

На правах рукописи

Зборовский Вадим Гарольдович



**РАЗВИТИЕ МОДЕЛЕЙ ПОВЕДЕНИЯ ЯДЕРНОГО ТОПЛИВА
В УСЛОВИЯХ ПОВЫШЕННОГО ВЫГОРАНИЯ, ПЕРЕХОДНЫХ
РЕЖИМОВ И ПРИ ПЕНАЛЬНОМ КОНТРОЛЕ ГЕРМЕТИЧНОСТИ
ОБОЛОЧЕК ТВЭЛОВ**

Специальность 05.13.18

«Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени кандидата
физико-математических наук

Научный руководитель: д. ф.-м. н. Лиханский В.В.

Троицк 2012

Работа выполнена в ФГУП «Государственный научный центр Российской Федерации Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований»

Научный руководитель: доктор физ.-мат. наук, профессор Лиханский В.В.

Официальные оппоненты: доктор физ.-мат. наук, профессор

Чернов Вячеслав Михайлович, ОАО «ВНИИНМ»

кандидат физ.-мат. наук, доцент

Семенов Андрей Юрьевич, ИОФ РАН

Ведущая организация: ОАО «Государственный научный центр – Научно-исследовательский институт атомных реакторов» (ОАО «ГНЦ НИИАР»), г. Димитровград.

Защита состоится 27 декабря 2012 г. в 15 часов 00 минут на заседании диссертационного совета Д212.130.09 в Национальном исследовательском ядерном университете МИФИ по адресу 115409, г. Москва, Каширское шоссе, д.31, тел. (499) 324-84-98, (499) 323-92-56.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке НИЯУ МИФИ.

Автореферат разослан « 26 » _____ ноября _____ 2012 г.

Отзывы на автореферат в двух экземплярах, заверенные печатью организации, просим направлять по вышеуказанному адресу на имя ученого секретаря диссертационного совета.

Ученый секретарь диссертационного совета,
доктор физико-математических наук,
профессор



Леонов А.С.

СПИСОК ИСПОЛЬЗУЕМЫХ СОКРАЩЕНИЙ

АЭС	Атомная электростанция
ВВЭР	Водно-водяной энергетический реактор
ТВЭЛ	Тепловыделяющий элемент
ТВС	Тепловыделяющая сборка
КГО	Контроль герметичности оболочек (ТВЭЛОВ)
ГПД	Газовые продукты деления
СМА	Собственный междоузельный атом
СОДС	Система обнаружения дефектных сборок
TVD	Total variation diminishing, с уменьшением полной вариации (свойство разностных схем)

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. В настоящее время основными требованиями к объектам атомной энергетики является обеспечение их безопасности и в то же время экономической рентабельности. При анализе безопасности атомных электростанций применяется концепция физических барьеров [1], к которым относятся: топливная матрица, оболочка тепловыделяющего элемента (ТВЭЛА), граница контура теплоносителя реактора, контейнмент реакторной установки. Процессы, происходящие в ядерном топливе, реакторных установках и всей АЭС являются достаточно сложными и взаимосвязанными, поэтому для их описания привлекаются компьютерные коды.

В России и за рубежом проводятся работы, направленные на моделирование герметичного и негерметичного ядерного топлива. Объектом моделирования является ТВЭЛ, который включает в себя сердечник из обогащенного диоксида урана, оболочку из циркониевых сплавов и другие конструкционные элементы. Целью моделирования герметичного топлива является установление пределов безопасной эксплуатации ТВЭЛОВ. К числу лимитирующих параметров относится давление газовых продуктов деления под оболочкой ТВЭЛОВ и меха-

нические напряжения в оболочке при ее взаимодействии с топливной таблеткой. Для негерметичного топлива разработаны расчетные средства, решающие задачи оперативной диагностики состояния активной зоны (установление числа и характеристик разгерметизировавшихся ТВЭлов) и прогноза активности в первом контуре АЭС при эксплуатации негерметичных ТВЭлов.

Для увеличения эффективности использования ядерного топлива в настоящее время повышается проектное выгорание топлива, и внедряются эксплуатационные режимы с маневрированием мощностью [2]. В рамках проводимых работ является важным развитие ряда моделей. К таковым относится моделирование UO_2 топлива высокого выгорания. На периферии топливных таблеток в ТВЭлах легководных реакторов при средних по таблетке выгораниях более $40 \text{ МВт} \cdot \text{сут/кгU}$ формируется так называемая рим-структура [3,4], характеризующаяся дроблением исходных зерен и значительным ростом пористости. Изменения микроструктуры влияют на теплофизические и механические свойства топлива в области рим-слоя, а также на выход активности из ТВЭла в случае разгерметизации. Самосогласованная физическая модель процессов, определяющих формирование рим-слоя в UO_2 -топливе, до сих пор отсутствует, несмотря на развитую феноменологию данного явления [4]. Поэтому задача о получении критерия для порога формирования рим-слоя в зависимости от различных параметров топлива и условий облучения, является актуальной.

Другой важной задачей является прогнозирование выхода газовых продуктов деления (ГПД) в переходных режимах облучения топлива, когда ТВЭлы подвергаются кратковременным (от нескольких часов до суток) повышенным тепловым нагрузкам. К механизмам, определяющим ускоренный выход ГПД из кристаллической матрицы в переходных режимах, относится рост зерен UO_2 и дрейф газовых пузырьков в градиенте температуры. Несмотря на то, что в литературе имеются достаточно подробные физические представления о данных процессах, задача разработки и верификации расчетно-теоретических моделей ускоренного выхода газа под оболочку в переходных режимах остается актуальной.

Для повышения радиационной безопасности на АЭС необходимым является развитие методик контроля герметичности оболочек (КГО) твэлов на остановленном реакторе. В настоящее время для российских атомных станций разработана и внедрена усовершенствованная методика пенального КГО с циклированием давления [А1,А2]. Данная методика обладает повышенной чувствительностью по сравнению со штатной методикой КГО, а измерение кинетики выноса активности дает возможность оценивать величину эффективного гидравлического диаметра дефекта в оболочке негерметичного твэла. Знание размера дефекта позволяет прогнозировать активность в первом контуре в случае загрузки негерметичной ТВС. Для обоснования новой методики было необходимо разработать расчетный код, описывающий физические процессы, которые определяют кинетику выноса активности из негерметичного твэла при пенальном КГО.

Таким образом, поставленные выше задачи о поведении герметичных и негерметичных твэлов являются актуальными для корректного моделирования топлива ядерных реакторов и представляют научный и практический интерес.

Целью диссертационной работы является развитие расчетно-теоретических моделей для пороговых условий формирования рим-структуры в UO_2 -топливе и выхода газовых продуктов деления из топлива в условиях переходных режимов, а также разработка моделей и расчетного кода, описывающего вынос активности из дефектного твэла при проведении пенального КГО.

Научная новизна результатов, представленных в диссертации:

1. Разработана расчетно-теоретическая модель поведения точечных дефектов и атомов ГПД вблизи краевой дислокации в условиях низкотемпературного облучения UO_2 .
2. Проведено аналитическое исследование задачи об устойчивости пространственно-однородных распределений точечных и протяженных дефектов кристаллической структуры UO_2 . Получены оценки и параметрические зависимости для временного и пространственного масштабов неустойчивости.

3. Определены условия формирования газовых пузырьков разного размера вблизи краевых дислокаций в облучаемом UO_2 -топливе.
4. Развиты расчетно-теоретические модели, описывающие ускоренный выход ГПД из UO_2 -топлива в переходных режимах: модели роста зерна во внутриреакторных условиях и модель дрейфа газовых пузырьков в градиенте температуры.
5. Разработаны расчетно-теоретические модели, описывающие перенос теплоносителя и радионуклидов под оболочкой твэла в условиях проведения пенального КГО.
6. Создан расчетный код РТОП-КГО, моделирующий вынос активности из дефектного твэла при проведении пенального КГО.

Научная и практическая значимость работы:

1. Разработанные модели микроструктурных изменений UO_2 позволяют повысить предсказательную способность интегральных топливных кодов и целенаправленно проводить разработку новых видов топлива для достижения требуемых свойств в условиях облучения.
2. Развитые модели пороговых условий формирования рим-структуры углубляют понимание основных механизмов, ответственных за начало реструктуризации. Разработанные численные методы могут эффективно применяться для моделирования кинетики точечных и протяженных дефектов в облучаемых материалах.
3. На основе созданного кода РТОП-КГО обоснована методика КГО на остановленном реакторе с циклированием давления, которая обладает повышенной чувствительностью по сравнению с имеющимися методиками пенального КГО и дает возможность оценивать эффективный гидравлический диаметр дефекта в оболочке твэла. Методика внедрена на все российские АЭС с энергоблоками типа ВВЭР и включена в руководящие документы для персонала атомных станций.

Достоверность результатов, полученных в диссертационной работе, подтверждается сравнением расчетов с экспериментальными данными. Модели

микроструктурных изменений в топливе и выхода ГПД в переходных режимах верифицированы на реакторных экспериментах. Код РТОП-КГО верифицирован на экспериментах на стенде ПЕНАЛ, результаты его применения на АЭС подтверждаются послереакторными исследованиями облученных ТВС. Проведено сравнение результатов расчетов с аналитическими тестами, и обоснована сходимость использованных численных схем. Программный код РТОП-КГО аттестован в Федеральной службе по экологическому, технологическому и атомному надзору РФ, получен аттестационный паспорт программного средства № 221 от 21.02.2007.

На защиту выносятся следующие основные положения:

1. Разработан численный метод, который позволяет находить распределения точечных дефектов и атомов ГПД вблизи краевой дислокации в UO_2 для условий низкотемпературного облучения.
2. Формирование пространственно-неоднородных распределений точечных дефектов и атомов ГПД вблизи дислокации может определять пороговые условия формирования рим-структуры.
3. Разработанные модели роста зерен и ускоренного выхода ГПД хорошо описывают поведение UO_2 -топлива с крупным зерном в условиях переходных режимов.
4. Созданный расчетный код РТОП-КГО решает задачу переноса жидкости и растворенных радионуклидов под оболочкой дефектного твэла и определения кинетики выноса активности из негерметичного твэла при пенальном КГО.

Апробация работы. Результаты работы докладывались и обсуждались на 6й, 7й, 8й, 9й международных конференциях “International Conference on WWER Fuel Performance, Modelling and Experimental Support” в Болгарии (2005, 2007, 2009, 2011 гг); на конференциях серии Top Fuel: “Water Reactor Fuel Performance Meeting” (Япония, 2005 г), “International Meeting on LWR Fuel Performance” (Испания, 2006 г, США, 2010 г); на IX Российской конференции по реакторному материаловедению (г. Димитровград, 14-18 сентября 2009 г); на

международном семинаре “NXO International workshop: Radiation Effect and Self-Recovery in Materials” (Япония, 2004 г); на российской научно-технической конференции ОАО «ТВЭЛ» (ОАО ВНИИНМ, 2010 г); на российской межотраслевой научно-технической конференции «Исследовательскому комплексу ИВВ-2М - 45 лет» (Заречный, 2011 г); на российском семинаре «Теория и многоуровневое моделирование дефектов, явлений и свойств материалов ядерной техники – ТММ-2008» (ОАО ВНИИНМ, 2008 г); на российском семинаре «Физика радиационных повреждений материалов атомной техники» (Обнинск, 2004, 2005, 2006, 2009, 2010 гг); семинаре «Физическое моделирование изменения свойств реакторных материалов в номинальных и аварийных условиях» (Дмитровград, 2006, 2009 гг; Троицк, 2005 г).

Публикации. Материалы, вошедшие в диссертацию, опубликованы в 12 печатных работах, из них 5 статей в рецензируемых журналах, 7 докладов, опубликованных в сборниках трудов конференций.

Личный вклад автора состоит в разработке, реализации и сравнении с экспериментами расчетно-теоретических моделей поведения точечных дефектов и газовых продуктов деления в облучаемом UO_2 -топливе (в условиях формирования рим-структуры и в условиях переходных режимов). Автором разработан модуль конвективно-диффузионного переноса и растворения радионуклидов, а также гидравлический модуль (последний совместно с Афанасьевой Е.Ю.) кода РТОП-КГО. Автор проводил верификацию разработанных расчетно-теоретических моделей и кода РТОП-КГО в целом.

Структура и объем диссертации. Настоящая диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка цитируемой литературы. Работа включает в себя 144 страницы, 52 иллюстрации, 5 таблиц и 163 цитирования литературы. Во введении излагаются предпосылки, послужившие выбору темы диссертации, цель проведенного исследования, формулируются научная новизна и практическая значимость представленной работы, положения, выносимые на защиту, список публикаций и личный вклад автора. В первой главе излагаются основные представления, опубликованные в литературе, и использован-

ные в настоящей работе. Во второй главе моделируются пороговые условия формирования рим-структуры в облучаемом UO_2 -топливе, для этого численно решается задача о кинетике точечных дефектов и распределении ГПД вблизи дислокации. Полученные результаты позволяют проанализировать модели неустойчивости Киношита и формирования крупных пересжатых пузырьков в топливе. В третьей главе описаны расчетные модели ускоренного выхода ГПД из UO_2 -топлива в переходных режимах облучения и приведены результаты их применения для условий экспериментов. В четвертой главе излагаются физические и численные модели кода РТОП-КГО, которые описывают массоперенос теплоносителя внутри дефектного твэла, конвективно-диффузионный перенос и растворение радионуклидов. Приведены результаты численных тестов и верификации кода РТОП-КГО на экспериментах, а также примеры его применения.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность выбора темы диссертационной работы, сформулирована цель и научная новизна диссертационной работы, аргументирована научная значимость полученных результатов, а также представлены выносимые на защиту основные результаты и положения, апробация работы, список публикаций и личный вклад автора.

В первой главе проведен анализ литературы, посвященной современному состоянию представлений о поведении UO_2 -топлива в условиях формирования рим-структуры, переходных режимов. Также рассматриваются методики пенального КГО твэлов на остановленном реакторе и основные физические модели процессов в твэле при пенальном КГО. На основании анализа состояния проблем определены цель и задачи настоящей работы, которые решаются в последующих главах.

Вторая глава посвящена моделированию механизмов, определяющих пороговые условия формирования рим-структуры. В частности, рассматривалось развитие неустойчивости однородных распределений точечных дефектов и

дислокаций в облучаемом UO_2 по отношению к образованию периодических пространственных структур (неустойчивость Киношита [5]). Кинетика точечных дефектов и дислокаций описывалась системой уравнений

$$\begin{aligned}\frac{\partial c_v}{\partial t} &= Q - \beta c_i c_v - J_v n_d + D_v \Delta c_v, \\ \frac{\partial c_i}{\partial t} &= Q - \beta c_i c_v - J_i n_d + P n_d + D_i \Delta c_i, \\ \frac{\partial n_d}{\partial t} &= 2\pi c_{disl} a_0^2 (J_i - J_v - P),\end{aligned}\quad (1)$$

где $c_{i,v}$, $D_{i,v}$ – концентрации и коэффициенты диффузии точечных дефектов (СМА и вакансий соответственно); n_d – плотность дислокационных петель; Q – источник френкелевских пар, пропорциональный частоте делений ядер в единице объема ($\dot{F}$); β – константа рекомбинации СМА и вакансий; $J_{i,v}$ – потоки точечных дефектов на единицу длины дислокации; P – поток урановых СМА за счет радиационного перерастворения дислокации; a_0 – параметр решетки UO_2 . Данная система записана в предположении о постоянстве объемной концентрации дислокаций c_{disl} (т.е. зарождения новых петель и разрушения старых не происходит).

Однородное стационарное решение системы (1) исследовалось на устойчивость в линейном приближении по отношению к периодическим пространственным возмущениям. Показано, что неустойчивость развивается при условии

$$\Phi_i < \Phi_v, \text{ где } \Phi_{i,v} = \frac{1}{D_{i,v}} \frac{\partial J_{i,v}}{\partial c_{i,v}}. \quad (2)$$

Максимальное значение ее инкремента

$$\Gamma_{\max} = \left(2k_{\max}^2 D_i D_v + \beta (D_v c_v + D_i c_i) + n_d D_i D_v (\Phi_i + \Phi_v) \right)^{-1} \times \\ \times J_v D_v D_i q (\Phi_v - \Phi_i) \quad (3)$$

достигается при следующем волновом числе:

$$k_{\max} = \sqrt[4]{\Phi_i \Phi_v n_d^2 + \frac{\beta n_d (\Phi_i D_i c_i + \Phi_v D_v c_v) + q J_v (\Phi_i D_i - \Phi_v D_v)}{D_i D_v}}, \quad (4)$$

где $q = 2\pi c_{disl} a_0^2$.

Для определения потоков точечных дефектов на дислокацию решалась задача о поведении точечных дефектов вблизи дислокации с учетом дрейфа в поле механических напряжений, создаваемых дислокацией. Распределения СМА урана и вакансий в квазистационарном приближении описывались системой уравнений

$$\begin{aligned} D_i \Delta c_i + D_i \nabla c_i \cdot \nabla \frac{\Lambda \cos \theta}{r} - \beta c_i c_v + Q &= 0, \\ D_v \Delta c_v - \beta c_i c_v + Q &= 0 \end{aligned} \quad (5)$$

где Λ – «длина дрейфа» СМА в поле механических напряжений дислокации, угол θ отсчитывается от продолжения экстраплоскости дислокации (перпендикулярно ее вектору Бюргерса), r – расстояние от линии дислокации до рассматриваемой точки. Внешние граничные условия для уравнений (5) ставились в соответствии со стационарным решением системы (1).

Для численного решения системы уравнений (5) был разработан метод, основанный на разложении решения в ряд Фурье по угловой переменной. В этом случае уравнение с двумя пространственными переменными сводится к бесконечной системе зацепленных одномерных уравнений для коэффициентов Фурье. При решении этих уравнений выбиралось конечное число угловых гармоник по условию сходимости. Полученная конечная система одномерных дифференциальных уравнений решалась разностным методом на неравномерной сетке.

Результаты расчетов показали, что вблизи дислокации формируется пик в концентрации вакансий. Примеры графиков распределения СМА и вакансий показаны на Рис. 1, 2. «Экранировка» междоузельных атомов пиком в распределении вакансий уменьшает поток СМА. Как следствие, увеличивается поток вакансий на дислокацию, что приводит к выполнению условия (2) и развитию неустойчивости.

Временной и пространственный масштабы неустойчивости достигают следующих значений: $\Gamma_{\max}^{-1} \approx 7 \cdot 10^7$ с; $2\pi k_{\max}^{-1} \approx 4 \cdot 10^{-6}$ см, что близко к экспериментально наблюдаемому времени развития неустойчивости – порядка года и про-

пространственному размеру субзерна в полигонизованной области – порядка 0.1 микрона.

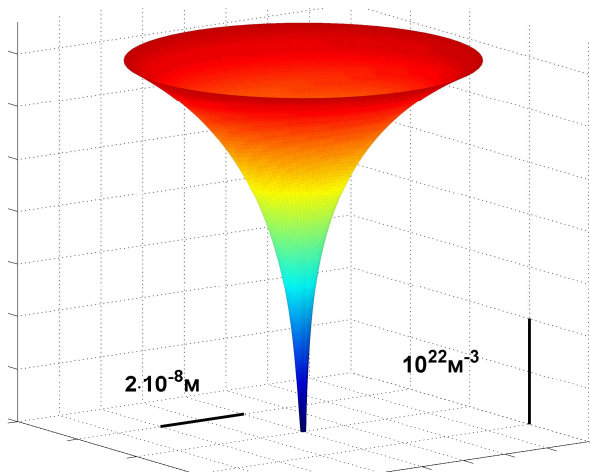


Рис. 1. Распределение СМА вблизи дислокации.

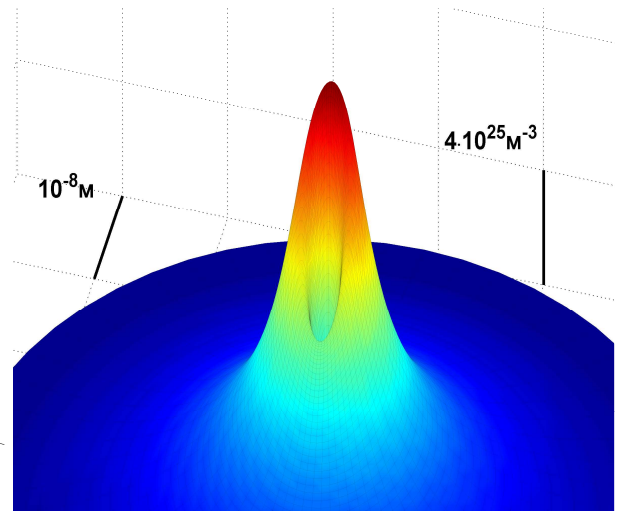


Рис. 2. Пик в распределении вакансий, $c_v^{\max} = 2.3 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$.

Расчеты для инкремента неустойчивости проводились при различных значениях параметров: частоты делений $\dot{F}$ и плотности дислокаций n_d в UO_2 -топливе. Результаты показаны на Рис. 3. Получающаяся пропорциональная зависимость от $\dot{F}$ и растущая зависимость от n_d качественно соответствуют экспериментальным данным.

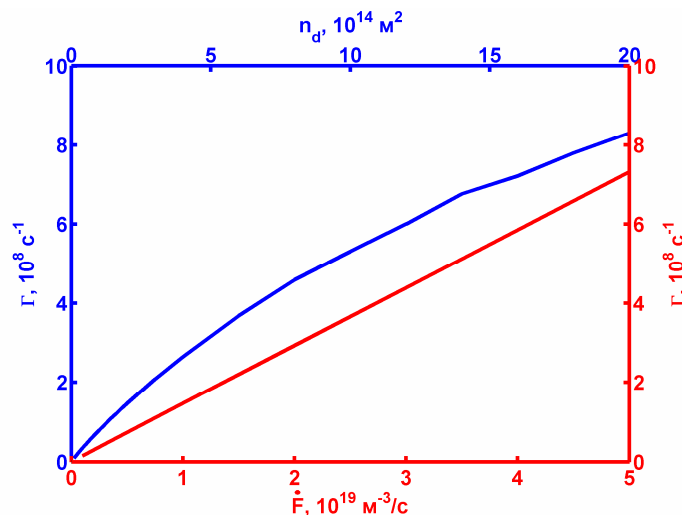


Рис. 3. Зависимость инкремента неустойчивости от частоты делений и плотности дислокаций.

Рассмотрен также другой пороговый механизм реструктуризации топлива: формирование крупных газовых пузырьков вблизи дислокаций. Согласно гетерогенной модели нуклеации газовых пузырьков в шпорах [6], радиус зарождающихся пузырьков определяется локальной концентрацией Хе в матрице: $r_b = r_{sp} (\Omega_{Xe} c_{Xe})^{1/3}$, где $r_{sp} = 5 \cdot 10^{-7}$ см – радиус шпоры [6], а $\Omega_{Xe} = 8.5 \cdot 10^{-23}$ см³ – объем атома ксенона [7]. Поэтому проводилось самосогласованное моделирование поведения ГПД и точечных дефектов вблизи дислокации. Считалось, что газовые атомы находятся в междоузельном состоянии и в виде комплексов атом ГПД+вакансия. Для них учитывался дрейф в поле механических напряжений дислокации, радиационное выбивание атомов Хе из вакансий с частотой α и захват междоузельных атомов Хе вакансиями с константой рекомбинации β_{Xe} . Система уравнений, описывающая пространственные распределения концентраций точечных дефектов и атомов ГПД, имеет вид:

$$Q - \beta_i c_i c_v + \operatorname{div} \left(D_i \nabla c_i + D_i c_i \nabla \frac{\Lambda \cos \theta}{r} + \vec{u} c_i \right) - z_i c_i = 0 \quad (6)$$

$$Q - \beta_i c_i c_v + \operatorname{div} (D_v \nabla c_v + \vec{u} c_v) - z_v c_v + \alpha c_{Xe,v} - \beta_{Xe} c_{Xe,i} c_v = 0$$

$$\alpha c_{Xe,v} - \beta_{Xe} c_{Xe,i} c_v + \operatorname{div} \left(D_{Xe,i} \nabla c_{Xe,i} + D_{Xe,i} c_{Xe,i} \nabla \frac{\Lambda \cos \theta}{r} + \vec{u} c_{Xe,i} \right) = 0 \quad (7)$$

$$-\alpha c_{Xe,v} + \beta_{Xe} c_{Xe,i} c_v + \operatorname{div} (D_{Xe,v} \nabla c_{Xe,v} + \vec{u} c_{Xe,v}) = 0$$

$$\int_{r_0}^R \int_0^{2\pi} (c_{Xe,i} + c_{Xe,v}) r dr d\theta = \bar{c}_{Xe} \cdot \pi (R^2 - r_0^2). \quad (8)$$

В уравнениях учитывается снос точечных дефектов и атомов ГПД на движущуюся со скоростью $\vec{u}$ дислокацию. Система (6)-(8) является квазистационарной. В качестве внешних параметров задаются средняя концентрация ГПД $\bar{c}_{Xe}$ и эффективные стоки $z_{i,v}$ для моделирования средних концентраций точечных дефектов в различных областях зерна и при различных выгораниях.

Результаты расчета показывают, что перед дислокацией формируется пик в распределении Хе. Дислокация движется справа налево и, как видно из примера на Рис. 4, «сгребает» подобно плугу атомы ГПД. Для сравнения с эксперимен-

тами [8,9] радиусы пузырьков рассчитывались при различных средних концентрациях ГПД и отношениях c_v/c_i , что можно связать с различными выгораниями и областями зерна. Измеренные данные хорошо согласуются с результатами расчета (Рис. 5), кроме пузырька большого радиуса при выгорании 90 МВт·сут/кгU, которое превышает порог формирования рим-слоя.

Полученные в данной главе результаты опубликованы в работах [А3-А7].

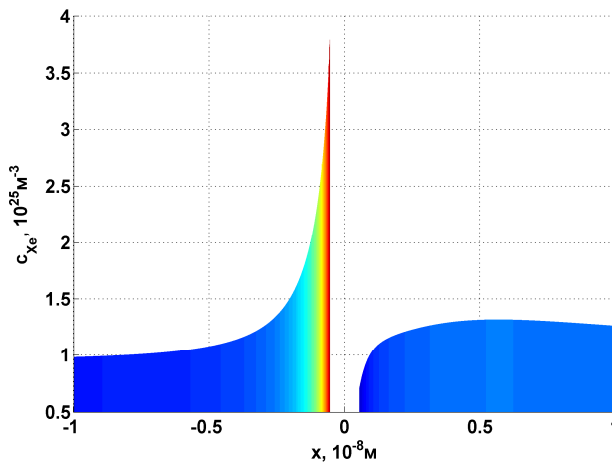


Рис. 4. Профиль концентрации Хе вдоль линии, перпендикулярной линии дислокации и вектору Бюргерса.

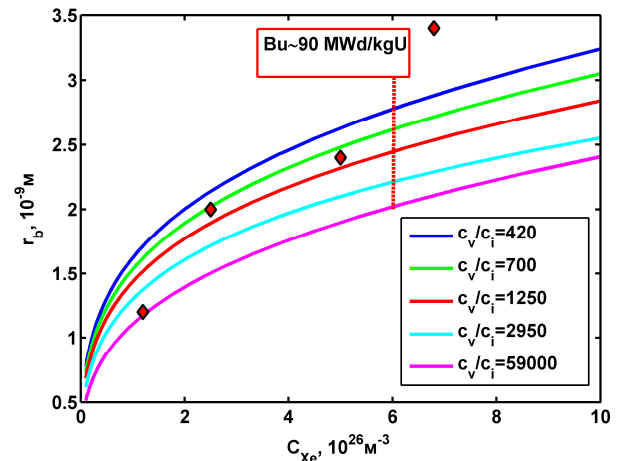


Рис. 5. Сравнение рассчитанных радиусов внутризеренных пузырьков с экспериментальными данными.

Третья глава посвящена моделированию ускоренного выхода ГПД и микроструктурных изменений в UO_2 топливе в условиях переходных режимов.

Одним из механизмов, дающих вклад в выход ГПД в условиях переходных режимов, является «заметание» атомов газа движущимися межзеренными границами при росте зерен. На базе моделей [10,11], описывающих рост зерна во вне реакторных и внутри реакторных условиях, построена новая модель для топлива с укрупненным зерном и легирующими добавками. Она основана на физических представлениях работы [11]: рост зерен ограничивается разупорядоченными областями кристаллической матрицы вблизи границы зерна, которые действуют аналогично включениям. Разупорядоченные области образуются при взаимодействии с осколками деления, затем отжигаются в соответствии с диффузионным механизмом (поверхностная или объемная самодиффузия урана).

Уравнение для скорости роста зерен согласно новой модели имеет вид:

$$\frac{da}{dt} = g(T, x) \cdot K(T) \left(\frac{1}{a \left(1 + \frac{a}{g(T, x) a_{ir}(T, \dot{F})} \right)} - \frac{1}{a_{th}(T)} \right). \quad (9)$$

Здесь зависимости $K(T)$ и $a_{th}(T)$ взяты из работы [10], а $a_{ir}(T, \dot{F})$ – из работы [11]. Поправка g отвечает за легирующие добавки в топливе. Данное уравнение переходит в модель [11] при отсутствии легирующих добавок в топливе ($g = 1$) и для случая малых начальных зерен (при условии $a/a_{ir} < 1$).

Максимальный размер зерна в условиях облучения равен

$$a_{\max} = g \left(\sqrt{a_{ir}^2 / 4 + a_{th} a_{ir} / g} - \frac{1}{2} a_{ir} \right) \approx \sqrt{g \cdot a_{th} a_{ir}}. \quad (10)$$

Для численного решения уравнения (9) с переменной историей облучения (параметрами $T, \dot{F}$) применялась неявная схема 1го порядка. Шаг по времени выбирался автоматически, чтобы обеспечить требуемую точность для размера зерна.

Рост зерен приводит к выходу ГПД из матрицы UO_2 в результате эффекта "заметания" газа межзеренной границей. Количество газа, вышедшего из зерен UO_2 , находится из балансных условий и пропорционально приращению объема зерна (объему, на который уменьшились окружающие зерна). Профиль внутризеренной концентрации ГПД изменяется в соответствии с уравнением

$$\frac{\partial C_g(r)}{\partial t} = - \frac{3}{a} \left(\frac{da}{dt} \right) C_g(r). \quad (11)$$

Высвобождающийся газ выходит на границы зерна.

Для условий облучения с быстрым подъемом линейной мощности вдоль радиуса топливной таблетки устанавливается температурный профиль с большим градиентом температуры. В этом случае также может происходить ускоренный выход ГПД за счет дрейфа газовых пузырьков в градиенте температуры. На основе имеющихся физических представлений [12] развита модель для скорости направленного движения пузырька в градиенте температур по меха-

низму диффузии атомов урана по поверхности пузырька. В этом случае параметрическая зависимость для скорости дрейфа пузырьков имеет вид:

$$v_b = AD_{s0} \exp\left(-\frac{E_s}{RT}\right) \frac{a_0}{r_b} \frac{E_s}{RT} \frac{|\nabla T|}{T}. \quad (12)$$

В модели использована безразмерная константа $A=0.1$ и корреляция [13] для коэффициента поверхностной диффузии с предэкспоненциальным множителем $D_{s0}=4 \cdot 10^8$ см²/с и энергией активации $E_s=548.05$ кДж/моль.

Изменение внутризеренной концентрации ГПД за счет дрейфа пузырьков описывается уравнением, аналогичным (11):

$$\frac{\partial C_g(r)}{\partial t} = -\frac{6}{a} v_b C_{g,b}(r). \quad (13)$$

где $C_{g,b}$ – концентрация газа, находящегося в пузырьках.

Рассмотренные модели были включены в код РТОП и верифицированы на экспериментах Risø3, HBER, INTER-RAMP, SUPER-RAMP. Для примера, на Рис. 6 показано сравнение расчетных и измеренных данных по размеру зерна и концентрации Хе для твэла GE2 из проекта Risø3. На Рис. 7 показано сравнение расчетных и экспериментальных данных по интегральному выходу ГПД для проектов Risø3, INTER-RAMP, SUPER-RAMP. Как можно видеть, разработанные модели ускоренного выхода ГПД позволяют адекватно описать результаты экспериментов в условиях переходных режимов. Результаты данной главы опубликованы в работах [A7-A10].

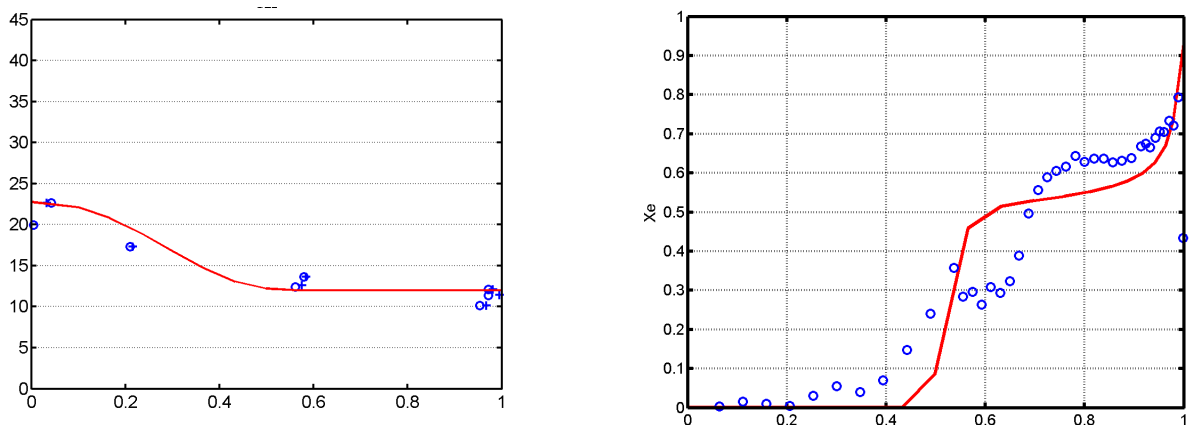


Рис. 6. Размер зерен, мкм (слева); концентрация Хе, вес. % (справа) в зависимости от g/g_0 в таблетке для твэла GE2. — расчет, ● — эксперимент.

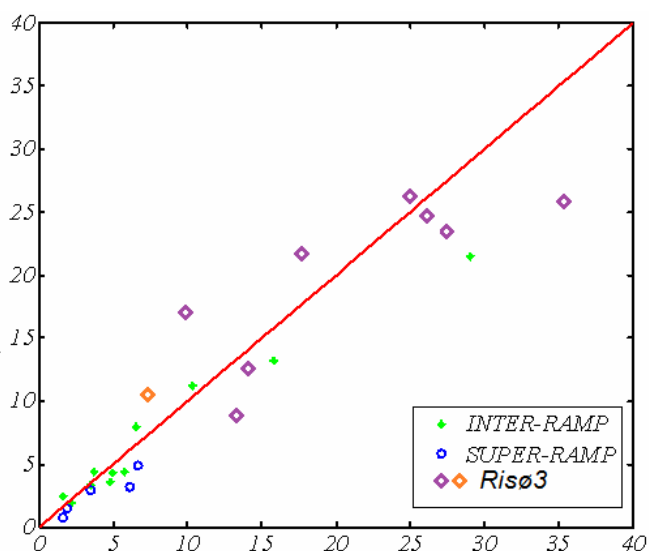


Рис. 7. Сравнение расчетного (по вертикали) и измеренного (по горизонтали) выхода ГПД в экспериментах INTER-RAMP, SUPER-RAMP, Risø3. — $T_{calc} = T_{exp}$.

В четвертой главе рассмотрены физические и расчетные модели кода РТОП-КГО, описывающего вынос активности из негерметичного твэла при проведении пениального КГО. Код моделирует массоперенос теплоносителя под оболочкой дефектного твэла, конвективно-диффузионный перенос и растворение радионуклидов. Входными параметрами являются геометрические параметры твэла и зависимость от времени давления в пенале СОДС. Основные выходные параметры кода — зависимость от времени массы (количества частиц) радиоактивных примесей, вынесенных в контур СОДС, и давления в газовом компенсационном объеме твэла. Расчетная область кода РТОП-КГО включает в себя зазор между топливом и оболочкой, поперечные каналы, образованные межтаблеточными зазорами и горизонтальными трещинами в топливных таблетках, центральное отверстие, а также компенсационный газовый объем.

Перенос жидкости в твэле описывается в гидравлическом приближении, по аналогии с протеканием тока в некоторой эквивалентной электрической схеме (Рис. 8). Вычисление полей скоростей и давлений в твэле сводится к решению системы алгебраических уравнений, включающей закон сохранения массы жидкости в каждой расчетной ячейке, и уравнения связи потоков жидкости между ячейками с перепадами давления в них.

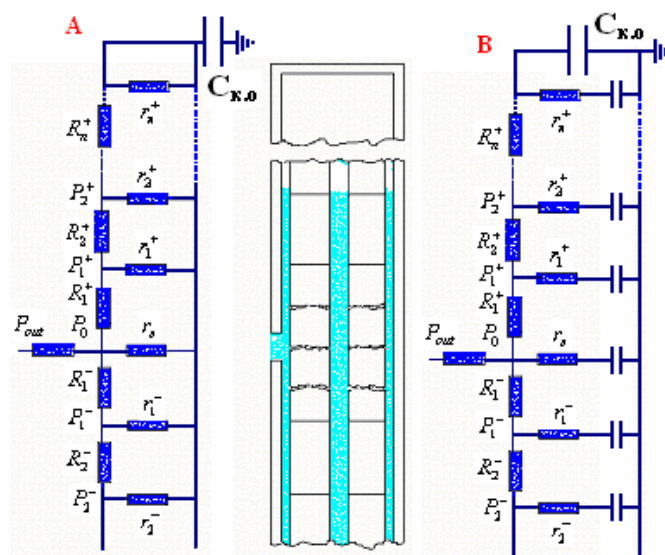


Рис. 8. Эквивалентные электрические схемы, для расчета гидравлики теплоносителя внутри дефектного ТВЭЛ. А - ТВЭЛ с таблетками, имеющими центральное отверстие, В – ТВЭЛ с таблетками без центрального отверстия.

Конвективно-диффузионный перенос концентрации растворенных нуклидов под оболочкой ТВЭЛ моделируется в квазиодномерной постановке в соответствии с вычисленными полями потоков и скоростей жидкости. Рассматривается перенос концентрации в зазоре топливо-оболочка, центральном канале и перетечки между ними через межтаблеточные зазоры и компенсационный объем, а также вынос нуклидов через дефект. Коэффициенты эффективной диффузии вычисляются с учетом молекулярной составляющей и дополнительного перемешивания, которое реализуется в каналах с неоднородным распределением скоростей благодаря поперечной диффузии [14].

Задача о переносе примеси под оболочкой ТВЭЛ решается методом расщепления по процессам. Перенос концентрации в зазоре топливо-оболочка и центральном канале рассчитывается с использованием TVD-схем [15]. Данный метод не дает существенной численной диффузии и не приводит к возникновению численных пространственных осцилляций концентрации.

Расчетные модели кода РТОП-КГО валидированы на численных и аналитических тестах, которые показали сходимость использованных методов, причем оцененный порядок сходимости при дроблении пространственной сетки оказывается почти квадратичным. Для примера на Рис. 9 показано сравнение

расчетного и аналитического решения в тесте о расплывании «ступенчатого» профиля концентрации растворенных нуклидов.

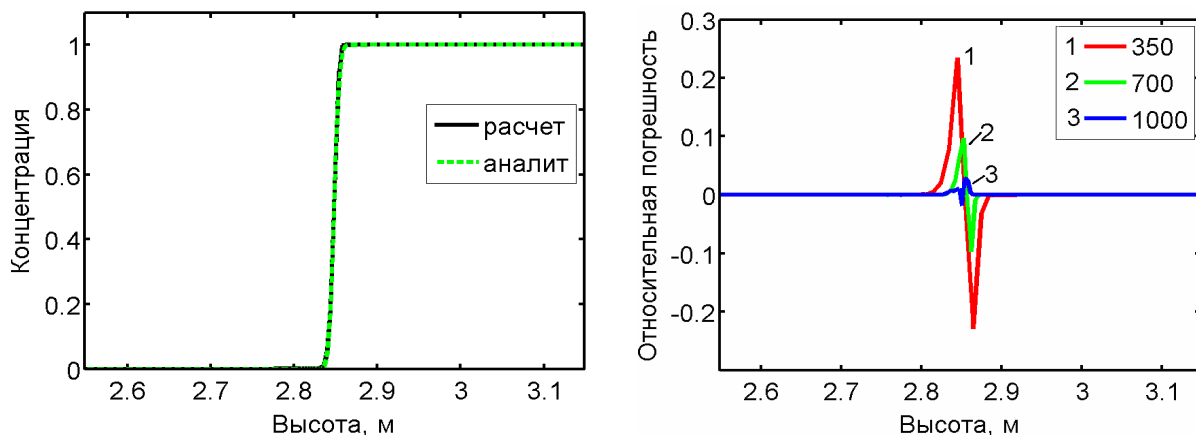


Рис. 9. Сравнение аналитического решения с расчетным для профиля концентрации примеси в центральном канале при $D=3 \cdot 10^{-5} \text{ см}^2/\text{с}$.

Код РТОП был верифицирован на экспериментах, выполненных с имитаторами дефектных твэлов на стенде ПЕНАЛ [14]. На Рис. 10 показан пример сравнения измеренных и расчетных данных по давлению в газовом объеме и выносу растворенного вещества. Наблюдается хорошее согласие между экспериментальными и рассчитанными значениями. По итогам верификации код РТОП-КГО был аттестован в надзорных органах РФ.

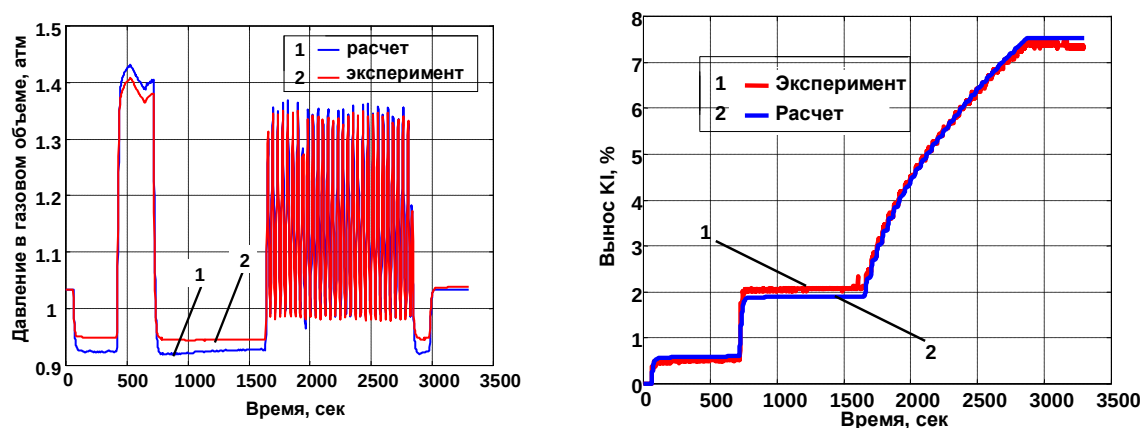


Рис. 10. Сравнение экспериментального и расчетного давления в газовом объеме модельного дефектного твэла (слева), выноса соли KI (справа) для топлива с центральным отверстием.

Применение расчетного кода РТОП-КГО и методики с циклированием давления позволяет оценивать эффективный гидравлический диаметр дефекта.

Методика базируется на измерениях кинетики выноса активности из дефектного твэла при циклировании давления в пенале СОДС. Одним из методов оценки является построение карт (семейства нормированных кривых) кинетических зависимостей выноса активности в зависимости от размера дефекта. Для оценки размера дефекта в оболочке твэла измерения активности сопоставляются с кривыми на соответствующих картах. На Рис. 11 показан пример апробации данной методики на экспериментальном стенде ПЕНАЛ для дефекта 70 мкм. Линии 1-4 соответствует эквивалентным гидравлическим диаметрам дефекта 30, 50, 70, 120 мкм, точки – экспериментальным данным. На Рис. 12 показан пример карт кинетических зависимостей для модернизированного топлива ВВЭР после 1 года эксплуатации. Кривые, изображенные на Рис. 12, соответствуют эквивалентным гидравлическим диаметрам дефекта 30, 35, 40, 55, 70, 80, 100, 120 мкм, соответственно. В настоящее время методика с циклированием давления включена в Руководящие Документы концерна «Росэнергоатом» и внедрена на все российские энергоблоки с реакторами ВВЭР.

Результаты данной главы опубликованы в работах [A1,A2,A11,A12].

В заключении приведены основные результаты диссертации и выводы.

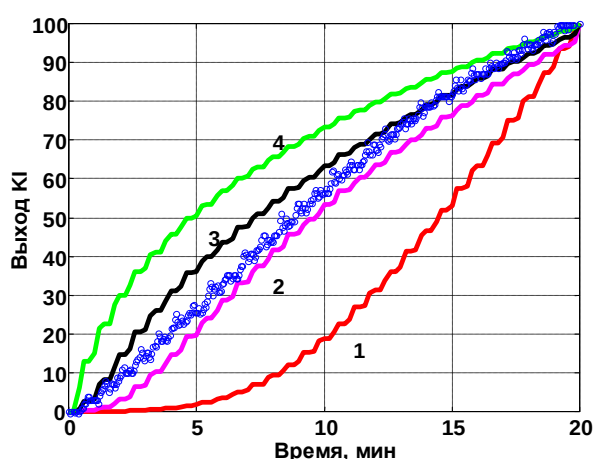


Рис. 11. Сравнение карт кинетических зависимостей для стенда ПЕНАЛ (дефект сверху) с экспериментальными данными.

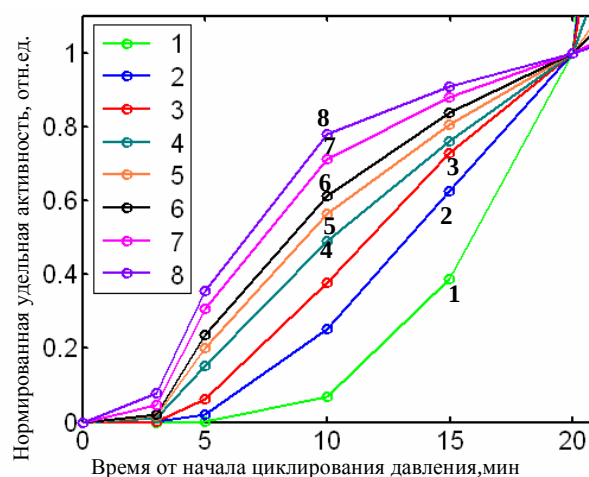


Рис. 12. Карты кинетических зависимостей для модернизированного топлива ВВЭР после 1 года эксплуатации.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ РАБОТЫ

Данная работа посвящена развитию расчетно-теоретических моделей для UO_2 -топлива в условиях повышенного выгорания, переходных режимов, а также пенального КГО на остановленном реакторе типа ВВЭР. Были получены следующие основные результаты:

1. Разработан и реализован эффективный численный метод решения задачи о кинетике точечных дефектов и атомов газовых продуктов деления вблизи краевой дислокации для условий низкотемпературного облучения UO_2 . Метод основан на представлении приближенного решения частичной суммой ряда Фурье по угловой переменной.

2. Проведено аналитическое и численное исследование условий, при которых однородные распределения точечных дефектов и дислокаций в облучаемом UO_2 неустойчивы по отношению к образованию периодических пространственных структур (неустойчивость Киношита). Характерные масштабы неустойчивости и их параметрические зависимости находятся в качественном согласии с экспериментальными данными по характеристикам рим-структуры в UO_2 -топливе.

3. Исследовано поведение атомов ГПД вблизи краевой дислокации. Показана возможность приоритетного формирования крупных газовых пузырьков вблизи ядра дислокации. Вычисленные размеры газовых пузырьков находятся в согласии с измерениями микроструктуры UO_2 -топлива.

4. Развита расчетно-теоретические модели, описывающие ускоренный выход ГПД из UO_2 -топлива в условиях переходных режимов: модель роста зерна во внутриреакторных условиях для топлива с большим начальным размером зерна и легирующими добавками, а также модель дрейфа газовых пузырьков в градиенте температуры. Результаты расчетов по моделям согласуются с измеренными данными.

5. Разработаны расчетные модели, описывающие массоперенос теплоносителя, перенос и растворение радионуклидов в дефектном твэле в условиях про-

ведения пенального КГО. Для решения задач конвективно-диффузионного переноса используются TVD-схемы. Модели валидированы на аналитических и численных тестах.

6. Создан код РТОП-КГО, который решает задачу расчета выноса активности из негерметичного твэла при проведении пенального КГО на АЭС с ВВЭР. Код РТОП-КГО верифицирован на стендовых экспериментах и аттестован в надзорных органах РФ.

7. Применение кода РТОП-КГО совместно с методикой циклирования давления позволяет оценивать эффективный гидравлический диаметр дефекта в твэле при проведении пенального КГО на остановленном реакторе.

Данные по экспериментальным проектам Risø3, HBER, INTER-RAMP, SUPER-RAMP получены в рамках совместного международного исследовательского проекта “FUMEX-III”, организованного МАГАТЭ.

ПУБЛИКАЦИИ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

- A1. Likhanskii V., Afanasieva E., Efremov N., Evdokimov I., Kirilenko D., Khromov A., Sorokin A., Svtin P., Zborovskii V., Sharikov A. Development of defect size determination procedure in a cask of WWER defective assembly detection system. //Proc. 6th Int. Conf. on WWER Fuel Performance, Modelling and Experimental Support. 19-23 September 2005, Albena, Bulgaria. Pp. 117-124.
- A2. Likhanskii V., Evdokimov I., Zborovskii V., Kanukova V., Sorokin A., Taran M., Ugrumov A., Riabinin Yu. Development and using computer codes for improvement of defect assembly detection on Russian WWER NPPs. //Proc. 8th Int. Conf. on WWER Fuel Performance, Modelling and Experimental Support. 26 September-4 October 2009, Helena Resort, Bulgaria. Pp. 148-157.
- A3. Likhanskii V., Zborovskii V. On possible mechanisms of rim-layer formation in the high-burnup UO_2 fuel. //Proc. 6th Int. Conf. on WWER Fuel Performance,

Modelling and Experimental Support. 19-23 September 2005, Albena, Bulgaria. Pp. 339-344.

- A4. Likhanskii V., Zborovskii V. Modeling of threshold conditions for beginning of rim formation in high burnup UO_2 fuel. //Proc. 2005 Water Reactor Fuel Performance Meeting. 2-6 October, 2005, Kyoto, Japan. Pp. 1149-1160.
- A5. Лиханский В.В., Зборовский В.Г. Исследование устойчивости пространственных распределений дефектов кристаллической структуры при облучении UO_2 -топлива высокого выгорания. //ВАНТ. Серия «Материаловедение и новые материалы». 2006. Т. 66. С. 120-128.
- A6. Likhanskii V.V., Zborovskii V.G. On stability of spatial distributions of crystal structure defects in irradiated high burnup UO_2 fuel. //J. Nucl. Mater. 2006. Vol. 350. Pp. 1-8.
- A7. Лиханский В. В., Алиев Т.Н., Евдокимов И.А., Зборовский В.Г., Канюкова В.Д., Сорокин А.А. Моделирование поведения UO_2 топлива для условий эксплуатации в легководных реакторах. //Ядерная физика и инжиниринг. 2010, Т. 2. С. 104-122.
- A8. Zborovskii V., Aliev T., Evdokimov I., Sorokin A., Likhanskii V. Simulation of fuel microstructure changes and fission gas release for transient conditions in the Risø3 experiments using the RTOP Code. //Proc. 8th Int. Conf. on WWER Fuel Performance, Modelling and Experimental Support. 26 September-4 October 2009, Helena Resort, Bulgaria. Pp. 339-346.
- A9. Likhanskii V.V., Aliev T.N., Evdokimov I.A., Kanukova V.D., Sorokin A.A., Zborovskii V.G. Simulation of fuel rod behavior by the RTOP code for transient experiments. //Proc. 2010 Int. Meeting on LWR Fuel Performance. Orlando, Florida, USA, September 26-29, 2010. Pp. 336-344.
- A10. Zborovskii V.G., Likhanskii V.V., Aliev T.N., Evdokimov I.A., Sorokin A.A., Kanukova V.D., Maslova L.A., Kolesnik M.Yu. Simulation of high burnup fuel rods under nominal and transient conditions with the RTOP code. //Proc. 9th Int.

Conf. on WWER Fuel Performance, Modelling and Experimental Support. 17-24 September 2011, Helena Resort, Bulgaria. Pp. 365-373.

A11.Зборовский В.Г., Лиханский В.В., Евдокимов И.А., Афанасьева Е.Ю., Ефремов Н.М., Кириленко Д.А. Моделирование выноса радионуклидов при контроле герметичности тепловыделяющих элементов на остановленном реакторе. //Мат. Моделирование. 2011. Т. 23. №7. С. 145-160.

A12.Иванов Н.А., Лиханский В.В., Зборовский В.Г., Сорокин А.А. Оценка эффективного гидравлического диаметра дефектов негерметичных ТВЭЛОВ по результатам контроля герметичности оболочек с циклированием давления с применением расчетных кодов РТОП-СА и РТОП-КГО. //Тяжелое машиностроение. 2011. №7. С. 31-37.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Машиностроение. Энциклопедия / Ред.совет: Фролов К.В. (пред.) и др. М.: Машиностроение. Машиностроение ядерной техники. Т.IV-25. В 2-х кн. Кн.1 Адамов Е.О., Драгунов Ю.Г., Орлов В.В. и др. Под общ.ред. Адамова Е.О. 2005.
2. Molchanov V. Nuclear fuel for WWER reactors: actual state and trends. //Proc. 8th Int. Conf. on WWER Fuel Performance, Modelling and Experimental Support. 26 September-4 October 2009, Helena Resort, Bulgaria. Pp. 43-55.
3. Rondinella V.V., Wiss T. The high burn-up structure in nuclear fuel. //Materials Today. 2010. Vol. 13. Issue 12. Pp. 24-32.
4. Baron D., Kinoshita M., Thevenin P., Largenton R. Discussion about HBS transformation in high burn-up fuels. //Nucl. Eng. Tech. 2009. Vol. 41. No. 2. Pp. 199-214.
5. Kinoshita M.. Towards the mathematical model of rim structure formation. //J. Nucl. Mater. 1992. Vol. 248. Pp. 185-190.

6. Turnbull J.A. The distribution of intragranular fission gas bubbles in UO_2 during irradiation. //J. Nucl. Mater. 1971. Vol. 38. Pp.203-212.
7. Физические Величины: Справочник. /под ред. И.С.Григорьева и Е.З.Мейлихова. М.: Энергоатомиздат, 1991.
8. Nogita K., Une K. Irradiation-induced recrystallization in high burnup UO_2 fuel. //J. Nucl. Mater. 1995. Vol. 226. Pp. 302-310.
9. Kashibe S., Une K., Nogita K. Formation and growth of intragranular fission gas bubbles in UO_2 fuels with burnups of 6-83 GWd/t. //J. Nucl. Mater. 1993. Vol. 206. Pp. 22-34.
10. Ainscough J.B., Oldfield B.W., Ware J.O. Isothermal grain growth kinetics in sintered UO_2 pellets. //J. Nucl. Mater. 1973/1974. Vol. 49. Pp. 117-128.
11. Курчатov С.Ю., Лиханский В.В., Хоружий О.В. Новая модель равноосного роста зерен диоксида урана в условиях облучения. //Атомная Энергия. 1998. Т. 84. № 4. С. 329-334.
12. Olander D.R. Fundamental aspects of nuclear reactor fuel elements. TID-26711-P1. US Technical Information Center, Springfield, VA, 1976.
13. Hodkin E.N., Nicholas M.G. Surface and interfacial properties of stoichiometric uranium dioxide. //J. Nucl. Mater. 1973. Vol. 47. Pp. 23-30.
14. Лиханский В.В., Ефремов Н.М., Кириленко Д.А. и др. Экспериментальные вне реакторные исследования по моделированию процессов массопереноса для развития методик контроля герметичности оболочек ТВЭЛов реакторов ВВЭР. //ВАНТ. Серия «Обеспечение безопасности АЭС». 2006. Вып. 15. С. 145-157.
15. Куликовский А.Г., Погорелов Н.В., Семенов А.Ю. Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001.