УДК 621.039.513

DOI: 10.46960/1816-210X_2022_1_68

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСЧЕТНОГО БЕНЧМАРКА ПО ОБЛУЧЕНИЮ ТОПЛИВНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ВТГР

А.В. Саляев

ORCID: 0000-0003-0511-0412 e-mail: salyaev@okbm.nnov.ru Опытное конструкторское бюро машиностроения им. И.И. Африкантова Нижний Новгород, Россия

С.Г. Усынина

ORCID: 0000-0002-0561-594X e-mail: usynina@okbm.nnov.ru Опытное конструкторское бюро машиностроения им. И.И. Африкантова Нижний Новгород, Россия

Проведено моделирование выгорания топливных элементов высокотемпературных газовых реакторов (ВТГР) на основе данных расчетного бенчмарка, выполненного под эгидой рабочей группы Агентства по ядерной энергии по научным проблемам реакторных систем (WPRS). При расчете выгорания использовался программный комплекс SCALE 6.2.4 с многогрупповой библиотекой сечений на базе файлов оцененных ядерных данных ENDF/B-VII.1, входящей в состав данного комплекса. Сравнение результатов расчета исследуемых характеристик – коэффициента размножения, концентрации нуклидов и спектральных индексов – показало хорошее согласие с данными участников бенчмарка, а также позволило выполнить верификацию комплекса SCALE 6.2.4 совместно с библиотеками нейтронных микросечений.

Ключевые слова: высокотемпературный газовый реактор, выгорание, бенчмарк, Монте-Карло, микротвэл, SCALE 6.2.4.

ДЛЯ ЦИТИРОВАНИЯ: Саляев, А.В. Моделирование расчетного бенчмарка по облучению топливных элементов ВТГР / А.В. Саляев, С.Г. Усынина // Труды НГТУ им. Р.Е. Алексеева. 2022. № 1. С. 68-76. DOI: 10.46960/1816-210X_2022_1_68

SIMULATION OF CALCULATED BENCHMARK FOR RADIATION EXPOSURE OF HTGR FUEL CELLS

A.V. Salyaev

ORCID: 0000-0003-0511-0412 e-mail: salyaev@okbm.nnov.ru Federal State Unitary Enterprise I.I. Afrikantov OKB Mechanical Engineering Nizhny Novgorod, Russia

S.G. Usynina

ORCID: 0000-0002-0561-594X e-mail: usynina@okbm.nnov.ru Federal State Unitary Enterprise I.I. Afrikantov OKB Mechanical Engineering Nizhny Novgorod, Russia

Abstract. Simulation of high-temperature gas reactors (HTGR) fuel cells burnout has been simulated based on calculated benchmark data carried out under the auspices of the Nuclear Energy Agency's working group on scientific problems of reactor systems (WPRS). When calculating the burnout, the SCALE 6.2.4 software package was used with a multigroup cross-section library based on ENDF/B-VII.1 estimated nuclear data files, which is part of this complex. Comparison of results of the studied characteristics calculation – the multiplication coefficient, concentration of nuclides and spectral indices – showed good agreement with the data of benchmark participants, and also allowed the verification of SCALE 6.2.4 complex together with libraries of neutron microsections.

[©] Саляев А.В., Усынина С.Г.

FOR CITATION: A.V. Salyaev, S.G. Usynina. Simulation of calculated benchmark for radiation exposure of HTGR fuel cells. Transactions of NNSTU n.a. R.E. Alekseev. 2022. № 1. Pp. 68-76. DOI: 10.46960/1816-210X_2022_1_68

Введение

Неослабевающий мировой интерес к высокотемпературным газоохлаждаемым реакторам обусловлен уникальными особенностями данных установок как в плане безопасности, так и в плане практического применения для выработки высокопотенциальной теплоты и/или производства электроэнергии с высоким КПД. Основные особенности и преимущества ВТГР определяются применением в них топливных элементов на основе микротвэлов – топливных частиц (кернов) с многослойным защитным керамическим покрытием TRISO. Микротвэлы размещаются в шаровых твэлах или в цилиндрических топливных компактах и графитовых блоках. Таким образом, возникает необходимость учета двойной гетерогенности, т.е. эффектов в области резонансных энергий (резонансной экранировки) как на микротвэлах, так и на шаровых твэлах или топливных компактах. Для учета данной особенности топлива ВТГР разрабатываются специальные расчетные методики и программы, учитывающие сложную структуру топливных сборок. В связи с трудностью получения экспериментальных данных такие программы требуют, в том числе, проведение кросс-верификации, свидетельствующей о правильности заложенных в программу методов и алгоритмов, а также адекватности используемых библиотек констант. Таким образом, проведение независимых расчетных бенчмарков является актуальной задачей.

Наиболее точными программами для моделирования и расчета сложных систем являются программы, реализующие метод Монте-Карло. Точность расчета по таким программам обусловлена, в основном, имеющимися неопределенностями в микросечениях ядерных реакций взаимодействия излучений с веществом. Программы, входящие в комплекс SCALE 6.2.4, в том числе, модуль KENO-VI, реализующий метод Монте-Карло, а также модуль расчета выгорания ORIGEN, позволяют практически точно моделировать выгорание топливных сборок ВТГР, предоставляя при этом пользователю достаточно простые и удобные средства для описания моделей.

Первоочередная задача заключалась в моделировании геометрии топливных элементов и выборе необходимых управляющих последовательностей и модулей для расчета. Далее проведено сравнение полученных результатов с данными участников бенчмарка и выполнен краткий анализ расчетных данных.

Описание бенчмарка

Бенчмарк состоял из расчета выгорания трех различных конфигураций среды: микротвэлов (топливных частиц с покрытием TRISO), шарового топливного элемента (топливные частицы, распределенные в графитовой матрице) и призматического топливного блока (графитовый блок, содержащий топливные компакты и цилиндрические каналы для прохода гелиевого теплоносителя). Во всех случаях рассматривалась бесконечная решетка из соответствующих элементов. В табл. 1 приведены характеристики топлива и топливных сборок, в табл. 2 – исходные составы материалов. Доля примесей в графите топливных элементов (борный эквивалент) принималась равной 0,5 ppm.

Рассчитывались следующие характеристики:

- коэффициент размножения в бесконечной среде *K*_{inf},
- спектральные индексы:
 - 1) $\rho^{238} = {}^{238}U_c$ (быстр) / ${}^{238}U_c$ (тепл); 2) $\delta^{235} = {}^{235}U_t$ (быстр) / ${}^{235}U_t$ (тепл);

3) $\delta^{238} = {}^{238}\text{U}_f / {}^{235}\text{U}_f$; 4) $c/f^{235} = {}^{238}U_c / {}^{235}U_f$, где 238 U_c – скорость реакции радиационного захвата на 238 U; $^{235}U_c$ – скорость реакции радиационного захвата на $^{235}U;$ $^{235}U_f$ – скорость реакции деления на $^{235}U.$

Таблица 1

Характеристики топлива и топливных сборок

Table 1

Characteristics of fuel and fuel assemblies

Характеристика	Значение
Параметры топлива:	
 – материал топливной композиции 	UO_2
- плотность, г/см ³	10,4
– обогащение по ²³⁵ U, % вес	8,2
 доля примесей в керне (борный эквивалент), ppm 	1
Параметры топливных частиц:	
– радиус керна, мм	0,25
– толщина/плотность буферного слоя РуС, мкм / г/см ³	0,09/1,05
– толщина/плотность внутреннего слоя РуС, мкм / г/см ³	0,04/1,9
– толщина/плотность слоя SiC, мкм / г/см ³	0,035/3,18
– толщина/плотность наружного слоя РуС, мкм / г/см ³	0,04/1,9
Параметры ячейки микротвэла:	
– радиус ячейки, см	0,10137
Параметры шарового топливного элемента:	
– наружный радиус, см	3
– радиус зоны с микротвэлами, см	2,5
– число топливных частиц	15000
– загрузка UO ₂ , г	10,21
 объемная доля топливных частиц, % 	9,043
Параметры топливных компактов:	
– диаметр, см	1,245
— высота, см	4,93
– загрузка UO2, г	2,042
– число топливных частиц на компакт	3000
– объемная доля топливных частиц в компакте, %	19,723
Параметры топливного блока:	
– шаг треугольной решетки расположения каналов, см	1,88
– диаметр отверстий под топливные компакты, см	1,27
– диаметр отверстий под теплоноситель, см	1,588

Граница между тепловой (тепл) и быстрой (быстр) областями энергий условно принималась равной 0,625 эВ.

Масса нуклидов (г/т U): 1) актиниды: ²³⁵U, ²³⁸U, ²³⁹Pu, ²⁴⁰Pu, ²⁴¹Pu, ²⁴²Pu, ²⁴¹Am, ²⁴⁴Cm, ²⁴⁵Cm; 2) продукты деления: ⁸⁵Kr, ⁹⁰Sr, ^{110m}Ag, ¹³⁷Cs, ¹³⁵Xe, ¹⁴⁹Sm, ¹⁵¹Sm.

Результаты, предоставленные участниками бенчмарка, включают 21 набор данных, предоставленных 12 участниками десяти организаций из шести стран. В расчетах использовались 11 разных расчетных программ. Участниками проводились полностью независимые расчеты по предоставленным исходным данным с использованием как детерминистских методов, так и метода Монте-Карло соответственно в многогрупповом приближении или в СЕ с поточечным представлением микросечений.

Таблица 2

Составы материалов

Table 2

Элемент	Нуклид или элемент	Атомная концентрация, 10 ²⁴ см ⁻³		
	²³⁵ U	2,12877 • 10-2		
	²³⁸ U	1,92585.10-3		
Керн	0	4,64272.10-2		
	$^{10}\mathrm{B}$	1,14694.10-7		
	11 B	4,64570.10-7		
Буферный слой РуС	С	5,26449.10-2		
Внутренний и наружный слой РуС	С	9,52621.10-2		
Crež SiC	С	4,77240.10-2		
	Si	4,77240.10-2		
	С	8,77414.10-2		
Матричный графит	$^{10}\mathrm{B}$	9,64977·10 ⁻⁹		
	¹¹ B	3,90864·10 ⁻⁸		
	С	8,77414.10-2		
Графит топливного блока	$^{10}\mathrm{B}$	9,64977·10 ⁻⁹		
	¹¹ B	3,90864·10 ⁻⁸		
Γ	³ He	3,71220.10-11		
т елиевыи теплоноситель	⁴ He	2,65156.10-5		

Compositions of materials

Таблица З

Table 3

Compositions of materials

Составы материалов

Конфигурания	Управляющий модуль /	Библиотека констант/	Количество	
конфитурация	последовательность	источник данных	групп	
Тонянов внойно	TRITON/T-DEPL-1D	scale.rev04.xn252	252	
топливная ячеика	(XSDRN)	v7.1/ENDF/B-VII.1		
Шаровой топливный	TRITON/T6-DEPL	scale.rev04.xn252	252	
элемент	(KENO-VI)	v7.1/ENDF/B-VII.1	252	
Призматический	TRITON/ T6-DEPL	scale.rev04.xn252	252	
топливный блок	(KENO VI), CSAS6 (KENO-VI)	v7.1/ENDF/B-VII.1	232	

Моделирование бенчмарка

Расчет выгорания всех трех конфигураций среды выполнен с использованием программного комплекса SCALE 6.2.4, разрабатываемого и поддерживаемого отделом RNSD (Reactor and Nuclear Systems Division) ORNL, Oak Ridge, Tennessee, США. Сводная информация о методах и данных, используемых в расчетах, приведена в табл. 3. Методология расчета в общем виде заключалась в следующем.

1. Подготовка библиотеки констант, в том числе, одногрупповых микросечений для расчета выгорания, проводилась с использованием управляющего модуля TRITON [4] в последовательностях T-DEPL-1D (простая многозонная ячейка – микротвэл) и T6-DEPL (шаровой топливный элемент или призматический топливный блок). Последовательности позволяют получить библиотеку констант для каждого материала на каждом шаге выгорания.

2. Спектр нейтронов в процессе выгорания рассчитывался с использованием 252-групповой библиотеки, включающей нейтронные данные, основанные на файлах оцененных ядерных данных ENDF/B-VII.1. Отметим, что для ячеек с двойной гетерогенностью не может быть задана библиотека с поточечным (CE) представлением сечений.

3. Расчет блокировки микросечений проводился с использованием транспортного модуля CENTRM, рассчитывающего непрерывный по энергии (CE) спектр нейтронов, использующийся в качестве весовой функции. При этом на правой границе ячейки микротвэла и ячейки твэл использовалось белое граничное условие.

4. Транспортная задача на каждом шаге выгорания решалась с помощью детерминистского модуля XSDRN или KENO-VI, реализующего метод Монте-Карло. Последовательность CSAS6, решающая задачу расчета на критичность, использовалась для получения спектральных индексов. При этом задавались составы материалов, полученные в процессе выгорания в последовательности T6-DEPL.

5. Расчет выгорания проводился по модулю ORIGEN [5], предназначенному для расчета изменения во времени концентраций, активности, мощности источников и спектров излучений смеси изотопов, находящейся под воздействием нейтронного облучения и (или) вследствие радиоактивного распада. Модуль использует одногрупповые микросечения, полученные на основе решения транспортной задачи с материалами, полученными на предыдущем шаге выгорания.

Расчет шарового топливного элемента и призматического топливного блока проводился с учетом двойной блокировки микросечений в топливных компактах. Геометрия задавалась в явном виде с описанием микротвэл с покрытиями. Предполагается, что распределение микротвэл в топливной зоне шарового твэл или в топливном компакте равномерное.

Результаты расчетов

Сравнительные результаты расчетов представлены в табл. 4-6. В них приведено относительное отклонение результатов расчетов от средних значений характеристик по данным различных участников. Из представленной информации можно отметить следующее.

1. Результаты расчетов K_{inf} достаточно хорошо согласуются между собой, учитывая разнообразие используемых расчетных методов и данных. Стандартное отклонение составляет менее 1 % для всех конфигураций и в целом возрастает с увеличением выгорания. Относительное отклонение находится в пределах 1 % за исключением глубины выгорания 120 ГВт сут/т для шарового топливного элемента.

2. Максимальное относительное отклонение от среднего значения спектральных индексов для всех трех конфигураций находится в диапазоне ± 5 % (за исключением значений индекса δ^{238} для шарового топливного элемента для глубин выгорания 80 и 120 ГВт·сут/т). При этом выраженного тренда в относительном отклонении в зависимости от выгорания не наблюдается.

3. Результаты расчета выгорания основных топливных изотопов находятся в удовлетворительном согласии с остальными результатами: относительное отклонение находится в основном в пределах \pm 6%. Характерно уменьшение относительного отклонения результатов для изотопов с их накоплением. Как и следовало ожидать, разброс данных с увеличением выгорания более выражен для минорных актинидов Am и Cm, содержание которых в топливе невелико. Для Cm отличия достигают 30% (при его содержании в облученной композиции на уровне микрограмм).

4. Результаты расчета накопления ключевых изотопов продуктов деления хорошо согласуются между собой: относительное отклонение находится в основном в пределах от -2 до 7 %. Наибольшие отличия наблюдаются для ^{110m}Ag: от -22 до 32 %, что может быть следствием как очень малого его накопления в топливе, так и неопределенности в коэффициентах ветвления библиотек распадов.

Таблица 4

Относительное отклонение результатов расчета для выгорания ячейки микротвэла, %

Table 4

V	Глубина выгорания, ГВт∙сут/т							
ларактеристика	0	0,5	5	10	20	40	80	120
K_{inf}	-0,40	-0,44	-0,45	-0,45	-0,50	-0,35	-0,45	-0,57
Масса актин	идов, г/т I	J						
²³⁵ U	_	0,08	-0,02	-0,04	-0,15	-0,19	0,29	1,47
²³⁸ U	_	-0,03	-0,02	-0,03	-0,02	-0,05	-0,07	-0,04
²³⁹ Pu	_	3,00	3,06	2,69	2,29	1,47	1,69	1,52
²⁴⁰ Pu	_	7,91	4,68	3,30	2,65	2,20	1,50	1,50
²⁴¹ Pu	_	10,15	6,25	4,43	3,50	2,77	1,38	1,11
²⁴² Pu	_	48,40	9,29	6,12	5,02	4,30	3,29	3,64
²⁴¹ Am	_	35,24	8,14	4,34	2,83	2,50	0,84	0,78
²⁴⁴ Cm	_	55,06	24,23	4,39	0,61	-1,64	-1,82	-2,40
²⁴⁵ Cm	_	-96,64	33,02	28,29	3,53	0,54	0,56	1,25
Масса проду	ктов деле	ния, г/т U						
⁸⁵ Kr	_	6,32	6,51	6,50	6,27	6,00	5,89	5,84
⁹⁰ Sr	_	0,94	0,86	0,79	0,62	0,35	0,79	0,05
^{110m} Ag	_	13,89	23,10	31,79	32,14	27,47	16,49	6,88
¹³⁷ Cs	_	1,18	1,20	1,12	1,24	1,21	1,28	1,25
¹³⁵ Xe	_	-0,14	0,38	0,63	1,02	1,07	3,08	4,50
¹⁴⁹ Sm	_	2,06	4,39	4,05	7,03	3,96	7,48	11,04
¹⁵¹ Sm	_	-1,46	1,31	0,94	1,55	1,19	2,67	4,13
Спектральные индексы								
ρ ²³⁸	1,09	1,26	1,51	1,73	1,71	1,49	2,68	3,21
δ ²³⁵	-0,86	-0,98	-0,54	-0,01	0,34	0,36	2,58	3,86
δ^{238}	-0,65	-0,60	-0,38	0,01	-0,02	-0,26	0,30	-2,15
c/f ²³⁵	0,94	1,06	1,36	1,70	1,92	1,96	2,86	1,37

Relative deviation of calculation results for coated particle cell burnout, %

Таблица 5

Относительное отклонение результатов расчета для выгорания шарового топливного элемента, %

Table 5

Relative deviation of calculation results for ball fuel cell burnout, %

Характеристика			Гл	убина вы	горания, І	Вт·сут/т		
	0	0,5	5	10	20	40	80	120
K_{inf}	0,07	0,12	0,08	0,14	0,14	0,18	0,42	1,54
Масса актин	идов, г/т l	IJ						
²³⁵ U		-0,03	-0,12	-0,22	-0,53	-1,43	-4,65	-8,32
²³⁸ U	_	0,05	0,06	0,05	0,07	0,04	0,01	0,00
²³⁹ Pu		1,22	0,78	0,37	0,06	-0,04	0,44	1,72
²⁴⁰ Pu		5,32	2,78	1,89	1,31	0,39	-0,96	-0,90
²⁴¹ Pu		12,02	4,97	3,64	3,07	3,37	2,03	1,82
²⁴² Pu	_	39,56	7,41	5,67	4,91	4,49	3,99	2,71
²⁴¹ Am	_	40,66	6,70	4,00	1,86	-0,60	-5,74	-8,37
²⁴⁴ Cm	_	77,88	33,56	10,41	1,67	1,62	2,39	0,50
²⁴⁵ Cm	_	136,62	30,06	28,23	28,54	2,30	4,68	5,01
Масса проду	ктов деле	ния, г/т U						
⁸⁵ Kr	—	2,19	4,72	4,88	4,80	4,77	4,65	4,64
⁹⁰ Sr	_	1,59	1,57	1,42	1,31	1,14	0,63	0,35
^{110m} Ag	_	28,07	-1,76	-0,83	0,69	-0,63	-5,99	-15,57
¹³⁷ Cs		1,42	1,22	1,23	1,15	0,94	0,80	0,51
¹³⁵ Xe	_	0,06	0,06	-0,07	-0,08	-0,22	0,51	2,74
149 Sm	_	0,90	0,78	0,94	2,37	1,84	2,84	4,81
¹⁵¹ Sm	_	-0,20	1,03	0,59	0,42	1,28	2,03	2,14
Спектральные индексы								
$ ho^{238}$	-1,96	-1,47	-1,92	-2,06	-2,41	-2,52	-2,09	-0,94
δ^{235}	-0,22	-0,03	-0,42	-0,69	-1,00	-1,26	-0,63	0,79
δ^{238}	4,55	4,80	4,64	4,98	4,56	4,97	7,49	11,41
c/f^{235}	-1,81	-1,62	-1,69	-1,66	-1,70	-1,22	1,17	4,56

Таблица б

Относительное отклонение результатов расчета для выгорания призматического топливного блока, %

Table 6

Relative deviation of calculation results for of prismatic fuel block, %

V	Глубина выгорания, ГВт·сут/т							
ларактеристика	0	0,5	5	10	20	40	80	120
K_{inf}	-0,08	-0,07	-0,05	-0,04	0,03	0,18	0,52	0,89
Масса актин	Масса актинидов, г/т U							
²³⁵ U	_	0,02	-0,12	-0,25	-0,51	-1,20	-3,10	-5,21
²³⁸ U	_	0,00	0,00	0,02	0,02	0,00	-0,03	-0,03
²³⁹ Pu	_	-1,50	0,75	0,91	0,42	-0,07	-0,26	0,07
²⁴⁰ Pu	_	-0,81	1,84	1,72	1,13	0,31	-1,03	-1,50
²⁴¹ Pu	_	12,45	2,37	2,34	1,76	1,86	0,48	-0,22
²⁴² Pu	_	18,25	8,67	4,60	3,49	3,22	3,43	3,18
²⁴¹ Am	_	17,37	14,04	1,61	0,01	-1,96	-6,11	-9,94
²⁴⁴ Cm	_	-19,78	3,77	7,18	-1,79	-1,21	-0,88	-1,21
²⁴⁵ Cm	_	-99,45	25,34	29,70	11,55	4,99	0,11	1,70
Масса проду	ктов деле	ния, г/т U						
⁸⁵ Kr	_	1,91	4,58	4,61	4,65	4,55	4,36	4,22
⁹⁰ Sr	—	1,58	1,52	1,44	1,31	1,14	0,69	0,33
^{110m} Ag	_	-11,55	-4,97	-2,03	-2,54	-5,89	-13,99	-22,51
¹³⁷ Cs	_	1,52	1,59	1,46	1,43	1,25	1,12	0,87
¹³⁵ Xe	_	0,10	0,21	0,27	0,40	0,70	2,00	3,43
¹⁴⁹ Sm	_	_	3,29	3,30	3,88	3,29	4,40	4,40
¹⁵¹ Sm	_	-2,08	0,60	0,08	-0,31	-0,05	0,71	0,76
Спектральные индексы								
$ ho^{238}$	0,32	-1,63	-1,57	-1,45	-1,93	-2,69	-2,73	-2,61
δ^{235}	-3,30	-1,80	-2,01	-2,08	-2,44	-3,13	-3,23	-3,22
δ^{238}	-3,39	-3,39	-3,14	-3,36	-3,27	-3,33	-2,06	-0,78
c/f^{235}	-2,18	-1,90	-1,69	-1,45	-1,57	-1,59	0,03	1,36

Заключение

Выполнено моделирование расчетного бенчмарка по выгоранию топливных элементов ВТГР. Расчеты проведены для трех конфигураций: элементарной ячейки микротвэла, шарового топливного элемента и призматического топливного блока. Сравнение полученных данных с результатами участников бенчмарка показало хорошую согласованность основных исследуемых характеристик.

Полученные данные могут быть полезны как кросс-верификация расчетных модулей и библиотек нейтронных микросечений программного комплекса SCALE 6.2.4.

Библиографический список

- 1. A Code-to-Code Benchmark for High-Temperature Gas-Cooled Reactor Fuel Element Depletion, NEA/NSC/R (2019)1, February 2019.
- 2. Wieselquist, W.A. Editors, SCALE Code System, ORNL/TM-2005/39 / W.A. Wieselquist, R.A. Lefebvre, M.A. Jessee, Version 6.2.4, April 2020.
- 3. Chadwick, M.B. ENDF/B-VII.1: Nuclear Data for Science and Technology: Cross Sections, Covariances, Fission Product Yields and Decay Data / M.B. Chadwick et al., Nucl. Data Sheets 112(2011)2887.
- 4. Jessee, M.A. TRITON, A Multipurpose Transport, Depletion, and Sensitivity and Uncertainty Analysis Module / M.A. Jessee, D. Wiarda, K. T. Clarno et al, ORNL/TM-2005/39, Version 6.2.4, April 2020.
- 5. Wieselquist, W. ORIGEN: Neutron Activation, Actinide Transmutation, Fission Product Generation, and Radiation Source Term Calculation / W. Wieselquist, S. Hart, A. Isotalo et al, SCALE Code System, ORNL/TM-2005/39, Version 6.2.4, April 2020.

Дата поступления в редакцию: 29.11.2021