the transmutation trajectory analysis method is used to decompose the connections between nuclides into linear chains, for one chain the analytical solution is derived strictly by using the Laplace transform. For the second method, a solution of the inhomogeneous equation in the form of summation of infinite matrix series is first derived, and then the sum function of the series is found. Furthermore, the different-order nearly-best rational approximation function of the sum function is found by using Carathéodory-Fejér method. The error between the sum function and the rational function fluctuates in a certain range without exceeding a limit value, while the maximum error decreases exponentially with the order of rational function increasing. By adopting the nearly-best rational approximation, the summation of infinite matrix series converts into a finite expansion of matrix fraction, which is much easier to deal with. These two methods are implemented in the burnup calculation code JBURN and numerical tests are done through using two examples. The first example is a small-scale matrix example and the result shows that the results from the two methods agree well in at least 6 decimal precision together with the results from the reference solution. The second example is a large-scale problem based on real nuclides' reaction database, and the result shows that less than 1% among all nuclides have a deviation larger than 10% between two methods, while about 8% nuclides have a deviation larger than 0.01% and the remaining ones have a deviation smaller than 0.01%. These results validate the correctness and accuracy for each of the two methods. Finally, this paper provides a possible implementation process for solving inhomogeneous burnup equations which have other time-dependent forms of inhomogeneous term.

**Keywords:** inhomogeneous burnup equation, Laplace transform, Carathéodory-Fejér method, near-best Chebyshev rational approximation

**PACS:** 28.52.Av, 28.41.Vx, 28.41.Ak

**DOI:** 10.7498/aps.67.20172650

\* Project supported by the Sub-item of Special Projects of the National Energy Bureau, China (Grant No. 2015ZX06002008), the National Defense Basic Scientific Research Program of China (Grant No. C1520110002), the National Magnetic Constrained Nuclear Fusion Energy Research Project, China (Grant No. 2015GB108002), and the National Science Foundation of China-Guangdong United Fund (second phase) Projects of Application of Supercomputing Science (Grant No. U1501501).

† Corresponding author. E-mail: [deng\\_li@iapcm.ac.cn](mailto:deng_li@iapcm.ac.cn)