РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЙ НУКЛИДНОЙ КИНЕТИКИ С ПОМОЩЬЮ КОМПЛЕКСА OPENBPS

SOLVING NUCLIDE KINETICS EQUATIONS USING THE OPENBOX COMPLEX

УДК-53

Бухтияров Иван Романович, Студент НИЯУ МИФИ, Россия, г. Москва

Артемьева Александра Борисовна, Студент НИЯУ МИФИ, Россия, г. Москва

Сайфуллин Данис Русланович, Студент НИЯУ МИФИ, Россия, г. Москва

Иванушкина Ксения Александровна, Студент НИЯУ МИФИ, Россия, г. Москва

Bukhtiyarov Ivan Romanovich, van4elotti@gmail.com

Artemieva, Alexandra B., sandra.artemyeva@gmail.com

Denis Ruslanovich Saifullin, mrdr.saif@gmail.com

Ksenia Aleksandrovna Ivanushkina, ivanushkinaxenia@gmail.com

Аннотация

Среди множества задач ядерной физики реакторов деления есть задача по расчету изменения состава материалов под действием потока нейтронов. Ядра нуклидов топлива, конструкционных материалов, поглотителя и теплоносителя взаимодействуют с налетающими нейтронами и могут превращаться в другие нуклиды. Нуклид может захватить нейтрон, испустить один и более нейтронов, испустить альфа-частицу, испытать акт деления и прочее. В результате, нуклид может стать радиоактивным (нестабильным). Радиоактивные нуклиды подвержены распаду. После окончания облучения в нейтронном потоке нуклиды могут испытывать превращение только за счет распада. Знание состава облученного материала важно для реакторной задачи определения баланса реактивности реактора, для задач радиационной безопасности определение активности

материалов с последующей оценкой по времени выдержки, для оценки остаточного тепловыделения. Наиболее полные ядерные, составленные МАГАТЭ и другими отечественными и иностранными организациями, работающими в области атомной энергетики, находятся в различных библиотеках в формате XML. На сегодняшний день данные для задачи нуклидной кинетики формируются вручную и передаются в программу, решающую эту задачу так же вручную. Данный подход является крайне трудозатратным в силу большого объема ядерных данных. В данной работе на основе ядерных данных в формате XML формируются входные данные для решения системы уравнений нуклидной кинетики и в ней же реализуются математические методы ее решения.

Целью данной работы является улучшение условий работы с ядерными данными, а главной задачей – создание программного комплекса для автоматизации формирования распадных данных для решения уравнений нуклидной кинетики, а также реализация решения этих уравнений с применением математических методов.

Annotation

Among the many problems of nuclear physics of fission reactors is the problem of calculating changes in the composition of materials under the action of a neutron flux. The nuclei of fuel nuclides, structural materials, scavenger and coolant interact with incoming neutrons and can be converted into other nuclides. A nuclide can capture a neutron, emit one or more neutrons, emit an alpha particle, experience the act of fission, and so on. As a result, the nuclide can become radioactive (unstable). Radioactive nuclides are susceptible to decay. After the end of irradiation in the neutron stream, nuclides can only undergo transformation due to decay. Knowledge of the composition of irradiated material is important for the reactor task of determining the reactivity balance of the reactor, for radiation safety tasks, determining the activity of materials with subsequent evaluation by exposure time, for evaluating the residual heat release. The most complete nuclear documents compiled by the IAEA and other domestic and foreign organizations working in the field of nuclear energy are available in various libraries in XML format. To date, data for the nuclide kinetics problem is generated manually and transmitted to the program

that solves this problem manually. This approach is extremely labor-intensive due to the large volume of nuclear data. In this paper, based on nuclear data in XML format, input data is generated for solving a system of equations of nuclide kinetics and mathematical methods for its solution are implemented in it.

The purpose of this work is to improve the conditions for working with nuclear data, and the main task is to create a software package for automating the formation of decay data for solving nuclide kinetics equations, as well as to implement the solution of these equations using mathematical methods.

Ключевые слова: нуклидная кинетика, нуклид, ядерные данные.

Key words: kinetics of nuclide, nuclide, nuclear data.

Уравнения нуклидной кинетики

Система уравнений нуклидной кинетики есть неоднородная линейная система уравнений

$$\frac{dy_i}{dt} = \sum_{j=1}^{n} a_{ij} y_j + q_i ,\left(\ i = 1, 2, ..., n \right) \tag{1}$$

с начальным условием

$$y_i \left(0\right) = y_{i0}, \quad \left(i = 1,\ 2,\ ...,\ n\right) \tag{2}$$

или в матричной форме

$$\frac{d\vec{y}}{dt} = \hat{A}\vec{y} + \vec{q}, \quad (A \equiv [a_{ij}]) \tag{3}$$

$$\vec{y}(0) = \vec{y}_0 \tag{4}$$

с постоянными коэффициентами a_{ij} имеет общее аналитическое решение, которое есть сумма какого-либо её частного решения и общего решения соответствующей однородной линейной системы уравнений

$$\frac{dy_i}{dt} = \sum_{j=1}^{n} a_{ij} y_j , \quad (i = 1, 2, ..., n) \tag{5}$$

с начальным условием

$$y_i(0) = y_{i0}, \quad (i = 1, 2, \ldots, n) \tag{6}$$

Общее решение имеет вид

$$y(t) = e^{At} y_0, \quad (t \geq 0) \tag{7}$$

где матричная функция e^{At} является матрицей размера $n \times n$

Проведение рассчетов

При проведении расчетов использовались цепочки нуклидов различной длины. Длина списка нуклидов максимальной длины chain.xml 3819 нуклидов. Полная цепочка строится на основе формата оценённых ядерных данных ENDFb версии 7.1 с помощью процедур opensource пакета OpenMC.

«Обрезание» цепочки производится с помощью функции reduce(inpnucllist, level), где inpnucllist - это есть список всех нуклидов, которые важны в нашей задаче, level - число, обозначающее на каком переходе считая от нуклидов, приведённых в списке, мы урезаем цепочку. Цепочки длины l1, l2, l3 содержат только те ядра, которые получаются в результате одного/двух/трёх превращений из исходных ядер списка (Рис. 1). Для каждого из нуклидов (урана-235, урана-238 и плутония-239) составлены три сокращенные цепочки с помощью функции reduce программного комплекса OpenMC. Расчёты с цепочками различной длины проводятся для исследования влияния уменьшения ее размерности на результат расчета.

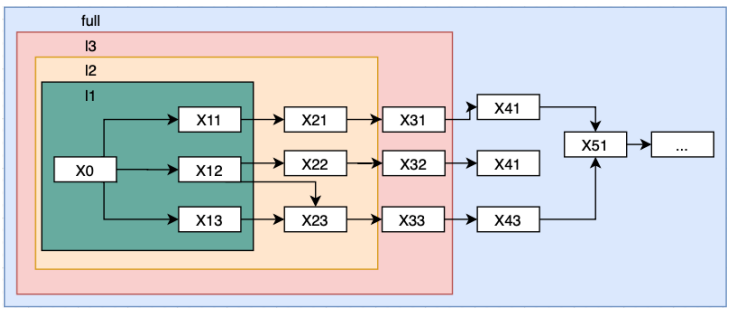


Рисунок 1 – Иллюстрация изменения размерности цепочки нуклидов

Работа по верификации результатов расчета остаточного тепловыделения кодом программ OpenBPS и BPSD/V2.1 для трех основных делящихся: урана-235,

урана-238 и плутония-239 – проводилась на основе экспериментов из подразделов 2.4.4 – 2.4.9.

Сравнение результатов расчета по программе OpenBPS и BPSD/V2.1 осуществлялось с экспериментальными данными измерения остаточного тепловыделения делящихся нуклидов в режиме «вспышка», приведенными раннее, а также с результатами расчета по другим кодам аналогичного назначения: FISPACT-II, AFPA, ORIGEN, CARE-E. Результаты расчета по коду FISPACT-II приводится для различных библиотек оцененных данных. Сравнение данных приведены на рисунках 2 – 4.

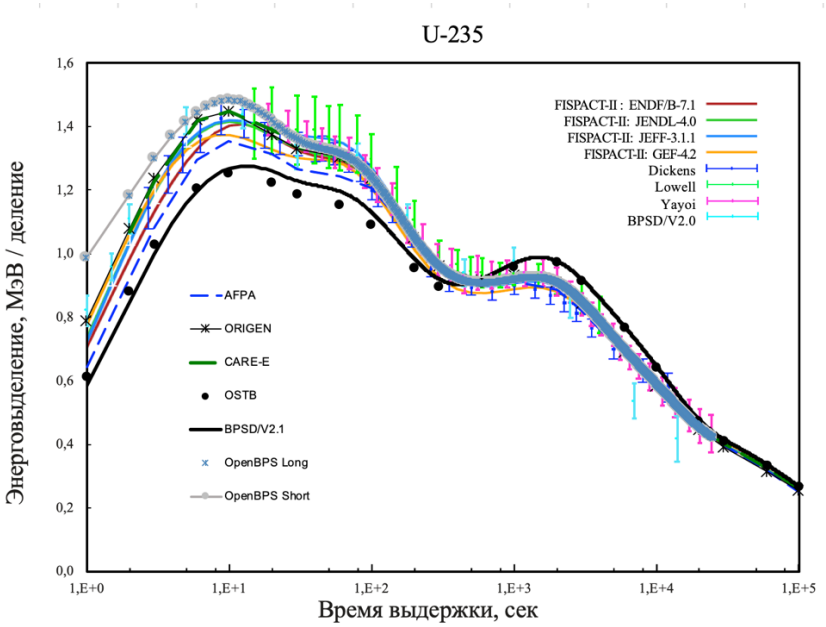


Рисунок 2 – Результаты расчета остаточного тепловыделения методом аппроксимации Чебышева (программой OpenBPS) и итерационным методом (программой BPSD/V2.1) на эксперименте типа «вспышка» с ураном 235

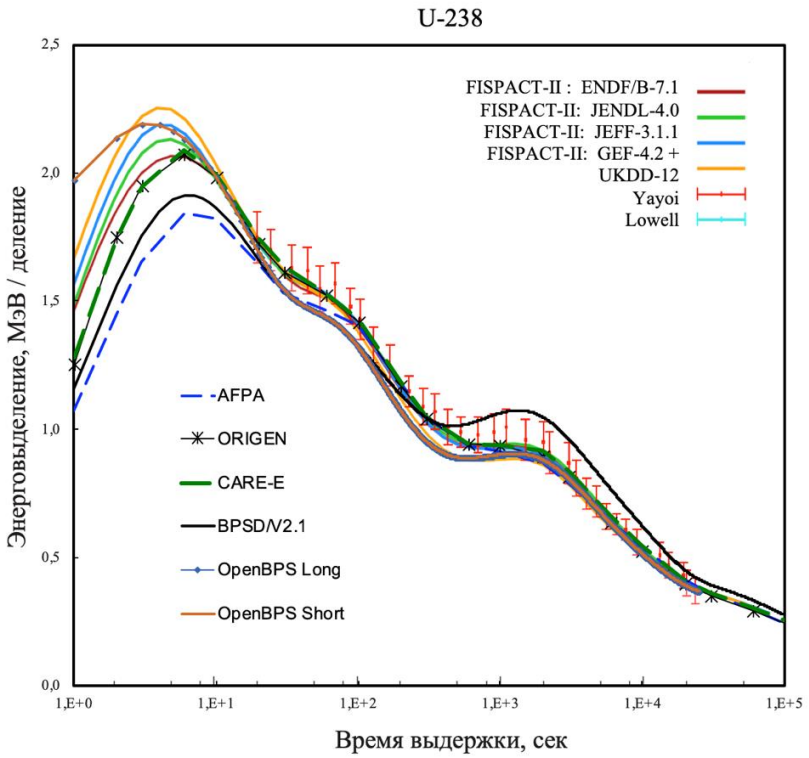


Рисунок 23 – Результаты расчета остаточного тепловыделения методом аппроксимации Чебышева (программой OpenBPS) и итерационным методом (программой BPSD/V2.1) на эксперименте типа «вспышка» с ураном 238

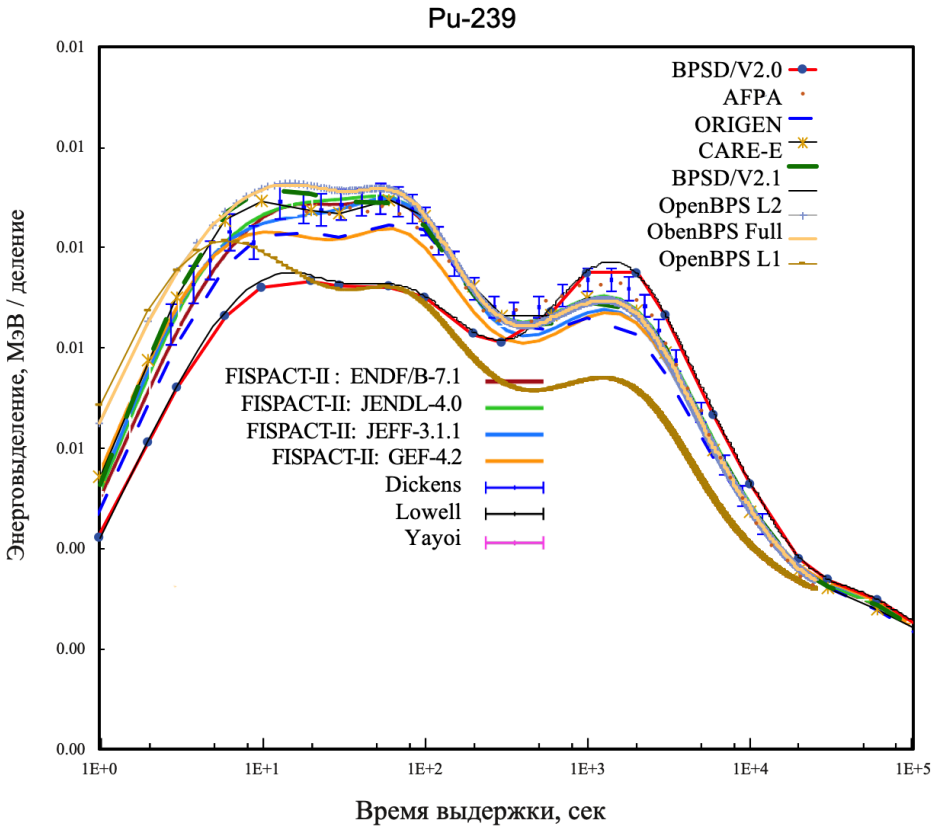


Рисунок 24 – Результаты расчета остаточного тепловыделения методом аппроксимации Чебышева (программой OpenBPS) и итерационным методом (программой BPSD/V2.1) на эксперименте типа «вспышка» с плутонием 239

Расчёты показали, что модификация цепочки повлияло на расчёты остаточного тепловыделения только для плутония 239 (OpenBPS short расчёт с входной цепочкой различной длины, OpenBPS full расчет с полной цепочкой на графиках рис. 22 - 24). Результат отличается для цепочки l1.

Так как цепочка в один уровень, то дальше нуклиды никуда не переходят, следовательно, часть активности от них теряется. После того, как вся активность ядер стремится устремляется к нулю, больше ее генерировать нечем, и идет спад тепловыделения до тех пор, пока все среднеактивные осколки не перейдут в более стабильные. От этого процесса получается последующее снижение активности относительно полной цепочки, но под конец расчета, когда остаются только самые стабильные нуклиды, кривые совпадают.

При добавлении уровней распада добавляется и доля среднеактивных элементов, поэтому для цепочек длины l2 и l3 такого расхождения в расчётах с графиком, соответствующим полной цепочке, мы не увидим.

Значительное превышения значений остаточного тепловыделения для урана-238 в первые секунды после облучения могут говорить о росте числа делений в данном случае к концу времени облучения, что, безусловно, связано с образованием и последующем делении плутония-239. Большее значение остаточного тепловыделения после тысячи секунд, практически после трети часа, при облучении плутония-239 связано с более длинной цепочкой актинидов в этом случае. Остаточное тепловыделение от продуктов деления для большого периода времени (часы) в экспериментах по облучению различных нуклидов становятся сопоставимы друг с другом.

Проведены расчеты остаточного тепловыделения в единицу времени на деление для экспериментов с облучением по отдельности трех делящихся нуклидов (урана-235, урана-238 и плутония 239) в течение одного года.

Плотность потока нейтронов и спектр нейтронов облучения, как и в экспериментах «вспышка», считались постоянными. Но значение плотности потока облучающих нейтронов была уменьшена на три порядка, что обеспечивает скорость деления на уровне одно деление в секунду в кубическом сантиметре для всех трёх вариантов нуклидов.

Данные сравнений указывают в основном на достаточно хорошее согласование решений, получаемых различными программами.

Из анализа результатов следует, что в течении выдержки до года определяющую роль в остаточном тепловыделении играют распады продуктов деления, а позже - распады актинидов.

Описание репозитория проекта OpenBPS на github.com

Весь код проекта OpenBPS находится в открытом репозитории: (https://github.com/ivanbukhtiyarov/nuclideParser). Также для проекта была настроена система автоматического тестирование коммитов репозитория (https://github.com/ivanbukhtiyarov/nuclideParser/actions), использующая библиотеку google test (рис. 5).

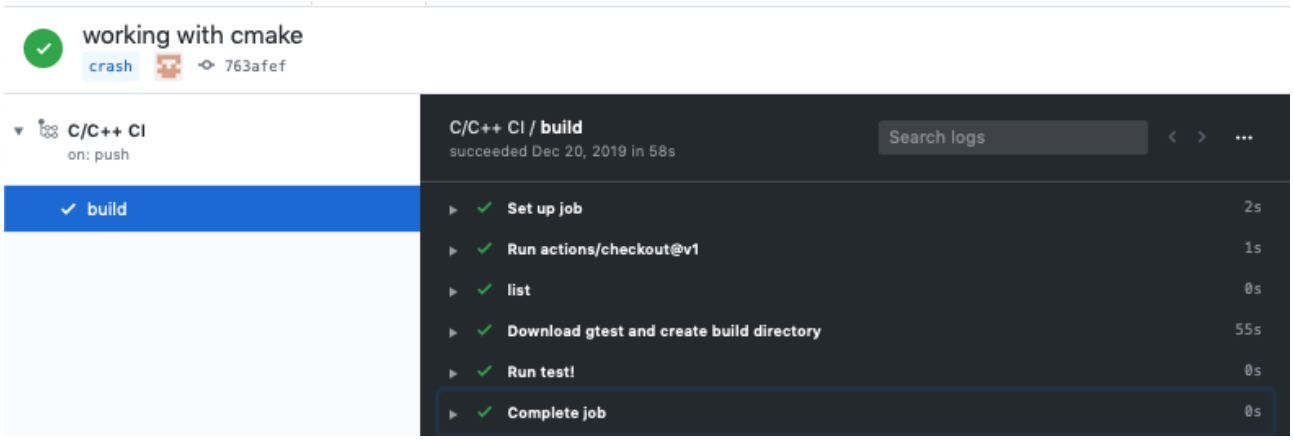


Рисунок 5 – Web интерфейс автоматического тестирования сборки

Также в репозитории подробно описываются спецификации и теория на английском языке (рис. 28).

Литература

1. Асатрян Д.С., Белов А.А., Белоусов В.И., Березнев В.П., Ивченко Д.В., Селезнев Е.Ф., Чернова И.С., Кощеев В.Н., Мантуров Г.Н., Перегудов А.А., Семенов М.Ю., Цибуля А.М., ДробышевЮ.Ю., Карпов С.А., Фёдоров И.В. Комплекс программ ГЕФЕСТ800 для проведения эксплуатационных расчетов нейтронно-физических характеристик БН-800 в стационарном режиме. Атомная энергия. 2015. Т.118, вып.6, с.303-308.
2. Campbell K.J., Collis K.F., Watsn J.M. Visual processing during mathematical problem solving // Educational Studies in Mathematics. 1995. Vol. 28(2). P. 177–194.
3. J. L. Yarnell and P. J. Bendt, Calorimetric Fission Product Decay Heat Measurements for 239Pu, 233U, and 235U. Technical Report NUREG/CR-0349, LA-7452-MS, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, New Mexico, USA, Sept. 1978.
4. Забродская С.В., Игнатюк А.В., Кощеев В.Н. и др. РОСФОНД – Российская национальная библиотека нейтронных данных // ВАНТ. Сер. Ядерные константы. – 2007. – Вып. 1-2. – С. 3
5. M. Akiyama, K. Furuta, T. Ida, K. Sakata, and S. An, "Measurements of Beta-Ray Decay Heat of Fission Products for Fast Neutron Fission of 235U, 239Pu, and 233U", J. Atomic Ener. Soc. Japan 24(10), 803 (1982) (in Japanese).
6. Отчет о НИОКР по договору от 29.06.2012 г. № 1/5610 «Разработка модулей BPS и ACTIVBPS для расчета изменения нуклидного состава, выгорания топлива по кампании и его активности с оценкой погрешностей» Инв. № № 3537-1/5610-2-10, 47 с.

Literature

1. Asatryan D. S., Belov A. A., Belousov V. I., bereznev V. P., Ivchenko D. V., Seleznev E. F., Chernova I. S., kosheev V. N., Manturov G. N., Peregudov A. A., Semenov M.

Yu., Tsybulya a.m., Drobyshev N. Yu., Karpov S. A., Fedorov I. V. a Set of programs for PERFORMING operational calculations of the neutron-physical characteristics of the bn-800 in stationary mode. Atomic energy. 2015. Vol. 118, issue 6, p. 303-308.

2. Campbell K. J., Collis K. F., Watsn J. M. Visual processing during mathematical problem solving / / Educational Studies in Mathematics. 1995. Vol. 28(2). P. 177-194.
3. J. L. Yarnell and P. J. Bendt, Calorimetric Fission Product Decay Heat Measurements for 239Pu, 233U, and 235U. Technical Report NUREG/CR-0349, LA-7452-MS, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, New Mexico, USA, Sept. 1978.
4. Zabrodskaya S. V., Ignatyuk A.V., kosheev V. N. et al. ROSFOND-Russian national library of neutron data / / VANT. Ser. Nuclear constants. - 2007. - Issue 1-2. - P. 3
5. M. Akiyama, K. Furuta, T. Ida, K. Sakata, and S. An, "Measurements of Beta-Ray Decay Heat of Fission Products for Fast Neutron Fission of 235U, 239Pu, and 233U", J. Atomic Ener. Soc. Japan 24(10), 803 (1982) (in Japanese).
6. Report on R & d under the agreement dated 29.06.2012 № 1/5610 "Development of bps and ACTIVBPS modules for calculating changes in nuclide composition, fuel burn - up for the campaign and its activity with an error estimation" inv. No. 3537-1/5610-2-10, 47 p.