

Д. С. Барабанова, Г. М. Жердев¹

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», г. Саров Нижегородской обл.

¹АО «ГНЦ РФ – ФЭИ им. А. И. Лейпунского», г. Обнинск Калужской обл.

В 2012 г. в РФЯЦ-ВНИИЭФ был создан программный модуль CRYSTAL [1] расчета выгорания ядерного топлива и остаточного энерговыделения, используемый в расчетах реакторных установок, как на тепловых, так и на быстрых нейтронах. Особенностью модуля CRYSTAL является учет наработки в топливе полного множества нуклидов (более 1300) и возможность использования модуля, как в групповых расчетах реакторных установок, так и в расчетах по методу Монте – Карло.

Классы решаемых задач:

- нестационарный расчет изменения изотопного состава топливных ячеек в нейтронном потоке на стадии критичности;
- расчет нестационарного источника запаздывающих нейтронов прямым образом на основе данных по бета-распадам на стадии критичности;
- нестационарный расчет изменения изотопного состава и энерговыделения топливных ячеек обработанных ТВС;
- нестационарный расчет источников нейтронного и гамма-излучения для обработанных ТВС.

На рис. 1 показана сложность решаемой задачи на примере схемы изотопного преобразования ⁸⁶Kr, как его наработка зависит от ядер-предшественников и от ядер-потомков. Для нахождения концентраций изотопов решается жесткая линейная система дифференциальных уравнений методом Розенброка – Ваннера.

Немаловажным фактором при численном моделировании изменения изотопного состава является

учет погрешностей ядерных данных, используемых в расчетах. В данной работе описывается методика создания библиотеки погрешностей ядерных данных по радиоактивным распадам. В качестве ее возможной основы для модуля рассматривается библиотека данных по радиоактивным распадам системы констант БНАБ [2], над сопровождением и развитием которой в течение многих лет работают в АО ГНЦ РФ – ФЭИ г. Обнинск. Библиотека широко используется в РФ. В докладе описываются методики получения распадных данных в формате БНАБ.

Цель работы – комплексно оценить погрешности радиационных характеристик, спектров проникающих излучений и остаточного энерговыделения топлива, а также проанализировать результаты и продемонстрировать применение этих данных в нейтронно-физических расчетах.

В работе использовались отечественная, американская, европейская и японская библиотеки, в которых данные хранятся в едином международном формате ENDF-6 [5]. Более подробно остановимся на отечественной библиотеке, рис. 2.

БНАБ – система константного обеспечения, аттестованная Государственной Службой Стандартных Справочных Данных России в качестве рекомендованных данных. Название появилось по первым буквам фамилий авторов: И. И. Бондаренко, М. Н. Николаев, Л. П., Абагян, Н. О. Базаянц. За рубежом ее называют ABBN (по алфавиту).

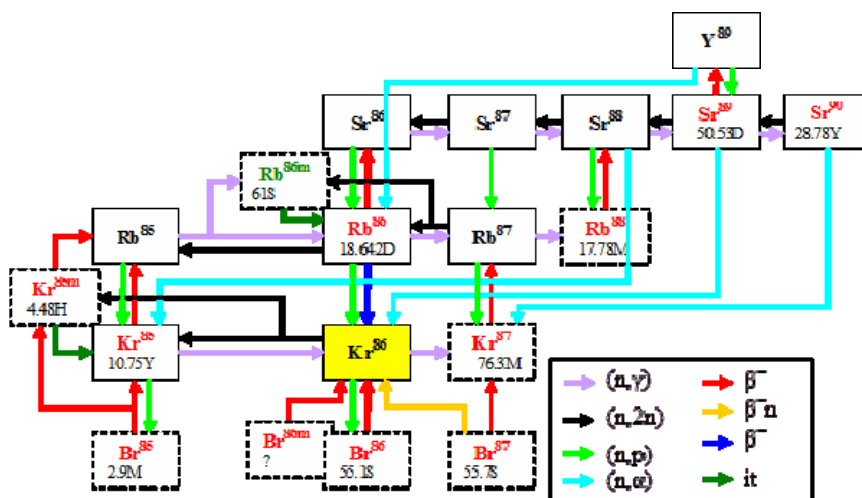


Рис. 1. Неявный характер связей между ядрами-потомками и ядрами предшественниками ⁸⁶Kr

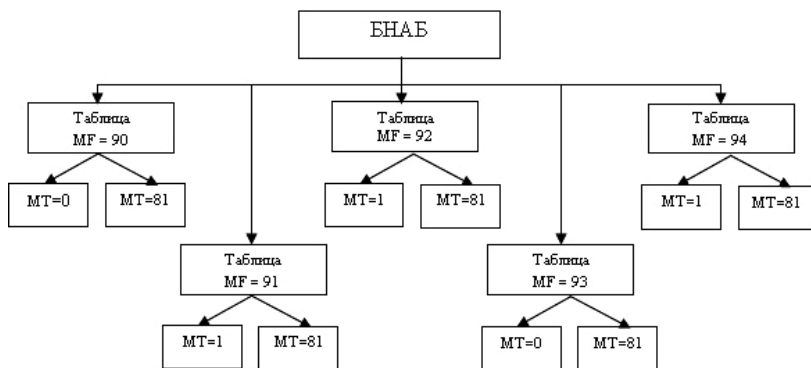


Рис. 2. Структура библиотеки

Для обработки файлов оцененных данных была использована, разработанная ранее программа [6] на языке программирования ФОРТРАН под названием DECAPRO (**Decay Processing**). Она извлекает распадные данные файла MF = 8 и формирует таблицы распадных¹ данных в формате БНАБ с их погрешностями (см. рис. 2). Данные содержатся в главной таблице (MF = 90), таблицах спектров (MF = 91–94).

Параллельно с данными формировались таблицы БНАБ, содержащие погрешности этих данных (MT = 81). Библиотека погрешностей была сформирована отдельно, так как предполагается что погрешности несущественно зависят от оценки.

В приведенных ниже табл. 1–4 представлены полученные программой таблицы распадных данных и их погрешностей для изотопов урана из ENDF/B7.

¹ Под термином «распадные данные» подразумеваются «данные по радиоактивным распадам».

Таблица 1

Пример полученной главной таблицы распадных данных для изотопов урана из библиотеки

```

NAM=U          LIB=ENDF MF= 90 MT= 0 Z = 92.
                LT = 44 LC= 12 LS= 12 LF = (I4,A2,E9.0,A1,5E7.0,3E8.0)
* A   T1/2      BETA+  BETA-   IT   ALFA   SF     E-GAM   E-LEP   E-BAR
2170 - 2.3500-2s
2180 - 5.4500-4s
2190 B 4.2000-5s
      S
|2200 - 6.0000-8s   50.          50.          0.44200 0.44200 5.15000
-----
2410 - 3.0000+2s          100.          0.63333 0.63333
2420 B 1.0080+3s          100.          3.633-2 0.38943
      S
      0.38943          3.633-2
*
*
  
```

Таблица 2

Пример полученной главной таблицы погрешностей распадных данных для изотопов урана из библиотеки ENDF/B7

```

NAM=U          LIB=ENDF/ MF= 90 MT= 81 Z = 92.
                LT = 43 LC= 12 LS= 12 LF = (I4,A2,E9.0,A1,5E8.0,3E8.0)
* A   T1/2      BETA+  BETA-   IT   ALFA   SF     E-GAM   E-LEP   E-BAR
2170 - 1.3500-2s
2180 - 1.3500-4s
2190 B 2.3500-5s
      S
      4.000-2
2200 - 6.0000-9s
2220 - 7.0000-7s
-----
2410 -          s
2420 B   30.s          3.045-3 0.10564
      S
      0.10564          3.045-3
*
*
  
```

Фрагмент полученной таблицы спектров гамма-квантов при распаде для изотопов урана U-235, U-236, U-237, U-238 из библиотеки ENDF/B7

```

NAM=U      LIB=ENDF/ MF= 91  MT= 1  Z = 92.
LV = 10    LT = 210  LC= 34  LS= 9  LF = (I4,4(E9.4,E10.5))
*
* Gamma yield
*
*      AAAM      Yield      AAAM      Yield      AAAM      Yield      AAAM      Yield
      2260. 0.1287554  2270. 0.8718529  2300. 0.1560781  2310. 1.9028733
           1.61892-2           0.1134015           3.09037-3           8.56304-2
1 0.183300 7.84519-2 0.158000 2.80000-2 7.2200-2 6.00000-3 9.3000-3 7.9104-11
2 3.0603-3 4.49498-3 0.209000 2.80000-2 8.1000-2 4.80000-6 1.5100-2 8.4480-10
3 1.2960-2 1.27835-2 0.247000 0.2000000 0.154230 1.25000-3 1.8070-2 6.49700-4
4 1.3328-2 1.64248-3 0.259000 3.00000-2 0.158180 7.00000-4 2.4330-2 3.84000-8
5 1.6137-2 1.44541-2 0.310000 3.60000-2 0.221000 5.00000-7 2.5650-2 0.1460000
-----
94                                     0.112089 1.67735-2
95                                     0.112336 3.33028-4
96                                     0.112377 3.83324-4
97-----
    
```

Таблица 4

Фрагмент полученной таблицы погрешностей спектров гамма-квантов при распаде для изотопов урана U-235, U-236, U-237, U-238 из библиотеки ENDF/B7

```

NAM=U      LIB=ENDF/ MF= 91  MT= 81  Z = 92.
LV = 10    LT = 210  LC= 34  LS= 9  LF = (I4,4(E9.4,E10.5))
*
* Gamma yield
*
*      AAAM      Yield      AAAM      Yield      AAAM      Yield      AAAM      Yield
      2260. 2.62234-2  2270. 6.19429-2  2300. 8.33502-3  2310. 6.14196-2
           4.79429-3           1.20203-2           1.74394-4           4.29018-3
1 2.0000-4 2.61512-2 2.0000-4 1.08462-2 4.0000-5 4.00000-4 1.0000-4 1.9844-11
2 3.8135-4 5.61888-4 2.0000-4 1.08462-2 5.0000-4 1.10000-6 2.0000-4 2.1193-10
3 1.2033-3 1.17994-3 2.0000-4 3.96989-2 3.0000-5 7.00000-5 2.0000-4 1.50278-4
4 7.5641-4 9.68511-5 2.0000-4 1.28160-2 3.0000-5 5.00000-5 5.0000-5 1.23200-8
5 1.3056-3 1.15574-3 2.0000-4 1.31590-2 5.0000-4 1.00000-7 4.0000-5 1.18633-2
-----
94                                     1.1209-3 2.05603-3
95                                     1.1234-3 4.08213-5
96                                     1.1238-3 4.69864-5
97-----
    
```

Аналогично обработаны библиотеки JEFF-3.11, JENDL-4.0 и получены таблицы в формате БНАБ, что позволяет произвести анализ данных, содержащихся в библиотеках.

Рассчитано среднее значение энерговыделения и разброс по оценкам. Величина разброса находится по следующей формуле:

$$Разброс = \sqrt{\frac{\sum_{k=1}^N (E_k - \bar{E})^2}{N}}$$

где N – число источников данных, \bar{E} – среднее значение, E_k – энерговыделение k -той оценки. Предполагается, что данные не коррелируют.

Из табл. 5 видно, что для большинства случаев разброс меньше погрешностей или они близки.

С гамма-квантами другая ситуация: разброс и погрешности близки, но зачастую разброс значительно превышает погрешности – это выделено жирным шрифтом в табл. 6.

На рис. 3 показаны энергии частиц при распаде U-235 и Ва-107m по различным оценкам, и их погрешности. Из рис. 3а видно, что погрешности существенно превышают разброс, а на рис. 3б представлена обратная ситуация.

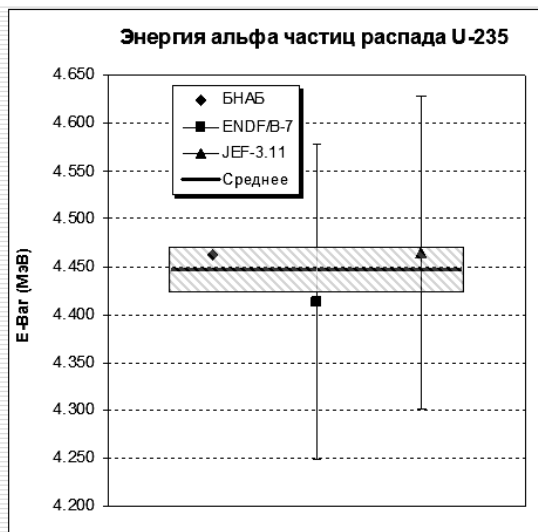
Энергия, уносимая альфа-частицами при распаде актинидов, погрешности, МэВ на распад

Изотоп	БНАБ	ENDF/B-7	JEFF-3.11	Среднее	Разброс	Погр. ENDF/B-7
ТН30	4,747	4,745	4,747	4,7466	0,00095	0,01488
ТН32	4,077	4,066	4,077	4,0734	0,00543	0,07319
U233	4,904	4,888	4,904	4,8988	0,00741	0,02897
U234	4,842	4,841	4,842	4,8416	0,00057	0,00882
U235	4,463	4,413	4,465	4,4470	0,02381	0,16485
U236	4,564	4,550	4,572	4,5619	0,00889	0,25289
U238	4,266	4,258	4,259	4,2608	0,00372	0,15945
NP37	4,863	4,866	4,860	4,8632	0,00253	0,04625
PU38	5,580	5,579	5,580	5,5795	0,00062	0,00775
PU39	5,237	5,237	5,238	5,2373	0,00032	0,01085
PU40	5,243	5,241	5,243	5,2424	0,00088	0,00728
PU41	1,200E-4	1,220E-4	1,226E-4	1,215E-4	1,112E-6	7,954E-7
PU42	4,973	4,973	4,973	4,9730	0,00025	0,01176
AM41	5,572	5,581	5,557	5,5702	0,00976	0,03201
AM2m	0,0252	0,0244	0,0248	0,0248	0,00032	0,00062
CM42	6,200	6,205	6,206	6,2038	0,00274	0,00562
CM43	5,940	5,926	5,940	5,9354	0,00682	0,13801
CM44	5,892	5,892	5,894	5,8924	0,00087	0,00818
CM45	5,448	5,475	5,448	5,4573	0,01285	0,02883
CM46	5,492	5,513	5,514	5,5064	0,01018	0,09104

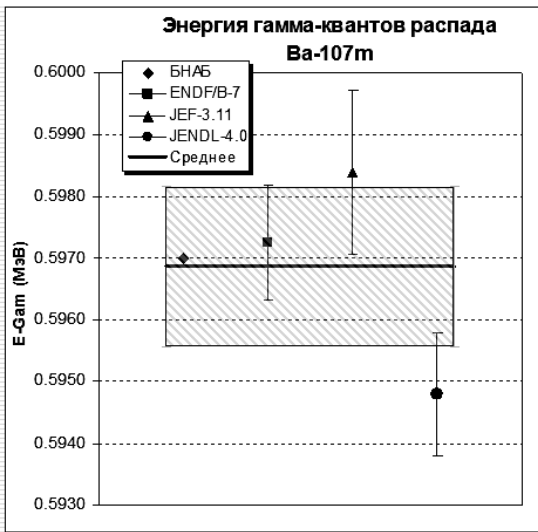
Таблица 6

Энергия, уносимая гамма-квантами при распаде актинидов, погрешности, МэВ на распад

Изотоп	БНАБ	ENDF/B-7	JEFF-3.11	Среднее	Разброс	Погр. ENDF/B-7
ТН30	0,0013	0,0013	0,0013	0,0013	0,00002	0,00009
ТН32	0,0012	0,0014	0,0012	0,0013	0,00007	0,00009
U233	0,0012	0,0011	0,0012	0,0012	0,00005	0,00011
U234	0,0015	0,0018	0,0015	0,0016	0,00017	0,00013
U235	0,1678	0,1642	0,1636	0,1652	0,00185	0,00163
U236	0,0012	0,0016	0,0012	0,0013	0,00018	0,00011
U238	0,0013	0,0013	0,0011	0,0012	0,00009	0,00014
NP37	0,0335	0,0321	0,0324	0,0327	0,00060	0,00071
PU38	0,0020	0,0019	0,0015	0,0018	0,00018	0,00013
PU39	0,0007	0,0004	0,0007	0,0006	0,00016	0,00003
PU40	0,0018	0,0018	0,0014	0,0016	0,00020	0,00013
PU41	1,650E-6	1,738E-6	1,711E-6	1,700E-6	3,681E-8	6,128E-8
PU42	0,0015	0,0015	0,0013	0,0014	0,00011	0,00011
AM41	0,0282	0,0263	0,0275	0,0273	0,00077	0,00036
AM2m	0,0050	0,0054	0,0042	0,0049	0,00050	0,00037
CM42	0,0014	0,0019	0,0014	0,0015	0,00025	0,00013
CM43	0,1330	0,1275	0,1332	0,1312	0,00263	0,00327
CM44	0,0013	0,0017	0,0012	0,0014	0,00023	0,00020
CM45	0,0939	0,0992	0,0938	0,0956	0,00254	0,00411
CM46	0,0028	0,0013	0,0030	0,0024	0,00075	0,00009



а



б

Рис. 3. Энергии частиц при распаде по различным оценкам, и их погрешности: а – U-235, б – Ba-107m

Таблица 7

Энергия, уносимая гамма-квантами при распаде изотопов, в расчете остаточного энерговыделения, МэВ на распад

Изотоп	БНАБ	ENDF/B-7	JEFF-3.11	JENDL-4.0	Среднее	Разброс	Погр. ENDF/B-7
Y-91	0,0036	0,0031	0,0031	0,0031	0,0032	0,00021	0,00048 (15 %)
Zr95	0,7370	0,7321	0,7328	0,7321	0,7335	0,00203	0,002300 (0,3 %)
Nb95	0,7670	0,7645	0,7645	0,7645	0,7651	0,00109	0,00006 (0,01 %)
Ru03	0,4840	0,4958	0,4961	0,4960	0,4930	0,00518	0,00609 (1,2 %)
Rh06	0,2090	0,2061	0,2043	0,2060	0,2063	0,00169	0,00260 (1,3 %)
Cs34	1,5540	1,5544	1,5554	1,5544	1,5546	0,00053	0,00085 (0,05 %)
Ba7m	0,5970	0,5972	0,5984	0,5948	0,5969	0,00130	0,00093 (0,16 %)
Ba40	0,1830	0,1822	0,1802	0,1820	0,1818	0,00105	0,00123 (0,68 %)
La40	2,3150	2,3083	2,3126	2,3080	2,3110	0,00294	0,00389 (0,17 %)
Ce41	0,0766	0,0766	0,0765	0,0767	0,0766	0,00007	0,00047 (0,62 %)
Pr44	0,0318	0,0289	0,0338	0,0289	0,0308	0,00207	0,00036 (1,2 %)
Cm42	0,0014	0,0019	0,0014		0,0015	0,00025	0,00013 (7 %)

Для дальнейшего анализа был выбран набор изотопов, дающих более 1 % в остаточное энерговыделение одного из вариантов тестовой модели быстрого реактора¹.

Как и в предыдущих случаях, погрешности либо больше, либо соизмеримы с разбросом. Это видно из табл. 7, кроме некоторых случаев и радикально малых приписанных погрешностей (Nb-95, Cs-134).

Предлагается принять для данных средние значения. А для погрешностей – наиболее консервативную оценку (наибольшую). В случаях, когда разброс больше погрешностей, для погрешностей можно принять величину разброса.

В системе СКАЛА, разработки АО ГНЦ РФ ФЭИ, энерговыделение считается модулем SOURCE. В этом модуле расчет энерговыделения выполняется

процедурой «PhotonEnergy». Модификация системы для расчета погрешностей заключалась в усовершенствовании именно этой процедуры. Расчет производится на основе данных о погрешностях $MT = 81$. Специально написанная процедура «FPyields» считывает данные по погрешностям выходов продуктов деления при делении для учета компоненты погрешностей от концентраций.

В качестве примера рассматривается остаточное энерговыделение в топливе, выгруженном из быстрого реактора после отработки, в установившемся режиме перегрузок на 5-й год и выдержки 35 дней на время перегрузки.

Остаточное энерговыделение по изотопам оценивалось по данным, полученным в ФЭИ, В. Г. Проняевым и А. В. Игнатьюком, и, приведенным в табл. 8. Оценивались доли, вносимые в погрешность каждым изотопом. Отдельно оценивались вклады в локальное энерговыделение (Z), отдельно – в переносное (Gam). Учитывались также погрешности «полураспада».

¹ Здесь и далее под термином «быстрый реактор» подразумевается тестовая модель реактора на быстрых нейтронах.

Вклады в погрешность энерговыделения изотопов на основе погрешностей констант энерговыделения и погрешностей периодов полураспада (на основе долей вкладов из теста)

Изотоп	ФЭИ				ENDF/B7			
	Константная составляющая, %		С учетом «полураспадной» составляющей, %		Константная составляющая, %		С учетом «полураспадной» составляющей, %	
	Z	Gam	Z	Gam	Z	Gam	Z	Gam
Y-91	0,01	1,05	0,01	1,05	0,01	0,69	0,01	0,69
ZR-95	0,17	0,09	0,17	0,09	0,06	0,03	0,06	0,03
NB-95	0,05	0,001	0,05	0,003	0,05	0,001	0,05	0,003
RU-103	0,22	0,24	0,22	0,24	0,18	0,10	0,18	0,10
RH-106	0,71	0,63	0,76	0,68	0,19	0,28	0,20	0,31
CS-134	0,05	0,02	0,05	0,02	0,01	0,001	0,01	0,001
BA-137m	0,12	0,01	0,12	0,01	0,01	0,002	0,01	0,002
BA-140	0,07	0,01	0,07	0,01	0,18	0,01	0,18	0,01
LA-140	0,07	0,01	0,07	0,01	0,20	0,01	0,20	0,01
CE-141	0,03	0,02	0,03	0,02	0,04	0,01	0,04	0,01
PR-144	0,05	0,15	0,06	0,15	0,05	0,14	0,06	0,14
CM-242	0,03	0,39	0,03	0,39	0,04	0,27	0,04	0,27
Суммарно	0,89	1,49	0,93	1,52	0,44	0,91	0,45	0,93

Результаты из ENDF/B7 хорошо согласуются с полученными ФЭИ, что говорит о правильности нашего подхода. Но иногда результаты расчета отличаются на порядок (Ba-137m, Cs-134), это объясняется тем, что оценки экспертов более консервативны по сравнению с оценкой ENDF/B7, но в целом достаточно близки.

Также были проведены дополнительные расчеты остаточного энерговыделения и его погрешностей для той же тестовой модели быстрого реактора. Из графика на рис. 4, видно, что погрешность на 2 порядка ниже, чем энерговыделение, и практически не меняется. На графике рис. 5 для важного периода около суток погрешность невысока и не сильно меняется, в дальнейшем растет и претерпевает резкие изменения. Это связано с накоплением продуктов деления, данные по которым менее известны.

Также сравнивались различные оценки энерговыделений по отношению к БНАБ. Из графика на рис.6 видно, что результаты по данным ENDF/B7 и JEFF-3.11 отличаются менее чем на 1 %, в то время как разница с БНАБ может отличаться более чем на 3 %. Это связано с отсутствием в БНАБ данных о короткоживущих изотопах.

Эксперимент «Вспышка» много лет назад был произведен японцами и недавно перепроверен снова. Из представленных ниже графиков (рис. 7 и рис. 8) видно, что результаты расчетов, сделанные в рамках настоящей работы, несущественно отличаются от результатов других авторов и для времен более 10 секунд выдержки совпадают с экспериментом в пределах погрешностей как для U-235, так и для Pu-239.

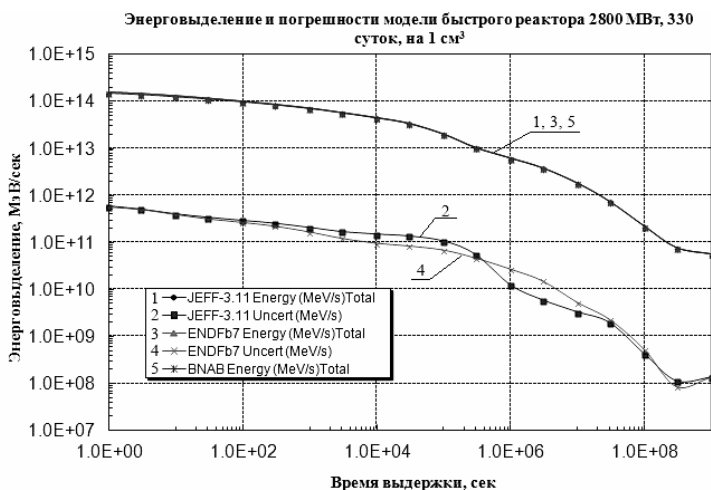


Рис. 4. Зависимость энерговыделения и абсолютной погрешности от времени выдержки разных оценок



Рис. 5. Зависимость относительной погрешности от времени выдержки разных оценок

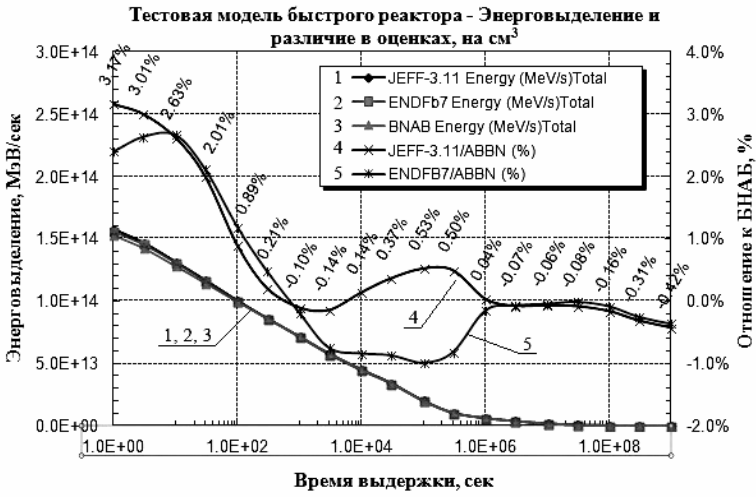


Рис. 6. Зависимость энерговыделений и разницы в оценках энерговыделений от времени выдержки

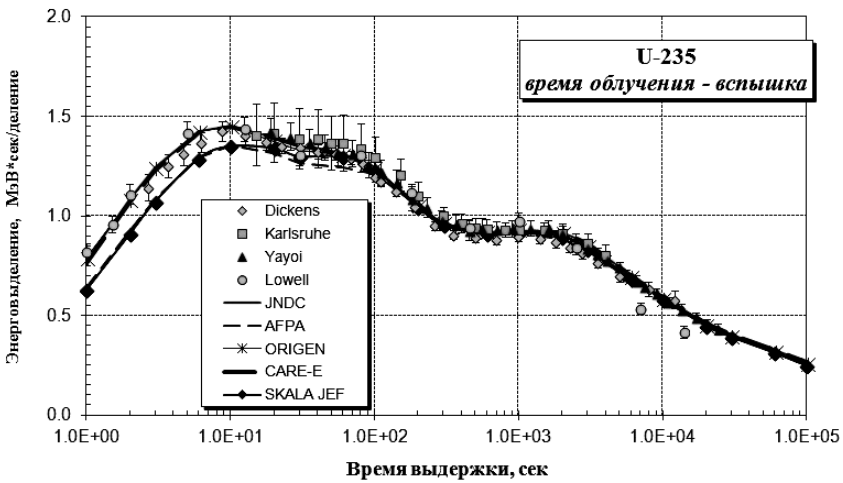


Рис. 7. Сравнение величины остаточного энерговыделения бенчмарк-экспериментов с расчетными значениями в области времени выдержки от 1 до 10⁵ секунд для U-235

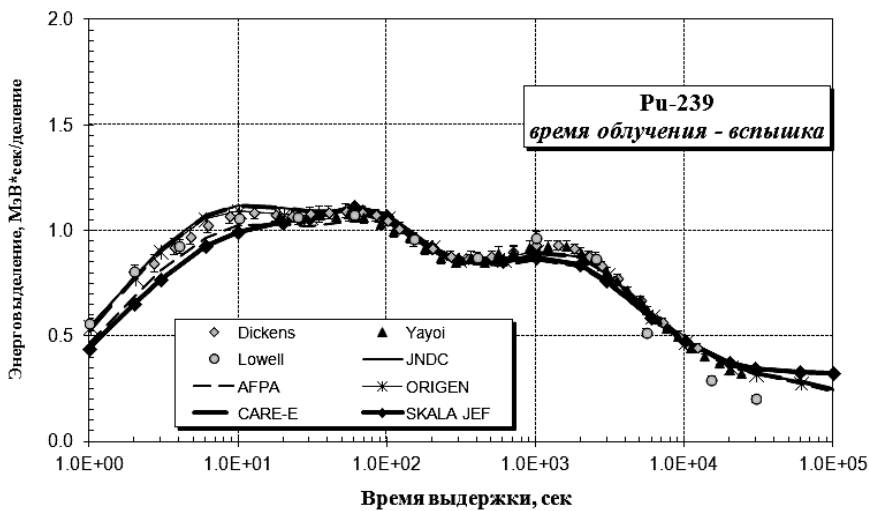


Рис. 8. Сравнение величины остаточного энерговыделения бенчмарк-экспериментов с расчетными значениями в области времени выдержки от 1 до 10^5 секунд для Pu-239

Заключение

- Освоена технология получения погрешностей характеристик распада радионуклидов в формате БНАБ.
- Протестирована программа перевода распадных данных из формата ENDF-6 в формат БНАБ, получены таблицы в формате БНАБ для большого числа нуклидов (обработаны данные 3-х национальных библиотек).
- На основе полученной методики создания библиотеки погрешностей ядерных данных по радиоактивным распадам предполагается создание аналогичной библиотеки в рамках системы константного обеспечения РФЯЦ-ВНИИЭФ с дальнейшей привязкой ее к модулю CRYSTAL.
- Рассчитано энерговыделение и его погрешности для тестовых моделей по системе СКАЛА/БНАБ (ФЭИ), выполнен анализ и сравнение результатов с другими авторами и экспериментами.

Литература

1. Мжачих С. В., Алексеев А. В., Гребенников А. Н., Гусев Е. А., Ермаков А. А., Ирничев Е. А., Касаткин С. С., Крутько Н. А. Расчет изотопного состава реакторных установок при моделировании

процессов выгорания и остаточного энерговыделения ядерного топлива в программном комплексе CONCORD // Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Математическое моделирование физических процессов. 2014. Вып. 1. С. 49–64.

2. Забродская С. В., Николаев М. Н., Цибуля А. М. Библиотека распадных данных и выходы продуктов деления в системе константного обеспечения БНАБ-93 // Вопросы Атомной Науки и Техники. Сер. Ядерные Константы. Вып. 2, 2000.

3. Жердев Г. М. SKALA – The computing system for an estimation of nuclear and radiation safety // Proc. Int. Conf. «M&C 2005», Avignon, France, September 12–15, 2005, on CD-ROM – sect. 315.

4. Власкин Г. Н., Жердев Г. М., Рогожкин В. Ю., Николаев М. Н. и др. Расчет интенсивности источников радиационных излучений (программа SOURCE) // ВАНТ. Сер. Физика ядерных реакторов, 2002, вып. 4. С. 39–60.

5. Trkov A., Herman M., Brown D. A. ENDF-102, ENDF-6 Formats Manual, Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data Files ENDF/B-VI and ENDF/B-VII. BNL-90365-2009 Rev. 2, Nov. 2011.

6. Барабанова Д. С., Жердев Г. М. Библиотека погрешностей характеристик распада радионуклидов в системе констант БНАБ // Известия высших учебных заведений, Ядерная Энергетика, 2015, № 1. С. 150–156.