

Nghiên cứu tính toán cháy cho bó nhiên liệu LEU sử dụng chương trình MCNP6 và SRAC

Nguyễn Hữu Tiệp, Nguyễn Thị Dung, Trần Việt Phú và Trần Vĩnh Thành
Viện Khoa học và Kỹ thuật hạt nhân, Viện Năng lượng nguyên tử Việt Nam

Tóm tắt:

Tính toán cháy nhiên liệu tuy là một bài toán kinh điển trong vật lý lò phản ứng, nhưng vẫn còn nhiều mới mẻ để khai thác. Đặc biệt, với cấu hình máy tính ngày càng phát triển thì phương pháp Monte Carlo có thể thích hợp hơn so với phương pháp tất định cổ điển do đặc thù của phương pháp ngẫu nhiên phụ thuộc vào cấu hình máy tính. Tuy nhiên, để đưa ra kết luận cuối cùng về vấn đề này, nhiều nghiên cứu sâu hơn cần được thực hiện. Trong nghiên cứu này, bài toán cháy nhiên liệu được thực hiện sử dụng cả hai phương pháp nêu trên. Để chuẩn hóa mô hình tính toán ba bài toán đã được thực hiện: lựa chọn phương pháp tối ưu hiệu chỉnh nhiệt độ chính xác trong MCNP6 (vấn đề mà các phiên bản trước chưa thực hiện được); bài toán tối ưu hóa số vùng cần chia của một thanh nhiên liệu U-Gd (do hiệu ứng che chắn của nhiên liệu chứa Gd); bài toán chuẩn cho bó nhiên liệu LEU (dùng để chuẩn hóa cả hai chương trình MCNP6 và SRAC). Cụ thể, các thông số đã được tính toán và so sánh như là hệ số nhân vô hạn, nồng độ các đồng vị trong nhiên liệu và hiệu ứng che chắn của thanh nhiên liệu chứa Gadolinium. Mục đích của nghiên cứu này là lựa chọn ra phương pháp tối ưu hiệu chỉnh nhiệt độ chính xác trong MCNP6 và kiểm tra tính đúng đắn của mô hình MCNP6 và SRAC để có thể ứng dụng vào các nghiên cứu tính toán cháy nhiên liệu cho vùng hoạt về sau.

Từ khóa: MCNP6, SRAC, bài toán chuẩn, tính toán cháy nhiên liệu

I. GIỚI THIỆU

Tính toán cháy nhiên liệu là một trong những công việc rất quan trọng để đánh giá, thiết kế, kiểm tra nhiên liệu trong lò phản ứng hạt nhân, ngoài ra nó còn đưa ra các thông tin quan trọng liên quan tới vật lý lò để phục vụ cho việc thiết kế vùng hoạt và nhiên liệu lò phản ứng hạt nhân. Việc tính toán cháy nhiên liệu không chỉ ứng dụng cho việc thiết kế vùng hoạt, mà còn có thể ứng dụng trong lĩnh vực an toàn bức xạ với việc phân tích và đánh giá bể lưu trữ nhiên liệu đã qua sử dụng hoặc phân tích số hạng nguồn (sản phẩm quá trình cháy) để làm thông số đầu vào cho các phân tích phát tán phóng xạ khi có sự cố của các nhà máy điện hạt nhân gần Việt Nam.

Hiện tại, bài toán tính cháy nhiên liệu cũng là một trong những bài toán quan trọng của Trung tâm Năng lượng hạt nhân. Bằng việc sử dụng các chương trình tính toán khác nhau, thư viện số liệu cập nhật, các kết quả tính toán đã được so sánh và xác nhận là có độ phù hợp tốt và có thể đánh giá được cho các

bài toán phức tạp hơn. Do đó, nghiên cứu này trình bày việc chuẩn bị dữ liệu, sử dụng các chương trình tính toán một cách triệt để cho việc thực hiện bài toán tính cháy, với mục đích duy trì đội ngũ nhân lực tính toán vật lý lò phản ứng đối với Trung tâm Năng lượng hạt nhân, Viện Khoa học và Kỹ thuật hạt nhân, Viện Năng lượng Nguyên tử Việt Nam.

Cho đến nay, đã có nhiều công bố về tính toán cháy sử dụng phương pháp Monte-Carlo kết hợp với các chương trình tính toán cháy riêng biệt và tạo thành vòng lặp tính toán như MOCUP (Moor, 1995), MONTEBURNS (Trellue, 1999), MCODE (Zhiwen Xu, 2002), MCORE (Meiyin Zheng, 2013). Hoặc sử dụng các chương trình tính toán cháy để tích hợp vào chương trình tính toán vật lý và tính toán cháy nhiên liệu MVP-BURN (Okumura, K. et al., 2005), BURNCAL (Edward J. Parma, 2002), MCNP6 (Denise B. Pelowitz, 2013). Phương pháp Monte Carlo có ưu điểm là có thể mô phỏng được hình học và vật liệu phức tạp, và có thể khảo sát được thông lượng bất đẳng hướng, tuy nhiên vấn đề mà tất cả các chương trình tính toán sử dụng phương pháp Monte Carlo đều gặp phải hiện nay đó là yêu cầu thời gian tính toán lớn và tốn tài nguyên của máy tính. Ngoài ra, vấn đề rất quan trọng mà ít được đề cập tới trong các nghiên cứu nêu trên đó là xử lý số liệu cho thư viện nhiệt độ trong tính toán sử dụng phương pháp ngẫu nhiên. Để xử lý thư viện nhiệt độ cho bài toán tính cháy, chương trình NJOY được sử dụng cho các tính toán dùng các phiên bản cũ hơn MCNP6. Tuy nhiên, phương pháp này là không hữu dụng với các bài toán nhiều vật liệu. Để giải quyết điều này, nhóm tác giả đã dung phương pháp tạo thư viện OTF trong MCNP6 để có thể tính toán được tại nhiệt độ bất kỳ, cụ thể sẽ được trình bày trong phần II.

Các chương trình tính toán cháy sử dụng phương pháp tất định đã được sử dụng rất nhiều trong những năm trước đây như EXCEL (L.Thilagam et al., 2009), SCALE (L.Mercatali et al., 2015) hay VISWAM (Suhail Ahmad Khan, et al., 2016)... Có ưu điểm là thời gian tính toán nhanh, mô hình đơn giản và độ chính xác đảm bảo, phương pháp tất định rất hữu ích khi thiết kế vùng hoạt cho lò phản ứng hạt nhân. Vì khi tính toán hàng nghìn câu hình vùng hoạt, đòi hỏi chương trình phải có thời gian tính toán nhanh và độ chính xác đảm bảo. Tuy nhiên, phương pháp tất định gặp phải sai số khi phải thực hiện nhiều phép xấp xỉ như tiết diện nhiều nhóm, đồng nhất hóa hình học và vật liệu, giới hạn bởi hình học cho trước và các hệ thống có chứa chất hấp thụ mạnh (điểm yếu của lý thuyết khuếch tán).

Trong nghiên cứu này chương trình SRAC và MCNP6 được sử dụng như là hai đại diện tiêu biểu của chương trình tính toán sử dụng phương pháp tất định và Monte Carlo. Đầu tiên, bài toán lựa chọn phương pháp tối ưu hiệu chỉnh nhiệt độ chính xác trong MCNP6 (vấn đề mà các phiên bản trước chưa thực hiện được) được trình bày. Trong đó, kết quả tính toán giá trị k_{inf} cho thanh

nhiên liệu UO_2 đã được trình bày và có sai số rất nhỏ. Bài toán tối ưu hóa số vùng chia cần thiết của thanh nhiên liệu chứa chất hấp thụ cháy được U-Gd cũng đã được khảo sát, với mục đích sử dụng mô hình tối ưu hóa này cho các tính toán tiếp theo. Cuối cùng là thực hiện một số tính toán và so sánh với kết quả của bài toán chuẩn (NEA, 2002), kết quả tính toán có thể xem như là một kết quả tham khảo thêm cho bài toán chuẩn ngoài các kết quả đã được kiểm chứng từ các chương trình như MCU, TVS-M, WIMS8A, HELIOS và MULTICELL.

II. MÔ HÌNH TÍNH TOÁN

Nghiên cứu này đề cập tới vấn đề tính cháy cho bó nhiên liệu sử dụng chương trình MCNP6 và SRAC. Do mô hình tính toán trên MCNP không quá phức tạp, nên nhóm tác giả tập trung trình bày vào mô hình tính toán của bài toán lựa chọn phương pháp tối ưu hiệu chỉnh nhiệt độ chính xác trong MCNP6.

Mô hình tính toán dùng chương trình MCNP6

Hầu hết trong các bài toán cụ thể, nhiệt độ của nhiên liệu là không có trong thư viện MCNP6, do thư viện mặc định của MCNP6 chỉ có tại một số ít giá trị nhiệt độ nhất định (xem bảng 1). Vì vậy, nếu chọn thư viện không khớp với nhiệt độ trong bài toán thực tế thì sẽ dẫn tới sai số lớn.

Bảng 1. Các nhiệt độ của thư viện có sẵn ENDF/B-VII.0 trong chương trình MCNP6 cho U-235 (Denise B. Pelowitz, 2013)

ZAID	AWR	Library Name	Source	Evaluated Date	Temperature (K)	E _{max} (MeV)
92235.70c	233.025	endf70j	ENDF/B-VII.0	2006	293.6	20.0
92235.71c	233.025	endf70j	ENDF/B-VII.0	2006	600.0	20.0
92235.72c	233.025	endf70j	ENDF/B-VII.0	2006	900.0	20.0
92235.73c	233.025	endf70j	ENDF/B-VII.0	2006	1200.0	20.0
92235.74c	233.025	endf70j	ENDF/B-VII.0	2006	2500.0	20.0

Từ bảng trên chúng ta có thể thấy việc tính toán ở dải nhiệt độ từ 850K đến 1050K chỉ có thể dùng thư viện có nhiệt độ gần nhất đó là .72c tức là các đồng vị ở nhiệt độ 900K. Kết quả tính toán được trình bày trong Hình 4, kết quả tính toán này cho thấy nếu chỉ dùng thư viện có sẵn của MCNP6 thì không thể tính toán được giá trị k_{inf} chính xác tại những nhiệt độ nêu trên. Chương trình SRAC có thể hiệu chỉnh được nhiệt độ và tự điều chỉnh thư viện theo nhiệt độ được đưa ra do vậy có thể thấy kết quả của SRAC là chính xác hơn MCNP6 khi cả hai chỉ dùng thư viện có sẵn của chương trình.

Để xử lý được điều này trong MCNP6, có rất nhiều phương pháp như: 1- dùng chương trình NJOY để tạo thư viện nhiệt độ chính xác cho từng vùng và từng vật liệu sử dụng trong bài toán – phương pháp này đưa ra kết quả chính

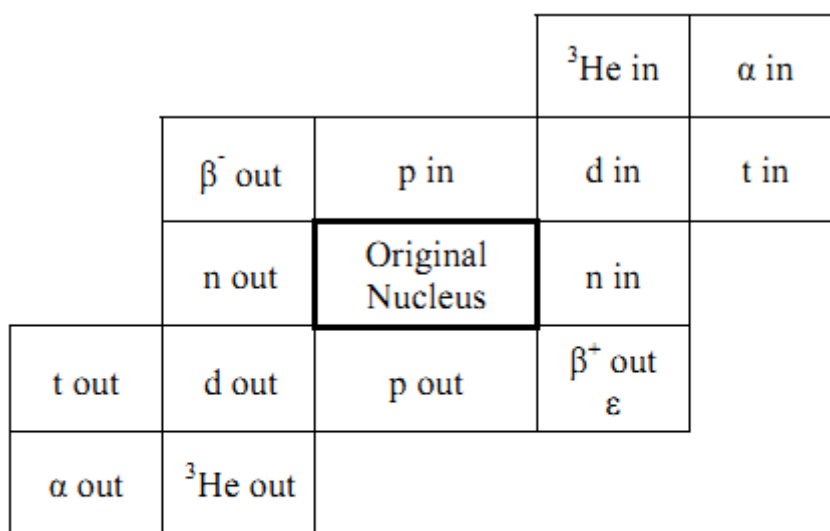
xác nhưng tạo ra một lượng dữ liệu rất lớn khi chạy một bài toán và thực sự không phù hợp cho những bài toán có nhiều vật liệu và đồng vị; 2- giống phương pháp 1 nhưng giảm khối lượng dữ liệu đi bằng cách tạo nhiệt độ chênh lệch so với nhiệt độ chính xác của bài toán khoảng 10-20K – phương pháp này có kết quả xấp xỉ, và cũng tạo ra lượng dữ liệu lớn; 3- chỉ dùng NJOY để tạo thư viện tại một số điểm nhiệt độ nhất định, sau đó tạo hai dạng thư viện nhiệt độ của đồng vị trong input cho MCNP, dạng 1 là dùng thư viện tại giới hạn dưới, dạng 2 là dùng thư viện tại giới hạn trên sau đó kết quả sẽ là trung bình của giới hạn dưới và trên – phương pháp này đưa ra kết quả xấp xỉ, số lượng đồng vị tăng lên gấp đôi do sử dụng hai loại nhiệt độ trong một bài toán và cũng chưa hạn chế được dung lượng thư viện cho chương trình tính toán; 4- OTF (On-The-Fly Doppler Broadening) Sigma1 là phương pháp cũng dùng NJOY tạo thư viện tại một điểm nhiệt độ duy nhất, sau đó trong quá trình chạy MCNP dùng phương pháp sigma1 để tính toán tại nhiệt độ cho trước trong bài toán – phương pháp này chính xác nhưng thời gian tính toán tăng lên khoảng gấp 10 lần; 5- phương pháp OTF sử dụng Delta-Track dùng trong chương trình SERPENT, phương pháp này cũng chỉ sử dụng NJOY để tạo thư viện cho một điểm nhiệt độ và trong suốt quá trình chạy chương trình sẽ sử dụng delta-tracking để tính toán tại nhiệt độ cho trước trong bài toán – Phương pháp này không thể sử dụng được vì MCNP6 dùng track-length để xác định thông lượng của hạt; 6- phương pháp OTF Temperature Fitted Data, phương pháp này cũng dùng NJOY để tạo thư viện tại một điểm nhiệt độ, sau đó trước khi tính toán MCNP sẽ phải tạo thư viện OTF (OTF datasets) cho các đồng vị sử dụng trong bài toán và dải nhiệt độ cần fitted để có thể tính toán được tại nhiệt độ bất kỳ trong dải nhiệt độ được đưa ra – Phương pháp này đưa ra kết quả chính xác và thời gian tính toán chỉ tăng lên khoảng 1.1 lần so với tính toán thông thường.

Trong nghiên cứu này, nhóm tác giả đã áp dụng phương pháp cuối cùng đó là tạo thư viện OTF cho một dải nhiệt độ để có thể tính toán được giá trị k-inf của thanh nhiên liệu tại nhiều điểm nhiệt độ khác nhau. Cụ thể, để tạo thư viện OTF, thư viện cơ sở ban đầu được dùng là thư viện ENDF/B-VII.0 tại nhiệt độ 300K (.70c) cho ^{235}U , ^{238}U và ^{16}O , dải nhiệt độ được dùng để tạo thư viện OTF là từ (0 – 1200K) với $\Delta T = 25\text{K}$. Kết quả cho thấy, sự trùng khớp khá tốt giữa chương trình MCNP6 dùng thư viện OTF và SRAC. Cũng như sự sai lệch khá lớn của MCNP6 khi chỉ dùng thư viện mặc định với bài toán này. Do vậy, thư viện OTF được xem như một giải pháp tối ưu cho bài toán với mức nhiệt độ bất kỳ trong MCNP6.

Trong bài toán cháy dùng Monte Carlo, mô đun tính toán cháy CINDER90 được sử dụng với thư viện tiết diện 63 nhóm năng lượng, 3400 isotopes, 1325 Fission products và 30 actinides yields. Trong khi ORIGEN2 gồm 1700 isotopes, 850 Fission products và 8 actinides yields (Michael et al, 2004). Trong tính toán cháy, CINDER90 và MCNP6 sẽ chạy độc lập với nhau, MCNP6 sẽ

Thực hiện tính toán tĩnh sau đó đưa các kết quả như giá trị k-inf, tiết diện theo 63 nhóm, tốc độ phản ứng, tích phân theo năng lượng, hệ số phân hạch (ν) và năng lượng trên một phân hạch (Q) vào mô-đun CINDER90 để tính toán mật độ đồng vị trong bước cháy tiếp theo và sau đó đưa thông tin về mật độ đồng vị mới trở lại chương trình MCNP6 để tính toán thông lượng, tiết diện và tốc độ phản ứng. Quá trình này sẽ dừng lại khi hoàn thành bước cháy cuối cùng được đưa ra bởi người dùng.

Các đồng vị sản phẩm phân hạch trong CINDER90 được tính toán dựa trên sơ đồ như sau:



- | | |
|--------------|-------------------------------|
| n = neutron | α = alpha particle |
| p = proton | β^- = electron |
| d = deuteron | β^+ = positron |
| t = triton | ϵ = electron capture |

Hình 1. Sơ đồ tính toán cháy trong chương trình con CINDER90

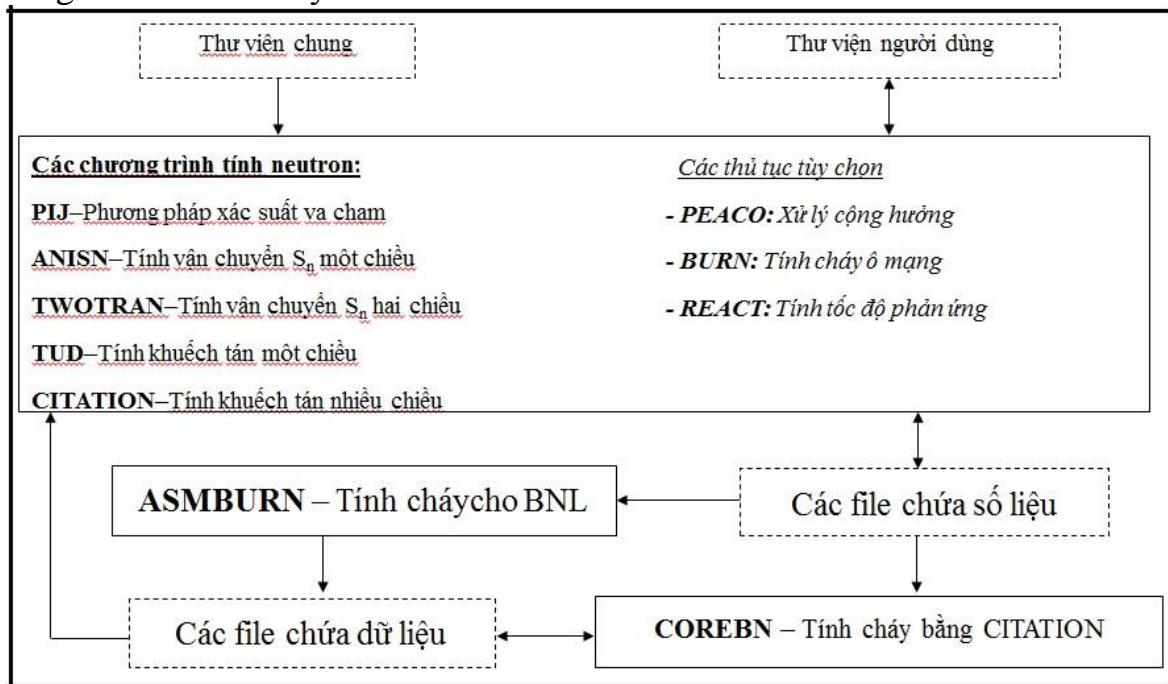
Trong đó, các hạt nhân con được sinh ra từ nhiều phản ứng từ hạt nhân mẹ như phân rã β^- , phân rã β^+ , bắt proton, bắt neutron... tổng cộng là 20 dạng phản ứng khác nhau được xem xét bởi CINDER90 để tạo các đồng vị hạt nhân mới.

Các kết quả tính toán cháy sử dụng chương trình MCNP6 được thực hiện với số lịch sử neutron là $5 \cdot 10^6$ thu được sai số thống kê của giá trị k-inf là 30 pcm.

Mô hình tính toán SRAC

SRAC là một chương trình tính toán sử dụng phương pháp tắt định để tính toán các thông số vật lý cho nhiều đối tượng trong vùng hoạt của lò phản ứng. Với ưu điểm là thời gian tính toán ngắn và có đầy đủ các tùy chọn để tính toán các đặc trưng vật lý cho vùng hoạt của các loại lò phản ứng, việc nắm được

cách sử dụng SRAC sẽ rất hữu dụng cho việc nghiên cứu, đánh giá, thiết kế... các loại lò phản ứng hạt nhân. Cấu trúc hệ thống của SRAC được trình bày trong Hình 2 dưới đây.



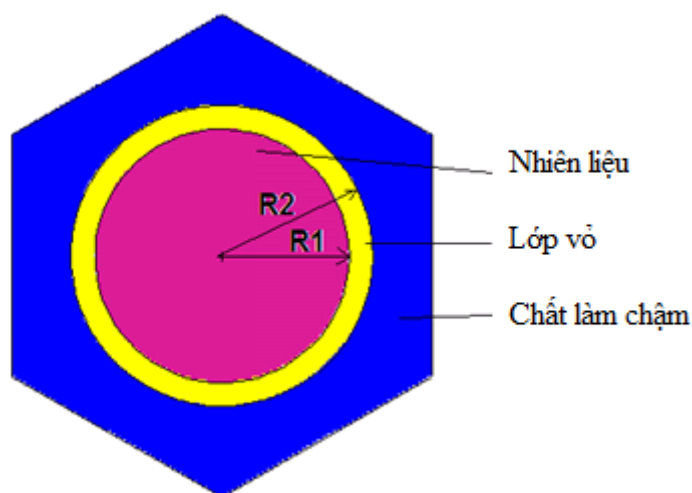
Hình 2: Cấu trúc hệ thống chương trình SRAC

Trong nghiên cứu này, chúng tôi sử dụng mô đun PIJ kết hợp với mô đun tính cháy để tính toán cho thanh và bó thanh nhiên liệu, cùng với bộ thư viện số liệu ENDF/B-VI.8. PIJ là một chương trình con trong SRAC dùng để tính toán cho thanh, bó nhiên liệu bằng phương pháp xác suất va chạm. Sau khi tính toán bằng PIJ, ta sẽ thu được các đặc trưng neutron, hệ số nhân và các hằng số nhóm cho thanh và bó nhiên liệu mà sẽ dùng cho tính toán toàn lò sau này.

III. KẾT QUẢ TÍNH TOÁN

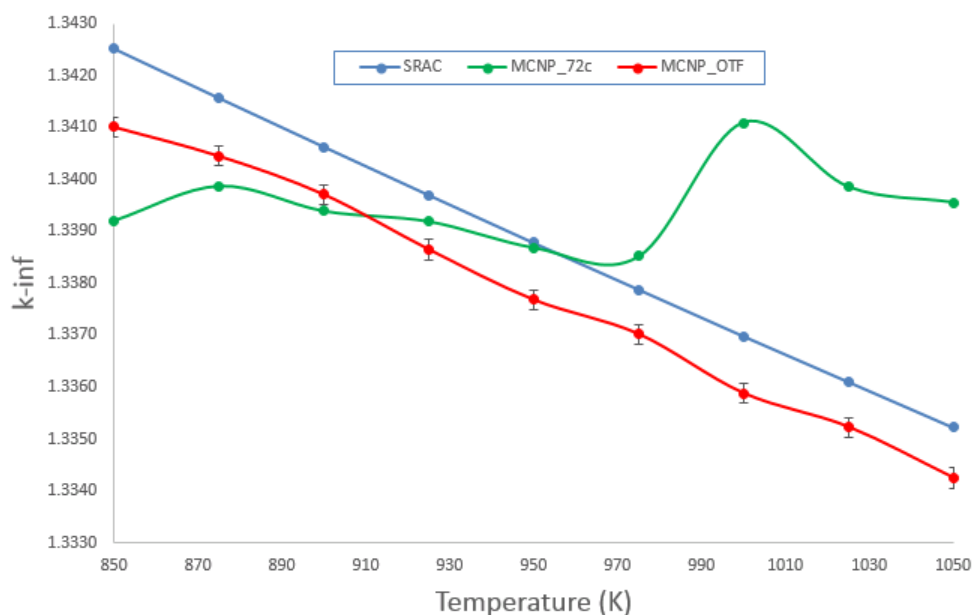
a. Lựa chọn phương pháp tạo thư viện trong MCNP6

Cấu hình thanh nhiên liệu được sử dụng trong bài toán này là một thanh nhiên liệu có lớp biên phản xạ toàn phần hình lục giác như hình dưới đây.



Hình 3. Cấu hình một thanh nhiên liệu

Trong đó, chiều cao của thanh nhiên liệu được lấy là vô hạn, bán kính ngoài thanh nhiên liệu là $R_1=0.386$ cm, bán kính ngoài của lớp vỏ là $R_2=0.4582$ cm (Hình 3). Hệ số nhân vô hạn k -inf được khảo sát tại dải nhiệt độ từ 850 đến 1050K với $\Delta T=25$ K. Ba kết quả tính toán đã được thực hiện: 1- Kết quả tính toán từ MCNP6 với thư viện nhiệt độ có sẵn ENDF/B-VII.0 với nhiệt độ là 900K; 2- Kết quả tính toán từ chương trình MCNP6 áp dụng phương pháp OTF; 3- Kết quả tính toán từ chương trình SRAC sử dụng thư viện ENDF/B-VII.0.



Hình 4. Kết quả tính toán hệ số nhân vô hạn theo nhiệt độ

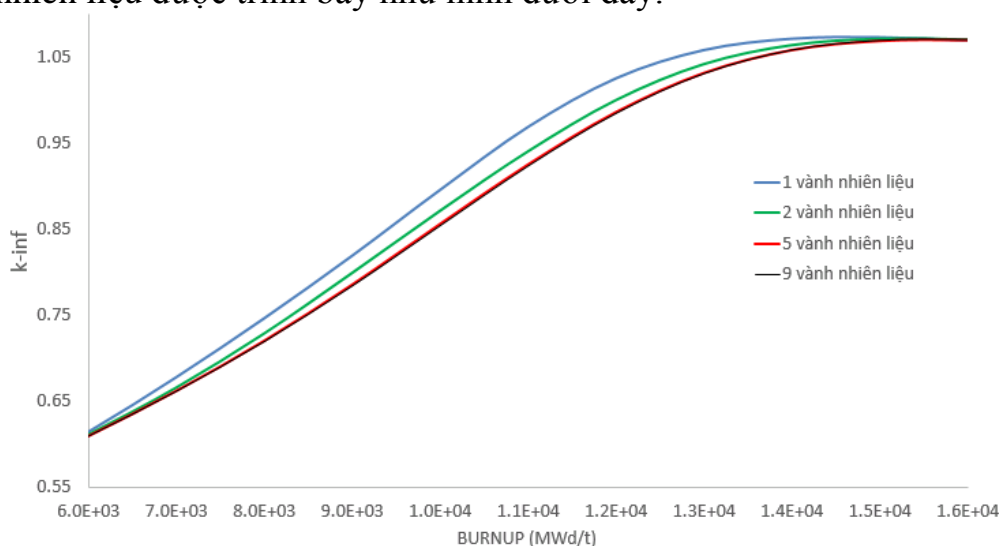
Từ kết quả tính toán cho thấy: 1- với thư viện có sẵn của chương trình MCNP6 thì chỉ có thể tính chính xác được tại nhiệt độ 900K; 2- Kết quả tính toán cho thấy sự phù hợp rất tốt của hai chương trình, với MCNP6 sử dụng thư viện OTF (độ lệch lớn nhất là 151 pcm). Do vậy, thư viện OTF có thể áp dụng

được cho tất cả các bài toán mà nhiệt độ không có trong thư viện chương trình MCNP6. Từ đó, nhóm tác giả đã sử dụng thư viện OTF cho tất cả các tính toán về sau để đảm bảo sự chính xác của kết quả tính toán.

b. Tối ưu hóa số vùng cần chia của thanh nhiên liệu U-Gd

Do hiệu ứng tự che chắn của nhiên liệu chứa chất hấp thụ mạnh như Gadolinium, việc chia vành cho thanh nhiên liệu là cần thiết. Mô hình tính toán của thanh U-Gd được lấy theo mô hình thanh U-Gd từ bài toán chuẩn (NEA, 2002). Việc khảo sát số vùng chia từ 1 tới 9 vùng đã được thực hiện. Mục đích của việc khảo sát số vùng tối ưu này để giảm tối đa thời gian tính toán mà vẫn đảm bảo tính chính xác của kết quả.

Kết quả giá trị hệ số nhân k_{inf} của thanh U-Gd theo độ sâu cháy và số vùng nhiên liệu được trình bày như hình dưới đây:



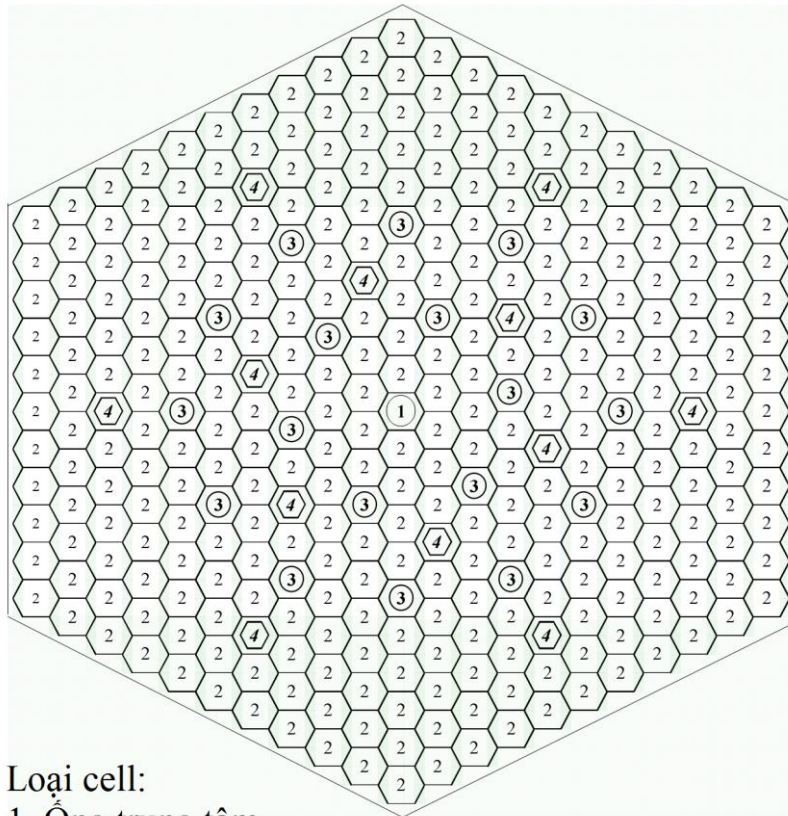
Hình 5. Kết quả tính toán hệ số nhân vô hạn theo độ sâu cháy của thanh nhiên liệu U-Gd bằng SRAC2006

Kết quả tính toán cho thấy, nếu chỉ chia 1 vùng nhiên liệu thì giá trị k_{inf} thu được sẽ bị lệch khá lớn so với giá trị hội tụ, giá trị hội tụ này đạt được khi số vùng được chia của thanh nhiên liệu U-Gd tăng lên. Cụ thể, với kết quả tính toán này, số vùng để đạt đến giá trị hội tụ này là 5. Do sự sai khác k_{inf} của 5 vùng so với 9 vùng là rất nhỏ, nên để tối ưu hóa thời gian tính toán số được đề xuất là 5. Từ đó, trong các kết quả tính toán về sau, thanh nhiên liệu U-Gd sẽ được chia 5 vùng vật liệu.

c. Kết quả tính toán cháy cho bài toán chuẩn

Bó nhiên liệu LEU trong bài toán chuẩn gồm 312 thanh nhiên liệu, trong đó 300 thanh nhiên liệu UO₂ và 12 thanh nhiên liệu chứa chất hấp thụ

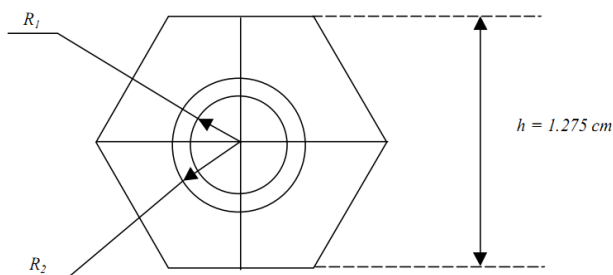
Gadolinium. Hình học sắp xếp các loại thanh nhiên liệu trong bó LEU được trình bày trong hình dưới đây:



Loại cell:

1. Ống trung tâm
 2. Nhiên liệu U1, độ giàu 3.7%
 3. Ống dẫn thanh điều khiển
 4. Nhiên liệu GD1, độ giàu 3.6% với 4% Gd2O3
- Hình 6. Cấu hình bó nhiên liệu LEU trong bài toán chuẩn

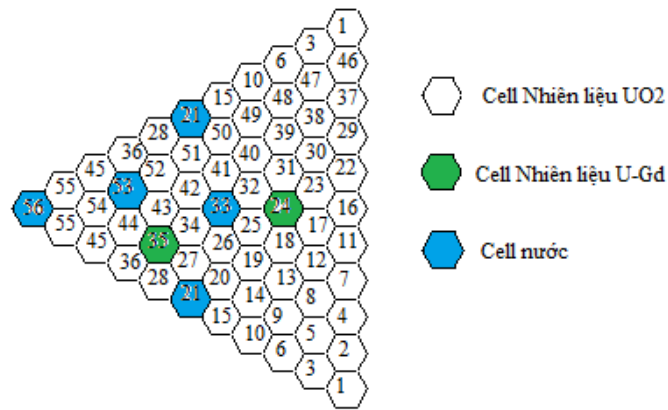
Kích thước chi tiết của từng loại ô mạng trong bó nhiên liệu được trình bày trong hình dưới đây:



Tên cell	Bán kính (cm)
Nhiên liệu	$R_1 = 0.386$ $R_2 = 0.4582$
Ống trung tâm	$R_1 = 0.48$ $R_2 = 0.5626$
Ống dẫn thanh điều khiển	$R_1 = 0.545$ $R_2 = 0.6323$

Hình 7. Kích thước từng loại ô mạng trong bó nhiên liệu LEU

Để dễ dàng cho việc lấy các kết quả tính toán và tính cháy nhiên liệu, cách đánh số cell nhiên liệu được trình bày như hình dưới đây.

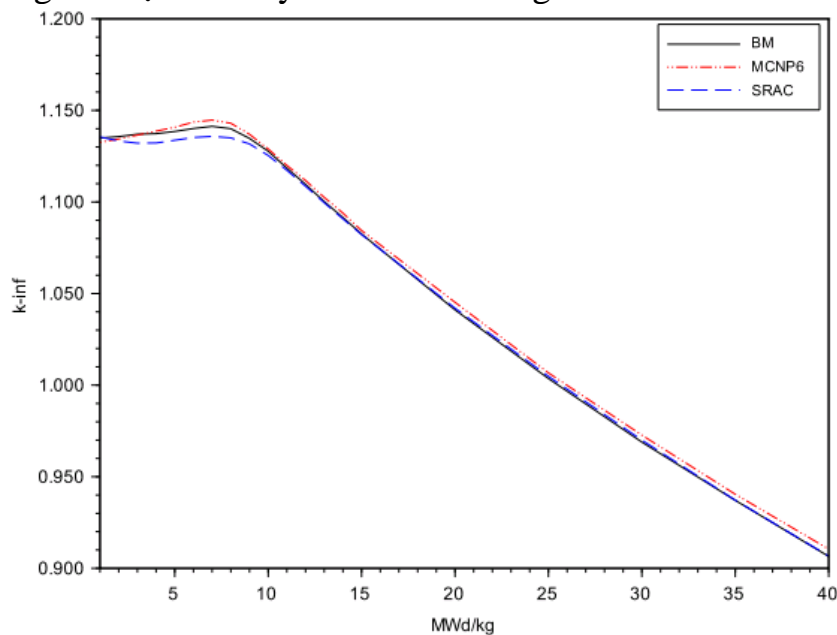


Hình 8. Cách đặt số thứ tự của các cell trong bó nhiên liệu LEU

Trong đó, một số kết quả tính toán sẽ được lấy tại CELL 1 và CELL 24. Thành phần CELL 1 gồm nhiên liệu UO₂ độ giàu ²³⁵U là 3.7% và CELL 24 là U-Gd độ giàu ²³⁵U là 3.6% và khối lượng Gd₂O₃ là 4%.

Kết quả tính toán hệ số nhân vô hạn theo độ sâu cháy của bó nhiên liệu LEU được trình bày trong hình 9 giữa MCNP6, SRAC và Benchmark Mean (giá trị k-inf trung bình trong bài toán chuẩn). Với mức công suất vận hành là 108 MWt/m³. Độ sâu cháy nhiên liệu được đưa lên tới 40 MWd/kgHM.

Độ chính xác của giá trị k-inf phụ thuộc rất nhiều yếu tố, một trong số đó là số bước cháy được khai báo trong mô hình. Cụ thể, sai số thống kê giảm dần và sau đó hội tụ khi số bước cháy tăng lên, tuy nhiên số bước cháy lại tỷ lệ thuận với thời gian tính toán. Do đó, để đảm bảo độ chính xác vừa đủ và thời gian tính toán hợp lý thì số bước cháy được lựa chọn là 160, trong đó mỗi bước cháy tương ứng với độ sâu cháy là 0.25 MWd/kgHM.

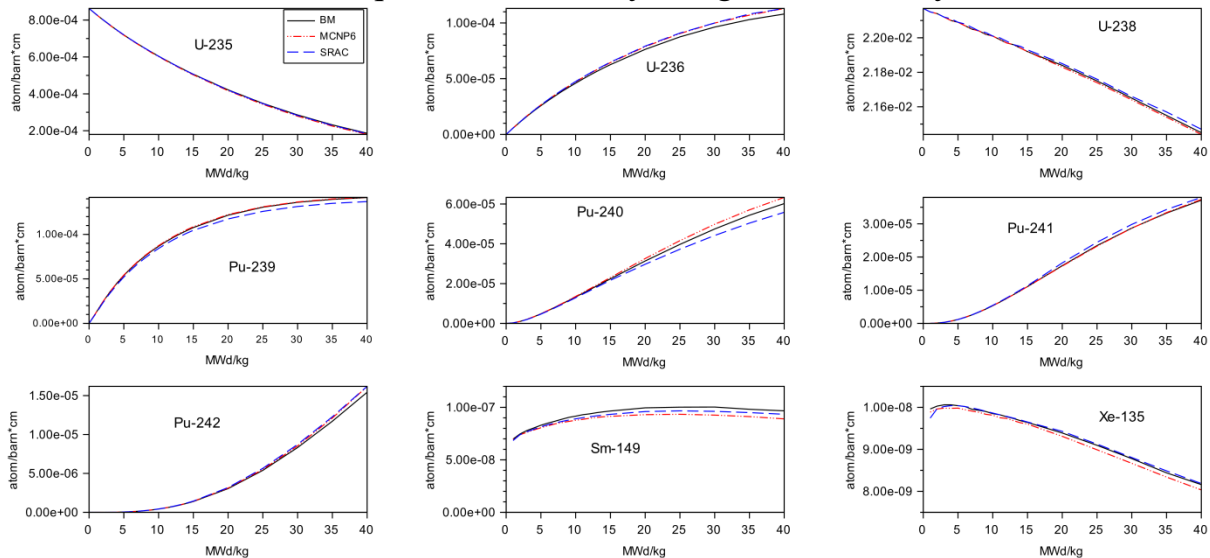


Hình 9. Hệ số nhân vô hạn theo độ sâu cháy bó nhiên liệu LEU

Từ kết quả tính toán k-inf ta có thể thấy sự phù hợp rất tốt của MCNP6 và SRAC với kết quả bài toán chuẩn. Sai số lớn nhất của MCNP6 với BM (Benchmark mean) là 0.00413 đk tại bước cháy 20 MWd/kg, giá trị này của chương trình SRAC là 0.00352 đk tại bước cháy 6 MWd/kg. Trong khi đó, sai số lớn nhất của MCU, TVS-M, WIMS8A, HELIOS và MULTICELL với BM lần lượt là 0.004, 0.004, 0.005, 0.003 và 0.004 đk. Từ đó có thể thấy rằng, mô hình tính toán dùng MCNP6 và SRAC đã có độ phù hợp rất với bài toán chuẩn.

Để đánh giá chi tiết hơn, mật độ các đồng vị theo thời gian cháy của CELL1 và CELL 24 cũng được tính toán và so sánh với BM. Các kết quả được trình bày trong phần dưới đây.

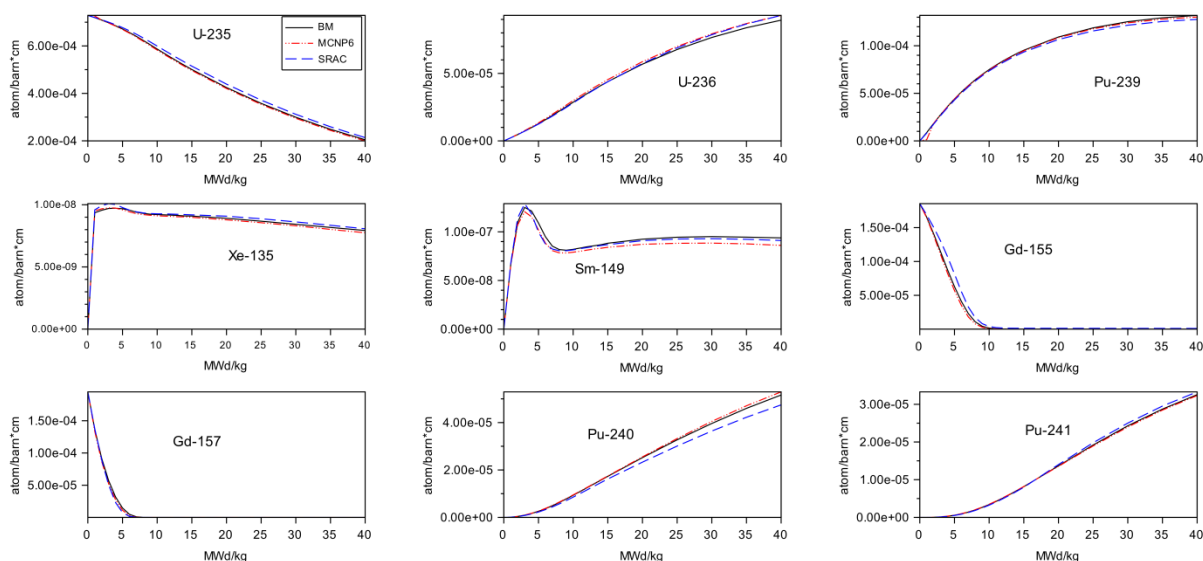
Kết quả tính toán mật độ các đồng vị trong CELL1. Trong đó, các đồng vị được tính toán và so sánh lần lượt là ^{235}U , ^{236}U , ^{238}U , ^{239}Pu , ^{240}Pu , ^{241}Pu , ^{242}Pu , ^{135}Xe và ^{149}Sm . Các kết quả được trình bày trong hình dưới đây.



Hình 10. Mật độ một số đồng vị theo bước cháy của CELL 1 so sánh giữa MCNP6, SRAC và BM

Kết quả tính toán mật độ các đồng vị trong CELL1 sai số lớn nhất của MCNP6 với BM là 8.2% của ^{149}Sm tại bước cháy 40 MWd/kg, giá trị này của MCU là 8.61%. Sai số lớn nhất của SRAC với BM là 7.29% mật độ của ^{240}Pu tại bước cháy 40 MWd/kg, giá trị này của HELIOS là 6.05%.

Đối với mật độ các đồng vị trong CELL24 như ^{235}U , ^{236}U , ^{239}Pu , ^{135}Xe , ^{149}Sm , ^{155}Gd , ^{157}Gd , ^{240}Pu và ^{241}Pu cũng được so sánh với bài toán chuẩn.



Hình 11. Mật độ các đồng vị theo bước cháy tại CELL 24

Kết quả tính toán mật độ các đồng vị cho CELL 24 cho thấy sai số lớn nhất của MCNP6 và SRAC với BM tương ứng là 53.1% và 65.14% của ^{157}Gd tại bước cháy 7 MWd/kg, giá trị này của MCU, TVS-M, WIMS8A, HELIOS và MULTICELL lần lượt là 24.13%, 14.98%, 25.62%, 3.06% và 61.67%. Sai số này đạt giá trị lớn nhất tại độ sâu cháy 7 MWd/kg và giảm dần theo thời gian cháy, điều này là do Gadolinium trong nhiên liệu cháy rất mạnh và hết rất nhanh trong những bước cháy đầu tiên vì chúng có tiết diện hấp thụ neutron rất lớn ($^{155}\sigma_a \cong 62,000$ barn và $^{157}\sigma_a \cong 252,000$ barn). Chính vì vậy, sau những bước cháy đầu tiên thì mật độ của chúng còn rất nhỏ, do đó dẫn đến sai số.

Ngoài ra, để khảo sát hiệu ứng che chắn của nhiên liệu chứa Gadolinium, CELL24 được chia thành 5 vành nhiên liệu khác nhau từ đó mật độ một số đồng vị trong từng vùng riêng biệt đã được khảo sát và so sánh. Cụ thể, các đồng vị được xem xét đó là ^{235}U , ^{239}Pu , ^{155}Gd và ^{157}Gd tại các bước cháy là 40 MWd/kgHM và 2 MWd/kgHM.

Bảng 2. Nồng độ một số đồng vị theo bán kính của CELL 24

U-235_cell 24 (40 MWd/kg)					
Vùng nhiên liệu	1	2	3	4	5
Bán kính vùng nhiên liệu, cm	0.173	0.244	0.299	0.345	0.386
BM	2.193E-04	2.126E-04	2.053E-04	1.975E-04	1.879E-04
MCNP6	2.135E-04	2.094E-04	1.998E-04	1.942E-04	1.818E-04
SRAC	2.341E-04	2.260E-04	2.166E-04	2.057E-04	1.921E-04
Sai số % (MCNP6-BM)	-2.64	-1.51	-2.68	-1.67	-3.25
Sai số % (SRAC-BM)	6.74	6.30	5.52	4.13	2.25
Giá trị R.M.S% của BM	1.87	1.77	1.83	1.89	2.05
Pu-239_cell 24 (40 MWd/kg)					
Vùng nhiên liệu	1	2	3	4	5

Bán kính vùng nhiên liệu, cm	0.173	0.244	0.299	0.345	0.386
BM	1.083E-04	1.107E-04	1.159E-04	1.273E-04	1.978E-04
MCNP6	1.065E-04	1.092E-04	1.139E-04	1.245E-04	1.967E-04
SRAC	9.866E-05	9.794E-05	9.713E-05	9.640E-05	2.085E-04
Sai số % (MCNP6-BM)	-1.66	-1.36	-1.73	-2.20	-0.56
Sai số % (SRAC-BM)	-8.90	-11.53	-16.20	-24.28	5.43
Giá trị R.M.S% của BM	4.79	4.63	4.23	3.70	3.22
Gd-155_cell 24 (2 MWd/kg)					
Vùng nhiên liệu	1	2	3	4	5
Bán kính vùng nhiên liệu, cm	0.173	0.244	0.299	0.345	0.386
BM	1.676E-04	1.636E-04	1.551E-04	1.333E-04	8.407E-05
MCNP6	1.676E-04	1.632E-04	1.530E-04	1.284E-04	7.873E-05
SRAC	1.717E-04	1.688E-04	1.631E-04	1.488E-04	9.908E-05
Sai số % (MCNP6-BM)	0.00	-0.24	-1.35	-3.68	-6.35
Sai số % (SRAC-BM)	2.44	3.21	5.14	11.65	17.85
Giá trị R.M.S% của BM	0.43	0.45	0.57	1.28	2.60
Gd-157_cell 24 (2 MWd/kg)					
Vùng nhiên liệu	1	2	3	4	5
Bán kính vùng nhiên liệu, cm	0.173	0.244	0.299	0.345	0.386
BM	1.502E-04	1.353E-04	1.074E-04	5.624E-05	8.722E-06
MCNP6	1.489E-04	1.328E-04	1.003E-04	4.674E-05	5.892E-06
SRAC	1.567E-04	1.456E-04	1.249E-04	8.334E-05	1.459E-05
Sai số % (MCNP6-BM)	-0.87	-1.85	-6.61	-16.89	-32.45
Sai số % (SRAC-BM)	4.31	7.63	16.27	48.19	67.22
Giá trị R.M.S% của BM	1.51	1.82	2.73	5.81	11.32

Giá trị R.M.S % của bài toán chuẩn đưa ra được tính dựa trên công thức sau:

$$R.M.S = 100\% * \frac{1}{\bar{x}} * \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}{(N-1)}} \quad (1)$$

trong đó, i là số kết quả tính toán từ các chương trình được đem ra so sánh với nhau ($i=1, N$), N là tổng số kết quả tính toán (trong bài toán chuẩn thì $N=5$), x_i là giá trị của kết quả tính toán từ chương trình i , \bar{x} là giá trị trung bình của các kết quả tính toán: $\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i$.

Kết quả tính toán từ bảng 2 cho thấy xu hướng tăng hoặc giảm sai số của MCNP từ trong ra ngoài (từ vùng 1 ra vùng 5) là phù hợp với xu hướng của bài toán chuẩn đối với Gadolinium. Có thể thấy kết quả từ MCNP có sự phù hợp tốt với giá trị BM (ngoại trừ nồng độ ^{157}Gd ở vùng ngoài cùng CELL24 tại độ sâu cháy 2MWd/kg) còn kết quả từ SRAC có sự phù hợp tương đối. Điều này có thể là do chương trình SRAC bị hạn chế trong việc khai báo số vùng nhiên liệu trong bài toán tính cháy. Ngoài ra, chương trình SRAC sử dụng thư viện tiết diện cũ ENDF/B-VI.8, nên gặp phải sai số lớn. Kết quả tính toán cho ^{155}Gd và

^{157}Gd tại độ sâu cháy 2 MWd/kg có sai số lớn tại vành ngoài cùng của thanh U-Gd, điều này có thể giải thích do hiệu ứng che chắn nên Gadolinium ở vành ngoài cùng tương tác với neutron tới khiến neutron không đi sâu được vào thanh nhiên liệu U-Gd mà phần lớn sẽ bị hấp thụ ở vành ngoài. Do vậy, sai số tăng lên khi mật độ Gadolinium rất nhỏ vì lượng Gadolinium ở vành ngoài cùng bị giảm rất nhanh.

KẾT LUẬN

Nghiên cứu này đã thực hiện những công việc như sau:

- Bài toán lựa chọn phương pháp tối ưu hiệu chỉnh nhiệt độ chính xác trong MCNP6 (vấn đề mà các phiên bản trước chưa thực hiện được) được trình bày; Trong đó, hệ số nhân k-inf theo nhiệt độ từ 850K đến 1050K với $\Delta T = 25\text{K}$ đã được khảo sát. Kết quả tính toán chỉ ra rằng nếu chỉ dùng thư viện có sẵn của MCNP6 thì không thể tính toán được giá trị k-inf chính xác tại nhiệt độ bất kỳ, trong khi đó kết quả tính toán có sự phù hợp rất tốt khi sử dụng phương pháp tạo thư viện OTF để tính toán. Từ đó có thể kết luận rằng, khi tính toán tại các trạng thái nhiệt độ khác nhau, việc áp dụng phương pháp OTF là vô cùng cần thiết.
- Bài toán tối ưu hóa số vùng chia cần thiết của thanh nhiên liệu chứa chất hấp thụ cháy được U-Gd cũng đã được khảo sát, từ kết quả tính toán có thể đề xuất rằng số vùng cần chia trong thanh nhiên liệu chứa U-Gd khi tính toán cháy là 5 thì kết quả tính toán mới đảm bảo độ tin cậy.
- Các kết quả tính toán cho bài toán chuẩn (NEA, 2002) cũng đã được thực hiện, trong đó các kết quả tính toán sử dụng MCNP6 và SRAC đã được so sánh với nhau và so sánh với giá trị trung bình trong bài toán chuẩn và có độ chính xác cao. Dễ thấy rằng, mô hình tính toán cháy cho bó nhiên liệu đã có độ phù hợp tốt và có thể áp dụng cho các tính toán cháy trong tương lai với các cấu hình phức tạp hơn. Ngoài ra, có thể xem các kết quả đã thực hiện như là một kết quả tham khảo thêm cho bài toán chuẩn ngoài các kết quả đã được kiểm chứng từ các chương trình như MCU, TVS-M, WIMS8A, HELIOS và MULTICELL.

Tuy nhiên, để có thể có kết quả tính toán chính xác hơn, một số cải tiến trong phương pháp tắt định dùng chương trình SRAC như việc cập nhật thư viện số liệu mới, việc cải tiến mô hình để tính được nhiều vùng nhiên liệu hơn cần được thực hiện. Ngoài ra, mô hình MCNP6 cần được cải tiến hơn trong việc xử lý nhiệt độ cho các đồng vị actinides sản phẩm của quá trình cháy (như Am, Np, Cm...), vì hiệu ứng Doppler đến từ các nguyên tố actinides cũng tương tự như ^{238}U .

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- Denise B. Pelowitz et al., 2013. MCNP6TM USER'S MANUAL. Version 1.0. LA-CP-13-00634, Rev. 0
- Edward J. Parma. BURNCAL: A Nuclear Reactor Burnup Code Using MCNP Tallies, Advanced Nuclear Concepts Sandia National Laboratories P.O. Box 5800 Albuquerque, NM 87185-1141.
- L. Mercatali et al., 2015. SCALE and SERPENT solutions of the OECD VVER-1000 LEU and MOX burnup computational benchmark. Annals of Nuclear Energy, 83 (2015) 328-341.
- L. Thilagam et al., 2009. A VVER-1000 LEU and MOX assembly computational benchmark analysis using the lattice burnup code EXCEL. Annals of Nuclear Energy 36 (2009) 505-519.
- Meiyin Zheng et al., 2013. Development of a MCNP-ORIGEN burn-up calculation code system and its accuracy assessment.
- Michael L. Fensin, John S. Hendricks, Gregg W. McKinney, 2009: Monte Carlo Burnup Interactive Tutorial, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM, 87545, USA.
- Moor, R.L. et al., 1995. MOCUP: MCNP-ORIGEN2 Coupled Utility Program, INEL-95/0523. Idaho National Engineering Laboratory.
- NEA/NSC/DOC 10, 2002. A VVER-1000 LEU and MOX Assembly Computational Benchmark. Nuclear Energy Agency, Organization for Economic Co-operation and Development.
- Okumura, K. et al., 2005. MVP-BURN: Burn-up calculation code using a continuous-energy Monte Carlo Code MVP.
- Suhail Ahmad Khan, et al., 2016. Study of VVER-1000 OECD LEU and MOX Computational Benchmark with VISWAM Code System. Nuclear Energy and Technology 2 (2016) 312-334.
- Trellue, H.R., Poston, D.L., 1999. User's Manual, version 2.0 for MONTEBURNS, Version 5B.
- Zhiwen Xu et al., 2002. An improved MCNP-ORIGEN depletion program (MCODE) and its verification for high-burnup applications.