乏燃料溶液系统临界安全分析 计算方法研究

银华北' 王永平' 苟军利' 刘国明² 祖铁军' 尹 文' 郑友琦' 杜夏楠' 1(西安交通大学 西安 710049) 2(中国核电工程有限公司 北京 100840)

摘要 核临界安全分析是保证乏燃料后处理厂安全性的关键技术,而现有核临界安全事故分析程序中,或在几 何适用范围上受限,或由于计算效率低而工程实用性差。因此,亟需研发一套适用范围大、计算精度高的临界 安全分析方法,提高对核临界事故的分析精度,为乏燃料后处理厂提供技术保障。为此,本文针对乏燃料溶液 系统特性,基于零维超细群截面制作与全问题并群方法、预估-校正准静态中子动力学计算方法和二维轴对称热 工-辐解气体模型,开发了相应的计算程序模块,最终形成了一套具备并行功能的三维乏燃料溶液系统临界安全 分析程序 hydra-TD。进一步利用该程序对法国 SILENE 实验装置进行了验证,结果显示:第一裂变功率峰、倍增 时间、总裂变次数等关键参数的误差较小,证明 hydra-TD程序正确模拟了燃料溶液系统临界过程中的多物理过 程,具备临界安全分析的能力。

关键词 乏燃料溶液,临界安全,瞬态分析,多物理耦合 中图分类号 TL942 DOI: 10.11889/j.0253-3219.2023.hjs.46.010601

Critical safety analysis method of spent fuel solution system

YIN Huabei¹ WANG Yongping¹ GOU Junli¹ LIU Guoming² ZU Tiejun¹ YIN Wen¹ ZHENG Youqi¹ DU Xianan¹

1(Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

2(China Nuclear Power Engineering Co., Ltd., Beijing 100840, China)

Abstract [Background] Nuclear critical safety analysis is the key technology to ensure the safety of spent fuel reprocessing plant. However, the present critical safety analysis codes for solution system are either limited in the geometric scope of application, or have poor engineering practicability due to low computational efficiency. [Purpose] This study aims to develop a method suitable for wide application range and high accuracy for nuclear critical safety analysis, so as to provide technical support for spent fuel reprocessing plant. [Methods] According to the characteristics of spent fuel solution system, a set of methods, such as the zero-dimension cross-section calculation and whole system group condensation model, the three-dimensional space-time neutron dynamics model based on PCQS, and the R-Z two dimensional thermal and radiolysis gas simulation model, were combined to establish a paralleled 3D critical safety analysis code hydra-TD. In addition, some experiments of SILENE facility at France were modeled and calculated by using hydra-TD code to verify its effectiveness. [Results] The verification results indicate that there are very small errors of key parameters such as the first fission power peak, multiplication

第一作者:银华北,男,1999年出生,2019年毕业于西安交通大学,现为博士研究生,研究领域为核反应堆物理

通信作者: 王永平, E-mail: wangyongping0627@xjtu.edu.cn

收稿日期: 2022-04-20, 修回日期: 2022-08-04

First author: YIN Huabei, male, born in 1999, graduated from Xi'an Jiaotong University in 2019, doctoral student, focusing on reactor physics Corresponding author: WANG Yongping, E-mail: wangyongping0627@xjtu.edu.cn

Received date: 2022-04-20, revised date: 2022-08-04

time and total fission times. **[Conclusion]** The code hydra-TD developed in this study can be applied to simulation of the multi-physics processes in the critical transients of the fuel solution, hence has the ability of critical safety analysis.

Key words Spent fuel solution, Critical safety, Transient analysis, Multi-physics coupling

为实现我国闭式循环目标,自主发展后处理技术、修建后处理厂具有重要意义。由于乏燃料后处 理过程中核燃料会发生固-液相变、富集等复杂过 程,涉及众多设备和环节,存在发生系统达临界事故 的风险。因此,在乏燃料后处理厂中,对核临界事故 的预防和防护,是保证核安全的关键内容。

在乏燃料溶液系统的临界事故中,临界瞬间功 率快速上升,伴随剧烈的辐解、相变传质过程,针对 固体燃料的核反应堆堆芯瞬态分析程序无法模拟上 述过程。传统的核临界安全事故分析方法采用经验 公式估计裂变次数,精度及适用范围有限。

针对溶液系统的上述特征,国内外机构开展了 瞬态分析研究。英国原子能委员会首先发布了 CRITEX程序,将溶液罐视作圆管,沿轴向分层进行 一维热工水力-辐解气体计算,与点堆动力学耦合进 行瞬态分析。法国与日本分别利用其溶液系统临界 实验装置 SILENE^[1]与 TRACY^[2]进行实验研究溶液 系统临界事故下的功率释放与溶液变化,并开发了 AGNES2^[3]、TRACE^[4]、FECTH^[5]等程序。其中, TRACE与AGNES2程序由日本原子能研究所先后 开发,其中子学均采用点堆动力学计算,而热工-水 力采用 R-Z 二维轴对称模型,将溶液对流近似等效 为导热,二者区别在辐解气体模型,TRACE程序基 于CRITEX模型,将气泡速度近似为仅功率变化有 关的函数,而AGNES2程序由气泡在溶液中的受力 平衡导出气泡速度关系式;AGNES2程序在实验验 证中精度优于 TRACE 程序。FETCH 程序由法国开 发,采用球谐函数展开下的有限元方法进行中子学 计算,并直接使用两相流计算流体力学 (Computational Fluid Dynamics, CFD)软件进行热工 水力-辐解气体建模计算,且考虑了溶液流动对缓发 中子先驱核分布的影响,其验证结果与实验值符合 较好,然而由于采用了CFD模型,导致计算效率低, 工程实用性差。

中国核电工程公司开发了CACCS程序^[6],动力 学计算采用点堆模型,热工水力与辐解气体模型与 AGNES2程序相似。清华大学开发了TCCHAR程 序^[7],其中子学计算采用蒙特卡罗方法,热工模型采 用集总模型,辐解气体模型在考虑产生、流入与流出 的基础上还考虑了气泡大小在轴向的变化,其验证 结果与实验值误差在15%以内。然而,在瞬态计算 中,基于蒙特卡罗的中子学计算显然存在计算效率 低、瞬态中的小反应性变化易被统计方差淹没的 缺点。

可见,国内外现有程序中大部分采用点堆动力 学进行中子学计算,使用余弦函数与贝塞尔函数近 似系统内的功率分布与反应性反馈权重,其优势在 于计算效率高,然而由于大量乏燃料后处理的需求, 后续后处理工业示范厂规模大幅增加,势必加大溶 液处理设备容量。而大容量溶液处理设备为保证系 统安全大量布置控制毒物,并控制容器形状保证几 何安全,上述假设不再适用,势必引入误差,对乏燃 料存储策略、临界事故预防措施的制定带来不确定 性;此外,随着计算机科学的发展,三维计算模型的 计算时间逐渐下降至可接受范围内,基于时空动力 学的溶液系统瞬态分析程序变得可能,从而进一步 提高安全分析结论的可靠性。因此,开发一套几何 适用范围广、模型精度高的临界安全分析程序,对于 提高核临界事故的分析精度、保障乏燃料后处理厂 的安全具有重要的意义。

为此,本研究开发了一套用于溶液系统的确定 论并行三维瞬态分析程序Hydra-TD,主要包含截面 制作模块,中子动力学模块及热工-辐解气体模块, 其中中子动力学模块采用离散纵标并行输运程序计 算,在保持三维中子学计算几何适用性广、分辨率高 的优点的同时保证中子学计算效率;热工水力-辐解 气体模块在AGNES2模型基础上进行简化以加速 计算;热工水力-辐解气体-中子学耦合中考虑了溶 液的膨胀、辐解气体对热散射的影响等因素,增加耦 合精度。将程序与SILENE实验数据进行对比验证 的结果误差较小,显示程序具备临界安全分析的 能力。

本文对研究工作分为三个部分介绍,首先为程 序的理论模型,介绍中子学截面制作、时空动力学模 型和热工-辐解气体模型,以及中子学-热工水力-辐 解气体模型的耦合方法;随后利用法国 SILENE 实 验装置对本研究开发程序的模型进行了检验,其裂 变次数、裂变率等结果精度较高;最后所得结论为本 研究开发程序能够正确模拟瞬发临界第一裂变峰的 功率变化,但无法还原功率下降阶段的振荡,辐解气 体模型可能需要进一步改进。

1 理论模型

1.1 截面制作与产生

本文采用多群近似进行中子学计算,需要获取 溶液系统各材料各个状态的有效多群截面。多群截 面制作模块流程如下:

首先,使用核数据处理程序NECP-Atlas^[8],从评 价核数据库出发,进行共振重构及线性化处理、多普 勒展宽、不可分辨区有效自屏截面处理,热中子散射 计算和多群常数计算,制作问题无关的多群截面库; 然后,在非共振段使用温度和背景截面插值获得多 群参数,在共振能量段使用超细群方法求解均匀问 题的慢化方程,使用通量归并获得问题相关的多群 参数。

$$\sigma_{i,k,g} = \frac{\sum_{h \in g} \sigma_{i,k,h} \phi_{i,h}}{\sum_{h \in g} \phi_{i,h}}$$
(1)

共振计算中,针对超细群方法的特点,模块采用 了散射源加速及碰撞概率表插值以提高计算效率。 散射源加速方法下,为避免计算源项时进行大量超 细群的累加,每次计算时从上次的散射源中减去高 能群超过最高对数能降的散射源,加上低能群的散 射源:

$$S_{jg} = \exp(-\Delta u_{f})S_{j,g-1} + \sum_{k} \sum_{sjk,g-1} P_{1,k}\phi_{j,g-1} - \exp(-\Delta u_{f})(\sum_{k} \sum_{sjk,g-N_{k}-1} P_{N_{k},k}\phi_{j,g-N_{k}-1})$$
(2)

式中: S_{jg} 为j区域内其他能群散射至g能群的散射 源; Δu_f 为对数能群宽度: $\Sigma_{sk,g}$ 为j区域内k核素在g能群宏观散射截面; $P_{N_{k},k}$ 为中子穿越 N_k 个能群后与 核素k发生核反应的概率; ϕ_{jg} 是j区域g群通量。

为提高计算效率,多群截面制作模块产生 WIMS-69 群各材料微观截面后,使用 NECP-Hydra 程序^[9]进行一次溶液系统的稳态计算,使用全问题 能谱将各材料截面归并为适用于热谱堆芯的4群2 阶散射截面。在 STACY燃料溶液罐问题中的稳态 计算结果表明这一归并能够保持对系统有效增殖因 子*k*_{eff}及溶液内通量分布的计算精度,*k*_{eff}偏差为十万 分之十四,如表1所示;将溶液区轴向分为三层,径 向分为4层,分群统计其通量分布(按蒙特卡罗程序 输出的一个源中子的统计结果进行归一),所得分群 分布偏差最大为5%,如表2所示。

针对溶液系统的辐射分解现象,为考虑辐解气

表1 STACY问题 k_{eff}计算结果对比 Table 1 Comparison on calculated k_{eff} of STACY problem

	$k_{\rm eff}$	误差 Error / 10 ⁻⁵
蒙卡程序 Monte Carlo code	0.999 80	—
NECP-Hydra	0.999 66	-14

体对热散射的影响,上述计算时同时制作了游离氢的截面数据,在瞬态计算时将对应的辐解气体由水中氢转化为游离氢。

1.2 中子时空动力学计算

本文在中子时空动力学计算中采用预估-校正 准静态方法^[10],将中子通量密度与缓发中子先驱核 密度分解为幅值与形状函数分别求解,在大时间步 上求解空间形状分布,从而减少输运求解次数节省 计算时间。

在多群、预估校正准静态的离散下,幅函数满足 精确点堆方程,其具体形式见文献[10],求解时,中 子密度方程采用全隐式向后差分离散,缓发中子先 驱核方程对其右端产生项 $\bar{\beta}_{a}(t)n(t)/\Lambda(t)$ 采用亚当 斯方法离散,即作二阶插值多项式在 $[t_{n},t_{n+1}]$ 内积 分,其余项采用解析积分;中子通量密度形状函数的 求解采用全隐式向后差分,需要求解的方程形式与 有源次临界问题类似。

在输运方程的求解上,为保证计算效率,本文采 用圆柱几何*r-θ-z*六面体网格下的KBA(Koch-Baker-Alcouffe)并行离散纵标(S_N)方法,基于 NECP-Hydra程序^[9]完成开发。在KBA并行算法 下,输运问题被空间区域分解,根据各个S_N角度上的 空间依赖关系,依次在各个并行单元上逐层逐角度 启动扫描,如图1所示。KBA并行算法能避免迭代 格式退化,是结构几何下并行效率最高的算法之一。 在 500×500×500 网格的输运问题中,NECP-Hydra 在 百核下能保持90%的并行效率。

除NECP-Hydra中已经采用的切比雪夫外推加速、扩散综合加速方法^[11]外,针对上述时间相关固定源问题,本文还采用了如下加速方法^[12]:

1)对固定源项归一:
$$\boldsymbol{S} = \langle \boldsymbol{S} \rangle \boldsymbol{S}_0$$
 (3)

式中:**S**₀为外中子源的归一化形状分布;〈·〉为在问题相空间区域内积分值。

2)进行类似于幂法的迭代过程直至迭代收敛。

$$\boldsymbol{M}\boldsymbol{\psi}^{j+1} = \boldsymbol{F}\boldsymbol{\psi}^{j} + \frac{1-k_j}{k_j} \left\langle \boldsymbol{F}\boldsymbol{\psi}^{j} \right\rangle \boldsymbol{S}_0 \tag{4}$$

$$k_{j} = k_{j-1} \frac{\left\langle F\psi^{j} \right\rangle}{\left\langle F\psi^{j-1} \right\rangle} \tag{5}$$

式中:M为包含泄漏、消失与散射贡献的输运算子;

Tab	ble 2 Comparison on cal	Comparison on calculated neutron flux distribution of STACY problem				
程序Program	能群	溶液分区通量				
	Energy group	Distributed neutr	Distributed neutron flux in solution area / $n \cdot cm^{-2} \cdot s^{-1}$			
蒙特卡罗程序	1	8.953 20×10 ⁻²	1.439 90×10 ⁻¹	1.414 48×10 ⁻¹	7.617 25×10 ⁻²	
Monte Carlo code		6.927 32×10 ⁻²	1.112 82×10 ⁻¹	1.095 87×10 ⁻¹	5.956 68×10 ⁻²	
		3.645 34×10 ⁻²	5.825 81×10 ⁻²	5.749 10×10 ⁻²	3.197 74×10 ⁻²	
	2	9.104 06×10 ⁻²	$1.434\ 08{ imes}10^{-1}$	$1.409\ 48{ imes}10^{-1}$	7.444 57×10 ⁻²	
		7.029 00×10 ⁻²	1.110 32×10 ⁻¹	1.092 43×10 ⁻¹	5.826 82×10 ⁻²	
		3.694 98×10 ⁻²	5.816 49×10 ⁻²	5.729 14×10 ⁻²	3.139 46×10 ⁻²	
	3	9.066 44×10 ⁻²	1.437 66×10 ⁻¹	1.411 14×10 ⁻¹	7.497 01×10 ⁻²	
		7.006 13×10 ⁻²	1.111 12×10 ⁻¹	1.093 59×10 ⁻¹	5.861 73×10 ⁻²	
		3.669 91×10 ⁻²	5.796 70×10 ⁻²	5.715 79×10 ⁻²	3.140 31×10 ⁻²	
	4	8.822 74×10 ⁻²	1.438 11×10 ⁻¹	1.411 90×10 ⁻¹	7.347 63×10 ⁻²	
		6.804 80×10 ⁻²	1.112 11×10 ⁻¹	1.094 47×10 ⁻¹	5.762 37×10 ⁻²	
		3.687 82×10 ⁻²	5.989 44×10 ⁻²	5.906 72×10 ⁻²	3.217 90×10 ⁻²	
Hydra-TD	1	8.893 49×10 ⁻²	1.430 69×10 ⁻¹	$1.409~08 \times 10^{-1}$	7.633 48×10 ⁻²	
		-0.67^{a}	-0.64	-0.38	0.21	
		6.928 94×10 ⁻²	1.114 53×10 ⁻¹	1.109 90×10 ⁻¹	5.998 15×10 ⁻²	
		0.02	0.15	1.28	0.70	
		3.651 91×10 ⁻²	5.853 72×10 ⁻²	5.783 47×10 ⁻²	3.231 19×10 ⁻²	
		0.18	0.48	0.60	1.05	
	2	8.955 94×10 ⁻²	1.426 38×10 ⁻¹	$1.404 \ 80 \times 10^{-1}$	7.530 31×10 ⁻²	
		-1.22	-0.78	-0.45	0.44	
		6.978 08×10 ⁻²	1.111 12×10 ⁻¹	1.109 57×10 ⁻¹	5.920 75×10 ⁻²	
		-0.40	0.00	1.46	1.01	
		3.683 50×10 ⁻²	5.849 44×10 ⁻²	5.779 08×10 ⁻²	3.205 69×10 ⁻²	
		0.37	0.91	1.11	2.08	
	3	8.849 48×10 ⁻²	1.430 54×10 ⁻¹	1.408 86×10 ⁻¹	7.471 50×10 ⁻²	
		0.30	-0.53	-0.22	1.69	
		6.895 78×10 ⁻²	1.114 57×10 ⁻¹	1.109 90×10 ⁻¹	5.880 21×10 ⁻²	
		1.34	0.22	1.41	2.04	
		3.683 92×10 ⁻²	5.931 02×10 ⁻²	5.859 74×10 ⁻²	3.231 69×10 ⁻²	
		-0.11	-0.98	-0.80	0.43	
	4	8.614 65×10 ⁻²	1.428 87×10 ⁻¹	1.407 19×10 ⁻¹	7.390 26×10 ⁻²	
		-5.38	-0.36	-0.16	-0.73	
		6.713 29×10 ⁻²	1.113 35×10 ⁻¹	1.109 77×10 ⁻¹	5.823 73×10 ⁻²	
		-4.49	0.27	1.59	-0.05	
		3.674 54×10 ⁻²	6.055 55×10 ⁻²	5.983 02×10 ⁻²	3.290 58×10 ⁻²	
		-0.55	4.11	4.43	4.81	

银华北等: 乏燃料溶液系统临界安全分析计算方法研究

表2 STACY问题溶液区分群通量计算结果对比

注: "Hydra-TD 相对于蒙特卡罗程序的偏差,% Note: "The relative error between Hydra-TD and Monte Carlo code,%

F为裂变源算子。在瞬态计算过程中,每次输运计 算的通量矩分布、k特征值都被保留,作为下次计算 的迭代初值,在通量形状变化不大时可大幅减少迭 代次数。

对于精确点堆方程系数及形状函数方程时间相 关项中的角度相关项,本文采用与离散纵标方法内 部储存一致的PN通量矩展开表示,即:

$$\frac{\psi_g(\boldsymbol{\Omega}, t_n)}{v_g \Delta t_{n+1}} = \frac{1}{v_g \Delta t_{n+1}} \sum_{k=1}^{N} \sum_{l=-k}^{k} \phi_g^{k,l}(t_n) Y_k^l(\boldsymbol{\Omega})$$
(6)

$$\int_{4\pi} \psi_g^*(\boldsymbol{\Omega}) \Sigma_{x,g} \tilde{\psi}_g(\boldsymbol{\Omega}) d\boldsymbol{\Omega} = \Sigma_{x,g} \sum_{k=1}^N \sum_{l=-k}^k \tilde{\phi}_g^{k,l} \phi_g^{*k,l} \qquad (7)$$



图1 KBA并行算法示意图 Fig.1 Diagram of KBA parallel sweep algorithm

$$\int_{4\pi} \psi_g^*(\boldsymbol{\Omega}) \int_{4\pi} \Sigma_{s,g} (\boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}) \tilde{\psi}_g(\boldsymbol{\Omega}') d\boldsymbol{\Omega}' d\boldsymbol{\Omega} = \sum_{k=1}^N \Sigma_{s,g,k} \sum_{l=-k}^k \tilde{\phi}_g^{k,l} \phi_g^{*k,l}$$
(8)

为使形式简洁,方程(6)省去了空间变量,方程 (7)、(8)省去了时间和空间变量。其中: $\phi_{g}^{k,l}$ 为g能群 k,l阶通量矩; $Y_{k}^{l}(\Omega)$ 为对应的球谐函数; ψ_{g}^{*} 为求解 系统稳态共轭输运方程得到的共轭角通量; $\tilde{\psi}_{g}$ 为归 一化后的中子角通量形状函数。

由于瞬态过程中系统各处的溶液组分随时变 化,为便于考虑溶液的各种物理变化,本研究使用微 观截面进行中子动力学计算,在每个时间步按当地 温度插值获得各核素的微观截面,随后结合当前区 域的核子密度计算得到宏观截面,代入中子输运模 块求解。

1.3 热工-辐解气体计算

在溶液系统临界过程中,由于功率升高,溶液温 度上升,体积、浓度也发生变化。同时,裂变反应产 生的高能碎片与燃料溶液中的分子发生碰撞,产生 辐照裂解气体(H₂、O₂、N₂等),并形成微泡;此外,中 子和伽马射线一并与分子的相互作用对辐解气体的 产生亦有贡献^[1]。上述因素在瞬态过程中影响热散 射、多普勒效应及核子密度分布,其计算精度关系到 中子输运计算精度。

对于溶液中辐解气体计算,经调研国内外相关 研究,本文参考AGNES2程序^[3]的模型,建立如下气 泡输运方程:

$$\frac{\partial F_{ij}}{\partial t} = v_t \cdot P_{ij} \cdot \left(C_{ij} - C_0\right) \cdot \theta\left(C_{ij} - C_0\right) - v_{ij} \frac{\partial F_{ij}}{\partial z}(9)$$
$$\frac{\partial C_{ij}}{\partial t} = G \cdot P_{ij} \cdot \left(C_{ij} - C_0\right) \cdot \theta\left(C_{ij} - C_0\right) - \frac{C_{ij}}{F_{ij}}\left(v_{ij} \frac{\partial F_{ij}}{\partial z}\right) - \frac{\partial C_{ij}}{\partial \tau}$$
(10)

式中: $F_{i,j}$ 为(i,j)控制体内的空泡体积份额; v_i 为能量 转换系数,m⁶·J⁻¹·mol⁻¹, $P_{i,j}$ 为控制体内功率密度, W·m⁻³; $C_{i,j}$ 为控制体内辐解气体浓度,mol·L⁻¹; C_0 为 辐解气体临界释放浓度; θ 为单位阶跃函数; $v_{i,j}$ 为气 泡轴向迁移速度,m·s⁻¹;G为辐解气体产生率, mol·J⁻¹; τ 为气体溶解时间。

上述方程中的未知量,除空泡体积份额、辐解气体量外,还包括气泡迁移速度。然而,溶液中辐解气体气泡的迁移过程受溶液对流、相间曳力、浮升力、 气泡的生长、合并、溶解、破裂等多种因素影响,精确 模拟其运动需进行精细建模的两相流数值计算,将 极大影响计算效率。为此,本文中的辐解气体迁移 速度采用近似关系式,通过一系列预先选取的两相 流工况数值计算结果对当地功率密度、当地溶液动 力学黏度与当地压力等因变量拟合得到。

对于系统热工计算,本文在溶液区及容器区分 别计算导热,并在区域交界面上将对流、辐射换热等 效为导热系数进行计算:

$$\rho C_{\rm p} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda_{\rm eff} r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_{\rm eff} \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \dot{\Phi}$$
(11)

式中: ρ 为材料密度; C_p 为定压比热;T为温度; λ_{eff} 为导热系数或等效导热系数; ϕ 为体积热源即功率密度。

1.4 耦合方法

在耦合计算中,中子动力学模块求解获得各个时刻的功率分布,热工-辐解气体模块求解获得各个时刻的温度、质量密度及辐解气体浓度分布,两者通过耦合接口按体积或质量权重转化为所需网格上的分布;质量密度与辐解气体浓度分布通过如下计算转化为中子学计算所需的核子密度。

$$N_{\text{inuc} \in 1}(t_{i+1}) = \varepsilon_1 \frac{\rho_1(t_{i+1})}{\rho_{1,0}} N_{\text{inuc} \in 1,0} - G \int_0^{t_{i+1}} \dot{\Phi}(\tau) d\tau N_A \delta_{\text{inuc},\text{igas} \in 1 \text{ to gas}} n_{\text{igas} \in \text{ gas}}$$
(12)
$$N_{\text{inuc},\text{igas}}(t_{i+1}) = N_A c_{\text{gas}}(t_{i+1}) n_{\text{inuc},\text{igas}}$$
(13)

式中: N_{inuc} 为核素密度,1表示溶液初始包含核素的集合; ϵ_i 为网格内溶液体积份额;G为辐解气体产生率, mol·J⁻¹; $\dot{\phi}$ 为功率密度; N_A 为阿伏伽德罗常数; δ 为Kronecker符号,仅当下标相同时为1,其余时刻为0;1 to gas表示溶液中辐解为气体的核素集合; $n_{igasegas}$ 为辐解气体平均每分子内各核素的原子数; c_{gas} 为辐解气体的摩尔浓度分布。上式的物理含义为溶液在升温膨胀的同时被辐解使一部分核素析出并转移, 其核素密度按物质的量混合至当地网格内,如图2所示。

此外,随溶液膨胀与辐解气体析出,溶液液位将 发生变化。耦合计算中,热工-辐解气体模块根据溶 液受热膨胀后密度与辐解气体所占体积得出总体 积,从而得出溶液液位,耦合接口中结合液位在上溢 网格内获得当地溶液与空气的体积份额,随后利用 当地溶液质量密度获得当地核素密度,以考虑该 效应:

$$N_{\text{inuc } \in 1}(t_{i+1}, \mathbf{r} \in V_{\text{overflow}}) = \varepsilon_1 \frac{\rho_1(t_{i+1}, \mathbf{r} \in V_{\text{overflow}})}{\rho_{1,0}} N_{\text{inuc } \in 1,0} - G \int_0^{t_{i+1}} \dot{\Phi}(\tau) \, \mathrm{d}\tau N_{\text{A}} \delta_{\text{inuc, igas } \in 1 \text{ to gas}} n_{\text{igas } \in \text{ gas}}$$
(14)

$$N_{\text{inuc } \in \text{ air}} \left(t_{i+1}, \mathbf{r} \in V_{\text{overflow}} \right) = \varepsilon_{\text{air}} \frac{\rho_{\text{air}} \left(t_{i+1}, \mathbf{r} \in V_{\text{overflow}} \right)}{\rho_{\text{air},0}} N_{\text{inuc } \in \text{ air}}$$
(15)

式中: V_{overflow} 为发生溶液上溢的网格;air表示气体包含核素的集合; ε_{air} 为网格内空气体积份额; ρ_{air} 为当地空气密度。式(14)和(15)的物理含义为:在溶液由于膨胀上溢处将溶液与空气按各自的体积份额混合至当地网格,如图2所示。

本文在耦合中采用算子分裂方法,即将温度、辐 解气体场与中子场分离解耦,先后求解后更新至下 一时间步。算子分裂方法是对多物理非线性耦合问 题的线性化,其误差随时间步减小而减小。

本研究采用的计算流程如下:首先进行一次稳





Fig.2 Volume mixing operation when coupling neutronics with thermal-hydraulics / radiolysis gas

态前向计算,以获取初始边界条件;随后进行共轭计 算,以共轭通量作为准静态下分离形状函数与幅函 数的权重函数;进入瞬态计算后:

1)先更新截面进行预估求解,获取中子通量及 先驱核浓度的形状函数;

2)随后在大时间步内进行形状函数插值更新点 堆参数;

3)进行点堆求解获取校正通量及功率分布;

4)从而进行热工-辐解气体计算;

5)根据温度分布进行截面插值,根据质量密度 及辐解气体含量更新核素密度分布从而归并得到宏 观截面。

瞬态计算的时间步进流程如图3所示。



图 3)) 网络的间步进流性 Fig.3 Transient time stepping process of Hydra-TD

2 数值验证

按照§1的理论模型,本文编制了圆柱几何乏燃料溶液系统临界安全时空瞬态分析程序。为了验证 该程序的计算精度,对SILENE实验装置的部分实 验进行了建模计算。SILENE实验装置是一个硝酸 铀酰溶液的均匀实验堆(²³⁵U富集度达92.7%),位于 法国Burgundy的Valduc中心,主要用于临界事故研究,但还可以用于核加热、剂量测量、临界训练。堆芯在一个很大的混凝土房间中央,是一个小的环形水槽,如图4所示。不锈钢容器高度为1m,外径360/368 mm,外壁厚度4 mm,内径70/76 mm,内壁厚度3 mm,底部厚度36 mm,顶部厚度30 mm。反

应性引入棒为环形镉棒,厚度为1mm,内外均有1mm厚的不锈钢包壳,直径60/66mm,长度为1130mm^[1]。



图4 SILENE 实验装置纵截面示意图 Fig.4 Diagram of axial section of SILENE facility

计算设备采用 Linux 18.04 LTS 64 位系统,处理 器 是 Intel Xeon Gold 6230 2.10GHz,内存空间为 8 G,采用7个 CPU核心进行计算。中子学计算中, 划分的网格为*r-θ-z*方向24×1×210,角度采用层对称 S4求积组。热工辐解气体计算中,对容器壁的网格 进行细化,对容器上部空气部分网格进行粗化,其网 格为*r-z*方向54×134。设置临界浓度为10 mol·m⁻³, 辐解气体产生率为1.5×10⁻⁷ mol·J⁻¹,能量转换系数为 $1 \times 10^{-7} \text{ mol} \cdot J^{-1[3]}$

本文所计算实验为S2-300实验,其初始液位高度为38.91 cm,通过以2 cm·s⁻¹的速度提升反应性引入棒,共引入约0.97 \$的反应性。对该问题进行时间步长敏感性分析,分别在脉冲阶段取大时间步为62.5 ms、31.25 ms、20 ms 下计算,其裂变率曲线对比如图5所示,时间步为31.25 ms与20 ms 的裂变率曲线已重合,可见在脉冲阶段取大时间步为31.25 ms能够使结果收敛。计算结果与实验测量结果的对比如图6所示,溶液高度、温度及空泡份额的变化和反应性变化绘于图7。随着反应性引入,系统功率开始指数上升,使溶液温度上升,密度下降,溶液高度升高;同时辐解气体开始积累,到达临界浓度后析出,使反应性快速下降。









计算获得的裂变率曲线趋势在第一功率峰处与 实验值曲线一致,平均温度曲线位于实验值波动区 间内。计算值与实验值的详细对比列于表2,峰值 裂变率误差为22%,总裂变次数、峰值前裂变次数、 功率倍增时间与峰值时间的误差分别为10%、2%、 4%和3%,均在10%以内,以上结果表明,程序正确 模拟了瞬态过程中溶液系统的复杂的多物理过程。 然而,由图6(b)中与实验值的比较结果可知, 现阶段程序还无法精确模拟第一裂变峰后的功率振荡,因此未能模拟第二裂变峰,计算所得溶液温度在 第二裂变峰后偏低,功率下降偏慢。由图7中空泡 反应性反馈与空泡份额的变化可知,可能的原因是 程序高估了空泡的反馈,或对气泡迁移速度存在低 估,使负反馈偏强,这将在后续重点研究和改进。



图7 S2-300实验反应性与溶液变化计算结果 Fig.7 Calculated results of reactivity and variation of solution system for S2-300 experiment

表3 S2-300 实验功率变化特性计算结果 Table 3 Calculated power feature of S2-300 experiment

实验值 Experiment	计算值 Calculated	C/E
1.7×10^{16}	2.08×10 ¹⁶	1.22
4.2×10^{16}	4.61×10 ¹⁶	1.10
1.3×10^{16}	1.28×10 ¹⁶	0.98
0.130	0.125	0.96
9.5	9.17	
	实验值 Experiment 1.7×10 ¹⁶ 4.2×10 ¹⁶ 1.3×10 ¹⁶ 0.130 9.5	实验值Experiment计算值Calculated1.7×10 ¹⁶ 2.08×10 ¹⁶ 4.2×10 ¹⁶ 4.61×10 ¹⁶ 1.3×10 ¹⁶ 1.28×10 ¹⁶ 0.1300.1259.59.17

3 结语

本文基于超细群共振方法、预估-校正准静态方 法及导热微分方程与辐解气体输运方程,开发了一 套用于圆柱几何溶液系统的临界安全分析的并行三 维瞬态分析程序,并对 SILENE 实验装置的 S2-300 实验进行了建模计算,结果表明,程序能够正确模拟 瞬发临界第一裂变峰的功率变化;程序现阶段无法 还原 S2-300 的在第一裂变峰后的功率振荡现象,由 溶液空泡份额下降较慢得知可能是辐解气体相关模 型的影响,这部分内容将在后续工作中重点研究和 改进。

致谢 本文研究内容受国防科工局乏燃料后处理科 研专项中"后处理厂核临界安全事故研究"项目资 助,特此致谢。

作者贡献声明 银华北:程序开发、验证计算、结果 分析、起草文章;王永平:程序开发及理论指导,文章 整体设计和修改;苟军利:热工水力-辐解气体模块 开发;刘国明:提供实验数据,结果分析;祖铁军:截 面模块程序开发及理论指导;尹文:截面制作程序模 块开发;郑友琦:三维时空动力学程序开发理论指导;杜夏楠:程序截面模块验证指导。

参考文献

- Francis B. SILENE reactor: results of selected typical experiments[R]. Cea Institut De Protection Et De Surete Nucleaire (France), 1994.
- 2 Nakajima K, Yamane Y, Ogawa K, et al. TRACY transient experiment databook. 1) pulse withdrawal experiment[R]. Japan Atomic Energy Research Institute, 2002.
- 3 Yamane Y, Nakajima K, Yamamoto T, et al. Development of criticality accident analysis code AGNES[R]. Japan Atomic Energy Research Institute, 2003.
- 4 Basoglu B, Yamamoto T, Okuno H, et al. Development of a new simulation code for evaluation of criticality transients involving fissile solution boiling[R]. Japan Atomic Energy Research Institute, 1998.
- 5 Pain C C, de Oliveira C R E, Goddard A J H, *et al.* Nonlinear space-dependent kinetics for the criticality assessment of fissile solutions[J]. Progress in Nuclear

Energy, 2001, **39**(1): 53 - 114. DOI: 10.1016/S0149-1970 (01)00003-8.

6 于淼, 霍小东, 刘国明, 等. 圆柱形溶液系统临界事故分析程序研制与验证[J]. 核动力工程, 2014, 35(S2): 170 - 172. DOI: 10.13832/j.jnpe.2014.S2.0170.

YU Miao, HUO Xiaodong, LIU Guoming, *et al.* Development and validation of cylindrical solution system criticality accident analysis program[J]. Nuclear Power Engineering, 2014, **35**(S2): 170 – 172. DOI: 10. 13832/j.jnpe.2014.S2.0170.

- 7 汪量子.溶液堆的蒙特卡罗方法物理计算模型及特性研究[D].北京:清华大学,2011.
 WANG Liangzi. Physics calculation model based on Monte Carlo method and characteristics analysis of aqueous homogeneous reactors[D]. Beijing: Tsinghua University, 2011.
- 8 Zu T J, Xu J L, Tang Y Q, et al. NECP-Atlas: a new nuclear data processing code[J]. Annals of Nuclear Energy, 2019, 123: 153 - 161. DOI: 10.1016/j. anucene. 2018.09.016.
- 9 Wang Y P, Zheng Y Q, Xu L F, et al. NECP-hydra: a high-

performance parallel S_N code for core-analysis and shielding calculation[J]. Nuclear Engineering and Design, 2020, **366**: 110711. DOI: 10.1016/j. nucengdes. 2020. 110711.

- 10 Dulla S, Mund E H, Ravetto P. Accuracy of a predictorcorrector quasi-static method for space-time reactor dynamics[C]. International Conference on the Physics of Reactors, Vancouver, Canada, September 10-14, 2006.
- 11 Xu L F, Shen H Y, Wei J X, et al. A parallel DSA algorithm in the 3-D cylindrical geometry[J]. Annals of Nuclear Energy, 2020, 140: 107236. DOI: 10.1016/j. anucene.2019.107236.
- Raskach K F, Korobeinikov V V. Effective algorithm for calculation of a subcritical reactor with an external source [J]. Atomic Energy, 1998, 85(6): 911 915. DOI: 10.1007/BF02361124.
- 13 Lane J A, MacPherson H G, Maslan F. Fluid fuel reactors: molten salt reactors, aqueous homogeneous reactors, fluoride reactors, chloride reactors, liquid metal reactors and why liquid fission[M]. V20181227c. USA: Addison-Wesley Publishing Company, 2018.