

МОДЕРНИЗАЦИЯ ПРОГРАММЫ РАСЧЕТА ЗАДАЧИ НУКЛИДНОЙ КИНЕТИКИ BPSD

Е.Ф. Селезнев, А.А. Белов, В.И. Белоусов, И.С. Чернова

*ФГБУН «Институт проблем безопасного развития атомной энергетики» РАН
115191, г. Москва, Большая Тульская ул., д. 52*



Описан алгоритм решения задачи нуклидной кинетики, реализованный в программе BPSD. Работа программы основана на использовании полной матрицы переходов, что снимает ограничения на число переходных процессов и позволяет учитывать обратные переходы. Результатом работы программы являются номинальные значения рассчитываемых концентраций нуклидов и их погрешности, оцененные с учетом погрешностей исходного состава материала, плотности потока нейтронов, постоянных распада, микросечений ядерных нейтронных реакций. Ранее разработанная версия кода BPS/V1.0 ориентирована на расчет топлива. Описаны проведенные в 2017 г. работы при расширении области применения программы для различных материалов, присущих реакторам на быстрых нейтронах с жидкометаллическим теплоносителем. В частности, были добавлены нетопливные материалы – теплоносители, конструкционные материалы, поглотители. Выбор добавляемых материалов ориентирован прежде всего на проекты типа БН-1200 и БРЕСТ-ОД-300. Улучшенная версия программы позволяет учесть наличие в чистых материалах заводских примесей. Несмотря на малое количество примесных нуклидов они могут оказать влияние на радиационные характеристики материала. В качестве примера важности учета примесей рассматривается накопление полония-210 из технологической примеси висмута в натриевом теплоносителе.

Ключевые слова: BPSD, задача нуклидной кинетики, цепочки ядерных превращений, ядерно-нейтронные реакции, радиоактивный распад, нуклид, реактор на быстрых нейтронах, расчетный код.

ВВЕДЕНИЕ

Решение задачи нуклидной кинетики предназначено для определения изменения элементного и изотопного составов материалов реакторной установки (РУ) в процессе ее работы при нормальных условиях эксплуатации.

Ранее был разработан расчетный код BPS/V1.0, основное назначение которого заключалось в расчете изотопных изменений топлива. Результатом работ по последующему развитию BPS является нейтронно-физический код для расчета изменений состава активной зоны реакторных установок на быстрых нейтронах и отдельных ее элементов с учетом выгорания топлива и поглотителя, воспроизводства топлива, активации конструкционных материалов и теплоносителя.

© *Е.Ф. Селезнев, А.А. Белов, В.И. Белоусов, И.С. Чернова, 2018*

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ НУКЛИДНОЙ КИНЕТИКИ

Система уравнений нуклидной кинетики является неоднородной СЛАУ относительно функций y_i [1 – 4]

$$\frac{dy_i}{dt} = \sum_{j=1}^n a_{ij} y_j + q_i \quad (1)$$

с начальным условием

$$y_i(0) = y_{i0} \quad (2)$$

и внешним источником q_i , где $i = 1, 2, \dots, n$.

Запись уравнений (1), (2) в матричной форме имеет вид

$$d\mathbf{y}/dt = \mathbf{A}\mathbf{y} + \mathbf{q}, \quad (3)$$

$$\mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0, \quad (4)$$

где элементы матрицы \mathbf{A} соответствуют постоянным коэффициентам a_{ij} из (1), столбцы \mathbf{y} и \mathbf{q} состоят из элементов $[y_i]$ и $[q_i]$ соответственно.

В системе BPSD итерационное решение определяется иначе. На первом этапе определяется решение однородных уравнений с неизвестным коэффициентом, а именно, представим уравнение (3) в виде

$$d\mathbf{y}/dt = \mathbf{D}\mathbf{y} + \mathbf{A}'\mathbf{y} + \mathbf{q},$$

где \mathbf{D} – диагональная часть матрицы \mathbf{A} , т.е. $\mathbf{D} = [a_{ii}]$, $\mathbf{A}' = \mathbf{A} - \mathbf{D}$ – недиагональная часть матрицы \mathbf{A} . Диагональный член \mathbf{D} отвечает за «уход» нуклида за счет всех реакций, недиагональные члены \mathbf{A}' – за «образование» нуклида из других нуклидов.

На первом итерационном шаге рассматривается решение системы

$$d\mathbf{y}/dt = \mathbf{D}\mathbf{y} + \mathbf{q},$$

которое легко решается аналитически на временном шаге τ для исходной (нулевой) итерации:

$$y^k_0(\tau) = y^k(0)\exp(-\lambda^k_p \tau) + q^k(1 - (1 - \exp(-\lambda^k_p \tau)) / \lambda^k_p \tau),$$

где первое слагаемое – остаток концентрации ядер нуклида после учета «распадов» из имеющихся на начальный момент ядер, второе слагаемое – «приход» нуклида от внешнего источника с учетом его распада по времени за шаг τ .

Одновременно получим на конец интервала количество «распавшегося» за шаг t этого же нуклида

$$dy^k_0 = y^k(0)(1 - \exp(-\lambda^k_p \tau)) + q^k \tau (1 - (1 - \exp(-\lambda^k_p \tau)) / (\tau \lambda^k_p)). \quad (5)$$

Это количество переходит в другие нуклиды с вероятностью, пропорциональной скоростям соответствующих процессов образования других нуклидов из данного. Тогда для концентрации нуклида k в итерационном процессе на первой итерации можно записать

$$\tilde{y}_1^k = y^k_0 + \sum_{m \neq k} dy^m_0 \cdot \lambda^{m \rightarrow k} / \lambda^m_p.$$

С учетом возможного ухода вновь пришедших ядер данного нуклида на первой итерации на конец временного шага τ получаем

$$y^k_1(\tau) = y^k_0 + \sum_{m \neq k} dy^m_0 (\lambda^{m \rightarrow k} / \lambda^m_p) [1 - \exp(-\lambda^k_p \tau)] / (\lambda^k_p \tau)$$

или

$$y^k_1(\tau) = y^k(0)\exp(-\lambda^k_p \tau) + q^k(1 - \exp(-\lambda^k_p \tau)) / \lambda^k_p + \sum_{m \neq k} dy^m_0 (\lambda^{m \rightarrow k} / \lambda^m_p) [1 - \exp(-\lambda^k_p \tau)] / (\lambda^k_p \tau)$$

с образованием новых нуклидов из распавшихся на данной итерации как

$$dy^k_1 = \sum_{m \neq k} dy^m_0 (\lambda^{m \rightarrow k} / \lambda^m_p) \{1 - [1 - \exp(-\lambda^k_p \tau)] / (\lambda^k_p \tau)\}.$$

В итоге для итерации n имеем

$$y^k_n(\tau) = y^k_{n-1}(\tau) + \sum_{m \neq k} dy^m_{n-1} (\lambda^{m \rightarrow k} / \lambda^m_p) [1 - \exp(-\lambda^k_p \tau)] / (\lambda^k_p \tau), \quad (6)$$

$$dy^k_n = \sum_{m \neq k} dy^m_{n-1} (\lambda^{m \rightarrow k} / \lambda^m_p) \{1 - [1 - \exp(-\lambda^k_p \tau)] / (\lambda^k_p \tau)\}. \quad (7)$$

Итерационный процесс заканчивается по выполнении неравенства

$$|y^k_n / y^k_{n-1} - 1| \leq \varepsilon, \quad \forall k,$$

где ε – максимальная допустимая величина отклонения концентраций нуклидов на двух соседних итерациях.

Заметим, что выражение в фигурных скобках (7) всегда меньше единицы, так как наблюдается стремление к нулю образования «новых» ядер искомого нуклида на конец временного шага. Это обстоятельство обеспечивает сходимость итерационного процесса.

Из записи решения в явном виде

$$\begin{aligned} y^k_n &= y^k_{n-1}(\tau) + \\ &+ \sum_{m \neq k} \frac{\lambda^{m \rightarrow k}}{\lambda^m_p} \frac{1 - \exp(-\lambda^k_p \tau)}{\lambda^k_p \tau} \left(1 - \frac{1 - \exp(-\lambda^k_p \tau)}{\lambda^k_p \tau}\right)^{n-1} \prod_{j=1}^{n-1} \left(\sum_{m_j \neq k} \frac{\lambda^{m_j \rightarrow k}}{\lambda^{m_j}_p}\right) dy^{m_1}_0 \approx \\ &\approx y^k_0(\tau) + \sum_{m \neq k} \left\{ dy^m_0 \frac{\lambda^{m \rightarrow k}}{\lambda^m_p} \frac{1 - \exp(-\lambda^k_p \tau)}{\lambda^k_p \tau} \left[1 + \left(1 - \frac{1 - \exp(-\lambda^k_p \tau)}{\lambda^k_p \tau}\right) \sum_{m \neq k} \frac{\lambda^{m \rightarrow k}}{\lambda^m_p} + \right. \right. \\ &\left. \left. + \dots + \left(1 - \frac{1 - \exp(-\lambda^k_p \tau)}{\lambda^k_p \tau}\right)^{n-1} \prod_{j=1}^{n-1} \left(\sum_{m_j \neq k} \frac{\lambda^{m_j \rightarrow k}}{\lambda^{m_j}_p}\right)\right] \right\} \end{aligned} \quad (8)$$

следует, что при $n \rightarrow \infty$ последнее слагаемое в ряду фактически является произведением двух сомножителей, каждое из которых служит возведенным в степень $(n - 1)$ числом, заведомо меньшим единицы, стремится к нулю, что и гарантирует сходимость. Согласно [5], ряд (8) может быть интерпретирован как ряд Неймана, сходимость которого доказана.

Обратим внимание на то, что во время итерационного процесса оперируем только с неотрицательными значениями равенств (6), (7). Таким образом, решение существует и оно положительно, потому что в сумме (6) всегда найдется хоть одно слагаемое, отличное от нуля (так как исходная концентрация хоть одного нуклида положительна, иначе сама задача смысла не имеет).

Пользователь программы BPSD может самостоятельно определить оптимальное соотношение между длительностью временного шага и скоростью получения решения.

ОЦЕНКА ПОГРЕШНОСТИ РЕШЕНИЯ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ НУКЛИДНОЙ КИНЕТИКИ ИТЕРАЦИОННЫМ МЕТОДОМ

Оценка погрешностей может быть сделана непосредственно в процессе итераций. Так на конец начальной итерации (5) имеем

$$\begin{aligned} \delta y^k_0(\tau) &= y^k_0(\tau) (\tau \delta \lambda^k_p + \lambda^k_p \delta \tau) + \delta y^k(0) \exp(-\lambda^k_p \tau) + \delta q^k (1 - \exp(-\lambda^k_p \tau)) / \lambda^k_p + \\ &+ q^k \left[(1 - \exp(-\lambda^k_p \tau)) \delta \lambda^k_p / (\lambda^k_p)^2 + (2 \exp(-\lambda^k_p \tau) - 1) (\tau \delta \lambda^k_p + \lambda^k_p \delta \tau) / \lambda^k_p \right] \end{aligned}$$

для первой итерации. При решении выражения

$$y^k_1(\tau) = y^k(0)\exp(-\lambda^k_p \tau) + q^k[1 - \exp(-\lambda^k_p \tau)] / \lambda^k_p + \sum_{m \neq k} dy^m_0(\lambda^{m \rightarrow k} / \lambda^m_p)[1 - \exp(-\lambda^k_p \tau)] / (\lambda^k_p \tau)$$

получим оценку погрешности, равную

$$\delta y^k_1(\tau) = \delta y^k_0(\tau) + \sum_{m \neq k} \delta(dy^m_0)(\lambda^{m \rightarrow k} / \lambda^m_p)[1 - \exp(-\lambda^k_p \tau)] / (\lambda^k_p \tau) + dy^m_0(\lambda^{m \rightarrow k} / \lambda^m_p)[1 - \exp(-\lambda^k_p \tau)] / (\lambda^k_p \tau)[(\delta \lambda^m_p / \lambda^m_p) + (\delta \lambda^{m \rightarrow k} / \lambda^{m \rightarrow k}_p)] + dy^m_0(\lambda^{m \rightarrow k} / \lambda^m_p)[1 - \exp(-\lambda^k_p \tau)] / (\lambda^k_p \tau)[(\delta \lambda^k_p / \lambda^k_p) + (\delta \tau / \tau)] + dy^m_0(\lambda^{m \rightarrow k} / \lambda^m_p)\exp(-\lambda^k_p \tau) / (\lambda^k_p \tau)(\delta \lambda^k_p \tau + \delta \tau \lambda^k_p),$$

где

$$\delta dy^k_0 = \delta y^k(0)(1 - \exp(-\lambda^k_p \tau)) + dy^k_0(0)\exp(-\lambda^k_p \tau)(\lambda^k_p \delta \tau + \tau \delta \lambda^k_p) + \delta q^k \tau(1 - (1 - \exp(-\lambda^k_p \tau)) / (\tau \lambda^k_p)) + q^k \delta \tau(1 - (1 - \exp(-\lambda^k_p \tau)) / (\tau \lambda^k_p)) + q^k \tau(1 - \exp(-\lambda^k_p \tau)) / (\tau \lambda^k_p)(\delta \tau / \tau + \delta \lambda^k_p / \lambda^k_p) + q^k \tau \exp(-\lambda^k_p \tau) / (\tau \lambda^k_p)(\lambda^k_p \delta \tau + \tau \delta \lambda^k_p)$$

и т.д.

ПОСТРОЕНИЕ ЦЕПОЧЕК ЯДЕРНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ

Нуклидная кинетика в реакторе обусловлена двумя основными процессами – радиоактивным распадом и ядерными реакциями.

В программе BPSD учитываются семь основных типов распадов: распад с испусканием электрона (β^- -распад), распад с испусканием позитрона или захватом ядра электрона с оболочки (β^+ -распад), изомерный переход с испусканием γ -квантов, распад с испусканием ядра гелия (α -распад), распад с испусканием нейтрона (n -распад, свойственный легким ядрам), распад с испусканием протона (p -распад), спонтанное деление (свойственно тяжелым ядрам). Также возможны комбинации из нескольких типов радиоактивного распада, наиболее распространенной из которых является β^-n .

Из ядерных реакций в BPSD учитываются десять реакций, инициированных нейтронами: деление ядра, захват нейтрона, реакции типа $(n, 2n)$, $(n, 3n)$, (n, p) , (n, pr) , (n, α) , $(n, n\alpha)$, (n, D) и (n, T) . Учет последних двух реакций из списка обусловлен тем, что применение программы ориентировано на нужды расчетов быстрых реакторов, где роль пороговых процессов существенна.

ИСХОДНЫЕ ДАННЫЕ РАСЧЕТА

Исходными данными на каждом временном интервале Δt в расчетной ячейке объемом V являются поток нейтронов $\phi(E, \mathbf{r})$ и микросечения ядерно-нейтронных реакций, на основании которых определяются скорости процессов ядерных превращений при радиоактивном распаде и ядерно-нейтронных реакциях. Эти параметры нуклидной кинетики предполагаются неизменными и будут переопределены только на следующем интервале Δt .

Размер временного интервала Δt определяется пользователем из физических соображений, в основном, для минимизации погрешностей определения концентраций нуклидов.

РАСЧЕТ ИЗМЕНЕНИЯ НУКЛИДНОГО СОСТАВА ТОПЛИВНЫХ КОМПОЗИЦИЙ

Расчет задачи нуклидной кинетики для топливных композиций необходим для решения нескольких классов задач, таких как выгорание топлива, накопление продук-

тов деления, накопление нуклидов (например, водорода, гелия, ^{14}C и т.д.).

В BPSD при расчете независимых и кумулятивных выходов продуктов деления учитываются 15 делящихся нуклидов: ^{227}Th , ^{229}Th , ^{230}Th , ^{232}Th , ^{232}U , ^{233}U , ^{234}U , ^{235}U , ^{236}U , ^{237}U , ^{238}U , ^{239}Pu , ^{240}Pu , ^{241}Pu и ^{242}Pu . Эти данные берутся из РОСФОНД [6] и основаны на оценке библиотек оцененных данных ENDF/B-6 (США) и JEF3.1 (Европа).

Выходы продуктов деления для каждого из нуклидов могут различаться по энергии делящего нейтрона. На рисунке 1 показаны кривые выхода продуктов деления ^{235}U для разных энергий делящего нейтрона. В библиотеках данные по выходам продуктов деления приводятся от одной точки по энергии до трех, для промежуточного значения энергии предусматривается линейная интерполяция данных.

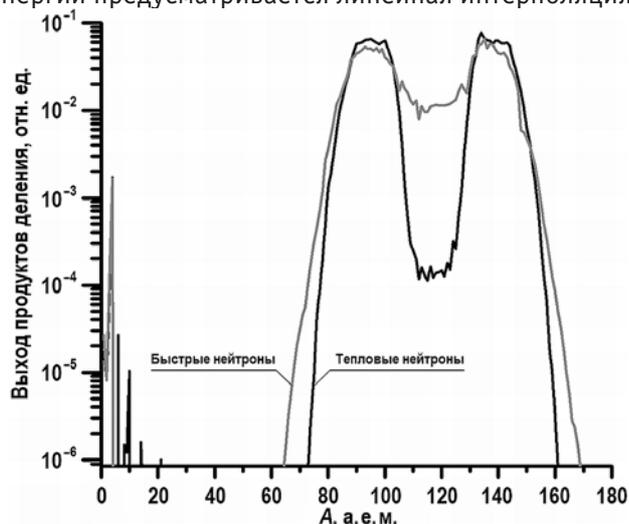


Рис. 1. Кривые выхода продуктов деления ^{235}U для разных энергий делящего нейтрона

В системе BPSD интерполяция этих данных осуществляется в два этапа. На первом из них по линейной интерполяции определяются доли представленных наборов данных для конкретной энергии делящего нейтрона $d(n, E)$, $n = 1, \dots, N$, где N — число наборов данных. При этом

$$\sum_n d(n, E) = 1.$$

Набор данных с номером n по всему числу делений конкретного нуклида k на конкретном потоке нейтронов определяется следующим образом:

$$\sum_n D(n, k) = \sum_n \frac{\int d(n, E') \sigma_f(k, E') f(E') dE'}{\int \sigma_f(k, E') f(E') dE'} = 1.$$

В зависимости от цели расчета программа BPSD позволяет решать задачу нуклидной кинетики для нескольких вариантов цепочек ядерных превращений. Самая полная система уравнений включает в себя 1561 нуклид. В результате проведения выборки по распадным данным продуктов деления были получены версии, содержащие 1081, 777, 550, 428 нуклидов с периодом полураспада не менее секунды, минуты, часа, суток соответственно.

РАСЧЕТ ИЗМЕНЕНИЯ НУКЛИДНОГО СОСТАВА КОНСТРУКЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

Задача, основанная на решении уравнения нуклидной кинетики для конструкционных материалов, заключается в определении изменения изотопного состава, накоплении примесных элементов, а также накоплении газообразных продуктов нейтроно-ядерных реакций.

Таблица 1

Список нуклидов в цепочках ядерных превращений конструкционных материалов в BPSD (A – массовые числа нуклидов элемента в цепочке ядерных превращений)

Элемент	A	Элемент	A	Элемент	A
H	1, 2, 3	Fe	53, 54 , 55, 56 , 57 , 58 , 59, 60, 61	Te	122, 124, 125m, 125
He	3, 4	Co	57, 58, 59 , 60m, 60, 61, 62, 63, 64	I	127
Li	7, 8	Ni	57, 58 , 59, 60 , 61 , 62 , 63, 64 , 65	Xe	126, 127, 128, 129, 130, 131, 132, 133, 134, 135
Be	9, 10, 11	Cu	62, 63 , 64, 65 , 66	Cs	128, 129, 130, 131, 132, 133, 134, 135, 136, 137, 138
B	10 , 11 , 12, 13	Zn	64, 66	Ba	128, 129, 130 , 131, 132 , 133, 134 , 135 , 136m, 136 , 137m, 137 , 138 , 139
C	12 , 13 , 14 , 15	Ga	71, 72	La	134, 135, 136, 137, 138 , 139 , 140, 141, 142
N	13, 14 , 15 , 16	Ge	70, 71, 72, 73m, 73, 74, 75, 76, 77, 78, 79	Ce	134, 135, 136 , 137, 138 , 139, 140 , 141, 142 , 143, 144, 145, 146, 146, 147
O	16	As	72, 73, 74, 75 , 76, 77, 78, 79, 80, 81, 82	Pr	140, 141, 142, 143, 144m, 144, 145, 146, 147, 148, 149, 150
Ne	20, 21, 22, 23	Se	73, 74 , 75, 76 , 77m, 77 , 78 , 79m, 79, 80 , 81m, 81, 82 , 83	Nd	140, 141, 142 , 143 , 144 , 145 , 146 , 147, 148 , 149, 150, 151
Na	23, 24, 25, 26	Br	79, 81, 83	Pm	147, 149, 151
Mg	23, 24 , 25 , 26 , 27	Kr	83m, 83, 86	Sm	147, 149, 150, 151
Al	26, 27 , 28, 29, 30	Rb	85, 86	Eu	151
Si	27, 28 , 29 , 30 , 31, 32, 33	Sr	86, 97, 88, 89, 90, 92	Yb	170, 172, 173, 174, 175, 176, 177
P	30, 31 , 32, 33, 34, 35, 36	Y	88, 89m, 89 , 90, 91, 92, 93, 94, 95	Lu	172m, 172, 173, 175, 176, 177, 178, 179, 180
S	31, 32 , 33 , 34 , 35, 36 , 37	Zr	88, 89, 90m, 90 , 91 , 92 , 93, 94 , 95, 96 , 97	Hf	172, 173, 174 , 175, 176 , 177 , 178 , 179 , 180 , 181, 182
Cl	35, 37	Nb	90, 91m, 91, 92, 93m, 93 , 94, 95m, 95, 96, 97m, 97, 98, 99, 100	Ta	178, 179, 181, 182, 183, 185
Ar	36, 37, 38, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 45	Mo	91, 92 , 93, 94 , 95 , 96 , 97 , 98 , 99, 100 , 101	W	178, 179, 180 , 181, 182 , 183m, 183 , 184 , 185, 186 , 187
K	38, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48	Tc	99m, 99, 101	Re	185, 187
Ca	39, 40 , 41, 42 , 43 , 44 , 45, 46 , 47, 48 , 49	Ru	99, 100, 101	Os	187
Sc	44, 45m, 45 , 46, 47, 48, 49, 50	Ag	109m, 109	Hg	200, 201, 202, 203, 204, 205
Ti	45, 46 , 47 , 48 , 49 , 50 , 51	Cd	108, 109, 110, 111m, 111, 112, 113, 114, 115, 116, 117, 118, 119, 120, 121	Tl	202, 203, 204, 205, 206, 207, 208
V	49, 50 , 51 , 52, 53, 54	In	110m, 110, 111, 112, 113m, 113, 114, 115m, 115, 116, 117m, 117, 118, 119m, 119, 120, 121m, 121, 122, 123, 124	Pb	202, 203, 204 , 205, 206 , 207 , 208 , 209
Cr	49, 50 , 51, 52 , 53 , 54 , 55	Sn	110, 111, 112 , 113, 114 , 115 , 116 , 117m, 117 , 118 , 119m, 119 , 120 , 121m, 121, 122 , 123m, 123, 124 , 125	Bi	207, 208, 209, 210
Mn	53, 54, 55 , 56, 57, 58	Sb	119, 120, 121 , 122, 123 , 124, 125	Po	210

Исходный состав конструкционных материалов был выбран на основе [7, 8]. Химическими элементами, присутствующими в стали различных марок, являются углерод, алюминий, кремний, фосфор, сера, титан, ванадий, хром, марганец, железо, никель, ниобий, молибден, вольфрам, бор, азот, магний, кальций, скандий, кобальт, медь, мышьяк, селен, иттрий, цирконий, олово, сурьма, барий, лантан, церий, неодим, гафний, свинец и висмут. С учетом содержания нуклидов в естественной смеси и описанных выше каналов превращений число нуклидов в цепочках составляет 500. Полный список нуклидов приведен в табл. 1, где нуклиды исходного материала выделены жирным шрифтом.

РАСЧЕТ ИЗМЕНЕНИЯ НУКЛИДНОГО СОСТАВА ПОГЛОТИТЕЛЯ

Самым распространенным поглотителем в реакторах на быстрых нейтронах является карбид бора [9]. Выбор поглощающих материалов для программы BPSD основан на реализованных и планируемых проектах реакторов на быстрых нейтронах. В связи с этим помимо карбида бора в программе также дополнительно реализована возможность расчета поглотителя из гафната диспрозия с добавкой из оксида ниобия [10 – 12], планируемого в качестве основного материала для стержней автоматического регулирования в РУ БРЕСТ.

Сложность расчета выгорания поглотителя стержней СУЗ связана не с решением системы уравнений нуклидной кинетики, а с учетом движения стержня в реакторе в процессе его работы, что требует дополнительных усилий для переопределения входных данных BPSD, перечисленных в статье выше.

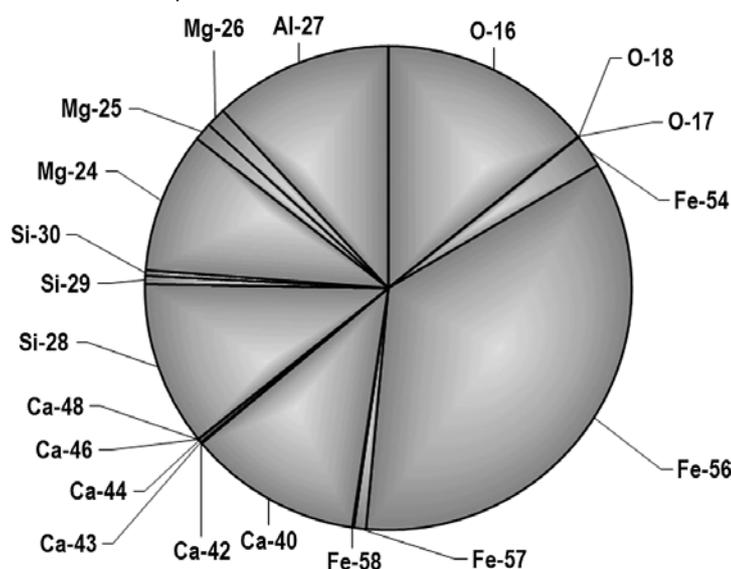


Рис. 2. Соотношение примесных элементов в карбиде бора

В качестве исходного состава карбида бора с учетом заводских примесей учитываются следующие химические элементы: бор, углерод, кислород, железо, кремний, кальций, магний и алюминий [13]. Соотношение между примесными элементами изображено на рис. 2. При определении исходного нуклидного состава поглотителя до его облучения в реакторе предполагается, что соотношение между нуклидами в пределах химического элемента соответствует его содержанию в естественной смеси. Таким образом, построение цепочек ядерных превращений осуществляется для исходного материала из 24-х нуклидов. Полное число нуклидов составило 115.

В качестве исходного состава гафната диспрозия с добавкой из оксида ниобия учитываются следующие химические элементы: гафний, диспрозий, ниобий, кисло-

род. Для данного типа поглотителей отсутствует учет заводских примесей. Построение цепочек ядерных превращений осуществляется для исходного материала из 17-ти нуклидов (из них шесть изотопов гафния и семь – диспрозия). Полное число нуклидов в цепочках превращений составило 99.

РАСЧЕТ ИЗМЕНЕНИЯ НУКЛИДНОГО СОСТАВА ТЕПЛОНОСИТЕЛЯ

Анализ действующих и разрабатываемых проектов реакторов на быстрых нейтронах ограничил выбор материалов для теплоносителя. Возможные жидкометаллические теплоносители для РУ на быстрых нейтронах – натрий, свинец.

При построении цепочек превращений учитывались только технологические примеси, присутствующие в исходном металле с завода. Изменение элементного состава теплоносителя, связанное с появлением примесей в теплоносителе в процессе работы реактора вследствие химической коррозии, технологических операций, загрязнения продуктами деления, а также очистки теплоносителя в фильтрах-ловушках, при создании программы не рассматривается.

В качестве исходного состава чистого металлического натрия учитываются следующие химические элементы: натрий, кальций, железо, кислород, сера, калий, хлор, свинец и кремний [14]. При определении исходного нуклидного состава теплоносителя до его облучения в реакторе предполагается, что соотношение между нуклидами в пределах химического элемента соответствует его содержанию в естественной смеси. Соотношение между примесными нуклидами в натриевом теплоносителе изображено на рис. 3.

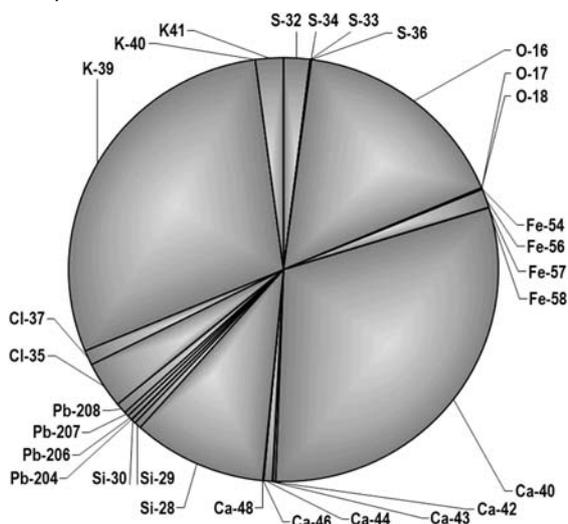


Рис. 3. Соотношение примесных элементов в натриевом теплоносителе

С точки зрения радиационной безопасности в решении задачи нуклидной кинетики для натриевого теплоносителя наибольший интерес представляют изотопы натрия и накопление ^{210}Po как источника α -излучения.

Единственным стабильным нуклидом натрия является ^{23}Na . В результате воздействия нейтронного поля образуются радиоактивные изотопы натрия с массой от 21 до 26. Каналы их образования представлены на рис. 4. Следует отметить, что период полураспада изотопов ^{21}Na , ^{25}Na и ^{26}Na не превышает минуты, а результатом их распада являются стабильные изотопы Ne и Mg. ^{27}Al образуется в результате радиоактивного распада и нейтронных реакций изотопов кремния, присутствующих в материале в качестве примеси.

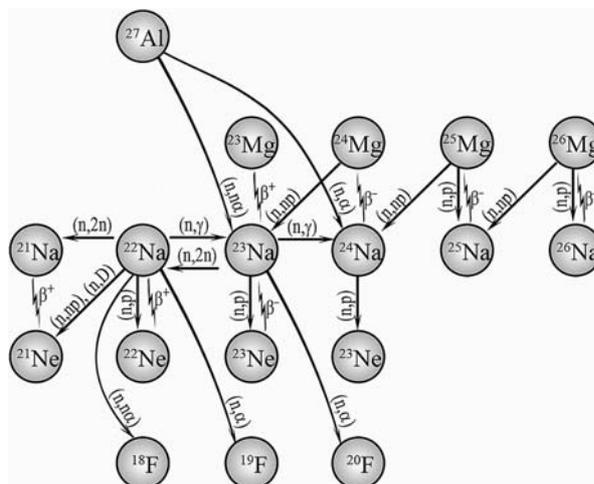


Рис. 4. Каналы образования и распада изотопов натрия

Наличие в теплоносителе висмута приводит к образованию источника α -излучения ^{210}Po . Каналы его образования будут описаны при рассмотрении свинцового теплоносителя.

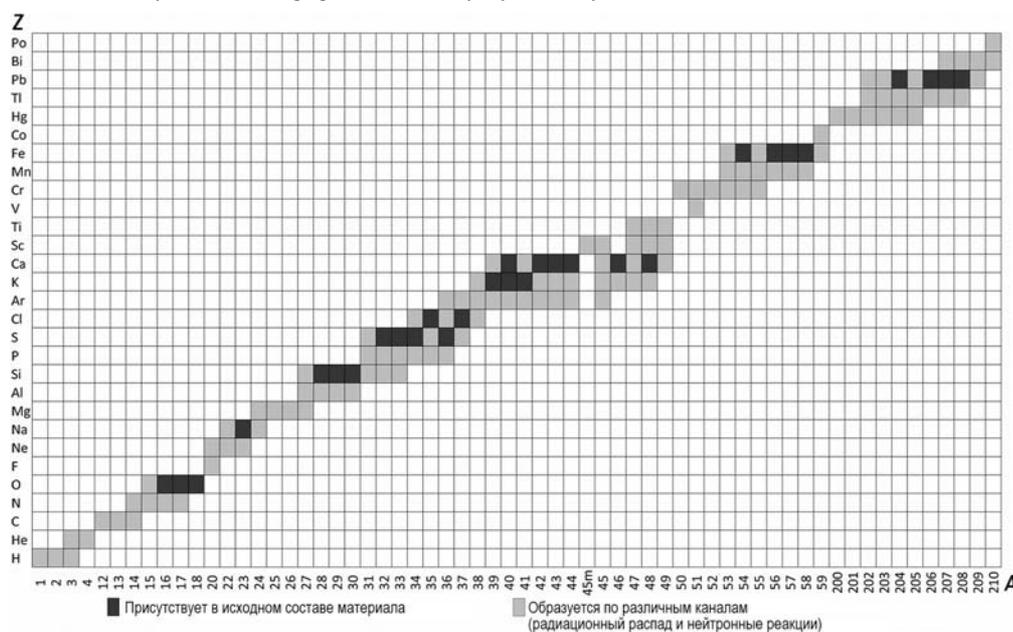


Рис. 5. Диаграмма нуклидов, учитываемых при решении задачи нуклидной кинетики жидкометаллического натриевого теплоносителя с учетом заводских примесей

Построение цепочек превращений для натриевого теплоносителя с учетом заводских примесей по данным библиотеки ENDFB-VII.1 способно включить в себя до 869-ти нуклидов. Реализованные в BPSD цепочки превращений в настоящее время используют лишь 209 нуклидов, представленных на рис. 5. Не исключено, что по мере накопления опыта их число может быть сокращено.

В качестве исходного состава чистого металлического свинца марки С00 [15] учитываются следующие химические элементы: серебро, медь, цинк, висмут, сурьма, железо, таллий, ртуть, кадмий и никель. Соотношение между нуклидами примесных элементов изображено на рис. 6. С учетом содержания нуклидов в естественной смеси исходный материал для расчета задачи нуклидной кинетики содержит 42 нуклида.

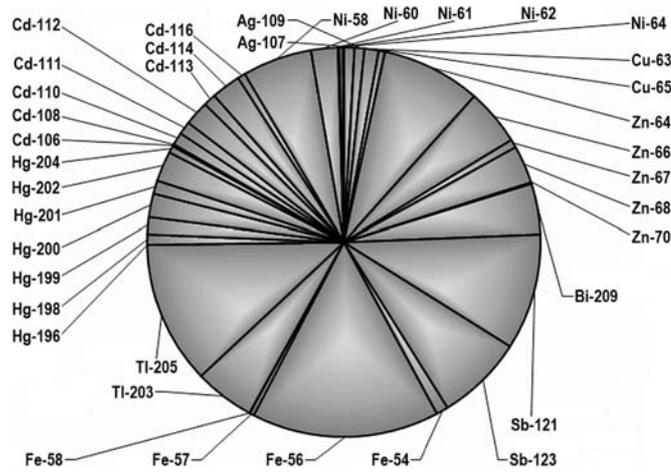


Рис. 6. Соотношение нуклидов примесных элементов в свинцовом теплоносителе

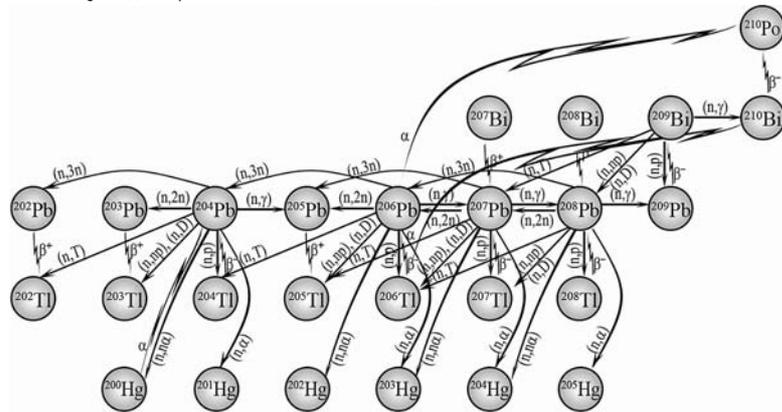


Рис. 7. Цепочки ядерных превращений свинца и каналы образования ^{210}Po в BPSD

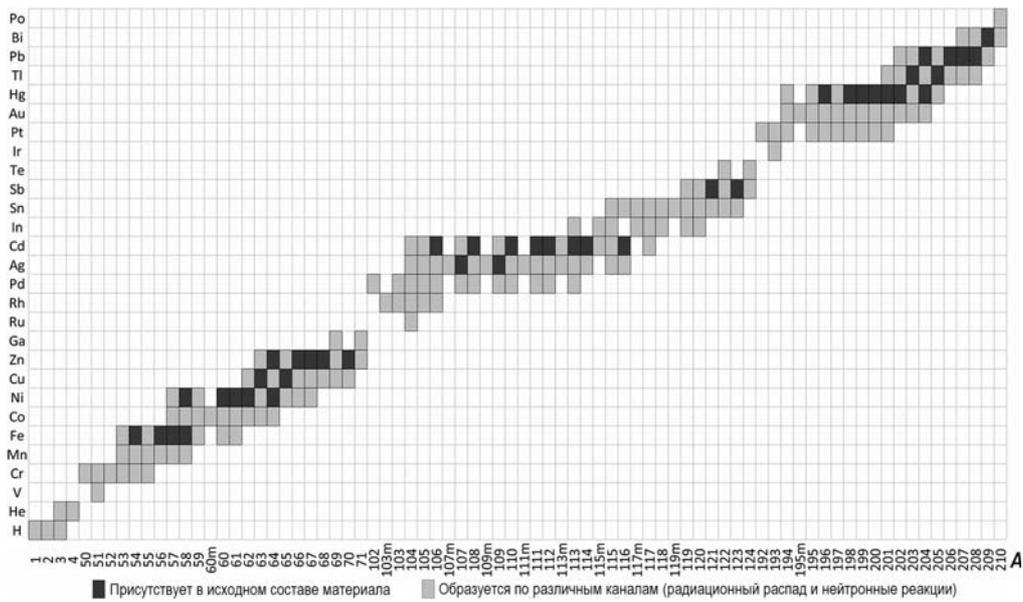


Рис. 8. Диаграмма нуклидов, учитываемых при решении задачи нуклидной кинетики жидкометаллического свинцового теплоносителя с учетом заводских примесей

Наиболее значимое внимание уделяется поведению нуклидов свинца под воздействием нейтронного поля, а также примеси висмута. Основные пути радиационных распадов и ядерно-нейтронных реакция для этих элементов приведены на рис. 7.

Помимо этих цепочек необходимо исследовать вопрос наличия примесей, вносящих большой вклад в активность теплоносителя.

Цепочки ядерных превращений для свинцового теплоносителя с учетом заводских примесей, реализованные в BPSD, в настоящее время используют 201 нуклид (рис. 8).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В рамках проведенных работ был расширен функционал кода BPS/V1.0 для не-топливных композиций – поглотителя, теплоносителя и конструкционных материалов. Последняя версия кода получила название BPSD. Алгоритм, заложенный в программу BPSD, зарекомендовал себя в рамках расчетов задач по выгоранию топлива. К его преимуществам следует отнести уверенную сходимость решения, высокую точность результатов, быструю скорость счета и расчет погрешности результатов на основании неточности входных данных.

В ближайшей перспективе предстоят работы по верификации расчетного кода BPSD. Не исключено, что по мере накопления опыта использования программы BPSD будут проведены дополнительные работы по модификации цепочек ядерных превращений.

Литература

1. Селезнев Е.Ф., Белов А.А. Решение задачи нуклидной кинетики с полной матрицей переходов нуклидов. // Известия Российской академии наук. Энергетика. – 2013. – № 3. – С. 27-40.
2. Селезнев Е. Ф. Кинетика реакторов на быстрых нейтронах / Под ред. акад. РАН А.А. Саркисова. – М.: Наука, 2013. – С. 178-198.
3. Seleznev, E.F., Belov, A.A., Manturov, G.N., Tsybulya, A.M. Электронный ресурс: Uncertainty Analysis for Fuel Flux Calculations of Fast Reactors with External Fuel Cycle. / Proc. of the Int. Conf. on Physics of Reactors (PHYSOR 2014); September 28-October 3, 2014, Kyoto, Japan. Also available at JAEA dx.doi.org/10.11484/jaea-conf-2014-003. Available as CD-ROM Data, Paper ID: a111101727.pdf.
4. Селезнев Е.Ф., Асатрян Д.С., Белов А.А. и др. Нейтронно-физические коды. / Международная научно-техническая конференция «Инновационные проекты и технологии ядерной энергетики», МНТК НИКИЭТ-2012: сборник докладов. – М.: НИКИЭТ, 2012. – С. 396-407.
5. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. – М.: Наука, 1977. – 832 с.
6. Забродская С.В., Игнатюк А.В., Коцеев В.Н., Манохин В.Н., Николаев М.Н., Проняев В.Г. РОСФОНД – российская национальная библиотека оцененных нейтронных данных. // ВАНТ. Серия: Ядерные константы. – 2007. – Вып. 1-2. – С. 3-21.
7. Дуб А.В., Лебедев А.Г., Баликов А.Г. и др. Высокоэнтропийные сплавы – перспективные материалы для ядерной энергетики / Международная научно-техническая конференция «Инновационные проекты и технологии ядерной энергетики», МНТК НИКИЭТ-2012: сборник докладов. – М.: НИКИЭТ, 2012. – С. 198-210.
8. ГОСТ 5632-2014. Легированные нержавеющие стали и сплавы коррозионно-стойкие, жаростойкие и жаропрочные. Марки. – М.: Стандартинформ, 2015. – 49 с.
9. Рисованый В.Д., Захаров А.В., Клочков Е.П., Гусева Т.М. Бор в ядерной технике. – Дмитровград: НИИАР, 2011. – 223 с.
10. Рисованый В.Д., Клочков Е.П., Пономаренко В.Б. Гафний в ядерной технике. – Дмитровград: НИИАР, 1993.
11. Рисованый В.Д., Захаров А.В., Пономаренко В.Б. и др. Диспрозий в ядерной технике. – Ульяновск: УлГУ, 2012. – 426 с.
12. Лемехов В.В. Смирнов В.С., Уманский А.А. Активная зона реактора БРЕСТ: современное состояние и перспективы / Международная научно-техническая конференция «Иннова-

ционные проекты и технологии ядерной энергетики», МНТК НИКИЭТ-2012: сборник докладов. – М.: НИКИЭТ, 2012. – С. 35-41.

13. Официальный сайт Национального центра высоких технологий Грузии. Электронный ресурс: www.geoisotopes.com/ru (дата доступа 04.04.2018).

14. Архипов В.М. Техника работы с натрием на АЭС. – М.: Энергоатомиздат, 1986. – 136 с.

15. Цветные металлы. Олово. Свинец. Технические условия. – М.: ИПК Издательство стандартов, 2000. – С. 24-26.

Поступила в редакцию 11.04.2018 г.

Авторы

Селезнев Евгений Федорович, главный научный сотрудник, доктор техн. наук,

E-mail: seleznev@ibrae.ac.ru

Белов Александр Анатольевич, научный сотрудник

E-mail: belov@ibrae.ac.ru

Белоусов Виктор Иванович, главный специалист, канд. физ.-мат. наук

E-mail: mirror08@yandex.ru

Чернова Ирина Сергеевна, младший научный сотрудник

E-mail: panova@ibrae.ac.ru

UDC 621.039.526

BPSD CODE UPGRADE FOR SOLVING THE NUCLEAR KINETICS PROBLEM

Seleznev E.F., Belov A.A., Belousov V.I., Chernova I.S.

The Nuclear Safety Institute of the Russian Academy of Sciences (IBRAE RAN)
52 Bol'shaya Tul'skaya str., Moscow, 115191 Russia

ABSTRACT

The paper describes an algorithm for solving the nuclide kinetics problem implemented in the BPSD program. The work of the program is based on the use of a full transition matrix, which removes restrictions on the number of transients and allows reverse transitions to be taken into account. As a result of its work, the program generates the nominal values of calculated nuclide concentrations and their errors estimated with allowance for the errors of the initial material composition, neutron flux density, decay constant, and nuclear neutron reaction microsections. The previous BPS/V1.0 code version was developed for fuel calculation. A description is given of the work carried out in 2017 to expand the scope of the program for various materials inherent to fast neutron reactors with a liquid-metal coolant. In particular, non-fuel materials were added, such as coolants, structural materials, and absorbers. The article provides basic information about the considered channels of nuclear transmutations for materials under the neutron flux influence and thereafter. The choice of added materials is focused primarily on the projects of fast neutron reactors such as BN-1200 and BREST-OD-300. The improved program version makes it possible to take into account factory impurities that are present in pure materials. Despite the small amount of impurity nuclides, they can affect the radiative properties of the material. The importance of taking into account impurities is exemplified by the accumulation of polonium-210 from the process-related bismuth impurity in the sodium coolant. The developed program can be used for research works, design and safety justification of nuclear power plants with fast neutron reactors with a liquid-metal coolant, as well as for training future specialists at universities.

Key words: BPSD, nuclide kinetics problem, nuclear transmutation chains, nuclear neutron

reactions, radioactive decay, nuclide, fast neutron reactor, calculation code.

REFERENCES

1. Seleznev E.F., Belov A.A. Solution of nuclide kinetics problem with full matrix of nuclides. *Izvestiya Rossijskoy Akademii Nauk. Energetika*. 2013, iss. 3, pp. 27-40 (in Russian).
2. Seleznev E.F. *Fast Breeder Reactor Kinetics*. Moscow. Nauka Publ., 2013, pp. 178-198 (in Russian).
3. Seleznev E.F., Belov A.A., Manturov G.N., Tsybulya A.M. *Uncertainty Analysis for Fuel Flux Calculations of Fast Reactors with External Fuel Cycle*. Proceedings of the International Conference on Physics of Reactors (PHYSOR 2014). Available at JAEA website dx.doi.org/10.11484/jaea-conf-2014-003 and from CD-ROM Data, Paper ID: a111101727.pdf.
4. Seleznev E.F., Asatrjan D.S., Belov A.A., Belousov V.I., Bereznev V.P., Vasekin V.N., Nuzhnyj A.S., Panova I.S. *Neutronics codes*. Proceedings of the International Scientific and Technical Conference «Safety, Efficiency and Economics of Nuclear Power Industry» MNTK-2012. Moscow. NIKIET Publ., 2012, pp. 396-407 (in Russian).
5. Korn G.A., Korn T.M. *Mathematical Handbook*. Moscow. Nauka Publ., 1977, 832 p. (in Russian).
6. Zabrodsckaja S.V., Ignatjuk A.V., Koshheev V.N., Manohin V.N., Nikolaev M.N., Pronjaev V.G. ROSFOND – Russian National Library Of Evaluated Neutron Data. *VANT. Ser.: Yadernye Konstanty*. 2007, iss. 1-2, pp. 3-21 (in Russian).
7. Dub A.V., Lebedev A.G., Balikoev A.G., Korneev A.E., Morozova T.V. *High entropy alloys-promising materials for nuclear power*. Proceedings of the International Scientific and Technical Conference «Safety, Efficiency and Economics of Nuclear Power Industry» MNTK-2012. Moscow. NIKIET Publ., 2012, pp. 198-210 (in Russian).
8. GOST 5632-2014. Alloys of stainless steels and corrosion resistant, heat resistant and heat resistant alloys. Grades. Moscow. Standartinform Publ., 2015. 49 p. (in Russian).
9. Risovanyj V.D., Zaharov A.V., Klochkov E.P., Guseva T.M. *Boron in nuclear engineering*. Dimitrov-grad. SSC RIAR Publ., 2011. 223 p. (in Russian).
10. Risovanyj V.D., Klochkov E.P., Ponomarenko V.B. *Hafnium in nuclear engineering*. Dimitrovgrad. SSC RIAR Publ., 1993 (in Russian).
11. Risovanyj V.D., Zaharov A.V., Ponomarenko V.B., Klochkov E.P., Muraleva E.M. *Disprosium in nuclear engineering*. Ulyanovsk. UlGU Publ., 2013. 436 p. ISBN 978-5-88866-470-4 (in Russian).
12. Lemehov V.V., Smirnov V.S., Umanskij A.A. *Core of reactor BREST: current status and prospects*. Proceedings of the International Scientific and Technical Conference «Safety, Efficiency and Economics of Nuclear Power Industry» MNTK-2012. Moscow. NIKIET Publ., 2012. pp. 35-41 (in Russian).
13. Official website of National High Technology Centre Of Georgia. Available at: www.geoisotopes.com/en (accessed Apr 04, 2018).
14. Arhipov V.M. *Sodium technologies at nuclear power plants*. Moscow. Energoatomizdat Publ., 1986. 136 p. (in Russian).
15. *Nonferrous metal. Tin. Lead. Technical conditions*. Moscow. IPK Publishing House of Standards, 2000, pp. 24-26 (in Russian).

Authors

Seleznev Evgenij Fyodorovich, Chief Researcher, Dr. Sci. (Engineering)

E-mail: seleznev@ibrae.ac.ru

Belov Aleksandr Anatol'evich, Researcher

E-mail: belov@ibrae.ac.ru

Belousov Viktor Ivanovich, Chief Specialist, Cand. Sci. (Phys.-Math.)

E-mail: mirror08@yandex.ru

Chernova Irina Sergeevna, Junior Researcher

E-mail: panova@ibrae.ac.ru