

Государственная корпорация по атомной энергии «Росатом»
А К Ц И О Н Е Р Н О Е О Б Щ Е С Т В О
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ —
ФИЗИКО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ
имени А. И. Лейпунского

ФЭИ-3311

В. М. Декусар, А. Л. Мосеев, О. С. Гурская

**МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕЙТРОННО-ФИЗИЧЕСКИХ
ХАРАКТЕРИСТИК БЫСТРЫХ РЕАКТОРОВ
В СОСТАВЕ ИХ ЗАМКНУТОГО ТОПЛИВНОГО ЦИКЛА**

Обнинск – 2025

Моделирование нейтронно-физических характеристик быстрых реакторов в составе их замкнутого топливного цикла : Препринт ФЭИ-3311. — Обнинск, АО «ГНЦ РФ – ФЭИ», 2025. 86 с.

Ключевые слова: моделирование, двухкомпонентная ЯЭС, быстрые реакторы, топливный цикл, нуклидный состав, ОЯТ, выгорание, нейтронно-физические характеристики, экологические характеристики, коды, исходные данные, расчеты.

Представлено описание методики, алгоритмов и необходимых исходных данных к моделированию нейтронно-физических характеристик быстрых реакторов в приближениях двумерной (R, Z) -геометрии и 26-группового расчета с возможностью учета изменения нуклидного состава топлива в процессе выгорания и перегрузок топлива. Представлено описание расчетных опций по моделированию характеристик быстрых реакторов и экологических характеристик свежего и отработавшего топлива и его компонент в процессе их движения по топливному циклу. Используется рекомендованная для быстрых реакторов библиотека многогрупповых констант БНАБ-93 и система константного обеспечения CONSYST. Указанная методика используется в комплексе CYCLE — системе компьютерных кодов для моделирования характеристик ядерных топливных циклов, в т. ч. замкнутых, ядерной энергетической системы, содержащей тепловые и быстрые реакторы. Кроме того, методика и алгоритмы могут использоваться автономно, в качестве рабочего инструмента, по анализу нейтронно-физических характеристик быстрых реакторов. В работе представлено описание файлов исходных данных, требующихся для полной реализации возможностей методики и алгоритмов.

The paper describes the methodology, algorithms, and required input data for modeling the neutron-physical characteristics of fast reactors in approximations of two-dimensional (R, Z) geometry and 26-group calculation with the ability to take into account changes in the nuclide composition of fuel during burnup and fuel reloads. The paper describes the calculation options for modeling the characteristics of fast reactors and environmental characteristics of fresh and spent fuel and its components during their movement inside the fuel cycle. The recommended for fast reactors library of multigroup constants BNAB-93 and the constant support system CONSYST are used. The specified methodology is used in the CYCLE complex — a system of computer codes for modeling the characteristics of nuclear fuel cycles, including closed ones, of a nuclear power system containing thermal and fast reactors. In addition, the methodology and algorithms can be used autonomously, as a working tool, for analyzing the neutron-physical characteristics of fast reactors. The paper presents a description of the source data files required for the full implementation of the capabilities of the methodology and algorithms.

СОДЕРЖАНИЕ

ПЕРЕЧЕНЬ СОКРАЩЕНИЙ И ОБОЗНАЧЕНИЙ	5
ВВЕДЕНИЕ.....	6
1 Файл config.driv – управление внешними файлами	8
2 Файл данных irgiv.dat для системы CONSYST.....	9
3 Файл исходных данных для нейтронно-физического расчета конкретной двумерной модели реактора с фиксированным изотопным составом	10
3.1 Общие замечания	10
3.2 Исходные данные для расчета реактора с фиксированным изотопным составом	11
4 Алгоритмы расчета изменения изотопного состава в процессе кампании реактора и соответствующие файлы исходных данных	19
4.1 Опции расчета изменения изотопного состава в процессе выгорания и перегрузок топлива.....	21
4.2 Расчет эволюции изотопного состава в процессе выгорания	22
4.3 Моделирование изменения изотопного состава активной зоны с учетом частичных перегрузок топлива.....	28
4.4 Алгоритм моделирования изменения состава реактора в режиме частичных перегрузок топлива.....	30
4.5 Расчет состава перегрузочных частей при рецикле топливных материалов	34
4.6 Определение изотопного состава зон воспроизводства	40
4.7 Исходные данные для расчетов изменения изотопного состава	40
4.8 Моделирование изменения изотопного состава в режиме использования заранее подготовленных составов (режим последовательных расчетов)	45
4.9 Расчет равновесного состава топлива.....	52
4.10 Определение содержания плутония в топливе при выводе на заданное значение k_{eff} в конце микрокампании	54
4.11 Расчет скоростей реакций	57
5 Расчет некоторых экологических характеристик	58
5.1 Общие замечания	58

5.2 Расчет эволюции нуклидного состава ОЯТ в процессе длительного хранения	61
5.3 Расчет активности и радиотоксичности	65
5.4 Расчет остаточного энерговыделения ОЯТ	68
5.5 Источник нейтронов на отработавшем топливе	74
5.6 Файл исходных данных для расчета экологических характеристик ...	79
6 Использование методики моделирования при расчетах	81
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	83
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.....	84

ПЕРЕЧЕНЬ СОКРАЩЕНИЙ И ОБОЗНАЧЕНИЙ

а.з.	— активная зона
АЭС	— атомная электростанция
АЭ	— атомная энергетика
ВУ	— внешнее устройство – канал записи-чтения
КВ	— коэффициент воспроизводства
МА	— младшие актиниды
МОКС-топливо	— ядерное топливо из оксидов плутония и обедненного урана
НБС	— номер блокирующего состава
ОТВС	— отработавшая тепловыделяющая сборка
ОЯТ	— отработавшее (облученное) ядерное топливо
ПГЧ	— перегрузочная часть
СТВС	— свежая тепловыделяющая сборка
т.а.	— тяжелые атомы
ТВС	— тепловыделяющая сборка
тм	— тяжелый металл
ЯТЦ	— ядерный топливный цикл
ЯЭС	— ядерно-энергетическая система

ВВЕДЕНИЕ

Перевод атомной энергетики (АЭ) России в режим двухкомпонентной ядерной энергетической системы (ЯЭС) с тепловыми и быстрыми реакторами, в соответствии со стратегией развития ядерной энергетики России, является одной из основных целей Госкорпорации «Росатом» на ближайшие десятилетия. Цель такого перехода — стабильное и долгосрочное топливообеспечение АЭ при ее безопасном и экономически приемлемом функционировании.

Объективные технологические неопределенности, присущие современной атомной энергетике, неясность темпов экономического развития страны, а также разные подходы к замыканию ядерного топливного цикла (ЯТЦ) сохраняют возможности для вариативных сценариев достижения этой цели. В этих условиях необходимым этапом при выборе путей перехода к двухкомпонентной ЯЭС является сценарное технико-экономическое моделирование топливных циклов. Наиболее эффективным при этом считается моделирование с помощью специализированных компьютерных программных средств. Одним из таких программных средств является CYCLE — система компьютерных кодов (далее — код), разработанная в АО «ГНЦ РФ — ФЭИ», для моделирования характеристик ядерной энергетической системы [1], [2]. Результаты, полученные с помощью кода CYCLE, нашли отражение в монографии [3], ряде статей [4]—[6] и других публикациях.

Двухкомпонентная ЯЭС, наряду с предприятиями топливообеспечения, включает в себя реакторные компоненты, отличающиеся спектром нейтронов: тепловые и быстрые реакторы различного типа. Указанные компоненты должны моделироваться соответствующими программными средствами, учитывающими их особенности при работе в системе. При этом базовой (ключевой) компонентой развивающейся ЯЭС является коммерческий быстрый реактор, который будет обеспечивать замыкание единого с тепловыми реакторами топливного цикла и одновременно производить электричество.

Для моделирования нейтронно-физических характеристик быстрых реакторов в код CYCLE включен алгоритм двумерного в (R, Z) -геометрии многогруппового (26 групп) расчета быстрого реактора с учетом изменения изотопного состава топлива в процессе выгорания, перегрузок, логистики топлива, его переработки и фабрикации свежего топлива. В качестве константного обеспечения для нейтронно-физического расчета используется 26-групповая система констант БНАБ-93 [7] с системой подготовки макро- и микроконстант CONSYST [8], [9]. Этот алгоритм предоставляет также возможность оценки некоторых экологических характеристик ядерного топлива и его компонент в течение длительного хранения (захоронения). Следует

также отметить, что указанный алгоритм, реализованный в виде моделирования нейтронно-физических характеристик быстрых реакторов, может использоваться вне CYCLE в качестве рабочего инструмента по анализу нейтронно-физических характеристик быстрых реакторов и их топливных циклов. Работа кода продемонстрирована как в операционных системах типа Windows, так и на базе ОС Astra Linux.

Моделирование тепловых реакторов в коде CYCLE выполняется на базе расчетов по известному коду WIMSD-5B [10] с использованием 172-групповых библиотек констант [11].

Описанию расчетных опций, включенных в предлагаемую методику моделирования нейтронно-физических характеристик быстрых реакторов, посвящено достаточно много отчетов и публикаций. Ссылки на некоторые из этих публикаций имеются в настоящей работе. Однако развитие кодов на ее основе продолжалось в течение достаточно длительного срока и продолжается в настоящее время. В связи с этим значительная часть возможностей и описание соответствующих исходных данных не отражены в опубликованных работах.

Цель настоящей работы состоит в устранении этой лакуны. Отметим, что методические основы, положенные в основу расчета быстрого реактора в двумерной модели с учетом выгорания топлива, достаточно полно уже описаны в ранних работах. Поэтому основное внимание в настоящей работе уделено рассмотрению дополнительных возможностей моделирования нейтронно-физических характеристик быстрых реакторов, в том числе связанных с использованием описываемой методики в CYCLE и направленных в основном на моделирование процессов, имеющих место в топливном цикле.

Для опций, описание которых отсутствует или недостаточно полно представлено в предыдущих публикациях, в настоящей работе приведено описание в полном объеме с соответствующей методикой, константным обеспечением и требующимися исходными данными.

При моделировании нейтронно-физических характеристик быстрых реакторов как в составе кода CYCLE, так и в автономном режиме необходимы 3 обязательных текстовых файла исходных данных, отличающихся степенью общности. Два файла имеют фиксированные имена: `config.drv` и `irgiv.dat`. Третий файл содержит исходные данные по расчетной модели реактора и топливного цикла для конкретной задачи. Кроме того, в зависимости от задачи может потребоваться еще ряд специальных файлов с исходными данными. Названия файлов могут содержать только латинские строчные или прописные литеры и точку. Все файлы должны находиться в папке, из которой производится запуск программы на расчет.

1 Файл config.drv — управление внешними файлами

Содержание файла в основном указывает на некоторые внешние файлы, используемые в моделировании нейтронно-физических характеристик быстрых реакторов, и в общем виде представлено в таблице 1. Содержание файла config.drv, как и всех последующих файлов исходных данных, состоит из строк, первым параметром в которых записывается ключевое слово. Далее через запятую перечисляются задаваемые значения данного параметра. Если они не умещаются в одной строке, то требуется переход на следующую строку и т. д. Запятая в конце строки является признаком продолжения данных в следующей строке.

Практика расчетов показала, что корректировка этого файла производится очень редко.

Таблица 1. Файл config.drv

Ключевое слово	Значение (пример)	Пояснение	
DATA=	b.dat	! Файл задания исходных данных для конкретного реактора. Если эта строка отсутствует, то имя файла вводится с клавиатуры	
LIBCNS=	e:\libconst\consyst2\	! Путь к файлу, содержащему служебную информацию для расчета макроконстант	*
DELAY=	e:\libconst\consyst2\	! Путь к файлу, содержащему информацию для расчета эффективной доли запаздывающих нейтронов	
TWR=	d:\DATA_INTEL\	! Путь к рабочим файлам RZA	*
BNAB.BIN:	d:\rza_august_intel\consyst0601\data\abbn93g5.01a	! Файл библиотеки констант БНАБ93	*
OUT:	d:\b\26\output	! Рабочий файл системы подготовки групповых констант БНАБ CONSYST	*
LIBRARY=	e:\libconst\consyst2\transact.90	! Файл некоторых микроконстант для актинидов	*
DELETE_FILES=	YES или NO, по умолчанию принято значение NO	! Признак, позволяющий сохранить или уничтожить после окончания расчета файлы, определяемые ключевым словом TWR=	

Примечания к таблице 1:

1 Ключевые слова в таблице 1 и в последующих таблицах исходных данных выделены полужирным шрифтом. Значения, соответствующие ключевому слову, набираются обычным шрифтом.

2 Ключевые слова в файле исходных данных могут набираться в любом регистре.

3 Пояснение набирается по желанию пользователя, скорее всего, может отсутствовать, в противном случае ему должен предшествовать знак «!».

4 Строки, отмеченные «*», обязательны в файле config.driv.

5 В случае отсутствия строки DATA= b.dat, имя файла исходных данных в режиме диалога вводится с клавиатуры.

6 Пути (папки, файлы) должны быть предварительно организованы.

Следует отметить, что предпочтительной опцией является задание DELETE_FILES = YES, т. е. исключение рабочих файлов после окончания расчета. В противном случае возможна ситуация, когда вследствие какой-либо ошибки не будут созданы требуемые файлы для данной задачи, тем не менее, расчет будет продолжаться с использованием файлов предыдущего расчета, что явно является ошибочным. Однако заметить такую ситуацию пользователю не всегда просто.

2 Файл данных irgiv.dat для системы CONSYST

Файл irgiv.dat содержит массивы irg(200) и iv(15), в которых есть управляющая информация для системы CONSYST подготовки групповых констант БНАБ [7]. Файл irgiv.dat обязателен. Смысл признаков, приводимых в указанных массивах, подробно разъясняется в работах [8], [9] и вкратце поясняется ниже.

Массив irg(200):

irg(1) — признак расчета заблокированных микросечений;

irg(2) — определяет режим расчета и способ оценки интегральных спектров зон блокировки;

irg(3) — признак печати микро и макроконстант;

irg(4) — определяет форматы выходных массивов констант;

irg(5) — не используется;

irg(6) — признак, определяющий способ учета эффектов термализации и расчета констант в тепловой группе;

irg(7) — признак, определяющий способ учета доплер-эффекта;

irg(8) — контрольная печать входной информации (0 — печать информации о начале и окончании расчета и счетного времени; 2 — печать всего протокола расчета);

irg(9) — не используется;

irg(10) — не используется;

irg(11) и далее — определяют список зон смешанной подготовки констант.

Массив iv(15):

iv(1) = 1

iv(2) — не используется;

iv(3) — не используется;

iv(4) — номер ВУ под файл FMAC1 (=9);

iv(5) — номер ВУ под файл FBMIC (=9);

iv(6) — номер ВУ под файл FNBMIC (=9);

iv(7) — не используется;

iv(8) — не используется;

iv(9) — номер зоны начала файла FMAC1 (=1);

iv(10) — номер зоны начала файла FBMIC (вычисляется);

iv(11) — номер зоны начала файла FNBMIC (вычисляется);

iv(12) — число групп (26);

iv(13) = INZ (число нуклидов);

iv(14) = IZT (число физических зон);

iv(15) — признак расчета транспортного сечения.

Типичные значения, используемые в указанных файлах, приведены ниже.

Строка «с» служит только для индексации номера позиции значений «irg» и «iv», ее назначение — помочь пользователю идентифицировать соответствующий параметр. Эта строка не является обязательной в файле. Изменения в файле irgiv.dat требуются весьма редко.

с 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15

irg = 0, 102, 0, 120, 0, 0, 1, 0, 0, 0

iv = 1, 0, 0, 9, 9, 9, 0, 0, 1, 250, 50, 26, 0, 0, 2

3 Файл исходных данных для нейтронно-физического расчета конкретной двумерной модели реактора с фиксированным изотопным составом

3.1 Общие замечания

Исходные данные для нейтронно-физического расчета реактора в двумерной (R, Z)-геометрии по комплексу программ моделирования нейтронно-физических характеристик быстрых реакторов, согласно работам [12], [13], готовятся в виде файла, который, как и предыдущие, должен находиться в папке проекта, т. е. в папке, из которой производится запуск задачи на расчет. Имя файла произвольно, однако должно обязательно иметь точку, разделяющую собственно имя и его расширение, хотя расширение может быть и пробелом. Количество символов в имени файла до точки (не включая ее)

не должно быть более 8. После запуска задачи на расчет, это имя вводится с клавиатуры. Однако возможно стандартное имя, которое определяется ключевым словом DATA= в файле config.driv. В примере, приведенном в таблице 1, стандартное имя имеет вид: b.dat. В этом случае процедура ввода имени с клавиатуры пропускается. Наличие этого файла обязательно.

Файл исходных данных состоит из строк, подготавливаемых в следующей форме:

<ИМЯ>, далее константа либо массив констант в произвольном формате через запятые, при этом допускается любое количество пробелов, где <ИМЯ> — это набор латинских букв и цифр, располагающихся в первых шести позициях задаваемой строки. Имя может располагаться на отдельной строке. Данные для одного имени можно располагать на нескольких строках. Для размещения данных в строке могут быть использованы позиции с 1-й по 80-ю.

Исходные данные задачи сформированы в наборы. Каждый набор данных соответствует одному расчетному шагу выгорания, причем количество наборов данных **должно быть не меньше** числа заданных расчетных шагов выгорания. Каждый набор данных должен заканчиваться строкой **FINISH** с номером расчетного шага по выгоранию. Некоторые наборы данных, за исключением набора данных для первого расчетного шага, могут быть пустыми. Это означает, что используются исходные данные предыдущего шага.

В каждом наборе исходные данные могут располагаться в произвольном порядке, но с учетом указанных ниже исключений.

Заканчивается файл исходных данных строкой **END FILE**. Необходимо иметь в виду, что имена могут быть набраны как строчными, так и прописными буквами, в то время как строки **FINISH** и **END FILE** должны быть набраны только прописными буквами.

Некоторые исходные данные задаются по умолчанию внутри кода в виде начальных значений, которые при необходимости могут изменяться последующим вводом. Значения по умолчанию приведены в таблицах 2 — 6.

Исходные данные в соответствии с опциями комплекса моделирования нейтронно-физических характеристик быстрых реакторов можно условно разделить на несколько разделов. Ниже, в соответствии с этим разделением, приводится описание файла исходных данных.

3.2 Исходные данные для расчета реактора с фиксированным изотопным составом

В таблице 2 представлены данные для расчета реактора в двумерной (R, Z)-геометрии с фиксированным составом. После идентификатора приводится значение, принятое по умолчанию. В фигурных скобках указываются

возможные альтернативные значения, если они фиксированы в коде. В противном случае возможны любые другие значения, не противоречащие ограничениям сложности задачи.

Курсивом в некоторых случаях указаны подпрограммы, в которых данный объект используется.

Здесь и далее знаком «*» помечены данные, которые могут вводиться в процессе выгорания (подробнее см. раздел 3.1); $\dim = \text{dimension}$ — максимальная размерность массива.

Поясним используемое понятие «зоны» реактора. Под геометрической или расчетной зоной реактора понимается объем реактора, образованный пересечением координатных поверхностей, определяемых заданными толщинами зон R и Z. Физическая зона — это группа геометрических зон, имеющих одинаковый изотопный состав в течение всей рассчитываемой кампании реактора. Следовательно, при наличии в геометрической зоне делящегося материала физическая зона совпадает с геометрической. Состав реактора задается по геометрическим зонам. Соответствие геометрических и физических зон устанавливается пользователем заданием массива **GN** (табл. 2).

Таблица 2. Данные для расчета реактора с фиксированным изотопным составом

№	Имя	Значение по умолчанию/ альтернативное	Определение данных
1	2	3	4
1	NAME	—	Произвольная текстовая константа, максимальная длина 6 символов, служит для идентификации варианта расчета
2	NG	26	Число энергетических групп в расчете
3	EPS *	10.	Относительная точность внутренних итераций
4	EPSKEF *	0.0005	Относительная точность внешних итераций
5	EPSQ *	0.01	Относительная точность внешних итераций по полю энерговыделения
6	ITER *	200	Максимальное число внешних итераций в многогрупповом расчете. Если явно задано $\text{ITER} \leq 200$, то расчет будет остановлен по выполнении заданного количества внешних итераций. При этом точности расчета будут проигнорированы
7	NPR *	—	Массив числа узлов разностной сетки для каждой геометрической зоны по оси R, $\dim \leq 100$
8	NPZ *	—	Массив числа узлов разностной сетки для каждой геометрической зоны по оси Z, $\dim \leq 50$. Примечание: число узлов в первой геометрической зоне по любой оси не менее двух

1	2	3	4
9	R*	—	Массив толщин геометрических зон по оси R, см, $\dim < 100$
10	Z*	—	Массив толщин геометрических зон по оси Z, см, $\dim < 50$
11	GN*	—	Массив соответствия физических и геометрических зон (тип целый). Нумерация геометрических зон идет слева направо и снизу вверх. Геометрические зоны, содержащие делящийся материал или материалы, состав которых может изменяться в процессе работы реактора, должны быть заданы различными физическими зонами
12	ALFA	0, 1, 1, 1	Массив граничных условий (тип целый): 0 — условие симметрии; 1 — граница с вакуумом, $\dim \leq 4$, границы: слева, справа, снизу, сверху
13	N*	1	Номер внешней итерации, после которой начинается их ускорение
14	SIGMA*	0	Параметр σ , необходимый для трехслойной схемы ускорения внешних итераций. Для расчета значения σ необходимо задать $N=0$, σ не задавать
15	INNER*	NO{YES}	YES — печать количества внутренних итераций и достигнутых максимальных относительных точностей расчета плотностей потоков в каждой группе по внешним итерациям, NO — отмена печати
16	FLUXES*	NO{YES}	YES — печать групповых ненормированных плотностей потока нейтронов по точкам, NO — отмена печати
17	P*	0.	Тепловая мощность реактора, МВт. В случае задания элемента симметрии мощность задается для этого элемента симметрии
18	DESFLX*	NO{YES}	YES — печать достигнутой точности расчета плотности потока во внутренних итерациях и соответствующие координаты точек (по группам)
19	NGN	200(0)	Массив соответствия геометрическим зонам: 1. $NGN(i) = 1$ — активная зона (а.з.) $NGN(i) = 2$ — торцевой экран $NGN(i) = 3$ — боковой экран № 1 $NGN(i) = 4$ — боковой экран № 2 $NGN(i) = 5$ — экран $NGN(i) = 0$ — другие элементы конструкции реактора (невоспроизводящие экраны, СУЗ и т. д.), где i — номер геометрической зоны. Указанная информация используется при расчетах КВ, загрузок тяжелого металла (тм), нормировки поля энергвыделения.

1	2	3	4
			2. При задании на расчет малогрупповых макроконстант по этим зонам будут свернуты макроконстанты. 3. По NGN определяется высота активной зоны (<i>в программе (UPADOW26)</i>). Если NGN не задан, то разделение а.з. и воспроизводящих экранов производится по совместному выполнению условий $\rho^{u238} \geq \rho^{u235} \cdot 143$ $\rho^{u238} \geq \rho^{pu239} \cdot 143,$ где ρ^{u238}, ρ^{u235} и ρ^{pu239} — концентрации соответствующих изотопов, 10^{24} барн/см, $143=1/0,7\%$. Т. е. физические зоны только с обедненным U (с содержанием менее 0,7 %) считаются зонами воспроизводства, а остальные зоны с делящимися материалами — активной зоной. После этого в NGN засылается 1 — для а.з., 0 — для всего остального. 4. Задается снизу—вверх, слева—направо
20	FLXPWR	NO{YES}	YES — печать групповых нормированных на тепловую мощность плотностей потока нейтронов по точкам, NO — отмена печати. Необходимо задание мощности P
21	DIGITS	NO {MULTY}	Признак вывода масс тяжелых атомов с увеличенным числом знаков (<i>используется в upraise, handling</i>), по признаку DIGITS = MULTY
22	NG1	11	Номер энергетической группы, до которой учитываются неупругие переходы.
23	MDRTAP*	DIF {OT, P1, P1H}	Признак приближения учета анизотропии рассеяния при расчете в области замедления: DIF — расчет реактора, не содержащего водород, в ОТ-приближении; OT — расчет реактора с водородом в ОТ-приближении; P1 — P₁-приближение для всех элементов; P1H — P₁-приближение только для водорода и ОТ-приближение для остальных элементов (P1H-приближение).
24	SCHEM	NO{OT-P1, OT-P1H}	OT-P1 — расчет с переходом от ОТ-приближения к P₁-приближению в процессе внешних итераций, OT-P1H — расчет с переходом от ОТ-приближения к P1H-приближению в процессе внешних итераций; NO — расчет в приближении учета анизотропии рассеяния, указанном картой MDRTAP
25	NUMP1*	—	Номер внешней итерации, начиная с которой происходит переход к P1(P1H)-приближению

1	2	3	4
26	T*	—	Температура (К) по физическим зонам, включая зоны, свойства которых описаны с помощью готовых макросечений. Необходима для расчета резонансных добавок, $\text{dim} < 200$
27	CRSEC*	—	Макроконстанты тепловой группы для всех физических зон или признак их расчета и дополнительная информация. Возможные способы задания: 1. Наборы макросечений (Σ_a, $\nu_f \Sigma_f$, Σ_1) для каждой физической зоны. 2. Число 55., если константы формируются самой программой по табличным значениям сечений. 3. Число 33., далее температуры (К) нейтронного газа по зонам, если табличные значения сечений усредняются по спектру Максвелла. 4. Число 77., далее температуры (К) замедлителя по зонам, если табличные значения сечений усредняются по спектру модели тяжелого газа. Если величина Σ_a, полученная как $\sum p_i \sigma_a^i$, где табличное значение микросечения поглощения i-го элемента меньше $1.0\text{E}-18$, то указанная величина не правится, независимо от того, какой способ ее получения задан
28	MICRO	35(0)	Массив номеров физических зон в порядке возрастания, в которых вводятся с «листа» микроконстанты элементов, отсутствующих в библиотеках микроконстант, или вводятся готовые макроконстанты, в том числе и для зон, имитирующих органы СУЗ. Признаком ввода микроконстант является отрицательный номер физической зоны в массиве MICRO, в противном случае считается, что вводятся макроконстанты зоны. Размерность макроконстант — 1/см. Номер физической зоны, в которой вводятся микро (макро)сечения, не должен превышать 35. В каждой зоне можно вводить с «листа» не более одного элемента, т. е. всего не более 35 элементов. Массив MICRO всегда должен предшествовать ядерно-физическому составу и макро- (микро-) константам
29	ZONXXX	—	Таблица состава реактора: ядерно-физическому составу каждой физической зоны присваивается имя ZONXXX (001<XXX<999) в соответствии с номером этой зоны. После имени соответствующей зоны попарно для каждого элемента располагаются его имя и ядерная концентрация в единицах барн/см, предполагается, что ядерная концентрация любого элемента не больше барн/см. В пределах одной зоны элементы

1	2	3	4
			располагаются в произвольном порядке, но их количество должно быть не более 150. В случае отсутствия элемента в библиотеке выдается соответствующая диагностика. Составы зон располагаются в порядке возрастания номеров зон; зоны, описываемые готовыми макросечениями, в таблице состава опускаются. С целью сокращения объема вводимой информации можно пропускать зоны, идущие подряд и имеющие одинаковый состав. В этом случае состав пропущенных зон будет принят таким же, как в предыдущей. Например, при задании ZON001 U-235, 0.001, H, 0.01 ZON010 BE, 0.03, состав первых девяти зон будет принят таким же, как и в первой зоне. Следует отметить, что в числе пропущенных зон могут быть зоны, имитирующие органы СУЗ. Для понуклидного задания температур необходимо в файле исходных данных после задаваемых концентраций нуклидов через запятую указывать требуемую температуру соответствующего нуклида. Температура задается в кельвинах и обязательно с десятичной точкой. Номер блокирующего состава (НБС) для конкретной физической зоны указывается после концентрации последнего нуклида в виде целого числа, отделенного от этой концентрации запятой. Для зон, состав которых опущен в файле исходных данных (имеется в виду существующая в RZA возможность дублирования одинаковых по составу зон), их НБС будет таким же, как НБС заданной зоны. В случае близких составов физических зон рекомендуется использовать в качестве блокирующего состава состав какой-либо одной зоны, это существенно сокращает время подготовки констант, т. к. в этом случае получение макроконстант сводится к умножению концентраций на полученные в блокирующем составе заблокированные микросечения. В алгоритме программы предусмотрена проверка на наличие НБС для каждого введенного состава зоны. В случае если в какой-либо зоне опущен НБС, зона блокируется по своему спектру. Если физические зоны имеют одинаковый состав, но требуется выполнить блокировку сечений этих зон по разным спектрам (например, в процессе выгорания), составы этих зон необходимо задать в явном виде, не используя алгоритм дублирования.

1	2	3	4
			При отсутствии НБС в исходных данных блокировка осуществляется для каждой зоны по своему спектру. Для зон, состав которых опущен в файле исходных данных, блокировка будет осуществляться по спектру оригинальной зоны. В связи с описанными выше новыми возможностями в RZA появились некоторые особенности в файле задания исходных данных: Для первого вводимого состава существует ограничение: если в зоне больше одного элемента, то на первой строке с составами должно быть задано не менее двух элементов, ввод остальных строк в задании составов может быть произволен. ПРИМЕР ZON001 U235, 0.07, 300., U238, 0.1, 300., PU39, 0.001, 500., PU40, 0.002, 500., 2 ZON002 U235, 0.01, 300., U238, 0.07, 300., Na, 0.06, 400. При этом можно пользоваться как строчными, так и прописными буквами
30	MRR*	2	Признак способа расчета резонансных добавок: 1 — в группах $g \geq 19$ используется приближение бесконечной массы по отношению к Th-232 и более тяжелым нуклидам; 2 — расчет резонансной самоэкранировки в приближении узких резонансов
31	FLX	VOL {PNTS}	VOL — печать интегральных по геометрическим зонам потоков, деленных на 2π. PNTS — печать потоков по расчетным узлам
32	NGS*	26(0)	Номера групп, для которых по признаку FLUXES (см. п. 16 настоящей таблицы) печатаются потоки. Если NGS не задается, то печатаются потоки всех групп
33	PROLNT	NO {YES}	YES — выдача временной библиотеки, представляющей собой выборку из 26-групповой библиотеки (CONSYST) нейтронных констант для нуклидов, входящих в состав рассчитываемой композиции
34	BJ	NO {YES}	YES — производится расчет поправок к сечению замедления; NO — расчет поправок не производится
35	IPRBJ	NO {BGHIMC, BJONLY}	BGHIMC — производится выдача на экран поправок b_j, распределения нейтронов деления по группам ($\chi^{(g)}$) и откорректированных макроконстант по зонам. Если в зоне нет делящихся материалов, будет приведено распределение, соответствующее спектру деления U-235 тепловыми нейтронами

1	2	3	4
			BJONLY — выводятся только поправки b_j по зонам. NO — нет выдачи
36	NFS	BNAB78 {BNAB93}	Признак спектра деления, возможно, NFS=BNAB93
37	NBZON	GN	Массив соответствия геометрических и блокировочных зон
38	MCSACT	NO{YES}	YES — выдача микроконстант актинидов в файл MICRO.OUT (u=27). NO — Нет выдачи. <i>Используется в INSTAR, PRINGN, PRMICRO.</i>
40	BBMIC	NO{YES}	YES — расчет заблокированных микроконстант на каждом временном шаге (для расчетов выгорания и $\beta_{\text{эф}}$). NO — заблокированные микроконстанты рассчитываются только на начало выгорания
41	BKB	0.	При определении поправки к сечению замедления — величина лапласиана для расчета спектра голого реактора с составом текущей физической зоны
42	FLUENC	NO{YES}	YES — расчет полного флюенса и флюенса быстрых нейтронов, NO — нет расчета
43	ONEDIM*	NO{YES}	Признак получения одномерного состава реактора YES — получение одномерного состава, NO — получения одномерного состава нет.
44	FRAGS	NO{YES}	Признак расчета детального распределения осколков деления: YES — расчет производится, NO — нет расчета
45	TRIFLE*	NO{YES}	Признак расчета относительной доли делений в группе и коэффициента размножения нейтронов в бесконечной среде. YES — расчет производится, NO — нет расчета
46	NFS	BNAB78 {BNAB93}	Расчет спектра нейтронов деления из БНАБ78 или БНАБ93
47	PRISAF	NO{YES}	YES — признак выдачи микросечений из FBMICR; NO — нет выдачи
48	PRINUF	NO{YES}	YES — признак выдачи V_f из FBMICR, работает при BETA=YES; NO — нет выдачи
49	ADAOUT	0	Признак выдачи входной и выходной информации CONSYST (aux(230))

ПРИМЕЧАНИЯ к таблице 2:

1. Поскольку поступление макросечений в расчет реактора определяется только таблицей **GN** (п. 11), то таблица состава в необходимых случаях

может быть расширенной по сравнению с той, которая необходима для конкретного расчета.

Например, пусть рассчитывается реактор с выгоранием, у которого на начальный момент все органы СУЗ погружены на всю высоту активной зоны, а в ходе выгорания извлекаются, и под ними образуются физические зоны с некоторым фиксированным ядерно-физическим составом. Состав этих зон необходимо задать в исходных данных для начала выгорания, а номера этих физических зон в массиве GN должны быть опущены для всех тех моментов выгорания, когда эти зоны не входят в расчет, т. е. когда органы СУЗ полностью погружены. Количество задаваемых температур в этом случае должно быть равно количеству физических зон в таблице состава реактора.

2. Строки с **T** (задание температур, п. 26) и **CRSEC** (задание тепловой группы, п. 27) должны предшествовать составу, определяемому через **ZONXXX** (п. 29).

4 Алгоритмы расчета изменения изотопного состава в процессе кампании реактора и соответствующие файлы исходных данных

В процессе работы реактора происходит изменение изотопного состава, полей энерговыделения, запаса реактивности и других физических характеристик. Расчет указанных характеристик по кампании в рамках описываемой методики производится методом шагов и сводится к последовательному расчету реактора на заданные моменты кампании. При этом изменение физических свойств реактора описывается изменением многогрупповых макроконстант физических зон, где происходит выгорание топлива и накопление продуктов других ядерных реакций. Перемещение органов СУЗ может моделироваться изменением задаваемого изотопного состава соответствующих зон реактора либо изъятием или введением эффективных макросечений, подготовленных специальным образом. Многогрупповые макроконстанты рассчитываются программой CONSYST [8], [9] на основе библиотеки нейтронных многогрупповых микроконстант БНАБ [7] и пересчета ядерно-физического состава реактора после каждого шага по времени.

При задании на расчет с учетом эволюции изотопного состава при выгорании ядерного топлива (см. также раздел 4.2) обязательным является включение в список состава реактора изотопов, изменение концентраций которых учитываются алгоритмом. При этом концентрации изотопов, которые отсутствуют в начальном (стартовом) составе, в этом случае задаются нулевыми. Список изотопов, начальные концентрации которых должны быть обязательно представлены в начальном составе, следующий:

^{232}Th				
^{231}Pa	^{233}Pa			
^{233}U	^{234}U	^{235}U	^{236}U	^{238}U
^{237}Np				
^{238}Pu	^{239}Pu	^{240}Pu	^{241}Pu	^{242}Pu
^{241}Am	$^{242\text{m}}\text{Am}$	^{243}Am		
^{242}Cm	^{243}Cm	^{244}Cm	^{245}Cm	^{246}Cm
fp35	fp39			

где fp35 и fp39 включают, соответственно, осколки деления изотопов урана и плутония — фактически концентрации разделившихся ядер этих изотопов.

Указанные изотопы учитываются в нейтронном балансе, их концентрации отражаются в общем листинге расчета. Задание этих концентраций необходимо для резервирования необходимых участков памяти для размещения соответствующих концентраций, а также является признаком для подготовки блокированных микроконстант этих нуклидов модулем CONSYST. При отсутствии в задании на расчет выгорания этот список может быть сокращен в соответствии с конкретным составом реактора.

Вместе с тем алгоритм позволяет учитывать наработку ряда других изотопов, образующихся при облучении топлива нейтронами, а также в результате радиоактивного распада, которые сами по себе практически не вносят вклада в нейтронный баланс и не влияют на нейтронно-физические характеристики и характеристики безопасности реактора, работающего на мощности. Однако эти изотопы важны для расчетов эволюции изотопного состава ОЯТ, особенно при его длительном хранении или захоронении, а также его радиационных характеристик. Задавать их в составе не требуется. К таким изотопам относятся:

^{227}Ac		
^{228}Ra		
^{227}Th	^{228}Th	^{229}Th
^{232}U		
^{236}Pu	^{237}Pu	
^{243}Cm		
OcU3	OcU5,	OcPu

В эту же группу включены квазиосколки OcU3, OcU5, OcPu, в них, помимо осколков основных делящихся изотопов урана и плутония, выделены концентрации осколков деления остальных делящихся изотопов. Расчеты указанных квазиосколков носят справочный характер, они не учитываются в нейтронном балансе. Состав их следующий:

ОсU3:

- ^{232}Th ,
- ^{231}Pa , ^{233}Pa ,
- ^{232}U , ^{233}U .

ОсU5:

- ^{234}U , ^{235}U , ^{236}U , ^{238}U ,
- ^{237}Np .

ОсPu:

- ^{236}Pu , ^{238}Pu , ^{239}Pu , ^{240}Pu , ^{241}Pu , ^{242}Pu ,
- $^{242\text{m}}\text{Am}$, ^{243}Am ,
- ^{242}Cm , ^{243}Cm , ^{244}Cm , ^{245}Cm , ^{246}Cm .

Концентрации всех перечисленных в данном пункте нуклидов выводятся в листинге отдельной группой. При этом квазиосколки fr35 и fr39 есть:

$$\text{fr35} = \text{ОсU3} + \text{ОсU5},$$

$$\text{fr39} = \text{ОсPu}.$$

4.1 Опции расчета изменения изотопного состава в процессе выгорания и перегрузок топлива

Алгоритм учета изменения изотопного состава в процессе выгорания топлива предусматривает следующие опции:

1. Расчет эволюции изотопного состава только в результате выгорания топлива без учета его частичных перегрузок.
2. Моделирование изменения изотопного состава при выгорании топлива и его частичных перегрузках с заданным составом топлива по содержанию урана, плутония и МА.
3. Моделирование изменения изотопного состава с ускоренным расчетом равновесного состава при выгорании топлива и частичных перегрузках с заданным содержанием урана, плутония и МА — выход на равновесный состав топлива.
4. Моделирование изменения изотопного состава с ускоренным расчетом равновесного состава при выгорании топлива и частичных перегрузках с обеспечением требуемого значения k_{eff} в равновесном состоянии в конце микрокампании. Требуемое значение k_{eff} обеспечивается выбором необходимого начального содержания плутония в топливе. Алгоритм реализован только для МОКС-топлива на основе смеси плутония и урана.
5. Моделирование изменения изотопного состава при выгорании топлива с учетом его частичных перегрузок с записью изотопного состава во внешний файл после каждой перегрузки и возможностью возобновления расчета с заданного шага по времени (подробнее ниже п. 4.8).

4.2 Расчет эволюции изотопного состава в процессе выгорания

Методика и алгоритм расчета изменения нуклидного состава топлива при его облучении нейтронами описаны в работах [12], [13] и здесь полностью не приводятся. Система уравнений, описывающая изменение нуклидного состава, в соответствии с этой методикой решается на временном шаге, который совпадает с временным шагом расчета потока нейтронов. При этом каждый шаг разбивается на определенное число равных подшагов. При таком расчете рассматривается список нуклидов, учет которых важен для нейтронного баланса. В этом списке также отсутствуют нуклиды с очень коротким, по сравнению с временным шагом, периодом полураспада. Наиболее короткоживущие в этом списке ^{237}U , ^{238}Np , ^{239}Np ($T_{1/2} \sim$ сутки) и некоторые другие. Непосредственные расчеты показали, что при надлежащем выборе величины временного подшага ($T \sim 5$ суток) при решении системы уравнений, описывающих ядерные превращения, методом Рунге — Кутты обеспечивается приемлемая точность.

При расчете изменения изотопного состава физически гомогенного реактора предполагается, что в течение каждого заданного шага по времени спектр нейтронов не изменяется и совпадает со спектром на начало шага, то есть

$$\varphi^{(g)}(\vec{r}, t) = S_j(t) \varphi_0^{(g)}(\vec{r}, 0), \quad 0 \leq t \leq \Delta t \quad (1)$$

где Δt — длительность шага; j — индекс геометрической зоны, в которой находится пространственный узел с координатой $\vec{r}$.

Функция $S_j(t)$ представляет собой коэффициент нормировки плотности потока нейтронов на заданную мощность. При условии измерения времени в тысячах часов и ядерных концентраций в 10^{24} яд/см³ выражение для $S(t)$ имеет вид:

$$S_j(t) = \frac{P \cdot 1000 \cdot 10^{-24}}{\int q(\vec{r}, t) dV} = \frac{P \cdot 0,00572957 \cdot 10^{-16}}{\iint q(r, z, t) r dr dz} \quad (2)$$

Интеграл по объему берется в пределах расчетной геометрической зоны j . Координата $\vec{r}$ раскрывается как (r, z) . Поле энергосвечения $q(\vec{r}, t)$ определяется по соотношениям:

$$q(\vec{r}, t) = 0,00572957 \sum_{g=1}^G \left[\sum_i \frac{1}{N_{fi}} \rho_i(r, z, t) \sigma_{fi}^{(g)}(r, z) + \right. \\ \left. + 1,6021 \cdot 10^{-3} Q_c \rho_i(r, z, t) \sigma_{ci}^{(g)}(r, z) \right]. \quad (3)$$

Численный коэффициент 0,00572957 в формулах, в соответствии с принятой нормировкой в RZA, представляет собой $(3600/2\pi) \cdot 10^{-5}$.

Первое слагаемое в квадратных скобках формулы (3) есть энерговыделение при делении ядер, второе слагаемое – энерговыделение за счет радиационного захвата нейтронов. По умолчанию принято $Q_c = 7$ МэВ на один захват, как это постулируется в системе БНАБ [14]. Т. е. в этом случае в общем количестве энергии, выделяемой в акте деления, не учитывается энергия, высвобождаемая при радиационном захвате нейтронов в материалах реактора. Однако значение Q_c может задаваться пользователем в исходных данных для конкретного расчета. Имеется также возможность расчетов по упрощенной формуле (3), без отдельного учета энергии, освобождаемой при захвате нейтронов. В этом случае N_{fi} определяется исходя из полной энергии, выделенной при делении и поглощенной в материалах реактора (см. таблицу 4, пп. 4, 5 и 6).

Размерность величин, входящих в формулы:

P — МВт,

t — тысячи часов,

N_{fi} — 10^{16} делений на 1 МВт·с,

ρ_i — 10^{24} ядер в 1 см^3 ,

ϕ_{fi} — 10^{24} нейтронов через 1 см^2 в секунду,

σ_i — 10^{-24} см^2 ,

Q_c — МэВ,

1 МэВ = $1,6021 \cdot 10^{-7}$ МВт·с,

линейные размеры — см.

Суммирование в формуле (3) по g ведется по энергетическим группам от 1 до $G = 26$, а суммирование по i производится по всем делящимся изотопам, список которых представлен в таблицах 3 и 4. При этом напомним, что в числовых константах здесь и далее учтено, что в моделировании нейтронно-физических характеристик быстрых реакторов все объемы вычисляются с точностью до множителя 2π .

При нормировке потоков на мощность удельные значения числа N_{fi} — делений в расчете на 1 МВт·с, (см. таблицы 3, 4), получены на основе данных таблиц 2.2.5 и 2.2.7 работы [15] для быстрых нейтронов с учетом энергии E_c , выделяемой при захвате $(\nu - 1)$ нейтронов в материалах реактора, при этом E_c принято равным 5,99 МэВ [15]. $N_{fi} = 1/(Q_T \cdot 1,8543 \cdot 10^{-24} \cdot 3600 \cdot 24)$ (Используются в подпрограммах QFJ, QFJZ). Для изотопов, перечисленных в п. 11 таблиц 3 и 4, принята энергия деления, равная 200 МэВ.

Для учета влияния истории облучения (учета энергии, выделяемой при распаде осколков деления) данные в таблице 3 приведены для бесконечного облучения, а также с учетом времени облучения в реакторе, равного 1 году.

Таблица 3. Число делений на МВт·с и энергия на акт деления [15]

№ п/п	Изотоп	Бесконечное облучение		Облучение в течение 1 года	
		N_{fi} , число делений, 10^{16} дел./(МВт·с)	Q_T , энергия, МэВ/дел.	N_{fi} , число делений, 10^{16} дел./(МВт·с)	Q_T , энергия, МэВ/дел.
1	^{232}Th	3,2265	193,45	3,2250	193,54
2	^{232}U	3,1317	199,31	3,1309	199,36
3	^{235}U	3,0953	201,65	3,0944	201,71
4	^{236}U	3,0849	202,33	3,0840	202,39
5	^{238}U	3,0319	205,87	3,0312	205,92
6	^{237}Np	3,0300	206,00	3,0292	206,05
7	^{239}Pu	2,9701	210,15	2,9696	210,19
8	^{240}Pu	2,9587	210,96	2,9580	211,01
9	^{241}Pu	2,9338	212,75	2,9332	212,80
10	^{242}Pu	2,9134	214,24	2,9128	214,29
11	^{231}Pa , ^{233}Pa , ^{232}U , ^{234}U , ^{236}Pu , ^{238}Pu , ^{241}Am , ^{242m}Am , ^{243}Am , ^{242}Cm , ^{243}Cm , ^{244}Cm , ^{245}Cm , ^{246}Cm	3,1209	200,00	3,1209	200,00

Таблица 4. Число делений на МВт·с и энергия на акт деления без учета энергии, выделяемой при радиационном захвате нейтронов [15]

№ п/п	Изотоп	Q _T (бесконечность)	
		N _{fi} , число делений, 10 ¹⁶ дел./(МВт·с)	Q _T , энергия, МэВ/деление
1	²³² Th	3,3754	184,92
2	²³² U	3,3039	188,92
3	²³⁵ U	3,2676	191,61
4	²³⁶ U	3,2565	191,67
5	²³⁸ U	3,1983	196,16
6	²³⁷ Np	3,2068	194,64
7	²³⁹ Pu	3,1676	197,05
8	²⁴⁰ Pu	3,1524	198,00
9	²⁴¹ Pu	3,1301	199,41
10	²⁴² Pu	3,0998	201,36
11	²³¹ Pa, ²³³ Pa, ²³² U, ²³⁴ U, ²³⁶ Pu, ²³⁸ Pu, ²⁴¹ Am, ^{242m} Am, ²⁴³ Am, ²⁴² Cm, ²⁴³ Cm, ²⁴⁴ Cm, ²⁴⁵ Cm, ²⁴⁶ Cm	3,1209	200,00

При организации алгоритма расчета выгорания предполагается следующее:

1. Деление происходит на изотопах, список которых представлен в таблицах 3 и 4.
2. Изменение нуклидного состава учитывается для следующих ядер (тяжелый металл):

²²⁷Ac,
²²⁸Ra,
²²⁷Th ²²⁸Th ²²⁹Th ²³⁰Th ²³²Th
²³¹Pa ²³³Pa
²³²U ²³³U ²³⁴U ²³⁵U ²³⁶U ²³⁸U
²³⁷Np
²³⁶Pu ²³⁷Pu ²³⁸Pu ²³⁹Pu ²⁴⁰Pu ²⁴¹Pu ²⁴²Pu
²⁴¹Am ^{242m}Am ²⁴³Am
²⁴²Cm ²⁴³Cm ²⁴⁴Cm ²⁴⁵Cm ²⁴⁶Cm
fp35 fp39

3. Все осколки деления условно объединены в три группы (квазиосколки):

а) осколков деления урана, куда входят осколки ^{234}U , ^{235}U , ^{236}U , ^{237}Np , ^{238}U ;

б) осколков деления плутония, куда входят осколки ^{236}Pu , ^{238}Pu , ^{239}Pu , ^{240}Pu , ^{241}Pu , ^{242}Pu , а также ^{241}Am , $^{242\text{m}}\text{Am}$, ^{243}Am , ^{242}Cm , ^{243}Cm , ^{244}Cm , ^{245}Cm , ^{246}Cm (fr39);

в) осколков деления ^{233}U , куда входят осколки ^{232}U , ^{233}U , а также ^{232}Th , ^{233}Pa , ^{231}Pa .

Считается, что концентрация осколков каждой группы равна суммарному количеству разделившихся ядер соответствующей группы, а среднее микросечение осколков не изменяется во времени. Причем fr35 – осколки деления урана, включая осколки деления ^{233}U , fr39 – осколки деления плутония.

4. В цепочках ядерных реакций пренебрегается промежуточными ядрами, время жизни которых существенно меньше длительности временного шага. В основном это ядра с периодом полураспада менее нескольких суток.

5. Изомерное отношение для ^{241}Am ($\sigma_{n\gamma}^m / \sigma_{n\gamma}^g$) по данным работы [16] для тепловых нейтронов принято равным 0,1013. Отсюда коэффициенты ветвления для образования $^{242\text{m}}\text{Am}$ и $^{242\text{g}}\text{Am}$ соответственно:

$$\frac{\sigma_{n\gamma}^m}{\sigma_{n\gamma}^m + \sigma_{n\gamma}^g} = 0,092; \quad \frac{\sigma_{n\gamma}^g}{\sigma_{n\gamma}^m + \sigma_{n\gamma}^g} = 0,908.$$

Однако коэффициенты ветвления могут меняться на уровне исходных данных конкретного расчета.

6. Вероятность образования ^{242}Cm из $^{242\text{m}}\text{Am}$ принята равной 83 %, а образования ^{242}Pu — 17 % [16].

7. Вероятность образования ^{236}Pu из ^{236}Np принята равной 48 %, а образования ^{236}U — 52 % [16].

8. Радиационным захватом на ^{246}Cm и образованием последующих изотопов Cm, Bk и Cf пренебрегается.

9. Концентрации всех нуклидов считаются постоянными по расчетным зонам реактора и определяются через средние по этим зонам потоки нейтронов и групповые микросечения.

В системе дифференциальных уравнений, описывающих изменение изотопного состава, учитываются реакции деления, поглощения, радиационного захвата, а также реакций $(n, 2n)$ и $(n, 3n)$ для изотопов, где они наиболее важны. Учитываются реакции радиационного распада. Система дополняется начальными условиями. Решение системы строится следующим образом. Из

получаемого на начало каждого расчетного шага по времени пространственно-энергетического распределения плотности потока нейтронов определяются средние по расчетным геометрическим зонам плотности потока каждой энергетической группы. Полученные величины далее используются для расчета интегралов соответствующих реакций, входящих в уравнения выгорания. Далее система уравнений выгорания решается при шаге заданной длительности методом Рунге — Кутта [17] с разбиением каждого шага на заданное число равных подшагов.

Если эту систему представить в векторном виде

$$\frac{d\vec{\rho}}{dt} = \vec{f}(t, \vec{\rho}), \quad (4)$$

то формулы для расчета концентраций можно представить так:

$$\vec{\rho}_{i+1} = \vec{\rho}_i + \frac{1}{6}(\vec{k}_1 + 2\vec{k}_2 + 2\vec{k}_3 + \vec{k}_4) \quad (5)$$

где $\vec{\rho}_i$ — вектор концентрации нуклидов на подшаге i ,

$$\vec{k}_1 = \vec{f}(t_i, \vec{\rho}_i)\Delta t;$$

$$\vec{k}_2 = \vec{f}\left(t_i + \frac{\Delta t}{2}, \vec{\rho}_i + \frac{\vec{k}_1}{2}\right)\Delta t;$$

$$\vec{k}_3 = \vec{f}\left(t_i + \frac{\Delta t}{2}, \vec{\rho}_i + \frac{\vec{k}_2}{2}\right)\Delta t;$$

$$\vec{k}_4 = \vec{f}(t_i + \Delta t, \vec{\rho}_i + \vec{k}_3)\Delta t;$$

Δt — величина длительности подшага.

После получения ядерно-физического состава реактора на конец шага по времени на его основе производится расчет многогрупповых макроконстант. Для зон, свойства которых описываются заранее подготовленными макросечениями, например зон, имитирующих систему органов СУЗ, расчет изотопного состава и, следовательно, корректировка макроконстант в ходе кампании не производится. В этом случае макроконстанты этих зон могут изменяться при моделировании перемещения органов СУЗ.

Переход в режим расчета выгорания происходит при задании в файле исходных данных (см. таблицу 5) числа шагов по времени (**TMCOMP**) и длительности одного шага в тысячах часов (**TML**). При задании **TMCOMP**=1 (значение по умолчанию) расчет производится для реактора с заданным фиксированным составом.

4.3 Моделирование изменения изотопного состава активной зоны с учетом частичных перегрузок топлива

Определим основные понятия, необходимые для управления режимом перегрузок ядерного топлива. Ядерное топливо (свежее, топливо регулярных подгрузок и отработавшее) включает в себя следующие компоненты: делящуюся компоненту, воспроизводящую, минорные актиниды и осколки деления. Принято, что состав конструкционных материалов топлива, теплоносителя и других материалов, входящих в состав физических зон, постоянен и поэтому в дальнейшем не упоминается.

Свежее топливо и топливо регулярных подгрузок по определению могут содержать только первые 3 компонента. Содержание МА в свежем топливе – опционально. Под начальным (стартовым) составом понимается состав, определяемый заданием строк **ZON001, ZON002,...** в файле исходных данных (см. п. 29 таблицы 2).

Алгоритм моделирования частичных перегрузок топлива выглядит следующим образом.

Расчетные геометрические зоны реактора с переменным составом (зоны, содержащие делящийся или сырьевой материал) делятся на N равных перегрузочных частей (ПГЧ), где N — кратность перегрузок в данной геометрической зоне или группе таких зон. Под кратностью перегрузок понимается величина, обратная доле ТВС, перегружаемых ежегодно в данной геометрической зоне. Т. е. кратность перегрузок, равная N , означает, что ежегодно перегружается $1/N$ -я часть ТВС данной геометрической зоны (группы зон). При этом предполагается, что в реакторе могут быть геометрические зоны с различной кратностью перегрузок, но должно быть сохранено одинаковое значение кратности перегрузок для каждой группы геометрических зон, расположенных по одной вертикали. Тем самым неявно предполагается, что реактор состоит из вертикально загружаемых сборок и таким образом моделируется перегрузка топлива в виде тепловыделяющих сборок — ТВС.

При каждой перегрузке, наступающей через определенный интервал времени (микрокампанию), содержимое ПГЧ по очереди, начиная с 1-го номера ($n = 1$) до номера $n = N$, заменяется на «свежее» топливо. Таким образом, через N перегрузок произойдет полное обновление состава данной геометрической зоны. После чего снова наступает очередь $n = 1$, и процесс повторяется. На рисунке 1 в качестве примера условным образом показана схема 4-кратных перегрузок для случая одинаковой кратности для всех геометрических зон. На этом рисунке цифрой 0 обозначено «свежее» топливо, 1 — топливо после первой перегрузки реактора (топливо, отработавшее одну микрокампанию), 2 — после второй и т. д. Как видно из этого рисунка, после

перегрузки № 3 реактор переходит в стационарное состояние, характеризующееся топливным вектором (0 1 2 3) на начало микрокампании и вектором (1 2 3 4) на конец микрокампании.

0	0	0	0
1	1	1	1
перегрузка №1			
0	1	1	1
1	2	2	2
перегрузка №2			
1	0	2	2
2	1	3	3
перегрузка №3			
2	1	0	3
3	2	1	4
перегрузка №4			
3	2	1	0
4	3	2	1
перегрузка №5			
0	3	2	1
1	4	3	2
и т. д.			

Рис. 1. Пример организации перегрузок топлива в случае 4-кратной схемы перегрузок

После замены топлива в процессе перегрузки состав топлива в пределах каждой геометрической зоны гомогенизируется. Таким образом, моделируется присутствие в составе физической зоны топлива с разным выгоранием. С этим гомогенизированным составом проводится расчет нейтронно-физических характеристик реактора на данный момент кампании реактора, включая многогрупповые потоки нейтронов.

Конкретный изотопный состав топлива подгрузки может формироваться в соответствии со следующими основными сценариями:

1. Сценарий открытого ядерного топливного цикла (ЯТЦ). В качестве топлива подгрузки («свежего» топлива) на протяжении всех временных шагов используется состав, задаваемый идентификаторами «ZONXXX», что означает использование начального (стартового) состава при перегрузках, т.е. фактически отсутствие рецикла топлива.

2. Сценарий замкнутого ЯТЦ для рассматриваемого реактора. Состав, задаваемый идентификаторами «ZONXXX» по урану и плутонию, использу-

ется только в течение времени внешнего топливного цикла – суммарного времени выдержки ОЯТ, длительности его переработки и фабрикации «свежего» топлива на основе выделенных компонент, TS+TF, (см. табл. 5, пп. 15, 16). Далее по сценарию используются компоненты топлива, выделенные из собственного ОЯТ (см. следующий сценарий). В этом случае моделируется замкнутый топливный цикл данного реактора.

3. Сценарий замкнутого ЯТЦ для системы из нескольких реакторов рассматриваемого типа. Формируется в соответствии с задаваемыми в исходных данных признаками для каждого элемента и группы МА в целом (см. табл. 5, пп. 20—54) и алгоритмом моделирования выгорания и переработки ОЯТ, описанным ниже (раздел 4.4). В этом случае неявно подразумевается наличие другого такого же реактора, эксплуатация которого началась раньше и ОЯТ которого используется при фабрикации «свежего» топлива для данного реактора.

4. Сценарий замкнутого ЯТЦ для ЯЭС с внешним топливом, определяемым алгоритмом кода CYCLE. Используется заранее подготовленный состав, записанный во внешней памяти рассчитываемой задачи. Этот способ описывается в разделе 4.8. Реализация такого сценария возможна только при моделировании нейтронно-физических характеристик быстрых реакторов в системе с CYCLE.

4.4 Алгоритм моделирования изменения состава реактора в режиме частичных перегрузок топлива

Изменение нуклидного состава как результат выгорания в течение микрокампании (за время между перегрузками топлива) рассчитывается отдельно (*подпрограммы VERTUM1, QFJZ, LOCNOR*) для каждой ПГЧ в соответствии с алгоритмом раздела 4.2.

В общем случае наличия нескольких кратностей перегрузок (групп перегрузок) расчет изменения нуклидного состава производится отдельно для каждой группы геометрических зон, имеющих свою конкретную кратность перегрузок. (При моделировании нейтронно-физических характеристик быстрых реакторов в составе CYCLE кратность перегрузок для активной зоны в настоящее время должна задаваться единой, например, усреднённой с весом масс перегружаемых частей).

Пример последовательности расчета изменения изотопного состава для случая 4-кратной схемы перегрузок всех физических зон активной зоны и зон воспроизводства показан на рисунке 1.

Если какие-либо компоненты выгружаемого топлива снова поступают в реактор (рецикл топлива), то может моделироваться изменение их состава за время задержек, связанных с переработкой ОЯТ: выдержка соответствующего состава ПГЧ в течение определенного (заданного) срока —

длительности внешнего топливного цикла. Указанный срок состоит из следующих составляющих, задаваемых в файле исходных данных для расчета:

- времени TS, включающего в себя выдержку ОЯТ перед переработкой, длительность транспортировки ОЯТ и длительность репроцессинга;
- времени TF, включающего в себя выдержку изготовленного топлива на заводе — изготовителе топлива, его транспортировку на АЭС и выдержку топлива перед его загрузкой в активную зону.

При работе с CYCLE описанные задержки TS и TF в моделировании нейтронно-физических характеристик быстрых реакторов принимаются равными нулю, поскольку в этом случае они моделируются в CYCLE.

Обозначения исходных данных здесь и далее приведены в таблице 5. При этом для учета изменения содержания изотопов, которые содержатся в неперегружаемых в данную перегрузку ПГЧ, но имеют период полураспада, сравнимый с длительностью перегрузки, или имеют предшественника с таким периодом (Cm-242, Pa-233, U-233, Pu-237, Pu-238), в исходных данных задается длительность перегрузки RST (*подпрограммы FORTUNE, RISUTE*).

Временная схема топливного цикла и технологические операции, на которых определялся изотопный состав топлива, показаны на рисунке 2.

Расчет критичности (значения k_{eff}) и других характеристик, в частности потоков нейтронов, в ходе кампании топлива производится в определенном порядке. Далее, для краткости, будем указывать только на расчет k_{eff} . Количество расчетов k_{eff} по кампании определяется значением заданной величины TMCOMP.

1. Выполняется расчет k_{eff} с заданным в исходных данных составом (заданным с именами ZON001, ZON002 и т. д.). Если задано TMCOMP=1, то расчет останавливается.

2. На потоках, полученных в расчете по предыдущему пункту, производится расчет изотопного состава, соответствующий заданному шагу по времени (длительности микрокампании).

3. Моделируется перегрузка топлива.

4. С полученным составом реактора выполняется расчет k_{eff} . Это значение соответствует началу следующего шага по выгоранию. Отметим, что значение k_{eff} , соответствующее концу предыдущего шага, не рассчитывается.

5. Если текущий номер шага меньше указанного в TMCOMP, то расчеты повторяются, начиная с п. 2. В противном случае, т. е. если номер текущего шага достиг величины, заданной TMCOMP, производится расчет изменения реактивности на шаге выгорания (на микрокампании), т. е. без перегрузки топлива. Для этого выполняются следующие расчеты.

6. С полученными в п. 4 потоками выполняется расчет изотопного состава, соответствующий шагу по времени (длительности микрокампании), при этом перегрузка топлива не моделируется.

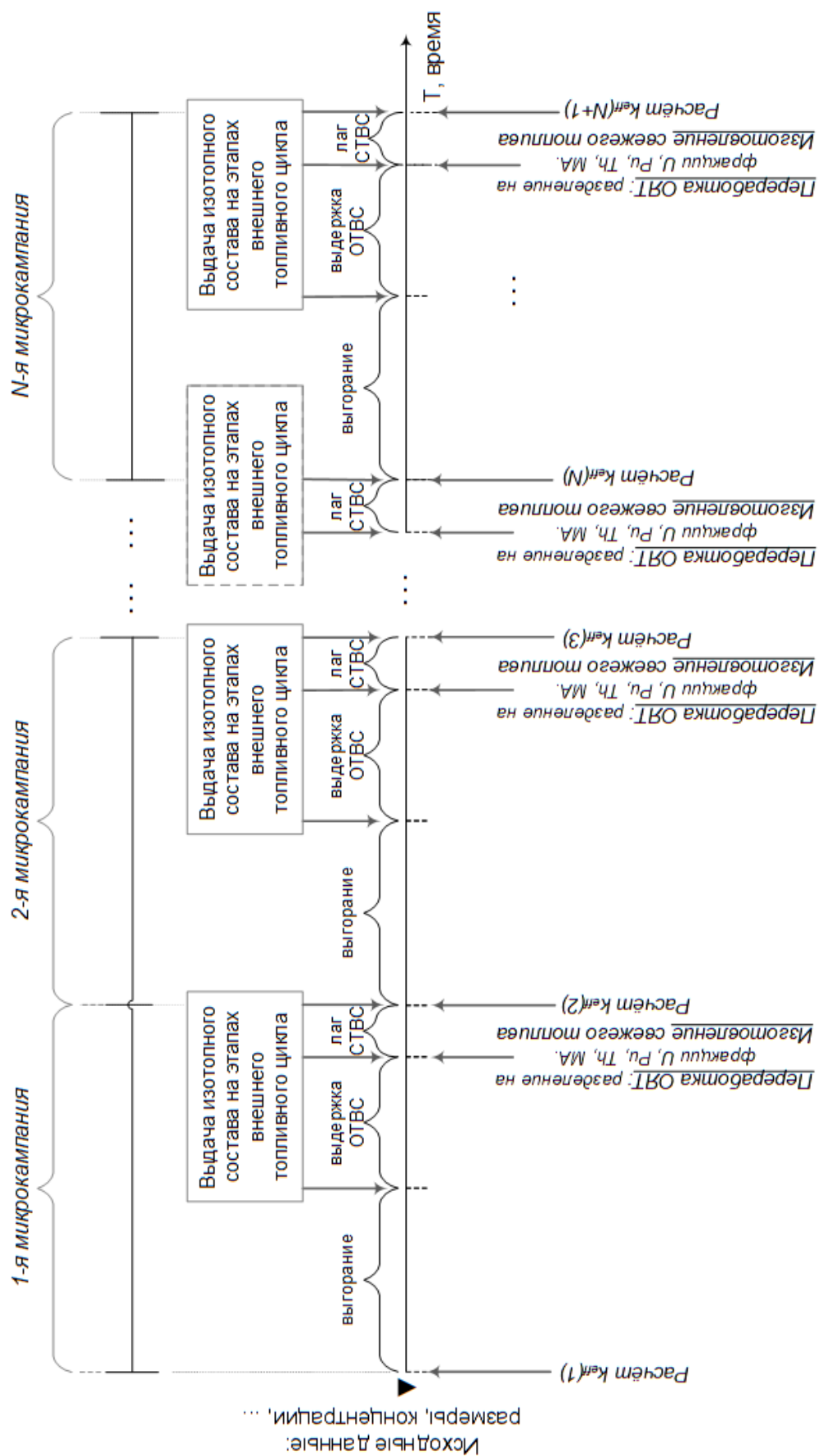


Рис. 2. Упрощенная схема расчета эволюции изотопного состава быстрого реактора при выгорании топлива и его перегрузках

7. Производится расчет значения k_{eff} . Полученное значение соответствует концу последнего временного шага или микрокампании. Разность между полученным k_{eff} и предыдущим значением позволит определить изменение реактивности, обусловленное только выгоранием топлива, на шаге выгорания, соответствующем **TMCOMP**. Если **TMCOMP** достаточно велико, то полученное изменение реактивности соответствует равновесному составу топлива. Расчет останавливается. Результаты расчета на шаге выгорания выдаются в файл **boleol.dat**, расположенный в папке запуска.

Замечание. Из сказанного выше следует, что при задании **TMCOMP**=1 выдается одно значение k_{eff} , а при **TMCOMP** = n ($n \neq 1$) выдается $n + 1$ значение k_{eff} .

Описанный алгоритм может использоваться при расчетно-теоретическом анализе процессов изменения изотопного состава в системе идентичных быстрых реакторов, поскольку позволяет учитывать перекрестный обмен делящимися материалами между ними. Однако следует иметь в виду, что алгоритм является «идеальным» и не отражает реальную практику для случая единственного реактора из-за имеющих место указанных задержек. Т. е. в таком случае вопрос происхождения подгружаемого топлива остается за рамками решаемой задачи. Практическая реализация такого алгоритма означает, что реактор должен останавливаться на время **TS+TF** в ожидании поступления рефабрицированного топлива, изготовленного из компонент, которые выделены из его же ОЯТ.

Для преодоления указанной ситуации алгоритмом предусмотрена возможность задания на начальном этапе кампании реактора длительностью **TS+TF** в качестве подгружаемых составов начального изотопного состава, как он определен в таблице 2 идентификатором **ZONXXX**. Для этого в файле исходных данных должна быть задана строка **INSTAF SFUEL** (см. табл. 5). Задание **INSTAF RFUEL** переводит задачу в режим сценария замкнутого ЯТЦ для системы из нескольких реакторов рассматриваемого типа (см. п. 3 раздела 4.3), т. е. к фактическому нулевому времени задержки **TS+TF** поставок рефабрицированного топлива на начальном этапе. Однако подчеркнем, что эволюция состава вследствие радиоактивного распада за это время учитывается.

Программная реализация моделирования изменения изотопного состава реактора в режиме частичных перегрузок топлива допускает следующие возможности:

1. Список изотопов, изменение концентраций которых учитывается в данном алгоритме, приведен в разделе 4.2 п.2 — «тяжелый металл» и п.3 — «квазиосколки». Концентрации всех остальных нуклидов остаются постоянными.

2. Алгоритм предусматривает возможность выжигания минорных актинидов (MA) Np, Am и Cm при их добавлении в топливо регулярных перегрузок. В этом случае по задаваемому признаку (см. об этом ниже, раздел 4.5) выполняется одно из трех условий:

$$GA + GU = \text{const},$$

$$GA + GTh = \text{const},$$

$$GA + GPu = \text{const},$$

где GA, GU, GTh, GPu — соответственно загрузки актинидов, урана, тория и плутония в активной зоне, т.е. подгружаемые актиниды могут замещать по отдельности или уран, или торий, или плутоний.

Кроме того, возможен вариант выжигания плутония в системе с торием, аналогично тому, как это делается для минорных актинидов, т. е. при условии:

$$GPu + GTh = \text{const}.$$

3. При расчете реактора, как уже указывалось выше, составы всех ПГЧ каждой геометрической зоны гомогенизируются. Расчеты выгорания во всех ПГЧ производятся с потоками нейтронов, рассчитанными для реактора с гомогенизированными указанным способом составами зон.

4.5 Расчет состава перегрузочных частей при рецикле топливных материалов

Содержание нуклидов в ПГЧ, принадлежащие зоне геометрической зоне m реактора, на момент загрузки ТВС соответствующих ПГЧ в реактор, определяются в соответствии с нижеприводимыми соотношениями. Далее в настоящем разделе под термином «зона» будет пониматься именно «геометрическая зона».

Введем понятие возвращаемой загрузки, т. е. загрузки «элемента» X (под X понимаются Th, Pa, U, Pu, актиниды), которая после выгрузки из реактора и выдержки в течение времени $T_b = TS + TF$, может быть полностью или частично загружена снова в активную зону реактора. Подразумевается, что избыток загрузки (если он появляется) в конечном итоге направляется на склад (в хранилище). Если же появляется дефицит загрузки, то загрузка дополняется соответствующим элементом с первоначальным изотопным составом.

Под загрузкой здесь и далее понимается соответствующая масса вещества. Возвращаемая загрузка:

$$GX^{63} = \delta X_{az} \sum_{m_{az}} GX_m^B + \delta X_{t3b} \sum_{m_{t3b}} GX_m^B + \delta X_{b3b} \sum_{m_{b3b}} GX_m^B, \quad (6)$$

где суммирование идет соответственно по зонам, принадлежащим активной зоне, торцевой зоне воспроизводства и боковой зоне воспроизводства.

$$\delta X_{\text{аз}} = \begin{cases} 0, & \text{если элемент } X \text{ не идет в рецикл из активной зоны;} \\ 1, & \text{если элемент } X \text{ идет в рецикл из активной зоны.} \end{cases}$$

$\delta X_{\text{тзв}}$ и $\delta X_{\text{бзв}}$ аналогичным образом определяют рецикл элемента X , соответственно, из торцевой и боковой зон воспроизводства.

Величины $\delta X_{\text{аз}}$ и $\delta X_{\text{бзв}}$, $\delta X_{\text{тзв}}$ и $\delta X_{\text{бзв}}$ задаются в исходных данных (см. табл. 5, пп. 24—27 для урана, пп. 29—32 для плутония, пп. 34—37 для тория), равенство их нулю означает отсутствие рецикла соответствующего элемента.

GX_m^B — масса элемента X в одной ПГЧ зоны m реактора после облучения в течение кампании ТВС (или ее части для первых рециклов) и выдержки в течение времени T_v .

Начальную массу элемента X в ПГЧ активной зоны обозначим GX^0 :

$$GX^0 = \sum_{m_{\text{аз}}} \sum_i GX_{i,m}^0, \quad (7)$$

где i — индекс изотопов, входящих в состав элемента X .

Тогда массы веществ в ПГЧ зоны m активной зоны после перегрузки вычисляются по формулам (8)—(14). В правой части даются пояснения, при каком значении вводимых исходных данных работает то или иное соотношение.

1. Минорные актиниды

$$GA_{i,m} = \begin{cases} GA_{i,m}^0, & GA^{B3} = 0; \quad ACTN = 'START' \\ \Delta GA \frac{GA_{i,m}^0}{GA^0} + p_i \cdot GA_i^{B3} \frac{GA_m^0}{GA^0}, & GA^{B3} > 0; \quad ACTN = 'OWN' \end{cases} \quad (8)$$

здесь ΔGA — задаваемая в микрокампанию подгрузка актинидов (см. табл. 5, п. 21).

Возможно задание коэффициентов возврата p_i в цикл для МА (^{243}Np , ^{241}Am , $^{242\text{m}}\text{Am}$, ^{243}Am , ^{242}Cm , ^{243}Cm , ^{244}Cm , ^{245}Cm , ^{246}Cm) и ^{231}Pa , ^{233}Pa (см. табл. 5, пп. 44—54):

$$\begin{aligned} p_i &= \text{пра231 изотоп } ^{231}\text{Pa} \\ p_i &= \text{пра233 изотоп } ^{233}\text{Pa} \\ p_i &= \text{рпр237 изотоп } ^{237}\text{Np} \\ p_i &= \text{рам241 изотоп } ^{241}\text{Am} \\ p_i &= \text{рам242 изотоп } ^{242\text{m}}\text{Am} \\ p_i &= \text{рам243 изотоп } ^{243}\text{Am} \\ p_i &= \text{рсм242 изотоп } ^{242}\text{Cm} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
p_i &= \text{pсм243 изотоп } {}^{243}\text{Cm} \\
p_i &= \text{pсм244 изотоп } {}^{244}\text{Cm} \\
p_i &= \text{pсм245 изотоп } {}^{245}\text{Cm} \\
p_i &= \text{pсм246 изотоп } {}^{246}\text{Cm}
\end{aligned}$$

Возможные значения p_i от 0 до 1. При 1 весь изотоп идет в рецикл, т. е. нет очистки, при значении 0 происходит полная очистка от этого изотопа, т. е. весь изотоп идет в отходы. Промежуточные значения описывают соответствующий коэффициент очистки.

Стандартные (по умолчанию) значения — 1.

2. Плутоний

а) плутоний, при условии замещения тория или урана подгружаемыми актинидами (*sub. pu1*), т. е.

$$\begin{aligned}
&\text{при } GA_m^0 + GU_m^0 = GA_m + GU_m, & FERTMA = 'U' \\
&\text{или } GA_m^0 + GTh_m^0 = GA_m + GTh_m: & FERTMA = 'Th' \\
&GPu_{i,m} = GPu_{i,m}^0, & \text{при } GPu^{B3} = 0; \\
&GPu_{i,m} = \frac{GPu_i^{B3}}{GPu^{B3}} GPu_m^0, & \text{при } GPu^0 \leq GPu^{B3};
\end{aligned} \tag{9}$$

$$GPu_{i,m} = \left(\frac{GPu_i^{B3}}{GPu^0} + \frac{GPu_{i,m}^0}{GPu_m^0} \cdot \frac{GPu^0 - GPu^{B3}}{GPu^0} \right) \cdot GPu_m^0, \text{ при } 0 < GPu^{B3} < GPu^0.$$

б) плутоний, при его замещении подгружаемыми актинидами (*sub. pu*), т. е.

$$\begin{aligned}
&\text{при } GA_m^0 + GPu_m^0 = GA_m + GPu_m: & FERTMA = 'Pu' \\
&GPu_{i,m} = \frac{GPu_i^0}{GPu^0} (GPu_m^0 + GA_m^0 - GA_m), & \text{при } GPu^{B3} = 0; \\
&GPu_{i,m} = \frac{GPu_i^{B3}}{GPu^{B3}} (GPu_m^0 + GA_m^0 - GA_m), & \text{при } GPu^0 + GA^0 \leq GPu^{B3} + GA; \\
&GPu_{i,m} = \left(\frac{GPu_i^{B3}}{GPu^0 + GA^0 - GA} + \frac{GPu_i^0}{GPu^0} \cdot \frac{GPu^0 + GA^0 - GA - GPu^{B3}}{GPu^0 + GA^0 - GA} \right) \times \\
&\quad \times (GPu_m^0 + GA_m^0 - GA_m) & \text{при } GPu^0 + GA^0 < GPu^{B3} + GA
\end{aligned} \tag{10}$$

3. Уран:

а) уран, при условии замещения плутония или тория подгружаемыми актинидами (*sub. uranium*), т. е.

$$\begin{aligned}
&\text{при } GA_m^0 + G\text{Pu}_m^0 = GA_m + G\text{Pu}_m, & FERTMA = \text{'Pu' } \\
&\text{или } GA_m^0 + G\text{Th}_m^0 = GA_m + G\text{Th}_m: & FERTMA = \text{'Th' } \\
&GU_{i,m} = GU_{i,m}^0, & \text{при } GU^{B3} = 0; \quad (11) \\
&GU_{i,m} = \frac{GU_i^{B3}}{GU^{B3}} GU_m^0, & \text{при } GU^0 \leq GU^{B3}; \\
&GU_{i,m} = \left(\frac{GU_i^{B3}}{GU^0} + \frac{GU_{i,m}^0}{GU_m^0} \cdot \frac{GU^0 - GU^{B3}}{GU^0} \right) \cdot GU_m^0, & \text{при } 0 < GU^{B3} < GU^0.
\end{aligned}$$

В случае а) возможно задание коэффициентов очистки изотопов урана, т. е. прохода урана через каскады изотопного разделения (см. табл. 5, пп. 38—43):

Pfu2 изотопа U-232
 Pfu3 изотопа U-233
 Pfu4 изотопа U-234
 Pfu5 изотопа U-235
 Pfu6 изотопа U-236
 Pfu8 изотопа U-238

Возможные значения Pfu2 – Pfu8 от 0 до 1. При 0 весь изотоп идет в рецикл, т. е. нет очистки, при значении 1 происходит полная очистка урана от этого изотопа, т. е. весь изотоп идет в отходы. Промежуточные значения описывают соответствующий коэффициент очистки.

Стандартные (по умолчанию) значения для всех коэффициентов очистки — 0.

б) Уран, при условии его замещения подгружаемыми актинидами (*sub. uranium1*), т. е. при $GA_m^0 + GU_m^0 = GA_m + GU_m$: $FERTMA = \text{'U'}$

$$\begin{aligned}
&GU_{i,m} = \frac{GU_i^0}{GU^0} (GU_m^0 + GA_m^0 - GA_m), & \text{при } GU^{B3} = 0; \\
&GU_{i,m} = \frac{GU_i^{B3}}{GU^{B3}} (GU_m^0 + GA_m^0 - GA_m), & \text{при } GU^0 + GA^0 \leq GU^{B3} + GA; \quad (12) \\
&GU_{i,m} = \left(\frac{GU_i^{B3}}{GU^0 + GA^0 - GA} + \frac{GU_i^0}{GU^0} \cdot \frac{GU^0 + GA^0 - GA - GU^{B3}}{GU^0 + GA^0 - GA} \right) \times \\
&\quad \times (GU_m^0 + GA_m^0 - GA_m) & \text{при } GU^0 + GA^0 > GU^{B3} + GA.
\end{aligned}$$

4. Торий, при условии $GA_m^0 + GTh_m^0 = GA_m + GTh_m$: $FERTMA = 'Th'$

$$GTh_{i,m} = \frac{GTh_i^0}{GTh^0} (GTh_m^0 + GA_m^0 - GA_m), \quad \text{при } GTh^{B3} = 0;$$

$$GTh_{i,m} = \frac{GTh_i^{B3}}{GTh^{B3}} (GTh_m^0 + GA_m^0 - GA_m), \text{ при } GTh^0 + GA^0 \leq GTh^{B3} + GA; \quad (13)$$

$$GTh_{i,m} = \left(\frac{GTh_i^{B3}}{GTh^0 + GA^0 - GA} + \frac{GTh_i^0}{GTh^0} \cdot \frac{GTh^0 + GA^0 - GA - GTh^{B3}}{GTh^0 + GA^0 - GA} \right) \times \\ \times (GTh_m^0 + GA_m^0 - GA_m) \quad \text{при } GTh^0 + GA^0 - GA < GTh^{B3}.$$

В системе с торием возможен режим выжигания плутония, т. е. в этом случае он рассматривается как аналог минорного актинида. Тогда в выше-приведенные формулы вносятся корректировки (*thorium, pluton1*):

а) к GA_m добавляется $G Pu_m = G Pu \cdot GTh_m^0 / GThz^0$,
 $GThz^0$ — начальная (стартовая) загрузка тория в активной зоне

б) к GA добавляется $G Pu$.

Для задания плутония в режиме его выжигания (т. е. аналогично трансмутации актинидов) в исходных данных необходимо задать:

U	OWN
ACTN	OWN
PU	ACTN
FERTMA	TH
PUC	YES
PUB	YES
PUR	YES
PUA	YES

5. Изотопы Ra^{231} и Ra^{233}

$$GPa_{i,m} = GPa_{i,m}^0 \quad \text{при } GPa^{B3} = 0; \quad (14)$$

$$GPa_{i,m} = \frac{GPa_m^0}{GPa^0} GPa_i^{B3} \quad \text{при } GPa^{B3} > 0.$$

В процессе рециклирования на начало каждого перегрузочного интервала в перегружаемых ТВС сохраняется масса делящейся компоненты, а также сумма масс воспроизводящей компоненты и МА. Таким образом, добавка МА в топливо приводит к уменьшению воспроизводящей компоненты.

Возможны следующие варианты логистики ядерных материалов при изготовлении свежего топлива в замкнутом топливном цикле (описание управляющих параметров дано в таблице 5).

а) Уран-плутониевый цикл

Делящимся материалом в этом случае считается плутоний, воспроизводящим — уран. Данный цикл идентифицируется заданием в исходных данных управляющих параметров **Pu OWN(START)**, **FERTMA U**. Учитывая принятые значения этих параметров по умолчанию, уран-плутониевое топливо является фактически принятым по умолчанию. При рецикле с подгрузкой минорных актинидов их добавка в топливо замещает эквивалентное по массе количество урана.

При задании **Pu OWN** в первую очередь при изготовлении топлива используется нарабатываемый в реакторе плутоний с учетом всех необходимых временных задержек, определяемыми значениями **TS** и **TF**. При недостатке по массе выгружаемого из активной зоны плутония (после всех этих временных задержек) для новой загрузки активной зоны добавляется плутоний из зон воспроизводства с учетом заданных управляющих параметров **PUC**, **PUB**, **PUA**, **PUR**. Если и при этом плутония окажется недостаточно для загрузки, то добавляется плутоний изотопного состава, соответствующего его начальной загрузке. Итоговый изотопный состав загружаемого плутония формируется именно в такой последовательности используемого плутония.

При задании **Pu START** используется плутоний стартового изотопного состава в количестве, соответствующем его начальной загрузке в перегружаемых ТВС. Значения управляющих параметров **PUC**, **PUB**, **PUA**, **PUR** при этом игнорируются.

Загрузка урана управляется параметром **U OWN(START)**. При **U START** при перегрузках загружается уран стартового изотопного состава в количестве, соответствующем начальной загрузке перегружаемых ТВС.

При **U OWN** реализуется рецикл урана, т. е. фактически используется рефабрикат урана. При этом недостаток выгружаемого из активной зоны урана компенсируется ураном первоначального изотопного состава. Подчеркнем, что уран из зон воспроизводства для подгрузки в активную зону не используется.

б) Торий-урановый цикл

Делящимся материалом в этом случае считается уран, основным компонентом которого является ^{233}U , воспроизводящим — торий.

Данное топливо идентифицируется заданием в исходных данных управляющих параметров **U OWN(START)**, **FERTMA TH**. При рецикле с

подгрузкой минорных актинидов их добавка в топливо замещает эквивалентное по массе количество тория.

При задании **U OWN** в первую очередь используется нарабатываемый в реакторе уран (в основном ^{233}U) с учетом всех необходимых временных задержек, определяемых значениями **TS** и **TF**. При недостатке по массе выгружаемого из активной зоны урана (после всех необходимых временных задержек при переработке ОЯТ и изготовлении топлива, определяемых значениями **TS** и **TF**) для новой загрузки активной зоны добавляется уран из зон воспроизводства с учетом заданных управляющих параметров **UC**, **UB**, **UA**, **UR**. Если и при этом урана окажется недостаточно для загрузки, то добавляется уран изотопного состава, соответствующего его начальной загрузке. Итоговый изотопный состав загружаемого урана формируется именно в такой последовательности используемого урана.

Загрузка тория управляется параметром **TH OWN(START)**. При **TH START** при перегрузках загружается торий стартового изотопного состава в количестве, соответствующем начальной загрузке перегружаемых ТВС.

При **TH OWN** реализуется рецикл тория, т. е. фактически используется рефабрикат тория. При этом недостаток выгружаемого из активной зоны тория компенсируется торием первоначального изотопного состава. Подчеркнем, что торий из зон воспроизводства для подгрузки в активную зону не используется.

4.6 Определение изотопного состава зон воспроизводства

Состав выгружаемого топлива из боковой и торцевой зон воспроизводства, а также из воспроизводящей аксиальной прослойки, определяется в соответствии с общей методикой расчета эволюции изотопного состава в процессе выгорания топлива (см. раздел 4.2). При перегрузках состав указанных зон всегда замещается на исходный, т. е. $GX_{i,m} = GX_{i,m}^0$.

4.7 Исходные данные для расчетов изменения изотопного состава

В таблице 5 приведены исходные данные, необходимые для расчета изменения изотопного состава в процессе работы реактора, а также для некоторых других опций. Эти исходные данные являются составной частью файла исходных данных, который подготавливается в соответствии с разделом 3.2. В колонке 3 указаны значения по умолчанию, в фигурных скобках {...} указываются возможные альтернативные значения, если они имеются. В противном случае возможны любые другие значения, не противоречащие ограничениям сложности задачи. *Курсивом* указаны подпрограммы, в которых данный объект используется. Данные, помеченные знаком «*», могут вводиться по шагам выгорания.

Таблица 5. Исходные данные, необходимые для расчета изменения изотопного состава, а также для некоторых других опций

№ п/п	Имя	Значение по умолчанию/альтернативное	Определение данных
1	2	3	4
1	TMCOMP	1	Число шагов по времени при расчете выгорания (если TMCOMP=1, то расчет производится только для реактора с заданным составом)
2	TML*	-	Длительность одного шага выгорания (микрокампании), тысячи часов
3	NSTEP*	10	Количество подшагов на одном временном шаге при решении уравнений изменения изотопного состава методом Рунге — Кутты
4	FISSEN	1.{0.}	Признак учета энергии деления: 1. — таблица 3, 0. — таблица 4
5	QCAPTR	7.0	Энергия, МэВ, выделяемая при одном акте радиационного захвата нейтронов
6	VERTUM	1. {2.}	Учет энергии, выделяемой при радиационном захвате: 1. — включена в энергию деления в соответствии с таблицей 3, 2. — учитывается отдельно в соответствии с QCAPTR , в этом случае следует задавать FISSEN=0
7	LIST*)	NO{YES}	Признак печати ядерно-физического состава реактора в ходе выгорания: YES — печать производится, NO — печать не производится
8	RFRS	-	Массив кратности частичных перегрузок по геометрическим зонам. Задается аналогично GN и NGN
9	RELT	1	Число шагов, после которого производится частичная перегрузка
10	EPSCON	0.1	Относительная точность определения ядерных концентраций при расчете равновесного состава.
11	EPSEQU	0.005	Относительная точность определения k_{eff} при расчете равновесного состава
12	EQU LIB	NO {YES}	Признак расчета равновесного состава
13	WEIGHT	NO {YES}	Признак печати загрузок перегрузочных зон
14	FORCYC	NO {YES}	Признак выдачи мощности по геометрическим зонам для расчета остаточного энерговыделения (<i>makave</i>), при TMCOMP>1
15	TS	26.28	Время выдержки перегружаемого состава перед изготовлением топлива, тыс. часов (26,28 тыс. часов = 3 года)
16	TF	1.0	Время выдержки топлива после его изготовления и

1	2	3	4
			началом работы реактора на мощности, лет
17	RST	0.	Длительность процесса перегрузки для учета изменения изотопного состава: Cm-242, Pa-233, U-233, Pu-237, Pu-238 в неперегружаемых ТВС, тыс. час (<i>fortune, risute</i>).
18	OUTSOS	NO {YES}	Вывод состава для расчета экологических характеристик по модулю расчета изменения изотопного состава тяжелого металла в течении длительной экспозиции
19	QFJ	NEW {OLD}	Признак новый/старый модуль QFJ. При QFJ= NEW считается, что вся энергия деления учитывается в Q _T , [15]. Использовать с VERTUM =1
20	FERTMA	U{U}, {PU}, {TH}	Идентификация сырьевого материала. Возможные значения — Th, U, Pu. U → (<i>plura1, u1</i>) U+Actn=const, Pu → (<i>plura</i>) Pu+Actn=const, Th → (<i>plura2</i>) Th+Actn=const
21	PACT	0.0	Суммарная подгрузка минорных актинидов- МА (Np, Am, Cm) в микрокампанию, кг
22	ACTN	START{OWN}	Идентификация подгружаемых МА при перегрузках
23	U	START {OWN}	Идентификация подгружаемого урана при перегрузках
24	UC	YES{NO}	Подача U из активной зоны в активную зону
25	UB	YES{NO}	Подача U из зоны воспроизводства в активную зону
26	UR	YES{NO}	Подача U из боковой зоны воспроизводства в активную зону
27	UA	YES{NO}	Подача U из торцевой зоны воспроизводства в активную зону
28	PU	START {OWN}, {ACTN} — Pu рециклируется как актинид	Идентификация подгружаемого плутония при перегрузках
29	PUC	YES{NO}	Подача Pu из активной зоны в активную зону
30	PUB	YES{NO}	Подача Pu из зоны воспроизводства в активную зону
31	PUR	YES{NO}	Подача Pu из боковой зоны воспроизводства в активную зону
32	PUA	YES{NO}	Подача Pu из торцевой зоны воспроизводства в активную зону
33	TH	START {OWN}	Идентификация подгружаемого тория при перегрузках
34	THC	NO{YES}	Подача Th из активной зоны в активную зону

1	2	3	4
35	THB	NO{YES}	Подача Th из зоны воспроизводства в активную зону
36	THR	NO{YES}	Подача Th из боковой зоны воспроизводства в активную зону
37	THA	NO{YES}	Подача Th из торцевой зоны воспроизводства в активную зону
38	PFU2	0.	PFU2—PFU8 коэффициенты очистки изотопов урана. 0. — не чистится, т. е. полностью идет в рецикл 1. — полностью идет в отход
39	PFU3	0.	
40	PFU4	0.	
41	PFU5	0.	
42	PFU6	0.	
43	PFU8	0.	
44	PPA231	1.	Коэффициенты возврата минорных актинидов в цикл пп. 44—54 (<i>burnames</i>)
45	PPA233	1.	
46	PNP237	1.	
47	PAM241	1.	
48	PAM242	1.	
49	PAM243	1.	
50	PCM242	1.	
51	PCM243	1.	
52	PCM244	1.	
53	PCM245	1.	
54	PCM246	1.	
55	Ra228p	0.5	Относительные точности при расчете концентраций при выводе в равновесное состояние (пп. 55—85)
56	Th228p	0.5	
57	Th229p	0.5	
58	Th230p	0.5	
59	Th232p	0.1	
60	Pa231p	0.1	
61	Pa233p	0.1	
62	U232p	0.1	
63	U233p	0.1	
64	U234p	0.01	
65	U235p	0.01	
66	U236p	0.01	
67	U238p	0.01	
68	Np237p	0.01	
69	Pu236p	0.1	
70	Pu237p	0.1	
71	Pu238p	0.1	
72	Pu239p	0.001	

1	2	3	4
73	Pu240p	0.001	
74	Pu241p	0.001	
75	Pu242p	0.001	
76	Am241p	0.01	
77	Am242mp	0.01	
78	Am243p	0.01	
79	Cm242p	0.01	
80	Cm243p	0.01	
81	Cm244p	0.01	
82	Cm245p	0.1	
83	Cm246p	0.1	
84	Ac227p	0.5	
85	Th227p	0.5	
86	K0	0.	Заданное значение k_{eff} , на которое требуется вывести расчет путем изменения содержания плутония. Реализовано только для случая МОКС-топлива (п. 3)
87	EPK0	0.	Относительная точность выведения на K0
88	MODE1	NO {YES}	Признак выдачи в файл DisFuel.out состава сразу после остановки реактора (<i>upraise, disfuel, subioa</i>)
89	MODE2	NO {YES}	Признак выдачи в файл DisFuel.out состава после выдержки топлива (<i>upraise, disfuel, subioa</i>)
90	MODE3	NO {YES}	Признак выдачи в файл FreFuel.out состава после переработки ОЯТ и рефабрикации топлива (<i>upraise, disfuel, subioa</i>)
91	MODE4	NO {YES}	Признак выдачи в файл FreFuel.out состава после перед постановкой рефабрицированного топлива в реактор (<i>upraise, disfuel, subioa</i>)
92	SZONES	NEW {OLD}	Признак расчета выгорания по зонам (<i>pervert, upraise, subioa</i>)
93	FFBCW		Идентифицирует место (папку) записи перегрузочных составов (<i>resima, resa, hatcher, multic, seqcom</i>)
94	FFBCR		Идентифицирует место (папку) чтения перегрузочных составов (<i>resima, resa, hatcher, multic, seqcom</i>)
95	SBS	N1, N2, N3,...	Блокирует запись составов для расчета «шаг-за-шагом». Первое число — номер шага, последующие — номера мод (<i>hatcher, multic, seqcom</i>)
96	SAVE	YES{NO}	Запись перегрузочных составов. В режиме последовательных расчетов для CYCLE место записи идентифицируется ключевым словом FFBCW . В противном случае запись производится в текущую папку
97	INTCAL	NO {YES}	Отказ от расчета выгорания на шаге

1	2	3	4
98	DETCOM	NO {YES}	Вывод в основной файл вывода детального состава в процессе его выгорания и перегрузок
99	DEHEAT	NO {YES}	Расчет остаточного энерговыделения в моделировании нейтронно-физических характеристик быстрых реакторов
100	NTVS		Количество ТВС в группах одинаковой кратности перегрузок или, что то же самое, имеющих одинаковую длительность кампании, NTVS обязателен при задании DEHEAT = YES
101	DELDPF	YES{NO}	Исключение файлов forcycle.dat, makave.out по окончании расчета (<i>subthc</i>)
102	B41A2	0.908	Коэффициент ветвления для Am241→Am242m
103	INSTAF	RFUEL {SFUEL}	Идентификация состава по урану и плутонию в течение первых TS+TF лет. SFUEL — начальный (стартовый) состав, RFUEL — состав урана и плутония, выделенных из собственного ОЯТ
104	RRATES	NO{YES}	Признак выдачи скоростей реакций.
105	RSIDES	NO{YES}	Признак выдачи правых частей уравнений эволюции. При задании RSIDES= “YES” необходимо задать RRATES= “YES”
106	FINISH	Номер расчетного шага по выгоранию	Признак окончания исходных данных для данного временного шага. Количество строк FINISH должно соответствовать заданному числу расчетных шагов выгорания TMCOMP

4.8 Моделирование изменения изотопного состава в режиме использования заранее подготовленных составов (режим последовательных расчетов)

В разделе 4.4 отмечены определенные ограничения на состав рециклируемого топлива. С целью преодоления таких ограничений, а также повышения гибкости расчетной схемы при использовании моделирования нейтронно-физических характеристик быстрых реакторов [1], [2], [12], [13] в связке с кодом CYCLE [1], [2], [18], в рассматриваемый алгоритм введена возможность подгрузки внешнего топлива. Под внешним топливом в общем случае понимается рециклируемое топливо любого состава, в частности, это может быть топливо на основе переработанного собственного ОЯТ или топливо на основе делящихся материалов, выделенных из ОЯТ реакторов другого типа. Такая возможность обеспечивается при расчетах с прерыванием на произвольном шаге с возможностью его продолжения. При этом заранее

подготовленные составы внешнего топлива хранятся во внешней памяти в виде текстовых файлов согласованного формата.

С этой целью в описываемом алгоритме предусмотрена возможность записи во внешнюю память на каждом шаге выгорания подгружаемых составов по всем тяжелым нуклидам, а также продуктам их радиоактивного распада. Указанные подгружаемые составы являются фактически перегрузочными частями (ПГЧ), описанными в разделе 4.4, однако расширенными на дополнительные составы (см. ниже) с учетом особенностей моделирования процесса выдержки ОЯТ, его переработки и рефабрикации топлива. В общем случае эти составы могут быть результатом использования и другого кода, при этом обязательным остается только сохранение формата записей. Основные положения, касающиеся этого формата, следующие.

Для каждой геометрической зоны количество перегрузочных составов равно, как указывалось в разделе 4.3, задаваемой кратности перегрузки. При этом она должна быть одинаковой для набора геометрических зон, моделирующих одну и ту же ТВС. Кратность перегрузок по геометрическим зонам задается с ключевым именем **RFRS** в файле исходных данных (табл. 5, п. 8).

Моделирование выдержки ОЯТ, его переработки и рефабрикации топлива учитывается тем, что каждая ПГЧ характеризуется первоначальным составом и следующими дополнительными составами (модами):

0. Первоначальный (стартовый состав, заданный в файле исходных данных для моделирования нейтронно-физических характеристик быстрых реакторов) состав свежего топлива. Состав идентифицируется как *moda*=0.

1. Состав выгоревшего выгружаемого топлива непосредственно после остановки моделируемого реактора на перегрузку. Состав идентифицируется как *moda* =1.

2. После моделирования нейтронно-физических характеристик быстрых реакторов состав выгружаемого топлива после выдержки в бассейне выдержки и/или хранилище, определяется как **TS**. Если **TS** не задано, то выдержка полагается равной 3 годам. Состав идентифицируется как *moda* =2.

3. Топливо с измененным нуклидным составом, моделируемым в RZA, в соответствии с алгоритмами разделов 4.4 и 4.5. Состав идентифицируется как *moda* =3.

4. Топливо в соответствии с п.3, но с учетом изменения нуклидного состава вследствие радиоактивного распада за время **TF**. Время **TF** — выдержка между моментом рефабрикации топлива и моментом начала работы реактора на номинальном уровне мощности после загрузки этого топлива. Время выдержки определяется ключевым именем **TF**, если **TF** не задано, то выдержка полагается равной 1 году. Состав идентифицируется как *moda* =4.

Указанные составы могут быть использованы в качестве перегрузочных для продолжения расчетов выгорания. В CYCLE в настоящее время используются режимы 4 и 1.

Для инициализации настоящего режима последовательных расчетов в файле исходных данных задаются следующие строки:

SAVE **YES**

FFBCW Disc:\dir/.../, (см. таблицу 5, п. 93),

где первая строка инициализирует данный режим, а вторая указывает адрес записи/чтения файлов составов перегружаемых частей топлива (хранения перегрузочных составов) во внешней памяти. **FFBCW** — ключевое имя, а Disc:\dir/.../ — адрес места записи, многоточие означает возможность увеличения глубины вложения папок. Последним символом всегда должен быть символ «/». Если вторая строка отсутствует, то при наличии **SAVE=YES** указанные файлы записываются в папку запуска.

Отметим, что по умолчанию **SAVE=YES**. Задание **SAVE=NO** приводит к отказу от режима записи во внешние файлы составов перегружаемых частей, что фактически означает отказ от режима последовательных расчетов.

Строкой **TMCOMP** должно быть задано количество шагов по выгоранию, на которое производится расчет, — не меньше двух. Если требуется выполнить расчет только одного шага, то необходимо задать строки **TMCOMP** n , где $n \geq 2$, и **INTCAL** **YES**. Это приведет к отказу от расчета реактора (расчет величины k_{eff}) на следующем шаге выгорания и расчет выгорания на шаге без выполнения перегрузки топлива. Однако задание **INTCAL=YES** необязательно, просто при **INTCAL=YES** будут исключены два реакторных расчета, что несколько сократит общее время расчета, при этом возможности режима записи-чтения будут сохранены.

Составы перегружаемых частей записываются в файлы с именем вида **CCXYY.dat**, где

X — номер группы ПГЧ с фиксированной кратностью перегрузок,

YY — номер ПГЧ внутри этой группы. Внутренняя структура файлов описывается ниже.

Пример порядка записи составов топлива приведен в таблице 6. В этом примере рассматривается расчет реактора, в составе которого имеются геометрические зоны (ТВС) с 4- и 5-кратной схемами перегрузок. Как и на рисунке 1, в данной таблице цифрой 0 обозначается свежее топливо, цифрой N — топливо после N циклов (микрокампаний) облучения в реакторе. **Жирным шрифтом** показаны записываемые во внешние файлы составы топлива указываемых мод (Моды 0, 1, 2, 3, 4). Запись производится, как уже указывалось выше, в текстовом формате. Текст в квадратных скобках [...] является именем подпрограммы, из которой производится данная запись.

Структура описываемых файлов следующая:

1-я строка

ntime 1 moda= 0 [имя подпрограммы]

2-строка

Ac27 nz

Далее форматом (5e13.6) идут *nz* чисел — ядерные концентрации Ac27 по физическим зонам (в данном контексте физические зоны идентичны геометрическим) данной ПГЧ. После данных для актиния таким же форматом следуют данные для Ra28, и так до последнего изотопа — псевдоосколка плутония — OCPu. Полный список изотопов, приведенный в разделе 5.2, п. 2, для рассматриваемых в настоящем разделе файлов, дополнен псевдоосколками (5.2, п. 3) урана-233 (OCU3), урана-235 (OCU5) и плутония (OCPu). Последняя строка содержит следующую информацию: номер шага (*nt*), значение k_{eff} для этого шага и массив целых чисел вида

nrfs, (l(i), i=1, nrfs),

где *nrfs* — количество групп перегрузочных зон с фиксированной кратностью перегрузок,

массив *l(i)* — номера перегрузочных зон, которые заменяются на следующем шаге выгорания (значения YY из имени файла, без начального нуля).

После этого строкой

ntime 2 moda= [имя подпрограммы]

начинается запись аналогичной информации для следующей микрокампании (следующего шага по времени, в данном случае 2-й микрокампании). При этом в соответствии со схемой, приведенной в качестве примера в таблице 6, для составов, направляемых на переработку ОЯТ, дополнительно записываются составы мод 1—4. Для остальных составов записывается только состав моды 1. Последняя строка этой записи аналогична записи для *moda=0*.

Заканчивается файл строкой вида

end file ntime ZZ,

где *ZZ* — номер последнего шага.

Отметим:

1) *nz* — количество физических зон при расчете реактора, в общем случае может быть индивидуальным для каждого изотопа.

2) Для перегрузочных зон, которые в данную перегрузку не выгружаются из реактора, записывается состав только моды 1. Изменение их изотопного состава (радиоактивный распад во время останова реактора на перегрузку) управляется заданием временного лага RST (см. таблицу 5, п. 17).

Отдельно записывается файл, содержащий начальный состав перегрузочных зон. Его имя **SC X00.dat**, а структура полностью идентична структуре файла **CC XYY.dat** для нулевого шага по времени.

Таблица 6. Пример организации записи во внешнюю память составов перегрузочных зон. Записываются составы ПГЧ с модами, отмеченными жирным шрифтом. В таблице в именах файлов опущено расширение .dat.

№ микро-кампании (шага)	ПГЧ с кратностью перегрузок 4, файлы				№ микро-кампании (шага)	ПГЧ с кратностью перегрузок 5, файлы				
	сс 101	сс 102	сс 103	сс 104		сс 201	сс 202	сс 203	сс 204	сс 205
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	расчет k_{eff}				0	расчет k_{eff}				
	M0	M0	M0	M0		M0	M0	M0	M0	M0
	расчет выгорания					расчет выгорания				
0	1	1	1	1	0	1	1	1	1	1
	перегрузка					перегрузка				
1	0	1	1	1	1	0	1	1	1	1
	M1	M1	M1	M1		M1	M1	M1	M1	M1
	M2					M2				
	M3					M3				
	M4					M4				
1	расчет k_{eff}				1	расчет k_{eff}				
	расчет выгорания					расчет выгорания				
	1	2	2	2		1	2	2	2	2
	перегрузка					перегрузка				
2	1	0	2	2	2	1	0	2	2	2
	M1	M1	M1	M1		M1	M1	M1	M1	M1
		M2					M2			
		M3					M3			
		M4					M4			
2	расчет k_{eff}				2	расчет k_{eff}				
	расчет выгорания					расчет выгорания				
	2	1	3	3		2	1	3	3	3
	перегрузка					перегрузка				
3	2	1	0	3	3	2	1	0	3	3
	M1	M1	M1	M1		M1	M1	M1	M1	M1
			M2					M2		
			M3					M3		
			M4					M4		
3	расчет k_{eff}				3	расчет k_{eff}				
	расчет выгорания					расчет выгорания				
	3	2	1	4		3	2	1	4	4
	перегрузка					перегрузка				
4	3	2	1	0	4	3	2	1	0	4
	M1	M1	M1	M1		M1	M1	M1	M1	M1

№ микро-кампании (шага)	ПГЧ с кратностью перегрузок 4, файлы				№ микро-кампании (шага)	ПГЧ с кратностью перегрузок 5, файлы				
	сс 101	сс 102	сс 103	сс 104		сс 201	сс 202	сс 203	сс 204	сс 205
				M2					M2	
				M3					M3	
				M4					M4	
4	расчет k_{eff}				4	расчет k_{eff}				
	расчет выгорания					расчет выгорания				
	4	3	2	1		4	3	2	1	5
	перегрузка					перегрузка				
5	0	3	2	1	5	4	3	2	1	0
	M1	M1	M1	M1		M1	M1	M1	M1	M1
	M2									M2
	M3									M3
	M4									M4
5	расчет k_{eff}				5	расчет k_{eff}				
	расчет выгорания					расчет выгорания				
	1	4	3	2		5	4	3	2	1
	перегрузка					перегрузка				
6	1	0	3	2	6	0	4	3	2	1
	M1	M1	M1	M1		M1	M1	M1	M1	M1
		M2				M2				
		M3				M3				
		M4				M4				
6	расчет k_{eff}				6	расчет k_{eff}				
	расчет выгорания					расчет выгорания				
	2	1	4	3		1	5	4	3	2
	перегрузка					перегрузка				
7	2	1	0	3	7	1	0	4	3	2
	M1	M1	M1	M1		M1	M1	M1	M1	M1
			M2				M2			
			M3				M3			
			M4				M4			
7	расчет k_{eff}				7	расчет k_{eff}				
	расчет выгорания					расчет выгорания				
	3	2	1	4		2	1	5	4	3

И так далее....

Для того чтобы прочитать требуемые составы (перегружаемый состав, а также составы, находящиеся в реакторе, т. е. составы тех ТВС, которые еще не выработали кампанию) в файле исходных данных к RZA необходимо указать строки вида:

FFBCR Disc:\dir/.../
SBS N1, N11, N12, N13, N14, N2, N21, N22, N23, N24, N25,....
SAVE NO

где

FFBCR — указывает адрес файлов для чтения с требуемым составом (см. таблицу 5, п. 94),

SBS — ключевое имя (см. таблицу 5, п. 95), а значения N1, N11, N12, N13, N14, N2, N21, N22, N23, N24, N25 и т. д. определяют параметры чтения. N1 и N2 определяют номер микрокампании (шага по времени), остальные параметры определяют номер требуемой моды (из числа записанных) для соответствующих перегрузочных частей:

N1 — номер шага по выгоранию (номер микрокампании),

N11 — номер моды для 1-й перегрузочной зоны 1-й группы перегрузочных зон,

N12 — номер моды для 2-й перегрузочной зоны 1-й группы перегрузочных зон,

N13 — номер моды для 3-й перегрузочной зоны 1-й группы перегрузочных зон,

N14 — номер моды для 4-й перегрузочной зоны 1-й группы перегрузочных зон,

N2 — номер шага по выгоранию (номер микрокампании), N1 = N2,

N21 — номер моды для 1-й перегрузочной зоны 2-й группы перегрузочных зон,

N22 — номер моды для 2-й перегрузочной зоны 2-й группы перегрузочных зон,

N23 — номер моды для 3-й перегрузочной зоны 2-й группы перегрузочных зон,

и так далее.

Например, строка в файле исходных данных:

SBS 4, 1, 1, 1, 4, 4, 1, 1, 1, 4, 1 для реактора, имеющего 2 группы геометрических зон (2 группы ТВС) с кратностью перегрузок 4 и 5, продолжить расчет реактора с составом:

1) для первой группы ПГЧ (кратность перегрузки — 4) в составе первых трех перегрузочных зон использовать состав, полученный после 4-х шагов (после 4-й микрокампании) непосредственно после остановки реактора (moda=1), для 4-й перегрузочной зоны использовать состав, соответствующий рефабрицируемому топливу, полученному на основе своего ОЯТ (moda=4).

2) для второй группы ПГЧ (кратность перегрузки — 5) в составе первых трех перегрузочных зон и пятой ПГЧ использовать состав, полученный

после 4-х шагов (после 4-й микрокампании) непосредственно после остановки реактора (moda=1), для 4-й перегрузочной зоны использовать состав, соответствующий рефабрицируемому топливу, полученному на основе своего ОЯТ (moda=4).

В таблице 6 указываемые составы отмечены *жирным курсивом*.

Строка **SAVE NO** приводит к отказу от режима записи по ключевому слову **FFBCW**, даже если оно присутствует в исходных данных. Поскольку по умолчанию **SAVE = YES**, строка **SAVE NO** означает фактическую блокировку записи и тем самым позволяет сохранить в неприкосновенности записанные по адресу **FFBCW** составы.

Ниже приводятся примеры задания чтения составов, записанных в формате таблицы 5. Номера шагов соответствуют первой и шестой цифрам каждого файла и для наглядности выделены серой заливкой. Предполагается, что файлы с составами записаны в D:\FFB3/ и D:\FFB4/.

1. Чтение состава 1-го шага по выгоранию:

FFBCR D:\FFB3/

SBS **1,4,1,1,1,1,4,1,1,1,1**

SAVE **NO**

2. Чтение состава 2-го шага по выгоранию:

FFBCR D:\FFB3/

SBS **2,1,4,1,1,2,1,4,1,1,1**

SAVE **NO**

3. Чтение состава 3-го шага по выгоранию и запись в D:\FFB4/:

FFBCR D:\FFB3/

FFBCW D:\FFB4/

SBS **3,1,1,4,1,3,1,1,4,1,1**

4. Чтение состава 2-го шага по выгоранию, записанного в D:\FFB4/:

FFBCR D:\FFB4/

SBS **2,4,1,1,1,2,1,1,1,1,4**

SAVE **NO**

Важное замечание. Режим использования заранее подготовленных составов (или режим последовательных по выгоранию расчетов) и режим расчета равновесного состава, см. далее раздел 4.9, одновременно не совместимы.

4.9 Расчет равновесного состава топлива

Стационарный (равновесный) состав быстрого реактора с учетом перегрузок может быть определен в расчетах выгорания с учетом многократного рецикла собственного топлива в соответствии с алгоритмом, описанным в предыдущем разделе. Практические расчеты показали, что количество шагов

по выгоранию (микрокампаний), необходимое для вывода реактора в состояние, близкое к стационарному, оказывается достаточно большим, особенно при рецикле минорных актинидов – несколько десятков шагов. Соответственно, такие расчеты требуют больших затрат счетного времени, основная часть которого расходуется на нейтронно-физические расчеты реактора.

Ниже описывается усовершенствованный алгоритм, который позволяет многократно сократить расчетное время определения стационарного состава без заметной потери точности. Этапы этого алгоритма заключаются в следующем:

1. Производится нейтронно-физический расчет реактора с заданным составом.

2. С полученным пространственно-энергетическим распределением нейтронов с учетом выбранного режима рецикла топлива и его частичных перегрузок (см. разделы 4.3—4.7) выполняется n итераций (шагов) по расчету выгорания без нейтронно-физического расчета реактора.

Критерием окончания итерационного процесса служит выполнение условий:

$$\max_{m,i} \frac{|\rho_{m,i}^{(n)} - \rho_{m,i}^{(n-1)}|}{\rho_{m,i}^{(n-1)}} < \varepsilon_{\rho,i}, \quad (15)$$

где $\rho_{m,i}^{(n)}$ — концентрация тяжелого нуклида i в зоне m в начале микрокампании после n итераций,

$\varepsilon_{\rho,i}$ — заданная точность расчета концентраций, где i соответствует нуклидам из таблицы 5 пп. 55—85:

^{227}Ac						
^{228}Ra						
^{227}Th	^{228}Th	^{229}Th	^{230}Th	^{232}Th		
^{231}Pa	^{233}Pa					
^{232}U	^{233}U	^{234}U	^{235}U	^{236}U	^{238}U	
^{237}Np						
^{236}Pu	^{237}Pu	^{238}Pu	^{239}Pu	^{240}Pu	^{241}Pu	^{242}Pu
^{241}Am	$^{242\text{m}}\text{Am}$	^{243}Am				
^{242}Cm	^{243}Cm	^{244}Cm	^{245}Cm	^{246}Cm		

3. С полученным ядерно-физическим составом, который можно считать первым приближением к стационарному составу, производится расчет реактора на начало очередной микрокампании. Определяется величина k_{eff} и уточняется пространственно-энергетическое распределение нейтронов.

4. С вновь полученным распределением нейтронов производится расчет выгорания в соответствии с п. 2 и тем самым уточняется стационарный состав реактора.

5. Проводится расчет реактора с уточненным стационарным составом, определяется новое значение $\tilde{k}_{eff}$. Если выполняется условие

$$\left| \frac{\tilde{k}_{eff} - k_{eff}}{k_{eff}} \right| < \varepsilon_{k_{eff}} \quad (16)$$

($\varepsilon_{k_{eff}}$ — задается, см. таблицу 5, п. 11), то расчет стационарного состава завершается. В противном случае полагается $k_{eff} = \tilde{k}_{eff}$ и цикл расчетов (пп 2 — 5) повторяется.

6. С целью определения изменения реактивности между перегрузками в стационарном состоянии производится расчет выгорания на одном временном шаге и определение нейтронно-физических характеристик реактора в конце микрокампании.

Важное замечание. Режимы расчета равновесного состава и использования заранее подготовленных составов (режим последовательных по выгоранию расчетов), изложенный в разделе 5.8, одновременно несовместимы.

4.10 Определение содержания плутония в топливе при выводе на заданное значение k_{eff} в конце микрокампании

Данная опция предназначена для определения содержания плутония в топливе, обеспечивающего заданное значение k_{eff} на конец микрокампании по завершении расчета выгорания в соответствии с заданным **TMCOMP**. В настоящее время опция реализована только для МОКС-топлива. В состав МОКС-топлива могут входить уран, плутоний и группа элементов, объединенная под названием «минорные актиниды» — МА:

изотопы урана: ^{232}U , ^{233}U , ^{234}U , ^{235}U , ^{236}U , ^{238}U ;

изотопы группы плутония: ^{236}Pu , ^{238}Pu , ^{239}Pu , ^{240}Pu , ^{241}Pu , ^{242}Pu , ^{241}Am ;

изотопы МА: ^{237}Np , ^{241}Am , $^{242\text{m}}\text{Am}$, ^{243}Am , ^{242}Cm , ^{243}Cm , ^{244}Cm , ^{245}Cm , ^{246}Cm .

^{241}Am может формироваться как за счет загружаемого вместе с плутонием и являющегося продуктом распада ^{241}Pu , так и за счет рецикла МА, загружаемых отдельно при перегрузках. Часть исходных данных, необходимых для данной опции, подготавливается в виде файла rzata.dat (см. ниже).

Для включения опции в работу в общем файле исходных данных для RZA необходимо задать требуемое значение величины k_{eff} . Поскольку содержание плутония определяется методом последовательных приближений,

необходимо также задание значения относительной точности определения k_{eff} . Соответствующие ключевые слова в файле исходных данных **К0** и **ЕРК0** (табл. 5, пп. 86 и 87).

Расчет содержания плутония в МОКС-топливе, обеспечивающего заданное значение k_{eff} , включает в себя следующую последовательность действий.

1. После расчета с заданным в исходных данных составом уменьшается заданное содержание плутония по всем зонам в **amu** раз (коэффициент для изменения содержания плутония на первой итерации см. в табл. 7).

2. Определяется массовая доля урана по зонам в топливе по соотношению $x_u = 1 - x_{\text{Pu}} - x_{\text{MA}}$.

3. Производится перерасчет ядерных концентраций всех изотопов/элементов, входящих в состав топлива, по следующим формулам:

– Определяются средние атомные веса урана, плутония и малых актиноидов по соотношению:

$$A_j = \sum x_i / A_i, \quad (17)$$

где x_i и A_i , соответственно, содержание и массовые числа изотопов элемента j , а A_j его среднее массовое число, $j = \text{U}, \text{Pu}, \text{MA}$.

– Определяется среднее массовое число по тяжелым атомам

$$A_{\text{ТА}} = x_u / A_{\text{U}} + x_{\text{Pu}} / A_{\text{Pu}} + x_{\text{MA}} / A_{\text{МА}}, \quad (18)$$

и с учетом наличия кислорода в МОКС-топливе: $A_{\text{МОКС}} = A_{\text{ТА}} + 32$.

– Определяются плотности, соответственно, тяжелых атомов, урана, плутония и МА:

$$\begin{aligned} \gamma_{\text{ТА}} &= \gamma A_{\text{ТА}} / A_{\text{МОКС}} \\ \gamma_{\text{Pu}} &= \gamma_{\text{ТА}} \cdot x_{\text{Pu}} \\ \gamma_{\text{МА}} &= \gamma_{\text{ТА}} \cdot x_{\text{МА}} \\ \gamma_{\text{U}} &= \gamma_{\text{ТА}} - \gamma_{\text{Pu}} - \gamma_{\text{МА}} \end{aligned}, \quad (19)$$

где γ — заданная плотность топлива, г/см³.

Ядерные концентрации изотопов тяжелых атомов рассчитываются по соотношению:

$$\rho_i = \varepsilon_{\text{топ}} (1 - \varepsilon_{\text{суз}}) x_i \gamma_{\text{ТА}} N_{\text{A}} / A_i \cdot \varepsilon_{\text{расш}}, \quad (20)$$

где индекс i относится ко всем изотопам $j = \text{U}, \text{Pu}$ и МА ;

$\varepsilon_{\text{топ}}$ и $\varepsilon_{\text{суз}}$ объемные доли топлива в ячейке и каналов под извлеченные органы СУЗ в расчетных зонах (задаются);

$\varepsilon_{\text{расш}}$ — коэффициент объемного термического расширения реактора (задается);

N_A — число Авогадро, равное 0,60221, при этом ρ_i измеряется в единицах 10^{24} яд/см³.

Концентрации ²⁴¹Am, полученные из двух источников (распада плутония и рецикла МА), суммируются. Концентрация кислорода рассчитывается как удвоенная концентрация суммы всех тяжелых атомов.

4. Производится расчет реактора с новым составом, определяется значение величины k_{eff} на конец микрокампании, сравнивается со старым значением k_{eff} и линейной интерполяцией (экстраполяцией) определяется новое содержание плутония в топливе (x_{pu}), требующееся для обеспечения заданного **K0** с требуемой точностью **ЕРК0**.

При этом обязательным условием такого расчета является постоянство в пределах активной зоны искомого содержания плутония.

Дополнительные исходные данные, необходимые для такого расчета должны содержаться в файле с именем rzata.dat, который должен быть размещен в папке, из которой производится запуск на расчет.

Пример файла приводится в таблице 7. Все содержания задаются в относительных единицах. При расчете определяется содержание плутония в МОКС-топливе, при котором обеспечивается заданное значение (см. табл. 5) $k_{eff} = k_0$ при погрешности **ЕРК0** (см. там же). Одновременно при этом корректируется содержание в топливе урана и кислорода. При этом сохраняется общая масса минорных актинидов и их изотопный состав, которые, однако, уточняются при новой итерации. Поскольку расчет производится методом итераций, то его эффективность зависит от задаваемого коэффициента учета изменения содержания плутония на первой итерации (**amu**). Неудачный выбор значения **amu** может привести к расходимости процесса итераций.

Следует подчеркнуть, что задаваемые в этом файле данные должны строго соответствовать данным, использованным при подготовке значений концентраций, которые заданы в основном файле исходных данных, представленных в таблице 2.

Таблица 7. Содержание файла **rzata.dat**

Ключевое слово	Значение (пример)	Пояснение
epu=	0.0,0.03,0.59,0.26, 0.05,0.07,0.0	Изотопный состав плутония: Pu-236, -238, -239, -240, -241, -242, Am-241. Am-241 здесь рассматривается как составная часть плутония, и его относительное содержание относительно изотопов плутония неизменно

Ключевое слово	Значение (пример)	Пояснение
eu=	0.0,0.0,0.0,0.004,0.0,0.996	Изотопный состав урана U-232, 233, 234, 235, 236, 238
ema=	0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.,0.	Изотопный состав минорных актинидов: Np-237, Am-241, -242m, -243, Cm-242, -243, -244, -245, -246. Здесь Am-241 рассматривается только как минорный актинид, и его содержание определяется общим содержанием минорных актинидов в топливе
gam=	9.2	Гомогенизированная по ячейке активной зоны плотность топлива (тм) UO ₂ +PuO ₂ +MAO ₂ по активной зоне, г/см ³
akt=	0.471,0.471	Объемная доля топлива в ячейке.
akr=	1.03	Коэффициент объемного термического расширения реактора
aks=	0.8714,1.0	Доля топлива в реакторе, (1 — aks) — доля каналов СУЗ
gpuv=	0.181,0.181	Массовое содержание плутония в топливе по геометрическим зонам активной зоны.
xma=	0.0,0.0	Массовое содержание минорных актинидов в топливе по геометрическим зонам активной зоны
ncore=	1,2	Номера геометрических зон, входящих в состав активной зоны, т.е. тех зон, в которых определяется содержание плутония
amu=	0.9	Коэффициент для изменения содержания плутония на первой итерации

Файл **rzata.dat** требуется только при расчетах с выводом на заданное значение величины k_{eff} в конце микрокампании (перегрузочного интервала) путем изменения содержания плутония в МОКС-топливе. Во всех других случаях он не требуется. Расчет проводится методом итераций.

4.11 Расчет скоростей реакций

Под скоростями реакций по геометрическим зонам понимаются произведения: $\lambda^i r^i$ и $\sigma^i r^i$ ф, где r^i – концентрация i -го изотопа по геометрическим зонам, эволюция которого предусмотрена алгоритмом. Список таких изотопов представлен в подразделе 4.2, пункт 2; σ^i – микросечения (поглощения,

деления, реакций ($n, 2n$) и ($n, 3n$)) для этих же изотопов; λ^i – постоянные распада для этих же изотопов; ϕ – средние потоки нейтронов по геометрическим зонам.

Расчет скоростей реакций инициируется заданием в файле исходных данных строки **RRATES YES** (см таблицу 5, п.104). Выдача результатов расчета производится в специальный файл `rrates.out`. При дополнительном задании строки **RSIDES YES** (см таблицу 5, п.105) на основе вычисленных скоростей реакций выполняются расчеты относительных вкладов реакций деления, поглощения и радиационного захвата нейтронов, а также реакций ($n, 2n$) и ($n, 3n$) в наработку или убыль конкретного изотопа. Выдача относительных вкладов производится в файл `rsides.out`.

Расчеты скоростей реакций и относительных вкладов производится по геометрическим зонам на моменты времени, соответствующие прекращению облучения нейтронами топлива в реакторе.

Расчеты выполняются модулями *RRATES* и *RSIDES*, вызываемыми из подпрограммы *ROCCOZ*.

5 Расчет некоторых экологических характеристик

5.1 Общие замечания

Рассматриваемая методика моделирования нейтронно-физических характеристик быстрых реакторов совместно с расчетом изменения изотопного состава тяжелого металла в течение длительной экспозиции позволяет проводить расчеты некоторых экологических характеристик компонент выгружаемого отработавшего ядерного топлива в процессе его длительного хранения:

- остаточного энерговыделения отработавшего топлива,
- изотопного состава топлива,
- активности,
- радиотоксичности,
- источника нейтронов.

При этом необходимые исходные данные, (в т. ч. изотопный состав на момент прекращения облучения, время облучения, мощности, выделяемые при делении тяжелых ядер, и др., которые являются результатом двумерного в (R, Z)-геометрии реакторного расчета по моделированию нейтронно-физических характеристик быстрых реакторов) через внешние файлы поступают в модули расчета экологических характеристик.

Экологические характеристики определяются на этапах заключительной стадии ЯТЦ, при этом временной интервал моделирования этих характеристик может составлять от момента прекращения облучения топлива в ре-

акторе до 10 млн лет. Отметим, что остаточное энергосодержание ОЯТ, обусловленное радиоактивным распадом осколков деления, также может определяться при использовании моделирования нейтронно-физических характеристик быстрых реакторов без использования модуля расчета изменения изотопного состава тяжелого металла в течение длительной экспозиции.

Передача исходной информации из реакторного расчета в модуль расчета изменения изотопного состава тяжелого металла в течение длительной экспозиции осуществляется через внешние файлы с именами вида **dpfpNNN.daq**, где NNN — номер геометрической зоны (см. раздел 5.6).

Файлы **dpfpNNN.daq** в текстовом формате содержат следующую информацию:

- 1) Мощность (тепловая), МВт, выделенная при делении следующих нуклидов: ^{232}Th , ^{233}U , ^{235}U , ^{236}U , ^{238}U , ^{237}Np , ^{239}Pu , ^{240}Pu , ^{241}Pu , ^{242}Pu за полный цикл облучения топлива.
- 2) Масса тяжелого металла в данной геометрической зоне (**HMI**), кг.
- 3) Объем данной геометрической зоны (**VOLUME**), м^3 .
- 4) Длительность облучения топлива в данной геометрической зоне (**IRT**), лет.
- 5) Гомогенизированная плотность тяжелого металла в данной геометрической зоне (**GAMMA**), г/см^3 .
- 6) Кратность перегрузок топлива данной геометрической зоны (**r1**).
- 7) Номер группы геометрических зон с различной кратностью перегрузок, к которой относится данная геометрическая зона (**r2**).
- 8) Количество групп геометрических зон с различной кратностью перегрузок (**nrfs**).
- 9) Количество ежегодно перегружаемых ТВС в группах геометрических зон с различной кратностью перегрузок (**ntvs**).
- 10) Выгорание в данной геометрической зоне (**burnup**), МВт·сут/кг.
- 11) Признак — данная геометрическая зона: $ngn=1$ — активная зона, $ngn=2$ — ТЗВ или прослойка $ngn=3$ — БЗВ.
- 12) Идентификатор единиц для нуклидного состава (**type=kg, ...**).
- 13) Нуклидный состав выгружаемого из реактора облученного топлива на момент прекращения облучения в реакторе. В общем случае состав может включать следующие нуклиды:

^{209}Bi			
^{206}Pb	^{207}Pb	^{208}Pb	^{210}Pb
^{210}Po			
^{227}Ac			
^{226}Ra	^{228}Ra		

²²⁷ Th	²²⁸ Th	²²⁹ Th	²³⁰ Th	²³¹ Th	²³² Th	
²³¹ Pa	²³³ Pa					
²³² U	²³³ U	²³⁴ U	²³⁵ U	²³⁶ U	²³⁷ U	²³⁸ U
²³⁷ Np	²³⁸ Np	²³⁹ Np				
²³⁶ Pu	²³⁷ Pu	²³⁸ Pu	²³⁹ Pu	²⁴⁰ Pu	²⁴¹ Pu	²⁴² Pu
²⁴¹ Am	²⁴² Am	^{242m} Am	²⁴³ Am	²⁴⁴ Am		
²⁴² Cm	²⁴³ Cm	²⁴⁴ Cm	²⁴⁵ Cm	²⁴⁶ Cm		
²²⁶ Ra	²²⁸ Ra					
Ocu3	Ocu5	Oсru	FPs			

Здесь Ocu3, Ocu5 и Oсru — концентрация осколков деления групп изотопов, определяемых в разделе 4.2 п. 3. **FPs** — суммарная концентрация осколков деления. Изотопный состав осколков деления и его изменение при длительном хранении не является предметом рассмотрения. Однако их влияние на плотность остаточного энерговыделения учитывается, см. раздел 5.4а). Наличие же в составе исходных данных осколков деления обусловлено требованием обеспечения баланса масс выгружаемого ОЯТ и загружаемого топлива.

Нуклидный состав тяжелого металла выгружаемого ОЯТ задается в килограммах, что явно указывается в файле (признак 12). Если какой-либо нуклид в данном составе отсутствует, то он может быть задан с нулевым содержанием или просто опущен. При автоматической передаче состава из реакторного расчета моделирования нейтронно-физических характеристик быстрых реакторов в модули расчета изменения изотопного состава тяжелого металла в течении длительной экспозиции указанный список несколько укорочен. Исключены следующие нуклиды: изотопы висмута и свинца, изотопы ²²⁷Th, ²³¹Th, ²⁴²Am, ²⁴⁴Am. Как правило, эти нуклиды образуются в реакторе в очень малых количествах, практически не влияющих на нейтронно-физические и радиационные характеристики при работе реактора на мощности. Кроме того, в файле отсутствуют Oсru и FPs, при этом в качестве Ocu5 задается сумма осколков групп урана и плутония.

Отметим, что алгоритмом предусмотрено суммирование остаточного энерговыделения, нейтронного источника, активности и радиотоксичности по расчетным зонам реактора, имеющим одинаковую кратность перегрузок и, следовательно, одинаковое время облучения. Тем самым указанные характеристики могут определяться как средние в расчете на ТВС с идентичными параметрами облучения.

Запуск на расчет экологических характеристик возможен через последовательный запуск моделирования нейтронно-физических характеристик быстрых реакторов и модуля расчета изменения изотопного состава

тяжелого металла в отдельном режиме или через однократный запуск соответствующего командного файла.

5.2 Расчет эволюции нуклидного состава ОЯТ в процессе длительного хранения

Задача по определению нуклидного состава топлива в процессе длительного хранения делится на две части:

– расчет нуклидного состава при работе реактора на мощности (облучения топлива нейтронами) и определение изотопного состава выгружаемого топлива — функция моделирования нейтронно-физических характеристик быстрых реакторов,

– расчет нуклидного состава при длительном хранении ОЯТ (обращении с ОЯТ) и оценка некоторых экологических характеристик — функция модуля расчета изменения изотопного состава тяжелого металла.

В первой части рассматриваются нуклиды, оказывающие принципиальное влияние на нейтронный баланс и являющиеся материнскими ядрами для последующих цепочек радиоактивного распада. Список этих нуклидов приведен в разделе 4.2, п.2. Во второй части — рассматривается список, расширенный за счет цепочек изотопов, претерпевающих радиоактивный распад, до стабильных изотопов свинца ^{206}Pb , ^{207}Pb , ^{208}Pb и висмута ^{209}Bi :

^{225}Ac	^{227}Ac	^{228}Ac						
^{223}Ra	^{224}Ra	^{225}Ra	^{226}Ra	^{228}Ra				
^{221}Fr	^{223}Fr							
^{219}Rn	^{220}Rn	^{222}Rn						
^{217}At	^{218}At							
^{210}Po	^{211}Po	^{212}Po	^{213}Po	^{214}Po	^{215}Po	^{216}Po	^{218}Po	
^{209}Bi	^{210}Bi	^{211}Bi	^{212}Bi	^{213}Bi	^{214}Bi			
^{206}Pb	^{207}Pb	^{208}Pb	^{209}Pb	^{210}Pb	^{211}Pb	^{212}Pb	^{213}Pb	^{214}Pb
^{207}Tl	^{208}Tl	^{209}Tl						

Эволюция продуктов деления, которые представлены псевдоосколками деления урана и плутония, при этом не учитывается.

Соответственно построены алгоритмы расчета. На первом этапе проводится расчет состава в процессе кампании топлива в реакторе (раздел 4). Рассчитанный состав топлива на конец облучения является начальным условием для решения системы дифференциальных уравнений, описывающих процессы радиоактивного распада тяжелых атомов при хранении ОЯТ.

Цепочки радиоактивных распадов тяжелого металла топлива, учитываемые в модуле расчета изменения изотопного состава тяжелого металла, при-

ведены на рисунке 3. Соответствующая им система дифференциальных уравнений, вследствие ее громоздкости, здесь не приводится. Характерной особенностью для рассматриваемого процесса является значительный разброс значений периода полураспада рассматриваемых ядер от $T_{1/2}=1,4 \cdot 10^{10}$ лет для ^{232}Th до $T_{1/2}=4,2$ мкс для ^{213}Po . Указанное обстоятельство затрудняет непосредственное использование численных методов для решения этой системы уравнений. Поэтому используется комбинация численного метода Рунге — Кутты [17] и приближение векового уравнения.

Методика и алгоритм расчета изменения нуклидного состава топлива при его облучении нейтронами кратко описаны в разделе 4, а также в ряде работ по моделированию нейтронно-физических характеристик быстрых реакторов [12], [13] и здесь не приводится. Система уравнений, описывающая изменение нуклидного состава, в этом случае решается, как указывалось в разделе 4.2, на временном шаге, который совпадает с временным шагом расчета потока нейтронов. При этом каждый шаг разбивается на определенное число равных подшагов. Непосредственные расчеты показали, что при надлежащем выборе величины временного подшага ($T \sim 5$ суток) при решении системы уравнений, описывающих ядерные превращения, методом Рунге — Кутты обеспечивается приемлемая точность. Отметим, что при таком расчете рассматривается список нуклидов, учет которых важен для нейтронного баланса.

Отметим одну особенность этапа расчета состава топлива при его облучении нейтронами. В этом случае принято, что конечным продуктом эволюции изотопного состава являются изотопы тория, а также нуклиды ^{227}Ac ($T_{1/2} = 21,8$ лет) и ^{228}Ra ($T_{1/2} = 5,75$ лет). Содержание продуктов радиоактивного распада последних сравнительно невелико, они практически не влияют на нейтронно-физические характеристики и характеристики безопасности работающего на энергетической мощности реактора. Также невелик их вклад в радиационные характеристики свежевыгруженного отработавшего топлива по сравнению с МА и осколками деления. Поэтому влиянием этих ядер на нейтронно-физические характеристики реактора можно пренебречь.

Однако при длительном хранении ОЯТ и/или его компонент изотопы тория вместе с ^{227}Ac и ^{228}Ra являются материнскими ядрами для радиационно опасных цепочек ядерных превращений. Большинство дочерних продуктов распада первого поколения имеют период полураспада существенно меньше, чем у материнских ядер. Поэтому можно полагать, что они находятся в динамическом равновесии с материнскими ядрами.

Особое место занимает изотоп ^{228}Th с периодом полураспада $T_{1/2} = 1,913$ лет. В цепочке его распада имеется изотоп ^{224}Ra ($T_{1/2} = 3,66$ суток), который является начальным ядром для цепочки ядерных превращений,

среди ядер которой имеются изотопы ^{212}Bi и ^{208}Tl , существенно влияющие на экологические характеристики даже свежевыгруженного ОЯТ. Особенно это важно для ториевого топливного цикла. В этом случае нулевая концентрация ^{224}Ra , которая обычно принимается для первого этапа (этапа облучения топлива нейтронами), может привести к заметной погрешности в экологических характеристиках, поэтому более корректным является принять ее равной его равновесному значению. Для этого учитывается вклад α -распада очень долгоживущего ^{232}Th ($T_{1/2} = 1,4 \cdot 10^{10}$ лет) через два β^- -распада сравнительно короткоживущих ^{228}Ra и ^{228}Ac в образование ^{228}Th .

При непосредственном использовании метода Рунге — Кутта для решения уравнений изотопной кинетики вследствие наличия нуклидов с очень коротким периодом полураспада и с учетом весьма длительного интервала времени, на котором прослеживается эволюция состава, потребуется большое количество временных шагов. Так, например, для корректного учета изменения содержания вышеупомянутого ^{213}Po на протяжении ~ 10 млн лет потребуется $\sim 10^{17}$ шагов, что явно неприемлемо.

С другой стороны, известно, что в таких условиях содержание короткоживущих нуклидов описывается вековым уравнением, соответствующим их динамическому равновесию с материнскими ядрами:

$$\rho_d \lambda_d = \rho_m \lambda_m, \quad (21)$$

где индексы m и d указывают, соответственно, на материнские и дочерние ядра.

Необходимым условием корректности вышеприведенного соотношения является:

$$(T_{1/2})_m \gg (T_{1/2})_d.$$

В соответствии с данными по величине $T_{1/2}$ и моментами времени, для которых проводится расчет нуклидного состава облученного топлива и его компонент (t_s , 10, 10^2 , 10^3 , 10^4 , 10^5 , 10^6 , 10^7 лет после прекращения облучения в реакторе, а также $t_{\text{ССТ}}$, где $t_s < 10$ лет и $t_{\text{ССТ}} < 10^7$ лет, которые задаются в исходных данных), все нуклиды были разбиты на две группы. В первую вошли нуклиды, для определения содержания которых используется метод Рунге — Кутта. Содержание нуклидов второй группы определяется на тех же временных шагах, что и для нуклидов первой группы, последовательно по равновесному соотношению (21) через содержание предшественников.

Использование такого подхода позволило существенно (на порядки) повысить эффективность алгоритма без потери точности.

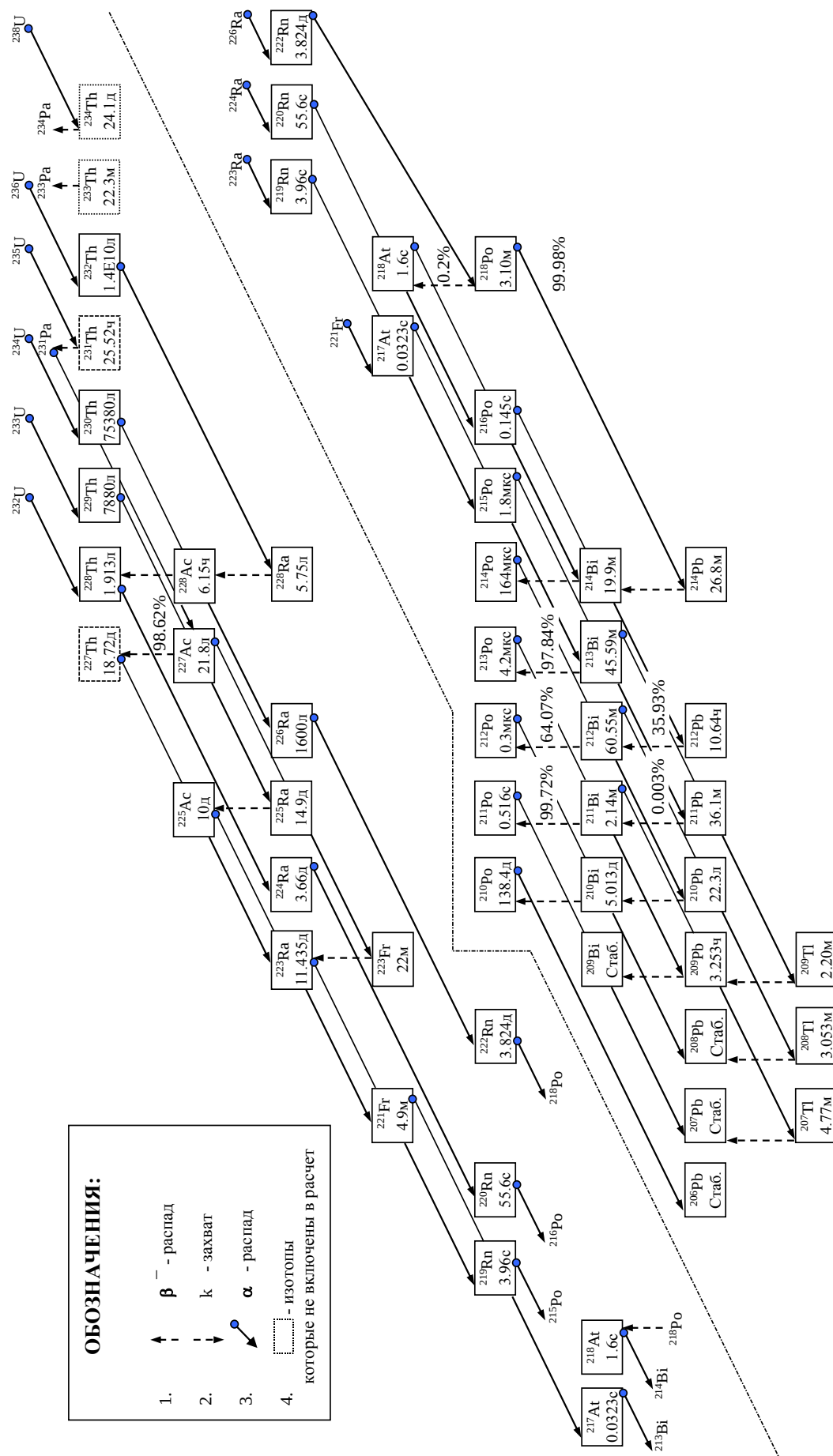


Рисунок 3 – Цепочки ядерных превращений, учитываемых при расчете нуклидного состава в процессе длительного хранения

5.3 Расчет активности и радиотоксичности

Удельная активность отработавшего топлива, $A(t)$ [Бк/см³], определяется как сумма по активности нуклидов, входящим в его состав:

$$A(t) = \sum_{m=1}^N \lambda_m \rho_m(t),$$

где λ_m — постоянная распада нуклида m , 1/с, $\rho_m(t)$ — ядерная концентрация нуклида m , яд/(барн·см), N — количество учитываемых нуклидов.

Компьютерный код выдает полную активность топлива, соответствующую каждой геометрической зоне (Бк), кроме того, рассчитывается удельная активность, приходящаяся на 1 кг тм данной расчетной зоны, [Бк/кг]:

$$A(t) = \frac{1000}{\gamma} \sum_{m=1}^N \lambda_m \rho_m(t),$$

где γ — плотность тяжелого металла в рассматриваемой геометрической зоне (ТВС) реактора, г/см³.

Потенциальный биологический ущерб при поступлении в организм радиоактивного вещества с пищей или при дыхании характеризуется радиотоксичностью. Исходными данными для расчета радиотоксичности служат активности входящих в состав топлива нуклидов и дозовые коэффициенты поступления радиоактивных нуклидов (Dose Coefficients for Intake, DCI), Зв/Бк. Коэффициенты взяты из работы [19] на основании данных, рекомендованных Международной комиссией по радиационной защите (ICRP) [20], [21]. Эти коэффициенты соответствуют попаданию в организм радионуклидов с пищей (по воде — DCI-W) и при дыхании (по воздуху — DCI-A).

Дозовые коэффициенты для некоторых тяжелых нуклидов и продуктов их радиоактивного распада приведены в табл. 8. Коэффициенты рассчитаны исходя из годовой дозы 20 мЗв. Обозначения в таблице:

IIN: Isotope identification number = $Z \times 10000 + W \times 10 + IS$,

где Z — атомный номер (заряд ядра); W — атомный вес; IS — 0 или 1, соответственно, для основного или метастабильного состояния;

DCI-W: значения DCI для поступления с водой;

DCI-A: значения DCI для поступления с воздухом.

Радиотоксичность R [Зв] тяжелого металла в ОЯТ и продуктов его распада определяется для каждой геометрической зоны реактора как

$$R = \sum_i A_i \times DCI_{i-W} \text{ — радиотоксичность по воде}$$

или

$$R = \sum_i A_i \times DCI_{i-A} \text{ — радиотоксичность по воздуху,}$$

где A_i — активность нуклида i в расчетной геометрической зоне реактора, Бк.

Таблица 8. Дозовые коэффициенты поступления радиоактивных нуклидов, Зв/Бк

№ п/п	ИИ	Нуклид	DCI-W	DCI-A
1	812070	Tl-207	5,E-10	5,E-09
2	812080	Tl-208	5,E-10	5,E-09
3	812090	Tl-209	5,E-10	5,E-09
4	822060	Pb-206	0,E+00	0,E+00
5	822070	Pb-207	0,E+00	0,E+00
6	822080	Pb-208	0,E+00	0,E+00
7	822090	Pb-209	6,E-11	3,E-11
8	822100	Pb-210	7,E-07	1,E-06
9	822110	Pb-211	2,E-10	6,E-09
10	822120	Pb-212	6,E-09	3,E-08
11	822140	Pb-214	1,E-10	5,E-09
12	832090	Bi-209	0,E+00	0,E+00
13	832100	Bi-210	1,E-09	8,E-08
14	832110	Bi-211	9,E-10	3,E-08
15	832120	Bi-212	3,E-10	4,E-08
16	832130	Bi-213	2,E-10	4,E-08
17	832140	Bi-214	1,E-10	2,E-08
18	842100	Po-210	2,E-07	3,E-06
19	842110	Po-211	9,E-10	3,E-08
20	842120	Po-212	9,E-10	3,E-08
21	842130	Po-213	9,E-10	3,E-08
22	842140	Po-214	9,E-10	3,E-08
23	842150	Po-215	9,E-10	3,E-08
24	842160	Po-216	9,E-10	3,E-08
25	842180	Po-218	9,E-10	3,E-08
26	852170	At-217	9,E-10	3,E-08
27	852180	At-218	9,E-10	3,E-08
28	862190	Rn-219	3,E-11	7,E-11
29	862200	Rn-220	3,E-11	7,E-11
30	862220	Rn-222	3,E-11	7,E-12
31	872210	Fr-221	9,E-10	3,E-08
32	872230	Fr-223	2,E-09	1,E-09
33	882230	Ra-223	1,E-07	7,E-06
34	882240	Ra-224	7,E-08	3,E-06
35	882250	Ra-225	1,E-07	6,E-06
36	882260	Ra-226	3,E-07	2,E-05
37	882280	Ra-228	7,E-07	3,E-06

№ п/п	IIN	Нуклид	DCI-W	DCI-A
38	892250	Ac-225	2,E-08	8,E-06
39	892270	Ac-227	1,E-06	6,E-04
40	892280	Ac-228	4,E-10	3,E-08
41	902270	Th-227	9,E-09	1,E-05
42	902280	Th-228	7,E-08	4,E-05
43	902290	Th-229	5,E-07	1,E-04
44	902300	Th-230	2,E-07	4,E-05
45	902310	Th-231	3,E-10	4,E-10
46	902320	Th-232	2,E-07	4,E-05
47	902330	Th-233	5,E-10	5,E-09
48	902340	Th-234	3,E-09	7,E-09
49	912310	Pa-231	7,E-07	1,E-04
50	912320	Pa-232	7,E-10	1,E-08
51	912330	Pa-233	9,E-10	4,E-09
52	912341	Pa-34m	5,E-10	5,E-09
53	912340	Pa-234	5,E-10	6,E-10
54	922320	U-232	3,E-07	4,E-05
55	922330	U-233	5,E-08	9,E-06
56	922340	U-234	5,E-08	9,E-06
57	922350	U-235	5,E-08	8,E-06
58	922360	U-236	5,E-08	8,E-06
59	922370	U-237	8,E-10	2,E-09
60	922380	U-238	4,E-08	7,E-06
61	922390	U-239	3,E-11	4,E-11
62	922400	U-240	1,E-09	8,E-10
63	932360	Np-236	2,E-08	3,E-06
64	932370	Np-237	1,E-07	2,E-05
65	932380	Np-238	9,E-10	2,E-09
66	932390	Np-239	8,E-10	1,E-09
67	932401	Np-40m	5,E-10	5,E-09
68	932400	Np-240	8,E-11	1,E-10
69	942360	Pu-236	9,E-08	2,E-05
70	942370	Pu-237	9,E-08	2,E-05
71	942380	Pu-238	2,E-07	4,E-05
72	942390	Pu-239	3,E-07	5,E-05
73	942400	Pu-240	3,E-07	5,E-05
74	942410	Pu-241	5,E-09	9,E-07
75	942420	Pu-242	2,E-07	4,E-05
76	942430	Pu-243	9,E-11	1,E-10
77	942440	Pu-244	2,E-07	4,E-05
78	942450	Pu-245	7,E-10	7,E-10

№ п/п	IIN	Нуклид	DCI-W	DCI-A
79	952410	Am-241	2,E-07	4,E-05
80	952421	Am-42m	2,E-07	4,E-05
81	952420	Am-242	3,E-10	2,E-08
82	952430	Am-243	2,E-07	4,E-05
83	952440	Am-244	5,E-10	2,E-09
84	952450	Am-245	6,E-11	8,E-11

5.4 Расчет остаточного энерговыделения ОЯТ

Остаточное энерговыделение ОЯТ складывается из двух составляющих:

- энерговыделение продуктов радиоактивного распада осколков деления и
- энерговыделение продуктов радиоактивного распада актинидов (включая минорные актиниды) и их дочерних продуктов, содержащихся в ОЯТ.

Характерное время для энерговыделения осколков деления — до нескольких сот лет, для энерговыделения от актинидов — тысячи лет. Остаточное энерговыделение рассчитывается для выгружаемого топлива. Энерговыделение определяется как среднее по всем ТВС, имеющим одинаковую кратность перегрузки, или, что тоже самое, одинаковую кампанию.

а) Остаточное энерговыделение осколков деления

Количество изотопов — продуктов деления ^{233}U , ^{235}U , ^{239}Pu , ^{240}Pu тепловыми нейтронами и ^{232}Th , ^{233}U , ^{235}U , ^{236}U , ^{237}Np , ^{238}U , ^{239}Pu , ^{240}Pu , ^{241}Pu , ^{242}Pu быстрыми нейтронами вместе с дочерними продуктами достаточно велико, особенно на коротких временах после облучения. Поэтому непосредственный учет всех этих изотопов затруднителен и сделал бы расчеты неоперативными. Обычно используют специально затабулированные функции, показывающие спад по времени энерговыделения, приходящийся на одно разделившееся ядро конкретного делящегося нуклида:

Методика расчета остаточного энерговыделения базируется на данных по остаточному энерговыделению для каждого из вышеперечисленных изотопов после его облучения тепловыми или быстрыми нейтронами в течение бесконечного времени в соответствии с произвольной мощностной историей облучения $P_0(t)$ [22]. При этом в указанной методике непосредственно не учитывается захват нейтронов в осколках деления. Поправка на этот эффект обычно невелика, однако заметна при длительном облучении в высоких потоках нейтронов. Поэтому в настоящем алгоритме вводится поправочный коэффициент на указанный эффект в соответствии с работой [22].

Остаточное энергосодержание рассчитывается для материала каждой геометрической зоны разбиения реактора как сумма энергосодержаний от осколков деления делящихся нуклидов данной зоны.

При произвольной истории облучения $P_0(t)$ остаточное энергосодержание $P(t, T)$ для каждого нуклида из приведенного выше списка запишется как:

$$P(t, T) = \left(\sum_{m=1}^N \frac{P_0^m}{Q} F(t_m, T_m) \right) f_a, \quad (22)$$

где t — время выдержки после облучения, с;

T — полное время облучения, с;

P_0^m — мощность в расчетной геометрической зоне реактора во временном интервале m , МВт, за счет деления данного нуклида;

Q — энергия, выделяемая при делении этого изотопа, с учетом деления его тепловыми или быстрыми нейтронами, МэВ/деление;

$t_m = 1$ (при $m=1$, для временного интервала сразу после останова),

$$t_m = t + \sum_{n=1}^{m-1} T_n, \quad T = \sum_{m=1}^N T_m,$$

f_a — поправочный коэффициент, учитывающий захват нейтронов в осколках деления, см. ниже,

$F(t, T)$ — остаточное энергосодержание за счет делений конкретного нуклида, соответствующее облучению в течение бесконечного интервала времени, при этом история облучения представляется в виде гистограммы, состоящей из N временных интервалов с мощностью P_0^m .

$$F(t_m, T_m) = F(t_m) - F(t_m + T).$$

Размерность величины $[F]$ — МэВ/деление.

Значения величины $F(t, T)$ при делении тепловыми или быстрыми нейтронами для списка делящихся нуклидов, указанного выше, приведены в работе [15, таблица 4.1.3(с)].

Отметим, что в моделировании нейтронно-физических характеристик быстрых реакторов облучение топлива предполагается на постоянном уровне в течение каждого перегрузочного интервала (микрокампании). Значение мощности P_0^m за счет деления каждого учитываемого нуклида (см. таблицу 8) принимается как среднеарифметическое между значениями для начала и конца последней микрокампании. Величина Q взята из работы [15, таблица 2.5.7, колонка $Q_T(1y)$]. Значения величины Q , используемые в описываемом моделировании нейтронно-физических характеристик быстрых

реакторов, приведены в таблице 9. При принятых размерностях входящих в формулу (22) величин, результат $P(t, T)$ получим в МВт.

Для смеси изотопов расчет проводится по формуле (22) для каждого изотопа, входящего в смесь, с соответствующими P_0^m и $F(t)$ с последующим суммированием результатов.

Таблица 9. Энергия, выделяемая при делении, с учетом деления тепловыми (t) или быстрыми (f) нейтронами, МэВ/деление

Нуклид	Энергия нейтрона	Q
^{232}Th	f	193,54
^{233}U	t	199,86
^{233}U	f	199,38
^{235}U	t	202,25
^{235}U	f	201,71
^{236}U		202,39
^{238}U		205,92
^{237}Np	f	206,05
^{239}Pu	t	210,96
^{239}Pu	f	210,19
^{240}Pu		211,01
^{241}Pu	t	213,27
^{241}Pu	f	212,80
^{242}Pu		214,29

Кроме того, учитывался дополнительный вклад в остаточное энерговыделение за счет поглощения нейтронов в продуктах деления. Учет тепловыделения за счет захвата нейтронов на осколках деления ^{235}U исследовался в работе [22] и представлен в таблице 10 в виде коэффициента f_a — отношения энерговыделения с учетом захвата к энерговыделению без учета захвата. Как видно из этих данных, эффект поглощения нейтронов на остаточное энерговыделение значителен, достигая максимума в 1,598 при 10^8 секунд (3,2 года) после останова реактора. К сожалению, в литературе не удалось найти данные по влиянию поглощения нейтронов для осколков деления остальных делящихся изотопов. Поэтому в расчетном моделировании нейтронно-физических характеристик быстрых реакторов для всех осколков были приняты данные для осколков деления ^{235}U .

Таблица 10. Влияние на тепловыделение поглощения нейтронов на осколках деления ^{235}U

Время, секунды	f_a
1,0+00	1,020
1,0+01	1,022
1,0+02	1,022
1,0+03	1,033
1,0+04	1,064
1,0+05	1,124
1,0+06	1,134
1,0+07	1,182
1,0+08	1,598
1,0+09	1,005

Остаточное энергосодержание осколков деления, как уже указывалось выше, вычисляется как в рамках комплекса программ моделирования нейтронно-физических характеристик быстрых реакторов, так и в специализированных для расчета экологических характеристик модуля расчета изменения изотопного состава тяжелого металла с использованием единой методики.

б) Остаточное энергосодержание от радиоактивного распада актинидов ОЯТ

Расчет остаточного энергосодержания от радиоактивного распада актинидов и их дочерних продуктов выполняется для нуклидов, перечисленных в таблице 11. Там же приведены значения энергии распада и периоды полураспада ($T_{1/2}$) [26] — [28].

Таблица 11. Распадные характеристики нуклидов

№ п/п	Нуклид	$T_{1/2}$	Энергия распада, кэВ
1	Tl-207	4,77 мин	494,7
2	Tl-208	3,053 мин	3978,8
3	Tl-209	2,20 мин	2807,1
4	Pb-206	stable	
5	Pb-207	stable	
6	Pb-208	stable	
7	Pb-209	3,253 ч	197,3
8	Pb-210	22,3 лет	44,8
9	Pb-211	36,1 мин	517,6

№ п/п	Нуклид	$T_{1/2}$	Энергия распада, кэВ
10	Pb-212	10,64 ч	319,2
11	Pb-214	26,8 мин	542,8
12	Bi-209	stable	
13	Bi-210g	5,013 сут	388,5
14	Bi-211	2,14 мин	6704,2
15	Bi-212	60,55 мин	1225,8
16	Bi-213	45,59 мин	572,7
17	Bi-214	19,9 мин	2168,5
18	Po-210	138,376 сут	5407,5
19	Po-211	0,516 с	7589,5
20	Po-212	$2,99 \cdot 10^{-7}$ с	8953,6
21	Po-213	$4,2 \cdot 10^{-6}$ с	8536,
22	Po-214	$1,643 \cdot 10^{-4}$ с	7835,2
23	Po-215	$1,781 \cdot 10^{-3}$ с	7256,2
24	Po-216	0,145 с	6906,4
25	Po-218	3,10 мин	6113,6
26	At-217	$3,23 \cdot 10^{-2}$ с	7199,7
27	At-218	1,6 с	6812,3
28	Rn-219	3,96 с	6891,6
29	Rn-220	55,6 с	6404,8
30	Rn-222	3,8235 сут	5590,5
31	Fr-221	4,9 мин	6487,2
32	Fr-223	22,00 мин	438,1
33	Ra-223	11,435 сут	5990,6
34	Ra-224	3,66 сут	5788,8
35	Ra-225	14,9 сут	121,6
36	Ra-226	1600 лет	4871,2
37	Ra-228	5,75 лет	23,5
38	Ac-225	10,0 сут	44,7
39	Ac-227	21,773 сут	16,2
40	Ac-228	6,15 ч	1403,4
41	Th-227	18,72 сут	6176,5
42	Th-228	1,9131 лет	5519,4
43	Th-229	7880 лет	5153,2
44	Th-230	75380 лет	4761,1
45	Th-231	25,52 ч	190,7
46	Th-232	$1,405 \cdot 10^{10}$ лет	4091,6
47	Pa-231	32760 лет	5152,3

№ п/п	Нуклид	$T_{1/2}$	Энергия распада, кэВ
48	Pa-233	26,967 сут	412,1
49	U-232	68,9 лет	5415,5
50	U-233	159200 лет	4912,9
51	U-234	245500 лет	4857,6
52	U-235	$7,038 \cdot 10^8$ лет	4678,3
53	U-236	$2,342 \cdot 10^7$ лет	4575,1
54	U-237	6,75 сут	343,1
55	U-238	$4,468 \cdot 10^9$ лет	4271,8
56	Np-237	$2,144 \cdot 10^6$ лет	4966,1
57	Np-238	2,117 сут	876,8
58	Np-239	2,3565 сут	445,0
59	Pu-236	2,858 лет	5866,2
60	Pu-237	45,2 сут	55,4
61	Pu-238	87,7 лет	5592,5
62	Pu-239	241100 лет	5244,9
63	Pu-240	6564 лет	5255,5
64	Pu-241	14,35 лет	5,2
65	Pu-242	733300 лет	4984,0
66	Am-241	432,2 лет	5639,2
67	Am-242m	141 лет	46,9
68	Am-242g	16,02 ч	198,0
69	Am-243	7370 лет	5439,9
70	Am-244	26 мин	1151,5
71	Cm-242	162,79 сут	6211,9
72	Cm-243	29,1 лет	6219,9
73	Cm-244	18,10 лет	5902,0
74	Cm-245	8500 лет	5623,2
75	Cm-246	4730 лет	5565,8

Расчеты проводятся по соотношению:

$$P(t) = 1,60214 \cdot 10^{-19} \sum_{m=1}^N A_m(t) Q_m, \quad (23)$$

где A_m — активность нуклида m в расчетной зоне реактора, Бк,

Q_m — энергия, выделяемая при радиоактивном распаде нуклида,

$1 \text{ кэВ/с} = 1,60214 \cdot 10^{-19} \text{ кВт}$,

$P(t)$ — остаточное энерговыделение от радиоактивного распада акти-
нидов, содержащихся в ОЯТ, кВт, рассчитывается в каждой расчетной зоне
реактора. Расчет остаточного энерговыделения от радиоактивного распада

актининов реализован в модулях расчета изменения изотопного состава тяжелого металла, исходные данные для которого (изотопный состав выгружаемого топлива и др.) автоматически через внешнюю память передаются из моделирования нейтронно-физических характеристик быстрых реакторов.

5.5 Источник нейтронов на отработавшем топливе

При расчетах нейтронных источников учитываются нейтроны, рожденные при спонтанном делении актинидов и в результате (α, n) реакции на кислороде оксидного топлива. Наряду с остаточным энерговыделением и потоком фотонов, нейтронный источник формирует радиационную обстановку при обращении со свежим и отработавшим топливом. Отметим, что при разработке и анализе стратегий развития АЭ и технико-экономических характеристик топливных циклов, что является целью комплекса программ CYCLE, достаточно ограничиться приближением полного источника, т. е. не учитывать его энергетическое распределение. Учет спектральных характеристик, которые необходимы при проектных расчетах для оценок дозовых нагрузок, выполняется по другим программам, в частности, по программе CARE [23].

а) Источник нейтронов от спонтанного деления

Значение полного источника нейтронов от спонтанного деления рассчитывается на тяжелых ядрах, начиная от Th-230, на основе данных работы [24] по выходу нейтронов на один акт деления и вероятности такого деления, характеризующей соответствующим периодом. Указанные данные приведены в таблице 12. Энергетическое распределение источника по группам системы констант БНАБ [7] не учитывается.

Источник нейтронов определяется по соотношению:

$$S_{sf} = \sum_i \nu_{sfi} \rho_i \ln 2 / T_{sfi} , \quad (24)$$

где S_{sf} – нейтронный источник от спонтанного деления, н/см²/с;

ν_{sfi} – выход нейтронов на один акт спонтанного деления нуклида i ;

ρ_i – ядерная концентрация нуклида i , яд/барн·см;

T_{sfi} – период спонтанного деления нуклида i , 1/с.

Отметим, что при таком расчете не учитывается самопоглощение нейтронов в материале ОЯТ. Оценки показывают, что длина свободного пробега нейтронов с энергией, характерной для спонтанного деления ($\sim 1,3$ МэВ), составляет несколько десятков сантиметров, что значительно превышает поперечные размеры ТВС. В этом случае эффектом самопоглощения можно пренебречь.

Таблица 12. Данные по выходам нейтронов, периодам и энергии нейтронов при спонтанном делении

№ п/п	Нуклид	ν_{sf}	$T_{sf1/2}$, лет	E (МэВ)
1	Th-230	1,125	1,50E+17	1,18
2	Th-232	1,370	1,00E+21	1,26
3	Pa-231	1,248	1,10E+16	1,33
4	U-232	1,370	7,66E+13	1,21
5	U-233	1,493	1,22E+17	1,23
6	U-234	1,615	2,00E+16	1,30
7	U-235	1,695	3,50E+17	1,32
8	U-236	1,65	2,00E+16	1,30
9	U-237	1,872	6,30E+19	1,28
10	U-238	2,00	8,19E+15	1,29
11	U-239	2,048	8,90E+18	1,30
12	Np-236g	1,783	6,30E+17	1,27
13	Np-236m	1,790	6,30E+17	1,27
14	Np-237	1,873	1,00E+18	1,32
15	Np-238	1,963	2,00E+18	1,29
16	Np-239	2,053	6,30E+16	1,30
17	Pu-236	2,22	3,50E+09	1,28
18	Pu-237	1,886	2,00E+15	1,28
19	Pu-238	2,28	4,77E+10	1,33
20	Pu-239	2,24	5,48E+15	1,39
21	Pu-240	2,16	1,15E+11	1,35
22	Pu-241	2,25	2,50E+15	1,33
23	Pu-242	2,15	6,84E+10	1,34
24	Pu-243	2,43	2,00E+15	1,35
25	Pu-244	2,30	6,61E+10	1,33
26	Am-240	2,29	1,00E+15	1,33
27	Am-241	3,22	1,06E+14	1,33
28	Am-242g	2,475	1,00E+10	1,35
29	Am-242m	2,59	9,50E+11	1,37
30	Am-243	2,52	3,35E+13	1,33
31	Am-244g	2,657	7,90E+13	1,37
32	Am-244m	2,665	7,90E+13	1,37
33	Cm-240	2,406	1,90E+06	1,34
34	Cm-241	2,50	1,60E+12	1,35
35	Cm-242	2,54	7,08E+06	1,33

№ п/п	Нуклид	ν_{sf}	$T_{sf1/2}$, лет	E (МэВ)
36	Cm-243	3,43	1,20E+11	1,38
37	Cm-244	2,72	1,34E+07	1,45
38	Cm-245	3,75	4,00E+12	1,40
39	Cm-246	2,93	1,81E+07	1,36
40	Cm-248	3,13	4,12E+06	1,33
41	Cm-250	3,30	1,13E+04	1,47
42	Bk-249	3,40	1,90E+09	1,46
43	Cf-246	3,1	2,04E+03	1,42
44	Cf-248	3,330	3,15E+04	1,44
45	Cf-249	3,4	6,74E+10	1,47
46	Cf-250	3,51	1,70E+04	1,46
47	Cf-252	3,757	85,54	1,47
48	Cf-254	3,85	0,1662	1,52
49	Es-253	4,7	6,42E+05	1,51
50	Es-254	4,2	2,52E+07	1,52
51	Es-254m	4,2	8,97	1,52
52	Es-255	4,188	2,66E+03	1,53
53	Fm-246	4,0	4,36E-07	1,42
54	Fm-248	3,330	1,14E-03	1,44
55	Fm-250	3,575	9,5	1,47
56	Fm-252	3,820	126,0	1,49
57	Fm-254	4,0	0,6242	1,52
58	Fm-255	4,0	9,54E+03	1,53
59	Fm-256	3,63	3,26E-04	1,54
60	Fm-257	3,87	131,0	1,55
61	Md-257	4,433	0,01511	1,55
62	No-252	4,2	2,71E-07	1,49
63	No-254	4,065	6,97E-04	1,52
64	No-256	4,31	3,48E-05	1,54
65	Lr-255	4,188	7,10E-04	1,53
66	Lr-256	4,310	2,96E-03	1,54
67	Ku-259	4,678	1,20E-06	1,57
68	Ku-261	4,923	2,05E-05	1,60
69	Ha-260	4,8	5,01E-07	1,59
70	Ha-261	4,923	2,28E-07	1,60
71	Ha-262	5,045	1,48E-06	1,61

б) Источник нейтронов от (α, n) -реакции

Дополнительным и значимым источником нейтронов является (α, n) -реакция на ядрах некоторых легких элементов. В случае использования оксидного топлива таким элементом является кислород. Эмитентом α -частиц служат тяжелые атомы топлива, а для облученного топлива – еще МА и продукты их распада. Обычно размеры твэлов значительно превосходят длину свободного пробега α -частиц в материале твэла, поэтому применима модель толстой мишени, т. е. можно считать, что все α -частицы прореагируют в твэле. Энергетическое распределение источника по группам системы констант БНАБ [7] не учитывается. Тогда выражения для расчета полного источника нейтронов от (α, n) -реакции можно записать в виде:

$$S_{\alpha i} = R_{\alpha i} \lambda_i \rho_i, \quad (25)$$

где ρ_i – концентрация ядер эмитента i α -частиц, яд/барн·см,

λ_i – постоянная распада эмитента i , 1/с,

$R_{\alpha i}$ – коэффициент ветвления α -распада эмитента i , отн. ед.,

$S_{\alpha i}$ – источник α -частиц за счет эмитента i , $10^{24}/(\text{см}^3 \cdot \text{с})$

и

$$S_{ni} = S_{\alpha i} Y_{ni}, \quad (26)$$

где Y_{ni} – выход нейтронов в реакции (α, n) за счет α -частиц эмитента i , н/а;

S_{ni} – источник нейтронов, н/с/см³.

Значение полного источника нейтронов от (α, n) -реакции рассчитывается на основе данных работы [23] по выходу нейтронов на одну α -частицу и коэффициенту ветвления (α, n) -реакции на кислороде диоксида урана, которые приведены в таблице 13.

Таблица 13. Данные по выходам нейтронов (α, n) -реакции и коэффициентам ветвления на кислороде диоксида урана

№ п/п	Нуклид α -эмиттер	Коэффициент ветвления, %	$Y_{na},$ 1,E-08 н/а
1	Tl-207	0	0
2	Tl-208	0	0
3	Tl-209	0	0
4	Pb-206	stable	0
5	Pb-207	stable	0
6	Pb-208	stable	0
7	Pb-209	0	0
8	Pb-210	0	0

№ п/п	Нуклид α -эмиттер	Коэффициент ветвления, %	$Y_{\alpha},$ $1, E-08 \text{ н}/\alpha$
9	Pb-211	0	0
10	Pb-212	0	0
11	Pb-214	0	0
12	Bi-209	stable	0
13	Bi-210	1,32E-04	1,22
14	Bi-211	99,72704	4,16
15	Bi-212	35,94	3,18
16	Bi-213	2,16	2,73
17	Bi-214	0,024	2,92
18	Po-210	100	1,90
19	Po-211	100	6,17
20	Po-212	100	9,78
21	Po-213	100	8,61
22	Po-214	100	6,75
23	Po-215	100	6,04
24	Po-216	100	4,61
25	Po-218	99,98	3,07
26	At-217	99,99	5,31
27	At-218	99,9	4,42
28	Rn-219	100	4,56
29	Rn-220	100	3,69
30	Rn-222	100	2,19
31	Fr-221	100	3,72
32	Fr-223	0,006	1,94
33	Ra-223	100	2,48
34	Ra-224	100	2,49
35	Ra-225	–	–
36	Ra-226	100	1,34
37	Ra-228	–	–
38	Ac-225	100	2,46
39	Ac-227	1,38	2,03
40	Ac-228	5,5E-06	0,75
41	Th-227	100	2,81
42	Th-228	100	2,03
43	Th-229	100	1,44
44	Th-230	100	1,23
45	Th-231	–	–
46	Th-232	100	0,491
47	Pa-231	100	1,54

№ п/п	Нуклид α-эмиттер	Коэффициент ветвления, %	Y_{α} , 1,E-08 n/α
49	U-232	100	1,90
50	U-233	100	1,39
51	U-234	100	1,33
52	U-235	100	0,896
53	U-236	100	1,01
54	U-237	0	–
55	U-238	100	0,652
56	Np-237	100	1,34
57	Np-238	0	–
58	Np-239	0	–
59	Pu-236	100	2,59
60	Pu-237	0,0033	2,01
61	Pu-238	100	2,18
62	Pu-239	100	1,73
63	Pu-240	100	1,74
64	Pu-241	2,41E-03	1,46
65	Pu-242	100	1,46
66	Am-241	100	1,99
67	Am-242m	0,45	1,79
68	Am-242g	0	–
69	Am-243	100	1,86
70	Am-244	0	–
71	Cm-242	100	3,31
72	Cm-243	99,76	2,68
73	Cm-244	100	2,65
74	Cm-245	100	1,97
75	Cm-246	99,97	1,99

5.6 Файл исходных данных для расчета экологических характеристик

Остаточное энерговыделение ОЯТ, обусловленное радиоактивным распадом осколков деления, может определяться, как указывалось выше, в рамках расчета моделирования нейтронно-физических характеристик быстрых реакторов. С целью инициализации такого расчета в файле исходных данных, описанном в разделе 4.7, должна быть задана строка **DEHEAT YES** и строка **NTVS**, указывающая количество ТВС в группах одинаковой кратности перегрузок или, что то же самое, имеющих одинаковую длительность кампании (см. пп. 99, 100 таблицы 5). Строка **NTVS** задается с целью получения среднего остаточного энерговыделения по указанным ТВС.

По умолчанию расчет проводится на следующие моменты времени после окончания облучения топлива нейтронами: 1 с., 0,5 года, 1 год, 10, 10², 10³, 10⁴, 10⁵, 10⁶, 10⁷ лет, учитывается вклад в остаточное энерговыделение за счет поглощения нейтронов в продуктах деления. Однако возможно задание **nt**=10 произвольных моментов времени, а также отказ от учета вклада в остаточное энерговыделение поглощения нейтронов в продуктах деления. Для этого в дополнительном файле **credex.dat** (см. ниже) задаются строки:

T = t₁, t₂, ..., t_{nt} и

W = 1,

где t₁, t₂, ..., t_{nt} задаваемые моменты времени в годах, а W=1 признак отключения учета остаточного энерговыделения за счет поглощения нейтронов в продуктах деления. При W=0 такой учет производится.

Результаты расчетов остаточного энерговыделения от осколков деления выдаются в файл deheat.out.

Использование модулей расчета изменения изотопного состава тяжелого металла в течение длительной экспозиции позволяет расширить список рассчитываемых экологических характеристик до полного набора, описанного в разделах 5.2—5.5. Для этого необходимо в файле исходных данных моделирования нейтронно-физических характеристик быстрых реакторов задать строку **FORSYC YES** (таблица 5, п. 14). В результате расчета образуются файлы drfpNNN.daq по числу геометрических зон, содержащих делящийся или фертильный материал, где NNN — номер геометрической зоны (см. также раздел 5.1 с описанием структуры файлов drfpNNN.daq).

Для запуска модуля расчета изменения изотопного состава в папке запуска потребуется файл исходных данных с именем **credex.dat**. Структура этого файла показана в таблице 14. В фигурных скобках указываются возможные альтернативные значения.

Таблица 14. Структура файла **credex.dat**

№	Имя	Значение по умолчанию, при наличии	Определение данных
1	OUTPUT=	—	Имя файла с результатами расчета модуля расчета изменения изотопного состава
2	CODE=	RZA{WIMS*}	Имя кода, формирующего файл исходных данных для модуля расчета изменения изотопного состава
3	NZ=	—	Расчет экологических характеристик производится для геометрических зон 1, ..., NZ .
4	NUCLIST=	—	Путь к папке, содержащей файлы drfpNNN, пример: D:\D\dpfp

№	Имя	Значение по умолчанию, при наличии	Определение данных
5	Th28chain=	NO{YES}	Учет цепочки с ^{228}Th , см. раздел 5.2.
6	TS=	4.	2-я расчетная точка по времени после прекращения облучения, лет
7	T00=	0	1-я расчетная точка по времени после прекращения облучения, обычно это 1 с, т. е. $3,16881 \cdot 10^{-8}$ лет, лет
8	CCT=	1500000	Последняя расчетная точка по времени, лет
8	T=	$10, 10^2, 10^3, 10^4, 10^5, 10^6, 10^7$	Массив расчетных точек по времени, лет
9	DESTEP=	40,64,64,64, 64,64,64,64	Количество шагов на декадах
10	DCI=	—	Адрес файла с дозовыми коэффициентами поступления радиоактивных нуклидов, таблица 8.
11	W=	0.	$W = 0$ – учет вклада в остаточное энергосодержание за счет поглощения нейтронов в продуктах деления, $W = 1$ – без такого учета.
13	PCCR=	NO{YES}	Полный вывод результатов расчета
14	PCRD=	YES{NO}	Вывод результатов расчета только по заданным моментам времени
* Код WIMS используется для расчета тепловых реакторов.			

Величины, имеющие значения по умолчанию, могут не включаться в исходные данные.

Экологические характеристики, при использовании модуля расчета изменения изотопного состава, рассчитываются на следующие временные моменты (лет):

- 1) на первую расчетную точку по времени после прекращения облучения — **T00**;
- 2) 0 — непосредственно после облучения нейтронами, с учетом равновесного содержания короткоживущих нуклидов;
- 3) на вторую расчетную точку по времени после прекращения облучения — **TS**;
- 4) на 7 моментов времени, определяемых значениями **T** и **CCT**. Необходимым условием при этом является неперевышение 10 (десяти) расчетных моментов. Результаты расчетов выдаются, помимо файла, определяемого строкой **OUTPUT=**, в файл **wrilst.out**.

6 Использование методики моделирования при расчетах

Запуск программной реализации рассматриваемой методики (а также в необходимых случаях модулей расчета изменения изотопного состава) на расчет в случае его использования в качестве автономного инструмента

проще всего осуществить с помощью batch-файла из текущей (рабочей) папки, содержащей необходимые файлы исходных данных. Указанный batch-файл должен содержать обращение к исполняемому модулю моделирования нейтронно-физических характеристик быстрых реакторов с учетом полной структуры вложенных папок и также находиться в этой папке. В этом случае запуск кода фактически производится с использованием командной строки. В этой же текущей папке образуются и основные выходные файлы с результатами расчетов. Такой подход позволяет обеспечить доступность кода из множества рабочих папок пользователя к единому же исполняемому модулю.

В случае, когда приглашение командной строки отключено администратором системы, исключается возможность запуска программы на расчет с помощью batch-файла. Альтернативным способом запуска кода на расчет является копирование исполняемого модуля в папку с исходными данными и его последующий запуск в ОС WINDOWS с помощью двойного клика. Однако такой подход может привести к созданию многочисленных копий исполняемого модуля, что не всегда удобно, особенно с учетом его значительной длины.

Другим возможным выходом является использование дополнительной фортран-программы с вызовом требуемого исполняемого модуля. Такая программа является аналогом соответствующего batch-файла и может копироваться в нужные рабочие папки. Ниже приводится описание программы **StartRZA**.

Программа StartRZA реализована на базе INTEL FORTRAN в среде MICROSOFT VISUAL STUDIO 2010. Ниже приводится пример текста программы StartRZA.

```
program startrza
use msflib
integer is*2
is=RUNQQ ('d:\rza_intel\rza\rza.exe',' ')
stop
end
```

Задачей подпрограммы **RUNQQ**, которая входит в состав библиотеки программ Intel Fortran [25], является вызов другого исполняемого модуля, в данном случае — кода моделирования нейтронно-физических характеристик. Первым аргументом RUNQQ является имя вызываемой программы вместе с указанием ее расположения, второй аргумент — пробел. Вместо пробела в случае необходимости указывается аргумент, передаваемый вызываемой программе с командной строки. Приводимый в примере первый аргумент, *выделенный курсивом*, является условным и должен соответствовать реальному расположению кода на конкретном компьютере.

Таким образом, в текущей (рабочей) папке, наряду с файлами исходных данных, должна находиться программа **StartRZA**. Запуск моделирования нейтронно-физических характеристик быстрых реакторов на расчет осуществляется в ОС WINDOWS кликом по **StartRZA**.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Сценарное технико-экономическое моделирование развития двухкомпонентной ЯЭС с тепловыми и быстрыми реакторами потребовало разработки кода CYCLE — системы компьютерных кодов для моделирования характеристик ядерных топливных циклов. Структура двухкомпонентной ЯЭС, наряду с предприятиями топливообеспечения, включает в себя тепловые и быстрые реакторы различного типа. При этом базовой (ключевой) компонентой ЯЭС является быстрый реактор, который должен обеспечивать замыкание единого с тепловыми реакторами топливного цикла и одновременно производить электричество.

Для моделирования основных нейтронно-физических характеристик быстрых реакторов используется методика и алгоритмы с соответствующими исходными данными двумерного в (R, Z)-геометрии многогруппового расчета реактора с возможностью учета изменения изотопного состава в процессе выгорания, перегрузок топлива и длительного хранения ОЯТ. К настоящему времени возможности алгоритма значительно расширились, в том числе и применительно к моделированию замкнутого топливного цикла. В частности, введена возможность расчета в режиме использования заранее подготовленных составов (режим последовательных расчетов). Включение этой опции позволило сократить временные затраты на моделирование топливных циклов. Кроме того, представленная методика и алгоритм дают возможность оценки экологических характеристик ОЯТ и его компонент в течение длительного хранения (захоронения): изотопного состава, активности, радиотоксичности, остаточного энергосодержания и источника нейтронов. Расширение номенклатуры экологических характеристик достигается при включении в единый расчетный алгоритм специальных модулей расчета изменения изотопного состава. При этом реализован автоматический обмен необходимыми исходными данными.

В документе приведено полное описание исходных данных и формат подготовки их содержащих файлов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Калашников А.Г., Мосеев А.Л., Декусар В.М., Коробейников В.В., Мосеев П.А.* Развитие программного комплекса CYCLE для системного анализа ядерного топливного цикла // Известия вузов. Ядерная энергетика. — 2016. — № 1. С. 91—99.
2. *Декусар В.М., Мосеев А.Л., Пупко Л.П.* Модель топливного цикла быстрого реактора, реализованная в коде CYCLE: Препринт ФЭИ-3298. Обнинск, 2022. — 24 с.
3. Двухкомпонентная ядерная энергетическая система с тепловыми и быстрыми реакторами в замкнутом ядерном топливном цикле / Под ред. академика РАН Пономарева-Степного Н.Н. — М.: Техносфера, 2016. — 160 с.
4. *Тузов А.А., Троянов В.М., Гурская О.С. и др.* К вопросу о начальном этапе замыкания ЯТЦ двухкомпонентной ядерной энергетики России. // Атомная энергия, 2022, т. 133(2), с. 71—76.
5. *Зродников А.В., Коробейников В.В., Мосеев А.Л. и др.* Многокритериальный анализ эффективности сценариев развития ядерной энергетики России в условиях неопределенности знаний о будущем. // Известия вузов. Ядерная энергетика. — 2020. — №3.
6. *Декусар В.М., Зродников А.В., Елисеев В.А., Мосеев А. Л.* К вопросу накопления и реакторной утилизации америция в ядерной энергетике // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы. — 2019. — №1. — С. 215—223.
7. *Мантуров Г.Н., Николаев М.Н., Цибуля А.М.* Система групповых констант БНАБ-93. Ч. 1: Групповые константы для расчета нейтронных и фотонных полей излучения // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Ядерные константы. — 1996. — Вып. 1.
8. *Мантуров Г.Н., Николаев М.Н., Цибуля А.М.* Программа подготовки констант CONSYST. Описание применения: Препринт ФЭИ-2828. — Обнинск, 2000.
9. *Баранов О.В.* Комплекс программ PRECON. Описание применения. Руководство программиста: Препринт ФЭИ-1847. — Обнинск, 1987.
10. NEA-1507, WIMSD5, Deterministic multigroup reactor lattice calculations. <http://www.oecd-neo.org/tools/abstract/detail/nea-1507/24.02.2022>.
11. WIMS-D Library Update: Final Report of a Coordinated Research Project International Atomic Energy Agency Publ., Vienna, 2007. <https://www.iaea.org/publications/7044/wims-d-library-update>. 24.02.2022.
12. *Артемьев Н.И., Декусар В.М., Калашников А.Г., Мосеев А.Л.* RZA — комплекс программ многогруппового расчета двумерного реактора в

областях замедления и термализации нейтронов с учетом выгорания: Препринт ФЭИ-1679. — Обнинск, 1985.

13. *Артемьев Н.И., Декусар В.М., Калашников А.Г., Мосеев А.Л.* Методика многогруппового расчета двумерного реактора в областях замедления и термализации нейтронов с учетом выгорания. // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика и техника ядерных реакторов. — 1988. — Вып. 2.

14. *Абагян Л.П., Базазянц Н.О., Николаев М.Н., Цибуля А.М.* Групповые константы для расчета реакторов и защиты. — М., Энергоиздат, 1981.

15. JNDC Nuclear Data Library of Fission Products. / Second Version JAERI-1320. — Japan Atomic Energy Research Institute, 1990.

16. *Mughabhab S. F. et al.* Neutron Cross Sections. // Academic Press, 1981. Volume 1.

17. *Годунов С.К., Рябенский В.С.* Разностные схемы. — М., Наука, 1977.

18. *Каграманян В.С., Калашников А.Г., Коробейников В.В. и др.* Разработка математической модели топливного цикла атомной энергетики, состоящей из тепловых и быстрых реакторов. // Ядерная энергетика. — 2010. — № 4.

19. Potential of thorium based fuel cycles to constrain plutonium and reduce longlived waste toxicity, IAEA-TECDOC-1349, IAEA, 2003.

20. ICRP Publication 68(1994).

21. ICRP Publication 61(1991).

22. *Shure K.* Decay Rate and decay Heat Data from Fission Products. Nucl.Sci. Engng. 1981, Vol 78 # 1, p. 185.

23. *Кочетков А.Л.* Программа CARE – расчет изотопной кинетики, радиационных и экологических характеристик ядерного топлива при его облучении и выдержке : Препринт ФЭИ-2431. — Обнинск, 1995.

24. Data book for Calculating Neutron Yields from (α , n) Reaction and Spontaneous Fission, JAERI-1324, 1992.

25. Intel® Fortran Libraries Reference. Document Number: 253262-002 World Wide Web: <http://developer.intel.com>.

26. *Jaglish K. Tuli.* Nuclear Wallet Cards (Fifth Ed.). National Nuclear Center for the U. S. Nuclear Data Network. BNL, 1995.

27. JEF-2.2 Radioactive Decay Data. JEF Report 13, AEN-NEA, 1994.

28. *Browne E., Firestone R.B.* Table of Radioactive Isotopes. Lawrence Berkley Lab.

Подписано к печати 12.02.2025.
Формат 60×84 ¹/₁₆. Усл. п. л. 2,7. Уч.-изд. л. 3,6.
Тираж 45 экз. Заказ № 24.

Отпечатано в ОНТИ методом прямого репродуцирования с оригинала авторов.
249033, Обнинск Калужской обл., АО «ГНЦ РФ – ФЭИ».