

ПРИМЕНЕНИЕ ISTAR ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ИЗМЕНЕНИЯ НУКЛИДНОГО СОСТАВА ЖИДКОСОЛЕВОЙ ТОПЛИВНОЙ КОМПОЗИЦИИ

Бландинский В.Ю., Дудников А.А., Кузенкова Д.С., Субботин С.А.

*НИЦ «Курчатовский институт»,
123182, г. Москва, пл. Академика Курчатова, 1*



Статья посвящена расчетным возможностям программы ISTAR, которая позволяет перейти от рассмотрения решения нестационарных задач изменения изотопного состава материалов в поле нейтронов и в процессе выдержки, связанных с расчетом конкретных моделей установок, к анализу системных задач, связанных с оценкой равновесных количеств нуклидов, которые могут быть накоплены как в отдельной установке, так и в системе ядерной энергетики. Программа ISTAR предназначена для расчетных исследований сложных структур систем ядерной энергетики, включая различные процессы трансформации нуклидов: ядерные реакторы, хранилища отработавшего топлива, предприятия по переработке и фабрикация топлива и т. п., и потоки нуклидов между ними. Расчеты могут проводиться как для стационарных режимов (состояние равновесия), так и для нестационарных – режимов выгорания и выдержки. В работе приводится описание возможностей программы ISTAR, их демонстрация на примере расчета изменения нуклидного состава в жидкосолевом бланкете термоядерного источника нейтронов. Представлены результаты кросс-верификации в сравнении с расчетами по кодам Serpent и JAR-FR. Приведены результаты моделирования изменения изотопного состава в тестовой задаче с демонстрацией достижения равновесных концентраций.

Ключевые слова: ISTAR, термоядерный источник нейтронов, ТИН, нейтронно-физические характеристики.

Для цитирования: Бландинский В.Ю., Дудников А.А., Кузенкова Д.С., Субботин С.А. Применение ISTAR для решения задач изменения нуклидного состава жидкосолеговой топливной композиции. // Известия вузов. Ядерная энергетика. – 2024. – № 4. – С. 128–143. DOI: <https://doi.org/10.26583/npe.2024.4.11>

ВВЕДЕНИЕ

Одной из важнейших задач физического расчета ядерных реакторов является моделирование изменения изотопного состава топлива с выгоранием. При создании реактора и его эксплуатации расчет изменения нуклидного состава топлива является важной частью обоснования безопасности реактора, в частности, при оценке коэффициентов и эффектов реактивности по кампании реактора. При создании многокомпонентной системы ядерной энергетики расчет изменения нуклидного состава топлива является источником исходных данных для моделирования сценариев развития системы ядерной энергетики с учетом потоков нуклидов между установками и предприятиями ядерного топливного цикла, а также для технико-экономических оценок с учетом стоимостей переделов и обращения с отработавшим ядерным топливом.

Существует большое количество кодов, как отечественных (JAR-FR, MCU, CARE, SKIF), так и зарубежных (MCNP, Serpent, ORIGEN), моделирующих изменение изотопного состава топлива в поле нейтронов и во время обращения с ним на различных этапах и переделах ядерного топливного цикла.

В то же время необходимость разработки, развития и использования оригинальной программы ISTAR для моделирования изотопной кинетики обусловлена возможностью выбора и использования ядерных данных (сечений и характеристик распадов) из различных библиотек на базе файлов оцененных ядерных данных по выбору пользователя, что расширяет возможности программы как исследовательского инструмента¹.

Еще одной важной отличительной особенностью программы ISTAR является возможность моделирования равновесного изотопного состава топлива в ядерном реакторе или в системе ядерной энергетики, когда при заданных скоростях подпитки, вывода нуклидов и характеристиках трансформации нуклидов в поле нейтронов (плотность потока нейтронов, сечения) моделируется нуклидный состав, который может быть достигнут в системе по прошествии длительного времени. В математической модели, описывающей такие состояния, считается, что с некоторого момента времени концентрации нуклидов перестают меняться и производные концентраций нуклидов по времени обращаются в ноль. Система уравнений выгорания сводится к системе алгебраических уравнений относительно концентраций нуклидов. Такая модель может быть полезна для оценки максимальных количеств нуклидов, которые могут быть достигнуты в ядерном реакторе (например, в жидкосолевом или в любом другом) и в системе ядерной энергетики в условиях необходимости реализации принципов устойчивого развития в плане необходимости демонстрации возможностей эффективного использования всего добываемого урана и тория.

Следует отметить, что возможность непосредственного расчета количеств нуклидов в системах с установившимся равновесием в процессах нуклидных превращений нигде более не реализована, кроме как в программе ISTAR. Существует возможность прямого расчета выгорания с подпиткой и выводом заданных нуклидов в ряде программ, например, в JAR-FR и Serpent, однако использование прямого расчета выгорания для оценки равновесных количеств нуклидов ограничено различающимися на порядки временами выхода различных нуклидов в состояние равновесия. Указанное обстоятельство позволяет

¹ Представленные в статье материалы частично отражают и развивают отдельные положения диссертации Кузенковой Д.С. «Изотопная кинетика в жидкосолевых установках с уран-ториевым топливным циклом», Москва, НИЦ Курчатовский Институт, 2024 г. (URL: <https://vak.minobrnauki.gov.ru/advert/100080264>, http://nrcki.ru/files/pdf/Diss_KDS02.pdf, дата доступа 25.10.2024).

применять прямые расчеты выгорания для исследования процессов нуклидной кинетики и достижения равновесия по некоторым нуклидам в отдельной установке и существенно ограничивает возможности такого подхода для моделирования нуклидных потоков в многокомпонентной системе ядерной энергетики.

ОПИСАНИЕ ISTAR

Программная система (ПС) ISTAR (Integrated System for Transmutation Analysis of Reactors and Fuel Cycles) [1] создавалась для моделирования системы ядерной энергетики (ЯЭ), ориентированной на многообразие ее компонентов: от предприятий по фабрикации топлива до заводов по переработке и хранению отработавшего ядерного топлива (ОЯТ).

Модель ядерной энергетики задается как определенная структура, состоящая из набора таких процессов – реакторов, физических зон, хранилищ и т.п. (с потоком нейтронов или без него, радиоактивный распад тоже принимается во внимание) и потоков нуклидов между ними, объединенных в систему ядерным топливным циклом.

В ISTAR расчеты проводятся как для нестационарных режимов, например, выдержки и изменения изотопного состава топлива со временем, так и для равновесных состояний (стационарных процессов).

Изотопная композиция в ISTAR разделяется на тяжелые нуклиды, которые являются основным компонентом ядерного топлива, и возникающие при делении тяжелых нуклидов продукты деления. В основе ISTAR применяется однорупповая модель изотопной кинетики для каждого процесса или физической зоны. Происходит усреднение по зоне параметров взаимодействия с нейтронами. Усредненные параметры взаимодействия с нейтронами определяются в результате нейтронно-физического расчета, который в настоящее время выполняется по программе MCNP.

ПС ISTAR может использовать ядерные данные, основанные на нескольких различных библиотеках оцененных ядерных данных: ENDF/B-VII.0, ENDF/B-VI.8, JENDL 4.0, JEFF 3.1.1. На основе этих библиотек составлены векторы тяжелых нуклидов и продуктов деления таким образом, чтобы нейтронные реакции и естественный распад не выводили их дочерние изотопы за пределы указанных векторов. Поэтому наборы тяжелых ядер и продуктов деления, созданные на основе указанных библиотек оцененных ядерных данных, отличаются друг от друга по некоторым нуклидам.

Результаты расчетов, представленные в работе, получены с использованием библиотеки оцененных ядерных данных на базе ENDF/B-VII.0 [2].

Изменение изотопного состояния в физической зоне описывается следующей системой уравнений:

$$\frac{dn_i(t)}{dt} = -n_i(t) \cdot \sum_j \lambda_{i \rightarrow j} + \sum_k \lambda_{k \rightarrow i} \cdot n_k(t) + q_i, \quad n_i(t)|_{t=0} = n_i^0, \quad i \in \mathbf{I}, \quad (1)$$

где $n_i(t)$ – ядерная концентрация нуклида i , яд/(барн·см); $\lambda_{i \rightarrow j}$ – постоянная деления или трансформации нуклида i в нуклид j , 1/сек; $\lambda_{k \rightarrow i}$ – постоянная трансформации нуклида k в нуклид i , 1/сек; q_i – скорость подпитки нуклидом i , яд/(барн·см·сек); n_i^0 – начальная концентрация ядер нуклида i , яд/(барн·см); \mathbf{I} – полный вектор нуклидов для данной проблемы; $j \in \mathbf{J}$ – нуклид из \mathbf{I} , в который переходит нуклид i ; $k \in \mathbf{K}$ – нуклиды из \mathbf{I} , которые переходят в нуклид i .

Равновесное состояние в некотором процессе замкнутого топливного цикла описывается следующей системой уравнений:

$$\frac{dn_i(t)}{dt} = -n_i(t) \cdot \sum_j \lambda_{i \rightarrow j} + \sum_k \lambda_{k \rightarrow i} \cdot n_k(t) + q_i = 0, \quad i \in I, \quad (2)$$

где $n_i(t) \equiv n_i$ – равновесное количество нуклида i , ядер; $\lambda_{i \rightarrow j}$ – постоянная деления или трансформации нуклида i в нуклид j , 1/сек; $\lambda_{k \rightarrow i}$ – постоянная трансформации нуклида k в нуклид i , 1/сек; q_i – внешний источник нуклида i , яд/сек; I – полный вектор нуклидов для данной проблемы; $j \in J$ – нуклид из I , в который переходит нуклид i ; $k \in K$ – нуклиды из I , которые переходят в нуклид i .

ПС ISTAR-2.06 может содержать следующие утилиты и модули:

- оболочка ISTAR – управление данными и работа с электронными таблицами;
- утилита PRO1 – расчет равновесного состояния сложных структур ЯЭ;
- утилита PIKT3 – расчет изотопной кинетики для заданного интервала времени;
- утилита PIKR1 – расчет изотопной кинетики для заданного интервала времени с моделированием перегрузок топлива;

• UNSM_1 – UNSM_n – линейка модулей для утилиты PRO1;

• BURN_1 – BURN_n – линейка модулей для утилит PIKT3, PIKR1, PIKW1;

• утилита REZPRO1 – генератор отчетов по равновесным состояниям сложных структур;

• утилита NJ4BS99 – подготовка ядерно-физических данных в формате ACE для MCNP5 с помощью программы NJOY99 [3] и библиотек оцененных ядерных данных в формате B6.

Утилита – отдельно компилируемый и исполняемый код с произвольным названием, алгоритмом и языком программирования, информационно привязанный к электронным таблицам ПС ISTAR. Модуль – отдельно компилируемый код с произвольным алгоритмом и языком программирования, с названием, отвечающим определенным соглашениям, вызываемый оболочкой ПС ISTAR или утилитой и информационно связанный с ними через временные рабочие файлы.

Исходный код ПС ISTAR адаптирован под компилятор Harbour 3.0, что позволило создать версию ПС, способную работать в современных операционных системах семейства Windows (версии 7 и 10). А в дальнейшем выбор данного языка программирования позволит перенести ПС ISTAR и на другие платформы, в частности, ОС семейства Unix/Linux.

На сегодняшний день ПС ISTAR многократно кросс-верифицирована для решения задач выгорания в твердотельных реакторах [4–9].

Система ISTAR является уникальным инструментом, который позволяет рассматривать как нестационарные задачи для моделирования накопления нуклидов в системе, так и системные задачи – задачи оценки равновесных количеств нуклидов, которые могут быть накоплены как в отдельной установке, так и в системе ядерной энергетики.

КРОСС-ВЕРИФИКАЦИЯ ПРОГРАММНОЙ СИСТЕМЫ ISTAR ПРИМЕНИТЕЛЬНО К РАСЧЕТАМ ВЫГОРАНИЯ И НАКОПЛЕНИЯ НУКЛИДОВ В ТОПЛИВНЫХ КОМПОЗИЦИЯХ

Кросс-верификация ISTAR проводилась на построенной в ней модели куба с длиной ребра 5 см, внутреннее пространство которого заполняла соль LiF-ThF₄ [11], и заключалась в расчетах выгорания топлива со временем.

Кроме ПС ISTAR расчет изменения изотопного состава топлива проводился с использованием Serpent [11-13] и JAR-FR [14–16], а также получено аналитическое решение системы уравнений выгорания для нуклидов, представляющих интерес для решения задач, затронутых в данной статье.

Для получения концентраций нуклидов, представляющих интерес для уран-ториевого топлива, оказывается достаточным решить систему из четырех дифференциальных уравнений выгорания (1), поскольку данные нуклиды находятся практически в начале цепочек нуклидных превращений.

Рисунок 1 демонстрирует изменение концентраций изотопа ^{232}Th , полученных с использованием кодов ISTAR, Serpent и JAR-FR, на нем также приведено сравнение с аналитическим решением уравнений (1). Аналогичные зависимости приведены на рис. 2 для ^{233}Pa и ^{233}U .

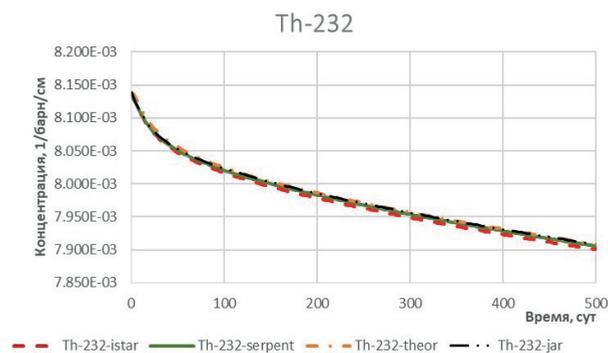


Рис. 1. График изменения концентрации ^{232}Th в зависимости от времени для расчета аналитическим методом (Th-232-theor), для численного расчета в программных комплексах ISTAR (Th-232-istar), Serpent (Th-232-serpent) и JAR-FR (Th-232-jar)

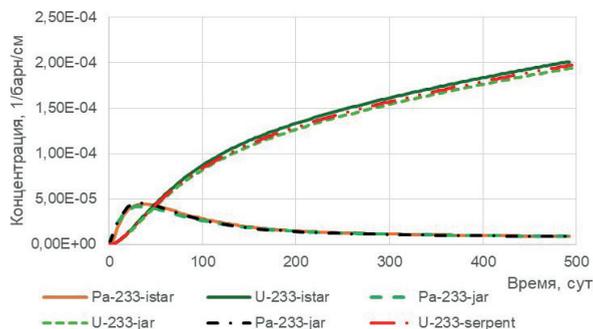


Рис. 2. Графики изменения концентраций ^{233}U и ^{233}Pa в зависимости от времени для численного расчета в программных комплексах ISTAR (U-233-istar, Pa-233-istar), Serpent (U-233-serpent, Pa-233-serpent) и JAR-FR (U-233-jar, Pa-233-jar)

Нейтронные данные (сечения), плотности потока нейтронов и постоянные естественного распада для аналитического решения этой задачи на каждом промежутке времени взяты из соответствующего временного шага программного расчета в ISTAR. При расчете в программных комплексах ISTAR и Serpent использовались сечения из одной библиотеки ядерных данных ENDF/B-VII, при расчете по JAR-FR использовались сечения библиотеки ядерных данных БНАБ-РФ.

Расхождения в концентрациях отдельных нуклидов достигают предельного значения в 5%, что говорит о приемлемой, как подтверждается в [17], точности расчета содержания нуклидов в облученном топливе. Эти результаты подтверждают надежность методов, используемых для анализа изотопного состава топлива, поступающего на хранение и переработку.

В процессе анализа решений задач выгорания для реакторных установок нормировка осуществляется на основе суммарной мощности системы. Однако возникает необходимость в моделировании нуклидной кинетики в системах с внешними источниками нейтронов, такими как бланкет ТИН или петлевые устройства исследовательских реакторов. Здесь суммарная мощность системы возрастает со временем, что связано с увеличением концентраций делящихся нуклидов. В связи с этим возникла необходимость адаптировать программный комплекс ISTAR для работы с системами переменной мощности, в частности, в контексте расплавленных солей, таких как LiF–ThF₄. В статье [9] описана модель, в которой смоделированы четыре зоны, содержащие тяжелые ядра, подвергающиеся делению, и рассчитано изменение изотопного состава во всех четырех зонах выгорания при нормировке на суммарную мощность системы. Таким образом решена «референсная» задача выгорания, в которой определялось распределение энерговыделения по зонам выгорания, на основании чего при известной суммарной мощности системы рассчитывалась плотность потока нейтронов для каждой зоны. Далее по рассчитанным плотности потока нейтронов и усредненным сечениям определялось изменение концентраций нуклидов за шаг выгорания. Вторым способом решения задачи выгорания заключался в моделировании изменения изотопного состава только в одной представляющей интерес зоне выгорания. Для нее было задано исходное значение мощности. На каждом шаге выгорания выполнялся расчет доли энерговыделения, приходящейся на данную зону. По известным энерговыделению с предыдущего шага выгорания и изменению доли энерговыделения вычислялось абсолютное значение мощности на текущем шаге выгорания для определения плотности потока нейтронов. Далее вычислялись усредненные сечения и решалась задача выгорания. В данной задаче в отличие от референсной усредненные сечения рассчитывались только для одной зоны выгорания (вместо четырех), что позволило сократить время расчета. Таким образом проведены сравнительные расчеты для решения разными способами задачи изотопной кинетики в представляющей интерес физической зоне: с помощью задания полной мощности установки (суммы по четырем зонам выгорания) и с помощью задания стартового энерговыделения только в интересующей зоне, с ее последующим пересчетом с учетом перераспределения долей энерговыделения во всех четырех физических зонах по кампании (при этом изменение изотопного состава в остальных зонах не моделируется). Получен новый изотопный состав на каждом расчетном шаге. На рисунке 3 приведен сравнительный график массы ²³³Pa и ²³³U для

каждого из вышеописанных расчетов в зависимости от времени (в сутках). Результаты расчетов изотопных составов при условии фиксированной суммарной мощности и при задании энерговыделения только в одной зоне совпадают. Это создает возможность исследовать в ISTAR процессы выгорания в зонах с переменной мощностью.

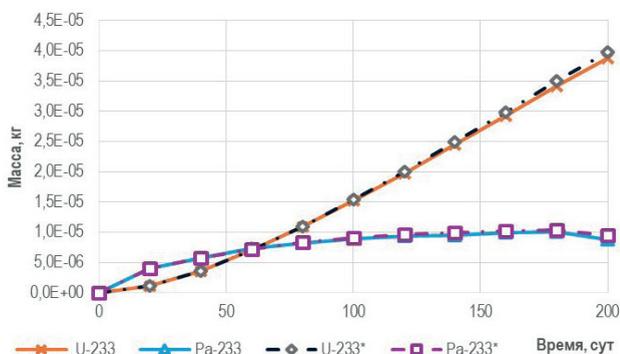


Рис. 3. Сравнительные графики массы ²³³Pa и ²³³U для многозонного и однозонного расчетов в зависимости от времени (*обозначены расчеты с заданием энерговыделения внутри каждой отдельной зоны)

ВЕРИФИКАЦИЯ ПРОГРАММНОЙ СИСТЕМЫ ISTAR ДЛЯ ОБОСНОВАНИЯ РАСЧЕТОВ РАВНОВЕСНОГО НУКЛИДНОГО СОСТАВА В РЕАКТОРАХ И СИСТЕМЕ ЯДЕРНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ

Для обоснования возможности рассчитывать равновесное состояние в ISTAR проведена ее кросс-верификация на элементарной модели. Она представляет собой заполненный солью LiF-ThF_4 куб с условиями трансляции на гранях. Равновесное состояние рассчитывалось согласно модели (2) и сравнивалось с результатами прямого расчета изменения изотопного состава. Это позволило дать оценку достижимости равновесного состояния путем длительного выгорания топлива для ^{232}Th , ^{233}Pa и ^{233}U , а также произвести сравнение полученных результатов с аналитическим решением системы уравнений, описывающих накопление представляющих интерес нуклидов тория, протактиния и урана. Приемлемым считается случай, когда по интересующим нас нуклидам (торий, уран, протактиний) значения концентраций, полученных путем длительного выгорания, с приемлемой степенью точности совпадают с расчетами равновесного состояния, а также согласуются с аналитическими расчетами.

Продемонстрирована возможность в ПС ISTAR задавать процесс выгорания топлива таким образом, чтобы через какое-то время его состав вышел на равновесие. При моделировании такого процесса была подобрана подпитка торием при условии, что из топлива выводились только продукты деления. На графиках ниже можно наблюдать процесс выхода нуклидов ^{232}Th и ^{233}U (рис. 4), ^{233}Pa (рис. 5) в равновесное состояние.

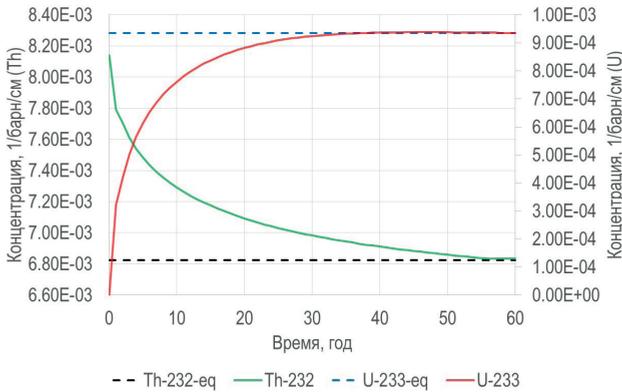


Рис. 4. График изменения концентрации ^{232}Th и ^{233}U в зависимости от времени

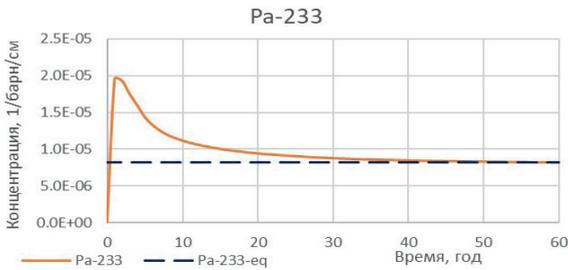


Рис. 5. График изменения концентрации ^{233}Pa в зависимости от времени

Таблица 1 демонстрирует результаты сравнения концентраций элементов.

Таблица 1

Результаты сравнения концентраций основных нуклидов при равновесном составе и с последнего шага выгорания, 1/(барн·см)

Нуклид	Концентрация с последнего шага выгорания	Равновесная концентрация	Разница, %
^{232}Th	$6,818 \cdot 10^{-03}$	$6,823 \cdot 10^{-03}$	0,08
^{233}Th	$4,638 \cdot 10^{-09}$	$4,659 \cdot 10^{-09}$	0,46
^{233}Pa	$8,208 \cdot 10^{-06}$	$8,245 \cdot 10^{-06}$	0,45
^{233}U	$9,348 \cdot 10^{-04}$	$9,348 \cdot 10^{-04}$	0,00

ДЕМОНСТРАЦИЯ ПРИМЕНЕНИЯ ПС ISTAR ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ НУКЛИДНОЙ КИНЕТИКИ В БЛАНКЕТЕ ТЕРМОЯДЕРНОГО ИСТОЧНИКА НЕЙТРОНОВ

В [18] приведены результаты работы по оценке наработки ^{233}U в бланкете термоядерного источника нейтронов (ТИН). В качестве сырьевого материала использовалась соль $\text{LiF}-\text{ThF}_4$; предполагалось, что весь объем бланкета перерабатывается за два года. В результате было показано, что в таком равновесном режиме можно ежегодно извлекать из бланкета до 448 кг урана, в котором содержится 380 кг ^{233}U .

Рассмотрим разные подходы к моделированию изотопного состава в исследуемой жидкосолевой системе: моделирование равновесного состояния, расчет изменения состава топливной соли при последовательном выгорании и выдержке и расчет изменения изотопного состава топлива без режима выдержки.

В бланкете ТИН мощностью $4,46 \cdot 10^{19}$ н/с (что соответствует нейтронной мощности 100 МВт) при режиме работы без выдержки за 1000 суток и подпитке ^{232}Th в 478 кг/год содержание ^{233}U достигает 896 кг.

По результатам расчета изотопного равновесия показано, что из бланкета ТИН, нейтронная мощность которого составляет 100 МВт, можно извлекать до 380 кг ^{233}U в год. При таком режиме работы бланкета он может произвести около 1041 кг ^{233}U за 1000 суток.

Расчеты равновесного состояния и прямое моделирование изотопного состава хорошо согласуются между собой, поэтому дальнейшие исследования баланса нуклидов в системе ЯЭ можно проводить на основе расчета равновесных состояний в ПС ISTAR. Отдельно следует отметить, что расчеты равновесия в ПС ISTAR выполняются значительно быстрее, чем прямые расчеты изменения изотопного состава, особенно в многокомпонентных системах.

ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ ЯДЕРНЫХ ДАННЫХ НА НАРАБОТКУ НУКЛИДОВ В БЛАНКЕТЕ ТЕРМОЯДЕРНОГО ИСТОЧНИКА НЕЙТРОНОВ

Известно, что равновесное количество нуклидов в бланкете определяется скоростями подпитки и вывода нуклидов, плотностью потока нейтронов и спектром (т.е. набором усредненных по спектру микроскопических сечений). Сечения взаимодействия нейтронов

с ядрами известны с некоторой погрешностью, поэтому возникает задача оценки влияния неопределенностей ядерных данных на равновесные количества нуклидов в бланкете и в итоге на скорость наработки ^{233}U .

Оценка неопределенностей выполнялась с помощью метода розыгрыша исходных данных, суть которого заключается в генерации случайных наборов исходных данных и последующей статистической обработке выборки результатов (представляющих интерес функционалов), полученных на этих наборах исходных данных. Предполагалось, что исходные данные имеют равномерное распределение в интервале $\pm 10\%$ от исходного значения.

Метод Generalized Random Sampling (GRS) [19] используется для оценки влияния неопределенности технологических параметров на изотопный состав топливной композиции. Он позволяет оценить влияние неопределенности входных параметров переменного типа (в данном случае микроскопических сечений для отдельных изотопов), используя статистическую обработку большого количества расчетных результатов. Метод GRS не имеет ограничений по количеству рассматриваемых входных параметров, известных с некоторой неопределенностью, на базе которого разработан специализированный программный комплекс SUSА (Statistical Uncertainty and Sensitivity Analysis) [20], который позволяет автоматизировать анализ неопределенности результатов расчетов. В программном комплексе SUSА выполнена подготовка 1000 наборов исходных данных, проведено соответствующее количество расчетов равновесного состояния бланкета ТИН по программе ISTAR [1] и сделана статистическая обработка результатов.

Таблица 2 демонстрирует равновесные количества нуклидов в бланкете ТИН.

Таблица 2

Равновесные количества нуклидов в бланкете ТИН, кг

Th-232	5,017E+05	Pa-233	4,184E+01	Ac-227	2,224E+00
Pa-231	5,337E+03	Th-229	1,082E+01	Pa-232	3,545E-01
Th-230	1,605E+03	U-234	4,725E+00	Th-231	2,939E-01
U-233	7,600E+02	Ra-226	3,667E+00	U-235	8,267E-02
U-232	1,310E+02	Th-228	3,601E+00	Остальные т.я.	8,392E-02

Согласно представленным данным, в бланкете содержится порядка 500 т тория, 450 кг урана, более 5 т протактиния и менее 100 г прочих тяжелых ядер. На данном этапе исследовано влияние неопределенностей в сечениях захвата, деления, реакции (n, 2n) и реакции (n, 3n) для следующих нуклидов: ^{232}Th , ^{232}U , ^{233}U , ^{234}U и ^{235}U на тепловую мощность бланкета, равновесное количество ^{232}Th и изотопов урана в нем.

В результате статистического анализа были определены коэффициенты линейной регрессии, которые позволяют оценить индивидуальные вклады неопределенностей исходных параметров в неопределенность представляющих интерес функционалов.

По программному комплексу SUSА рассчитаны коэффициенты линейной регрессии и связанные с ними неопределенности в равновесном количестве ^{233}U в бланкете ТИН. Полученные парциальные вклады в неопределенность позволяют ранжировать сечения нейтронных реакций на рассмотренных нуклидах по степени значимости при оценке, например, наработки ^{233}U . Зная исходные неопределенности в сечениях, заложенные в расчетах по комплексу SUSА, можно оценить вклад неопределенности каждого рассмотренного сечения в неопределенность исследуемого функционала.

Таблица 3 демонстрирует нейтронные реакции и связанные с ними неопределенности, оказывающие наибольшее влияние на исследуемый функционал.

Таблица 3

Нейтронные реакции, оказывающие наибольшее влияние на неопределенность в наработке ^{233}U

Исходный параметр (сечение)	Значение исходного параметра с неопределенностью, барн	Вклад в неопределенность результирующего функционала, кг
Th-232 CAPTURE	$6,60370\text{E}-01 \pm 10\%$	13,80636
Th-232 N_2N	$9,69381\text{E}-02 \pm 10\%$	9,06614
Th-232 FISSION	$2,79030\text{E}-02 \pm 10\%$	2,63290
Th-232 N_3N	$2,21717\text{E}-02 \pm 10\%$	2,07682
U-233 FISSION	$1,08580\text{E}+01 \pm 10\%$	1,88006
U-233 CAPTURE	$2,09025\text{E}+00 \pm 10\%$	0,34700

С учетом оцененных неопределенностей можно сформулировать рекомендации по дальнейшему уточнению сечений тех или иных нейтронных реакций для снижения ошибки в оценке наработки ^{233}U . Так, например, выполненные расчеты продемонстрировали заметное влияние сечений реакций $(n, 2n)$ и $(n, 3n)$ на ^{232}Th , которые, как правило, известны с меньшей точностью, чем сечения реакций деления и радиационного захвата. При этом реакции деления и радиационного захвата на самом целевом нуклиде (^{233}U) оказывают меньшее влияние на его равновесное количество и наработку. По поводу влияния сечений нейтронных реакций на тории следует учитывать то, что он является основным источником наработки ^{233}U и его содержание в бланкете достигает 500 т, обуславливая большое влияние на наработку ^{233}U .

На диаграммах рис. 6 каждая точка соответствует величине указанного функционала – массы ^{233}U в бланкете, рассчитанной при конкретных значениях сечений нейтронных реакций в одном из 1000 наборов исходных данных. Линии на графике представляют собой линии регрессии.

Отличительной особенностью рассмотренного бланкета для наработки ^{233}U является пониженное энерговыделение и соответственно сниженное накопление продуктов деления. Аналогичный анализ по влиянию неопределенностей нейтронных сечений был проведен и для энерговыделения в бланкете. В исходном варианте бланкета его тепловая мощность была равна 74,6 МВт.

По программному комплексу SUSAS рассчитаны коэффициенты линейной регрессии и связанные с ними неопределенности в тепловой мощности бланкета ТИН. Таблица 4 представляет нейтронные реакции, оказывающие наибольшее влияние на мощность бланкета.

Следовательно, наибольший вклад в неопределенность мощности вносят неопределенности реакций деления на нуклидах, присутствующих в значимых количествах в бланкете. Также влияние оказывают и другие реакции на ^{232}Th , поскольку этого нуклида в бланкете содержится больше всего, и данные реакции конкурируют с делением на тории, которое вносит вклад в мощность напрямую.

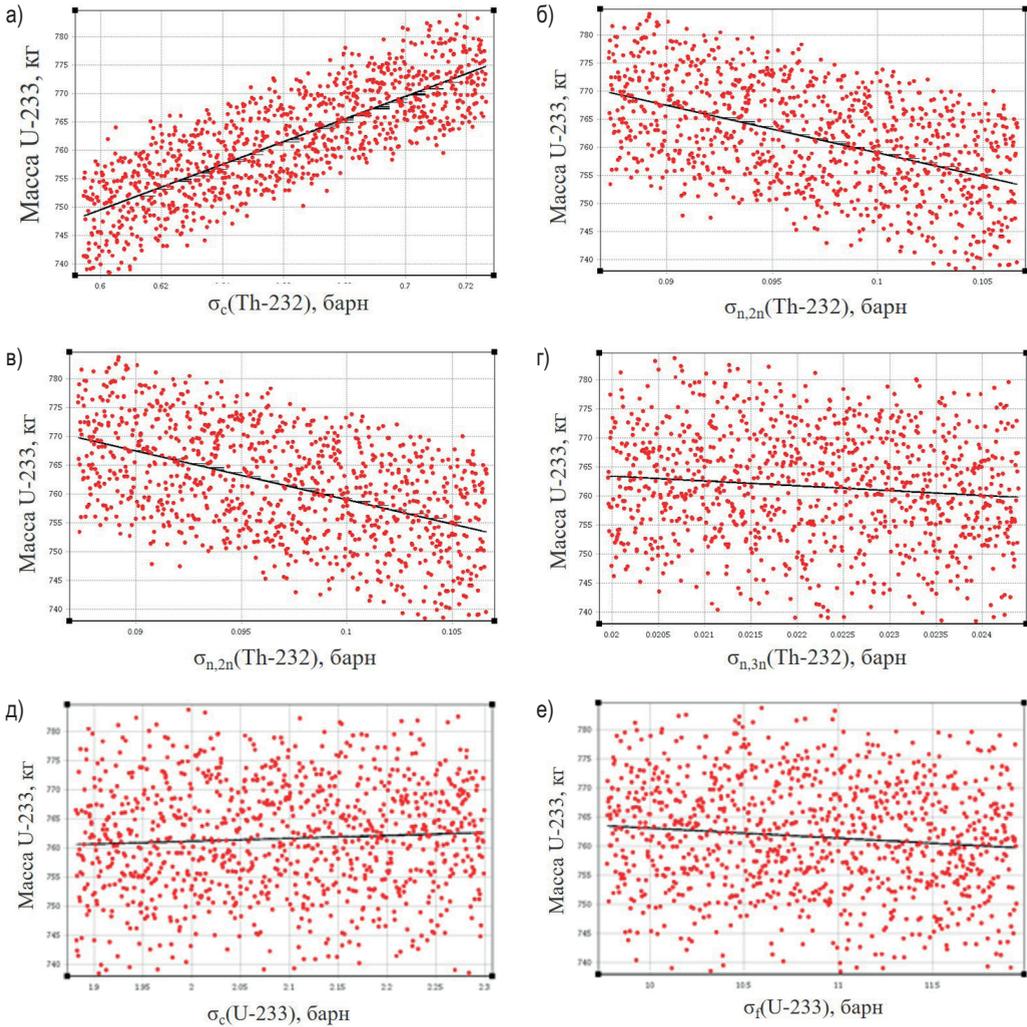


Рис. 6. Зависимости равновесного количества ²³³U в бланкете от сечений нейтронных реакций

Таблица 4

Нейтронные реакции, оказывающие наибольшее влияние на неопределенность в тепловой мощности бланкета

Исходный параметр (сечение)	Значение исходного параметра с неопределенностью, барн	Вклад в неопределенность результирующего функционала, МВт(тепл.)
Th-232 FISSION	2,79030E-02 ± 10%	3,82271
Th-232 CAPTURE	6,60370E-01 ± 10%	3,39496
U-233 FISSION	1,08580E+01 ± 10%	2,37139
Th-232 N_2N	9,69381E-02 ± 10%	0,39347
U-232 FISSION	6,70133E+00 ± 10%	0,24145

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Система ISTAR является уникальным инструментом, который позволяет рассматривать как нестационарные задачи для моделирования накопления нуклидов в системе, так и системные задачи – задачи оценки равновесных количеств нуклидов, которые можно получить как в отдельной установке, так и в системе ядерной энергетики. Этот расчетный комплекс помогает решать задачи дальнейшего развития системы ядерной энергетики в условиях принципиальной неопределенности как характеристик инновационных реакторов, так и условий их развития и логистических связей между различными структурами ядерного топливного цикла.

При этом с помощью ISTAR можно как оценивать количества различных нуклидов, с которыми придется столкнуться в будущем при обращении с облученным ядерным топливом и при направлении на окончательную изоляцию от среды обитания опасных долгоживущих нуклидов, которые не будут востребованы народном хозяйстве, так и контролировать возможность использования всех добытых тяжелых нуклидов – как урана, так и тория. При этом появляется возможность оценки нейтронного потенциала каждого нуклида в системе при использовании их в различных установках и возможности использования жидкотопливных технологий для замыкания ядерного топливного цикла по нуклидам, использование которых затруднено в твердотопливных реакторах и для наработки искусственных делящихся нуклидов в blankets термоядерных реакторов с совместным производством материнских альфа-активных нуклидов для получения радионуклидов для медфармпрепаратов.

Литература

1. Дудников А.А. Программа моделирования изотопной кинетики в многокомпонентных структурах ядерной энергетики «Istar». Свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ №2020619218, 13.08.2020. URL: https://elibrary.ru/download/elibrary_43889370_67706735.PDF (дата доступа 25.10.2024) EDN: CHWOHW.
2. Chadwick M. B. et al. ENDF/B-VII.0: next generation evaluated nuclear data library for nuclear science and technology. // Nuclear data sheets. – 2006. – Vol. 107. – No. 12. – PP. 2931–3060. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nds.2006.11.001>
3. MacFarlane R.E., Kahler A.C. Methods for Processing ENDF/B-VII with NJOY. // Nuclear Data Sheets. – 2010. – Vol. 111. – No. 12. – PP. 2739–2890. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nds.2010.11.001>
4. Blandinskiy V.Y., Dudnikov A.A. Calculations of spent fuel isotopic composition for fuel rod from VVER-440 fuel assembly benchmark using several evaluated nuclear data libraries. // Kerntechnik. – 2018. – Vol. 83. – No. 4. – PP. 325–330. DOI: <https://doi.org/10.3139/124.110917>
5. Blandinskiy V. Neutron balance as indicator of long-term resource availability in growing nuclear energy system. // Kerntechnik. – 2017. – Vol. 82. – No. 4. – PP. 468–473. DOI: <http://dx.doi.org/10.3139/124.110815>
6. Blandinskiy V. Efficient introduction of natural uranium and thorium into nuclear energy system. // Kerntechnik. – 2016. – Vol. 81. – No. 4. – PP. 432–436. DOI: <http://dx.doi.org/10.3139/124.110708>
7. Alekseev P.N., Balanin A.L., Blandinsky V.Yu., Dudnikov A.A., Fomichenko P.A., Nevinitza V.A., Frolov A.A., Lubina A.S., Sedov A.A., Subbotin A.S. Prospects of subcritical molten salt reactor for minor actinides incineration in closed fuel cycle. // Kerntechnik. – 2015. – Vol. 80. – No. 4. – PP. 389–393. DOI: <http://dx.doi.org/10.3139/124.110514>
8. Blandinskiy V., Alekseev P., Fomichenko P., Frolov A., Lubina A., Nevinitza V., Sedov A., Stepanov A., Subbotin A., Subbotin S., Zizin M. Concept of Multifunctional Fast Neutron Research Reactor (MBIR) Core

with Metal (U-Pu-Zr)-fuel. IAEA-CN245-271, 2018. URL: <https://media.superevent.com/documents/20170620/224211987a231e7e256e718e02bf6252/fr17-271.pdf> (дата доступа 25.10.2024).

9. Кузенкова Д.С., Бландинский В.Ю. Моделирование изотопной кинетики в системе с циркулирующим топливом на примере петли реактора МБИР. // Известия вузов. Ядерная энергетика. – 2022. – № 4. – С. 58–66. DOI: <https://doi.org/10.26583/npe.2022.4.05>

10. Capelli E., Beneš O., Beilmann M., Konings R.J.M. Thermodynamic investigation of the LiF–ThF₄ system. // The Journal of Chemical Thermodynamics. – 2013. – Vol. 58. – PP. 110–116. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jct.2012.10.013>

11. Dwijayanto R.A.P., Oktavian M.R., Putra M.Y.A., Harto A.W. Model Comparison of Passive Compact-Molten Salt Reactor Neutronic Design Using MCNP6 and Serpent-2. // Atom Indonesia. – 2021. – Vol. 47. – No. 3. – PP. 191–197. DOI: <https://doi.org/10.17146/aj.2021.1122>

12. Rykhlevskii A., Bae J.W., Huff K.D. Modeling and simulation of online reprocessing in the thorium-fueled molten salt breeder reactor. // Annals of Nuclear Energy. – 2019. – No. 128. – PP. 366–372. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2019.01.030>

13. Rykhlevskii A., Lindsay A., Kathryn H. Full-core analysis of thorium-fueled Molten Salt Breeder Reactor using the SERPENT 2 Monte Carlo code. // Transactions of the American Nuclear Society. – 2017. – Vol. 117. – PP. 1343–1346. URL: <https://pdfs.semanticscholar.org/841b/be1c8725a74ac14c20258fafdc8b65f8ff4e.pdf> (дата доступа 25.10.2024).

14. Ярославцева Л.Н. Комплекс программ JARB для расчета нейтронно-физических характеристик ядерных реакторов. // ВАИТ. Сер. Физика и техника ядерных реакторов. – 1983. – № 8. – С. 37.

15. Ярославцева Л.Н., Зверков Ю.А. Программный комплекс JARFR. Инструкция для пользователя. Отчет ИАЭ, инв. №35/1-201-88. Москва, 1988.

16. Ярославцева Л.Н., Фомиченко П.А., Васильев А.В., Кононова Л.Л. Методы и алгоритмы нейтронно-физического расчета ядерных реакторов в комплексе. Отчет РНЦ «Курчатовский институт», инв. № 90/1-4-95. Москва, 1995.

17. Румянцев А.Н. Прогнозирование безопасности в ядерной энергетике. // Атомная энергия. – 2007. – Том 102. – Вып. 2. – С. 80–86.

18. Андрианова Е.А., Бландинский В.Ю., Давиденко В.Д., Кормилицын М.В., Кузенкова Д.С., Субботин С.А. Термоядерный источник нейтронов как часть системы ядерной энергетике. // ВАИТ. Сер. Физика ядерных реакторов. – 2023. – № 1. – С. 100–113. EDN: BTTOCV. URL: <http://nrcki.ru/files/pdf/VANT-2023-01.pdf> (дата доступа 25.10.2024).

19. Zwermann W. et al. Uncertainty Analyses with Nuclear Covariance Data in Reactor Core Calculations. Int. Conf. on Nuclear Data for Science and Technology, Jeju Island, Korea, April 26–30, 2010.

20. Kloos M. SUSA Version 4.0. User's Guide and Tutorial. GRS-P-5, Rev.1, 2015.

Поступила в редакцию 30.10.2024

Авторы

Бландинский Виктор Юрьевич, ученый секретарь, к.т.н.,

E-mail: Blandinskiy_VY@nrcki.ru

Кузенкова Дарья Сергеевна, старший научный сотрудник, к.т.н.,

E-mail: Kuzenkova_DS@nrcki.ru

Дудников Анатолий Анатольевич, ведущий эксперт,

E-mail: Dudnikov_AA@nrcki.ru

Субботин Станислав Анатольевич, начальник отдела, к.т.н.,

E-mail: Subbotin_SA@nrcki.ru

UDC 621.039.5

Using the ISTAR Code to Solve Problems of the Molten Salt Fuel Nuclide Composition Change

Blandinskiy V.Yu., Dudnikov A.A., Kuzenkova D.S., Subbotin S.A.

National Research Center «Kurchatov Institute»,
1 Acad. Kurchatov Sq., 123182 Moscow, Russia

Abstract

The paper considers the computational capabilities of the ISTAR code, which allows one to proceed from considering the solution of time-dependent problems that describe the change in the isotopic composition in the neutron field and in the process of decay cooling, involved in calculation of specific nuclear facility models, to analyzing system problems of estimating equilibrium quantities of nuclides, which can be accumulated, in principle, both in a separate nuclear facility and in a nuclear energy system. The ISTAR code is designed for investigating computationally complex structures of nuclear energy systems, including nuclide transformation in different nuclear energy system components: nuclear reactors, spent fuel storage facilities, fuel reprocessing and fabrication plants, etc., and nuclide flows between them. Calculations can be undertaken both for steady-state modes (equilibrium state) and for non-steady-state modes (burnup and decay modes). The paper describes the capabilities of the ISTAR code and demonstrates these using an example with calculation of the nuclide composition change in the molten salt blanket of a thermonuclear neutron source. The cross-verification results are also presented in comparison with calculations based on the Serpent and JARFR codes. Results are presented from the isotopic composition evolution simulation in a test problem. The achievement of equilibrium concentrations is demonstrated in the test problem considered. The ISTAR code helps one potentially to resolve issues involved in developing further nuclear power as a system in conditions with a fundamental uncertainty of both the performance of innovative reactors and nuclide flows between different components of the nuclear fuel cycle. At the same time, it becomes possible to estimate the neutron potential of each nuclide in the system when using them in different reactor types.

Keywords: ISTAR, thermonuclear neutron source, TNS, neutronic performance.

For citation: Blandinskiy V.Yu., Dudnikov A.A., Kuzenkova D.S., Subbotin S.A. Using the ISTAR Code to Solve Problems of the Molten Salt Fuel Nuclide Composition Change. *Izvestiya vuzov. Yadernaya Energetika*. 2024, no. 4, pp. 128–143. DOI: <https://doi.org/10.26583/npe.2024.4.11> (in Russian).

References

1. Dudnikov A.A. *Program for modeling isotope kinetics in multicomponent structures of nuclear energy «ISTAR»*. Certificate of state registration of PC №2020619218, 13.08.2020. URL: https://elibrary.ru/download/elibrary_43889370_67706735.PDF EDN: CHWOHW (accessed Oct. 25, 2024) (in Russian).
2. Chadwick M. B. et al. ENDF/B-VII.0: next generation evaluated nuclear data library for nuclear science and technology. *Nuclear data sheets*. 2006, vol. 107, no. 12, pp. 2931–3060. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nds.2006.11.001>
3. MacFarlane R.E., Kahler A.C. Methods for Processing ENDF/B-VII with NJOY. *Nuclear Data Sheets*. 2010, vol. 111, no. 12, pp. 2739–2890. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.nds.2010.11.001>

4. Blandinskiy V.Y., Dudnikov A.A. Calculations of spent fuel isotopic composition for fuel rod from VVER-440 fuel assembly benchmark using several evaluated nuclear data libraries. *Kerntechnik*. 2018, vol. 83, no. 4, pp. 325–330. DOI: <https://doi.org/10.3139/124.110917>
5. Blandinskiy V. Neutron balance as indicator of long-term resource availability in growing nuclear energy system. *Kerntechnik*. 2017, vol. 82, no. 4, pp. 468–473. DOI: <http://dx.doi.org/10.3139/124.110815>
6. Blandinskiy V. Efficient introduction of natural uranium and thorium into nuclear energy system. *Kerntechnik*. 2016, vol. 81, no. 4, pp. 432–436. DOI: <http://dx.doi.org/10.3139/124.110708>
7. Alekseev P.N., Balanin A.L., Blandinsky V.Yu., Dudnikov A.A., Fomichenko P.A., Nevinitza V.A., Frolov A.A., Lubina A.S., Sedov A.A., Subbotin A.S. Prospects of subcritical molten salt reactor for minor actinides incineration in closed fuel cycle. *Kerntechnik*. 2015, vol. 80, no. 4, pp. 389–393. DOI: <http://dx.doi.org/10.3139/124.110514>
8. Blandinskiy V., Alekseev P., Fomichenko P., Frolov A., Lubina A., Nevinitza V., Sedov A., Stepanov A., Subbotin A., Subbotin S., Zizin M. Concept of Multifunctional Fast Neutron Research Reactor (MBIR) Core with Metal (U-Pu-Zr)-fuel. IAEA-CN245-271, 2018. URL: <https://media.superevent.com/documents/20170620/224211987a231e7e256e718e02bf6252/fr17-271.pdf> (accessed Oct. 25, 2024).
9. Kuzenkova D.S., Blandinsky V.Y. Modeling Isotope Kinetics in a Circulating Fuel System: a Case Study of the MBIR Reactor Loop. *Izvestiya vuzov. Yadernaya Energetika*. 2022, no. 4, pp. 58–66; DOI: <https://doi.org/10.26583/npe.2022.4.05> (in Russian).
10. Capelli E., Beneš O., Beilmann M., Konings R.J.M. Thermodynamic investigation of the LiF–ThF₄ system. *The Journal of Chemical Thermodynamics*. 2013, vol. 58, pp. 110–116. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jct.2012.10.013>
11. Dwijayanto R.A.P., Oktavian M.R., Putra M.Y.A., Harto A.W. Model Comparison of Passive Compact-Molten Salt Reactor Neutronic Design Using MCNP6 and Serpent-2. *Atom Indonesia*. 2021, vol. 47, no. 3, pp. 191–197. DOI: <https://doi.org/10.17146/aij.2021.1122>
12. Rykhlevskii A., Bae J.W., Huff K.D. Modeling and simulation of online reprocessing in the thorium-fueled molten salt breeder reactor. *Annals of Nuclear Energy*. 2019, no. 128, pp. 366–372. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2019.01.030>
13. Rykhlevskii A., Lindsay A., Kathryn H. Full-core analysis of thorium-fueled Molten Salt Breeder Reactor using the SERPENT 2 Monte Carlo code. *Transactions of the American Nuclear Society*. 2017, vol. 117, pp. 1343–1346. URL: <https://pdfs.semanticscholar.org/841b/be1c8725a74ac14c20258fafdc8b65f8ff4e.pdf7> (accessed Oct. 25, 2024).
14. Yaroslavtseva L.N. The JAR Code System for Nuclear Reactor Neutronics Calculations. *Problems of atomic science and technology. Series: Physics of Nuclear Reactors*. 1983, no. 8(37), pp. 41–43.
15. Yaroslavtseva L.N., Zverkov Y.A. *Program complex JARFR. Instruction for User*. Report of IAE, inv.№35/1-201-88. Moscow, 1988.
16. Yaroslavtseva L.N., Fomichenko P.A., Vasiliev A.V., Kononova L.L. *Methods and Algorithms of Neutron-Physical Calculation of Nuclear Reactors in Complex*. Report of RRC «Kurchatov Institute». Inv. No. 90/1-4-95, Moscow, 1995.
17. Rummyantsev A.N. Safety prediction in nuclear power. *Atomic Energy*. 2007, vol. 102, pp. 94–99. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10512-007-0014-2>
18. Andrianova E.A., Blandinskii V.Yu., Davidenko V.D., Kormilitsyn M.V., Kuzenkova D.S., Subbotin S.A. The Fusion Neutron Source as Part of a Nuclear Energy System. *Problems of atomic science and technology. Series: Physics of Nuclear Reactors*. 2023, no. 1, pp. 100–113. EDN: BTTOCV. URL: <http://nrcki.ru/files/pdf/VANT-2023-01.pdf> (accessed Oct. 25, 2024) (in Russian).
19. Zwermann W. et al. Uncertainty Analyses with Nuclear Covariance Data in Reactor Core Calculations. *Int. Conf. on Nuclear Data for Science and Technology*, Jeju Island, Korea, April 26–30, 2010.
20. Kloos M. *SUSA Version 4.0. User's Guide and Tutorial. GRS-P-5, Rev.1*. 2015.

Authors

Victor Yu. Blandinskiy, scientific secretary, Cand. Sci. (Engineering),

E-mail: Blandinskiy_VY@nrcki.ru

Anatoly A. Dudnikov, expert,

E-mail: Dudnikov_AA@nrcki.ru

Daria S. Kuzenkova, senior researcher, Cand. Sci. (Engineering),

E-mail: Kuzenkova_DS@nrcki.ru

Stanislav A. Subbotin, Head of Department, Cand. Sci. (Engineering),

E-mail: Subbotin_SA@nrcki.ru