

LAPPEENRANNAN TEKNILLINEN YLIOPISTO
TEKNILLINEN TIEDEKUNTA
ENERGIATEKNIIKAN KOULUTUSOHJELMA

Ville Rintala

Monte Carlo -reaktorifysiikkalaskennan ja
laskennallisen virtausmekaniikan kytkentä
kuulakekoreaktorissa

Tarkastajat: Professori TkT Riitta Kyrki-Rajamäki
DI Heikki Suikkanen
Ohjaaja: DI Heikki Suikkanen

TIIVISTELMÄ

Lappeenrannan teknillinen yliopisto
Teknillinen tiedekunta
Energiatekniikan koulutusohjelma

Ville Rintala

Monte Carlo -reaktorifysiikkalaskennan ja laskennallisen virtausmekaniikan kytkentä kuulakekoreaktorissa

Diplomityö

2011

115 sivua, 27 kuvaa, 13 taulukkoa ja 2 liitettä.

Tarkastajat: Professori TkT Riitta Kyrki-Rajamäki
DI Heikki Suikkanen

Ohjaaja: DI Heikki Suikkanen

Hakusanat: Monte Carlo, Serpent, korkealämpötilareaktori, kuulakekoreaktori, reaktorifysiikka, termohydrauliikka, kytketty laskenta

Monte Carlo -reaktorifysiikkakoodit nykyisin käytettävissä olevilla laskentatehoilla tarjoavat mielenkiintoisen tavan reaktorifysiikan ongelmien ratkaisuun. Neljännen sukupolven ydinreaktoreissa käytettävät uudet rakenteet ja materiaalit ovat haasteellisia nykyisiin reaktoreihin suunnitelluille laskentaohjelmille. Tässä työssä Monte Carlo -reaktorifysiikkakoodi ja CFD (Computational Fluid Dynamics) -koodi yhdistetään kytkettyyn laskentaan kuulakekoreaktorissa, joka on yksi korkealämpötilareaktoryyppi. Työssä käytetty lähestymistapa on uutta maailmankin mittapuussa ajateltuna.

ABSTRACT

Lappeenranta University of Technology
Faculty of Technology
Degree programme in Energy Technology

Ville Rintala

Coupling of Monte Carlo reactor physics and computational fluid dynamics in case of pebble bed reactor

Master's thesis

2011

115 pages, 27 figures, 13 tables and 2 appendices.

Examiners: Professor D.Sc (Tech.) Riitta Kyrki-Rajamäki
M.Sc. (Tech.) Heikki Suikkanen

Supervisor: M.Sc. (Tech.) Heikki Suikkanen

Keywords: Monte Carlo, Serpent, High temperature reactor, Pebble bed reactor, reactor physics, thermal hydraulics, code coupling

Monte Carlo reactor physics codes with calculation power available today offers exciting way to study reactor physics problems. Generation IV nuclear reactors are challenging old codes as structure and materials of reactor core can differ significantly from traditional reactors. In this study Monte Carlo reactor physics code and CFD (Computational Fluid Dynamics) code are coupled in case of Pebble bed reactor, a one type of HTR (High Temperature Reactor). This kind of approach for coupling is considered a new one even if compared internationally.

Sisältö

Symboliluettelo	5
Lyhenteet	7
Taulukot	9
Kuvat	10
Alkusanat	12
1 Johdanto	13
2 Ydinreaktori	15
2.1 Ydinreaktiot	15
2.1.1 Fissioreaktio	15
2.1.2 Muut reaktiot	21
2.1.3 Reaktioiden vaikutusalat	22
2.2 Ydinreaktorin toiminta	23
2.2.1 Ketjureaktio	24
2.2.2 Tehonsäätö	25
2.2.3 Sammuttaminen ja jälkilämpöteho	27
2.2.4 Neutronien hidastuminen	29

2.2.5	Rakenteet	30
2.2.6	Reaktorityypit	30
2.3	Kuulakekoreaktori	32
2.3.1	Kuulakekoreaktorien historia	33
3	Ydinvoimalaitosten simulointi	35
3.1	Reaktorifysiikkalaskenta	35
3.1.1	Monte Carlo -menetelmät	35
3.1.2	Deterministiset menetelmät	36
3.1.3	Sovelluskohteet	38
3.1.4	Monte Carlo -reaktorifysiikka	39
3.1.5	Serpent	42
3.2	Termohydrauliikkalaskenta	43
3.2.1	Systeemikoodit	43
3.2.2	Laskennallinen virtausmekaniikka	44
3.2.3	Muu termohydrauliikkamallinnus	47
3.2.4	Menetelmien vertailu	48
3.3	Kytetty laskenta	48
3.3.1	Kytettä	49
3.3.2	Kytetyt koodit	50
3.3.3	Kuulakekoreaktoreihin soveltuvat koodit	50
3.3.4	Korkealämpötilareaktorien mallinnus	53
3.4	Polttoainekuulien pakkautuminen	54
4	Kytetty laskenta kuulakekoreaktorissa	55
4.1	Kytetyn laskennan kulku	55

4.2	Laskentakoodilla tapahtuva mallinnus	56
4.2.1	Reaktorifysiikkakoodit ja HTR-mallinnus	57
4.2.2	Ydinmateriaalitiedot	58
4.2.3	Termohydrauliikkamallinnus	60
4.2.4	Polttoainekuulien pakkautuminen ja virtaaminen	62
4.3	Mallien välinen tiedonsiirto	62
4.3.1	Tiedonsiirto keskipisteiden perusteella	63
4.3.2	Tehon tarkka jakaminen laskentakoppeihin	64
4.3.3	Koordinaatistot	66
4.4	Lämpötilamuutosten arviointi	66
4.4.1	Reaktorin lämpötilajakauma	67
4.4.2	Kuulan sisäinen lämpötilajakauma	70
4.4.3	Tasaiseksi oletettu lämpötila	72
4.5	Laskennan etenemisen seuranta	73
5	Monte Carlon ja CFD:n kytkentä kuulakekoreaktorissa	74
5.1	Lähtöoletukset ja rajoitukset	75
5.2	Soveltuvuus kuulakekolaskentaan	77
5.3	Rakenteiden mallintaminen	77
5.3.1	Reaktoriytimen mallintaminen	79
5.3.2	Polttoaineen mallintaminen	80
5.4	Virtauksen ja kuulien välinen lämpötilaero	82
5.5	KytKentäohjelma	83
5.5.1	Laskennan aloitusrutiinit	84
5.5.2	Iterointi	85
5.6	Laskentaympäristö ja lähtöoletukset	86

6 Tulokset	88
6.1 Kuulien ja jäähdytevirtauksen lämpötilat	88
6.2 Reaktorin tehojakauman laskeminen	89
6.3 Kytketyn laskennan tulokset	91
7 Johtopäätökset	100
7.1 Laskentatulokset	100
7.2 Kehityskohteet	102
8 Yhteenveto	104
Lähdeluettelo	105
A KytKentäsovelluksen lähdekoodi	116
B Materiaalien isotooppikoostumukset	117

Symboliluettelo

Latinalaiset

A	pinta-ala	m^2
$a \dots d$	vakioita	–
C_1, C_2	integroimisvakioita	–
c_p	ominaislämpökapasiteetti vakiopaineessa	$J/(kg\ K)$
d	halkaisija	m
E	energia	J, MeV
H	korkeus	m
h	lämmönsiirtokerroin	$W/(m^2\ K)$
j	Colburnin j-tekijä	–
k	lämmönjohtavuus	$W/(m\ K)$
N	laskenta-alueiden kokonaismäärä	–
Nu	Nusseltin luku	–
P	teho	W
Pr	Prandtlin luku	–
q'''	tehotiheys	W/m^3
r	säde	m
Re	Reynoldsin luku	–
St	Stantonin luku	–
T	lämpötila	$K, ^\circ C$
t	aika	s, d
V	tilavuus	m^3, cm^3
v	nopeus	m/s
W	painotus	–
X	muutos laskentakierrosten välillä	W, K
x	x-koordinaatti	m, cm
y	y-koordinaatti	m, cm
z	z-koordinaatti	m, cm

Kreikkalaiset

Φ	neutronivuo	$1/cm^2/s$
Σ	makroskooppinen vaikutusala	$1/cm$
ν	kinemaattinen viskositeetti	$kg/(s\ m)$

ρ	säde	cm
ε	huokoisuus (porositeetti)	—
φ	kiertokulma	°, rad

Alaindeksit

<i>c</i>	reaktorisydän	—
<i>f</i>	fissio	—
<i>g</i>	grafiitti	—
<i>i</i>	sisempi	—
<i>k</i>	keskipiste	—
<i>o</i>	ulompi	—
<i>p</i>	polttoainekuula	—
<i>r</i>	jälkilämpö	—
<i>s</i>	pysäytetty	—
<i>th</i>	lämpö	—
<i>t</i>	kokonais	—
<i>v</i>	aukko	—
\perp	kohtisuora	—
<i>m</i>	laskentakierros	—
<i>n</i>	laskentakoppi	—
<i>P</i>	teho	—
<i>T</i>	lämpötila	—

Lyhenteet

ACE	A Compact ENDF
APROS	Advanced PROcess Simulator
AVR	Arbeitsgemeinschaft VersuchsReaktor
BWR	Boiling Water Reactor
CANDU	CANada Deuterium Uranium
CATHARE	Code for Analysis of THERmalhydraulics during an Accident of Reactor and safety Evaluation
CEA	Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives
CFD	Computational Fluid Dynamics
DEM	Discrete Element Method
D-CMFD	Direct Coarse Mesh Finite Difference
ENDF	Evaluated Nuclear Data File
GFR	Gas-cooled Fast Reactor
HEXTRAN	HEXagonal TRANsient analysis code
HTR	High Temperature Reactor
HTGR	High Temperature Gas-cooled Reactor
IAEA	International Atomic Energy Agency
INL	Idaho National Laboratory
KAERI	Korean Atomic Energy Research Institute
KTA	KernTechnischer Ausschuss
LUT	Lappeenranta University of Technology
LWR	Light Water Reactor
MCNP	Monte Carlo N-Particle

MCNPX	Monte Carlo N-Particle eXtended
MCU	Monte Carlo Universal
MGT	Multi Group TINTE
MPI	Message Passing Interface
NEM	Nodal Expansion Method
PARCS	Purdue Advanced Reactor Core Simulator
PBMR	Pebble Bed Modular Reactor
PVM	Parallel Virtual Machine
PWR	Pressurized Water Reactor
RBMK	Reaktor Bolshoy Moshchnosti Kanalnyi
RELAP	Reactor Excursion and Leak Analysis Program
SMABRE	SMAll BREak accident analysis code
THTR	Thorium Hochtemperatur Reaktor
TINTE	TIme-dependent Neutronics and TEmpertures
TRAC	Transient Reactor Analysis Code
TRACE	TRAC/RELAP Advanced Computational Engine
TRISO	TRI ISOtropic
UDF	User Defined Function
VHTR	Very High Temperature Reactor
VSOP	Very Superior Old Programs
VTT	Teknologian tutkimuskeskus VTT
VVER	Vodo-vodjanoi energetitseski reaktor

Taulukot

2.1	U-235:n fissiossa vapautuva energia	20
2.2	Fissiossa hyötykäyttöön saatavissa oleva energia	20
5.1	Reaktorin rakenteiden mallinnuksessa käytetyt tiedot	79
5.2	Polttoainekuulan mallinnuksessa käytetyt tiedot	82
5.3	Polttoainepartikkelin mallinnuksessa käytetyt tiedot	82
5.4	Polttoainekuulan materiaalien lämmönjohtavuudet	83
5.5	Lämmönsiirtokertoimen arvioinnissa käytetyt lähtöarvot	83
5.6	Laskennan alkuarvot	87
6.1	Kuulakekoreaktorin lämmönsiirtokerroin ja lämpötilat	88
6.2	ASTRA-kriittisyyskoelaitoksen vertailulaskentaongelmien kasvutekijät	90
6.3	Neutronihistorioiden lukumäärän vaikutus laskentaan	91
6.4	Iteroinnin kehittyminen laskentakierroksilla	92
6.5	Kasvutekijä ja laskenta-aika	92

Kuvat

2.1	Fissioreaktio	16
2.2	Sidosenergia ydinhiukkasta kohti	17
2.3	Nuklidikartta	18
2.4	Halkeamistuotteiden osuus massalukua kohti	19
2.5	Neutronin aiheuttamat tärkeimmät ydinreaktiot	21
2.6	Uraanin vaikutusaloja	23
2.7	Doppler-leveneminen, lämpötilat järjestyksessä $T_1 > T_2 > T_3$	28
2.8	Polttoainekuulan rakennekuva	33
2.9	Polttoainepartikkelin (TRISO) rakenne	34
3.1	Kaavio Monte Carlo -simulaation neutronihistorian kulusta	40
3.2	Rakenteellinen ja rakenteeton laskentaverkko	47
4.1	Kytketyn laskennan pääosat	56
5.1	Kytkeyty laskenta kuulakekoreaktorissa	76
5.2	Yksinkertaistetun reaktorin rakenne	78
5.3	Fluentissa käytetty laskentaverkko	79
5.4	Serpentin laskentamalli leikattuna pystysuunnassa	81
6.1	Polttoainekuulan lämpötilajakauma	89
6.2	ASTRA-koelaitteistossa tapahtuvien fissioiden jakautuminen	90

6.3	Aksiaalinen tehojakauma	93
6.4	Radiaalinen tehojakauma	94
6.5	Kuulakohtaiset lämpötilat reaktorifysiikkaiteraatiossa	95
6.6	Kuulakohtaiset tehot reaktorifysiikkaiteraatiossa	95
6.7	Laskentakoppien lämpötilajakauma	96
6.8	Laskentakoppien tehojakauma	97
6.9	Laskentakoppien porositeettijakauma	97
6.10	Lämpötilajakauma pystysuunnassa leikatusta reaktorista	98
6.11	Nopeusjakauma pystysuunnassa leikatusta reaktorista	99

Alkusanat

Kiitän työni ohjaajaa ja toista tarkastajaa nuorempaa tutkijaa DI Heikki Suikkasta työn ohjauksesta ja tuesta tavoitteen saavuttamiseksi. Samoin kiitän työni tarkastajaa professori TkT Riitta Kyrki-Rajamäkeä kehittämisideoista ja kannustavasta työilmapiiristä.

Kiitos myös Suomen Akatemialle ja NETNUC-projektille mahdollisuudesta tehdä mielenkiintoinen ja haastava diplomityö. Lisäksi kuuluu myös kiitos Ydinvoimatekniikan laboratorion muulle henkilökunnalle, jotka osaltaan ovat auttaneet tavoitteen saavuttamisessa.

Lisäksi kiitän vanhempiani koko opiskeluajan jatkuneesta tuesta ja kannustuksesta. Kiitos myös Annastiinalle jatkuvasta tuesta tämän työn aikana.

Lappeenrannassa, 30.5.2011

Ville Rintala

1 Johdanto

Monte Carlo -reaktorifysiikka antaa uuden erilaisen mahdollisuuden mallintaa monia perinteisiä ongelmia ja tässä työssä sitä sovelletaan yhdessä laskennallisen virtausmekaniikan kanssa tuottamaan uudentyyppinen kytketty koodi kuulakekoreaktoreiden analyyseissa käytettäväksi. Perinteisesti analyyseihin käytetyt koodit ovat rajoittuneita ja niillä laskettaessa joudutaan tekemään merkittäviä yksinkertaistuksia. Kytettyä laskentaa tarvitaan ydinreaktoreissa useiden toisiinsa kytköksissä olevien ilmiöiden ratkaisuun.

Laskennallisen virtausmekaniikan käyttöä kuulakekoreaktorin mallinnuksessa oli tutkittu ydinvoimatekniikan laboratoriossa jo aiemmin Heikki Suikkasen tekemässä diplomityössä. Kyseisessä diplomityössä oli käytetty porositeettimallia kuulakeossa tapahtuvan lämmönsiirron tarkasteluun, mutta porositeettimallin virtausvastus ja reaktorin tehontuotto arvioitiin kirjallisuusarvojen pohjalta sopivien työkalujen puuttuessa niiden laskemiseksi. [74]

Tässä toisessa aiheeseen liittyvässä diplomityössä otettiin lähtökohdaksi pystyä laskemaan reaktorin tehontuotto ja käyttämään sitä Suikkasen diplomityössä tehtyyn termohydrauliikkalaskentamalliin tai sen parannettuun versioon lämpötilajakauman selvittämiseksi. Myös kuulakeon pakkautumisen mallintamiseen oli käytettävissä sopivia työkaluja, joita voitiin käyttää virtausvastuksen selvittämiseen. Tässä työssä olevan termohydrauliikkalaskentaan liittyvän mallin ja kuulakeon pakkaamisen teki Heikki Suikkanen.

Työssä tarkastellaan kuulakekoreaktorin kytketyn laskennan toteutusta ja siihen liittyviä ongelmia. Tähän työhön liittyen tehtiin myös konferenssipaperi ”An Approach for Detailed Reactor Physics Modelling of Randomly Packed Pebble Beds” HTR 2010 -konferenssiin [75]. Paperissa käsiteltiin kuulien pakkaamista ja Monte Carlo -koodilla laskemista tarkat kuulien paikat huomioiden, mikä on edellytys kytketyn laskennan aikaansaamiseksi tällä valitulla menetelmällä.

Ensimmäisenä käsitellään perusilmiöt, joista tarve kytketylle laskennalle ilmenee ja perehdytään nykyisiin laskentamenetelmiin. Tämän jälkeen käsitellään kuulakeko-reaktoriin liittyvän kytketyn laskennan yksityiskohtia ja toteutus.

2 Ydinreaktori

Ydinreaktorin rakentamisessa tarvitsee tuntea monenlaisia fysikaalisia ilmiöitä, jotka on otettava huomioon reaktorin suunnittelussa ja toisaalta reaktorin toimintaa simuloivissa laskentaohjelmissa. Tässä luvussa käsitellään ydinreaktorin toimintaperiaate ja tärkeimmät reaktorissa esiintyvät ilmiöt.

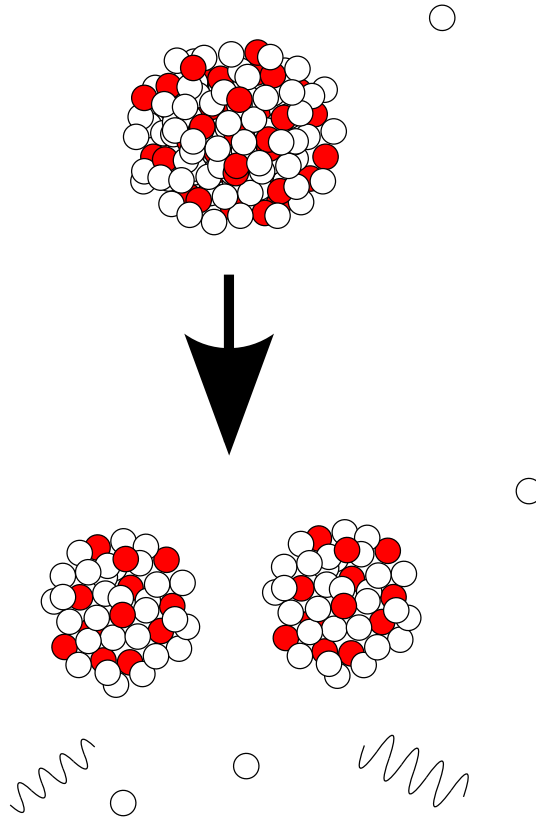
2.1 Ydinreaktiot

Perinteisessä ydinreaktorissa halkaistaan raskaita atomiytimiä fissioreaktioilla. Raskaat atomiytimet ovat joko maaperästä kaivettua uraania tai ydinreaktorin neutronisäteilyssä uraanista syntyneitä muita raskaita aineita, kuten plutoniumia tai muita aktinideja. Neutronit törmätessään näihin fissiileihin ytimiin voivat aiheuttaa fissioreaktioita, joissa vapautuu raskaiden atomiytimien sidosenergiaa. Tämä sidosenergia jakautuu fissioreaktiossa syntyvien fissiofragmenttien, kerkeiden neutronien ja gammahiukkasten kesken. Reaktiossa vapautuneet uudet neutronit voivat aiheuttaa uusia fissioreaktioita ja ylläpitää ketjureaktiota.

Fissiofragmentit ovat siis uraanin halkeamisen seurauksena syntyviä kevyempiä aineita ja ne ovat lähes poikkeuksetta radioaktiivisia. Jos verrataan eri aineiden stabiileiden ytimien neutronimääriä, niin raskaissa atomiytimissä on suhteessa enemmän neutroneita kuin kevyemmissä ytimissä keskimäärin [6, kuva 3-6]. Tästä taas seuraa fission yhteydessä, että syntyvät fissiofragmentit, keskiraskaat atomiytimet, sisältävät useimmiten liian paljon neutroneita ollakseen stabiileja [68, s. 8].

2.1.1 Fissioreaktio

Uraania neutroneilla pommitettuaan Hahn ja Strassmann löysivät jälkiä bariumista [21] ja tarkemmin fissioreaktiosta kertoivat näiden kokeiden pohjalta Meitner ja

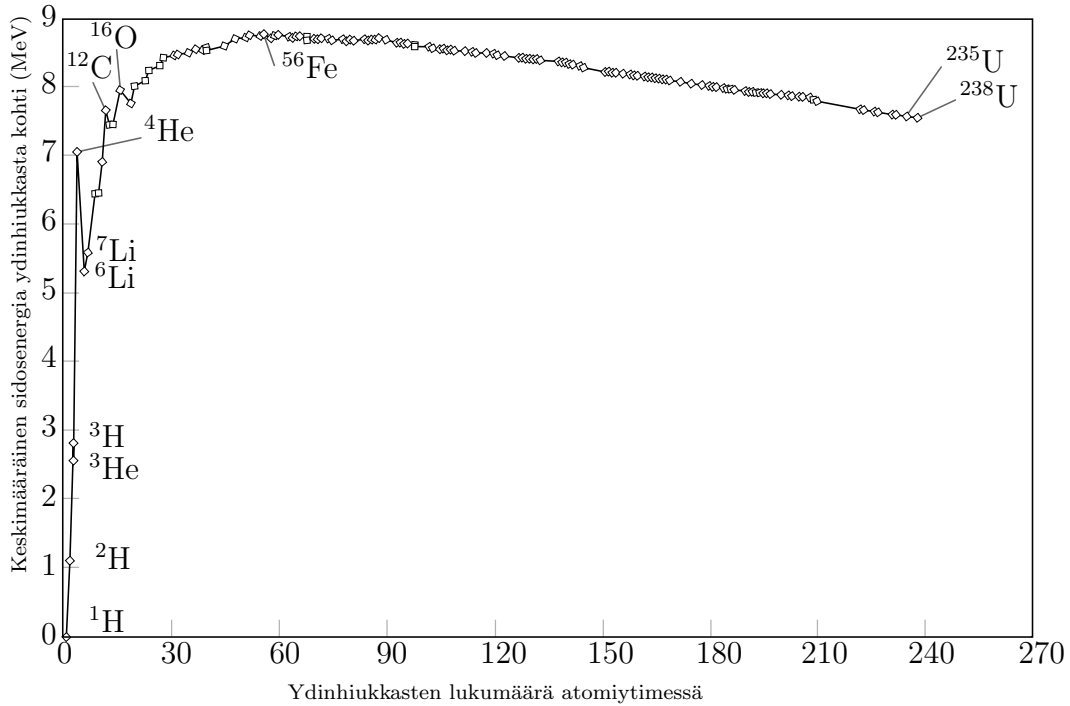


Kuva 2.1: Fissioreaktio

Frisch [47]. Heti tämän jälkeen ymmärrettiin ketjureaktion mahdollisuus fissioreaktioiden avulla, koska Szilárd oli pohtinut ketjureaktion mahdollisuutta neutronien avulla jo aiemmin [76]. Tapahtumat johtivat Manhattan-projektiin, ensimmäisten reaktorien rakentamiseen ja atomipommien kehittämiseen toisen maailmansodan aikana.

Fissioreaktioissa vapautetaan atomiytimissä olevien hiukkasten, nukleonien, sidosenergiaa. Sidosenergia on energian määrä, mikä tarvitaan vetämään nukleonit toisistaan erilleen. Sidosenergian määrä hiukkasta kohti saavuttaa maksimin massaluvun 60 tienoilla. [62, s. 29, 35–36] Tämä tarkoittaa siis käytännössä sitä, että synnytetessä uusi ydin irrallaan olevista ydinhuukkasista massaluvulla 60, vapautuu energiaa enemmän ydinhuukasta kohti kuin esimerkiksi massaluvuilla 40 tai 80 vapautuisi. Tähän perustuu niin fuusio kuin fissiokin. Uraaniatomien halkaisemalla syntyvät ytimet ovat lähempänä massalukua 60 kuin uraaniydin ja tarkastelemalla sidosenergiakäyrää kuvasta 2.2, voidaan päätellä, että energiaa vapautuu reaktion seurauksena.

Fissioreaktio on mahdollista merkittäväällä todennäköisyydellä vain atomiytimillä,



Kuva 2.2: Sidosenergia ydinhiukasta kohti [1, data]

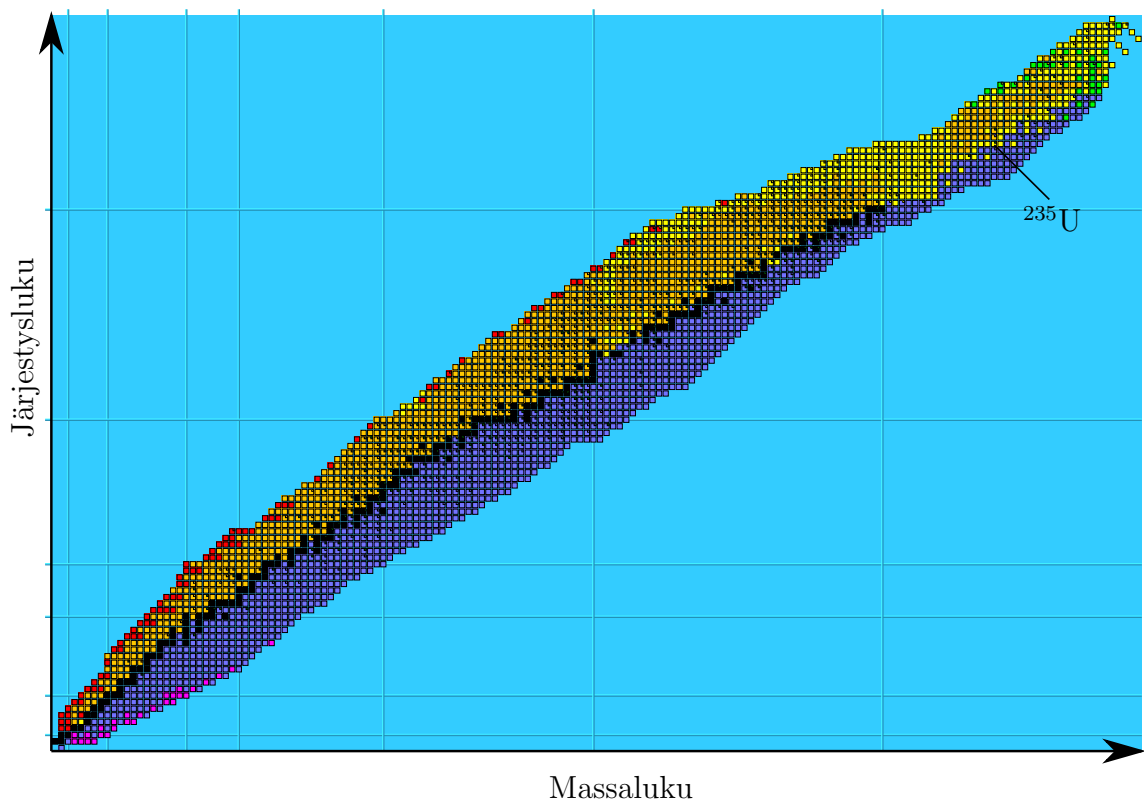
joiden järjestysluku on vähintään 90. Atomytimiä, jotka pystyvät fission suu-
rella todennäköisyydellä riippumatta ytimeen osuvan neutronin liike-energiasta, kut-
sutaan fissiileiksi. [68, s. 4–5] Jos ydinreaktiot vapauttavat energiaa, niin niiden voi
odottaa tapahtuvan spontaanisti. Tästä ilmiöstä esimerkkejä ovat radioaktiivinen
hajoaminen tai spontaani fission, missä atomydin hajoaa tai halkeaa ilman ulkoista
vaikutusta. Kuitenkin luonnossa esiintyvien raskaiden aineiden olemassaolosta voi-
daan päätellä, että atomytimeen täytyy tuoda ylimääräistä energiaa, jotta fission-
reaktio voi tapahtua. Atomytimen rakenteesta seuraa, että muodostuu energiavalli,
joka fission aikaansaamiseksi pitää ylittää tavalla tai toisella. [62, s. 69–70]

Energiavallin suuruus ja muoto riippuvat atomytimen rakenteesta. Toisaalta ener-
giavallin ylittämiseen ja siis ytimen viritystilaan käytettävissä oleva energiamäärä
riippuu ytimeen osuvan neutronin kineettisestä energiasta ja tämän uuden neutro-
nin vapauttamasta sidosenergiasta. Ytimissä, joissa on pariton määrä neutroneita,
tämän vapautuvan sidosenergian määrä on suurempi kuin parillisen määrän neut-
roneita omaavissa ytimissä. Esimerkiksi U-235:ssä pelkkä sidosenergia riittää kat-
tamaan energiavallin ylityksen. Kuitenkin kvanttimekaanisista ilmiöistä johtuen U-
235:n fission ei ole varma, vaan ydin voi kaapata neutronin fissionumatta. Toi-
saalta myös U-238 voi fissionua neutronin törmäyksen seurauksena tai spontaanisti,
vaikkei energiavalli klassisen fysiikan mukaisesti ylittyisikään. [62, s. 71–73]

Luonnosta saatavissa olevat ydinmateriaalit fissiokäytön näkökulmasta ovat uraani ja torium. Luonnonuraani koostuu pääasiassa kahdesta jo aiemmin mainitusta isotoopista, U-235:stä, jota luonnonuraanista on noin 0,71 %, ja U-238:sta. Torium on isotooppia 232. Ainoa fissiili näistä on U-235 ja muut vasta kaapattuaan neutronin muuttuvat radioaktiivisten hajoamisten kautta fissiileiksi ytimiksi. Yleisesti aineita, joista syntyy fissiili ydin neutronikaappauksen tai sen jälkeisen radioaktiivisen hajoamisen seurauksena, kutsutaan fertiileiksi. [62, s. 332]

Kuvassa 2.3 esitetään tunnettujen aineiden vallitseva radioaktiivinen hajoamistapa. Mustat ovat pysyviä isotooppeja, siniset β^- -aktiivisia, oranssit β^+ -aktiivisia ja keltaiset α -aktiivisia. Kuvaan on merkitty esimerkkinä U-235:n sijainti, josta fission yhteydessä muodostuu kaksi keskiraskasta atomiydintä.

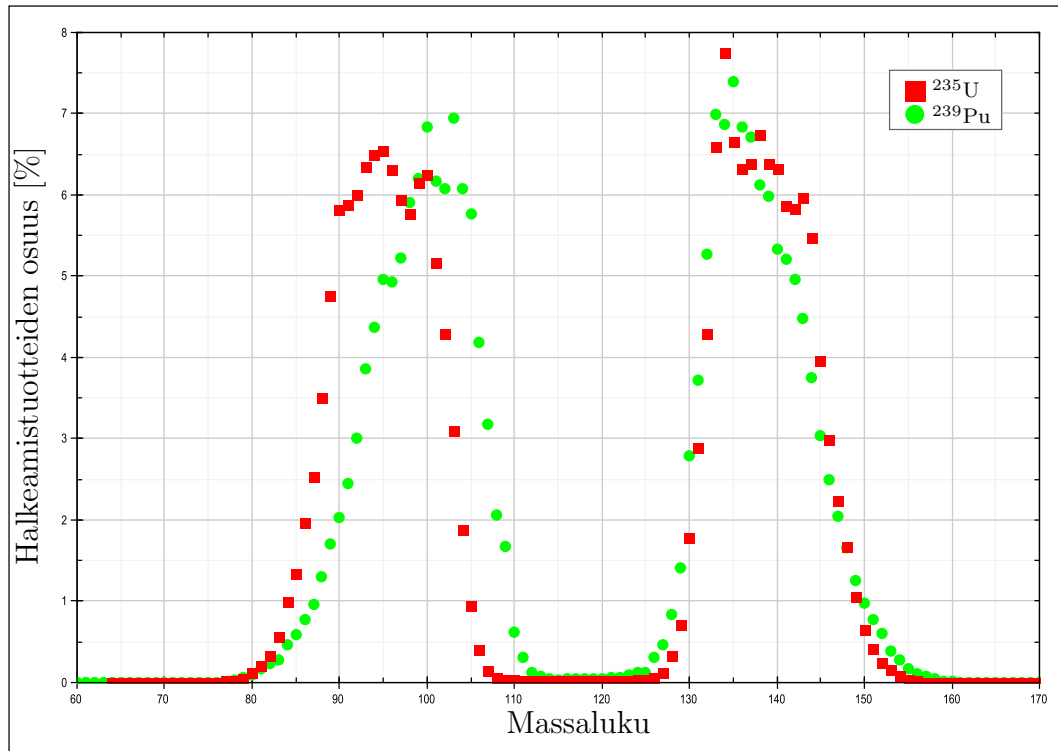
Aiemmin todettiin, että raskaissa ytimissä on suhteessa enemmän neutroneita kuin kevyissä ytimissä. Halkeamistuotteina syntyvät uudet ytimet siis sijaitsevat kuvassa stabiilien isotooppien muodostaman käyrän alapuolella, vaikka heti fissioreaktion seurauksena vapautuu yleensä 2–3 nopeaa neutronia. Tästä johtuen syntyvät aineet ovat useimmiten β^- -aktiivisia [62, s. 76].



Kuva 2.3: Nuklidikartta [30, data]

Halkeamistuotteina syntyviä ytimiä on useita satoja erilaisia ja mahdollisia alkua-

neitakin on yli 30 kappaletta. Fissioreaktion tuloksena syntyvät ytimet ovat harvoin samanpainoisia keskenään eli fissio on asymmetrinen reaktio. Tämä ilmiö voidaan nähdä kuvassa 2.4. [62, s. 75–76]



Kuva 2.4: U-235:n ja Pu-239:n halkeamistuotteiden osuus massalukua kohti [30, data]

Jokaisessa fissioreaktiossa vapautuu yleensä kahdesta kolmeen nopeaa neutronia, joista vain yhden pitää aiheuttaa uusi fissioreaktio, jotta ydinreaktorin tehontuotto pysyy vakiona. Tällaisessa tilanteessa ydinreaktorin sanotaan olevan kriittinen. Useampien neutronien aiheuttaessa fission teho alkaa suurenemaan ja harvempien aiheuttaessa fission teho alkaa pienenemään.

Heti fissioreaktiossa vapautuneiden neutronien, kerkeiden neutronien, liike-energia vaihtelee karkeasti 0–10 MeV:n välillä keskimääräisen arvon ollessa 2 MeV. Vapautuvien neutronien energiajakauman analyttiseen arviointiin käy Maxwellin jakauma. [62, s. 73–74]

Taulukossa 2.1 esitetään fissioreaktiossa vapautuvan energian jakautuminen erilaisille reaktiotuotteille. Kulkeutumisetäisyydet ovat suuruusluokka-arvioita, minkä kokeiselle alueelle suurin osa mainitusta energiasta päättyy. Tarkat kulkeutumisetäisyydet riippuvat reaktorissa vallitsevista olosuhteista.

Fissiofragmenttien ja β -hiukkasten liike-energia päättyy käytännössä kokonaan polttoaineeseen. Gammakvanttien keskimääräinen vapaamatka on useiden senttien suuruusluokkaa ja näidenkin energia päättyy suurimmaksi osaksi raskaisiin materiaaleihin ja reaktorissa siis polttoaineeseen, mutta laajemmalle alueelle. [62, s. 77]

Taulukko 2.1: U-235:n fissiossa vapautuva energia ja suuruusluokka sen kulkeutumisetäisyydelle fission tapahtumapaikasta [62, s. 77], [68, s. 12]

Vapautuva energia (U-235)	[MeV]	Kulkeutumisetäisyys
Halkeamistuotteiden liike-energia	166,2	< mm
Gammakvantit fissiosta	8,0	10–100 cm
Neutronit	4,8	10–100 cm
Betahiukkaset	7,0	\approx 1 mm
Antineutriinot β -hajoamisesta	9,6	∞
Gammakvantit β -hajoamisesta	7,2	10–100 cm
Yhteensä	202,8	

Radioaktiivisten hajoamisten seurauksena syntyvien antineutriinoiden energia menee hukkaan, koska neutriinot eivät juurikaan vuorovaikuta aineen kanssa. Toisaalta (n, γ) -reaktioista saadaan karkeasti mitattuna vastaava määrä tehoa tilalle. Ketjureaktion ylläpidon kannaltahan kaikkia syntyviä neutroneita ei tarvita, vaan osa on tarkoituskin kaapata muihin kuin halkeamiskelpoisiin ytimiin tehon pitämiseksi vakiokäytönä. Kaappautuessaan aineeseen neutronit saavat aikaan ydinreaktioita, joista tyyppillisesti vapautuu ytimen sidosenergiaa. Vapautuvan energian määrä riippuu reaktorissa olevista materiaaleista ja esimerkiksi kevytvesireaktoreille käytetään yleensä arvoa 6 MeV neutronikaappausta kohti [62, s. 77]. Yhteensä energiaa vapautuu siis lisää $(2,4 - 1) \cdot 6 \text{ MeV} = 8,4 \text{ MeV}$ fissiota kohti. Tämän seurauksena fissioreaktiosta hyötykäyttöön saatavissa oleva energia on loppujen lopuksi melkein sama kuin fissiossa vapautuva energia. Taulukossa 2.2 esitetään tiedot yleisimmille fissioituville aineille.

Taulukko 2.2: Fissiossa hyötykäyttöön saatavissa oleva energia [62, s. 77]

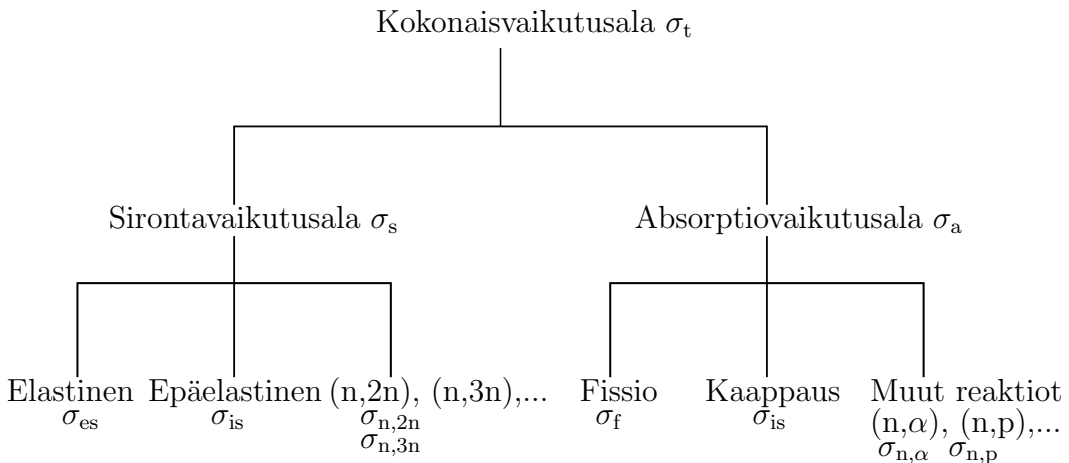
Fissioituva ydin	Energia [MeV]
U-235	201,7
U-238	205,0
Pu-239	210,0
Pu-241	212,4

2.1.2 Muut reaktiot

Fissioreaktion lisäksi ydinreaktorissa tapahtuu monia muitakin neutronien ja atomiydinten reaktioita, kuten jo aiemmin mainittu kaappausreaktio. Kaappausreaktiossa ytimeen osunut neutroni jää atomiytimeen, josta vapautunut sidosenergia poistuu γ -säteilynä. Reaktiossa aine muuttuu raskaammaksi isotoopiksi, joka usein on myös radioaktiivinen. Kuvassa 2.5 on esitetty tärkeimpiä neutronin aiheuttamia ydinreaktioita.

Reaktiot jaetaan kahteen pääryhmään, absorptioon ja sirontaan, riippuen siitä jääkö neutroni ytimeen vai ei. Absorptioon kuuluvat fissio- ja kaappausreaktiot, kun taas sironta koostuu elastisesta ja epäelastisesta sironnasta. Myös reaktiot, jossa osunut neutroni potkaisee ytimeä ulos kaksi tai useamman neutronin luetaan sirontareaktioiksi. [62, s. 53–54]

Ainoastaan osa elastisesta sironnasta, potentiaalisironta, ei ole väliydinreaktio. Tämä tarkoittaa sitä, että neutroni ei osu itse atomiytimeen, vaan siroaa ytimen voimakentän vaikutuksesta. Muissa tapauksissa syntyy väliydin, jonka syntynyt viritystila purkautuu erilaisilla todennäköisyyksillä eri reaktioilla. Reaktioilla voi olla kynnyksenergioita eli kaikki reaktiot eivät ole aina mahdollisia. Viritystilan energia riippuu siis tulleen neutronin liike-energiasta ja sidosenergian määrästä. [62, s. 52–53]



Kuva 2.5: Neutronin aiheuttamat tärkeimmät ydinreaktiot

Esimerkiksi kuvassa 2.5 esiintyvä (n,α) -reaktio on myös merkittävä ydinreaktorin toiminnan kannalta, sillä säätösauvat usein sisältävät booria, jonka hyvä kyky kaappata neutroneita perustuu tähän reaktioon.

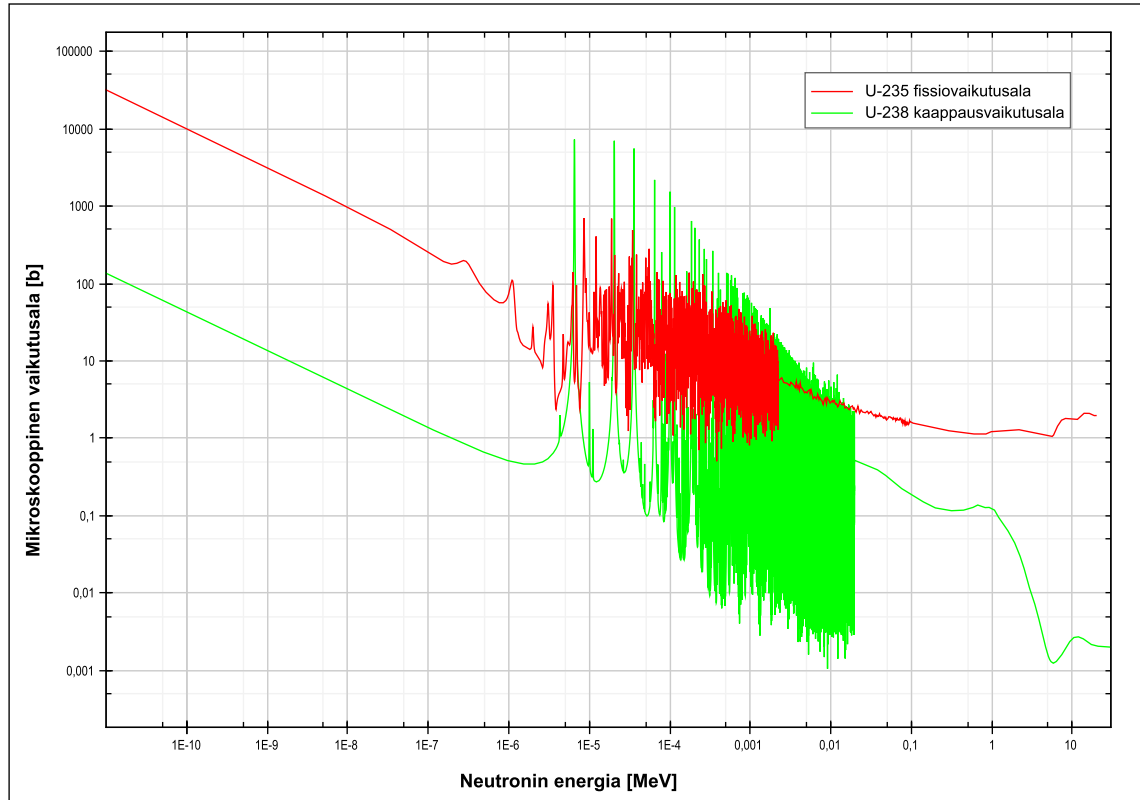
2.1.3 Reaktioiden vaikutusalat

Vaikutusalat kuvaavat karkeasti ilmaistuna ytimen poikkileikkauspinta-alaa ja siten määräävät ytimen vuorovaikutustodennäköisyyden neutronien kanssa. Mitä suurempi vaikutusala, niin sen helpommin neutroni voi ytimeen törmätä. Kokonaisvaikutusalan perusteella voidaan laskea vuorovaikutustodennäköisyys yleisesti ja vastaavasti tietämällä tietyn reaktion vaikutusala saadaan laskettua juuri tämän kyseisen reaktion tapahtumisen todennäköisyys. [62, s. 48–49, 53]

Kuvassa 2.6 on esitetty U-235:n fissiovaikutusala ja U-238:n kaappausvaikutusala. Tästä huomataan, että neutronin todennäköisyys aiheuttaa fissio vaihtelee suuresti liike-energiasta riippuen. Matalilla energioilla vaikutusalakäyrällä on $\frac{1}{v}$ -riippuvuus eli vaikutusala on kääntäen verrannollinen neutronin nopeuteen tai toisaalta liike-energian neliöjuureen. Tämän siististi käyttäytyvän alueen jälkeen alkaa resonanssialue, jossa näyttäisi olevan melko epäsäännöllisiä resonanssiipiikkejä.

Resonanssialue johtuu kvanttimekaanisista ilmiöistä. Atomytimillä on energiatasoja, joille ne voivat asettua ja jos reaktiossa syntyvälle väliytimelle muodostuva viritysenenergia on lähellä tällaista energiatasoa, tapahtuu reaktio helpommin. Viritysenenergiaan vaikutti ytimen rakenteesta määräytyvän sidosenergian lisäksi neutronin liike-energia, jolla on siis huomattava vaikutus reaktioiden todennäköisyyksiin tällä alueella. Vaikutusalat voivat vaihdella jopa dekadeja hyvin pienien neutronin liike-energian muutosten välillä. Raskailla aineilla ytimen rakenne on monimutkainen ja energiatasoja vastaavasti enemmän, josta johtuu vaikutusalakäyrien monimutkaisuus raskaiden aineiden kohdalla. [62, s. 57–61]

Matalilla viritysenenergioilla resonanssit ovat helposti mitattavissa, mutta suuremmilla energioilla resonansseja ei pystytä enää mittaamalla erottamaan toisistaan. Lopulta resonanssit alkavat mennä päällekkäin. [62, s. 58] Suurimmaksi osaksi resonanssien päällekkäin osuminen suurilla energioilla johtuu hieman myöhemmin mainittavasta Doppler-ilmiöstä, joka leventää resonansseja neutronin liike-energian neliöjuuren funktiona. Lisäksi resonanssit ovat tiheämmässä korkeammilla energioilla. [2, s. 407, 439–440]



Kuva 2.6: U-235 mikroskooppinen fissiovaikutusala ja U-238 kaappausvaikutusala [30, data]

2.2 Ydinreaktorin toiminta

Vuoden 2011 alussa maailmassa on International Atomic Energy Agency (IAEA) mukaan 442 toimivaa ydinvoimalaitosyksikköä ja rakenteilla on 65 yksikköä lisää. Näistä toimivista yksiköistä 361 kappaletta, mikä tarkoittaa hieman yli 80 prosenttia, on kevytvesireaktoreita, joko kiehumus- tai painevesityyppisiä. Muut jäljelläolevat reaktorit ovat pääasiassa raskasvesihidasteisia, pienempi osa on grafiittihidasteisia tai kaasujäähdytteisiä reaktoreita. Vain yksi nopea reaktori on kaupallisessa käytössä. [29]

Yleisesti ydinreaktori toimii siis neutronien halkaistessa raskaita isotooppeja, joista syntyy uusia neutroneja käytettäväksi uusissa halkeamisreaktioissa. Käytännössä pelkällä tällä tiedolla ei tulla toimeen, vaan täytyy paneutua useisiin ilmiöihin toimivan reaktorin aikaansaamiseksi.

2.2.1 Ketjureaktio

Kappaleessa 2.1.1 todettiin fissiossa vapautuvien neutronien keskienergian olevan noin 2 MeV. Aiemmin esitetystä kuvasta 2.6 voidaan nähdä, että tällä energia-alueella U-235:n fissiovaikutusalan suhde U-238:n kaappausvaikutusalaan on noin 5–10 kertainen. Luonnonuraanissa näiden kahden uraani-isotoopin suhde on noin $\frac{1}{140}$, joten voidaan todeta, että U-238 kaappausreaktio on hallitseva ja reaktori ei voi toimia. Nostamalla U-235:n pitoisuutta suhteessa U-238:aan, väkevöimällä, voidaan saada aikaan toimiva reaktori nopeillakin neutroneilla. Käytännössä tähän tarvittaisiin noin 15–20 % U-235 -pitoisuus, jolloin molemmat reaktiot olisivat lähellä tasapainoa.

Väkevöimisen sijaan voidaan käyttää toista tapaa ja tarkastella U-235:n fissiovaikutusalan suhdetta U-238:n kaappausvaikutusalaan matalilla energioilla ja havaita, että siellä ero on yli 200-kertainen U-235:n eduksi. Toisin sanoen hidastamalla neutronit tavalla tai toisella voidaan saada aikaan luonnonuraanilla toimiva reaktori. Näitä reaktoreita kutsutaan termisiksi, koska neutronit pyrkivät hidastumaan termiseen tasapainoon hidastinaineen kanssa.

Hidastamiseen kannattaa käyttää kevyitä aineita, joille neutronit menettävät tehokkaasti liike-energiaansa törmäyksissä. Muita tärkeitä ominaisuuksia ovat esimerkiksi pieni kaappausvaikutusala, jotta neutroneita ei menisi hukkaan hidastumisen aikana ja riittävä tiheys. Myös hinta ja saatavuus vaikuttavat hidastinaineen valintaan. Hyviä hidastinaineita ovat paljon vetyä sisältävät aineet, kuten vesi, vedyn raskaampaa isotooppia, deuteriumia, sisältävä raskas vesi, beryllium ja grafiitti. Vetyä hidasteena käytettäviä reaktoreita ei voida saada toimimaan luonnonuraanilla muita suuremman kaappausvaikutusalan takia, jota tosin kompensoi sen erittäin hyvä kyky hidastaa neutroneja. Muilla kolmella mainitulla hidastinaineella voidaan saada aikaan toimiva luonnonuraanireaktori. [62, s. 13]

Valtaosa maailman sähköä tuottavista ydinvoimalaitosyksiköistä on kuitenkin kevytvesireaktoreita, koska vesi on halpaa ja se on hyvin tuttu aine, joka voi toimia myös jäähdytteenä reaktorissa. Lisäksi kevytvesireaktorista voi rakentaa pienikokoisen vedyn hyvän hidastuskyvyn ansiosta. Hyvä hidastuskyky johtuu ennen kaikkea vety-ytimen poikkeuksellisen suuresta sirontavaikutusalasta. [62, s. 206–207]

Kasvutekijällä kuvataan neutronien määrän muuttumista reaktorissa. Jos reaktorissa kyettäisi erottamaan neutronisukupolvet toisistaan, kasvutekijä tarkoittaisi ny-

kyisessä neutronisukupolvessa olevien neutronien määrän ja edellisessä sukupolvessa olleiden neutronien määrän suhdetta. Toisaalta neutronit vapautuvat fissioreaktioista, joten kasvutekijä on myös sukupolven fissioiden määrän suhde edellisen sukupolven fissioiden määrään. Ilman sukupolvijättelua voidaan kasvutekijä ilmaista neutronien tuottonopeuden ja neutronien häviämisenopeuden suhteena. [15, s. 74–75]

Kasvutekijä on tärkeä reaktorin käyttäytymisen kannalta ja sen laskeminen reaktorille erilaisissa käyttötilanteissa on siten yksi tärkeimpiä reaktorifysiikan sovelluskohteita. Aiemmin mainittiin jo kriittinen reaktori, jossa tehontuotto pysyy vakiona. Tämähän tarkoittaa samalla, että fissioiden määrä aikayksikössä pysyy vakiona ja edelleen, että kasvutekijän on oltava tasan yksi. Kasvutekijän ollessa tätä pienempi on reaktori alikriittinen ja teho vähenee, kun taas yhtä suuremmilla arvoilla teho kasvaa ja puhutaan ylikriittisyydestä.

2.2.2 Tehonsäätö

Toimivassa ydinreaktorissa vapautuu ja absorboituu jatkuvasti neutroneja erilaisien reaktioiden mukaisesti. Fissioissa syntyvät neutronit aiheuttavat uusia fissioita, jotka aiheuttavat yhä uusia fissioita ja tästä seuraa ydinreaktorille ominainen eksponentiaalinen käyttäytyminen. Fissiosta suoraan vapautuvan neutronin keskimääräinen elin aika reaktorissa on erittäin lyhyt, noin 10^{-7} s nopeissa reaktoreissa ja $10^{-5} \dots 10^{-3}$ s termisissä reaktoreissa. Pienetkin muutokset vaikuttavat nopeasti reaktorin käyttäytymiseen, jos tilanne riippuu ainoastaan tästä kerkeiden neutronien elinajasta ja reaktoria ei pystyttäisi säätämään. [62, s. 119–120]

Tilannetta helpottavat viivästyneet neutronit, joita vapautuu viiveellä fission tapahtumisesta. Nämä neutronit vapautuvat β^- -aktiivisista aineista, joissa radioaktiivisessa hajoamisessa vapautuva ytimelle tuleva viritysentenergia ylittää neutronin sidosenergian. Näissä prekursoriytimissä tapahtuu neutroniemissio lähes välittömästi β^- -hajoamisen jälkeen. Viritystila voi purkautua myös γ -kvanttina, jolloin neutronia ei vapaudu. Viivästyneiden neutronien liike-energia vaihtelee välillä 0,2–0,6 MeV ja on siis pienempi kuin syntyvien kerkeiden neutronien keskimääräinen liike-energia. [62, s. 73–74]

Viivästyneiden neutronien osuus kaikista vapautuvista neutroneista vaihtelee erilaisilla fissioituvilla aineilla 0,2–2,5 % välillä. Vaikka osuus on pieni on sen merkitys

reaktorin säädön kannalta huomattava. Prekursorytimien puoliintumisaajat vaihtelevat sekunnin osista lähes minuuttiin ja käytännössä neutronin keskimääräisessä elinajassa viivästyneet neutronit ovat hallitseva tekijä. Esimerkiksi uraanilla toimivan kevytvesireaktorin keskimääräiseksi neutronien elinajaksi saadaan ottamalla viivästyneet neutronit mukaan tarkasteluun 0,077 sekuntia, mikä on noin 1000-kertainen kerkeiden neutronien elinaikaan verrattuna. Tämä käytännössä mahdollistaa ydinreaktorin toiminnan. [62, s. 121–122]

Sukupolviajattelun avulla tilannetta voi ajatella reaktorin toiminnan kannalta siten, että reaktorin ollessa hieman ylikriittinen teho kasvaa ja uusia neutroneja vapautuu fissioreaktioista kerkeinä neutroneina lähes välittömästi. Kuitenkin osa neutroneista vapautuu viiveellä ja jos kasvutekijän arvo ylittää yhden pienemmällä arvolla kuin viivästyneiden neutronien osuus on, niin viivästyneitä neutroneita tarvitaan pitämään reaktori edes kriittisenä. Jos viivästyneet neutronit jäisivät vapautumatta, niin teho kääntyisi laskuun. Tässä viiveen suuruus astuu kuvaan, eli viivästyneiden neutroneiden viive hidastaa tehonnousua.

Kasvutekijän ylittäessä yhden suuremmalla määrällä kuin viivästyneiden neutronien osuus on, reaktorin käyttäytyminen muuttuu. Tällöin teho kasvaa, vaikka viivästyneitä neutroneita ei olisikaan ja kerkeät neutronit, joiden elinaika syntymisestä fission aiheuttamiseen on lyhyt verrattuna viivästyneisiin neutroneihin, alkavat hallita reaktorin käyttäytymistä. Tilanne johtaa tehon nopeaan eksponentiaaliseen kasvuun ja siksi tätä kerkeäksi ylikriittisyydeksi kutsuttua ilmiötä ei saa esiintyä reaktoreissa.

Käytännössä reaktorin tehoa säädetään säätösauvoilla, joissa on voimakkaasti neutroneita kaappaavaa ainetta, kuten booria, hafniumia tai esimerkiksi hopean, indiumin ja kadmiumin seosta. Lisäksi polttoaineeseen voidaan sekoittaa palavaa absorbaattoria, minkä tehtävänä on pienentää polttoaineen kykyä tuottaa energiaa latausjakson alussa. Vastaavasti toimii myös painevesireaktoreissa jäähdyteteen liuotettu boorihappo, jonka pitoisuutta laimennetaan latausjakson kuluessa. [15, s. 95, 537, 551, 554–555]

Doppler-leveneminen on ehkä tärkein ilmiö ydinreaktorin stabiiliuden kannalta, koska se aiheuttaa negatiivisen takaisinkytkennän tehoon lämpötilan noustessa ja vastaavasti toisinpäin. Esimerkiksi lämpötilan noustessa äkisti tehopiikin seurauksena alkaa reaktorin teho nopeasti laskea. Doppler-ilmiö johtuu neutronin ja atomiytimen

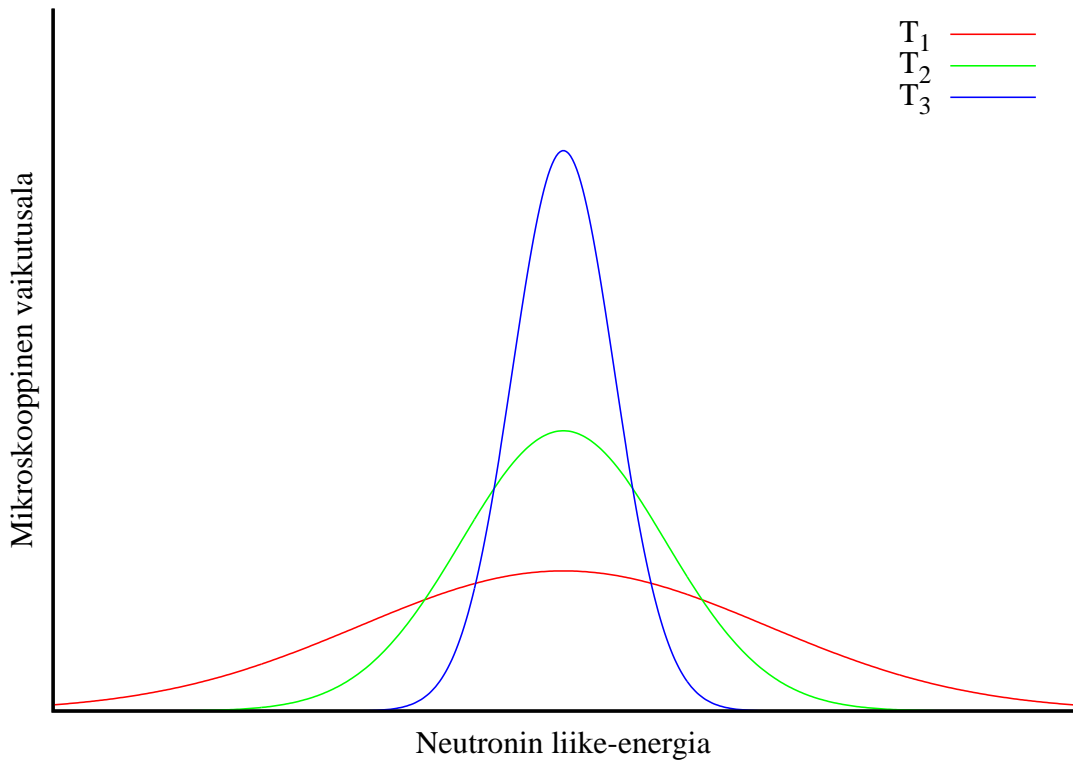
välisestä suhteellisesta nopeudesta, jonka perusteella vaikutusala määrätty. Suhteelliseen nopeuteen vaikuttaa neutronin nopeus ja atomiytimen lämpöliike, joka muuttaa suhteellista nopeutta vain vähän. Tällä pienellä muutoksella ei ole todennäköisesti merkitystä ellei vaikutusalueella ole lähellä resonanssiipiikkiä, jolloin taas pienikin nopeuden muutos voi aiheuttaa merkittävän eron vaikutusalaan. [62, s. 246–247]

Doppler-ilmiön seurauksena resonanssiipiikit levenevät, mutta samalla mataloituvat siten, että vaikutusalakäyrän alle jäävä pinta-ala säilyy vakiona. Ilmiötä on havainnollistettu kuvassa 2.7. Tästä huolimatta ilmiöllä on voimakas vaikutus neutronien käyttäytymiseen, koska resonanssin levenemisellä on paljon enemmän merkitystä kuin huipun mataloitumisella. Neutronin todennäköisyys päästä läpi materiaali-alueesta resonanssin kohdalle sattuneella energialla on yhä olematon, mutta energia-alue, jolla resonanssi esiintyy on suurempi. Tämä ilmiö lisää resonanssikaappauksen todennäköisyyttä ja useimmissa reaktoreissa on U-238 isotooppia, mikä kaappaa neutroneja paljon fissioitumista todennäköisemmin. Tästä seuraa, että Doppler-leveneminen aiheuttaa negatiivisen takaisinkytkennän useimmissa reaktoreissa. Lisäksi fissioista tuleva lämpö vapautuu polttoaineeseen, joten takaisinkytkentä on lähes välitön. [62, s. 246–248]

Muita takaisinkytkentöjä lämpötilasta tehoon aiheutuu hidasteaineen välityksellä. Kevytvesireaktoreissa jäähdytteen tiheydellä on suurin merkitys reaktorin tehoon, koska harvempi hidaste hidastaa neutroneja huomattavasti lisäten resonanssikaappauksia. Erityisen voimakas tämä ilmiö on kiehumisvesireaktoreissa, joissa vesi kiehuu ja harvenee voimakkaasti. Korkealämpötilareaktoreissa grafiitin lämpötilasta aiheutuu takaisinkytkentä, jonka suuruus ja suunta riippuvat useista tekijöistä. Takaisinkytkentä aiheutuu kuitenkin grafiitin kuumentuessa tapahtuvasta neutronipopulaation keskimääräisen liike-energian kasvamisesta. Aiemmin mainittu terminen tasapaino siirtyy suuremmalle energialle lämpötilan kasvaessa. [15, s. 559]

2.2.3 Sammuttaminen ja jälkilämpöteho

Reaktori voidaan pysäyttää nopeasti sijoittamalla säätösauvat reaktorisydämeen, jolloin vapaiden neutronien määrä alkaa nopeasti vähentyä ja sen myötä myös fissiotehontuotto. Tapahtumaan menee muutamia sekunteja hyvin suunnitellussa reaktorissa. Ydinreaktorissa tapahtuva tehontuotto ei kuitenkaan lakkaa kokonaisuudessaan tähän.



Kuva 2.7: Doppler-leveneminen, lämpötilat järjestyksessä $T_1 > T_2 > T_3$

Taulukoiden 2.1 ja 2.2 perusteella voi laskea suoraan, että 7 % ydinreaktorin tuot-
tamasta tehosta vapautuu viiveellä. Tämä johtuu siis fissiossa syntyneistä radio-
aktiivisista aineista ja jälkilämpötehotuoton aikariippuvuus näiden aineiden puo-
liintumisajoista. Karkeita suuruusluokka-arvioita voi saada tästä jälkilämpötehoksi
kutsutusta ilmiöstä käyttämällä Wayn ja Wignerin 1948 esittämää riippuvuutta [84].

Yhtälössä (2.1) on esitetty tämä riippuvuus helposti käytettävässä muodossa. Tällä
yhtälöllä voidaan arvioida jälkilämpötehoa 10 sekunnin päästä reaktorin pysäyttä-
misestä ja siitä eteenpäin. [62, s. 542]

$$P_r = 5,9 \cdot 10^{-3} P_{th} [t_s^{-0,2} - (t_s + t_{th})^{-0,2}] \quad (2.1)$$

missä

P_r	jälkilämpöteho
P_{th}	reaktorin lämpöteho

t_s	aika päivinä pysäytyksestä
t_{th}	reaktorin käyttöaika päivinä teholla P_{th}

2.2.4 Neutronien hidastuminen

Neutronien hidastumiseen liittyy kappaleessa 2.1.3 mainitut resonanssit, joiden ohitse fissiossa syntyvän nopean neutronin on päästävä hidastuessaan termiselle energia-alueelle. Neutroni hidastuu törmäämällä hidasteaineen atomeihin ja yksi hyvän hidasteaineen ominaisuus oli mahdollisimman vähät törmäykset, joilla neutroni hidastuu termiselle alueelle. Tällöin neutroni pääsee resonanssialueen yli mahdollisimman vähillä mahdollisuuksilla osua samalle energialle resonanssiipiikin kanssa. Uraanipolttoainehan absorboi tehokkaasti pois kaikki resonanssihuippujen kanssa samalle energialle osuneet neutronit.

Varsin pian ydinvoiman alkutaipaleella Fermi ja Szilárd huomasivat, ettei polttoainetta kannattanut sekoittaa tasaisesti hidasteen kanssa reaktorissa, vaan sijoittaa molemmat erillisiin alueisiin [67, s. 368]. Erilliset alueet auttavat, koska tällöin neutroni poistuu polttoaineesta hidasteeseen, jossa se pyritään hidastamaan termiselle alueelle ja vasta sitten neutroni palaa polttoaineeseen aiheuttaen fission. Neutroni ei voi tällöin kaappautua resonanssiin, vaikka sattuisi resonanssin kanssa samalle energialle, koska hidasteessa ei ole uraania. Tietysti todellisuudessa jokin pieni osa neutroneista palaa uraania sisältävään alueeseen juuri resonanssienergialla ja absorboituu heti pintakerrokseen [15, kuva 10-1]. Resonanssienergian kohdalla olevat neutronit häviävät siis nopeasti tultaessa uraanipolttoaineeseen ja tätä ilmiötä kutsutaan itsevarjostukseksi. [62, s. 231–233]

Useimmissa reaktoreissa polttoaine ja hidaste ovat siis erillään toisistaan ja tämä heterogeenisuus on otettava huomioon laskettaessa uraanin resonansseihin kaappautuvien neutronien osuutta. Laskennassa oletetaan polttoaineelle jokin muoto ja oletetaan lisäksi, että polttoaineesta koostuvan alueen ulkopuolella on vain hidastetta ja polttoaineesta poistuva neutroni törmää seuraavaksi välttämättä hidasteaineessa. Käytännön reaktorissa tilanne on kuitenkin toinen ja neutroni voi päätyä uudelleen alueeseen, jossa on polttoainetta. Tämän vaikutuksen huomioimiseksi pitää laskentaan tuoda Dancoffin korjauskerroin, jolla korjataan tuloksiin muuten syntyvä virhe. Esimerkiksi kevytvesireaktoreissa korjauskertoimen arvo vaihtelee välillä 0,1–0,3 ja tarkoittaa siis polttoainealueesta lähtevän neutronin todennäköisyyden päätyä toiseen polttoainealueeseen törmäämättä hidasteeseen matkalla. [62, s. 239–245]

2.2.5 Rakenteet

Ydinreaktori koostuu karkeasti jaoteltuna mm. polttoaineesta ja sen suojakuorista, jäähdytteestä, säätöelementeistä ja reaktorin rakennemateriaaleista. Termisessä reaktorissa tarvitaan myös hidastinta, joka voi olla samalla jäähdytettä, kuten kevytvesireaktoreissa. Polttoaineessa tuotetaan teho ja se siirretään jäähdytteen mukana ulos reaktorista. Polttoaineen suojakuorien tehtävänä on pitää syntyvät fissiotuotteet sisällään ja kevytvesireaktoreissa ne ovat yleensä zirkoniumia, jolla on pieni kaappausvaikutusala. Reaktorin sisäiset rakenteet pitävät sydämen paikallaan ja esimerkiksi ohjaavat jäähdytevirtausta. Painesäiliö taas kantaa paineistetun järjestelmän aiheuttaman painekuorman. [15, s. 94–95]

Jäähdytteen on kyettävä jäähdyttämään kaikkia reaktorin osia, joihin tehoa päätyy reaktorin toimiessa varsinaisen polttoaineen lisäksi. Riippuen reaktorityypistä tähän voidaan joutua kiinnittämään erityistä huomiota. Aiemmin taulukossa 2.1 esiteltiin fissiotehon kulkeutumista ja käytännön esimerkkinä tästä kulkeutumisesta toimii venäläinen grafiittihidasteinen kevytvesijäähdytetty RBMK (Reaktor Bols-hoy Moshchnosti Kanalnyi) -reaktori, jossa 5,5 % reaktorin lämpötehosta vapautuu hidastimena toimivaan grafiittiin [64].

Kaikkien materiaalien on kestettävä useat erilaiset rasitukset. Niiden pitää kestää korkea lämpötilaa, säteilyä ja korroosiota. Materiaalien on oltava lujia ja mielellään kaapattava vähän neutroneita ja niiden ei tulisi muodostaa pitkäikäisiä radioaktiivisia aineita neutronien aikaansaamien ydinreaktioiden vaikutuksesta. [15, s. 456–458]

2.2.6 Reaktorityypit

Tavanomaisimpia reaktoreita ovat kevytvesireaktorit, joissa hidasteena ja samalla jäähdytteenä toimii tavallinen vesi. Näiden lisäksi käytetään raskasvesihidastettuja ja -jäähdytettyjä CANada Deuterium Uranium (CANDU) -reaktoreita, sekä Neuvostoliitossa rakennettuja grafiittihidasteisia RBMK -reaktoreita, joissa jäähdytteenä toimii tavallinen vesi. Kahdelle viimeksimainitulle on yhteistä reaktorin suuri koko johtuen deuteriumin ja hiilen pienemmistä sirontavaikutusaloista ja hidastuskyvystä vetyyn verrattuna, jolloin hidastetta tarvitaan paljon enemmän. Molemmissa käytetäänkin paineputkirakennetta yhden suuren painesäiliön sijaan. [68, s. 255–260] Jäähdytteenä käytettävä vesi rajoittaa saavutettavaa ulostulolämpötilaa

reaktorista, koska suojakuoriin kohdistuu monia suuria rasituksia ja polttoaine ei saa joutua lämmönsiirtokriisiin [15, s. 470–471].

Muutamia nopeita reaktoreita on rakennettu, joissa neutroneita ei hidasteta ja jäähdytteenä käytetään sulaa natriumia mm. tästä syystä. Näissä reaktoreissa polttoaine on väkevöidymppää kuin termisissä reaktoreissa johtuen kohdassa 2.2.1 mainittujen eri uraani-isotooppien fissio- ja kaappausreaktioiden suhteesta. Johtuen nestemetallijäähdytyksestä ulostulolämpötila voidaan nostaa korkeaksi. Nopeiden reaktoreiden etu on, että niillä on mahdollisuus tuottaa enemmän halkeamiskelpoista polttoainetta kuin ne itse kuluttavat.

Korkealämpötilareaktorit ovat kaasujäähdytteisiä grafiittihidasteisia reaktoreita, joita on kahta päätyyppiä. Poikkileikkaukseltaan heksagonaalisista polttoaine-elementeistä kasatut reaktorit ja pallomaisista polttoainekuulusta kasatut kuulakekoreaktorit. Jäähdytteenä käytetään heliumia, joka ei reagoi kemiallisesti reaktorissa eikä kaappaa neutroneita. Painesäiliönä käytetään useimmiten esijännitetyn betonin ympäröimää kaasutiivistä terässäiliötä. [48, s. 4, 43–46, 177, 189–192]

Polttoaine on sijoitettu pieniin polttoainejyväsiin, joita suojaa monikerroksinen rakenne. Tämän rakenteen tarkoituksena on vastata useimmissa reaktoreissa polttoaineen suojakuorena käytössä olevaa zirkoniumia, joka muodostaa radioaktiivisten aineiden leviämisesteen. Jyväset on sekoitettu joko grafiitin joukkoon polttoainekompakteihin, jotka on edelleen sijoitettu grafiittisiin heksagonaalisiin blokkeihin tai kuulakekoreaktorin tapauksessa suoraan pallomaiseen alueeseen, joka muodostaa polttoainekuulan polttoainealueen. [48, s. 43–46, 186–192]

Johtuen korkealämpötilareaktorissa käytetyistä materiaaleista ja rakenteista, voidaan reaktorin ulostulolämpötila nostaa huomattavan korkeaksi, voidaan saavuttaa jopa lähes 1000 °C lämpötila. Tämän seurauksena reaktoreita voidaan käyttää paremmalla hyötysuhteella ja käyttää prosessilämmön tuottamiseen esimerkiksi öljyteollisuudelle tai vedyntuotantoon. [48, s. 177–178] Korkealämpötilareaktorit käyttävät myös merkittävästi vähemmän uraania paremman konversiosuhteensa, joka on 0,8 luokkaa, ansiosta kuin kevytvesireaktorit [15, s. 592–593].

2.3 Kuulakekoreaktori

Kuulakekoreaktori on siis toinen korkealämpötilareaktoreiden päätyypeistä. Kuulakekoreaktorin etuina ovat melko helposti saavutettavissa oleva passiivinen turvallisuus ja korkea jäähdytteen ulostulolämpötila. Lisäksi jäähdytteenä käytettävä helium yksinkertaistaa reaktoria, koska siinä ei tapahdu faasimuutoksia, jotka vaikuttaisivat reaktorin käyttäytymiseen. [32] Kuulia voi myös lisätä ja poistaa reaktorin ollessa käynnissä, millä reaktori pidetään kriittisenä [68, s. 268]. Kääntäen tämä tarkoittaa, ettei reaktorissa tarvitse kompensoida suurta ylijäämäreaktiivisuutta ja kriittisyysonnettomuuden mahdollisuus on pienempi.

Reaktorissa kuulia jäähdyttävä helium lämpenee ja sillä keitetään vettä höyrystimissä höyryturpiinille tai käytetään suoraan kaasuturpiinissa sähköntuotantoon. Toinen vaihtoehto on tuottaa prosessilämpöä teollisuuden käyttöön.

Etelä-Afrikkalainen kuulakekoreaktoreja kehittänyt PBMR-yhtiö painottaa kuulakekoreaktorin voimakasta takaisinkytkentää lämpötilasta, mikä kääntää reaktorin tehon voimakkaasti laskuun jäähdytevirtauksen pysähtyessä ja lopettaa tehontuoton reaktorissa, vaikkei pikasulku onnistuisikaan. Lisäksi polttoaineen lämpötilankestä on erinomainen ja käytännössä lämpötilan pitää ylittää reilusti 1600 °C ennen fissiotuotteiden merkittävää vuotamista. [57]

Reaktoriydin koostuu grafiittikuulista, jotka kasataan usein sylinterimäiseen tilaan, jonka sivuilla on grafiittiheijastimet. Polttoainekuulien määrä on tehoa tuottavissa reaktoreissa puolen miljoonan kuulan luokkaa. Polttoaineena käytettävä materiaali on sijoitettu pieniin jyväsiin, jotka on sekoitettu edelleen kuulassa olevaan grafiittiin. Polttoainepartikkeleita yksittäisessä polttoainekuulassa voi olla 15000. Tyypillisesti polttoainekuulan halkaisija on kuuden senttimetrin luokkaa, josta ulommainen puolen senttimetrin paksuinen kuori on pelkkää grafiittia. Kuvassa 2.8 on esitetty polttoainekuulan rakenne ilman polttoainepartikkelien välit täyttävää grafiittia. [68, s. 268]

Polttoainekuuliin syntyy reaktorin toimiessa lämpötilajakauma, jonka suuruusero ulkoreunan ja keskipisteen välillä ei ole kovin voimakas grafiitin hyvän lämmönjohtavuuden takia. Esimerkiksi Pebble Bed Modular Reactor (PBMR) -tyyppisen polttoaineen pinta- ja keskipistelämpötilan ero on vain hieman reilut 60 °C oletta- malla yksittäiseen kuulaan tässä reaktorikonseptissa vallitseva keskimääräinen teho 885 W. [44] Tämän lisäksi yksittäiset polttoainepartikkelit kuumenevat tuottamansa



Kuva 2.8: Kuulakekoreaktorin polttoainekuula halkaistuna ilman polttoainealueen grafiittia

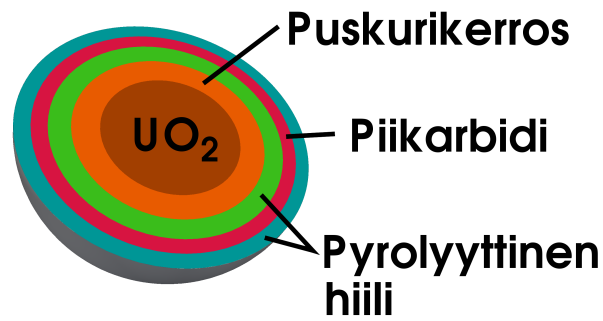
tehon vaikutuksesta [69, kuva 16].

Polttoainepartikkelissa on uraanidioksidista tehty keskiosa, jonka väkevöinti on kahdeksan prosentin luokkaa. Myös thoriumia on käytetty kuulakekoreaktoreiden polttoaineessa tuottamaan halkeamiskelpoista uraani-233 -isotooppia [48, s. 48]. Partikkelin ydintä ympäröi huokoinen hiilestä tehty puskurikerros, johon kaasumaiset fissiotuotteet voivat kerääntyä. Lisäksi polttoainepartikkelissa on kaksi pyrolyyttistä hiilikerrosta, joiden välissä on piikarbidista tehty tiivis kerros estämässä fissiotuotteiden karkaaminen. [68, s. 268]

Polttoainepartikkelin tarkka rakenne vaihtelee maittain, joissa niitä on kehitetty. Yhteistä on kuitenkin ollut siirtyminen TRI ISOTropic (TRISO) -tyyppisiin partikkeleihin, jollainen on kuvassa 2.9. Näissä on tiivis piikarbidikerros, joka estää tehokkaasti fissiotuotteiden poispääsyn partikkeleista. Lisäksi on tutkittu esimerkiksi zirconiumkarbidin käyttöä polttoainepartikkelin pinnoituksessa. Polttoainepartikkelien valmistaminen on selvästi vaativampi ja kalliimpi prosessi kuin kevytvesireaktorin polttoaineen valmistus [15, s. 592]. [28]

2.3.1 Kuulakekoreaktorien historia

Kuulakekoreaktoria kehitettiin Saksassa aktiivisesti 1960, 1970 ja 1980 -luvuilla, jolloin rakennettiin koereaktori, AVR (Arbeitsgemeinschaft VersuchsReaktor), ja demonstraatiolaitos THTR (Thorium Hochtemperatur Reaktor). Reaktorien käytös-



Kuva 2.9: Polttoainepartikkelin (TRISO) rakenne

tä saatiin merkittäviä käyttökokemuksia ja pääsääntöisesti reaktorit toimivat hyvin. AVR käynnistyi 1966 ja siinä olevien polttoainekuulien määrä vaihteli 30000–100000 välillä riippuen käytetystä latauksesta. Keskimääräinen ulostulolämpötila pystyi olemaan jopa 950 °C ja suurin polttoainekuulan pintalämpötila oli 1120 °C, jolloin kuumin polttoainepartikkeli oli 1225 °C lämpötilassa. [48, s. 43–48]

THTR käynnistettiin 1983 ja tämän reaktorin sydän koostui 675000 polttoainekuulasta. Reaktori oli demonstraatiolaitos ja siinä, kuten useimmissa muissakin High Temperature Gas-cooled Reactor (HTGR) -tyyppisissä laitoksissa, koko primääripiiri oli esijännitetyn teräsbetonirakenteen sisällä. Reaktorissa olevilta polttoainekuulilta meni keskimäärin noin kuusi kuukautta reaktorin läpi virtaamiseen ja ne kulkivat todennäköisesti kuusi kertaa tämän syklin ennen reaktorista poistamista. Tähän reaktoriin korjattiin AVR:ssä huonoksi havaittu jäähdytteen virtaussuunta, joten helium kulkee ylhäältä alaspäin, jotta virtaus ei aiheuttaisi kuulakekoon nostavaa vaikutusta. [48, s. 43–48]

Molemmat Saksassa sijaitsevat kuulakekoreaktorit on kuitenkin jo suljettu ja ne odottavat purkutoimenpiteitä. Saksassa ydinvoimavastaisuus lisääntyi Tsernobylin onnettomuuden seurauksena ja ydinvoimatutkimus väheni. AVR pysäytettiin 1988 ja THTR 1989, jonka jälkeen kuulakekoreaktoritutkimuksen paras osaaminen on hiljalleen siirtynyt ensin Etelä-Afrikkaan ja sittemmin Kiinaan. Kiinassa on toiminut HTR-10 kooreaktori vuodesta 2002, mikä on tällä hetkellä ainoa toimiva kuulakekoreaktori maailmassa. Etelä-Afrikassa kuulakekoreaktoreja kehittänyt PBMR-yhtiö on myös joutunut vaikeuksiin rahoituksen vähennyttyä ja suurin osa koelaitteistoista on varastoitu ja vain pieni osa henkilöstöstä jää pitämään yllä tietotaitoa.

3 Ydinvoimalaitosten simulointi

3.1 Reaktorifysiikkalaskenta

Aluksi reaktorifysiikkalaskentaa tarvittiin Manhattan-projektissa ratkaisemaan perimmäistä ongelmaa voidaanko kasvutekijä saada yli yhden toteutuskelpoisissa olosuhteissa ja siten ketjureaktio itseään ylläpitäväksi. [67, 4.15]

Reaktorin käyttäytymisen määrää neutronien jakauma paikan, energian ja ajan suhteen. Reaktorifysiikkalaskennassa pyritään selvittämään nämä jakaumat ja työkaluna tässä on neutronien kuljetusyhtälö. Yhtälöä kutsutaan usein Boltzmannin yhtälöksi löytäjänsä mukaan, koska alkujaan vastaava yhtälö on esiintynyt kineettisen kaasuteorian yhteydessä, jota vain sovelletaan neutronien tapaukseen. [2, s. 1]

Reaktorifysiikkalaskenta on siis pohjimmiltaan vapaiden neutronien syntymisen, kulkeutumisen ja niiden aikaansaamien reaktioiden laskentaa, joko reaktorissa tai muissa tilanteissa, joissa fissioituvalla materiaalilla on mahdollisuus tulla kriittiseksi.

Neutronien kuljetusyhtälöä voidaan alkaa ratkomaan kolmella tavalla — suoraan Monte Carlo -simulaatiolla, suoralla deterministisellä laskulla tai yksinkertaistaa ongelmaa homogenisoimalla ja ratkaisemalla tämä yksinkertaisempi ongelma jommallakummalla menetelmällä.

3.1.1 Monte Carlo -menetelmät

Monte Carlo -menetelmän määrittelevät Lux ja Koblinger kirjassaan seuraavasti: Menetelmä käyttää aina tilastollista mallia, joka rakennetaan siten, että tietyn satunnaismuuttujan odotusarvo vastaa halutun fyysikaalisen suureen arvoa. Tätä odotusarvoa arvioidaan useiden toisistaan riippumattomien satunnaisotantojen, jotka edustavat edellämainittua satunnaismuuttujaa, keskiarvolla. Tehtäessä useiden riip-

pumattomien otantojen joukkoa, käytetään satunnaislukuja, jotka seuraavat kul-loinkin arvioitavan muuttujan jakaumasta. [43, s. 5]

Monte Carlo -menetelmää on käytetty useissa yhteyksissä ennen menetelmän varsi-naista dokumentointia. Esimerkiksi jo 1777 Comte de Buffon käytti menetelmää rat-kaisemaan tasolla olevien suorien viivojen ja tasolle heitetyn neulan todennäköisyy-den leikata toisensa [16]. Lordi Kelvin taas käytti menetelmää eräiden integraalien ratkaisemiseen kineettisen kaasuteorian yhteydessä [41]. Myös Enrico Fermi käyt-ti menetelmää itsenäisesti 1930-luvulla tutkiessaan neutronien hidastumista. Monte Carlo -menetelmän kehittyminen pääsi kuitenkin vauhtiin kunnolla vasta 1946 Sta-nislaw Ulamin ja John von Neumannin aloittaman työn seurauksena ja tietokoneiden keksimisen myötä. Nimi menetelmälle on myös peräisin tältä ajalta. [50]

Monte Carlo -menetelmän ongelma on yleisesti sen vaatima laskentateho. Esimer-kiksi monissa käytännön tilanteissa hyvin suuri määrä hiukkasia tulee lähteestä ja hyvin pieni osa niistä päätyy ilmaisimeen. Samaa koetta simuloitaessa tietokoneella kaikkien vuorovaikutusten huomioiminen suurelle määrälle hiukkasia vaatisi hyvin paljon laskentatehoa. Toisin sanoen laskenta kestäisi hyvin kauan. Jos taas lasken-taan kuluvaa aikaa lyhennetään simuloitavien hiukkasten määrää vähentämällä, niin ilmaisimeen osuvien hiukkasten määrä vähenee ja vastaavasti tulosten tilastollinen tarkkuus huononee. [43, s. 6]

3.1.2 Deterministiset menetelmät

Deterministinen systeemi tarkoittaa matematiikassa sitä, että systeemin tuleva tila ei riipu satunnaisuudesta. Filosofiasa determinismin yhteydessä puhutaan kausa-liteetista eli syy-seuraus -suhteesta. Deterministinen reaktorifysiikkalaskenta nojaa neutronivuon käsitteeseen, jota laskennassa ratkaistaan yksittäisten neutronien si-jaan. Tämän tyyppiset menetelmät ovat yleisimmin käytössä laskettaessa reaktori-fysikaalisia laskuja.

Käytännössä neutronien kuljetusyhtälölle etsitään numeerisia ratkaisuja erilaisilla menetelmillä, koska analyttistä ratkaisua ei voida esittää kuin hyvin yksinkertai-sille esimerkkitapauksille. Yhtälöissä esiintyvät fysikaaliset suureet, kuten energia, paikka ja suunta joudutaan diskretoimaan äärelliseen määrään välejä, jota rajoittaa tietokoneisiin tallennettavissa oleva datan määrä. Diskretoitujen yhtälöiden perus-teella luodaan seuraavaksi lineaarinen yhtälöryhmä ja kerroinmatriisi kääntämällä

saadaan ongelma ratkaistua. Kerroinmatriisista voi kuitenkin tulla valtavan suuri ja ongelma voi tämän takia olla helpompi ratkaista jollakin sopivalla iteroivalla ratkaisualgoritmilla ilman varsinaista kerroinmatriisin luomista.

Ongelmien suora ratkaiseminen on yleensä mahdotonta, koska tuntemattomien vuon arvojen määrä muodostuisi suureksi. Tuntemattomien määrä tyypillisessä reaktorissa olisi vähintään luokkaa 10^5 – 10^6 kappaletta. [68, s. 541] Osa geometriasta on siis homogenisoitava ja riippuen kokosydänlaskentaan käytetyistä menetelmistä valitaan homogenisoitavaksi kokonaiset polttoaine-elementit tai sitten nipun sisällä olevat yksityiskohdat, kuten kevytvesireaktoreiden tapauksessa polttoainesauvat viereisine vesialueineen. [62, s. 503–505]

Jos paikan diskretoinnissa tyydytään käyttämään neutronivuolle vakioarvoa yhden syntyvän laskentakopin sisällä, joudutaan laskentaverkosta tekemään tiheä, jotta nämä portaittaiset muutokset kuvaisivat riittävän tarkasti oikeaa fysikaalista tilannetta [68, s. 541]. Toinen tapa lähestyä ongelmaa on harventaa laskentaverkkoa ja arvioida sopivilla funktioilla laskentakopeissa olevan vuon muotoa. Esimerkiksi elementtimenetelmällä tai nodaalimenetelmillä päästään ensinmainittuun differenssimenetelmään verrattuna vastaavaan tarkkuuteen paljon pienemmällä määrällä laskentakoppeja. [62, s. 180–183]

Deterministisissä menetelmissä käytetään siis neutronivuota ja yhtälöitä, joissa mallinnetaan tämän neutronivuon aiheuttamia keskimääräisiä vaikutuksia reaktorissa. Tällä saavutetaan etua Monte Carlo -menetelmään nähden, koska kaikki reaktiot tulevat kerralla otetuksi huomioon. Ongelmaksi muodostuu tietysti, että oikeasti neutronit voivat kulkea äärettömällä määrällä erilaisia suuntia ja nopeuksia, joista vain jokin äärellinen osa voidaan käytännössä ratkaista. Tämä rajoittaa menetelmällä saavutettavaa tarkkuutta.

Erilaisia deterministisiä laskentakoodeja on olemassa valtava määrä ja ihan vain esimerkkinä mainitaan muutamia. Polttoaineniipputasolla homogenisointia suorittavat muun muassa brittiläinen WIMS [52] ja ruotsalainen CASMO [72]. Kokosydänlaskentaan tehtyjä koodeja ovat mm. suomalaiset ARES [45] ja HEXBU [65], sekä ruotsalainen SIMULATE [73]. Transienttimallinnusta varten on omat koodinsa, kuten suomalaiset TRAB [33] ja HEXTRAN (HEXagonal TRANsient analysis code) [35].

3.1.3 Sovelluskohteet

Reaktorifysiikkalaskentaa tarvitaan siis selvittämään reaktorin käyttäytymistä laskennallisesti. Ydinpolttoaineella ja reaktorilla on monia turvallisuudesta aiheutuvia rajoituksia, jotka eivät saa ylittyä ja näitä on kyettävä arvioimaan laskennallisesti etukäteen suunniteltaessa itse reaktorin rakennetta tai polttoaineen latausta. Laskuissa pyritään selvittämään neutronivuota, koska monet kiinnostavat suureet määräytyvät neutronivuosta, joka kuvaa paljonko neutroneita menee pinta-alayksikön lävitse aikayksikössä. Esimerkiksi ydinpolttoaineen tuottama teho ja siitä seuraava palama määräytyy neutronivuon perusteella. Polttoaineen tuottama tehotiheys saadaan laskettua neutronivuon ja siitä materiaaliominaisuuksien kanssa ratkaistavan reaktionopeuden ja fissiossa vapautuvan hyödyntämiskelpoisen energian (taulukko 2.2 avulla yhtälön (3.1) mukaisesti).

$$q''' = E_f \Sigma_f \Phi \quad (3.1)$$

missä

E_f	fissiossa hyödyksi saatava energia
Σ_f	makroskooppinen fissiovaikutusala
Φ	neutronivuoto

Reaktorin turvallisen käytön kannalta tulee myös tietää missä olosuhteissa reaktori tulee kriittiseksi ja toisaalta onko riittävä sammutusmarginaali olemassa reaktorin pysäyttämiseksi kaikissa tilanteissa. Lisäksi reaktori on kyettävä pitämään jatkuvasti halutulla teholla eli reaktoria on kyettävä säätämään. Säätöön vaikuttaa esimerkiksi polttoaineen kuluneisuus, fissiomyrkyt ja käyttöhistoria. [15, s. 537–540]

Palamalaskennassa selvitetään polttoaineen koostumuksen muuttumista käytön aikana ja siitä aiheutuvia seurauksia. Halkeamiskelpoisen uraanin väheneminen polttoaineessa vaikuttaa tehontuottoon ja olosuhteet reaktorissa muuttuvat latausjakson aikana. Suurin osa reaktorin polttoaineesta on ollut reaktorissa jo pitemmän aikaa, eikä sen tarkkaa koostumusta voi mitenkään yksinkertaisesti selvittää. Ydinpolttoainehan on yleensä reaktorin toimiessa luoksepääsemättömissä minkäänlaisten koostumusmittausten kannalta ajateltuna.

Polttoaineen muuttumista voidaan edellä mainitun takia lähinnä laskea tunnettujen parametrien, kuten tuotetun tehon ja sen historian perusteella. Laskentoja joudutaan toistamaan tunnetusta lähtötilasta reaktorin oletetun tulevan käytön perusteella ja laskea polttoaineen kulumista esimerkiksi lataussuunnittelun mahdollistamiseksi. Reaktorinhan on tarkoitus toimia koko käyttöjakso samalla polttoainelatauksella ja siksi sen tulee sisältää tarpeeksi kulumisvaraa.[15, s. 566–567, 580–585]

Kriittisyyslaskut ovat oma sovelluksensa, joissa tarkoitus on poissulkea ei toivotun kriittisyyden mahdollisuus esimerkiksi ydinpolttoaineen kuljetuksen tai valmistuksen yhteydessä. Näissä laskuissa ollaan kiinnostuneita kasvutekijän arvosta ja siis siitä kuinka kaukana ollaan itseään ylläpitävän ketjureaktion alkamisesta.

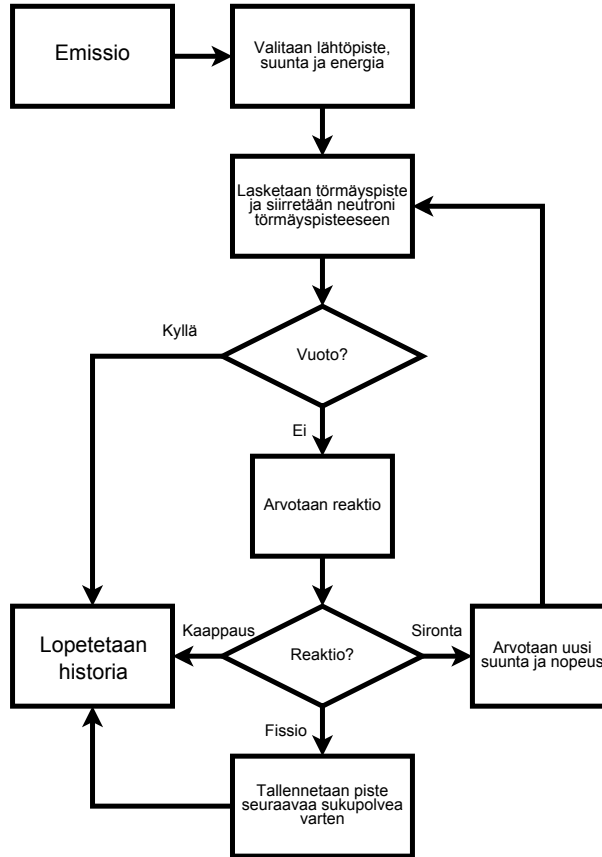
3.1.4 Monte Carlo -reaktorifysiikka

Monte Carlo -reaktorifysiikkakoodi toimii deterministisistä koodeista poiketen yksittäisten neutronien tasolla. Simulaatiot voidaan jakaa analogisiin ja epäanalogisiin riippuen toimivatko ne mallinnettavaa fysikaalista ilmiötä jäljitellen vai eivät.

Analogisessa simulaatiossa siis neutroni syntyy fissiosta ja se kulkee yksittäisenä neutronina reaktorissa. Sen todennäköisyys aiheuttaa ydinreaktio määritetään kussakin kohdassa vaikuttavien materiaaliominaisuuksien perusteella ja mahdollisille reaktioille on selvä todellinen fysikaalinen vastine. Epäanalogisessa simulaatiossa hiukkaset eivät kuvaa todellisia fysikaalisia hiukkasia ja saatua lopputulosta painotetaan tilastollisesti, jotta se kuvaisi haluttua fysikaalista prosessia. Karkeasti ilmaistuna tämä painotus ottaa huomioon arvottujen hiukkahistorioiden eroavaisuuden vastaavista analogisista hiukkahistorioista. Epäanalogisten simulaatioiden tarkoituksena on kasvattaa simulaation hyötysuhdetta.[43, s. 149]

Analoginen Monte Carlo -simulaatio menee pääpiirteissään kuvassa 3.1 esitetyllä tavalla. Neutroni luodaan alkupisteeseen ja sille arvotaan suunta ja nopeus. Tämän jälkeen lasketaan kokonaisvaikutusalat materiaalille, jossa neutroni kulkee ja edelleen ratkaistaan todennäköisyysjakauma neutronin päätymisetäisyydelle. Tämän jälkeen arpomalla satunnaisluku päätetään neutronin törmäysetäisyys. Jos törmäysetäisyys on suurempi kuin materiaali-alue, siirretään neutroni rajapinnalle ja aloitetaan alusta. Jos taas tapahtuu törmäys, niin arvotaan vaikutusalojen keskinäisten suuruuksien mukaan painotettuna tapahtuva reaktio. [43, s. 357–362] Neutronin jäljityk-

sen ja vuorovaikutustodennäköisyyden perusyhtälöt on esitetty esimerkiksi Luxin ja Koblingerin kirjassa ”Monte Carlo Particle Transport Methods: Neutron and Photon Calculations” [43] ja myös Leppäsen väitöskirjassa [38, s. 92–116].



Kuva 3.1: Kaavio Monte Carlo -simulaation neutronihistorian kulusta

Reaktiomahdollisuuksia on kaikki materiaalialueen sisältämien aineiden erilaiset reaktiot, joista tärkeimmät esitettiin kuvassa 2.5. Sirontareaktioissa arvotaan neutronille uusi suunta ja energia, kun taas kaappaus lopettaa neutronihistorian. Fissioneaktio myös lopettaa historian, mutta törmäyspiste otetaan talteen ja siitä voi lähteä fissioneutroni seuraavassa laskentasukupolvessa. Neutroni voi myös päätyä ulos geometriasta, jolloin se vuotaa ja historia lopetetaan. [43, s. 47–55]

Edellä kuvattu menetelmä kuvaa säteenseuranta (ray tracing) -tyyppistä simulaatiota, jossa joudutaan aina erilaisten aineiden rajapinnoilla ratkaisemaan uusi sijainti törmäykselle. Toinen vaihtoehto on käyttää delta-tracking -menetelmää, jossa aineiden rajapintojen käsittely vältetään. Menetelmän ovat esittäneet Woodcock *et al.* jo 1960-luvulla [85]. Menetelmän ideana on käyttää samaa kokonaisvaikutusa-

laa kaikille materiaaleille reaktorissa, jolloin törmäyskohta voidaan ratkaista riippumatta rajapinnoista. Kokonaisvaikutusalaksi valitaan suurin kokonaisvaikutusala reaktorissa esiintyvien materiaalien joukosta ja tämän ja muiden materiaalien kokonaisvaikutusalojen erotuksena saadaan kullekin materiaalille ominainen näennäis-törmäysvaikutusala. Laskettaessa törmäyspistettä käytetään suurinta kokonaisvaikutusala ja etsitään törmäyspisteessä sijaitseva materiaali, jonka jälkeen päätetään onko törmäys todellinen vai näennäinen näennäisvaikutusalan ja suurimman kokonaisvaikutusalan suhteesta satunnaisluvun perusteella. Jos törmäys on näennäinen, niin mitään ei tapahdu ja arvotaan uusi törmäyspaikka. Jos törmäys on todellinen, niin toimitaan säteenseurantamenetelmän tavoin eteenpäin.

Menetelmän heikkoutena ovat voimakkaat paikalliset absorbaattorit, kuten palava myrkky. Tällöin näennäistörmäyksien määrä kasvaa voimakkaasti muissa materiaaleissa ja rajapintojen etäisyyksien laskematta jättämisellä saavutettu nopeusetu menetetään. Lisäksi rajapintojen ylityksiä ei huomioida mitenkään, joten neutronin kulkemaa matkaa tietyssa alueessa ei voida käyttää neutronivuon arviointiin. Tämän sijaan neutronivuota joudutaan arvioimaan tapahtuneiden törmäysten perusteella, mikä on yleensä vähemmän tehokasta. Esimerkiksi pienen materiaalialueen läpi voi kulkea paljonkin neutroneita, mutta todennäköisyys törmäyksen tapahtumiselle voi olla pieni. [38, s. 102]

Kasvutekijää voidaan arvioida helposti sen perusteella kuinka monta neutronia kulloinkin laskettavasta sukupolvesta aiheuttaa uuden fission. Monte Carlo -menetelmässä käytetään siis suoraan aiemmin kohdassa 2.2.1 esitettyä kasvutekijän määritelmää. Esimerkiksi, jos aluksi valitaan tietty määrä tarkasteltavia neutroneita ja niistä joku osa aiheuttaa uuden fission, niin verrataan tätä fissioiden määrään, joka tarvitaan tuottamaan sukupolven alussa oleva määrä neutroneita. Tämän yksityiskohtaiseen toteutukseen on useita tapoja. [43, s. 346–357]

Uudet neutronit voidaan aina lähettää edellisen sukupolven fissioiden tapahtumapaikoilta muistaen, että fissiossa syntyy keskimäärin tietty määrä neutroneita. Tämän menetelmän ongelmana on se, että jos kasvutekijä ei ole tasan yksi, niin neutroneiden lukumäärä muuttuu sukupolvien mukana ja lähestyy joko nolaa tai ääretöntä. Kehittyneempi tapa on pitää neutronien lukumäärä sukupolvien välillä vakiona ja poistaa ylimääräiset tai lisätä puuttuvat neutronit sukupolven aluksi. Toisaalta tässä menetelmässä täytyy pystyä sijoittamaan neutroneja uusiin lähtöpisteisiin tai poistaa ylimääräisiä mahdollisimman hyvin ongelmaa kuvaavasti, jotta tuloksiin ei

synny vääristymää. [43, s. 357–362]

Simulaatiosta kerätään tiettyjä tuloksia, kuten absorptioita, sirontoja, materiaalirajojen ylityksiä tai muita neutronille tapahtuvia ilmiöitä. Näistä luodaan tilastollisia estimaatteja erilaisille fysikaalisille suureille. Tekemällä tilastollisia tarkasteluja voidaan simulaatiossa kerättyjen tulosten perusteella laskea näitä estimaatteja ja määrittellä niille virherajat. [38, s. 117–127]

Monte Carlo -laskentakoodeja on lukuisia ja tunnetuin lienee Yhdysvalloissa kehitetty MCNP (Monte Carlo N-Particle). Muita ovat esimerkiksi ranskalainen TRIPOLI, venäläinen MCU (Monte Carlo Universal) ja Suomessa kehitetty Serpent.

3.1.5 Serpent

Serpent on kolmiulotteinen jatkuvaenerginen Monte Carlo -reaktorifysiikkakoodi, jonka on kehittänyt Jaakko Leppänen Teknologian tutkimuskeskus VTT:ltä (VTT). Koodi on erikoistunut kaksiulotteiseen nippulaskentaan, mutta universumipohjainen geometriamallinnus mahdollistaa monimutkaistenkin kolmiulotteisten ongelmien kuvaamisen. Serpent käyttää ray tracing- ja Woodcockin kehittämän delta-tracking -menetelmän yhdistelmää neutronien seuraamiseen laskennassa. High Temperature Gas-cooled Reactor (HTGR) eli korkealämpötilareaktorilaskentoja ajatellen koodiin on tehty erityisiä geometriatyyppejä helpottamaan näiden reaktorien mallintamista. [37]

Materiaalidata on samassa jatkuvaenergisessä ACE (A Compact ENDF) muodossa kuin MCNP:ssä. Vaikutusalatieto käsitellään yhtenäiseen energia-asteikkoon, joka on kaikille nuklideille ja reaktioille sama. ACE-muodossa jokaisella nuklidilla on oma energia-asteikkonsa ja laskettaessa esimerkiksi kokonaisvaikutusaloja joudutaan tekemään huomattava määrä iteraatioita oikean energiavälin löytämiseksi kunkin nuklidin kohdalla. Yhdistämällä jokaisen nuklidin asteikko saadaan mainittu yhtenäinen energia-asteikko ja säästytään ylimääräisiltä iteroinneilta. Tällä saavutetaan huomattava nopeuslisä muistin käytön kustannuksella. [39, s. 55–56]

3.2 Termohydrauliikkalaskenta

Termohydrauliikkalaskenta on virtausdynamiikan ja lämmönsiirron laskentaa. Laskennan mittakaava vaihtelee kokonaisten laitosten laskennasta pienten erillisilmiöiden laskentaan. Laskentojen laajuudet ja niihin käytettävät ohjelmistot jakavat ydinvoimalaitosten termohydrauliikkalaskentaan käytettävät ohjelmat erilaisiin ryhmiin.

3.2.1 Systemikoodit

Systemikoodit on kehitetty kuvaamaan primääripiirin käyttäytymistä jäähdytteenmenetysonnettomuudessa [58, s. 399]. Systemikoodi mallintaa laitoksen järjestelmien toimimista yhdessä ja malli voi pitää sisällään esimerkiksi primääri- ja sekundääripiirit, ohjaus- ja suojausjärjestelmät sekä apu- ja turvallisuusjärjestelmät. Systemikoodit perustuvat kontrollitulavuus- ja differenssimenetelmään ja laskennassa ratkaistaan energian, massan ja nopeuden säilymisyhtälöt yhdelle tai ongelmasta riippuen kahdelle faasille. [80, s. 413–414, 621–622]

Systemikoodien mallit koostuvat pääasiassa yksiulotteisista komponenteista ja tämä osaltaan rajoittaa menetelmän tarkkuutta muiden syiden ohella [59, s. 3–5]. Useissa koodeissa kolmiulotteisia komponentteja käytetään kuvaamaan paremmin esimerkiksi reaktorin painesäiliön alueella tapahtuvaa virtausta [54, s. 37–41].

RELAP5-3D:n manuaalissa mainitaan, että yksiulotteisuudesta johtuen kaikkien fyysikaalisten suureiden, kuten esimerkiksi nopeuden, poikittaisista gradienteista riippuvia ilmiöitä ei voida ratkaista laskennassa. Tämän seurauksena nämä ilmiöt joudutaan mallintamaan lisäämällä säilymisyhtälöihin lisätermejä. Termit ovat peräisin korrelaatioista, joiden tulisi perustua kokeellisiin tuloksiin tai fyysikaalisiin teorioihin. Osassa korrelaatioista on kuitenkin jouduttu käyttämään insinöörin harkintakykyä johtuen aiheeseen liittyvän tutkimuksen keskeneräisyydestä tai numeerisen stabiiliisuuden vaatimuksista. [77, s. 4-1] Tämä asia on käytännössä sovellettavissa kaikkiin systemikoodeihin.

Systemikoodit soveltuvat 1D-luonteensa vuoksi hyvin laitosten ja isojen laitteistojen laskentaan, jolloin voidaan tutkia koko systeemin käyttäytymistä ilman valtavia laskentatehovaatimuksia. Systemikoodeja ovat esimerkiksi RELAP (Reactor Excursion and Leak Analysis Program) [78], TRACE (TRAC/RELAP Advanced Compu-

tational Engine) [13], APROS (Advanced PROcess Simulator) [83] ja CATHARE (Code for Analysis of THERmalhydraulics during an Accident of Reactor and safety Evaluation) [5].

3.2.2 Laskennallinen virtausmekaniikka

Toisena työkaluna termohydrauliikkalaskuissa käytetään laskennallista virtausmekaniikkaa eli CFD (Computational Fluid Dynamics) -koodeja. Tätä menetelmää on käytetty paljon tutkittaessa lukuisia aloja, vain muutamina esimerkkeinä mainittakoon ajoneuvojen ja lentokoneiden aerodynamiikka, sekä erilaiset virtauskoneet, kuten ahtimet ja turpiinit [81, s. 1].

Tarvittavat säilymisytälöt ovat samat kuin systeemikoodienkin tapauksissa eli ratkaistaan massan, liikemäärän ja energian säilymisytälöitä. Ongelmaa kuvaavat yhtälöt johdetaan tekemällä sopivat fysikaaliset oletukset, kuten onko virtaus kokoonpuristuvaa vai ei ja päädytään ryhmään osittaisdifferentiaaliytälöitä. Lisäksi yhtälöissä esiintyvien fysikaalisten muuttujien, kuten esimerkiksi paineen, tiheyden ja lämpötilan, keskinäisiä riippuvuuksia kuvataan tilanyhtälöillä. [81, s. 10–24]

Useimmin laskennallisen virtausmekaniikan laskentasovellukset käyttävät kontrollitulavuusmenetelmää, jossa tarkasteltava ongelma jaetaan äärelliseen määrään laskentatulavuuksia. Yleensä fyysisillä rajapinnoilla kontrollitulavuudet muodostetaan siten, että kontrollitulavuuksien rajapinnat ovat yhteneviä fyysisten rajapintojen kanssa. Tämän jälkeen muodostetut yhtälöt integroidaan kontrollitulavuuden ylitse ja muodostetaan diskretoidut versiot yhtälöistä. Edelleen rakennetaan yksittäisiin kontrollitulavuuksiin sijoitetuista yhtälöistä yhtälöryhmä ja ratkaistaan tuntemattomat. [81, s. 86–88]

Diskretoinnilla tarkoitetaan, ettei ongelmaa pyritä ratkaisemaan kaikissa pisteissä laskenta-alueella, kuten analyttisesti ratkaistaessa tapahtuisi, vaan vain ennalta määrätyissä kohdissa. Käytännössä tämä voi tarkoittaa esimerkiksi, että kontrollitulavuuden alueella ratkaistu tulos on vakio aina yhden kopin alueella. Oikeasti ratkaisu muuttuu jatkuvasti eikä paloittain ja koppikokoa pienentämällä päästään lähemmäksi oikeaa tilannetta.

Tyypillinen CFD-koodi on jaettavissa kolmeen osaan: Esikäsitteilyään, ratkaisijaan ja jälkikäsitteilyään. Esikäsitteilyllä määritetään mallinnettava geometria ja edelleen

esimerkiksi kontrollitulavuuksien muodostama laskentaverkko. Lisäksi syötetään materiaalitiedot ja ongelman reunaehdot laskentakoppeihin, jotka koskettavat laskentalueen reunaan. [81, s. 2-3]

Ratkaisija nimensä mukaisesti hoitaa ongelman numeerisen ratkaisun. Ratkaisija muodostaa virtauksen tuntemattomille muuttujille arviot yksinkertaisten funktioiden avulla ja sijoittaa nämä arviot alkuperäisten ongelmaa kuvaavien yhtälöiden paikalle. Samalla ratkaisija hoitaa ongelman diskretoinnin ja tämän jälkeen annettujen tietojen perusteella numeerisesti ratkaisee muodostuneen ongelman. Prosessi on iteratiivinen, koska ratkaistava fysikaalinen ongelma on monimutkainen ja epälineaarinen. [81, s. 3-5]

Yhtälöjen yksinkertaistamistavan ja diskretointimenetelmän perusteella CFD-koodit voidaan jaotella ryhmiin. Näitä menetelmiä ovat esimerkiksi differenssimenetelmä, elementtimenetelmä ja aiemmin mainittu kontrollitulavuusmenetelmä. Kontrollitulavuusmenetelmä on näistä yleisimmin käytetty. [81, s. 3-4]

Jälkikäsitteijä hoitaa laskentatulosten esittämisen ihmiselle helpommin ymmärrettävässä muodossa eli piirtää esimerkiksi erilaisia graafeja, leikkauskuvia tai 3D-malleja halutun mukaisesti [81, s. 2-3]. Jälkikäsitteijä voi olla mukana CFD-koodipaketissa tai vaihtoehtoisesti käytetään ulkopuolisia työkaluja, kuten monipuolista avoimen lähdekoodin Paraview-ohjelmaa.

Tunnettuja CFD-koodeja ovat mm. kaupalliset Fluent ja StarCD sekä avoimen lähdekoodin OpenFOAM.

Useimmiten CFD-koodilla laskettaessa rakennetaan laskettava geometria pienistä laskentatulavuuksista, jotka samalla määrittävät ongelmassa esiintyvät rajapinnat. Tämä tarkka kuvaus johtaa ongelmiin mallinnettaessa esimerkiksi veden virtausta hiekkapatjan lävitse. Pieniä hiekanjyväsiä ei voi mallintaa laskentakopeilla, koska yksittäiseenkin hiekanjyvään tarvittaisiin vähintään useita laskentakoppeja kuvaamaan hiekanjyvän muoto oikein. Mallinnettaessa aluetta, jossa on miljoonia hiekanjyviä ei voida tietenkään käyttää tätä lähestymistapaa tietokoneiden laskentakapasiteetin loppuessa kesken hyvin nopeasti. Hiekan kaltaisten huokoisten materiaalien mallinnuksessa käytetään tämän sijaan porositeettimalliin perustuvia laskentamenetelmiä.

Porositeettimallissa käytettävä huokoinen materiaali koostuu kiinteästä aineesta ja siinä olevista toisiinsa yhdistyneistä aukoista. Näiden huokoisen materiaalin sisältä-

mien avointen tilojen kautta voi virrata nestettä, kaasua tai näiden seoksia. Hyvä esimerkki tällaisesta huokoisesta materiaalista on aiemmin mainittu hiekka. [53, s. 1–3]

Mikroskooppisella, esimerkiksi yksittäisen hiekanjyvän, tasolla virtaussuureet ovat selvästikin epäsäännöllisiä verrattuna virtaukseen kokonaisuutena. Kasvattamalla tarkastelualueetta sisältämään suurempi joukko pieniä yksityiskohtia ja ottamalla virtaussuureista keskiarvo saadaan hieman suuremmalla tarkastelualueella järkeviä kuvauksia virtauksen käyttäytymisestä. Porositeettimallin ideana on siis jättää yksityiskohtien mallinnus pois ja ratkaista keskimääräinen isommalla alueella tapahtuva virtaus. Tämän mahdollistamiseksi pitää alkuperäisiä säilymisyhtälöitä muuttaa sisältämään mallintamistapaan liittyvä huokoinen materiaali. [53, s. 1–4]

Porositeetilla tai huokoisuudella tarkoitetaan huokoisessa aineessa olevien aukkojen tilavuuden suhdetta koko tilavuuteen yhtälön (3.2) mukaisesti [53, s. 3].

$$\varepsilon = \frac{V_v}{V_t} \quad (3.2)$$

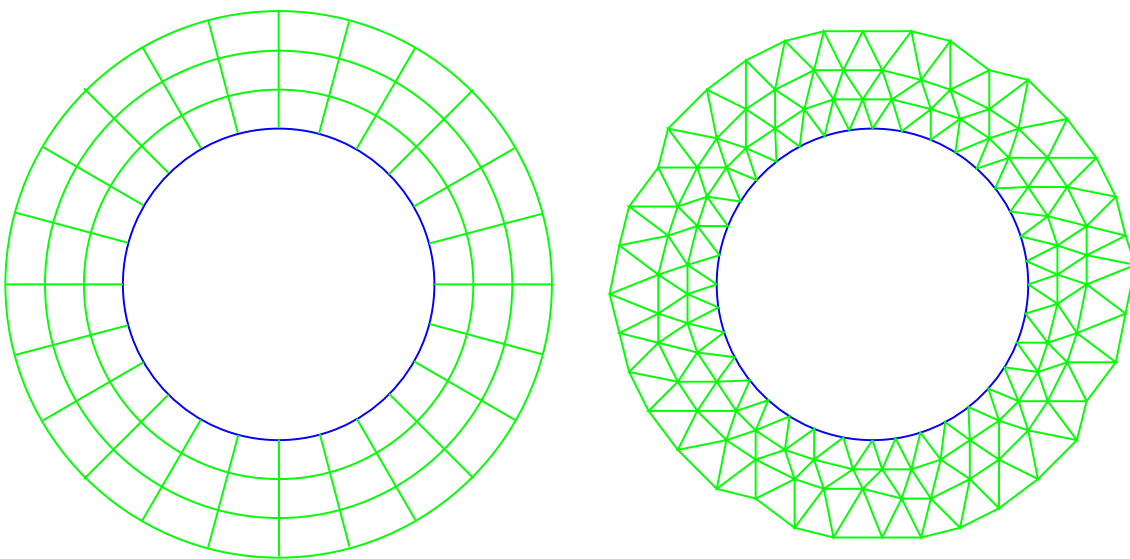
missä

ε	huokoisuus (porositeetti)
V_v	aukkojen viemä tilavuus
V_t	kokonaistilavuus

Määriteltäessä laskenta-alueita voidaan laskentatilavuudet määrittävä laskentaverkko tehdä kahdella periaatteellisesti erilaisella tavalla, rakenteellisena tai rakenteettomana. Menetelmien ero on nähtävissä kuvassa 3.2. Rakenteellisille verkoille on yhteistä, että verkon solmupisteet sijoittuvat koordinaatiston akselien suuntaisten viivojen leikkauspisteisiin, laskentatilavuuksilla on yhtä monta naapurua ja solmupisteet voidaan sijoittaa matriisiin, jossa laskentatilavuuksien paikat voidaan osoittaa indekseillä. Laskentaverkoissa käytetyt koordinaatistot voivat olla karteesisia tai käyräviivaisia. Rakenteellisen hilan muodostaminen laskentageometriian monimutkaistuessa muuttuu hankalaksi ja tätä ongelmaa voidaan vain rajoitetusti kiertää esimerkiksi tihentyvillä verkoilla. Näissä laskentaverkko jaetaan alueittain eri määrillä koordinaattiakselien suuntaisia viivoja, jolloin laskentatilavuuksille muodostuu

näillä rajapinnoilla ylimääräisiä naapureita ja tarvitaan erikoiskäsittelyä jakamaan tai yhdistämään suureita. [82, s. 304–310]

Rakenteeton verkko koostuu yksittäisistä laskentakopeista, joita käsitellään toisistaan erillisinä ja ne eivät muodosta koordinaattiakselien mukaisia rakenteita. Tämä mahdollistaa laskentaverkon helpon muodostamisen vaikeissakin geometrioissa ja tihentämisen tarvittavissa kohdissa, mutta säännöllisen rakenteen puuttuessa täytyy laskentatilavuuksien välinen tiedonsiirto toteuttaa monimutkaisemmin. [82, s. 311–315]



Kuva 3.2: Esimerkki rakenteellisesta ja rakenteettomasta laskentaverkosta

3.2.3 Muu termohydrauliikkamallinnus

Systemikoodien ja laskennallisten virtausmekaniikkakoodien lisäksi on olemassa lukuisia erilaisia tarkan aihealueen koodeja, joita käytetään tietynlaisten ilmiöiden laskemiseen. Tällaisista esimerkkinä voidaan mainita sub channel -koodit, joita käytetään polttoainepinnojen virtauskanavassa tapahtuvien ilmiöiden laskentaan. Tällainen koodi on esimerkiksi F-COBRA-TF [18]. Toinen esimerkkiryhmä ovat ohjelmat, jotka mallintavat polttoaineen käyttäytymistä erilaisissa tilanteissa. Esimerkiksi FRAPTRAN mallintaa kevytvesireaktoreiden polttoaineen lämpötilaa ja mekaanista käyttäytymistä transienttitilanteissa [12].

3.2.4 Menetelmien vertailu

Ydinteknisten sovelluskohteiden näkökulmasta tarkasteltuna CFD:n erona systeemi-koodeihin on mahdollisuus kolmiulotteisten ongelmien ratkaisuun ja monimutkaisten rakenteiden mallintamiseen. Perinteiset yksiulotteiset systeemikoodit ovat toimineet hyvin ydinturvallisuusanalyysissä, koska niille on tehty paljon yksiulotteisia korrelaatioita erityisten koejärjestelyjen tulosten pohjalta. Ongelman muodostavat kohteet, joissa virtaus tapahtuu selvästikin kolmessa ulottuvuudessa, kuten reaktorisydämessä. Luonnonkierto, sekoittuminen ja kerrostuminen ovat esimerkkejä ilmiöistä, joiden esittäminen yksiulotteisina voi olla yliyksinkertaistamista ja johtaa mahdollisesti väärin johtopäätöksiin. [66, s. 9–10]

CFD-koodit ovat hyviä monimutkaistenkin geometrioiden mallintamisessa, mutta ilmiöiden, kuten kaksifaasivirtauksen, monimutkaisuus vaikeuttaa laskentaa. Kolmiulotteisia vertailumittauksia ei ole vastaavassa määrin tehty kuin 1D-mittauksia systeemikoodeille ja tämä rajoittaa laskennallisen virtausmekaniikan luotettavuutta turvallisuusanalyysissä. [66, s. 9–10] Useita ilmiöitä, kuten paineiskuja ja jäähdytteen sekoittumista taas ei voida ennustaa yksiulotteisilla systeemikoodeilla riittävällä tarkkuudella [22].

3.3 Kytketty laskenta

Ydinreaktorin ydinteknistä suunnittelua ei voi erottaa omaksi kokonaisuudekseen muista osa-alueista, kuten termohydrauliikasta ja rakenteellisesta suunnittelusta. Termohydrauliikka sanelee varsin pitkälle reaktoriytimen mitat, jotta lämpötilat eivät nousisi liian korkeiksi turvallisuuden kannalta. Polttoaineenkin käyttöä rajoittavat enemmän mekaaninen kestävyys säteilytyksessä kuin uraanin loppuminen. Perustyökaluja suunnittelussa ovat erilaiset tietokonemallit ja laskentaohjelmat, joissa on otettava huomioon ilmiöiden väliset kytkennät. [15, s. 447–448]

Reaktoria ja sen latauksia suunniteltaessa joudutaan useimmiten etsimään tietokoneohjelmilla yritys ja erehdys -menetelmällä ratkaisuja, joilla koko käyttöjakso saadaan tuotettua energiaa ylittämättä turvallisuuden kannalta olennaisia rajoituksia. Lisäksi konseptin on läpäistävä myös normaalista käytöstä poikkeavia transientteja ilman polttoaineen vahingoittumista. Näissä tarkasteluissa käytetään erityisiä transienttitilanteita laskevia reaktoridynamiikkakoodeja. [68, s. 281]

Perinteisesti kokosydänlaskut tehdään valitsemalla homogenisointilaskuissa, joita si-
vuttiin jo kohdassa 3.1.2, muodostetusta tietokannasta jokaiseen reaktorin osaan si-
tä kuvaavin homogenisoitu polttoainenippu tai sen osa. Nämä koodit ratkaisevat
reaktorissa vallitsevat vuot ajasta riippumattomasti tietylle reaktorin käyttötilalle.
Esimerkiksi lämpötilat ja polttoaineen kuluminen otetaan huomioon sopivat homo-
genisoidut arvot valitsemalla.

Ydinreaktorissa tehontuottoon vaikuttavat esimerkiksi polttoaineen lämpötila, jääh-
dytteen tiheys ja lämpötila, fissiomyrkyt, absorbaattorit sekä viivästyneet neutronit.
Fissioteho vapautuu sekä polttoaineeseen, että jäähdytteeseen osittain heti ja osak-
si viiveellä. Polttoaineeseen syntynyt lämpö johtuu itse polttoaineen ja suojakuoren
lävitse sauvan pinnalle, josta se siirtyy jäähdytteeseen. Reaktoridynamiikassa tä-
tä reaktorin ajastariippuvaa käyttäytymistä pyritään tutkimaan laskentakooodeilla,
jotka sisältävät mallit tilanteeseen vaikuttaville ilmiöille ja niiden keskinäisen kyt-
kennän. [35, s. 8–14]

Reaktoridynamiikkamallinnus voi vaihdella laskettavan sovelluksen mukaan. Esimer-
kiksi mallinnettaessa säätösauvojen uloslento-onnettomuutta ei tarvitse ottaa huo-
mioon esimerkiksi fissiomyrkkijä, koska näin pienessä aikaikkunassa muutokset nii-
den suhteen ovat hyvin pieniä. Kaikissa tilanteissa polttoaineen takaisinkytkentä
lämpötilasta on kuitenkin otettava huomioon. Onnettomuusanalyysseissä useimmi-
ten on lisäksi kytkettävä systeemikoodi mallintamaan voimalaitoksen järjestelmien
muodostamaa kokonaisuutta. [62, s. 510]

Palamalaskennassa ratkaistaan peräkkäisiä ajasta riippumattomia tilanteita, joi-
den perusteella lasketaan polttoaineen muuttuminen säteilytyksessä tällä aikavälillä.
Uusia arvoja käytetään seuraavalla askeleella, jossa on mahdollista muuttaa reak-
torissa vallitsevia olosuhteita tämän käyttöjakson osan mukaiseksi. Näin voidaan
jatkaa laskentaa käyttöjakson loppuun saakka. [15, s. 585–588]

3.3.1 Kytkenä

Kytkenän toteuttaminen esimerkiksi reaktoridynamiikan ja termohydrauliikan vä-
lille voidaan tehdä eri tavoin. Yksi tapa on tehdä toisesta laskennasta aliohjelma ja
useimmiten neutroniikka lisätään aliohjelmaksi termohydrauliikkakoodiin. Toinen
vaihtoehto on ajaa erillisiä koodeja erillisen kytkentäohjelman välityksellä. Kytken-
tä voidaan toteuttaa kirjoittamalla oma kytkentäkoodi ja käyttää siinä esimerkiksi

Parallel Virtual Machine (PVM) tai Message Passing Interface (MPI) -tekniikoita tiedon siirtämiseen ohjelmien kesken. [54, s. 55]

Kytkenässä käytettävien laskentatapojen mukaan kytkentä voidaan jakaa vielä erilaisiin tyyppisiin. Ulkoisessa kytkennässä sydämen lasku erotetaan muusta termohydrauliikkalaskennasta ja reaktoridynamiikkaosa laskee neutroniikan lisäksi sydämessä tapahtuvan lämmönsiirron ja virtauksen. Tietoa osien välillä siirretään ainoastaan sydämen sisään- ja ulostulossa. Sisäisessä kytkennässä termohydrauliikkaosa mallintaa kaiken termohydrauliikan ja tietoa osien välillä siirretään tietysti suoraan laskentakopista toiseen sydämen alueella. Kolmas tapa on käyttää koodeja rinnakkain, jolloin molemmat koodit laskevat termohydrauliikan sydämen alueella. Neutroniikasta saatu tehojakauma siirretään koko piiriä mallintavaan termohydrauliikkaosaan jokaisessa sydämen laskentakopissa, mutta termohydrauliset tiedot ainoastaan sydämen sisään- ja ulostulossa. [24, s. 25–26]

3.3.2 Kytketyt koodit

Systemikoodit sisältävät useimmiten yksinkertaiset pistekinetiikkayhtälöt neutronitehon mallintamiseen [59, s.3]. Useat systemikoodit voidaan kytkeä myös 3D-reaktoridynamiikkasovellukseen, jolloin tehojakauma voidaan mallintaa kolmessa dimensiossa ja reaktiivisuustransientteja voidaan simuloida laitosmallilla. Esimerkiksi yhdysvaltalaiseen TRACE-systemikoodiin voidaan kytkeä PARCS-reaktoridynamiikkakoodi (Purdue Advanced Reactor Core Simulator) ja tällaisella yhdistelmällä voidaan laskea erilaisia kevytvesireaktorin sydämen 3D-transientteja [13, s. 459].

Erilaisia kytkettyjä koodeja on lukuisia erilaisiin sovelluskohteisiin. Esimerkiksi Suomessa VTT:llä on kehitetty useita kytkettyjä koodeja, kuten HEXTRAN-SMABRE (SMAll BREak accident analysis code) venäläistyyppisten VVER (Vodo-vodjanoi energetitseski reaktor) -tyyppisten reaktoreiden transienttianalyysiin [35] ja TRAB-3D/SMABRE kiehutusvesireaktoreiden analyyseihin [25].

3.3.3 Kuulakekoreaktoreihin soveltuvat koodit

Kuulakekoreaktorilaskuissa on käytetty muutamia kytkettyjä koodeja, jotka käyttävät deterministisiä menetelmiä tehon määrittämiseen ja erityistä kuulien tapaukseen soveltuvaa termohydrauliikkaohjelmaa. Esimerkkeinä mainittakoon PBMR268-

vertailulaskennassa käytetyt kytketyt koodit VSOP (Very Superior Old Programs), TINTE (Time-dependent Neutronics and TEmperatures), PANTHERMIX, NEM (Nodal Expansion Method) ja PARCS. Kaikissa muissa paitsi TINTE:ssä erillinen neutroniikkakoodi on kytketty johonkin versioon THERMIX-ohjelmasta, joka laskee termohydrauliikkalaskut. [61, s. 663–664] Vastaavia ohjelmia on myös esimerkiksi DALTON-THERMIX [4] ja taas muita kuin THERMIXiä käyttäviä on esimerkiksi KAERI:n (Korean Atomic Energy Research Institute) kehittämä MARS-GCR/V1, joka on alun perin kevytvesireaktorien mallinnukseen tehdystä ohjelmasta laajennettu versio korkealämpötilareaktoreita varten [36].

VSOP on kehitetty tutkimuskeskuksessa Jülichissä Saksassa ja sitä on käytetty useimmiten kuulakekoreaktoreiden tutkimiseen ja siihen on kehitetty paljon osia juurikin tästä näkökulmasta. Koodi on monipuolinen ja sen tärkeimpiin ominaisuuksiin kuuluu esimerkiksi tarvittavien vaikutusalatietojen käsittely, varsinaiset diffuusiolas-
kut, palaman ratkaiseminen ja termohydrauliikkalaskenta, joka tosin onnistuu vain kaksiulotteisesti eli lasketaan aksiaali- ja radiaalisuunnassa. [63, s. 1]

TINTE käyttää kahta energiaryhmää ja differenssimenetelmää diffuusioyhtälön ratkaisemiseen. Koodilla voi ratkoa sekä vakiotilan ongelmia, että transientteja, ja se on erityisesti suunniteltu korkealämpötilareaktoreiden laskentaan. Geometria on tässäkin rajattu sylinterimäisiin reaktoreihin kahdessa ulottuvuudessa. Myös tämä koodi on kehitetty Jülichissä. [17, s. 5] Koodista on myös kehitetty uudempi moniryhmäversio MGT (Multi Group TINTE) [34].

PANTHERMIX käyttää High Temperature Reactor (HTR) termohydrauliikkamal-
linnukseen niin ikään Jülichissä kehitettyä THERMIX-sovellusta. PANTHER laskee tehojakauman sekä vakiotilassa, että aikariippuvassa tilanteessa annetun lämpötila-
jakauman perusteella. THERMIX-DIREKT laskee vastaavasti lämpötilajakauman tehojakauman perusteella. Laskennan aluksi käynnistetään PANTHER, joka kut-
suu UNIX-skriptillä termohydrauliikkasovellusta ja muunto-ohjelmia. Tiedonsiirto tapahtuu tiedostojen välityksellä ja muunto-ohjelmat muuttavat tiedot aina toisen ohjelman ymmärtämään muotoon. [55] PANTHER on nodaalimenetelmään perus-
tuva 3D-diffuusiokoodi, joka tukee ratkaisumenetelmästä riippuen kahta tai useam-
paa energiaryhmää [26, s. 3]. PANTHERin kanssa käytetään useimmiten WIMS-
nippukoodia homogenisointiin.

NEM on Pennsylvania State Universityn kehittämä koodi, joka pystyy kolmiulottei-
seen ratkaisuun nodaalimenetelmällä suorakulmaisessa, sylinterimäisissä ja heksa-

gonaalisisissa geometrioissa. Koodilla voi ratkaista sekä vakio- että transienttitilojen ongelmia. [56]

PARCS on Purdue Universityn kehittämä differenssi- tai nodaalimenetelmää käyttävä diffuusiokoodi, jossa on myös mahdollisuus käyttää SP_3 transport-menetelmää. Myös kinetiikka, palamalaskenta ja heksagonaaligeometria on sisällytetty koodiin. PARCS on modulaarinen ja esimerkiksi edellä mainittuja ominaisuuksia sisällytetään laskentaan tarpeen mukaan. [14]

Myös CEA (Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives) on kehittänyt kaasujäähdytteisille reaktoreille käytettävää CAST3M/ARCTURUS CFD-koodia, jonka voi kytkeä CRONOS2 deterministiseen neutroniikkakoodiin tai CATHARE-systeemikoodiin. Homogenisointiin käytetään APOLLO2-koodia. Koodipaketti on kolmiulotteinen, mutta näyttäisi kykenevän ratkaisemaan vain ajasta riippumattomia ongelmia. Tarkempi lämmönsiirto on käytettävissä esimerkiksi yksittäisille virtauskanaville ja porositeettimalli kokonaisien reaktoreiden mallintamista varten. Kytkeä kuvataan monimutkaiseksi ja vaikuttaisi, että tiedot siirretään tiedostoina erillisten ohjelmien välillä. [71]

INL:ssä (Idaho National Laboratory) on kehitetty myös uusia koodeja neutroniikan laskentaan. PEBBED käyttää diffuusiyohtälöä ja se voi ratkaista ajasta riippumattomia ongelmia nodaali- tai differenssimenetelmällä kolmessa ulottuvuudessa. Homogenisointi lasketaan COMBINE-koodilla ja termohydrauliikan mallinnukseen käytetään THERMIX-KONVEK -koodia [9], joka on vanhempi versio THERMIX-koodista. [20], [19]

Ajastariippuvien ongelmien ratkaisuun on kehitetty toinen koodi CYNOD, joka käyttää D-CMFD (Direct Coarse Mesh Finite Difference) -menetelmää. Tämä koodi on kytketty THERMIX-KONVEK ja RELAP5-3D -koodeihin transienttien laskemiseksi. Kytkeä on toteutettu PVM:n (Parallel Virtual Machine) avulla näihin erillisiin koodeihin. [23]

THERMIX laskee kuulakekoreaktorin termohydrauliikkaa sylinterikoordinaatistossa eli koodi on kaksiulotteinen. Koodi laskee lämpötilajakauman johtumisen, säteilyn ja konvektion, sekä annettujen tehojakauman ja virtaustietojen perusteella. Laskentaa voidaan tehdä niin vakio-tilassa, kuin laskea transienttejakin. Koodin sisältämät korrelaatiot esimerkiksi johtumiselle tai lämmönsiirtokertoimelle perustuvat osaksi kokeisiin ja ovat osaksi täsmällisiä sovitetuin parametrein. Koodia on validoitu

AVR-reaktorilla tehtyjä kokeita vastaan. [70], [56]

Yhteenvetona soveltuvia reaktorifysiikkakoodeja on runsaasti, koska reaktorifysiikan näkökulmasta laskenta ei käänny aivan pääläelleen siirryttäessä kevytvesireaktoreista, joille suurin osa koodeista on alun perin tehty, korkealämpötilareaktoreihin. Jäähdytteessä esiintyvä yksi faasi jopa yksinkertaistaa transienttilaskentaa kevytvesireaktoreihin verrattuna. Lämmönsiirron laskenta sen sijaan muuttuu edellä mainitusta huolimatta oleellisesti, koska virtaavien aineiden luonne ja reaktorien rakenne näiden reaktortyyppien välillä on hyvin erilainen. Käytännössä tämä näkyy käytettävissä olevien koodien suhteellisen vähäisenä määränä.

3.3.4 Korkealämpötilareaktorien mallinnus

Kuulakekoreaktoreista on olemassa pari isompaa vertailulaskentaa, PBMR-268 ja PBMR-400 -tapaukset. Aiemmin mainitut kytketyt koodit olivat esimerkkejä PBMR-268 -vertailulaskentaan osallistuneiden tahojen käyttämistä laskentatyökaluista ja se sisältää useita vakiotilojen ja transienttien laskentatapauksia. Tämän pohjalta tehtiin PBMR 400 OECD/NEA-benchmark, jossa on korostettu enemmän transienttilaskentaa. [61] Näitä vertailulaskentoja on laskettu kaikilla mainituilla laskentakoodilla ja alustavia tuloksia on löydettävissä useiden kohdalta lähdemateriaaleista.

Boer *et al.* ovat laskeneet DALTON-THERMIX kytketyllä koodilla PBMR-400 ja HTR10 -reaktoreista erilaisia tapauksia koodin validointimielessä. Tulokset näyttävät pitävän hyvin yhtä verrattuna TINTE-koodiin. DALTON-THERMIX koodipaketti on osa isompaa kokonaisuutta, jota kehitetään sisältämään esimerkiksi myös palamalaskenta ja kuulien virtaus reaktorissa. [3]

CEA:lla on laskettu CAST3M/ARCTURUS-koodilla VHTR (Very High Temperature Reactor), GFR (Gas-cooled Fast Reactor) ja HTR10-reaktoreita ja tulokset ovat olleet esimerkiksi HTR-10-reaktorin tapauksessa varsin hyviä pieniä poikkeamia lukuunottamatta kohdissa, joissa konvektiivinen lämmönsiirto on tärkeää. [71], [40]

Thomas *et al.* ovat esittäneet ICAPP '10 -konferenssissa paperin ”Steady-State, Whole-Core VHTR Simulation with Consistent Coupling of Neutronics and Thermo-Fluid Analysis”, missä DeCART deterministinen kuljetusyhtälöä ratkaiseva neutroonikkakoodi ja Star-CD CFD-koodi yhdistetään kytkettyyn laskentaan VHTR:n (Ve-

ry High Temperature Reactor) tapauksessa. Mallinnettava reaktori voidaan jakaa kolmeen identtiseen osaan ja pienillä lisäoletuksilla kuuteen osaan laskenta-alueen pienentämiseksi. Myös heksagonaalisissa elementeissä olevat polttoainekompaktit on homogenisoitu laskennan nopeuttamiseksi. Laskennallisen virtausmekaniikan malli on liian karkea tarkkaan mallinnukseen, vaikka koppeja onkin 22 miljoonaa kappaletta. Laskenta konvergoi hyvin ja viiteen iteraatiokierrokseen kului 18 tuntia 12 koneen Linux-klusterilta, missä oli 8 suoritinydintä konetta kohti. [79]

Lisäksi on tietysti valtava määrä laskentoja, joissa on laskettu joko lämmönsiirtoa tai reaktorifysiikkaa, muttei molempia kytkettynä. Esimerkiksi HTR10-reaktorista on olemassa vertailulaskentaa termohydrauliikan osalta [7].

3.4 Polttoainekuulien pakkautuminen

Perinteisten ydinvoimalaitosten mallinnuksessa ei yleensä tarvitse tutkia kappaleiden tai partikkelien virtausta ainakaan samassa mielessä kuin kuulakekoreaktorin tapauksessa. Tähän mallintamiseen voidaan käyttää DEM (Discrete Element Method) -laskentaa. DEM laskentaa voidaan käyttää mallinnettaessa esimerkiksi perinteisten kattiloiden leijupetien käyttäytymistä tai raemaisen aineen liikkumista putkissa tai säiliöissä.

Mallinnettaessa kappaleiden vuorovaikutuksia jokaisen kappaleen liike käsitellään kappale kappaleelta ja niiden kohtaamat voimat kaikissa kosketuspisteissä, joiden perusteella numeerisesti ratkaistaan kappaleiden liiketiloja. Menetelmää on käytetty jo 1970-luvulla tietokoneilla ratkaisemaan yksinkertaisia ongelmia. [11]

4 Kytketty laskenta kuulakekoreaktorissa

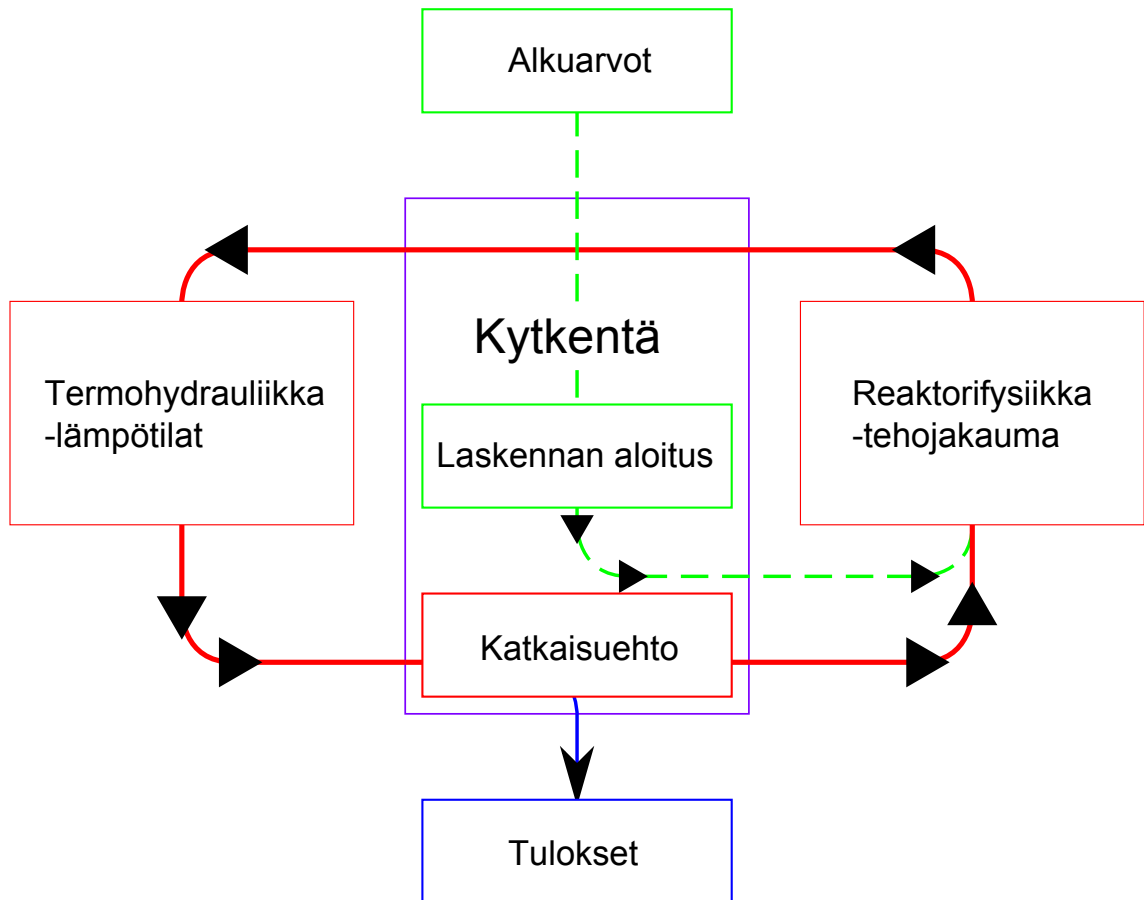
Ydinreaktorin käyttö ja sen turvallisuus ovat monien tekijöiden summia, joita ei pysty luotettavasti mallintamaan ilman erilaisten ilmiöiden yhdistämistä yhdeksi kokonaisuudeksi. Myös kuulakekoreaktoreilta vaaditaan nykyisiin ydinvoimalaitoksiin verrattuna parempaa turvallisuutta ja erilaisena konseptina tänä päivänä käytettyihin reaktoreihin verrattuna niihin kohdistuu monia avoimia kysymyksiä. Yksityiskohtaisen reaktorifysiikan ja termohydrauliikan kytkemisen seurauksena voidaan laskea ja tutkia ilmiöitä, joita ei ole aiemmin voitu mallintaa lainkaan tai joiden mallintaminen on ollut hyvin hankalaa. Tällaisia ilmiöitä ovat esimerkiksi satunnaisen pakkautumisen seurauksena syntyvät tihentymät ja harventumat. Lisäksi reaktori voidaan mallintaa koko laskennassa kolmiulotteisena, mikä ei useimmissa nykyisin käytetyissä koodeissa onnistu.

4.1 Kytketyn laskennan kulku

Kuulakekoreaktorin tapauksessa kytketty laskenta kulkee kappaleessa 3.3 esitetyn tavan mukaisesti. Kuvassa 4.1 on esitettyinä laskennan pääelementit. Laskentaa varten on oltava materiaalitiedot ja niiden pohjalta tehdyt mallit reaktorifysiikka- ja termohydrauliikkalaskentaa varten. Tiedonsiirtomekanismi laskentojen välillä siirtää tuloksia molempiin suuntiin ja lisäksi tarkastaa laskentakierrosten välissä onko haluttu tarkkuus saavutettu. Käytännössä tarkistetaan, onko tilanne muuttunut edellisten laskentakierrosten välillä niin vähän, että laskenta voidaan lopettaa.

Kevytvesireaktoreihin verrattuna yksi merkittävä ero tulee epämääräisistä polttoaine-elementtien paikoista, mikä monimutkaistaa tilannetta. Kuulien paikat ovat satunnaisia ja kuulakekoreaktorissa ne muuttuvat hiljalleen, koska reaktori on käynnissä ladattava. Tämän mallintaminen vaatisi ajasta riippuvaan kytkentään vielä yhden palikan lisää, mikä vaikeuttaisi kyseisen ongelman ratkaisua entisestään. Toi-

saalta jäädytteenä käytettävästä heliumista johtuen jäädytteenä ei esiinny kuin yksi faasi, mikä taas helpottaa laskentaa.



Kuva 4.1: Kytketyn laskennan pääosat

4.2 Laskentakoodeilla tapahtuva mallinnus

Kuulakekoreaktorien kuulien pakkautuminen on oma ilmiönsä ja sen mallintamiseen vaaditaan omat työkalunsa. Polttoainekuulat tiputetaan yläpuolelta reaktoriin ja otetaan alhaalta pois. Syntyneestä satunnaisesta rakenteesta pitää tietää vähintään keskimääräinen pakkaustiheys muiden laskentojen pohjaksi ja parempi olisi tietää pakkaustiheyden vaihtelu eri osissa reaktoria. Monimutkaisemmissa analyyseissa tarvitaan tietoa myös kuulien virtauksesta reaktorin lävitse.

Tehontuotto lasketaan reaktorifysiikkakoodilla, jonka lähtötiedoiksi tarvitaan kaikki reaktorin mitat ja kuulakasan rakenne, materiaalitiedot sekä fysikaaliset olosuhteet.

Periaatteelliset kaksi vaihtoehtoa olisi käyttää joko kappaleessa 3.3.3 esiteltyjen koodien tapaan determinististä menetelmää tai sitten Monte Carlo -menetelmää.

Termohydrauliikkamallinnuksessa pyritään laskemaan virtauksen kulku ja lämpötilat eri osissa kuulakekoa. Lähtötietoina ovat kuulakasan rakenne ja tehontuotto reaktorifysiikkalaskennan puolelta.

4.2.1 Reaktorifysiikkakoodit ja HTR-mallinnus

Deterministisessä menetelmässä alue jaettaisiin laskentakoppeihin, mahdollisesti vastaavan kokoisiin kuin käytettävässä termohydrauliikkamallissa, ja niiden sisältö homogenisoitaisiin. Homogenisointi voitaisiin taas tehdä joko jollakin deterministisellä neutronin kuljetusyhtälöön perustuvalla menetelmällä tai Monte Carlo -menetelmällä. Etuna deterministisellä menetelmällä on ratkaisun nopeus, mutta haittapuolena monimutkaisempi laskentatapa ja tuloksiin aiheutuva virhe esimerkiksi geometriamallin yksinkertaistamisen ja kappaleessa 2.2.4 mainittujen itsevarjostusilmiöiden takia. Homogenisoidussa alueessahan kaikki aineet ovat tasaisesti sekoittuneet eivätkä materiaalit enää ole erillisiä, mikä on otettava huomioon tässä lähestymistavassa. Itsevarjostukseen liittyvien virheiden huomioonottamiseksi voidaan tehdä Monte Carlo -menetelmällä tarkasteluja ja korjata tulosta kohti oikeaa arvoa.

Monte Carlo -menetelmällä laskenta voidaan aloittaa heti laskentageometrian mallintamisen ja materiaaliominaisuuksien syöttämisen jälkeen eli voidaan alkaa arpoa neutronihistorioita ja keräämään tuloksia, jotka laskennan päätteeksi kerätään yhteen. Laskentageometriaa kannattaa tässäkin menetelmässä yksinkertaistaa laskennan nopeuttamiseksi mahdollisuuksien mukaan, koska kohdassa 3.1.4 esitellyt neutronin jäljitysmenetelmät voivat viedä merkittävän osan käytetystä laskenta-ajasta. Menetelmän hyviä puolia on laskennan yksinkertaisuus ja tarkkuus, koska mitään merkittäviä oletuksia ei tarvitse tehdä. Haittapuoli on tarvittava laskentateho, joka menetelmän hyvästä rinnakaistuvuudesta huolimatta estää menetelmän käyttämisen monimutkaisissa kokoreaktorigeometrioiden tapahtuvaan mallinnukseen ja transienttilaskentaan vielä pitkään.

Monte Carlo -reaktorifysiikkamallinnuksessa kaikki rakenteissa olevat muodot pyritään mallintamaan yksinkertaisilla perusmuodoilla, kuten viivoilla, nelikulmioilla tai

ympyröillä. Näistä muodoista voidaan kolmiulotteisissa tapauksissa rajata esimerkiksi sylinteri kuvaamaan polttoainesauvan uraania. Lähtökohtaisesti pyritään yhtenäinen materiaaialue mallintamaan sellaisena myös Monte Carlo -mallissa. Asia ei tietysti ole näin yksinkertainen, koska lämpötilajakauman määrittäminen Monte Carlo -koodissa vaatii materiaaialueiden jakamisen pienempiin osiin, jotta niihin voidaan sijoittaa eri lämpötiloissa olevaa sinänsä samaa materiaalia.

Palamalaskuissa on oleellista materiaalien muuttuminen neutronisäteilytyksen kulessa ja esimerkiksi erityisesti palavia absorbaattoreita sisältävät materiaaialueet joudutaan jakamaan useisiin kerroksiin, jotta muuttumista voi kuvata realistisesti. Ongelma johtuu alkujaan siitä, että yhtä materiaaialuetta kuvataan yhdellä neutronivuon arvolla, joka muuttuu paikallisesti huomattavasti esimerkiksi sauvan pinnalta syvemmälle mentäessä, mutta keskiarvoistetaan isompaan alueeseen ja tilanne ei vastaa enää mallinnettavaa fysikaalista prosessia.

Kuulakekoreaktorin mallintaminen vaihtelee merkittävästi erilaisten Monte Carlo -koodien välillä. Koodeissa ei välttämättä ole valmista geometriatyyppejä kuulakeon mallintamiseen, vaan kuulakeko joudutaan kasaamaan yksinkertaisista perusmuodoista eli palloista. Sydänalue sisältää paljon palloja ja tämä aiheuttaa helposti suorituskykyongelmia neutronia jäljittävässä geometriarutiinissa ellei käytetä yksinkertaistusta tai sopivaa hakualgoritmia. Erityisesti tästä tulee ongelma, jos myös polttoainekuulien sisällä olevat polttoainepartikkelit mallinnetaan.

Serpent-koodin lisäksi esimerkiksi MONK käyttää aiemmin kohdassa 3.1.4 mainittua delta-tracking -menetelmää ja pyrkii lisäksi mallintamaan kuulakeon satunnaista pakkautumista. [51]

4.2.2 Ydinmateriaalitiedot

Reaktorifysiikan laskentaohjelmat laskevat neutronien käyttäytymistä, minkä määräävät aiemmin kohdassa 2.1 käsitellyt erilaiset ydinreaktiot. Ohjelmat käyttävät mittausdatan ja teoreettisten mallien pohjalta laadituista materiaalikirjastoista saatuja vaikutusalatietoja laskennassaan. Riippuen käytettävän laskentaohjelman tyyppistä materiaalidata käsitellään sopivaan ohjelman haluamaan muotoon. Merkittävä tekijä materiaalitietojen kannalta on laskentaohjelmassa käytetty neutronin liike-energian käsittely. Deterministiset koodit jakavat aina materiaalin vaikutusalat äärelliseen määrään energiavälejä, joiden määrä vaihtelee yksinkertaisimmillaan

yhdestä joihinkin satoihin riippuen sovelluskohteesta. Monte Carlo -tyyppisissä laskentaohjelmissa on mahdollista käyttää edellä mainitun menetelmän lisäksi jatkuvaenergistä materiaalityyppiä, koska yksittäiset neutronit voivat saada minkä tahansa liike-energian sirontareaktioissa.

Energiaväleihin jakamisen kannalta huonona seikkana monien aineiden vaikutuslakäyrät sisältävät resonansseja, kuten alkuosan kuvassa 2.6 uraanin tapauksessa nähtiin. Jakamalla tällainen resonansseja sisältävä käyrä väleihin, joiden sisällä vaikutuslasketieto saa vakioarvon, on erilaisten menetelmien avulla varmistettava, että keskimääräiset reaktionopeudet menevät oikein ja siis kuvaavat oikein fysikaalista tilannetta.

Monte Carlo -koodeissa mahdollinen jatkuvaenerginen menetelmä on sinänsä yksinkertaisempi soveltaa kuin edellinen, mutta muutamien vaikutuslasketietojen sijaan käytetään tarkimmassa tavassa jopa täydellistä vaikutuslasketietoa, jolloin tarvittavan muistin määrä muodostuu suureksi. Aineilla, joilla vaikutuslasketietoa ei ole resonansseja, materiaalityyppi sisältävät tiedostot ovat suhteellisen pieniä, kuten esimerkiksi He-4:n tapauksessa 3 megatavua. Vastaavasti suuria tiedostot ovat raskailla aineilla, kuten esimerkiksi U-238:n 110 megatavua. Tämä on vain karkea suuntaa antava suuruusluokka muistin käytölle ja siihen vaikuttavat niin erilaiset vaikutuslasketietoa laskentaohjelmien ymmärtämään muotoon käsittelevän ohjelman, kuten NJOY:n [42], parametrit, kuin laskentaohjelmienkin asetukset.

Materiaalityyppiä käsitellään valmiiksi yleensä tiettyihin lämpötiloihin esimerkiksi 300 kelvinin välein. Nämä lämpötilaerot ovat tietenkin liian karkeita suoraan käytettäväksi kytketyssä laskennassa ja siksi materiaalityyppiä pitää luoda uudelleen kaikissa tarvittavissa lämpötiloissa aina ennen reaktorifysiikkalaskentaa. Serpentiin tosin on rakennettu sisään menetelmä kappaleessa 2.2.2 mainitun Doppler-ilmiön huomioon otamiseksi materiaaleissa ja tämä muutos tehdään ennen varsinaista laskentaa lähtien normaaleista lämpötila-arvoiltaan karkeista materiaalityyppitiedoista [39, s. 49].

Lisäksi tarvitaan termisen sironnan kirjastot, koska termisellä energia-alueella neutronin törmäämistä atomiin ei voi käsitellä pelkästään näiden kahden välisenä eli vapaakaasumallin perusteella, vaan mukaan on otettava kemiallisten sidosten aiheuttama muutos. Tätä vaikutuslasketietoa on saatavissa monille yleisimmille hidastinaineille, kuten vesi, raskasvesi ja grafiitti.

4.2.3 Termohydrauliikkamallinnus

Menetelmiä kuulakekoreaktorin mallintamiseksi ja lämpötilojen ratkaisemiseksi on kolme erilaista. Ensimmäisessä käytetään yleisiä mittauksista ja teorioista johdettuja korrelaatioita kuulakasan läpi kulkevan virtauksen painehäviölle sekä virtauksen ja polttoainekuulien väliselle lämmönsiirtokertoimelle. Tällä menetelmällä voidaan käytännössä tehdä karkeita keskimääräisiä arvioita kuulakeon yleisestä käyttäytymisestä. Yhtälöitä ja korrelaatioita esitellään myöhemmin kappaleessa 4.4.

Muiden menetelmien periaatteet esiteltiin jo aiemmin kohdassa 3.2.2. Porositeettimallissa alue jaetaan laskentakoppeihin, joihin mahtuu vähintään useita kuulia ja kuvataan alueen sisällä oikeasti tapahtuvia ilmiöitä keskiarvoistetusti. Tätä menetelmää voi ajatella jossain määrin analogisena reaktorifysiikkaongelmissa käytettyyn homogenisointiin. Virtausvastus lasketaan annettujen huokoisuuksien perusteella sopivan painehäviökorrelaation avulla. Tämän menetelmän etuina ovat varsin pieni laskentakoppien määrä ja siitä seuraava menetelmän nopeus laskennassa sekä lämpötilojen ratkaisumahdollisuus reaktorin eri osissa. Haittapuolena laskennassa ei käsitellä jäähdytettä tai polttoainekuulia vaan niistä koostuvaa huokoista seosta, mikä ei kuvaa tapahtuvaa fysikaalista prosessia täsmälleen oikein. Lisäksi painehäviö ja lämmönsiirtoon liittyvät parametrit joudutaan antamaan korrelaatioilla niiden ratkaisemisen sijaan.

Yhdellä energiayhtälöllä ratkaistaessa huokoista ainetta ei tuloksena saada erillisiä lämpötiloja käytetylle polttoainekuulien kiinteälle aineelle ja virtaavalle heliumille. Tämä muodostaa ongelman laskentaan, koska saatuja tuloksia ei voida suoraan käyttää kuulien lämpötiloina reaktorifysiikkalaskennassa. Kahdella energiayhtälöllä ratkaistaessa saadaan lämpötilat molemmille aineille, mutta myös lämmönsiirtomallit joudutaan tekemään erikseen.

Viimeinen tapa olisi mallintaa polttoainekuulat suoraan ja jakaa niiden ulkopuolelle jäävä virtausalue kokonaisuudessaan laskentakoppeihin. Tällöin voitaisiin ratkaista virtausta tarkemmin ja mallintaa esimerkiksi turbulenssin vaikutusta lämmönsiirtoon ja painehäviöön. Lämmönsiirtokerroin kuulien pinnalta jäähdtevirtaukseen ja virtauksen painehäviö määräytyisivät suoraan laskennassa. Myös kuulat olisi mahdollista mallintaa kolmiulotteisina, jolloin virtauksen ja viereisiin kuuliin koskevien pintojen aiheuttamat paikalliset lämpötilamuutokset kuulassa voitaisiin havaita. Menetelmän etuna olisi yksityiskohtainen ratkaisu, mutta haittapuoli on, ettei tällaista

ongelmaa kyetä nykyisillä tietokoneilla ratkaisemaan. Menetelmällä voidaan tutkia enintään muutamien kuulien muodostamaa aluetta ilman laskenta-aikojen ja muistinkäytön kasvamista tämän hetken tietokonekapasiteetin ulottumattomiin. Kuulien pyöreä muoto ja satunnainen sijainti vaikeuttavat osaltaan laskentaverkon rakentamista. Laskentakoppien on oltava hyvin pieniä, jotta kuulien välisissä ahtaissa väleissä kulkeva virtaus ja siihen vaikuttava turbulenssi tulisivat oikein kuvatuiksi.

Ensimmäistä menetelmää voisi kuvata milteipä pistemäiseksi, koska tulokset ovat samanlaiset koko reaktorille. Tietysti olettamalla tehojakauman muoto ja pedin virtausvastus tietyn muotoisiksi voidaan menetelmällä pyrkiä arvioimaan reaktorissa vallitsevia lämpötiloja vaikka kolmessakin ulottuvuudessa. Porositeettimenetelmää voi soveltaa kolmiulotteisena jakamalla reaktori halutulla tavalla laskenta-alueisiin muistaen, että alueen pitää sisältää tarpeeksi suuri määrä polttoainekuulia. Pienessä mittakaavassa menetelmä ei pysty kuvaamaan virtauksen käyttäytymistä oikein, koska yksittäisen polttoainekuulan vaikutus virtaukseen on yksityiskohtaisella tasolla suuri ja tätä ei mallinneta mitenkään. Viimeisenä mainittu tarkka kuvaus on luonnollisestikin kolmiulotteinen, mutta rajoittuu pienten alueiden tarkasteluun.

Useimmissa kuulakekoreaktoriin liittyvissä koodeissa käytetty kaksiulotteinen termohydrauliikkamallinnus estää varsin tehokkaasti esimerkiksi tehovärähtelyiden mallintamisen, koska lämpötiloja ei saada laskettua kuin keskimäärin koko reaktorissa tietyllä etäisyydellä radiaalisuunnassa. Toisaalta tehovärähtelyillä on kuitenkin paljon vähemmän merkitystä kuulakekoreaktorissa heliumista johtuen kuin esimerkiksi kiehumusvesireaktoreissa, joissa vesi ja sen kiehuminen vaikuttavat voimakkaasti sydämen reaktiivisuustasoon.

Termohydrauliikan näkökulmasta reaktori on erilainen kuin reaktorifysiikan kannalta. Reaktorifysiikkalaskennan näkökulmasta aine on paikallaan ja vain neutronit liikkuvat, koska kaikkien reaktorissa esiintyvien rakenteiden tai jäähdytteen nopeus on pieni neutronien nopeuteen verrattuna. Reaktorissa esiintyvät materiaalit vaikuttavat neutroneihin, mutta neutronit eivät juurikaan vuorovaikuta keskenään. Tässä tulee selvä ero termohydrauliikkamallinnukseen, koska reaktorissa virtaa aina jäähdyttävä aine. Tätä jäähdytettävää ainetta mallinnettaessa pitää ottaa huomioon myös jäähdytettävän aineen oma liike ja sisäiset vuorovaikutukset.

4.2.4 Polttoainekuulien pakkautuminen ja virtaaminen

Yksinkertaisin vaihtoehto olisi sijoittaa kuulat reaktoriin johonkin säännölliseen rakenteeseen, kuten kuutiohilaan. Tässä esimerkiksi kuution jokaisessa kulmapisteessä on polttoainekuula ja rakenne jatkuu samanlaisena kaikkiin suuntiin. Toinen vaihtoehto on käyttää jotain suhteellisen yksinkertaista menetelmää, kuten tiputella kuulia reaktoriin ja jättää ne ensimmäiseen syntyvään stabiiliin asemaan. Kolmas menetelmä on käyttää koetuloksiin perustuvia korrelaatioita. Neljäs tapa mainittiin jo kappaleessa 3.4 eli DEM, jossa pyritään realistisesti mallintamaan kaikki kappaleiden väliset voimat ja ratkaisemaan kappaleiden liike-tilat deterministisesti.

DEM-koodeilla simulointi voidaan tehdä erilaisilla tavoilla. Tarkimmassa tapauksessa pyrittäisiin jäljittämään reaktorin oikeaa lataustekniikkaa ja käynnissä lataamiseen liittyvää kuulien poistamista reaktorista. Tällä menetelmällä voitaisiin yrittää mallintaa reaktorin lataamista tiputtamalla kuulat oikeaa lataustekniikkaa noudattaen tai sitten esimerkiksi luomalla kuulia kerralla suuri määrä satunnaisesti sijainteihin antaen tämän löyhän kasan tippua ja pakkautua reaktoriin.

Kuulakasaa ei tarvitse laskea uudelleen ratkaistaessa ongelmia vakio-tilassa, joten saatu kuulakasa toimii tällaisessa laskennassa vain alkuarvona. Transienttilaskennan näkökulmasta kuulien virtaus on hidaskäyttäjä ja hyödyt sen huomioonottamisessa laskennassa kyseenalaisia. Poikkeuksen voi muodostaa maanjäristys, joka saattaa aiheuttaa reaktiivisuusmuutoksen itse kuulakasassa tapahtuvan pakkaustihyden muutoksen seurauksena.

Palamalaskennassa kuulavirtauksien mallintaminen on olennaista, jotta tiedetään millainen vuojauma reaktoriin muodostuu ja toisaalta miten kuulat kuluvat tässä vuojaumassa reaktorin läpi virratessaan.

4.3 Mallien välinen tiedonsiirto

Eri ilmiöiden laskentamallien välillä on kyettävä siirtämään tietoa kytkennän aikaansaamiseksi ja aiemmin mainittu mallinnettavien ilmiöiden eroavaisuus toisistaan tekee suoran tiedonsiirron ongelmalliseksi. Reaktorifysiikkamallinnuksessa kopeissa tai muissa geometrisissa alueissa syntyvä teho pitää pystyä sijoittamaan termohydrauliikkamallin laskentakoppiin, joka sijaitsee vastaavalla paikalla reaktorissa.

Usein laskenta-alueet ovat erikokoisia ja tiedonsiirto riippuu käytetystä menetelmästä.

Mallinnettaessa kuulakekoreaktorin kuulat suoraan laskentakoppeina tai pikemminkin niiden joukkona olisi tehon sijoittaminen helppoa, koska tietty fyysinen kuula ja sen alueella olevat termohydrauliikan laskentakopit vastaisivat toisiaan. Syntynyt teho voitaisi sijoittaa tasaisesti tai muulla halutulla tavalla näihin koppeihin.

Käytettäessä porositeettimallia termohydrauliikassa laskentakopin suuruusluokka on kuulia suurempi ja yksittäisiä kuulia ei mallinneta. Syntyvää tehoa ei siis voida sijoittaa tiettyä kuulaa vastaavaan kohtaan vaan useiden kuulien sijaintipaikalle ulottuvaan isoon laskentakoppiin. Jos reaktorifysiikkapuolella käytetään determinististä koodia ja homogenisointia, niin laskentakopit ovat samaa luokkaa tai pienempiä kuin termohydrauliikassa. Tällöin tiedonsiirto voi onnistua yksinkertaisestikin suoraan kopista koppiin.

Tehtäessä tiedonsiirtoa erikokoisten laskenta-alkioiden välillä tapahtuu aina väistämättä ylimääräistä diffuusiota, kun esimerkiksi tietyssä paikassa vallitseva teho keskiarvoistetaan suurempaan alueeseen. Toisaalta kaikki ydinreaktorin fissioissa syntyvä teho ei synny pistemäisesti fissioreaktion tapahtumapaikalle vaan osa voi kulkeutua taulukossa 2.1 esitettyjen etäisyyksienkin päähän fission tapahtumapaikasta, joten tehon sijoittaminen tarkasti oikealle paikalle ei ole fysikaalisessa mielessäkään välttämätöntä. Kuulasta tuleva lämpövirtakin siirtyy kuulan pinnalta konvektion ja säteilylämmönsiirron avulla jäädytteeseen tai rakenteisiin ja säteilyosa vie tehoa pois vastaavassa mielessä kuin gammasäteily tai neutronitkin.

Olettamalla käytettäväksi reaktorifysiikkapuolella Monte Carlo -menetelmää, josta voidaan saada polttoainekuulakohtaiset tehotiedot, ja termohydrauliikkapuolella porositeettimallia, syntyy edellä mainittu tiedonsiirto-ongelma. Ongelmaa voidaan lähestyä ainakin kahdella tavalla, keskipisteiden sijaintiin perustuvalla menetelmällä tai tarkasti kopin alueella kuulissa syntyvän tehon sijoittavalla menetelmällä.

4.3.1 Tiedonsiirto keskipisteiden perusteella

Yksinkertaisin malli on olettaa kuulassa syntyvän tehon syntyvän kokonaisuudessaan laskentakopissa, jossa kuulan keskipiste sijaitsee. Tämä on varsin helppo toteuttaa vertaamalla vain laskentakopin seinämiä kuulien paikkoihin, ja rakenteel-

lisen hilan tapauksessa asia yksinkertaistuu entisestään laskentakoppien seinämien sijaitessa säännöllisillä etäisyyksillä toisistaan.

Ongelmia voi syntyä tilanteissa, joissa laskentakoppien koko suhteessa kuulien kokoon on liian pieni. Tällöin syntyy koppeja, joissa ei pahimmassa tapauksessa ole kuulia lainkaan ja siten ei tehoakaan, vaikka laskentakopissa voi olla osia useista kuulista, muttei yhdenkään kuulan keskipistettä. Tosin käytettäessä termohydrauliikassa porositeettimallia näin pienten koppien käyttäminen ei ole muutenkaan sallittua. Toisaalta laskentakoppien koko suhteessa kuulien kokoon voi olla sellainen, että syntyy säännöllinen rakenne, jossa tietyin välimatkoin laskentakoppiin tulee paljon kuulia ja vastaavasti toisaalle vähän kuulia. Nämä virheet johtavat tehon siirtymiseen pois oikealta syntypaikaltaan, mikä tosin vähäisessä määrin on toivottavakin ominaisuus, mutta myös säännölliseen rakenteeseen, jolla voi olla haitallisia vaikutuksia lopputuloksessa.

4.3.2 Tehon tarkka jakaminen laskentakoppeihin

Toinen menetelmä tehon sijoittamiseen antaa jokaiseen koppiin oikeasti niiden alueella syntyvän tehon. Tämä on periaatteellisella tasolla yksinkertainen, mutta johtaa selvästi keskipistemenetelmää monimutkaisempaan käsittelyyn käytännössä. Muistetaan jälleen, että laskentakopin on oltava suurempi kuin yksittäinen kuula ja siten pahin tapaus on laskentakopin nurkan kohdalle sattuva kuula. Tällöin kuulan leikkaa kolme tasoa, yhtälöt ovat muotoa (4.1), ja kuula itsessään toteuttaa ympyrän yhtälön, joka on esitetty yhtälönä (4.2).

$$ax + by + cz + d = 0 \quad (4.1)$$

missä

x	x-koordinaatti
y	y-koordinaatti
z	z-koordinaatti
$a \dots d$	vakioita

$$(x - x_k)^2 + (y - y_k)^2 + (z - z_k)^2 = r^2 \quad (4.2)$$

missä

x_k	keskipisteen x-koordinaatti
y_k	keskipisteen y-koordinaatti
z_k	keskipisteen z-koordinaatti
r	ympyrän säde

Tasojen kuulasta leikkaama tilavuus on käytännössä paloitteltava vielä osiin ongelman ratkaisemiseksi. Esimerkiksi leikkaustilavuuden osa, mikä saadaan koordinaattiakselien suuntaisilla tasoilla rajattua, on yhtälössä (4.3) esitetyn kaltainen. Yhtälössä käytetään tietoa, että otettaessa tilavuusintegraali funktiosta $f(x,y,z) = 1$ saadaan integroimisrajoilla rajatun alueen tilavuus. Tässä oletetaan, että ennen integrointia tehdään koordinaatiston nollapisteen siirto kuulan keskipisteeseen.

$$V_{\perp} = \int_e^f \int_g^{\sqrt{r^2-x^2}} \int_h^{\sqrt{r^2-x^2-y^2}} dz dy dx \quad (4.3)$$

missä

V_{\perp}	kohtisuorien tasojen rajaama tilavuus
-------------	---------------------------------------

Yhtälössä esitetyistä integraaleista kaksi sisemmäistä voidaan ratkaista analyttisesti, mutta vähintään viimeinen joudutaan laskemaan numeerisesti. Jos alkuperäiset tasot eivät olleet keskenään kohtisuorassa, niin tämän jälkeen täytyy laskea jäljellejäänyt tai -jääneet osat ja lisätä tai vähentää kohtisuorien tasojen rajaamasta alueesta tilanteesta riippuen. Näiden jäljellejääneiden osien laskemiseen tarvittavien yhtälöiden monimutkaisuus riippuu paljolti siitä, kuinka moni alkuperäisistä tasoista on keskenään kohtisuorassa. Koordinaatistoa kannattaa myös kiertää siten, että mahdollisimman moni leikkaavista tasoista olisi koordinaattiakselien suuntainen.

Yhteenvetona voi todeta, että tarkan tehon sijoittumisen ratkaiseminen johtaa numeeriseen integrointiin ja menetelmää sovellettaessa pitäisi vielä ottaa huomioon, että osa fissiotehosta ei jää fission tapahtumapaikalle vaan siirtyy lähiympäristöön, joka voi sijaita viereisessä laskentakopissa. Käytännössä reaktorin reunalla sijaitseviin koppeihin tällä voisi olla merkitystä, koska niihin ei päädy muista laskentakopeista fissiotehon kulkeutumisen takia yhtä paljon tehoa kuin poistuu. Tehon kulkeutumisen tarkasti ratkaiseminen vaatisi Monte Carlo -simulointeja selvittämään

keskimääräisen tehon kulkeutumisen kuulakekoreaktorin olosuhteissa. Tämä voitaisiin tehdä esimerkiksi MCNPX:llä (Monte Carlo N-Particle eXtended), jolla voidaan mallintaa myös betahiukkaset ja gammakvantit.

4.3.3 Koordinaatistot

Serpentissä käytetään suorakulmaista koordinaatistoa, mutta reaktorin muotoon sopivan rakenteellisen hilan yhteydessä olisi edullisempaa käyttää sylinterikoordinaatistoa tiedonsiirtovaiheessa. Tämän takia on tehtävä koordinaatistomuunnoksia suorakulmaisesta sylinterikoordinaatistoon, joihin tarvittavat muunnoskaavat esitetään yhtälöissä (4.4) ja (4.5).

$$\rho = \sqrt{x^2 + y^2} \quad (4.4a)$$

$$\varphi = \begin{cases} \arcsin \frac{y}{\rho}, & \text{kun } x \geq 0, \\ \pi - \arcsin \frac{y}{\rho}, & \text{kun } x < 0, \\ 0, & \text{kun } x = 0 \text{ ja } y = 0. \end{cases} \quad (4.4b)$$

$$z = z \quad (4.4c)$$

missä

ρ	säde
φ	kiertokulma

$$x = \rho \cos \varphi \quad (4.5a)$$

$$y = \rho \sin \varphi \quad (4.5b)$$

$$z = z \quad (4.5c)$$

4.4 Lämpötilamuutosten arviointi

Lämpötilamuutos reaktorissa aiheuttaa reaktiivisuusmuutoksen ja edelleen muutoksen reaktorin tuottamaan tehoon. Tämä mekanismi on tärkeä kytketyn laskennan

kannalta ja sen mallintamiseen on kiinnitettävä erityistä huomiota.

Yksinkertaisin menetelmä reaktorin lämpötilajakauman mallintamiseksi olisi olettaa se tasaiseksi, mutta tällöin ei voitaisi mallintaa erilaisesta lämpötilasta aiheutuvia muutoksia tehossa reaktorin eri alueissa. Tässä oletettaisiin siis kaikki polttoainekuulat samaan lämpötilaan ja ainoastaan reaktorin keskimääräisen tehon muuttuminen tämän keskimääräisen lämpötilan perusteella olisi mallinnettavissa. Parempi menetelmä olisi käyttää reaktorin oikeaa lämpötilajakaumaa ja tarpeen vaatiessa vain yksinkertaistettava sitä sopivalla tavalla. Tällöin reaktorissa alueittain tapahtuvat lämpötilamuutokset vaikuttavat tehoon enemmän paikallisesti ja reaktorin sisäisen tehojakauman määrittämisestä tulee tarkempaa.

Reaktorissa vallitsevan lämpötilajakauman lisäksi yksittäisiin polttoainekuuliin syntyy lämpötilajakauma ja tässä vaihtoehdot ovat vastaavat kuin kokonaisen reaktorin tapauksessa. Yksittäinen kuula voidaan mallintaa kokonaan tasalämpötilaan tai ottaa sisälle mentäessä muuttuva lämpötilajakauma huomioon. Tämä lämpötilajakauma ei ole kuitenkaan kovin suuri, kuten kappaleessa 2.3 mainittiin.

4.4.1 Reaktorin lämpötilajakauma

Nykyisissä reaktorikonsepteissa jäähdytevirtaus kulkee siis ylhäältä alas, kuten kappaleessa 2.3.1 mainittiin. Virtauksen mallintaminen tarkasti kuulakekoreaktorin kaltaisissa pedeissä on hankalaa pedin epäsäännöllisestä rakenteesta johtuen. Kuulissa tuotetaan teho, joka siirtyy kuulien seassa virtaavaan jäähdytteeseen. Lämpötilaeron laskemiseksi kuulien pinnan ja jäähdytevirtauksen välillä täytyy pystyä arvioimaan lämmönsiirtokertoimen suuruus.

Kirjallisuudessa esitetyt korrelaatiot erilaisille pedeille annetaan Colburnin j -tekijän avulla. Korrelaatioita on koottu ja niitä löydettävissä lämmönsiirtoa yleisesti käsittelevistä teoksista, muutamia esimerkiksi Jakobin Heat Transfer -kirjasta [31, s. 550–551]. Yksi suositeltu kaasuvirtauksessa olevien pallojen muodostaman pedin laskentaan sopiva korrelaatio on esimerkiksi yhtälössä (4.6) [27, s. 434]. Alueet, joilla korrelaatiot ovat käyttökelpoisia ovat merkittyinä hakasulkeissa.

$$\varepsilon \bar{j}_H = 2,06 Re^{-0,575} \quad \left[\begin{array}{l} Pr \approx 0,7 \\ 90 \leq Re \leq 4000 \end{array} \right] \quad (4.6)$$

missä

\bar{j}_H	lämmönsiirron Colburnin j-tekijä
Re	Reynoldsin luku
Pr	Prandtlin luku

Chilton-Colburn analogian mukaisesti Colburnin j-tekijälle voidaan kirjoittaa yhtälössä (4.7) esitetty muoto. [8], [10]

$$\bar{j}_H = St Pr^{\frac{2}{3}} \quad (4.7)$$

missä

St	Stantonin luku
------	----------------

Stantonin luku määritellään kaavalla (4.8).

$$St = \frac{h}{\rho v c_p} = \frac{Nu}{Re Pr} \quad [0,6 \leq Pr \leq 60] \quad (4.8)$$

missä

c_p	ominaislämpökapasiteetti vakiopaineessa
h	lämmönsiirtokerroin
Nu	Nusseltin luku
v	virtauksen nopeus tyhjässä kanavassa

Yhdistämällä kaikki kolme edellä mainittua yhtälöä saadaan lämmönsiirtokertoimelle ratkaistua kaava (4.9).

$$\bar{h} = \frac{\rho v c_p}{\varepsilon} \frac{2,06 Re^{-0,575}}{Pr^{\frac{2}{3}}} \quad (4.9)$$

missä

\bar{h} keskimääräinen lämmönsiirtokerroin

Lisäksi Reynoldsin luvulle on määritelty kaavan (4.10) mukainen muoto.

$$Re = \frac{v d_p}{\nu} \quad (4.10)$$

missä

d_p pedissä olevien pallojen halkaisija
 ν kaasun kinemaattinen viskositeetti

Edellä mainitun korrelaation lisäksi saksalaisissa KTA (KernTechnischer Ausschuss) -standardeissa on julkaistu erityisesti kuulakekoreaktoreille käytettävä korrelaatio, joka esitetään seuraavaksi yhtälössä (4.11).

$$Nu = 1,27 \frac{Pr^{\frac{1}{3}}}{\varepsilon^{1,18}} Re^{0,36} + 0,033 \frac{Pr^{\frac{1}{2}}}{\varepsilon^{1,07}} Re^{0,86} \quad \left[\begin{array}{l} 100 \leq Re \leq 10^5 \\ 0,36 < \varepsilon < 0,42 \\ \frac{d_c}{d_p} > 20 \\ H > 4d_p \end{array} \right] \quad (4.11)$$

missä

d_c pedin halkaisija
 H pedin korkeus

Edellisestä korrelaatiosta saadun Nusseltin luvun avulla voidaan lämmönsiirtokerroin laskea yhtälön (4.12) perusteella.

$$\bar{h} = \frac{Nu k}{D} \quad (4.12)$$

missä

k kaasun lämmönjohtavuus

4.4.2 Kuulan sisäinen lämpötilajakauma

Polttoainekuulien rakenteen ollessa kappaleessa 2.3 mainitun kaltainen muodostuu siihen lämpötilajakauma kuulan sisällä vapautuvan lämpöenergian vaikutuksesta. Polttoainepartikkeleissa oleva uraani kuumenee fissioreaktioiden vaikutuksesta ja suurin osa tehosta vapautuu partikkeliin. Lämpö kulkee partikkelin suojaavien kerrosten lävitse polttoainekuulan polttoainealueen grafiittiin ja edelleen pinnalla olevan grafiittikerroksen lävitse heliumjäähdytteeseen. Syntyy toisaalta lämpötilajakauma yksittäiseen polttoainepartikkeliin ja lisäksi kokonaiseen polttoainekuulaan. Näitä lämpötilajakaumia voidaan arvioida matemaattisesti varsin yksinkertaisilla yhtälöillä tekemällä sopivat oletukset tai mallintaa yksityiskohtaisemmin ja ratkaista numeerisesti tämä monimutkaisempi ongelma.

Polttoainekuulat ovat pallonmuotoisia ja niissä on uloimpana grafiittikerros ilman polttoainepartikkeleja kappaleessa 2.3 kerrotulla tavalla. Tässä pallokuoressa tapahtuu vain lämmönjohtumista ja olettamalla tilanne samanlaiseksi suunnasta riippumatta voidaan tilannetta käsitellä yksiulotteisena. Lähtemällä Fourierin laista (4.13) voidaan johtaa kaava lämpötilalle pallokuoren sisäpinnalla. Sovellettuna polttoainekuulan grafiittikerrokseen sisäpinnan lämpötilalle saadaan kaava (4.14).

$$P = -kA \frac{dT}{dr} \quad (4.13)$$

$$T_{g,i} = T_{g,o} + \frac{P_p}{4\pi k} \left[\frac{1}{r_{g,i}} - \frac{1}{r_{g,o}} \right] \quad (4.14)$$

missä

A	tarkasteltavan pinnan ala
P_p	lämpöteho polttoainekuulassa
$r_{g,i}$	grafiittikerroksen sisäpinnan säde
$r_{g,o}$	grafiittikerroksen ulkopinnan säde
$T_{g,i}$	lämpötila grafiittikerroksen sisäpinnalla
$T_{g,o}$	lämpötila grafiittikerroksen ulkopinnalla

Toinen ongelman ratkaisemiseen tarvittava yhtälö saadaan lähtemällä pallon lämpöyhtälöstä (4.15) olettaen sama yksiulotteisuus kuin pallokuoren tapauksessa ja integroimalla kahdesti. Tehontuoton pallossa oletetaan tapahtuvan tasaisesti koko tilavuudessa.

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dT}{dr} \right) = -\frac{q'''}{k} r^2 \quad \left\| \int \right. \quad (4.15a)$$

$$r^2 \frac{dT}{dr} = -\frac{q'''}{3k} r^3 + C_1 \quad \left\| \int \right. \quad (4.15b)$$

$$T(r) = -\frac{q'''}{6k} r^2 - \frac{C_1}{r} + C_2 \quad (4.15c)$$

Reunaehdot :

$$\text{kun } r = 0 \quad \frac{dT}{dr} = 0 \Rightarrow C_1 = 0$$

$$\text{kun } r = r_{g,i} \quad T(r_{g,i}) = T_{g,i} \Rightarrow C_2 = T_{g,i} + \frac{q'''}{6k} r_{g,i}^2$$

Saadaan :

$$T(r) = T_{g,i} + \frac{q'''}{6k} (r_{g,i}^2 - r^2) \quad (4.15d)$$

$$T(0) = T_{g,i} + \frac{q'''}{6k} r_{g,i}^2 \quad (4.15e)$$

missä

q'''	tehotiheys
C	integroimisvakioita

Esitetyillä yhtälöillä voidaan mallintaa yksittäisen kuulan lämpötilajakauma pinnalta sisälle mentäessä. Vastaavia yhtälöitä voidaan tarvittaessa soveltaa myös yksittäisen polttoainepartikkelin tapauksessa.

4.4.3 Tasaiseksi oletettu lämpötila

Käytännössä lämpötilajakaumaa voidaan joutua arvioimaan tasajakaumalla muuttuvan sijaan. Tämän takia pitää pystyä ratkaisemaan polttoainekuulassa olevien alueiden keskilämpötilat, joissa pitää huomioida tilavuuden muuttuminen lämpötilan muuttumisen ohella kuulan sisälle mentäessä. Näiden tilavuuspainotettujen keskilämpötilojen ratkaisemiseen käytetään yhtälön (4.16) mukaista menetelmää.

$$\bar{T} = \frac{\int_{r_i}^{r_o} T(r) W(r) dr}{\int_{r_i}^{r_o} W(r) dr} \quad (4.16)$$

missä

$T(r)$	lämpötilafunktio
$W(r)$	painotusfunktio

Tässä asiassa säteen mukana muuttuva tilavuus on siis painottava seikka, koska muuten polttoainekuulan keskellä oleva kuumempi lämpötila tulisi liikaa huomioiduksi keskilämpötilassa huolimatta pienestä tilavuusosuudestaan. Vastaavasti kylmemmällä ulkoreunalla on paljon suurempi osuus tilavuudesta, joten selvää on, että keskilämpötila on lähempänä kuulan ulkoreunan kuin keskipisteen lämpötilaa.

Yhtälössä (4.16) oleva integraalilauseke ilman painotusta ($W(r) = 1$) antaisi tavalisen keskiarvon, koska määrätty integraali palauttaa käyrän alle jäävän pinta-alan määrättyllä välillä. Jakamalla tämä saatu pinta-ala integrointivälin pituudella saadaan yksinkertaisesti alkuperäisen funktion keskimääräinen arvo tällä välillä. Painotuksessa taas tuodaan mukaan tilavuuden muuttuminen säteen mukana. Painotuksessa on otettava huomioon integrointi, jonka tuloksena saadaan painottava tilavuus, joten itse painofunktio on pallon pinta-ala. Yhtälössä (4.17) on esimerkkilauseke kuulan polttoainealueen keskilämpötilalle.

$$\bar{T}_{\text{fz}} = \frac{\int_0^{r_{\text{g},i}} T_{\text{g},i} + \frac{q'''}{6k}(r_{\text{g},i}^2 - r^2) 4\pi r^2 dr}{\int_0^{r_{\text{g},i}} 4\pi r^2 dr} = \frac{q''' r_{\text{g},i}^2}{15k} \quad (4.17)$$

missä

\bar{T}_{fz} keskilämpötila kuulan polttoainealueessa

4.5 Laskennan etenemisen seuranta

Laskennan etenemistä voi tarkastella tutkimalla laskettavien suureiden muuttumista iteraatiokierrosten välillä. Vertaamalla tulosta jokaisessa laskenta-alueessa edellisen kierroksen tulokseen saadaan tietää laskentakoppikohtainen muutos kierrosten välillä. Tämä muutos voi olla positiivinen tai negatiivinen, joten ottamalla itseisarvo saadaan muutoksen suuruus selville suunnasta riippumatta. Koko tilannetta kuvaava arvo voidaan saada laskemalla kaikkien laskenta-alueiden muutokset yhteen ja jakamalla laskenta-alueiden määrällä. Tämä on esitetty esimerkiksi fissioteholle laskentakopeissa yhtälönä (4.18).

$$\overline{X_{P,n}} = \frac{\sum_{n=1}^N |P_{n,m} - P_{n,m-1}|}{N} \quad (4.18)$$

missä

$\overline{X_{P,n}}$	keskimääräinen muutos laskentakoppien tehoissa laskentakierrosten välillä
n	laskentakoppi
m	laskentakierros
N	laskenta-alueiden kokonaismäärä

5 Monte Carlon ja CFD:n kytkentä kuulakekoreaktorissa

Työssä oli tarkoituksena kehittää kytkettyä laskentaa kuulakekoreaktorissa ja osaltaan mahdollistaa tämän reaktorityypin yksityiskohtaisten ilmiöiden tutkimista. Tästä syystä haluttiin soveltaa Monte Carlo -menetelmää, jolla saadaan laskettua ilman merkittäviä oletuksia yksittäisten polttoainekuulien tuottamat tehot. Vastavasti termohydrauliikan osalta CFD antaa mahdollisuuden käyttää yleiskäyttöisiä tarkkaan mallintamiseen kykeneviä ohjelmistoja tämän ongelman mallintamiseksi. Kehittämistyöstä johtuen päätettiin pitäytyä mahdollisimman yksinkertaisessa laskentatilanteessa, jossa kuitenkin voitaisiin huomioida kaikki menetelmän merkittävimmät ominaisuudet.

Reaktorifysiikkamallinnukseen käytetään Jaakko Leppäsen VTT:llä kehittämää Serpent-koodia, koska se on nopea ja sisältää aiemmin kohdassa 4.2.1 käsitellyt HTGR-mallinnusta helpottavat geometriatyypit. Fluent valittiin käytettäväksi CFD-koodiksi, koska se sisältää tarvittavan ratkaisijan valmiina ja siitä on aikaisempaa käyttökokemusta kuulakekoreaktorin mallinnuksessa.

Tässä luvussa esitellään kehitetty menetelmä ja käytetty pelkistetty reaktorimalli, johon menetelmää sovellettiin. Kytketyn laskennan kehittäminen vaatii monen alan syvällistä osaamista, mikä on käytännössä vaikeaa yhden ihmisen voimin tehtäväksi. Diplomityössä keskityttiin kehittämään kuulakekoreaktorin reaktorifysiikkalaskentaa ja sen kytkemistä termohydrauliikkaan. CFD-koodi Fluentilla tehdyt termohydrauliikkalaskennat ja DEM-laskennalla tuotetut kuulakasat on rajattu työn ulkopuolelle ja ne on tehnyt Heikki Suikkanen.

5.1 Lähtöoletukset ja rajoitukset

Aiemmissa luvuissa mainittiin molemmat työssä käytettävät laskentamenetelmät paljon laskentatehoa vaativiksi, mistä seuraa laskennan kannalta muutamia rajoituksia. Kohdissa 3.2.2 ja 4.2.3 esiteltiin CFD-koodilla tapahtuvaa mallinnusta ja on selvää, ettei kokonaista reaktoria voida mallintaa tarkasti yksittäisten polttoainekuulien tasolla. Tämän osalta joudutaan turvautumaan porositeettimalliin ja siten menettämään yksityiskohtaisten ilmiöiden suora tarkastelumahdollisuus.

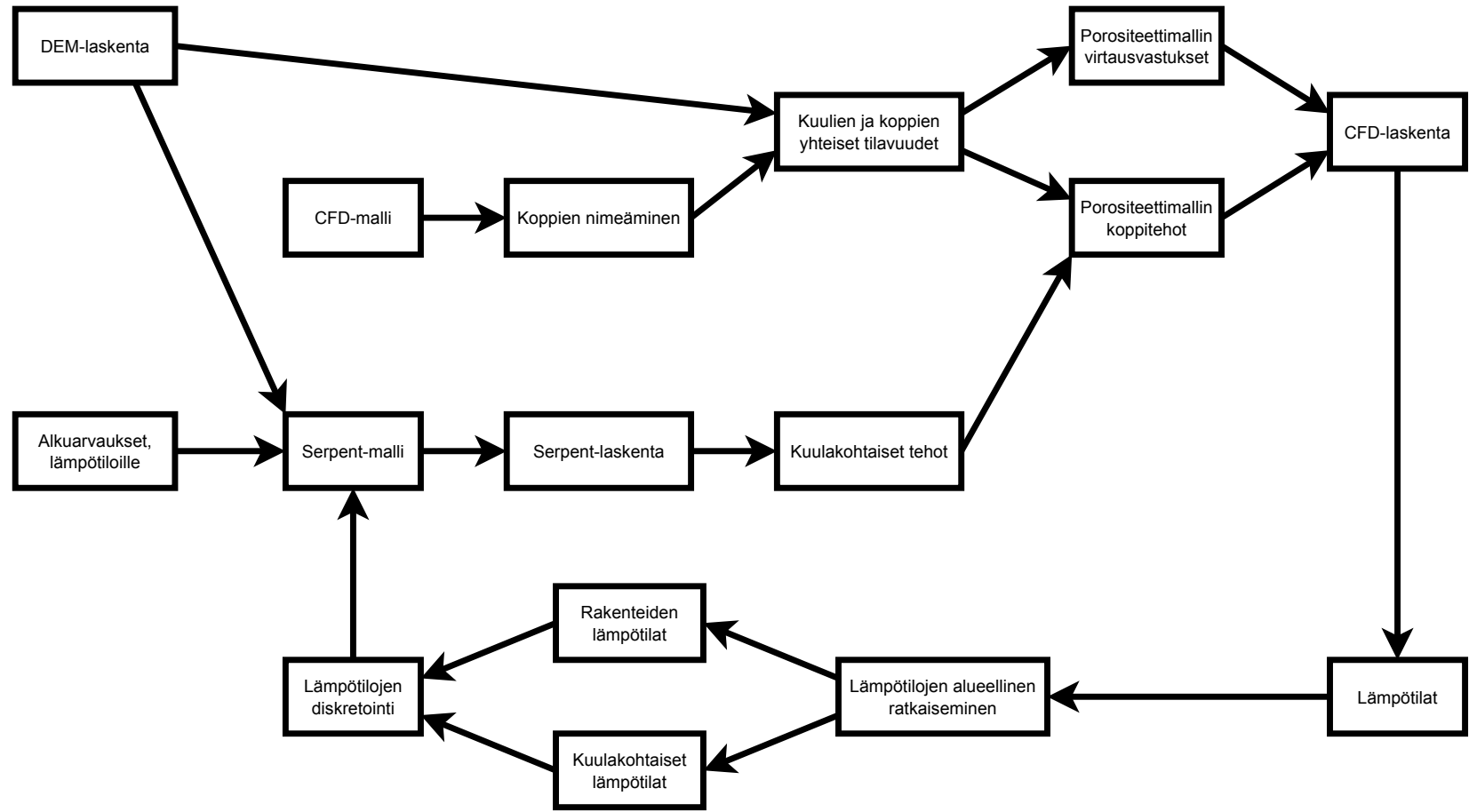
Monte Carlo -laskennassa törmätään kohdissa 3.1.4 ja 4.2.2 esiteltyihin asioihin. Ensinnäkin kokonaisuun reaktorilaskuihin liittyvä suuri yksityiskohtien määrä geometriamallinnuksessa hidastaa laskentaa, koska neutronien jäljitysruutiineihin kuluu paljon laskenta-aikaa. Tästä seuraa käytännössä se, että minkäänlaisten ajasta riippuvien tarkastelujen tekeminen ei ole mahdollista.

Toiseksi materiaalidata eri aineille vie merkittävästi muistitilaa ja mallinnettaessa lämpötilasta riippuvia systeemejä tarvitaan kutakin esiintyvää lämpötila-arvoa kohti oma kopio tästä datasta, johon tehdään kohdassa 2.2.2 mainitut resonanssien levenemiset. Tietokoneissa käytettävissä oleva muistimäärä loppuu siis kesken ja käytännössä tämä rajoittaa kuulakekoreaktorissa esiintyvät erilaiset lämpötila-arvot joihinkin kymmeneen tai enintään noin 100 erilaiseen vaihtoehtoon, joilla on tultava toimeen.

Molemmat koodit osaavat vain oman alansa laskentaa, joten kohtaan 3.3.1 sovellettuna voidaan puhua sisäisestä kytkennästä. Lämpötila- ja tehotietoja siirretään suoraan laskentakopista toiseen tai sen alueella sijaitseville polttoainekuulille. Fluentia käytettiin mallintamaan koko reaktorin termohydrauliikka ja siihen voidaan sisällyttää myös reaktorisydämen ulkopuolella olevat rakenteet. Näissä ulkopuolisissa rakenteissa käytetään tarkkaa mallinnusta huokoisen aineen sijaan, koska esimerkiksi grafiittiheijastimen sisällä ei tapahdu kuin johtumista ja yksityiskohtien määrä virtauksen kannalta on muutenkin pienempi.

Käytettävät ohjelmistot ovat erillisiä, joten niitä on ajettava vuorotellen. Laskenta aloitetaan olettamalla lämpötilat, minkä jälkeen ratkaistaan tehojakauma Serpentiin. Saadun tehojakauman perusteella voidaan Fluentilla ratkaista uudet lämpötilat. Uudet lämpötila-arvot sijoitetaan takaisin Serpentin syötetiedostoon ja ajetaan uusi laskentakierros. Tätä toistetaan kunnes haluttu tarkkuus on saavutettu. Kuvassa 5.1 on vielä esitetty laskennassa tarvittavat päävaiheet.

Kuva 5.1: Kytkeyty laskenta kuulakereaktorissa



5.2 Soveltuvuus kuulakekolaskentaan

Kuulakekoreaktoreissa ongelman muodostaa laskennan kannalta kasan rakenne, joka on satunnainen. Kuulat voivat siis sijaita ja kulkea kuulavirtauksen mukana reaktorissa lukemattomilla eri tavoilla. Toisaalta myös polttoainejyvät sijaitsevat satunnaisesti jokaisessa polttoainekuulassa. Tämä kahdella tasolla oleva satunnaisuus tekee mallintamisesta vaikeaa. Esimerkiksi deterministisen reaktorifysiikkalaskennan näkökulmasta on vaikea määrittellä laskentakoppeja, koska selkeää säännöllistä homogenisoitavaa rakennetta ei esiinny. Satunnaisuudesta johtuen myös homogenisoinnista aiheutuvien virheiden korjaamiseen tarvittavat parametrit ovat hankalia määrittää, kuten aiemmin kohdassa 2.2.4 lyhyesti esitelty Dancoffin kerroin.

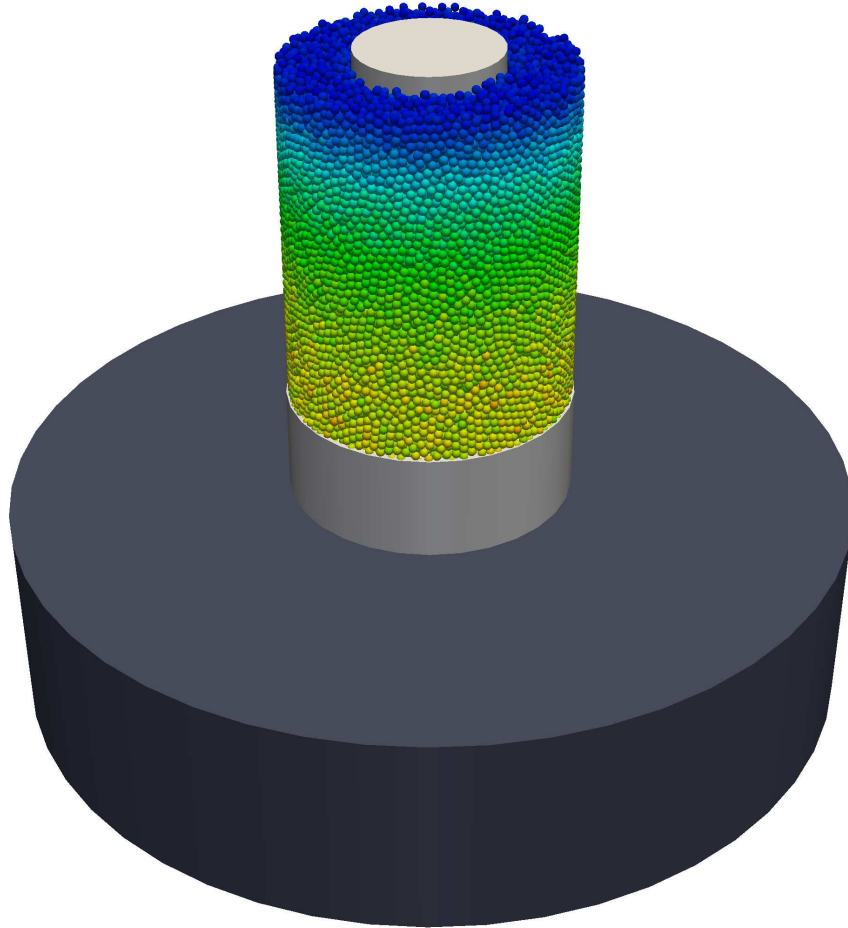
Serpentillä laskettaessa ei tarvita mitään korjausparametreja, koska mallinnus voidaan suorittaa tarkasti kuvatussa geometriassa. Sekä kuulien, että niissä olevien polttoainejyvien paikat voidaan siis määrittää tarkasti. Saatavan tehojakauman voidaan olettaa tämän perusteella olevan tarkka polttoainekuulien tasolla, koska neutronihistorioiden määrä on paljon suurempi kuin polttoainekuulien määrä. Partikkelitasolla tehojakaumaa ei voi määrittää tarkasti, koska välttämättä jokaiseen partikkeliin, joita kuulassa on 5000 kappaletta, ei edes ehdi simulaation aikana osua yhtään neutronia.

Fluent ei ole rajoitettu tiettyihin virtaaviin aineisiin tai muutenkaan materiaalien osalta ja se sisältää valmiiksi kuulapedin mallinnuksessa tarvittun huokoisen aineen ratkaisijan. Lähtökohtaisesti Fluent soveltuu siten hyvin kuulakekoreaktorin tarkastelemiseen. Oleellisesti parempaa menetelmää ei ole käytettävissä, koska tällä hetkellä kaikki reaktoria laskentakopeissa ratkaisevat ohjelmat käyttävät huokoista ainetta kuvaamaan kuulakasaa tarkemman mallin sijaan.

5.3 Rakenteiden mallintaminen

Kytketyn laskentaongelman yksinkertaistamiseksi valittiin sydänalueen laskentageometriaksi kuvitteellinen kahdesta samanakselisesta sylinteripinnasta ja rajaavista tasoista koostuva kuulakekoreaktori. Reaktorin polttoaine sijaitsee siis sisemmän ja ulomman sylinteripinnan välisellä alueella kuvan 5.2 mukaisesti. Lisäksi kuvassa on tummanharmaalla esitetty grafiittiheijastin, jonka yläosa on leikattu pois reaktorin

muun rakenteen havainnollistamiseksi. Keskellä on grafiittiheijastin, kuten myös sivuilla ja alla. Reaktorisydämen yläpuolella on tyhjää tilaa reaktorin yläosaan saakka, mutta heijastimet jatkuvat ylös asti.



Kuva 5.2: Yksinkertaistetun reaktorin rakenne

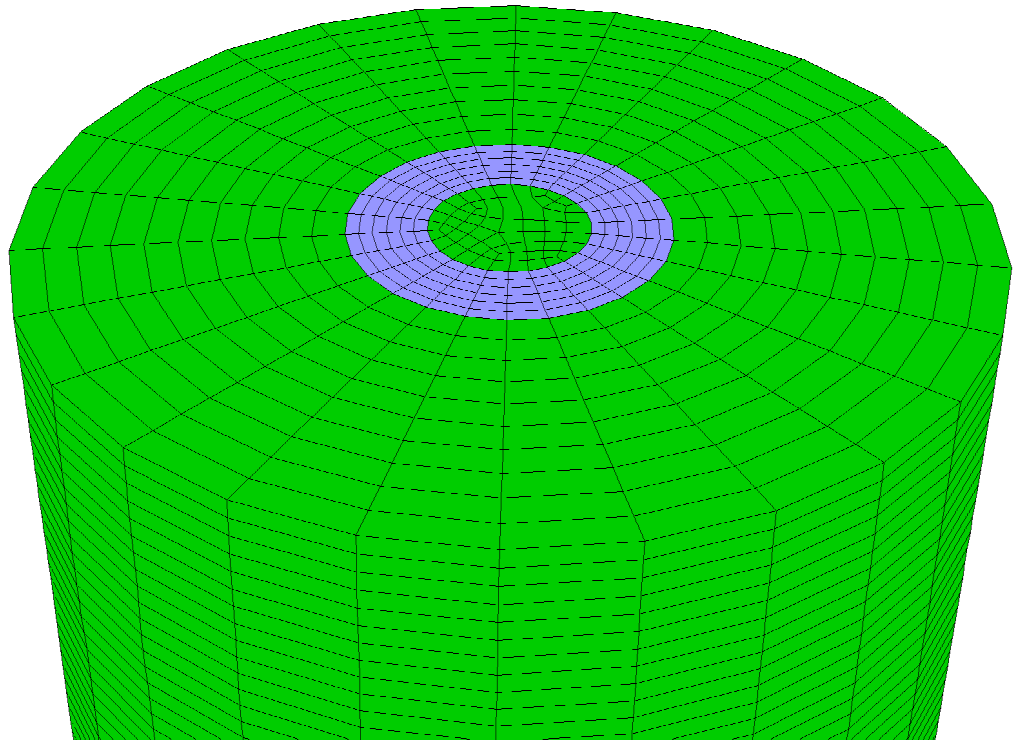
Heijastimien lämpötilat päätettiin asettaa kiinteään vakioarvoon laskennan yksinkertaistamiseksi reaktorifysiikan osalta. Vaikutus ajateltiin erittäin pieneksi, koska grafiitilla ei ole resonanssiipukkeja ja siten kappaleessa 2.2.2 mainittua doppler-ilmliötä ei esiinny.

Molemmissa käytetyissä koodeissa reaktorin suuret rakenteet mallinnettiin yksityiskohtaisesti. Serpentissä kaikille tarvituille muodoille oli omat geometriakuvaukset olemassa ja mallinnus oli suoraviivaista. Fluentissa sylinteripinnat jouduttiin muodostamaan tasojen rajaamista laskentakopeista ja poikkileikkaus ei siten ole aivan

Taulukko 5.1: Reaktorin rakenteiden mallinnuksessa käytetyt tiedot

Sisäheijastimen säde	50	cm
Reaktoriytimen ulkosäde	100	cm
Sivuheijastimen ulkosäde	300	cm
Alaheijastimen paksuus	50	cm
Heijastimien korkeus sydämen pohjasta	500	cm
Heijastimien lämpötila	500	K

tarkka sylinteri, mutta pitämällä virtauspoikkipinta-ala samanlaisena ei asialla ole juuri merkitystä laskentaan. Kuvassa 5.3 on esitetty tämä Fluentissa käytetty laskentaverkko, jossa sydänalue on merkitty sinertävällä värillä.

**Kuva 5.3:** Fluentissa käytetty laskentaverkko

5.3.1 Reaktoriytimen mallintaminen

Serpentissä reaktoriytimen mallintaminen on mahdollista sijoittamalla reaktoriin polttoainekuulat tarkasti paikoilleen listattujen koordinaattien perusteella, kuten aiemmin todettiin kohdassa 4.2.1. DEM-laskennoista polttoainekuulien koordinaatit

olivat saatavissa, joten tätä tarkimmin ongelmaa kuvaavaa menetelmää päätettiin käyttää laskennassa. Mallinnettu reaktori on nähtävissä kuvassa 5.4.

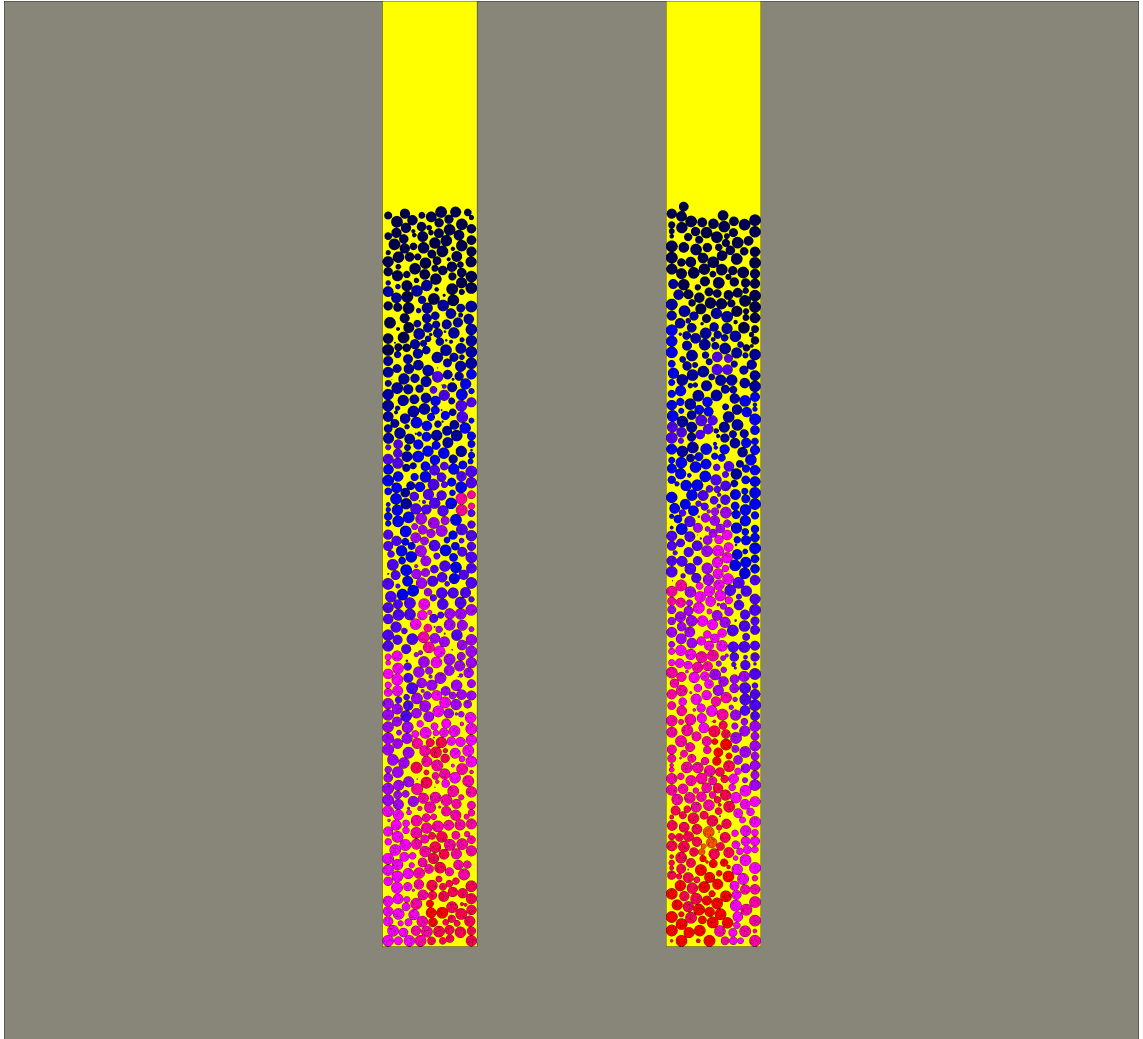
Fluentissa sydänaalueen mallintamisessa piti huomioida kuvaamiseen käytetty huokoinen materiaali. Käytettävän koppikoon tuli olla riittävän suuri, jotta kopit sisälsivät riittävän määrän polttoainekuulia täyttääkseen huokoiselle aineelle tehdyt oletukset. Käytännössä pyrittiin siihen, että polttoainekuulia olisi noin 10 kappaletta laskentakoppia kohti ja lopulta Fluentin sydänaalueen laskentaverkko koostui 5148 laskentakopista.

Rakenteiden mallinnuksessa täytyi huomioida laskentakierrosten kuluessa tehtävät muutokset materiaaliarvoihin. Serpent-mallissa piti pystyä vaihtamaan kuulien lämpötilaa ja Fluent-mallissa kuulakohtaiset tehot. Jotta tietyn alueen laskentakopit pystyi yhdistämään saman alueen polttoainekuuliin täytyi kehittää algoritmi, joka palautti sijaintitiedot tarvittaessa. Tämä algoritmi on helpompi tehdä rakenteelliselle kuin rakenteettomalle hilalle, koska säännöllinen rakenne toistuu ja jokaiselle laskentakopille voidaan muodostaa indeksit. Rakenteettomassa hilassa olisi pitänyt aina tarkastella tasoja, jotka rajaavat esimerkiksi tetraedrin, ja käydä läpi valtava määrä näitä pintoja selvitetessä, minkä laskentakopin sisällä tietty piste sijaitsee. Erityisesti tämän vuoksi sydänaalueella haluttiin käyttää rakenteellista laskentaverkkoa, joka myös on nähtävissä kuvasta 5.3.

Termohydrauliikkamalli oli muuten sama kuin Heikki Suikkasen diplomityössä käytetty, mutta kaksiulotteisen mallin sijaan käytettiin kolmiulotteista geometriamallia ja huokoisen aineen aukkoisuus määritettiin DEM-koodin laskeman pakkautumisen perusteella laskentakoppikohtaisesti pakkaustiheyskäyrän sijaan. Tarkempi kuvaus termohydrauliikkamallista löytyy Heikki Suikkasen diplomityöstä [74] ja muutettujen ominaisuuksien osalta myöhemmistä julkaisuista.

5.3.2 Polttoaineen mallintaminen

Tarkastellaan seuraavaksi Serpentillä tehtävää polttoainekuulien ja niiden sisäisen rakenteen mallintamista, koska niillä on merkittävää vaikutusta mallintamisen tuloksiin. Uraani on pienissä polttoainepartikkeleissa ja niissä vallitsevat olosuhteet varsin pitkälle määräävät reaktorin tuottaman tehon. Fluentin näkökulmasta yksityiskohtien tarkastelu ei ole tarpeen, koska sydänaalueella käytettävä huokoinen materiaali hukkaa yksityiskohdat ja laskentakopin sisällä mitään yksityiskohtia ei



Kuva 5.4: Serpentin laskentamalli leikattuna pystysuunnassa

mallineta.

Polttoainekuula mallinnettiin tarkasti kuulakekoreaktoreissa käytettävien polttoainekuulien rakenteen mukaan. Kuulan määrittäviä ominaisuuksia ovat ulkohalkaisija, polttoainetta sisältävän alueen halkaisija, polttoainepartikkelien määrä, sijainti, koko ja muu rakenne, materiaalikoostumus ja lämpötila. Tiedot on esitetty taulukoissa 5.2 ja 5.3. Käytettyjen materiaalien isotooppikoostumukset on esitetty liitteessä B.

Kuulissa oleville polttoainepartikkeleille luotiin satunnaisia jakaumia, joita oli yhtä paljon kuin mallinnettavassa tapauksessa erilaisissa lämpötiloissa olleita kuulia. Kaikki keskenään samanlämpöiset kuulat olivat siis identtisiä toistensa kanssa.

Polttoainekuulaan syntyvän lämpötilajakauman, jota käsiteltiin kohdassa 4.4.2, taakia polttoaine pitäisi jakaa pallokuoriin, jotka olisivat erilaisissa lämpötiloissa. Edel-

Taulukko 5.2: Polttoainekuulan mallinnuksessa käytetyt tiedot

Polttoainekuulan halkaisija	6,0	cm
Polttoainealueen halkaisija	5,0	cm
Polttoainepartikkelien määrä	5000	-
Materiaali	Grafiitti	
Epäpuhtausekvivalentti booria	1	ppm

Taulukko 5.3: Polttoainepartikkelin mallinnuksessa käytetyt tiedot

Polttoaineytimen säde	0,024	cm
Puskurikerroksen paksuus	0,009	cm
Sisemmän pyrolyyttisen hiilikerroksen paksuus	0,007	cm
Piikarbidikerroksen paksuus	0,005	cm
Ulomman pyrolyyttisen hiilikerroksen paksuus	0,005	mm
Väkevöinti	8	%

leen täytyisi huomioida vielä yksittäisten partikkelien erilainen kuumentuminen riippuen kuinka syvällä ne polttoainekuulien sisällä ovat.

Tämä ilmiö jouduttiin jättämään toistaiseksi huomiotta laskennassa ja ratkaisuun käytettiin yksinkertaisinta menetelmää eli oletettiin yksittäinen polttoainekuula tasalämpöiseksi partikkeleineen kaikkineen. Syitä tarkemman mallin ohittamiseen olivat osaltaan tietokoneiden rajallinen muistin määrä ja Fluentissa käytetty yksi energiayhtälö. Lisäksi haluttiin pitää malli riittävän yksinkertaisena.

Mallin kehittämiseksi tarkasteltiin lämpötilajakauman suuruutta polttoainekuulan sisällä yhtälöiden (4.13) ja (4.16) perusteella. Laskennan kannalta kiinnostava tieto oli millainen tasainen lämpötila kuvaisi parhaiten oikeaa lämpötilajakaumaa. Taulukossa 5.4 on esitetty laskennassa käytetyt lämmönjohtavuudet. Laskennassa oletettiin, että tehontuoton voidaan arvioida tapahtuvan tasaisesti kuulan polttoainealueessa. Tämä ei täysin vastaa todellisuutta, koska teho syntyy tietyissä kohdissa eli polttoainepartikkeleissa. Toisaalta partikkelit ovat satunnaisesti sijoittuneet polttoainealueen tilavuuteen ja esiintyvät siten keskimäärin tasaisesti alueessa, joten tässä ei pitäisi syntyä suurta virhettä suuntaan eikä toiseen.

5.4 Virtauksen ja kuulien välinen lämpötilaero

Virtaavan heliumin ja polttoainekuulien välille muodostuu lämpötilaero erilaisten rajakerrosilmiöiden vaikutuksesta. Laskennallisessa tarkastelussa pyrittiin selvittä-

Taulukko 5.4: Polttoainekuulan materiaalien lämmönjohtavuudet [69, s. 8]

Polttoaineydin	3,7	W/(m K)
Puskurikerros	0,5	W/(m K)
Sisempi pyrolyyttinen hiilikerros	4,0	W/(m K)
Piikarbidikerros	16,0	W/(m K)
Ulompi pyrolyyttinen hiilikerros	4,0	W/(m K)
Polttoainekuulan grafiitti	15	W/(m K)

mään polttoainekuulan pinnan keskimääräinen lämmönsiirtokerroin, jolla voidaan arvioida lämpötilaeroa. Työssä laskettiin kohdassa 4.4.1 esitettyjen menetelmien avulla lämmönsiirtokertoimen arvo ja edelleen lämpötilaero. Kuulakasa oletettiin tässä sivuilta eristetyksi, joten kaikki tuotettu teho siirtyy jäähdytteeseen heti sydämessä, mikä ei pidä tarkkaan ottaen täysin paikkaansa. Taulukossa 5.5 on esitetty laskennassa tarvittavat erityiset alkuarvot. Heliumille ja luonnonvakioille käytettiin yleisiä kirjallisuudesta löytyviä arvoja.

Taulukko 5.5: Lämmönsiirtokertoimen arvioinnissa käytetyt lähtöarvot

Kuulakasan korkeus	396	cm
Reaktorin teho	44,25	MW
Polttoainekuulien määrä	50000	
Paine	50	bar
Huokoisuus (porositeetti)	0,394	

Lämmönsiirtokertoimen laskentaa on lisäksi Ydinvoimatekniikan laboratoriossa pyritty tarkastelemaan tarkalla CFD-mallilla, joka koostuu vain muutamista kuulista. Tämänkaltainen tarkastelu ei ole toistaiseksi tuottanut kovin hyviä tuloksia. [49] Tosin muuallakin (McLaughlin *et al.*) vastaavasti lasketuissa tuloksissa lämmönsiirtokertoimen arvot eivät ole vastanneet erityisen hyvin kokeellisten korrelaatioiden avulla laskettuja tuloksia. [46]

5.5 Kytkentäohjelma

Ohjelmistot olivat erillisiä ja kummallakaan ohjelmistolla ei voitu ohjata toista mitenkään yksinkertaisesti, joten tiedonsiirtoon päätettiin tehdä oma sovellus. Tämä kytketyn laskennan toiminnot sisältävä ohjelma tehtiin Perl-ohjelmointikielellä johdettua sen hyvästä kyvystä käsitellä tekstimuotoisia tiedostoja ja yleisestä helppokäyt-

töisyydestä. Sovellus hoiti laskennan aloitusrutiinit, käynnisti vuorotellen halutun laskennan ja siirsi tiedot ohjelmistojen kesken kumpaankin suuntaan.

Seuraavissa kappaleissa esitetään kytkettyä laskentaa varten tehdyn sovelluksen rakenne. Täydellinen lähdekoodi on esitetty liitteessä A.

5.5.1 Laskennan aloitusrutiinit

Sovelluksen oli tehtävä aluksi itse sovellukseen liittyviä aloitusrutiineja, kuten asetusten hakeminen, tarpeellisten asetusarvojen tarkastaminen, lokitiedoston luominen ja siihen kirjoittamisen mahdollistaminen.

Varsinaisen laskennan aloitukseen tarvittiin polttoainekuulien sijainti reaktorissa ja laskennallisessa virtausmekaniikkasovelluksessa käytettyjen laskentakoppien mitat. Tarkemmin sanottuna hilageneraattorilla luodut laskentakoppitiedot luettiin kerran Fluentiin ja Fluentin käyttämä laskentakoppien numerointi niiden sijaintitietojen ohella kirjoitettiin erilliseen tiedostoon. Kytkeäkoodi luki kuulien sijainti- ja edellä mainitut laskentakoppitiedot, joiden perusteella koodi päätteli, mikä kuula sijaitti missäkin kopissa. Tämä toteutettiin luomalla laskentakopeille indekset kaikissa sylinterikoordinaatiston suunnissa ja antamalla jokaiselle kuulalle valitun järjestelmän mukaiset indeksoinnit. Asiaa voi osaltaan selventää kuva 5.3, missä oli esitetty Fluentin käyttämä laskentaverkko. Kuulien sijaintitiedot olivat karteesisessa koordinaatistossa, joten ohjelma muutti koordinaatit perustuen kohdassa 4.4 esitettyyn tapaan.

Kuulien sijoittamiseen päätettiin siis käyttää keskipistemenetelmää, jota käsiteltiin kohdassa 4.3.1. Menetelmä tarkoitti sitä, että kuulat joiden keskipiste oli tietyn laskentakopin sisällä, kuuluivat tähän alueeseen kokonaisuudessaan. Tämä vaikutti laskennan aluksi tehtävään huokoisuusarvojen laskentaan ja kuulien lämpötilojen valintaan joka iteraatiokierroksella. Fluentissa käytetystä porositeettimallista johdettua saatiin yhden laskentakopin alueella olleille kuulille vain yksi lämpötila, koska laskentakoppihan on pienin yksikkö, jossa suureita CFD-ohjelmassa käsitellään.

Indeksoinnin ensimmäinen suunta oli säteen suunta, jossa indeksin yksi sai reaktori sydämen sisäreunalla, seuraavalla kehällä arvon kaksi ja niin edelleen. Toinen indeksi oli kulma, jonka nolla määriteltiin positiiviselle x -akselille. Tästä vastapäivään mennessä indeksien arvot kasvoivat ykkösestä alkaen. Kolmas indeksi oli korkeus

reaktorin pohjalta, jonka oletettiin sijaitsevan kohdassa $z = 0$. Arvot lähtivät taas ykkösestä ja saivat suurimman arvonsa reaktorisydämen yläosassa.

Aliohjelma *reallocations* teki kaiken tämän vain kerran laskennan aluksi. Laskentakoppien numerointi ei muutu Fluentissa laskentakerrasta toiseen, joten tietoja ei tarvinnut päivittää laskennan kuluessa. Kuulien tiedot kerättiin kolmeen taulukkoon, joissa kuulien juoksevien numeroiden mukaisesti alkioihin sijoitettiin kuulien sijaintia vastaavan laskentakopin indeksit. Näiden taulukkotietojen perusteella voitiin aina tarvittaessa selvittää, missä laskentakopissa kukin kuula sijaitti. Lopulta voitiin laskea kuulien viemä tilavuus jokaisesta laskentakopista ja edelleen huokoisuusarvot, jotka Fluent tarvitsi virtausvastuksien määrittämiseksi.

5.5.2 Iterointi

Iterointi aloitettiin laskemalla Serpentillä tehojakauma vakioämpötilassa. Aloitusrutiinien jälkeen käynnistettävä iterointisilmukka tarkisti iteraatiokierroksen ja ensimmäisellä kierroksella suoritti *initempdist*-aliohjelman, joka sijoitti alkuarvoissa annetun aloituslämpötilan kaikkiin polttoainekuuliin. Muilla kierroksilla suoritettiin *tempdist*-aliohjelma, joka haki Fluentilla lasketuista tuloksista suurimman ja pienimmän lämpötilan ja jakoi tämän vakio pituisiin lämpötila-alueisiin. Jako suoritettiin käyttämällä alkuarvoissa annettua erilaisten materiaalien maksimimäärää, joka määräytyi käytettävässä laskentakoneessa olevan muistin määrän perusteella. Saadun materiaalmäärän mukaan indeksoidut lämpötilat sijoitettiin taulukkoon, josta niitä oli helppo käyttää muissa aliohjelmissä.

Seuraavaksi Serpentin syöttötiedosto luotiin valmiiksi tehdyn esisyöttötiedoston perusteella. Esisyöttötiedosto sisälsi kaikki vakiona säilyvät osat ja lisäksi merkit, joiden kohdalle *serpentinp*-aliohjelma kirjoitti muuttuvat tiedot. Muuttuvia tietoja olivat laskennassa haluttu erilämpöisten materiaalien määrät ja materiaalien lämpötilat, jotka edellinen aliohjelma määräsi. Serpent käyttää erillisiä tiedostoja kuulakeon syöttöön, joten kuulakekotiedoston käsittelyyn tarvittiin oma aliohjelma *pebbd*. Kuulakekotiedostossa käytännössä päätettiin millainen *serpentinp*-aliohjelman luomista vaihtoehdoista kuulakasan kukin kuula oli. *pebbd* sijoitti kuulat kuula kerrallaan lähimpään lineaarisen asteikon lämpötilaan.

Tämän jälkeen suoritettiin *serpentrun*-aliohjelma, joka käynnisti Serpentin laskemaan muodostettu reaktorifysiikkaosa iteraatiokierroksesta. Serpent palauttaa eril-

liseen tiedostoon kuulakohtaiset tehot, joita käsiteltiin laskennan päätyttyä *power-dist*-aliohjelmalla. Serpentillä lasketuista kuulakohtaisista tehoista valittiin kuhunkin laskentakoppiin kuuluvat tehot ja laskettiin yhteen Fluentissa käytettäväksi tehontuotoksi. Tehotiedot luettiin taulukkoon, josta niitä käytettiin Fluentin syötötiedoston tekevässä aliohjelmassa. Tämän *fluentinp*-aliohjelman tarkoituksena oli tuottaa Fluentille sen tarvitsemat porositeetit ja laskentakoppikohtaiset tehot. Automaattista kytkentää Fluentin kanssa ei ehditty kuitenkaan saada toimimaan ja laskenta yksinkertaisesti odotti kunnes manuaalisesti lasketut Fluentin lämpötilat oli saatu kopioitua paikoilleen. Tämän jälkeen suoritusta jatkettiin ja laskenta palasi iteraatiokierroksen alkuun.

5.6 Laskentaympäristö ja lähtöoletukset

Laskentaan oli käytettävissä laskenta-aikaa Ydinvoimatekniikan laboratorion laskentaklusterilta, joka koostui neljästä tietokoneesta, sekä erilliseltä työasemalta. Kussakin klusterin koneessa oli Intel Core2 Quad Q9550 neliydinsuorittimet ja 8 gigatavua muistia. Erillisen työaseman suoritin oli Intel Xeon E5520 ja muistia oli käytettävissä 12 gigatavua. Käyttöjärjestelmät olivat klusterin koneissa SuSe 11.1 ja työasemassa Ubuntu 10.04 LTS.

Laskentakapasiteetti- ja aikataulusyistä päädyttiin käyttämään laskennassa taulukossa 5.6 esitettyjä arvoja. Serpenttiä käytettiin pääasiallisesti erillisessä työasemassa sen suuremman muistikapasiteetin takia. Neutronihistorioiden ja materiaalueiden määrä valittiin niin suureksi kuin käytettävä muisti salli, mutta kuitenkin rinnakkaislaskenta kaikilla suoritinymillä mahdollistaen.

Aiemmin mainittiin, ettei Fluentin komentorivikäyttöliittymään ehditty tehdä automatisointia, joten kytketty laskenta pysäytettiin aina odottamaan Fluentissa tapahtuvaa manuaalista lämpötilojen laskentaa. Fluentia käytettiin samalla koneella kuin kytkettyä laskentaakin. Tiedostojen siirtämisen jälkeen kytkettyä laskentaa ajettiin uusi kierros.

Taulukko 5.6: Laskennan alkuarvot

Neutronisukupolvien määrä	500
Neutronihistorioita sukupolvea kohti	60000
Neutronihistorioita iteraatiota kohti	$30 \cdot 10^6$
Serpentin lämpötila-alueiden määrä	40
Serpentin alkuarvolämpötila	800 K
Fluentin laskentakoppien määrä	5148
Laskentakoppeja radiaalisuunnassa	6
Laskentakoppeja kiertokulmasuunnassa	26
Laskentakoppeja korkeussuunnassa	33

Ensimmäisten kymmenen neutronisukupolven tiedot jätettiin huomioimatta tuloksissa siltä varalta, että fissioiden keskimääräiset tapahtumapaikat ja siten seuraavan sukupolven neutroneiden lähtöpaikat eivät olisi konvergoituneet riittävän lähelle oikeaa tilannetta. Muissa aiemmissa kuulakekoreaktorituloksissa ei oltu havaittu ainakaan erityisen selvää systemaattista virhettä alkusukupolvilla, joten tätä arvoa päätettiin käyttää tässäkin laskennassa.

Serpentistä käytettiin versiota 1.1.14 ja siinä ei ollut säikeistystä, vaan jokaisella rinnakkaisprosessilla oli muistissa oma kopio ydinmateriaalidatasta. Tämä tuhlaa huomattavan määrän muistia ja rajoittaa käytettävien erilämpöisten alueiden määrää merkittävästi. Fluentin käytetty versio oli 13.0.

6 Tulokset

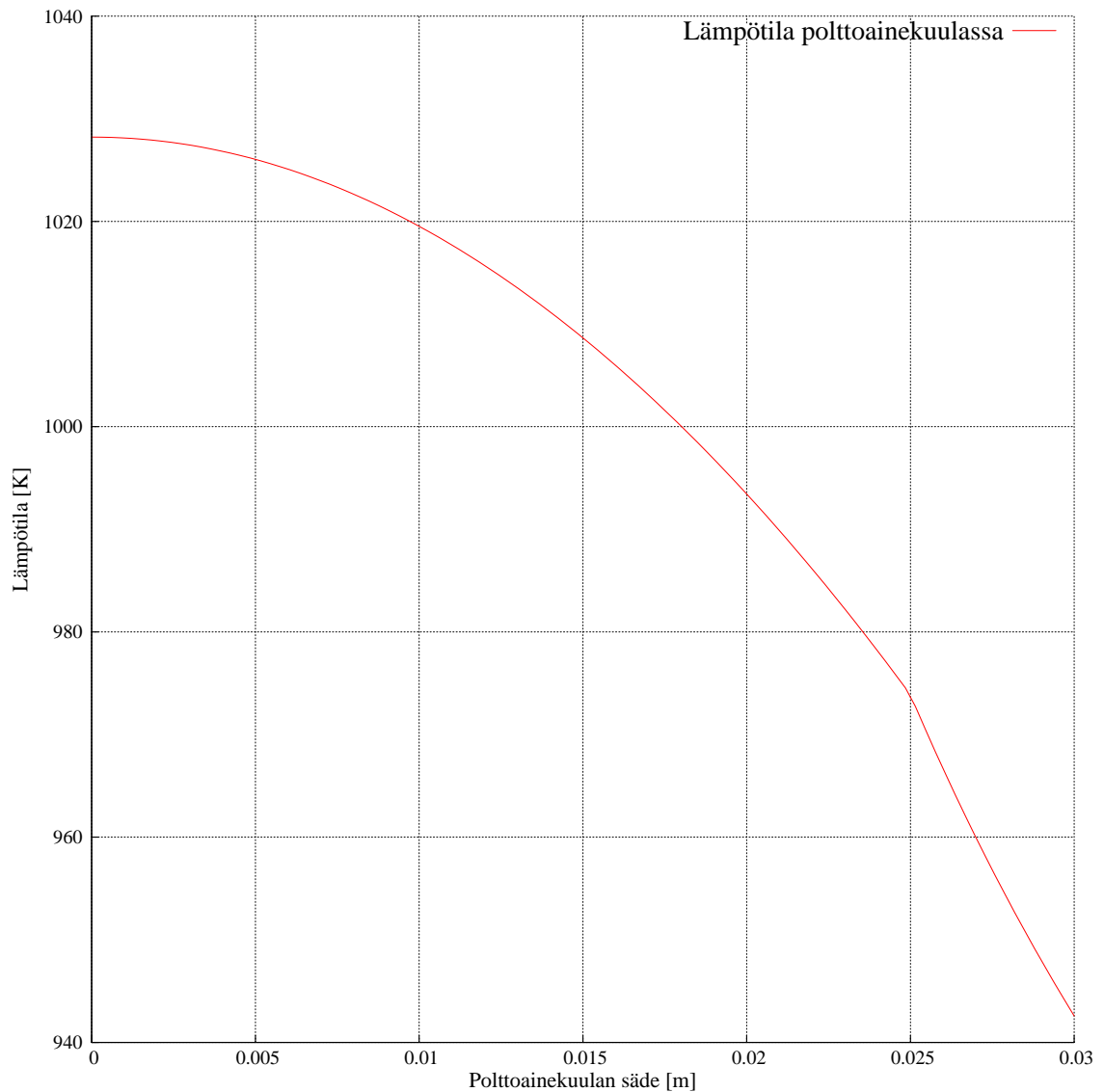
Luvussa esitetään työn kuluessa saavutetut tulokset jaettuna kolmeen osaan. Ensimmäisenä esitetään perinteisillä lämmönsiirron menetelmillä lasketut tulokset, joita tarvitaan kytketyn laskennan toteuttamiseen ja tulosten arviointiin. Toisena esitetään Monte Carlo -koodi Serpentillä laskettuja reaktorikokoluokan kuulakekolaskentatuloksia, jotka ovat edellytys kytketylle laskennalle. Lopuksi on tuloksia itse kytketystä laskennasta.

6.1 Kuulien ja jäähdytevirtauksen lämpötilat

Kuulakeon jäähdytevirtaukselle ja polttoainekuulan lämpötiloille laskettiin esitetyillä yksinkertaisilla menetelmillä taulukossa 6.1 esitetyt arvot. Kuulille annetut tiedot pätevät reaktorin keskimääräisessä lämpötilassa olevalle kuulalle. Kuvassa 6.1 on lisäksi esitetty polttoainekuulalle laskettu lämpötilajakauma. Lämpötilajakauman muoto on tällä tavalla laskettuna kaikille kuulille samanlainen.

Taulukko 6.1: Kuulakekoreaktorin lämmönsiirtokerroin ja lämpötilat

Keskimääräinen lämmönsiirtokerroin	3710	W/(m ² K)
Lämpötila ulostulossa	943	K
Keskimääräinen lämpötila	858	K
Kuulan pintalämpötila	943	K
Huokoisuus (porositeetti)	0,394	



Kuva 6.1: Polttoainekuulan lämpötilajakauma

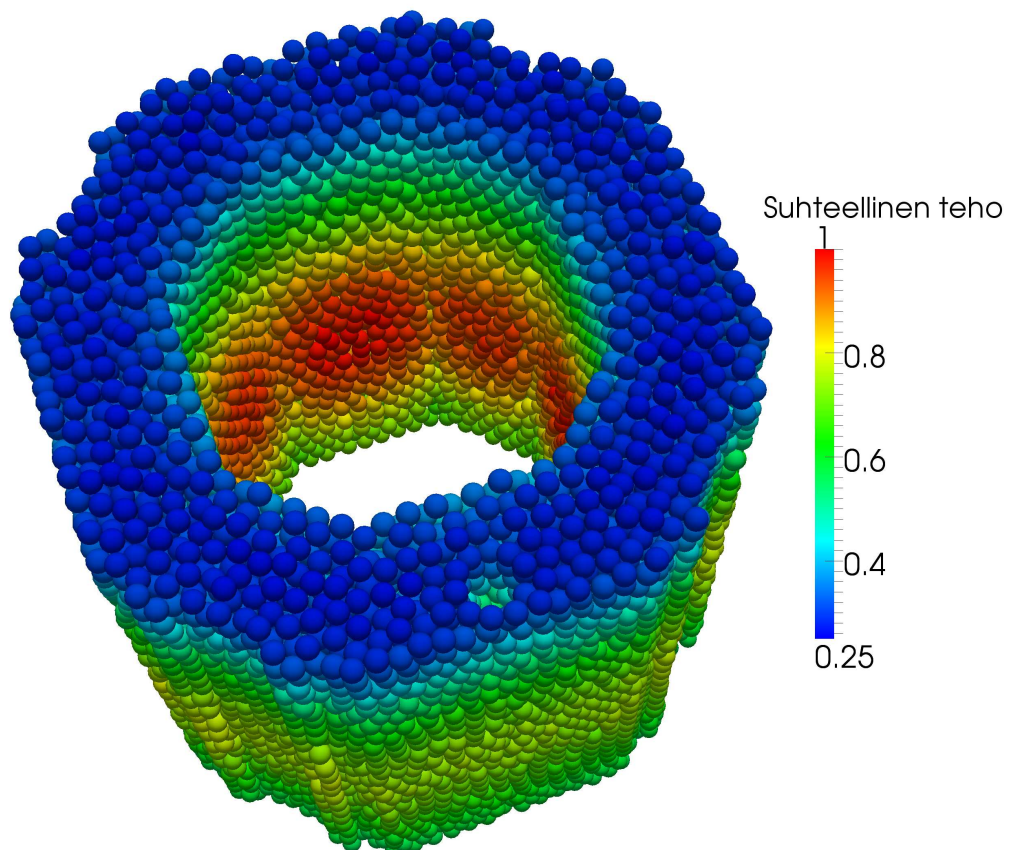
6.2 Reaktorin tehojakauman laskeminen

Ennen kytketyn laskennan toteuttamista laskettiin Serpentillä venäläisen ASTRA-kriittisyyskoelaitoksen [60] vertailulaskuongelmat. Laitoksen ytimen muodostava kuulakeko laskettiin DEM-koodilla ja kasvutekijä Serpentillä. Tässä vaiheessa sivutuotteena saatiin myös kuulakeon polttoainekuulakohtainen tehojakauma, vaikkei koelaitteisto tehoa tuotakaan kuin maksimissaan 1 kW luokkaa. Tuloksista kirjoitettiin konferenssipaperi ”An Approach for Detailed Reactor Physics Modelling of Randomly Packed Pebble Beds” ja se esiteltiin HTR-2010 konferenssissa. Reaktorin kas-

vutekijälle saatiin taulukossa 6.2 esitetyt arvot ja tehojakaumaa havainnollistetaan kuvassa 6.2. Kuulakasassa etualalla näkyvä reikä on säätösaunaputkelle varattu tila. [75]

Taulukko 6.2: ASTRA-kriittisyyskoelaitoksen vertailulaskentaongelmien kasvutekijät

Verrattavat tilanteet	Mitattu kasvutekijä	Laskettu kasvutekijä
1	1.0000 ± 0.0036	1.01052 ± 0.00008
2	1.0000 ± 0.0036	1.01040 ± 0.00008
3	1.0000 ± 0.0036	1.01086 ± 0.00008
4	1.0000 ± 0.0036	1.01005 ± 0.00008
5	1.0000 ± 0.0036	1.01096 ± 0.00008



Kuva 6.2: ASTRA-koelaitteistossa tapahtuvien fissionen jakautuminen

6.3 Kytketyn laskennan tulokset

Tarvittavan neutronihistorioiden määrän selvittämiseksi laskettiin samaa yhtä iteraatiota tutkitusta reaktorista Serpentillä eri määrillä neutronihistorioita sukupolvea kohti. Kappaleessa 4.5 esitettyä menetelmää on tässä sovellettu polttoainekuulien ja laskentakoppien tehojen laskentaan eri neutronihistoriamäärillä. Taulukossa 6.3 on esitetty laskentatapausten välillä tapahtuvat keskimääräiset muutokset polttoainekuulien ja laskentakoppien näkökulmasta. Esimerkiksi verrattaessa tilanteita, joissa simuloidaan 10000 ja 20000 neutronihistoriaa sukupolvea kohti, saadaan keskimääräiseksi polttoainekuulan tehon muutokseksi 99 W verrattaessa kierrosten tilanteita. Lyhimmässä simulaatiossa aikaa kului noin tunti siihen käytetyltä klusterin neliydinkoneelta ja muut arvot ovat hyvin lähellä tämän monikertoja.

Taulukko 6.3: Keskimääräisten polttoainekuula- ja laskentakoppikohtaisten tehojen muutosten kehittyminen laskennassa eri neutronihistoriamäärillä

Verrattavat tilanteet	Kuulat [W]	Kopit [W]
10000–20000	99	313
20000–30000	74	229
30000–40000	62	192
40000–50000	54	168

Kytketyn laskennan iteraatiota ajettiin luvussa 5 kuvatulla tavalla viisi laskentakierrosta ja keskimääräiset muutokset laskentakierrosten välillä ovat esitettynä taulukossa 6.4. Muutokset on esitetty keskimääräisille polttoainekuula- ja laskentakoppikohtaisten tehojen muutoksille sekä keskimääräisille laskentakoppikohtaisille lämpötilan muutoksille. Neutronihistorioita simuloitiin $6 \cdot 10^4$ sukupolvea kohden eli yhteensä $30 \cdot 10^6$ kappaletta iteraatiokierrosta kohti.

Taulukko 6.4: Keskimääräisten teho- ja lämpötila-muutosten kehittyminen laskennassa iteraatioiden kuluessa

Verrattavat iteraatiot	$\overline{X_{P,p}}$ [W]	$\overline{X_{P,n}}$ [W]	$\overline{X_{T,n}}$ [K]
1–2	48,93	194,84	0,88
2–3	46,78	145,75	0,38
3–4	46,68	144,29	0,28
4–5	46,62	143,68	0,26

missä

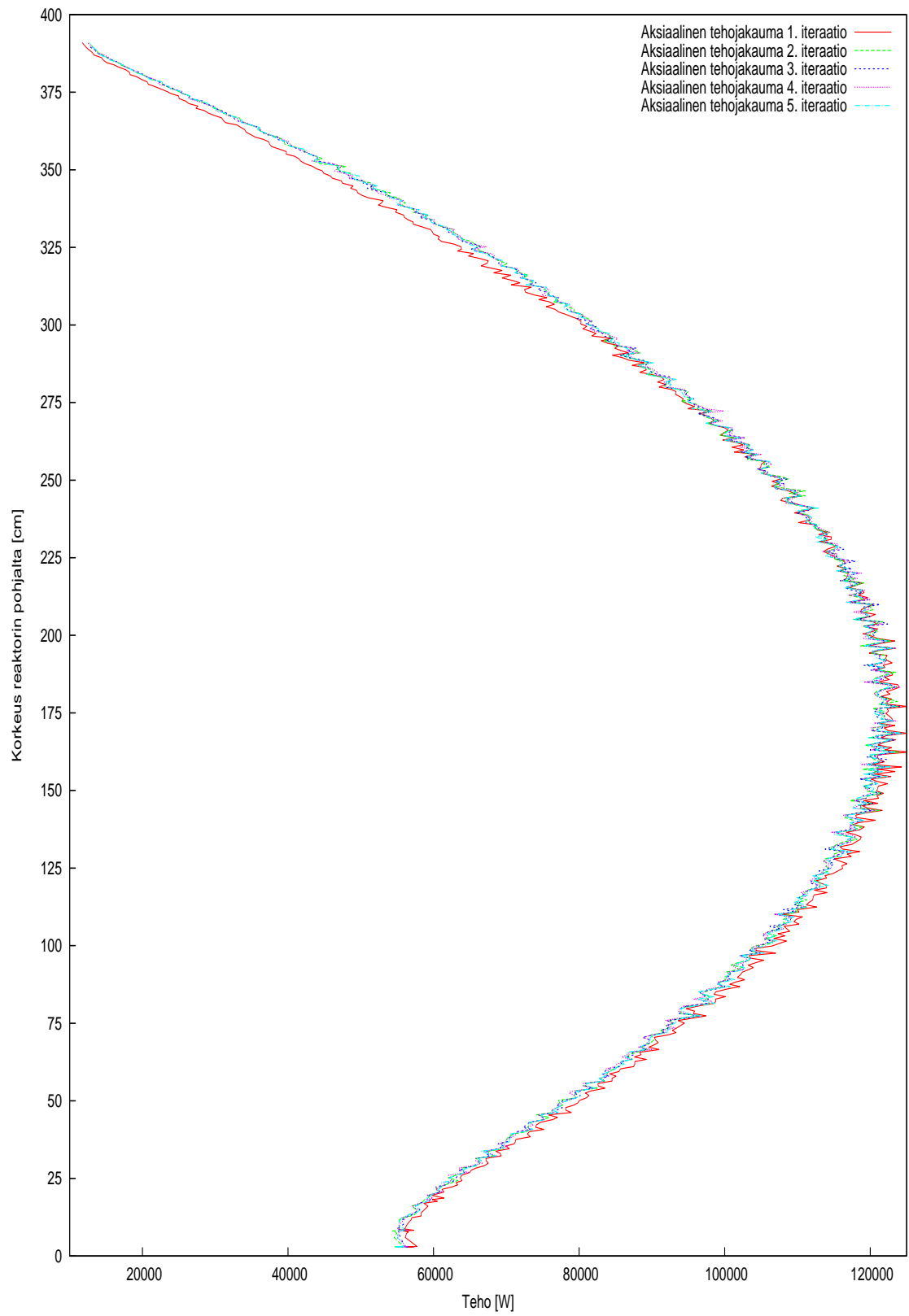
$\overline{X_{P,p}}$	keskimääräinen muutos polttoainekuulien tehoissa laskentakierrosten välillä
$\overline{X_{P,n}}$	keskimääräinen muutos laskentakoppien tehoissa laskentakierrosten välillä
$\overline{X_{T,n}}$	keskimääräinen muutos laskentakoppien lämpötiloissa laskentakierrosten välillä

Iteraatiokierroksilla Serpentin laskema kasvutekijä ja reaktorifysiikkalaskentaan kulunut aika on esitetty taulukossa 6.5. Kasvutekijälle yhden keskihajonnan luottamusväli on kaikissa tapauksissa ± 24 pcm.

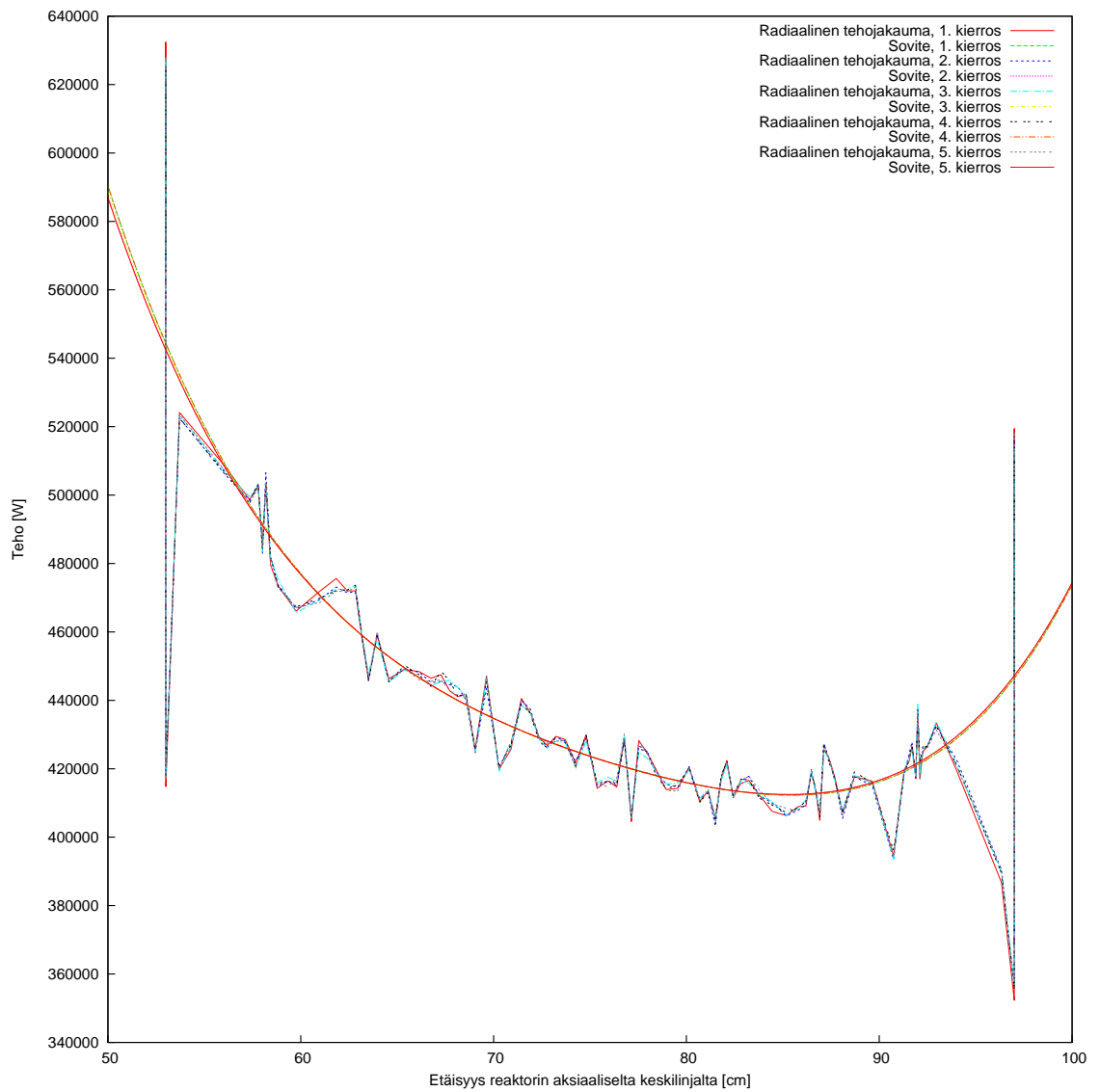
Taulukko 6.5: Iteraatiokierroksilla ratkaistu reaktorin kasvutekijä ja käytetty laskenta-aika

Iteraatio	Kasvutekijä	Laskenta-aika [min]
1	0,97186	361
2	0,97170	359
3	0,97158	357
4	0,97158	364
5	0,97159	372

Lisäksi kuulakohtaisista tehotiedoista laskettiin sekä aksiaali-, että radiaalisuunnissa tehojakaumakäyrät, jotka on esitetty kuvissa 6.3 ja 6.4. Arvot laskettiin aksiaalisuunnassa 100 kuulan ja radiaalisuunnassa 500 kuulan välein.

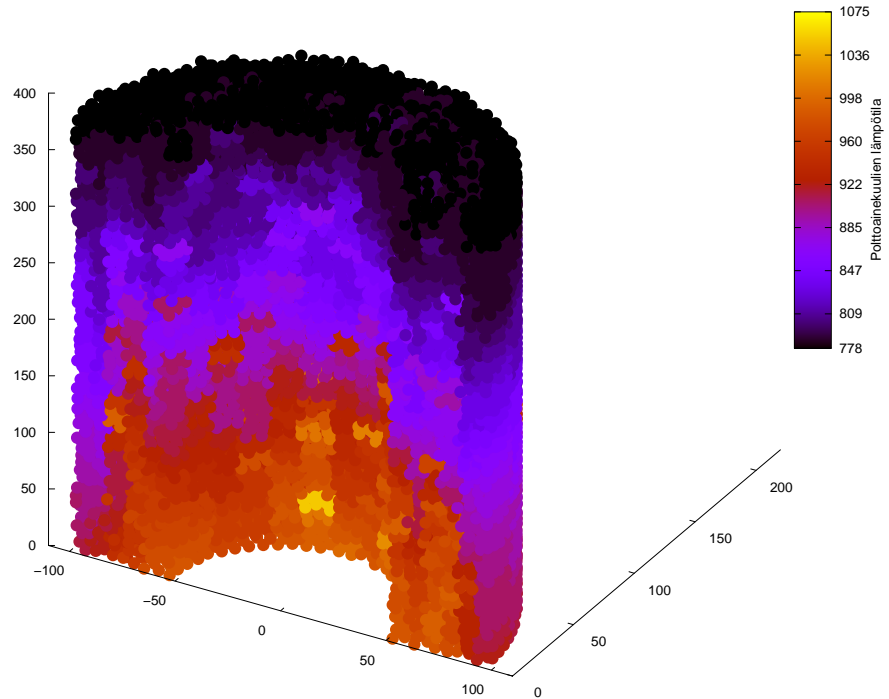


Kuva 6.3: Aksiaalinen tehojakauma

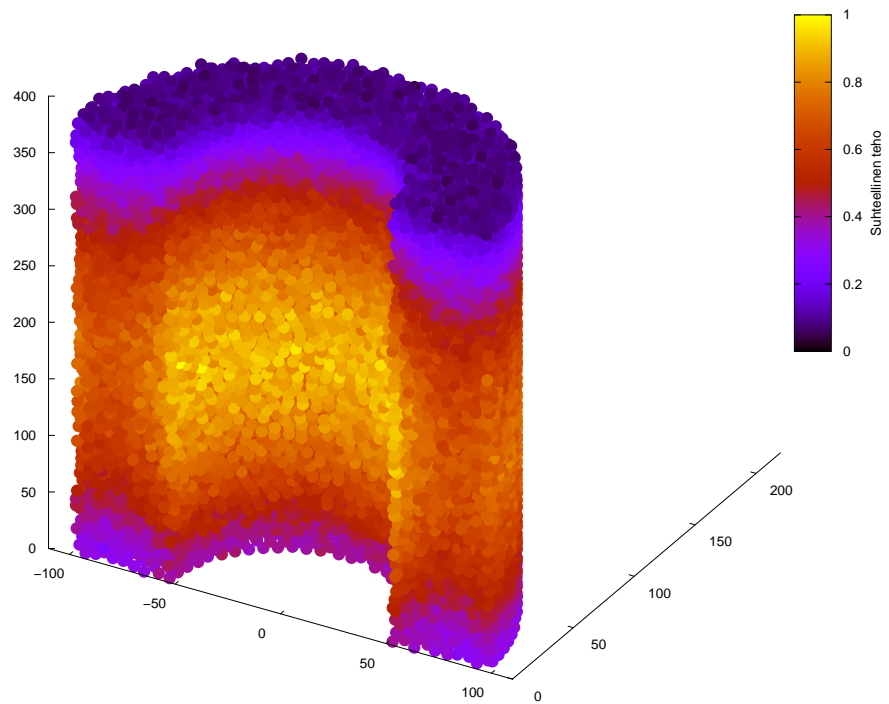


Kuva 6.4: Radiaalinen tehojakauma

Laskennan kuluessa saa lukuisia erilaisia kuvia niin tehojakaumasta kuin lämpötiloistakin ja seuraavana esitetään muutamia tyypillisiä kuvia eri iteraatiokierroksilta. Kuvassa 6.5 havainnollistetaan reaktorifysiikkaiteraatiossa käytettävää kuulien lämpötilajakaumaa ja seuraavassa kuvassa 6.6 tämän pohjalta laskettua tehojakaumaa.

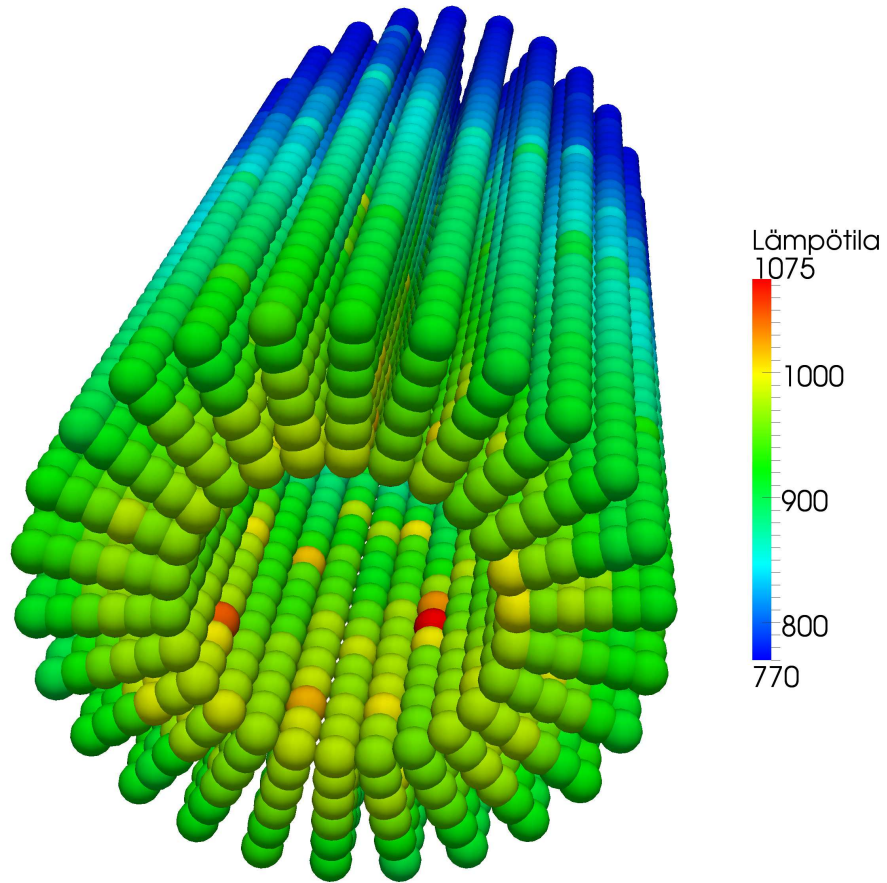


Kuva 6.5: Kuulakohtaiset lämpötilat reaktorifysiikkalaskennassa, iteraatiokierros 5

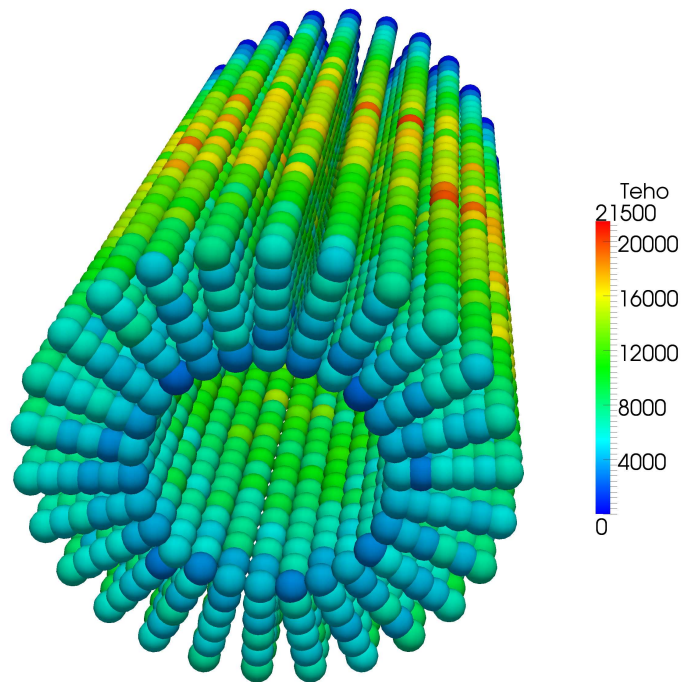


Kuva 6.6: Kuulakohtaiset lasketut tehot reaktorifysiikkalaskennan jälkeen, iteraatiokierros 5

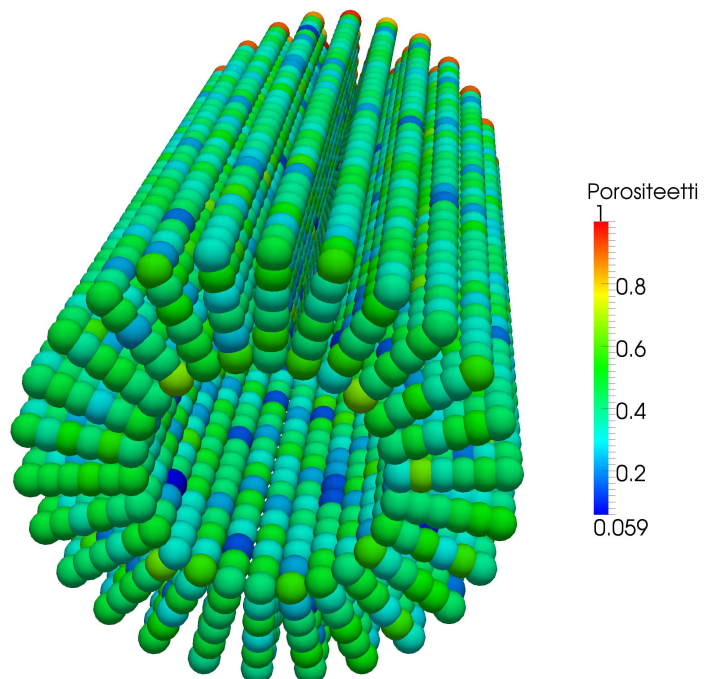
Seuraavissa kuvissa on viidennen iteraatiokierroksen tuloksena saadut laskentakoppien lämpötila- ja tehojakaumat sekä laskennan kuluessa vakiona pysyvä porositeetti. Yksi kuvassa esiintyvä pallo vastaa yhtä reaktorin laskentakoppia. Kaikki kuvat näyttävät samaa reaktorin kohtaa ja näyttävät reaktorin pohjalta ylöspäin.



Kuva 6.7: Laskentakoppien lämpötilajakauma reaktorin pohjan suunnasta viidennen iteraatiokierroksen jälkeen [K]

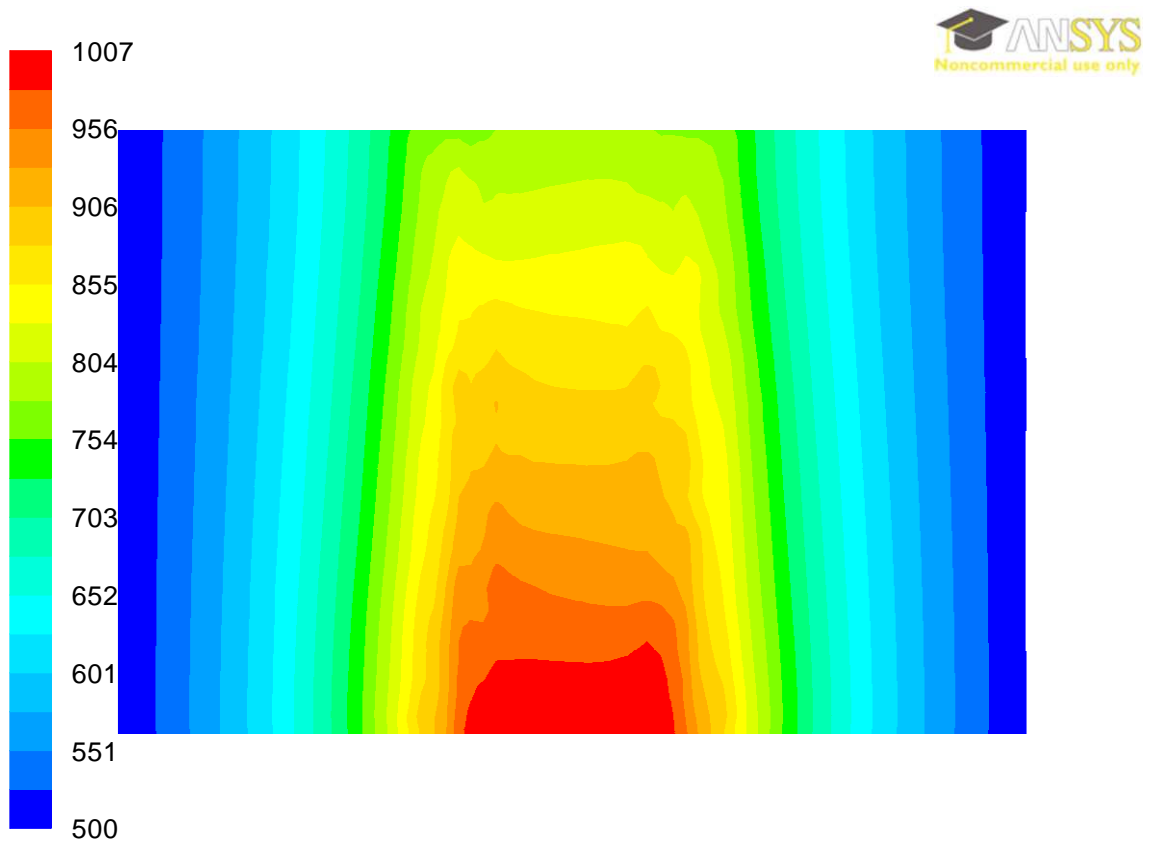


Kuva 6.8: Laskentakoppien tehojakauma reaktorin pohjan suunnasta viidennen iteraatiokierroksen jälkeen [W]

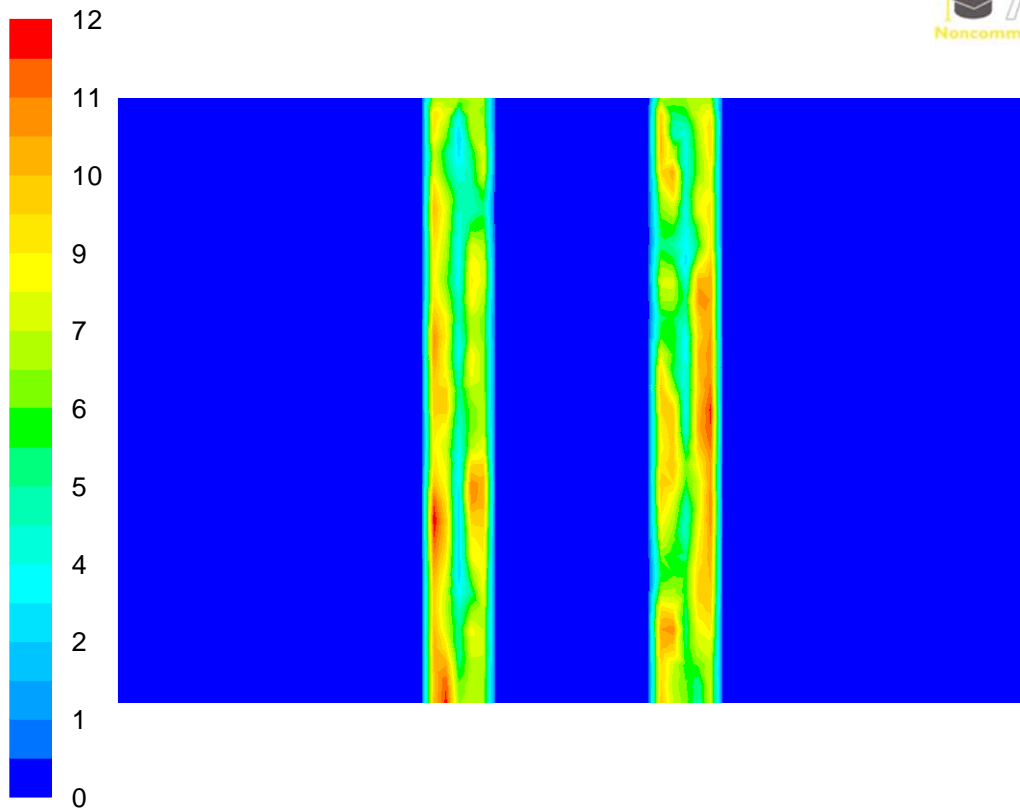


Kuva 6.9: Laskentakoppien porositeettijakauma reaktorin pohjan suunnasta

Kahdessa viimeisessä kuvassa on Fluentin tulostamia arvoja termohydrauliikkalaskennasta. Kuvassa 6.10 on lämpötilat pystysuunnassa leikatusta reaktorista. Polttoainekuulat sijaitsevat kaksihuippuisen kuuman alueen huippujen kohdalla. Sijaintia voi arvioida vertaamalla lämpötilakuvaa kuvassa 6.11 esitettyyn nopeusjakamaan, jossa näkyy vain sydänalue.



Kuva 6.10: Lämpötilajakauma pystysuunnassa leikatusta reaktorista [K]



Kuva 6.11: Nopeusjakauma pystysuunnassa leikatusta reaktorista [m/s]

7 Johtopäätökset

Ensimmäinen ja tärkein saavutettu tulos oli kytketyn laskennan saaminen toimivaksi. Toiseksi laskentatulokset näyttävät laskennan toimivan suurinpiirtein odotetulla tavalla. Saadut ensimmäiset tulokset auttavat merkittävästi laskentamenetelmän kehittämisessä ja sen soveltamisessa käytäntöön.

Huolimatta Monte Carlo -menetelmän vaatimasta laskentatehosta tarvittava laskenta-aika ei venynyt erityisen pitkäksi. Yhteensä kaikki viisi iteraatiokierrosta kestivät noin 30 tuntia yhdellä tietokoneella ajettuna. Tämä on hyvä tulos, koska Monte Carlo -menetelmä on hyvin rinnakkaistuva ja laskenta-aikaa voidaan lyhentää merkittävästi ottamalla laskentaan mukaan enemmän tietokoneita. Tässä vaiheessa käytetty termohydrauliikkamalli laski oman osansa erittäin nopeasti ja iteraatiokierrosta kohti kuluva aika laskettiin sekunneissa.

7.1 Laskentatulokset

Kuvissa 6.7, 6.8 ja 6.9 esitetyistä tuloksista voidaan tehdä muutamia mielenkiintoisia havaintoja. Ensinnäkin lämpötiloissa näkyy kuumia pisteitä reaktorin alaosissa, joi-
lle löytyy selitys tarkastelemalla huokoisuusarvoja. Osaan laskentakopeista näyttää kertyneen enemmän polttoainekuulia (kuvassa tummansiniset alueet) ja tähän voi selityksenä olla oikeat tihentymät tai paljon todennäköisemmin jonkinlainen periodisuus valitun laskentakoppikoon ja keskipistemenetelmän seurauksena. Näin siksi, että paljon kuulia sisältävien laskentakoppien naapurissa on usein koppeja, joissa on vastaavasti ympäristöään harvempaa.

Tästä nähdään seurannaisilmiöitä, kuten mainittuja kuumia lämpötila-arvoja paljon kuulia sisältävissä kopeissa. Sen lisäksi, että näihin laskentakoppeihin päätyy paljon tehoa reaktorifysiikkalaskun seurauksena, niin niissä on myös paljon virtausvastusta. Alueessa virtaa vähemmän jäähdytettä ja lämpötila nousee väistämättä selvästi

useimmissa tällaisissa kohdissa.

Tarkastelemalla reaktorin ulkoreunaa reaktorin puolivälin korkeudelta, jossa teho on suurin, nähdään paljon polttoainekuulia sisältävien koppien tuottavan selvästi enemmän tehoa naapureihinsa verrattuna. Tähän pätee siis sama selitys kuin lämpötiloihinkin sen seikan ohella, että Monte Carlo -laskenta perustuu satunnaisuuteen ja tästä muodostuu jonkin verran kohinaa tuloksiin riippuen mihin neutroneja nyt on laskennassa sattunut kulkeutumaan. Tähän voi vaikuttaa ainoastaan lisäämällä simuloituja neutronihistorioita. Käytetty neutronihistoriamäärä oli tässä laskennassa 600-kertainen polttoainekuulien määrään, jota voinee pitää taulukossa 6.3 esitettyjen tulosten perusteella minimimääränä. Esimerkiksi suurimpien ajettujen neutronihistoriamäärien tapausten kesken keskimääräinen polttoainekuulissa ollut muutos on kuuden prosentin luokkaa verrattuna keskimääräiseen polttoainekuulakohtaiseen tehoon. Tämän laskennan näkökulmasta laskentakopit auttavat tähän ongelmaan, koska isommalla alueella myös kuulissa syntyvät paikalliset tehovaihtelut keskiarvoistuvat. Samasta taulukosta poimittaessa laskentakopeille vastaava tulos kuin aiemmin kuulille, päästään heittelyssä enää vajaan kahden prosentin luokkaan laskentakoppikohtaisesta keskitehosta.

Lyhyesti koottuna näyttää siltä, että polttoainekuulien sijoittaminen keskipisteiden perusteella laskentakoppeihin ei näytä toimivan ongelmitta ja siitä voisi olla kannattavaa siirtyä jo kohdassa 4.3.2 mainittuun integrointimenetelmään.

Ensimmäisellä iteraatiokierroksella kuvan 6.3 aksiaalisen tehojakauman muodossa on selvästi nähtävissä muutos tasaisesta lämpötilasta uuteen tilanteeseen. Teho vähenee reaktorin alaosassa, joka kuumentuu ja vastaavasti teho kasvaa yläosassa, joka viilenee. Alkuosassa kohdassa 2.2.2 mainitusta Doppler-ilmiöstä aiheutuva terminen takaisinkytkentä selvästikin toimii. Radiaalisuuntaisessa tehojakaumassa ei vastavia selviä ilmiöitä ole havaittavissa. Radiaalisuuntaista laskentaa vaikeuttaa todennäköisesti polttoainekuulien pakkautuminen lähellä seiniä säännöllisille etäisyyksille seinistä. Tästä aiheutuneet käyrässä näkyvät voimakkaat vaihtelut tietyssä osassa reaktoria olevien kuulien sattuessa samalle keskiarvoistusvälille.

Termohydrauliikkamallissa käytetty laskentakoppikohtainen huokoisuusarvo näyttäisi toimivan kuvan 6.11 perusteella hyvin. Polttoainekuulien pakkautuessa seinien lähellä säännöllisille etäisyyksille seinästä, muodostuu virtauksen kannalta helppoja reittejä kulkea ja tämä on havaittavissa laskentatuloksesta.

Termohydrauliikkamallin laskemat keskimääräiset lämpötilat vaikuttavat varsin hy-

vin vastaavan odotettuja lämpötiloja, tai ainakin suuruusluokka on oikea, siltä osin kuin yhdestä energiayhtälöstä peräisin olevia arvoja pystyy vertaamaan. Laskettuja tuloksia ei voi verrata muiden tekemään tutkimukseen, koska laskennassa mallinnetulla reaktorilla ei ollut mitään suoranaista esikuvaa. Näin myöskään koodilla saavutettuja tuloksia ei voida verrata esimerkiksi mittaustuloksiin, vaan tähän asiaan palataan myöhemmissä analyyseissa.

7.2 Kehityskohteet

Laskennan kuluessa huomattiin monta kehitettävää asiaa, kuten laskennan aloittamisessa voitaisi olettaa lineaarinen lämpötilajakauma tasaisen sijaan. Laskenta näyttää kyllä hyppäävän nopeasti suurinpiirtein oikeaan arvoonsa, jonka jälkeen alkaa hidas paraneminen, kuten taulukosta 6.4 nähdään. Tässä mielessä asialla ei näyttäisi olevan merkitystä laskennan nopeuttamisessa, mutta toisaalta tuloksia ja iteroituvuutta ei ole tässä vaiheessa vielä kattavasti tutkittu.

Toinen laskentatekninen kehitettävä asia on kuulien jakaminen lämpötilaryhmiin. Aiemmin mainitut kuumat lämpötila-alueet ovat selvästi kuumempia kuin muut reaktorin kohdat. Kuulat jaetaan lineaarisesti eri lämpötilaryhmiin, jolloin kuumimpaan ryhmään tulee yksittäisten kuumien alueiden kuulat ja niiden lähelle jää tyhjiä ryhmiä. Kaikkia lämpötilavaihtoehtoja, joita muutenkin on muistin rajallisuudesta johtuen vähän, ei siis edes käytetä laskennassa. Syntyvä tilanne olisi syytä korjata esimerkiksi painottamalla valittavia lämpötiloja niihin osuvien kuulien määrän perusteella.

E erityisen merkittävää on myös laskennassa käytetty yksinkertainen menetelmä, jossa polttoainepartikkelien sisältämän uraanin lämpötilassa ei huomioitu partikkelin suojakerrosten aiheuttamaa lämpövastusta. Siten laskennassa jäi huomioimatta uraanin lämpötilan nousu polttoainealueen lämpötilaa korkeammaksi. Tämän asian korjaaminen on hyvin yksinkertaista periaatteellisesti, mutta oikean lämpötilajakauman ratkaiseminen yleensäkin polttoaineen grafiitille ilman parannuksia termohydrauliikkamalliin on vaikeampi tehtävä. Toinen hieman samaan asiaan liittyvä ongelma on grafiitin lämpötilasta aiheutuva takaisinkytkentä tehoon. Grafiitti on mallinnettu tasalämpöiseksi ja syytä olisi tarkkaan selvittää millaisella tasalämpöisellä grafiitilla voi kuvata oikeasti polttoainekuulissa esiintyviä lämpötilajakaumia. Tässä pitää kuitenkin muistaa termohydrauliikkapuolen asettamat usein paljon merkittäväm-

mät rajoitteet, kuten esimerkiksi epävarmuus grafiitin lämmönjohtavuudessa, joka vaihtelee merkittävästi riippuen grafiitin säteilytyksen määrästä.

Polttoainekuulissa käytettiin yhtä montaa satunnaista partikkelijakaumaa kuin oli erilämpöisiä polttoainekuuliakin. Tästä aiheutuu samanlainen partikkelijakauma vierisiin polttoainekuuliin, josta aiheutuu säännöllinen rakenne. Käytännössä tällä ei pitäisi olla mitään vaikutusta tuloksiin, ellei partikkelijakauma olisi esimerkiksi vahvasti tiettyyn osaan kuulaa painottunut. Tämä ongelma saataisiin poistettua kehittämällä Serpentiin sopiva lennossa partikkelien sijainteja kehittävä rutiini, jolloin kaikki polttoainekuulat olisivat keskenään erilaisia.

Serpent ei simuloi muita kuin neutroneita, joten tehon kulkeutumista ei mallinneta mitenkään. Toisaalta suurin osa tehosta vapautuu uraaniin, joten tällä ei liene erityisen suurta merkitystä tulosten kannalta. Serpentistä on tätä kirjoitettaessa tekeillä uusi versio, jossa on säikeistys ja siten muistin käyttöä pitäisi saada hillittyä laskentatehon siitä erityisesti kärsimättä. Tämä auttaa selvästi kytketyssä laskennassa ongelmaksi muodostuvaan muistin tarvittavaan määrään rinnakkaislaskennassa.

8 Yhteenveto

Tehtyjen laskentojen perusteella Monte Carlo -menetelmää voidaan käyttää kuulakekoreaktoreiden kytketyssä laskennassa mallinnettaessa ajasta riippumattomia ongelmia. Menetelmä mahdollistaa yksinkertaisen ja tarkan menetelmän kuulakekoreaktori-analyysiin. Tarvittava laskentakapasiteetti on perinteisiin deterministisiin menetelmiin perustuvia laskentamenetelmiä suurempi, mutta laskenta voidaan tehdä vähemmän oletuksin ja epävarmuudet jäävät pienemmiksi.

Työssä saavutetut tulokset avaavat ovia kohti kuulakekoreaktorin yksityiskohtaisten paikallisten ilmiöiden tutkimista. Laskemalla tässä työssä kehitetyllä kytkentäkoodilla yleinen reaktorin lämpötilajakauma ja virtaustiedot, voidaan nämä ottaa tehotietojen ohella reunaehdoiksi tarkkaan laskennallisen virtausmekaniikan malliin. Tämä malli voisi koostua esimerkiksi vain yhden laskentakopin alueesta ja polttoainekuulista mahdollistaen tarkan laskennan tällä rajoitetulla alueella.

Tämä työ on yksi esimerkki Monte Carlo -menetelmän tulemisesta käyttökelpoiseksi yhä useampiin käytännön ongelmiin. Tämän 1940-luvulta alkaen tutkitun menetelmän soveltamismahdollisuudet ovat oleellisesti parantuneet viimeisen kymmenen vuoden aikana tietokoneiden suorituskyvyn myötä. Myös tulevaisuus näyttää lupaavalta, koska Monte Carlo -menetelmä rinnakkaistuu erinomaisesti.

Lähdeluetelo

- [1] Audi, G., O. Bersillon, J. Blachot, and A. H. Wapstra: *The evaluation of nuclear and decay properties*. Nuclear Physics A, 729(1):3 – 128, 2003, ISSN 0375-9474. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TVB-4B4VNB4-2/2/a24d6481eddc3d282e18410fedc4cfd9>, The 2003 NUBASE and Atomic Mass Evaluations.
- [2] Bell, George I. and Samuel Glasstone: *Nuclear Reactor Theory*. Van Nostrand Reinhold, 1970, ISBN 9780442206840.
- [3] Boer, B., D. Lathouwers, J. L. Kloosterman, T. H. J. J. Van Der Hagen, and G. Strydom: *Validation of the DALTON-THERMIX code system with transient analyses of the HTR-10 and application to the PBMR*. Nuclear Technology, 170:306–321, 2010.
- [4] Boer, Brian, Danny Lathouwers, Ming Ding, and Jan Leen Kloosterman: *Coupled neutronics / thermal hydraulics calculations for High Temperature Reactors with the DALTON - THERMIX code system*. In *International Conference on the Physics of Reactors, "Nuclear Power: A Sustainable Resource", Casino-Kursaal Conference Center, Interlaken, Switzerland, September 14-19, 2008*, 2008. <http://www.janleenkloosterman.nl/papers/boer0802.pdf>.
- [5] CEA: *CATHARE : Advanced Safety Code for Pressurized Water Reactors (PWR)*. <http://www-cathare.cea.fr>, visited on 2011-01-31, CATHARE is the result of a joint effort of : AREVA NP, CEA, EDF and IRSN.
- [6] Cember, Herman and Thomas E. Johnson: *Introduction to Health Physics*. McGraw-Hill, 4th edition, 2009, ISBN 978-0-07-142308-3.
- [7] Chen, Fubing, Yujie Dong, Yanhua Zheng, Lei Shi, and Zuoyi Zhang: *Benchmark Calculation for the Steady-State Temperature Distribution of the HTR-10 under Full-Power Operation*. Journal of Nuclear Science and Technology,

- 46(6):572–580, 2009. http://www.jstage.jst.go.jp/article/jnst/46/6/572/_pdf.
- [8] Chilton, T. H. and A. P. Colburn: *Mass transfer (absorption) coefficients, prediction from data on heat transfer and fluid friction*. Industrial and Engineering Chemistry, 26:1183–1187, 1934.
- [9] Cleveland, J. C. and S. R. Greene: *Application of THERMIX-KONVEK code to accident analyses of modular pebble bed high temperature reactors (HTRs)*. Technical report, Oak Ridge National Laboratory, 1986. NUREG/CR-4694.
- [10] Colburn, A. P.: *A method of correlating forced convection heat transfer data and a comparison with fluid friction*. Transactions of the American Institute of Chemical Engineers, 29:174–210, 1933.
- [11] Cundall, P. A. and O. D. L. Strack: *A discrete numerical model for granular assemblies*. Géotechnique, 29(1):47–65, 1979.
- [12] Cunningham, M. E., C. E. Beyer, P. G. Medvedev, and G. A. Berna: *FRAP-TRAN: A Computer Code for the Transient Analysis of Oxide Fuel Rods*. Pacific Northwest National Laboratory, Richland, WA 99352. <http://www.pnl.gov/fraccon3/fracptran/FRAPTRAN%20description.pdf>, NUREG/CR-6739 Vol. 1 PNNL-13576.
- [13] Division of Safety Analysis: *TRACE V5.0 THEORY MANUAL Field Equations, Solution Methods, and Physical Models*. U.S. NRC, Washington, DC 20555-0001, 2010-06-04 edition.
- [14] Downar, T., D. Lee, Y. Xu, T. Kozlowski, and J. Staudenmier: *PARCS v2.6, U.S. NRC Core Neutronics Simulator, THEORY MANUAL*. School of Nuclear Engineering, Purdue University, W. Lafayette, Indiana 47907, 2004. <https://engineering.purdue.edu/PARCS/Code/Manual/Theory>.
- [15] Duderstadt, James J. and Louis J. Hamilton: *Nuclear Reactor Analysis*. John Wiley & Sons, Inc., 1976, ISBN 0-471-22363-8.
- [16] Georges-Louis Leclerc, Comte de Buffon: *Essai d'arithmétique morale*. Dans *Histoire naturelle générale et particulière : servant de suite à l'histoire naturelle de l'homme*, pages 46–123. L'Imprimerie royale, 1777. http://books.google.fi/books?id=eJFMHq5v_d8C&dq=Histoire%20naturelle%2C%20g%C3%A9n

%C3%A9rale%20er%20particuli%C3%A8re%201777&pg=PA46#v=onepage&q&f=false.

- [17] Gerwin, H., W. Scherer, A. Lauer, and I. Clifford: *TINTE - Nuclear Calculation Theory Description Report*. Technical Report Jül-4317, Forschungszentrum Jülich GmbH, Institute for Energy Research, Safety Research and Reactor Technology, 2010. http://juwel.fz-juelich.de:8080/dspace/bitstream/2128/3705/1/J%C3%BC1_4317_Gerwin.pdf.
- [18] Glück, M.: *Validation of the sub-channel code f-cobra-tf: Part i. recalculation of single-phase and two-phase pressure loss measurements*. Nuclear Engineering and Design, 238(9):2308 – 2316, 2008, ISSN 0029-5493. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6V4D-4SBRTV8-1/2/c9c5318e58dbde52feb38c992d1b2414>.
- [19] Gougar, Hans, Woo Yoon, and Abderrafi Ougouag: *Multiscale analysis of pebble bed reactors*. In *Proceedings of HTR 2010 Prague, Czech Republic, October 18-20, 2010*. Idaho National Laboratory, 2010.
- [20] Gougar, Hans D.: *The Application of the PEBBED Code Suite to the PBMR-400 Coupled Code Benchmark – FY 2006 Annual Report*. Technical Report INL/EXT-06-11842, Idaho National Laboratory, 2006.
- [21] Hahn, Otto und Fritz Strassmann: *Nachweis der Entstehung aktiver Bariumisotope aus Uran und Thorium durch Neutronenbestrahlung; Nachweis weiterer aktiver Bruchstücke bei der Uranspaltung*. Naturwissenschaften, 27:89–95, 1939, ISSN 0028-1042. <http://dx.doi.org/10.1007/BF01488988>, 10.1007/BF01488988.
- [22] Höhne, T., E. Krepper, and U. Rohde: *Application of CFD Codes in Nuclear Reactor Safety Analysis*. Science and Technology of Nuclear Installations, 2010. <http://downloads.hindawi.com/journals/stni/2010/198758.pdf>.
- [23] Hiruta, Hikaru, Abderrafi M. Ougouag, Hans D. Gougar, Javier Ortensi, David W. Nigg, Cliff B. Davis, and Walter L. Weaver III: *CYNOD: A Neutronics Code for Pebble Bed Modular Reactor Coupled Transient Analysis*. In *Proceedings of the 4th International Topical Meeting on High Temperature Reactor Technology, HTR2008, September 28-October 1, 2008, Washington, DC USA*. Idaho National Laboratory, 2008. INL/CON-08-14160.

- [24] Hämäläinen, Anitta: *Applying thermal hydraulics modeling in coupled processes of nuclear power plants*. PhD thesis, VTT Processes, 2005, ISBN 951-38-6667-X. <http://www.vtt.fi/inf/pdf/publications/2005/P578.pdf>, VTT PUBLICATIONS 578.
- [25] Hämäläinen, Anitta and Hanna Rätty: *The internally coupled TRAB-3D 3.0 and SMABRE 6.0 codes*. Technical report, VTT, 2011.
- [26] Hutton, J. L., D. J. Powney (AEA Technology), P. K. Hutt, M. P. Knight, P. Bryce, A. Goddard (Nuclear Electric Limited), C. R. Schneidesch, D. Vantroyen, S. Bosso, and O. Ergo (Tractebel Energy Engineering): *Comparison of WIMS/PANTHER calculations with measurement on a range of operating PWR*. <http://www.sercoassurance.com/ANSWERS/resource/pdfs/139.pdf>, visited on 2011-04-27.
- [27] Incropera, Frank P. and David P. DeWitt: *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*. John Wiley & Sons, Inc., 5th edition, 2002, ISBN 0-471-38650-2.
- [28] International Atomic Energy Agency: *IAEA-TECDOC-978: Fuel performance and fission product behaviour in gas cooled reactors*. Technical report, International Atomic Energy Agency, 1997. <http://www.iaea.org/inisnkm/nkm/aws/htgr/fulltext/29009817.pdf>.
- [29] International Atomic Energy Agency: *Latest news related to PRIS and the status of nuclear power plants*, January 2011. <http://www.iaea.org/programmes/a2/>.
- [30] International collaboration of NEA Data Bank member countries: *The joint evaluated fission and fusion file*, 2009. http://www.oecd-nea.org/dbforms/data/eva/evatapes/jeff_31/index-JEFF3.1.1.html.
- [31] Jakob, Max: *Heat transfer*, volume 2. John Wiley & Sons, Inc., 1957, ISBN 978-0471438571.
- [32] Joksimovic, V. and C. R. Fisher: *HTGR safety philosophy*. In *International Atomic Energy Agency, Vienna (Austria). International Working Group on Gas-Cooled Reactors. Specialists meeting on gas-cooled reactor safety and licensing aspects, Lausanne, Switzerland, 1-3 September 1980. Summary report. Jan 1981*, 1980. http://www.iaea.org/inisnkm/nkm/aws/htgr/fulltext/iwggcr1_25.pdf.

- [33] Kaloinen, E. and R. Kyrki-Rajamäki: *TRAB-3D, a New Code for Three-Dimensional Reactor Dynamics*. In *5th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-5)*. Nice, France, 26-30 May, 1997. American Society of Mechanical Engineers, 1997, ISBN 0-79181-238-3. ICONE5-2197.
- [34] Kay Nünighoff, Claudia Druska, Hans Josef Allelein: *Code-to-code comparison between TINTE and MGT for transient scenarios*. In *Proceedings of HTR 2010, Prague, Czech Republic, October 18-20, 2010*, 2010.
- [35] Kyrki-Rajamäki, Riitta: *Three-dimensional reactor dynamics code for VVER type nuclear reactors*. PhD thesis, Technical Research Centre of Finland, 1995, ISBN 951-38-4784-5. VTT Publications 246.
- [36] Lee, Won Jae, Jae Jun Jeong, Seung Wook Lee, and Jonghwa Chang: *Development of MARS-GCR/V1 for thermal-hydraulic safety analysis of gas-cooled reactor systems*. Nuclear Engineering and Technology, 37(6):587–594, December 2005. <http://article.nuclear.or.kr/jknsfile/v37/JK0370587.pdf>.
- [37] Leppänen, Jaakko: *PSG2 / Serpent, a Continuous-energy Monte Carlo Reactor Physics Burnup Calculation Code*. <http://montecarlo.vtt.fi/>, visited on 2011-01-28.
- [38] Leppänen, Jaakko: *Development of a New Monte Carlo Reactor Physics Code*. PhD thesis, VTT Technical Research Centre of Finland, 2007, ISBN 978-951-38-7018-8. <http://montecarlo.vtt.fi/download/P640.pdf>, VTT Publications 640.
- [39] Leppänen, Jaakko: *PSG2 / Serpent – a Continuous-energy Monte Carlo Reactor Physics Burnup Calculation Code*. VTT Technical Research Centre of Finland, December 2010. http://montecarlo.vtt.fi/download/Serpent_manual.pdf.
- [40] Limaïem, I., F. Damian, X. Raepsaet, and E. Studer: *VHTR core modeling: Coupling between neutronic and thermal-hydraulics*. In *Mathematics and Computation, Supercomputing, Reactor Physics and Nuclear and Biological Applications, American Nuclear Society Topical Meeting in Mathematics & Computations, Avignon, France*. CEA, American Nuclear Society, 2005.
- [41] Lord Kelvin (William Thomson): *Nineteenth century clouds over the dynamical theory of heat and light*. Philosophical Magazine Se-

- ries 6, 2(7):1–40, July 1901. <http://www.informaworld.com/smpp/ftinterface~content=a910469961~fulltext=713240930~frm=content>.
- [42] Los Alamos National Laboratory: *Understanding NJOY: Index*, 2000. <http://t2.lanl.gov/njoy/theindex.html>, visited on 2011-05-27.
- [43] Lux, Iván and László Koblinger: *Monte Carlo Particle Transport Methods: Neutron and Photon Calculations*. CRC Press, 1991, ISBN 0-8493-6074-9.
- [44] Marmier, Alain, Michael A. Fütterer, Kamil Tuček, Han de Haas, Jim C. Kuijper, and Jan Leen Kloosterman: *Revisiting the concept of HTR wallpaper fuel*. In *Proceedings of the 4th International Topical Meeting on High Temperature Reactor Technology HTR2008*, 2008.
- [45] Mattila, Riku: *ARES-sydänsimulaattori viranomaisen työkaluna*. *ATS Ydintekniikka*, 38(1):35–37, 2009. http://www.ats-fns.fi/index.php?option=com_joomdoc&task=doc_download&gid=172&Itemid=&lang=fi.
- [46] McLaughlin, Brian, Matthew Worsley, Richard Stainsby, Andrew Grief, Ana Dennier, Shawn MacIntosh, and Eugene vanHeerden: *Development of local heat transfer and pressure drop models for pebble bed high temperature gas-cooled reactor cores*. In *Proceedings of the 4th International Topical Meeting on High Temperature Reactor Technology, HTR2008, September 28-October 1, 2008, Washington, DC USA*. AMEC Nuclear, 2008. HTR2008-58296.
- [47] Meitner, Lise and O. R. Frisch: *Disintegration of uranium by neutrons: a new type of nuclear reaction*. *Nature*, 143:239–240, 1939. <http://www.nature.com/physics/looking-back/meitner/meitner.pdf>.
- [48] Melese, Gilbert and Robert Katz: *Thermal and Flow Design of Helium-Cooled Reactors*. America Nuclear Society, 1984, ISBN 0-89448-027-8.
- [49] Merisaari, Timo: *Kuulakeon lämmönsiirron arviointi laskennallisella virtausmekaniikalla*. Sisäinen raportti, marraskuu 2010.
- [50] Metropolis, N.: *The beginning of the monte carlo method*. Los Alamos Science, 15:125–130, 1987. <http://library.lanl.gov/cgi-bin/getfile?15-12.pdf>, Special Issue, Stanislaw Ulam 1909-1984.

- [51] Newton, T. D.: *The development of modern design and reference core neutronics methods for the PBMR*. In *European Nuclear Conference*. Serco Assurance, 2002. http://www.sercoassurance.com/ANSWERS/resource/pdfs/enc_pnbr_paper.pdf.
- [52] Newton, T. D. and J. L. Hutton: *The next generation wims lattice code: WIMS9*. In *PHYSOR 2002, Seoul, Korea, October 7–10, 2002*. Serco Assurance, Winfrith Technology Centre, 2002. <http://www.sercoassurance.com/ANSWERS/resource/pdfs/wims9.pdf>.
- [53] Nield, Donald A. and Adrian Bejan: *Convection in Porous Media*. Springer-Verlag New York Inc., second edition, 1999, ISBN 0-387-98443-7.
- [54] Nuclear Energy Agency: *CRISSUE-S – WP2, Neutronics/Thermal-hydraulics Coupling in LWR Technology: State-of-the-art Report (REAC-SOAR)*. Technical Report 5436, OECD, 2004. <http://www.oecd-nea.org/science/docs/pubs/nea5436-crissue-s-vol2.pdf>.
- [55] Oppe, J., J. B. M. de Haas, and J. C. Kuijper: *PANTHERMIX A PANTHER-THERMIX interaction*. Technical Report ECN-I-96-022, Energieonderzoek Centrum Nederland, Netherlands Energy Research Foundation ECN, P.O. Box 1, NL-1755 ZG Petten, 1996. http://www.iaea.org/inis/collection/NCLCollectionStore/_Public/28/008/28008783.pdf.
- [56] Ortensi, Javier, Hans Gougar, Peter Mkhabela, James Han, Bismark Tyobeka, and Kostadin Ivanov: *PBMR 400 Coupled Code Benchmark: Challenges and Successes With NEM-THERMIX*. In *American Nuclear Society Annual Meeting*. Idaho National Laboratory, Penn State University, 2006. INL/CON-06-11435.
- [57] PBMR: *Why won't PBMR become a second chernobyl?*, 2005. <http://www.pbmr.co.za/contenthtml/files/File/WhynoChernobyl.pdf>, visited on 2011-05-29.
- [58] Pershagen, Bengt: *Light Water Reactor Safety*. Pergamon Press, 1989, ISBN 0-08-035915-9.
- [59] Petruzzi, Alessandro and Francesco D'Auria: *Thermal-hydraulic system codes in nuclear reactor safety and qualification procedures*. Science and Technology

- of Nuclear Installations, page 16, 2008. <http://www.hindawi.com/journals/stni/2008/460795/>.
- [60] Ponomarev-Stepnoi, Nikolai N., Evgeny S. Glushkov, Georgy V. Kompaniets, Dmitry N. Polyakov, Mikhail I. Gurevich, Alexey E. Glushkov, Viacheslav A. Lobyntsev, Vitaly I. Nosov, and A. Nichole Ellis: *Graphite annular core assemblies with spherical fuel elements containing coated UO₂ fuel particles*. Technical report, Russian Research Center Kurchatov Institute, 2008. NEA/NSC/DOC/(95)03/III, Volume III, IEU-COMP-THERM-008.
- [61] Reitsma, F., G. Strydom, J.B.M. de Haas, K. Ivanov, B. Tyobeka, R. Mphahlele, T.J. Downar, V. Seker, H.D. Gougar, D.F. Da Cruz, and U.E. Sikik: *The PBMR steady-state and coupled kinetics core thermal-hydraulics benchmark test problems*. Nuclear Engineering and Design, 236(5-6):657 – 668, 2006, ISSN 0029-5493. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6V4D-4J791RD-4/2/c60df3cfd1c1f71eb1def77340a91850>, HTR-2004.
- [62] Reuss, Paul: *Neutron Physics*. EDP Sciences, 2008, ISBN 978-2-7598-0041-4.
- [63] Rütten, H.J., K.A. Haas, H. Brockmann, U. Ohlig, C. Pohl, and W. Scherer: *V. S. O. P. (99/09) Computer Code System for Reactor Physics and Fuel Cycle Simulation; Version 2009*. Technical Report Jül-4326, Forschungszentrum Jülich GmbH, Institut für Energieforschung, Sicherheitsforschung und Reaktortechnik, 2010. http://juwel.fz-juelich.de:8080/dspace/bitstream/2128/3782/1/J%C3%BC1_4326_Ruetten.pdf.
- [64] Russian Academy of Science, Nuclear Safety Institute: *Russian RBMK reactor design information*. Technical report PNL-8937, Pacific Northwest Lab., Richland, WA (United States); AN SSSR, Moscow (Russian Federation). Inst. Yadernykh Issledovanij, November 1993.
- [65] Siltanen, Pertti ja Elja Kaloinen: *Ohjelma HEXBU-3D Neutronivuon kuvaus VVER-reaktorin sydämessä*. ATS Ydintekniikka, 38(1):22–25, 2009. http://www.ats-fns.fi/index.php?option=com_joomdoc&task=doc_download&gid=172&Itemid=&lang=fi.
- [66] Smith (PSI), B. L., U. Bieder (CEA), E. Graffard (IRSN), M. Heitsch (GRS), M. Henriksson (Vattenfall), T. Höhne (FZD), E. Komen (NRG), J. Mahaffy (PSU), F. Moretti (UPisa), T. Morii (JNES), P. Mühlbauer (NRI), U. Rohde (FZD),

- M. Scheuerer (GRS), C. H. Song (KAERI), and G. Zigh (USNRC): *Assessment of Computational Fluid Dynamics (CFD) for Nuclear Reactor Safety Problems*. Assessment NEA/CSNI/R(2007)13, OECD Nuclear Energy Agency, Le Seine Saint-Germain - 12, boulevard des îles F-92130 Issy-les-Moulineaux, France, January 2008. <http://www.oecd-nea.org/nsd/docs/2007/csni-r2007-13.pdf>.
- [67] Smyth, H. D.: *Atomic energy for military purposes*. Rev. Mod. Phys., 17(4):351–471, Oct 1945. <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.17.351>.
- [68] Stacey, Weston M.: *Nuclear Reactor Physics*. Wiley-VCH, second edition, completely revised and enlarged edition, 2007, ISBN 978-3-527-40679-1.
- [69] Stainsby, Richard, Matthew Worsley, Andrew Grief, Ana Dennier, Frances Dawson, Mike Davies, Paul Coddington, and Jo Baker: *Development of local heat transfer models for safety assessment of pebble bed high temperature gas-cooled reactor cores*. In *Proceedings of the 4th International Topical Meeting on High Temperature Reactor Technology HTR2008 September 28-October 1, 2008, Washington DC, USA*, 2008. HTR2008-58293.
- [70] Struth, S.: *DIREKT – A Computer Programme for non-steady, two-dimensional simulation of thermo-hydraulic transients*. Technical Report Jül-1702, Kernforschungsanstalt Jülich, 1999.
- [71] Studer, E., A. Beccantini, S. Gounand, F. Dabbene, J.P. Magnaud, H. Paillère, I. Limaiem, F. Damian, H. Golfier, C. Bassi, and J.C. Garnier: *CAST3M/ARCTURUS: A coupled heat transfer CFD code for thermal-hydraulic analyzes of gas cooled reactors*. Nuclear Engineering and Design, 237:1814–1828, 2007.
- [72] Studsvik Scandpower: *CASMO-5 State-of-the-Art Lattice Physics*. <http://www.studsvikscandpower.com/nuclear-reactor-analysis-software/casmo-5>, visited on 2011-05-12.
- [73] Studsvik Scandpower: *SIMULATE-5 Steady-State Nodal Core Simulator*. <http://www.studsvikscandpower.com/nuclear-reactor-analysis-software/simulate-5>, visited on 2011-05-12.

- [74] Suikkanen, Heikki: *Coolant flow and heat transfer in pebble-bed reactor core*. Master's thesis, Lappeenranta University of Technology, Faculty of Technology, Energy and Environmental Technology, Fluid Mechanics, 2008.
- [75] Suikkanen, Heikki, Ville Rintala, and Riitta Kyrki-Rajamäki: *An approach for detailed reactor physics modelling of randomly packed pebble beds*. In *Proceedings of HTR 2010*, 2010.
- [76] Szilárd, Leó: *Improvements in or relating to the transmutation of chemical elements*, 1936. <http://v3.espacenet.com/textdoc?DB=EPDOC&IDX=GB630726>.
- [77] The RELAP5-3D Code Development Team: *RELAP5-3D Code Manual Volume IV: Models and Correlations*. Idaho National Laboratory, Idaho Falls, Idaho 83415, revision 2.4 edition, June 2005. <http://www.inl.gov/relap5/r5manuals.htm>, visited on 2011-01-31, INEEL-EXT-98-00834-V4.
- [78] The RELAP5-3D Code Development Team: *RELAP5-3D Manuals*, June 2005. <http://www.inl.gov/relap5/r5manuals.htm>, visited on 2011-01-31.
- [79] Thomas, J. W., C. H. Lee, W. D. Pointer, and W. S. Yang: *Steady-State, Whole-Core VHTR Simulation with Consistent Coupling of Neutronics and Thermo-Fluid Analysis*. In *Proceedings of ICAPP '10*, pages 327–336, 9700 South Cass Avenue, Argonne, IL 60074, 2010. Argonne National Laboratory. Paper 10263.
- [80] Tong, L. S. and Joel Weisman: *Thermal Analysis of Pressurized Water Reactors*. American Nuclear Society, third edition edition, 1996, ISBN 0-89448-038-3.
- [81] Versteeg, H. K. and W. Malalasekera: *An introduction to Computational Fluid Dynamics The Finite Volume Method*. Pearson Education Limited, 1995, ISBN 0-582-21884-5.
- [82] Versteeg, H. K. and W. Malalasekera: *An introduction to Computational Fluid Dynamics The Finite Volume Method*. Pearson Education Limited, second edition, 2007, ISBN 978-0-13-127498-3.
- [83] VTT and Fortum: *Apros - process simulation software*. <http://www.apros.fi/en/>, visited on 2011-01-31.
- [84] Way, K. and E. P. Wigner: *The rate of decay of fission products*. *Phys. Rev.*, 73(11):1318–1330, Jun 1948.

- [85] Woodcock, E.R., T. Murphy, P.J. Hemmings, and T.C. Longworth: *Techniques used in the gem code for monte carlo neutronics calculations in reactors and other systems of complex geometry*. In *Proceedings of the Conference on Applications of Computing Methods to Reactor Problems*. Argonne National Laboratory, 1965. ANL-7050.

A KytKentäsovelluksen lähdekoodi

```
1 #####
2 # Contact author
3 # Ville Rintala
4 # Laboratory of Nuclear Engineering
5 # PL 20
6 # 53851 LAPPEENRANTA
7 # FINLAND
8 # http://www.lut.fi
9 #####

    netti.pl
```

B Materiaalien isotooppikoostumukset

Polttoaine UO_2		
Tiheys	10,5	g/cm^3
U-235	0,08	
U-238	0,8	
O-16	0,12	

Puskurikerros		
Tiheys	1,01	g/cm^3
C-nat	1	

Pyrolyyttinen hiili		
Tiheys	1,9	g/cm^3
C-nat	1	

Piikarbidi		
Tiheys	3,21	g/cm^3
C-nat	0,299547089	
Si-nat	0,700452911	

Grafiitti		
Tiheys	1,89	g/cm^3
C-nat	0,9999999	
B-10	0,00000018242	
B-11	0,00000081758	

Helium		
Tiheys	0,5	g/cm^3
He-4	1	
