

СИСТЕМА МОДЕЛИРОВАНИЯ И ВИЗУАЛИЗАЦИИ ЯДЕРНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ – NUCLEAR EVOLUTION SOFTWARE

А.А. Догов

*Обнинский институт атомной энергетики НИЯУ МИФИ
249030, Калужская обл., г. Обнинск, Студенческий городок, 1*



Приводится методика моделирования изменения изотопного состава топлива с использованием системы обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающей трансмутацию нуклидов. Предложены алгоритмы моделирования и расчета основных параметров ядерных превращений нуклидов, основанные на направленных графах, что позволило повысить скорость и точность вычислений. Дается описание разработанной системы моделирования процессов ядерных превращений в результате радиоактивного распада и в результате реакций, вызываемых потоками частиц. Определены ее особенности и функциональные возможности.

Особенностями системы являются простота, развитый дружественный пользовательский интерфейс, высокая степень автоматизации всех этапов работы пользователя, визуализация моделируемых процессов и удобные средства управления расчетом и обработки результатов. Система ориентирована на широкий круг пользователей – от студентов и аспирантов до преподавателей вузов и научных работников. Она может использоваться как инструмент для проведения научных исследований и поддержки образовательного процесса. Представленная система является удобным инструментом оценки концентрации любого изотопа в цепочке превращений в зависимости от интегрального потока и времени при различном количестве стартовых изотопов.

При создании системы помимо авторских разработок используются лицензионные современные программные средства и библиотеки визуальных контрольных элементов мировых производителей. Это позволило разработать удобный для пользователя интерфейс, отвечающий самым передовым программным разработкам. Представление результатов моделирования осуществляется в виде интерактивных таблиц и графических зависимостей. Даются примеры использования предложенного инструментария.

Ключевые слова: радиоактивные отходы, трансмутация, цепочки распада, теория графов, уравнения Бейтмана, информационные системы, интерактивный интерфейс.

ВВЕДЕНИЕ

Важным аспектом атомной энергетики является контроль состояния и изменения изотопного состава ядерного топлива. Моделирование процессов ядерных превращений имеет приложение в широком круге прикладных и теоретических исследований,

© А.А. Догов, 2016

связанных с развитием ядерных технологий. В частности, в настоящее время необходимо решать задачи, связанные с утилизацией облученного ядерного топлива. Один из главных предлагаемых методов переработки основан на трансмутации вредных продуктов деления, накопившихся в топливе, путем их облучения в атомных реакторах или системах с подкритичной активной зоной, где превращения ядер также обусловлены нейтронными реакциями [1]. Поэтому актуально создание специализированных программ для моделирования трансмутации нуклидов.

Система дает возможность автоматически построить и представить на экране в реальном времени схему нуклидных превращений при радиоактивном распаде, а также в результате реакций, вызываемых нейтронами; оценить число ядер целевого нуклида при облучении и выдержке мишени.

В систему интегрирована справочно-информационная интерактивная система, содержащая необходимую информацию о характеристиках большинства известных нуклидов 112-ти химических элементов. Также реализована возможность подключения к удаленным базам данных для получения свойств экзотических нуклидов.

ОСОБЕННОСТИ МОДЕЛИРОВАНИЯ И РАСЧЕТ ОСНОВНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ПРОЦЕССОВ

Для цепочек распадов, когда радиоактивное вещество X_1 превращается в X_2 , X_2 превращается в X_3 и т.д., баланс количества нуклидов определяется обычными условиями распада. Скорость превращения X_k в X_{k+1} пропорциональна λ_k , а скорость превращения X_{k-1} в X_k пропорциональна λ_{k-1} . Изменение концентрации изотопов со временем описывается системой из n обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ)

$$\begin{aligned} dN_1(t) / dt &= -\lambda_1 N_1(t); \\ dN_2(t) / dt &= -\lambda_2 N_2(t) + \lambda_1 N_1(t); \\ &\dots\dots\dots \\ dN_n(t) / dt &= -\lambda_n N_n(t) + \lambda_{n-1} N_{n-1}(t). \end{aligned} \quad (1)$$

Расчет систем дифференциальных уравнений, описывающих распад радиоактивных цепочек, даже при использовании современных компьютеров и стандартных численных методов приводит к большим затратам времени. Это обусловлено тем, что при численном интегрировании системы уравнений величина шага интегрирования по самым грубым оценкам не может превышать периода полураспада самого короткоживущего нуклида в цепочке. Случай, когда в одной цепочке присутствуют изотопы, периоды полураспада которых отличаются на порядки, представляется сложной и затратной по времени задачей.

В простейшем случае, когда в начальный момент времени дочерних ядер нет, а количество материнских ядер равно N_{10} , решение каждого k -го уравнения имеет вид [2]

$$N_k(t) = N_{10} \sum_{i=1}^k C_i e^{-\lambda_i t}, \quad N_{10} = N_1(0), \quad (2)$$

где C_i – коэффициент в решении Бейтмана, рассчитываемый по формуле

$$C_i = \prod_{j=1}^{k-1} \lambda_j / \sum_{i=1}^k (\lambda_j - \lambda_i), \quad j \neq i. \quad (3)$$

Расчет концентрации ядер в случае «ветвления» цепочки. Для ряда нуклидов имеют место два или более конкурирующих процессов ядерных превращений. Было сделано предположение о том, что ветвления в схеме превращений нуклидов

в процессе трансмутации происходят независимо друг от друга. При расчете активности в цепочках с ветвлением целесообразно представить их в виде нескольких независимых линейных цепочек и затем производить расчет параметров трансмутации, используя формулы (2) и (3) [3].

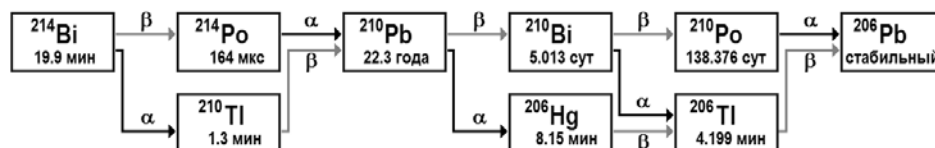
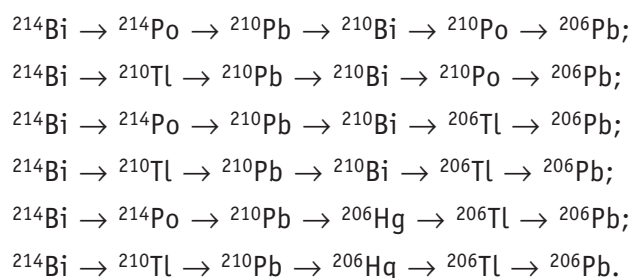


Рис. 1. Цепочка распада ^{214}Bi

Например, в представленной на рис. 1 цепочке распада ^{214}Bi существует шесть условно независимых уникальных путей образования ^{206}Pb из ^{214}Bi :



Тогда, при сделанных выше предположениях, число $N_k(t)$ ядер нуклида k в определенный момент времени t может быть получено как сумма числа ядер этого нуклида, рассчитанного по всем линейным цепочкам n , от стартового нуклида к нуклиду k :

$$N_k(t, N_0) = \sum_n \left(N_{10} \prod_{i=1}^{k-1} q_i \sum_{i=0}^k C_i e^{-\lambda_i t} \right), \quad (4)$$

где q_i – доля распада; а C_i рассчитывается по формуле (3)

Для реакций, вызываемых частицами (нейтронами, протонами и т.д.), скорость реакции зависит от свойств ядер нуклида и спектра этих частиц. Вероятность распада атома за единицу времени в потоке различных типов частиц или излучения (для удобства в данной работе эта величина обозначена Λ по аналогии с постоянной распада λ и называется постоянной распада нуклида в потоке частиц) описывается уравнением

$$\Lambda_i = \lambda_i + \sum_f \sigma_{if} \Phi_f, \quad (5)$$

где λ_i – постоянная распада, характеризующая скорость естественного радиоактивного распада нуклида i ; Φ_f – плотность потока частиц f ; σ_{if} – микросечение реакций (f, γ) , (f, α) , (f, β) , $(f, 2n)$, $(f, 3n)$, ... взаимодействия частиц f с ядрами нуклида, приводящее к превращению его в другой нуклид. Величина $(\sigma_{if} \Phi_f)$ характеризует скорость трансмутации i -го ядра нуклида под действием потока частиц f . Обратная величина $(\sigma_{if} \Phi_f)^{-1}$ является средним временем жизни нуклида в потоке частиц [4, 5].

В данном случае при решении системы уравнений (1) вместо постоянной распада λ_i необходимо учитывать Λ_i .

Удельная активность Q радионуклида в мишени в расчете на один грамм стартового химического элемента равна

$$Q_i(t) = \lambda_i \cdot N_A \cdot C \cdot N_i(t) / M, \quad (6)$$

где N_A – число Авогадро; C – изотопное содержание основного стартового нуклида; $N_i(t)$ – число ядер i -го радионуклида в момент времени t ; M – средняя атомная масса стартового химического элемента. Возможность рассчитать удельную активность побочных радионуклидов позволяет производить анализ процесса получения радионуклида и выбирать оптимальные параметры режима облучения и выдержки [3].

В программном комплексе цепочка превращений представляется в виде направленного графа, вершинами которого являются изотопы или нуклиды, составляющие цепочку, а ребра соответствуют взаимным превращениям нуклидов в процессе трансмутации. Направление ребер соответствует направлению превращения нуклидов – от материнского нуклида к дочернему. Это позволяет работать с цепочкой ядерных превращений как с математическим объектом: применять к работе над ней особые подходы и методы, характерные для работы с графами.

Для графа превращений можно определить три типа вершин.

– Вершина нулевого поколения – вершина, в которую не входит ни одно ребро. Вершины нулевого поколения соответствуют изотопам, заданным в начальный момент времени.

– Вершина последнего поколения – вершина, из которой не выходит ни одного ребра. Такие вершины представляют стабильные изотопы или изотопы, для которых система не нашла необходимых для моделирования данных.

– Целевая вершина – вершина, параметры которой необходимо рассчитать.

Для задачи трансмутации нуклидов наибольший шанс попасть в неисследованную область – рассмотреть возможных претендентов на роль дочерних изотопов для получения целевого нуклида в качестве осколка деления. Таким образом, на каждом шаге ведется поиск следующих изотопов на основе свойств предыдущих. Процесс продолжается до тех пор, пока система не найдет стабильный изотоп или элемент, для которого нет данных.

Для корректного задания вектора неизвестных системы ОДУ трансмутации необходимо построить все возможные уникальные линейные цепочки ядерных превращений, реализующиеся при облучении изотопов. Для этого предлагается использовать алгоритмы поиска пути на карте с неизвестной местностью.

Для определения путей образования и выделения линейных цепочек применялся метод поиска в глубину (Depth First Search, DFS). Алгоритм поиска описывается следующим образом: для каждой непройденной вершины необходимо найти все непройденные смежные вершины и повторить поиск для них. Методом систематического прохождения (посещения) вершин графа, когда за счет продвижений от текущей вершины по ребру вперед (к еще не просмотренной вершине) всегда, когда это возможно, и возвратов от текущей вершины по пройденному ребру назад (к ранее пройденной вершине), если движение вперед от текущей вершины невозможно, осуществляется движение по всем вершинам графа, достижимым из заданной вершины S , с которой начинается поиск [6].

ОПИСАНИЕ И ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ СИСТЕМЫ

Система NES (Nuclear Evolution Software) – программный продукт, который представляет собой отдельное приложение с прямым доступом к удаленной или локальной базам данных. Система обладает широким набором инструментов навигации, чтобы помочь пользователю определить ядра и данные, представляющие интерес.

В главном окне NES размещается область построения цепочек распада, область построения графиков концентрации ядер. Также система предоставляет значения данных по концентрации активности и токсичности в определенных временных точках по выбору пользователя. При разработке системы большое внимание было уделено основным принципам создания интерактивного интерфейса [7].

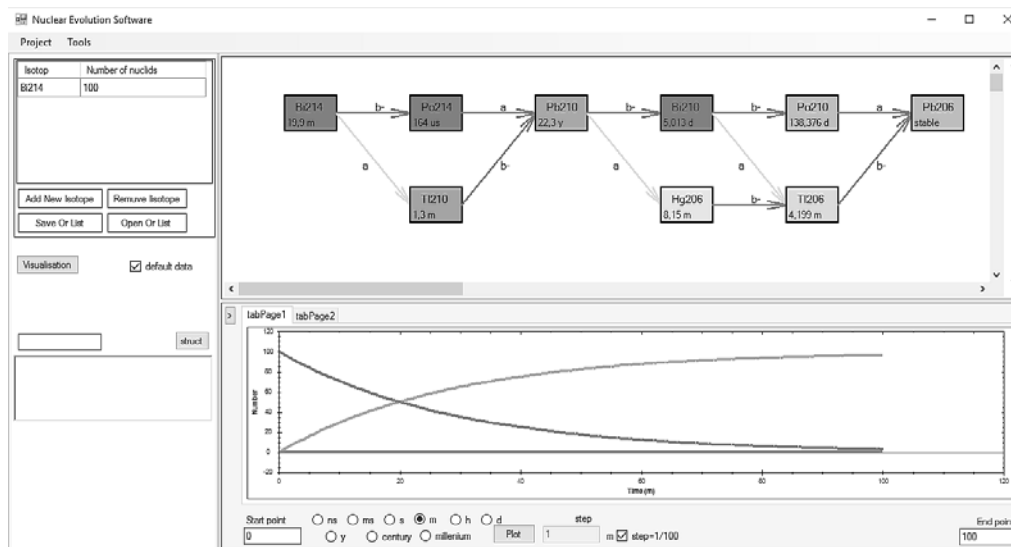


Рис. 2. Вид главного окна NES

В главном окне (рис. 2) система отображает структуру в виде направленного графа, элементами которого являются изотопы. В каждом элементе система отображает название изотопа и его период полураспада, каждый элемент выделен собственным цветом. Вероятность распада по определенному пути отображается цветом стрелки. Чем выше вероятность, тем ярче стрелка, отображающая тип распада. Ниже в отдельном окне строятся графики зависимости концентрации изотопов от времени. Реализована также возможность получать численные значения в заданных временных точках. Изотопный состав задается в верхнем левом углу экрана в виде названия изотопа и его концентрации.

Для упрощения ввода данных была реализована справочная система «Проводник нуклидов» – встроенная презентационная подпрограмма, предназначенная для облегчения доступа к справочным данным.

Данная справочно-информационная система объединяет совокупность свойств более чем 3500 изотопов 112-ти химических элементов. В базе данных помимо данных о составе ядер также содержатся справочные данные об основных свойствах изотопов химических элементов, таких как масса, избыток массы, тип распада, период полураспада, распространенность нуклида в природной смеси изотопов (%), спин и четность основного состояния. Эти значения снабжены стандартными погрешностями.

Для радиоактивных нуклидов представлены оцененные значения периода полураспада. Для стабильных нуклидов вместо периода полураспада указано «stable» (стабильный). Данные были получены на основе информации, содержащейся в базах данных Центра ядерных данных агентства по атомной энергии Японии (Nuclear Data Center at Japan Atomic Energy Agency) [8] и Brookhaven National Nuclear Data Center (NNDC) [9]. Данные по микросечениям реакций на тепловых нейтронах были подготовлены на основе данных библиотеки FENDL-2.1 (Fusion Evaluated Nuclear

Data Library) [10]. Доступ к данным предоставляется через диаграмму нуклидов или периодическую систему.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗМЕНЕНИЯ ИЗОТОПНОГО СОСТАВА ОЯТ ВВЭР-1000 ПРИ ДЛИТЕЛЬНОЙ ВЫДЕРЖКЕ

Для демонстрации возможностей системы было проведено моделирование длительной выдержки отработанного ядерного топлива реактора ВВЭР-1000. После извлечения отработавшего ядерного топлива (ОЯТ) из активной зоны в нем продолжают спонтанные процессы деления, радиоактивных распадов; короткоживущие нуклиды исчезают, появляются новые. Топливо в течение длительного периода времени остается мощным источником α -, β -, γ -, нейтронного излучения и тепловыделения. На рисунке 3 представлен фрагмент результата моделирования цепочек распадов в ОЯТ реактора ВВЭР 1000. В рамках указаны элементы, составляющие начальный изотопный состав ОЯТ [5, 11].

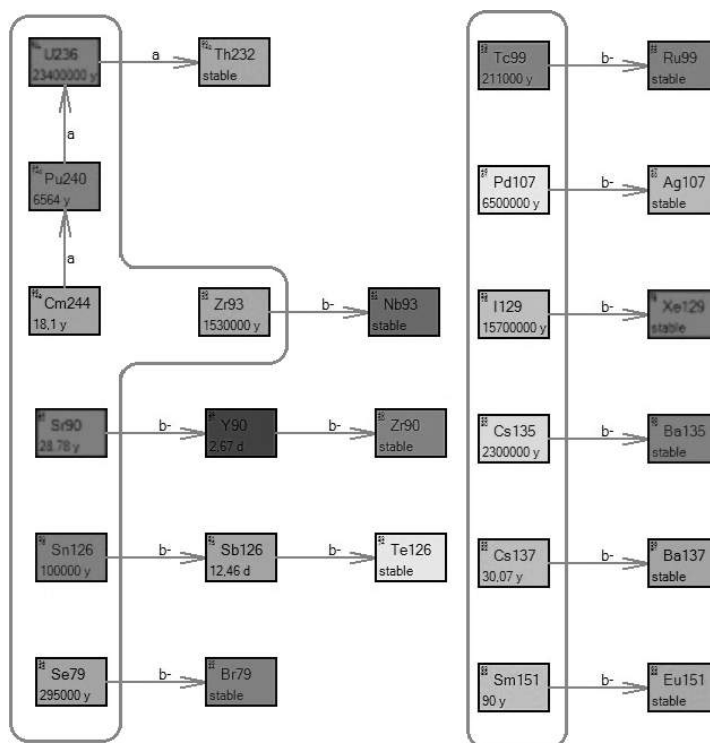


Рис. 3. Фрагмент цепочки распадов, смоделированный системой для ОЯТ реактора ВВЭР-1000

На рисунке 4 представлен графический вариант расчета изменения изотопного состава в ОЯТ при длительной выдержке. Учитывая приведенные радиоэкологические характеристики ОЯТ и результаты моделирования можно охарактеризовать его, в первую очередь, как высокоактивный материал, который с экологической точки зрения представляет опасность не только в краткосрочном плане, но и в долгосрочной перспективе.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотрены основные методы расчета изменения изотопного состава ядерного топлива. На основе решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка, предложенного Бейтманом, составлен алгоритм расчета основных параметров трансмутации на основе направленного графа превращений нуклидов.

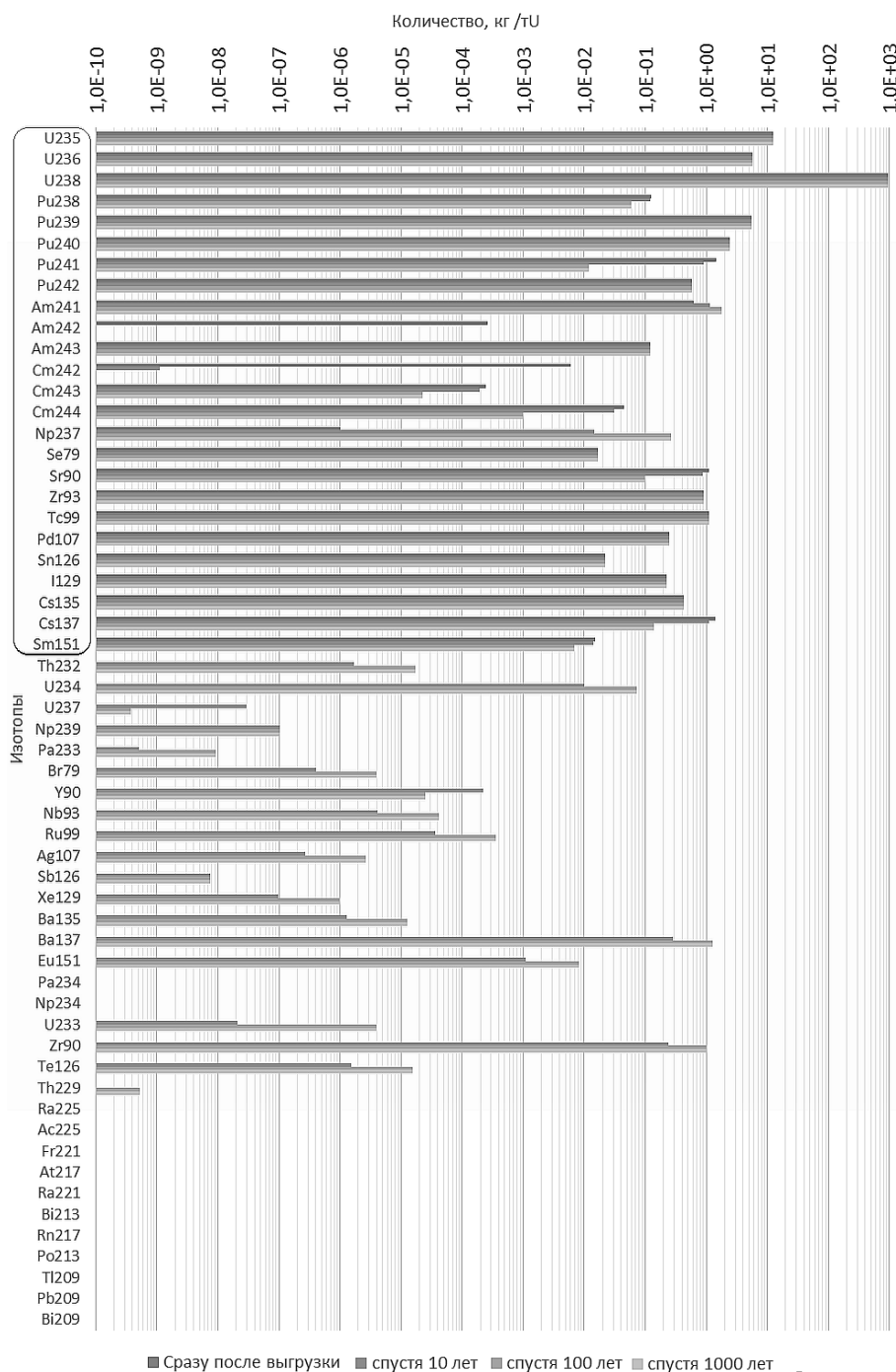


Рис. 4. Изменение изотопного состава в ОЯТ реактора ВВЭР 1000

Создана интерактивная система, которая дает пользователю возможность проводить оценку эффективности трансмутации нуклидов в процессе выдержки ОЯТ при различных условиях. Благодаря проведенной оптимизации кода существенно сокращено время расчета. Данная система была применена для моделирования трансмутации в работе [12].

В отличие от множества научных программных комплексов, в которых различные

этапы работы пользователей проводятся в разных, иногда даже «неоднородных» приложениях с различным интерфейсом и внутренней логикой взаимодействия объектов, NES разработана в виде интегрированной среды, объединяющей все пользовательские инструментальные программные средства в единое приложение с единым интерфейсом и общей логикой функционирования объектов.

Все этапы работы пользователя – подготовка и редактирование исходных данных, расчет, автоматический анализ и обработка результатов – отражаются визуально, что обеспечивает простоту использования, быстроту восприятия результатов и высокий уровень информативности.

Литература

1. *Адамов Е.О., Ганев И.Х., Лопаткин А.В., Муратов В.Г., Орлов В.В.* Трансмутационный топливный цикл в крупномасштабной ядерной энергетике России. М.: ГУП НИКИЭТ, 1999, 156 с.
2. *Bateman H.* Solution of a System of Differential Equations Occurring in The Theory of Radio-Active Transformation., University of Cambridge, Proc. Phil. Soc. 1910. PP. 423-427.
3. *Пляскин В.И., Р.А. Косилов, Г.Н. Мантуров.* Справочно-информационная интерактивная система «Трансмутация нуклидов в ядерных реакторах» // Вопросы атомной науки и техники, 2003. Т. 2. № 1. С. 103-109.
4. Manual for reactor produced radioisotopes. IAEA TECDOC-1340, Vienna, 2002.-257p.
5. *Герасимов А.С., Зарицкая Т.С., Рудик А.П.* Справочник по образованию нуклидов в ядерных реакторах – М.: Энергоатомиздат, 1989. – 573 с.
6. Depth-first search // In: Introduction to Algorithms, Second Edition / Ed. by *Thomas H. Cormen, Charles E. Leiserson, Ronald L. Rivest, and Clifford Stein.* The MIT Press, 2001. PP. 540–549.
7. Visual Interface Design // In: About Face 3 The Essentials of Interaction Design / Ed. by *Alan Cooper, R. Reimann, D. Cronin.* Indianapolis. Wiley Publishing Inc., 2007. PP. 287-319.
8. Tables of Nuclear Data [Электронный ресурс] // Japan Atomic Energy Agency, Nuclear Data Center: [сайт]. [1995-2016]. URL: <http://www.ndc.jaea.go.jp/> (дата обращения: 15.10.2015).
9. Chart of Nuclides [Электронный ресурс] // The National Nuclear Data Center (NNDC): [сайт]. [2012]. URL: <http://www.nndc.bnl.gov/chart/> (дата обращения: 4.10.2015).
10. Fusion Evaluated Nuclear Data Library [Электронный ресурс] // International Atomic Energy Agency - Nuclear Data Section: [сайт]. [2004]. URL: <https://www.nds.iaea.org/fendl21/> (дата обращения: 10.9.2015).
11. *Колобашкин В.М., Рубцов П.М., Ружанский П.А., Сидоренко В.Д.* Радиационные характеристики облученного ядерного топлива / Справочник. М.: Энергоатомиздат, 1983. 382 с.
12. *Андреанов А.А., Догов А.А., Коровин Ю.А., Купцов И.С.* Подход к определению оптимальной стратегии ядерной трансмутации // Ядерная физика и инжиниринг, Т. 5, № 2, 2014. С. 122.

Поступила в редакцию 10.03.2016 г.

Автор

Догов Артём Александрович, аспирант
E-mail: AADogov@gmail.com

UDC 539.163

INTERACTIVE INFORMATION SYSTEM FOR SIMULATION AND VISUALIZATION OF NUCLEAR TRANSFORMATIONS – NUCLEAR EVOLUTION SOFTWARE

Dogov A.A.

Obninsk Institute for Nuclear Power Engineering,
National Research Nuclear University «MEPhI»
1 Studgorodok, Obninsk, Kaluga reg., 249030 Russia

ABSTRACT

The present paper gives a brief review of technique of the isotopic fuel composition changes modeling with ordinary differential equations system describing nuclides transmutation. Suggested algorithms of modeling and calculation of the main parameters for nuclear transformations are based on a directed graph, which improves the speed and accuracy of calculations. The description is given of the designed software system for modeling of radioactive decay transformations and transformations caused by particles flow (neutrons, protons, etc.). The features and functionality of this system are defined.

System distinctive features include, inter alia, simplicity, developed user-friendly interface, high degree of automation of all stages of user work, simulated processes imaging and convenient tools for calculations management and results processing. The described system is aimed at wide range of users from students and post-graduates to university professors and researchers, and can be used to facilitate scientific research and educational process. The proposed system is a convenient assessment tool for the concentration of any isotope in a chain depending on integral flow and time with various original isotopes amounts.

Apart from author developments, current licensed software and visual reference components libraries from leading global producers were utilized for the system creation, which allowed to develop a user-friendly interface and keep abreast of leading software developments. Modelling results are displayed by interactive tables and characteristic curves.

The paper describes some examples of the use of the proposed instruments.

Key words: radioactive waste, transmutation, decay chain, graph theory, Bateman equations, information systems, interactive interface.

REFERENCES

1. Adamov E.O., Ganev I.H., Lopatkin A.V., Muratov V.G., Orlov V.V. Transmutatsionnyy toplivnyy tsikl v krupnomasshtabnoy yadernoy energetike Rossii. Moscow. State Unitary Enterprise NIKIET Publ., 1999. 156 p. (in Russian).
2. Bateman H. Solution of a System of Differential Equations Occurring in The Theory of Radio-Active Transformation., University of Cambridge, *Proc. Phil. Soc.* 1910, pp. 423-427.
3. Plyaskin V.I., Kosilov R.A., Manturov G.N. Interactive information system on the nuclear physics properties of nuclides and radioactive decay chains. *Voprosy atomnoj nauki i tekhniki*. ISSN: 2414-1038 2003, v. 2, no. 1, pp. 103-109 (in Russian).
4. Manual for reactor produced radioisotopes. IAEA TECDOC-1340, Vienna, 2002. 257 p.
5. Gerasimov A.S., Zaritskaya T.S., Rudik A.P. Handbook of the formation of nuclides in nuclear reactors. Moscow. Energoatomisdat Publ., 1989. 573 p. (in Russian).
6. Depth-first search. In: Introduction to Algorithms, Second Edition. Eds. Cormen Th.H., Leiserson Ch.E., Rivest R.L. and Stein C. The MIT Press. 2001, pp. 540–549.
7. Visual Interface Design. In: About Face 3 The Essentials of Interaction Design. Eds. Cooper

- A., Reimann R., Cronin D. Indianapolis. Wiley Publishing Inc. 2007, pp. 287-319.
8. Tables of Nuclear Data. Japan Atomic Energy Agency, Nuclear Data Center: [1995-2016]. Available at: <http://www.ndc.jaea.go.jp/> (accessed 15 Oct 2015).
9. Chart of Nuclides. The National Nuclear Data Center (NNDC). 2012. Available at: <http://www.nndc.bnl.gov/chart/> (accessed 04 Oct 2015).
10. Fusion Evaluated Nuclear Data Library. International Atomic Energy Agency – Nuclear Data Section: 2004. Available at: <https://www-nds.iaea.org/fendl21/> (accessed 10 Sep 2015).
11. Kolobashkin V.M., Rubtsov P.M., Ruzhansky P.A., Sidorenko V.D. The radiation characteristics of irradiated nuclear fuel: Directory. Moscow. Energoatomisdat Publ., 1983. 382 p. (in Russian).
12. Andrianov A.A., Dogov A.A., Korovin Yu.A., Kuptcov I.S. The approach to determining the optimal strategy for the nuclear transmutation. *Yadernaya fizika i inzhiniring*. 2014, v. 5, no. 2, p. 122 (in Russian).

Author

Dogov Artem Aleksandrovich, PhD Student
E-mail: AADogov@gmail.com