

РАЗРАБОТКА ПРОГРАММЫ ДЛЯ АВТОМАТИЗАЦИИ СОЗДАНИЯ РАСЧЁТНЫХ ФАЙЛОВ ДЛЯ MCU-PTR

Балачков М.М.¹, Федоренко Е.А.²

¹ *Томский политехнический университет, Инженерная школа ядерных технологий,
ассистент ОЯТЦ, mmb2@tpu.ru*

² *Томский политехнический университет, Инженерная школа ядерных технологий,
группа ОАМ41, eaf26@tpu.ru*

Введение

Одной из проблем прецизионных программ для нейтронно-физических расчётов ядерных реакторов заключается в отсутствии пользовательского интерфейса (большинство расчётных моделей пишутся в текстовых редакторах), невозможности быстро создавать расчётные файлы и редактировать параметры в них. Решением является создание отдельных программ, которые способны быстро генерировать исходные файлы для расчётных программ, но при этом теряя гибкость изначального подхода таких кодов.

В данной работе представлено описание и возможности разработанной программы, предназначенной для создания исходных файлов для прецизионной программы MCU-PTR. Разработанная программа приспособлена для создания исходных файлов для проведения нейтронно-физических расчётов ядерных реакторов с водяным теплоносителем и с широким спектром материалов топлива и оболочки.

Описание программы

Данная программа написана на языке Wolfram Language. Для ввода данных необходимо использовать в качестве десятичного разделителя точку, а не запятую, иначе программа выдаст ошибку.

В написанной программе присутствуют 5 вкладок.

Первая вкладка – «Топливо». Она разделена на секции. В первой секции задаётся плотность топлива. Во второй – доли ядер содержащихся в топливе (Th^{232} , $\text{U}^{233, 235, 238}$, $\text{Pu}^{238-242}$). В третьей – количество атомов разбавителя в молекуле топлива (O, N, C). Такой набор разбавителей позволяет рассчитывать традиционное оксидное и перспективные нитридное и карбидное топлива. В последней секции задаются параметры матрицы: объёмная доля матрицы, плотность матрицы, доля ядер в молекуле матрицы (Si, Al, Mo). В дальнейшем планируется расширить список возможных материалов матриц, что позволит вести расчёты не только традиционного топлива, но и перспективного дисперсионного ядерного топлива (ДЯТ), к примеру, для атомных станций малой мощности (АСММ) или ядерных реакторов для ледокольного флота (КЛТ-40). Последний параметр на этой вкладке – средняя температура топлива и матрицы.

Вторая вкладка – «Вода». В ней задаются температуры и давления воды на входе и выходе из активной зоны ядерного реактора. После ввода параметров необходимо нажать на кнопку «Рассчитать плотность воды», далее в соответствующих полях появятся плотности воды на входе и выходе из активной зоны. Расчёт плотностей происходит с помощью встроенной функции «ThermodynamicData[]», которая опирается [1] на [2].

Изначальные параметры воды соответствует давлению 16 МПа и температуре на входе в активную зону – 289 °С и на выходе из активной зоны – 320 °С, что типично для реакторов типа ВВЭР-1000 [3, 4]. В дальнейшем планируется добавить другие виды теплоносителей (натрий, свинец, эвтектики: Na-K, Pb-Bi).

Третья вкладка – «Оболочка». В первой секции задаётся плотность оболочки, количество ядер в молекуле оболочки и средняя температура оболочки. Изначально задан сплав Э-125. С заданным набором материалов возможен расчёт как традиционных оболочек на основе циркония, так и различных видов сталей. В дальнейшем планируется расширить список возможных химических элементов для обеспечения расчётов более перспективных оболочек, разрабатываемых для концепции толерантного ядерного топлива. Во второй секции задаются параметры газового зазора: плотность гелия и его средняя температура.

Следующая вкладка – «Геометрия» разделена на несколько секций. В первой задаются параметры топливной таблетки: внутренний и внешний радиусы топливной таблетки и количество разбиений по радиусу топливной таблетки. При задании отличного от нуля внутреннего радиуса топливной

таблетки, будет считаться, что внутри есть отверстие заполненное гелием, параметры которого аналогичны гелию в газовом зазоре. Такой подход позволяет моделировать как топливные таблетки современных реакторов типа ВВЭР, так и перспективные топливные таблетки без центрального отверстия для других типов реакторов.

Следующая секция связана с параметрами твэла. Сюда входят следующие параметры: высота твэла; количество разбиений по высоте твэла; внутренний и внешний радиус оболочки твэла. Если задать внутренний радиус оболочки твэла равным внешнему радиусу топливной таблетки, то газовый зазор будет отсутствовать, что позволяет моделировать как традиционные реакторы типа ВВЭР, так и ледокольные КЛТ-40С.

В третьей секции – «Параметры элементарной ячейки» один параметр: шаг расстановки твэлов под ключ. Таким образом возникает ограничение на форму расстановки твэлов – она может быть либо шестиугольной, либо треугольной. Квадратную расстановку твэлов планируется добавить в будущем. В последней секции схематично показана элементарная ячейка с видом сверху, если изменить геометрические параметры, то элементарная ячейка будет создана в соответствии с ними.

Следующая вкладка – «Создание файла». На ней присутствует кнопка «Рассчитать концентрации», необходимая для перерасчёта ядерных концентраций при изменении исходных параметров, а ниже приведены таблицы со значениями ядерных концентраций в формате необходимом для MCU-PTR. Для каждого материала элементарной ячейки существует своя таблица (топливо, теплоноситель, оболочка, газовый зазор), в которой перед началом расчёта можно проверить корректность введённых данных. Для первой таблицы параметры задаются на первой вкладке программы («Топливо»), для второй – на второй («Вода»), а для третьей и четвёртой – на третьей («Оболочка»).

Расчёт ядерных концентраций для сложных веществ при различном ядерном содержании нуклидов можно провести по следующей формуле [4]:

$$N = \frac{N_A \cdot \rho}{\mu} \cdot n \cdot c, \quad (1)$$

где N – ядерная концентрация нуклида;

N_A – число Авогадро, ρ – плотность материала, μ – молярная масса материала, n – число атомов изотопов рассматриваемого нуклида в одной молекуле материала, c – доля ядер рассматриваемого нуклида.

В программе реализован последовательный расчёт молекулярной концентрации материала:

$$N_{\text{мол}} = \frac{N_A \cdot \rho}{\mu} \cdot \sigma, \quad (2)$$

где $N_{\text{мол}}$ – молекулярная концентрация;

σ – множитель равный 10^{-24} , необходимый для корректной записи ядерной концентрации в MCU-PTR, а затем расчёт ядерной концентрации:

$$N = N_{\text{мол}} \cdot c', \quad (3)$$

где c' – доля атомов нуклида в молекуле вещества.

Новая переменная c' по сути является произведением $n \cdot c$ и является индексом в химической формуле вещества.

Молекулярная концентрация топлива зависит от объёмной доли матрицы, в формулу (2) добавляется множитель равный объёмной доли топлива:

$$N_{\text{мол}} = \frac{N_A \cdot \rho}{\mu} \cdot \sigma \cdot (1 - c_{V\text{Matrix}}), \quad (4)$$

где $c_{V\text{Matrix}}$ – объёмная доля матрицы.

Для матрицы добавляется множитель равный объёмной доли матрицы:

$$N_{\text{мол}} = \frac{N_A \cdot \rho}{\mu} \cdot \sigma \cdot c_{V\text{Matrix}}. \quad (5)$$

При этом молекулярная масса вещества не зависит от объёмной доли матрицы, она рассчитывается только исходя из состава молекулы и является средневзвешенной молярной массой вещества:

$$\mu = \sum_{i=1}^m \mu_i \cdot c'_i, \quad (6)$$

где m – количество сортов нуклидов в молекуле, μ_i – молярная масса i -го нуклида, c'_i – доля атомов i -го нуклида в молекуле вещества.

Внизу вкладки есть поле для пути создания файла и кнопка для создания файла и запуска его на расчёт. Стоит отметить, что если до создания файла в той же директории находился другой файл с таким же названием, то он будет удалён, и вместо него создан новый.

Автоматически выбирается путь расположения файла написанной программы, но его можно изменить в соответствующем поле.

После нажатия кнопки «Создание файла для MCU и его запуск», в указанной директории будет создан файл со следующей структурой:

1. Физический модуль.

Описываются материалы, их температуры и ядерные концентрации нуклидов, входящих в их состав.

2. Геометрический модуль.

Задаются граничные условия для шестигранной призмы (элементарная ячейка): верхний торцы абсолютно чёрные для нейтронов, боковые стороны отражают все падающие на них нейтроны, тем самым обеспечивается расчёт бесконечного по радиусу реактора (в дальнейшем планируется добавить учёт утечки нейтронов через боковую стенку реактора).

Создаётся центральное отверстие с гелием. Если его радиус равен 0, оно так же создаётся, но с нулевым радиусом, что фактически означает его отсутствие.

Топливо разбивается на концентрические цилиндрические кольца, количество которых равно указанному ранее разбиению по радиусу, умноженному на количество разбиений по высоте. Все параметры в топливе одинаковые, то есть температуры и концентрации во всех телах одинаковые.

3. Модуль источника.

Начальный источник нейтронов расположен в центре твэла и является точечным. Спектр представляет собой спектр деления U^{235} . После прохождения нескольких поколений нейтроны будут рождаться во всех точках топливного столба, а их спектр рождающихся нейтронов придёт к виду спектра деления для указанного материального состава.

4. Модуль регистрации.

Нейтроны регистрируются по длинам треков для скорости реакции деления в концентрических цилиндрических кольцах и отдельно в разбиениях только по высоте топливного столба.

5. Модули данных для моделирования и управления расчётом.

Количество нейтронов в одном поколении равно 2000, количество поколений в одной серии равно 50, всего 10 независимых серий и дополнительно одна с самым большим отклонением отбрасывается. То есть рассчитывается 11 независимый серий. В учёт статистики, таким образом, попадает $2000 \cdot 50 \cdot 10 = 10^6$ нейтронов. В дальнейшем планируется создать функционал для манипулирования этими параметрами.

Создается файл с расширением «.bat» для запуска MCU-PTR. Количество одновременно запущенных процессов равно 6, то есть будет рассчитано 6 млн нейтронов. Одновременно запущенные процессы позволяют использовать более одного ядра центрального процессора для расчётов. В дальнейшем планируется создать функционал изменения количества одновременно запущенных процессов. После окончания расчёта остаются только 2 файла: исходный файл и файл с именем начального файла (включая расширение начального файла) с расширением «.FIN».

Заключение

Таким образом, данная программа позволяет автоматизировать создания расчётных файлов для программы MCU-PTR. Спектр моделируемых реакторов довольно обширный и ограничивается в основном: шестиугольной элементарной ячейкой; невозможностью задания отдельных материалов для теплоносителя и замедлителя нейтронов; материалами теплоносителя. В дальнейшем планируется доработать программу для устранения перечисленных недостатков.

Так же планируется добавить функционал для интерпретации полученных в результате расчёта данных в распределение энерговыделения по высоте и радиусу топливного столба с дальнейшим импортом данных в пакет программ ЛОГОС.

Работа выполнена в рамках НИОКТР ПИШ-НИР-2024-006 №124070500010-4

Список используемых источников

1. ThermodynamicData Source Information—Wolfram Language Documentation: сайт – 2024 – URL: <https://reference.wolfram.com/language/note/ThermodynamicDataSourceInformation.html> : (Дата обращения 21.09.2024). – Режим доступа: свободный. – Текст: электронный.
2. Lemmon E., Huber M., McLinden M. NIST standard reference database 23: reference fluid thermodynamic and transport properties-REFPROP, Version 9.1, Natl Std. Ref. Data Series (NIST NSRDS) //(No Title). – 2013.
3. Колпаков Г.Н. Конструкции твэлов, каналов и активных зон энергетических реакторов: учебное пособие / Г.Н. Колпаков, О.В. Селиваникова. – Томск : Изд-во Томского политехнического университета, 2009. – 118 с.
4. Беспалов В.И. Лекции по радиационной защите : учебное пособие / В.И. Беспалов ; Томский политехнический ун-т. – 5-е изд., расшир. – Томск : Изд-во Томского политехнического ун-та, 2017. – 695 с.