

ВОЗМОЖНОСТИ РАСЧЕТНОГО КОДА TRACT ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ХАРАКТЕРИЗАЦИИ РАДИОНУКЛИДНОГО СОСТАВА РАО И ОЯТ

А. И. Блохин, П. А. Блохин, И. В. Сипачев

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН, Москва

Статья поступила в редакцию 23 мая 2018 г.

В работе представлены расчетные возможности создаваемого кода нуклидной кинетики TRACT, выполнена его верификация на базе тестовых экспериментов по тепловыделению продуктов деления. Для отработавшего топлива реактора ВВЭР-440 исследованы его радиационные характеристики для времен охлаждения до 10000 лет.

Ключевые слова: *изотопная кинетика, расчетный код TRACT, верификация, остаточное тепловыделение, отработавшее топливо, радиоактивные отходы, гамма-излучение, реактор ВВЭР-440.*

Введение

В процессе облучения материалов происходят изменения их элементного и изотопного составов, вызванные ядерными реакциями и радиоактивным распадом. Создание программно-аналитических комплексов по обеспечению теоретических исследований трансмутации и активации материалов представляет собой достаточно трудоемкую и сложную задачу, решению которой всегда уделялось большое внимание. Актуальность этой задачи возросла за последние 10–15 лет в связи с повышением требований по обеспечению требуемой точности расчетов характеристик ОЯТ и РАО для задач их долговременного хранения и захоронения [1], где требуется обеспечение расчетов длинных цепочек радиоактивного распада и оценка изменения характеристик (активность, энерговыделение, поглощенная доза и др.) ОЯТ и РАО.

Одной из актуальных задач является определение составов РАО класса 1, планируемых к размещению в пункте глубинного захоронения «Нижнеканский массив». На данный момент значительное количество РАО класса 1 от переработки ОЯТ накоплено на заводе РТ-1,

расположенного на ФГУП «ПО «Маяк». В силу отсутствия практической необходимости знания о радионуклидном составе РАО, образующихся при переработке ОЯТ, характеризуются существенными пробелами и большими неопределенностями по ряду ключевых, но ранее не рассматриваемых радионуклидов [2]. Для целей оценки долгосрочной безопасности пункта захоронения минимизация этих неопределенностей является одной из основных задач. Определение радионуклидного состава РАО с целью обоснования безопасности захоронения ранее не выполнялось, а его измерение с помощью иных методов неразрушающего контроля не представляются возможными в силу объективных причин. Решение этой задачи без привлечения расчетных комплексов и формирования специальных условий для измерений не представляется практически реализуемым.

Для решений этой и других задач разрабатывается программа для расчета нуклидной кинетики TRACT (Transmutation and ACTivation). В данной работе описаны исследования по верификации текущей версии программы TRACT/2018 и приведены примеры ее апробации.

Математическая модель кода нуклидной кинетики и формирование библиотек ядерных данных

Программа нуклидной кинетики TRACT/2018 рассчитывает изменение концентрации ядер материалов, учитывая ядерные превращения при нейтронном облучении и радиоактивном распаде. Область энергий нейтронов может изменяться от тепловых до 20 МэВ. Для этой области энергий нейтронов учитываются все открытые каналы нейтронных реакций, число которых для отдельных нуклидов может достигать 18 с учетом образования остаточных ядер в основном и метастабильных состояниях. Число метастабильных состояний может достигать четырех. В состав материалов могут входить не делящиеся и делящиеся элементы от водорода до фермия (от $Z = 1$ до $Z = 100$). При радиоактивном распаде образующихся радионуклидов учитываются все каналы распадов, известные из библиотеки радиационных данных. Результатом работы кода нуклидной кинетики является новый состав облученного материала, который образуется в рассматриваемый момент облучения или выдержки. Для оценки свойств полученного состава материала рассчитываются наборы следующих радиационных характеристик: активность, спектры нейтронного и гамма-излучения, энерговыделение и газонакопление за счет ядерных реакций (водорода, гелия и трития).

Математическая модель нуклидной кинетики представляет собой систему линейных дифференциальных уравнений первого порядка с постоянными коэффициентами. В процессе нейтронного облучения материалов происходит изменение их изотопного состава за счет ядерных реакций и радиоактивного распада образующихся нестабильных нуклидов. В расчете нуклидного состава облучаемого нейтронами материала число ядер $N_i(t)$ радионуклидов определяется из решения системы дифференциальных уравнений:

$$dN_i(t)/dt = -N_i \cdot (\lambda_i + \sigma_i \cdot \Phi(t)) + \sum_{j \neq i} (\lambda_{ij} + \sigma_{ij} \cdot \Phi(t)) \cdot N_j + S_i,$$

где $N_i(t)$ — число радиоактивных ядер i -го нуклида в момент времени t ;
 $\Phi(t)$ — нейтронный поток, $1/(см^2 \cdot с)$;
 λ_i — постоянная распада i -го нуклида, $1/с$;
 λ_{ij} — постоянная распада нуклида j в нуклид i , $1/с$;
 σ_i — полное сечения ядерных реакций на i -м нуклиде, $см^2$;
 σ_{ij} — полное сечение ядерных реакций на j -м нуклиде по наработке i -го нуклида, $см^2$;
 S_i — источник образования i -го нуклида по каналу деления, который определяется как

$$S_i = \sum_k \sigma_k^f \cdot \Phi(t) \cdot N_k \cdot Y_{ik}.$$

Здесь: N_k — число делящихся ядер k -го нуклида; σ_k^f — сечение реакции деления для актинида k ; Y_{ik} — выход нуклида i за счет реакции деления актинида k .

Расчет активации и трансмутации материалов при их нейтронном облучении должен быть обеспечен ядерными данными по микроскопическим сечениям взаимодействия нейтронов с изотопами облучаемых материалов, радиационным характеристикам радиоактивных ядер и выходам продуктов деления при делении актинидов нейтронами и гамма-квантами.

После окончания нейтронного облучения материал, например ОЯТ, является сам по себе источником следующих видов излучения:

- нейтронов спонтанного деления накопленных актинидов и топливных элементов;
- альфа-частиц, образованных при радиоактивном распаде минорных актинидов. Энергия таких альфа-частиц не превышает 7 МэВ;
- гамма-квантов, образованных при радиоактивном распаде нестабильных изотопов, в основном продуктов деления, а также при спонтанном делении; энергия таких гамма-квантов простирается до 12 МэВ;
- нейтронов из (α, n) реакции, протекающей на легких элементах;
- нейтронов из (γ, n) и (γ, f) реакций, протекающих на делящихся изотопах;

Для учета этих процессов требуются данные по выходам продуктов деления при спонтанном делении актинидов, сечениям (α, n) реакций на изотопах, энергетический порог которых не превышает максимальной энергии альфа-частиц в 7 МэВ и сечениям (γ, n) и (γ, f) реакций, протекающих на делящихся изотопах.

По всем требующимся данным необходимо сформировать или использовать готовые библиотеки ядерно-физических данных.

Формирование библиотек ядерных данных

Библиотека нейтронных сечений

Одной из важных задач, решаемых при разработке кода, является формирование современной библиотеки ядерных активационных данных по сечениям взаимодействия нейтронов с изотопами элементов для обеспечения расчетов активации и изменения элементного состава материалов, находящихся в нейтронных полях различных типов ядерно-энергетических установок со спектром нейтронов ниже 20 МэВ. В состав библиотеки нейтронных ядерных сечений должны быть включены элементы от водорода ($Z = 1$) до фермия ($Z = 100$), которые охватывают всю совокупность делящихся и неделящихся материалов. Для них должны быть представлены

все нейтронные реакции, доступные в области энергий нейтронов до 20 МэВ. Наряду со стабильными изотопами в состав этой библиотеки должны входить ядерные данные для радиоактивных изотопов, которые образуются в процессах трансмутации элементов.

Наиболее информативно полными библиотеками активационных ядерных сечений в области энергий нейтронов до 20 МэВ являются европейская библиотека EAF-2010 [3] и российская библиотека БРОНД-3/А [4], которые отражают современный уровень знаний по статусу оцененных ядерных нейтронных сечений. В их состав включены элементы от водорода ($Z = 1$) до фермия ($Z = 100$). В составе библиотеки БРОНД-3/А общее число включенных изотопов равно 704. Для них представлено примерно 11000 различных нейтронных реакций в области энергий нейтронов до 20 МэВ. Наряду со стабильными изотопами в состав библиотеки БРОНД-3/А входят ядерные данные для радиоактивных изотопов, которые образуются в процессах трансмутации элементов. Для каждого изотопа приведен полный набор нейтронных сечений, энергетические пороги которых ниже 20 МэВ. Этот набор включает такие каналы ядерных реакций как: $(n, 2n)$, (n, p) , (n, d) , (n, t) , $(n, {}^3\text{He})$, (n, α) , (n, np) , (n, nd) , (n, nt) , $(n, 2p)$, $(n, p\alpha)$, $(n, n\alpha)$, (n, γ) и ряд других более сложных типа $(n, n2\alpha)$ для области легких ядер. Библиотека EAF-2010 представлена в области энергий нейтронов до 60 МэВ. Обе библиотеки представлены в формате endf-6 [5], рекомендованном Международной комиссией по ядерным данным в качестве унифицированного стандартного формата представления оцененных ядерных данных. На основе этих библиотек сформирована объединенная стартовая библиотека активационных сечений с рабочим названием TRACT/ACT.

Библиотека радиационных данных радиоактивных ядер

Второй по важности библиотекой ядерных данных для решения задачи активации материалов является библиотека радиационных характеристик радиоактивных ядер, которые образуются в ядерных реакциях.

Современные библиотеки включают распадные данные для ~3800 радиоактивных изотопов от ${}^3\text{H}$ до ${}^{257}\text{Fm}$, в состав которых входят все изотопы, которые могут быть образованы в ядерных реакциях. В настоящее время наиболее полными и основанными на результатах как современных экспериментов, так и на современных методах их анализа являются библиотеки радиационных параметров изотопов, подготовленные в проектах ENDF/B-VII.1 [9] и JEFF-3.3 [11]. На их основе нами скомпонована библиотека TRACT/DEC, которая в качестве стартовой

версии включена в базу ядерных данных для программы TRACT/2018.

Библиотека оцененных ядерных данных по выходам продуктов деления

Выходы продуктов деления являются важнейшими исходными данными для расчетов радиационных характеристик ОЯТ. Инженерные расчеты в области реакторной физики используют порядка тысячи значений выходов продуктов деления, для чего требуются доступные базы ядерных данных в виде организованных файлов с заранее согласованной структурой при их форматном представлении, и при этом надежность расчетов ЯЭУ зависит от качества и достоверности данных. В настоящее время подготовлены новые версии национальных библиотек по выходам продуктов деления, такие как TENDL-2015 [10], BROND, CENDL-3.1, JEFF-3.1, JENDL-4.0 и ENDF/B-VII.1.

Выполненный анализ национальных библиотек оцененных нейтронных ядерных данных по выходам продуктов деления позволил сформировать объединенную библиотеку по выходам продуктов деления, состоящую из двух частей:

- для 44 актинидов от ${}^{227}\text{Th}$ до ${}^{256}\text{Fm}$ данные приведены для вынужденного деления нейтронами;
- для 15 актинидов данные по выходам продуктов деления приведены при спонтанном делении.

Библиотека выходов и энергий альфа-частиц при радиоактивном распаде TRACT/ALPHA

На основе анализа современных экспериментальных данных сформированы наборы ядерных данных по выходам дискретных альфа-частиц при радиоактивном распаде тяжелых элементов. Данные подготовлены с использованием информации, представленной в [6] для области ядер от прометия ${}^{145}\text{Pm}$ до ${}^{257}\text{Fm}$, радиоактивный распад которых сопровождается альфа-излучением. Отметим, что у изотопа радона ${}^{219}\text{Rn}$ энергия альфа-излучения достигает величины в 6,6 МэВ. Для актинидов энергии альфа-частиц не превышают 6,1 МэВ.

Библиотека сечений (α, n) реакций на легких элементах TRACT/AN

Библиотека сечений (α, n) реакций на легких элементах TRACT/AN сформирована на основе компиляции, подготовленной для проекта JENDL/AN-2005 [7], и включает данные для 17 изотопов: ${}^6\text{Li}$, ${}^7\text{Li}$, ${}^9\text{Be}$, ${}^{10}\text{B}$, ${}^{11}\text{B}$, ${}^{12}\text{C}$, ${}^{13}\text{C}$, ${}^{14}\text{N}$, ${}^{15}\text{N}$, ${}^{17}\text{O}$, ${}^{18}\text{O}$, ${}^{19}\text{F}$, ${}^{23}\text{Na}$, ${}^{27}\text{Al}$, ${}^{28}\text{S}$, ${}^{29}\text{Si}$, ${}^{30}\text{Si}$. Библиотека JENDL/AN-2005 подготовлена в формате endf-6 и включает различные каналы ядерных реакций (α, xn) в области энергий α -частиц до 15 МэВ.

Библиотека фотоядерных сечений на делящихся изотопах TRACT/PN

Библиотека фотоядерных данных сформирована для делящихся изотопов от ^{232}Th до ^{248}Cm . Данные для делящихся ядер отобраны из международной библиотеки оцененных фотоядерных данных [8], созданной под руководством МАГАТЭ группой международных экспертов для области ядер от дейтерия до плутония. Ряд данных отобраны из библиотек фотоядерных данных проекта ENDF/B-VII.1 [9] и TENDL-2015 [11]. На основе этих библиотек [8–10] сформирована библиотека сечений (γ, n) и (γ, f) реакций TRACT/PN.

Решение тестовых задач для отработки алгоритма расчета энерговыделения в ОЯТ и РАО

Точность расчета энерговыделения в ОЯТ и РАО определяется как точностью расчета их нуклидного состава на определенный момент времени, так и точностью ядерных данных. Поэтому появляется необходимость в верификации и валидации используемых программных средств на основе сравнения результатов расчетов и реперных экспериментов, при отборе которых должны учитываться подробность и полнота описаний условий проведения измерений, полученных результатов и их погрешностей.

На основе анализа экспериментов, которые могут рассматриваться в качестве реперных для задачи верификации кода нуклидной кинетики, отобраны наиболее информативные измерения, содержащие полный объем информации, требуемой для расчетного моделирования.

Тестовая задача E1 — измерения остаточного тепловыделения продуктов деления [12]

В качестве первого шага по тестированию разрабатываемого кода отобраны экспериментальные данные по тепловыделению [12], которые использовались в различных международных сравнительных тестах [13–15]. В работе [12] для времени выдержки T_g от 10 до 10^5 с приведены результаты измерений тепловыделения $E(\beta+\gamma)$ продуктов деления тепловыми нейтронами ядер-мишеней ^{239}Pu , ^{235}U и ^{235}U , облученных в течение небольшого промежутка времени $2 \cdot 10^4$ с ($\sim 5,5$ часов).

Число делений в образцах было определено радиохимическим методом по активности радиоизотопов ^{99}Mo , ^{140}La , ^{147}Nd . Для урана-235 точность определения тепловыделения на одно деление ΔE находится в пределах $\pm 6\%$.

Нуклидный состав исходных моноизотопных ядер-мишеней ^{235}U , ^{235}U и ^{239}Pu как при облучении до $2 \cdot 10^4$ с (5,5 часов), так и в процессе их выдержки, рассчитан по программе TRACT/2018. При таких относительно малых временах облучения

начальный состав мишеней меняется незначительно, и на результаты расчетов нуклидного состава и тепловыделения основное влияние оказывают ядерные данные по сечениям деления тепловыми нейтронами, независимым выходам продуктов деления, радиационным параметрам продуктов деления и актинидов.

В расчетах использовались ядерные данные по выходам продуктов деления ядер ^{235}U , ^{235}U , ^{239}Pu из библиотеки JEFF-3.2. Эта библиотека выбрана в качестве основного источника данных для программы TRACT/FPYLD, так как в ней собраны наиболее надежные современные данные по выходам продуктов деления для ^{235}U , которые используются в большинстве расчетных исследований по уран-ториевому циклу. Анализ результатов моделирования (рис. 1–3) позволяет заключить, что для коротких времен облучения «тонких» мишеней ^{235}U и ^{239}Pu получено удовлетворительное согласие расчетных и экспериментальных данных, что свидетельствует о надежности алгоритма разработанного кода нуклидной кинетики и отобранных библиотек ядерных данных по выходам продуктов деления и радиационным параметрам. Однако для ^{235}U при малых временах выдержки получено до 15% превышение в расчете тепловыделения. На это обстоятельство указано также в международном перечне требований на уточнение ядерных данных HPRC (Nuclear Data High Priority Request List) [16], который формируется международными экспертами в рамках кооперации WPEC (Working Party on International Nuclear Data Evaluation Cooperation) [17]. Для уточнения этих данных ведется активная работа как по линии МАГАТЭ (в 2017 году закончена программа по их пересмотру для большой группы актинидов, и предварительные оцененные данные были представлены в открытом пользования для их тестирования), так и в рамках международного сотрудничества по оценке ядерных данных (WPEC).

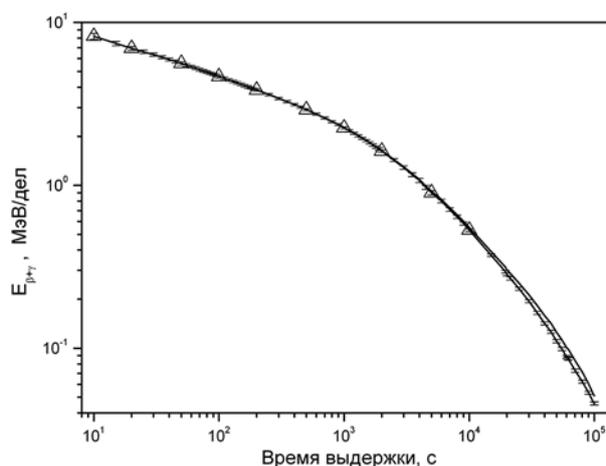


Рис. 1. Экспериментальные и расчетные данные по тепловыделению продуктов деления ^{235}U

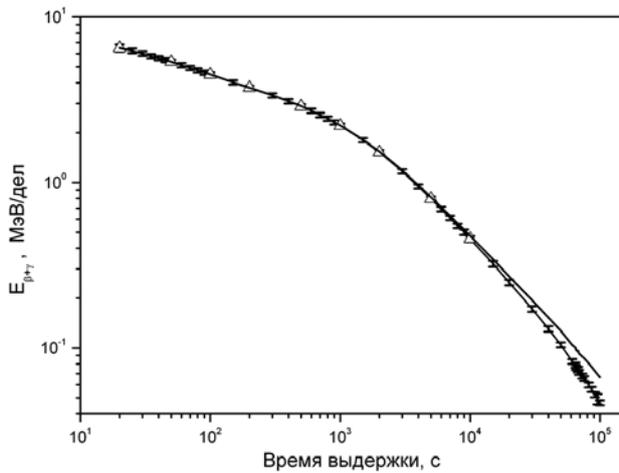


Рис. 2. Экспериментальные и расчетные данные по тепловыделению продуктов деления ^{239}Pu

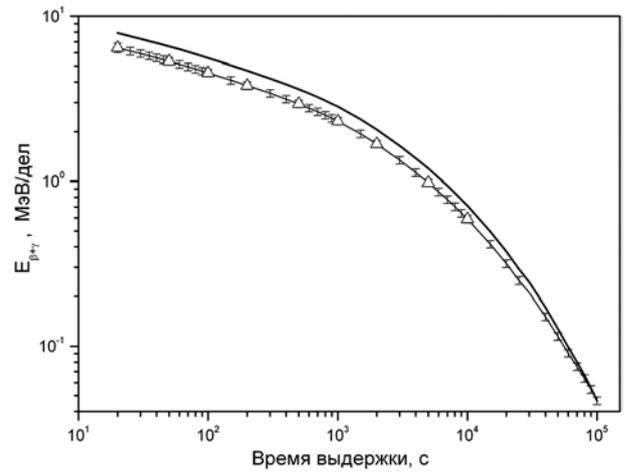


Рис. 3. Экспериментальные и расчетные данные по тепловыделению продуктов деления ^{233}U

Тестовая задача E2 — измерения остаточного энерговыделения продуктов деления [18–20]

В 80-е годы прошлого века в трех ведущих научных центрах мира (ORNL, LOWELL (США), YAYOI (Япония) [18–20]) выполнены прецизионные измерения спектральных характеристик

излучения и остаточного энерговыделения в облученных мишенях, содержащих изотопы тория, урана и плутония. Результаты этих измерений являются наиболее информативными и используются в различных международных тестах для проверки как ядерных данных, так и методов расчета нуклидного состава и радиационных

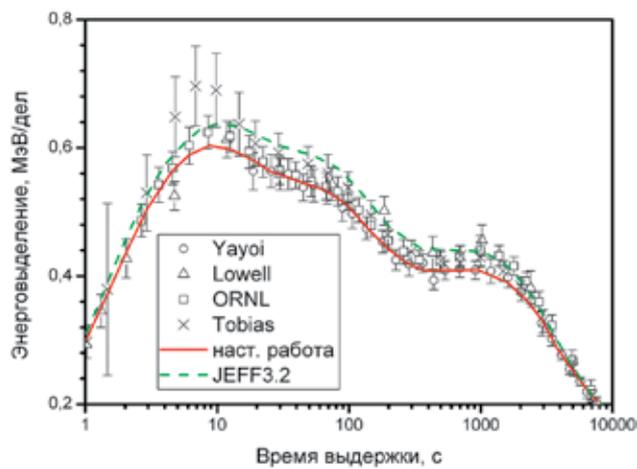


Рис. 4. Зависимость энерговыделения ^{239}Pu (β -компоненты) от времени выдержки

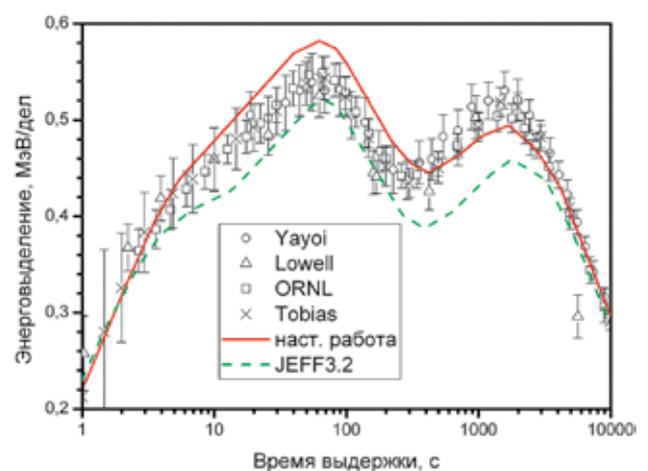


Рис. 5. Зависимость энерговыделения ^{239}Pu (γ -компоненты) от времени выдержки

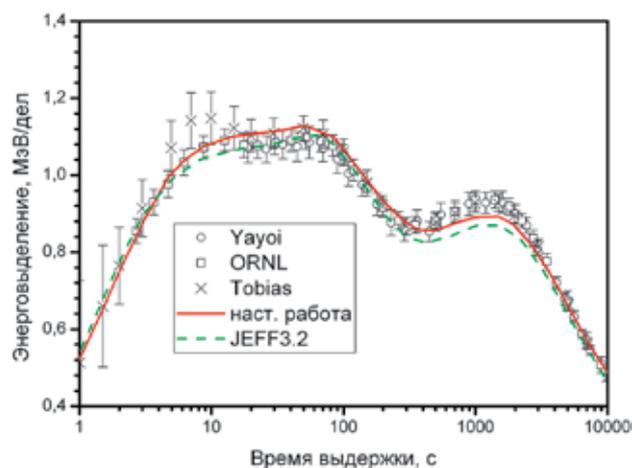


Рис. 6. Зависимость полного энерговыделения ^{239}Pu от времени выдержки

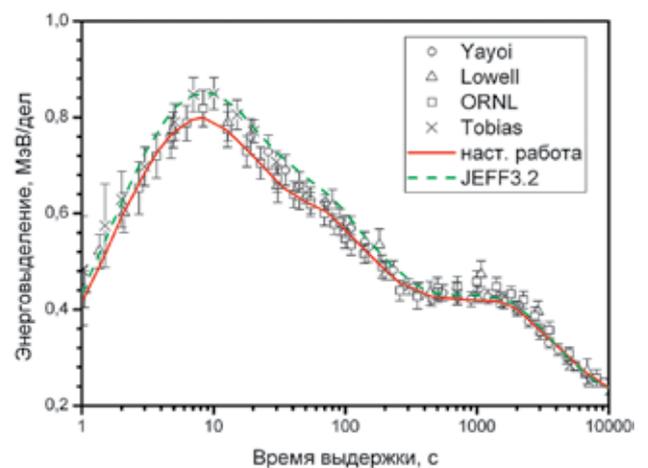


Рис. 7. Зависимость энерговыделения ^{235}U (β -компоненты) от времени выдержки

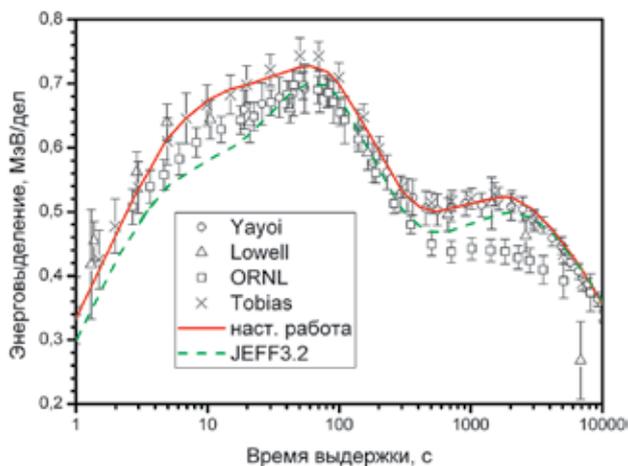


Рис. 8. Зависимость энергосвечения ^{235}U (γ -компоненты) от времени выдержки

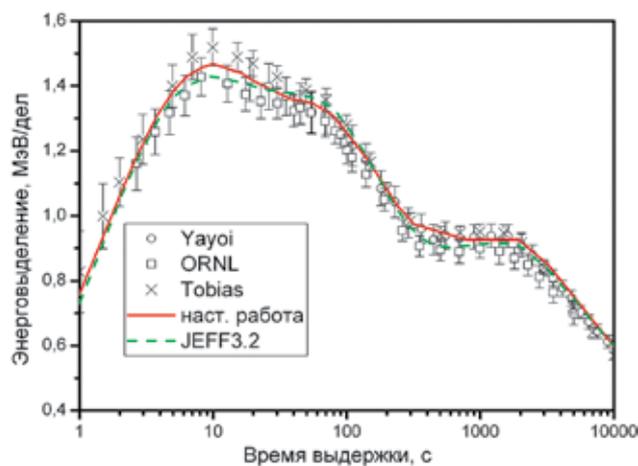


Рис. 9. Зависимость полного энергосвечения ^{235}U от времени выдержки

характеристик ядерного топлива при малых временах облучения и выдержки.

На рис. 4–9 показано сравнение расчетных и экспериментальных данных А. Tobias [13], ORNL [18], (LOWELL [19], YAYOI [20]). Расчеты и сравнение выполнены для двух актинидов — ^{235}U и ^{239}Pu . На рисунках также приведены аналогичные расчетные данные, подготовленные на основе библиотеки JEFF-3.2, которая в настоящее время включает наиболее современные данные для выходов продуктов деления и их радиационных характеристик («распадных данных»).

Оценивая результаты расчетов, выполненных по программе TRACT/2018, отметим, что для ^{235}U и ^{239}Pu как для β - и γ -компонент тепловыделения, так и для полного тепловыделения получено удовлетворительное согласие экспериментальных и расчетных данных, что может свидетельствовать о корректном выборе библиотек ядерных данных для этих изотопов в наших расчетах. Эти результаты также подтверждаются результатами анализа по задаче Е1.

Практическая апробация программы нуклидной кинетики

Радиационные характеристики ОЯТ реактора ВВЭР-440

Расчеты составов ОЯТ, образующихся в процессе работы реакторов ВВЭР-440, а также их различные радиационные характеристики были выполнены с использованием разработанного кода нуклидной кинетики. Исходная библиотека нейтронных активационных сечений взята в 315-групповом приближении (разбиение TRIPOLI) и свернута в одноклассовое представление по соответствующему нейтронному спектру реактора ВВЭР-440.

Для реактора ВВЭР-440 в качестве нейтронного поля, характеризующего активную зону реактора, выбран нейтронный спектр в области центральной части активной зоны

реактора ВВЭР-440 в окрестности точки на высоте $h = 120$ см от низа корпуса реактора [21]. Данная область реактора ВВЭР-440 является наиболее энергонагруженной с наибольшим значением нейтронных потоков в ее окрестности.

Для реактора ВВЭР-440 было рассмотрено топливо в виде двуоксида урана UO_2 (3,6% обогащение по ^{235}U), которое используется в ВВЭР-440 до выгорания 30 ГВт-сут/т UO_2 . Данный вариант расчета выгорания топлива используется для целей верификации программ нуклидной кинетики, а также рассмотрен в справочнике [22].

В целом для полученного состава ОЯТ выполнены расчеты изменения его изотопного состава для времени до 10000 лет. Представляет интерес сравнить полученные результаты с аналогичными данными из справочника [22] (рис. 10). Отметим, что сравниваемые данные достаточно близки. Однако если в справочнике рассмотрено не более 460 продуктов деления от ^{62}Zn до ^{166}No , то наши результаты дают информацию о примерно 650 продуктах деления для этой области ядер. Также получена информация об изотопах в области от водорода до цинка (порядка 114 изотопов) и от гольмия до тория.

Выполнена оценка остаточного энергосвечения ОЯТ за счет излучения γ -квантов, α - и β -частиц (рис. 11).

В «свежем» ОЯТ содержится большое количество короткоживущих продуктов деления и легких изотопов, распад которых сопровождается гамма-излучением. На рис. 12 полученные расчетные данные по выходам γ -излучения сравниваются с аналогичными данными из справочника [22]. В целом получено хорошее согласие расчетных данных с тестовыми. Заметим, что отсутствие в справочнике короткоживущих ядер приводит к занижению данных по выходу γ -излучения. На рис. 13 представлены расчетные данные по энергетическому распределению γ -излучения для различных времен выдержки. Представленные результаты дают

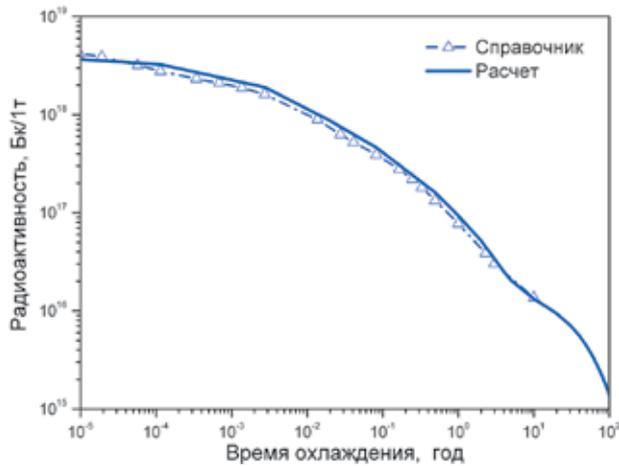


Рис. 10. Сравнение временных зависимостей расчетных и справочных данных по спаду накопленной активности для ОЯТ

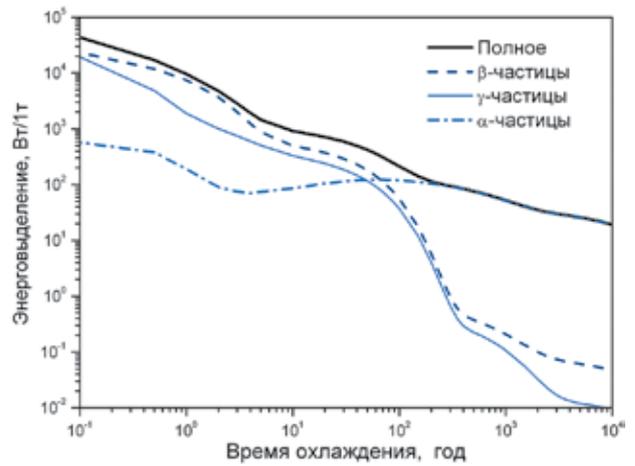


Рис. 11. Полное энерговыделение ОЯТ и его компоненты за счет излучения бета, гамма и альфа частиц

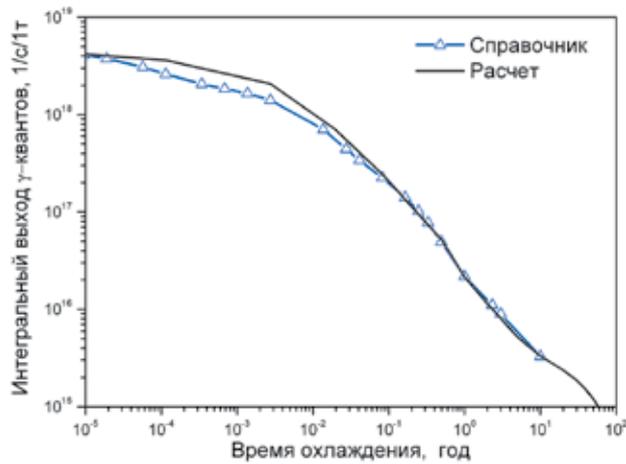


Рис. 12. Сравнение расчетных и справочных данных по выходу гамма-излучения ОЯТ

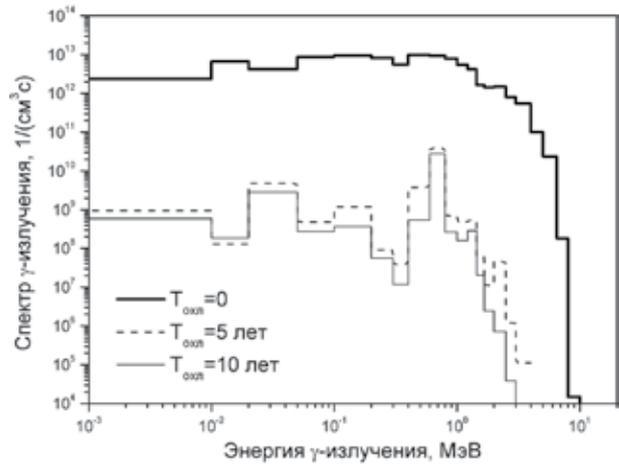


Рис. 13. Энергетические спектры гамма-излучения ОЯТ для различных времен выдержки

полное представление о составе и радиационных характеристиках ОЯТ.

Радиационные характеристики РАО после переработки ОЯТ реактора ВВЭР-440

Рассмотрим радиационные характеристики РАО, полученных после переработки ОЯТ реактора ВВЭР-440. Ядерное топливо в виде двуоксида урана UO_2 (3,6% обогащение по ^{235}U) используется в ВВЭР-440 до выгорания 30 ГВт·сут/т UO_2 , затем выдерживается до 5 лет и направляется на переработку на ФГУП «ПО «Маяк».

При переработке из ОЯТ извлекается уран и плутоний. В полученных РАО может быть до 0,01% урана и 0,025% плутония.

Согласно выполненным расчетам, при переработке 1 т ОЯТ образуется 154,81 кг РАО. После этапа остекловывания данного количества РАО образуется от 1,5 до 1,7 т стекломассы, в которой содержится 154,81 кг РАО, что составляет от 9,1 до 10,32% по массе стекла. Далее примем, что после остекловывания 154,81 кг РАО образуется 1600 кг стекломассы объемом 0,64 м³

при плотности стекла 2,5 г/см³. Таким образом, в 1 кг остеклованных РАО содержится 96,75 г РАО.

Для полученного состава РАО выполнены расчеты изменения его изотопного состава для времен охлаждения до 10000 лет. Затем были выполнены вычисления остаточного энерговыделения РАО за счет излучения бета-частиц, альфа-частиц и гамма-квантов (рис. 14). Данные приведены на 1 кг исходного состава РАО и на 1 кг остеклованного РАО.

РАО представляют собой источник гамма-излучения. На момент переработки ОЯТ, которое было выдержано в течение 5 лет, энергетический спектр гамма-излучения РАО представлен на рис. 15 в сравнении со спектрами ОЯТ и урана и плутония, входящих в ОЯТ. Видно, что для рассмотренного ОЯТ вклад в гамма-излучение изотопов урана и плутония незначителен. Интегральный выход гамма-излучения для ОЯТ, изотопов урана и плутония равен $5,24 \cdot 10^{10}$, $9,72 \cdot 10^5$ и $5,38 \cdot 10^7$ 1/(см³·с) соответственно. Таким образом, выход гамма-излучения в РАО

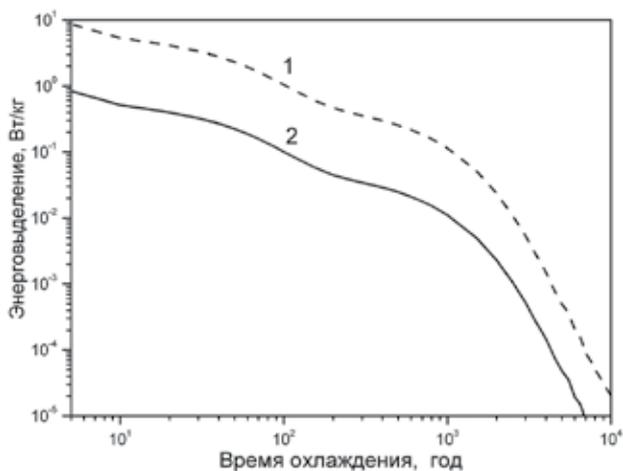


Рис. 14. Энерговыделение в РАО (1) и в остеклованном РАО (2).

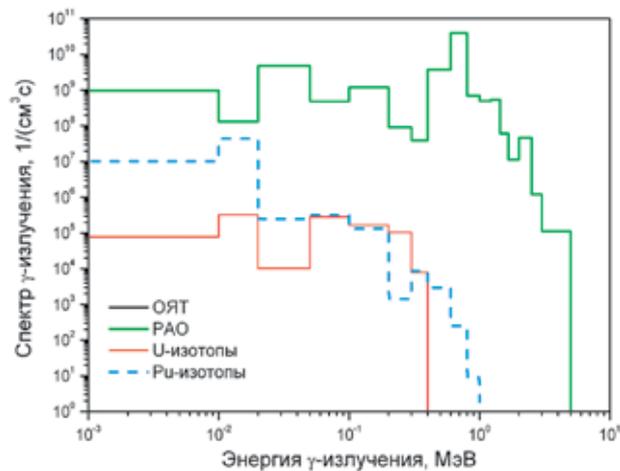


Рис. 15. Энергетические спектры γ -излучения ОЯТ, РАО, изотопов U и Pu для выдержки 5 лет

численно практически совпадает с гамма-излучением ОЯТ даже после извлечения из ОЯТ урана и плутония.

Заключение

На основе критического анализа качества оцененных ядерных данных в различных зарубежных библиотеках для обеспечения расчетов подготовлены новые наборы оцененных файлов ядерных данных для широкой совокупности ядер от водорода до фермия. Сформирована библиотека ядерно-физических данных TRACT/ACT, радиационных параметров радиоактивных изотопов TRACT/DEC, выходов продуктов деления для процессов вынужденного деления и спонтанного деления TRACT/FPYLD, выходов и энергий альфа-частиц при радиоактивном распаде актиноидов TRACT/ALPHA, сечений (α, n) реакций на легких элементах TRACT/AN, сечений фотоядерных реакций (γ, n) и (γ, f) TRACT/PN для всех доступных ядер от тория-232 до кюрия-248.

Для целей верификации программы TRACT/2018 и валидации подготовленных библиотек ядерно-физических данных сформирован набор тестовых задач, с помощью которого оценен уровень надежности проводимых расчетных исследований характеристик ОЯТ и РАО.

Полученные в данной работе результаты расчетов показали хорошее согласие с экспериментальными данными (в рамках погрешностей экспериментов). Исключение составил только расчет тепловыделения ²³⁵U. Решение этой проблемы связано с уточнением ядерных данных по выходам продуктов деления, а при решении практических задач это не критично.

Проведенные расчетные исследования и анализ полученных результатов позволяют сделать следующие выводы:

- алгоритм расчета трансмутации и активации программы TRACT/2018 работает корректно;
- отобранные в состав библиотеки ядерных данных программы TRACT/2018 активационные

данные по нейтронным сечениям в целом позволяют достаточно надежно моделировать тестовые задачи.

С целью демонстрации расчетных возможностей и апробации комплекса оценен состав ОЯТ реактора ВВЭР-440 и для него рассчитаны на время выдержки до 10000 лет: остаточное энерговыделение, радиоактивность, выходы гамма-излучения. Также для различных времен выдержки (0, 5 и 10 лет) оценены спектры гамма-излучения.

В целом можно заключить, что создаваемый комплекс программ и требуемых библиотек ядерно-физических данных позволяет адекватно описать экспериментальные данные и может служить инструментом для проведения более сложных расчетов и анализа интегральных реакторных и имитационно-реакторных экспериментов.

Литература

1. Дорофеев А. Н., Большов Л. А., Линге И. И., Уткин С. С., Савельева Е. А. Стратегический мастер-план исследований в обоснование безопасности сооружения, эксплуатации и закрытия пункта глубокого захоронения радиоактивных отходов // Радиоактивные отходы. — 2017. — № 1. — С. 33–42.
2. Блохин П. А., Самойлов А. А. Радиологическое обоснование контроля содержания радионуклидов в контексте обеспечения долговременной безопасности пунктов захоронения // Мед. радиология и радиац. безопасность. — 2017. — Т. 62. — № 4. — С. 17–23.
3. Sublet J.-Ch., Packer L. W., Kopecky J., Forrest R. A., Koning A. J. and Rochman D. A. The European Activation File: EAF-2010 neutron-induced cross section library. — EASY Documentation Series, Report CCFE-R (10) 05, UK, 2010.
4. Блохин А.И., Блохин Д. А., Манохин В. Н., Суначев И. В. Оценка сечений пороговых реакций для библиотеки активационных данных БРОНД-3/А: Препринт ФЭИ-3226. — Обнинск, ГНЦ РФ — ФЭИ, 2012. — 28 с.

5. *Herman M.* ENDF-102, endf-6 data formats and procedures for the evaluated nuclear data file ENDF-VII. — BNL-NCS 44945-01/04-Rev (2005).
6. Энергии и выходы альфа-частиц при радиоактивном распаде актинидов. — URL: <http://www.ndc.bnl.gov/>.
7. *Murata T. et al.* Evaluation of the (α , xn) Reaction Data for JENDL/AN-2005. JAEA-Research 2006-052 (July 2006). — URL: <http://www.ndc.jaea.go.jp/ftpnd/jendl/jendl-an-2005.html>.
8. *Chadwick M., Oblozinsky P., Blokhin A. et al.* Handbook of Photonuclear Data for Applications: cross-sections and spectra. — Tech. Report IAEA-TECDOC-1178, Vienna, IAEA, October 2000.
9. *Chadwick M.B., Herman M., Oblozinsky P. et al.* ENDF/B-VII.1 nuclear data for science and technology: Cross sections, covariances, fission product yields and decay data // Nuclear Data Sheets, 112(12): 2887-2996 (2011).
10. *Koning A.J., Rochman D., Kopecky J. et al.* TENDL-2015: TALYS-based Evaluated Nuclear Data Library. — URL: https://tendl.web.psi.ch/tendl_2015/tendl2015.html.
11. URL: <http://www.oecd-nea.org/dbdata/JEFF33/>.
12. *John L. Yarnell, Philip J. Bendt.* Calorimetric Fission Product Decay Heat Measurements for ^{239}Pu , ^{235}U , and ^{235}U . — Prepared for Office of Nuclear Regulatory Research US Nuclear Regulatory Commission, Washington, DC 20555, Report NUREG/CR-0349 (LA-7452-MS Informal Report), 1978.
13. *Tobias A.* Decay Heat Testing of the UK-ENDF/B-IV format fission product decay data file. — Report DIDWG/(77)P159, 1977
14. *Duchemin B., Nordborg C.* Decay Heat Calculation — An International Nuclear Code Comparison. — NEACRP-319 “L”, France, 1989.
15. *Sublet J.-C., Maekawa F.* Decay Power: A Comprehensive Experimental Validation. — Report CEA-R-6213, 2009, France.
16. NEA Nuclear Data High Priority Request List. — URL: <http://www.oecd-nea.org/dbdata/hprl/>.
17. WPEC Working Party on International Nuclear Data Evaluation Co-operation. — URL: <https://www.oecd-nea.org/science/wpec/>.
18. *Dickens J.K. et al.* // Nucl.Sci. Eng., vol 74, p. 106 (1980); vol. 78, p. 126 (1981).
19. *Seabury E.H. et al.* // Proc. of Int. Conf. on Nucl. Data for Science and Technology. — May 19–24, 1997, Trieste. — P. 835 (1997).
20. *Akiyama M. et al.* // Jour. At. En. Soc., vol. 24, no. 9, p. 709 and no. 10, p. 803 (1982).
21. *Горохов А. К., Драгунов Ю. Г., Лунин Г. Л., Новиков А. Н., Цофин В. И., Ананьев Ю. А.* Обоснование нейтронно-физической и радиационной частей проектов ВВЭР. — М., ИздАТ, 2004.
22. *Колобашкин В. М., Рубцов П. М., Ружанский П. А., Сидоренко В. Д.* Радиационные характеристики облученного ядерного топлива: Справочник. — М.: Энергоатомиздат, 1983.

Информация об авторах

Блохин Анатолий Иванович, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Институт проблем безопасного развития атомной энергетики (115191, Москва, ул. Б. Тульская, д. 52), e-mail: bai@ibrae.ac.ru.

Блохин Павел Анатольевич, младший научный сотрудник, Институт проблем безопасного развития атомной энергетики (115191, Москва, ул. Б. Тульская, д. 52), e-mail: blokhin@ibrae.ac.ru.

Сипачев Иван Васильевич, главный специалист, Институт проблем безопасного развития атомной энергетики (115191, Москва, ул. Б. Тульская, д. 52), e-mail: sipachev@ibrae.ac.ru.

Библиографическое описание данной статьи

Блохин А. И., Блохин П. А., Сипачев И. В. Возможности расчетного кода TRACT для решения задач характеристики радионуклидного состава РАО и ОЯТ // Радиоактивные отходы. — 2018. — № 2 (3). — С. 95–104.

CAPABILITIES CODE TRACT TO SOLVE PROBLEMS OF CHARACTERIZATION RADIOACTIVE WASTE AND SPENT FUEL

Blokhin A. I., Blokhin P. A., Sipachev I. V.

Nuclear Safety Institute of RAS, Moscow, Russian Federation

Article received 23 May 2018

The paper presents the calculation capabilities of the nuclide kinetics code TRACT, its verification on the basis of test experiments on the heat release of fission products. For the VVER-440 reactor radiation characteristics of spent fuel and radioactive waste were analyzed for cooling times up to 10000 years.

Keywords: isotope kinetics, code TRACT, verification, decay heat, spent fuel, radioactive waste, gamma-radiation, VVER-440.

References

1. Dorofeev A. N., Bolshov L. A., Linge I. I., Utkin S. S., Saveleva E. A. Strategic Master Plan for R&D Demonstrating the Safety of Construction, Operation and Closure of a Deep Geological Disposal Facility for Radioactive Waste. *Radioactive Waste*, 2017, no. 1, pp. 33–42. (In Russian).
2. Blokhin P. A., Samoylov A. A. Radiologicheskoe obosnovanie kontrolya sodержaniya radionuklidov v kontekste obespecheniya dolgovremennoi besopasnosti punktov zahoroneniya. *Med. Radiologiya i radiac. Besopasnost*, 2017, vol. 62, no. 4, pp. 17–23.
3. Sublet J.-Ch., Packer L. W., Kopecky J., Forrest R. A., Koning A. J. and Rochman D. A. The European Activation File: EAF-2010 neutron-induced cross section library. EASY Documentation Series, Report CCFE-R (10) 05, UK, 2010.
4. Blokhin A. I., Blokhin D. A., Manokhin V. N., Sipachev I. V. Ocenka sechenii porogovyh reakcii dlya biblioteki aktivacionnyh dannyh BROND-3/A. Preprint FEI-3226, Obninsk, FEI Publ., 2012, 28 p.
5. Herman M. ENDF-102, endf-6 data formats and procedures for the evaluated nuclear data file ENDF-VII. BNL-NCS 44945-01/04-Rev (2005).
6. Energii I vyhody alfa-chastich pri radioaktivtom raspade aktinidov. Available at <http://www.ndc.bnl.gov/>.
7. Murata T. et al. Evaluation of the (α, xn) Reaction Data for JENDL/AN-2005. JAEA-Research 2006-052 (July 2006). Available at <http://www.ndc.jaea.go.jp/ftpnd/jendl/jendl-an-2005.html>.
8. Chadwick M., Oblozinsky P., Blokhin A. et al. Handbook of Photonuclear Data for Applications: cross-sections and spectra. Tech. Report IAEA-TEC-DOC-1178, Vienna, IAEA, October 2000.
9. Chadwick M. B., Herman M., Oblozinsky P. et al. ENDF/B-VII.1 nuclear data for science and technology: Cross sections, covariances, fission product yields and decay data. Nuclear Data Sheets, 112(12):2887-2996 (2011).
10. Koning A. J., Rochman D., Kopecky J. et al. TENDL-2015: TALYS-based Evaluated Nuclear Data Library. Available at https://tendl.web.psi.ch/tendl_2015/tendl2015.html.
11. Available at <http://www.oecd-nea.org/dbdata/JEFF33/>.
12. John L. Yarnell, Philip J. Bendt. Calorimetric Fission Product Decay Heat Measurements for ^{239}Pu , ^{235}U , and ^{235}U . Prepared for Office of Nuclear Regulatory Research US Nuclear Regulatory Commission, Washington, DC 20555, Report NUREG/CR-0349 (LA-7452-MS Informal Report), 1978.
13. Tobias A. Decay Heat Testing of the UK-ENDF/B-IV format fission product decay data file. Report DIDWG/(77)P159, 1977.
14. Duchemin B., Nordborg C. Decay Heat Calculation – An International Nuclear Code Comparison. NEACRP-319 “L”, France, 1989.
15. Sublet J.-C., Maekawa F. Decay Power: A Comprehensive Experimental Validation. Report CEA-R-6213, 2009, France
16. NEA Nuclear Data High Priority Request List. Available at <http://www.oecd-nea.org/dbdata/hprl/>.
17. WPEC Working Party on International Nuclear Data Evaluation Co-operation. Available at <https://www.oecd-nea.org/science/wpec/>.
18. Dickens J. K. et al. Nucl. Sci. Eng., vol. 74, p. 106 (1980), vol. 78, p. 126 (1981).
19. Seabury E. H. et al. Proc. of Int. Conf. on Nucl. Data for Science and Technology, May 19–24, 1997, Trieste, p. 835 (1997).
20. Akiyama M. et al. Jour. At. En. Soc., vol. 24, no. 9, p. 709 and no. 10, p. 803 (1982).
21. Gorohov A. K., Dragunov Yu. G., Lunin G. L., Novikov A. N., Tsofin V. I., Ananiev Yu. A. Obosnovanie neitronno-fizicheskoi i radiacionnoi chastei proektov VVER. Moscow, Izdat Publ., 2004.
22. Kolobashkin V. M., Rubsov P. M., Ruzhanskiy P. A., Sidorenko V. D. Radiacionnye harakteristiki oblu-chenogo yadernogo topliva. Spravochnik. Moscow, Energoatomizdat Publ., 1983.

Information about the authors

Blokhin Anatoly Ivanovich, Ph.D., senior research associate, Nuclear Safety Institute of RAS (52, Bolshaya Tulsкая st., Moscow, Russia, 115191), e-mail: bai@ibrae.ac.ru.

Blokhin Pavel Anatolievich, senior researcher, Nuclear Safety Institute of RAS (52, Bolshaya Tulsкая st., Moscow, Russia, 115191), e-mail: blokhin@ibrae.ac.ru.

Sipachev Ivan Vasilievich, chief specialist, Nuclear Safety Institute of RAS (52, Bolshaya Tulsкая st., Moscow, Russia, 115191), e-mail: sipachev@ibrae.ac.ru.

Bibliographic description

Blokhin A. I., Blokhin P. A., Sipachev I. V. Capabilities code TRACT to solve problems of characterization radioactive waste and spent fuel. *Radioactive Waste*, 2018, no. 2 (3), pp. 95–104