Рішення бенчмарка Х2 щодо визначення ізотопного складу відпрацьованого ядерного палива BBEP-1000 з використанням пакета програм SCALE

- Ковбасенко Юрій Петрович, канд. техн. наук Державне підприємство «Державний науково-технічний центр з ядерної та радіаційної безпеки», м. Київ, Україна ORCID: https://orcid.org/0000-0002-0674-6263
- Білодід Євген Ігорович, канд. техн. наук Державне підприємство «Державний науково-технічний центр з ядерної та радіаційної безпеки», м. Київ, Україна ORCID: https://orcid.org/0000-0002-7790-2913

З використанням даних розрахункового бенчмарка X2 проведено аналіз похибки розрахунків коефіцієнта розмноження нейтронів та ізотопного складу відпрацьованого ядерного палива реактора BBEP-1000 під час його опромінення в активній зоні реактора за допомогою програмних модулів CSAS6 та TRITON пакета програм SCALE.

Бенчмарк Х2 було розроблено для моделювання нейтронно-фізичних характеристик ядерного палива та активної зони реактора BBEP-1000 за експлуатаційними даними енергоблока № 2 Хмельницької АЕС (Україна).

Розрахунки проводилися з використанням детальної тривимірної моделі реакторної чарунки зі штатною паливною збіркою реактора BBEP-1000 типу TB3-A, розробленої для пакета програм SCALE. Відповідно до матеріалів бенчмарка були використані номінальні значення геометричних та матеріальних параметрів TB3-A, а також номінальні умови опромінення палива в активній зоні енергоблока № 2 Хмельницької AEC.

Було виконано розрахунки з визначення коефіцієнта розмноження нейтронів реакторної чарунки та ізотопного складу ядерного палива залежно від глибини вигоряння в діапазоні 0 – 60 МВт-діб/кгU. Відповідно до матеріалів бенчмарка були визначені концентрації в опроміненому паливі 9 ізотопів: ²³⁵U, ²³⁸U, ²³⁹Pu, ²⁴⁰Pu, ²⁴¹Pu, ¹⁵⁵Gd, ¹⁵⁷Gd, ¹³⁵Xe та ¹⁴⁹Sm залежно від глибини вигоряння палива.

Результати розрахунків нейтронно-фізичних характеристик сучасного відпрацьованого ядерного палива реактора BBEP-1000 з використанням пакета програм SCALE показують дуже хороший збіг з результатами бенчмарка.

Ключові слова: бенчмарк X2, реактор BBEP-1000, відпрацьоване ядерне паливо, ізотопний склад, пакет програм SCALE.

© Ковбасенко Ю. П., Білодід Є. І., 2023

Вступ

У Державному підприємстві «Державний науковий центр з ядерної та радіаційної безпеки» (ДНТЦ ЯРБ), як організації науково-технічної підтримки регулюючого органу України – Державної інспекції ядерного регулювання України, для аналізу нейтронно-фізичних характеристик паливних систем (до яких входять активні зони ядерних установок, басейни витримки, сховища свіжого і відпрацьованого ядерного палива (ВЯП), контейнери для транспортування і зберігання свіжого палива і ВЯП тощо), вже багато років використовують пакет програм SCALE [1], створений в США.

Крім США та України, пакет програм SCALE широко використовується під час аналізу ядерної безпеки в багатьох інших країнах та міжнародних організаціях. Цей пакет програм упродовж багатьох років розробляється, валідується та удоско-



налюється в Національній лабораторії Оук-Ридж (США) за замовленням Комісії ядерного регулювання США.

У ДНТЦ ЯРБ виконано низку робіт з дослідження можливості та похибок застосування пакета програм SCALE для паливних систем діючих в Україні реакторних установок типу BBEP-440 та BBEP-1000. У цих роботах було отримано хороше співпадіння результатів розрахунків коефіцієнтів розмноження нейтронів паливних систем з розрахунковими бенчмарками та експериментальними результатами [2].

Наведені у цій статті дослідження ізотопного складу та розмножуючих властивостей ВЯП реакторів BBEP-1000 виконувались у межах проєкту Міжнародного агентства з атомної енергії (МАГАТЕ) CRP T13018 «Spent Fuel Characterization».

1. Опис розрахункових моделей для визначення характеристик ВЯП

Пакет програм SCALE дозволяє визначати розмножуючі властивості та ізотопний склад ВЯП як під час експлуатації в активній зоні реактора, так і після, впродовж зберігання. Використані у цій статті для виконання розрахункового дослідження модулі CSAS6 та TRITON є складовими частинами пакета програм SCALE, які дозволяють визначати коефіцієнт розмноження нейтронів та ізотопний склад опроміненого палива, а також інші характеристики ВЯП, такі, наприклад, як залишкове енерговиділення, активність, потужність нейтронного та фотонного випромінювання тощо.

Основою обох модулів CSAS6 і TRITON у цьому дослідженні є використання програми KENO-VI для розрахунку спектра нейтронів на основі методу Монте-Карло. Для визначення ізотопного складу опроміненого палива в модулі TRITON використовується програма ORIGEN-S.

Під час виконання розрахунків з використанням пакета програм SCALE можуть бути використані як бібліотеки перерізів з безперервною енергетичною залежністю нейтронно-фізичних констант, так і багатогрупові бібліотеки. У розрахунках коефіцієнта розмноження нейтронів та ізотопного складу тепловидільних збірок (ТВЗ), наведених у цій статті, використовувалася стандартна 44-группова бібліотека нейтроно-фізичних характеристик матеріалів, розроблена на основі файлу оцінених даних ENDF/B-V, та більш повна 238-групова бібліотека на основі файлу оцінених даних ENDF/B-VII.

Більш докладний опис розрахункових методів, що використовуються в пакеті програм SCALE, особливості розрахункових модулів та бібліотек вихідних даних наведено в документації для користувачів [1].

У розрахунках моделювалася реакторна чарунка періодичності. Чарунка з ТВЗ по висоті паливних стрижнів моделювалася у З-вимірній геометрії з детальним описом твелів, твегів та направляючих і центрального каналів. Дистанціонуючі решітки, а також конструктивні елементи ТВЗ, розташовані вище і нижче границь паливних стрижнів не моделювалися і заміщалися теплоносієм.

На границях чарунки задавалися умови дзеркального відбиття нейтронів у поперечному напрямку і відбиття нейтронів на нескінченому шарі води в аксіальному напрямку.

Геометрія, розміри та матеріали ТВЗ, а також параметри їх експлуатації задавалися згідно з даними, наведеними в [3]-[7].

Направляючі канали ТВЗ вважалися заповненими водою.

На рисунку 1 зображено візуалізацію розрахункової моделі, отриманої за допомогою допоміжної програми пакета SCALE.

2. Порівняння результатів моделювання з результатами розрахункового бенчмарка X2

Найбільш достовірним та вагомим підходом до валідації моделі є порівняння результатів розрахунків з результатами експериментальних досліджень. На жаль, у відкритих джерелах експериментальні дані щодо нейтронно-фізичних характеристик опроміненого палива для сучасних ТВЗ реакторів ВВЕР-1000 України типу ТВЗ-А або ТВЗ-WR відсутні.

А втім, у 2009 – 2012 роках німецькими та українськими спеціалістами в межах щорічних міжнародних симпозіумів з фізики реакторів ВВЕР (англ. «Atomic Energy Research», AER) було запропоновано бенчмарк з моделювання активної зони на підставі експлуатаційних даних енергоблока № 2 Хмельницької АЕС, т.зв. «Х2 бенчмарк» [4]-[7]. Цей бенчмарк базується на експлуатаційних даних, які були отримані під час експлуатації перших 4-х завантажень енергоблока № 2 Хмельницької AEC, та дає можливість проведення низки розрахунків для валідації нейтронно-фізичних кодів у гексагональній геометрії. Перша частина бенчмарка присвячена підготовці бібліотеки малогрупових перерізів взаємодії, невід'ємною частиною якої є розрахунки ізотопного складу паливних касет. У межах цього бенчмарка з використанням добре відомих кодів розрахунку нейтронно-фізичних констант реакторної чарунки, як-от NESSEL [8], CASMO [9] та HELIOS [10], було розраховано зміну розмножуючих властивостей та ізотопного складу паливної касети ТВЗ-А типу 439GT залежно від вигоряння у діапазоні від 0 до 60 МВт.діб/кгU. Усі зазначені коди є детерміністичними з реалізацією методу імовірності перших зіткнень або методу характеристик для розв'язання рівняння переносу нейтронів. Наразі найбільш точними програмами для розрахунків нейтронно-фізичних характеристик паливних касет вважаються програми, які реалізують метод Монте Карло. Тому становить





а) Поперечний переріз

б) Повздовжній переріз

Рисунок 1 – Візуалізація розрахункової моделі реакторної чарунки

інтерес доповнення даних розрахунків бенчмарка результатами, отриманими з використанням монте-карлівської програми KENO-VI.

Додатково дані бенчмарка було використано для визначення похибки розробленої моделі до визначення характеристик ВЯП за допомогою пакета програм SCALE.

На початку було визначено значення одного з основних параметрів розрахунків, а саме достатньої кількісті історій нейтронів, що моделюються на кожному кроці по вигорянню.

Визначення достатньої кількісті історій нейтронів було проведено порівнянням величини коефіцієнта розмноження нейтронів залежно від глибини вигоряння. На рисунку 2 наведено результати порівняння даних бенчмарка з результатами розрахунків, виконаних з використанням пакета програм SCALE, коли кількість історій нейтронів, що моделювалися на кожному кроці по вигорянню складає 1 (розрахунок 1), 2,5 (розрахунок 2) та 5 (розрахунок 3) мільйонів нейтронів. Як видно з результатів, наведених на рисунку 2, зі збільшенням кількості історій починаючи з величини у 2,5 мільйонів історій нейтронів результати розрахунків перестають суттєво відрізнятися від наступних. Сумарне по всіх розрахункових точках абсолютне відхилення величини коефіцієнта розмноження нейтронів між другим і першим розрахунком складає 0,01381, а між третім і другим розрахунком – 0,00950. Різниця між значеннями коефіцієнта розмноження нейтронів у другому і третьому розрахунках з'являється лише у п'ятій значущій цифрі.

Тому, у розрахунках, результати яких наведено в цьому розділі, на кожному кроці вигоряння моделюється саме 2,5 мільйонів історій нейтронів.

З даних, зображених на рисунку 2, видно, що результати, отримані з використанням пакета програм SCALE, щодо залежності коефіцієнта розмноження нейтронів реакторної чарунки реактора BBEP-1000 з TB3-A типу 439GT залежно від глибини вигоряння добре збігаються з даними бенчмарка.

Розрахунки критичності та ізотопного складу виконувалися з використанням двох стандартних бібліотек багатогрупових нейтронно-фізичних констант пакета програм SCALE – 44-групової та 238-групової. Результати розрахунків з використанням обох бібліотек настільки співпадають один з одним, що їхнє відхилення один від одного значно менше відхилення від результатів бенчмарка, і на рисунках 2 – 12 вони показані однією лінією.

Після визначення необхідних розрахункових параметрів було виконано моделювання залежності ізотопного складу палива від вигоряння. У матеріалах бенчмарка наведено дані для 9 ізотопів: ²³⁵U, ²³⁸U, ²³⁹Pu, ²⁴⁰Pu, ²⁴¹Pu, ¹⁵⁵Gd, ¹⁵⁷Gd, ¹³⁵Xe та ¹⁴⁹Sm. Результати розрахунків наведено на рисунках 3 – 12. Середнє значення вираховувалось як середнє арифметичне результатів розрахунку вагової частки ізотопів зазначеними вище кодами у бенчмарку (тобто для HELIOS, CASMO та NESSEL).



Рисунок 2 – Порівняння результатів розрахунку коефіцієнта розмноження нейтронів з даними бенчмарка



Примітка: Тут і далі N_i – розрахована зазначеною програмою або пакетом програм SCALE концентрація і-го ізотопу; N_{avg} – середня концентрація ізотопу за кодами HELIOS, CASMO та NESSEL.





Рисунок 4 – Порівняння результатів розрахунку концентрації ізотопу ²³⁸U з даними бенчмарка





Рисунок 5 – Порівняння результатів розрахунку концентрації ізотопу ²³⁹Ри з даними бенчмарка



Рисунок 6 – Порівняння результатів розрахунку концентрації ізотопів ²⁴⁰Ри з даними бенчмарка



Рисунок 7 – Порівняння результатів розрахунку концентрації ізотопів ²⁴¹Ри з даними бенчмарка





Рисунок 8 – Порівняння результатів розрахунку концентрації ізотопу ¹⁵⁵Gd з даними бенчмарка



Рисунок 9 – Порівняння результатів розрахунку концентрації ізотопу ¹⁵⁷Gd з даними бенчмарка



Рисунок 10 – Порівняння результатів розрахунку концентрації ізотопу ¹³⁵Хе з даними бенчмарка

 SSTC
 Державне підприємство

 центр з ядерної та радіаційної

 беляски



Рисунок 11 – Порівняння результатів розрахунку концентрації ізотопу ¹⁴⁹Sm з даними бенчмарка



Примітки: k_{∞}^{avg} – середнє значення коефіцієнта розмноження нейтронів, отриманих кодами HELIOS, CASMO та NESSEL у бенчмарку;

k²⁵_∞ – k^{avg}_∞ – відхилення розрахункового значення коефіцієнта розмноження нейтронів, отриманих кодом KENO-VI зі статистикою 2,5 млн історій нейтронів, від середнього значення коефіцієнта розмноження нейтронів у бенчмарку;

k_∞¹⁰ – k_∞²⁵ – відхилення розрахункового значення коефіцієнта розмноження нейтронів, отриманих кодом KENO-VI зі статистикою 1,0 млн історій нейтронів, від розрахункового значення коефіцієнта розмноження нейтронів, отриманих кодом KENO-VI зі статистикою 2,5 млн історій нейтронів; k_∞⁵⁰ – k_∞²⁵ – відхилення розрахункового значення коефіцієнта розмноження нейтронів, отриманих кодом KENO-VI зі статистикою 2,5 млн історій ейтронів, кодом KENO-VI зі статистикою 2,5 млн історій нейтронів, отриманих кодом KENO-VI зі статистикою 2,5 млн історів, отриманих кодом KENO-VI зі статистикою 2,5 млн історій, по концисти кою 2,5 млн історій нейтронів, від розрахункового значення коефіцієнта розмноження нейтронів, отриманих кодом KENO-VI зі статистикою 2,5 млн історій нейтронів.

Рисунок 12 – Порівняння результатів розрахунку коефіцієнта розмноження нейтронів.

У таблиці 1 наведено максимальне відхилення результатів розрахунку ізотопного складу ВЯП для окремих програм (HELIOS, CASMO, NESSEL та SCALE) в діапазоні можливих значень глибини вигоряння палива від 0 до 60 МВт-діб/кгВМ¹ від середніх значень, розрахованих для бенчмарку (тобто для кодів HELIOS, CASMO та NESSEL).

¹ «кг важких металів», сума мас ізотопів Th+U+Np+Pu, які містились у свіжому паливі.



Ізотоп	$\Delta = \max((N_i - N_{avg})/N_{avg}), \%$			
	HELIOS	CASMO	NESSEL	SCALE
²³⁵ U	2,55	0,863	3,71	6,63
²³⁸ U	0,0612	0,0716	0,0315	0,0616
²³⁹ Pu	4,43	6,94	12,3	5,19
²⁴⁰ Pu	8,28	9,37	19,1	9,23
²⁴¹ Pu	17,8	11,3	31,6	3,45
¹⁵⁵ Gd	31,9	50,9	20,8	40,3
¹⁵⁷ Gd	53,5	87,9	37,6	77,9
¹³⁵ Xe	5,50	1,42	4,42	1,79
¹⁴⁹ Sm	20,1	17,4	40,7	14,0

Таблиця 1 — Максимальне відносне відхилення результатів розрахунку ізотопного складу ВЯП від середніх значень

Висновок

Отримані з використанням пакета програм SCALE результати розрахунку вмісту основних ізотопів у паливі та коефіцієнта розмноження нейтронів ТВЗ протягом вигоряння загалом дуже близькі до середніх значень, наведених у бенчмарку Х2. Розроблена розрахункова модель для пакета програм SCALE у поєднанні з вибраними бібліотеками нейтронно-фізичних констант демонструє результати розрахунку ізотопного складу ВЯП, які добре корелюють з результатами бенчмарка в усьому діапазоні значень глибини вигоряння палива від 0 МВт·діб/кгВМ до 60 МВт·діб/кгВМ, особливо, на ділянці 0 - 40 МВт·діб/кгВМ.

Отже, хороший збіг результатів проведених розрахунків дозволяє зробити висновок про можливість доповнення даних бенчмарка Х2 результатами розрахунків з використанням методу Монте-Карло, а також про застосовність розробленої моделі для пакета програм SCALE, для розрахунків ізотопного складу сучасних типів ВЯП ректорів BBEP-1000 України з урахуванням визначених в цій статті похибок.

Список використаної літератури

1. SCALE: A Modular Code System for Performing Standardized Computer Analyses for Licensing Evaluation. ORNL/TM-2005/39 Version 6 Vols. I-III. ORNL, January 2009. 2. Kovbasenko Y., Khalimonchuk V., Kuchin A., Bilodid Y., Yeremenko M., Dudka O. Validation of SCALE Sequence CSAS26 for Criticality Safety Analysis of VVER and RBMK Fuel Designs. NUREG/CR-6736. 2002.

3. Комплекс составных частей активной зоны ВВЭР-1000 (тип В-320, В-338, В-302). Каталожное описание У 0401.21.00.000 ДКО, 2003.

4. Lötsch T., Khalimonchuk V., Kuchin A.. Proposal of a benchmark for core burnup calculations for a A VVER-1000 reactor core. *19th AER Symposium on Reactor Physics and Reactor Safety*. Varna, Bulgaria, 21-25 October, 2009.

5. Lötsch T, Khalimonchuk V, Kuchin A. Corrections and additions to the proposal of a benchmark for core burnup calculations for a VVER-1000 reactor. *20th Symposium of AER on VVER Reactor Physics and Reactor Safety*. Hanasaari, Espoo, Finland, 20-24 September 2010.

6. Lötsch T., Khalimonchuk V., Kuchin A. Solutions for the Task 1 and Task 2 op the benchmark for core burnup calculations for a VVER-1000 reactor. *21st Atomic Energy Research Symposium on WWER Physics and Reactor Safety*. Dresden, Germany, 19-23 September 2011.

7. Lötsch T., Khalimonchuk V., Kuchin A. Consolidated Data for Task 1 and Status of Task 2 of the Benchmark for Core Burnup Calculations for a VVER-1000 Reactor. *22 Symposium of AER on VVER Reactor Physics and Safety*. Průhonice, Czech Republic, 01-05 October 2012.

8. Schulz G. NESSEL Code Manual Version 6.09a. K.A.B. GmbH, Berlin, 2001.

9. Malte Edenius, Kim Ekberg, Bengt H. Forssen, Dave Knott. CASMO-4 - A fuel assembly burn up program, User's Manual, Version 1.28.05. Studsvik/SOA-95/1. STUDSVIK of America, Inc., USA, STUDSVIK Core Analysis AB, Sweden, 1995.

10. Casal J. J., Stamm'ler R. J. J., Villarino E. A., Ferri A. A. HELIOS: Geometric Capabilities of a New Fuel-Assembly Program. *Proc. Int. Topical Meeting on Advances in Mathematics, Computations, and Reactor Physics.* Pittsburgh, Pennsylvania, April 28-May 2, 1991. Vol. 2. P. 10.2.1.1-13.



References

1. SCALE. A modular code system for performing standardized computer analyses for licensing evaluation. ORNL/TM-2005/39 Version 6 Vols. I-III. ORNL, January 2009.

2. Kovbasenko, Yu., Khalimonchuk, V., Kuchin, A., Bilodid, Ye., Yeremenko, M., Dudka, O. (2002). Validation of SCALE sequence CSAS26 for criticality safety analysis of VVER and RBMK fuel designs. NUREG/CR-6736.

3. Set of core components for VVER-1000 (320, 338, 302). Catalogue description U 0401.21.00.000 DKO, 2003.

4. Lötsch, T., Khalimonchuk, V., Kuchin, A. Proposal of a benchmark for core burnup calculations for a VVER-1000 reactor core. *19th AER Symposium on Reactor Physics and Reactor Safety*. Varna, Bulgaria, 21-25 October 2009.

5. Lötsch, T., Khalimonchuk, V., Kuchin, A. Corrections and additions to the proposal of a benchmark for core burnup calculations for a VVER-1000 reactor. *20th Symposium of AER on VVER Reactor Physics and Reactor Safety*. Hanasaari, Espoo, Finland, 20-24 September 2010.

6. Lötsch, T., Khalimonchuk, V., Kuchin, A. Solutions for the Task 1 and Task 2 op the benchmark for core burnup calculations for a VVER-1000 reactor. *21st Atomic Energy Research Symposium on WWER Physics and Reactor Safety*. Dresden, Germany, 19-23 September 2011.

7. Lötsch, T., Khalimonchuk, V., Kuchin, A. Consolidated data for Task 1 and status of Task 2 of the benchmark for core burnup calculations for a VVER-1000 Reactor. *22 Symposium of AER on VVER Reactor Physics and Safety.* Průhonice, Czech Republic, 01-05 October 2012.

8. Schulz, G. NESSEL code manual version 6.09a. K.A.B. GmbH, Berlin, 2001.

9. Malte Edenius, Kim Ekberg, Bengt H. Forssen, Dave Knott. CASMO-4 - A fuel assembly burn up program, User's Manual, Version 1.28.05. Studsvik/SOA-95/1. STUDSVIK of America, Inc., USA, STUDSVIK Core Analysis AB, Sweden, 1995.

10. Casal, J., J., Stamm'ler, R., J., J., Villarino, E., A., Ferri, A. A. HELIOS: Geometric capabilities of a new fuel-assembly program. *Proc. Int. Topical Meeting on Advances in Mathematics, Computations, and Reactor Physics,* Pittsburgh, Pennsylvania, April 28-May 2, 1991, Vol. 2, p. 10.2.1.1-13.

Benchmark X2 Solution for Determining the Isotopic Composition of VVER-1000 Spent Nuclear Fuel Using the SCALE Code Package

Yu. Kovbasenko, Ye. Bilodid

State enterprise "State Scientific and Technical Center for Nuclear and Radiation safety", Kyiv, Ukraine

Based on the data of calculational benchmark X2, the analysis of errors in the calculations of the neutron multiplication factor and the isotopic composition of VVER-1000 spent nuclear fuel during its irradiation in the reactor core was performed respectively using software modules CSAS6 and TRITON of the SCALE code package.

Benchmark X2 was developed for modeling the neutronic characteristics of nuclear fuel and VVER-1000 reactor core based on the operational data of Khmelnytsky NPP Unit No. 2 (Ukraine).

The calculations were carried out using the detailed 3D model of the reactor cell for VVER-1000, which consists of regular type fuel assembly FA-A, developed for the SCALE code package. In accordance with the benchmark documentation, rated values of FA-A geometric and material parameters were used, as well as rated fuel irradiation conditions in the core of Khmelnytsky NPP Unit No. 2.

Based on the results of the performed calculations, the neutron multiplication factor of the reactor cell and the isotopic composition of nuclear fuel depending on the burnup in the range of 0-60 MW·day/kgU were determined. In accordance with the benchmark materials, the concentration of 9 sotopes in the irradiated fuel: ²³⁵U, ²³⁸U, ²³⁹Pu, ²⁴⁰Pu, ²⁴¹Pu, ¹⁵⁵Gd, ¹⁵⁷Gd, ¹³⁵Xe and ¹⁴⁹Sm was determined depending on the fuel burnup.

The calculation results for the neutronic characteristics of up-to-date VVER-1000 spent nuclear fuel using the SCALE code package show a very good agreement with the benchmark results.

Keywords: X2 benchmark, isotopic composition, spent nuclear fuel, SCALE code package, VVER-1000.

Отримано 17.11.2023

