

ВАЛИДАЦИЯ ПРОГРАММЫ НУКЛИДНОЙ КИНЕТИКИ TRACT ДЛЯ ОЦЕНКИ РАДИАЦИОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ОЯТ И РАО

А. И. Блохин, П. А. Блохин, С. Т. Казиева, И. В. Сипачев

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН, Москва

Статья поступила в редакцию 6 октября 2022 г.

В статье представлена матрица верификации программы для расчета нуклидной кинетики TRACT, продемонстрированы результаты валидации программы с использованием данных, полученных при выполнении реакторных экспериментов. Приведены рекомендации к проведению будущих экспериментальных исследований ОЯТ, важные для задачи оценки безопасности долговременного хранения и захоронения ОЯТ и РАО, образующихся при его переработке.

Ключевые слова: расчетный код, нуклидная кинетика, отработавшее ядерное топливо, радиационные характеристики, энерговыделение, водо-водяной энергетический реактор, верификация, валидация, реактор, радиоактивные отходы.

Введение

В соответствии со статьей 26 Федерального закона № 170-ФЗ «Об использовании атомной энергии» [1] при обосновании безопасности объектов использования атомной энергии (ОИАЭ) требуется применение аттестованных программных средств. Для этого проводится их валидация и верификация. Программа TRACT [2], [3] разработана для решения задач расчета радионуклидного состава радиоактивных отходов (РАО). На данном этапе разработки основное внимание уделяется оценке радиационных характеристик РАО класса 1 [4]. Основной объем таких отходов накоплен на ФГУП «ПО «Маяк» в виде алюмофосфатного стекла (АФС), которое образуется в результате переработки отработавшего ядерного топлива (ОЯТ) реакторов (ВВЭР-440, БН-600, 800 и др.) и иммобилизации

(остекловывания) образующихся жидких РАО в алюмофосфатную стекломатрицу. Данные по измерениям радионуклидного состава АФС, с помощью которых можно было бы провести валидацию программы TRACT, на данный момент отсутствуют. С учетом того, что переработанное ОЯТ ВВЭР-440 составляет основной объем (более 80 %) жидких РАО, при отверждении которого образуются АФС, в данной работе показаны результаты валидации программы для рассматриваемого типа топлива.

В связи с тем, что в ближайшей перспективе планируется запустить новый завод по переработке ОЯТ ВВЭР-1000 (ОДЦ ФГУП «ГХК»), в статье представлены результаты валидации программы для анализа продуктов переработки данного топлива.

Программа для расчета нуклидной кинетики TRACT

Актуальность создания программы для расчетных исследований трансмутации и активации материалов для решения практических задач, связанных с обращением с накопленным ОЯТ и РАО, образующимися при выводе из эксплуатации реакторных установок, возросла в связи с планами по выводу реакторов типа РБМК, ВВЭР и необходимостью оценки радиационных характеристик (РХ) ОЯТ, облученных конструкционных материалов и образующихся в результате их переработки РАО, в особенности для задач их долговременного хранения и захоронения.

На данный момент экспериментальные данные по измерениям массовых содержаний нуклидов в ОЯТ ВВЭР-440 и ВВЭР-1000 представлены для ограниченного числа радионуклидов (р/н) (трансурановые элементы, цезий, неодим и др.) и для малых времен выдержки (до 10–30 лет). Этих данных недостаточно для проведения полноценного анализа РХ ОЯТ и РАО, в частности при решении задач по оценке долговременной безопасности. В основном это связано с необходимостью оценки их на большие времена выдержки и дополнительным учетом массовых содержаний р/н (^{129}I , ^{36}Cl , ^{79}Se и т. д.) [5], [6].

В табл. 1 перечислены представленные в базе экспериментальных данных SF-Compro [7] изотопы, для которых было измерено их массовое содержание в ОЯТ. Результаты экспериментальных исследований ОТВС, извлеченных из 2-го и 3-го блоков Балаковской АЭС (БаАЭС), 1-го блока Калининской АЭС (КАЭС) с реакторами

ВВЭР-440, 4-го блока Нововоронежской АЭС (НВАЭС) с реактором ВВЭР-1000, использовались при валидации расчетов по программе TRACT. При этом по остальным экспериментам имеется либо недостаток информации по измерениям отработавших тепловыделяющих сборок (ОТВС) и их режимам облучения, например для ОТВС, извлеченных из блоков НВАЭС-3 и НВАЭС-5, либо отсутствие в открытом доступе данных по измерениям, например для ОТВС из 3-го блока Кольской АЭС (КоАЭС).

В связи со сложностью измерения труднодетектируемых радионуклидов применяются различные способы их оценки, например, такие как метод радионуклидного вектора [5], но основным способом остаются расчетные исследования. К примеру, МАГАТЭ в своем докладе рекомендовало совместное выполнение экспериментальных и расчетных исследований для повышения надежности оценки РХ облученных материалов [8].

Программа TRACT [2], [3], разрабатываемая в ИБРАЭ РАН, позволяет моделировать изменение изотопного состава материалов в процессе нейтронного облучения, в результате ядерных взаимодействий и радиоактивного распада образующихся нестабильных нуклидов. Математическая модель нуклидной кинетики представляет собой систему линейных дифференциальных уравнений первого порядка с постоянными коэффициентами. Для численного решения системы используется метод матричной экспоненты Дж. Сиделла [9]. Программа аттестуется вместе с библиотеками ядерных данных (табл. 2), которые являются ее неотъемлемой частью.

Таблица 1. Изотопы, представленные в базе экспериментальных данных SF-Compro [7]

ВВЭР-1000				ВВЭР-440			
НВАЭС-5	КАЭС-1	БаАЭС-2	БаАЭС-3	КоАЭС-3	НВАЭС-4		НВАЭС-3
^{235}U , ^{236}U , ^{238}U , ^{238}Pu , ^{239}Pu , ^{240}Pu , ^{241}Pu , ^{242}Pu , ^{243}Am , ^{244}Cm ,							
^{242}Cm							
^{234}U			^{234}U				
^{241}Am , ^{143}Nd , ^{144}Nd , ^{145}Nd , ^{146}Nd							
^{148}Nd			^{148}Nd				
^{142}Nd			^{142}Nd				
^{236}Pu			^{236}Pu				
^{137}Cs	^{137}Cs						
^{237}Np , ^{155}Gd , ^{151}Eu , ^{153}Eu , ^{154}Eu , ^{155}Eu , ^{147}Sm , ^{149}Sm , ^{150}Sm , ^{151}Sm , ^{152}Sm , ^{133}Cs , ^{134}Cs , ^{135}Cs , ^{109}Ag , ^{105}Pd , ^{108}Pd , ^{101}Ru , ^{95}Mo							
^{245}Cm , ^{246}Cm , $^{242\text{m}}\text{Am}$, ^{154}Sm , ^{148}Sm , ^{150}Nd , ^{140}Ce , ^{142}Ce , ^{99}Tc							
^{144}Ce , ^{103}Rh							

Таблица 2. Набор библиотек ядерных данных программы TRACT [2]

№ п/п	Библиотеки ядерных данных	Содержание библиотеки
1	Микроскопические ядерные данные по сечениям взаимодействия нейтронов с изотопами	704 изотопа от ^1H до ^{257}Fm в области энергий нейтронов до 20 МэВ
2	Радиационные характеристики радиоактивных ядер	~3500 радиоизотопов от ^3H до ^{258}Fm
3	Выходы продуктов при делении актинидов нейтронами	44 актинида от ^{227}Th до ^{256}Fm – данные для вынужденного деления нейтронами
4	Выходы продуктов при спонтанном делении актинидов	15 актинидов от ^{232}Th до ^{256}Fm
5	Выходы и энергии альфа-частиц при радиоактивном распаде	Изотопы от ^{145}Pm до ^{257}Fm , имеющие канал альфа-распада
6	Сечения (α, n) реакций на легких элементах, энергетический порог которых не превышает максимальной энергии альфа-частиц 7 МэВ	10 элементов от Li до Si и 17 их изотопов

Зарубежными аналогами можно считать наиболее известные программы, такие как программа для расчета радионуклидного состава FISPACT-2001, входящая в пакет европейской системы расчета активации EASY-2001 [10], программы ACDAM [11], ORIGEN, ALARA и др. В нашей стране на данный момент разработаны и аттестованы программы решения задач нуклидной кинетики для анализа безопасности быстрых реакторов: BPSD/V2.1, CARE_03, TAPUCA-9, ORIGEN-2 и т. д.; для водо-водяных реакторов: TBC-M, MCU-PD, SFUEL(1.0), CHAIN и т. д.; для РБМК: NUCMA; для ЭГП-6: ядерный калькулятор ЭГП-6 [12].

Программа TRACT содержит заранее подготовленные в нужном формате библиотеки ядерных данных [2] и позволяет моделировать процесс изменения радионуклидного состава материала в результате его облучения нейтронами с энергиями до 20 МэВ, при этом учитываются все открытые каналы нейтронных реакций, в т. ч. образования новых ядер в основном и метастабильных состояниях, и все каналы распадов, константы по которым содержатся в используемых в программе библиотеках радиационных данных [2].

Отбор экспериментальных и расчетных исследований ОЯТ и РАО для валидации программы TRACT

Для верификации программы с целью оценки радиационных характеристик ОЯТ, облученных конструкционных материалов и РАО, образующихся в результате переработки, в особенности для задач их долговременного хранения и захоронения, отобраны экспериментальные и расчетные исследования ОЯТ и РАО, содержащие наиболее полный объем информации, требуемой для расчетного моделирования.

В первую часть матрицы верификации программы TRACT включены наиболее известные на сегодняшний день расчетные исследования РХ ОЯТ и РАО. Справочник [13] является классическим источником данных по таким РХ ОЯТ ВВЭР, как активность, тепловыделение интегральное и его компонент (альфа-, бета- и гамма-), и используется в данной работе для подтверждения надежности расчетов радиационных характеристик ОЯТ. Руководство по безопасности РБ-093-20 [14] содержит рекомендованные данные по радиационным и теплофизическим характеристикам ОЯТ ВВЭР-440, 1000, 1200.

Во вторую часть матрицы верификации включены результаты экспериментальных исследований РХ облученных материалов, ОЯТ и РАО. Одним из наиболее известных бенчмарков является эксперимент [15] по измерению тепловыделения продуктов деления при облучении ядер-мишеней ^{239}Pu , ^{235}U и ^{238}U тепловыми нейтронами. Результаты эксперимента традиционно используются в международных сравнительных тестах [16], [17] для подтверждения надежности расчетов.

В настоящее время многие экспериментальные исследования по выгоранию ОЯТ ВВЭР-440 и ВВЭР-1000, представленные в отечественной литературе, содержат недостаточно подробные (детальные) описания экспериментов, например, по режиму облучения ОТВС (по его длительности и их расположению в различных областях активной зоны при перестановках в течение процесса), по выдержке сборки и т. д., необходимые для проведения расчетного моделирования, а также информацию по точности полученных результатов измерений. Наиболее полное описание эксперимента для ОЯТ реактора ВВЭР-440 было представлено в работе [18], которая выполнена в рамках проекта МНТЦ-2670р, в котором были измерены массовые выходы для 4 изотопов урана, 11 актинидов

и 32 продуктов деления в образцах, вырезанных из ОТВС 4-го блока НВАЭС. В качестве наиболее содержательного экспериментального исследования по выгоранию ОЯТ ВВЭР-1000 для проведения валидации был выбран эксперимент по измерениям массовых содержаний изотопов в образцах, вырезанных из ОТВС блоков КАЭС и БалаЭС с реакторами ВВЭР-1000 [19], в котором данные были представлены для меньшего числа изотопов (3 изотопов урана, 12 актинидов и 5 продуктов деления) по сравнению с предыдущим экспериментом.

Матрица верификации

Для верификации и валидации программы TRACT были выбраны экспериментальные и расчетные исследования, которые имеют широкую известность среди научного сообщества и активно используются в задачах тестирования, а также содержащие наиболее полный объем информации, требуемый для расчетного моделирования, и сформирован набор тестовых задач. Матрица верификации, включающая отобранные тестовые задачи, представлена в табл. 3.

Таблица 3. Матрица верификации программы TRACT для расчета радионуклидных составов и радиационных характеристик ОЯТ и РАО

№ п/п	Назначение расчетного исследования/эксперимента	Реакторная установка	Материал
1	Определение активности и α -, β -, γ -энерговыведения (на основе данных справочника* [13])	ВВЭР-440 (30 МВт-сут/кгU)	Диоксид урана, 3,6% обогащения
2		ВВЭР-1000 (40 МВт-сут/кгU)	Диоксид урана, 4,4% обогащения
3	Определение остаточного тепловыделения (на основе данных из руководства РБ-093-20 [14])	ВВЭР-440 (30 МВт-сут/кгU)	Диоксид урана, 3,6–4,87% обогащения
4		ВВЭР-1000 (40 МВт-сут/кгU)	Диоксид урана, 3–4,95% обогащения
5		ВВЭР-1200 (50 МВт-сут/кгU)	Диоксид урана, 3,3–4,95% обогащения
6	Измерения остаточного тепловыделения продуктов деления [15–17]	Omega West (OWR) (исследовательский реактор на тепловых нейтронах)	^{239}Pu , ^{235}U , ^{235}U
7	Измерения массовых выходов актинидов и продуктов деления (определение нуклидного состава) [18, 19]	ВВЭР-440	Диоксид урана, 3,6% и 4,3% обогащения
8		ВВЭР-1000	Диоксид урана, 4,3% обогащения

*справочник по радиационным характеристикам облученного ядерного топлива / Колобашкин В. М., Рубцов П. М., Ружанский П. А., Сидоренко В. Д. [13] (далее – справочник)

Результаты верификации и валидации

Тестовые задачи 1–2

В справочнике [13] приведены данные по РХ отработавшего ядерного топлива реакторов ВВЭР-440 и ВВЭР-1000. Результаты расчетов по тестовой задаче 1 были представлены ранее в публикации [4]. По задаче 2 справочные данные и результаты расчета РХ (активности, энерговыделения и его компонент, удельного выхода гамма-излучения) ОЯТ ВВЭР-1000 с 4,4% начальным обогащением по ^{235}U при выгорании до 40,48 МВт-сут/кгU в зависимости от времени выдержки приведены на рис. 1–3.

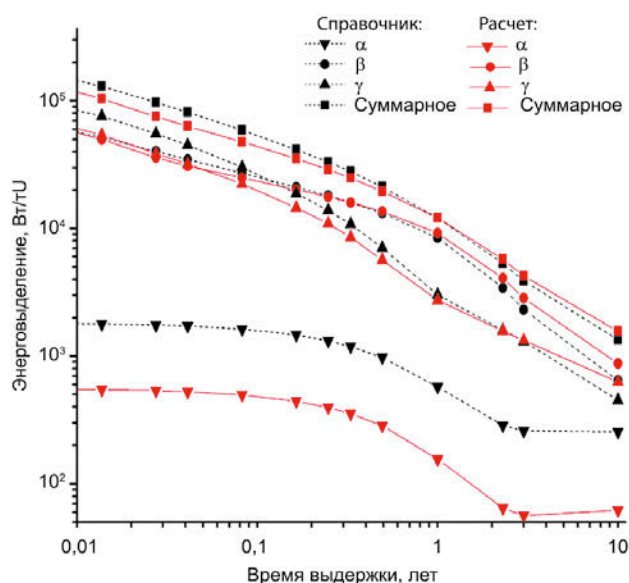


Рис. 1. Зависимость энерговыделения ОЯТ ВВЭР-1000 и его компонент от времени выдержки

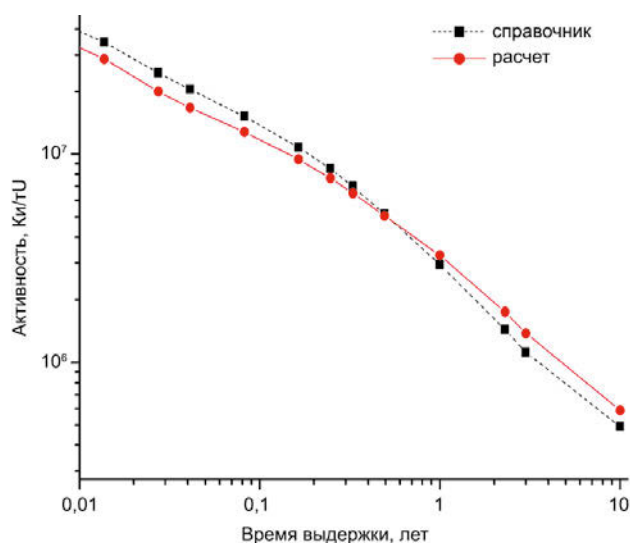


Рис. 2. Зависимость активности ОЯТ ВВЭР-1000 от времени выдержки

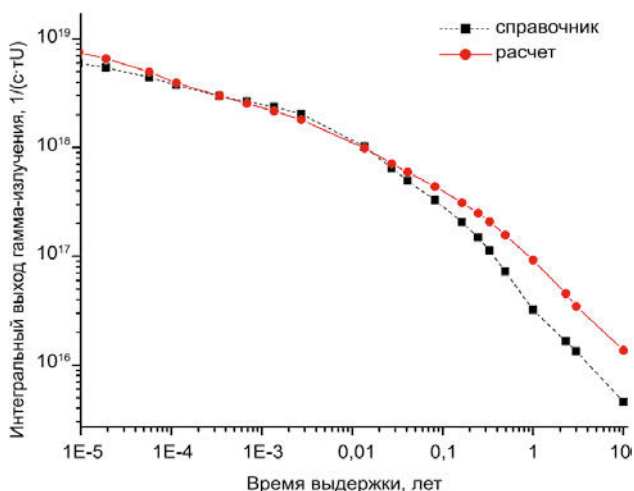


Рис. 3. Зависимость интегрального выхода гамма-излучения ОЯТ ВВЭР-1000 от времени выдержки

Результаты вычислений, полученные в виде наборов значений удельной активности и энерговыделения от времен выдержек ОЯТ, коррелируют с данными (на соответствующих временных интервалах), представленными в справочнике [13]. Как показали тестовые расчеты по анализу накопления продуктов деления и актинидов в ОЯТ реактора ВВЭР-1000, разница в полученных расчетных и справочных данных для минорных актинидов лежит в интервале (20–70)%. Это свидетельствует о том, что основным источником погрешности являются ядерные данные для минорных актинидов в используемых константных библиотеках. Как следствие, при их применении из различных библиотек оцененных ядерных данных наблюдаются значительные расхождения в полученных расчетных результатах для накопленных масс минорных актинидов [20]. Эти эффекты приводят к различиям в альфа-энерговыделении.

Тестовые задачи 3–5

В руководстве по безопасности РБ-093-20 [14] содержится информация по радиационным и теплофизическим характеристикам ОЯТ ВВЭР-440, 1000, 1200. Для сравнения с этими данными были получены результаты расчетов для различных средних начальных обогачений топлива по ²³⁵U и выгораний топлива для ВВЭР-440, ВВЭР-1000 и ВВЭР-1200 для времен выдержек от 1 года до 20 лет. На рис. 4 представлены данные по остаточному тепловыделению ОЯТ ВВЭР-440 с обогачением топлива 4,38% по ²³⁵U для глубины выгорания 30 ГВт·сут/тУ, полученные в результате проведения расчетов по программе TRACT, в сравнении с данными, приведенными в РБ-093-20 [14].

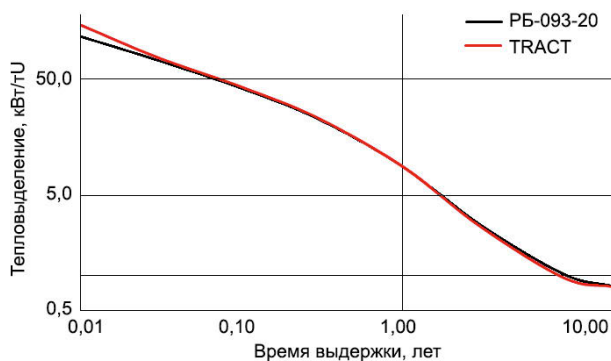


Рис. 4. Зависимость остаточного тепловыделения ОЯТ ВВЭР-440 с обогачением топлива 4,38% по ²³⁵U для глубины выгорания 30 ГВт·сут/тУ от времени выдержки

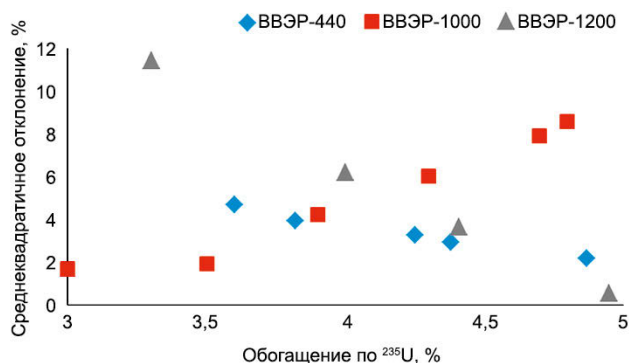


Рис. 5. Среднеквадратичные отклонения результатов расчета остаточного тепловыделения ОЯТ от значений для РБ-093-20 [14] в зависимости от обогачения топлива для реакторов серии ВВЭР

На рис. 5 показаны среднеквадратичные отклонения совокупности результатов расчета остаточного тепловыделения ОЯТ, полученных по тестовым задачам 3–5 от значений тепловыделений, представленных в руководстве по безопасности РБ-093-20 [14], для различных средних начальных обогачений топлива по ²³⁵U для ВВЭР-440 при глубине выгорания 30 ГВт·сут/тУ, для ВВЭР-1000 при глубине выгорания 40 ГВт·сут/тУ и для ВВЭР-1200 при глубине выгорания 50 ГВт·сут/тУ для времен выдержек от 1 года до 20 лет.

При сравнении результатов расчета по программе со справочными или экспериментальными значениями отклонение (в %) и среднее квадратичное отклонение σ совокупности результатов (также в %) в данной работе определялись по формулам:

$$\varepsilon = (F_{\text{расч}} - F_{\text{изм}}) / F_{\text{расч}} \cdot 100\%,$$

$$\sigma_{\varepsilon} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N \varepsilon_i^2}{N}}. \tag{1}$$

Средние квадратичные отклонения результатов расчета остаточного тепловыделения ОЯТ ВВЭР-440, ВВЭР-1000 и ВВЭР-1200 от данных,

представленных в руководстве по безопасности РБ-093-20, не превышают 12 %.

Тестовая задача 6

Итоги расчетов по тестовой задаче 6 из матрицы верификации были опубликованы в работе [21]. Анализ полученных результатов моделирования позволяет заключить, что для коротких времен облучения «тонких» мишеней ^{235}U и ^{239}Pu , в которых пренебрежимо мало ослабление нейтронного потока, получено удовлетворительное согласие расчетных и экспериментальных данных по энерговыделению, что свидетельствует о надежности алгоритма разработанного кода нуклидной кинетики и включенных в программный комплекс библиотек ядерных данных по выходам продуктов деления и радиационным параметрам.

Полученные в этой работе результаты расчетов в целом согласуются с экспериментальными данными в пределах погрешностей измерений. Исключение составляет только расчет энерговыделения в образце ^{235}U , что свидетельствует о необходимости уточнения библиотек констант для этого изотопа.

Тестовая задача 7

Результаты расчетов были опубликованы в докладе на конференции [22]. На рис. 6 и 7 представлены их отклонения по массовому содержанию актинидов и продуктов деления в образце 57, вырезанном из ОТВС реактора ВВЭР-440 при уровне выгорания топлива 36 ГВт-сут/тU, от экспериментальных данных.

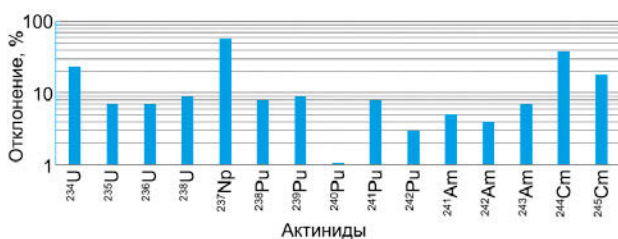


Рис. 6. Отклонения результатов расчетов по накоплению актинидов в образце 57 ОТВС ВВЭР-440 при уровне выгорания топлива 36 ГВт-сут/тU от экспериментальных значений

Для большинства актинидов отклонение расчетных и измеренных данных лежит в пределах до 10%. Для ^{234}U , накопление которого составляет $\sim 100 \text{ г/тU}_{\text{исх}}$, отклонение достигает величины порядка 24%. Для ^{237}Np и ^{244}Cm — до 60%. Следует отметить, что причиной таких отклонений могут быть и неточности в экспериментальных значениях. Как отмечено в работе [18], для образца 57



Рис. 7. Отклонения результатов расчетов по накоплению продуктов деления в образце 57 ОТВС ВВЭР-440 при уровне выгорания топлива 36 ГВт-сут/тU от экспериментальных значений

содержание ^{237}Np определено с погрешностью в 39%, а ^{244}Cm — с погрешностью 33%. Для ^{238}U практически для всей рассмотренной области выгорания наблюдается превышение расчетных данных до 10%, что может быть связано с заниженными значениями сечения радиационного захвата нейтронов в используемой библиотеке.

В целом выходы большинства продуктов деления известны с точностью до $\sim 20\%$. Представленные данные по их накоплению имеют достаточно большой интервал расхождений в основном для стабильных и долгоживущих продуктов деления с малым выходом (например, по изотопам ^{105}Pd , ^{95}Mo , ^{101}Ru). Одной из причин может быть погрешность экспериментальных данных, которая достигает нескольких десятков процентов.

Сравнение полученных расчетных данных с экспериментом в целом показало адекватность расчетного моделирования рассматриваемых физических процессов.

Тестовая задача 8

Итоги расчетов были представлены в докладе на конференции [22]. Отметим, что по сравнению с данными, приведенными для ВВЭР-440, измерения для ВВЭР-1000 проведены для малого числа нуклидов. На рис. 8 показаны отклонения результатов расчетов содержания актинидов и продуктов деления в образце 581, вырезанном из ОТВС реактора ВВЭР-1000, от экспериментальных значений.



Рис. 8. Отклонения результатов расчетов содержания актинидов и продуктов деления в образце 581 от экспериментальных значений

Для изотопа ^{236}U практически для всей рассмотренной области выгорания наблюдается занижение расчетных значений до 10%. Для изотопов неодима отклонения результатов лежат в пределах 2–3%, за исключением изотопов ^{142}Nd и ^{144}Nd , для которых расхождения доходят до 11% и 18% соответственно.

Кросс-верификация

Для проведения кросс-верификации были выполнены расчеты РХ ОЯТ ВВЭР-440 по программе FISPACT из пакета EASY-2010 [10]. Для сравнения этих результатов расчетов с полученными в программе TRACT моделировались условия тестовой задачи 1. На рис. 9 и 10 представлены графики зависимости активности и энерговыделений (альфа-, бета-, гамма-, суммарного) от времени выдержки до 1 000 000 лет.

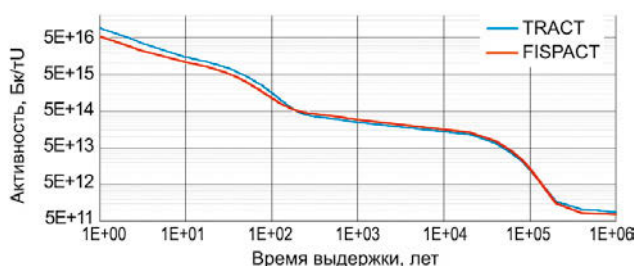


Рис. 9. Зависимость интегральной активности ОЯТ ВВЭР-440 от времени выдержки до 1 000 000 лет

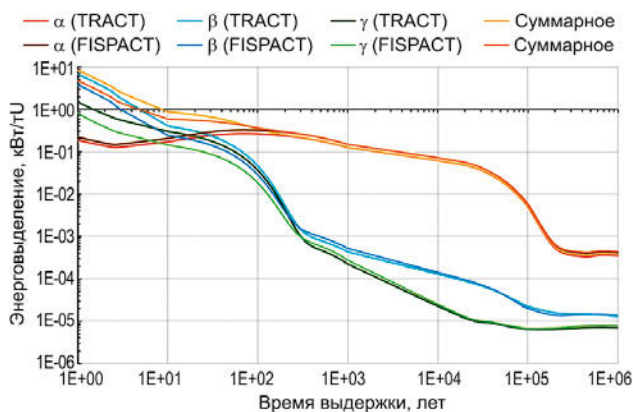


Рис. 10. Зависимость энерговыделения (альфа-, бета-, гамма- и суммарного) от распада для ОЯТ ВВЭР-440 от времени выдержки до 1 000 000 лет

Близкие результаты расчетных значений активностей и энерговыделения от облученных образцов, полученные по программам FISPACT и TRACT и продемонстрированные на рис. 9 и 10, свидетельствуют о возможности применения кода TRACT для проведения оценок радиационных характеристик ОЯТ реакторов ВВЭР на большие времена — до 1 000 000 лет выдержки в рамках долговременной безопасности.

Заключение

В статье представлены результаты валидации и верификации программы TRACT для решения задач оценки радионуклидных составов ОЯТ реакторов типа ВВЭР. Такой выбор определен потребностью в оценке радионуклидных составов остеклованных РАО (АФС) — продуктов переработки отработавшего топлива.

Для этого были проанализированы и отобраны экспериментальные и справочные данные с достаточным для расчетного моделирования описанием. Было показано, что нет информации по измерениям содержания радионуклидов (^{129}I , ^{36}Cl , ^{79}Se и т. д.), важных для обоснования долговременной безопасности, и требуется проведение экспериментальных исследований радионуклидного состава ОЯТ с учетом данных изотопов.

Итоги валидации и кросс-верификации по расчетам РХ и нуклидного состава ОЯТ, полученные в данной работе, демонстрируют адекватность расчетного моделирования рассматриваемых физических процессов и свидетельствуют о надежности таких исследований.

При анализе измерений массовых содержаний нуклидов в ОЯТ для большинства актинидов наблюдается отклонение расчетных и измеренных данных в пределах до 10%, а выходы большинства продуктов деления определены с точностью до ~20%.

Результаты сопоставления с данными, полученными по программе FISPACT, свидетельствуют о возможности применения кода TRACT в рамках анализа долговременной безопасности для проведения оценок РХ ОЯТ реакторов ВВЭР на времена выдержки до 1 000 000 лет.

Литература

1. Федеральный закон от 21 ноября 1995 г. № 170-ФЗ «Об использовании атомной энергии».
2. 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.
3. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2020613540 Российская Федерация. Программа для оценки радионуклидных составов и радиационных характеристик ОЯТ и РАО (TRACT) : № 2020610528 : заявл. 20.01.2020 : опублик. 18.03.2020 / А. И. Блохин, П. А. Блохин, И. В. Сипачев ; заявитель Российская Федерация, от имени которой выступает Государственная корпорация по атомной энергии «Росатом».

4. Блохин А. И., Блохин П. А., Казиева С. Т. Применение расчетного кода TRACT для оценок радионуклидных составов и радиационных характеристик ОЯТ и РАО класса 1 // Радиоактивные отходы. 2020. № 4 (13). С. 99—111. DOI: 10.25283/2587-9707-2020-4-99-111.
5. Александрова Т. А., Блохин П. А., Самойлов А. А., Курындин А. В. Анализ данных по радионуклидному составу РАО в контексте оценки долговременной безопасности их захоронения // Радиоактивные отходы. 2018. № 2 (3). С. 44—51.
6. Самойлов А. А., Блохин П. А., Болдырев К. А., Уткин С. С., Семенов М. А., Коновалов В. Ю. Методический подход к определению радиологически значимых радионуклидов для оценки долговременной безопасности пунктов захоронения радиоактивных отходов // Вопросы радиационной безопасности. 2017. Т. 87. № 3. С. 21—31.
7. Michel-Sendis F., Martinez-González J., Gauld I. SFCOMPO 2.0 — A relational database of spent fuel isotopic measurements, reactor operational histories, and design data // EPJ Web of Conferences, 2017, 146. DOI: 10.1051/epjconf/201714606015.
8. Radiological characterization of shut down nuclear reactors for decommissioning purposes. Technical report series no. 389. IAEA, Vienna, 1998.
9. Sidell J. EXTRA — A digital computer program for the solution of stiff sets of ordinary value, first order differential equations. AEEW-R-799. 1972.
10. Forrest R. A. FISPACT-2007: User Manual. Technical Report UKAEA FUS 534, EURATOM/UKAEA Fusion Association, March 2007.
11. Блохин А. И. и др. Расчетный комплекс ACDAM-2.0 для исследований ядерных физических свойств материалов в условиях нейтронного облучения // ВАНТ. Серия: Материаловедение и новые материалы. 2015. Вып. 3 (82). С. 81—109.
12. База аттестационных паспортов программ для ЭВМ : сайт НТЦ ЯРБ. [Электронный ресурс]. 2022. Дата обновления: 03.2021. URL: https://docs.secnrs.ru/catalog/databases/Baza_attestatsionnykh_pasportov_programm_dlya_EVM/ (дата обращения: 06.09.2022).
13. Колобашкин В. М., Рубцов П. М., Ружанский П. А., Сидоренко В. Д. Радиационные характеристики облученного ядерного топлива : Справочник. — М. : Энергоатомиздат, 1983. 382 с.
14. Радиационные и теплофизические характеристики отработавшего ядерного топлива водо-водяных энергетических реакторов и реакторов большой мощности канальных: утв. Приказом Федеральной службы по экологическому, технологическому и атомному надзору от 11 марта 2020 г. № 106.
15. Yarnell J. L., Bendt P. J. 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.
16. Tobias A. Decay Heat Testing of the UK-ENDF/B-IV format fission product decay data file. Report DIDWG/(77)P159, 1977.
17. Duchemin B., Nordborg C. Decay Heat Calculation — An International Nuclear Code Comparison. NEACRP-319 “L”, France, 1989.
18. Jardine L. J. Radiochemical Assays of Irradiated WWER-440 Fuel for Use in Spent Fuel Burn-up Credit Activities. Lawrence Livermore National Laboratory, UCRL-TR-212202, April 26, 2005.
19. Murphy B. D., Kravchenko J., Lazarenko A., Pavlovitchev A., Sidorenko V., Chetverikov A. Simulation of Low-Enriched Uranium (LEU) Burnup in Russian VVER Reactors with the HELIOS Code Package. Report ORNL/TM-1999/168, March 2000.
20. Блохин А. И., Митенкова Е. Ф., Блохин Д. А., Булеева Н. Н., Манохин В. Н., Сипачев И. В. Атлас нейтронных ядерных сечений для актинидов : Препринт ИБРАЭ РАН № ИБРАЭ-2008-04. — М. : ИБРАЭ РАН, 2008. Часть 1. Описание рекомендованных нейтронных сечений для актинидов. 20 с.; Часть 2. Графики ядерных нейтронных сечений для актинидов. 94 с.
21. Блохин П. А., Блохин А. И., Сипачёв И. В. Разработка и верификация кода нуклидной кинетики TRACT // Сборник статей по материалам международной научно-практической конференции «Экологическая, промышленная и энергетическая безопасность — 2018». Под ред. Л. И. Лукиной, Н. А. Бежина, Н. В. Ляминой. 2018. С. 189—193.
22. Блохин А. И., Блохин П. А., Казиева С. Т. Кросс-верификация и валидация программы TRACT на основе экспериментальных данных реакторов ВВЭР-440 и ВВЭР-1000 // Радиационная защита и радиационная безопасность в ядерных технологиях : Сборник материалов XI Российской научной конференции, Москва, 26—29 октября 2021 года. — Москва: ИБРАЭ РАН, 2022. С. 118—126.

Информация об авторах

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

Блохин Павел Анатольевич, кандидат технических наук, заведующий лабораторией, Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН (115191, Москва, Большая Тульская ул., д. 52), e-mail: blokhin@ibrae.ac.ru.

Казиева Сабина Темергалиевна, младший научный сотрудник, Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН (115191, Москва, Большая Тульская ул., д. 52), e-mail: kazieva@ibrae.ac.ru.

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

Библиографическое описание статьи

Блохин А. И., Блохин П. А., Казиева С. Т., Сипачев И. В. Валидация программы нуклидной кинетики TRACT для оценки радиационных характеристик ОЯТ и РАО // Радиоактивные отходы. 2022. № 4 (21). С. 48–57. DOI: 10.25283/2587-9707-2022-4-48-57.

VALIDATION OF NUCLIDE KINETICS CODE TRACT FOR THE ASSESSMENT OF SNF AND RW RADIATION CHARACTERISTICS

Blokhin A. I., Blokhin P. A., Kazieva S. T., Sipachev I. V.
Nuclear Safety Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

Article received on October 6, 2022

The article presents a verification matrix for the TRACT code designed for nuclide kinetics calculations and demonstrates code validation results based on data from reactor experiments. It provides recommendations regarding future experimental SNF studies considered important in terms of assessing the long-term storage and disposal safety of SNF and RW generated from SNF reprocessing.

Keywords: calculation code, nuclide kinetics, spent nuclear fuel, radiation characteristics, energy release, pressurized water power reactor, verification, validation, reactor, radioactive waste.

References

1. Federal Law No. 170-FZ of November 21, 1995 On Atomic Energy Use.

2. Blokhin A. I., Blokhin P. A., Sipachev I. V. Vozmozhnosti raschetnogo koda TRACT dlya resheniya zadach kharakterizatsii radionuklidnogo sostava RAO i OYAT [Capabilities of the TRACT code addressing the problems of radioactive waste and spent fuel characterization]. *Radioaktivnye otkhody – Radioactive Waste*, 2018, no. 2 (3), pp. 95–104.

3. Blokhin A. I., Blokhin P. A., Sipachev I. V. *Programma dlya otsenki radionuklidnykh sostavov i radiatsionnykh kharakteristik OYAT i RAO (TRACT)* [Code designed to estimate the radionuclide compositions and radiation characteristics of SNF and RW (TRACT)]. Certificate of state registration No. 2020613540 IBRAE RAS, State Corporation Rosatom.

4. Blokhin A. I., Blokhin P. A., Kazieva S. T. Primenenie raschetnogo koda TRACT dlya otsenok radionuklidnykh sostavov i radiatsionnykh kharakteristik OYAT i RAO klassa 1 [TRACT Computer Code Application in the Assessment of SNF and RW Class 1 Radionuclide Compositions and Radiation Characteristics]. *Radioaktivnye*

otkhody – Radioactive Waste, 2020, no. 4 (13), pp. 99–111. DOI: 10.25283/2587-9707-2020-4-99-111.

5. Alexandrova T. A., Blokhin P. A., Samoylov A. A., Kuryndin A. V. Analiz dannykh po radionuklidnomu sostavu RAO v kontekste otsenki dolgovremennoi bezopasnosti ikh zakhroneniya [Analysis of the RW Radionuclide Composition in the Context of Long-Term Safety of Its Disposal]. *Radioaktivnye otkhody – Radioactive Waste*, 2018, no. 2 (3), pp. 44–51.

6. Samoylov A.A., Blokhin P.A., Boldyrev K.A., Utkin S.S., Semenov M.A., Kononov V.Yu. Metodicheskiy podkhod k opredeleniyu radiologicheskikh znachimykh radionuklidov dlya otsenki dolgovremennoy bezopasnosti punktov zakhroneniya radioaktivnykh otkhodov [Methodological approach designed to identify radiologically significant radionuclides for the long-term safety assessment of radioactive waste disposal facilities]. *Voprosy radiatsionnoy bezopasnosti – Radiation Safety Issues*, 2017, vol. 87, no. 3, pp. 21–31.

7. Michel-Sendis F., Martinez-González J., Gauld I. SFCOMPO 2.0 – A relational database of spent fuel isotopic measurements, reactor operational histories, and design data. *EPJ Web of Conferences*, 2017, 146, DOI: 10.1051/epjconf/201714606015.

8. Radiological characterization of shut down nuclear reactors for decommissioning purposes. Technical report series no. 389. IAEA, Vienna, 1998.
9. Sidell J. EXTRA — A digital computer program for the solution of stiff sets of ordinary value, first order differential equations. AEEW-R-799. 1972.
10. Forrest R. A. FISPACT-2007: User Manual. Technical Report UKAEA FUS 534, EURATOM/UKAEA Fusion Association, March 2007.
11. Blokhin A. I. et al. Raschetnyy kompleks ACDAM-2.0 dlya issledovaniy yadernykh fizicheskikh svoystv materialov v usloviyakh neitronnogo oblucheniya [Calculation package ACDAM-2.0 designed to evaluate nuclear physical properties of materials under neutron irradiation impact]. VANT, ser. Materialovedenie i novye materialy — VANT, ser. Material science and new materials, 2015, iss. 3 (82), pp. 81–109.
12. Base of attestation passports for computer software: STC NRS website. [Electronic resource]. 2022. Update date: 03.2021. URL: https://docs.secnrs.ru/catalog/databases/Baza_attestatsionnykh_passportov_programm_dlya_EVM/ (date of access: 09/06/2022).
13. Kolobashkin V. M., Rubtsov P. M., Ruzhansky P. A., Sidorenko V. D. Radiatsionnyye kharakteristiki obluchennogo yadernogo topliva: Spravochnik [Radiation Characteristics of Irradiated Nuclear Fuel: Handbook]. Moscow, Energoatomizdat Publ., 1983. 382 p.
14. Radiation and thermophysical characteristics of spent nuclear fuel of water-moderated power reactors and high-power channel reactors: approved by Order of the Federal Service for Ecological, Technological and Nuclear Supervision on March 11, 2020 No. 106.
15. Yarnell J. L., Bendt P. J. Calorimetric Fission Product Decay Heat Measurements for ^{239}Pu , ^{253}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.
16. Tobias A. Decay Heat Testing of the UK-ENDF/B-IV format fission product decay data file. Report DIDWG/(77)P159, 1977.
17. Duchemin B., Nordborg C. Decay Heat Calculation — An International Nuclear Code Comparison. NEACRP-319 “L”, France, 1989.
18. Jardine L. J. Radiochemical Assays of Irradiated WWER-440 Fuel for Use in Spent Fuel Burn-up Credit Activities. Lawrence Livermore National Laboratory, UCRL-TR-212202, April 26, 2005.
19. Murphy B. D., Kravchenko J., Lazarenko A., Pavlovitchev A., Sidorenko V., Chetverikov A. Simulation of Low-Enriched Uranium (LEU) Burnup in Russian VVER Reactors with the HELIOS Code Package. Report ORNL/TM-1999/168, March 2000.
20. Blokhin A. I., Mitenkova Ye. F., Blokhin D. A., Buleyeva N. N., Manokhin V. N., Sipachev I. V. Atlas neytronnykh yadernykh secheniy dlya aktinidov [Atlas of neutron nuclear cross sections for actinides]. Preprint NSI RAS N°IBRAE-2008-04. — Moscow, Nuclear Safety Institute of RAS Publ., 2008. Chast' 1. Opisaniye rekomendovannykh neytronnykh secheniy dlya aktinidov [Part 1: Description of recommended neutron cross sections for actinides]. 20 p.; Chast' 2. Grafiki yadernykh neytronnykh secheniy dlya aktinidov [Part 2. Diagrams of nuclear neutron cross sections for actinides]. 94 p.
21. Blokhin P. A., Blokhin A. I., Sipachev I. V. Razrabotka i verifikatsiya koda nuklidnoy kinetiki TRACT [Development and verification of the TRACT nuclide kinetics code]. Sbornik statey po materialam mezhdunarodnoy nauchno-prakticheskoy konferentsii "Ekologicheskaya, promyshlennaya i energeticheskaya bezopasnost' — 2018" [Collection of articles based on the materials of the international scientific and practical conference Environmental, Industrial and Energy Safety — 2018]. Edited by L. I. Lukinoy, N. A. Bezgina, N. V. Lyaminoy. 2018. Pp. 189–193.
22. Blokhin A. I., Blokhin P. A., Kazieva S. T. Krossverifikatsiya i validatsiya programmy TRACT na osnove eksperimental'nykh dannykh reaktorov VVER-440 i VVER-1000 [Cross-verification and validation of the TRACT software based on the experimental data from VVER-440 and VVER-1000 reactors]. Proceedings of the XI Russian Scientific Conference Radiation Protection and Radiation Safety in Nuclear Technologies. Moscow, October 26–29, 2021, vol. 3, pp. 118–126.

Information about the authors

Blokhin Anatoly Ivanovich, Ph.D., leading researcher, Nuclear Safety Institute of the Russian Academy of Sciences (52, Bolshaya Tulsкая st., Moscow, 115191, Russia), e-mail: bai@ibrae.ac.ru.

Blokhin Pavel Anatolievich, Ph.D., head of laboratory, Nuclear Safety Institute of the Russian Academy of Sciences (52, Bolshaya Tulsкая st., Moscow, 115191, Russia), e-mail: blokhin@ibrae.ac.ru.

Kazieva Sabina Temergaliyevna, Junior researcher, Nuclear Safety Institute of the Russian Academy of Sciences (52, Bolshaya Tulsкая st., Moscow, 115191, Russia), e-mail: kazieva@ibrae.ac.ru.

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

Bibliographic description

Blokhin A. I., Blokhin P. A., Kazieva S. T., Sipachev I. V. Validation of Nuclide Kinetics Code TRACT for the Assessment of SNF and RW Radiation Characteristics. *Radioactive Waste*, 2022, no. 4 (21), pp. 48–57. DOI: 10.25283/2587-9707-2022-4-48-57. (In Russian).