

LAPPEENRANNAN-LAHDEN TEKNILLINEN YLIOPISTO LUT
School of Energy Systems
Energiatekniikan koulutusohjelma
BH10A0202 Energiatekniikan kandidaatintyö

Reaktoridynamiikkakoodit ja niiden laskentamenetelmät

Työn tarkastaja: Heikki Suikkanen

Työn ohjaaja: Heikki Suikkanen

Lappeenrannassa 10.4.2022

Jaakko Marttila

TIIVISTELMÄ

Lappeenrannan-Lahden teknillinen yliopisto LUT

School of Energy Systems

Energiatekniikka

Jaakko Marttila

Reaktoridynamiikkakoodit ja niiden laskentamenetelmät

Energiatekniikan kandidaatintyö 2022

40 sivua, 2 taulukkoa ja 6 kuvaa.

Tarkastaja: Heikki Suikkanen

Työssä käsitellään maailmalla kehitettyjä ja käytössä olevia reaktoridynamiikkakoodeja ja niiden laskentamenetelmiä. Dynamiikkakoodeilla mallinnetaan ydinreaktorin käyttäytymistä transienttitilanteissa, joihin kuuluvat reaktorin ylös- ja alasajo sekä häiriö- ja onnettomuustilanteet.

Työssä käydään ensin läpi ketjureaktion käyttäytymistä kuvaava reaktorin kasvutekijä, sekä polttoaineen palama ja sen koostumuksen muuttuminen käyttöjakson aikana. Tästä edetään reaktorin säädön kannalta oleellisiin käsitteisiin, kuten sen mahdollistaviin viivästyneisiin neutroneihin ja lämpötilanmuutosten johdosta ilmeneviin tehon takaisinkytkentöihin.

Reaktoridynamiikka koostuu erikseen neutronien vuorovaikutuksia käsittelevästä kinetiikasta, ja materiaalien ja jäähdytteen ominaisuuksia mallintavasta termohydrauliikasta. Termohydrauliikan avulla mahdollistetaan takaisinkytkentöjen huomioiminen mallinnuksessa.

Kinetiikka perustuu Boltzmannin yhtälöön ja siitä johdettuihin yksinkertaistuksiin. Ratkaisulle on kaksi päähaaraa, deterministiset ja stokastiset menetelmät. Deterministiset menetelmät perustuvat Boltzmannin yhtälön numeeriseen ratkaisuun diskretisointien ja yksinkertaistuksien avulla. Stokastiset, eli tilastolliset menetelmät ovat vasta hiljattain otettu mukaan dynamiikan mallintamiseen tietokoneiden laskentatehon lisääntyessä. Aikaisemmin dynamiikkamallinnus toteutettiin yksinomaan deterministisillä menetelmillä, ja edelleen hyvin monet koodit pohjautuvat näihin.

Termohydrauliikka perustuu erikseen polttoainesauvan lämmönsiirtoon ja jäähdytteen aineen- ja lämmönsiirtoon. Jäähdytteen termodynaamisten ominaisuuksien mallintaminen toteutetaan säilymisytälöiden avulla.

Työssä käydään läpi useampi reaktoridynamiikkakoodi, osa koodista on suurempien reaktorifysiikkakoodipaketien osia, toiset puhtaita dynamiikkakoodeja, ja loput yhdistelmiä erillisistä kinetiikka- ja termohydrauliikkakoodeista.

Työssä havaittiin suurimman osan käytännön koodista hyödyntävän determinististä menetelmää, jossa tilavuutta käsitellään nodaalimenetelmällä, neutronien energia on jaettu hitaiden ja nopeiden neutronien ryhmiin ja kulmariippuvuus on poistettu diffuusioteorian avulla.

SISÄLLYS

TIIVISTELMÄ

SISÄLLYSLUETTELO

SYMBOLILUETTELO

1	JOHDANTO.....	6
2	YDINREAKTORIN TOIMINNAN PERUSTEET.....	7
2.1	Neutronien vuorovaikutukset, ketjureaktio, reaktorin kasvutekijä.....	7
2.2	Neutronien vaikutusalat.....	8
2.2.1	Reaktorimyrkyt ksenon-135 ja samarium-149.....	9
2.2.2	Vaikutusalakirjastot.....	10
2.3	Ydinpolttoaine.....	10
2.3.1	Polttoaineen palama.....	11
3	YDINREAKTORIN SÄÄTÖ.....	12
3.1	Viivästyneet neutronit.....	12
3.2	Reaktiivisuus.....	13
3.3	Reaktiivisuuden takaisinkytkennät ja reaktorin tehonsäätö.....	14
4	RATKAISTAVAT YHTÄLÖT JA RATKAISUMENETELMÄT.....	16
4.1	Boltzmannin yhtälö / Neutronien kuljetusyhtälö.....	16
4.1.1	Yhtälössä käytetyt neutronipopulaation matemaattiset mallit.....	17
4.1.2	Kuljetusyhtälö.....	18
4.2	Kuljetusyhtälön deterministiset ratkaisumenetelmät.....	21
4.2.1	Diskretisoinnit.....	21
4.3	Diffuusioteoria.....	22
4.3.1	Reaktorin homogenisointi.....	23
4.4	Kuljetusyhtälön stokastinen ratkaisumenetelmä.....	24
4.5	Termohydrauliikka.....	25
4.5.1	Polttoainesauvan lämmönsiirto.....	25
4.5.2	Jäähdytteen termohydrauliikka.....	26
4.6	Ratkaisumenetelmät ajan suhteen.....	26
4.6.1	Neutroniikassa käytetyt aikariippuvuuden yksinkertaistukset.....	27
5	REAKTORIDYNAMIIKKAKOODIT.....	28
5.1	Listaus maailmalla käytössä olevista koodeista.....	28
5.2	Apros® Nuclear.....	30
5.3	Serpent 2.....	31
5.4	APOLLO3®.....	32
5.5	DYN3D.....	33
6	KOODIEN VERIFIOINTI JA VALIDOINTI.....	34
7	JOHTOPÄÄTÖKSET & YHTEENVETO.....	35
	LÄHTEET.....	37

SYMBOLILUETTELO

Roomalaiset

B	Palama	[MWd/kgU, MWd/tU]
D	Diffuusiokerroin	[cm]
E	Energia	[J, eV]
J	Neutronivirran tiheys	[cm ⁻² · s ⁻¹]
k	Reaktorin kasvutekijä	[-]
l	Neutronin elinaika	[s]
N	Konsentraatio	[cm ⁻³]
n	Kulmatiheys	[cm ⁻³ · MeV ⁻¹ · sr ⁻¹]
\vec{r}	Paikkavektori	[cm]
t	Aika	[s]
T	Puoliintumisaika	[s]
v	Nopeus	[cm/s]
w	Massaosuus	[-]
x	x-koordinaatti	[-]
y	y-koordinaatti	[-]
z	z-koordinaatti	[-]

Kreikkalaiset

α	Reaktiivisuuskerroin	[pcm/K, pcm/%-tehosta/aukkoja]
β	Osuus fissiotuotteista	[pcm, 10 ⁻⁵]
θ	Elevaatiokulma	[rad]
λ	Hajoamisvakio	[1/s]
ν	Keskimääräinen fissiossa vapautuneiden kerkeiden neutronien lukumäärä	[-]
ρ	Reaktiivisuus	[pcm, 10 ⁻⁵]
Σ	Makroskooppinen vaikutusala	[1/cm]
σ	Mikroskooppinen vaikutusala	[barn, cm ²]
τ	Keskimääräinen elinaika	[s]
ϕ	Skalaarivuo	[cm ⁻² · MeV ⁻¹ · s ⁻¹]
φ	Atsimuuttikulma	[rad]

χ	Fissiospektri	[MeV ⁻¹]
ψ	Kulmavuo	[cm ⁻² · MeV ⁻¹ · sr ⁻¹ · s ⁻¹]
$\vec{\Omega}$	Suuntavektori	[sr]

Alaindeksit

d	Viivästynyt neutroni
e	Elastinen sironta
eff	Efektiivinen
ext	Ulkoinen
f	Fissio
fs	Spontaani fissio
ie	Epäelastinen sironta
p	Kerkeä
P	Teho
R	Neutronien poistuminen
s	Sironta
t	Kokonais
T	Lämpötila
V	Tilavuus
γ	Kaappaus

Lyhenteet

BWR	Boiling water reactor
CEA	Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives
DEN	Direction de l'Energie Nucleaire
DNB	Departure from Nucleate Boiling
GRS	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit
IAEA	International Atomic Energy Agency / Kansainvälinen atomienergiavirasto
IQS	Improved Quasi-Static Method
KIT	Karlsruher Institut für Technologie
NRC	United States Nuclear Regulatory Commission
PWR	Pressurized water reactor
VTT	Valtion tieteen tutkimuslaitos

1 JOHDANTO

Tässä kandidaatintyössä käsitellään maailmalla kehitettyjä ja käytössä olevia reaktoridynamiikkakoodeja, ja niiden ratkaisumenetelmiä. Kyseisiä koodeja käytetään mallintamaan ydinreaktorin käyttäytymistä transienttitilanteissa. Näihin kuuluvat muun muassa reaktorin ylös- ja alasajo sekä häiriö- ja onnettomuustilanteet. Työn tarkoituksena on selvittää tällä hetkellä käytössä olevat koodit, avata niiden ratkaisumenetelmiä, sekä pohtia minkälaisiin tilanteisiin niitä voidaan käyttää.

Dynamiikkakoodien avulla pystytään määrittämään fission kehittyneet lämpöteho ajan ja paikan funktiona. Koodit mallintavat mitä reaktorissa tapahtuu, ja ovat yhdistelmiä neutroniikan (kinetiikka), eli neutronien vuorovaikutusten laskennan, ja termohydrauliikan, eli lämmönsiirron ja jäähdyteaineen aineensiirron laskevan koodin välillä. (Reuss, 2008. s. 510) Kehittyneimmissä koodeissa on mukana vielä laitostason mallinnus, joka ottaa huomioon myös muualla kuin reaktorissa tapahtuvat fysikaaliset ilmiöt. Näin ollen saadaan transientista aiheutuvat vaikutukset selville myös laitostasolla. Tämä toimii myös toisinpäin, eli pystytään mallintamaan laitostason häiriöiden vaikutusta reaktorin toimintaan. Tässä työssä keskitytään kuitenkin vain itse dynamiikkakoodeihin, jotka ovat kehitetty mallintamaan nykyisiä kevytvesireaktoreita, eli kiehutusvesireaktoreita (BWR) ja painevesireaktoreita (PWR). Työn rajaamisen kannalta on oletettu lukijan tuntevan näiden reaktorityyppien rakenne.

Aluksi työssä käydään läpi ydinreaktorin toiminta yleisellä tasolla, fissioketjureaktio, neutronien vuorovaikutukset ja polttoaineessa tapahtuvat muutokset. Tästä edetään varsinaiseen reaktorin säätöön ja dynamiikkaan, ottaen neutronien vuorovaikutusten lisäksi huomioon tehonmuutoksissa ilmenevät takaisinkytkennät, muun muassa polttoaineen, jäähdytteen ja moderaattorin lämpötilojen muutokset, jotka vaikuttavat reaktorin reaktiivisuuteen joko hidastaen tai kiihdyttäen tehonmuutosta.

Säätöosion jälkeen käydään läpi mallinnuksessa oleelliset yhtälöt ja niiden yleisimmät ratkaisumenetelmät. Tämän jälkeen tutkitaan maailmalla käytettäviä koodeja, niissä tehtyjä yksinkertaistuksia, ja käytettyjä ratkaisumenetelmiä. Tässä osiossa käydään useampi koodi lyhyesti läpi, ja esitetään ne kootusti taulukkomuodossa. Muutamasta laajasti käytetystä koodista kerrotaan vielä hieman yksityiskohtaisemmin. Ennen yhteenvetoa käydään läpi koodien laadunhallintaa, sillä koodilla, joka ei vastaa todellisuutta ei ole järkevää käyttöä.

2 YDINREAKTORIN TOIMINNAN PERUSTEET

Nykyiset kaupalliset ydinreaktorit perustuvat fissioketjureaktioon. Fissioissa syntynyt lämpö johdetaan jäähdytteen avulla pois reaktorista, ja muunnetaan höyryturbiinin avulla sähköksi. (Duderstadt & Hamilton, 1976. s. 94–95)

Koska työssä keskitytään vain itse reaktoriin, käydään tässä osiossa läpi neutronien vuorovaikutukset, niiden todennäköisyydet sekä ydinpolttoaine.

2.1 Neutronien vuorovaikutukset, ketjureaktio, reaktorin kasvutekijä

Fissioissa neutroni törmää raskaaseen atomiytimeen kuten U-235 tai Pu-239, aiheuttaen sen halkeamisen kahdeksi kevyemmäksi ytimeksi, vapauttaen samalla useita neutroneita, gammasäteilyä ja neutriinoja. Reaktiossa vapautunut energia jakautuu fissiotuotteiden kesken, ja lopulta muuntuu erinäisissä reaktioissa lämmöksi. Varsinainen ydinreaktori saadaan manipuloimalla fissioissa vapautuneet neutronit aiheuttamaan uusia fissioita, jolloin saadaan itseään ylläpitävä ketjureaktio. (Oka, 2013. s. 3), (Reuss, 2008. s. 77)

Muita neutronien ja aineen vuorovaikutuksia ovat kaappaus ja sironna. Sironnassa neutronit törmäilevät väliaineeseen, muuttavat suuntaansa ja hidastuvat, menettäen energiaansa. Tämä on toivottua, sillä hidastetut matalaenergiset eli termiset neutronit ovat paljon todennäköisempiä aiheuttamaan fission kuin korkeaenergiset eli nopeat neutronit. Neutronien hidastuminen tapahtuu hidastimessa. Kevytvesireaktoreissa hidastimena on vesi, joka toimii myös jäähdytteenä. (Reuss, 2008. s. 12), (Lamarsh, 2001. s. 52–53)

Vakaalla teholla olevaa reaktoria kutsutaan kriittiseksi, jolloin jokaisen fission vapauttamat neutronit aiheuttavat tasan yhden uuden fission. Ketjureaktion käyttäytymistä, eli reaktorin kriittisyyttä kuvaa kasvutekijä k , joka tarkoittaa neutronien syntymisnopeuden suhdetta niiden häviämisenopeuteen. Kasvutekijän avulla voidaan kuvata reaktorin tilaa kolmella tapaa (Kalli, 2010. s. 1–2):

1. $k < 1$: Neutronien ja vastaavasti fissioiden lukumäärä pienenee jatkuvasti kohti nollaa, aiheuttaen reaktorin tehon laskun; reaktori on alikriittinen.
2. $k > 1$: Neutronien ja fissioiden määrä kasvaa jatkuvasti, aiheuttaen reaktorin tehon nousun; reaktori on ylikriittinen.
3. $k = 1$: Neutronien ja fissioiden määrä pysyy vakiona ja reaktori toimii vakioteholla. Tällöin reaktori on kriittinen.

Neutronit voivat myös vuotaa ulos reaktorista, jolloin ne ketjureaktion kannalta menetetään. Yksinkertaistuksissa kasvutekijää kuvataan niin sanottuna äärettömän reaktorin kasvutekijänä k_∞ , joka olettaa reaktorin sydänalueen olevan äärettömän kokoinen, jolloin vuotoja ei tapahdu. Todellisuudessa tämä ei tietenkään päde, ja neutronien vuodon huomioivaa kasvutekijää k_{eff} kutsutaan efektiiviseksi kasvutekijäksi. (Kalli, 2012. s. 72)

2.2 Neutronien vaikutusalat

Neutronien eri vuorovaikutusten todennäköisyyttä kuvataan mikroskooppisella vaikutusalalla σ . Asiaa voi ajatella olettamalla neutronin olevan pieni partikkeli, joka törmää suurempaan. Suuremmalla partikkelilla on tietty poikkipinta-ala, johon neutroni voi törmätä. Neutronin näkökulmasta tämä poikkipinta-ala riippuu neutronin energiasta, ja vuorovaikutustavasta. Kuten aiemmin mainittu, termisillä neutroneilla on suurempi todennäköisyys aiheuttaa kohdeytimen fissio, jolloin voidaan ajatella kohdeytimen poikki-pinta-alan olevan termisille neutroneille suurempi kuin nopeille neutroneille. Tämä analogia pätee myös sironta- ja kaappausreaktioille, eli tietyn energisillä neutroneilla on tiettyjä ytimiä kohtaan tiettyä vuorovaikutusta vastaava mikroskooppinen vaikutusala. Mikroskooppista vaikutus-alaa mitataan barneissa, joissa 1 barn on 10^{-24} cm². Tämä on hyvin pieni pinta-alan yksikkö, ja se kuvaa suhteellisen tarkasti todellisen atomiytimen poikkipinta-alaa. Alla on vielä esitetty mikroskooppinen kokonaisvaikutusala, joka on summa kaikista mahdollisista vuorovaikutuksista, eli todennäköisyys sille, että neutroni ylipäättään vuorovaikuttaa kohdeytimen kanssa. (Lamarsh, 2001. s. 54–55)

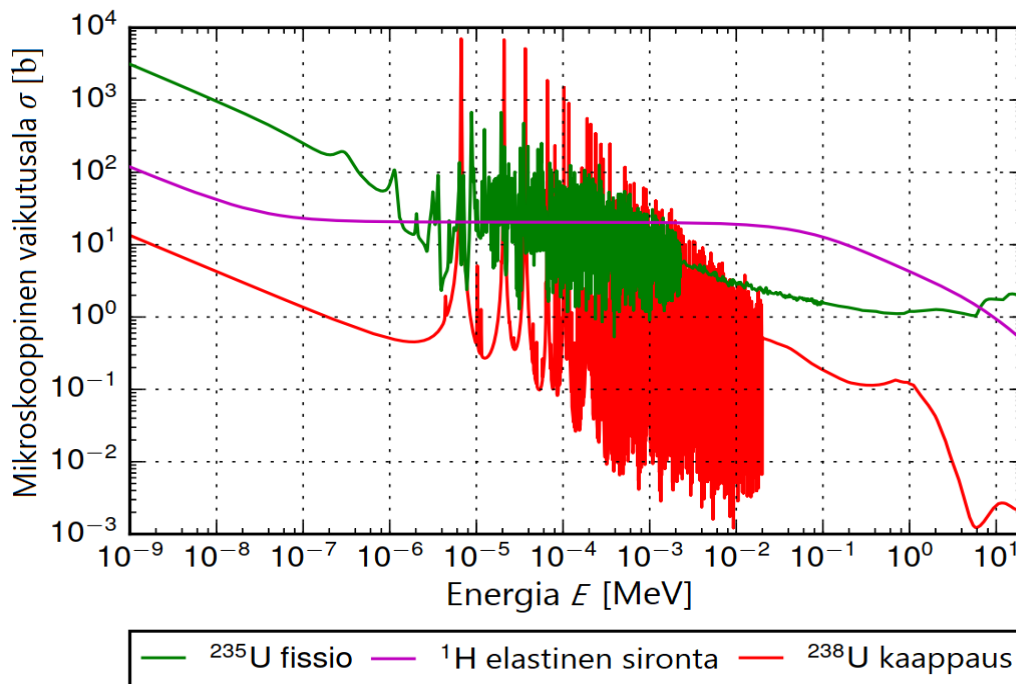
$$\sigma_t = \sigma_e + \sigma_{ie} + \sigma_\gamma + \sigma_f \quad (1)$$

jossa σ_e on elastisen sironnan vaikutusala, σ_{ie} on epäelastisen sironnan vaikutusala, σ_γ on kaappausreaktion vaikutusala ja σ_f on fission vaikutusala. (Lamarsh, 2001. s. 55)

Alla kuvassa 1. on esitetty reaktorin toiminnan kannalta kolme olennaista mikroskooppista vaikutus-alaa. Kuvan vasemmassa reunassa sijaitsee termisen energian alue, jossa neutronin energia on alle 1 eV. Tällä alueella tapahtuu suurin osa U-235 fissioista. (Reuss, 2008. s. 54)

Keskellä olevaa aluetta kutsutaan resonanssialueeksi, sillä se sisältää resonanssiipiikit, jotka ovat peräisin kvanttimekaanisista ilmiöistä. Resonanssialueella vaikutusalat vaihtelevat huomattavan paljon pienilläkin energianmuutoksilla. Tällä alueella tapahtuu suurin osa kaappauksista U-238:aan. (Reuss, 2008. s. 57–58)

Korkeammilla energioilla resonansseja ei voida enää mitata toisistaan niiden mennessä osittain päällekkäin. Tätä aluetta kutsutaan selvittämättömien resonanssien alueeksi. Suurin osa fissiosta emittoituneista neutroneista aloittaa hidastumisen tältä alueelta, missä hallitsevana vuorovaikutuksena on elastinen sironta veden aineosana olevan vedyn kanssa. Olennainen osa vaikutusaloja on niiden lämpötilariippuvuus, joka tarkoittaa vaikutusalojen olevan väliaineen lämpötilan funktioita. (CEA/DEN, 2015. s. 24)



Kuva 1. U-235 fission, vedyn elastisen sironnan ja U-238 kaappauksen mikrokooppiset vaikutusalat neutronin energian funktiona logaritmisella asteikolla väliaineiden lämpötilassa 300 K. Muokattu lähteestä (Valtavirta, 2017. s. 18, Figure 2.).

Mikroskooppisesta vaikutusalasta saadaan johdettua makroskooppinen vaikutusala Σ ottamalla huomioon väliaineen materiaaliominaisuudet. Näin saadaan reaktion todennäköisyys suhteessa neutronin kulkemaan matkaan väliaineessa. (Reuss, 2008. s. 50)

2.2.1 Reaktorimyrkyt ksenon-135 ja samarium-149

Ksenon-135 ja samarium-149 ovat isotooppeja, joita kutsutaan reaktorimyrkyiksi, sillä kyseisillä isotoopeilla on erittäin suuret kaappausvaikutusalat neutronien termisellä alueella (Xe-135 n. $2.65 \cdot 10^6$ barnia ja Sm-149 n. 40 500 barnia). (Reuss, 2008. s. 57)

Ksenon-135 on radioaktiivinen isotooppi, ja sitä syntyy jonkin verran suoraan fissiossa, mutta pääosin jodi-135:n radioaktiivisen hajoamisen seurauksena. Ksenonin pitoisuus vähenee sekä kaappausten, että radioaktiivisen hajoamisen seurauksena. Ksenonin puoliintumisaika on kuitenkin jodi-135:n puoliintumisaikaa pidempi, joka tarkoittaa ksenonin

pitoisuuden hetkellisesti kasvavan reaktorin alasajon jälkeen. Ajan kuluessa ksenonin pitoisuus laskee. (Reuss, 2008. s. 301–304)

Samarium-149 on stabiili isotooppi, ja sitä syntyy neodyymi-150:n radioaktiivisen hajoamisen seurauksena. Koska samariumin pitoisuus laskee vain kaappausreaktioissa, mutta sitä syntyy radioaktiivisen hajoamisen seurauksena, sen pitoisuus nousee reaktorin alasajon jälkeen pysyvästi. (Reuss, 2008. s. 305–307)

Koska kummankin isotoopin pitoisuudet kasvavat reaktorin alasajon jälkeen, on seuraava ylösajo toteutettava hitaasti, ja joissain tapauksissa täytyy jopa odottaa ksenonin pitoisuuden laskua. Jos ylösajo toteutettaisiin nopeasti, muutama tunti alasajon jälkeen, aluksi tehon noustessa suuri osa termiselle alueelle hidastuneista neutroneista kokisi kaappausreaktion näihin isotooppeihin. Tässä tapauksessa pitoisuudet laskisivat hyvin nopeasti, jolloin enemmän ja enemmän neutroneita pääsisi aiheuttamaan fissioita, kiihdyttäen tehonnousua. Pahimmassa tapauksessa syntyvä tehopiikki voi vaurioittaa polttoainetta. (Kalli, 2010. s. 24)

Tästä syystä näiden kahden isotoopin pitoisuuksia valvotaan jatkuvasti, ja niiden huomioon ottaminen reaktorin mallintamisessa on erittäin tärkeää. Lisäksi monet mallinnukset käsittelevät juuri yllä kuvatun niin sanotun ksenonmyrkytyksen vaikutuksia. (Reuss, 2008. s. 510)

2.2.2 Vaikutusalakirjastot

Koska vaikutusalat ovat hyvin olennaisia neutronien vuorovaikutusten suhteen, on niitä tutkittu ja tilastoitu hyvin tarkkaan. Muun muassa yhdysvaltalainen END/B-7 ja eurooppalainen JEFF-3 sisältävät useiden satojen isotooppien eri vaikutusaloja. (Reuss, 2008. s. 80–81)

Reaktoridynamiikkakoodit eivät kuitenkaan suoraan hyödynnä näitä valmiita kirjastoja, vaan välissä on usein erillinen koodi, joka ottaa datan kirjastoista. Tämä koodi yksinkertaistaa dataa ottamalla keskiarvoja vaikutusaloista tietyiltä energia-alueilta, ja muokkaa datan dynamiikkakoodeihin sopivaksi. (Reuss, 2008 s. 498)

2.3 Ydinpolttoaine

Luonnonuraani koostuu kahdesta isotoopista, U-238 ja U-235. Näistä U-235 on fissiili, eli helposti fissioituva, ja sen osuus on n. 0.72 % luonnonuraanista. Kevytvesireaktoreissa käytetään polttoainetta, joka on luonnonuraanista rikastettu U-235 isotoopin suhteen muutama prosenttiin, jotta ketjureaktio olisi mahdollinen. Näin ollen tyypillisesti reaktorin lataussyklin alussa polttoaine sisältää n. 97 % U-238 isotooppia ja 3 % U-235 isotooppia. Heti

reaktorin käynnistämisen jälkeen U-235 alkaa fissioitumaan keskiraskaiksi atomiytimiksi, ja samalla U-238:sta alkaa muodostumaan neutronikaappausten ja näitä seuraavien beetahajoamisten seurauksena raskaampia alkuaineita. Tällaisia kaappauksia U-238:aan kutsutaan fertiileiksi kaappauksiksi, sillä kaappausten aloittaman niin kutsutun konversioprosessin seurauksena syntyy fissiilejä plutoniumin isotooppeja. Merkittävä osa ydinreaktorin tuottamasta tehosta on peräisin näiden konversioprosessissa syntyneiden transuraanien (uraania raskaammat alkuaineet) fissioista. Konversioprosessista huolimatta nykyisissä kevytvesireaktoreissa fissiilejä isotooppeja häviää enemmän kuin niitä syntyy. Tästä syystä osa polttoaineesta on vaihdettava vuosittain. (Lamarsh et al. 2001. s. 119–121)

2.3.1 Polttoaineen palama

Ydinreaktorin polttoaineen kulumisen mittana käytetään suuretta palama B , joka on määritelmän mukaan polttoaineen tuottaman lämpöenergian suhde polttoaineen metallisen uraanin massaan. Tyypillisesti yksikkönä käytetään MWd/kgU. Kevytvesireaktoreissa poistopalama on n. 35–60 MWd/kgU, joka saavutetaan noin kolmessa vuodessa. (Kalli, 2010. s. 4)

Polttoaineen koostumus muuttuu merkittävästi palaman funktiona edellä mainittujen konversioprosessien seurauksena. Yksi reaktorifysiikkakoodien käyttötarkoituksista on palaman laskenta ja polttoaineen eri nuklidien pitoisuuksien määrittäminen (Leppänen, 2007. s. 20). Dynamiikkakoodeilla tehtäviä transienttianalyysyjä varten on oltava tiedossa lähtötilanteen polttoaineen koostumus transientin alussa.

3 YDINREAKTORIN SÄÄTÖ

Ydinreaktorin säätö poikkeaa monista muista prosesseista fissioketjureaktion ollessa luonteeltaan eksponentiaalinen. Tehon säädön mahdollistavat viivästyneet neutronit, niiden hidastaessa tehon eksponentiaalista käyttäytymistä. Tämän lisäksi säätöön vaikuttavat lukuisat reaktiivisuuden takaisinkytkennät, jotka aiheutuvat muun muassa reaktorin polttoaineen ja jäähdytteen lämpötilan muutoksista. (Kalli, 2010. s. 28)

Tässä osiossa käydään läpi reaktorin ajallinen käyttäytyminen, reaktiivisuus ja sen takaisinkytkennät sekä varsinainen tehonsäätöprosessi.

3.1 Viivästyneet neutronit

Valtaosa fissioissa vapautuneista neutroneista ilmenee heti fissioiden jälkeen, näitä kutsutaan kerkeiksi neutroneiksi. Kuitenkin pieni osa neutroneista vapautuu vasta myöhemmin niin sanotuista prekursoriytimistä, tällä tavalla vapautuneita neutroneita kutsutaan viivästyneiksi neutroneiksi. Mahdollisia fissiotuotteita on n. 500, ja näistä 40 on prekursoriytimiä. (Anglart, 2011. s. 33) Yleisin viivästyneiden neutronien synty tapa on prekursoriytimen beetamiinus hajoaminen, jota seuraa välittömästi ytimen viritystilan purkautumisen johdosta aiheutunut neutroniemissio. Näin ollen viivästyneiden neutronien vapautumisnopeuden määrittää prekursoriytimen beetahajoamisen puoliintumisaika. (Reuss, 2008. s. 74)

Prekursoriydinten suuren lukumäärän vuoksi ne on päätetty jakaa kuuteen tai kahdeksaan ryhmään, jotta laskentaa saataisiin yksinkertaistettua. Lisäksi jokaiselle fissioituvalle ytimelle täytyy määrittää kyseiset ryhmät erikseen, sillä eri isotoopeilla on erilaiset fissiotuottejakaumat. Jokainen ryhmä sisältää kaksi ryhmävakiota, ryhmän osuus kaikista fissiotuotteista β_i , ja ryhmän (beta-)hajoamisvakio λ_i . Yksittäisen ryhmän prekursoriydinten lukumäärän muutosnopeus saadaan niiden synty- ja häviämisenopeuden avulla (Reuss, 2008. s. 123):

$$\frac{dC_i}{dt} = \frac{\beta_i}{l} n - \lambda_i C_i \quad (2)$$

jossa C_i on ryhmää i vastaavien prekursoriytimien lukumäärä, ja l on kerkeiden neutronien elinaika [s].

Alla taulukossa 1. on esitetty U-235 fission kahdeksan prekursoriryhmän osuudet β_i (yksikkönä pcm = 10^{-5}), hajoamisvakiot λ_i , keskimääräinen elinaika τ_i ja puoliintumisaika T_i . Taulukon arvot ovat peräisin JEFF-3.1 datakirjastosta. (CEA/DEN, 2015. s. 118)

Taulukko 1. U-235 fission kahdeksan prekursoriryhmän ryhmävakiot, sekä kaikki prekursoriytimet sisältävän ”yhden ryhmän” ryhmävakiot. (CEA/DEN, 2015. s. 118, Table 17.)

Prekursori-ryhmä	Osuus β_i [pcm]	Hajoamis- vakio λ_i [1/s]	Keskimääräinen elinaika τ_i [s]	Puoliintumis- aika T_i [s]
1	22	0.012	80.210	55.597
2	102	0.028	35.350	24.503
3	61	0.043	23.520	16.303
4	131	0.133	7.516	5.210
5	220	0.293	3.419	2.370
6	60	0.667	1.500	1.040
7	54	1.635	0.612	0.424
8	15	3.555	0.281	0.195
Keskiarvo	665	0.077	13.036	9.036

Taulukosta 1. huomataan, että kaikkien viivästyneiden neutronien osuus on vain murto-osa fissiossa vapautuneista neutroneista, noin 0,66 %. Tarkastelemalla neutronien tehollista elin-aikaa reaktorissa l_{eff} , saadaan viivästyneiden merkitys selville. (Kalli, 2010. s. 42)

$$l_{eff} = (1 - \beta)l + \beta\tau = (1 - \beta)l + \sum_{i=1}^8 \beta_i\tau_i \quad (3)$$

Yhtälön oikean puolen ensimmäinen termi kertoo kerkeiden neutronien osuuden, joka on tyypillisesti luokkaa 10^{-3} – 10^{-7} s, reaktortyyppistä riippuen. Toinen termi summaa viivästyneiden neutronien eri ryhmien osuuden tehollisessa elinajassa, joka saa taulukon 1. arvoilla suuruudekseen n. 0.087 s. Viivästyneet neutronit siis määräävät tehollisen elinajan, mahdollistaen prosessin säädön. (Kalli, 2010. s. 47)

3.2 Reaktiivisuus

Kappaleessa 2.1 esiteltiin reaktorin kasvutekijä k , jonka avulla saadaan johdettua laskennan kannalta vielä hyödyllisempi muuttuja ρ , eli reaktiivisuus.

$$\rho = \frac{k - 1}{k} \quad (4)$$

Reaktiivisuus kertoo reaktorin poikkeaman kriittisestä tilasta. Sen yksikkö on pcm, koska käytännössä ottaen kasvutekijä on lähes aina likimain yksi. Kasvutekijän tavoin, voidaan reaktiivisuuden arvoilla kuvata reaktorin tilaa kolmella tapaa (Reuss, 2008. s. 121):

1. $\rho = 0$: Reaktori on kriittinen.
2. $\rho > 0$: Reaktori on ylikriittinen.
3. $\rho < 0$: Reaktori on alikriittinen.

3.3 Reaktiivisuuden takaisinkytkennät ja reaktorin tehonsäätö

Reaktiivisuuden takaisinkytkennät vaikuttavat merkittävästi reaktorin säätöön ja stabiilisuu-
teen. Näistä suurin osa on lämpötilan funktioita, johtuen joko suoraan lämpötilan aiheutta-
masta aineen rakenneosasten värähtelyn muutoksista, tai tiheyksien ja faasien muutoksista.
(Reuss, 2008. s. 347–348)

Takaisinkytkennät hidastavat tai kiihdyttävät tehonmuutosta. Hyvin suunnitellussa reaktori-
ssa tehon takaisinkytkentä, eli tehokerroin α_P pyritään saamaan negatiiviseksi.

$$\alpha_P = \frac{d\rho}{dP} \quad (5)$$

jossa P on reaktorin teho [%-tehosta], jolloin tehokerroimen yksikkö on [pcm/%-tehosta].

Mikäli reaktiivisuus, ja sitä kautta myös teho syystä tai toisesta nousee, negatiivinen takai-
sinkytkentä hidastaa tehon muutosnopeutta, kunnes saavutetaan uutta sydämen reaktiivi-
suustasoa vastaava tasapainotilanne. Tehonsäätö toimii samalla periaatteella, eli ensin aiheu-
tetaan reaktiivisuusmuutos, odotetaan takaisinkytkentöjen vaikutuksia ja päästään uuteen re-
aktorin toimintapisteeseen. (Kalli, 2010. s. 30), (Duderstadt & Hamilton, 1976. s. 556–557)

Tehokerroin muodostuu kaikista tehon takaisinkytkentään vaikuttavista tekijöistä, eli reakti-
viivisuuskertoimista, näistä tärkeimpänä lämpötilan reaktiivisuuskerroin α_T . Tämä jakautuu
vielä useampaan tekijään, sillä eri komponenteilla on erilainen vaste lämpötilan muutokseen.

$$\alpha_T = \frac{\partial \rho}{\partial T} \rightarrow \sum_j \frac{\partial \rho}{\partial T_j} = \sum_j \alpha_T^{(j)} \quad (6)$$

jossa T_j vastaa kunkin komponentin lämpötilaa [K]. Tällöin yksikkö on [pcm/K].

Lämpötilan reaktiivisuuskertoimen osalta tärkeimmät tekijät ovat polttoaineen reaktiivisuus-
kerroin α_T^F , hidasteen reaktiivisuuskerroin α_T^M ja jäähdytteen aukkerroin α_V . (Duderstadt
& Hamilton, 1976. s. 556–563)

Aukkerroin on BWR:ssä hyvin oleellinen, sillä reaktorissa nimensä mukaisesti kiehute-
taan vettä, jolloin jäähdytteeseen tulee kuplia (aukkoja). (Lamarsh & Baratta, 2001. s. 374)

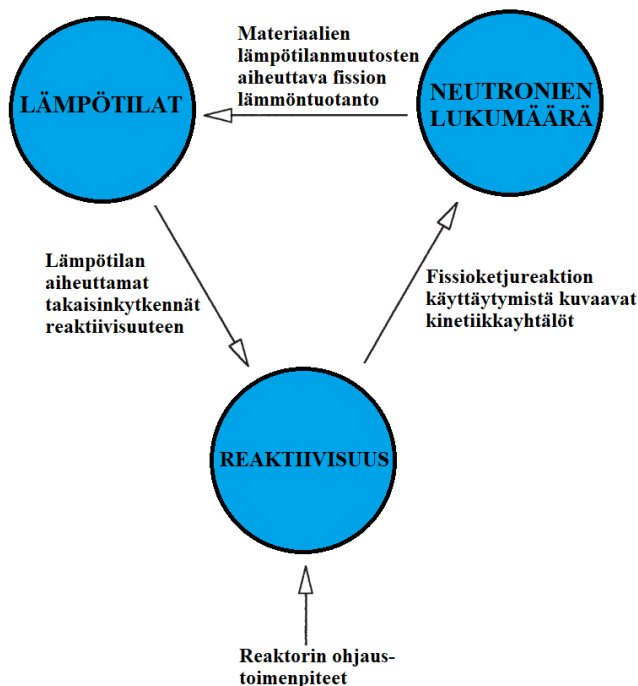
$$\alpha_V = \frac{d\rho}{dx} \quad (7)$$

jossa x on jäähdytteen aukko-osuus [%-aukkoja], eli jäähdytteen aukkojen tilavuuden suhde
koko jäähdytteen tilavuuteen. Aukkokertoimen yksikkö on [pcm/%-aukkoja].

Lämpötilan takaisinkytkennät perustuvat pääosin kolmeen fysikaaliseen ilmiöön: polttoaineessa esiintyvään Doppler ilmiöön, hidasteessa ja jäähdytteessä ilmenevään lämpölaajenemiseen ja mahdolliseen kiehumiseen, sekä termisten neutronien energian riippuvuuteen lämpötilasta. (Reuss, 2008. s. 349–350)

Doppler ilmiö on näistä tärkein, U-238 resonanssialueen piikit (kuva 1.) laajenevat lämpötilan nousun johdosta, kasvattaen merkittävästi kaappauksen mikroskooppista vaikutusala. Eli polttoaineen lämpötilan kasvaessa kaappaukset U-238:aan nousevat, ja siten vähemmän neutroneita pääsee aiheuttamaan U-235:n fissioita. Tämä vaikutus on lisäksi välitön, sillä suurin osa fissioiden tuottamasta lämmöstä vapautuu suoraan polttoaineeseen. Polttoaineesta lämpö kulkeutuu viiveellä jäähdytteeseen, jolloin myös tähän liittyvät takaisinkytkennät ovat hitaampia. (Reuss, 2008. s. 349)

Jäähdytteen tiheyden muutos ja mahdollinen kiehuminen vaikuttavat myös merkittävästi lämpötilan takaisinkytkentään, lämpötilan noustessa veden tiheys pienenee, ja siten sen siirron mikroskooppinen vaikutusala laskee. Tällöin entistä enemmän neutroneita kokee kaappauksen ennen termiselle alueelle pääsyään. Sama pätee kiehumiseen, jolloin tiheys laskee vielä dramaattisemmin. Tästä syystä mahdollisessa onnettomuustilanteessa, jossa reaktorin vedestä suurin osa höyrystyy (tai vuotaa pois), fissioketjureaktio sammuu itsestään. (Kalli, 2010. s. 29) Alla kuvassa 2. on vielä havainnollistettu lämpötilan takaisinkytkentää.



Kuva 2. Lämpötilan takaisinkytkentä reaktiivisuuteen. Muokattu lähteestä (Reuss, 2008. s. 348, Figure. 13.1.)

4 RATKAISTAVAT YHTÄLÖT JA RATKAISUMENETELMÄT

Ydinreaktorin käyttäytymistä ohjaa neutronien jakauma paikan, energian ja ajan suhteen. Nämä jakaumat on mahdollista selvittää niin sanotulla Boltzmannin yhtälöllä, jota kutsutaan myös neutronien kuljetusyhtälöksi. (Bell & Glasstone, 1970. s. 1) Koska neutronien vuorovaikutustodennäköisyydet, eli vaikutusalat riippuvat vahvasti polttoaineen ja jäähdytteen lämpötilasta sekä tiheydestä, on termohydrauliikka otettava transienttien tapauksien laskennassa huomioon. Termohydrauliikan ratkaisu perustuu polttoaineen lämmönsiirron osalta johtumisen ja konvektion empiirisesti määritettyihin korrelaatioihin, jäähdytteen taas Navier-Stokes yhtälöiden ratkaisuun. (CEA/DEN, 2015. s. 215)

Tässä osiossa käydään Boltzmannin yhtälö läpi, johon lähestulkoon kaikki reaktoridynamiikkaratkaisijat perustuvat. (Leppänen, 2007. s. 49) Yhtälö esitetään yleisessä muodossa, josta erinäisin yksinkertaistuksin päästään yksittäisten dynamiikkakoodien hyödyntämiin muotoihin. Lisäksi käydään läpi yleisimpiä ratkaisuperiaatteita käytetyille yhtälöille.

4.1 Boltzmannin yhtälö / Neutronien kuljetusyhtälö

Ludwig Boltzmann kehitti yhtälön kuvaamaan kineettistä kaasuteoriaansa 1860-luvulla, ja tästä noin 80 vuotta eteenpäin huomattiin teorian olevan varsin analoginen neutronipopulaation käyttäytymisen suhteen. (CEA/DEN, 2015. s. 48.) Yhtälö on neutroniikkaan sovelletuna itseasiassa yksinkertaisempi kuin kaasuteoriassa, koska neutronit eivät vuorovaikuta toistensa kanssa ja näin ollen neutroniikassa yhtälön sirontatermi on lineaarinen. (Duderstadt & Hamilton, 1976. s. 104)

Tässä työssä käsitelty kuljetusyhtälö notaatioineen on peräisin Ranskan vaihtoehtoisten energialähteiden ja ydinenergian komission (CEA) vuonna 2015 julkaisemasta neutroniikkaa käsittelevästä monografiasta. Lähteessä yhtälö on käsitelty suurin piirtein siinä laajuudessa kuin tässäkin työssä. Yhtälö esitetään sen perusmuodossa, jota ei kuitenkaan suoraan voi soveltaa transienttitapauksiin. Transienttitapaukset ratkaistaan yhtälöstä johdetuista yksinkertaistuksista, useimmiten ns. diffuusioteorian avulla. (Leppänen, 2007. s. 87)

Kuljetusyhtälön tarkempi johtaminen on esitetty lukuisissa kirjallisuuslähteissä, muun muassa (Bell & Glasstone 1970, s. 2–15), (Duderstadt & Hamilton, 1976. s. 105–117).

4.1.1 Yhtälössä käytetyt neutronipopulaation matemaattiset mallit

Kuljetusyhtälössä yksittäisten neutronien sijaan käsitellään useampaa neutronia kerralla, ja puhutaan muuttujasta neutronitiheys, joka tarkoittaa keskimääräistä neutronien lukumäärää tilavuusyksikössä. Tämä kuitenkin poikkeaa normaalista tiheyden määritelmästä, sillä neutronitiheys on paikan lisäksi neutronien energiaan sidottu. Näin ollen neutronitiheys koostuu yhteensä 7 muuttujasta, kolmesta paikkamuuttujasta (x, y, z), kolmesta nopeusmuuttujasta ($\Omega_x, \Omega_y, \Omega_z$) sekä aikamuuttujasta t . Paikkamuuttujista saadaan paikkavektori \vec{r} , ja nopeusmuuttujista vastaavasti nopeusvektori \vec{v} . Koska reaktorin materiaalit ovat isotrooppisia (suunnasta riippumattomia), niiden vaikutusalat riippuvat vain neutronin nopeudesta, eli liike-energiasta. Tästä syystä nopeusvektori korvataan energiamuuttujalla E , ja suuntavektorilla $\vec{\Omega}$. Suuntavektori on nopeusvektorin \vec{v} suuntainen yksikkövektori, se sisältää pallokoordinaatiston atsimuuttikulman φ ja elevaatiokulman θ . (CEA/DEN, 2015. s. 46).

Suuntavektorin avulla kuvattua neutronitiheyttä kutsutaan kulmatiheydeksi n .

$$n(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) \quad (8)$$

Yksiköksi muodostuu [$\text{cm}^{-3} \cdot \text{MeV}^{-1} \cdot \text{sr}^{-1}$]. Kulmatiheys kertoo neutronien keskimääräisen lukumäärän 6-uloitteisessa faasiavaruudessa ajanhetkellä t .

Kulmatiheydestä päästään kuljetusyhtälön määrittämisen kannalta vielä käytännöllisempiin suureisiin, kulmavuohon ja skalaarivuohon. Kulmavuo ψ kertoo ajanhetkellä t pisteessä \vec{r} tietyllä energialla E etenemissuuntaansa $\vec{\Omega}$ nähden kohtisuorassa olevan tason läpi kulkevien neutronien lukumäärän aikayksikköä kohden. Näin ollen kulmavuon yksiköksi muodostuu [$\text{cm}^{-2} \cdot \text{MeV}^{-1} \cdot \text{sr}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$].

$$\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) = vn(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) \quad (9)$$

Skalaarivuo ϕ saadaan integroimalla kulmavuo koko avaruuskulman yli, näin päästään eroon kulmariippuvuudesta, ja yksiköksi jää [$\text{cm}^{-2} \cdot \text{MeV}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$]. Skalaarivuota hyödynnetään kulmasta riippumattomien reaktioiden kuvaamiseen. Esimerkiksi fissiossa vapautuu neutroneita, joiden suunta on täysin satunnainen. (Leppänen, 2007. s. 53).

$$\phi(\vec{r}, E, t) = \int_{4\pi} \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) d\vec{\Omega} \quad (10)$$

4.1.2 Kuljetusyhtälö

Vielä ennen varsinaisen kuljetusyhtälön käsittelemistä on käytävä läpi sen johtamisessa tehdyt oletukset ja yksinkertaistukset. (CEA/DEN, 2015, s. 45)

1. Neutronien lukumäärän on oltava tarpeeksi suuri, jotta neutronitiheyden käsitettä voidaan hyödyntää. Käynnissä olevassa reaktorissa on noin 10^8 neutronia kuutiosenttimetriä kohden, joten tämä ehto täyttyy varsin hyvin.
2. Neutronien väliset vuorovaikutukset voidaan jättää huomioimatta niiden ollessa erittäin vähäiset verrattuna neutronien ja aineiden välisiin vuorovaikutuksiin.
3. Neutroneilla on kolme eri vuorovaikutusta aineen kanssa: kaappaus, sironta ja fissio.
4. Näiden vuorovaikutusten välillä neutronit kulkevat suoraa linjaa, ulkoisilla voimilla ei ole vaikutusta niiden liikerataan.
5. Relativistiset vaikutukset voidaan jättää huomioimatta.
6. Neutronien hajoaminen protoneiksi voidaan jättää huomioimatta, koska neutronin elinikä, eli aika emissiosta absorboitumiseen reaktorissa on alle millisekunnin luokkaa, verrattuna neutronin 10 minuutin puoliintumisaikaan.

Neutronien kuljetusyhtälö kuvaa neutronilukumäärän tasapainoa aikavälillä dt ajanhetken t lähistöllä faasiavaruudessa sijaitsevan pisteen $P \equiv (\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ ympärillä alkeistilavuudessa $D \equiv d\vec{r} dE d\vec{\Omega}$. Tämä tasapainoyhtälö koostuu kuudesta termistä, nämä kuvaavat tietyn energisten ja tiettyyn suuntaan kulkevien neutronien häviämistä ja syntymistä, joko tilavuudesta fyysisesti poistumalla tai absorboitumalla tilavuuden sisällä. Energia- ja suuntariippuvuudesta johtuen myös tilavuudessa tapahtuvat sironnat voivat lisätä tai vähentää neutronien lukumäärää. Lisäksi fissionissa vapautuu sekä kerkeitä, että hidastettuja neutroneita, jotka on erikseen otettava huomioon. (CEA/DEN, 2015. s. 44–47)

Kuljetusyhtälön vasemmalla puolella on kulmavuon aikariippuvuus, oikea puoli koostuu yllä mainituista neutronien lukumäärän muutosta kuvaavasta kuudesta termistä.

$$\begin{aligned}
\frac{1}{v} \frac{\partial \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)}{\partial t} &= -\vec{\Omega} \cdot \nabla \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) \\
&- \sum_k N_k(\vec{r}, t) \sigma_k(E) \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) \\
&+ \sum_k N_k(\vec{r}, t) \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \sigma_{s,k}(E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) \\
&+ \frac{1}{4\pi} \sum_k N_k(\vec{r}, t) \int_0^\infty dE' v_{p,k}(E') \sigma_{f,k}(E') \chi_{p,k}(E' \rightarrow E) \phi(\vec{r}, E, t) \\
&+ \frac{1}{4\pi} \sum_k v_{p,f,s,k} \lambda_{f,s,k} N_k(\vec{r}, t) \chi_{p,f,s,k}(E) \\
&+ \frac{1}{4\pi} \sum_k \lambda_{d,k} N_k(\vec{r}, t) \chi_{d,k}(E) \\
&+ S_{ext}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)
\end{aligned} \tag{11}$$

jossa $N_k(\vec{r}, t)$: nuklidin k pitoisuus pisteessä \vec{r} ajanhetkellä t .

$\sigma_k(E)$: mikroskooppinen kokonaisvaikutusala nuklidille k energiaa E vastaavaa neutronia kohden.

$\sigma_{s,k}(E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega})$: mikroskooppinen vaikutusala sirontareaktiolle, jossa neutroni, jolla on alun perin energia E' ja suunta $\vec{\Omega}'$ siroaa energiatasolle E ja suunnalle $\vec{\Omega}$.

$v_{p,k}(E')$: nuklidille k energialla E' absorboituneen neutronin aiheuttaman fission kerkeiden neutronien keskimääräinen lukumäärä.

$\sigma_{f,k}(E')$: mikroskooppinen fissiovaikutusala nuklidille k energiaa E' vastaavalle neutronille.

$\chi_{p,k}(E' \rightarrow E)$: energialla E' absorboituneen neutronin nuklidin k fissiossa isotrooppisesti emittoituneiden kerkeiden neutronien energiaspektri.

$v_{p,f,s,k}$: nuklidin k spontaanin fission kerkeiden neutronien keskimääräinen lukumäärä.

$\lambda_{f,s,k}$: nuklidin k spontaanin fission hajoamisvakio.

$\chi_{p,f,s,k}$: nuklidin k spontaanissa fissiossa isotrooppisesti emittoituneiden kerkeiden neutronien energiaspektri.

$\lambda_{d,k}$: nuklidin k beetamiinus hajoamisvakio.

$\chi_{d,k}$: nuklidin k isotrooppisesti emittoimien viivästyneiden neutronien energiaspektri.

$S_{ext}(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$: ulkoinen lähde-termi.

Yhtälön 11. oikean puolen **ensimmäinen termi** (ensimmäinen rivi) kuvaa aikavälillä dt neutronien poistumista tilavuudesta sen ulkopintojen läpi.

Toinen termi (rivi 2) kuvaa aikavälillä dt neutronien vähenemistä absorptio- ja sirontareaktioiden seurauksena. Absorptioreaktiossa neutroni menetetään lopullisesti, sirontareaktiossa sen energia pienenee ja suunta muuttuu

Kolmas termi (rivi 3) kertoo aikavälillä dt sirontareaktioissa tietylle energiatasolle ja suunnalle sironneiden neutronien lukumäärän.

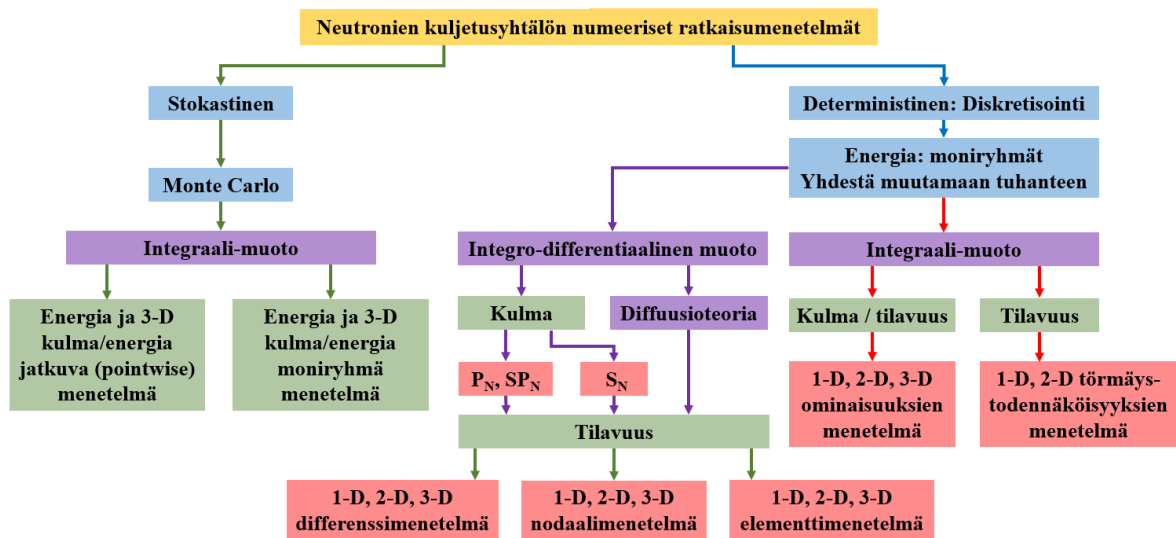
Neljäs termi (rivi 4 ja 5) kertoo aikavälillä dt kerkeiden neutronien syntymisnopeuden joko neutronien aiheuttamien tai spontaanien fissioiden johdosta. Termi on kaksiosainen, ensimmäinen osa kuvaa neutronien aiheuttamien fissioiden johdosta syntyneitä kerkeitä neutroneja, toinen osa spontaanien fissioiden johdosta syntyneitä kerkeitä neutroneja.

Viides termi (rivi 6) kertoo aikavälillä dt fissioissa syntyneiden viivästyneiden neutronien lukumäärän.

Kuudes termi (rivi 7) kertoo aikavälillä dt tilavuuteen tulleiden ulkoisten neutronien lukumäärän, esimerkiksi jos tilavuudessa sijaitsee neutronilähde.

Esitetty kuljetusyhtälö on integro-differentiaalisessa muodossa, sillä se sisältää differentiaaleja paikan ja ajan suhteen, sekä integraaleja energian ja suunnan suhteen. (Duderstadt & Hamilton, 1976, s. 114) Kuljetusyhtälöstä on olemassa myös integraalimuoto, jota hyödynnetään varsinkin stokastisissa ratkaisumenetelmissä. (CEA/DEN, 2015. s. 47)

Yhtälön numeeriselle ratkaisulle on kaksi päävaihtoehtoa: deterministiset menetelmät ja stokastinen, eli tilastollinen menetelmä. Nämä jakautuvat vielä useampaan vaihtoehtoon, joista monessa yksinkertaistetaan yhtälöä eliminoimalla siitä muuttujia. Alla kuvassa 3. on esitetty tyypillisimmät tavat lähteä ratkaisemaan kuljetusyhtälöä. (CEA, 2015. s. 62–63)



Kuva 3. Kuljetusyhtälön numeeriset ratkaisumenetelmät. Muokattu lähteestä (CEA/DEN, 2015. s. 63)

4.2 Kuljetusyhtälön deterministiset ratkaisumenetelmät

Kuljetusyhtälön deterministinen ratkaisu toteutetaan diskretisoinnilla, eli jakamalla kukin jatkuva muuttuja (energia, suunta, tilavuus) äärelliseen määrään välejä. Lähtökohtaisesti mitä pienempiä nämä välit ovat, sitä tarkempi ratkaisu. Diskretisointien jälkeen toteutetaan varsinainen laskenta joko kääntämällä muodostunut kerroinmatriisi, tai numeerisesti iteroimalla. (CEA/DEN, 2015. s. 62–63)

4.2.1 Diskretisoinnit

Tyypillisesti ensimmäinen diskretisoitava muuttuja on energia, sillä vaikutusalat riippuvat tästä. Energian diskretisoinnin suhteen puhutaan ”moniryhmistä” (multigroup), ja diskretisointi toteutetaan siten, että ryhmiä on yhdestä muutamaan tuhanteen. (CEA/DEN, 2015. s. 62) Näissä ryhmissä vaikutusalat oletetaan vakioksi, kunkin ryhmän keskimääräistä energiaa vastaavaksi. (Bell & Glasstone, 1970. s. 48) Yksinkertaisin menetelmä on jakaa energia kahteen ryhmään, nopeiden ja hitaiden neutronien ryhmiin. (Stacey, 2020. s. 128)

Suunta, eli avaruuskulma diskretisoidaan yleisesti 100–1000 väliin. Tämän jälkeen kulmariippuvuutta käsitellään joko diskreettien ordinaattojen menetelmällä (S_N), harmonisten pallofunktioiden menetelmällä (P_N) tai yksinkertaistetulla P_N -menetelmällä, eli SP_N -menetelmällä. (CEA/DEN, 2015. s. 72–74) Näistä kaikki ovat kuitenkin suhteellisen paljon laskenta-aikaa vieviä menetelmiä, ja usein päädytään ratkaisuun poistamalla kulmariippuvuus diffuusio-teorian avulla. (Leppänen, 2007. s. 64)

Lopuksi tilavuus on diskretisoitava ottaen huomioon reaktorin dimensiot. Erittäin tarkkoissa laskuissa diskretisointi differenssimenetelmällä on suoritettava hyvin tiheästi, sillä esimerkiksi polttoaineen suojakuooren paksuus on millimetrien luokkaa, jolloin erittäin tarkka 3-ulotteinen malli sisältäisi miljardi laskentakoppia (1 mm x 1 mm x 1 mm) per kuutio. Laskentaa voidaan nopeuttaa suurentamalla laskentakoppien kokoa, polttoainennipputasolla elementti- tai nodaalimenetelmällä päästään parempaan tarkkuuteen differenssimenetelmään verrattuna. (CEA/DEN, 2015. s. 62)

Lopulta yksittäisten muuttujien diskretisoinnin jälkeen saadaan faasiavaruuden laskentakoppien lukumääräksi kunkin muuttujan diskreditointivälien summan tulo. Esimerkiksi jos energialle otetaan 200 ryhmää, suunnalle 400 väliä ja yhden kuution tilavuudelle miljardi laskentakoppia, saadaan faasiavaruudelle $200 \cdot 400 \cdot 10^9 = 20 \cdot 10^{13}$ laskentakoppia. Käytännön laskuihin tällainen diskretisointi ei ole realistinen sen vaatiessa hyvin paljon laskentatehoa. (CEA/DEN, 2015. s. 62)

4.3 Diffuusioteoria

Diffuusiprosesseja esiintyy monella fysiikan osa alueella, alun perin kemiassa huomattiin liuenneen aineen konsentraation diffusoituvan väkevämmästä konsentraatiosta laimeampaan päin. Diffuusioteoriaan pohjautuva neutroniikan mallinnus on tullut kaasuteorian mukana kuljetusyhtälön tavoin. (Reuss, 2008. s. 139), (Leppänen, 2007. s. 65)

Kulman diskretisoinnin yhteydessä mainittu diffuusioteoria on yleisin käytännön dynaamikkakoodien käyttämä yksinkertaistus. (Oka, 2014. s. 71) Teorian avulla eliminoidaan kuljetusyhtälön kulmariippuvuus, jolloin riippuvien muuttujien lukumäärä pienenee kahdella. Lisäksi diffuusioyhtälöä on tutkittu pitkään ja sen ratkaisemiseen on kehitetty useita tehokkaita numeerisia menetelmiä. (CEA/DEN, 2015. s. 76)

Diffuusioteoria pohjautuu Fickin lakiin, jonka mukaan neutronivirran tiheys J on verrannollinen skalaarivuon negatiiviseen gradienttiin (Torres, 2011. s. 29):

$$J_g(\vec{r}, t) = -D_g(\vec{r}, t) \nabla \phi_g(\vec{r}, t) \quad (12)$$

Jossa D_g on energiaryhmän g diffuusiokerroin.

Fickin laki olettaa sironnan olevan isotrooppista, ja neutronien absorboitumisen tapahtuvan vasta kun ne saavuttavat tasapainon ympäristönsä kanssa diffuusiossessissa. Laki ei päde tilanteissa, joissa ollaan lähellä sydämen reunaa, väliaine on vahvasti absorboivaa tai jos

vuon tiheyden muutosnopeus on suuri. Tämä on ongelmallista, sillä todellisessa reaktorissa materiaalit on jaettu heterogeenisesti, jolloin vuon tiheys muuttuu äkillisesti materiaalista toiseen siirryttäessä, säätösauvat ovat voimakkaasti absorboivia, ja transienteissa vuon tiheyden muutosnopeudet suuria. Fickin lain tuoman yksinkertaistuksen johdosta diffuusio- teoriaa voidaan käyttää vain homogenisoidussa reaktorissa. (Duderstadt & Hamilton, 1976. s. 152), (Kalli, 2013. s. 27–28)

Alla on esitetty ajasta riippuva diffuusioyhtälö yleisessä energian suhteen diskretisoidussa moniryhmämuodossa, jossa g kuvaa yhtä ryhmää. (Torres, 2011. s. 26–29)

$$\begin{aligned} \frac{1}{v_g} \frac{\partial \phi_g(\vec{r}, t)}{\partial t} = & -\nabla J_g(\vec{r}, t) - \Sigma_{R,g}(\vec{r}, t) \phi_g(\vec{r}, t) + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \Sigma_{s,g' \rightarrow g}(\vec{r}, t) \phi_{g'}(\vec{r}, t) \\ & + \frac{\chi_g}{k_{eff}} \sum_{g'=1}^G (1 - \beta_{g'}) v_{g'}(\vec{r}, t) \Sigma_{f,g'}(\vec{r}, t) \phi_{g'}(\vec{r}, t) + \sum_{i=1}^{I_p} \chi_{g,i} \lambda_i C_i(\vec{r}, t) \quad g = 1, \dots, G \end{aligned} \quad (13)$$

Prekursoriryhmien ydinten lukumäärien muutosnopeudet huomioidaan seuraavasti:

$$\frac{\partial}{\partial t} C_i(\vec{r}, t) = \frac{1}{k_{eff}} \sum_{g=1}^G \beta_{g,i} v_g(\vec{r}, t) \Sigma_{f,g}(\vec{r}, t) \phi_g(\vec{r}, t) - \lambda_i C_i(\vec{r}, t) \quad i = 1, \dots, I_p \quad (14)$$

Yhtälössä 13. esiintyvä makroskooppinen vaikutusala neutronien poistumiselle $\Sigma_{R,g}$ saadaan vähentämällä kokonaisvaikutusalasta sirontareaktion vaikutusala, jossa neutronin energia jää saman ryhmän alueelle. (Torres, 2011. s. 29)

$$\Sigma_{R,g}(\vec{r}, t) = \Sigma_{t,g}(\vec{r}, t) - \Sigma_{s,g \rightarrow g}(\vec{r}, t) \quad (15)$$

Yleisin tapa ratkaista yhtälöt 13. ja 14. on diskretisoida energia kahteen ryhmään, käsitellä kuutta viivästyneiden neutronien ryhmää, ja sitten diskretisoida tilavuus nodaalimenetelmällä, ja käsitellä aikariippuvuutta Improved Quasi-static (IQS) -menetelmällä. (Oka, 2014. s. 84)

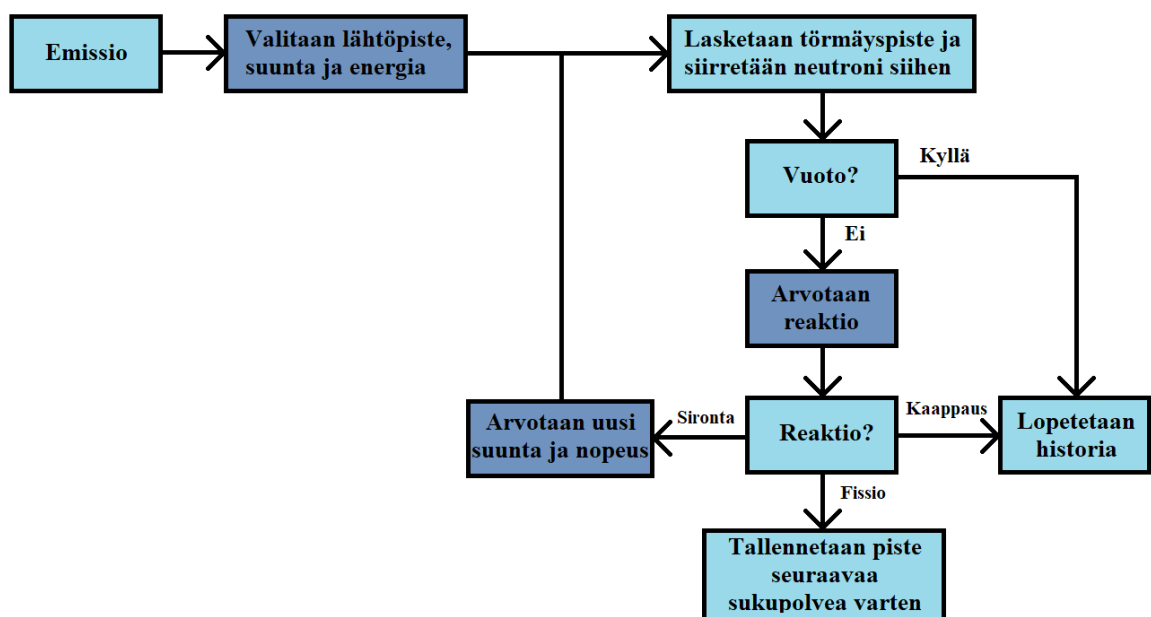
4.3.1 Reaktorin homogenisointi

Homogenisoinnissa reaktorin materiaalit jaetaan tasaisesti joko paikoitellen tilavuuden diskretisoinnin tarkkuudella, tai koko reaktorin laajuisesti. Tarkoituksena on määrittää niin kutsutut homogenisoidut moniryhmävakiot, joihin kuuluvat muun muassa neutronivuot, vaikutusalat ja diffuusio kertoimet. Homogenisointi on toteuttava eri polttoaineen palamille ja

reaktorin termohydraulisille ominaisuuksille. Homogenisointi toteutetaan erillisillä tähän tarkoitukseen kehitetyillä koodeilla, joissain laajemmissa koodipaketeissa kuten APOLLO3 on mukana sisäänrakennettu homogenisointiratkaisija. (CEA/DEN, 2015. s. 131) Homogenisointikoodit perustuvat neutronien kuljetusyhtälöön, ja monet näistä käyttävät seuraavassa kappaleessa esiteltävää Monte Carlo -menetelmää. Esimerkiksi laajasti käytetty Serpent 2 sisältää Monte Carlo -menetelmää hyödyntävän homogenisointiratkaisijan. (Oka, 2014. s. 60–65), (Reuss, 2008. s. 503–505)

4.4 Kuljetusyhtälön stokastinen ratkaisumenetelmä

Stokastiset mallit perustuvat Monte Carlo -menetelmiin, joissa käsitellään yksittäisten neutronien satunnaista kulkeutumista reaktorissa. Menetelmät jaetaan analogisiin ja epäanalogisiin riippuen siitä, jäljittelevätkö ne mallinnettavaa fysikaalista ilmiötä vai eivät. Alla kuvassa 4. on esitetty analogisen menetelmän toimintaperiaate, jossa arvotaan neutronille lähtöpiste, suunta ja energia, jonka jälkeen lasketaan missä kohtaa neutroni vuorovaikuttaa aineen kanssa käyttäen makroskooppista kokonaisvaikutusalaa. Tämän jälkeen taas arvotaan mikä reaktio on kyseessä, absorptio päättää ketjun, sironnan tapauksessa arvotaan neutronille uusi suunta ja nopeus fysikaalisten lakien mukaisesti. Näitä neutronien kokemien vuorovaikutusten sarjoja kutsutaan historioiksi, joiden lukumäärää kasvattamalla saadaan mallinnuksesta tarkempi. Käytännön simulaatioissa historioita mallinnetaan miljoonista muutamaa miljardiin. (Rintala, 2011. s. 39), (CEA, 2015. s. 89)



Kuva 4. Monte Carlo -menetelmän toimintaperiaate. Tummansiniset laatikot kuvaavat arvottuja parametreja.

Monte Carlo menetelmät eivät siis suoraan ratkaise kuljetusyhtälöä, selvitettävät suureet saadaan nyt tilastollisina keskiarvoina simuloitujen historioiden joukosta. Näin ollen menetelmä ei vaadi determinististen ratkaisutapojen mukaisia yksinkertaistuksia ja diskretisointeja, ja on siten lähtökohtaisesti todenmukaisempi ja tarkempi. (Leppänen 2007, s. 20, 91)

Haittapuolena on menetelmän hitaus sen vaatiessa huomattavan suuren määrän laskentakapasiteettia, ja tästä syystä sen käyttö on usein ollut lähinnä referenssikoodina reaktorikinetiikassa, johon deterministisillä koodeilla saatuja tuloksia on verrattu. Nykyään tietokoneiden laskentateho on noussut jo niin merkittävästi, että menetelmää on alettu soveltamaan myös reaktoridynamiikkaan. (Leppänen 2007, s. 20), (Valtavirta, 2017. s. 61)

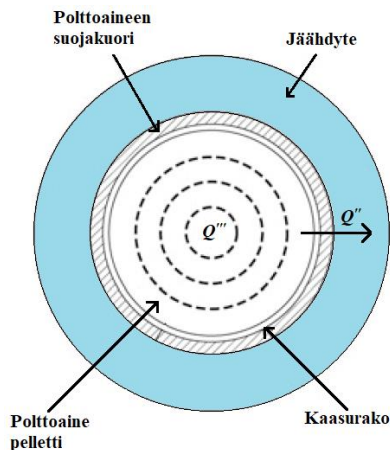
4.5 Termohydrauliikka

Termohydrauliikan mallinnuksella ratkaistaan reaktorin lämpötilajakaumat ja jäähdytteen muut termodynaamiset ominaisuudet, muun muassa aukkokertoimen määrittämisen kannalta oleellinen tiheys, ja reaktoripaineastian kestävyuden kannalta tärkeä paine. Mallinnus toteutetaan usein erikseen polttoainesauvalle ja jäähdytteelle. Sauvan lämmönsiirtoa kuvataan johtumisen ja konvektion malleilla, ja tässä usein riittää 1-ulotteinen polttoainesauvan säteensuuntainen tarkastelu. (Oka, 2014. s. 94–95) Polttoainesauvaa tarkasteltaessa kriittisin muuttuja on lämpövuoto, sillä paikallisesti suuresta vuosta seuraa kiehumiskriisi (DNB/dryout), jolloin lämmönsiirto jäähdytteeseen romahtaa sauvan ulkopinnalle muodostuneen höyryfilmin johdosta. Tällaisessa tapauksessa sauvan lämpötila kohoaa hyvin nopeasti, vaarantaen sauvan mekaanisen kestävyuden. (Oka, 2014. s. 119)

Jäähdytteen termohydrauliikkaa mallinnetaan säilymisyhtälöiden avulla numeerisesti. Mallinnuksessa on otettava huomioon jäähdytteen kiehumisen, jota tapahtuu BWR:issä normaalin toiminnan aikana, ja PWR:issä häiriötilanteissa. Kiehumisen mallintaminen tuo huomattavan paljon lisää muuttujia mukaan, sillä virtausta on mallinnettava kaksifaasisesti, ja itse kiehumiselle on useita eri mallinnusvaihtoehtoja. (Tong & Weisman, 1996. s. 309–319)

4.5.1 Polttoainesauvan lämmönsiirto

Polttoainesauva koostuu polttoainepelletistä, kaasuraosta ja suojakuoresta. Tarkassa lämmönsiirron mallintamisessa tulee ottaa näistä jokainen huomioon, ensin johtuminen polttoaineessa, sitten konvektio kaasuraon ylitse, johtuminen polttoaineen suojakuoren läpi ja lopuksi vielä konvektio jäähdytteeseen. (Oka, 2014. s. 95) Alla kuvassa 5. on esitetty polttoainesauvan poikkileikkaus lämmönsiirron havainnollistamiseksi.



Kuva 5. Polttoainesauvan säteittäinen poikkileikkaus. Muokattu lähteestä (Oka, 2014, s. 95)

4.5.2 Jäähdytteen termohydrauliikka

Jäähdytteen termohydrauliikan ratkaisu perustuu säilymisyyhtälöihin, joihin kuuluu massan säilymisyyhtälö, liikemäärän säilymisyyhtälöt eli niin kutsutut Navier-Stokes yhtälöt ja energian säilymisyyhtälö. Näiden numeerinen ratkaisu toteutetaan samoilla menetelmillä kuin kappaleessa 4.2 selitetty tilavuuden diskretisointi. Eli ensiksi diskretisoidaan jäähdytealue menetelmästä riippuen alikanaviin/noodeihin/laskentakoppeihin, jonka jälkeen ratkaistaan yhtälöt numeerisesti käyttäen differenssi, elementti tai nodaalimenetelmää. (CEA/DEN, 2015, s. 215), (Oka, 2014, s. 102)

4.6 Ratkaisumenetelmät ajan suhteen

Aikamuuttuja on huomioitava sekä neutroniikassa, että termohydrauliikassa. Erona näiden kahden välillä on aika-askeleen pituus, neutroniikassa pituuden tulee olla erittäin lyhyt muutosten ollessa nopeita, termohydrauliikassa saadaan riittävän tarkka ratkaisu verrattain paljon pidemmällä aika-askeleella. Kummassakin näissä voidaan käyttää samoja menetelmiä myös ajan diskretisointiin. (Oka, 2014, s. 82–93)

Yleisin tapa toteuttaa ajan diskretisointi on θ -menetelmä, jossa theetan eri arvoilla päädytään kolmeen eri ratkaisutapaan: eksplisiittinen ($\theta = 0$), implisiittinen ($\theta = 1$), ja Crank-Nicholson menetelmä ($\theta = 1/2$). Theeta menetelmän yleisessä muodossa on jokin ajasta riippuva funktio

u , ja sen aikaderivaatta $\frac{du}{dt} = f(u, t)$ (Zachary et al. 2016, s. 5):

$$\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = (1 - \theta)f(u^n, t) + \theta f(u^{n+1}, t) \quad (16)$$

Käytännössä yhtälössä 16. esiintyvä u voi olla esimerkiksi skalaarivuo.

Iteroinnin stabiilisuus riippuu käytettävästä menetelmästä, ja aika askeleen pituudesta. Eksplisiittinen menetelmä on suoriin ja helpoin tapa sen käyttäessä edellisen aika-askeleen arvoja nykyisen askeleen määrittämiseen. Menetelmän heikkous on stabiilisuus, joka saavutetaan vain erittäin lyhyellä aika-askeleella, ja tästä syystä usein päädytään käyttämään muita vaihtoehtoja. Implisiittinen- ja Crank-Nicholson menetelmä ovat paljon stabiilimpia, mutta niiden käyttö vaatii muuttujien ratkaisua nykyisessä aika-askeleessa, joka vaikeuttaa laskentaa huomattavasti. Crank-Nicholson on kaikkein tarkin menetelmä, ja implisiittinen stabiilein. Käytännön koodeissa voidaan käyttää kumpaakin menetelmää yhtäaikaaisesti, esimerkiksi Crank-Nicholsonia tehopiikissä, ja implisiittistä menetelmää tehonnoususta aiheutuvassa pikasulussa. (Demazière, 2020. s. 181–183), (CEA/DEN, 2015. s. 123)

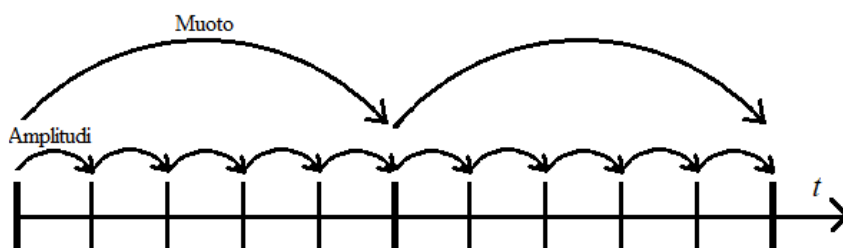
4.6.1 Neutroniikassa käytetyt aikariippuvuuden yksinkertaistukset

Neutroniikan aika-askelten vaihtelevasta pituudesta johtuen on kehitelty yksinkertaistuksia, joissa monessa skalaarivuo jaetaan kahteen komponenttiin. (Dulla et al. 2008. s. 908–911)

$$\phi(\vec{r}, t) = a(\vec{r}, t)f(\vec{r}, t) \quad (17)$$

jossa $a(\vec{r}, t)$ on vuon nopeita muutoksia ajan suhteen käsittelevä amplitudifunktio, joka on aina ajan funktio ja menetelmästä riippuen mahdollisesti myös paikan funktio. $f(\vec{r}, t)$ on vuon hitaita muutoksia ajan suhteen käsittelevä muotofunktio, joka taas on aina paikan funktio, ja mahdollisesti myös ajan funktio. (CEA/DEN 2015. s. 121)

Nykyisin monessa koodissa käytetään paranneltua kvasistaattista menetelmää (Improved Quasi-Static, IQS), jossa muotofunktio on ajan ja paikan funktio. Tässä muotofunktion oletetaan olevan vain vähäisesti ajasta riippuvainen, jolloin sitä ei tarvitse laskea jokaisella aika-askeleella uudelleen, vähentäen merkittävästi laskenta-aikaa. (Zachary et al. 2016. s. 1) Alla kuvassa 5. on havainnollistettu IQS-menetelmän eri funktioiden aika-askelten pituuksia. Toinen skalaarivuon yksinkertaistus on eksponenttimenetelmä, jossa vuon aikariippuvuutta kuvataan eksponenttitermin avulla. (Oka, 2014. s 93), (Torres, 2011. s. 33)



Kuva 6. IQS-menetelmän aika-askleet. Muokattu lähteestä (Zachary, et al. 2016, s. 4).

5 REAKTORIDYNAMIIKKAKOODIT

Usein dynamiikkakoodit perustuvat kytkettyyn laskentaan, jossa neutroniikka ja termohydrauliikka ovat erilliset koodinsa. Kehittyneimmissä koodeissa nämä on rakennettu samaan pakettiin, ja näistäkin suurin osa sallii ulkoisen termohydrauliikkaratkaisijan käytön.

Osion alussa taulukoidaan yleisiä dynamiikkakoodeja, esitellään niiden käyttämät menetelmät ja yksinkertaistukset lyhyesti. Erityistarkasteluun on valittu muutama lähestymistavataan selkeästi toisistaan poikkeava koodi, koko laitosta käsittelevä systeemikoodi Apros, Monte-Carlo -menetelmää hyödyntävä koodi Serpent 2, laajempi reaktorifysiikkakoodipaketti Apollo 3 ja puhtaasti deterministinen reaktoridynamiikkakoodi DYN3D.

5.1 Listaus maailmalla käytössä olevista koodeista

Taulukossa 2. on esitelty maailmalla käytössä olevia reaktoridynamiikkakoodeja. Näistä ensimmäiset neljä sisältävät sisäänrakennetun termohydrauliikkaratkaisijan, loput koodeista ovat yleisesti käytettyjä yhdistelmiä kinetiikka- ja termohydrauliikkaratkaisijoiden välillä.

Taulukko 2. Maailmalla käytössä olevia reaktoridynamiikkakoodeja.

Koodi, kehittäjä & lähteet	Kinetiikan ratkaisumenetelmät	Termohydrauliikan ratkaisumenetelmät
KIKO3D , KFKI (Kereszturi et al. 2003. s. 94–95)	3D 2-ryhmädiffuusioteoriaa hyödyntävä nodaalimenetelmä homogenisoiduille polttoainepuille. Geometria neliöt tai kuusikulmiot. 6 viivästyneiden neutronien ryhmää. IQS-menetelmä aikariippuvuudelle.	1D ratkaisu akselinsuuntaisesti polttoaineniippukohtaisesti. Säilyvyysyhtälöt massalle, liikemäärälle ja energialle neste-höyry sekoitukselle (3 yhtälöä).
HEXTRAN , VTT (Kyrki-Rajamäki, 1995. s. 13–14), (Ikonen et al. 2016. s. 5)	3D 2-ryhmädiffuusioteoriaa hyödyntävä nodaalimenetelmä homogenisoidulle polttoainepulle. Geometria kuusikulmiot. 6 viivästyneiden neutronien ryhmää.	1D ratkaisu akselinsuuntaisesti polttoaineniippukohtaisesti. Säilyvyysyhtälöt massalle ja energialle erikseen nesteelle ja höyrylle, liikemäärän säilymysyhtälö nesteen ja höyryn sekoitukselle (5 yhtälöä).
NESTLE , North Carolina State University (Turinsky et al. 2003. s. 3, 76–77)	3D 2 tai 4-ryhmädiffuusioteoriaa hyödyntävä nodaalimenetelmä homogenisoiduille polttoainepuille. Geometria neliöt ja kuusikulmiot. 1–6 viivästyneiden neutronien ryhmää.	1D ratkaisu akselinsuuntaisesti polttoaineniippukohtaisesti. Säilyvyysyhtälöt massalle ja energialle, tilanyhtälö jäähdytteen tiheydelle. (3 yhtälöä) Valittavissa ratkaisu 1 faasille tai 2-faasisekoitukselle. Paine oletetaan vakioksi, poistaen tarpeen liikemäärän säilymysyhtälölle.
RAST-K v2 ,	3D moniryhmädiffuusioteoriaa hyödyntävä kaksinoodi nodaalimenetelmä & harvan laskentahilan	1D ratkaisu akselinsuuntaisesti polttoaineniippukohtaisesti. Säilyvyysyhtälöt massalle ja energialle. 1-ulotteinen johtuminen

Ulsan national Institute of Science and Technology (Park et al. 2020. s. 2–5)	differenssimenetelmä. Geometria neliöt ja kuusikulmiot.	polttoaineessa. Polttoainemallin osat: pelletti, kaasurako ja suojakuori.
PARCS-TRACE , University of Michigan/NRC (Downar et al. 2010. s. 3–15), (NRC, 2017. s. xvi)	3D moniryhmädiffuusioteoriaa hyödyntävä nodaalimenetelmä homogenisoiduille polttoainepuille sekä 3D differenssimenetelmä. Geometria neliöt tai kuusikulmiot. 6 viivästyneiden neutronien ryhmää. Eksponenttimenetelmä aika-riippuvuudelle.	Erittäin kattava erillinen termohydrauliikkaratkaisija. 1D tai 3D ratkaisu 2-faasivirtaukselle, säilyvyysyhtälöt, massalle, liikemäärälle ja energialle. (6 yhtälöä) 1D tai 2D ratkaisu kiinteiden rakenteiden lämmönjohtumiselle. Keskeisdifferenssimenetelmä tilavuuden diskretisointiin, ratkaisu Newton-Raphson iteroinnilla.
TORT-TD/CTF , GRS/North Carolina State University (Seubert et al. 2021. s. 2), (Wang et al. 2020. s. 235)	Polttoainesauvatason ratkaisu 3-ulotteisena usealle energiaryhmälle tiheällä laskentahilalla diskreettien ordinaattojen menetelmällä tai diffuusioteorialla. Energia- ja viivästyneiden neutroniryhmien lukumäärät käyttäjän määritettävissä.	Monipuolinen erillinen alikanava/3D -analyysiin perustuva termohydrauliikkaratkaisija. Ratkaisu 2-faasivirtauksen 3:lle eri osa-alueelle (höyry, neste ja höyry pisaroilla). Nesteelle ja höyrylle säilyvyysyhtälöt massalle, liikemäärälle ja energialle, höyryyn pisaroilla säilyvyysyhtälöt massalle ja liikemäärälle, ja kiinteissä rakenteissa säilyvyysyhtälö energialle (yhteensä 9 yhtälöä). Säilyvyysyhtälöille käytetään keskeisdifferenssimenetelmää, jonka ratkaisulle useita eri vaihtoehtoja. Lämmönsiirrolle yleisesti ja polttoainesauvan mallintamiselle useita vaihtoehtoisia korrelaatiota ja menetelmiä.
COBAY4/CTF , Universidad Politécnica de Madrid/ North Carolina State University (García-Herranz et al. 2017. s. 39–40)	1D/3D moniryhmädiffuusioteoriaa hyödyntävä nodaalimenetelmä/polttoainesauvatason ratkaisu tiheällä laskentahilalla. Geometria neliöt tai kuusikulmiot.	
TRIPOLI-4/SUB-CHANFLOW , CEA/KIT (Faucher, 2019. s. 30–38)	3D jatkuvaenerginen Monte Carlo -menetelmää hyödyntävä koodi. Vaikutusalojen lämpötilariippuvuudet saadaan tilastollisella interpoloinnilla. Aikariippuvuus hoideaan jakamalla aika-alue omiin lokeroihin, jotka voivat olla epä-säännöllisin välein ja sisältää minkä tahansa määrän historioita.	Erillinen alikanava-analyysin perustuva termohydrauliikkaratkaisija. Säilyvyysyhtälöt massalle, liikemäärälle ja energialle 2-faasivirtaukselle. Implisiittinen ratkaisumenetelmä. Polttoaineen lämmönsiirto ratkaistaan rajallisen tilavuuden menetelmällä. Useita eri korrelaatioita painehäviölle, lämmönsiirrolle ja jäähdytteen aukkojen muodostumiselle.

Taulukosta 2. voidaan päätellä valtaosan koodeista käyttävän kinetiikan ratkaisussa diffuusioteoriaa hyödyntävää nodaalimenetelmää. Tällä saavutetaan paras tarkkuuden ja laskenta-ajan suhde. Termohydrauliikan ratkaisussa kaikki ratkaisijat perustuvat säilyvyysyhtälöihin, erot tulevat lähinnä yhtälöiden ja faasien lukumäärässä ja käsittelyssä. Huomioitavaa on vielä erillisten termohydrauliikkaratkaisijoiden tarjoama valtaisa määrä käyttäjän valittavissa olevia korrelaatiota ja ratkaisumenetelmiä, joiden avulla saadaan tarkkuutta ja laskenta-aikaa optimoitua tapauskohtaisesti.

5.2 Apros[®] Nuclear

Apros[®] Nuclear (Advanced PROcess Simulation Software) on Fortumin ja VTT:n kehittämä ydinvoimalaitosten mallinnus- ja simulointiohjelmisto. Ohjelmistolla voidaan mallintaa lähes koko ydinvoimalaitosta: reaktori- ja turbiinisaarekettä sekä sähkö- ja automaatiojärjestelmiä. (Apros 2022a, s. 1)

Ohjelmiston kinetiikkaratkaisijat soveltuvat neliön sekä kuusikulmaisten polttoaine-elementtien sisältävien kevytvesireaktorien mallinnukseen. Viivästyneiden neutronien laskentaan käytetään kuuden prekursoriryhmän mallia. Laskennassa voidaan ottaa huomioon palavat absorbaattorit, paikalliset jodin, ksenonin, prometiumin ja samariumin konsentraatiot. Vaikutusala-data saadaan polttoaineen palaman funktiona hyödyntäen VTT:n kehittämää HEXBU-3D:tä. (Apros 2022a, s. 1–2)

Ohjelmisto sisältää useamman deterministisen kinetiikkaratkaisijan, muun muassa 1- ja 3-ulotteiset kaksiryhmädiffuusiooteoriaa hyödyntävät nodaalilaskentaan perustuvat ratkaisijat. Mallit pohjautuvat VTT:n aikaisemmin kehittelemiin ja perusteellisesti validoituihin reaktorianalyysikoodeihin, HEXTRAN:iin ja TRAB3D:hen. (Hämäläinen, A. 2005, s. 44–59) Lisäksi 3-ulotteisille tapauksille on nodaalimallin lisäksi olemassa differenssimenetelmään perustuva ratkaisija. (Apros 2022b, s. 1–2)

3-ulotteisessa nodaalilaskentaan perustuvassa kinetiikkaratkaisijassa jokainen polttoaine-elementti muodostaa yhden noodin, joka sitten homogenisoidaan ja jaetaan akselin suuntaisesti 20 laskentakoppiin. Iterointi voidaan suorittaa useammalla vaihtoehdolla, mukaan lukien implisiittinen menetelmä, jonka avulla voidaan suorittaa kinetiikkayhtälöiden diskretisointi ajan suhteen, mahdollistaen erittäin joustavan aika-askeleen pituuden. (Apros 2022b, s. 2)

Aproksen sisäänrakennettu termohydrauliikkaratkaisija laskee polttoaineen ja jäähdytteen lämpötilan, sekä booripitoisuuden. Polttoainesauvan malli koostuu säteen suuntaisesti vaihtoehdoisesta ”keskiaukosta”, polttoaineesta, polttoaineen ja suojakuoren välisestä raosta, sekä suojakuoresta. (Apros 2022b, s. 1)

Termohydrauliikkamalleja on kaksi kappaletta, 5- ja 6-yhtälömalli. 3-ulotteisen kinetiikkamallin tapauksessa reaktorisydämen termohydrauliikka kuvataan 1-ulotteisten virtauskanavien avulla, jotka ulottuvat koko sydämen mitalle. Jokainen kanava sisältää yhden

polttoainenipun alueen jäähdytyen, ja jokaiselle kanavalle määritellään omat termohydrauliset ominaisuutensa. Kanavien lisäksi 3-ulotteinen sydänmalli koostuu polttoaineesta, neutroniheijastimesta ja reaktorin säätöelementeistä. (Apros 2022b, s. 1)

5.3 Serpent 2

Serpentin (alkuperäinen nimi PSG) kehitys alkoi Suomessa Teknologian tutkimuskeskuksella (VTT) Jaakko Leppäsen toimesta vuonna 2004. Koodia voi kuvailla kolmiulotteiseksi jatkuvaenergiseksi Monte Carlo -menetelmää hyödyntäväksi neutronikuljetuskoodiksi. Eräs koodin alkuperäisistä käyttökohteista oli homogenisoitujen ryhmävakioiden laskeminen deterministisiä reaktorisimulaattorikoodeja varten. (Leppänen, 2007, s. 21, 24)

Seuraava kehitysvaihe oli lisätä koodiin sisäänrakennettu polttoaineen palaman ratkaisija, ja samoihin aikoihin koodin nimi muutettiin nykyiseen muotoonsa, Serpentiksi, ja se julkaistiin yleiseen käyttöön. Palaman ratkaisemisesta tuli nopeasti koodin pääkäyttökohde. (Leppänen et al. 2014)

Nykyinen versio eli Serpent 2 sisältää aikaisempien ratkaisijoiden lisäksi myös transienttilanteiden mallinnuksen. Transienttien kytketty laskenta voidaan toteuttaa joko suoraan koodiin sisäänrakennetun kevyen termohydrauliikkaratkaisijan avulla, tai vaihtoehtoisesti ulkoisten tarkempien ratkaisijoiden avulla. (Valtavirta 2017, s. 63–68)

Monte Carlo -menetelmään pohjautuvat dynamiikkaratkaisijat ovat varsin uusi käsite, sillä tietokoneiden laskentateho on vasta hiljattain noussut riittävän suureksi, jotta tällä menetelmällä toteutettavat simulaatiot ovat laskenta-ajallisesti käytännöllisiä. Etu tällä ratkaisutavalla on sen tarkkuus, sillä yksinkertaistusten määrä jää huomattavasti deterministisiä vaihtoehtoja pienemmäksi. Dynamiikkatapauksissa on käytössä kaksivaiheinen ratkaisu, ensimmäisessä vaiheessa selvitetään prekursoriydinten lukumäärät stationääritilassa ennen transientin alkamista. (Ferraro et al. 2020a, s. 3–4), (Ferraro et al 2020b, s. 11.)

Serpentissä käytetään analogista Monte Carlo menetelmää, jonka peruseriaatteet on selitetty kohdassa 4.4. Yksi koodin merkittävimmistä yksinkertaistuksista on perinteisin säteenseurannan sijaan käyttää Woodcock delta-tracking -menetelmää, joka eliminoi tarpeen laskea neutronin törmäyskohta uudelleen neutronin siirtyessä väliaineesta toiseen. Menetelmässä lasketaan reaktorin materiaalien keskimääräinen kokonaisvaikutusala, jota sitten käytetään kaikkialla. Näin saadaan laskentaa nopeutettua merkittävästi, mutta menetelmällä on

myös haittapuolensa. Ensinnäkin neutronien siirtymistä väliaineiden välillä ei tässä tapauksessa lasketa, ja samalla myös neutronivuon määrittäminen onnistuu lähinnä vain geometrian ulkorajoilla. Toinen haittapuoli liittyy paikallisesti vahvoihin absorbaattoreihin, jotka nostavat keskimääräistä kokonaisvaikutusala merkittävästi vääristäen neutronien liikeratoja ja absorbtiosijainteja. Ongelma paikallisten absorbaattorien suhteen muistuttaa paljon kapaleessa 4.3.1 selitettyä diffuusioteorian vaatimaa reaktorin homogenisointia. (Leppänen, 2007. s. 100–103)

5.4 APOLLO3[®]

APOLLO3[®] on Ranskalaisen CEA:n yhteistyössä AREVA:n ja EDF:n kanssa kehittämä uuden sukupolven deterministinen reaktorifysiikkakoodipaketti (Schneider et al. 2016. s. 1). Koodi perustuu jo 1980-luvulta lähtöisin oleviin APOLLO2 ja CRONOS2 koodeihin, sisältäen erittäin laajan kattauksen eri toimintoja ja ratkaisijoita, lähtien homogenisoitujen ryhmävakioiden määrittämisestä polttoaineen palaman ratkaisijoihin, ja lopulta useisiin aika-riippuviin kinetiikkaratkaisijoihin. (Schneider et al. 2016. s. 2–4), (CEA/DEN, 2015. s. 131–133)

APOLLO3 sisältää useita dynamiikkaan soveltuvia kinetiikkaratkaisijoita, jotka on jaoteltu niiden käyttämien ratkaisumenetelmien mukaan. Yksi näistä on MINOS, joka käyttää joko SP_N menetelmää tai diffuusioteoriaa 3D kinetiikan ratkaisuun neliön tai kuusikulmion mallisissa geometrioissa. Tässä tilavuuden diskretisointi toteutetaan elementtimenetelmään pohjautuvalla ”Raviart-Thomas-Nedelec elements” menetelmällä. Toinen ratkaisija on PASTIS, joka käyttää P_N menetelmää, jossa 3D tilavuus diskretisoidaan nodaalimenetelmällä kuusiokulmion muotoisissa geometrioissa. (Schneider et al. 2016. s. 4)

APOLLO3:n kehittynein kinetiikkaratkaisija on MINOS, jolla on mahdollista ratkaista 2D tai 3D kinetiikka SP_N tai S_N mallilla epäsäännöllisen muotoisessa sylinterigeometriassa. Tilavuus diskretisoidaan tässä käyttäen epäjatkovaa Galerkin menetelmää, jota voidaan kuvailla elementtimenetelmän ja tilavuusmenetelmän yhdistelmänä. Ratkaisijan etuna voidaan pitää kykyä ratkaista kinetiikka epäsäännöllisellä laskentahilalla, kyseinen ominaisuus on suhteellisen harvinainen kinetiikkakoodeissa, mutta kuitenkin yleinen termohydrauliikka ja CFD puolella. (Schneider et al. 2016. s. 2–4), (CEA/DEN, 2015. s. 131–133)

Termohydrauliikka voidaan ratkaista sisäisillä ratkaisijoilla, tai vaihtoehtoisesti kytketysti jollain ulkoisella ratkaisijalla. Yksi sisäisistä ratkaisijoista on THEDI, joka perustuu 1D 2-

faasivirtauksen kokonaismassan, höyryn massan, liikemäärän ja energian säilymisytälöihin (4 yhtälöä). (Patricot et al. 2020. s. 1–3)

5.5 DYN3D

DYN3D on Saksassa 90-luvulla kehitetty reaktoridynamiikkakoodi, alun perin VVER-tyyppisten reaktoreiden reaktiivisuusmuutoksista aiheutuneiden transienttien mallintamiseen. Koodi painottuu vahvasti nimenomaan transienttien laskentaan, ja vuosien mittaan siihen on lisätty myös stationääritilanteiden ja palaman laskenta. 90-luvulla koodin katsottiin olevan lajissaan kehittyneimpien joukossa, ja sille myönnettiin IAEA:n toimesta referenssikoodin status VVER-440/V213 reaktorityypeille. (Rohde et al. 2016. s. 170–171)

Kinetiikan ratkaisumenetelmänä koodissa toimii 3D nodaalilaajennusmenetelmä, jolla ratkaistaan kaksiryhmädiffuusioiteorian mukaiset yhtälöt neliön tai kuusikulmion mallisessa geometriassa. Oletuksena on noodikohtaisesti vakio makroskooppinen vaikutusala. Ajan suhteen ratkaisu toteutetaan implisiittisellä mallilla käyttäen eksponenttimuunnosta. Viivästyneiden neutroniryhmien (1–6 kpl) yhtälöt ratkaistaan analyttisesti, olettaen fissionopeuden käyttäytyvän eksponentiaalisesti aika-askelten välillä. (Grundmann et al. 2005 s. 3), (Torres, 2011. s. 26)

Sisäänrakennettu termohydrauliikaratkaisija FLOCAL perustuu 4 säilymisytälön kaksifaasivirtauksen malliin rinnakkaisissa virtauskanavissa. Rinnakkaiset virtauskanavat on hydraulisesti kytketty toisiinsa olettamalla painehäviön olevan kaikissa kanavissa yhtä suuri. Polttoainesauvan lämmönsiirrolle on oma mallinsa, johon sisältyy myös sauvan mekaanisen kestävyuden laskenta. (Grundmann et al. 2005. s. 4)

Kinetiikka ja termohydrauliikan kytkentä transienteja varten on toteutettu kahden aika-askelen mallilla. Tässä yksi tai useampia kinetiikan aika-askelia vastaa yhtä termohydrauliikan aika-askelta. Metodi muistuttaa kappaleessa 4.6.1 mainittua IQS-menetelmän tapaa käsitellä eri tavalla ajasta riippuvia ilmiötä omilla aika-askelillaan. Lähtökohtaisesti neutroniikan ilmiöt ovat nopeampia, ja vaativat siten lyhyemmän aika-askelen. Koodi muokkaa automaattisesti aika-askelten pituuksia riippuen fysikaalisten parametrien käyttäytymisestä, eli nopeissa transienteissa lyhyet aika-askleet, ja hitaissa vastaavasti pidemmät. (Grundmann et al. 2005. s. 4)

6 KOODIEN VERIFIOINTI JA VALIDOINTI

Verifioinnilla ja validoinnilla varmistetaan mallinnusten ratkaisujen paikkansapitävyys tietyllä voimassaoloalueella. Ensin koodit verifioidaan tietyillä kansainvälisten standardien mukaisilla testeillä, jonka jälkeen tehdään validointi toteuttamalla herkkyyssanalyysi mallinnuksen lähtöarvoille. Validoinnin avulla saadaan selville millä tarkkuudella koodin antamiin tuloksiin voidaan luottaa ja mikä on ratkaisujen voimassaoloalue. Validointi on toteutettava jokaiselle laskennan vaiheelle erikseen, reaktoridynamiikassa on selkeä jako kinetiikkaan ja termohydrauliikkaan, joista vielä kumpikin jakautuu useampaan osaan. Paras tapa toteuttaa validointi on vertailla koodin tuloksia testireaktoreilla toteutettuihin käytännön kokeisiin. (CEA/DEN, 2015. s. 165), (Kyrki-Rajamäki, 1995. s. 28–32), (Reuss, 2008. s. 513)

Lähes kaikkien reaktoridynamiikkakoodien verifiointi toteutetaan vertaamalla niitä tarkempiin referenssikoodeihin. Vertailua varten on kehitetty useita erilaisia testejä eri reaktorityypeille ja transienttitilanteille. (Grundmann et al. 2005. s. 124–128)

Referenssikoodit perustuvat tarkempiin laskentamenetelmiin, ja sitä kautta niiden vaatima laskenta-aika on huomattavasti muita koodeja pidempi. Neutroniikan verifioinnissa etuna on laskentamenetelmien erilaisuus; kehitteillä olevaa koodia voidaan verrata erikseen stokastiseen ja deterministiseen referenssikoodiin. Monte Carlo -menetelmä sopeutuu erityisen hyvin referenssikoodiksi, sillä siinä tehdään vain vähän yksinkertaistuksia ja sen tarkkuus on erittäin hyvä varsinkin suurilla neutronihistorioiden määrillä. Deterministiset referenssikoodit sisältävät hyvin tiheät diskretisointivälit ja mahdollisimman vähän yksinkertaistuksia. Nykyään enää harva koodi perustuu diffuusioteoriana, siinä tehtävien suurien yksinkertaistusten johdosta. Lisäksi tietokoneiden lisääntynyt laskentateho mahdollistaa laskennallisesti raskaampien menetelmien käytön. (Reuss, 2008. s. 513), (CEA/DEN, 2015. s. 165)

Kvalifiointi toteutetaan vertailemalla koodien tuloksia niin testireaktoreilla toteutettuihin käytännön kokeisiin, kuin kaupallisilla reaktoreilla tehtyihin testeihin ja niiden käytöstä saatuun dataan (Hegyí et al. 2011. s. 694). Dynamiikkakoodien kvalifioinnissa yhtenä ongelmaa on mallinnettävien ilmiöiden luonne, testejä esimerkiksi säätösauvan uloslento-onnettomuudesta on haastava toteuttaa siinä ilmenevien riskien kannalta. (Reuss, 2008. s. 514)

Kvalifiointia ei tarvitse toteuttaa jokaiselle koodille erikseen, sillä verifioinnissa käytetyt referenssikoodit ovat jo käyneet tämän prosessin läpi. (CEA/DEN, 2015. s. 165)

7 JOHTOPÄÄTÖKSET & YHTEENVETO

Reaktoridynamiikan mallintaminen vaatii huomattavan paljon lähtötietoa, ensinnäkin reaktorin tarkka geometria ja materiaalit on tiedettävä. Geometrian selvittäminen on vielä suhteellisen yksinkertaista ainakin kevytvesireaktorien tapauksessa, jossa se ei muutu käyttöjakson aikana, pois lukien säätösauvojen liikuttelu. Hankalampi tapaus on itse polttoaine, jonka koostumus vaihtelee palaman mukaan pitkällä aikavälillä. Lisäksi polttoaineessa on useita radioaktiivisen hajoamisen seurauksena syntyviä nuklideja, joiden pitoisuuksien selvittäminen on reaktorin käyttäytymisen ja mallintamisen kannalta oleellista. Ksenonin ja Samariumin pitoisuudet vaihtelevat muutaman tunnin aikavälillä, ja prekursoriytimien pitoisuudet muutamien sekuntien aikavälillä. Kaikki nämä tulisi tietää vielä polttoainesauvakohtaisesti, tai ainakin polttoaineniippukohtaisesti.

Yksi käytetyimmistä yksinkertaistuksista on diffuusioteoria, joka toimii ainoastaan homogeenisoidulle reaktorille. Homogenisoinnissa jaetaan reaktorin materiaalit tasaisesti joko koko reaktorin alueelle tai polttoainesauvakohtaisesti. Tämä itsessään on jo aika vaativa laskutoimitus, vaatiessaan yllä mainitut tiedot geometriasta ja materiaaleista. Homogenisointiin on kehitetty useita koodeja eri menetelmineen.

Reaktorin geometrian ja sisältämän materiaalin lisäksi tarvitaan suuri määrä dataa neutronien vaikutusaloista, jotka vaihtelevat merkittävästi neutronin energian ja väliaineen lämpötilan funktiona. Data pitää usein vielä erikseen käsitellä ja muokata dynamiikkakoodien vaatimaan muotoon erillisellä koodilla. Vaikutusalojen lisäksi tarvitaan myös loput mallinnuksen lähtötiedoista, materiaalien aineominaisuudet, reaktorin termodynaaminen tila, jäädytteen mahdollinen boorikonsentraatio, ja mallinnettavan ilmiön aiheuttamat mahdolliset säätöautomaatio toimenpiteet.

Vasta näiden vaiheiden jälkeen päästään itse dynamiikan mallintamiseen, joka perustuu kinetiikan osalta Boltzmannin yhtälöön ja siitä johdettuihin yksinkertaistuksiin. Ratkaisulle on kaksi päähaaraa, deterministiset ja stokastiset menetelmät. Stokastiset menetelmät ovat vasta hiljattain otettu mukaan dynamiikan mallintamiseen tietokoneiden laskentatehon lisääntyessä. Aikaisemmin dynamiikkamallinnus toteutettiin yksinomaan deterministisillä menetelmillä, ja edelleen hyvin monet koodit pohjautuvat näihin. Merkittävin etu deterministisillä menetelmillä on tulosten suhteellisen hyvä tarkkuus suhteutettuna laskentaan vievään aikaan.

Deterministiset menetelmät perustuvat Boltzmannin yhtälössä esiintyvien paikan, energian, suuntakulman ja ajan diskretisointiin. Diskretisointimenetelmiä on useita erilaisia, ja tämän työn perusteella kaikkein suosituimmat tavat on diskretisoida paikka nodaalimenetelmällä, poistaa kulmariippuvuus diffuusioteoriolla, jakaa energia kahteen ryhmään, ja diskretisoida aika implisiittisellä menetelmällä käyttäen IQS-menetelmää hyväksi.

Termohydrauliikka perustuu erikseen polttoainesauvan lämmönsiirtoon ja jäähdytteen aineen- ja lämmönsiirtoon. Polttoainesauvan lämmönsiirto ratkaistaan lähes kaikissa koodeissa 1-ulotteisesti sauvan säteen suuntaisesti, sillä akselin suuntainen johtuminen on hyvin vähäistä. Sauvan lämmönsiirto tapahtuu kiinteissä kohdissa johtumalla, ja kaasuraon kohdalla konvektiolla. Tämä konvektio saadaan ratkaistua käyttämällä jotakin lämmönsiirron korrelaatiota. Jäähdytteen lämmön- ja aineensiirto ratkaistaan massan, liikemäärän, ja energian säilymisyhtälöillä ja tarvittaessa tilanyhtälöllä. Tähän löytyi useampaa ratkaisumenetelmää, erona oli lähinnä säilyvyysyhtälöiden lukumäärä ja tehdyt yksinkertaistukset. Lähes kaikissa koodeissa jäähdytteen mallinnus perustui ainakin osittain kaksifaasivirtaukseen.

Ratkaisumenetelmät ajan suhteen ovat käytännössä samat kinetiikalle ja termohydrauliikalle. Theta-menetelmän implisiittinen muoto on yleisin käytössä oleva ratkaisu sen salliessa joustavamman aika-askeleen pituuden kuitenkin säilyttäen laskennan stabiilisuuden. Neutroniikassa on käytössä yksinkertaistuksia, joissa jaetaan aika-askel useampaan osaan. Näistä IQS-menetelmä on tunnetuimpien ja käytetyimpien joukossa. Näiden avulla saadaan laskenta-aikaa huomattavasti lyhyemmäksi.

Kehitettyjä dynamiikkakoodeja löytyi useampi kappale. Näistä APOLLO3, APROS ja SERPENT 2 ovat laajempia reaktorifysiikkakoodipaketteja, jotka sisältävät dynamiikkaratkaisijat. KIKO3D, HEXTRAN, NESTLE, RAST-K v2 ja DYN3D ovat puhtaasti reaktoridynamiikkakoodeja sisältäen omat ratkaisijat neutroniikalle ja termohydrauliikalle. Työssä käsitellyt PARCS, TORT-TD, COBAY4 ja TRIPOLI 4 ovat kinetiikkaratkaisijoita, jotka vaativat erillisen termohydrauliikkaratkaisijan.

Kaiken kaikkiaan työn tavoitteet täyttyivät suhteellisen hyvin kandidaatintyön rajattuun pituuteen nähden. Ratkaisumenetelmistä ja yksittäisistä koodeista olisi mahdollista kertoa myös paljon laajemmin ja yksityiskohtaisemmin. Työtä voisi vielä jatkaa selvittämällä tarkemmin kinetiikan ja termohydrauliikan kytkentää. Toinen mahdollinen jatkotutkimus olisi toteuttaa käytännön mallinnus eri koodeilla ja vertailla niiden toimintaa ja ratkaisuja.

LÄHTEET

Anglart, H. 2011. Nuclear Reactor Dynamics and Stability. KTH Royal Institute of Technology. 151 sivua.

Apros, 2022a. Apros® Nuclear Products, Dynamic Simulation and Safety Analysis. Tuote-esittely. Saatavilla: https://www.apros.fi/wp-content/uploads/sites/27/2020/09/213-Apros_Nuclear_brochure.pdf

Apros, 2022b. Apros® Datasheet, 1D- and 3D-Neutronics models. Tuote-esittely. Saatavilla: https://www.apros.fi/wp-content/uploads/sites/27/2020/09/205-Apros_Datasheet_1D_and_3D-Neutronics_Models.pdf

Bell, G. I. & Glasstone, S. 1970. Nuclear Reactor Theory. New York, USA: Van Nostrand Reinhold. ISBN: 978044-2068-0.

CEA/DEN. 2015. Neutronics. Pariisi, Ranska: CEA Saclay and Groupe Moniteur. 273 sivua. ISBN 978-2-281-11372-3.

Demazière, C. 2020. Modelling of nuclear reactor multi-physics: from local balance equations to macroscopic models in neutronics and thermal-hydraulics. Iso-Britannia, Lontoo, Academic Press, Elsevier. ISBN: 978-0-12-815069-6
DOI: <http://dx.doi.org/10.1051/epjn/2016032>

Downar, T. & Xu, Y. & Seker, V. 2010. PARCS v3.0 – U.S. NRC Core Neutronics Simulator User Manual. Department of Nuclear Engineering and Radiological Sciences, University of Michigan. Ann Arbor.

Duderstadt, J. J. & Hamilton, L. J. 1976. Nuclear Reactor Analysis. New York, USA: JOHN WILEY & SONS Inc. ISBN: 0-471-22363-8

Dulla, S. & Mund, E.H. & Ravetto, P. 2008. The quasi-static method revisited. Progress in Nuclear Energy, Volume 50. Pages 908-920. ISSN: 0149-1970

Faucher, M. 2019. Coupling between Monte Carlo neutron transport and thermal-hydraulics for the simulation of transients due to reactivity insertions. Väitöskirja. Université Paris Saclay, Ranska.

Ferraro, D. & García, M. & Valtavirta, V & Imke, U. & Tuominen, R. & Leppänen, J. & Sanchez-Espinoza, V. 2020a. Serpent/SUBCHANFLOW pin-by-pin coupled transient

calculations for a PWR minicore. *Annals of Nuclear Energy*, Volume 137, 107090. ISSN: 0306-4549.

Ferraro, D. & García, M. & Valtavirta, V & Imke, U. & Tuominen, R. & Leppänen, J. & Sanchez-Espinoza, V. 2020b. Serpent/SUBCHANFLOW pin-by-pin coupled transient calculations for the SPERT-III hot full power tests. *Annals of Nuclear Energy*, Volume 142, 107387. ISSN: 0306-4549.

García-Herranz, N. & Cuervo, D. & Sabater, A. & Rucabado, G. & Sánchez-Cervera, S. & Castro, E. 2017. Multiscale neutronics/thermal-hydraulics coupling with COBAYA4 code for pin-by-pin PWR transient analysis. *Nuclear Engineering and Design*, Volume 321. Pages 38-47. ISSN 0029-5493

Grundmann, U. & Rohde, U. & Mittag, S. & Kliem, S. 2005. DYN3D Version 3.2 – Code for Calculation of Transients in Light Water Reactors (LWR) with Hexagonal or Quadratic Fuel Elements.

Hämäläinen, A. 2005. Applying thermal hydraulics modeling in coupled processes of nuclear power plants. Väitöskirja. Lappeenranta University of Technology, Energiatekniikan osasto. Espoo, VTT Publications 578. 103 sivua. ISBN: 951-38-6668-8

Hegyí, Gy. & Keresztúri, A. & Maráczy, Cs. & Hordósy, G. & Temesvári, E. 2011. Simulation of start-up measurements with the KIKO3D code and its application for determining the scram rod worth uncertainty in the VVER-440 reactor. *Annals of Nuclear Energy*, Volume 38, Issues 2-3. Pages 694-704. ISSN: 0306-4549.

Ikonen, T. & Syrjälahti, E. & Valtavirta V. & Loukusa, H. & Leppänen, J. & Tulkki, V. 2016. Multiphysics simulation of fast transients with the FINIX fuel behaviour module. *EPJ Nuclear Sciences & Technologies*, Volume 2. EDP Sciences.

Kalli, H. 2010. Ydinreaktorien fysiikka, osa 3. Lappeenrannan teknillinen yliopisto, Teknillinen tiedekunta, LUT energia Opetusmoniste Nro 5. 86 sivua. ISBN: 978-952-214-825-4.

Kalli, H. 2012. Ydinreaktorien fysiikka, osa 1. – Ydinvoimatekniikan perusteet. Lappeenrannan teknillinen yliopisto, Teknillinen tiedekunta, Ydinvoimatekniikan laboratorio.

Kalli, H. 2013. Ydinreaktorien fysiikka, osa 2. Lappeenrannan teknillinen yliopisto, Teknillinen tiedekunta, Ydinvoimatekniikan laboratorio. Kurssille BH30A0200 Ydinvoimatekniikka I.

Keresztúri, A. & Hegyi, Gy. & Marázcy, Cs. & Panka, I. & Telbisz, M. & Trosztel, I. & Hegedüs, Cs. 2003. Development and validation of the three-dimensional dynamic code-KIKO3D. *Annals of Nuclear Energy*, Volume 30, Issue 1. Pages 93-120. ISSN: 0306-4549.

Kyrki-Rajamäki, R. 1995. Three-dimensional reactor dynamics code for VVER type nuclear reactors. Väitöskirja. Espoo, VTT Publications 246. 51 sivua.

Lamarsh, J. R. & Baratta, A. J. 2001. *Introduction to Nuclear Engineering*. Third Edition. New Jersey, USA: Prentice-Hall, Inc. 783 sivua. ISBN: 0-201-82498-1.

Leppänen, J. & Pusa, M. & Viitanen, T. & Valtavirta, V. & Kaltiaisenaho, T. 2014. The Serpent Monte Carlo code: Status, development and applications in 2013. *Annals of Nuclear Energy*, Volume 82. Pages 142-150. ISSN: 0306-4549.

Leppänen, J. 2007. *Development of a New Monte Carlo Reactor Physics Code*. Väitöskirja. Espoo, VTT Publications 640. 228 sivua. ISBN: ISBN 978-951-38-7018-8.

NRC, 2017. *Trace v5.0 Theory Manual – Field Equations, Solution Methods, and Physical Models*. Division of Risk Assessment and Special Projects, Office of Nuclear Regulatory Research, U.S. Nuclear Regulatory Commission. Yhdysvallat, Washington, D.C.

Oka, Y. 2013. *Nuclear Reactor Kinetics and Plant Control*. Tokio, Japani: Springer Japan. 305 sivua. ISBN 978-4-431-54194-3.

Oka, Y. 2014. *Nuclear Reactor Design*. Tokio, Japani: Springer Japan. 327 sivua. ISBN: 978-4-431-54897-3.

Park, J. & Jang, J. & Kim, H. & Choe, J. & Yun, D. & Zhang, P. & Cherezov, A. & Lee., D. 2020. RAST-K v2-Three-Dimensional Nodal Diffusion Code for Pressurized Water Reactor Core Analysis. *Energies* 2020, 13, 6324. <https://doi.org/10.3390/en13236324>

Patricot, C. & Lenain, R. & Caron, D. 2020. Upgrade of APOLLO3[®] internal thermohydraulic feedback model with THEDI, and application to a control-rod ejection accident. CEA/DEN, Université de Paris-Saclay

Reuss, P. 2008. *Neutron Physics*. Pariisi, Ranska: EDP Sciences. 669 sivua. ISBN: 978-2-7598-0041-4.

Rohde, U. & Kliem, S. & Grundmann, U. & Baier, S. & Bilodid, Y. & Duerigen, S. & Fridman, E. & Gommlich, A. & Grahn, A. & Holt, L. & Kozmenkov, Y. & Mittag, S. 2016. The

reactor dynamics code DYN3D – models, validation, and applications. *Progress in Nuclear Energy*, Volume 89. Pages 170-190. ISSN: 0149-1970

Schneider, D. & Dolci, F. & Gabriel, F. & Palau, J. M. & Guillo, M. & Pothet B. 2016. APOLLO3 CEA/DEN deterministic multi-purpose code for reactor physics analysis. *PHYSOR 2016 – Unifying Theory and Experiments in the 21st Century*, May 2016, Sun Valley, United States. CEA-02509714.

Seubert, A. & Périn, Y. & Henry, R. 2021. High-Fidelity Multi-Physics Pin-by-Pin Model of a SVEA-96 Optima2 Assembly With TORT-TD/CTF. *EPJ Web Conference* 247, 06035. *PHYSOR2020*

Tong, L.S. & Weisman, J. 1996. *Thermal Analysis of Pressurized Water Reactors*, Third Edition. La Grange Park, USA: American Nuclear Society. ISBN: 1-5231-1631-5

Turinsky, P. J. & Al-Chalabi, R. M. K. & Engrad, P. & Sarsour, H. N. 2003. NESTLE: Few-Group Neutron Diffusion Equation Solver Utilizing The Nodal Expansion Method for Eigenvalue, Adjoint, Fixed-Source Steady-State and Transient Problems. *Electric Power Research Center*. North Carolina State University, Raleigh.

Valtavirta, V. 2017. *Development and applications of multi-physics capabilities in a continuous energy Monte Carlo neutron transport code*. Väitöskirja. Aalto University, School of Science, Department of Applied Physics. Helsinki, Unigrafia Oy. 172 sivua. ISBN: 78-952-60-7376-7

Wang, J. & Li, X. & Allison, C. & Hohorst, J. 2020. *Nuclear Power Plant Design and Analysis Codes – Development, Validation, and Application*. Woodhead Publishing, Elsevier. ISBN: 978-0-12-818191-1

Zachary, M.P. & Ragusa, J.C. & Wang, Y. 2016. *Improved Quasi-Static Method, IQS-Method Implementation for CFEM Diffusion in Rattlesnake*. Department of Nuclear Engineering, Texas A&M University, College Station, TX, USA. Idaho National Laboratory.