

НЕЙТРОННО-ФИЗИЧЕСКИЕ КОДЫ ДЛЯ РАСЧЕТОВ ПЕРСПЕКТИВНЫХ РЕАКТОРНЫХ УСТАНОВОК С ЖИДКОМЕТАЛЛИЧЕСКИМ ТЕПЛОНОСИТЕЛЕМ

Белов А.А., Березнев В.П., Колташев Д.А., Потапов В.С., Шершов А.В.,
Чертовских О.И. (ИБРАЭ РАН, Москва, Россия)

Введение

Актуальной тенденцией при обосновании безопасности существующих и проектируемых объектов использования атомной энергии (ОИАЭ), включая реакторные установки с жидкометаллическими теплоносителями, является применение численного моделирования на базе современных расчетных кодов. Данная работа посвящена нейтронно-физическим кодам, разрабатываемым в ИБРАЭ РАН в рамках проектного направления «ПРОРЫВ».

1. Код CORNER

Код CORNER предназначен для расчета основных нейтронно-физических характеристик РУ БР в стационарных и нестационарных состояниях при нормальных условиях эксплуатации и нарушениях нормальной эксплуатации.

Программа позволяет решать прямые и сопряженные однородные задачи степенным методом и нестационарные задачи в адиабатическом приближении. Групповые уравнения решаются методом простой итерации (метод итерации источника). В программе реализована схема нелинейного диффузионного ускорения сходимости итерационных процессов.

Энергетическая зависимость представлена многогрупповым приближением с использованием системы подготовки констант CONSYST-RF [1] с библиотекой ядерных данных БНАБ-РФ.

Для аппроксимации угловой зависимости используется метод дискретных ординат с возможностью выбора квадратурных наборов (Карлсона, Чебышева-Лежандра или специальных квадратур для реализации граничных условий отражения при расчете ячейки в бесконечной решетке). Анизотропное рассеяние представляется разложением в ряд Фурье по полиномам Лежандра.

Для пространственной аппроксимации используется метод конечных объемов, представленный алмазной схемой с коррекцией отрицательных значений плотности потока. Пространственные сетки состоят из прямых призм с шестиугольным основанием, образуя HEX-Z геометрию. Особенностью кода является возможность использования вложенных сеток, позволяющих как просто сгущать сетку, так и учитывать пространственные эффекты гетерогенности (как показано на рисунке 1).

Реализована возможность задания вложенной сетки в отдельных расчетных областях – неконформные сетки; пример представлен на рисунке 2. В зависимости от потребностей пользователя эта опция может сократить расчетное время или повысить точность расчетов.

Код CORNER разработан с использованием современных стандартов языка Fortran, поддерживается параллелизация кода на основе технологий параллельного программирования MPI/OpenMP. Технология MPI используется для распараллеливания по угловым направлениям, OpenMP – по пространственной сетке. Обеспечена кроссплатформенность программы по отношению к операционным системам семейств Windows и Linux.

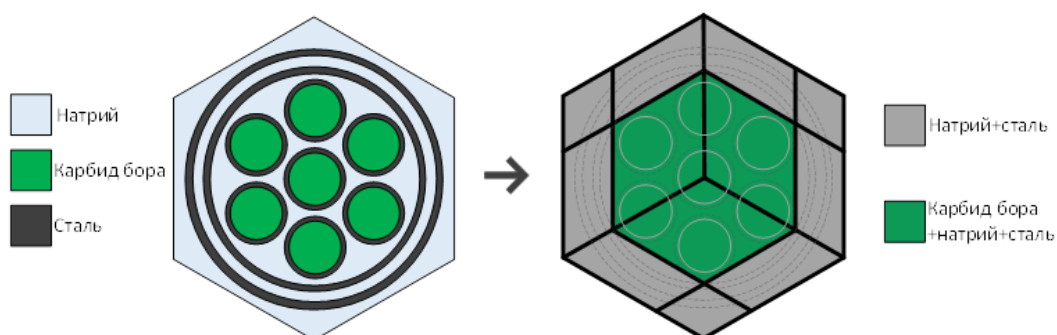


Рис. 1. Использование вложенной сетки для канала CVZ модели реактора JOYO

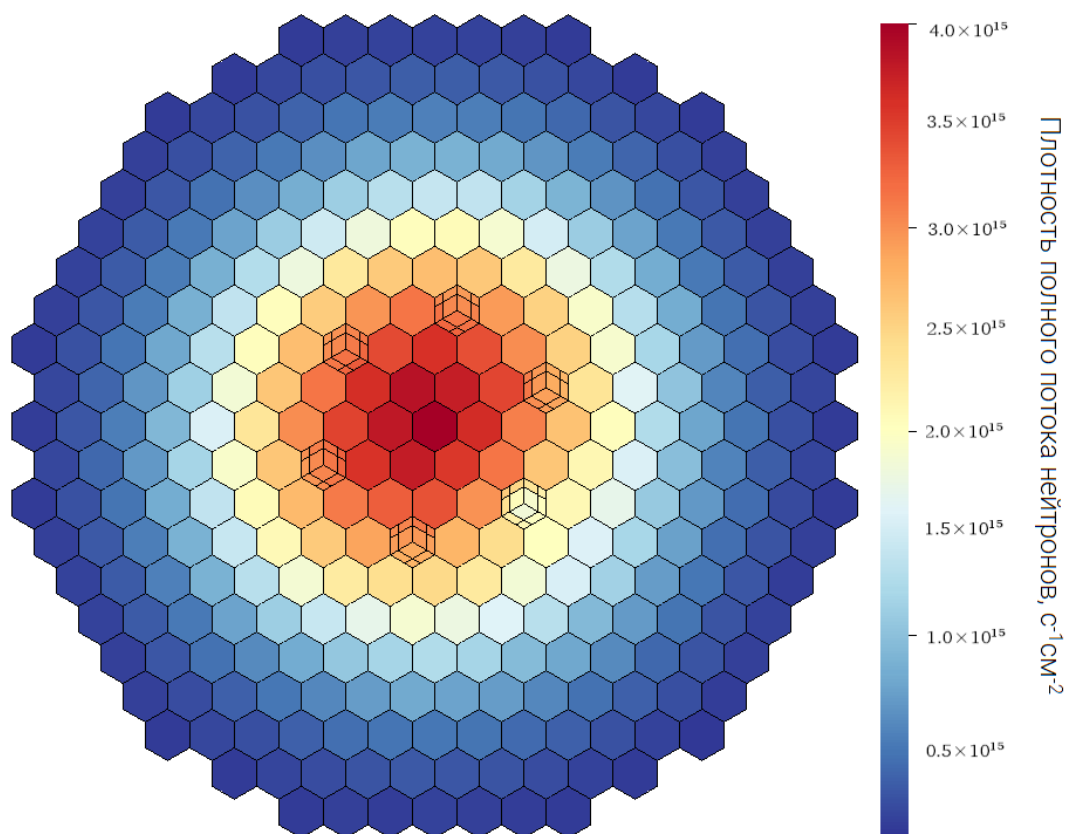


Рис. 2. Неконформная сетка для расчета эффективности k_{eff} CVZ бенчмарк-модели реактора JOYO и распределение плотности полного потока в центральном слое а.з.

Верификация программы проведена на международных бенчмарках БР: BN-600, SFR MOX-1000, SFR-MOX-3600 (пример сравнения результатов представлен на рис. 3) и моделях РУ БН-1200 и БРЕСТ-ОД-300, валидация выполнена на экспериментах на реакторе JOYO и критических сборках БФС. Первая версия расчетного кода (программа для ЭВМ «Нейтронно-физический расчетный код на базе приближения дискретных ординат (Sn) на структурированных сетках. Версия 1.0 (CORNER/V1.0)») аттестована [2] в Ростехнадзоре в 2020 году.

Для пре- и пост-процессинга используется графическая оболочка Smart [3], предоставляющая интерактивный способ формирования входных файлов и позволяющая в удобном виде отображать данные, временные и пространственные зависимости.

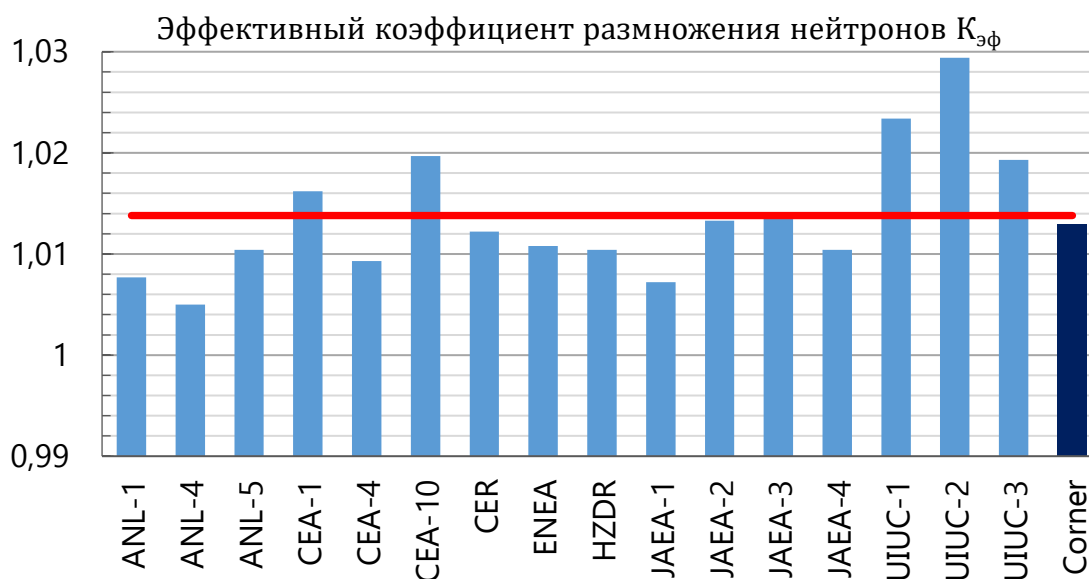


Рис. 3. Сравнительные результаты расчета $K_{эф}$ бенчмарк-модели SFR-MOX-3600

2. Код ODETTA

Расчетный код ODETTA предназначен для численного решения стационарных задач переноса нейтронов и фотонов по отдельности и связанных нейтронно-фотонных задачи в рамках обоснования радиационной безопасности ОИАЭ – защитных композиций реакторных установок на быстрых нейтронах с жидкометаллическим теплоносителем и объектов топливного цикла.

Основной особенностью кода является использование линейного разрывного метода конечных элементов с аппроксимацией по Галеркину на тетраэдральных сетках для пространственной аппроксимации и интеграция с открытой CAD-системой Salome [4]. Под интеграцией здесь понимается полный цикл работы с CAD-моделями, генерация неструктурированной сетки и автоматическая передача данных в расчетный код, кроме того для ряда задач автоматизирован процесс создания CAD-модели.

Как и в программе CORNER, используется групповое энергетическое представление и метод дискретных ординат. Для решения защитных задач реализован более широкий спектр угловых квадратур (треугольных и квадратур типа произведения) и граничных условий (нулевых, зеркальных, периодических и альбедных). В коде реализованы методы расчета нерассеянной компоненты излучения [5].

Для постпроцессинга может использоваться собственная разработка SMART Viewer или любое открытое программное средство с поддержкой VTK формата.

Хранение основного объема расчетных данных осуществляется с использованием формата HDF5 [6].

Реализовано распараллеливание кода по угловым направлениям на основе технологии параллельного программирования OpenMP.

Версия кода ODETTA 2.1 аттестована в Ростехнадзоре применительно к переносу нейтронной излучения в защитных композициях РУ БР, валидация выполнена на экспериментах из базы SINBAD [7]. На данный момент продолжается дополнительная верификация и валидация в части переноса фотонного излучения.

В частности, выполнена кросс-верификация с программным комплексом SCALE [8] по расчету мощности эквивалентной дозы на тестовой модели контейнера с отработавшим топливом. Общий вид модели и расчетная модель, использованная в коде

ODETTA, представлены на рисунке 4, в таблице приведены характеристики расчетной модели.

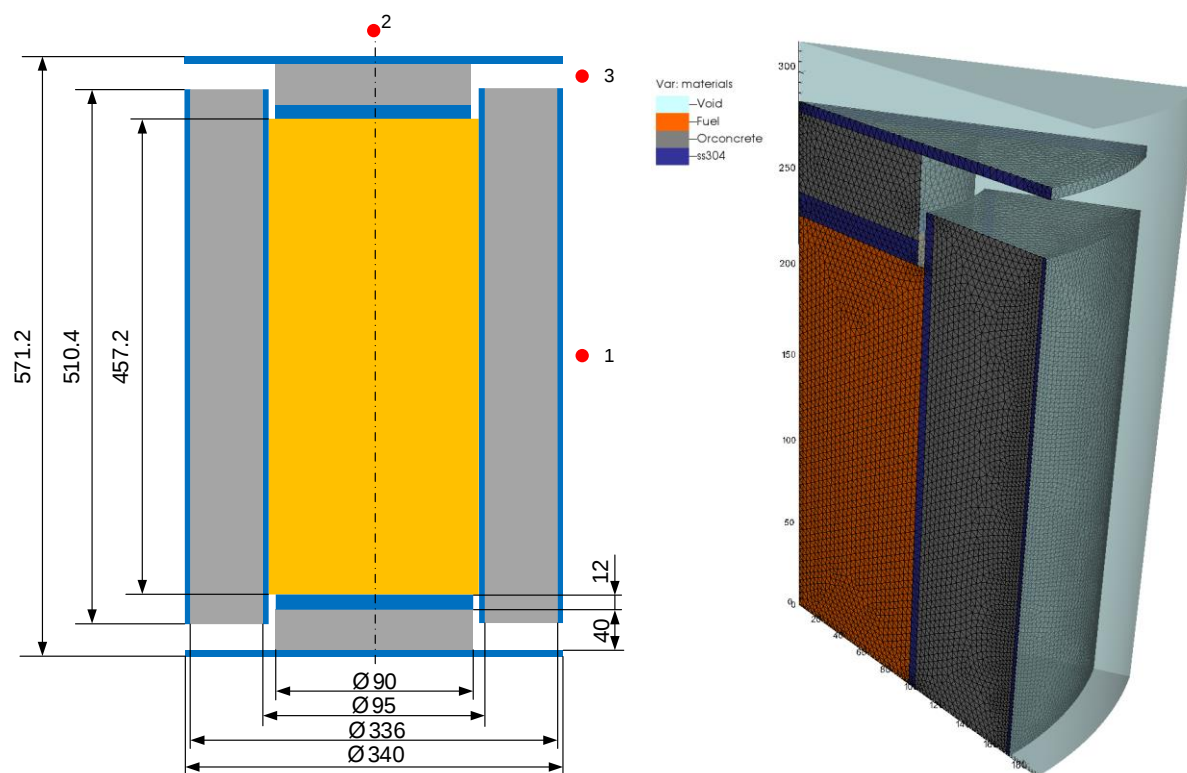


Рис. 4. Общий вид тестовой модели контейнера с отработавшим топливом и расчетная модель для кода ODETTA (30°-сектор, $\frac{1}{2}$ высоты)

Характеристики расчетной модели

Характеристика	Нейтронная задача	Фотонная задача
Групповая библиотека	scale.rev10.xn27g19v7.0 (27 групп)	scale.rev10.xn27g19v7.0 (19 групп)
Толщина защитной композиции	по радиусу: 7 см сталь + 68 см бетон по высоте: 17 см сталь + 40 см бетон	
Количество тетраэдров (средний объем тетраэдра)	272 935 (10,9 см ³)	673 057 (1,47 см ³)
Анизотропия рассеяния	P ₃	P ₅
Угловые квадратуры (количество узлов)	Чебышева-Лежандра (432)	
Коэффициенты перевода плотности потока в МЭД	ANSI 1977	
Расчетное время	4 ч 33 мин	6 ч 31 мин

Результаты, полученные по коду ODETTA, согласуются с результатами по коду SCALE в пределах от -14,1% до 2,2% в случае нейтронного излучения и в пределах от -17,9% до 19,1% в случае фотонного излучения.

3. Код BPSD

Код нуклидной кинетики, расчета активности и остаточного тепловыделения BPSD решает следующие задачи: расчет изменений состава топлива; расчет накопления продуктов деления; расчет изменений состава поглотителя; расчет активации теплоносителя и конструкционных материалов с учетом примесей; расчет активности облученных материалов для последующего определения остаточного тепловыделения. В качестве объектов моделирования рассматриваются: топливные, поглощающие и конструкционные материалы ТВС, РО СУЗ, сборок активной зоны с учетом примесей; жидкометаллические теплоносители с учетом находящихся в них примесей; элементы радиационной защиты, корпус и другие элементы установки, подвергающиеся нейтронному облучению; мишени материалов, размещаемых в активной зоне и подвергаемых нейтронному облучению. Код обеспечивает расчет определяемых им функционалов и характеристик для моделируемого объекта при нормальных условиях эксплуатации, включая подкритическое состояние, и нарушениях нормальной эксплуатации.

Верификация и валидация проведена на базе экспериментальных и расчетных данных для оксидного уранового, смешанного оксид уран-плутониевого (МОКС) и смешанного нитрид уран-плутониевого (СНУП) топлив: эксперименты по облучению ТВС с МОКС-топливом на РУ БН-350, эксперименты по остаточному тепловыделению на БН-600, эксперименты по облучению образцов минорных актинидов на РУ БН-350, эксперименты по облучению образцов конструкционных материалов на установке термоядерного источника нейтронов FNS, бенчмарки нуклидной кинетики по облучению СНУП топлива в РУ БН-600 (КЭТВС-1, КЭТВС-7). Аттестационный паспорт на код BPSD получен в 2021 году.

Цепочки превращений были построены на основе распадных и ядерных данных библиотек РОСФОНД и БНАБ-РФ.

Расчет превращения нуклидов для топлива в коде организован следующим образом. Задача решается для двух взаимосвязанных цепочек превращений. Первая цепочка превращений — это 48 актинидов и два кумулятивных продукта деления (FP35 и FP39, в терминологии библиотеки БНАБ). Расчет кумулятивных продуктов деления требуется для использования результатов при подготовке сечений в системе CONSYST/БНАБ для программ нейтронно-физического расчета. Вторая цепочка превращений — собственно для нуклидов продуктов деления. В первой цепочке превращений учет образования продуктов за счет деления выполняется точно — суммарное число ядер (актинидов и кумулятивных продуктов деления) известно с ограничением точности представления чисел. Погрешность ядерной концентрации кумулятивных продуктов деления полностью определяется погрешностью ядерных констант, потока нейтронов. В зависимости от цели расчета, программа BPSD позволяет решать задачу нуклидной кинетики для нескольких вариантов цепочек превращений нуклидов кумулятивных продуктов деления. Самая полная система уравнений включает в себя 1561 нуклид. Также реализованы цепочки, содержащие 1081, 777, 550, 428 нуклидов с периодом полураспада не менее секунды, минуты, часа, суток соответственно.

Для BPSD был разработан модуль анализа чувствительности и неопределенности SUN (от англ. Sensitivity and Uncertainty analysis), позволяющий выполнить детерминистическую и стохастическую оценку неопределенности применительно к задачам нуклидной кинетики, обусловленных неопределенностью ядерных данных и технологических параметров. Одновременная реализация двух взаимосогласованных методов оценки неопределенности позволяет расширить область применения кода.

Был промоделирован эксперимент по облучению веществ на установке термоядерного источника нейтронов FNS японского агентства по атомной энергии и их дальнейшей выдержки [9]. На рисунке 5 изображена кривая остаточного тепловыделения, рассчитанного по коду BPSD, неопределенности расчета BPSD и точки эксперимента с неопределенностью и расчета по FISPACT для 5-минутного облучения. На рисунках 6 и 7 приведены графики величин концентраций основных вкладчиков в остаточное тепловыделение и их активность соответственно.

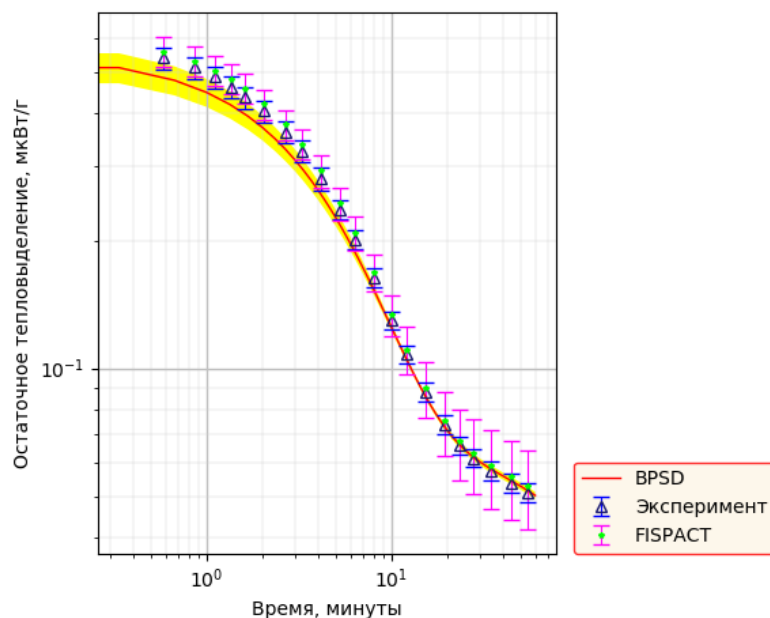


Рис. 5. Сравнение изменения величины остаточного тепловыделения стали SS-304 при режиме 5-минутного облучения по времени со значениями, полученными в эксперименте и со значениями, полученными с помощью кода FISPACT

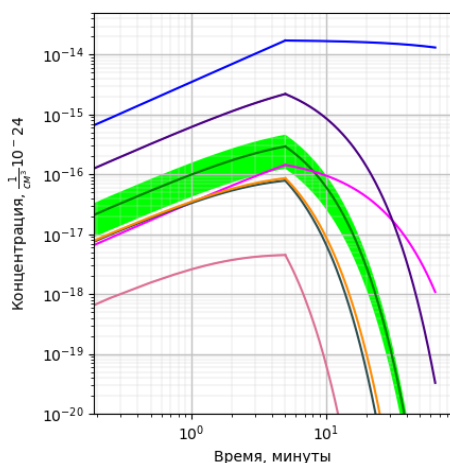


Рис. 6. Изменение ядерных концентрации нуклидов стали SS-304 при режиме 5-минутного облучения

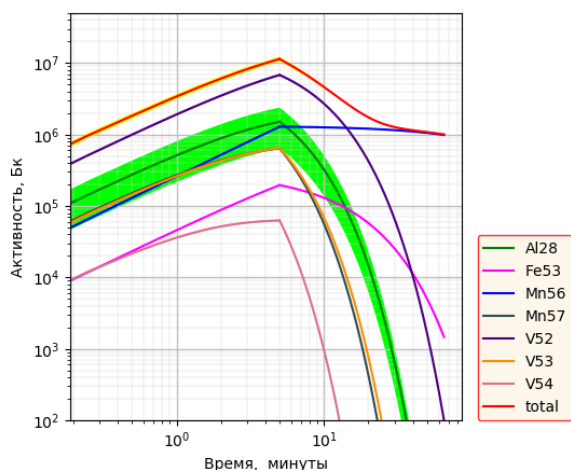


Рис. 7. Изменение активности нуклидов стали SS-304 при режиме 5-минутного облучения

4. Код ЕВКЛИД

Интегральный код ЕВКЛИД/V1 предназначен для моделирования установок с жидкометаллическим теплоносителем на базе связанных нейтронно-физических, термомеханических и теплогидравлических расчетов в условиях нормальной эксплуатации (стационарные состояния на разрешенных уровнях мощности, штатные переходные режимы) и в условиях нарушения нормальной эксплуатации. Код имеет модульную структуру и включает три основных модуля: теплогидравлический, твэльный и нейтронно-физический [10, 11]. Помимо традиционной диффузионной опции нейтронно-физический модуль включает диффузионную опцию G7 с семью расчетными точками на кассету в плане. Обе опции разработаны на базе нейтронно-физического кода DOLCE VITA. Энергетическая зависимость в коде DOLCE VITA представлена многогрупповым приближением с использованием системы подготовки констант CONSYST-RF [1] с библиотекой ядерных данных БНАБ-РФ. Верификация программы проведена на международных бенчмарках БР: BN-600, SFR MOX-1000, SFR-MOX-3600 и моделях РУ БН-1200 и БРЕСТ-ОД-300, валидация выполнена на экспериментах на реакторе JOYO и критических сборках БФС. Код DOLCE VITA аттестован в Ростехнадзоре в 2020 году [12].

Помимо диффузионной опции нейтронно-физический модуль включает кинетическую опцию на базе кода CORNER.

В коде реализована возможность расчета режимов работы РУ с учетом выгорания активной зоны и перегрузки ТВС в рамках микрокампаний на базе кода BPSD.

Верификация и валидация кода ЕВКЛИД/V1 базировалась, как на проведении автономных расчетов с применением каждого из модулей, так и на интегральных нестационарных расчетах РУ БН-600 и БН-800 (сравнение с экспериментальными данными) и БН-1200 (кросс-верификация с аттестованным кодом BURAN). Интегральный код ЕВКЛИД/V1 кода аттестован Ростехнадзором в 2019 г [13].

Область применимости второй версии кода ЕВКЛИД/V2 распространяется также на моделирование аварий и помимо модулей, представленных в первой версии, в данную версию интегрирован тяжелоаварийный модуль SAFR и другие модули, которые позволяют проводить расчеты процессов, происходящих на различных этапах аварийного процесса. Модуль SAFR позволяет рассчитывать плавление твэла, застывание образовавшегося расплава, а также перемещение расплава по поверхности тепловыделяющего элемента. В нейтронно-физическом модуле DN3D реализована возможность учета плавления и перемещения материалов активной зоны [14].

В рамках изучения гипотетических аварий с разрушением активной зоны в реакторах на быстрых нейтронах для тестовой задачи, в который моделируется плавление топлива за счет слабого отвода тепла, получены зависимости мощности (рис. 8) и реактивности (рис. 9) от времени.

В данный момент код ЕВКЛИД/V2 проходит процедуру аттестации в Ростехнадзоре.

5. Код COMPLEX

Интегральный код COMPLEX предназначен для обоснования радиационной и ядерной безопасности реакторной установки на быстрых нейтронах и объектов топливного цикла, а также средств транспортировки и хранения ядерного топлива (делящихся материалов) этих реакторов. Код включает модули DOLCE VITA, CORNER, BPSD, ODETTA, MCU-FR (разработка НИЦ "Курчатовский институт"), RASTAS

(разработка АО «ПРОРЫВ»), объединенные графической оболочкой пользователя COMPLEX-GUI со средствами пре- и постпроцессинга для кода (рис. 10).

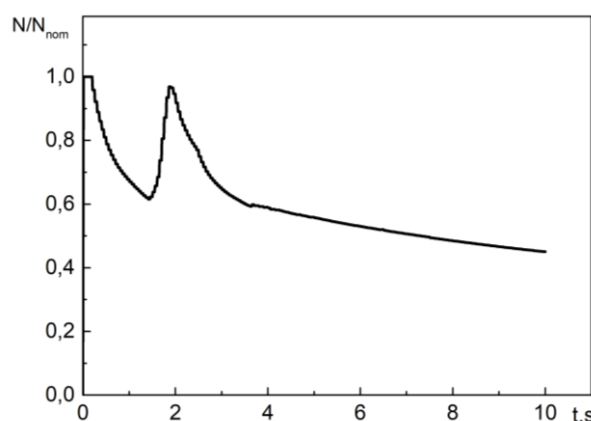


Рис. 8. Зависимость полной мощности от времени

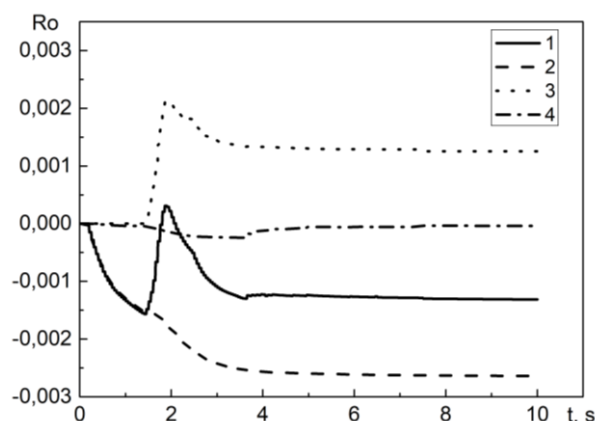


Рис. 9. Зависимость реактивности (1), вклада в реактивность от плавления (2), Доплеровского эффекта по температуре топлива (3) и стали (4) от времени

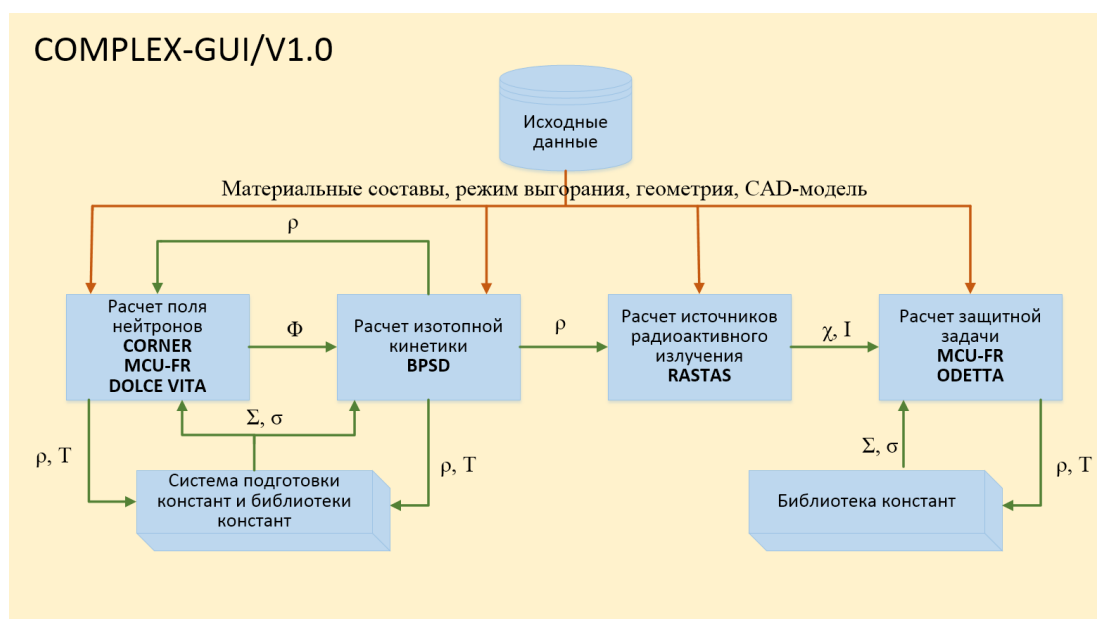


Рис. 10. Функциональная схема работы кода COMPLEX

Графическая оболочка используется для ввода исходных данных расчетных моделей, формирования сценария расчета, проведения, контроля расчета и вывода полученных результатов.

Во всех расчетных модулях кроме RASTAS используются данные из библиотеки оцененных ядерных данных РОСФОНД и библиотеки групповых констант БНАБ. В модуле RASTAS используется свой специализированный набор библиотек данных.

Верификационная база кода включает простые модели защитных композиций, характерные для реакторов на быстрых нейтронах: модель натриевого трубопровода в различных вариантах защиты, модель облучательного устройства, модели ТВС с топливом различного состава и др.

В рамках отработки методики по выбору расчетных схем и геометрических моделей ОИАЭ в процессе подготовки к аттестации кода были просчитаны модели аппаратов ЗЯТЦ.

В рамках интегрального расчета была получена оценка мощности дозы от транспортного контейнера, содержащего ТВС, облученную в РУ БН-600 (рис. 11).

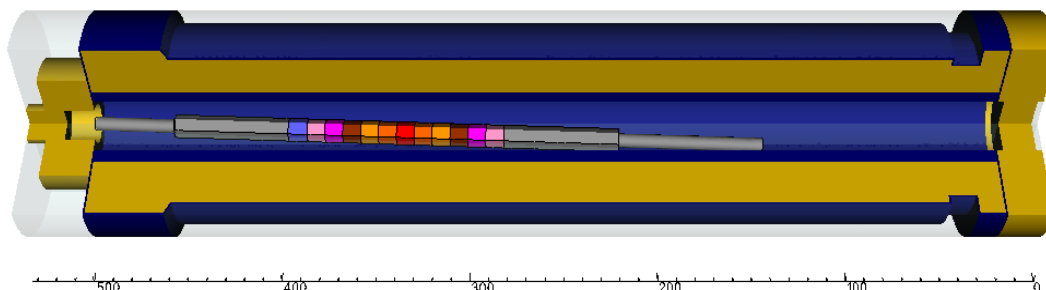


Рис. 11. Расчетная модель контейнера с ОТВС

Расчет разбивается на три этапа. На первом этапе, при помощи кодов CORNER (реакторный код, S_n -приближение), BPSD (нуклидная кинетика) моделируется кампания ТВС. На втором этапе, по модулю RASTAS проводится подготовка источника радиоактивного излучения. На третьем, по программе MCU-FR (метод Монте-Карло) проводится расчет переноса нейтронов и гамма-квантов с фиксированием нормированной мощности амбиентного эквивалента дозы в объемах детектирования. На рисунке 12 приведены экспериментальные и расчетные мощности амбиентного эквивалента дозы от нейтронного излучения вдоль контейнера на его поверхности, и в 1 и 2 метрах от нее.

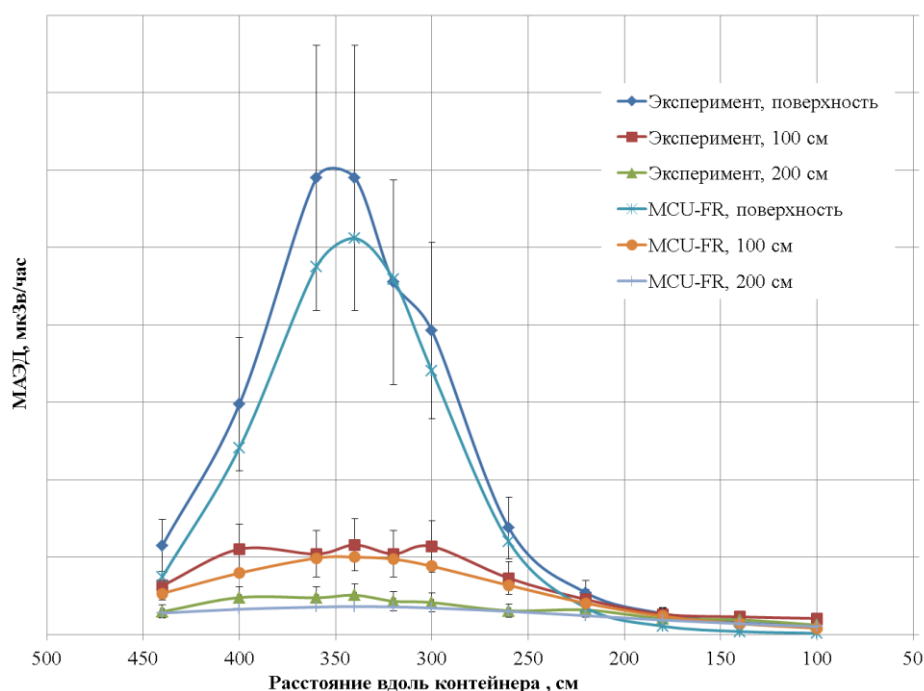


Рис. 12. МАЭД нейтронного излучения от контейнера с ОТВС РУ БН

На текущий момент код COMPLEX проходит процедуру аттестации в Ростехнадзоре.

Заключение

В работе представлено описание кодов, разрабатываемых в ИБРАЭ РАН в рамках проектного направления «ПРОРЫВ». Все коды аттестованы или в данный момент проходят процедуру аттестации, что позволит в дальнейшем использовать их при обосновании безопасности реакторных установок с жидкометаллическим теплоносителем.

Работа выполнена в рамках Государственного контракта № Н.4о.241.19.21.1068 от 14.04.2021.

Список литературы

1. «Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ CONSYST-RF» № 2016612865 от 11.03.2016.
2. Аттестационный паспорт программы для ЭВМ «CORNER», №499 от 14 декабря 2020 года.
3. «Графическая оболочка с доработанными средствами постпроцессинга для динамического интегрального универсального расчетного кода для анализа и обоснования безопасности АЭС с реакторными установками на быстрых нейтронах с жидкометаллическими теплоносителями ЕВКЛИД/V2. Smart-Client/V1.0». Руководство пользователя.
4. A. Ribes and C. Caremoli, "Salomé platform component model for numerical simulation," COMPSAC 07: Proceeding of the 31st Annual International Computer Software and Applications Conference, pages 553–564, Washington, DC, USA, 2007, IEEE Computer Society.
5. Березнев В.П., Белов А.А., Колташев Д.А. Использование методов первого и последнего столкновения в программе ODETTA при решении задач радиационной защиты. Вопросы атомной науки и техники. Серия: Ядерно-реакторные константы, 2021, выпуск 1, 1:2.
6. URL: <https://www.hdfgroup.org/solutions/hdf5/>
7. URL: <https://www.oecd-nea.org/tools/abstract/detail/NEA-1517/>
8. Rearden B.T., Jessee M.A. SCALE Code System, ORNL/TM-2005/39, Version 6.2.3. Oak Ridge, Oak Ridge National Laboratory, 2018.
9. M.R. Gilbert, J-Ch. Sublet, «Fusion decay heat validation, FISPACT-II & TENDL-2017, EAF2010, ENDF/B-VIII.0, JEFF-3.3, and IRDFF-1.05 nuclear data libraries», Tech. Rep. UKAEA-CCFE-R(18)002, CCFE, 2018.
10. Мосунова Н.А. Интегральный код ЕВКЛИД/V1 для обоснования безопасности реакторных установок на быстрых нейтронах с жидкометаллическим теплоносителем. часть 1: базовые модели. – Теплоэнергетика, 2018, №5, с. 69–84.
11. Алипченков В.М., Болдырев А.В., Вепрев Д.П. и др. Интегральный код ЕВКЛИД/V1 для обоснования безопасности реакторных установок с жидкометаллическим теплоносителем. Часть 2. Верификация. – Теплоэнергетика, 2018, №9, с. 57–72
12. Аттестационный паспорт программы для ЭВМ «Динамический интегральный универсальный расчетный код для анализа и обоснования безопасности реакторных установок на быстрых нейтронах с жидкометаллическими теплоносителями. Версия 1.2 (ЕВКЛИД/V1.2)», №462 от 30 мая 2019 года.
13. Аттестационный паспорт программы для ЭВМ «Отраслевой нейтронно-физический расчетный код на базе диффузионного приближения. Версия 1.1 (DOLCE VITA/V1.1)», №500 от 14 декабря 2020 года.
14. Колташев Д.А., Бутов А.А., Климонов И.А. и др. Особенности расчета нейтронно-физических процессов в активной зоне быстрого реактора с натриевым теплоносителем на этапе ее разрушения – Атомная энергия, 2022, т.132, №4, с. 204–210.