

СПРАВОЧНО-ИНФОРМАЦИОННАЯ ИНТЕРАКТИВНАЯ СИСТЕМА  
МОДЕЛИРОВАНИЯ И ВИЗУАЛИЗАЦИИ ЯДЕРНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ –  
NUCLEAR EVOLUTION SOFTWARE

**Догов А.А.**

АО ИК «АСЭ»

*В работе приводится методика моделирования изменения изотопного состава топлива. Предложены алгоритмы моделирования и расчета основных параметров ядерных превращений нуклидов, основанные на направленном графе, что позволило повысить скорость и точность вычислений. Приводится описание разработанной системы моделирования процессов ядерных превращений в результате радиоактивного распада, и в результате реакций, вызываемых потоками частиц. Определены её отличительные особенности и функциональные возможности. Представленная система является удобным инструментом оценки концентрации любого изотопа в цепочке превращений в зависимости от интегрального потока и времени при различном количестве стартовых изотопов. Приведены примеры использования предложенного инструментария.*

**Ключевые слова:** Радиоактивные отходы, трансмутация, цепочки распада, теория графов, уравнения Бейтмана, информационные системы, интерактивный интерфейс.

### **Введение**

Важным аспектом атомной энергетики является контроль состояния и изменения изотопного состава ядерного топлива. Моделирование процессов ядерных превращений имеет приложение в широком круге прикладных и теоретических исследований, связанных с развитием ядерных технологий. В частности, в настоящее время необходимо решать задачи, связанные с утилизацией облученного ядерного топлива. Один из главных предлагаемых методов переработки основан на трансмутации вредных продуктов деления, накопившихся в топливе, путем их облучения в атомных реакторах или системах с подкритичной активной зоной, где превращения ядер также обусловлены

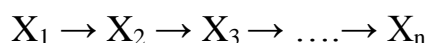
нейтронными реакциями. Поэтому актуально создание специализированных программ для моделирования трансмутации нуклидов.

Рассматриваемая система дает возможность: автоматически построить и представить на экране в реальном времени, схему нуклидных превращений при радиоактивном распаде, а также в результате реакций, вызываемых нейтронами; вычислить число ядер целевого нуклида при облучении и выдержки мишени.

В систему интегрирована справочно-информационная интерактивная система, содержащая необходимую информацию о характеристиках большинства известных нуклидов 112 химических элементов. Также реализована возможность подключения к удаленным базам данных, для получения свойств экзотических нуклидов.

### **Особенности моделирования и расчет основных характеристик процессов**

Для цепочек распадов, когда радиоактивное вещество  $X_1$  превращается в  $X_2$ ,  $X_2$  превращается в  $X_3$  и т.д.



Баланс количества нуклидов определяется обычными условиями распада. Скорость превращения  $X_k$  в  $X_{k+1}$  пропорциональна  $\lambda_k$ , а скорость превращения  $X_{k-1}$  в  $X_k$  пропорциональна  $\lambda_{k-1}$ . Изменение концентрации изотопов со временем описывается системой из  $n$  обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ).

$$\begin{cases} \frac{dN_1(t)}{dt} = -\lambda_1 N_1(t) \\ \frac{dN_2(t)}{dt} = -\lambda_2 N_2(t) + \lambda_1 N_1(t) \\ \dots \dots \\ \dots \dots \\ \frac{dN_n(t)}{dt} = -\lambda_n N_n(t) + \lambda_{n-1} N_{n-1}(t) \end{cases} \quad (1)$$

Расчет систем дифференциальных уравнений, описывающих распад радиоактивных цепочек даже при использовании современных компьютеров и стандартных численных методов, приводит к большим временным затратам. В частности это обусловлено тем, что при численном интегрировании этой системы, величина шага интегрирования по самым грубым оценкам, не может

превышать периода полураспада самого короткоживущего нуклида в цепочке. И в случае, когда в одной цепочке присутствуют изотопы, периоды полураспада которых отличаются на порядки, представляется сложной и затратной по времени задачей.

В простейшем случае, когда в начальный момент времени дочерних ядер нет, а количество материнских ядер равно  $N_{10}$ , решение каждого  $k$ -го уравнения имеет вид [1]:

$$N_k(t) = N_{10} \sum_{i=1}^k C_i e^{-\lambda_i t}; \quad N_{10} = N_1(0) \quad (2)$$

где  $C_i$  – коэффициент в решении Бейтмана, рассчитывается по формуле:

$$C_i = \frac{\prod_{i=1}^{k-1} \lambda_i}{\sum_{i=1}^k (\lambda_j - \lambda_i)}; \quad j \neq i \quad (3)$$

Для расчета концентрации ядер в случае «ветвления» цепочки. Когда для определенного нуклида имеет место два или более конкурирующих процессов ядерных превращений. Было сделано предположение о том, что ветвления в схеме превращений нуклидов в процессе трансмутации происходят независимо друг от друга. При расчете активности в цепочках с ветвлением целесообразно представить их в виде нескольких независимых линейных цепочек, затем производить расчет параметров трансмутации, используя формулы (2) и (3).

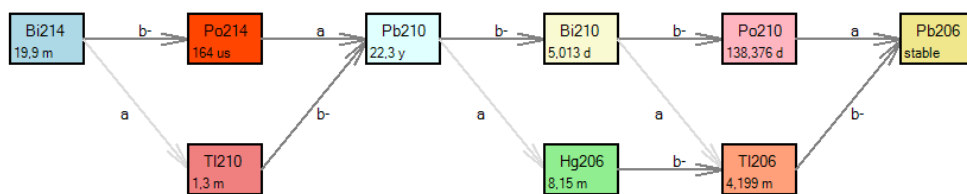
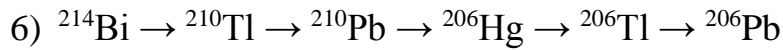
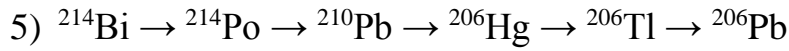


Рисунок 1 – Цепочка распада  $^{214}\text{Bi}$

Например, в представленной цепочке распада  $^{214}\text{Bi}$  (рисунок 1) существует шесть условно независимых уникальных путей образования  $^{206}\text{Pb}$  из  $^{214}\text{Bi}$ .

- 1)  $^{214}\text{Bi} \rightarrow ^{214}\text{Po} \rightarrow ^{210}\text{Pb} \rightarrow ^{210}\text{Bi} \rightarrow ^{210}\text{Po} \rightarrow ^{206}\text{Pb}$
- 2)  $^{214}\text{Bi} \rightarrow ^{210}\text{Tl} \rightarrow ^{210}\text{Pb} \rightarrow ^{210}\text{Bi} \rightarrow ^{210}\text{Po} \rightarrow ^{206}\text{Pb}$
- 3)  $^{214}\text{Bi} \rightarrow ^{214}\text{Po} \rightarrow ^{210}\text{Pb} \rightarrow ^{210}\text{Bi} \rightarrow ^{206}\text{Tl} \rightarrow ^{206}\text{Pb}$
- 4)  $^{214}\text{Bi} \rightarrow ^{210}\text{Tl} \rightarrow ^{210}\text{Pb} \rightarrow ^{210}\text{Bi} \rightarrow ^{206}\text{Tl} \rightarrow ^{206}\text{Pb}$



Тогда, при сделанных предположениях, число  $N_k(t)$  ядер нуклида  $K$  в определенный момент времени  $t$  может быть получено как сумма числа ядер этого нуклида, рассчитанного по всем линейным цепочкам  $n$ , от стартового нуклида к нуклиду  $K$ .

$$N_k(t, N_0) = \sum_n \left( N_{10} \prod_{i=1}^{k-1} q_i \sum_{i=0}^k C_i e^{-\lambda_i t} \right) \quad (4)$$

где  $q_i$  – доля распада; а  $C_i$  рассчитывается по формуле (3).

Для реакций, вызываемых частицами (нейтронами протонами и т.д.), скорость реакции зависит от свойств ядер нуклида и спектра этих частиц. Вероятность распада атома за единицу времени в потоке различных типов частиц или излучения описывается уравнением (5). Для удобства, в данной работе эта величина  $\Lambda$  по аналогии с радиоактивным распадом, называется постоянной распада нуклида в потоке частиц.

$$\Lambda_i = \lambda_i + \sum_f \sigma_{if} \Phi_f \quad (5)$$

где  $\lambda_i$  – постоянная распада характеризует скорость естественного радиоактивного распада нуклида  $i$ ;  $\Phi_f$  – плотность потока частиц  $f$ ;  $\sigma_{if}$  – микросечение реакций  $(f, \gamma)$ ,  $(f, \alpha)$ ,  $(f, \beta)$ ,  $(f, 2n)$ ,  $(f, 3n)$  ... взаимодействия частиц  $f$  с ядрами нуклида, приводящее к превращению его в другой нуклид. Величина  $(\sigma_{if} \Phi_f)$  характеризует скорость трансмутации  $i$ -го ядра нуклида под действием потока частиц  $f$ . А обратная величина  $(\sigma_{if} \Phi_f)^{-1}$  является, средним временем жизни нуклида в потоке частиц.

Баланс количества нуклидов определяется системой обыкновенных дифференциальных уравнений (1), решением которых являются также уравнение (4), с той лишь разницей что в место постоянной распада  $\lambda_i$ , учитывается  $\Lambda_i$ .

Удельная активность  $Q$  радионуклида в мишени в расчете на один грамм стартового химического элемента равна:

$$Q_i(t) = \frac{\lambda_i N_A C N_i(t)}{M} \quad (6)$$

где  $N_A$  – число Авогадро;  $C$  – изотопное содержание (обогащение) основного стартового нуклида;  $N_i(t)$  – число ядер  $i$ -го радионуклида в момент времени  $t$ ;  $M$  – средняя атомная масса стартового химического элемента. Возможность рассчитать удельную активность побочных радионуклидов позволяет производить анализ процесса получения радионуклида и выбирать оптимальные параметры режима облучения и выдержки [2].

В данной системе цепочка превращений представляется в виде направленного графа, вершинами которого являются изотопы или нуклиды, составляющие цепочку, а ребра соответствуют взаимным превращениям нуклидов в процессе трансмутации. Направление ребер соответствует направлению превращения нуклидов - от материнского нуклида к дочернему. Это позволяет работать с цепочкой ядерных превращений как с математическим объектом: применять к работе над ней особые подходы и методы характерные для работы с графами.

Для графа превращений можно определить 3 типа вершин:

- Вершина нулевого поколения – вершина, в которую не ведет ни одно ребро. Вершины нулевого поколения соответствуют изотопам, заданным в начальный момент времени.
- Вершина последнего поколения – вершина, из которой не выходит ни одного ребра. Вершины последнего поколения представляют стабильные изотопы, или изотопы для которых система не нашла необходимых для моделирования данных.
- Целевая вершина – вершина, параметры которой необходимо рассчитать.

Для задачи трансмутации нуклидов наибольший шанс попасть в неисследованную область – рассмотреть возможных претендентов на роль дочерних изотопов для получения целевого нуклида в качестве осколка деления.

Таким образом, на каждом шаге ведётся поиск следующих изотопов на основе свойств предыдущих. Процесс продолжается до тех пор, пока система не найдет стабильный изотоп или элемент для которого нет данных.

Для корректного задания вектора неизвестных системы ОДУ трансмутации необходимо построить все возможные уникальные линейные цепочки ядерных превращений, реализующиеся при облучении изотопов. Для этого предлагается использовать алгоритмы поиска пути на карте с неизвестной местностью.

Для определения путей образования и выделения линейных цепочек применялся метод поиска в глубину (Depth-first search, DFS). Алгоритм поиска описывается следующим образом: для каждой не пройденной вершины необходимо найти все не пройденные смежные вершины и повторить поиск для них. Метод систематического прохождения (посещения) вершин графа, когда за счет продвижений от текущей вершины по ребру вперед (к еще не просмотренной вершине) всегда, когда это возможно, и возвратов от текущей вершины по пройденному ребру назад (к ранее пройденной вершине), если движение вперед от текущей вершины невозможно, осуществляется движение по всем вершинам графа, достижимым из заданной вершины  $S$ , с которой начинается поиск [3].

### **Описание и функциональные возможности системы**

Система NES (Nuclear Evolution Software) – программное обеспечение, которое представляет собой отдельное приложение с прямым доступом к удаленной или локальной базам данных. ПО обладает широким набором инструментов навигации, чтобы помочь пользователю определить ядра и данные, представляющие интерес. В главном окне NDS размещается область построения цепочек распада, область построения графиков концентрации ядер. Также система предоставляет значения данные по концентрации активности и токсичности в определенных временных точках по выбору пользователя.

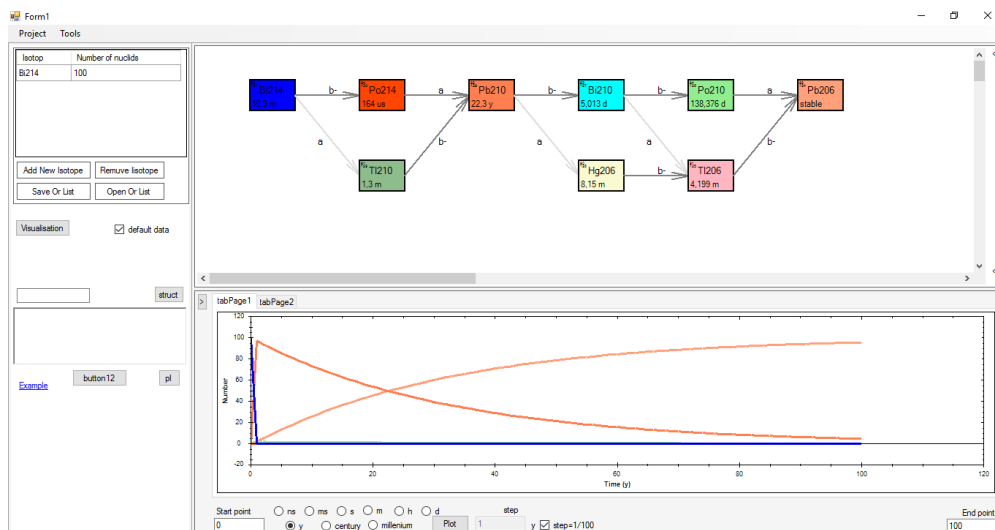


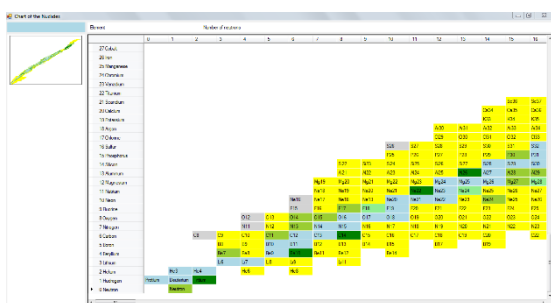
Рисунок 2 – Главное окно NDS

В главном окне (рисунок 2) система отображает структуру в виде направленного графа, элементами которого являются изотопы, в каждом элементе система отображает: название изотопа и его период полураспада, каждый элемент выделен собственным цветом. Вероятность распада по определенному пути отображается цветом стрелочки. Чем выше вероятность, тем ярче стрелочка отображающая тип распада. Ниже строятся графики зависимости концентрации изотопов от времени. Также реализована возможность получать численные значения в заданных временных точках. Изотопный состав задается в верхнем левом углу в виде названия изотопа и его концентрации.

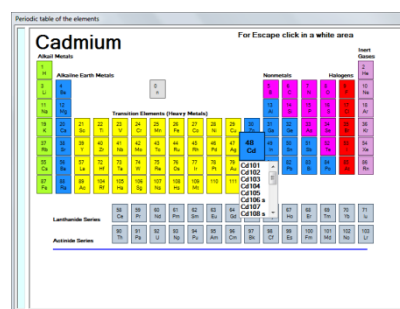
Для упрощения ввода данных была реализована справочная система «Проводник нуклидов». Проводник нуклидов – это встроенная презентационная подпрограмма, предназначенная для облегчения доступа к справочным данным.

Данная справочно-информационная система объединяет совокупность свойств более чем 3500 изотопов 112 химических элементов. В базе данных помимо данных о составе ядра также содержатся справочные данные об основных свойствах изотопов химических элементов таких как: масса; избыток массы; тип распада; период полураспада; распространенность нуклида в природной смеси изотопов (процент); спин и четность основного состояния. Эти значения снабжены стандартными погрешностями. Для радиоактивных

нуклидов представлены оцененные значения периода полураспада. Для стабильных нуклидов вместо периода полураспада указано «stable». Данные были получены на основе информации, содержащейся в базах данных Центра Ядерных Данных Агентства по Атомной Энергии Японии (Nuclear Data Center at Japan Atomic Energy Agency) [4] и Brookhaven National Nuclear Data Center (NNDC) [5]. Данные по микросечениям реакций на тепловых нейтронах были подготовлены на основе данных библиотеки FENDL-2.1 Fusion Evaluated Nuclear Data Library [6].



а)



б)

Рисунок 3 – Проводник нуклидов

Проводник нуклидов, предоставляет доступ к данным через диаграмму нуклидов или периодическую систему, рисунок 3.

### Моделирование изменения изотопного состава ОЯТ ВВЭР-1000 при длительной выдержке

Для примера было проведено моделирование длительной выдержки отработанного ядерного топлива реактора ВВЭР-1000. После извлечения отработавшего ядерного топлива (ОЯТ) из активной зоны в нем продолжают спонтанные процессы деления, радиоактивных распадов; короткоживущие нуклиды исчезают, появляются новые; и топливо в течение длительного периода времени остается мощным источником  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ , и нейтронного излучения, и тепловыделения. На рисунке 4 представлены результаты моделирования цепочек распадов в ОЯТ реактора ВВЭР 1000. В рамках указаны элементы, составляющие изначальный изотопный состав ОЯТ [7].



Образующиеся в топливе радионуклиды продукты деления и актиноиды представляют не одинаковую опасность с экологической точки зрения. Это зависит от времени жизни нуклида, его биологической токсичности и концентрации в топливе. Для оценки возможного радиационного воздействия на окружающую среду радионуклидов отработавшего топлива необходимо учитывать их количество и следующие характеристики: активность, интенсивность радиоактивного распада, радиационная токсичность компонентов облученного топлива и химическая токсичность.

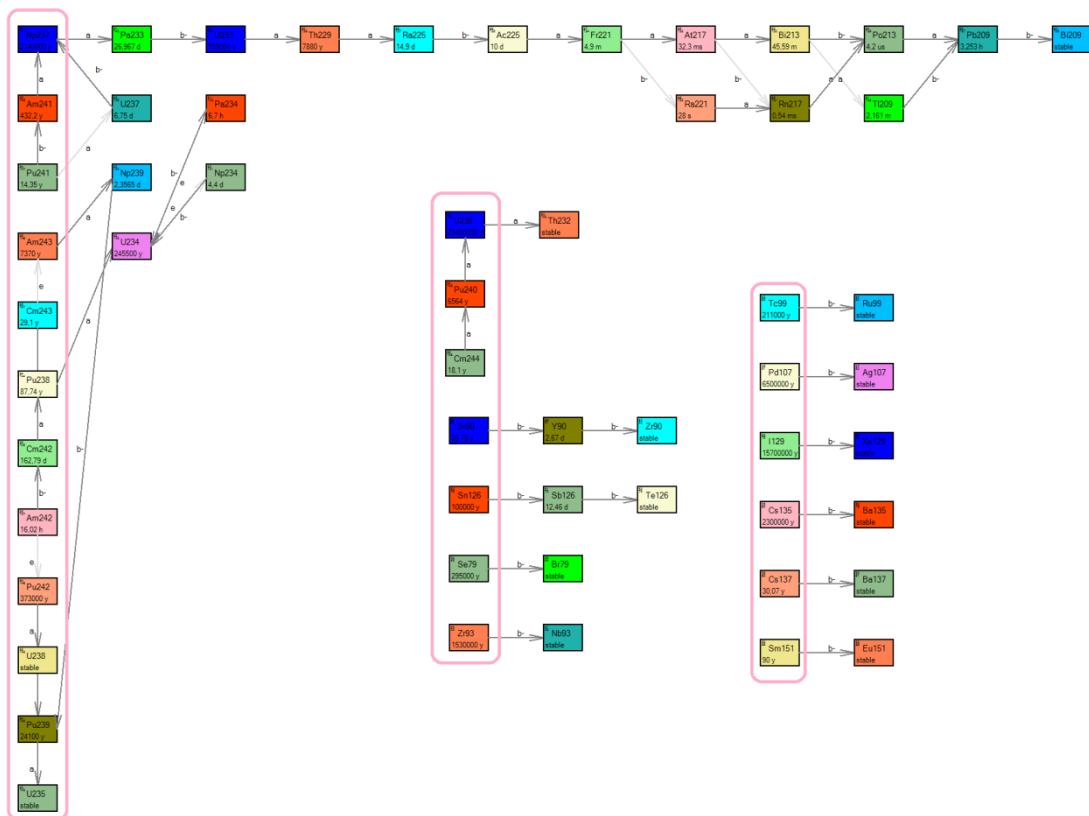


Рисунок 4 – Цепочки распадов смоделированные системой в ОЯТ реактора ВВЭР 1000

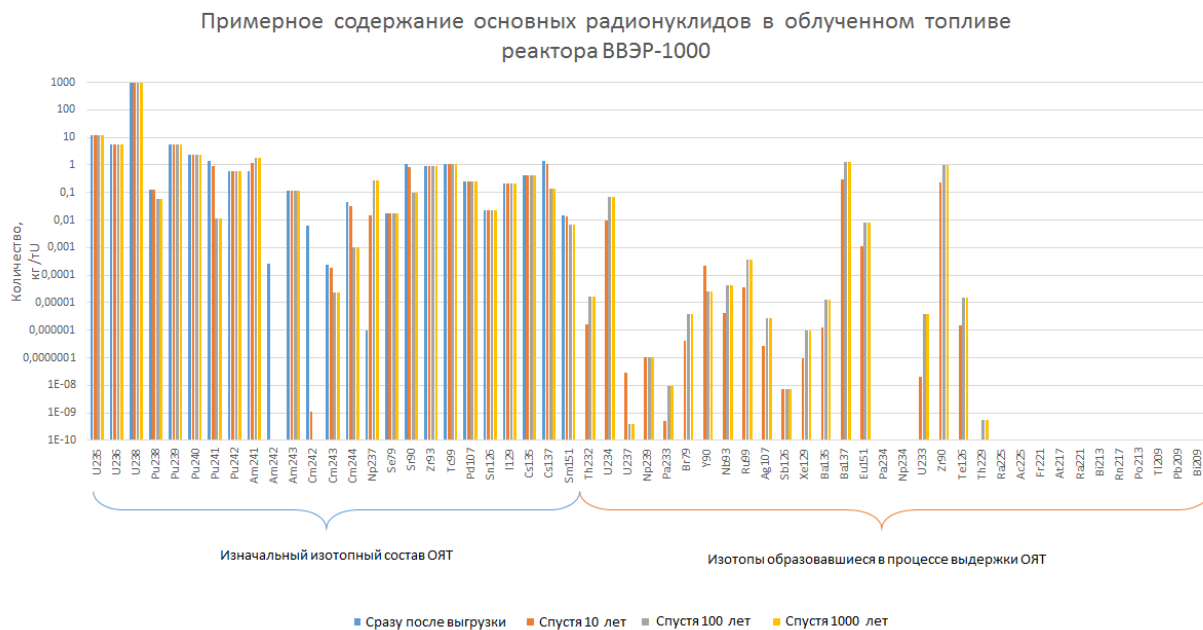


Рисунок 5 – Изменение изотопного состава в ОЯТ реактора ВВЭР 1000

На рисунке 5 представлено изменение изотопного состава в ОЯТ при длительной выдержке. Учитывая приведенные радиозэкологические характеристики ОЯТ и результаты моделирования можно охарактеризовать его, в первую очередь, как высокоактивный материал, который с экологической точки зрения представляет опасность не только в краткосрочном плане, но и в долгосрочной перспективе.

### Заключение

В работе представлен обзор основных методов расчета изменения изотопного состава ядерного топлива. На основе решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка, предложенного Бейтманом, составлен алгоритм расчета основных параметров трансмутации на основе направленного графа превращений нуклидов.

Создана интерактивная система, дающая пользователю возможность проводить оценку эффективности трансмутации нуклидов в процессе выдержке при различных условиях.

## Список литературы

1. Bateman H. Solution of a System of Differential Equations Occurring in The Theory of Radio-Active Transformation., University of Cambridge, Proc. Phil. Soc. 1910 pp 423-427.
2. В.И. Пляскин, Р.А. Косилов, Г.Н. Мантуров. Справочно–Информационная Интерактивная Система "Трансмутация Нуклидов в Ядерных Реакторах // Вопросы атомной науки и техники, Т. 2, № 1, 2003. сс. 103-109.
3. Depth-first search // In: Introduction to Algorithms, Second Edition / Ed. by Thomas H. Cormen, Charles E. Leiserson, Ronald L. Rivest, and Clifford Stein. The MIT Press, 2001. pp. 540–549.
4. Tables of Nuclear Data [Электронный ресурс] // Japan Atomic Energy Agency, Nuclear Data Center: [сайт]. [1995-2016]. URL: <http://www.ndc.jaea.go.jp/> (дата обращения: 15.10.2015).
5. Chart of Nuclides [Электронный ресурс] // The National Nuclear Data Center (NNDC): [сайт]. [2012]. URL: <http://www.nndc.bnl.gov/chart/> (дата обращения: 4.10.2015).
6. Fusion Evaluated Nuclear Data Library [Электронный ресурс] // International Atomic Energy Agency - Nuclear Data Section: [сайт]. [2004]. URL: <https://www-nds.iaea.org/fendl21/> (дата обращения: 10.9.2015).
7. В.М. Колобашкин, П.М Рубцов, П.А Ружанский, В.Д Сидоренко. Радиационные характеристики облученного ядерного топлива: Справочник. М.: Энергоатомиздат, 1983. 382 с.