НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР “КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ”

ВОПРОСЫ АТОМНОЙ НАУКИ И ТЕХНИКИ

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ СБОРНИК

СЕРИЯ:

ФИЗИКА ЯДЕРНЫХ РЕАКТОРОВ

ИЗДАЁТСЯ с 1989 г.

ВЫПУСК 2

ФИЗИКА И МЕТОДЫ РАСЧЁТА ЯДЕРНЫХ РЕАКТОРОВ

ИЗДАЁТСЯ с 1981 г.

МОСКВА – 2015

Журнал “Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика ядерных реакторов” издаётся с 1981 года. Выходят пять выпусков в год, которые подготавливают НИЦ “Курчатовский институт” (ответственный за серию “Физика ядерных реакторов” в целом), ФГУП “РФЯЦ-ВНИИЭФ” и АО ОКБ “ГИДРОПРЕСС”.
Подписной индекс 32067 в каталоге “Газеты. Журналы” ОАО Агентства “Роспечать”.

Тематика журнала:
- ядерные реакторы различного типа и назначения, импульсные реакторы, критические сборки;
- теория ядерных реакторов, методы расчёта, вычислительные программы;
- экспериментальные методы, приборы и установки;
- расчётно-теоретические и экспериментальные исследования ядерных реакторов;
- кинетика и динамика ядерных реакторов, контроль и управление;
- ядерная безопасность; радиационная безопасность и защита;
- гидродинамика и теплообмен в ядерных реакторах;
- физико-технические проблемы;
- исследования характеристик реакторных материалов и их изменений под воздействием облучения;
- обеспечение безопасности эксплуатации АЭС и других ядерных установок;
- топливный цикл, отдельные аспекты и общие проблемы ядерной энергетики.

Редакционная коллегия:

Главный редактор – Ю.М. Семченков (НИЦ “Курчатовский институт”);

Заместители главного редактора – С.М. Зарицкий, В.В. Пчелин (НИЦ “Курчатовский институт”), В.Ф. Колесов (ФГУП “РФЯЦ-ВНИИЭФ”), В.А. Мохов (АО ОКБ “ГИДРОПРЕСС”);

Ответственный секретарь – Е.А. Старостина (НИЦ “Курчатовский институт”);

Члены редколлегии – П.Н. Алексеев, Е.В. Бурлаков, А.Ю. Гагаринский, А.А. Ковалишин, Н.Е. Кухаркин, М.П. Лизоркин, В.А. Павшук, В.А. Сидоренко, В.С. Устинов, Я.И. Штромбах (НИЦ “Курчатовский институт”);

С.В. Воронцов, Е.В. Куличкова, А.С. Кошелев, В.Х. Хоружий (ФГУП “РФЯЦ-ВНИИЭФ”);

А.В. Лукин, Ю.А. Соколов (ФГУП “РФЯЦ ВНИИТФ”);

Ю.А. Безруков, В.Я. Беркович, И.Н. Васильченко, Д.Н. Ермаков, А.С. Зубченко, С.Р. Сорокин, В.В. Сотсков, Н.Н. Климов, Н.В. Козлачкова, В.М. Махин, В.С. Попадчук, А.В. Селезнёв (АО ОКБ “ГИДРОПРЕСС”);

А.Н. Лупишко (АО “ВНИИАЭС”).

Журнал “Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика ядерных реакторов” включён в Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание учёной степени доктора и кандидата наук (Перечень ВАК).

Журнал “Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика ядерных реакторов” включён в Российский индекс научного цитирования (РИНЦ).

Статьи из журнала “Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика ядерных реакторов” публикуются в переводе на английский язык в специальных выпусках журнала “Physics of Atomic Nuclei” (перевод Российского журнала “Ядерная физика”), издаваемого PLEIADES PUBLISHING и распространяемого издательством Springer (ISSN: 1063-7788 печатная версия, ISSN: 1562-692X электронная версия).

Журнал “Physics of Atomic Nuclei” индексируется в Academic OneFile, Academic Search, Astrophysics Data System (ADS), Chemical Abstracts Service (CAS), Chemical and Earth Sciences, Current Content/Physical, EBSCO, Environment Index, Gale, Google Scholar, INIS Atomindex, INSPEC, INSPIRE, Journal Citation Reports/Science Edition, OCLC, SCImago, SCOPUS, Science Citation Index, Science Citation Index Expanded (SciSearch), Summon by Serial Solutions.

Статьи, поступающие в редакцию, рецензируются. При перепечатке и цитировании ссылка на журнал обязательна. Перепечатка материалов допускается только с письменного разрешения редакции.

© НИЦ “Курчатовский институт”, 2015

СОДЕРЖАНИЕ

Моряков А.В. Алгоритм решения линейной задачи Коши для систем обыкновенных дифференциальных уравнений большой размерности с использованием параллельных вычислений….4
Моряков А.В. Программа *LUCKY_TD* для решения нестационарного уравнения переноса с использованием параллельных вычислений...15
Аристархова Е.А., Малофеев В.М. Эффективные условия для плотности потока нейтронов на аксиальных границах активной зоны…..…20
Савандер В.И., Шумский Б.Е., Пинегин А.А. Аксиальное профилирование поля энерговыделения для минимизации объёмной доли пара на выходе из ТВС ВВЭР-1200……....25
Жуков Ю.М., Уртенов Д.С. Теплогидравлические реакторные коды III поколения. Современный статус и проблемы внедрения……...…36
Федосов А.М. Стохастическая модель формоизменения графитовой кладки РБМК……..…47
Бычков С.А., Плеханов Р.В., Зинаков Д.Л. Модуль регистрации расширенного набора функционалов при расчёте фрагментов и активных зон РБМК по прецизионному коду MCU...…..58
Баловнев А.В., Жирнов А.П., Иванюта А.Н., Рождественский И.М., Юферева В.А. Интегральная система кодов Платформа БРЕСТ…..67
Баловнев А.В., Иванюта А.Н., Ионов А.И., Жирнов А.П., Кузнецов П.Б., Сахарова Т.Ю. Расчётное моделирование нестационарных нейтронно-физических и теплогидравлических процессов в активной зоне реакторной установки со свинцовым теплоносителем с учётом работы системы управления и защиты……76
Лукасевич И.Б., Мороко В.И., Попов В.Е., Левченко М.О. Моделирование стартовой загрузки и начальных циклов работы МБИР……..…84
Ларионов И.А., Платонов И.В., Лопаткин А.В., Долгов Ю.А. Использование связанного расчётного комплекса PRISET-MBIR для исследования штатных и аварийных режимов РУ МБИР……..…..…..90
Платонов И.В., Лопаткин А.В., Ларионов И.А., Долгов Ю.А. Использование параллельных вычислений на многоядерных ЭВМ для ускорения счёта программного комплекса PRISET-MBIR……..……...98
Иванов А.С., Русинкевич А.А., Белов Г.В., Иванов Ю.А. Анализ области применимости термодинамических расчётов при проектировании твэлов с нитридным топливом……106
Русинкевич А.А., Иванов А.С., Белов Г.В., Скупов М.В. Некоторые особенности термодинамики нитридного уран-плутониевого топлива при выгорании……..…114
Семинар “Физика ядерных реакторов”..…...122

CONTENTS

Moryakov A.V. Algorithm for Solution of the Linear Cauchy Task for Large Systems of Ordinary Differential Equations Using Parallel Calculations……4
Moryakov A.V. Program *LUCKY_TD* for Solution of Time Dependent Transport Equation Using Parallel Calculations……..…15
Aristarkhova E.A., Malofeev V.M. Effective Conditions for Neutron Flux Density at Axial Boundaries of the Core……...…..20
Savander V.I., Shumskiy B.E., Pinegin A.A. Shaping of the Axial Power Distribution in the Core to Minimize the Vapor Volume Fraction at the Outlet of the VVER-1200 Fuel Assemblies……25
Zhukov Yu.M., Urtenov D.S. Thermohydraulic Reactor Codes of 3rd Generation. Present Status and Problems of Implementation……..…36
Fedosov A.M. Stochastic Model of the RBMK Graphite Stack Deformation……..…47
Bychkov S.A., Plekhanov R.V., Zinakov D.L. Registration Module of Expanded Set of Functionals in the Calculation of the Fragments and Full-Scale RBMK Cores by MCU Precision Code……...58
Balovnev A.V., Zhirnov A.P., Ivanyuta A.N., Rozhdestvenskiy I.M., Yufereva V.A. The Integral System of Codes – Platform BREST……...…67
Balovnev A.V., Ivanyuta A.N., Ionov A.I., Zhirnov A.P., Kuznetsov P.B., Saharova T.Yu. Calculation of the Time Dependent Neutron and Thermohydraulic Processes in the Lead-Cooled Reactor Core with the Control System.……....76
Lukasevich I.B., Moroko V.I., Popov V.E., Levchenko M.O. Simulation of the First Fuel Loading and Initial Operating Cycles of MBIR.……..…84
Larionov I.A., Platonov I.V., Lopatkin A.V., Dolgov Yu.A. Use of the PRISET-MBIR Code for Study of the Transients and Emergencies of the MBIR Reactor Installation……...…90
Platonov I.V., Lopatkin A.V., Larionov I.A., Dolgov Yu.A. Using the Parallel Calculations on the Multiprocessor Computers to Accelerate the PRISET-MBIR Code Run…….....98
Ivanov A.S., Rusinkevich A.A., Belov G.V., Ivanov Yu.A. Analysis of the Applicability Range of Thermodynamic Calculations at the Design of Nitride Fuel……..……106
Rusinkevich A.A., Ivanov A.S., Belov G.V., Skupov M.V. Some Thermodynamic Features of Nitride Uranium-Plutonium Fuel during Burnup.....114
Seminar “Physics of Nuclear Reactors”……122

УДК 519.622

Алгоритм решения линейной задачи Коши для систем обыкновенных дифференциальных уравнений большой размерности с использованием параллельных вычислений

А.В. Моряков,
НИЦ “Курчатовский институт”, 123182, Москва, пл. Курчатова, 1
Поступила в редакцию 27.10.2014 г., исправленный вариант – 24.02.2015 г.

Представлен алгоритм решения линейной задачи Коши для систем обыкновенных дифференциальных уравнений большой размерности. Предложенный алгоритм для линейных систем дифференциальных уравнений первого порядка реализован в программе *EDELWEISS* с возможностью использования параллельных вычислений на суперкомпьютерах, применяющих MPI (Message Passing Interface) стандарт для обмена данными между параллельными процессами. Решение представляется в виде ряда по ортогональным полиномам на отрезке [0, 1]. К особенностям алгоритма можно отнести его простоту и возможность решения нелинейных задач с поправкой оператора с учётом решения, полученного в итерационном процессе.
Ключевые слова: алгоритм, итерационный процесс, программа, система уравнений, решение, пространство, вектор.

Algorithm for Solution of the Linear Cauchy Task for Large Systems of Ordinary Differential Equations Using Parallel Calculations. ***A.V. Moryakov,*** *NRC “Kurchatov Institute”, 1, Kurchatov Sq., Moscow,* 123182.

This paper is devoted for the algorithm for solution of the linear Cauchy task for large systems of ordinary differential equations using parallel calculations. The algorithm for linear systems of first order equations was realized in *EDELWEISS* computer code. This code was developed especially for supercomputers that may use MPI technology to exchange of dates for parallel processes. The solution is presented as a row by orthogonal polynomials at [0, 1] segment. Features of this algorithm are simplicity, opportunity to get solution by parallel calculations and also possibility to get a solution for non-linear task by changing the operator using the solution from iteration process.
Key Words: Algorithm, Iteration Process, Program, System of Equations, Solution, Space, Vector.

Введение

Многие задачи математической физики сводятся к решению задачи Коши для больших по размерности систем дифференциальных уравнений первого или второго порядка. Точное и быстрое решение этой задачи представляет большой практический интерес.

Развитие вычислительной техники, ориентированной на применение параллельных вычислительных технологий, даёт возможность эффективно решать эти задачи. Для использования всех возможностей суперкомпьютеров необходимы алгоритмы, способные использовать все преимущества таких ЭВМ. В данной работе представлено описание такого алгоритма с возможностью параллельных вычислений при его реализации на ЭВМ.

1. Уравнения первого порядка

Рассмотрим задачу Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка с оператором $\mathrm{A}(t, \boldsymbol{\varphi}(t))$:

$$d\boldsymbol{\varphi}(t)/dt = \mathrm{A}(t, \boldsymbol{\varphi}(t)), \qquad (1)$$

начальные условия $\boldsymbol{\varphi}(0) = \boldsymbol{\vartheta}$, $t \in [0, 1]$. Предполагается, что оператор $\mathrm{A}(t, \boldsymbol{\varphi}(t))$ удовлетворяет условию Липшица $|\mathrm{A}(t, \boldsymbol{\varphi}_1(t)) - \mathrm{A}(t, \boldsymbol{\varphi}_2(t))| \le M|\boldsymbol{\varphi}_1(t) - \boldsymbol{\varphi}_2(t)|$.

Любая система, определённая на интервале времени $t \in [0, T]$, может быть сведена к системе, определённой на отрезке $[0, 1]$, введением новой переменной $t = Ts$, $s \in [0, 1]$. Тогда $\dfrac{d\boldsymbol{\varphi}(s)}{ds} = \dfrac{d\boldsymbol{\varphi}(t)}{dt}\dfrac{dt}{ds} = \dfrac{d\boldsymbol{\varphi}(t)}{dt}T$, с учётом этого $d\boldsymbol{\varphi}(s)/ds = (\mathrm{A}(s, \boldsymbol{\varphi}(s))T$.

1.1. *Итерационный алгоритм для нахождения решения системы уравнений* (1)

Запишем уравнение (1) следующим образом: $d\boldsymbol{\varphi}(t)/dt = \mathrm{A}(t,\, \boldsymbol{\varphi}(t)) + r\boldsymbol{\varphi}(t) - r\boldsymbol{\varphi}(t)$, введя некоторый положительный параметр r. Вектор $\boldsymbol{\varphi}(t)$ задан в пространстве R_0^n с расстоянием между элементами пространства $D(x, y) = \max|x_j(t) - y_j(t)|$ для $\forall j = 1...n$. Построим последовательность $\boldsymbol{\varphi}_k(t)$ для получения решения уравнения (1) согласно итерационному процессу по следующей схеме, стартуя с некоторого, например, $\boldsymbol{\varphi}_0(t) = \boldsymbol{\vartheta}$:

$$d\boldsymbol{\varphi}_k(t)/dt = \mathrm{A}(t,\, \boldsymbol{\varphi}_{k-1}(t)) + r\boldsymbol{\varphi}_{k-1}(t) - r\boldsymbol{\varphi}_k(t).$$

Обозначим $\boldsymbol{\gamma}_{k-1}(t) = \mathrm{A}(t, \boldsymbol{\varphi}_{k-1}(t)) + r\boldsymbol{\varphi}_{k-1}(t)$, тогда система уравнений примет вид

$$d\boldsymbol{\varphi}_k(t)/dt = -r\boldsymbol{\varphi}_k(t) + \boldsymbol{\gamma}_{k-1}(t). \qquad (2)$$

Особенностью системы (2) является то, что в этих уравнениях неизвестные в векторе $\boldsymbol{\varphi}_k(t)$ не связаны друг с другом, следовательно, могут быть найдены с помощью параллельных вычислительных процессов. Система имеет простое аналитическое решение, можно назвать его “ведущим “ решением

$$\boldsymbol{\varphi}_k(t) = \mathrm{e}^{-rt}\int_0^t \mathrm{e}^{rt'}\boldsymbol{\gamma}_{k-1}(t')dt' + \mathrm{e}^{-rt}\boldsymbol{\vartheta}.$$

Покажем, что организованный итерационный процесс (последовательность “ведущих” решений) сходится к решению уравнения (1). Обозначим

$$\mathrm{B}\boldsymbol{\varphi}(t) = \mathrm{e}^{-rt}\int_0^t \mathrm{e}^{rt'}(\mathrm{A}(t', \boldsymbol{\varphi}(t')) + r\boldsymbol{\varphi}(t'))dt',$$

тогда $\boldsymbol{\varphi}_k(t) = \mathrm{B}\boldsymbol{\varphi}_{k-1}(t) + \mathrm{e}^{-rt}\boldsymbol{\vartheta}$ и некоторая степень оператора B^k будет оператором сжатия, начиная с некоторого k.

Для $\forall$ элементов $\boldsymbol{\theta}_1$ и $\boldsymbol{\theta}_2$ пространства R_0^n, предполагая, что $\mathrm{A}(t,\, \boldsymbol{\varphi}(t))$ удовлетворяет условию Липшица и с учётом того, что $\mathrm{e}^{-r(t-t')} \le 1$ (экспоненту можно убрать из оценок сверху для интегралов, заменив её на 1), получаем:

$$D(\mathrm{B}^1\boldsymbol{\theta}_1, \mathrm{B}^1\boldsymbol{\theta}_2) = \max|\mathrm{B}^1\boldsymbol{\theta}_1 - \mathrm{B}^1\boldsymbol{\theta}_2| = \max\left|\int_0^t (\mathrm{A}(t', \boldsymbol{\theta}_1) + r_1\boldsymbol{\theta}_1)dt' - \int_0^t (\mathrm{A}(t', \boldsymbol{\theta}_2) + r\boldsymbol{\theta}_2)dt'\right| =$$

$$= \max\left|\int_0^t ((\mathrm{A}(t', \boldsymbol{\theta}_1) + r\boldsymbol{\theta}_1) - (\mathrm{A}(t', \boldsymbol{\theta}_2) + r\boldsymbol{\theta}_2))dt'\right| \le \max\int_0^t (|\mathrm{A}(t', \boldsymbol{\theta}_1) - \mathrm{A}(t', \boldsymbol{\theta}_2)| + r|\boldsymbol{\theta}_1 - \boldsymbol{\theta}_2|)dt' \le$$

$$\le (M + r)\int_0^t \max|\boldsymbol{\theta}_1 - \boldsymbol{\theta}_2|\, dt' \le (M + r)\max|\boldsymbol{\theta}_1 - \boldsymbol{\theta}_2|\int_0^t dt' = (M + r)\max|\boldsymbol{\theta}_1 - \boldsymbol{\theta}_2|\, t\big|_0^1 = (M + r)\max|\boldsymbol{\theta}_1 - \boldsymbol{\theta}_2|.$$

Соответственно для оператора B^2 –

$$D(\mathrm{B}^2\boldsymbol{\theta}_1, \mathrm{B}^2\boldsymbol{\theta}_2) = \max|\mathrm{B}^2\boldsymbol{\theta}_1 - \mathrm{B}^2\boldsymbol{\theta}_2| \le \int_0^t (M + r)\max|\mathrm{B}^1\boldsymbol{\theta}_1 - \mathrm{B}^1\boldsymbol{\theta}_2|\, dt' \le$$

$$\le \int_0^t (M + r)^2 \max|\boldsymbol{\theta}_1 - \boldsymbol{\theta}_2|\, t'dt' = (M + r)^2 \max|\boldsymbol{\theta}_1 - \boldsymbol{\theta}_2| \left(\frac{t^2}{2!}\right)\Big|_0^1 = (M + r)^2 \max|\boldsymbol{\theta}_1 - \boldsymbol{\theta}_2| \frac{1^2}{2!}$$

и оператора B^3 – $D(\mathrm{B}^3\boldsymbol{\theta}_1, \mathrm{B}^3\boldsymbol{\theta}_2) = \max|\mathrm{B}^3\boldsymbol{\theta}_1 - \mathrm{B}^3\boldsymbol{\theta}_2| \le \int_0^t (M + r)\max|\mathrm{B}^2\boldsymbol{\theta}_1 - \mathrm{B}^2\boldsymbol{\theta}_2|\, dt' \le$

$$\le \int_0^t (M + r)^3 \max|\boldsymbol{\theta}_1 - \boldsymbol{\theta}_2| \frac{(t')^2}{2!}dt' = (M + r)^3 \max|\boldsymbol{\theta}_1 - \boldsymbol{\theta}_2| \left(\frac{t^3}{3!}\right)\Big|_0^1 = (M + r)^3 \max|\boldsymbol{\theta}_1 - \boldsymbol{\theta}_2| \frac{1^3}{3!}.$$

Получаем рекуррентную формулу, согласно которой

$$D(\mathrm{B}^k\boldsymbol{\theta}_1, \mathrm{B}^k\boldsymbol{\theta}_2) = \max|\mathrm{B}^k\boldsymbol{\theta}_1 - \mathrm{B}^k\boldsymbol{\theta}_2| \le (M + r)^k \frac{1^k}{k!}\max|\boldsymbol{\theta}_1 - \boldsymbol{\theta}_2|$$

Тогда, начиная с некоторого k, получим $(M+r)^k \frac{1^k}{k!} < 1$ и отображение B^k будет сжимающим, следовательно, описанный выше итерационный процесс будет сходиться к решению уравнения (1) [1]. Чем меньше величина $(M+r)$, тем быстрее будет сходиться итерационный процесс.

Таким образом, решение задачи Коши для системы дифференциальных уравнений (1) сводится к нахождению решения системы интегральных уравнений второго рода типа Вольтерра с вырожденным ядром:

$$\varphi(t) = \mathrm{e}^{-rt} \int_0^t \mathrm{e}^{rt'} (\mathrm{A}(t', \varphi(t')) + r\varphi(t'))dt' + \mathrm{e}^{-rt}\vartheta .$$

Продифференцировав это уравнение, получим (1). При $r = 0$ уравнение примет вид $\varphi(t) = \int_0^t \mathrm{A}(t', \varphi(t'))dt' + \vartheta$. Это уравнение может быть сразу получено из (1), если проинтегрировать правую и левую части (1) от 0 до t.

Рассмотрим случай, когда оператор $\mathrm{A}(t)$ не зависит от решения $\varphi(t)$. Тогда задача $d\varphi(t)/dt = \mathrm{A}(t)\varphi(t) + \sum_{i=0}^{m} \alpha_i P_i(t)$ с начальными условиями $\varphi(0) = \vartheta$, $t \in [0, 1]$, может быть сведена к задаче с нулевыми начальными условиями путём замены $\varphi(t) = \vartheta + \xi(t)$ с начальными условиями $\xi(0) = 0$ с источником в уравнении, равным $\mathrm{A}(t)\vartheta + \sum_{i=0}^{m} \alpha_i P_i(t)$.

Предполагается, что источник разложен в ряд по ортогональным полиномам на этом отрезке $t \in [0, 1]$. Базисные полиномы могут быть получены из полиномов Лежандра, заданных на отрезке $t \in [-1, 1]$.

1.2. *Интегрирование по частям как способ получения моментов от решения*

Так как в дальнейшем будем предполагать, что решение (2) разложено в ряд по ортогональным полиномам, необходимо будет находить моменты искомого решения от этих полиномов. В качестве ортогональных полиномов используются полиномы, полученные из полиномов Лежандра, в построении которых применяются степени t. Покажем, как можно аналитически получать моменты от искомого решения от таких полиномов. Известна формула интегрирования по частям, которая имеет вид

$$\int_0^b u dv = uv\Big|_0^b - \int_0^b v du \text{ [2].}$$

Так как основу полиномов образуют степени t, необходимо научиться получать моменты от этих степеней (что позволит в дальнейшем легко получить моменты от самих полиномов). Покажем, как данная формула может быть использована для нахождения момента функции $f(t)$ от t^n.

Рассмотрим интеграл $\int_0^b t^n f(t)dt$ и применим к нему формулу интегрирования по частям

$$\int_0^b t^n f(t)dt = t^n \int f(t)dt\Big|_0^b - n\int_0^b t^{n-1}\left(\int f(t')dt'\right)dt =$$

$$= t^n I^0(t)\Big|_0^b - n\int_0^b t^{n-1} I^0(t)dt, \text{ где функция } I^0(t) = \int_0^t f(t')dt'.$$

Применим формулу интегрирования по частям ко второму слагаемому в предыдущей формуле:

$$\int_0^b t^{n-1} I^0(t)dt = t^{n-1}\int I^0(t)dt\Big|_0^b - (n-1)\int_0^b t^{n-2} I^1(t)dt,$$

где функция $I^1(t) = \int_0^t I^0(t')dt'$.

Последовательно будем применять формулу интегрирования по частям ко второму слагаемому в предыдущей формуле и получим формулу, позволяющую находить момент функции $f(t)$ от функции t^n, зная n интегралов от функции $f(t)$. Формула будет иметь вид

$$\int_0^b t^n f(t)dt = \sum_{i=0}^{n} (-1)^i \frac{n!}{(n-i)!}\left(t^{n-i} I^i(t)\right)\Big|_0^b =$$

$$= \sum_{i=0}^{n} (-1)^i b^{n-i} I^i(b) \frac{n!}{(n-i)!}. \qquad (3)$$

Отметим, что для вычисления момента по этой формуле не надо знать значений

функции $I^i(t)$ на всём интервале интегрирования, нужно знать её значения только на границах интервала интегрирования.

Далее рассмотрим задачу Коши, представленную уравнением

$$d\varphi_j(t)/dt = -r\varphi_j(t) + t^j, \qquad (4)$$

$t \in [0,1]$ с нулевыми начальными условиями $\varphi_j(0) = 0$.

Найдём $I_j^i(t) = \int_0^t I_j^{i-1}(t')dt'$ от решения уравнения (4), индекс j определяет значение степени t. Для этого получим уравнения для $I_j^i(t)$, а решив их, сможем найти эти функции.

Продемонстрируем приём, который можно использовать для линейных уравнений или систем линейных уравнений, решение которых может быть найдено как аналитически, так и численным методом. Проинтегрируем уравнение (4) от 0 до t:

$$\int_0^t \left(\frac{d\varphi_j(t')}{dt'} \right) dt' = \int_0^t -r\varphi_j(t')dt' + \int_0^t (t')^j dt'$$

или

$$\int_0^t \left(\frac{d\varphi_j(t')}{dt'} \right) dt' = -r\int_0^t \varphi_j(t')dt' + \frac{t^{j+1}}{j+1}. \qquad (5)$$

Ранее определяли $I_j^0(t) = \int_0^t \varphi_j(t')dt'$. Очевидно, что для любой функции $\varphi(t)$ можно записать $\int_0^t \left(\frac{d\varphi(t')}{dt'} \right) dt' = \frac{d}{dt}\left(\int_0^t \varphi(t')dt' \right) - \varphi(0)$. С учётом данного соотношения и определения $I^0(t)$ уравнение (5) примет вид

$$dI_j^0(t)/dt = -rI_j^0(t) + i^{j+1}/(j+1). \qquad (6)$$

Таким образом, получили уравнение для нахождения $I_j^0(t) = \int_0^t \varphi_j(t')dt'$ с начальным условием для $I_j^0(0) = 0$. Интегрируя уравнение (6), получим уравнение для определения $I_j^1(t) = \int_0^t I_j^0(t')dt'$,

$$dI_j^1(t)/dt = -rI_j^1(t) + i^{j+2}/[(j+1)(j+2)].$$

И так далее, получаем уравнение для нахождения соответственно интегралов от решения $\frac{dI_j^i(t)}{dt} = -rI_j^i(t) + \frac{i^{j+i+1}}{\prod_{l=0}^{i}(j+l+1)}$, где $j = 0...m$, $i = 0...m$, m – порядок разложения источника $\gamma_{k-1}(t)$ по ортогональным полиномам в уравнении (2).

Для $I_j^i(t) = \int_0^t I_j^{i-1}(t')dt'$ задачи Коши для нахождения всех $I_j^i(t)$ будут с нулевыми начальными условиями.

Найдём рекуррентную формулу для нахождения следующего интеграла:

$F_n = \int_0^1 e^{rt}t^n dt$, $F_0 = \int_0^1 e^{rt}dt = \frac{1}{r}(e^r - 1)$, используя интегрирование по частям

$$F_1 = \int_0^1 e^{rt}t^1 dt = \left(\frac{t^1}{r}e^{rt} \right)\Big|_0^1 - \frac{1}{r}\int_0^1 e^{rt}dt = \frac{1}{r}e^r - \frac{1}{r}F_0.$$

Таким образом, получаем

$$F_n = \int_0^1 e^{rt}t^n dt = \left(\frac{t^n}{r}e^{rt} \right)\Big|_0^1 - \frac{n}{r}\int_0^1 e^{rt}t^{n-1}dt = \frac{1}{r}e^r - \frac{n}{r}F_{n-1}. \qquad (7)$$

Так как решение уравнения (4) есть $\varphi_j(t) = e^{-rt}\int_0^t e^{rt'}(t')^j dt'$, то

$$\varphi_j(1) = e^{-r}F_j. \qquad (8)$$

При проведении описанного в разделе 1 итерационного процесса в реализации на ЭВМ предполагается в уравнении (2), что член $\gamma_{k-1}(t)$ разложен в ряд

$\gamma_{k-1}(t) = \sum_{i=0}^{m} \mu_i P_i(t)$, где $P_i(t)$ – ортогональные полиномы на отрезке $t \in [0,1]$, полученные из полиномов Лежандра. Тогда решение задачи (2) (как следствие её линейности) может быть представлено как сумма решений задач (2) с правой частью $\gamma_{i,k-1}(t) = \mu_i P_i(t)$, а эти задачи, в свою очередь, могут быть редуцированы к простейшим задачам $d\psi_i(t)/dt = -r\psi_i(t) + t^i$ с нулевыми начальными условиями.

Используя формулы (3), (7), (8), легко можно аналитически получить решения и моменты от решения для этих задач, в итоге решение уравнения (2) в виде ряда $\boldsymbol{\varphi}_k(t)=\sum_{i=0}^{m}\boldsymbol{\omega}_i P_i(t)$ и затем использовать это решение для получения следующего $\boldsymbol{\gamma}_k(t)$ в итерационном процессе.

Продемонстрируем алгоритм решения задачи (2). Так как элементы вектора $\boldsymbol{\varphi}(t)$ в уравнении не связаны друг с другом, рассмотрим уравнение

$$d\theta(t)/dt=-r\theta(t)+\sum_{i=0}^{m}D_iP_i(t)\,, \qquad (9)$$

где $\theta(t)$ – элемент вектора $\boldsymbol{\varphi}(t)$ с начальными условиями $\theta(0)=0$.

Уравнение линейно и решение его может быть представлено как $\theta(t)=\sum_{i=0}^{m}D_i f_i(t)$, где $f_i(t)$ – решение уравнения $df_i(t)/dt=-rf_i(t)+P_i(t)$ с начальными условиями $f_i(0)=0$. Найдём моменты $\theta_j=\int_0^1 P_j(t)\theta(t)dt=(P_j(t)\theta(t))$ от ортогональных полиномов для решения уравнения (9). С учётом разложения $P_j(t)=\sum_{l=0}^{m}p_{l,j}t^l$ можно записать

$$\vartheta_j=(P_j(t)\theta(t))=\sum_{i=0}^{m}D_i(P_j(t)f_i(t))=$$

$$=\sum_{i=0}^{m}D_i\sum_{k=0}^{m}(P_j(t)p_{i,k}g_k(t))=\sum_{i=0}^{m}D_i\sum_{k=0}^{m}p_{i,k}(P_j(t)g_k(t)),$$

где $g_k(t)$ – решение уравнения

$$dg_k(t)/dt=-rg_k(t)+t^k \qquad (10)$$

с начальными условиями $g_k(0)=0$. Тогда

$$\vartheta_j=\sum_{i=0}^{m}D_i\sum_{k=0}^{m}p_{i,k}(P_j(t)g_k(t))=$$

$$=\sum_{i=0}^{m}D_i\sum_{k=0}^{m}p_{i,k}\sum_{l=0}^{m}p_{l,j}(t^l g_k(t)),$$

где $(t^l g_k(t))$ – моменты решений задачи (10), которые могут быть найдены через интегрирование по частям.

Если рассматривать ϑ_j как элемент вектора $\boldsymbol{\vartheta}=[\vartheta_0...\vartheta_m]$, тогда можно записать $\boldsymbol{\vartheta}=\mathbf{ZD}$, где вектор $\mathbf{D}=[D_0...D_m]$ из уравнения (9), а $\mathbf{Z}=\|z_{i,j}\|$ есть матрица размерностью $m\times m$ и

$$z_{i,j}=\sum_{k=0}^{m}p_{i,k}\sum_{l=0}^{m}p_{l,j}(t^l g_k(t)) \qquad (11)$$

– элементы этой матрицы. Таким образом, коэффициенты разложения по ортогональным полиномам решения задачи (9) с нулевым начальным условием могут быть найдены как произведение матрицы на вектор $\boldsymbol{\vartheta}=\mathbf{ZD}$. В итоге имеем

$$\theta(t)=\sum_{i=0}^{m}D_i f_i(t)=\sum_{i=0}^{m}\vartheta_i P_i(t)\,.$$

Отметим, что матрица $\mathbf{Z}$ зависит только от r и коэффициентов полиномов порядка m и может быть вычислена один раз в рамках принятой модели для аппроксимации решения. Изначально предполагалось, что r один и тот же для всех элементов вектора $\boldsymbol{\varphi}(t)$, но формально для каждого $\varphi_j(t)=\theta_j(t)$ элемента вектора $\boldsymbol{\varphi}(t)$ можно использовать свой r_j (конечно, с коррекцией получения уравнения (2)).

1.3. *Выбор параметра r*

Если оператор A ограничен величиной M_1 на отрезке $t\in[0,T]$, то интервал времени T всегда можно разбить на N частей с шагом Δt ($M=M_1\Delta t$ на интервале $[0,1]$) таким образом, чтобы величина $(M+r)<1$ была достаточно малой величиной (выбрав $r<1$), тогда уже оператор B^1 будет сжимающим отображением, а задача нахождения решения на отрезке $t\in[0,T]$ сводится к последовательности задач Коши с известными начальными условиями для моментов времени $t_i=(i-1)\Delta t$, $i=1...N$.

Несмотря на то, что формально сходимость итерационного процесса возможна при любом r, фактически параметр r должен быть сравним с M, в этом случае при формировании $\boldsymbol{\gamma}_{k-1}(t)$ в итерационном про-

цессе будет вноситься сравнимое с решением “возмущение” в правую часть системы уравнений (2). Шаг по времени при решении практических задач выбирался так, чтобы $1<(M+r)<1000$ при условии $r = M$. Параметр r и порядок m разложения решения по ортогональным полиномам однозначно определяют матрицу $\mathbf{Z}=\| z_{i,j} \|$, при вычислении которой используются рекуррентные формулы, полученные через интегрирование по частям.

Почему выбрано уравнение (2) для получения “ведущего” решения? Решение ищется посредством итераций по $\boldsymbol{\gamma}_{k-1}(t)$, зависящему от $\boldsymbol{\varphi}_{k-1}(t)$. Система уравнений (2) имеет точное аналитическое решение, что даёт возможность точно вычислять моменты от решения с использованием матрицы $\mathbf{Z}$, т.е. сразу получаются коэффициенты разложения по ортогональным полиномам для решения. В итоге окончательное решение для системы (2) (для каждой компоненты вектора) будет получено именно через аналитическое решение (в рамках принятого порядка разложения по m) дифференциального уравнения вида (2) со “сформировавшейся” в процессе итераций своей правой частью $\boldsymbol{\gamma}_{k-1}(t)$.

2. Программа *EDELWEISS*

Предложенный выше алгоритм использован для решения задачи

$d\boldsymbol{\varphi}(t)/dt = \mathrm{B}\boldsymbol{\varphi}(t)+\sum_{i=0}^{m}\boldsymbol{\alpha}_i t^i$ с начальными условиями $\boldsymbol{\varphi}(0)=\boldsymbol{\vartheta}$, $t\in[0,T]$, B – линейный оператор (матрица большой размерности n). Алгоритм реализован в программе *EDELWEISS*, применяющей технологию MPI [3, 4] для организации параллельного вычислительного процесса и ориентированной на современные вычислительные комплексы.

Рассматриваемая система уравнений, заданная в пространстве размерностью n, путём замены переменной приводится к системе с нулевыми начальными условиями с отображением на отрезок $t\in[0,1]$:

$$d\boldsymbol{\varphi}(t)/dt = \mathrm{A}\boldsymbol{\varphi}(t)+\sum_{l=1}^{m}\boldsymbol{\beta}_l P_l(t). \qquad (12)$$

Возможно использование программы в качестве “решателя” в различных задачах, сводимых к задаче (12). *EDELWEISS* работает с матрицей, упакованной по определённому закону, исключающему наличие нулевых элементов. Программа определяет необходимые связи при организации обмена между параллельными процессами, оптимизируя MPI обмен данными.

2.1. *Параллельная схема решения задачи* (12)

Система уравнений (12) разбивается на подсистемы размерностью N_i. Число подсистем равно N. Тогда $n=\sum_{i=1}^{N}N_i$ Разбивку на подсистемы желательно делать равномерной, $N_i \approx n/N$. Таким образом, число операций на каждом вычислительном ядре будет примерно одинаковым, это необходимо для получения лучшей эффективности организованного параллельного процесса.

Связь между подсистемами осуществляется посредством пересчитываемых на внешних итерациях членов “связи” для каждой подсистемы. Член “связи” отражает влияние других подсистем на данную подсистему. Уравнение для подсистемы i имеет вид

$$d\boldsymbol{\varphi}_i^k(t)/dt = \mathrm{A}_i\boldsymbol{\varphi}_i^{k-1}(t)+r\boldsymbol{\varphi}_i^{k-1}(t)-$$
$$-r\boldsymbol{\varphi}_i^k(t)+\sum_{l=1}^{m}\boldsymbol{\beta}_{i,l}P_l(t)+\sum_{j=1}^{N-1}\boldsymbol{\chi}_{i,j\neq i}^{k-1}(t), \qquad (13)$$

где $t\in[0,1]$; $\sum_{l=1}^{m}\boldsymbol{\beta}_{i,l}P_l(t)$ – член источника; $\boldsymbol{\varphi}_i(0)=0$ – начальные условия; k – номер итерации; $\boldsymbol{\chi}_{i,j}^{k-1}(t)=\mathrm{A}_{j,i}\boldsymbol{\varphi}_j^{k-1}(t)$ – член, связывающий подсистему i с подсистемой j.

Задача (12) решается с использованием N параллельных вычислительных процессов. Каждый вычислительный процесс обеспечивает нахождение решения задачи (13). Задача (13) решается по алгоритму, описанному в главе 1.

Получение решения задачи (12) осуществляется через следующий итерационный процесс.

1) Стартуя с начального приближения, параллельно получаются решения для каждой подсистемы $\boldsymbol{\varphi}_i^0(t)$ (верхний индекс – номер итерации) в виде разложения в ряд по ортогональным полиномам.

2) Далее рассчитывается источник, связывающий подсистемы друг с другом, $\sum_{j=1}^{N-1}\boldsymbol{\chi}_{i,j\neq i}^0(t)$ в виде ряда по ортогональным полиномам с применением передачи данных по MPI стандарту. Итерация считается завершённой.

3) Затем параллельно получаются новые решения для задачи (13) $\boldsymbol{\varphi}_i^1(t)$ и итерационный процесс продолжается по описанной схеме до получения решения задачи (12) с заданной относительной точностью для двух последовательно полученных решений. Если оператор A удовлетворяет условию Липшица, то очевидно, что и $\forall \mathbf{A}_i$ на подпространстве (подсистеме) i будет удовлетворять этому условию

$$|\mathrm{A}_i(t,\boldsymbol{\varphi}_{i,1}(t))-\mathrm{A}_i(t,\boldsymbol{\varphi}_{i,2}(t))|\leq$$
$$\leq M\,|\boldsymbol{\varphi}_{i,1}(t)-\boldsymbol{\varphi}_{i,2}(t)|\leq M\,|\boldsymbol{\varphi}_1(t)-\boldsymbol{\varphi}_2(t)|.$$

Изначально выбирается $r>0$, тогда выберем наибольшую величину между $(M+r)M$ и $(M+r)$. Обозначим её W. Это будет необходимо для проведения дальнейших оценок сверху. Покажем, что предложенный итерационный процесс сходится к решению задачи (12).

Для $\forall i$ оператора $\mathrm{B}_i=\mathrm{e}^{-rt}\int_0^t \mathrm{e}^{rt'}(\mathrm{A}_i+r)dt'$ и для двух $\forall$ элементов основного пространства сходимость итерационного процесса следует из соотношений

$$D(\mathrm{B}_i^1\boldsymbol{\theta}_{1,i},\mathrm{B}_i^1\boldsymbol{\theta}_{2,i})=\max|\mathrm{B}_i^1\boldsymbol{\theta}_{1,i}-\mathrm{B}_i^1\boldsymbol{\theta}_{2,i}|=\int_0^t\max|\boldsymbol{\theta}_{1,i}-\boldsymbol{\theta}_{2,i}|(M+r)dt'+$$
$$+\int_0^t(M+r)M\sum_{j=1}^{N-1}\max|\boldsymbol{\theta}_{1,j\neq i}-\boldsymbol{\theta}_{2,j\neq i}|dt'\leq\max|\boldsymbol{\theta}_{1,i}-\boldsymbol{\theta}_{2,i}|W\int_0^t dt'+W\sum_{j=1}^{N-1}\max|\boldsymbol{\theta}_{1,j\neq i}-\boldsymbol{\theta}_{2,j\neq i}|\int_0^t dt'\leq$$
$$\leq W\sum_{j=1}^{N}\max|\boldsymbol{\theta}_{1,j}-\boldsymbol{\theta}_{2,j}|(t)|_0^1\leq WN\max|\boldsymbol{\theta}_1-\boldsymbol{\theta}_2|\left(\frac{t}{1!}\right)|_0^1=WN\max|\boldsymbol{\theta}_1-\boldsymbol{\theta}_2|\frac{1^1}{1!}.$$

При проведении оценки для $D(\mathrm{B}_i^1\boldsymbol{\theta}_{1,i},\mathrm{B}_i^1\boldsymbol{\theta}_{2,i})$ множители $(M+r)$ и $(M+r)M$ заменили на W, что только усилило оценку сверху (с учётом предположений, сделанных выше) и позволило упростить (собрав все члены под один знак суммы) окончательную формулу для выполняемой оценки.

Для $D(\mathrm{B}_i^2\boldsymbol{\theta}_{1,i},\mathrm{B}_i^2\boldsymbol{\theta}_{2,i})=\max|\mathrm{B}_i^2\boldsymbol{\theta}_{1,i}-\mathrm{B}_i^2\boldsymbol{\theta}_{2,i}|=\int_0^t\max|\mathrm{B}^1\boldsymbol{\theta}_{1,i}-\mathrm{B}^1\boldsymbol{\theta}_{2,i}|(M+r)dt'+$

$$+\int_0^t(M+r)M\sum_{j=1}^{N-1}\max|\mathrm{B}^1\boldsymbol{\theta}_{1,j\neq i}-\mathrm{B}^1\boldsymbol{\theta}_{2,j\neq i}|dt'\leq$$
$$\leq\max|\mathrm{B}^1\boldsymbol{\theta}_{1,i}-\mathrm{B}^1\boldsymbol{\theta}_{2,i}|(M+r)\int_0^t dt'+(M+r)\sum_{j=1}^{N-1}\max|\mathrm{B}^1\boldsymbol{\theta}_{1,j\neq i}-\mathrm{B}^1\boldsymbol{\theta}_{2,j\neq i}|\int_0^t dt'\leq$$
$$\leq W\sum_{j=1}^{N}\int_0^t\max|\boldsymbol{\theta}_{1,j}-\boldsymbol{\theta}_{2,j}|dt'\leq W\sum_{j=1}^{N}\int_0^t\left(\sum_{m=1}^{N}W\max|\boldsymbol{\theta}_{1,m}-\boldsymbol{\theta}_{2,m}|\frac{t'}{1!}\right)dt'\leq$$
$$\leq W^2N^2\max|\boldsymbol{\theta}_1-\boldsymbol{\theta}_2|\left(\frac{t^2}{2!}\right)|_0^1=W^2N^2\max|\boldsymbol{\theta}_1-\boldsymbol{\theta}_2|\frac{1^2}{2!}$$

получаем рекуррентную формулу, по которой для оператора B_i^k

$$D(\mathrm{B}_i^k\boldsymbol{\theta}_{1,i},\mathrm{B}_i^k\boldsymbol{\theta}_{2,i})=\max|\mathrm{B}_i^k\boldsymbol{\theta}_{1,i}-\mathrm{B}_i^k\boldsymbol{\theta}_{2,i}|\le W^kN^k\max|\boldsymbol{\theta}_1-\boldsymbol{\theta}_2|\left(\frac{t^k}{k!}\right)\Big|_0^1=W^kN^k\max|\boldsymbol{\theta}_1-\boldsymbol{\theta}_2|\frac{1^k}{k!}. \quad (14)$$

Неравенство (14) справедливо для $\forall i$ подпространства, следовательно, и для всего пространства. Начиная с некоторого k, получим $W^kN^k\frac{1^k}{k!}<1$, следовательно, отображение будет сжимающим отображением, и организованный итерационный процесс будет сходиться к решению (12).

В данной модели предполагается связь каждого подпространства с каждым. Полное количество связей в системе в общем случае равно N^2. Алгоритм нахождения решения задачи (12) достаточно хорошо распараллеливается, так как все операции при вычислении решения сведены к умножению матрицы на вектор.

Следует отметить, что при наличии полного количества связей в системе при большом значении N рассматриваемая параллельная схема будет мало интересна, так как итерационный процесс получения решения будет длительным.

Для задач, где оператор A описывает конечно-разностную аппроксимацию уравнений в частных производных первого или второго порядка по пространственным координатам в прямоугольной системе координат XYZ и число пространственных подобластей (подпространств) равно N, связь подобластей будет только с соседними подобластями. Таким образом, полное число связей в системе будет не более $6N$, система будет слабосвязанной.

Для таких задач эффективность параллельного процесса будет значительной даже при больших значениях N, так как коэффициент в (14) при $\max|\boldsymbol{\theta}_1-\boldsymbol{\theta}_2|$ будет иметь вид $W^k7^k\frac{1^k}{k!}$ (7 есть сумма подпространство плюс 6 соседей) и не зависеть от N. При $k\approx 12$ $k!$ “догонит” 7^k и получим $\frac{7^k}{k!}<1$. Вычислительную модель можно масштабировать (по числу используемых параллельных процессов, уменьшая вычислительную нагрузку на процесс) до тех пор, пока время обмена данными будет сравнимо со временем вычисления решения на итерации.

3. Уравнения второго порядка

Система линейных дифференциальных уравнений второго порядка

$$d^2\boldsymbol{\varphi}(t)/dt^2=\mathrm{A}(t)\boldsymbol{\varphi}(t)+\sum_{i=0}^{m}\boldsymbol{\alpha}_iP_i(t), \quad (15)$$

$t\in[0,1]$, с начальными условиями $\boldsymbol{\varphi}(0)=\boldsymbol{\vartheta}$ и $\boldsymbol{\varphi}'(0)=\boldsymbol{\theta}$ путём замены переменных $\boldsymbol{\varphi}(t)=\boldsymbol{\vartheta}+\boldsymbol{\theta}t+\boldsymbol{\xi}(t)$ может быть сведена к системе с нулевыми начальными условиями $\boldsymbol{\xi}(0)=0$, $\boldsymbol{\xi}'(0)=0$. Если сделать замену переменных $\boldsymbol{\xi}(t)=\int_0^t\boldsymbol{\psi}(t')dt'$, то (15) может быть представлена как система дифференциальных уравнений первого порядка

$$d\boldsymbol{\psi}(t)/dt=\mathrm{A}(t)\int_0^t\boldsymbol{\psi}(t')dt'+\sum_{i=0}^{m}\boldsymbol{\beta}_iP_i(t), \quad (16)$$

$t\in[0,1]$, с начальными условиями $\boldsymbol{\psi}(0)=0$.

Полагая, что оператор $\mathrm{A}(t)$ удовлетворяет условию Липшица $|\mathrm{A}(t)\boldsymbol{\psi}_1(t)-\mathrm{A}(t)\boldsymbol{\psi}_2(t)|\le M|\boldsymbol{\psi}_1(t)-\boldsymbol{\psi}_2(t)|$, и с учётом того, что $0\le t\le 1$, будет справедливо неравенство

$$|\mathrm{A}(t)\int_0^t\boldsymbol{\psi}_1(t')dt'-\mathrm{A}(t)\int_0^t\boldsymbol{\psi}_2(t')dt'|=$$

$$=|\int_0^t\mathrm{A}(t)(\boldsymbol{\psi}_1(t)-\boldsymbol{\psi}_2(t))dt'|\le\int_0^t|\mathrm{A}(t)(\boldsymbol{\psi}_1(t)-\boldsymbol{\psi}_2(t))|dt'\le$$

$$\le tM|\boldsymbol{\psi}_1(t)-\boldsymbol{\psi}_2(t)|\le M|\boldsymbol{\psi}_1(t)-\boldsymbol{\psi}_2(t)|,$$

следовательно, для получения решения системы (16) можно использовать алгоритм, рассмотренный в главах 1…3.

4. Тестовые задачи для *EDELWEISS*

В качестве первой тестовой задачи, например, можно рассмотреть начально-краевую задачу прохождения излучения в пластине, заданную уравнением

$$\partial\varphi(x,t)/\partial t = -\mu\,\partial\varphi(x,t)/\partial x - \Sigma_{\text{tot}}\varphi(x,t)$$

с граничным условием $\varphi(0,t)=\varphi_0$. Независимо от начального условия для достаточно большого t получаем асимптотическое по времени решение $\varphi(x)=\varphi_0\exp(-\Sigma_{\text{tot}}x/\mu)$.

Для этой задачи при $\mu=1$, $\Sigma_{\text{tot}}=1$ см$^{-1}$, $\varphi_0=1$ для t >20 секунд получаем точное решение $\varphi(x)=\exp(-x)$. Расчёты по программе *EDELWEISS* для размера пластины l = = 10 см. (шаг пространственной дискретизации dx = l/10 000, число используемых моментов по времени для аппроксимации решения равно 3, критерий (M + r) = 10, r = = M, шаг по времени $\Delta t \approx 0{,}0035$ с, относительный критерий точности для выхода из итераций 10^{-12}) дали следующий результат:

– максимальное относительное отклонение численного решения от точного решения составило 0,05 %;

– выигрыш по времени с использованием 4 ядер (3 исполнителя и 1 контрольное ядро) для нахождения численного решения задачи по параллельному алгоритму составил ~ 2 раза при использовании MPICH (WINDOWS 7×64) и процессора Intel Core *i*7 (4 физических ядра);

– моделирование вычисления решения на числе ядер > 4 даёт устойчивый (независимый от используемого числа виртуальных ядер) результат.

Рассмотрим следующую тестовую задачу вида $\partial\varphi(x,t)/\partial t = \Delta\varphi(x,t)$ с нулевыми начальными условиями и краевыми условиями $\varphi(0,t)=1$ и $\varphi(1,t)=2$, $x\in[0,1]$. Решением этого уравнения при $t\to\infty$ будет функция $\varphi(x,t)=1+x$.

Численное решение для этой задачи при числе используемых моментов для решения, равном 3, (M + r) = 100, r = M , шаге по времени $\Delta t \approx 2\cdot 10^{-5}$ с на сетке n = 1000 даёт относительное отклонение от точного результата ~ 0,01 % и асимптотическую сходимость с относительной точностью ε = 10^{-10}. Выигрыш по времени с использованием 4 ядер (3 исполнителя и 1 контрольное ядро) для нахождения численного решения задачи по параллельному алгоритму составил ~ 2 раза.

Рассмотрим следующую тестовую задачу вида

$$\partial\varphi(x,t)/\partial t = \Delta\varphi(x,t) + q(x) \qquad (17)$$

с нулевыми начальными условиями и краевыми условиями $\varphi(0,t)=0$ и $\varphi(1,t)=0$, $x\in[0,1]$. Если $q(x)=\lambda\psi(x)$, где $\psi(x)$ – решение задачи

$$\Delta\psi(x) + \lambda\psi(x) = 0, \qquad (18)$$

$x\in[0,1]$, с краевыми условиями $\psi(0)=0$, $\psi(1)=0$, тогда решением уравнения (17) при $t\to\infty$ будет функция $\varphi(x,t)=\psi(x)$.

При конечно-разностной аппроксимации $\Delta\psi_k = (\psi_{k-1} - 2\psi_k + \psi_{k+1})/h^2$, где h – шаг сетки, известно точное решение задачи (18) $x\in[0,l]$ на сетке размерности n ($0...n+1$ узлов).

Собственные функции имеют вид $\psi_k(x)=\sin(k\pi x/l)$, $\lambda_k=(4/h^2)\sin^2(k\pi h/2l)$, а $x=ih$, $k=1,2...n$ [5]. Для различных n = = 100, 250, 500, 1000, 1 500, 2 000, 3 000 по программам *EDELWEISS* и *CHEBYSHEV* (“Чебышевский ускоритель”, $\varphi_{k+1}(x)=\varphi_k(x)+\tau_{k+1}(\Delta\varphi_k(x)+q(x))$ с упорядочиванием τ_{k+1}, найденных через корни полинома Чебышева [5]) решена задача (17) со значением $q_n(x)=\lambda_n\psi_n(x)$. Число используемых моментов для аппроксимации решения для программы *EDELWEISS* выбиралось равным 3, (r + M) = 100, r = M, асимптотическая сходимость с относительной точностью ε = 10^{-8}.

В таблице представлены максимальное относительное отклонение численных результатов от точного решения $\psi_n(x)$ и значения для собственных чисел задачи (18) для различных n. Старт с начального приближения, равного 1. На рисунке дан график зависимости максимальной относительной асимптотической погрешности результата от числа итераций.

Т а б л и ц а. Максимальное относительное отклонение (в процентах $\delta = \max|(\varphi_n - \psi_n)/\psi_n|$) численных результатов от точного решения и значения собственных чисел задачи (18)

n	100	250	500	1000	1 500	2 000	3 000
EDELWEISS	$6{,}89\cdot10^{-8}$	$9{,}78\cdot10^{-8}$	$6{,}34\cdot10^{-7}$	$7{,}39\cdot10^{-7}$	$9{,}10\cdot10^{-7}$	$4{,}07\cdot10^{-6}$	$4{,}52\cdot10^{-6}$
CHEBYSHEV	$3{,}41\cdot10^{-7}$	$4{,}96\cdot10^{-7}$	$5{,}24\cdot10^{-7}$	$5{,}42\cdot10^{-7}$	$5{,}81\cdot10^{-7}$	$6{,}18\cdot10^{-7}$	$7{,}63\cdot10^{-7}$
λ_1	9,86	9,86	9,86	9,86	9,86	9,86	9,86
λ_n	$4{,}07\cdot10^{4}$	$2{,}52\cdot10^{5}$	$1{,}00\cdot10^{6}$	$4{,}00\cdot10^{6}$	$9{,}01\cdot10^{6}$	$1{,}60\cdot10^{7}$	$3{,}60\cdot10^{7}$

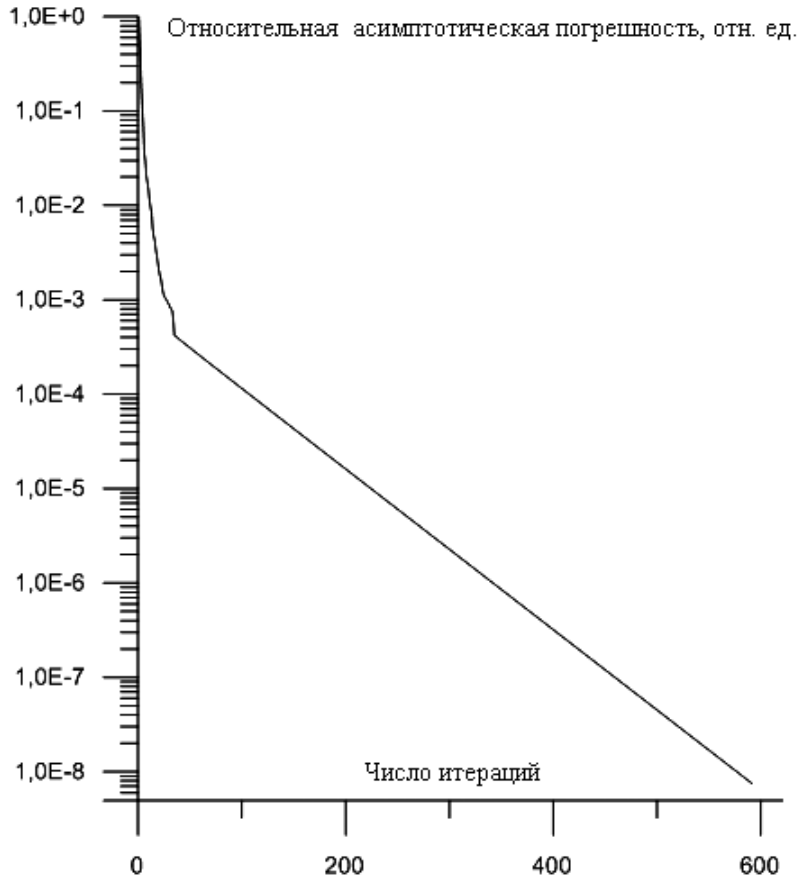

Рисунок. График максимальной относительной асимптотической погрешности $\delta = \max|(\psi_{i+1} - \psi_i)/\psi_{i+1}|$ (i – номер итерации) решения задачи (18) в зависимости от числа итераций (временны́х шагов). Расчёт по программе *EDELWEISS*, размерность сетки n = 1000

Заключение

Предложен алгоритм получения решения линейной задачи Коши в виде ряда по ортогональным полиномам с возможностью использования параллельных вычислений на современных вычислительных комплексах. Показана сходимость параллельного итерационного процесса к решению задачи.

Создана программа *EDELWEISS*, в которой реализован предложенный алгоритм для решения систем линейных дифференциальных уравнений первого порядка большой размерности.

Алгоритм хорошо распараллеливается с возможностью применения GPU (графических процессоров) и MPI технологии, так как большинство вычислительных операций разделены и представляют собой умножение матрицы на вектор.

Следует отметить, что найденное по данному алгоритму решение задачи Коши является приближённым. Точность полученного решения определяется рамками вычислительной модели – порядком m раз-

ложения в ряд по ортогональным полиномам “ведущего” решения в процессе проведения итераций.

Программа *EDELWEISS* может быть использована в качестве “решателя” для задач, сводимых к линейной задаче Коши, например, применялась для решения задач массопереноса радиоактивных продуктов деления по контурам ядерных энергетических установок.

На базе “решателя” *EDELWEISS* и программы *LUCKY* [6, 7] созданы программы *LUCKY_TD* (нахождение решения начально-краевой задачи для нестационарного уравнения переноса Больцмана в рамках группового по энергии P_mS_n приближения) и *LUCKY_HEAT* (нахождение решения нестационарного уравнения теплопроводности), использующие суперкомпьютеры с применением MPI технологии для обмена данными между параллельными процессами.

Программы унаследовали геометрический модуль, стиль задания исходных данных, а также идеологию распараллеливания вычислительного процесса по пространственным подобластям от программы *LUCKY*. Вычислительный процесс получения решения по этим программам хорошо масштабируется по числу используемых вычислительных ядер до нескольких тысяч, что обеспечивается малым числом связей в системе (не более 6*N*), обусловленных только числом соседей для подобласти не более 6.

К особенностям предложенного алгоритма можно отнести:

– возможность решать нелинейные задачи с пересчётом оператора $A(\varphi(t),t)$ при проведении итерационного процесса;

– простоту и возможность аналитически (точно) вычислять моменты от решения;

– оператор Z, найденный по формуле (11), один и тот же для всех элементов вектора и может быть вычислен заранее один раз в рамках выбранной вычислительной модели и определяется значением *r* и порядком *m* разложения решения в ряд по ортогональным полиномам;

– использование параллельных вычислений в процессе получения решения.

Результаты расчётов по программе *EDELWEISS* для рассмотренных тестовых задач хорошо согласуются с точными решениями для этих задач.

Автор выражает глубокую благодарность Юрию Андреевичу Повещенко за помощь в подборе тестовых задач для программы *EDELWEISS* и за программу получения параметров для “Чебышевского ускорителя”.

Список литературы

1. ***Колмогоров А.Н., Фомин С.В.*** Элементы теории функций и функционального анализа. М.: Наука, 1972.
2. ***Корн Г., Корн Т.*** Справочник по математике. М.: Наука, 1970.
3. ***Воеводин В.В., Воеводин Вл.В.*** Параллельные вычисления. СПб.: БХВ-Петербург, 2002.
4. ***Антонов А.С.*** Параллельное программирование с использованием технологии MPI. М.: МГУ, 2004.
5. ***Самарский А.А.*** Введение в теорию разностных схем. М.: Наука, 1971.
6. ***Моряков А.В.*** Использование параллельных технологий для решения многогруппового уравнения переноса методом дискретных ординат // ВАНТ. Сер. Физика ядерных реакторов, 2002, вып. 4 , с. 3–14.
7. ***Моряков А.В.*** Алгоритм получения угловых потоков в ячейке для многопроцессорных программ LUCKY и LUCKY_C. Там же, 2011, вып. 1, с. 3–6.

Контактная информация –
Моряков Алексей Владимирович, в. н. с., тел.: (499)196-71-98, e-mail: sailor@orc.ru

Вопросы атомной науки и техники.
Сер. Физика ядерных реакторов, 2015, вып. 2,
с. 4–14.

УДК 621.039

Программа *LUCKY_TD* для решения нестационарного уравнения переноса с использованием параллельных вычислений

А.В. Моряков,
НИЦ “Курчатовский институт”, 123182, Москва, пл. Курчатова, 1
Поступила в редакцию 27.10.2014 г., исправленный вариант – 24.02.2015 г.

Представлен алгоритм решения нестационарного уравнения переноса в рамках группового P_mS_n метода с использованием параллельных вычислений. Предложенный алгоритм реализован в программе *LUCKY_TD*. Программа создана для применения на суперкомпьютерах, в которых реализован MPI стандарт для обмена данными между параллельными процессами.
Ключевые слова: алгоритм, уравнение переноса, P_mS_n метод, итерационный процесс, программа, суперкомпьютер, функция, решение, пространственная подобласть.

Program *LUCKY_TD* for Solution of Time Dependent Transport Equation Using Parallel Calculations. ***A.V. Moryakov,*** *NRC “Kurchatov Institute”, 1, Kurchatov Sq., Moscow, 123182.*

This paper is devoted for the algorithm of solution of time dependent transport equation using parallel calculations. This algorithm was realized in *LUCKY_TD* code which was created especially for supercomputers with MPI technology of exchange dates for parallel processes.
Key Words: Algorithm, Transport Equation, P_mS_n Approximation, Iteration Process, Program, Supercomputer, Function, Solution, Space Domain.

Введение

Повышенные требования к безопасности ядерной энергетики стимулируют интерес к надёжному моделированию динамических и аварийных процессов, сопровождающих работу ядерных энергетических установок (ЯЭУ). Развитие вычислительной техники привело к появлению суперкомпьютеров, позволяющих вести параллельные вычисления на сотнях и тысячах вычислительных ядер, что даёт возможность детального моделирования нестационарных нейтронно-физических процессов в ЯЭУ.

Программа *LUCKY_TD* (*LUCKY* time dependent) является развитием серии компьютерных кодов *LUCKY* (*LUCKY*, *LUCKY_C*) [1…4] и позволяет получить решение нестационарного уравнения переноса (начально-краевой задачи) в рамках группового P_mS_n метода.

Программа ориентирована на работу с многопроцессорными суперкомпьютерами, поддерживающими MPI (Message Passing Interface) [5, 6] стандарт передачи данных между процессами, производящими параллельные вычисления, и унаследовала геометрический модуль и идеологию задания исходных данных программ серии *LUCKY*. В данной работе представлена математическая модель для получения решения нестационарного уравнения переноса, реализованная в программе *LUCKY_TD*.

1. Основные уравнения

Нестационарный перенос нейтронов в реакторе в рамках группового по энергии P_mS_n приближения в прямоугольной системе координат для расчётного объёма V с учётом запаздывающих нейтронов и уравнений для предшественников запаздывающих нейтронов описывается системой уравнений [7]

$$\frac{1}{\vartheta_j}\frac{\partial\varphi_{i,j}(x,y,z,t)}{\partial t}+\Omega_{x,i}\frac{\partial\varphi_{i,j}(x,y,z,t)}{\partial x}+\Omega_{y,i}\frac{\partial\varphi_{i,j}(x,y,z,t)}{\partial y}+\frac{\partial\varphi_{i,j}(t,x,y,z)}{\partial z}+\Sigma_{\mathrm{tot},j}(x,y,z)\varphi_{i,j}(x,y,z,t)=$$

$$= \chi_j (1-\beta) \sum_{j=1}^{NGR} \nu_j \Sigma_{\text{fis},j}(x,y,z) \sum_{i=1}^{N} \omega_i \varphi_{i,j}(x,y,z,t) + \sum_{j_1=1}^{NGR} \sum_{i_1=1}^{N} \mathrm{P}_{i_1 \to i, j_1 \to j}(x,y,z) \varphi_{i_1,j_1}(x,y,z,t) +$$

$$+ \sum_{k=1}^{NGRD} \lambda_k \gamma_j C_k(x,y,z,t) + Q_j(x,y,z,t);$$

$$\frac{dC_k(x,y,z,t)}{dt} = -\lambda_k C_k(x,y,z,t) + \beta_k \sum_{j=1}^{NGR} \nu_j \Sigma_{\text{fis},j}(x,y,z) \sum_{i=1}^{N} \omega_i \varphi_{i,j}(x,y,z,t) \qquad (1)$$

с начальными условиями

$$\varphi_{i,j}(x,y,z,t_0) = F_{i,j}(x,y,z),$$

$$C_k(x,y,z,t_0) = G_k(x,y,z)$$

и краевыми условиями, например, вакуум (ноль влёта частиц в систему)

$\varphi_{i,j}(x,y,z,t) = 0$ для $(\mathbf{\Omega}_i, \boldsymbol{\tau}) < 0$, где $(x,y,z) \in S$, $\boldsymbol{\tau}$ – вектор нормали к поверхности S расчётного объёма V.

Здесь $i = 1...N$ – индекс углового направления для угловой квадратуры; $j = 1...NGR$ – индекс энергетической группы; $k = 1...NGRD$ – индекс группы для предшественников запаздывающих нейтронов; λ_k – постоянная распада для предшественников запаздывающих нейтронов k-й группы; γ_j – доля j-й группы в спектре запаздывающих нейтронов; β – доля запаздывающих нейтронов в спектре деления; β_k – доля запаздывающих нейтронов k-й группы предшественников запаздывающих нейтронов в спектре деления, $\beta = \sum_{k=1}^{NGRD} \beta_k$; χ_j – спектр нейтронов деления; $\Omega_{i,x}, \Omega_{i,y}, \Omega_{i,z}$ – направляющие косинусы для угловой квадратуры; ϑ_j – средняя скорость нейтронов для энергетической группы; ω_i – веса для интегрирования по угловой квадратуре; $\Sigma_{\text{tot},j}(x,y,z)$ – полное сечение для энергетической группы j; $\nu_j \Sigma_{\text{fis},j}(x,y,z)$ – сечение деления для энергетической группы j; $\mathrm{P}_{i_1 \to i, j_1 \to j}(x,y,z)$ – вероятности переходов нейтронов для расчёта интегралов рассеивания с углового направления $i_1 \to i$ от энергетической группы $j_1 \to j$; $\varphi_{i,j}(x,y,z)$ – угловые потоки нейтронов; $C_k(x,y,z,t)$ – предшественники запаздывающих нейтронов; $Q_j(x,y,z,t)$ – распределённый источник нейтронов в энергетической группе j.

2. Выбор расчётной модели

Задача (1) может быть сведена к задаче Коши, алгоритм решения которой описан в работе [8]. Сформулируем эту задачу для простой модели, когда частные производные по пространству получены с помощью конечно-разностной аппроксимации по схеме первого порядка точности.

Рассмотрим пространственный элемент $\Delta V = \Delta x \Delta y \Delta z$ в расчётном объёме V в виде параллелепипеда, представленного на рис. 1. Для восьми угловых октантов единичной сферы $\mathbf{\Omega}$ будем ставить в соответствие значения функции углового потока в вершинах $f_1 ... f_8$ параллелепипеда. Вершины $f_5 ... f_8$ будут соответствовать октантам верхней полусферы, а $f_1 ... f_4$ – октантам нижней полусферы.

Для линейного приближения при аппроксимации углового потока в ячейке по пространству угловой поток в первом октанте угловой сферы (порядок следования

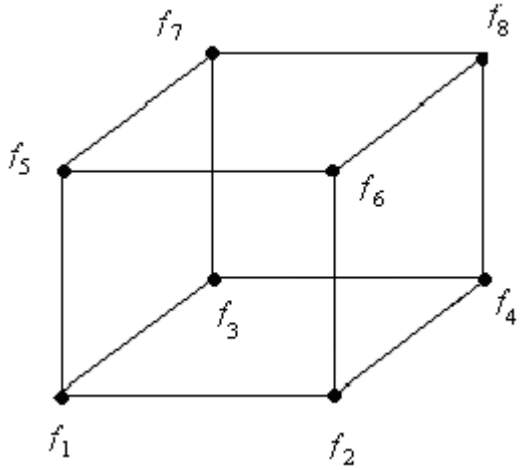

Рис. 1. Схема элементарной ячейки

вершин $f_1 ... f_8$) представляется как функция вида

$$f(x,y,z) = a_1 + a_2 x + a_3 y + \\ + a_4 z + a_5 xy + a_6 xz + a_7 yz + a_8 xyz.$$

Если шаг пространственной сетки по координатным осям есть соответственно $\Delta x, \Delta y, \Delta z$, тогда коэффициенты $a_1 ... a_8$ определяются по вершинам элементарной ячейки: $a_1 = f_1$, $a_2 = \dfrac{f_2 - f_1}{\Delta x}$, $a_3 = \dfrac{f_3 - f_1}{\Delta y}$,

$a_4 = \dfrac{f_5 - f_1}{\Delta z}$, $a_5 = \dfrac{f_4 - f_2 - f_3 + f_1}{\Delta x \Delta y}$,

$a_6 = \dfrac{f_6 - f_2 - f_5 + f_1}{\Delta x \Delta z}$, $a_7 = \dfrac{f_7 - f_3 - f_5 + f_1}{\Delta y \Delta z}$,

$a_8 = \dfrac{f_8 - f_4 - f_1 - f_6 + f_2 - f_7 + f_3 + f_5}{\Delta x \Delta y \Delta z}$.

Значение углового потока в вершине f_8 соответствует значению этого потока в этом октанте для рассматриваемой ячейки, все значения в других вершинах ячейки соответствуют значению углового потока для данного октанта в соседних ячейках по общим границам с рассматриваемой пространственной ячейкой.

С учётом полученных коэффициентов

$$\Omega_x \frac{\partial f(x,y,z)}{\partial x} + \Omega_y \frac{\partial f(x,y,z)}{\partial y} + \Omega_z \frac{\partial f(x,y,z)}{\partial z} = \\ = -\frac{\Omega_z}{\Delta z} f_4 - \frac{\Omega_y}{\Delta y} f_6 - \frac{\Omega_x}{\Delta x} f_7 + \left(\frac{\Omega_x}{\Delta x} + \frac{\Omega_y}{\Delta y} + \frac{\Omega_z}{\Delta z} \right) f_8. \quad (2)$$

Для других октантов соотношение (2) получается согласно следованию вершин в ячейке в системе координат, совпадающей с направлением октанта. Для второго октанта порядок следования вершин будет ($f_2, f_1, f_4, f_3, f_6, f_5, f_8, f_7$). Соответственно для следующих октантов порядок следования вершин будет

($f_4, f_3, f_2, f_1, f_8, f_7, f_6, f_5$),
($f_3, f_4, f_1, f_2, f_7, f_8, f_5, f_6$),
($f_5, f_6, f_7, f_8, f_1, f_2, f_3, f_4$),
($f_6, f_5, f_8, f_7, f_2, f_1, f_4, f_3$),
($f_8, f_7, f_6, f_5, f_4, f_3, f_2, f_1$),
($f_7, f_8, f_5, f_6, f_3, f_4, f_1, f_2$).

Например, (2) для угловых направлений 8-го октанта будет иметь вид

$$\Omega_x \frac{\partial f(x,y,z)}{\partial x} + \Omega_y \frac{\partial f(x,y,z)}{\partial y} + \Omega_z \frac{\partial f(x,y,z)}{\partial z} = \\ = -\frac{\Omega_z}{\Delta z} f_6 - \frac{\Omega_y}{\Delta y} f_4 - \frac{\Omega_x}{\Delta x} f_1 + \left(\frac{\Omega_x}{\Delta x} + \frac{\Omega_y}{\Delta y} + \frac{\Omega_z}{\Delta z} \right) f_2.$$

В рамках группового по энергии и $P_m S_n$ приближения по индикатрисе рассеивания и угловой квадратуре в пространственной ячейке, имеющей индексацию в пространстве X, Y, Z, i, j, k соответственно координатным осям, поставим в соответствие массив (содержащий элементы вектора искомой функции) $\varphi(lm, i, j, k)$, где размерность $lm = N \cdot NGR + NGRD$, имеющий следующую структуру.

Первые элементы массива $N \cdot NGR$ соответствуют угловым потокам нейтронов в энергетических группах, а $NGRD$ – значениям предшественников запаздывающих нейтронов. Суммарная размерность вектора $\boldsymbol{\varphi}$ равна $(N \cdot NGR + NGRD) \times im \times jm \times km$, где im, jm, km – размерность пространственной сетки по осям X, Y, Z, соответственно. Тогда уравнение (1) для вектора $\boldsymbol{\varphi}$ будем рассматривать в виде

$$d\boldsymbol{\varphi}(t)/dt = \mathrm{A}\boldsymbol{\varphi}(t) + \sum_{l=1}^{m} \boldsymbol{\alpha}_l P_l(t) \quad (3)$$

с определёнными краевыми условиями и начальными условиями $\boldsymbol{\varphi}(t_0) = \boldsymbol{\varphi}_0$, $P_l(t)$ – ортогональные полиномы на отрезке времени $t \in [0, 1]$, полученные из полиномов Лежандра [9]. Ряд по полиномам в уравнении (3) представляет член источника в уравнении (1). Решение (3) получаем по алгоритму, описанному в [8].

Оператор A составляют коэффициенты для уравнения (1) с учётом соотношения (2) для члена с частными производными по пространству. Любой элемент вектора $\boldsymbol{\varphi}(t)$ в пространственной ячейке согласно (2) связан не более чем с 3-мя элементами вектора в трёх соседних пространственных ячейках, а в целом значения углового потока во всех октантах единичной сферы не более чем с 6-ю соседними пространственными ячейками.

Таким образом, при организации параллельного итерационного процесса по прост-

ранственным подобластям числом k (с использованием идеологии, принятой в программе *LUCKY*) связь для любой пространственной подобласти будет не более чем с 6 соседними пространственными подобластями. Следовательно, MPI обмен данными между параллельными процессами не будет превосходить величины $6k$, таким образом, система будет слабосвязанная, это обеспечит умеренные потери времени на обмен данными и, как следствие, хорошую эффективность параллельного вычислительного процесса

3. Тестирование программы

Проверка верности решения по *LUCKY_TD* на тестах, где источник излучения распределён по пространству и не зависит от времени (получение асимптотического решения), проводилась с помощью программы *LUCKY* в рамках одной и той же расчётной модели (по числу энергетических групп, порядку P_mS_n приближения, пространственной сетке, числу используемых процессоров). Проведенные тесты показали хорошее совпадение результатов, полученных по программам *LUCKY* и *LUCKY_TD*.

Также проводились тесты для динамического нахождения решения задач на собственное значение в размножающих средах.

Тестовая задача

В качестве тестовой задачи рассмотрена задача для ячейки (размеры ячейки по всем осям 30 см.) из двух материалов, типичных для ВВЭР (внешний цилиндр и параллелепипед, материал вода). Геометрия для тестовой задачи представлена на рис. 2. Граничные условия для всех границ свободные (ноль влёта частиц в систему).

Для 8 энергетических групп нейтронов (библиотека констант BUGLE-96 [10]) в P_0S_4 приближении получено асимптотическое решение от равномерно распределённого источника нейтронов со спектром деления ^{235}U, расположенного в цилиндре (материал топливо).

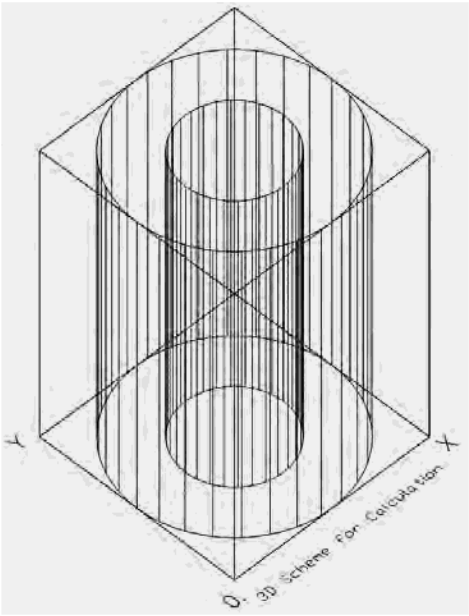

Рис. 2. Геометрия для тестовой задачи

Относительное расхождение результатов, полученных по программам *LUCKY* и *LUCKY_TD* (независимо от начального приближения при получении стационарного решения) на одной и той же пространственной сетке, во всех энергетических группах не превышало 0,001 %.

4. Дополнительно используемые программные средства

Для контроля и визуализации геометрии при задании исходных данных так же, как и в программе *LUCKY*, применяется программа AVTOCAD [11], а для получения ядерно-физических данных для расчёта используются библиотеки ядерных констант в формате GIT (group independent tape) [10] с возможностью применения различного порядка разложения индикатрисы рассеивания по полиномам Лежандра, доступного в исходной библиотеке ядерных данных.

5. Решаемые задачи

С помощью программы *LUCKY_TD* можно решать следующие задачи:

1) решение нестационарного уравнения переноса в задачах с пространственно-распределённым источником, зависящим от времени;

2) решение задачи на собственное значение с получением заданного значения мощности, с возможностью последующего моделирования решения, вызванного внесением реактивности, посредством изменения материального состава по заранее заданному сценарию.

Заключение

Разработана программа *LUCKY_TD*, в которой реализован алгоритм [8] для решения линейной задачи Коши для систем обыкновенных дифференциальных уравнений большой размерности с применением параллельных вычислений. Возможность использования суперкомпьютеров при расчётах по программе позволяет применять детальные (с дискретизацией расчётной области по пространству до нескольких миллиметров) расчётные модели.

Вычислительный процесс может масштабироваться (посредством увеличения числа применяемых параллельных процессов – вычислительных ядер) со снижением вычислительной нагрузки на процесс до тех пор, пока время расчёта итерации будет сопоставимо с временем обмена данными между вычислительными процессами, определяемым архитектурой суперкомпьютеров.

Список литературы

1. ***Моряков А.В.*** Использование параллельных технологий для решения многогруппового уравнения переноса методом дискретных ординат // ВАНТ. Сер. Физика ядерных реакторов, 2002, вып. 4, с. 3–14.
2. ***Моряков А.В.*** Программа LUCKY. Решение уравнения переноса нейтронов и гамма-излучения с использованием параллельных технологий. Там же, 2010, вып. 4, с. 18–29.
3. ***Моряков А.В.*** Алгоритм получения угловых потоков в ячейке для многопроцессорных программ LUCKY и LUCKY_C. Там же, 2011, вып. 1, с. 3–6.
4. ***Моряков А.В.*** Алгоритм пространственно-энергетического распараллеливания при решении критической задачи, реализованный в многопроцессорной программе LUCKY_C. Там же, 2012, вып. 1, с. 24–27.
5. ***Воеводин В.В., Воеводин Вл.В.*** Параллельные вычисления. СПб.: БХВ-Петербург, 2002.
6. ***Антонов А.С.*** Параллельное программирование с использованием технологии MPI. М.: МГУ, 2004.
7. ***Белл Д., Глесстон С.*** Теория ядерных реакторов. Пер. с англ. под ред. В.Н. А р т а м к и н а. М.: Атомиздат, 1974.
8. ***Моряков А.В.*** Алгоритм решения линейной задачи Коши для систем обыкновенных дифференциальных уравнений большой размерности с использованием параллельных вычислений. В данном выпуске, с. 4–14.
9. ***Корн Г., Корн Т.*** Справочник по математике. М.: Наука, 1970.
10. ***White J.E., Ingersol D.T., Slater C.O., Roussin R.W.*** BUGLE-96: Coupled 47 Neutron, 20 Gamma-Ray Group Cross Section Library Derived from ENDF/B-VI for LWR Shielding and Pressure Vessel Dosimetry Application, RSIC Data Library Collection, DLC-185, March 1996.
11. ***Красковский Д.Г., Виноградов А.В.*** AutoCAD 2000 для всех. М.: Компьютер Пресс, 1999.

Контактная информация –
Моряков Алексей Владимирович, в. н. с., тел.: (499)196-71-98, e-mail: sailor@orc.ru

Вопросы атомной науки и техники.
Сер. Физика ядерных реакторов, 2015, вып. 2,
с. 15–19.

УДК 621.039.51

Эффективные условия для плотности потока нейтронов на аксиальных границах активной зоны

Е.А. Аристархова, В.М. Малофеев,
НИЦ “Курчатовский институт”, 123182, Москва, пл. Курчатова, 1
Поступила в редакцию 23.09.2014 г.

Получены аналитические выражения для элементов треугольной матрицы эффективных условий на границе активной зоны с многозонным отражателем в малогрупповом диффузионном приближении. Проведена верификация разработанной методики на примерах расчёта ТВС легководного реактора с промежуточным спектром нейтронов.
Ключевые слова: поток нейтронов, ток нейтронов, активная зона, аксиальный отражатель, граничное условие.

Effective Conditions for Neutron Flux Density at Axial Boundaries of the Core. ***E.A. Aristarkhova, V. M. Malofeev,*** *NRC “Kurchatov Institute”, 1, Kurchatov Sq., Moscow,123182.*

Analytical expressions for elements of the triangular matrix of effective conditions at boundary of the core with multizone reflector were derived in few group diffusion approximation. Verification of the developed procedure was carried out on the examples of calculations of fuel assembly of light water reactor with intermediate neutron spectrum.
Key Words: Neutron Flux, Neutron Current, Core, Axial Reflector, Boundary Condition.

Аксиальное распределение плотности потока нейтронов в легководных реакторах может характеризоваться большими градиентами в областях верхнего и нижнего отражателей. В реакторах с промежуточным спектром нейтронов максимальное значение плотности потока тепловых нейтронов в аксиальных отражателях может в несколько раз превосходить её максимальное значение в активной зоне. В трёхмерных расчётах реакторов по сеточным программам обычно используется достаточно грубая сетка с несколькими десятками узлов в аксиальном направлении. Наличие больших градиентов плотности потока нейтронов в области аксиальных отражателей может приводить к значительным погрешностям таких расчётов распределения энерговыделения в активной зоне вблизи отражателей.

В программах расчёта реактора гетерогенным методом [1] аксиальная зависимость плотности потока нейтронов определяется путём её разложения в ряд Фурье по синусам. Наличие больших “всплесков” плотности потока тепловых нейтронов в аксиальных отражателях приводит к необходимости применения большого числа аксиальных гармоник в гетерогенных расчётах реакторов с промежуточным спектром нейтронов, что значительно увеличивает время расчёта.

Чтобы избежать прямого расчёта плотности потока нейтронов в аксиальных отражателях, можно использовать матрицы эффективных граничных условий на границах активной зоны и отражателей по аналогии с матрицами эффективных условий, задаваемых на радиальных границах ячеек в теории гетерогенного реактора [2]. Поскольку на границах активной зоны и аксиальных отражателей аксиальная компонента градиента плотности потока нейтронов по величине значительно превосходит радиальную компоненту, последней можно пренебречь и для вычисления матриц эффективных граничных условий применять одномерную модель.

Ниже представлен вывод аналитических выражений для элементов треугольной матрицы эффективных условий на границе активной зоны с многозонным отражателем в малогрупповом диффузионном приближении.

Рассмотрим многозонный одномерный аксиальный отражатель реактора. На грани-

це активной зоны с отражателем зададим эффективные условия в следующей форме:

$$\varphi_g^{0\prime} = -\sum_{j=1}^{g} \lambda_{gj} \varphi_j^0;\ g = 1...G, \qquad (1)$$

где φ_g^0 – плотность потока нейтронов группы g в активной зоне вблизи отражателя, λ_{gj} – элементы треугольной матрицы граничных условий.

Будем считать, что распределение плотности потока нейтронов в зоне i удовлетворяет уравнениям диффузии

$$\varphi_1^{i\prime\prime}(z) - æ_1^{i2}\varphi_1^i(z) = 0;\ \varphi_g^{i\prime\prime}(z) - æ_g^{i\,2}\varphi_g^i(z) =$$

$$= -\sum_{j=1}^{g-1} D_{j,g}^i \tilde{æ}_{gj}^{i2} \varphi_g^i(z);\ g = 2...G;$$

$$z_{i-1} \le z \le z_i; i = 1...N; z_0 = 0, \qquad (2)$$

$$æ_g^i = \sqrt{(\Sigma_{ag}^i + \Sigma_{dg}^i)/D_g^i}; g = 1...G-1;$$

где $æ_G^i = \sqrt{\Sigma_{aG}^i / D_G^i}; D_{j,g}^i = D_j^i / D_g^i;$

$$\tilde{æ}_{gj}^i = \sqrt{\Sigma_{gj}^i / D_j^i};\ j = 1...G-1.$$

Здесь Σ_{ag}^i – сечение поглощения в энергетической группе g зоны i; Σ_{dg}^i – сечение увода в энергетической группе g зоны i; D_g^i – коэффициент диффузии в энергетической группе g зоны i; Σ_{gj}^i – сечение замедления из группы j в группу g зоны i; G – число энергетических групп; N – число аксиальных зон в отражателе.

Предполагается, что последняя зона отражателя граничит с вакуумом, и условие на внешней границе имеет вид

$$\varphi_g^{N\prime}(z_N) = -\lambda_g^v \varphi_g^N(z_N);\ g = 1...G, \qquad (3)$$

где z_N – расстояние от активной зоны до границы аксиального отражателя с вакуумом; λ_g^v – элементы диагональной матрицы эффективных условий на границе отражателя с вакуумом, значения которых определяются из физических характеристик последнего слоя отражателя.

На границах раздела z_i двух зон отражателя выполняются условия непрерывности потока и тока нейтронов

$$\varphi_g^i(z_i) = \varphi_g^{i+1}(z_i);\ D_g^i \varphi_g^{i\prime}(z_i) = D_g^{i+1} \varphi_g^{i+1\prime}(z_i);$$

$$g = 1...G;\ i = 1...N-1. \qquad (4)$$

На границе раздела отражателя с активной зоной выполняются условия непрерывности, аналогичные условиям (4),

$$\varphi_g^0(0) = \varphi_g^1(0);\ D_g^0 \varphi_g^{0\prime}(0) = D_g^1 \varphi_g^{1\prime}(0);$$

$$g = 1...G, \qquad (5)$$

где φ_g^0 и $\varphi_g^{0\prime}$ – плотность потока нейтронов и её производная в активной зоне вблизи отражателя, D_g^0 – коэффициент диффузии активной зоны для группы g вблизи отражателя.

Решение системы (2) для зоны i представим в следующем виде:

$$\varphi_g^i(z) = \gamma_g^i(\exp(-æ_g^i z) + \beta_g^i \exp(æ_g^i z)) +$$

$$+\sum_{j=1}^{g-1} \alpha_{gj}^i \gamma_j^i (\exp(-æ_j^i z) + \beta_j^i \exp(æ_j^i z));$$

$$z_{i-1} \le z \le z_i;\ g = 1...G, \qquad (6)$$

где $\gamma_g^i, \beta_g^i, \alpha_{gj}^i$ – постоянные коэффициенты.

Первые два слагаемые в решении (6) описывают диффузию нейтронов в пределах группы g, а сумма по j – влияние нейтронов с большей энергией на распределение плотности потока нейтронов группы g.

Значения плотности потока нейтронов φ_g^0 на границе активной зоны и отражателя зависят от коэффициентов γ_g^1. Так как граничные условия (1) должны выполняться при любых значениях φ_g^0, в дальнейшем будет использовано условие независимости $\varphi_g^i(z)$ от значений γ_g^1 (g = 1…G).

Чтобы определить значения коэффициентов в выражении (6), сначала рассмотрим первую группу. Подставив последовательно выражение (6) в условия (4) и используя условие (3) для каждой зоны $i = N - 1…1$, найдём коэффициенты β_1^i, а коэффициенты γ_1^i выразим через коэффициент первой зоны γ_1^1. Соответствующие выражения для коэффициентов β_1^i и γ_1^i будут приведены ниже. Далее последовательно для каждой

группы $g = 2\ldots G$ выполним следующие операции.

Сначала выражения (6) подставим в уравнения (2) и, используя условия независимости $\varphi_g^i(z)$ от коэффициентов γ_g^1, получим выражения для коэффициентов α_{gj}^i

$$\alpha_{gj}^i = \frac{D_{j,g}^i \text{æ}_{gj}^{i2} + \sum_{k=j+1}^{g-1} \alpha_{kj}^i D_{k,g}^i \text{æ}_{gk}^{i2}}{\text{æ}_g^{i2} - \text{æ}_j^{i\,2}};$$

$$g = 2\ldots G;\ j = 1\ldots g-1. \qquad (7)$$

Затем, подставив выражение (6) в условия (4) последовательно для каждой аксиальной зоны, получим систему уравнений с граничными условиями (3), из которой найдём выражения для коэффициентов β_g^i и γ_g^i Выражения для коэффициентов β_g^i имеют вид

$$\beta_g^i = a_g^i + c_g^i \big/ \gamma_g^i;\ g = 1\ldots G; c_1^i = 0;\ i = 1\ldots N. \qquad (8)$$

Здесь

$$a_g^N = \exp(-2\text{æ}_g^N z_N)\frac{\text{æ}_g^N - \lambda_g^v}{\text{æ}_g^N + \lambda_g^v}; a_g^i = \exp(-2\text{æ}_g^i z_i) \times$$

$$\times \frac{D_g^i \text{æ}_g^i f_g^{i+1}(z_i) + D_g^{i+1} df_g^{i+1}(z_i)}{D_g^i \text{æ}_g^i f_g^{i+1}(z_i) - D_g^{i+1} df_g^{i+1}(z_i)};\ i = N-1\ldots 1, \qquad (9)$$

где

$$f_g^i(z) = \exp(-\text{æ}_g^i z) + a_g^i \exp(\text{æ}_g^i z);$$

$$df_g^i(z) = -\text{æ}_g^i \exp(-\text{æ}_g^i z) + a_g^i \text{æ}_g^i \exp(\text{æ}_g^i z). \qquad (10)$$

Коэффициент c_g^i в соотношении (8) выражается через коэффициенты γ_j^1 следующим образом:

$$c_g^i = \sum_{j=1}^{g-1} \gamma_j^1 b_{gj}^i;\ g = 2\ldots G;\ i = 1\ldots N, \qquad (11)$$

где

$$b_{gj}^N = q_{gj}^N = -\frac{\lambda_g^v P_{gj}^N(z_N) + dP_{gj}^N(z_N)}{\exp(\text{æ}_g^N z_N)(\text{æ}_g^N + \lambda_g^v)}; b_{gj}^i = q_{gj}^i + b_{gj}^{i+1} q_{gg}^i;\ i = N-1\ldots 1;\ j = 1\ldots g-1;$$

$$q_{gj}^i = \frac{D_g^i df_g^i(z_i)\left(P_{gj}^i(z_i) - P_{gj}^{i+1}(z_i)\right) - f_g^i(z_i)\left(D_g^i dP_{gj}^i(z_i) - D_g^{i+1} dP_{gj}^{i+1}(z_i)\right)}{D_g^i \exp(\text{æ}_g^i z_i)\left(\text{æ}_g^i f_g^i(z_i) - df_g^i(z_i)\right)};\ j < g;$$

$$q_{gg}^i = \exp((\text{æ}_g^{i+1} - \text{æ}_g^i) z_i)[D_g^{i+1} \text{æ}_g^{i+1} f_g^i(z_i) - D_g^i df_g^i(z_i)] \big/ D_g^i \left(\text{æ}_g^i f_g^i(z_i) - df_g^i(z_i)\right). \qquad (12)$$

Выражения для $P_{gj}^i(z)$ и $dP_{gj}^i(z)$ будут определены ниже. Коэффициенты γ_g^i выражаются через коэффициенты первой зоны γ_j^1:

$$\gamma_g^i = \sum_{j=1}^{g} \gamma_j^1 d_{gj}^i;\ g = 1\ldots G;\ i = 2\ldots N, \qquad (13)$$

где

$$d_{gj}^i = \left(P_{gj}^{i-1}(z_{i-1}) - P_{gj}^i(z_{i-1}) + b_{gj}^{i-1} \exp(\text{æ}_g^{i-1} z_{i-1}) - b_{gj}^i \exp(\text{æ}_g^i z_{i-1}) + d_{gj}^{i-1} f_g^{i-1}(z_{i-1})\right) \big/ f_g^i(z_{i-1});\ j = 1\ldots g-1; \qquad (14)$$

$$d_{gg}^i = d_{gg}^{i-1} \frac{f_g^{i-1}(z_{i-1})}{f_g^i(z_{i-1})};\ i = 2\ldots N;\ d_{gg}^1 \equiv 1. \qquad (15)$$

Выражения для $P_{gj}^i(z)$ и $dP_{gj}^i(z)$ имеют вид:

$$P_{gj}^i(z) = \sum_{l=j}^{g-1} \alpha_{gl}^i (d_{lj}^i f_l^i(z) + b_{lj}^i \exp(\text{æ}_l^i z));$$

$$dP_{gj}^i(z) = \sum_{l=j}^{g-1} \alpha_{gl}^i (d_{lj}^i df_l^i(z) + b_{lj}^i \text{æ}_l^i \exp(\text{æ}_l^i z));$$

$$z_{i-1} \le z \le z_i;\ g = 1\ldots G;\ j = 1\ldots g;\ i = 1\ldots N. \qquad (16)$$

Применяя полученные соотношения (11), (13) для коэффициентов c_g^i и γ_g^i ($g = 1\ldots G$), преобразуем выражение (6) к виду

$$\varphi_g^i(z) = \sum_{j=1}^{g} \gamma_j^1 R_{gj}^i(z);\ g = 1\ldots G, \qquad (17)$$

где

$$R_{gj}^i(z) = P_{gj}^i(z) + d_{gj}^i f_g^i(z) + b_{gj}^i \exp(\text{æ}_g^i z);$$

$$dR_{gj}^i(z) = dP_{gj}^i(z) + d_{gj}^i df_g^i(z) + b_{gj}^i \text{æ}_g^i \exp(\text{æ}_g^i z). \qquad (18)$$

Подставим выражение (17) при $i = 1$ в эффективные граничные условия (1), учитывая в условиях (5) непрерывность плот-

ности потока нейтронов на границе активной зоны с отражателем. Используя условие независимости $\varphi_g^i(z)$ от параметров γ_j^1, из полученных уравнений выразим элементы матрицы эффективных условий на аксиальных границах активной зоны:

$$\lambda_{gg} = -\frac{dR_{gg}^1(0)}{R_{gg}^1(0)}\frac{D_g^1}{D_g^0};\ g = 1...G; \lambda_{gj} = -\frac{1}{R_{jj}^1(0)}\times$$

$$\times\left(\sum_{l=j+1}^{g}\lambda_{gl}R_{lj}^1(0) + dR_{gj}^1(0)\right)\frac{D_g^1}{D_g^0};\ j = g-1...1. \quad (19)$$

Алгоритм вычисления элементов матрицы эффективных граничных условий представляет собой последовательность следующих процедур. Сначала для первой группы последовательно от последней зоны до первой рассчитываются коэффициенты a_1^i по формулам (9), при этом для i от $N-1$ до 1 используются значения функций $f_g^{i+1}(z)$ и $df_g^{i+1}(z)$ в точках $z = z_i$, которые рассчитываются по формулам (10) через найденные коэффициенты a_1^{i+1}. После вычисления всех коэффициентов a_1^i проводится расчёт коэффициентов d_{11}^i от второй до последней зоны по формуле (15) с использованием значений функций $f_g^{i-1}(z)$ и $df_g^i(z)$ в точках $z = z_{i-1}$. Затем выполняются вычисления для остальных групп.

Для каждой текущей группы g ($g = 2\ldots G$) сначала последовательно от первой до последней зоны по формуле (7) рассчитываются коэффициенты α_{gj}^i ($j = 1\ldots g-1$). Затем аналогично a_1^i рассчитываются коэффициенты a_g^i по формулам (9) с применением выражений (10). Далее для текущей группы g последовательно по группам j ($j = 1\ldots g-1$) рассчитываются коэффициенты b_{gj}^i по формулам (12) от последней до первой зоны. Для вычисления коэффициентов b_{gj}^i используются значения функций $P_{gj}^i(z)$, $P_{gj}^{i+1}(z)$, $dP_{gj}^i(z)$ и $dP_{gj}^{i+1}(z)$ в точках $z = z_i$.

Функции $P_{gj}^i(z)$ и $dP_{gj}^i(z)$, значения которых вычисляются по формулам (16), выражаются через найденные коэффициенты α_{gl}^i, d_{lj}^i и b_{lj}^i, а также функции $f_l^i(z)$ и $df_l^i(z)$. Значения функций $f_l^i(z)$ и $df_l^i(z)$ в точках $z = z_i$ рассчитываются по формулам (10) с применением найденных коэффициентов $a_l^i(z)$. После вычисления всех коэффициентов b_{gj}^i для группы g проводится расчёт коэффициентов d_{gj}^i по формулам (14), (15) последовательно от второй до последней зоны для всех j.

Коэффициенты d_{gj}^i рассчитываются с использованием найденных коэффициентов b_{gj}^{i-1}, b_{gj}^i, α_{gl}^i, d_{lj}^i и b_{lj}^i ($l = j\ldots g-1$). При выполнении всех операций по описанному алгоритму вычисляются коэффициенты d_{gj}^1, b_{gj}^1 ($j = 1\ldots g$) и α_{gl}^1 ($l = 1\ldots g-1$), с помощью которых по формуле (18) рассчитываются значения функций $R_{gj}^1(z)$, $dR_{gj}^1(z)$ в точке $z = 0$. Применяя значения функций $R_{gj}^1(0)$ и $dR_{gj}^1(0)$, по формулам (19) вычисляются элементы матрицы эффективных граничных условий λ_{gj} ($j = 1\ldots g$).

Представленный алгоритм вычисления матриц эффективных условий на аксиальных границах активной зоны реализован в программе Laref. Верификация предложенной методики проводилась с помощью программы Difax, решающей малогрупповые уравнения диффузии в одномерной плоской геометрии с граничными условиями в виде (1) или (3) конечно-разностным методом. В расчётах моделировались решётки многозонных в аксиальном направлении однотипных ТВС легководного реактора с промежуточным спектром нейтронов. Компоновки верхнего и нижнего аксиальных отражателей моделировались двумя и четырьмя зонами, соответственно.

Расчёты проводились в четырёхгрупповом приближении на очень мелкой сетке. Результаты расчётов с граничными условиями в виде (3), задаваемыми на внешних границах отражателей, сравнивались с расчётами с граничными условиями в виде (1), задаваемыми на границах активной зоны и

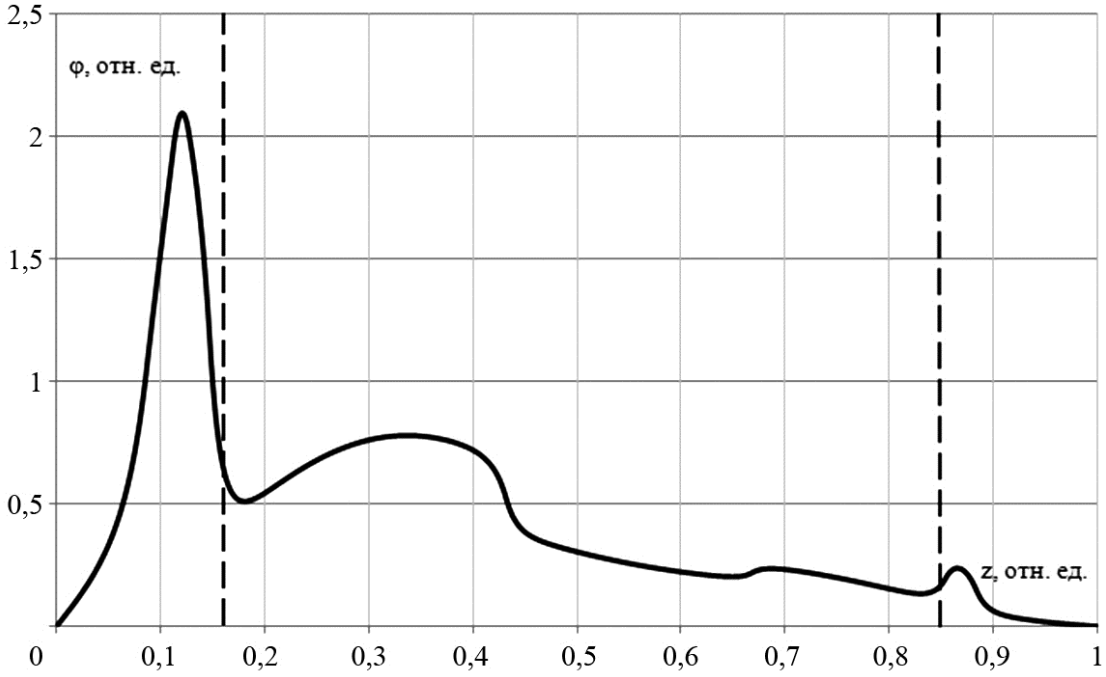

Рисунок. Аксиальное распределение плотности потока тепловых нейтронов в ТВС легководного реактора с промежуточным спектром нейтронов

отражателей. Результаты расчётов полностью совпали как по $K_{эф}$, так и по аксиальным распределениям плотности потока нейтронов. В качестве иллюстрации на рисунке приведено аксиальное распределение плотности потока тепловых нейтронов для одной из рассмотренных ТВС. Пунктиром показаны границы активной зоны и отражателей, на которых задавались эффективные условия в виде (1).

Заключение

Полученные аналитические выражения для элементов матриц эффективных граничных условий позволяют избегать прямых расчётов плотности потока нейтронов в аксиальных отражателях. Предложенный аналитический метод может быть использован как в сеточных диффузионных программах, так и в программах, основанных на гетерогенном методе. Применение матриц эффективных условий на границах активной зоны и аксиальных отражателей позволяет уменьшить число расчётных точек в аксиальном направлении или число аксиальных гармоник в гетерогенном методе, за счёт чего уменьшается время расчёта.

Список литературы

1. ***Кочуров Б.П., Малофеев В.М.*** О трёхмерных расчётах гетерогенного реактора // Атомная энергия, 1980, т. 48, вып. 6, с. 387–388.
2. ***Галанин А.Д.*** Теория гетерогенного реактора. М.: Атомиздат, 1971.

Контактная информация –
Аристархова Елена Александровна, м. н. с., тел.: +7(916)810-29-11, e-mail: aristarhel@mail.ru
Малофеев Валерий Михайлович, нач. лаб., тел.: +7(910)402-03-64, e-mail: vm_malofeev@mail.ru

Вопросы атомной науки техники.
Сер. Физика ядерных реакторов, 2015, вып. 2,
с. 20–24.

УДК 621.039.55:621.039.5.001.24:621.039.566

Аксиальное профилирование поля энерговыделения для минимизации объёмной доли пара на выходе из ТВС ВВЭР-1200

В.И. Савандер, Б.Е. Шумский,
НИЯУ “МИФИ“, 115409, Москва, Каширское ш., 31,
А.А. Пинегин,
НИЦ “Курчатовский институт“, 123182, Москва, пл. Курчатова, 1
Поступила в редакцию 10.10.2014 г.

Представлены результаты исследования возможности снижения доли пара на выходе ТВС ВВЭР-1200 путём аксиального профилирования поля энерговыделения. Для профилирования поля энерговыделения применялось перераспределение по высоте твэга выгорающего поглотителя (гадолиния). Исследования проводились на основе компьютерного моделирования с использованием кода NOSTRA.
Ключевые слова: ВВЭР-1200, компьютерное моделирование, аксиальног профилирование, выгорающий поглотитель, истинная объёмная доля пара.

Shaping of the Axial Power Distribution in the Core to Minimize the Vapor Volume Fraction at the Outlet of the VVER-1200 Fuel Assemblies. ***V.I. Savander, B.E. Shumskiy,*** *National Research Nuclear University “MEPhI”, 31, Kashirskoe Sh., Moscow, 115409,* ***A.A. Pinegin,*** *NRC “Kurchatov Institute”, 1, Kurchatov Sq., Moscow, 123182.*

The possibility of the vapor fraction decreasing at the VVER-1200 fuel assembly outlet is considered. The shaping of the axial power distribution in the reactor core is proposed to achieve this aim. The axial power field was shaped by axial re-distribution of gadolinium (burnable poison) concentration in Gd-containing fuel rods. The computer code NOSTRA was used for mathematical modeling of the VVER-1200 core.
Key Words: VVER-1200, Computer Simulation, Shaping of the Axial Power Distribution, Burnable Poison, True Volume Fraction of Vapor.

Введение

Реализуемые в настоящее время в России на АЭС с ВВЭР-1000 мероприятия по увеличению мощности энергоблоков до 104…110 % от номинальной приводят к повышению эксплуатационных параметров ТВС, в частности, к эксплуатации в условиях повышенного паросодержания в теплоносителе. Ведётся строительство двух блоков по проекту АЭС-2006 на базе ВВЭР-1200, в котором допускается значительное паросодержание (до 13 % массовых) в теплоносителе на выходе из активной зоны даже при работе на номинальных параметрах.

В проекте ВВЭР-1200 параметры теплоносителя, мощность реактора и ограничение на распределение покассетного энерговыделения подобраны таким образом, чтобы объёмное кипение в активной зоне реактора отсутствовало. Но, как показывают расчётные данные, вследствие того, что в верхней части активной зоны на поверхности значительной части твэлов устанавливается температура, превышающая температуру насыщения, наблюдается поверхностное пузырьковое кипение.

Длительное и интенсивное локальное кипение может приводить к образованию поверхностных отложений и возникновению эффекта АОА (аномального аксиального офсета), что приводит к ухудшению прочностных характеристик твэла, снижению управляемости полем энерговыделения в реакторе и повышению неравномерности выгорания выгружаемого топлива. Следовательно, снижение доли неравновесного пара в активной зоне ВВЭР-1200 является актуальной задачей.

При неизменных параметрах теплоносителя минимизации доли неравновесного пара в ТВС можно достигнуть следующими способами:

1) понижением мощности наиболее нагруженных ТВС за счёт выравнивания покассетного энерговыделения;

2) выравниванием потвэльного энерговыделения в поперечном сечении ТВС, осуществляемым как с помощью твэгов, так и профилированием загрузок твэлов с использованием топливных таблеток с разным обогащением по урану 235;

3) уменьшением поверхности и интенсивности кипения за счёт перераспределения энерговыделения по высоте твэла;

4) применением интенсификаторов теплообмена с эффектом турбулизации потока теплоносителя вдоль оболочки твэлов.

В статье анализируется возможность уменьшения доли пара на выходе из ТВС за счёт перераспределения энерговыделения по высоте твэла.

1. Ситуация с кипением в активной зоне ВВЭР-1200

Парообразование в активной зоне ВВЭР-1200 анализировалось с помощью компьютерного кода NOSTRA [1…3]. Для этого проведены расчёты температуры теплоносителя и поверхности оболочки твэла, а также объёмной доли пара в наиболее энергонапряжённых ТВС. Расчёты проводились для начала стационарной кампании ВВЭР-1200 в двух состояниях:

– для состояния работы реактора на номинальных эксплуатационных параметрах;

– для состояния работы реактора на мощности, повышенной на величину погрешности определения, при консервативно ухудшенных (также в пределах погрешности) параметрах теплоносителя (расход, давление, температура на входе в активную зону).

Используемые в расчётах параметры состояния реактора ВВЭР-1200 приведены в табл. 1.

При моделировании в каждой ТВС выделяются два канала: средний по параметрам твэла (“средний канал”), мощность которого принята равной средней мощности твэла данной ТВС, и “горячий канал”, мощность которого соответствует максимальной мощности твэла в данной ТВС, с учётом допусков при фабрикации твэлов и погрешности расчёта поля энерговыделения. Для построения аксиального распределения энерговыделения в “горячем канале” аксиальный профиль энерговыделения “среднего канала” умножается на коэффициент потвэльной внутрикассетной неравномерности (1,1) и на инженерный коэффициент запаса (1,16).

По результатам расчётов на номинальных параметрах реактора температура теплоносителя не достигает величины насыщения ни для “среднего канала”, ни для “горячего канала” в наиболее энергонапряжённой ТВС, что говорит об отсутствии объёмного кипения в активной зоне. И хотя температура поверхности оболочки “среднего твэла” в верхней части активной зоны на небольшом участке незначительно превышает температуру насыщения (рис. 1), но этого оказывается недостаточно для запуска процесса поверхностного кипения, что следует из величины истинной объёмной доли пара (рис. 2).

Однако для “горячего канала” температура поверхности оболочки с середины до верхней точки активной зоны превышает температуру насыщения (рис. 1). На отметке примерно две трети высоты активной

Т а б л и ц а 1. Параметры состояния работы реактора на номинальных и консервативных эксплуатационных параметрах

Наименование параметра	Номинальная величина	Консервативная величина
Момент кампании, эфф. сутки	0	
Концентрация ксенона	Равновесная	
Концентрация самария	Соответствует началу кампании	
Мощность реактора, МВт	3 200	3 264
Расход теплоносителя на входе в реактор, $м^3$/час	86 000	83 100
Температура теплоносителя на входе в активную зону, ºС	298,2	300,2
Давление над активной зоной, МПа	16,2	15,9
Расход протечек мимо активной зоны, %	3	3

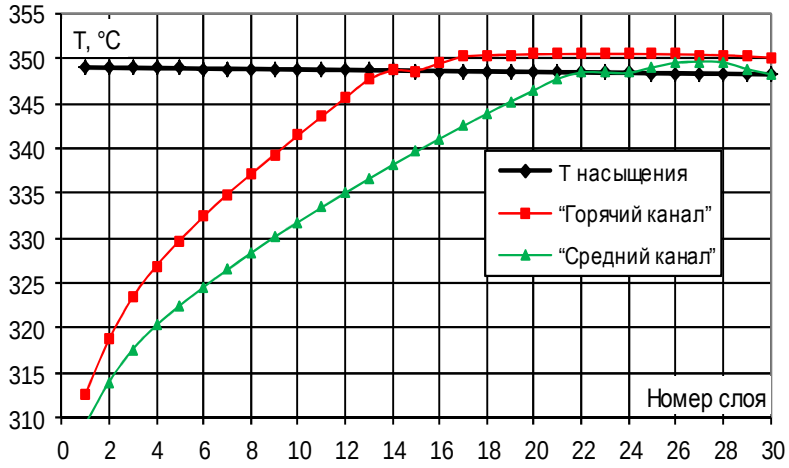

Рис. 1. Температура поверхности оболочки твэла для наиболее энергонапряжённой ТВС (состояние реактора с номинальными параметрами)

Рис. 2. Истинное объёмное паросодержание φ наиболее энергонапряжённой ТВС (состояние реактора с номинальными параметрами)

зоны начинается поверхностное кипение (рис. 2). Максимальная объёмная доля пара достигает величины примерно 20 %.

По результатам расчётов на консервативных параметрах реактора температура теплоносителя "горячего канала" наиболее энергонапряжённой ТВС в отличие от "среднего канала" достигает температуры насыщения (рис. 3), в результате чего в "горячем канале" возникает объёмное кипение. Истинное объёмное паросодержание для "среднего" и "горячего" каналов составляет соответственно примерно 4,5 и 35 % (рис. 4).

Увеличение почти в два раза объёмной доли пара при работе реактора на консервативных параметрах объясняется следующим образом. Температура насыщения из-за более низкого давления в реакторе оказывается ниже. Из-за увеличения мощности реактора и понижения температуры насыщения длина участка, на котором температура поверхности оболочки твэла превышает температуру насыщения, больше, чем при работе на номинальных параметрах. Повышение температуры на входе и уменьшение расхода также способствуют интенсификации процесса парообразования в ТВС.

Задача снижения паросодержания в теплоносителе на выходе из "горячего канала" решалась в два этапа. На первом этапе оценивалось влияние аксиального профиля тепловыделения на паросодержание в теплоносителе "горячего канала" и проводился поиск оптимального профиля аксиального энергораспределения, который минимизирует паросодержание, при ограничениях на максимальную линейную нагрузку на твэл. На втором этапе на основе полномасштабного нейтрон-

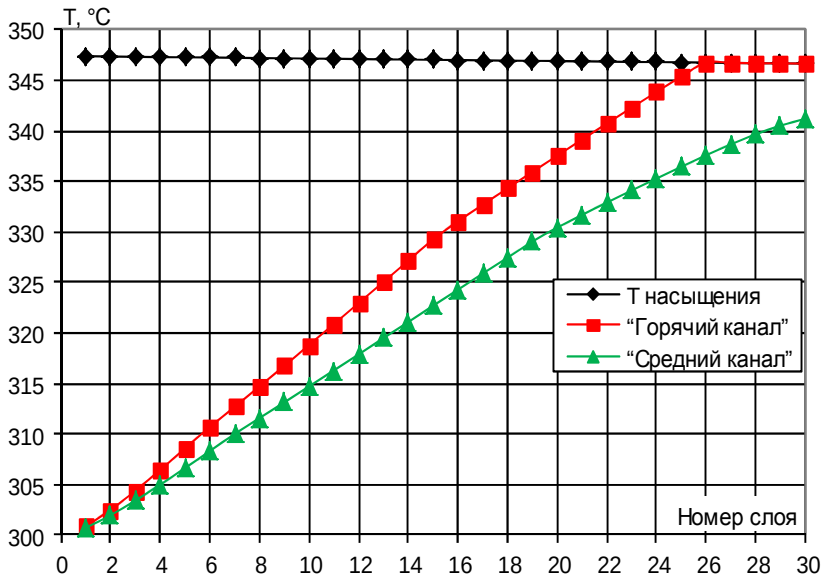

Рис. 3. Температура теплоносителя наиболее энергонапряжённой ТВС (состояние реактора с консервативными параметрами)

Рис. 4. Истинное объёмное паросодержание φ наиболее энергонапряжённой ТВС (состояние реактора с консервативными параметрами)

но-физического и теплогидравлического расчёта с учётом обратных связей решалась задача получения оптимального профиля энерговыделения с помощью профилирования загрузки выгорающего поглотителя по длине твэга.

2. Влияние аксиального профиля энерговыделения на интенсивность парообразования в "горячем канале" без учёта обратных связей

Эффект аксиального профилирования энерговыделения как с помощью обогащения топлива, так и изменением концентрации поглотителя по высоте, в наибольшей степени может проявиться в начале первой топливной кампании. В этот момент кампании свежие твэлы или твэги с аксиальным профилированием окружены такими же свежими топливными элементами как с профилированием, так и без профилирования. В дальнейшем, в процессе перегрузок и перестановок ТВС в активной зоне, ТВС со свежим топливом и с профилированной загрузкой будут окружены частично выгоревшими ТВС, имеющими собственное аксиальное распределение размножающих свойств, которое существенно влияет на поле энерговыделения в свежей ТВС. Для

учёта этого влияния исследования проводились для начала стационарной топливной кампании 12-месячного топливного цикла ВВЭР-1200.

Процесс парообразования в активной зоне ВВЭР-1200 важен с точки зрения изучения масштаба отложений на поверхности твэлов в результате кипения. Величина отложений зависит от среднестатистического состояния активной зоны в течение кампании. Поэтому в качестве исходных данных для расчётов выбраны среднестатистические, номинальные эксплуатационные параметры реактора, а расчётные исследования проводились для “горячего канала”, в котором кипение наиболее вероятно.

Первоначально рассчитывалось трёхмерное поле энерговыделения в активной зоне ВВЭР-1200 в начале равновесной кампании при номинальных эксплуатационных параметрах. Выбиралась ТВС со свежим топливом, обладающая наибольшей мощностью. Аксиальное распределение энерговыделения в этой ТВС использовалось как базовое.

Исходное энергораспределение $q(z)$ путём деления на полную мощность Q ТВС приводилось к безразмерному виду $w(z) = q(z)/Q$. Для расчётов удобнее использовать безразмерную аксиальную координату $x = (z - \Delta z/2)/(H - \Delta z)$, где $\Delta z = H/N$, H – высота топливного столба в ТВС, а N – число узлов в пространственной сетке по аксиальной переменной. В результате такого преобразования безразмерная координата x изменяется в интервале [0, 1].

Далее с помощью линейного члена $L(x) = Ax + B$ функция безразмерного энерговыделения $q^*(x) = w(x) + L(x)$ путём выбора коэффициентов A и B принимает на границах нулевые значения $q^*(0) = q^*(1) = 0$. В результате функцию $q^*(x)$ можно разложить по синусоидальным гармоникам:

$$q^*(x) = \sum_{i=1}^{5} A_i \sin(i\pi x);$$

$$w(x) = q^*(x) - L(x); \quad q(x) = w(x)Q,$$

где A_i – коэффициенты разложения преобразованного распределения.

Построенный с помощью разложения по пяти первым синусоидальным гармоникам профиль энерговыделения достаточно хорошо совпадает с исходным, что говорит о корректности выбора представления (см. рис. 5).

Для построения отклонённых от исходного аксиальных профилей аксиальный коэффициент K_z неравномерности модельных распределений энерговыделения изменялся путём варьирования чётных коэффициентов разложения, при этом одному и тому же значению K_z отвечают два различных профиля энерговыделения, максимумы которых расположены симметрично относительно центральной плоскости активной зоны. При варьировании аксиального профиля учитывалось ограничение на величину линейного локального энерговыделения. Этот алгоритм использовался для построения всех аксиальных профилей энерговы-

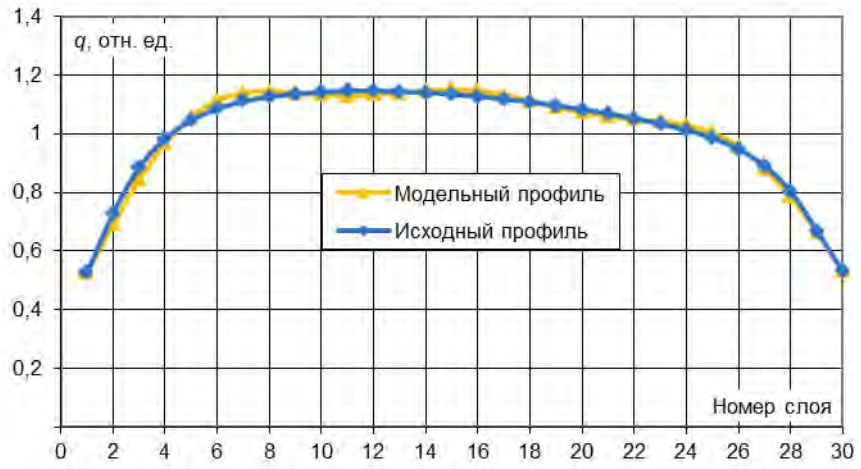

Рис. 5. Сравнение модельного профиля энерговыделения с исходным

деления, представленных ниже.

Результаты расчётов подтвердили предположение, что для уменьшения доли пара в теплоносителе необходимо смещать максимум энерговыделения в нижнюю часть активной зоны. Для оценки максимального эффекта снижения доли пара от деформации аксиального профиля энерговыделения проведены расчёты для совокупности вариантов вплоть до такого значения коэффициента K_z, при котором линейная нагрузка на “горячий” твэл достигает предельного значения.

На рис. 6 представлен предельный, удовлетворяющий ограничениям на локальную мощность, аксиальный профиль энерговыделения, а на рис. 7 представлены аксиальные профили температур поверхности оболочки твэла и теплоносителя в “горячем канале” этого варианта в сравнении с исходными профилями.

Расчёты показали, что при увеличении смещения энерговыделения в нижнюю часть активной зоны область, где температура поверхности оболочки твэла достигает температуры насыщения, также смещается ближе к входу в активную зону. Тепловой поток через поверхность оболочки твэла в верхней части активной зоны уменьшается, величина температуры поверхности оболочки твэла становится несколько ниже, чем для исходного варианта, хотя и остаётся вблизи температуры Лейден-Фроста. Объёмная доля пара также уменьшается. Однако, темп снижения объёмной доли пара по мере выдавливания поля энерговыделения в нижнюю часть ТВС также снижается при приближении локальной мощнос-

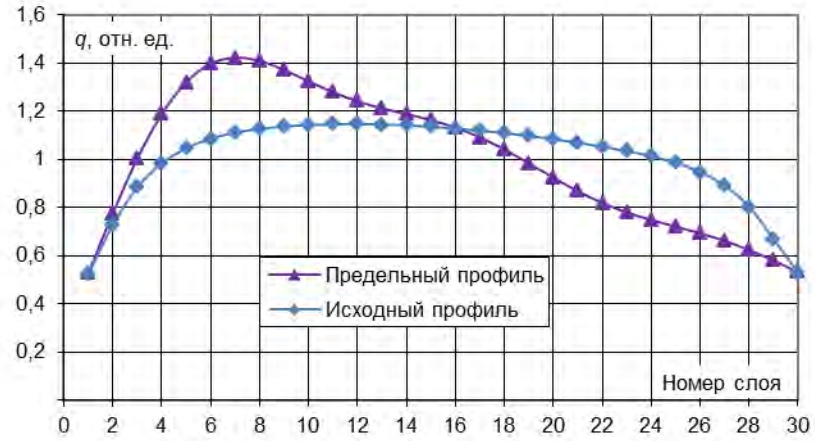

Рис. 6. Предельный, удовлетворяющий ограничениям на локальную мощность, отклонённый аксиальный профиль энерговыделения

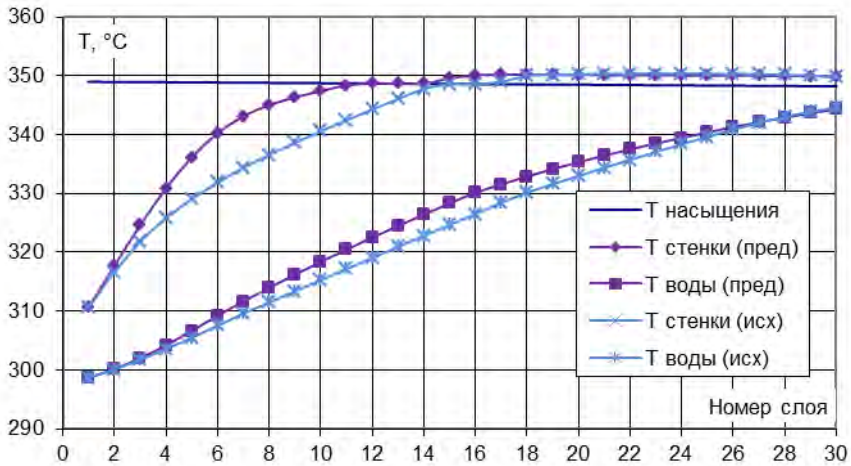

Рис. 7. Аксиальные профили температур поверхности оболочки твэла и теплоносителя в “горячем канале” предельного варианта в сравнении с исходными профилями

ти твэла к предельному значению линейной нагрузки на твэл (420 Вт/см).

На рис. 8 и 9 представлены результаты исследования влияния формы аксиального профиля энерговыделения “горячего канала” на величину максимальной и усреднённой по высоте твэла объёмной доли пара. Характеристикой формы аксиального профиля энерговыделения выступает офсет “горячего канала”, определяемый так: офсет = $[(Q^{верх} - Q^{низ})/Q]\cdot 100$ %, где $Q^{верх}$, $Q^{низ}$, Q – соответственно энерговыделение верхней, нижней частей и полное энерговыделение “горячего канала”.

В результате варьирования аксиального профиля энерговыделения оказалось, что значимый эффект уменьшения доли неравновесного пара достигается при уменьшении офсета “горячего канала” с – 3 % (исходный вариант) до примерно – 15…– 18 %. Дальнейшее уменьшение офсета “горячего канала” не даёт значимого эффекта. При рассмотрении результатов следует учитывать, что офсет энерговыделения отдельного “горячего канала” отличается от усреднённого по всей активной зоне офсета.

3. Аксиальное профилирование поля энерговыделения в ТВС перераспределением концентрации поглотителя по высоте твэга (расчёт с обратными связями)

На втором этапе расчётных исследований для создания оптимального профиля энерговыделения осуществлялось перераспределение выгорающего поглотителя по высоте твэга. Как показано выше, для минимизации доли пара требуется сместить

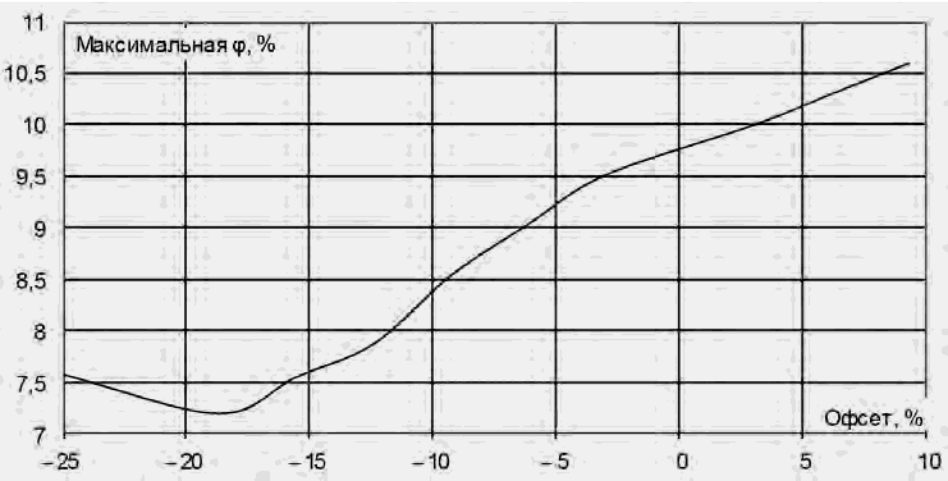

Рис. 8. Максимальная истинная объёмная доля φ пара в зависимости от офсета энерговыделения “горячего канала”

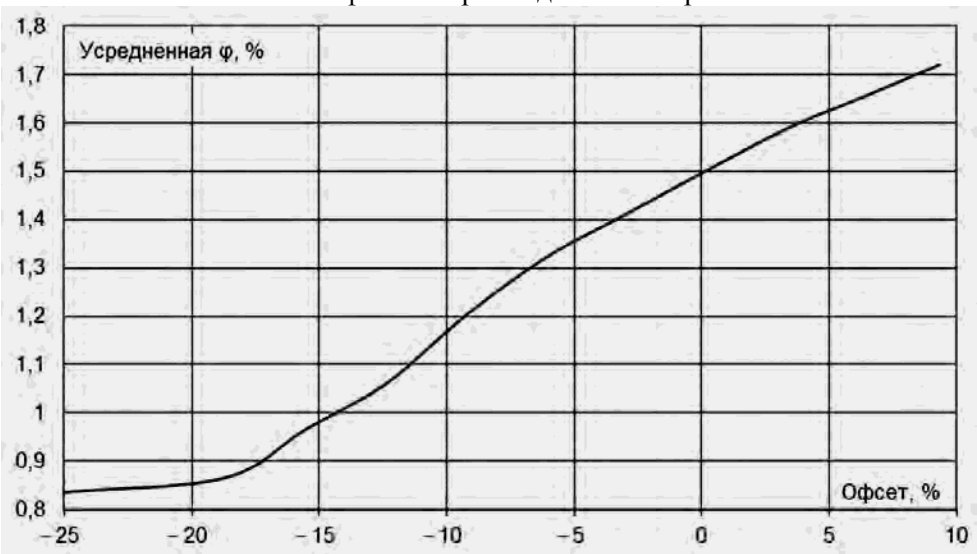

Рис. 9. Усреднённая по высоте твэла истинная объёмная доля φ пара в зависимости от офсета энерговыделения “горячего канала”

максимум аксиального энерговыделения в нижнюю часть активной зоны. Этого можно достичь, если расположить поглотитель с максимальной его концентрацией в верхней части твэга, а с минимальной – в нижней. При таком распределении поглотителя в верхней части ТВС, в которой обычно происходит парообразование, уменьшается тепловой поток и соответственно уменьшается продуцирование пара. Расчёты также проводились по модели “горячего канала”.

Профилирование концентрации гадолиния по высоте активной зоны осуществлялось таким образом, чтобы сохранялось общее количество гадолиния в твэге. За среднее значение взята стандартная для 12-месячного топливного цикла ВВЭР-1200 весовая концентрация гадолиния (5 %). Предполагается, что по высоте твэга в топливных таблетках допускаются следующие концентрации гадолиния: 0, 3, 5 и 8 %.

Проведены расчёты с различными вариантами аксиального распределения гадолиния в твэгах. Из этих вариантов отобраны для сравнения два наиболее характерных. Аксиальное распределение концентрации гадолиния по твэгу в этих вариантах приведено на рис. 10 и 11. Гадолиний ступенчато перераспределяется из нижней части твэга в верхнюю часть. В первом варианте таблетки с максимальным весовым содержанием гадолиния начинаются с 18-го слоя, а во втором варианте – с 16-го (при разбиении на 30 аксиальных слоёв).

Перераспределение поглотителя по высоте активной зоны приводит не только к изменению аксиальной формы поля энерговыделения, но также и к перераспределе-

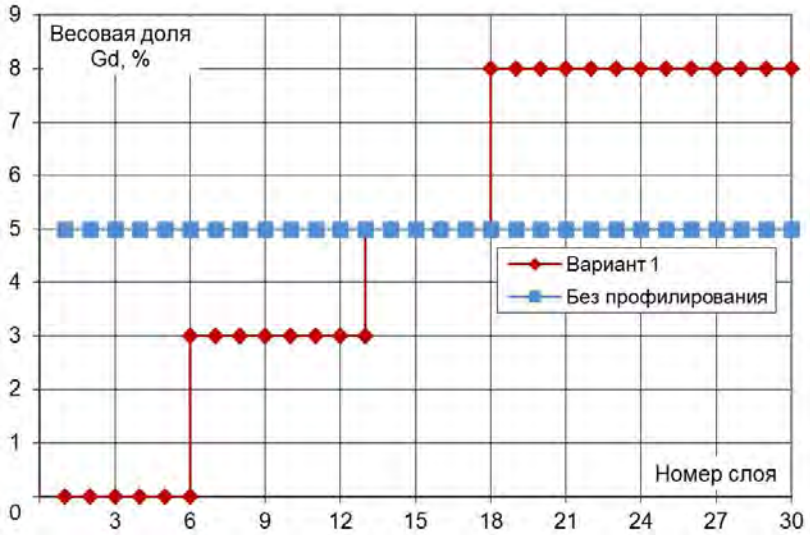

Рис. 10. Аксиальное распределение концентрации гадолиния по твэгу в варианте 1

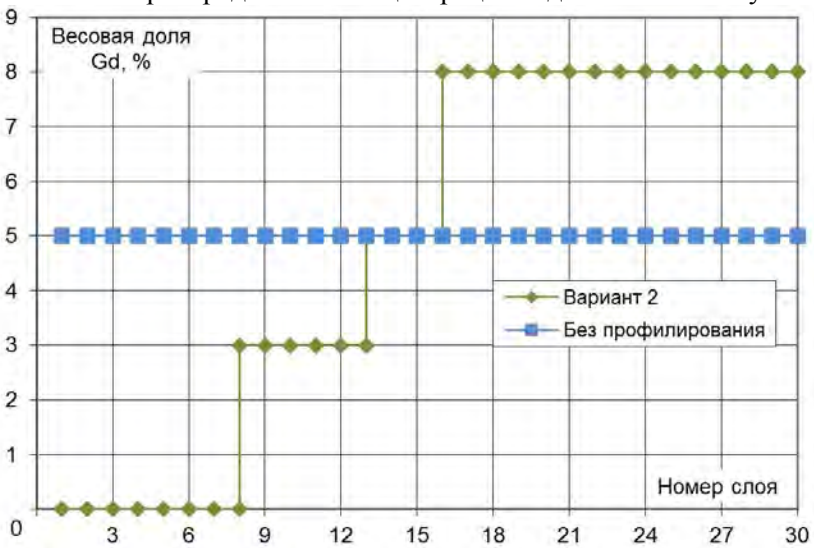

Рис. 11. Аксиальное распределение концентрации гадолиния по твэгу в варианте 2

нию мощности между соседними ТВС. В табл. 2 приведены значения относительного энерговыделения (K_q) и максимальной доли пара в ТВС с максимальным, среди свежих кассет, энерговыделением.

Т а б л и ц а 2. Относительное энерговыделение K_q рассматриваемой ТВС для вариантов с аксиальным профилированием и без профилирования гадолиния

Параметры	Варианты профилирования		
	Без профилирования (проект)	1	2
K_q	1,27	1,33	1,37
$K_q/K_q^{проект}$	1	1,05	1,08
$\varphi^{макс}$, %	10,2	16,4	21,3

Оказалось, что профилирование загрузки гадолиния в твэгах приводит к повышению мощности в этих ТВС по сравнению со стандартным вариантом, и, как следствие, повышается паросодержание на выходе теплоносителя из ТВС, достигая более высокого значения, чем для стандартного варианта. Это связано с нелинейной зависимостью коэффициента размножения нейтронов от концентрации поглотителя в твэгах из-за сильной блокировки потока тепловых нейтронов по твэгу.

В нижней части ТВС концентрация выгорающего поглотителя примерно в половину меньше, чем для однородного распределения гадолиния по твэгу, что приводит к повышению коэффициента размножения в этой части ТВС. Повышенное содержание выгорающего поглотителя в верхней части ТВС действует в противоположную сторону, так что мощность верхней половины ТВС снижается. Но результирующий эффект приводит к возрастанию мощности профилированных ТВС.

Следовательно, простое перераспределение поглотителя по высоте активной зоны с сохранением общей массы поглотителя приводит к нежелательному результату: к значительному увеличению доли пара в аксиально профилированных кассетах из-за увеличения мощности этих кассет.

На рис. 12 приведены аксиальные профили энерговыделения в рассматриваемой ТВС в проектном и профилированных вариантах.

Поскольку конечный результат профилирования загрузки поглотителя складывается из двух факторов, а именно, изменения профиля энерговыделения за счёт профилирования и повышения мощности ТВС, то для оценки роли профилирования поглотителя в чистом виде проведен модельный расчёт без изменения мощности. Фактически это достигается простым снижением мощности реактора пропорционально изменению мощности в профилированной ТВС.

Для этого исходные профили энерговыделения для рассматриваемых вариантов отнормированы на интегральную мощность каждого из них, а нормированные распре-

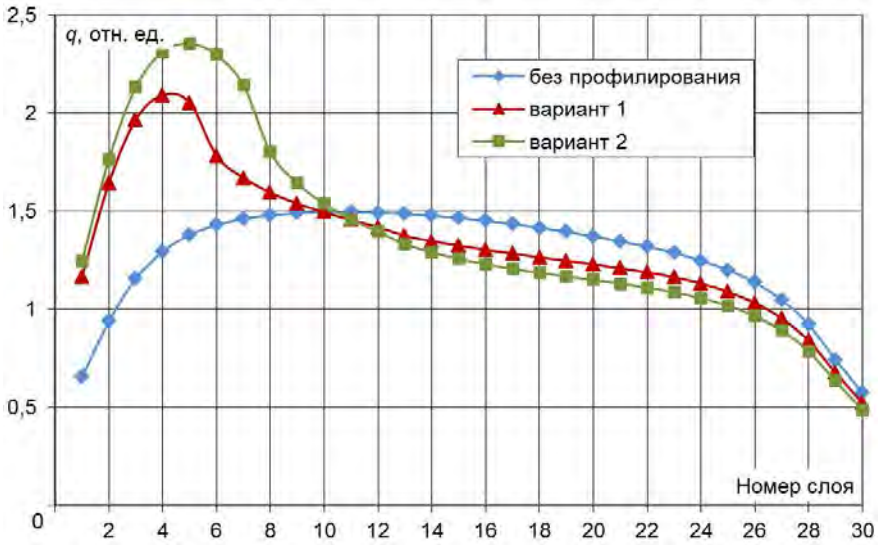

Рис. 12. Исходные аксиальные профили энерговыделения рассматриваемой ТВС в проектном и профилированных вариантах для равновесной кампании

деления умножены на величину относительной мощности рассматриваемой ТВС для варианта без профилирования. В результате получены аксиальные профили энерговыделения равной интегральной мощности (рис. 13), которые далее использовались для расчёта объёмной доли пара. На рис. 14 представлены аксиальные профили истинной объёмной доли пара “горячих каналов” для рассматриваемых профилей энерговыделения.

Окончательный результат минимизации доли пара за счёт аксиального профилирования поглотителя в твэгах приведен в табл. 3.

Т а б л и ц а 3. Истинная объёмная доля пара в “горячем канале” рассматриваемой ТВС в проектном варианте и вариантах 1 и 2

Вариант	Максимальная величина φ доли пара, %
Проектный	10,2
№ 1	7,2
№ 2	6,7

Таким образом, при выравнивании интегральной мощности “горячих каналов” эффект уменьшения доли пара от аксиального профилирования поглотителя достигает 34 % в варианте № 2. К сожалению, в варианте № 2 слишком большое смещение поля энерговыделения в нижнюю часть ТВС приводит к нарушению ограничения

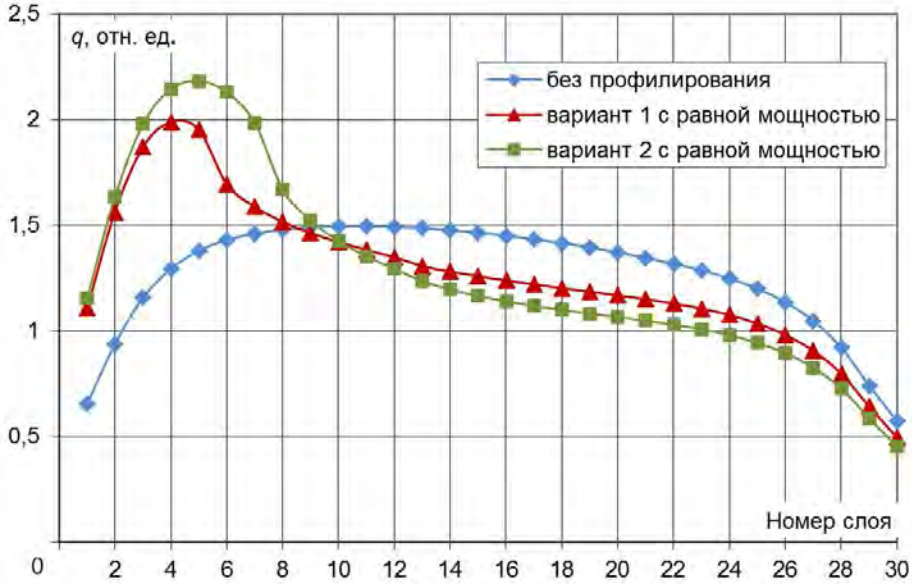

Рис. 13. Аксиальные профили энерговыделения рассматриваемой ТВС при равной интегральной мощности в проектном и профилированных вариантах

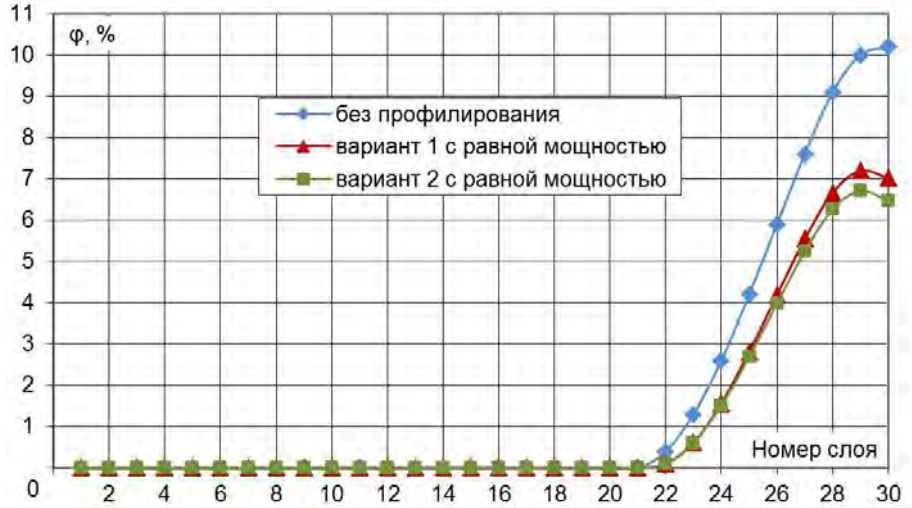

Рис. 14. Аксиальные профили истинной объёмной доли пара “горячих каналов” рассматриваемой ТВС при равной интегральной мощности в проектном и профилированных вариантах

на величину линейной нагрузки на твэл (она превосходит 420 Вт/см).

В варианте № 1 ограничение на линейную нагрузку выполняется с небольшим (2 Вт/см) запасом. Таким образом, максимальный полученный эффект уменьшения доли пара составил 29 %. Следовательно, для получения положительного эффекта необходимо наряду с профилированной загрузкой поглотителя найти иной способ влияния на энергораспределение для снижения мощности ТВС.

Заключение

Проведены модельные исследования по оптимизации аксиального профиля энерговыделения для снижения доли пара на выходе “горячего канала” ТВС ВВЭР-1200. Показано, что доля пара снижается при уменьшении энерговыделения в верхней части ТВС по отношению к энерговыделению в нижней части. Рассмотрен вариант снижения энерговыделения в верхней части за счёт перераспределения выгорающего поглотителя по высоте твэга в ТВС. В расчётах применялись различные возможные способы ступенчатого аксиального профилирования концентрации гадолиния и предложен близкий к оптимальному вариант, удовлетворяющий проектному ограничению на линейную нагрузку на твэл.

В то же время проведенные исследования показали, что простым перераспределением начальной концентрации гадолиния по высоте твэга, при сохранении средней концентрации гадолиния, понизить долю пара на выходе из “горячего канала” не удаётся. Оказалось, что при таком способе профилирования, благодаря нелинейной зависимости размножающих свойств ТВС от концентрации гадолиния и действию обратных связей, мощность ТВС возрастает. В результате доля пара на выходе из канала только увеличивается.

Для получения положительного эффекта от аксиального профилирования поглотителя в ТВС необходимо понизить мощность этой ТВС. Энерговыделение в каждой точке определяется как потоком тепловых нейтронов, так и концентрацией делящегося изотопа (обогащением). Профилирование загрузки поглотителя воздействует в основном на поток тепловых нейтронов. Поэтому, если к тому же применить дополнительное профилирование обогащения по длине ТВС, то можно изменить и полную мощность.

В частности, необходимо перераспределить обогащение так, чтобы в нижней части ТВС оно понизилось, а в верхней – повысилось. Поскольку мощность профилированной ТВС возрастает всего на 5…8 %, то потребуется небольшое изменение обогащения по длине ТВС. Таким образом, если перераспределением обогащения топлива привести мощность профилированной ТВС к мощности непрофилированной, то можно ожидать уменьшение доли пара на выходе примерно на 30 %.

Данная работа поддержана Минобрнауки РФ в рамках проекта № 3092 базовой части государственного задания вузам в сфере научной деятельности.

Список литературы

1. ***Программа NOSTRA*** (версия 5.0). Аттестационный паспорт программного средства. Регистрационный номер паспорта от 23.12.2003 № 167. М.: Федеральный надзор России по ядерной и радиационной безопасности, 2003.

2. ***Семченков Ю.М., Мильто В.А., Пинегин А.А., Шумский Б.Е.*** Анализ шумов нейтронного потока, вызванных флюктуациями параметров теплоносителя в активной зоне ВВЭР // Атомная энергия, 2007, т. 103, вып. 5, с. 283–286.

3. ***Семченков Ю.М., Мильто В.А., Шумский Б.Е.*** Внедрение методики диагностики кипения теплоносителя в активной зоне ВВЭР-1000 в систему внутриреакторной шумовой диагностики // Атомная энергия, 2008, т. 105, вып. 2, с. 79–82.

Контактная информация –
Шумский Борис Евгеньевич, в. н. с., тел.: 8(499) 323-92-42, (моб.) 8(916)125-53-11, e-mail: borisshumskij@yandex.ru

Вопросы атомной науки и техники.
Сер. Физика ядерных реакторов, 2015, вып. 2, с. 25–35.

УДК 533.6.011.6

Теплогидравлические реакторные коды III поколения. Современный статус и проблемы внедрения

Ю.М. Жуков, Д.С. Уртенов,
НИЦ “Курчатовский институт”, 123182, Москва, пл. Курчатова, 1
Поступила в редакцию 12.11.2014 г.

Рассмотрен комплекс проблем постепенного перехода от существующих теплогидравлических реакторных кодов II поколения, основанных на концепции двухжидкостной неравновесной модели течения, к реакторным кодам III поколения – трёхмерным кодам с учётом влияния турбулентности (3D+ + CFD). Для современного уровня описания физических явлений, происходящих в канале, охлаждаемом двухфазной средой, необходимо математическое моделирование процессов в трёхмерном пространстве с учётом влияния турбулентности. В условиях переизбытка информации такой анализ необходим для ясного понимания пределов работоспособности классических уравнений Навье–Стокса с учётом топологии реальных поверхностей, на которых и образуется паровая фаза. Переход к полномасштабному применению 3D CFD турбулентных кодов для оценки безопасности действующих ЯЭУ ожидается лишь в долговременной перспективе.

Ключевые слова: теплогидравлический реакторный код, вычислительная гидродинамика турбулентных многожидкостных потоков, прямое численное решение уравнений Навье–Стокса, верификация и валидация кода.

Thermohydraulic Reactor Codes of 3rd Generation. Present Status and Problems of Implementation. ***Yu.M. Zhukov, D.S. Urtenov,*** *NRC “Kurchatov Institute”, I, Kurchatov Sq., Moscow, 123182.*

It is discussed the transition from the existing reactor thermal-hydraulic codes of 2nd generation, based on the non-equilibrium two-fluid flow model, to the reactor codes of 3rd generation – three-dimensional codes with taking into account the influence of turbulence (3D CFD). The transition to full application of the turbulent codes to evaluate the safety of existing nuclear power installations is expected only in the long term, after realizing the whole set of experimental research in the field of thermal physics and mathematical modeling of phase-change heat transfer medium. Such analysis is necessary fora clear understanding of the limits of the classical Navier–Stokes equations, taking into account the topology of real surfaces, on which a vapor phase is formed.

Key Words: Reactor Thermohydraulic Code, Computational Fluid Dynamics of Turbulent Multifluid Flows, Direct Numerical Solution of the Navier–Stokes Equations, Verification and Validation of Code.

Введение

Современные одномерные реакторные коды II поколения, основанные на двухжидкостной модели течения теплоносителя (6 уравнений сохранения), за 40 лет своего существования достигли высокого уровня развития и с определённой степенью достоверности обеспечивают расчёты сложных стационарных, нестационарных и аварийных режимов реакторных установок (РУ).

Есть основание считать, что в течение продолжительного времени они по-прежнему будут использоваться ядерным сообществом в качестве основного расчётного инструмента для решения задач обоснования увеличения срока службы и повышения уровня безопасности, снижения технологических запасов, интенсификации процессов тепломассообмена в условиях вынужденной и естественной циркуляции в контуре реактора.

При этом как в России, так и за рубежом, специалистами признано, что одномерные двухжидкостные теплогидравлические (ТГ) коды “улучшенной оценки” уже не удовлетворяют возросшим требованиям к достоверности результатов расчётов, а также не учитывают всех достижений в экспериментальных и теоретических исследованиях в области теплофизики и математическом моделировании нелинейных процессов, происходя-

щих в исключительно малых пространственно-временны́х масштабах.

С физической точки зрения 3D CFD коды представляют собой дальнейшее развитие двухжидкостной модели течения теплоносителя с дополнительным подключением транспортного уравнения межфазного взаимодействия на интерфейсе пар-жидкость. В проектах энергетических реакторов следующего поколения большая роль отводится концепции “пассивной безопасности”, при которой протекание процессов теплообмена и гидродинамической неустойчивости контура определяются напором естественной циркуляции.

Расчёт таких режимов выходит за рамки возможностей одномерных ТГ кодов. Течения в сложных структурах (кассеты с твэлами, гибы, элементы с резким изменением сечения) вызывают сильные локальные возмущения потока, которые воздействуют на давление и фазовые скорости. Появление противотоков, как правило, происходит в областях со сложной геометрией. Для численного моделирования течения теплоносителя в таких областях требуются трёхмерные коды с расчётом мелкомасштабных характеристик потока.

Высший приоритет в теоретических исследованиях газо-жидкостных потоков принадлежит созданию моделей и разработке математического инструмента, с помощью которых можно описать динамику процессов, протекающих в исключительно малых объёмах, с учётом турбулентности жидкости, взаимодействия типа частица/частица, частица/стенка.

Такое взаимодействие зависит от формы частиц, закона распределения по размеру, скорости, концентрации фаз, процессов дробления и слияния пузырей. Сами по себе эти процессы имеют стохастическую природу, как и само явление турбулентности. Распределение фаз в пристенном слое, динамическое взаимодействие паровой и жидкой фаз в окрестности растущего пузыря – фундаментальные проблемы численного моделирования на уровне микрофизики.

Поскольку непосредственное решение уравнений сплошной среды Навье – Стокса для турбулентных течений в настоящее время представляется слишком ресурсоёмким, то используются полуэмпирические модели турбулентности. Например, модели турбулентности $\boldsymbol{k}$-ε и $\boldsymbol{k}$-ω являются одними из самых известных и наиболее универсальных моделей.

Однако экспериментальное изучение сложных неравновесных в термодинамическом смысле физических явлений для малых масштабных и временны́х интервалов всё ещё проблематично по техническим причинам, а прямое численное моделирование (DNS) для изучения макроскопических проблем пока неэффективно по временны́м затратам. Поэтому усреднённые модели турбулентности (RANS, URANS, LES, DES) являются основным расчётным инструментом в реакторной технологии.

Все без исключения ТГ реакторные коды II и III поколений в вопросах гидродинамики и теплообмена базируются на эмпирических формулах со всеми присущими такому подходу недостатками. В долгосрочной перспективе применение многофазных CFD кодов позволит обеспечить моделирование множества трёхмерных эффектов крупного и мелкого масштаба, важных для безопасности РУ, без привлечения эмпирических зависимостей. Однако физические модели по теплообмену и гидродинамике, разработанные в своё время для одномерных системных кодов, обеспечивают расчёт лишь усреднённых параметров потока.

Такие модели без соответствующей коррекции не могут быть включены в турбулентные 3D CFD коды. По сравнению с однофазной вычислительной гидродинамикой двухфазные CFD коды находятся на более низком уровне развития. Известны успешные подходы в реализации турбулентных и физических моделей, однако применимость двухфазных CFD кодов при дискретизации на мелких сетках всё ещё ограничивается частными примерами, включающими теплообмен при пузырьковом кипении.

В обзорной статье [1] рассмотрены современные тенденции развития зарубежных системных ТГ кодов II поколения, ис-

пользуемых для анализа аварийных процессов в системах охлаждения энергетических ядерных реакторов. Представлены основные направления совершенствования физических моделей для описания межфазных взаимодействий, трения, теплообмена с учётом фазовых переходов, а также процесса верификации и валидации ТГ кодов.

Реакторные ТГ коды обеспечивают в первую очередь расчёт нестационарных режимов в комплексных реакторных системах, в то время как 3D CFD коды предназначены для анализа мелкомасштабных эффектов при достаточно подробной дискретизации по пространству, в стационарных условиях, для отдельных реакторных компонентов. В том числе необходимо решить проблему влияния масштабного фактора, что является критическим моментом при использовании 3D CFD кодов, особенно в динамических режимах.

1. Проблема моделирования процесса кипения в реакторных ТГ кодах III поколения

В этом году исполняется ровно 80 лет с момента опубликования статьи, где впервые речь шла о “кривой кипения”. После нескольких десятилетий фундаментального исследования процесса гетерогенного кипения численное моделирование даже адиабатических потоков пузырьковой структуры всё ещё сталкивается с определёнными трудностями, особенно для значительного истинного объёмного паросодержания, когда размер пузыря не является очень маленьким и форма пузырей отличается от сферы.

Режим пузырькового кипения недогретой жидкости до сих пор остаётся трудным для математического моделирования, потому что локальные микроскопические параметры, такие как состояние поверхности, плотность центров парообразования и их взаимодействие, частота эмиссии пузырьков, оказывают прямое комплексное влияние на изменение макроскопических параметров (температура стенки, объёмное паросодержание, фазовые скорости, критические тепловые потоки, гидравлическое сопротивление).

В то время как некоторое продвижение сделано в моделировании плёночного кипения и кипения с недогревом для случая одиночного пузыря или нескольких пузырей на предопределённых участках обогреваемой поверхности, полное моделирование гетерогенного кипения с учётом стохастически распределённых центров парообразования пока недоступно.

Чтобы достигнуть той же самой степени готовности, как современные системные двухжидкостные коды II поколения, двухфазные CFD коды нуждаются в дополнительных физических моделях для расчёта следующих процессов:

кризис теплоотдачи, критическое истечение, влияние турбулентности на теплообмен и на механизм дробления и коалесценции пузырьков пара, конденсация с учётом неконденсирующихся газов, гидравлическое сопротивление элементов контура реактора, гидроудар при наличии паровой фазы, стратификация потока, осушение активной зоны и её повторный залив, возникновение колебаний расхода и нелинейная динамика системы взаимосвязанных парогенерирующих каналов.

В обзоре [2] в рамках рассматриваемой проблемы разработки физических моделей для расчёта режимов теплообмена с фазовыми переходами затронуты следующие темы:

- пузырьковое кипение – возможности теоретического анализа и обзор за последние 20 лет экспериментальных исследований процесса в большом объёме и при циркуляции теплоносителя;
- транспорт тепла от стенки к ядру потока жидкости;
- взаимодействие между жидкой фазой, паровыми пузырями и стенкой;
- достоверность расчёта основных характеристик кипящих потоков пузырьковой структуры;
- взаимное влияние пузырей и процесс коалесценции/дробления в парожидкостных потоках;
- метастабильность жидкости;

- статистика процесса пузырькового кипения;
- динамика поведения центров парообразования различной геометрии;
- нелинейная хаотическая динамика пузырькового кипения;
- проблема масштабирования и переход от методов DNS к реальным инженерным задачам;
- оценка необходимых вычислительных ресурсов;
- оценка временно́го интервала внедрения методики DNS в инженерную практику ТГ расчётов ЯЭУ.

Множество существующих механистических моделей кипения и кризиса теплоотдачи, огромное количество экспериментальных данных затрудняют разработку инженерных методик и рекомендаций для расчёта новых перспективных конструкций твэлов и ТВС с элементами интенсификации теплоотдачи и с повышенным запасом до предельно допустимой мощности. Эти рекомендации должны работать во всём многообразии режимных параметров как в номинальных, так и в аварийных режимах работы ЯЭУ. Проблемы при моделировании многофазных потоков CFD кодами возникают потому, что процессы обмена массой, моментом и энергией определяются сложной динамической структурой интерфейса.

Процедуры усреднения по пространству и времени приводят к хорошо известным двухжидкостным моделям. Из-за этого усреднения, главным образом на поверхности интерфейса, информация о деталях процессов взаимодействия между жидкой фазой, паровыми пузырями и стенкой теряется и должна быть дополнена снова так называемыми замыкающими эмпирическими соотношениями. Общепризнанной математической модели кипения на сегодняшний день нет. Поэтому при использовании замыкающих соотношений, устанавливающих определённую зависимость между неизвестными параметрами, как правило, применяются чисто эмпирические либо полуэмпирические зависимости. Общее количество таких рекомендаций в ТГ реакторном коде может достигать сотен.

Некоторые физические явления на микромасштабном уровне пока не до конца поняты. Сюда можно отнести проблемы микрофизики, в том числе наличие связи между молекулярными силами и макроскопическим поведением пузырьков пара, капель жидкости, которые можно наблюдать во многих ситуациях при формировании/разрушении интерфейса в процессе слияния/дробления капель и пузырьков. Механизм запуска пузырькового кипения на ультра гладких поверхностях также относится к разряду задач из области молекулярной динамики.

Решение проблемы передачи тепла от обогреваемой стенки к жидкости в сопряжённой постановке определяется тремя факторами, которые включают в себя следующие компоненты.

2. Размерность пространства переменных

Процесс гетерогенного пузырькового кипения жидкости на обогреваемой поверхности является многофакторным, нелинейным и стохастическим по своей природе. Как следует из анализа литературных источников, теплообмен при кипении существенно зависит от комбинации режимных параметров, теплофизических свойств жидкости и теплоотдающей стенки, микроструктуры поверхности и её толщины. Из-за отсутствия строгого аналитического решения задачи в сопряжённой постановке пока не удаётся корректно учесть влияние условий зарождения, скорости роста и частоты эмиссии пузырей, полей температуры в жидкости и в стенке с учётом всего многообразия взаимодействия центров парообразования.

Все известные решения имеют, как правило, полуэмпирический характер. Даже прогнозирование динамики единичных пузырьков с использованием различных моделей часто даёт противоречивые результаты.

Появление усовершенствованных экспериментальных методов, средств диагностики, методов сбора данных и высокоскоростной

визуализации обеспечили значительный прогресс в области фундаментальных исследований процесса зарождения и динамики роста единичного пузырька, движения контактной линии и распространения “сухих” пятен, скольжения, дробления и коалесценции пузырьков, эффекта влияния теплофизических свойств материала нагревателя и микроструктуры поверхности. Однако до сих пор нет согласия в отношении значимости вклада конкурирующих механизмов переноса тепла от поверхности к ядру потока жидкости.

Из фрагментов многочисленных теоретических исследований и огромного количества экспериментальных данных пока не удаётся создать непротиворечивую модель кипения. По нашему мнению, переход на петафлопные процессоры не решит проблемы. Нужны новые идеи, обеспечивающие сборку многих взаимодействующих подпроцессов, протекающих в исключительно малых масштабах с временны́ми интервалами до микросекунд в условиях влияния детерминированного хаоса.

Исключительно важную роль при разработке эмпирических корреляций играет размерность пространства независимых переменных. Например, при конвективном теплообмене число $\mathrm{Nu} = f(\mathrm{Re}^m, \mathrm{Pr}^n)$, т.е. используется пространство, где всего два параметра и поэтому структура эмпирической формулы проста.

Но при расчёте кризиса теплоотдачи в статике и при фиксированном расположении в пространстве необходимы уже 6 параметров (как минимум), так как $q_{\text{кр}} = f(P, Wj, X$, радиальное и высотное поля энерговыделения, геометрия канала). По этой причине нет эмпирических корреляций, которые могли бы конкурировать со “скелетными таблицами”. Аналогичная картина наблюдается и при расчёте закризисного теплообмена.

Пространство независимых переменных при кипении превышает 30 единиц [3, 4]. Некоторые переменные являются стохастическими, а не детерминированными. Нелинейные связи между ними переводят проблему гетерогенного кипения в класс задач, не поддающихся безразмерному анализу.

3. Проблема масштабирования

Это одна из труднейших задач при разработке математического аппарата для численного моделирования процессов с фазовыми переходами. Детальный расчёт, например, таких явлений, как разрыв жидкой нити на завершающей стадии отрыва жидкой капли от сопла, слияние пузырей или капель жидкости, движение пограничной линии, разделяющей три области – твёрдая стенка, пар, жидкость, требует диапазона разрешения по пространственной координате до 7-ми порядков. В частности, масштаб некоторых переменных, характерных для процесса пузырькового кипения, изменяется в следующих диапазонах [5]:

- температура стенки испытывает колебания $\Delta T \sim 10\ldots15$ ºС за 2 миллисекунды;
- ускорение пузырька в инерционной фазе развития $dR/dt \sim (2\ldots3)\cdot10^6$g;
- градиент температуры на интерфейсе пар-жидкость-стенка $dT/dr \sim 2\cdot10^5$ ºС/мм;
- толщина метастабильного перегретого слоя $\delta \sim 10\ldots20$ микрон;
- число пузырьков при разгерметизации I контура может превосходить 10^9 м$^{-3}$.

Поэтому DNS для расчёта макроскопических реальных процессов пока неэффективно по временны́м затратам, а экспериментальное изучение сложных неравновесных в термодинамическом смысле физических явлений для микромасштабных интервалов всё ещё проблематично по техническим причинам.

Например, в аналитической модели пузырькового кипения [6], основанной на концепции динамики контактной линии CL при испарении микрослоя, с учётом влияния расклинивающего давления и давления отдачи на тепломассообмен в микроскопической зоне линии соприкосновения 3-х фаз плотность теплового потока может достигать величины $q \approx 10^8$ Вт/м^2, т.е. на два порядка превышать стандартную величину критического теплового потока. Теплообмен на контактной линии (CL) регулируется законами микрофизики,

которые действуют на микромасштабах длины (~ 10^{-8}…10^{-6} м), и не может быть численно разрешён на реальных сетках.

Детали физики процессов, происходящих вокруг отдельного пузырька, в настоящее время остаются неопределёнными. Из-за отсутствия универсальной модели кипения пока не удаётся корректно рассчитать условия зарождения, скорость роста и частоту эмиссии пузырей в сопряжённой постановке с учётом влияния полей температуры в жидкости и в стенке с учётом взаимодействия центров парообразования.

4. Нелинейная хаотическая динамика пузырькового кипения

Известно, что кипение – комплексное явление, включающее в себя фазовый переход, турбулентное течение и сложные процессы взаимодействия фаз на интерфейсе. Случайный характер образования пузырьков на центрах зарождения, взаимное влияние этих центров друг на друга – сугубо нелинейный процесс.

Кипение служит одним из примеров нелинейных пространственно-временны́х систем, где даже малые возмущения отдельной составляющей приводят к сложному поведению всей системы. Предполагается, что такое нелинейное поведение является одной из причин, почему возможности теоретического анализа процесса кипения до сих пор остаются призрачными.

Нелинейный характер взаимодействия пузырьков препятствует разработке механистических моделей кипения, так как практически невозможно учесть реальную микроструктуру поверхности и соответствующие характеристики центров парообразования (диаметр и раствор впадин). Экспериментально подтверждено, что глубина и форма впадины являются важными параметрами, необходимыми для определения условий активации центров парообразования при пузырьковом кипении.

Анализ поведения кластера из нескольких пузырьков показывает, что взаимодействие между пузырьками сильно зависит от микроструктуры центров парообразования, а также от расстояния между ними, от теплоёмкости и толщины стенки.

Разработка корреляций для расчёта плотности зародышеобразования, отрывного диаметра, частоты эмиссии пузырьков, распределения потоков тепла в режиме взаимодействующих пузырьков находится на этапе поиска. Численное моделирование само по себе не может обеспечить понимание всех деталей механизма переноса тепла, так как используется концепция детерминированного вклада различных подпроцессов. При этом надо иметь в виду следующие обстоятельства.

Во-первых, микроскопические переменные процесса кипения, например, условия зарождения пузырька и шероховатость поверхности, плотность и геометрия впадин определяются в значительной степени случайными обстоятельствами.

Во-вторых, кипение на микро уровне проявляется как стохастический процесс, и невозможно точно предсказать, где и когда будет генерироваться следующий пузырь, как долго и на каком расстоянии он будет скользить по поверхности, при каком диаметре он будет отрываться или сливаться с соседними пузырьками.

В обзоре [7] показана необходимость применения понятийного аппарата и математических методов, разработанных для нелинейных систем, находящихся под влиянием детерминированного хаоса. Сложность задачи можно оценить по такому факту – список литературных источников, приведенный автором обзора, составляет 156 единиц.

5. Математические аспекты проблемы моделирования многофазных потоков

В коммерческих CFD кодах, как правило, используются однофазные решатели (single phase solvers) и пользователю предоставляется возможность реализовать конкретную модель пузырькового кипения.

Известно, что режимы течения двухфазного потока описывается эмпирическими замыкающими соотношениями и не всегда безусловно выполняется коррект-

ность математической постановки задачи. Поэтому система из 6 дифференциальных уравнений сохранения момента, энергии и массы при некоторых условиях может стать негиперболичной, что повлечёт за собой появление комплексных характеристик со всеми вытекающими отрицательными последствиями для результатов решения конечно-разностных систем уравнений.

Комплексные характеристики приводят к экспоненциальному росту возмущений в конечно-разностных схемах решения систем уравнений Навье–Стокса. Искусственные меры по подавлению численной неустойчивости решения могут привести к нефизичным колебаниям искомых параметров.

Поэтому 3D CFD турбулентные коды нуждаются в обосновании устойчивой работы “решателя” с гарантированным выходом на правильные результаты, обеспечивающие реалистичное описание режимных параметров как в отдельных компонентах, так и в ЯЭУ в целом.

В работе [8] дан обзор исследований в области численного моделирования многофазных потоков. Приведены примеры научных разработок и перечислены нерешённые проблемы, связанные с расчётом процессов, контролирующих организацию фаз, их взаимодействие, теплообмен, образование/исчезновение интерфейса, процесс коалесценции/дробления пузырей и капель жидкости.

При численном моделировании многофазных потоков требуются специфические методы решения, отражающие более сложную физику. При естественном желании обойти проблему затрат времени с помощью специально разработанных моделей турбулентности начинает сказываться субъективный выбор большого количества факторов. Результаты расчёта начинают зависеть от созданной пользователем пространственной сетки, граничных и начальных условий, численной схемы решения.

Известно, что с математической точки зрения эффективная область усреднённых уравнений двухжидкостных моделей детерминирована. Однако необходимо учитывать стохастическую природу взаимопроникающего континуума жидкость/пар, которая не заложена в полевых уравнениях. Процедура усреднения по пространственной и временнóй координатам приводит к тому, что результирующая двухжидкостная и двухскоростная модель при некоторых условиях становится плохо определённой в том смысле, что используемая система уравнений становится негиперболической, нелинейной и неконсервативной.

Математическая модель должна быть правильной с точки зрения физики явления, с учётом корректного задания начальных и граничных условий в исследуемой области:

а) уравнения движения должны иметь решения;

б) решения должны быть единственными;

в) решение должно быть устойчивым при малых возмущениях начальных данных.

Работоспособность кода проверяется процедурой верификации и валидации при сопоставлении с экспериментальными данными.

6. Верификация двухфазных 3D CFD кодов

Для обеспечения верификации базовой системы замыкающих соотношений реакторных кодов II поколения в прошлом проведены локальные и интегральные эксперименты, в которых моделировались явления и пространственные эффекты, связанные с процессами в нештатных ситуациях. Объём существующей информации по рассматриваемой проблеме огромен.

Так, по зарубежным оценкам на начало 90-х годов прошлого века только по интегральным тестам количество экспериментов превышало 500 единиц. На сегодняшний день число так называемых стандартных проблем безопасности (ISP) превышает 40 единиц. Давно известны подробные матрицы для верификации кодов улучшенной оценки для реакторов типа PWR и BWR в условиях больших и малых течей.

Значительно сложнее обстоит дело в случае применения 3D CFD кода в качестве расчётного инструмента. Экспертиза регулирующего органа оценивает качество процедуры верификации и валидации кода, представленного к аттестации, когда физические модели (например, кипение, конденсация, скорость движения фронта смачивания на перегретой поверхности твэлов и т.п.) верифицированы по известным экспериментальным данным и оценка работоспособности кода убедительно подтверждается многочисленными графиками и таблицами. Тем самым осуществляется проверка работоспособности моделей, заложенных в CFD код, качество нодализационной схемы, устойчивость результатов к вариации шага по пространственной и временно́й координатам, требуемые ресурсы по памяти и время счёта.

Точно также логически проста и наглядна процедура анализа чувствительности и расчёта доверительных интервалов при проведении вероятностного анализа редких событий, важных для безопасности сложных систем (метод Монте-Карло). В рамках европейских проектов NEPTUNE и NURESIM ведутся работы по созданию баз данных для верификации и валидации двухфазных 3D CFD турбулентных кодов. Однако возникает естественный вопрос об объёме верификационных расчётов. Пока трудно оценить масштаб необходимых исследований по данной проблеме.

7. Прямое численное моделирование (DNS) двухфазных потоков

Как инструмент для расчётного моделирования комплекса явлений, связанных с кипением, методика DNS на протяжении последних 15-ти лет применяется различными группами специалистов. При моделировании процесса гетерогенного кипения в большом объёме уравнения неразрывности и энергии Навье – Стокса решаются с учётом фазовых переходов и с известными граничными условиями на стенке.

В публикациях, связанных с разработкой турбулентных моделей для новых ТГ 3D CFD кодов III поколения взамен существующих, основанных на двухжидкостной модели течения, рефреном звучит тезис об исключительных возможностях методики DNS, позволяющей разрешить практически все проблемы гидродинамики и теплообмена с учётом фазовых переходов и наличия сложного интерфейса. И даже обойтись без дорогостоящих экспериментов [9].

Все проблемы, якобы, заключаются в недостаточной мощности современных процессоров, и поэтому постоянный прогресс в этой области (удвоение производительности CPU за 18 месяцев) в ближайшее время обеспечит решение задач любой сложности.

Однако не все специалисты придерживаются такой точки зрения. В частности, установлено, что процесс кипения – это своего рода комплекс пространственно-временны́х хаотических явлений. Поэтому затраты процессорного времени, необходимого для интегрирования систем уравнений гидродинамики и теплообмена в сопряжённой постановке, очень большие, поскольку расчёты должны быть проведены с малым временны́м шагом на исключительно подробных сетках.

В обзоре [2] приводится сводка критических замечаний по данному вопросу. Спектр мнений широкий – от самых пессимистических прогнозов до осторожных выводов. Часть специалистов прогнозирует отдалённую перспективу внедрения методики DNS на уровне системных ТГ реакторных кодов. Оценки изменяются в интервале – от очень отдалённого будущего до – “*не ранее, чем через 20 лет!*”.

Прямое численное моделирование всех процессов переноса в кипящей жидкости, как это делается в турбулентных потоках при малых числах Рейнольдса, не может быть применено для расчёта кипения на реальных технических поверхностях из-за непомерно высоких вычислительных затрат. Даже при самых оптимистичных прогнозах развития вычислительной техники минимальный масштаб разностной сетки при численном решении практических задач в обозримом будущем не сможет прибли-

зиться к колмогоровским микромасштабам турбулентности при высоких числах Рейнольдса. Например, методом DNS авторы [10] провели расчётное моделирование поведения адиабатической системы из 256 газовых пузырей, поднимающихся в стоячей жидкости при числе Re в диапазоне значений 10…30. Для решения этой задачи потребовалось 4 месяца работы кластера из 8 процессоров.

Эти ограничения будут оставаться, по крайней мере, в обозримом будущем, несмотря на продолжающееся увеличение доступных вычислительных ресурсов. Есть экспериментальное подтверждение необходимости введения пространственной шкалы для гладкой обогреваемой поверхности на уровне $\Delta \sim 10^{-9}$ м. Тем самым подчёркивается незначимость влияния макромасштабной гидродинамики на первопричину возникновения кризиса теплоотдачи.

Необходимо признать, что численное моделирование само по себе не может обеспечить понимание механизма переноса тепла от стенки к жидкости без теоретических и экспериментальных исследований.

“Возможности большинства существующих CFD кодов ограничиваются моделированием только некоторых режимов двухфазных потоков и, кроме того, для использования этих кодов требуются огромные вычислительные ресурсы. Прямое использование двухфазных CFD кодов для анализа динамики больших систем не может найти практического применения в течение ближайших нескольких десятилетий” [11].

В работе [12] обращается внимание на пределы вычислительной способности современных CFD кодов и перспективы развития технологии 3D CFD в обозримом будущем. Авторы статьи делают очень важный вывод о том, что в противовес ранним оптимистическим прогнозам о решающей роли CFD в проектировании и снижении затрат на эксперименты пока только небольшая часть расчётных исследований, произведенных в ядерных отраслях промышленности, сделана с использованием технологии 3D CFD. Некоторые эксперты полагают, что эта перспектива очень далека даже при самых оптимистичных оценках роста вычислительной мощности.

Пока существует ограниченное понимание, как представить огромное количество цифровой информации, генерируемое современными кодами методом DNS при расчёте аварии на реальной ЯЭУ, где развитие очень сложных, взаимосвязанных процессов может длиться на протяжении часов или суток.

Если сегодня для оптимизационных расчётов и обоснования безопасности реакторов следующего поколения повторять обширные экспериментальные исследования, выполненные в прошлом, то затраты могут оказаться слишком большими. Одна из причин, почему двухфазные 3D CFD турбулентные коды медленно внедряются в практику расчётов, заключается в том, что фазовый переход жидкость-пар является исключительно сложным процессом по своей природе и не имеет достаточно строгого теоретического обоснования.

8. Оценка необходимого количества узлов сетки для моделирования движения многофазной среды

В [13] сделана оценка требуемого количества узлов, необходимых для расчёта течения однофазной среды в активной зоне PWR (900 MWe, 157 ТВС по 17×17 стержней каждая, P = 15,5 МПа, $V_{ср}$ = 5,4 м/с) 3D CFD кодом с применением методики DNS. Масштаб Колмогорова при расчёте вязкой диссипации энергии приблизительно равен 12 мкм. Тогда генератор сетки должен создать контрольные объёмы с максимальным линейным размером узла около 12 мкм.

Необходимое количество узлов сетки для моделирования движения многофазной среды в сечении одной ТВС с использованием метода DNS в режимах с фазовыми переходами составляет величину порядка 10^{17}, что соответствует примерно 10^{19} узлов для активной зоны реактора. В настоящее время возможности высокопроизводительных процессоров позволяют обрабатывать от 10^7 до 10^8 узлов.

В сборнике [14] приводятся мнения ведущих специалистов в области физики кипения, их замечания и комментарии к дискуссии о состоянии проблемы. Отмечается, что хотя специалисты нуждаются в надёжных моделях для насущных практических потребностей, претензии некоторых авторов на универсальность разрабатываемых моделей и кодов следует признать как *"несбыточные и потенциально опасные"*.

Разработка множества более специализированных инструментов, каждый из которых имеет свою область применимости, кажется, представляет собой более реалистичный способ решения различных проблем с приемлемой степенью физического реализма, по крайней мере, в обозримом будущем. Даже при таком сокращении масштабов значительные трудности остаются, преодолеть которые можно лишь взаимно дополняемыми усилиями различных групп исследователей.

Заключение

1. Турбулентные 3D CFD коды, несмотря на определённые недостатки, постепенно входят в практику расчётов особенно в тех областях реакторной технологии, где они вне конкуренции. В долгосрочной перспективе применение двухфазных CFD кодов позволит значительно улучшить понимание динамики процессов и обеспечить моделирование множества трёхмерных эффектов крупного и мелкого масштаба, важных для безопасности ЯЭУ. Однако, несмотря на потенциальные возможности и преимущества CFD кодов, их роль не должна быть преувеличена.

2. Оценка необходимого числа узлов для проведения поячеечного ТГ расчёта одной ТВС LWR в режимах с кипением методом DNS составляет около 10^{17} единиц, что соответствует примерно 10^{19} узлов для всей активной зоны. По этой причине всережимные двухфазные CFD коды для открытой среды почти наверняка не смогут заменить компонентные и системные ТГ коды II поколения в краткосрочной и среднесрочной перспективе. Даже в классическом приближении RANS сквозное моделирование ядерных РУ пока лежит за пределами возможностей существующих CPU, если CFD код используется в качестве системного.

3. Известные коммерческие CFD коды, такие как CFX, FLUENT, ANSYS, STAR_CD, представляют собой сложные многокомпонентные системы, имеющие трёхступенчатую структуру: генератор сеток, расчётный модуль и графический интерпретатор результатов. Коды оснащены наборами математических моделей физических процессов и различными методами решения систем конечно-разностных уравнений, из элементов которых конструируется решение той или иной задачи. Широкое распространение вычислительных пакетов создаёт иллюзию того, что они позволяют решить любые задачи.

На самом деле используемые в них математические модели процессов и численные методы далеки от совершенства, поскольку научные изыскания по ним не закончены. В частности, из фрагментов многочисленных теоретических исследований и огромного количества экспериментальных данных пока не удаётся создать непротиворечивую модель кипения. По нашему мнению, переход на петафлопные процессоры не решает проблему. Нужны новые идеи, обеспечивающие сборку множества взаимодействующих подпроцессов, протекающих в исключительно малых масштабах с временны́ми интервалами до микросекунд в условиях влияния детерминированного хаоса.

4. Современные системные реакторные ТГ коды II поколения не исчерпали своих возможностей и в ближайшие 10…15 лет будут по-прежнему служить основным расчётным инструментом при проектировании новых реакторов и при оценке уровня риска и границ безопасной работы ЯЭУ. Макроскопические подходы в приближении пористой среды будут по-прежнему играть доминирующую роль при решении задач съёма тепла в легководных реакторах с принудительной циркуляцией.

5. На сегодняшний день отсутствует единое мнение о способе оценки достоверности расчётов, полученных с помощью CFD 3D кодов, основанных на очень сложных моделях турбулентности (процедура V&V). Много-

численность таких моделей и пока ещё незначительный опыт практического применения в области реакторной технологии указывают на то, что наиболее уязвимым местом современных CFD реакторных кодов является оценка неопределённости результатов. До сих пор нет общепризнанной стратегии решения этой проблемы.

Список литературы

1. ***Асмолов В.Г., Блинков В.Н., Мелихов В.И., Мелихов О.И., Парфёнов Ю.В., Емельянов Д.А., Киселёв А.Е., Долганов К.С.*** Современное состояние и тенденции развития системных теплогидравлических кодов за рубежом // ТВТ, 2014, том 52, .№ 1, с. 105–117.

2. ***Большаков А.В., Жуков Ю.М.*** Модели пузырькового кипения и кризиса теплоодачи в теплогидравлических кодах III поколения // Отчёт НИЦ КИ инв. № 260-45/6-12 от 09.11.2012 г.

3. ***Shekriladze I.*** Boiling Heat Transfer: Mechanisms, Models, Correlations and the Lines of Further Research // The Open Mechanical Engin. Journal, 2008, 2, 104–127.

4. ***Kawaji M., Samaroo R., Kreynin J., Lee T., Banerjee S.*** Subcooled Flow Boiling Experiments and Numerical Simulations for a Virtual Reactor Development // NURETH14-353, 2011.

5. ***RobinsonA.J., Judd R.L.*** Bubble growth in a uniform and spatially distributed temperature field // Int. J. of Heat and Mass Transfer, 2001, Vol. 44, P. 2699–2710.

6. ***Nikolayev V.*** Dynamics of the triple contact line on the non-isothermal heater // Phys. Fluids, 2010, Vol. 22 (8), 082105.

7. ***Shoji M.*** Studies of boiling chaos: a review // Int. J. of Heat and Mass Transfer, 2004, Vol. 47, pp. 1105–1128.

8. ***DinhT., Nourgaliev R., Theofanous T.*** Understanding the Ill-Posed Two-Fluid Model // NURETH-10, A00413, 2003.

9. ***BestionD., Morel C.*** Strategy for improving two-phase 3-D modelling for nuclear safety applications // NURETH-9 Log G239, 1999.

10. ***Magnaudet J., Legendre D.,Mougin G.*** Struggling with Boundary Layers and Wakes of High-Reynolds-Number Bubbles // Proc. of the IUTAM Symp. on Comput. Multiphase Flow, P. 263–271, 2006.

11. ***Jeong, Jae-Jun; Yoon, Han-Young; Park, Ik-Kyu; Cho, Hyoung-Kyu.*** Development and preliminary assessment of a three-dimensional thermal hydraulics code, CUPID // Nuclear Engineering and Technology, v. 42(3), June 2010, p. 279–296.

12. ***Ninokata H., Merzari E.*** Computational fluid dynamics and simulation-based design approach for tight lattice nuclear fuel pin subassemblies // Log Number: KN#6 NURETH-12, 2007.

13. ***Bestion D.*** Status and perspective of a multiscale approach to light water reactor thermalhydraulic simulation // NURETH14-632, 2011.

14. ***Prosperetti A., Hewitt G., Joseph D***. Report on the Panel Discussion on ‘Modeling of Multiphase Flow’, 2003, http: //www .aem. umn. edu/ people/ faculty/joseph/archive/docs/allpanel.pdf (дата обращения: 20.05.2015).

Контактная информация –
Жуков Юрий Михайлович, с. н. с., тел.: 8(499)196-93-70, e-mail: jukovum@rambler.ru

Вопросы атомной науки и техники.
Сер. Физика ядерных реакторов, 2015, вып. 2,
с. 36–46.

УДК 621.039.5

Стохастическая модель формоизменения графитовой кладки РБМК

А.М. Федосов,
НИЦ “Курчатовский институт”, 123182, Москва, пл. Курчатова, 1
Поступила в редакцию 29.09.2014 г.

Разработана расчётная модель деформации графитовой кладки РБМК, вызванной образованием трещин в графитовых блоках. Ориентация трещин и зависимость размеров блоков от флюенса имеют стохастический характер. Для повышения точности расчётов используется информация об измеренных значениях прогибов отдельных каналов. Поле прогибов корректируется на основе принципа максимального правдоподобия. Приводится пример оптимизации схемы ремонта графитовой кладки.
Ключевые слова: РБМК, графитовая кладка, стохастическая модель, флюенс, прогибы каналов, принцип максимального правдоподобия, схема ремонта.

Stochastic Model of the RBMK Graphite Stack Deformation. ***A.M. Fedosov,*** *NRC “Kurchatov Institute”, 1, Kurchatov Sq., Moscow, 123182.*

A computational model of deformation of RBMK graphite stack caused by the formation of cracks in the graphite blocks is developed. Cracks orientation and block sizes dependence on the fluence are stochastic. Information about the measured values of the deflections of the individual channels is used to improve the accuracy of the calculations. Field of deflections is adjusted basing on the principle of maximum likelihood. An example of the optimization scheme of graphite stack repair is shown.
Key Words: RBMK, Graphite Stack, Stochastic Model, Fluence, Deflection of Channels, Principle of Maximum Likelihood, Repair Scheme.

Введение

В последние 2…3 года на некоторых энергоблоках с РБМК наблюдается увеличение кривизны каналов, вызванное растрескиванием графитовых блоков. Искривления каналов могут препятствовать нормальному ходу стержней регулирования и перегрузкам топлива.

Появление трещин в кладке связано с изменением характеристик графита при облучении быстрыми нейтронами [1]. Со временем, по мере набора интеграла потока быстрых нейтронов (флюенса) с энергией выше 0,18 МэВ, происходит вначале уплотнение графита, а затем его распухание, вызванное накоплением дефектов и образованием микротрещин.

Из-за неравномерности распределения флюенса по радиусу графитовых блоков в них растут напряжения, которые в конечном счёте приводят к образованию сквозных продольных трещин и постепенному увеличению габаритов блоков особенно в направлении, перпендикулярном трещине. Из-за силового взаимодействия блоков их центры смещаются. Данные процессы наиболее интенсивно происходят в области максимальных по высоте флюенсов, что приводит к деформации графитовой кладки, приобретающей бочкообразную форму.

В настоящее время наиболее критичным параметром для дальнейшей работы РБМК-1000 является максимальная стрела прогиба каналов. Для поддержания данного параметра в допустимых пределах на энергоблоках Ленинградской и Курской АЭС проводятся работы по восстановлению ресурсных характеристик, заключающиеся в распиле графитовых блоков в некоторых ячейках на 2 или 4 части, уменьшении прогибов с помощью специальных натяжителей и калибровке отверстий под канал.

Для оценки искривлений каналов в процессе дальнейшей эксплуатации деформированной кладки, а также эффективности проводимого ремонта разработана инженерная методика, основанная на вероятностном подходе к определению момента образования трещин и их ориентации по граням графитовых блоков (стохастическая модель).

1. Основные положения стохастической модели

Рассматривается полномасштабная модель активной зоны, включающая ячейки (графитовые колонны) с топливными каналами, каналами СУЗ и т.д.

Предполагается, что силы, приводящие к возникновению и последующему раскрытию трещин в графитовых блоках, превосходят силы сопротивления, препятствующие такому раскрытию (упругость каналов, реакция соседних блоков, силы трения). Тогда задачу формоизменения кладки можно свести к геометрической, используя определённые зависимости размеров графитового блока от флюенса нейтронов и температуры.

Искривление каналов вызвано растрескиванием графитовых блоков в области наибольшего по высоте активной зоны флюенса, где блоки непосредственно соприкасаются и “толкают” друг друга. С этой точки зрения можно было рассмотреть один, наиболее критичный, плоский слой графитовых блоков. Однако из-за того, что блоки в соседних ячейках расположены на разных уровнях (“перевязаны”), высотные слои взаимодействуют между собой.

В модели для учёта эффекта “перевязки” блоков рассматриваются 3 слоя в области наибольшего по высоте флюенса нейтронов, взаимодействующие друг с другом. Предполагается, что выше и ниже данных слоёв деформации блоков заведомо меньше, поэтому они не могут увеличить искривление каналов, так как остаются зазоры между блоками. Горизонтальное сечение треснувшего графитового блока представлено на рис. 1.

От целого треснувший блок отличается тем, что при увеличении ширины трещины его углы расходятся в направлении, перпендикулярном трещине, на величину $2\delta_x$. В направлении, параллельном трещине, также происходит деформация блока на величину $\approx \delta_y$, однако данное приращение значительно меньше, чем в направлении X.

Рассматривается взаимодействие соседних блоков, приводящее после выбора исходного зазора к изменению расстояния между осями каналов. Всего возможны 16 вариантов примыкания двух соседних блоков (по числу граней блока и числу возможных ориентаций трещины соседнего блока). Например, если трещины соседних блоков ориентированы в одну сторону, то приращения δ_x складываются. Если трещины ориентированы в противоположные стороны, то выбирается наибольшая величина δ_x, и т.д. Повороты блоков вокруг оси не рассматриваются.

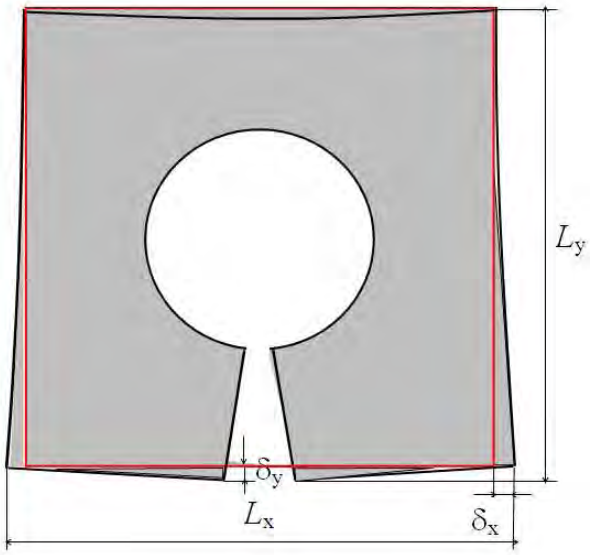

Рис. 1. Горизонтальное сечение треснувшего графитового блока (красная линия – исходные габариты)

Сдвиги центров каналов в направлениях X и Y, вызванные взаимодействием деформированных блоков, далее суммируются, начиная от осей, разделяющих всю активную зону на квадранты (рис. 2). При

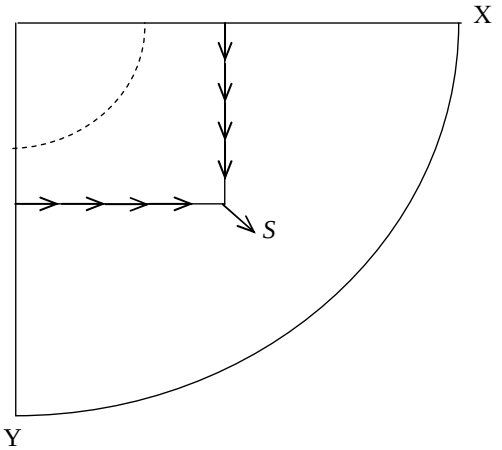

Рис. 2. Схема образования прогиба канала

этом отклонения осей каналов от исходного положения постепенно увеличиваются в направлении от центра к периферии активной зоны. Но вблизи отражателя отклонения не увеличиваются и даже несколько уменьшаются за счёт выбора зазоров, так как периферийные блоки не треснули из-за относительно невысокого флюенса в них.

Отметим, что уменьшение габаритов графитовых блоков в результате ремонта в центре активной зоны (отмечено пунктиром на рис. 2) может никак не влиять на прогибы в каналах по диагонали от центра.

Если бы были известны направления и размеры трещин во всех ячейках, описанный выше подход позволил бы однозначно определить прогибы каналов (с определённой, конечно, точностью). Однако такая информация недоступна в принципе, поскольку направление трещин носит случайный характер, а провести осмотр всех графитовых блоков невозможно. Поэтому приходится применять вероятностный подход. В стохастической модели с помощью генератора случайных чисел разыгрывается множество вариантов ориентации трещин в предположении, что их распределение по граням блоков равновероятно. Рассчитывается математическое ожидание прогибов каналов в каждой ячейке.

Другим источником неопределённости, также носящим вероятностный характер, является зависимость габаритов треснувших блоков от флюенса. Это вызвано множеством факторов, приводящих к “размыванию” зависимости плотности графита от флюенса, которая наблюдается при измерении плотности графитовых кернов (см. рис. 3). В стохастической модели предполагается, что случайный разброс в размере трещины при заданном значении флюенса примерно такой же, как и в плотности графита на рис. 3.

Радиационное формоизменение графита зависит не только от величины флюенса повреждающих нейтронов, но и от температуры, при которой графит облучался. На рис. 4 представлены зависимости плотности графита от флюенса при разных температурах. Кривые получены в отделе Чугунова О.К. (НИЦ КИ) путём обобщения результатов измерений графитовых кернов.

С ростом температуры уменьшается критическое значение флюенса $F_{кр}$, при котором плотность графита становится равной исходной. Однако дальнейшее изменение плотности слабо зависит от температуры (кривые эквидистантны). Согласно [2] между критическим флюенсом и флюенсом, при котором достигается максимальная плотность графита F_{max}, существует прямая пропорция.

Образование трещины в графитовом блоке происходит при некотором порого-

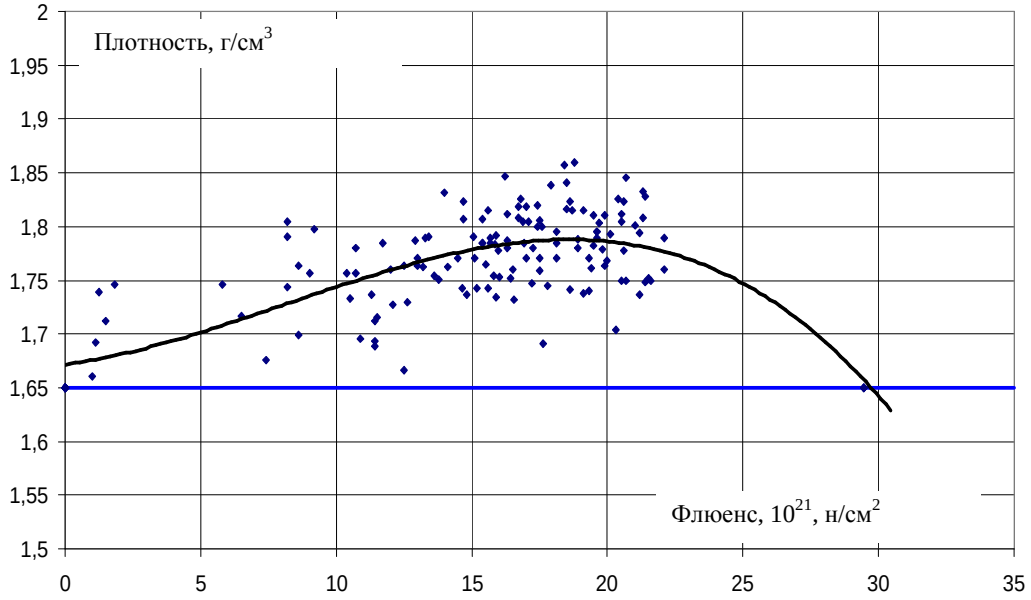

Рис. 3. Зависимость плотности графита от флюенса по измерениям кернов реактора 1-го энергоблока ЛАЭС

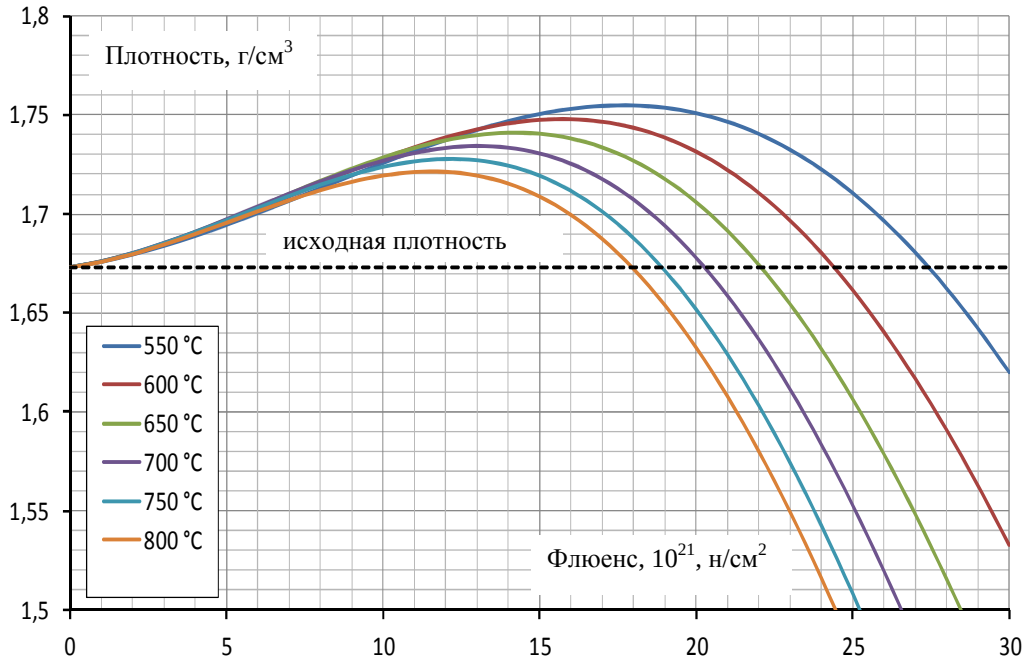

Рис. 4. Зависимость плотности графита от флюенса при разных температурах облучения

вом значении флюенса $F_{пор}$ (между F_{max} и $F_{кр}$) на внутренней поверхности блока, когда внутренние слои переходят в стадию распухания. Учитывая пропорциональность всех трёх величин флюенса, в модели используется зависимость от температуры $F_{пор}$(T), в относительных единицах совпадающая с зависимостью $F_{кр}$(T), полученной из набора кривых рис. 4.

В качестве исходной информации при вычислении прогибов каналов применяются:

– зависимость изменения габаритов блока после образования трещины от флюенса,

– поканальное двумерное распределение (в плане реактора) и усреднённое высотное распределение флюенса,

– распределение температур ячеек.

Зависимость габаритов одиночного блока от флюенса определяется с помощью конечно-элементной модели блока (см., например, [3]) и служит для стохастической модели внешней информацией. Данная зависимость аппроксимирована экспоненциальной функцией, параметры которой откорректированы путём анализа динамики роста прогибов по результатам измерений.

В стохастической модели в соответствии с данными рис. 4 предполагается одинаковый вид зависимости габаритов после образования трещины от флюенса для разных температур облучения, но пороговый флюенс зависит от температуры $F_{пор}$(T). Для учёта стохастичности зависимости ширины трещины от флюенса (аналогично рис. 3) рассчитанная величина $\Delta L_x = 2\delta_x$ варьируется затем случайным образом в пределах ± 15 %.

Для расчёта распределения флюенса в активной зоне используется информация об энерговыработках ячеек за всё время эксплуатации реактора. При этом учитывается, что только примерно половина быстрых нейтронов с энергией выше 0,18 МэВ остаётся в данной ячейке, остальные нейтроны перетекают в соседние ячейки. В результате распределение флюенса в плоскости X-Y отличается от распределения энерговыработок.

На рис. 5 в качестве примера приведено распределение флюенса для 1-го энергоблока ЛАЭС. Данные приведены в относительных единицах. Всё, что меньше единицы, обозначено белым цветом, остальные значения показаны цветовым спектром от наименьшего (фиолетовый) до наибольшего (красный). Видно, что максимальный флюенс имеют ячейки зоны плато, наиболее удалённые от каналов СУЗ, поскольку они со всех сторон окружены каналами с

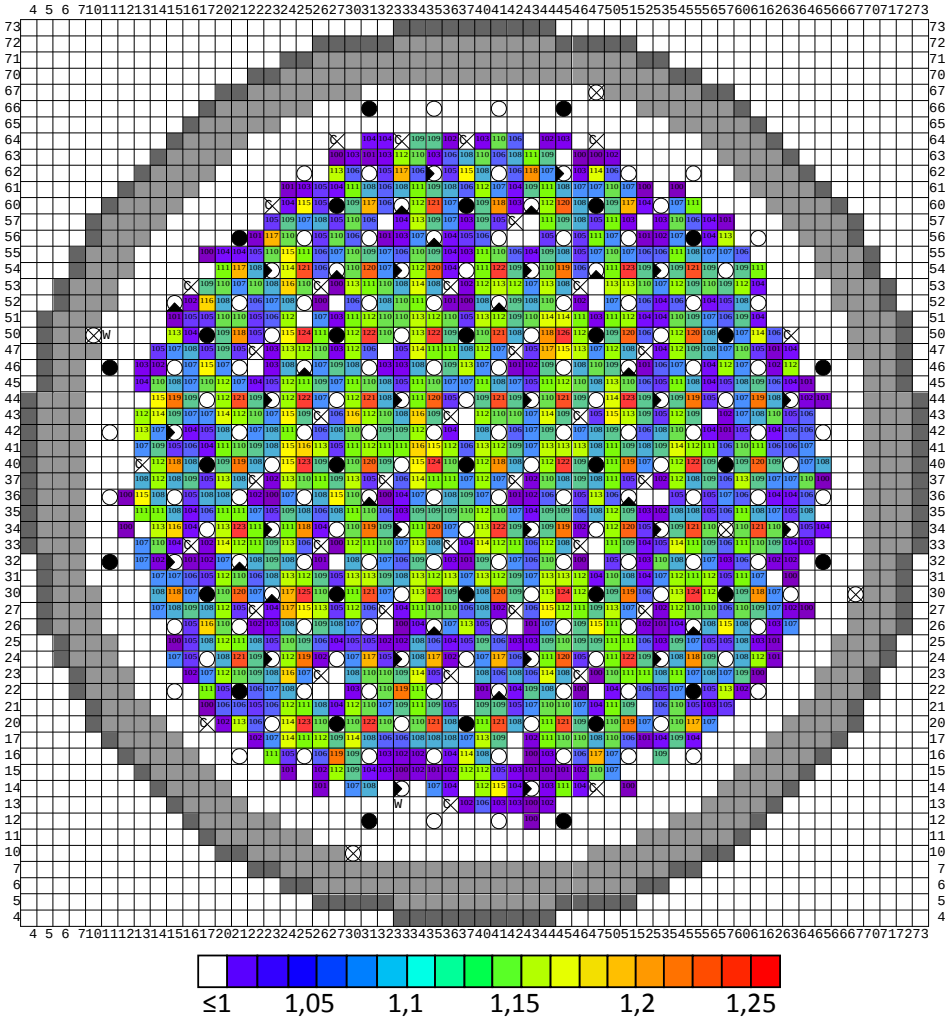

Рис. 5. Распределение флюенса в активной зоне ЛАЭС-1 (относительные единицы)

топливом, дающими примерно 50 % от общего количества быстрых нейтронов в данной ячейке. Ячейки без топлива являются стоками быстрых нейтронов.

При расчёте температур графита на внутренней поверхности ячеек в высотном слое с наибольшим флюенсом предполагается, что перепад средней за всё время эксплуатации температуры между графитом и трубой канала пропорционален средней мощности канала, т.е. фактически средней энерговыработке ячейки.

Расчёты по стохастической модели проводятся следующим образом. В качестве исходной информации задаются: распределение энерговыработок и флюенсов ячеек (в относительных единицах), коэффициенты неравномерности флюенса по высоте активной зоны и по радиусу отдельного графитового блока, средняя температура внутренней поверхности графитового блока в высотном слое с наибольшим флюенсом, полная энерговыработка реактора с начала эксплуатации в эффективных сутках. Для каждой ячейки определяются: флюенс в абсолютных единицах, температура и пороговый флюенс, изменение габаритов блоков ΔL_x и ΔL_y, отклонения a_x и a_y оси канала от исходного положения и величина прогиба $s = \sqrt{a_x^2 + a_y^2}$.

Ремонт графитовой кладки, заключающийся в разрезании графитовых блоков на 2 или 4 части и калибровке отверстий под канал, моделируется соответствующим уменьшением габаритов графитовых блоков на ширину реза в одном или двух направлениях. Неполное смыкание разрезанных частей блока учитывается путём эффективной ширины реза, которая меньше реальной. Предполагается, что дальнейшая деформация разрезанных частей графито-

вого блока либо пренебрежимо мала, либо во много раз меньше, чем неразрезанного треснувшего блока.

2. Влияние неопределённости исходных данных на точность расчётов прогибов

Образование прогибов графитовой кладки носит пороговый характер. За десятилетия эксплуатации реактора они никак не проявляются. Но с момента начала массового образования трещин может наблюдаться довольно быстрый (до нескольких десятков миллиметров в год) рост прогибов. В то же время сам момент образования продольной трещины в конкретном графитовом блоке определяется всей предысторией его эксплуатации, в частности, зависит от накопленного флюенса и средней температуры облучения (см. рис. 4).

Всё это приводит к большой чувствительности расчётной величины прогибов к погрешностям определения флюенса и средней температуры. Например, если реактор до массового растрескивания графита работал около 40 лет, а погрешность в определении абсолютной величины флюенса составляет ~ 5 %, погрешность определения массового растрескивания может составить до 2 лет.

Более конкретные оценки влияния погрешностей исходных данных на точность расчёта прогибов сделаны по стохастической модели на примере реактора 1-го энергоблока Ленинградской АЭС.

Погрешность флюенса определяет погрешность коэффициента пересчёта эффективных суток в средний флюенс на внутренней поверхности графитового блока. Среднеквадратическую погрешность определения данного коэффициента с учётом погрешностей его составляющих можно оценить в 5…6 %. Отметим, что погрешностью распределения флюенса по ячейкам (рис. 5) можно пренебречь, так как она сглаживается из-за стохастического подхода к определению прогибов каналов.

Погрешность в определении абсолютной величины флюенса существенно влияет на определение времени образования трещин и, соответственно, на величину прогибов к заданному моменту времени. Поскольку пороговый флюенс $F_{\text{пор}}$ сильно зависит от средней температуры облучения, погрешность в определении температуры также влияет на точность расчёта прогибов.

Расчёты формоизменения графитовой кладки 1-го энергоблока ЛАЭС показывают, что погрешность в 6 % при определении абсолютных величин флюенсов даёт погрешность в определении максимального прогиба каналов 48 мм, а ошибка в 25 °С в средней температуре даёт погрешность в 23 мм. Суммарная среднеквадратическая погрешность составит 53 мм, что эквивалентно различию ~ 600 эфф. сут (примерно 2 года) во времени достижения максимального прогиба ~ 100 мм.

Таким образом, даже при очень сложной и совершенной модели деформации графитовой кладки только погрешность исходных данных по флюенсам и температурам может привести к значительной погрешности в определении максимального прогиба и времени достижения критической его величины. Причём основной вклад вносит определение момента начала образования трещин. Если массовое образование продольных трещин началось, то дальнейшее развитие деформаций кладки определяется скоростью раскрытия трещин. Влияние неопределённости данной характеристики на конечный результат значительно меньше.

Приведенные данные показывают, что при прогнозировании поведения графитовой кладки, особенно для относительно “молодых” энергоблоков, основная трудность заключается в определении начала массового образования трещин. Поэтому большое значение имеют измерения прогибов каналов. Если прогибы достигают заметных значений (~ 20 мм и выше), значит трещинообразование началось и дальнейшее развитие деформаций можно прогнозировать с большей определённостью. Результаты измерений прогибов можно использовать для настройки модели.

3. Корректировка расчётов по результатам измерений прогибов каналов

Опыт расчётов прогибов каналов по стохастической модели показывает, что после некоторой настройки, заключающейся в основном в небольшой корректировке значения средней температуры графита, результаты расчётов довольно хорошо совпадают с измерениями по величине максимального прогиба и распределению (спектру) прогибов, т.е. доле каналов, имеющих прогибы в данном диапазоне. Однако локализация максимальных прогибов может существенно отличаться от реальной. Это вызвано большим количеством неопределённостей, в частности, в поведении графита, которые трудно учесть в расчёте.

Проблема в чём-то схожа с нейтронно-физическим расчётом большого реактора, в котором небольшие случайные отклонения в характеристиках ячеек, вызванные, например, технологическими допусками, точностью расчёта констант и т.п., приводят к значительным перекосам нейтронного поля. Данная проблема решается корректировкой констант по показаниям нейтронных датчиков.

Наиболее последовательный (статистический) подход предложен несколько десятилетий назад Я.В. Шевелёвым на основе принципа максимального правдоподобия. В применении к нейтронно-физическим расчётам данный подход развит С.С. Городковым [4].

Суть метода состоит в следующем. Предполагается, что исходные параметры **X** (векторная величина) могут иметь отклонения **x**, распределённые по нормальному закону $d\mathrm{P}(\mathbf{x})/d\mathbf{x} \sim \exp(-0{,}5\mathbf{x}^{\mathrm{т}}\mathbf{K}_{\mathbf{x}}^{-1}\mathbf{x})$, где P – вероятность; $\mathbf{K}_{\mathbf{x}}$ – ковариационная матрица, диагональная в случае некоррелированности вариаций параметров, содержащая дисперсии σ^2 отклонений; т – знак транспонирования.

Результаты измерений также имеют погрешности **δ**, подчиняющиеся нормальному закону $d\mathrm{P}(\boldsymbol{\delta})/d\boldsymbol{\delta} \sim \exp(-0{,}5\boldsymbol{\delta}^{\mathrm{т}}\mathbf{K}_{\boldsymbol{\delta}}^{-1}\boldsymbol{\delta})$. Матрица $\mathbf{K}_{\boldsymbol{\delta}}$ также диагональная.

Далее предполагается, что искомый функционал, который в нашем случае является вектором **S** прогибов во всех ячейках реактора, линейно зависит от отклонений **x**, что справедливо при их малости. Измерения прогибов проводятся в отдельных ячейках (назовём их “датчиками”). Вариации **y** показаний “датчиков” зависят от вариаций параметров как $\mathbf{y} = \mathbf{A}(\mathbf{x}) \approx \mathbf{A}\mathbf{x}$, где **A** – матрица функций влияния, связывающая вариации показаний датчиков с вариациями параметров, размерностью $n_{\text{дат}} \times n_{\text{пар}}$.

С учётом проведенных измерений распределение неизвестных отклонений **x** также будет нормальным:

$$d\mathrm{P}(\mathbf{x})/d\mathbf{x} \sim \exp\left\{-0{,}5\left[\mathbf{x}^{\mathrm{т}}\mathbf{K}_{\mathbf{x}}^{-1}\mathbf{x} + (\mathbf{y}^m - \mathbf{A}\mathbf{x})^{\mathrm{т}}\mathbf{K}_{\boldsymbol{\delta}}^{-1}(\mathbf{y}^m - \mathbf{A}\mathbf{x})\right]\right\}. \qquad (1)$$

Наиболее вероятный (максимально правдоподобный) набор отклонений $\mathbf{x}^m$ получим из условия экстремума показателя степени в (1):

$$\mathbf{x}^m = (\mathbf{k}_{\boldsymbol{\delta}}\mathbf{k}_{\mathbf{x}}^{-1} + \mathbf{A}^{\mathrm{т}}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^{\mathrm{т}}\mathbf{y}^m = D\mathbf{y}^m, \qquad (2)$$

где $\mathbf{y}^m$ – отклонение расчёта от измерения в “датчиках”, $\mathbf{k} = \sigma^2 \times \mathbf{1}$ – диагональные матрицы дисперсий, **1** – единичная матрица.

Чтобы получить матрицу **A**, надо кроме базового расчёта с параметрами **X** провести ещё $n_{\text{пар}}$ расчётов, поочерёдно задавая вариации параметров в ячейках. В качестве быстродействующей программы применяется описанная выше стохастическая модель. Как показывает опыт расчётов, матрица **A** является сильно разреженной, так как изменение параметра в ячейке влияет лишь на показания отдельных “датчиков”. Более того, некоторые ячейки в основном на периферии вообще не влияют на “датчики”. В этом случае в матрице **A** появляются нулевые строки, которые нужно удалить. Обращение матрицы размерностью ~ 10^3 в формуле (2) не представляет сложности.

В стохастической модели есть несколько групп параметров, вариации которых можно было бы использовать для коррекции результатов расчётов прогибов по результатам их измерений в отдельных ячей-

ках. К сожалению, такую группу, как ориентация трещин, использовать нельзя, поскольку это целочисленный параметр (4 направления). Наиболее удобными являются вариации распределения флюенса по ячейкам и вариации размеров трещин. Среднеквадратическую погрешность распределения флюенса можно оценить в 5…6 %. Размер трещины при фиксированном значении флюенса может иметь разброс до 2…3 мм. Точность измерения прогиба составляет 3…5 мм. Заметим, что в формуле (2) применяется отношение дисперсий, что снижает требования к оценке погрешностей.

Корректировка исходных параметров проводится в 2 этапа. На первом этапе определяются оптимальные поправки к значениям флюенса, минимизирующие отклонение расчётов прогибов от измеренных значений. На втором этапе при известных оптимальных поправках к распределению флюенсов определяются оптимальные поправки к ширине трещин (точнее к значениям δ_x, которые близки к размерам трещин).

Основное уменьшение отклонений расчётов от измерений происходит уже на первом этапе. Второй этап обеспечивает более тонкую корректировку. Ячейки, в которых значение флюенса ниже $F_{пор}$, в корректировке, естественно, не участвуют, что заметно уменьшает $n_{пар}$. Задавать случайный разброс δ_x, как это описано в п. 1, не нужно, поскольку оптимальные поправки определяются в результате расчётов на втором этапе.

Продемонстрируем работоспособность метода коррекции на примере расчёта прогибов кладки реактора 2-го энергоблока ЛАЭС. В 2014 г. измерены прогибы в 293 ячейках. На рис. 6 показаны картограммы прогибов, полученные по стохастической модели без корректировки и с корректировкой по показаниям 293 “датчиков”. Цветовой спектр соответствует диапазону от ~ 10 мм (фиолетовый) до ~ 90 мм (красный). Видно, что корректированный вариант заметно отличается от исходного. В частности, коррекция сглаживает контрастность значений прогибов.

Среднеквадратическое отклонение расчётов от измерений в 293 ячейках в исходном варианте составляет 12,7 мм, а в корректированном варианте 2,3 мм. Максимальное расхождение составляет 40 и 10 мм, соответственно. Максимальный прогиб равен 86 мм в исходном и 83 мм в корректированном варианте, т.е. слабо влияя на максимальное значение прогиба, коррекция позволяет существенно улучшить согласие

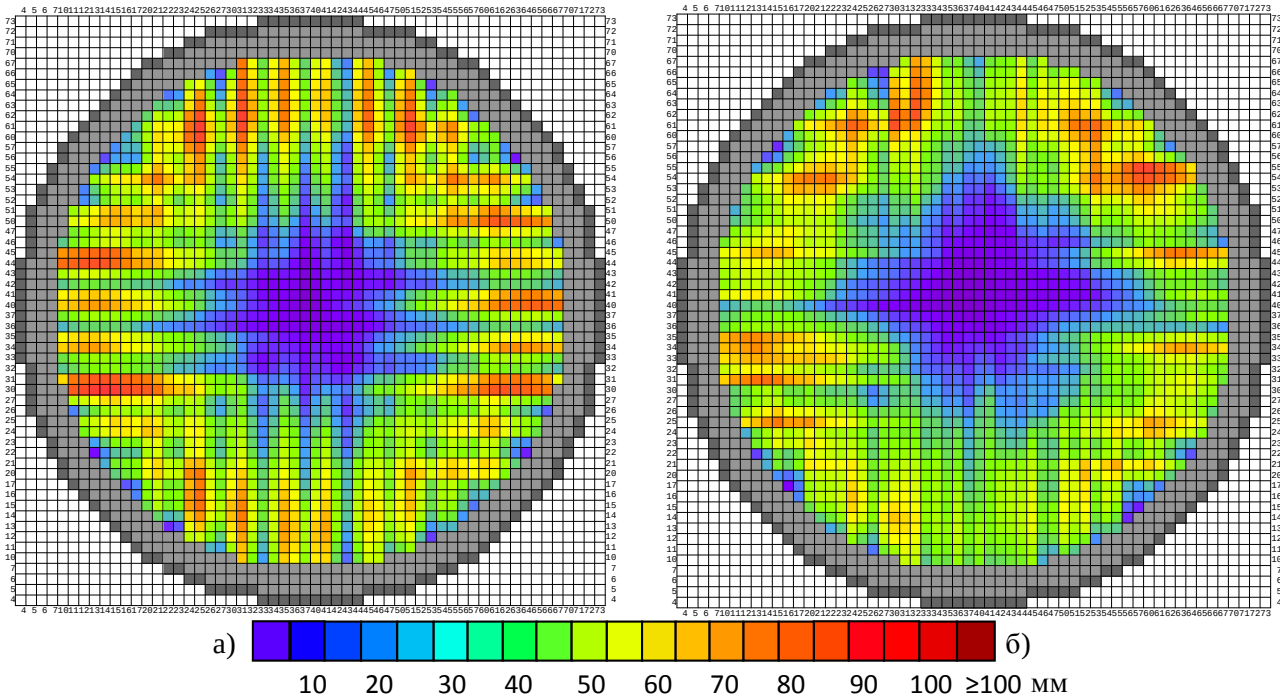

Рис. 6. Картограмма прогибов каналов до (а) и после (б) корректировки

расчётов с измерениями в конкретных ячейках.

Приведенный пример показывает возможности коррекции для ячеек, в которых проводятся измерения. Однако представляет интерес вопрос: насколько повышается точность определения прогибов между “датчиками”? Здесь можно применять разные подходы.

В первом случае проводится корректировка параметров по измерениям в ограниченном числе ячеек и затем проверяется соответствие расчётов и измерений по полному набору измерений. На первом этапе измерены прогибы в 137 ячейках. Коррекция по 137 “датчикам” дала среднеквадратическое расхождение в этих ячейках 1,9 мм и максимальное расхождение 10 мм. Проверка точности по 293 “датчикам” показала среднеквадратическое расхождение 4,9 мм и максимальное различие 22 мм. Т.е. точность корректированных расчётов между “датчиками” хуже, чем в них, однако она значительно выше, чем в некорректированном варианте.

Другой способ использует информацию, полученную от большего числа “датчиков”, но годом ранее, и затем прогнозный расчёт. Так, в 2013 г. проведены измерения в 375 ячейках. Корректировка по 375 датчикам показала различие расчётов и измерений (на момент измерений 2013 г.): среднеквадратическое 2,5 мм, максимальное 8,5 мм. С использованием полученных поправок проведен прогнозный расчёт на момент измерений 2014 г. и сравнение с показаниями 293 “датчиков”. Среднеквадратическое расхождение составило 4,2 мм, а максимальное 15 мм.

Таким образом, несмотря на годовой разрыв во времени эксплуатации, второй способ дал несколько лучшие результаты, поскольку при получении поправок использовано большее число измерений.

Заметим, что с практической точки зрения наибольший интерес представляют области реактора, где наблюдаются максимальные прогибы. Опыт расчётов показывает, что после корректировки точность расчёта поля прогибов в этих местах выше, чем в целом по реактору. Так, во втором способе среднеквадратическое отклонение для ячеек, в которых прогиб превышает 70 мм, составляет 4,1 мм, а максимальное 8 мм.

Изложенный выше метод корректировки расчёта прогибов по результатам измерений позволяет получить более реалистичную картину поля прогибов в реакторе, что важно при планировании ремонта графитовой кладки.

4. Оптимизация картограммы ремонта реактора 2-го энергоблока ЛАЭС

Выбор схем ремонта графитовой кладки 1-го энергоблока Ленинградской АЭС и 2-го энергоблока Курской АЭС опирался на существовавший в то время уровень знаний и представлений о характере процессов деформации графитовой кладки с треснувшими блоками. Подход был в основном эмпирический и интуитивный. Математические модели и программы применялись, как правило, к уже выбранным схемам для прогнозной оценки возможного времени работы до достижения допустимого предела прогибов.

Поскольку изложенный в предыдущем пункте метод коррекции расчёта позволяет значительно приблизить расчётные прогибы к наблюдаемым при измерениях, стохастическая модель может быть использована для выбора оптимальной схемы ремонта графитовой кладки.

В качестве примера рассмотрим состояние 2-го энергоблока ЛАЭС на момент его останова в 2014 г. Расчётное поле прогибов, откорректированное по 293 измерениям, приведено на рис. 6 б). Необходимо подобрать схему резки (координаты ячеек), при которой при относительно небольшом (~ 200 шт.) числе ячеек минимизируется максимальное значение стрелы прогиба. В качестве дополнительного ставилось условие разрезания графитовых блоков только на 2 части. Это облегчает условия дальнейшего их смыкания при помощи натяжителей и калибровки отверстий. Ширина реза 12 мм.

Задача решалась последовательно (итерационно) путём “ручной” оптимизации. Для резки выбирались ячейки между осями симметрии картограммы и ячейками с наибольшими прогибами. На каждом шаге итерации ликвидировались зоны максимальных на этом этапе прогибов. Картограмма ремонта, полученная в результате решения, приводится на рис. 7. Всего ремонтируются 210 ячеек: 101 с горизонтальным (на картограмме) разрезом и 109 с вертикальным разрезом. Картограммы прогибов сразу после ремонта и через 700 эфф. сут (примерно 2,5 года) приведены на рис. 8. Максимальный прогиб сразу после ремонта равен 35 мм, а после 700 эфф. сут – 89 мм.

Отметим, что при оптимальной схеме ремонта наблюдается азимутальная симметрия зоны максимальных прогибов на периферии реактора, т.е. сразу много ячеек имеют прогибы, близкие к предельному значению. Для “неоптимальных” схем обычно наблюдается локализация максимальных прогибов в отдельных зонах, в то время как в других местах ещё есть значительный запас до предела.

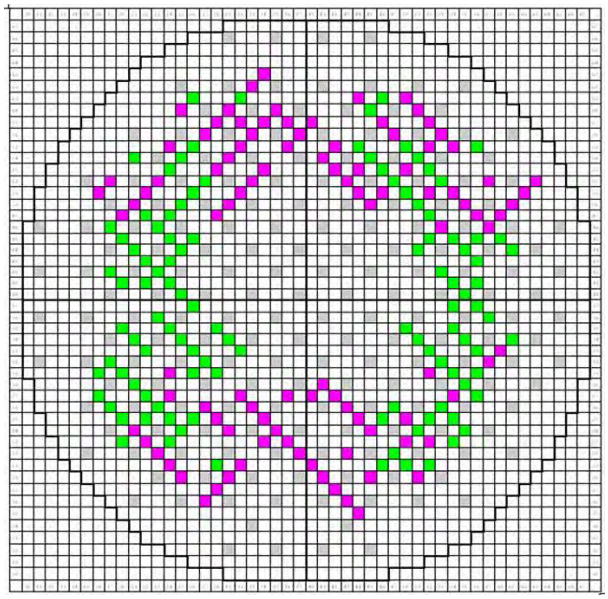

Рис. 7. Картограмма ремонта:
■ – горизонтальный рез блока (перпендикулярно прогибу по Y);
■ – вертикальный рез блока (перпендикулярно прогибу по X);
■ – ячейка СУЗ

Заключение

Разработана инженерная модель для анализа формоизменения графитовой кладки, основанная на вероятностном подходе к определению величины максимального прогиба каналов, вызванного растрескива-

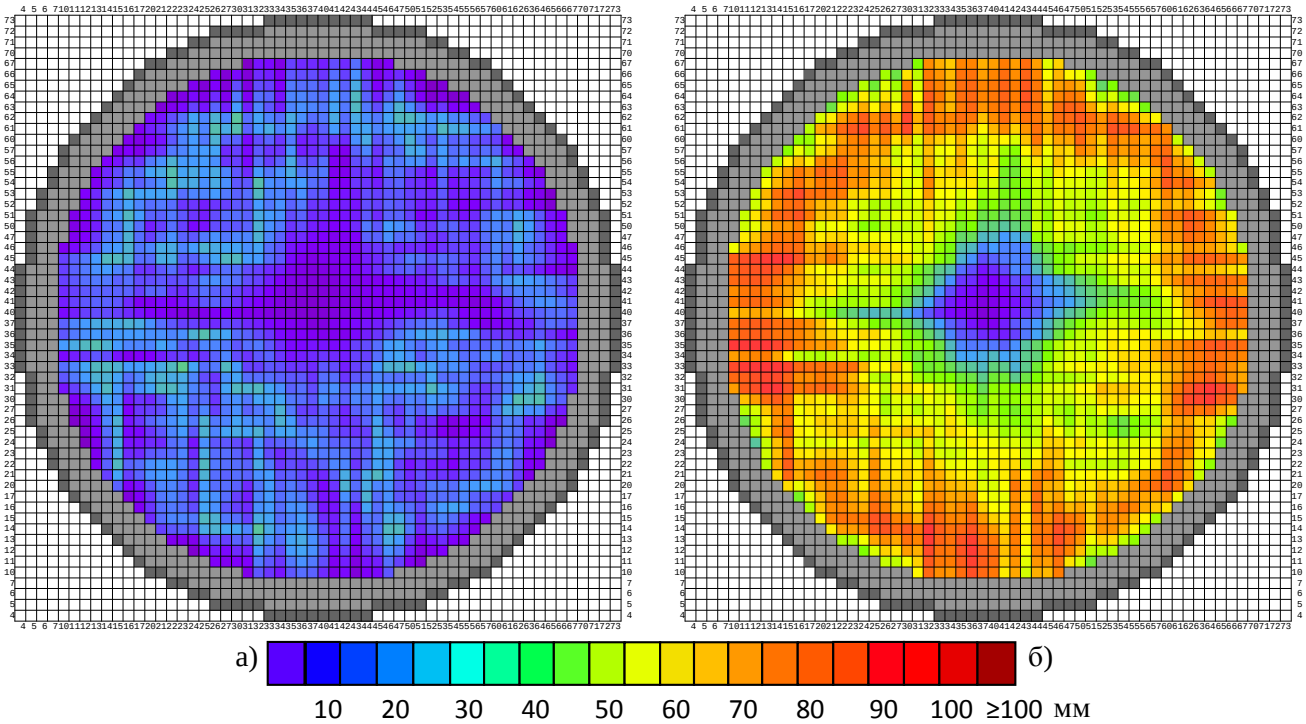

Рис. 8. Картограммы прогибов сразу (а) и через 700 эфф. сут (б) после ремонта

нием графитовых блоков. Математическое ожидание величин прогибов определяется с учётом случайного характера размеров и расположения трещин.

Анализ чувствительности результатов расчётов к неопределённости исходных данных показал, что основная трудность состоит в определении времени начала массового образования трещин, поскольку даже небольшая погрешность в коэффициенте перехода от эффективных суток к величинам флюенса или в средней температуре облучения графита приводит к сдвигу во времени порядка сотен эффективных суток. Поэтому для корректного прогноза деформации кладки требуется привязка модели к результатам измерений прогибов.

Корректировка поля прогибов по результатам измерений в отдельных каналах на основе принципа максимального правдоподобия позволяет существенно уменьшить расхождения между расчётом и измерениями, т.е. получить более реалистичную картину прогибов с учётом локализации наибольших значений прогибов, что даёт возможность оптимизировать схему ремонта графитовой кладки.

Автор благодарит Сергея Сергеевича Городкова за консультации при разработке метода корректировки расчётов по результатам измерений прогибов.

Список литературы

1. ***Абрамов В.Я., Абрамов М.И., Авдеев В.И. и др.*** Канальный ядерный энергетический реактор РБМК. Изд. 2 под общей ред. А.А. Петрова. М.: ОАО “НИКИЭТ”, 2013.

2. ***Штромбах Я.И., Чугунов О.К.*** Графит и ресурс РБМК-1000 // “Росэнергоатом” (РЭА) (Ежемесячный журнал атомной энергетики России), июнь 2012, № 6, с. 28–35.

3. ***Тутнов А.А., Киселёв А.С., Крутько Е.С., Бурлаков Е.В., Ткачёв В.В., Федосов А.М.*** Расчётный прогноз прогибов каналов на стадии растрескивания графита. Материалы 9 Межд. научно-технич. конф. “Безопасность, эффективность и экономика ядерной энергетики”, Москва, 21-23 мая 2014 г. Тезисы докладов, с. 38–39. М.: ОАО “Росэнергоатом”, 2014.

4. ***Gorodkov S.S.*** Numerical-Experimental Reconstruction of Spatial Power Distribution VVER Core Based on Maximum Likelihood Estimation and Evaluation of its Quality with the Help of Full-Scale VVER-MCU Model / Proc. of 23 Symposium of AER. Štrbske Pleso, Slovakia, 30 Sept.-4 Okt. 2013, v. I, p. 195–204.

Контактная информация –
Федосов Александр Михайлович, нач. лаб., тел.: (499)196-72-33, e-mail: amfedosov@mail.ru

Вопросы атомной науки и техники.
Сер. Физика ядерных реакторов, 2015, вып. 2,
с. 47–57.

УДК 621.039.5.021

Модуль регистрации расширенного набора функционалов при расчёте фрагментов и активных зон РБМК по прецизионному коду MCU

С.А. Бычков, Р.В. Плеханов, Д.Л. Зинаков,
АО “ВНИИАЭС”, 109507, Москва, Ферганская ул., 25
Поступила в редакцию 29.01.2015 г.

Описан регистрационный пользовательский модуль прецизионного кода MCU [1]. Модуль разработан для регистрации функционалов при проведении трёхмерных расчётов фрагментов и полномасштабных активных зон РБМК-1000 методом Монте-Карло. Приводятся результаты, характеризующие апробацию модуля для расчёта полиячеек и полномасштабных загрузок в составе многопроцессорной версии прецизионного кода MCU.
Ключевые слова: РБМК-1000, расчётные коды, библиотека констант, прецизионный расчёт, прецизионный код MCU, регистрация, функционал, полиячейка, коэффициент размножения, метод Монте-Карло.

Registration Module of Expanded Set of Functionals in the Calculation of the Fragments and Full-Scale RBMK Cores by MCU Precision Code. ***S.A. Bychkov, R.V. Plekhanov, D.L. Zinakov,*** *JSC “VNIIAES”, 25, Ferganskaya St., Moscow, 109507.*

The description of the user registration module of MCU code [1] is stated. The module is designed for the registration of functionals in the 3D calculations of fragments and full-scale RBMK-1000 cores by Monte-Carlo method. The results which characterized the approbation of module for calculating of multicells and full-scale reactor cores by multiprocessor version of code MCU are stated.
Key Words: RBMK-1000, Computer Codes, Library of Constants, Precise Calculation, Code MCU, Registration, Functional, Multicell, Multiplication Factor, Monte-Carlo Method.

Введение

Повышение безопасности ядерных реакторов требует внедрения новых, более совершенных методов расчёта нейтронно-физических характеристик. Экспериментальная информация, получаемая с энергоблоков, не позволяет в полной мере ответить на вопрос о точности проводимых расчётов для определения ряда важных функционалов (интегральных потоков в элементарных ячейках, скоростей реакций поглощения, деления, генерации нейтронов, эффектов обезвоживания различных типов каналов и т.п.) Более того, существует целый ряд функционалов, которые невозможно измерить (например, средние по ячейке малогрупповые потоки и макросечения).

В этой связи большое значение приобретают прецизионные тестовые расчёты, выполненные методом прямого моделирования пространственного и энергетического переноса нейтронов. В рамках таких методов возможен прямой расчёт средних по элементарной ячейке функционалов, опирающийся на современные знания о детальной энергетической зависимости сечений различных нуклидов. Таким образом, совершенствование методик прецизионных расчётов является объективным и необходимым условием повышения безопасности ядерных реакторов.

В настоящее время для расчёта нейтронно-физических характеристик РБМК-1000 активно используется прецизионный код MCU, в котором решение уравнения переноса нейтронов производится методом Монте-Карло на основе оценённых ядерных данных.

Функционалы, регистрируемые в стандартной версии прецизионного кода MCU, точно не описывают баланс нейтронов в каждой элементарной ячейке относительно процессов рождения, утечки и поглощения нейтронов. Более того, потребности эксплуатационных расчётов требуют взаимосогласованной (в смысле учёта баланса нейтронов) регистрации более широкой группы функционалов. В этой связи возникает ост-

рая необходимость разработки специализированного модуля регистрации функционалов для трёхмерных расчётов РБМК-1000 методом Монте-Карло.

При расчёте систем типа РБМК активная зона для регистрации различных функционалов, как правило, разбивается на области (ноды). В инженерных расчётах количество нод определяется исходя из того, что все ячейки реактора (2 488 в плане) разбиваются на 30 зон по высоте. Если исходить из того, что регистрируется около десяти функционалов в двух энергетических группах, то общее число регистрационных объектов достигает 700 000. В стандартной модели MCU реализация такого количества регистрационных объектов – это крайне трудоёмкая задача, которая в конечном счёте требует разработки соответствующего программного обеспечения.

Поэтому в рамках описываемой работы разработано вспомогательное программное обеспечение (программный модуль USER), расширяющее возможности MCU при расчёте полномасштабных зон РБМК и их фрагментов методом Монте-Карло. При разработке программного модуля ставилась задача обеспечения регистрации не только интегральных функционалов в каждой ноде реактора, но и регистрации токов и потоков на границах нод, а также скоростей реакций на отдельных изотопах для выбранного набора нод.

1. Уравнения баланса нейтронов, используемые при регистрации функционалов

Методика регистрации, реализованная в разработанном модуле, обеспечивает регистрацию моделируемых событий детерминированными функциями дискретных величин – фактами событий. Это даёт возможность проверки “целочисленного” баланса, нарушаемого лишь аварийными обрывами траекторий нейтронов.

В упрощенном виде процесс моделирования можно представить следующим образом. В программном банке частиц записаны координаты, регистрационный вес и некоторые другие параметры нейтронов деления n-го поколения. Под регистрационным весом (далее просто весом) нейтрона понимается величина, в общем случае отличная от единицы, которая добавляется к сумме функционала при каждом факте события. В результате процедуры нормализации число частиц в банке приводится к заданному значению $N_{\text{пак}}$ (число частиц в пакете) с весом, равным единице. В процессе моделирования переноса нейтронов возможно изменение веса частицы в (n, $2n$) или (n, $3n$) реакциях.

Запишем уравнения баланса частиц, характеризующихся принадлежностью к некоторой элементарной ячейке РБМК, некоторому весу и некоторой энергетической группе в виде

$$\sum_{Gi}(J_{ij}^{\text{out}} - J_{ij}^{\text{in}}) + R_a + R_{\text{rem}} + (R_{w\to w'} - R_{\text{rem}(w\to w')}) = Q + R_{\text{com}} + (R_{w'\to w} - R_{\text{com}(w'\to w)}), \qquad (1)$$

где Gi – множество индексов таких элементарных ячеек “j”, которые имеют общую границу с элементарной ячейкой “i”;

J_{ij}^{out} – количество нейтронов, вытекающих из ячейки “i” через общую границу ячеек “i” и “j”;

J_{ij}^{in} – количество нейтронов, втекающих из ячеек “j” в ячейку “i” через общую границу ячеек “i” и “j”;

R_a – количество поглощённых частиц;

R_{rem} – количество частиц, ушедших в другую энергетическую группу;

R_{com} – количество частиц, пришедших из других энергетических групп;

$R_{w\to w'}$ – количество частиц, ушедших за счёт изменения веса на любой другой вес;

$R_{\text{rem}(w\to w')}$ – количество частиц, ушедших за счёт изменения веса на любой другой, сопровождающегося уводом из энергетической группы;

$R_{w'\to w}$ – количество частиц, пришедших за счёт изменения веса частицы с любого другого на данный;

$R_{\mathrm{com}(w'\to w)}$ – количество частиц, пришедших за счёт изменения веса на w из других энергетических групп в рассматриваемую;
Q – количество частиц, выбранных из банка.

Если регистрировать не количество частиц, участвующих в различных процессах, а суммарный вес, то уравнение баланса суммарного веса частиц в ячейке для каждой энергетической группы можно получить, умножая каждое из уравнений (1) на вес частицы и суммируя:

$$\sum_{Gw} w\left(\sum_{Gi}((J_{ij}^{\mathrm{out}})_w-(J_{ij}^{\mathrm{in}})_w)+R_{aw}+R_{\mathrm{rem}w}+(R_{w\to w'}-R_{\mathrm{rem}(w\to w')})\right)=\sum_{Gw} w\left(Q_w+R_{\mathrm{com}w}+(R_{w'\to w}-R_{\mathrm{com}(w'\to w)})\right),$$

где суммирование ведётся по множеству всех весов частиц Gw. Остальные обозначения такие же, как в (1).

Уравнения баланса суммарного веса частиц в ячейке РБМК с учётом (n, $2n$) реакции можно записать в виде

$$\left.\begin{aligned}&\sum_{Gi}((J_{ij}^{\mathrm{out}})^1-(J_{ij}^{\mathrm{in}})^1)+R_a^1+R_{12}-R_{n2n}^1=Q^1;\\&\sum_{Gi}((J_{ij}^{\mathrm{out}})^2-(J_{ij}^{\mathrm{in}})^2)+R_a^2=R_{12},\end{aligned}\right\}\quad(2)$$

где верхний числовой индекс указывает на номер энергетической группы; R_{12} – суммарный вес частиц, переведенных из первой энергетической группы во вторую; R_{n2n} – суммарный вес частиц, вызвавших реакцию (n, $2n$); J_{ij}^{out} – суммарный вес нейтронов, вытекающих из ячейки “i” через границу соприкосновения ячеек “i” и “j”; J_{ij}^{in} – суммарный вес нейтронов, втекающих из ячеек “j” в ячейку “i” через границу соприкосновения ячеек “i” и “j”; R_a – суммарный вес поглощённых частиц; R_{rem} – суммарный вес нейтронов, ушедших в другую энергетическую группу; остальные обозначения такие же, как в (1), только считается не количество частиц, а их вес.

Если в рассматриваемой системе регистрируются потери траекторий нейтронов, то уравнения баланса суммарного веса частиц запишутся в виде

$$\left.\begin{aligned}&\sum_{Gi}((J_{ij}^{\mathrm{out}})^1-(J_{ij}^{\mathrm{in}})^1)+R_a^1+R_{ap}^1+R_{12}-R_{n2n}^1=Q;\\&\sum_{Gi}((J_{ij}^{\mathrm{out}})^2-(J_{ij}^{\mathrm{in}})^2)+R_a^2+R_{ap}^2=R_{12},\end{aligned}\right\}$$

где R_{ap} – суммарный вес нейтронов потерянных траекторий, а остальные обозначения такие же, как в (2).

2. Описание разработанного программного модуля

Как уже отмечалось, разработанный программный модуль опирается на специально предусмотренные внутренние возможности кода MCU и значительно расширяет возможности регистрации функционалов при прецизионных расчётах. Модуль обеспечивает:

– регистрацию широкой группы функционалов в каждой ноде реактора;

– возможность свёртки полученной информации для более крупных областей вплоть до объединения всех нод в единый реактор;

– первичную подготовку необходимой выходной информации для анализа нейтронно-физических процессов, протекающих в активной зоне РБМК-1000.

Программный модуль USER написан на специализированном языке GURTRAN [2], предназначенном для разработки кода MCU. Вызов процедур модуля производится при том или ином факте события нейтрона из основного модуля регистрации кода MCU.

При использовании в расчётах разработанного модуля моделируемая с помощью кода MCU система должна представлять собой фрагмент или полномасштабную зону РБМК-1000 и удовлетворять следующим требованиям (в терминологии кода MCU):

– контейнер системы есть прямоугольный параллелепипед с рёбрами, ориентированными по осям координат;

– на каждой грани контейнера стоит одно из условий: трансляции, абсолютно чёрной среды или полного отражения.

Разбиение моделируемой области внутри контейнера на $Nx \cdot Ny \cdot Nz$ расчётных нод вида прямоугольного параллелепипеда задаётся плоскостями. Числа Nx, Ny, Nz определяют количество разбиений по осям координат. Каждой ноде присваивается свой тип, определяемый целым номером.

Для регистрации скоростей реакций на изотопах задаются номера реакций в соответствии с принятыми в коде MCU и названия изотопов. При этом регистрация будет произведена на изотопах каждой из нод.

Для системы в целом и каждой энергетической группы регистрируется скорость утечки нейтронов за грань контейнера (по событиям выхода за грань, $с^{-1}$).

Для каждого типа ноды и каждой энергетической группы каждой энергетической сетки оцениваются следующие функционалы (сумма по всем нодам, имеющим одинаковый номер типа):

– интегральный по объёму поток нейтронов (оценка по пробегам, $см \cdot с^{-1}$);

– скорость поглощения нейтронов (оценка по столкновениям, $с^{-1}$);

– скорость поглощения нейтронов (оценка по поглощениям, $с^{-1}$);

– скорость генерации нейтронов деления (оценка по столкновениям, $с^{-1}$);

– скорость выборки нейтронов из банка, т.е. нейтронов деления и нейтронов источника (оценка по событиям выборки, $с^{-1}$);

– скорость реакции (n, kn), умноженная на (k – 1) (оценка по событиям реакции (n, kn), $с^{-1}$);

– скорость потерь траекторий нейтронов – оценка по событиям потерь траекторий, $с^{-1}$;

– матрица скоростей переходов между группами при рассеянии нейтронов (оценка по рассеяниям, $с^{-1}$);

– шесть поверхностных потоков нейтронов (для каждой грани нод, входящих в тип, $см \cdot с^{-1}$);

– шесть поверхностных токов нейтронов (для каждой грани нод, входящих в тип, $с^{-1}$).

Поверхностные потоки отличаются от поверхностных токов множителем $(\mathbf{\Omega}, \mathbf{n})^{-1}$, где $\mathbf{\Omega}$ – единичный вектор направления полёта вылетающей из ячейки частицы, а $\mathbf{n}$ – единичный вектор внешней нормали к поверхности, через которую частица вылетает.

При регистрации поверхностных токов нейтронов перетечки между нодами одного типа не учитываются.

Для каждого типа нод, каждого заданного изотопа и каждого типа реакции регистрируются скорости реакций на изотопах, заданных в соответствии с принятыми в коде MCU. Скорости регистрируются по событиям соответствующих реакций. Исключение составляют реакции с номерами “918” и “3” (генерация и поглощение, соответственно). Скорость реакции поглощения нейтронов (реакция с номером “3”) определяется как сумма скоростей захвата и деления (реакций “101” и “18”). Скорость генерации нейтронов (реакция “918”) регистрируется по событию деления “18” как произведение скорости реакции деления на выход нейтронов.

Для каждого регистрируемого функционала выдаётся оценка его математического ожидания, а также оценка относительного среднеквадратического отклонения.

3. Апробация разработанного программного модуля USER на полиячеечной задаче

Одним из примеров использования разработанного программного модуля послужила задача диагностики заполнения водой гильзы кластерного регулирующего органа (КРО) [3]. Заполнение гильзы КРО водой полностью или частично приводит к локальному изменению плотности нейтронного потока в окружении КРО, изменению мощностей технологических каналов, окружающих КРО, и показаний внутриреакторных датчиков.

Для оценки величины вносимого возмущения в распределение скоростей генерации нейтронов при изменении материального состава ячейки с КРО проведены

расчёты состояний двумерной полиячейки по коду MCU. Эти расчёты проводились на вычислительном кластере с общим числом процессоров, равным 16. Применение многопроцессорного кластера обеспечило высокую точность при расчёте с большой статистикой (320 млн. историй взаимодействия нейтронов с веществом).

Рассматривалась полиячейка с загрузкой, имитирующей типовую периодическую структуру РБМК, имеющая неоднородности в виде каналов системы управления и защиты (СУЗ). Размерность полиячейки в плане составляет 12×12 ячеек РБМК (рис. 1). В качестве топлива рассматривались уран-эрбиевые тепловыделяющие сборки (ТВС) с обогащением 2,8 % по ^{235}U и выгоранием 16,34 МВт·сут/кг. В каналы СУЗ установлены КРО с чередующимся положением поглощающих элементов (ПЭЛ) на верхних (ВК) и нижних (НК) концевых выключателях.

Рассматривались рабочие состояния полиячейки – температура топлива в твэлах составляла 1000 К, температура графита 750 К, плотность теплоносителя в каналах с топливом 0,5 г/см^3, плотность воды в каналах СУЗ 1 г/см^3. Число моделируемых историй взаимодействия нейтронов с веществом составляло 320 млн. На границах полиячейки – условия трансляционной симметрии.

Для каждой ячейки с топливным каналом вычислялись отклонения скоростей генерации нейтронов в процентах. Отклонения определялись по следующей формуле: $\varepsilon = (1 - E/E_{\text{возм}}) \times 100$ %, где E – скорость генерации нейтронов в состоянии полиячейки с гильзой, не заполненной водой; $E_{\text{возм}}$ – скорость генерации нейтронов в “возмущённом” состоянии полиячейки с гильзой, заполненной водой.

Канал с КРО, испытывающим возмущение материального состава, на рис. 1 выделен красным цветом. На этом рисунке показаны отклонения в скоростях генерации нейтронов в топливных каналах поляичейки при полном заполнении гильзы КРО с ПЭЛ на ВК.

Значения коэффициентов размножения в бесконечной среде для рассмотренной полиячейки:

0,9947 для исходного состояния с гильзой КРО, не заполненной водой;

0,9922 для состояния полиячейки с гильзой КРО, полностью заполненной водой.

КРО НК	2,474	1,907	1,637	КРО НК	1,321	0,937	1,189	КРО НК	1,240	1,890	1,909
2,057	2,063	1,989	1,731	1,519	1,219	1,042	0,909	0,929	1,338	1,687	2,054
2,061	1,909	КРО ВК	1,366	0,990	0,623	КРО ВК	0,605	0,729	1,056	КРО ВК	1,786
1,687	1,669	1,337	0,928	0,180	– 0,650	– 0,880	– 0,681	0,019	0,822	1,364	1,579
КРО НК	1,188	0,916	0,045	КРО НК	– 3,044	– 3,763	– 3,147	КРО НК	0,182	0,919	1,433
0,933	0,993	0,543	– 0,994	– 2,823	– 6,261	– 8,638	– 6,469	– 3,310	– 0,796	0,356	0,811
1,066	0,714	КРО ВК	– 0,908	– 3,649	– 8,880	КРО ВК	– 8,975	– 4,213	– 1,397	КРО ВК	0,786
1,123	0,928	0,414	– 0,722	– 3,330	– 6,509	– 8,991	– 6,586	– 3,431	– 1,031	0,187	0,658
КРО НК	1,056	1,052	– 0,072	КРО НК	– 3,188	– 3,884	– 3,263	КРО НК	– 0,060	0,567	0,941
1,644	1,332	1,515	0,940	0,020	– 0,905	– 1,101	– 1,155	– 0,529	0,342	1,161	1,481
1,861	1,860	КРО ВК	1,249	0,648	0,370	КРО ВК	0,216	0,369	1,139	КРО ВК	1,856
2,150	2,002	1,909	1,570	1,484	0,891	0,833	0,774	0,873	1,436	1,768	1,929

Рис. 1. Отклонения (%) в распределении скоростей генерации нейтронов при заполнении гильзы КРО с ПЭЛ на ВК. Различными цветами выделены кольцевые зоны технологических каналов вокруг ячейки с КРО, испытывающим возмущение

Эти расчёты, проведенные с помощью пользовательского регистрационного модуля на многопроцессорной системе, использованы при формировании шаблона отказа для методики диагностики заполнения КРО водой, применяемой на Курской АЭС.

4. Апробация разработанного модуля USER на полномасштабном расчёте РБМК-1000

Ещё одним этапом апробации разработанного программного модуля USER служил полномасштабный расчёт РБМК-1000 [4, 5]. Анализировалось состояние реактора, ранее рассчитанное по коду MCU на многопроцессорном кластере. Сопоставлялись расчётные результаты, полученные с применением модуля USER, с данными, полученными без его использования.

Расчёты проводились для активной зоны реактора одного из энергоблоков Смоленской АЭС. Состав загрузки активной зоны приведен в таблице. Средняя энерговыработка топлива в активной зоне составляет 1 669,9 МВт·сут/ТВС.

Т а б л и ц а. Состав загрузки активной зоны

Тип	Обозначение	Количество
1	ТВС с обогащением 2,8 % со стальными дистанционирующими решётками (ДР)	1 629
4	ТВС с обогащением 2,6 % с ДР из циркониевого сплава	15
16	Столб воды	3
18	Кластерный дополнительный поглотитель	14
24	Стержень быстрой аварийной защиты	33
25	Укороченный стержень-поглотитель	24
30	КРО	166

Проведено сравнение результатов, полученных при расчёте по коду MCU с применением “штатной” регистрации функционалов по длинам пробегов и с использованием разработанного программного модуля USER. Отклонения результатов расчётов определялись по формуле $\varepsilon = (1 - \Psi_{USER}/\Psi_{MCU}) \times 100$ %, где Ψ_{USER} – функционал, рассчитанный с применением модуля USER; Ψ_{MCU} – функционал, рассчитанный без использования модуля USER.

На рис. 2 показана цветовая диаграмма относительных отклонений интегральных по высоте одногрупповых потоков (в процентах) для короткой серии расчётов. Отклонения не превышают величины 0,035 %, что указывает на удовлетворительное соответствие результатов.

Для детального анализа пригодности программного модуля USER проведен расчёт с большим числом историй нейтронов (100 млн.) При этом при использовании “штатного” метода применялась регистрация функционалов по столкновениям. На рис. 3 приведена диаграмма относительных отклонений (в процентах) результатов этих расчётов. На этой диаграмме можно наблюдать максимумы отклонений до 8 % в каналах, образующих решётку стержней АЗ, и в каналах со стержнями СУЗ. Большая величина отклонений объясняется спецификой в методах регистрации. В указанных каналах предпочтительнее вести регистрацию по длинам пробегов нейтронов ввиду малой статистики столкновений.

Величина отклонений по топливным ячейкам в среднем составляет от 1 до 1,2 %, что также обусловлено различием в методах регистрации.

Для демонстрации возможностей программного модуля USER для рассматриваемого варианта проведена регистрация скоростей поглощений в топливных ячейках на изотопе ^{167}Er (реакция “3” в нотации ENDF/B). На рис. 4 приведена диаграмма одногрупповых интегральных по высоте скоростей поглощения на изотопе ^{167}Er в ячейках активной зоны. На рис. 5 показана гистограмма зависимости скорости поглощения на изотопе ^{167}Er от величины энерговыработки в топливных ячейках.

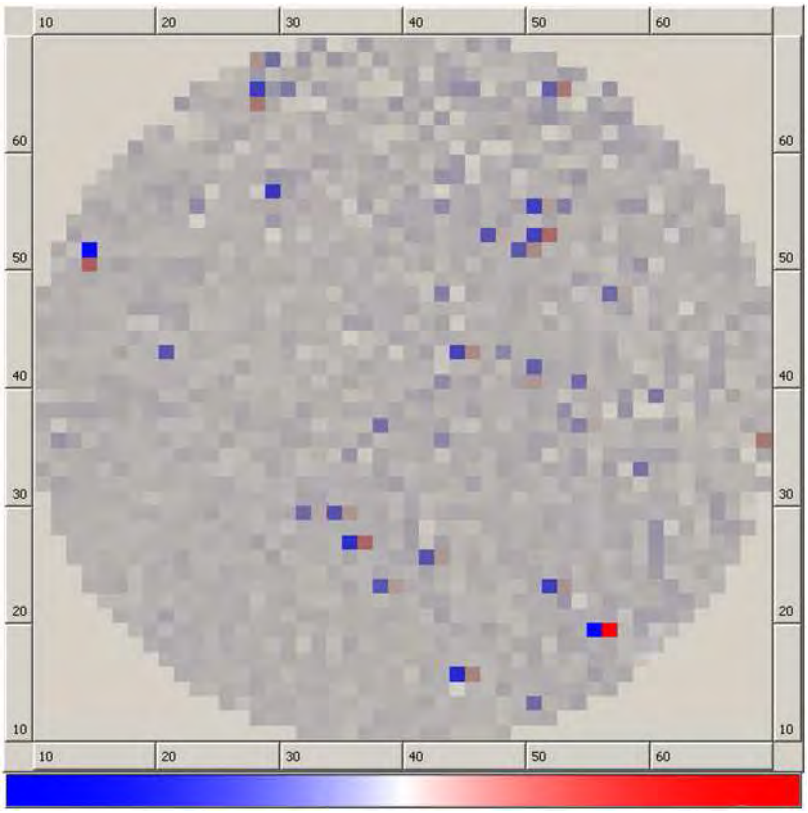

Рис. 2. Относительные отклонения (в процентах) интегральных по высоте потоков нейтронов в ячейках (для короткой серии расчётов). Цветовая градация соответствует величине отклонения. По периметру рисунка показаны шкалы координатных осей в принятой для РБМК восьмеричной системе координат

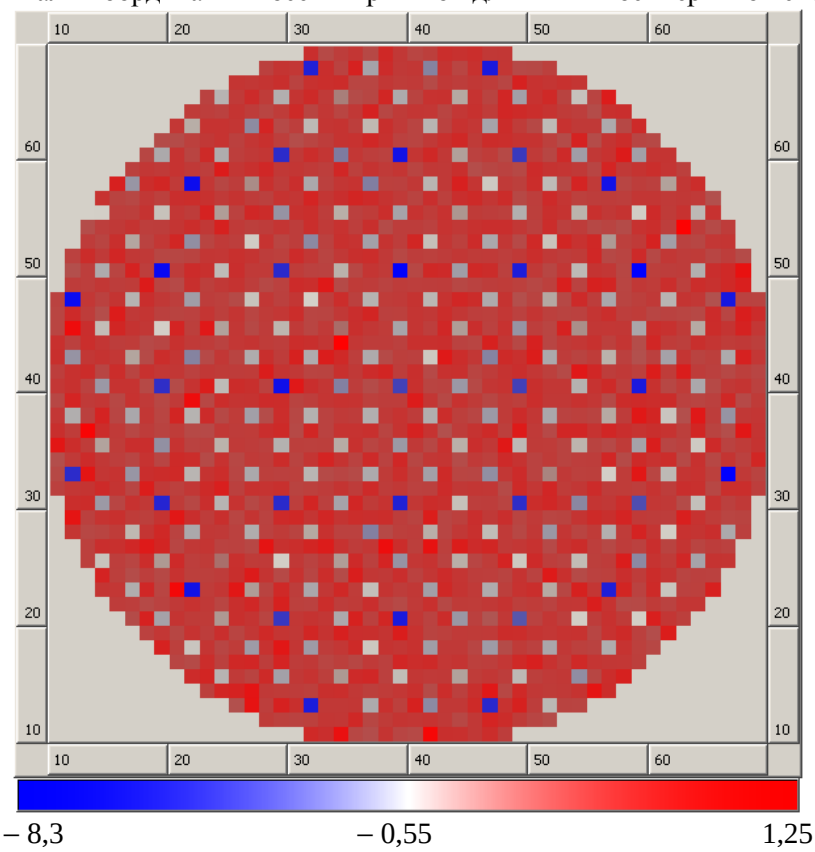

Рис. 3. Относительные отклонения (в процентах) интегральных по высоте потоков нейтронов в ячейках. Сравнение на большой статистике

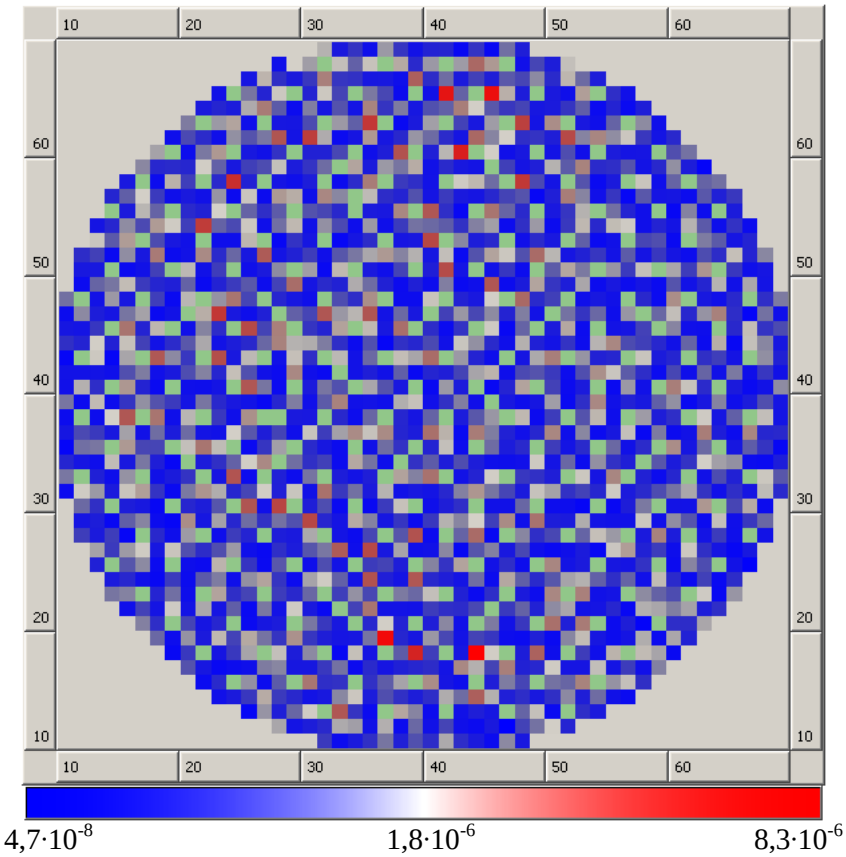

Рис. 4. Одногрупповые интегральные по высоте скорости поглощения (в c^{-1}) на изотопе ^{167}Er

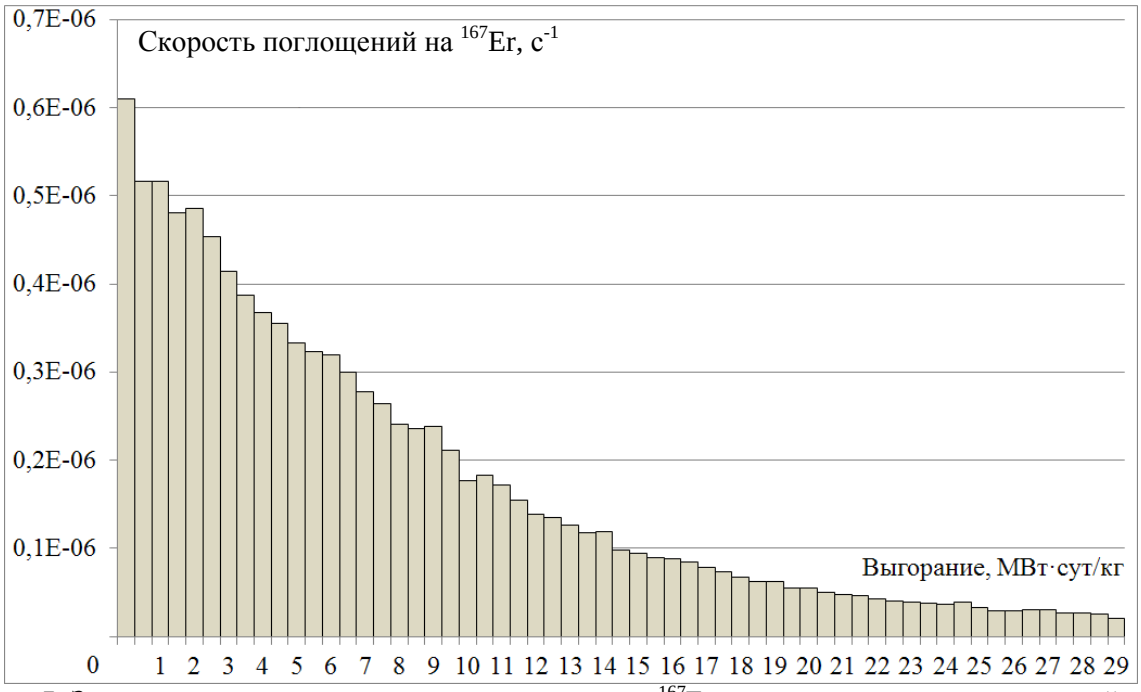

Рис. 5. Зависимость скорости поглощения на изотопе ^{167}Er от выгорания в топливных ячейках

Заключение

Описан программный модуль USER, существенно расширяющий внутренние возможности прецизионного кода MCU и позволяющий производить взаимосогласованную, в смысле учёта баланса нейтронов, регистрацию широкой группы функционалов.

Модуль адаптирован для проведения расчётов на многопроцессорных системах и позволяет регистрировать методом Монте-Карло функционалы, важные для поддержки эксплуатации АЭС.

Рассмотрены примеры использования разработанного программного модуля:

– задача диагностики заполнения гильзы КРО водой (расчёт возмущений скоростей генерации в ячейках с топливом);

– расчёт полномасштабной активной зоны РБМК-1000.

Сравнение результатов, полученных при расчёте по коду MCU “штатными” методами, с результатами, полученными при использовании разработанного программного модуля USER, показало их удовлетворительное согласие.

Список литературы

1. ***Алексеев Н.И., Большагин С.Н., Гомин Е.А., Городков С.С., Гуревич М.И., Калугин М.А., Кулаков А.С., Марин С.В., Новосельцев А.П., Олейник Д.С., Пряничников А.В., Сухино-Хоменко Е.А., Шкаровский Д.А., Юдкевич М.С.*** Статус MCU-5 // ВАНТ. Сер. Физика ядерных реакторов, 2011, вып. 4, с. 4–23.

2. ***Программа*** MCU-REA/1 с библиотекой констант DLC/MCUDAT-2.2. Под ред. Е.А. Гомина, Л.В. Майорова. Отчёт РНЦ КИ инв. № 36/38 -2004. М.: 2004.

3. ***Гуревич М.И., Тельковская О.В., Немиров А.С.*** Программа КДМК для автоматического формирования исходных данных на языке MCU-REA для расчётов полномасштабных активных зон РБМК-1000 с использованием системы подготовки данных о состоянии РУ РБМК-1000. Техническая справка ООО Издательская фирма “Содействие” инв. № О/0102/ 2002/2358/3. М.: 2002.

4. ***Канальный*** ядерный энергетический реактор РБМК. Под общей ред. Ю.М. Черкашова. М.: ФГУП НИКИЭТ, 2006.

5. ***Дружинин В.Е., Шмонин Ю.В., Лысов Д.А., Бычков С.А., Немиров А.С., Пряничников А.В., Плеханов Р.В., Зинаков Д.Л., Иванов И.Е.*** Повышение точности прецизионных расчётов эффектов реактивности за счёт разработки, тестирования и внедрения в состав процессора КДМК уточнённой библиотеки изменения изотопного состава в процессе выгорания топлива. Отчёт ВНИИАЭС инв. № От-Ц360-027/ 2013. М.: 2013.

Контактная информация –
Плеханов Руслан Владимирович, н. с., тел.: (495)376-15-08, e-mail: plehanovrv@vniiaes.ru

Вопросы атомной науки и техники.
Сер. Физика ядерных реакторов, 2015, вып. 2,
с. 58–66.

УДК 621.039.526

Интегральная система кодов Платформа БРЕСТ

А.В. Баловнев, А.П. Жирнов, А.Н. Иванюта, И.М. Рождественский, В.А. Юферева,
АО “НИКИЭТ”, 107140, Москва, Малая Красносельская ул., 2/8
Поступила в редакцию 31.10.2014 г.

Интегральная система кодов Платформа БРЕСТ предназначена для проведения полномасштабных прецизионных мультифизических расчётов реакторных установок (РУ) БРЕСТ-ОД-300 и БН-600. В Платформу БРЕСТ интегрированы проектные коды для нейтронно-физических и теплогидравлических расчётов активных зон. Описываются основные функции и возможности интегральной системы кодов.
Ключевые слова: РУ БРЕСТ-ОД-300, БН-600, платформа, FACT-BR, MCU-BR, TRIGEX, VEGA, MCNP, кросс-верификация, нейтронно-физический расчёт, картограмма, проектные коды.

The Integral System of Codes – Platform BREST. ***A.V. Balovnev, A.P. Zhirnov, A.N. Ivanyuta, I.M. Rozhdestvenskiy, V.A. Yufereva,*** *JSC “RDIPE”, 2/8, Malaya Krasnosel’skaya St., Moscow, 107140.*
The integral system of codes Platform BREST was developed for full-scale, precision, multiphysics calculations of BREST-OD-300 and BN-600 reactors. The codes for neutronic and thermohydraulic calculations of core are integrated into Platform BREST. The paper describes main functions and capabilities of the integral system of codes.
Key Words: BREST-OD-300 Reactor, BN-600 Reactor, Platform, FACT-BR, MCU-BR, TRIGEX, VEGA, MCNP, Cross-Verification, Neutronic Calculations, Cartogram, Project Codes.

Введение

Повышение требований к обоснованию ядерной безопасности и бурное развитие вычислительной техники приводят к повышению требований к расчётным моделям. При обоснования безопасности важную роль играет снижение консервативности решений, заложенных в конструкцию РУ. Безусловным требованием сегодняшнего времени становится использование прецизионных, мультифизичных и связанных кодов. Это в свою очередь приводит к увеличению сложности моделей в части как описания процессов и явлений, которые необходимо моделировать, так и усложнения формального описания исходных данных расчета.

С переходом на трёхмерные модели с детальным описанием геометрии, материального состава, теплофизических параметров модели объём задаваемых данных стал превышать несколько сотен тысяч строк, и автоматизация процессов построения адекватной модели в настоящее время требует применения специальных средств (препроцессоров). С другой стороны, получаемые многомерные результаты расчётов представляют достаточно сложный объект для ручной обработки и анализа. Для этого в настоящее время используются специализированные программные средства (постпроцессоры).

Необходимость объединения разных программных комплексов (ПК), выполняющих как нейтронно-физические, так и теплогидравлические расчёты, с различными пре- и постпроцессорами, а также с системами визуализации привела к развитию интегральных ПК – платформ. Как правило, создаваемые платформы предметно-ориентированы на определённый класс решаемых задач и тип РУ.

Для решения задач в рамках проекта “Прорыв” и создания нового типа РУ с быстрым спектром нейтронов и замыканием ядерного топливного цикла (ЯТЦ) разработана интегральная система кодов (ИСК) – Платформа БРЕСТ.

Основной задачей данной интегральной системы кодов являются обоснование ядерной безопасности РУ БРЕСТ-ОД-300 при условиях работы в замкнутом ЯТЦ, анализ параметров топливного цикла, а также верификация расчётных моделей и кодов с применением экспериментальных данных и

кросс-верификационных расчётов по прецизионным кодам.

1. Общее описание ИСК

ИСК Платформа БРЕСТ представляет собой набор текстовых и исполняемых файлов, а также набор специализированных библиотек и баз данных. Основной исполняемый модуль оболочки скомпилирован в среде Borland C++ Builder [1] как Win32 приложение [2, 3] и предназначен для выполнения в 32- и 64-разрядных операционных системах семейства Windows.

Программные коды, интегрированные в ИСК, являются независимыми программными средствами и разрабатываются в рамках частных технических заданий. Для интеграции в платформу, как правило, не требуется проводить специализированную доработку программных кодов, так как их интеграция осуществляется с помощью пре- и постпроцессоров. Пре- и постпроцессоры выполняют связующую роль при подготовке расчётных заданий и обработке результатов расчёта, соответственно.

Ядром платформы служит рабочая модель РУ, представляющая собой геометрическое описание модели активной зоны реактора и набор параметров, присущих данной модели. Параметры могут быть как интегральными, так и распределёнными. Набор параметров для каждой модели индивидуален и задаётся пользователем на этапе разработки модели. В состав ИСК входит набор рабочих моделей РУ БРЕСТ и БН-600, применяемых для верификационных расчётов в обоснование проекта БРЕСТ-ОД-300.

Геометрическая модель РУ задаётся описанием квадратных или гексагональных ячеек в трёхмерном пространстве. Каждой ячейке присваиваются тип и координата. В общем случае допускается применение несвязанных ячеек. Для размещения ячеек в плоскости используется координатная сетка.

Тип ячейки определяет конструктивные особенности ячейки. Для рабочей модели РУ БРЕСТ-ОД-300 соответствующие типы применяются для описания ячеек центральной и периферийной зон, а также ячеек, предназначенных для расположения органов системы управления и защиты (СУЗ). Для рабочей модели реактора БН-600 типы используются для выделения зон большого, малого и среднего обогащения. Применение разных типов позволяет выполнять фильтрацию и обработку информации для различных изделий активной зоны.

Так как в ИСК Платформа БРЕСТ используются параметры рабочей модели, задаваемые пользователем, а интегрирование ПК не требует существенной доработки системы, с помощью платформы возможно построение достаточно сложных вычислительных комплексов, выполняющих как связанные расчёты, например, нейтронно-физические, теплофизические и термомеханические, так и кросс-верификационные расчёты, например, с использованием диффузионных кодов, прецизионных кодов и кодов, реализующих метод конечных элементов.

Платформа БРЕСТ содержит широкий набор средств визуализации расчётной модели и результатов расчётов, позволяет выполнять сравнение различных расчётов и модификацию входных данных, а также производить экспресс-анализ результатов с представлением в табличном и графическом форматах.

2. Описание постпроцессоров

В ИСК Платформа БРЕСТ используются внешние (*.exe, *.dll) и внутренние модули постпроцессоров. Каждый постпроцессор имеет привязку к конкретной расчётной модели и конкретному ПК. Модель, применяемая в ПК для проведения расчётов, называется расчётной моделью, модель отображения данных в ИСК Платформа БРЕСТ – рабочей моделью.

Таким образом, для работы с постпроцессором пользователю сначала необходимо выбрать рабочую модель, в рамках которой он собирается проводить анализ вариантов, а затем ПК, с использованием которого рассчитано данное состояние. ИСК

Платформа БРЕСТ сохраняет данные о выборе пользователем рабочей модели и ПК в последней сессии в *.ini файле.

В настоящее время выполнены работы по интеграции в платформу постпроцессоров для ПК MCU-BR [4], FACT-BR [5], VEGA [6], TRIGEX [7, 8], MCNP [9].

3. Описание препроцессоров

Препроцессоры, как и постпроцессоры, интегрированы в ИСК Платформа БРЕСТ в качестве внутренних и внешних модулей. Каждый препроцессор имеет привязку к конкретной расчётной модели и конкретному ПК. Интерфейс препроцессоров для разных ПК различен, поскольку каждый ПК требует свой набор данных для расчёта.

Разработка препроцессора включает в себя разработку расчётной модели, шаблонов для данной расчётной модели и в некоторых случаях создание базы данных материальных составов. Все необходимые для работы препроцессора данные (шаблоны, служебные файлы, база данных) хранятся в Платформе в соответствующей папке. Таким образом, при изменении шаблона чаще всего нет необходимости вносить изменения в препроцессор, достаточно заменить файлы шаблонов.

На данном этапе в ИСК Платформа БРЕСТ интегрированы препроцессоры для расчётов РУ БРЕСТ-ОД-300 и БН-600 по ПК MCU-BR и препроцессор для расчётов РУ БРЕСТ-ОД-300 по ПК FACT-BR.

Последние версии препроцессоров для ПК MCU-BR позволяют формировать входные файлы для гомогенных и гетерогенных расчётов с учётом трёхмерного распределения температуры, выгорания и перегрузок. Реализованы следующие возможности:

– формирование исходных данных:

1) для гомогенных расчётов на основе данных ПК TRIGEX;

2) для гетерогенных расчётов на основе данных ПК TRIGEX;

3) для гетерогенных расчётов на основе данных о загрузке на начало микрокомпании в формате MS Excel (данные с АЭС);

4) для гетерогенных расчётов на основе сформированной библиотеки материальных составов;

– формирование библиотеки материальных составов:

1) на основе ячеечных расчётов выгорания по ПК MCU-BR;

2) на основе полномасштабных расчётов выгорания по ПК MCU-BR;

– расчёт температур топлива и натрия для формирования исходных данных на основе предыдущих расчетов;

– осуществление перегрузок и перестановок топлива по заданной пользователем схеме.

В последней версии препроцессора для ПК FACT-BR реализованы следующие возможности:

– установка временно́го разбиения кампании реактора и задание перегрузок;

– возможность запланировать и рассчитать кампанию;

– возможность продолжить начатый ранее расчёт с произвольной перегрузки;

– задание различных сценариев перегрузки ТВС в процессе кампании;

– управление плотностью и обогащением как исходного топлива, так и загружаемого при перегрузках;

– точное задание температур топлива и оболочек или запуск расчёта температур;

– управление системой рабочих органов (РО) СУЗ;

– возможность автоматического расчёта эффективности органов СУЗ, мощностного и температурного эффектов реактивности для любого временно́го промежутка в ходе кампании;

– автоматическая обработка выходных файлов и вывод результатов в виде таблиц, графиков и картограмм.

4. Интегрированные рабочие модели

Каждая рабочая модель, интегрированная в ИСК Платформа БРЕСТ, включает в себя системные файлы с описаниями геометрии модели (model.ini) и со списком функционалов (model.deal), с которыми позволяет работать данная модель, а также

папки, которые содержат препроцессоры, постпроцессоры и пользовательские фильтры для данной модели.

Файл model.deal содержит список функционалов, которыми можно оперировать в рамках данной модели. Список функционалов структурирован таким образом, что первым идёт блок одномерных функционалов, затем блок двумерных функционалов, потом трёхмерные функционалы, затем функционалы с учётом энергетической группы нейтронов (четырёхмерные функционалы). Также в списке функционалов могут присутствовать потвэльное энерговыделение и изотопный состав, которые нельзя отнести ни к одной из перечисленных выше групп.

На сегодняшний день интегрированные рабочие модели предоставляют пользователю возможность анализировать и изменять следующие параметры:

– загрузку активной зоны;
– положение стержней;
– мощность;
– температуру топлива;
– температуру оболочки;
– температуру теплоносителя;
– поток нейтронов;
– групповые макроконстанты;
– скорости реакций взаимодействия;
– изотопный состав;
– потвэльное распределение энерговыделения и температур.

Каждый функционал определяется названием, форматом отображения, единицей измерения.

Файл model.ini содержит описание геометрии данной модели. Название файла не может быть изменено. Структура файла универсальна для всех интегрированных моделей. Файл model.ini содержит следующие данные:

– тип геометрии картограммы (гексагональная, прямоугольная);
– число ячеек;
– количество слоёв по высоте;
– количество энергетических групп нейтронов;
– максимальное количество ячеек в одном ряду в картограмме;
– количество рядов в картограмме;
– координаты ячеек по оси X в картограмме;
– координаты ячеек по оси Y в картограмме;
– описание основной палитры цветов для отображения загрузки в данной модели;
– расположение РО СУЗ;
– количество твэлов в рабочих ТВС;
– максимальное количество твэлов в одном ряду;
– координаты твэлов по оси Y в рабочей ТВС;
– координаты твэлов по оси X в рабочей ТВС;
– координаты твэлов по оси Y в ТВС с РО СУЗ;
– координаты твэлов по оси X в ТВС с РО СУЗ.

5. Функции анализа и формирования состояний

5.1. *Гетерогенизация и гомогенизация*

В диффузионном программном коде FACT-BR все изотопы равномерно распределены по объёму ячейки. Каждая ячейка активной зоны включает в себя теплоноситель, конструкционные материалы и топливо. В прецизионном программном коде MCU-BR концентрации изотопов для теплоносителя, топлива и конструкционных материалов задаются отдельно.

Концентрации изотопов в оболочках твэлов одинаковы для всех ячеек. Концентрации изотопов в топливе задаются индивидуально для каждой ячейки, и при расчёте выгорания именно они претерпевают изменения. Во многих расчётах концентрации изотопов теплоносителя задаются индивидуально для каждой ячейки в зависимости от температуры и плотности свинца или натрия.

Функции гетерогенизации и гомогенизации оперируют с концентрациями изотопов и изотопным составом ячеек в файлах состояний в рамках используемой модели.

Функции гетерогенизации и гомогенизации позволяют реализовать выполнение следующих задач:

– кросс-верификация диффузионных и прецизионных кодов;

– формирование исходных данных на основе состояний, рассчитанных по другим кодам;

– исследование эффекта гомогенизации и определение коэффициента гомогенизации для диффузионных кодов.

Процедура гетерогенизации организована следующим образом. Для каждой ячейки анализируется её изотопный состав на соответствие перечисленных там изотопов изотопам из списка изотопного состава топлива (системный файл iso). Все изотопы, которые отсутствуют в данном списке, удаляются из изотопного состава ячейки. Концентрации остальных изотопов (топливные изотопы, продукты деления, младшие актиноиды) ячейки пересчитываются по следующей формуле: $N_{\text{гет}} = N_{\text{гом}} \frac{V_{\text{яч}}}{V_{\text{топ}}}$, где $N_{\text{гет}}$ – концентрация изотопа в топливе; $N_{\text{гом}}$ – концентрация изотопа в гомогенизированной ячейке; $V_{\text{яч}}$ – объём элементарной ячейки в диффузионном коде; $V_{\text{топ}}$ – объём топливного слоя, соответствующего по высоте топливной ячейке.

Процедура гомогенизации для каждой ячейки организована следующим образом. Концентрации изотопов пересчитываются по аналогичной формуле. После этого к существующим в описании изотопам добавляются изотопы конструкционных материалов в концентрациях, установленных для данной модели. Ядерные концентрации натрия в зависимости от температуры теплоносителя в данной ячейке рассчитываются по формуле

$$\gamma_{\text{Na}} = \frac{\left(949 - 0{,}223\, T_{\text{Na}} - 1{,}75 \cdot 10^{-5} \cdot T_{\text{Na}}^{2}\right) \text{N}_{\text{A}}}{M_{\text{Na}}},$$

где T_{Na} – температура натрия, °C; M_{Na}– молярная масса натрия; N_{A} – число Авогадро.

5.2. *Расчёт усреднённых профилей*

Определение усреднённых профилей основных анализируемых функционалов активной зоны позволяет решить следующие задачи:

– оптимизация загрузки топлива и расходов теплоносителя для снижения коэффициента неравномерности энерговыделения и максимальных температур топлива и оболочки твэлов в активной зоне;

– оптимизация исходных данных с усреднением аксиальных профилей распределения выгорания и теплофизических параметров активной зоны;

– расчёт глубины погружения РО СУЗ для выравнивания поля энерговыделения в активной зоне;

– оптимизация частичных перегрузок.

Для трёхмерных функционалов анализируемого в ИСК Платформа БРЕСТ состояния данная функция позволяет рассчитать усреднённые аксиальные и послойные усреднённые радиальные поля распределения интересующих величин.

Для двумерных функционалов данная функция позволяет рассчитать только усреднённые радиальные поля распределения интересующих величин.

5.3. *Расчёт среднеквадратических отклонений*

Вычисление среднеквадратических отклонений позволяет получить количественную информацию о различии в результатах расчётов одного состояния по разным кодам или двух состояний при различных исходных данных. Таким образом, можно проводить кросс-верификацию программных кодов или определять чувствительность расчёта какого-либо распределённого параметра (например, плотности потока нейтронов или энерговыделения) к исходным данным (например, к температуре теплоносителя).

Вычисление среднеквадратических отклонений производится автоматически при открытии двух файлов состояний для анализа в ИСК Платформа БРЕСТ. Значения среднеквадратических отклонений рассчитываются послойно и для всего набора значений.

5.4. *Определение максимумов, минимумов, средних значений*

Максимальные, минимальные и средние значения трёхмерных функционалов по высоте для каждого элемента загрузки рассчитываются автоматически при открытии состояния и отображаются на соответствующих картограммах.

Максимальные, минимальные и средние значения в каждом слое (или для всей модели при исследовании двумерных параметров) рассчитываются автоматически при выборе слоя и отображаются на информационной панели. Кроме того, при выборе пользователем соответствующих настроек визуализации максимальные значения функционала в данном слое (или во всей модели при исследовании двумерных параметров) могут выделяться на картограмме красным шрифтом.

При анализе потвэльных распределений в ТВС максимальные значения энерговыделения всегда выделяются красным шрифтом на картограмме ТВС.

Определение максимальных и средних значений позволяет рассчитывать коэффициенты неравномерности распределений функционалов. Радиальные и аксиальные коэффициенты неравномерности отображаются в правом нижнем углу основного окна ИСК Платформа БРЕСТ.

6. Средства визуализации

6.1. *Цветовая палитра*

Основная цветовая палитра по умолчанию используется для отображения картограммы загрузки в ИСК Платформа БРЕСТ и задаётся в системном файле с описанием геометрии модели.

При цветовой визуализации распределения функционалов на картограмме по умолчанию применяется градиент с переходом от красного к белому, при этом наиболее насыщенный красный используется для отображения максимальных значений, а белый – для отображения минимальных значений (рис. 1).

При цветовой визуализации сравнения двух состояний (вкладка “*A* – *B*” или вкладка “(*A* – *B*)/*B*”) применяется градиент красный-белый-синий (рис. 2). При этом наиболее насыщенным красным отображаются ячейки с максимальным отклонением, при котором значение в данной ячейке в состоянии *B* больше значения в данной ячейке в состоянии *A*. Наиболее насыщенным синим отображаются ячейки с максимальным отклонением, при котором значение в данной ячейке в состоянии *A* больше значения в данной ячейке в состоянии *B*. Белым цветом отображаются ячейки, в которых отклонение для двух состояний равно нулю.

Кроме основной палитры и градиентов, используемых по умолчанию, пользователь может задать собственную палитру. Каждому типу топлива пользователь может присвоить свой цвет, применяя цветовую модель RGB (Red Green Blue). Также пользователь может выбрать другие цвета для отображения градиентов.

6.2. *Пользовательские фильтры*

Для удобства работы пользователя с картограммами ИСК Платформа БРЕСТ разработана система пользовательских фильтров, отображающая только те ячейки модели, которые нужны пользователю в рамках решения конкретной задачи. Например, в симметричных активных зонах (РУ БРЕСТ-ОД-300) иногда удобнее оперировать с 1/6 или с 1/12 картограммы активной зоны.

В дальнейшем пользователь сможет в любой момент выбрать уже сохранённый для данной модели пользовательский фильтр для отображения картограммы в нужном формате.

Кроме пользовательских фильтров разработана система фильтров загрузки. Выбирая в списке в правой части основного окна ИСК Платформа БРЕСТ те или иные типы загрузки, можно убрать их из отображения на картограмме. Например, это позволяет отображать или скрывать на картограмме отражатель или биологическую защиту.

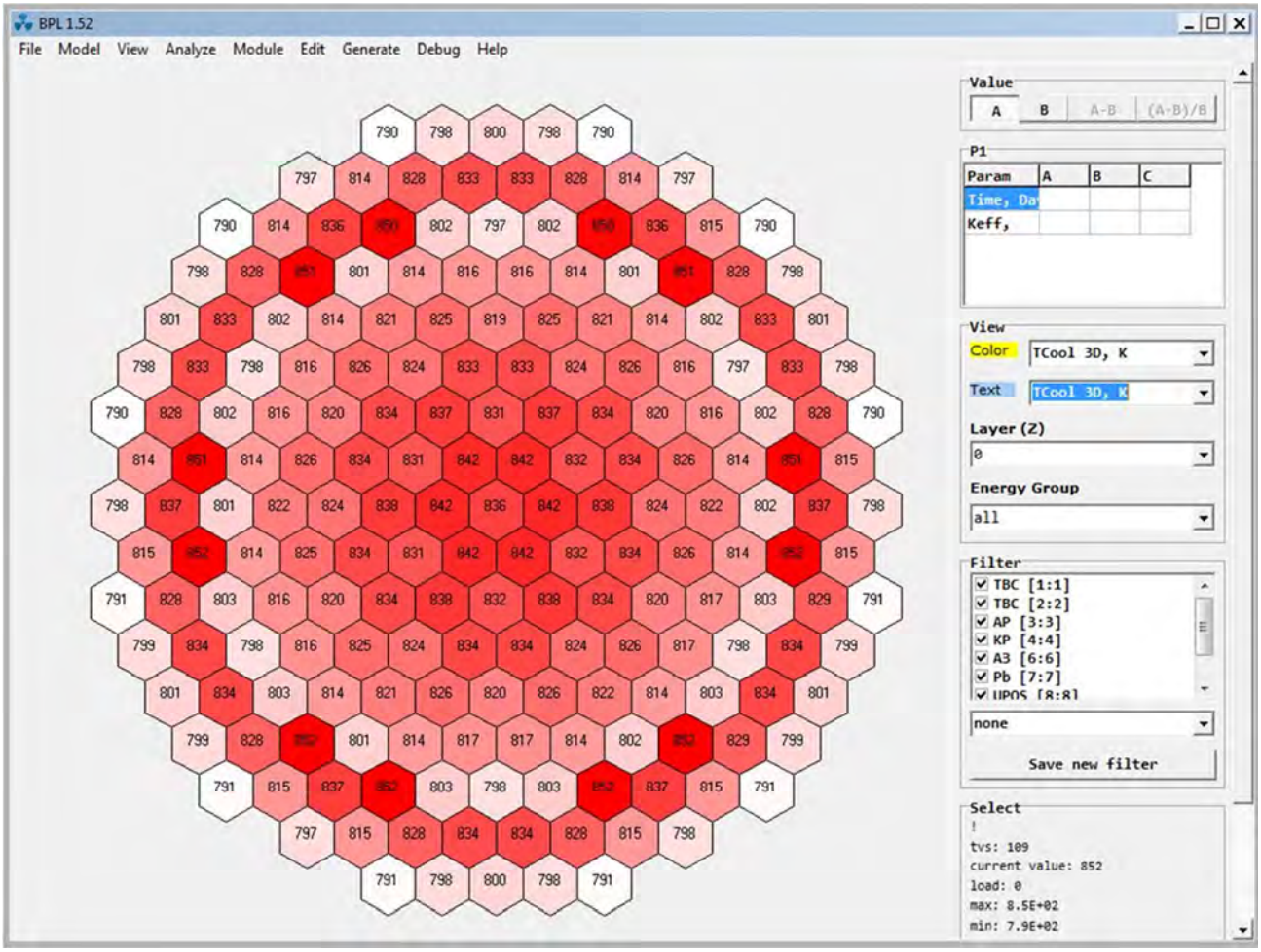

Рис. 1. Пример цветового градиента при отображении картограммы температуры теплоносителя

6.3. *Формат вывода численных значений*

При отрисовке картограммы в ИСК Платформа БРЕСТ численные значения выбранных пользователем функционалов по умолчанию отображаются в соответствии с форматом, единицами измерения и множителями, заданными в системном файле платформы – model.deal. Иногда для наилучшего отображения в рамках решения конкретной задачи целесообразно изменить эти параметры.

Пользователь может редактировать формат, единицы измерения и множители для всех функционалов, доступных в данной модели.

7. Экспорт результатов (генератор отчётов)

Все картограммы и графики (в том числе картограммы потвэльного распределения энерговыделения в ТВС, усреднённые профили распределения функционалов по радиусу и высоте), которые формируются в процессе работы с ИСК Платформа БРЕСТ, можно сохранить в формате SVG [10] для картограмм или BMP для графиков.

SVG – это масштабируемый формат векторной графики, который описывает графику с помощью языка разметки XML [11]. Его выбор обусловлен рядом достоинств, таких как:

– масштабируемость (возможность изменять масштаб любой части изображения без потери качества);

– представление файлов в виде текста на языке XML, вследствие чего упрощается редактирование файла и появляется возможность сформировать его программным способом;

– размер (файл в формате SVG занима-

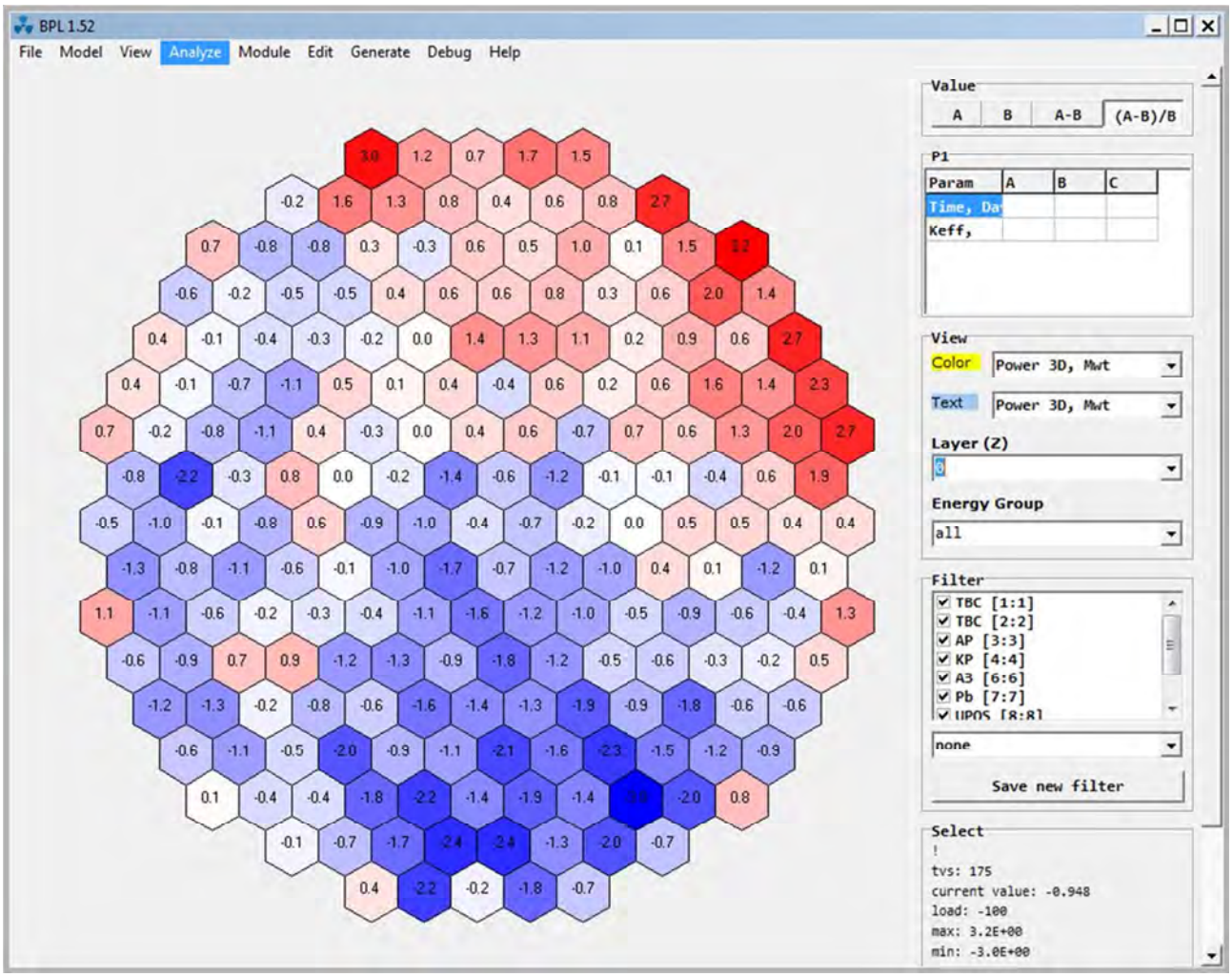

Рис. 2. Пример цветового градиента при сравнении мощностей ТВС для двух различных состояний (относительные отклонения)

ет меньше места, чем сравнимые по качеству файлы в форматах JPEG и GIF, и хорошо поддаётся сжатию);

– открытость стандарта SVG.

Графические объекты (геометрические фигуры, линии, текст) представлены в файле в виде тегов. Внутри тега содержится информация о типе графического объекта и о его свойствах.

При необходимости пользователь может отрисовать только текущую картограмму, для чего ему потребуется указать имя файла, а также стиль и размер шрифта, в котором на картограмму будет выводиться текст. Также пользователь может сохранить в формате SVG сразу несколько картограмм, для чего ему потребуется указать параметры этих картограмм в специальной форме. Все файлы будут сохранены с учётом всех фильтров, которые были поставлены пользователем при отрисовке картограммы в основном окне платформы, а также с учётом координатной сетки.

Заключение

С целью оптимизации и повышения точности расчётов активных зон реакторов с быстрым спектром нейтронов и жидкометаллическим теплоносителем разработана ИСК Платформа БРЕСТ. Выполнены работы по интеграции в ИСК инженерных и прецизионных кодов и разработаны рабочие модели РУ БРЕСТ-ОД-300 и БН-600.

В настоящее время с использованием ИСК Платформа БРЕСТ выполнено более ста расчётных исследований в обоснование ядерной безопасности РУ БРЕСТ-ОД-300. Также ИСК применяется для проведения

верификации ПК MCU-BR по результатам экспериментов на реакторе БН-600.

В ближайшее время планируются разработка и интеграция в ИСК Платформа БРЕСТ модуля топливного архива для анализа нейтронно-физических характеристик РУ БРЕСТ-ОД-300 при работе в режиме частичных перегрузок с замыканием ЯТЦ. Также разрабатываются рабочие модели для стенда БФС.

Список литературы

1. ***Архангельский А.Я.*** Программирование в C++ Builder 6. М.: ЗАО “Изд-во БИНОМ”, 2002.
2. ***Литвиненко Н.А.*** Технология программирования на C++. Win32 API-приложения. СПб.: БХВ-Петербург, 2010.
3. ***Джарод Холингвэрт Д.*** C++ Builder 5. Руководство разработчика. Том 2. Сложные вопросы программирования. М.: Вильямс, 2001.
4. ***Баловнев А.В., Давыдов В.К., Рождественский И.М., Кузнецов П.Б.*** Доработка и верификация программного комплекса FACT-BREST. Сб. Годовой отчёт НИКИЭТ-2013, с. 89–90. М.: Изд-во ОАО НИКИЭТ, 2013.
5. ***Алексеев Н.И., Большагин С.Н., Гомин Е.А., Городков С.С., Гуревич М.И., Калугин М.А., Кулаков А.С., Марин С.В., Новосельцев А.П., Олейник Д.С., Пряничников А.В., Сухино-Хоменко Е.А., Шкаровский Д.А., Юдкевич М.С.*** Статус MCU-5 // ВАНТ. Сер. Физика ядерных реакторов, 2011, вып. 4, с. 4–23.
6. ***Буколов С.Н.*** Верификация программы VEGA-2 в процессе выгорания топлива первых двух загрузок реактора PWR. Сб. Годовой отчёт НИКИЭТ-2013, с. 120–122. М.: Изд-во ОАО НИКИЭТ, 2013.
7. ***Серёгин А.С., Кислицына Т.С.*** Аннотация TRIGEX.04: Препринт № 2846. Обнинск: ГНЦ РФ-ФЭИ, 2000.
8. ***Серёгин А.С.*** Аннотация программы TRIGEX для малогруппового расчёта реактора в трёхмерной гексагональной геометрии // ВАНТ. Сер. Физика и техника ядерных реакторов, 1983, вып. 4(33), с. 59-60.
9. ***MCNP***, General Monte-Carlo N-Particle Transport Code. Version 4A, 1993.
10. ***Scalable Vector Graphics*** (SVG) 1.1 (Second Edition) / W3C Recommendation 16 August 2011. http://www.w3.org/TR/2011/REC-SVG11-20110816 (дата обращения: 26.05.2015).
11. ***Extensible Markup Language*** (XML) 1.1 (Second Edition) / W3C Recommendation 16 August 2006, edited in place 29 September 2006. http:// www.w3.org/TR/2006/REC-xml11-20060816 (дата обращения: 26.05.2015).

Контактная информация –
Юферева Варвара Александровна, н. с., тел.: (499)763-04-31, e-mail: varvara@nikiet.ru

Вопросы атомной науки и техники.
Сер. Физика ядерных реакторов, 2015, вып. 2,
с. 67–75.

УДК 621.039.51

Расчётное моделирование нестационарных нейтронно-физических и теплогидравлических процессов в активной зоне реакторной установки со свинцовым теплоносителем с учётом работы системы управления и защиты

А.В. Баловнев, А.Н. Иванюта, А.И. Ионов, А.П. Жирнов, П.Б. Кузнецов, Т.Ю. Сахарова,
АО “НИКИЭТ”, 107140, Москва, Малая Красносельская ул., 2/8
Поступила в редакцию 31.10.2014 г.

Представлено краткое описание программного комплекса FACT-BREST [1, 2] для моделирования нестационарных нейтронно-физических и теплогидравлических процессов в активной зоне реакторной установки (РУ) с учётом работы систем регулирования. Представлены результаты расчётного моделирования переходных режимов нормальной эксплуатации РУ со свинцовым теплоносителем.
Ключевые слова: РУ БРЕСТ-ОД-300, FACT-BREST, нейтронно-физический расчёт, теплогидравлический расчёт, картограмма.

Calculation of the Time Dependent Neutron and Thermohydraulic Processes in the Lead-Cooled Reactor Core with the Control System. ***A.V. Balovnev, A.N. Ivanyuta, A.I. Ionov, A.P. Zhirnov, P.B. Kuznetsov, T.Yu. Saharova,*** *JSC “RDIPE”, 2/8, Malaya Krasnosel’skaya St., Moscow, 107140.*
The brief description of software package FACT-BREST [1, 2] for modeling non-stationary neutron-physical and thermohydraulic processes in reactor core with control system is provided in this paper. Results of calculation modeling transient of lead-cooled reactor normal operation are given.
Key Words: BREST-OD-300 Reactor, FACT-BREST, Neutronic Calculations, Thermohydraulic Calculations, Cartogram.

1. Краткое описание программного комплекса (ПК)

Для расчёта трёхмерного поля плотности потока нейтронов и распределения мощности используется малогрупповое диффузионное приближение. Предполагается, что в процессе рассеяния энергия нейтронов не возрастает и рассеяние происходит только в соседнюю группу. Уравнение диффузии нейтронов решается в гексагональной либо в декартовой трёхмерной геометрии одним из следующих методов:

- метод конечных разностей на грубой сетке;
- нодальный метод с коррекцией токов нейтронов на границе расчётной ячейки (модифицированный вариант метода Аскью – Такеда [3]).

В качестве блока нейтронных данных используется система подготовки нейтронных сечений CONSYST [4]. В настоящей версии ПК используются 26-и групповые макросечения ячеек активной зоны и отражателей.

В каждый канал реактора может быть установлен рабочий орган (РО) системы управления и защиты (СУЗ). В процессе выгорания на каждом шаге с помощью РО СУЗ можно выводить реактор в критическое состояние, а также осуществлять выравнивание поля энерговыделения.

ПК FACT-BREST предназначен для проведения совместных нейтронно-теплогидравлических расчётов быстрых реакторов как в комплексе с другими теплогидравлическими программами, моделирующими I контур и активную зону, так и с применением инженерных моделей, реализованных в соответствующем модуле ПК.

Для расчёта распределения расхода теплоносителя по элементам активной зоны моделируется часть подъёмного участка от входа до верхней головки ТВС, остальная часть контура описывается в виде трубы с эквивалентным гидравлическим сопротивлением без детализации геометрии.

Для расчета используется модель параллельных каналов, в качестве которых рассматриваются три основных типа каналов – межтвэльное пространство сборок централь-

ной зоны (ЦЗ) без РО, межтвэльное пространство сборок ЦЗ с РО и межтвэльное пространство сборок периферийной зоны, а также эквивалентные каналы для описания расходов через межчехловые зазоры, каналы СУЗ и отражатели. Течение теплоносителя для каждого участка тракта описывается уравнениями сохранения массы, импульса и энергии для жидкости.

Для формирования обратных связей по реактивности и оценки температурного режима работы твэлов для каждой ТВС активной зоны реактора рассматривается средний по мощности твэл, окружённый проточным теплоносителем. Решается уравнение теплопроводности в цилиндрических координатах с переменными коэффициентами и соответствующими начальными и граничными условиями. При постановке задачи не учитываются вертикальные и азимутальные перетечки тепла. Предусмотрена возможность проведения расчётов для определения начального состояния, если оно не задано.

2. Возможности ПК: режимы, процессы

ПК FACT-BREST обеспечивает трёхмерный нейтронно-физический расчёт реактора при решении следующих задач:

- расчёт реактора в стационарном состоянии;
- моделирование работы реактора с учётом изменения нуклидного состава топлива;
- расчёт нестационарных переходных процессов с учётом работы органов СУЗ;
- расчёт подкритического реактора с распределёнными и локальными внешними источниками нейтронов;
- расчёт с потвэльным восстановлением поля энерговыделения.

ПК FACT-BREST позволяет рассчитывать:

- трёхмерное поле плотности потока нейтронов и распределение мощности в стационарных состояниях и в процессе выгорания ядерного топлива;
- выгорание и трёхмерные распределения концентраций нуклидов топлива, осколков деления, ^{10}B и ^{11}B при выгорании;
- нуклидный состав выгружаемого и регенерированного топлива;
- эффективный коэффициент размножения нейтронов;
- радиальный, интегральный высотный, поканальный высотный и объёмный коэффициенты неравномерности энерговыделения в активной зоне;
- максимальные линейные тепловые нагрузки на твэлы и ТВС;
- температуры топлива, оболочки и теплоносителя;
- расход и плотность теплоносителя;
- эффективность органов СУЗ;
- коэффициент воспроизводства ядерного топлива;
- спектр и флюенс нейтронов, характеристики радиационных повреждений (СНА) в элементах конструкции активной зоны и отражателя;
- различные эффекты реактивности.

Расчёт с потвэльным восстановлением полей энерговыделения может проводиться совместно с расчётом температурных полей каждого твэла.

На примере модельного реактора типа БРЕСТ проведены тестовые расчёты переходных режимов, рассматриваемых при анализе вопросов безопасности РУ.

3. Несанкционированное извлечение стержней РО при пуске реактора

В начальный момент реактор находится в стационарном состоянии на мощности $10^{-4}\,N_{\text{ном}}$. Температура теплоносителя на входе и выходе активной зоны ~ 390 °С, расход свинцового теплоносителя номинальный.

Постулируется исходное событие: ввод положительной реактивности в процессе извлечения из активной зоны РО СУЗ – 6 стержней автоматического регулятора (АР), компенсирующих оперативный запас реактивности (~ 1,6 $\beta_{\text{эф}}$). Все погруженные РО АР извлекаются со скоростью 40 мм/с. Ввод положительной реактивности вызовет быстрый рост мощности, некомпенсируемый в начальный период обратными связями.

В случае функционирования всех систем и оборудования в штатном режиме реактор

должен быть остановлен по первой из достигаемых уставок аварийной защиты (АЗ): при уменьшении периода нарастания мощности до значения Т ≤ 20 с (тип 1) или достижения мощностью заданной величины (тип 2). Время запаздывания на формирование сигнала АЗ принято равным 0,2 с. По сигналу АЗ обесточиваются сервоприводы и в активную зону вводятся РО АЗ и РО ЭСМ (экстренного снижения мощности).

Второй рассматриваемый сценарий переходного процесса с извлечением РО АР на пусковом уровне мощности предполагает постулируемый пропуск первого аварийного сигнала по периоду.

Результаты расчётного моделирования представлены на рис. 1 и в табл. 1.

Температуры топлива, оболочки твэлов и свинцового теплоносителя на выходе из активной зоны изменяются незначительно.

4. Несанкционированное извлечение РО при работе на номинальном уровне мощности

В исходном состоянии реактор работает на стационарном номинальном уровне мощности. В соответствии с алгоритмом управления при работе РУ на мощности три РО АР, входящие в состав одной из двух групп автоматического регулирования, введены в наиболее эффективную среднюю часть активной зоны на половину своего хода, т.е. находятся в средней её части по высоте. Запас реактивности, скомпенсированный РО АР, составляет 0,5 $\beta_{эф}$.

Рассматривается исходное событие: одновременное извлечение из активной зоны с максимальной скоростью трёх РО АР. С целью оценки условий безопасности проведены расчёты переходных процессов со срабатыванием систем остановки по различным типам уставок:

1) по мощности 115 % $N_{ном}$ (ЭСМ);

2) по периоду нарастания мощности Т ≤ 20 с (АЗ);

3) по температуре теплоносителя на выходе ЦЗ 600 °С (АЗ).

Также рассмотрен сценарий со срабатыванием только двух из трёх стержней пассивной АЗ при достижении температурой свинцового теплоносителя на выходе из центральной области активной зоны величины 620 °С (тип уставки 4).

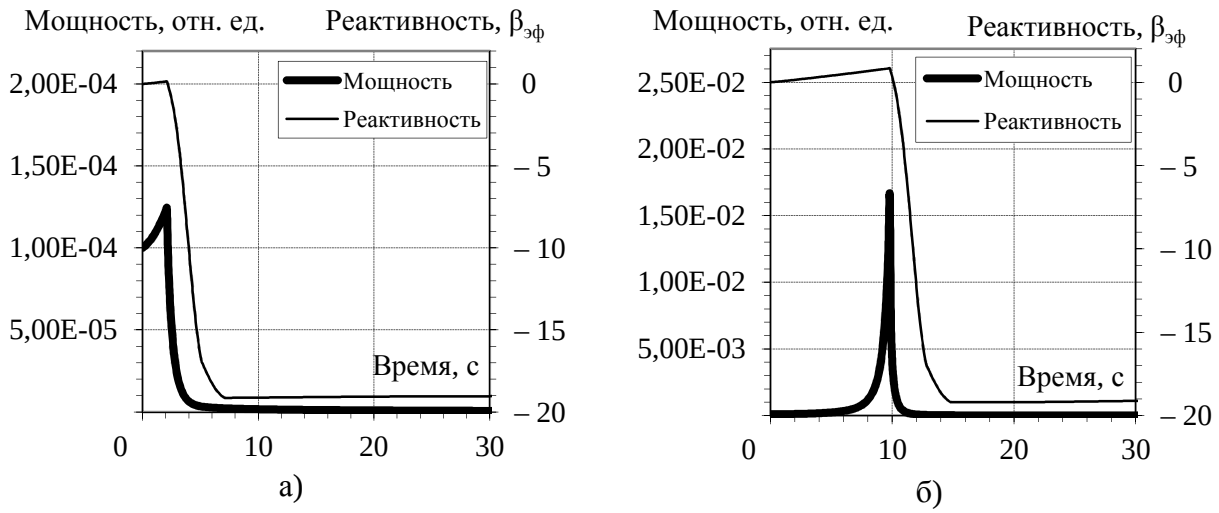

Рис. 1. Изменение мощности и реактивности в переходном процессе при извлечении РО АР и срабатывании АЗ по достижении аварийной уставки: а) периода нарастания мощности; б) мощности

Т а б л и ц а 1. Результаты расчётного моделирования процесса извлечения РО при пуске реактора

Тип уставки	Время до срабатывания, с	Увеличение мощности, раз	Введённая отрицательная реактивность, $\beta_{эф}$	Скорость ввода отрицательной реактивности, $\beta_{эф}$/с
1	2,1	1,24	~ 19	~ 5
2	9,8	1,64	~ 19	~ 5

Результаты расчётного анализа представлены в табл. 2 и на рис. 2.

5. Регулируемый перевод мощности реактора с $N_{ном}$ до 30 % $N_{ном}$

Выполнен расчёт автоматического режима перевода мощности реактора с номинального уровня до 30 % $N_{ном}$ с синхронизированным уменьшением расхода теплоносителя через активную зону. Режим выполнялся с учётом работы как стержней РО АР, так и системы пассивной обратной связи (СПОС).

На рис. 3 приведены изменения мощности, реактивности, температуры топлива, оболочки твэла и температура теплоносителя на выходе в переходном процессе.

Скорость снижения мощности составила 1 %/с. Соответственно изменялся и расход теплоносителя. Диапазон изменения реактивности в переходном режиме составил от 0 до – 0,35 $\beta_{эф}$. Основное управляющее воздействие на реактивность оказывают каналы СПОС, а РО АР поддерживаеют заданный темп переходного процесса. После стабилизации на новом уровне мощности РО АР извлечены на 14 см относительно исходного положения (рис. 3б). Скорость перемещения РО АР, которая зависит от величины разбаланса по мощности, не превышала 20 мм/с.

Время переходного режима снижения мощности составляет ~ 70 с. Температура топлива равномерно уменьшается от 1000 до 700 °С. Температура оболочки твэлов снижается на 25 °С. Температура теплоносителя на выходе из активной зоны сохраняется на исходном уровне. Таким образом обеспечивается приемлемое качество переходного режима.

6. Отключение главного циркуляционного насосного агрегата (ГЦНА)

На примере отключения одного ГЦНА продемонстрировано расчётное моделирование режима быстрого управляемого снижения мощности (БУСМ). Также проведен аналогичный расчёт в условиях саморегулирования без внешних воздействий РО и СПОС.

Отработка СПОС и АР обеспечивает перевод РУ на уровень мощности ~ 75 % $N_{ном}$ без существенных отклонений параметров от номинальных значений (рис. 4, 5). После стабилизации на новом уровне мощности РО АР возвращаются в положение, близкое к исходному (рис. 6). Рабочая скорость перемещения РО АР составляет 20 мм/с.

Реализация режима БУСМ при отключении ГЦНА обеспечивает поддержание температуры теплоносителя на выходе активной зоны и температуры оболочки твэлов без превышения исходного значения этих параметров.

Без срабатывания систем регулирования средняя температура теплоносителя на выходе увеличивается за счёт падения расхода на ~ 30 ºС (перепад температуры на активной зоне растёт на ~ 25 %), средняя температура топлива остаётся неизменной. Мощность РУ меняется в пределах 4 %.

7. Несимметричная подача горячего теплоносителя на вход активной зоны

С целью оценки чувствительности полей энерговыделения к возмущениям, связанным с температурной неоднородностью поступающего на вход активной зоны теплоносителя, смоделировано неравномерное

Т а б л и ц а 2. Результаты расчётного моделирования процесса извлечения РО при работе на $N_{ном}$

Тип уставки	Время до срабатывания, с	Увеличение мощности, раз	Max $T_{топ}$, °С	Max $T_{об}$, °С	Max $T_{св}$, °С	Введённая отрицательная реактивность, $\beta_{эф}$	Скорость ввода отрицательной реактивности, $\beta_{эф}$/с
1	2,4	1,17	1 050	612	549	13,5	~ 4,5
2	4,2	1,28	1 098	625	560	19	~ 4,3
3	10,8	1,6	1 255	688	604	19	~ 4,0
4	15,0	1,7	1 302	716	622	1	~ 0,2

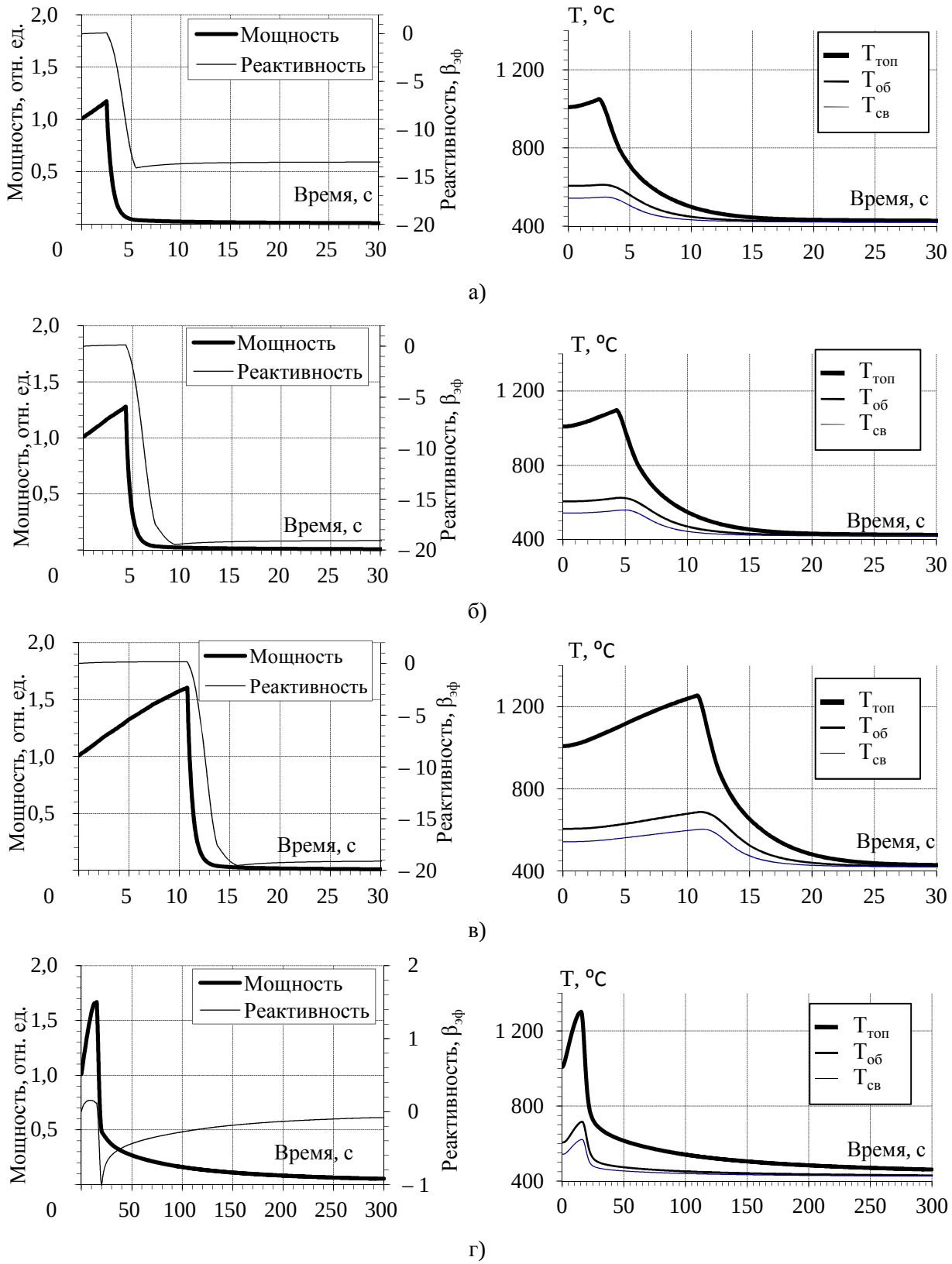

Рис. 2. Изменение мощности, реактивности и температуры топлива, оболочки твэла и теплоносителя в переходном процессе при извлечении РО АР и срабатывании ЭСМ по достижении аварийной уставки: а) мощности; б) периода нарастания мощности; в) температуры теплоносителя; г) срабатывания ПАЗ-Т (пассивной АЗ по температуре теплоносителя)

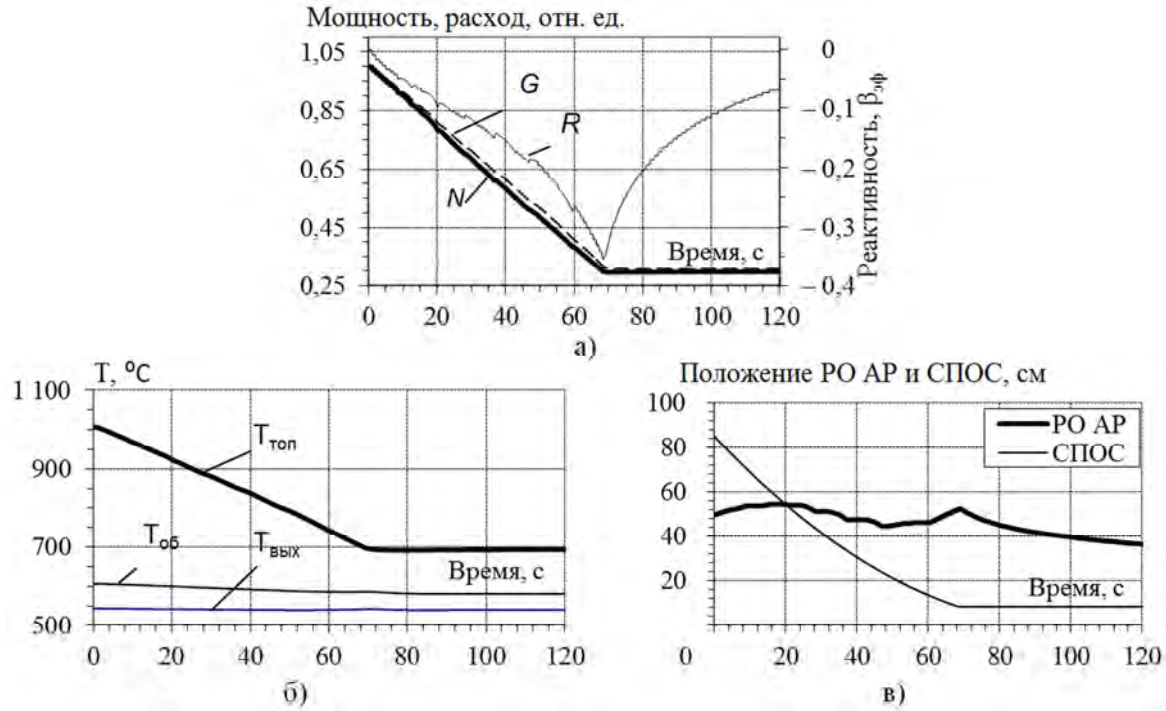

Рис. 3. Изменение мощности *N*, расхода *G* теплоносителя и реактивности *R* (а), температуры (б), положения РО АР и СПОС (в) в переходном процессе при снижении мощности с 100 до 30 % $N_{ном}$

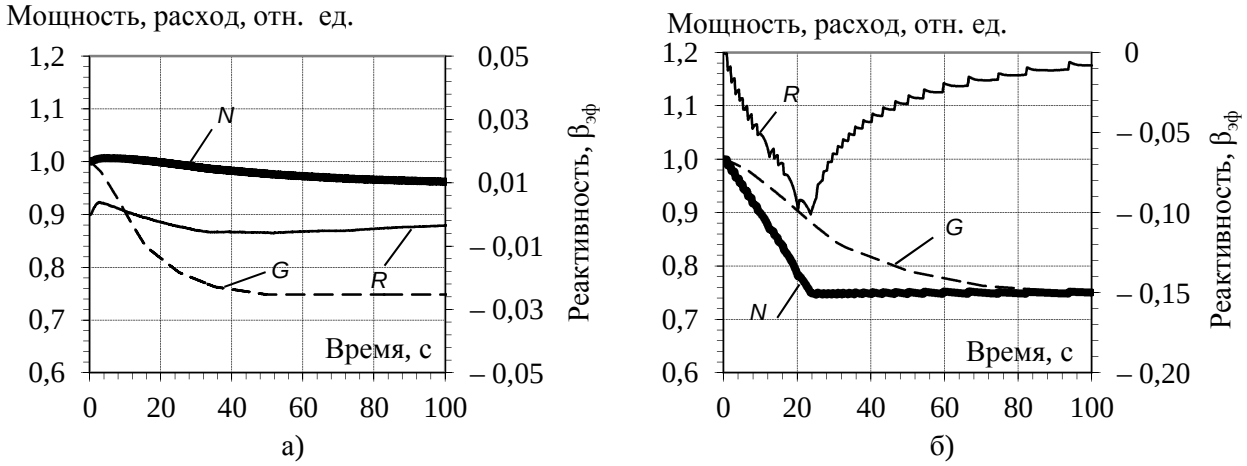

Рис. 4. Изменение мощности *N*, реактивности *R* и расхода *G* при отключении одного ГЦНА без регулирования (а) и с реализацией режима БУСМ (б)

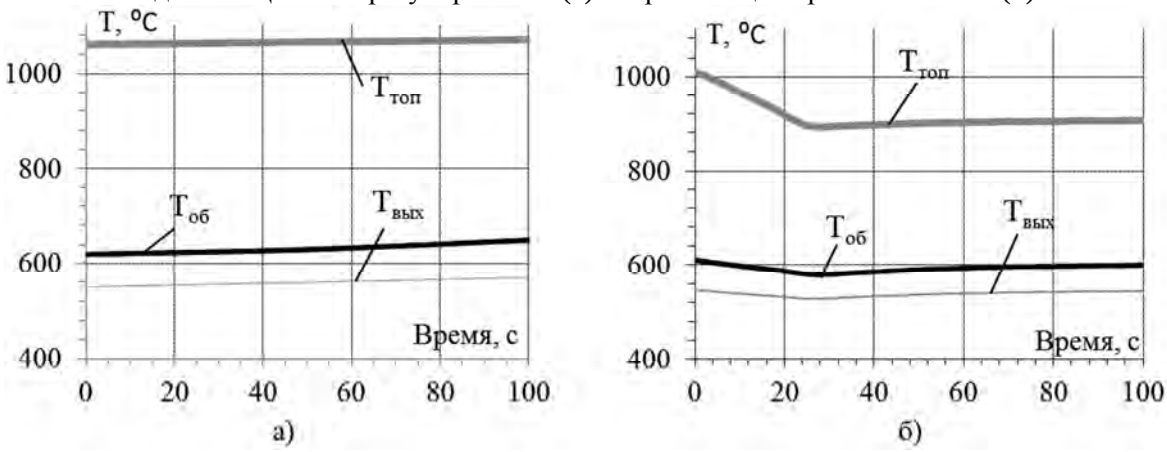

Рис. 5. Изменение температуры топлива, оболочки и теплоносителя при отключении одного ГЦНА без регулирования (а) и с реализацией режима БУСМ (б)

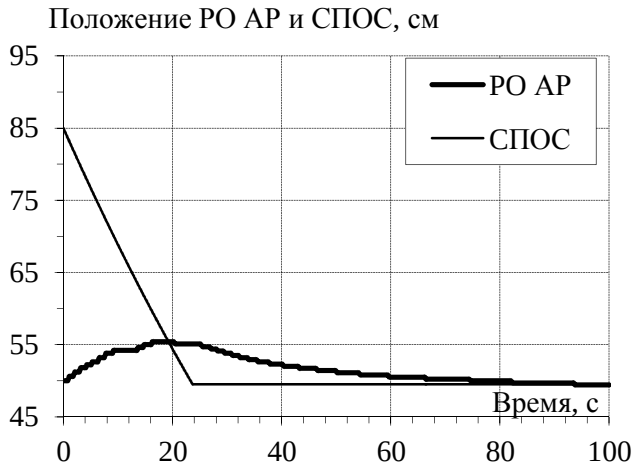

Рис. 6. Изменение положения РО АР и СПОС при отключении одного ГЦНА с реализацией режима БУСМ

возмущение температуры теплоносителя по активной зоне при постоянном перепаде давления. На входе в 45 ТВС в течение 5 с температура теплоносителя поднялась с 420 до 470 °С, в 20 ТВС – до 445 °С, а в остальных не менялась на протяжении всех 50 с моделируемого процесса (рис. 7).

Проведены два варианта расчётов: в первом случае отслеживался отклик нейтронно-физических характеристик на изменение температуры без работы регулирующих органов, во втором учитывалась отработка стержней АР. Результаты представлены на рис. 8. Видно, что в первом случае интегральная мощность снижается из-за

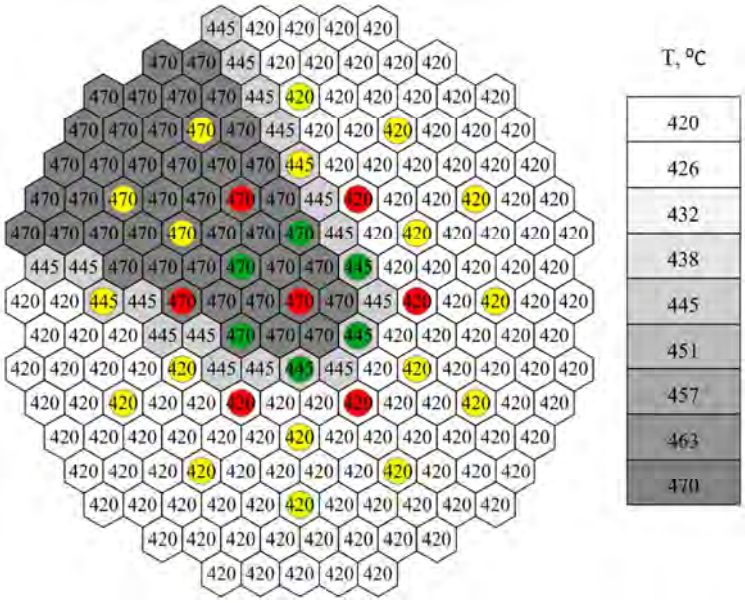

Рис. 7. Картограмма задаваемого изменения температуры теплоносителя на входе в ТВС:
● – ТВС с РО АР; ● – ТВС с РО АЗ; ● – ТВС с РО КР

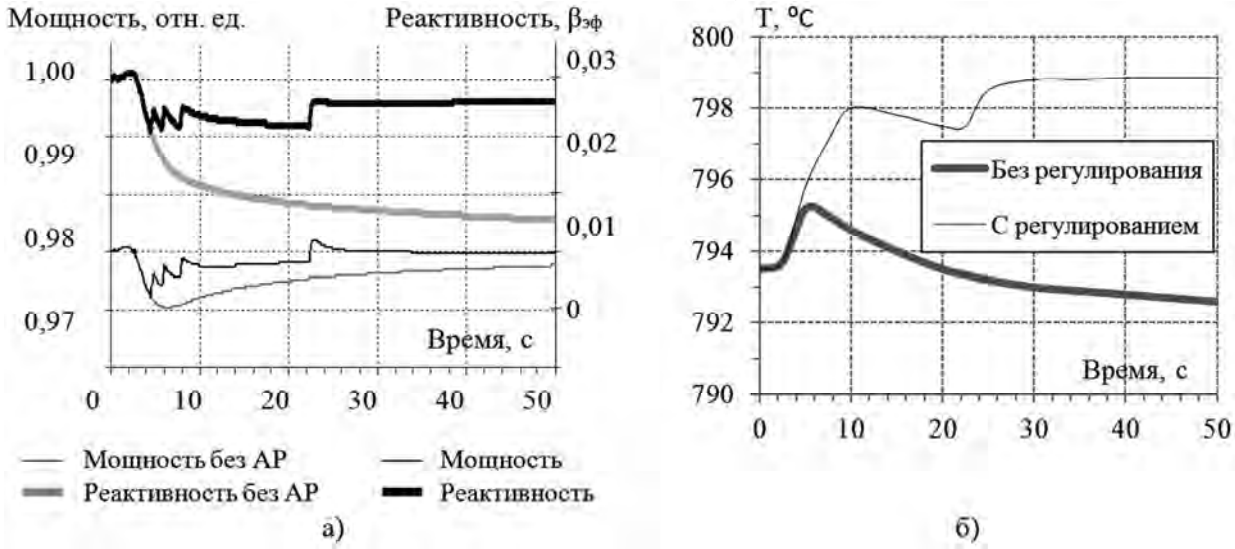

Рис. 8. Изменение мощности и реактивности (а) и средней по активной зоне температуры топлива (б) в результате несимметричной подачи горячего теплоносителя на вход активной зоны

срабатывания отрицательных реактивностных обратных связей по температуре топлива. Во втором мощность удерживается регулятором в диапазоне зоны нечувствительности. Поэтому увеличение температур топлива во втором случае несколько выше.

Из представленных результатов видно, что локальные возмущения по входной температуре теплоносителя сопровождаются изменением интегральной мощности при сохранении исходного профиля поля энерговыделения.

Заключение

Результаты тестовых расчётов показали, что ПК FACT-BREST обеспечивает расчётное моделирование переходных процессов, связанных как с режимами нормальной эксплуатации, так и с аварийными режимами, требующими срабатывания АЗ. При моделировании учитывались изменения нейтронно-физических и теплогидравлических параметров реактора, алгоритмы регулирования и защиты СУЗ. Результаты расчётов отражают взаимное влияние нейтронно-физических и теплогидравлических параметров в ходе совместных динамических расчётов.

Список литературы

1. ***Баловнев А.В., Давыдов В.К., Рождественский И.М., Кузнецов П.Б.*** Доработка и верификация программного комплекса FACT-BREST. Сб. Годовой отчёт НИКИЭТ-2013, с. 89–90. М.: Изд-во ОАО НИКИЭТ, 2013.

2. ***Иванюта А.Н., Ионов А.И., Кузнецов П.Б., Сахарова Т.Ю.*** Разработка интегрального динамического кода на базе программного комплекса FACT-BREST. Там же, с. 137–138.

3. ***Takeda T., Komano Y.*** Extension of Askew's Coarse Mesh Method to Few-Group Problems for Calculating Two-Dimensional Power Distribution in Fast Breeder Reactors // J. of Nuc. Sci. and Tec. July 1978, Vol. 15(7), P. 523–532.

4. ***Мантуров Г.Н., Николаев М.Н., Цибуля А.М.*** Программа подготовки констант CONSYST. Описание применения: Препринт ФЭИ-2828. Обнинск, 2000.

Контактная информация –
Иванюта Анастасия Николаевна, инжен., тел.: (499)763-03-28, e-mail: a.ivanyuta@nikiet.ru

Вопросы атомной науки и техники.
Сер. Физика ядерных реакторов, 2015, вып. 2,
с. 76–83.

УДК 621.039.5

Моделирование стартовой загрузки и начальных циклов работы МБИР

И.Б. Лукасевич, В.И. Мороко, В.Е. Попов, М.О. Левченко,
АО “НИКИЭТ”, 107140, Москва, Малая Красносельская ул., 2/8
Поступила в редакцию 24.11.2014 г.

Приведены результаты расчётного моделирования стартовой загрузки и начальных циклов работы проектируемого реактора МБИР в рамках нейтронно-физического обоснования его конструкции и режимов эксплуатации. Показано, что для контроля уровня подкритичности на всех этапах физического пуска необходим источник нейтронов с мощностью 10^8 $с^{-1}$, размещённый в центре активной зоны. Предложен порядок загрузки топливных сборок для набора критической конфигурации активной зоны, которая достигается при загрузке 63 ТВС с частично введёнными РО СУЗ. Моделирование начальных циклов работы МБИР до выхода на равновесный режим работы выполнено на основе стратегии наискорейшего формирования проектной компоновки активной зоны и наискорейшего выхода на номинальную мощность работы. Показано, что интегральная по всем энергиям плотность потока нейтронов в экспериментальных устройствах с первых циклов близка к равновесным значениям $(2…5)\cdot 10^{15}$ $см^{-2}с^{-1}$.

Ключевые слова: МБИР, быстрый реактор, исследовательский реактор, MCU, TRIGEX.

Simulation of the First Fuel Loading and Initial Operating Cycles of MBIR. ***I.B. Lukasevich, V.I. Moroko, V.E. Popov, M.O. Levchenko****. JSC “RDIPE”, 2/8, Malaya Krasnosel’skaya St., Moscow, 107140.*

The paper presents the results of a computational simulation for the first fuel loading and initial operating cycles of the MBIR reactor under design, as part of justifying its neutronics in the design and during the operating modes. It has been shown that monitoring of the subcriticality level at all first criticality stages requires a neutron source of the capacity 10^8 s^{-1} installed in the core center. Procedures have been proposed for the loading of fuel assemblies (FA) to compose the critical configuration of the core which is achieved with 63 loaded FAs when control rods inserted partially. The initial operating cycles of MBIR prior to the equilibrium operating mode being achieved were simulated based on the strategy of forming the core’s design configuration and reaching the rated operating power as fast as possible. It has been shown that the total neutron flux density in experimental devices is close to the equilibrium values of $(2…5)\cdot 10^{15}$ $cm^{-2}\cdot s^{-1}$ as from the early operating cycles.

Key Words: MBIR, Fast Reactor, Research Reactor, MCU, TRIGEX.

Введение

Многоцелевой быстрый исследовательский реактор (МБИР) предназначен для обновления экспериментальной базы исследовательских реакторов, проведения широкого спектра экспериментальных и исследовательских работ. В 2013 г. НИКИЭТ завершил комплекс нейтронно-физических расчётов в обоснование конструкции МБИР. Сформирована компоновка активной зоны, включающая в себя 94 ТВС, петлевой канал в центре, занимающий 7 ячеек, три ячейки, предназначенные для размещения в них инструментованных экспериментальных сборок, 13 ячеек для размещения неинструментованных материаловедческих сборок [1]. Высота активной зоны составляет 550 мм. Номинальная тепловая мощность установки составляет 150 МВт. Используется виброуплотнённое МОКС-топливо. В качестве теплоносителя применяется натрий.

ТВС МБИР содержит 91 цилиндрических твэлов диаметром 6,0 мм, установленных по узлам шестигранной решётки. Оболочка твэла изготовлена из стали ЧС-68 ИД. Твэлы заключены в шестигранный чехол из стали ЭП-450Ш с внешним размером под ключ 72,2 мм. Высота ТВС 2 700 мм. ТВС располагаются в треугольной решётке с шагом 75 мм [2].

Аспекты моделирования равновесного режима работы и определение отвечающих этому режиму характеристик освещены в

[2…4]. В этой статье представляются исследования, связанные с вопросами пусковых этапов.

Данная задача состоит из трёх частей:

– определение мощности пускового источника;

– моделирование стартовой загрузки до выхода на критичность;

– моделирование первых циклов работы реактора до выхода на равновесный режим.

Определение мощности пускового источника и моделирование стартовой загрузки реактора осуществлялись по прецизионной программе MCU-BR. Моделирование выгорания топлива в начальных циклах работы реактора и осуществления перегрузок между ними выполнялось на основе программы TRIGEX [5] с оболочкой Парус, разработанной в НИКИЭТ. На основе полученных составов расчёт нейтронно-физических характеристик проводился по MCU-BR.

1. Определение мощности пускового источника

При наборе критической конфигурации во время первого пуска реактора для обеспечения контроля состояния активной зоны требуется применение размещённого внутри корпуса реактора пускового источника нейтронов, отклик от которого на всех этапах набора активной зоны должен регистрироваться детекторами, расположенными за пределами корпуса реактора.

Расчёт мощности источника производился на основе следующих исходных положений:

1) источник задавался точечным и размещался в центральной ячейке компоновки на уровне центральной плоскости активной зоны (ц.п.а.з.);

2) пусковые детекторы размещались в четырёх специальных каналах, которые расположены в слое засыпки Al_2O_3 за пределами корпуса реактора, кожуха, тепловой защиты сталь-фоль и части биологической защиты (слой чугуна). Предполагается, что по высотному размещению детекторы находятся на высоте ± 10 см относительно ц.п.а.з.;

3) скорость счёта для детектора при наборе активной зоны на начальных этапах этой процедуры должна составлять не менее 1,5…2 импульсов в секунду;

4) рассматривался детектор, импульсная чувствительность которого по отношению к тепловым нейтронам (с энергией менее 0,5 эВ) равна 0,5 см^2. Указанная чувствительность означает, что, например, плотность потока тепловых нейтронов 4 см$^{-2}$с$^{-1}$ в месте размещения детектора обеспечивает скорость счёта 2 импульса в с. Надтепловая область спектра увеличивает скорость счёта, и её вклад в расчёте также учитывался;

5) детектор должен регистрировать нейтронный поток непосредственно с момента размещения пускового источника в реакторе до начала загрузки первой топливной сборки;

6) внутрикорпусной объём в расчётной модели для определения мощности источника заполнялся следующим образом. В ячейках, предназначенных для установки ТВС, размещены имитаторы топливных сборок, конструкция которых соответствует конструкции ТВС за тем исключением, что внутри твэла вместо топлива находится стальной стержень. В ячейках, предназначенных для установки экспериментальных устройств, в пределах активной зоны размещены имитаторы экспериментальных устройств. Боковой экран заполнен стальными сборками, находящимися в том числе на месте внутриреакторного хранилища и его защиты.

Наиболее консервативное состояние для расчёта мощности пускового источника возникает перед загрузкой первой ТВС в реактор, когда РО СУЗ расцепляются и оказываются погруженными в активную зону, поэтому в расчётной модели РО СУЗ задаются в погруженном в активную зону положении. Температурное состояние реактора соответствует технологическому холодному состоянию, когда все элементы внутри корпуса обладают температурой 225 ºС;

7) закорпусная периферия задана в упрощённом виде. Модельный вид закорпусной периферии приведен на рис. 1;

8) в качестве источника нейтронов используется изотоп ^{252}Cf.

Расчёт показал, что отношение плотности потока тепловых нейтронов (для $E < 0{,}5$ эВ) к мощности пускового источника (количеству испускаемых за 1 с нейтронов) для всех каналов составляет около $2{,}0 \cdot 10^{-8}$ см$^{-2}$, т.е. при мощности пускового источника 10^8 с$^{-1}$ скорость счёта при импульсной чувствительности 0,5 см^2 детектора к тепловым нейтронам составляет 1,0 имп/с.

Однако, значительный вклад в скорость счёта детектора вносит надтепловая область спектра нейтронного потока в районе детектора. Полная скорость счёта (пропорциональная количеству делений в ^{235}U на электродах) примерно в 2,5 раза выше, чем та, которая формируется за счёт тепловой области спектра, и для мощности пускового источника 10^8 с$^{-1}$ составляет около 2,5 имп/с, что является удовлетворительным показателем.

Таким образом, для обеспечения регистрации состояния активной зоны на всех этапах набора критической конфигурации достаточно в геометрическом центре внутрикорпусной компоновки разместить пусковой калифорниевый источник мощностью 10^8 с$^{-1}$.

2. Моделирование стартовой загрузки реактора

Моделирование стартовой загрузки производилось в два этапа.

На первом этапе целью служило достижение критической конфигурации с минимальным количеством ТВС, загруженных в активную зону. Загрузка осуществлялась по одной ТВС с последующим измерением реактивности и параметров РО СУЗ. Последовательность операций должна быть подробно отражена в будущей программе физического и энергетического пусков. В данном расчёте подробно все детали процедуры загрузки топливных сборок не рассматривались.

Расчёт $K_{эф}$, а также параметров нейтронного потока и скорости счёта в детекторе не проводился для каждой очередной загруженной ТВС, а определялся для дискретных порций с подробным рассмотрением (дискретностью в одну топливную сборку)

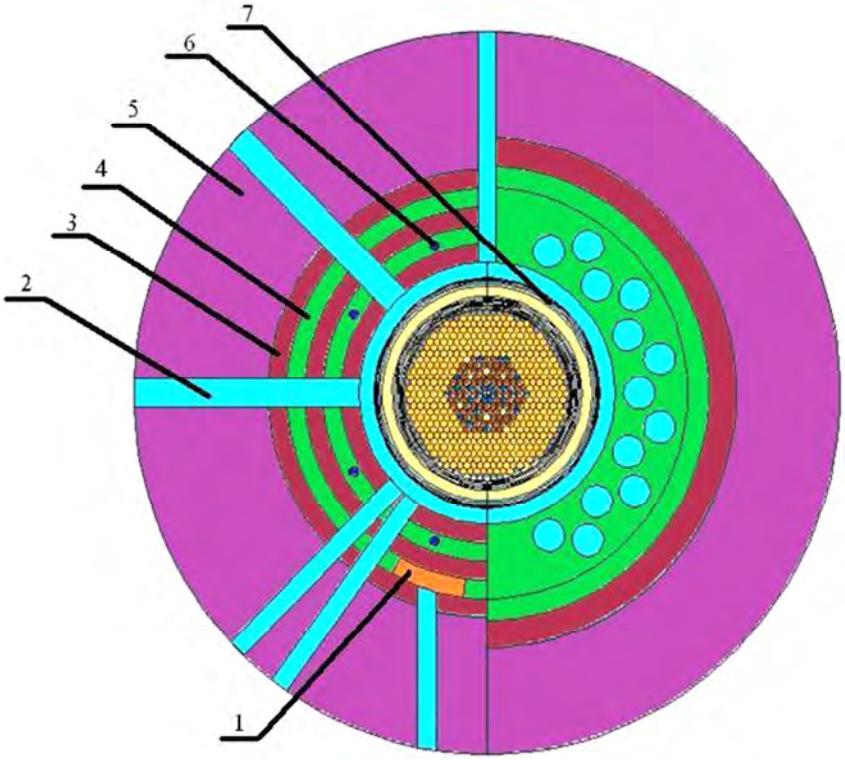

Рис. 1. Закорпусная периферия: 1 – бериллий; 2 – воздух; 3 – чугун; 4 – Al_2O_3; 5 – бетон; 6 – детекторные каналы; 7 – корпус

лишь на начальном этапе загрузки и при приближении к критической конфигурации. При этом реактор находился в технологически холодном состоянии (все элементы обладают температурой 225 ºС).

Кривые роста $К_{эф}$ и обратного умножения при наборе критической конфигурации представлены на рис. 2. Критическое состояние достигается при размещении 63 ТВС с введённым стержнем РО СУЗ РР1 на 3,5 см в активную зону (см. рис. 3). Остальные РО СУЗ находятся во взведённом состоянии. При этом расчётное значение $К_{эф}$ со всеми взведёнными РО СУЗ составляет 1,0017.

Второй этап загрузки топливных сборок имеет целью формирование компоновки, в рамках которой возможны энергетический пуск реактора на мощности, близкой к номинальной, и последующая работа на мощности в течение 100 эфф. сут. Проведен ряд расчётов, в рамках которых определялась конфигурация с запасом реактивности, обеспечивающим:

– запас реактивности на выгорание около 3 % ΔК/К (соответствует падению реактивности за 100 сут);

– запас на компенсацию изотермического и мощностного эффектов реактивности около 1,1 % ΔК/К;

– оперативный запас реактивности, требующийся для регулирования реактора при работе на мощности и составляющий 0,4 % ΔК/К.

При компоновке 76 ТВС запас реактивности системы составляет 4,6 % ($К_{эф}$ = = 1,0484), т.е. отвечает запасу реактивности, требующемуся для работы на мощности в течение 100 эфф. сут. При этом эффективность РО СУЗ позволяет обеспечить более 2 % подкритичности (согласно расчёту около 3,5 %) при взведённых РО АЗ согласно требованиям правил ядерной безопасности для исследовательских реакторов.

Порядок загрузки показан на рис. 3, где догружаемые ТВС разбиты на три группы в зависимости от этапа, на котором они загружаются, при этом использованы результаты расчётов, представленные далее.

3. Моделирование первых циклов работы реактора

В расчётном моделировании начальных этапов работы МБИР в качестве основной стратегии принята задача скорейшего вывода реактора на номинальную мощность, скорейшего формирования полной компо-

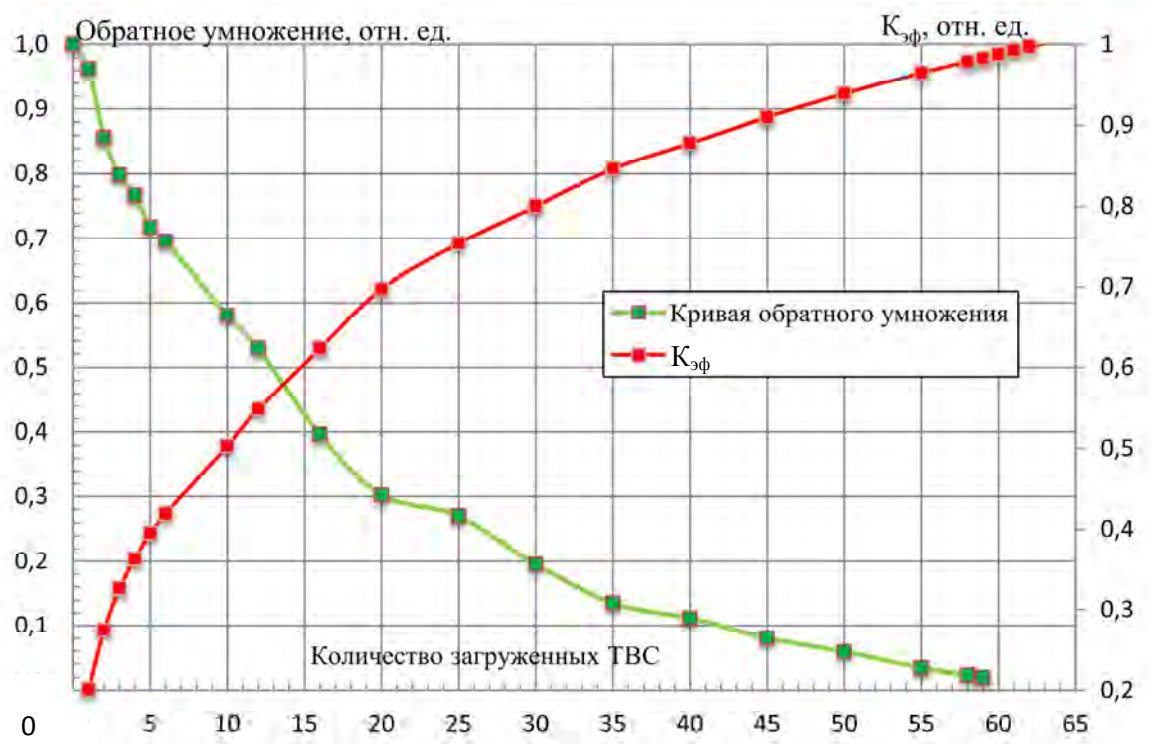

Рис. 2. Зависимости $К_{эф}$ и обратного умножения в процессе набора критической конфигурации

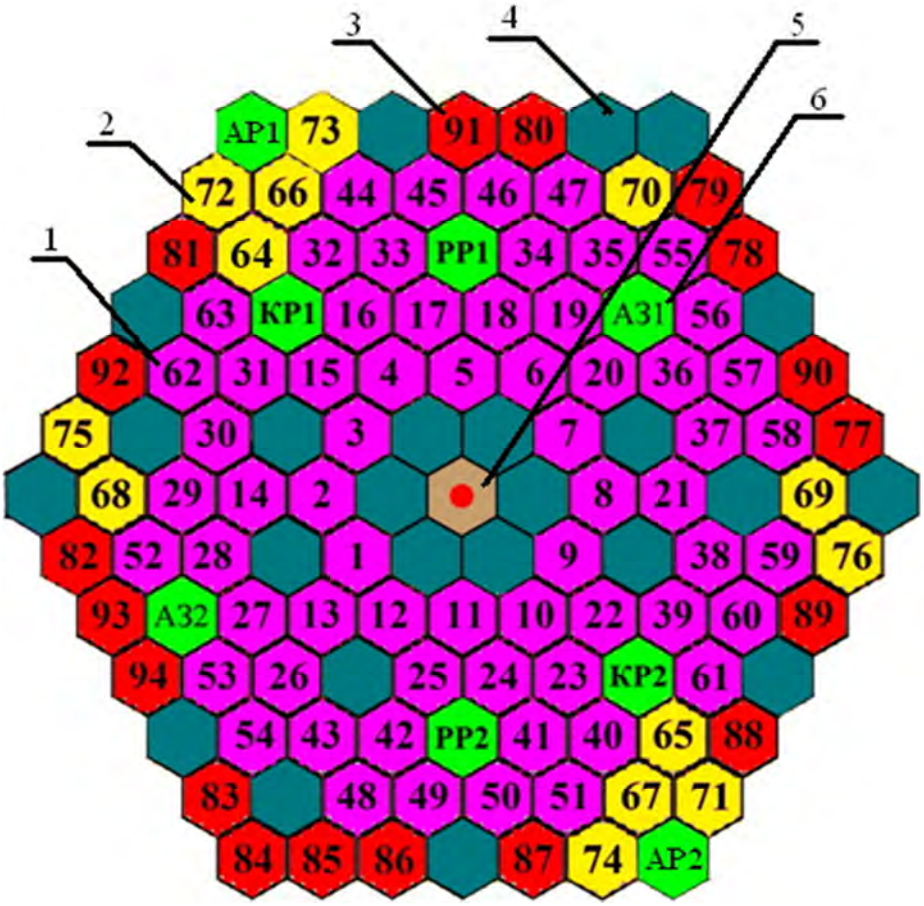

Рис. 3. Порядок загрузки ТВС при наборе активной зоны: 1 – ТВС, загружаемые при наборе критической компоновки; 2 – ТВС, загружаемые при наборе компоновки для начала работы на мощности; 3 – ТВС, дозагружаемые при перегрузках после одного или двух циклов работы на мощности; 4 – имитаторы экспериментальных устройств; 5 – ячейка с источником (удаляется после достижения критической конфигурации); 6 – РО СУЗ

новки активной зоны из 94 ТВС и скорейшего приближения параметров работы к показателям равновесной кампании. При определении перегружаемых и догружаемых ТВС учитывались необходимый для следующего цикла работы запас реактивности на выгорание топлива и требование отсутствия образования “горячих пятен”, когда несколько свежих ТВС оказываются рядом. Кроме того, реактор МБИР при работе на мощности должен удовлетворять следующим требованиям:

1) максимальная линейная тепловая нагрузка на твэл меньше 500 Вт/см;

2) длительность цикла работы между перегрузками равна 100 эфф. суткам;

3) 2 % подкритичности при взведённых РО АЗ в режиме временного останова;

4) набранный элементами ТВС флюенс от быстрых нейтронов (E > 0,1 МэВ) не должен превышать $1{,}5\cdot10^{23}$ см$^{-2}$.

Произведено моделирование 20 начальных циклов работы реактора. На первом работа реактора осуществлялась на мощности 130 МВт. После чего компоновка реактора была расширена на 11 ТВС с топливом подпитки, дозагруженных на периферию активной зоны. При этом отработавшие первый цикл ТВС не перегружались. Несмотря на то, что во втором цикле компоновка состоит из 87 ТВС, оказывается возможным вывести реактор на номинальную мощность в 150 МВт вследствие меньшей неравномерности энерговыделения по сравнению с равновесным состоянием, вызванной отсутствием свежих ТВС в центре активной зоны и наличием дозагруженных свежих ТВС на периферии компоновки.

Полная компоновка в 94 ТВС достигается на начало третьего цикла. Уровень среднего выгорания активной зоны, следовательно, и топливный состав в ней стабилизируются с четвёртого цикла. Величина среднего выгорания активной зоны с пятого по девятый цикл незначительно превышает равновесное значение.

Главным целевым параметром МБИР служит уровень плотности потока нейтронов. Проведенное моделирование показало, что интегральная по всем энергиям плотность потока нейтронов близка к равновесным значениям с первых циклов, что, как показано в [1, 3], отвечает величинам $(2\ldots5)\cdot10^{15}$ см$^{-2}$с$^{-1}$ в зависимости от локализации экспериментальных устройств, размещённых в пределах активной зоны.

Заключение

В рамках работ по проекту МБИР проведено моделирование стартовой загрузки и начальных циклов работы реактора. Определена мощность пускового источника, необходимая для осуществления контроля уровня подкритичности на всех этапах набора критической конфигурации. Показано, что для этого требуется источник нейтронов деления (^{252}Cf) с мощностью 10^8 с$^{-1}$. Предложен порядок загрузки топливных сборок в активную зону для формирования критической конфигурации, которая достигается при загрузке 63 ТВС.

Выход в критическое состояние допустим также при компоновках с бóльшим количеством ТВС при частично введённых РО СУЗ. Компоновка активной зоны, позволяющая начать работу на мощности 130 МВт в течение установленного периода работы, состоит из 76 ТВС. Моделирование начальных циклов работы МБИР показало, что нейтронно-физические параметры выходят на показатели, отвечающие равновесному режиму работы реактора, в течение первых 3, 4 циклов работы.

Работа по оптимизации компоновки реактора и размещения экспериментальных устройств продолжается, рассматриваются иные варианты расположения детекторов, поэтому возможно, что в будущем представленные в статье параметры претерпят некоторые изменения.

Список литературы

1. ***Лукасевич И.Б., Родина Е.А.*** Порядок формирования и пути усовершенствования активной зоны РУ МБИР // ВАНТ. Сер. Обеспечение безопасности АЭС, 2013, вып. 33: Исследовательские реакторы, с. 53–59.

2. ***Родина Е.А., Лопаткин А.В., Лукасевич И.Б., Романова Н.В.*** Выбор компоновки активной зоны реактора МБИР. Там же, Сер. Физика ядерных реакторов, 2012, вып. 1, с. 79–84.

3. ***Зайко И.В., Левченко М.О., Лукасевич И.Б., Родина Е.А.*** Моделирование равновесной кампании РУ МБИР. Там же, Сер. Обеспечение безопасности АЭС, 2013, вып. 33: Исследовательские реакторы, с. 49–53.

4. ***Зайко И.В., Левченко М.О., Лопаткин А.В., Лукасевич И.Б., Родина Е.А., Романова Н.В., Третьяков И.Т.*** Нейтронно-физические особенности активной зоны МБИР // Атомная энергия, 2013, том 114, вып. 4, с. 188–191.

5. ***Серёгин А.С., Кислицына Т.С., Цибуля А.М.*** Аннотация комплекса программ TRIGEX.04: Препринт ФЭИ-2846. Обнинск, 2000.

Контактная информация –
Мороко Василий Игоревич, инженер, тел.: 8 (499)763-02-49, e-mail: vmoroko@nikiet.ru

Вопросы атомной науки и техники.
Сер. Физика ядерных реакторов, 2015, вып. 2, с. 84–89.

УДК 621.039.51

Использование связанного расчётного комплекса PRISET-MBIR для исследования штатных и аварийных режимов РУ МБИР

И.А. Ларионов, И.В. Платонов, А.В. Лопаткин, Ю.А. Долгов,
АО “НИКИЭТ”, 107140, Москва, Малая Красносельская ул., 2/8
Поступила в редакцию 24.11.2014 г.

Обсуждаются основные принципы построения связанных нейтронно-физических и теплогидравлических расчётных комплексов для исследования переходных и аварийных режимов и обоснования безопасности. Описаны структурная схема разработанного комплекса и принципиальная расчётная схема теплогидравлической модели реакторной установки (РУ). Приведены описание модели трёхмерной кинетики активной зоны и результаты расчётных исследований аварийных режимов.
Ключевые слова: программный комплекс PRISET-MBIR, многоцелевой быстрый исследовательский реактор, трёхмерная модель кинетики активной зоны, модели контуров технологической схемы, переходные и аварийные режимы, безопасность.

Use of the PRISET-MBIR Code for Study of the Transients and Emergencies of the MBIR Reactor Installation. ***I.A. Larionov, I.V. Platonov, A.V. Lopatkin, Yu.A. Dolgov,*** JSC *“RDIPE”, 2/8, Malaya Krasnosel’skaya St., Moscow, 107140.*

The calculation code PRISET-MBIR for study of the dynamics, transients and emergency processes of the multipurpose fast reactor MBIR is discussed. The code block-diagram and basement design scheme of thermal-hydraulic model of the reactor have been described. It has been presented description of the three-dimensional kinetics model of the core. The results of the studies of emergencies are presented also.
Key Words: PRISET-MBIR Software Package, Multipurpose Fast Research Reactor, Three-Dimensional Model of Kinetics Reactor Core, Models of Circuits Technological Scheme, Transients and Emergencies, Safety.

Программный комплекс PRISET-MBIR, предназначенный для анализа безопасности эксплуатации РУ МБИР, позволяет проводить исследование переходных нейтронно-физических и теплогидравлических процессов в активной зоне (а.з.) реактора, в контурах охлаждения реактора и в различных системах и экспериментальных устройствах (ЭУ). При этом обеспечиваются исследования нормальных эксплуатационных режимов, а также аварийных режимов, вызванных отказами технологического оборудования, отказами в системе управления и внешними воздействиями с учётом работы систем контроля, управления и аварийной защиты (АЗ) и возможных отказов в их работе.

1. Программный комплекс PRISET-MBIR

Связанный нейтронно-физический и теплогидравлический программный комплекс PRISET-MBIR построен на основе следующих программных модулей:

– модуль, описывающий переходные процессы в а.з. ядерного реактора и разветвлённых контурах охлаждения;
– модуль расчёта нейтронной кинетики (трёхмерной, в диффузионном приближении, с произвольным числом энергетических групп и шестью группами запаздывающих нейтронов) в стационарных и переходных режимах;
– модуль, описывающий систему управления и защиты;
– модули, описывающие системы безопасности РУ;
– модули, описывающие технологические контуры циркуляции теплоносителя;
– вспомогательные интерфейсные модули, необходимые для ввода-вывода данных, визуализации расчёта, обмена данными между другими программными средствами.

Принципиальная блочная схема расчётного комплекса PRISET-MBIR приведена на рис. 1.

Принципиальная расчётная схема установки в программе PRISET-MBIR предста-

Рис. 1. Принципиальная блочная схема расчётного комплекса PRISET-MBIR

вляет собой разветвлённую гидравлическую сеть произвольной конфигурации. Ветви этой сети могут включать различное оборудование: тепловыделяющий канал а.з. и внутриреакторного хранилища (ВРХ), теплообменник (ТО), парогенератор (ПГ), участок трубопровода, отсечной и обратный клапаны, циркуляционный насос и др.

Расчётная модель I контура включает модель МБИР, которая состоит из моделей а.з., ВРХ и бокового экрана, а также модель основного оборудования I контура охлаждения РУ.

Каждая петля II контура РУ МБИР включает промежуточный теплообменник, ПГ, бак буферный натриевый, главный циркуляционный насос (ГЦН), клапаны, а также трубопроводы II контура.

Каждая петля контура системы аварийного отвода тепла (САОТ) включает: аварийный теплообменник, воздушный теплообменник, расширительный бак, а также трубопроводы контура САОТ.

Математические модели теплогидравлических процессов [1], использованные в программном комплексе, включают описание многоканальной а.з., ТО с распределёнными параметрами и другого оборудования технологических контуров. Также моделируются теплогидравлические процессы в разветвлённых гидравлических сетях контуров охлаждения с учётом переменных режимов и отказов в работе оборудования.

Для описания процессов теплообмена в твэлах а.з. использовано одномерное трёхточечное приближение (топливо, оболочка твэла, теплоноситель). При разработке замыкающих соотношений для описания процессов теплоотдачи и гидравлического сопротивления применялись уравнения,

описывающие изменения коэффициентов теплоотдачи и гидравлического сопротивления во всех возможных режимах работы РУ.

Модель нейтронно-физических процессов, протекающих в а.з., основана на решении нестационарных групповых уравнений диффузии нейтронов с учётом пространственного распределения параметров. Программа позволяет определять распределение нейтронных потоков и энерговыделения по объёму а.з. как в стационарных, так и в переходных и аварийных режимах.

Использование диффузионного приближения в модели кинетики а.з. позволяет получить результаты необходимой точности при минимальных затратах вычислительных ресурсов [2, 3].

А.з. реактора (рис. 2) разбивается на расчётные ячейки таким образом, чтобы учитывалась геометрия а.з., а также принятая компоновка. Необходимо отметить, что работа по оптимизации компоновки МБИР и размещения ЭУ (с целью повышения эксплуатационных и исследовательских характеристик установки) продолжается, вследствие чего возможна корректировка представленных в статье величин.

Расчётная сетка имеет гексагональную структуру, в которой каждой расчётной ячейке соответствует отдельная кассета. Для реализации расчётной сетки а.з. произвольной компоновки в программном комплексе PRISET-MBIR применяется модуль сеточного генератора.

Наряду с использованием трёхмерной кинетики а.з. для решения оптимизационных задач и задач длительного расхолаживания установки в программном комплексе имеется возможность перехода на расчёт динамических процессов в одноточечном приближении.

В качестве примеров расчёта переходных и аварийных режимов рассматривались следующие исходные события:

– несанкционированное извлечение ра-

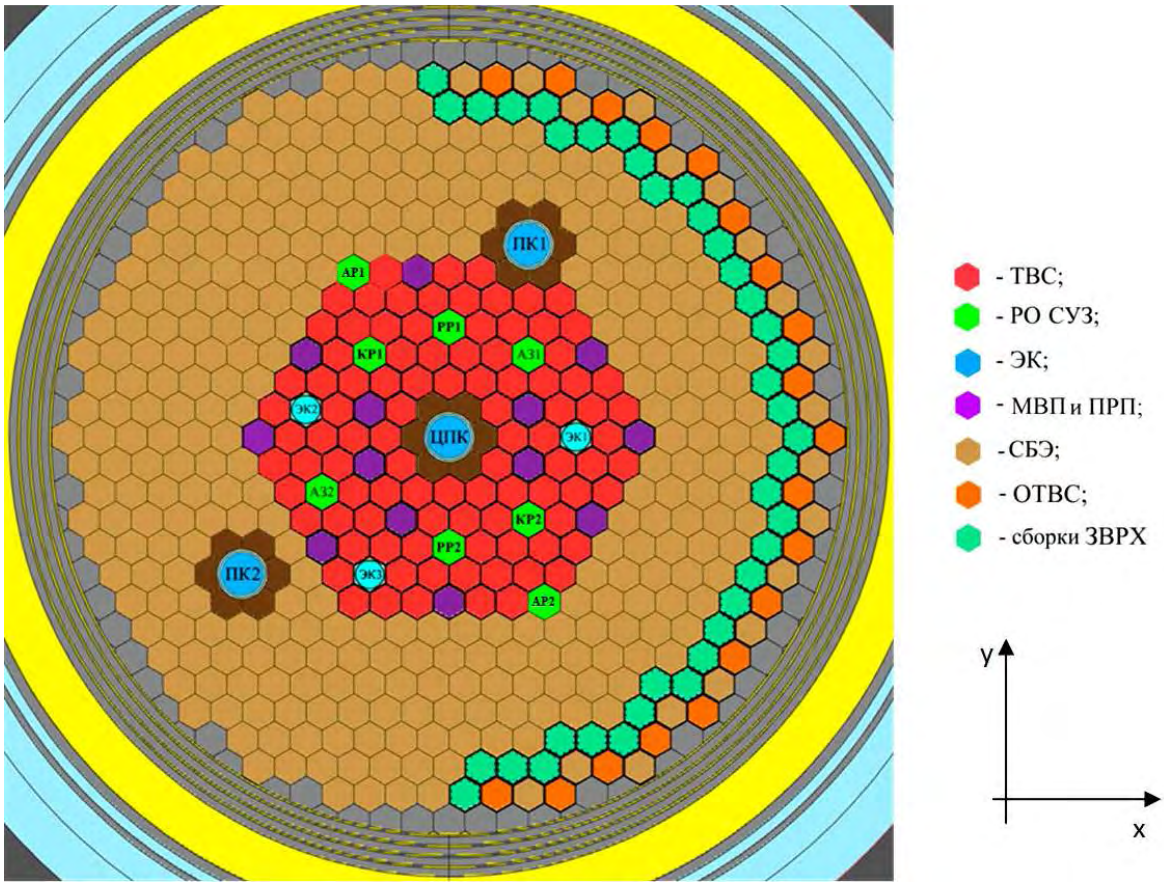

Рис. 2. Компоновка а.з. с размещёнными в ней РО и ЭУ, а также схема бокового экрана, ВРХ и его защиты (ЗВРХ): ЭК – экспериментальные каналы, МВП – материаловедческие пакеты, ПРП – пакеты радионуклидной продукции, СБЭ – сборки бокового экрана, ОТВС – отработавшие ТВС

бочего органа ручного регулирования (РО РР) при работе реактора на мощности;

– останов одного ГЦН I контура;

– потеря системного и аварийного электроснабжения.

Для демонстрации работоспособности программного комплекса PRISET-MBIR проведены тестовые расчёты переходных процессов, связанных с вводом положительной реактивности и нарушениями в системе охлаждения РУ.

2. Несанкционированное извлечение РО РР при работе реактора на мощности

При извлечении РО РР из начального состояния в а.з. вводится положительная реактивность, и начинает увеличиваться мощность реактора. При увеличении мощности выше зоны нечувствительности регулятора мощности в а.з. начинает вводиться РО автоматического регулирования (АР) для компенсации реактивности, вводимой РО РР. Так как эффективности стержней АР недостаточно для компенсации вводимого возмущения, мощность продолжает расти, что приводит к срабатыванию АЗ.

Учитывая, что при несанкционированном извлечении одного РО РР наблюдаются значительные искажения поля энерговыделения, расчёты этого режима проводились с использованием модели трёхмерной кинетики а.з.

На рис. 3 приведено поле относительного изменения энерговыделения в момент срабатывания АЗ, что наиболее наглядно показывает изменение поля энерговыделения относительно начального состояния. Из рис. 3 видно, что наибольший рост энерговыделения наблюдается в тепловыделяющих сборках (ТВС), прилегающих к ячейке, из которой извлекается РО РР, что объясняется ростом плотности потока нейтронов при извлечении РО РР.

На рис. 4, 5 приведено изменение параметров РУ (мощность реактора, расход натрия через реактор, температура стенки максимально напряжённого твэла) при несанкционированном извлечении РО РР.

При извлечении РО РР в начальный момент времени происходит рост интегральной мощности (рис. 4), который влечёт за

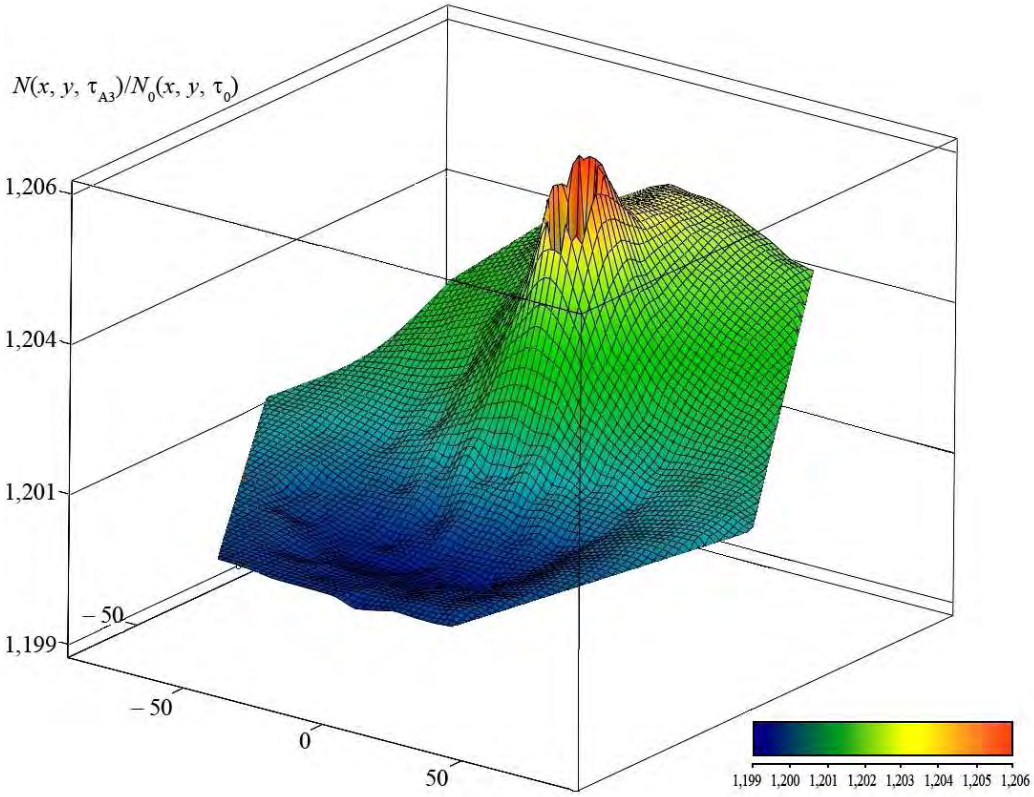

Рис. 3. Поле относительного изменения энерговыделения в а.з. РУ МБИР на третьем участке разбиения по высоте а.з. в момент срабатывания АЗ

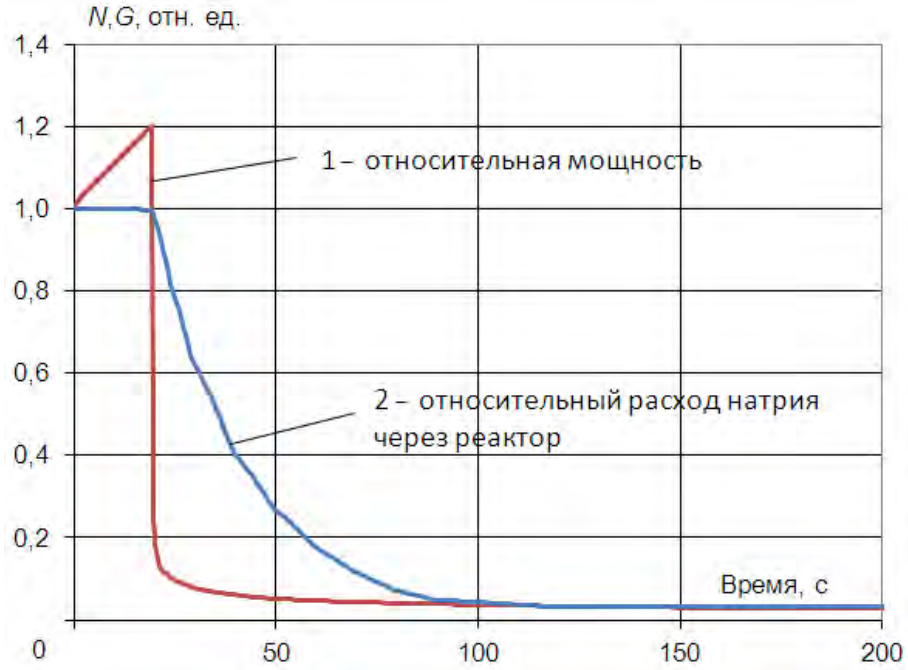

Рис. 4. Изменение относительных мощности *N* и расхода *G* натрия через реактор при несанкционированном извлечении РО РР при работе реактора на мощности

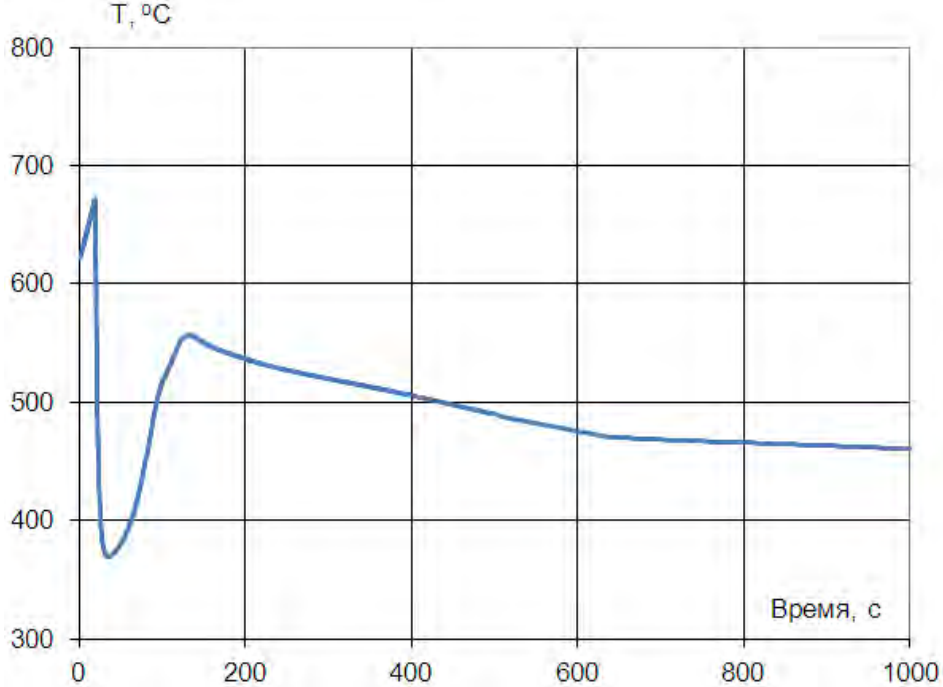

Рис. 5. Изменение температуры стенки максимально напряжённого твэла при несанкционированном извлечении РО РР при работе реактора на мощности

собой рост температур топлива, оболочек твэлов и теплоносителя в а.з. Через 19 с после начала движения РО РР мощность реактора достигает уставки срабатывания АЗ по превышению заданной мощности, равной 1,2 от номинальной.

Вследствие задержки 0,3 с ввода стержней АЗ в а.з. мощность продолжает расти и к моменту начала ввода регулирующего органа АЗ достигает значения 1,205 от номинальной мощности. После срабатывания АЗ реактор заглушается. Максимальная температура стенки самого теплонапряжённого твэла в а.з. достигает 672 °С через 19,3 с после начала исходного события (рис. 5).

Температура теплоносителя I контура на выходе реактора на 23 с достигает 525 °С.

3. Останов одного ГЦН I контура

При останове ГЦН в петле I контура РУ при работе реактора на номинальной мощности существенно изменяются условия теплоотвода от а.з. При рассмотрении аварийного режима, связанного с остановом ГЦН I контура, используется модель точечной кинетики, так как искажения поля энерговыделения в течение всего аварийного процесса практически отсутствуют.

В результате отказа одного ГЦН I контура расход через реактор начинает снижаться. При достижении уставки медленного снижения мощности (МСМ) по снижению расхода в петле I контура, равной 85 % от номинального значения, вырабатывается сигнал на срабатывание режима МСМ и в а.з. вводятся регулирующие органы СУЗ с рабочими скоростями, и реактор заглушается.

На рис. 6, 7 показаны изменения таких параметров РУ, как мощность реактора, расход натрия через реактор, температура стенки максимально напряжённого твэла при останове одного ГЦН I контура.

Снижение расхода теплоносителя через реактор влечёт за собой рост температур оболочек твэлов и теплоносителя в реакторе. Максимальная температура стенки твэла в а.з. составляет 638 °С на 4 с, что не превышает предела нормальной эксплуатации 700 °С (рис. 7). Максимальная температура натрия на выходе реактора составляет 515 °С через 15 с после начала аварийного процесса. Затем температуры стенки твэла и натрия на выходе реактора снижаются в результате снижения мощности. На выбеге ГЦН I контура происходит снижение расхода натрия, что приводит к росту температур, после чего температуры стенки твэла и натрия на выходе реактора снижаются.

4. Потеря нормального и аварийного электроснабжения

При потере нормального и аварийного электроснабжения происходит отключение насосов I и II контуров РУ, а также питательных насосов. Расхолаживание реактора обеспечивается за счёт естественной циркуляции в I контуре и контуре САОТ. При рассмотрении аварийного режима, связанного с потерей нормального и аварийного электроснабжения, применяется модель точечной кинетики, так как искажения поля

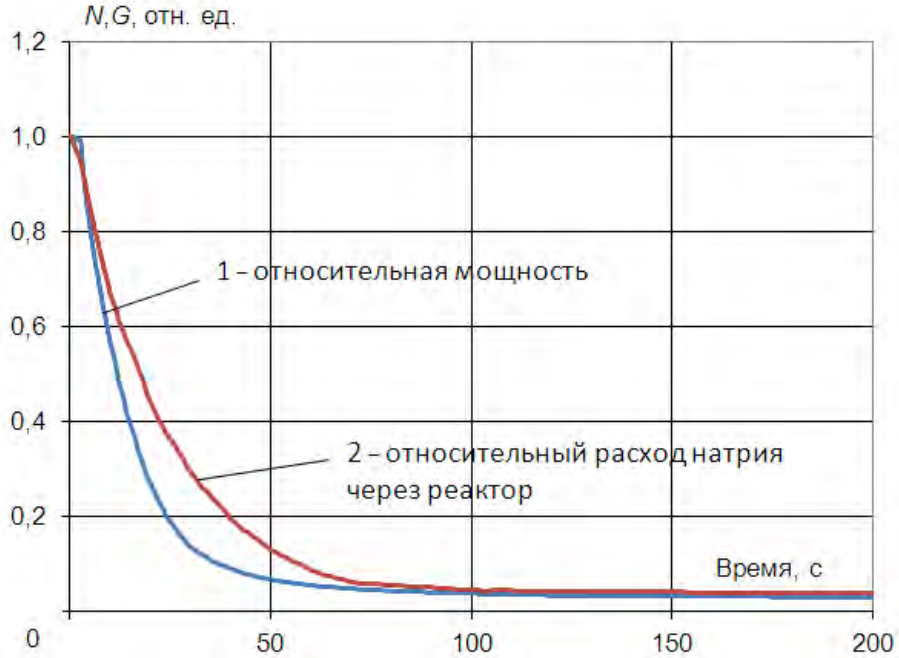

Рис. 6. Изменение относительных мощности *N* и расхода *G* натрия через реактор при останове одного ГЦН I контура

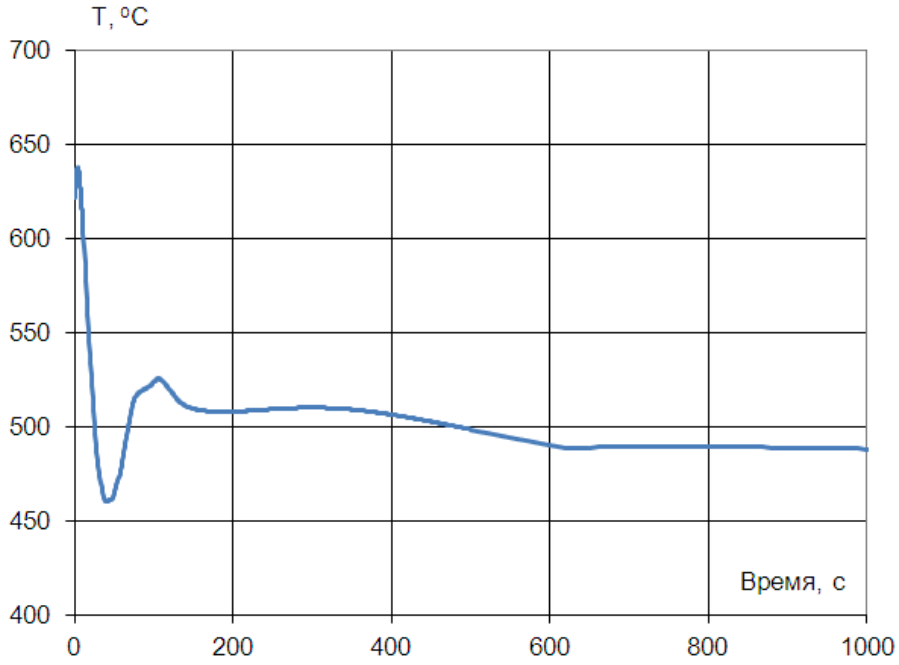

Рис. 7. Изменение температуры стенки максимально напряжённого твэла при останове одного ГЦН I контура

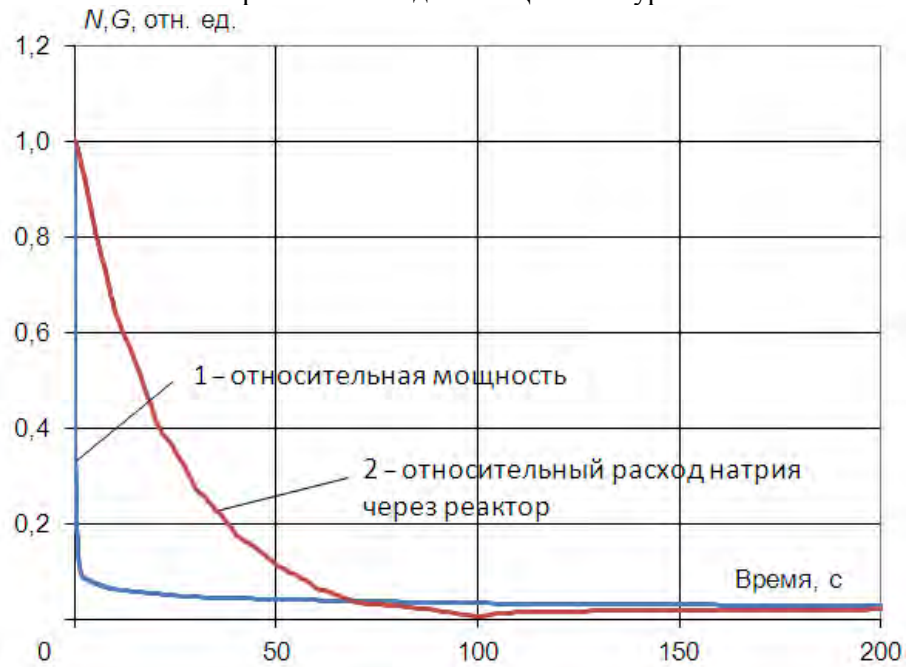

Рис. 8. Изменение относительных мощности *N* и расхода *G* натрия через реактор при потере нормального и аварийного электроснабжения

энерговыделения в течение всего аварийного процесса практически отсутствуют.

По сигналу потери нормального электроснабжения срабатывает АЗ. В результате обесточивания электромагнитных муфт в а.з. вводится один РО АЗ под действием силы тяжести и ускоряющей пружины за время не более 0,9 с, оставшиеся РО СУЗ падают в а.з. под действием силы тяжести. Предполагается, что один РО АЗ с максимальной эффективностью в а.з. не вводится. Мощность снижается, и реактор заглушается. На рис. 8, 9 показаны изменения параметров РУ при потере нормального и аварийного электроснабжения.

При полном обесточивании РУ и срабатывании АЗ в начальный момент времени происходит быстрое снижение мощности,

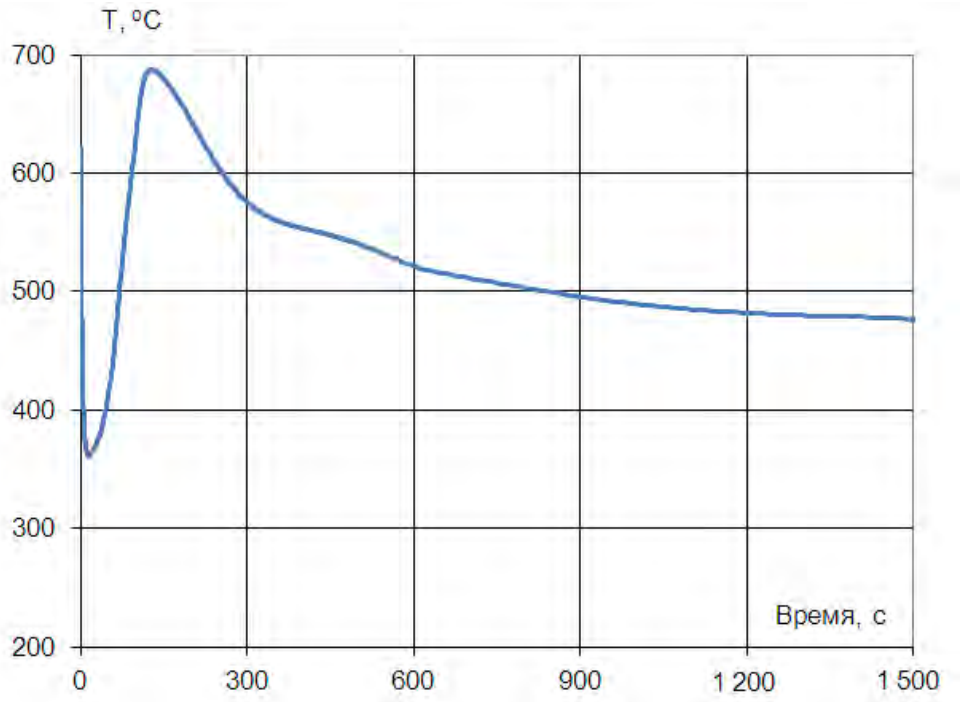

Рис. 9. Изменение температуры стенки максимально напряжённого твэла при потере нормального и аварийного электроснабжения

что вызывает снижение температур стенки максимально напряжённого твэла и теплоносителя в а.з. Затем при снижении расхода натрия на выбеге ГЦН I контура скорость снижения мощности становится меньше скорости снижения относительного расхода через реактор, что приводит к росту температур. После этого температуры оболочки твэла и натрия в а.з. снижаются.

Максимальное значение температуры стенки максимально напряжённого твэла составляет 687 °С на 129 с, что ниже предела нормальной эксплуатации 700 °С (рис. 9). Максимальное значение температуры натрия на выходе реактора не превышает номинального значения 512 °С.

Заключение

Приведено краткое описание расчётного комплекса PRISET-MBIR и расчётной модели РУ МБИР. Приведенные результаты тестовых расчётных исследований аварийных режимов показывают возможности использования связанного нейтронно-физического и теплогидравлического программного комплекса PRISET-MBIR для исследования переходных и аварийных режимов и обоснования безопасности РУ с натриевым теплоносителем.

Список литературы

1. ***Платонов И.В.***, ***Ларионов И.А.***, ***Долгов Ю.А.*** Связанный нейтронно-физический и теплогидравлический программный комплекс PRISET-MBIR для исследования переходных и аварийных режимов и обоснования безопасности // ВАНТ. Сер. Обеспечение безопасности АЭС, 2013. вып. 33, с. 59–67.

2. ***Вычислительные методы*** в физике реакторов. Сб. статей под ред. Х. Гринспенна, К. Келбера, Д. Окрента. Пер. с англ. М.: Атомиздат, 1972.

3. ***Марчук Г.И.*** Численные методы расчёта ядерных реакторов. М.: Атомиздат, 1958.

Контактная информация –
Ларионов Игорь Александрович, инженер, тел.: (499)763-03-81, e-mail: dolgov@nikiet.ru

Вопросы атомной науки и техники.
Сер. Физика ядерных реакторов, 2015, вып. 2,
с. 90–97.

УДК 621.039.51

Использование параллельных вычислений на многоядерных ЭВМ для ускорения счёта программного комплекса PRISET-MBIR

И.В. Платонов, А.В. Лопаткин, И.А. Ларионов, Ю.А. Долгов,
АО “НИКИЭТ”, 107140, Москва, Малая Красносельская ул., 2/8
Поступила в редакцию 24.11.2014 г.

Продемонстрирована возможность использования параллельных вычислений для ускорения счёта комплекса PRISET-MBIR. Для этого рассмотрены различные математические методы решения матричных уравнений больших размерностей. Приведен способ распараллеливания этих методов при помощи директив OpenMP. Показано, что применение этих методов позволяет увеличить скорость счёта. Приведенные результаты показывают эффективность применения параллельных вычислений в программном комплексе PRISET-MBIR и возможности их использования в расчётных комплексах с моделями трёхмерной нейтронной кинетики.
Ключевые слова: программный комплекс, распараллеливание, математические методы, быстродействие, ускорение счёта.

Using the Parallel Calculations on the Multiprocessor Computers to Accelerate the PRISET-MBIR Code Run. ***I.V. Platonov, A.V. Lopatkin, I.A. Larionov, Yu.A. Dolgov,*** *JSC “RDIPE”, 2/8, Malaya Krasnosel’skaya St., Moscow, 107140.*

The article demonstrates the possibility of parallel computing to accelerate calculation with PRISET-MBIR software package. Various mathematical methods for solving matrix equations of higher dimensions are discussed. It has been presented the parallelization of these methods using OpenMP directives. It has been shown that the application of these methods allows increasing speed of calculation. The results given in the article show the effectiveness of the use of parallel computing in the PRISET-MBIR software package and the possibility of their use in the calculation codes with three-dimensional models of neutron kinetics.
Key Words: Software Package, Parallelization, Mathematical Methods, Processing Speed, Acceleration of Calculation.

При использовании расчётных кодов с математическими моделями, учитывающими пространственное распределение физических свойств (модель трёхмерной нейтронной кинетики), встаёт вопрос о быстродействии таких кодов. В последнее время производительность вычислительных машин наращивается не только за счёт увеличения частоты процессора (т.е. увеличения количества операций в единицу времени), но и за счёт размещения на материнской плате компьютера нескольких процессоров. Принимая во внимание это обстоятельство, задачи по увеличению быстродействия программных комплексов можно решить путём распараллеливания алгоритмов программы.

В данной статье речь пойдёт о повышении быстродействия программного комплекса PRISET-MBIR за счёт применения в нём распараллеленных алгоритмов [1]. Для этого использована технология OpenMP (разработка OpenMP Architecture Review Board), работающая с языком программирования Fortran (компилятор Intel Visual Fortran Compiler 11.1.038).

При применении данной технологии за основу берётся последовательный код программы и при помощи вставки специальных комментариев (директив) организуется участок кода, выполняемый несколькими нитями (процессорами) одновременно. При таком способе распараллеливания исходный код программы сохраняет свою структуру, что позволяет применять его как в параллельном, так и в последовательном режимах.

Построенная таким способом программа начинается с последовательной области, которая выполняется одной нитью, далее следует выделенный директивами параллельный участок кода, выполняемый несколькими нитями, после выполнения параллельного участка кода следует синхронизация. Далее может следовать участок после-

довательного кода, после опять параллельный и так далее, количество распараллеленных участков кода в программе может быть каким угодно. Учитывая то, что время, которое затрачивается на создание и завершение параллельных нитей, существенно меньше, чем время, требуемое на выполнение функционального участка кода, частая организация параллельных нитей не окажет сильного воздействия на быстродействие кода.

Одним из важных моментов при написании такой программы является организация доступа к данным. Наличие общих данных для нескольких нитей при одновременном несогласованном доступе может привести к конфликту или так называемой "гонке данных", при которой результат выполнения программы будет непредсказуем.

Для ускорения программного комплекса PRISET-MBIR необходимо рассмотреть его структуру и выделить в ней наиболее трудоёмкие с точки зрения затрат машинного времени места.

Описание структуры и модулей расчётного комплекса приведено в работе [2]. В данной статье ограничимся описанием модулей, отвечающих за работу трёхмерной нейтронной кинетики как самой медленной части комплекса.

Расчёт трёхмерных полей энерговыделения основан на решении нестационарного уравнения переноса нейтронов в квазистатическом приближении:

$$\frac{1}{\mathrm{v}(g)}\frac{\partial\Phi(\mathbf{r},\tau,g)}{\partial\tau}=\left[-\mathrm{L}+\mathrm{K}_f+\mathrm{K}_s\right]\Phi\left(\mathbf{r},\tau,g\right)+\mathrm{S}_d\left[\Phi\left(\mathbf{r},\tau,g\right)\right], \quad (1)$$

где оператор L – убыль нейтронов за счёт поглощения и утечки; оператор K_f – прибыль нейтронов за счёт мгновенного деления; оператор K_s – прибыль нейтронов за счёт замедления из вышестоящих энергетических групп; оператор S_d – источник запаздывающих нейтронов.

Поток нейтронов представляется в виде произведения двух функций – функции формы поля (форм-функции) и амплитудной функции $\Phi(\mathbf{r}, g, \tau) = \Psi(\mathbf{r}, g, \tau)\mathrm{T}(\tau)$. Форм-функция определяется из стационарного решения уравнения (1). Для этого уравнение (1) приводится к виду

$$\mathrm{div}\left[D(\mathbf{r},\tau,g)\nabla\left(\Psi(\mathbf{r},\tau,g)\right)\right]-\Sigma_d(\mathbf{r},\tau,g)+\sum_{l=1}^{G-1}\Sigma_r^{l\to g}\Psi(\mathbf{r},\tau,l)=-\frac{\chi(g)}{\lambda}\sum_{g'=1}^{G}\nu_f(\mathrm{g}')\Sigma_f(\mathbf{r},\tau,g')\Psi(\mathbf{r},\tau,g') \quad (2)$$

и операторному виду $\left[\mathrm{L}-\mathrm{K}_s\right]\mathbf{\Psi}=\frac{1}{\lambda}\mathrm{K}_f\mathbf{\Psi}$.

Уравнение (2) может быть решено итерационным способом

$$\left[\mathrm{L}-\mathrm{K}_s\right]\mathbf{\Psi}^{k+1}=\frac{1}{\lambda^k}\mathrm{K}_f\mathbf{\Psi}^k, \quad (3)$$

где верхний индекс k – номер итерации. Решением уравнения (3) являются число λ и совокупность функций $\mathbf{\Psi}(\mathbf{r}, g = 1...G)$, которые при подстановке в уравнение (2) обращают его в верное тождество.

В математике данная задача называется задачей на собственное число. При этом

$$\lambda=\lim_{k\to\infty}\lambda^k=\lim_{k\to\infty}\frac{\sum_{g=1}^{G}\int_V\nu_f(g)\Sigma_f(\mathbf{r},g)\Psi^{k+1}(\mathbf{r},g)dV}{\sum_{g=1}^{G}\int_V\nu_f(g)\Sigma_f(\mathbf{r},g)\Psi^{k}(\mathbf{r},g)dV},\ \Psi(\mathbf{r},g)=\lim_{k\to\infty}\Psi^k(\mathbf{r},g). \quad (4)$$

Для инициализации итерационного процесса необходимо задать начальные значения числа λ^0 и функции $\mathbf{\Psi}^0(\mathbf{r}, g = 1...G)$. Далее на каждой итерации по уравнению (2) производится последовательный расчёт $\mathbf{\Psi}(\mathbf{r}, g)$ всех групп нейтронов $g = 1...G$ и по формуле (4) вычисляется новое значение λ. Итерации продолжаются до тех пор, пока значение λ не достигнет заданной точности ε. Полученное значение числа λ имеет физический смысл эффективного коэффициента размножения $\mathrm{K}_{эф}$, а функция $\Psi(\mathbf{r}, g,\tau)$ – форм-функции нейтронного поля группы g.

Для решения группового уравнения (2) оно записывается в конечно-разностном виде для всех узлов расчётной сетки, которая выбирается таким образом, чтобы наиболее

точно соответствовать геометрии активной зоны реактора. На рис. 1 представлен фрагмент расчётной сетки реактора МБИР.

После приведения уравнения (2) к конечно-разностному виду [2] задача сводится к решению матричного уравнения

$$\begin{bmatrix} A_{11} & \cdots & A_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{N1} & \cdots & A_{NN} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \Psi_1 \\ \vdots \\ \Psi_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_N \end{bmatrix} \qquad (5)$$

или в операторном виде $\mathbf{A} \times \mathbf{\Psi} = \mathbf{b}$, где $\mathbf{A}$ – матрица коэффициентов, полученных при разложении уравнения (2); $\mathbf{\Psi}$ – вектор-столбец неизвестных; $\mathbf{b}$ – вектор-столбец свободных членов.

Решая матричное уравнение, находим вектор-столбец неизвестных значений форм-функции $\mathbf{\Psi} = \mathbf{A}^{-1} \times \mathbf{b}$.

Размерность матрицы зависит от количества точек расчётной сетки, т.е. от количества ячеек, из которых собрана активная зона реактора МБИР. Для расчётной сетки МБИР матрица $\mathbf{A}$ имеет размерность, близкую к 6 000×6 000.

Решение систем алгебраических уравнений больших размерностей наиболее удобно получать итерационными методами, так как применение прямых методов требует большого количества операций и на вычисления одной группы нейтронов уходит слишком много времени, что отрицательно сказывается на быстродействии расчётного комплекса. При разработке программного комплекса рассматривались только итерационные методы: верхней релаксации, Зейделя (частный случай метода релаксации) и Якоби (разновидность метода простой итерации).

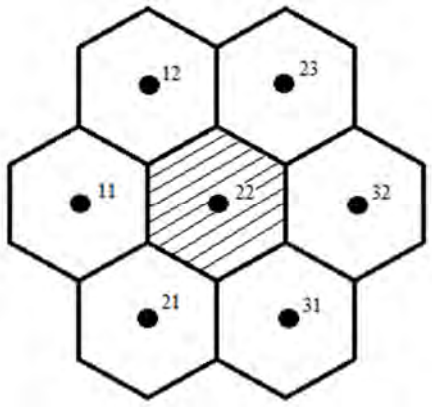

Рис. 1. Фрагмент расчётной сетки реактора МБИР

Метод Якоби – одна из разновидностей метода простой итерации. Для построения итерационной схемы система уравнений (5) приводится к следующему виду:

$$\left.\begin{aligned} &\mathbf{\Psi}^{k+1} = \mathbf{B} \times \mathbf{\Psi}^{k} + \mathbf{g}; \\ &\mathbf{B} = -\mathbf{D}(\mathbf{L} + \mathbf{U}); \\ &\mathbf{g} = -\mathbf{D}\mathbf{b}, \end{aligned}\right\} \qquad (6)$$

где k – номер текущей итерации.

Матрица $\mathbf{D}$ имеет на главной диагонали обратные значения элементов, стоящих на главной диагонали матрицы $\mathbf{A}$. Матрицы $\mathbf{L}$ и $\mathbf{U}$ содержат соответственно элементы верхнего и нижнего треугольников матрицы $\mathbf{A}$. В поэлементном виде схема (6) представляется следующей формулой:

$$\Psi_i^{k+1} = \frac{1}{A_{i,i}} \left[b_i - \sum_{j \neq i}^{N} A_{i,j} \Psi_i^k \right], \; i = 1 \ldots N. \qquad (7)$$

Анализ последовательного алгоритма (7) показывает, что наиболее затратным по количеству операций на k-й итерации является перемножение матрицы $\mathbf{A}$ на столбец текущего приближения вектора $\mathbf{\Psi}$, и можно распараллелить вычисление этой суммы. Кроме этого видно, что новые значения вектора $\mathbf{\Psi}$, вычисляемые на $k + 1$ итерации, в формуле (7) выражены в явном виде. Это позволяет вычислять компоненты вектора $\mathbf{\Psi}^{k+1}$ одновременно, независимо друг от друга. Схема распараллеливания метода Якоби показана на рис. 2.

В приведенной выше схеме реализовано параллельное вычисление компонентов нового приближения вектора $\mathbf{\Psi}$ на k-й итерации. В параллельной области инициализируется N_s потоков. Каждому потоку определяется m итераций из общего числа N. Для более равномерной загрузки потоков использовано динамическое разделение итераций, при котором порция итераций каждого потока m уменьшается с некоторого начального значения ($m = N/N_s$) пропорционально количеству ещё невыполненных итераций.

Для организации доступа к данным из потоков переменные Ψ^k (компоненты вектора $\mathbf{\Psi}$ текущего приближения), Ψ^{k+1} (компоненты вектора $\mathbf{\Psi}$ нового приближения) и

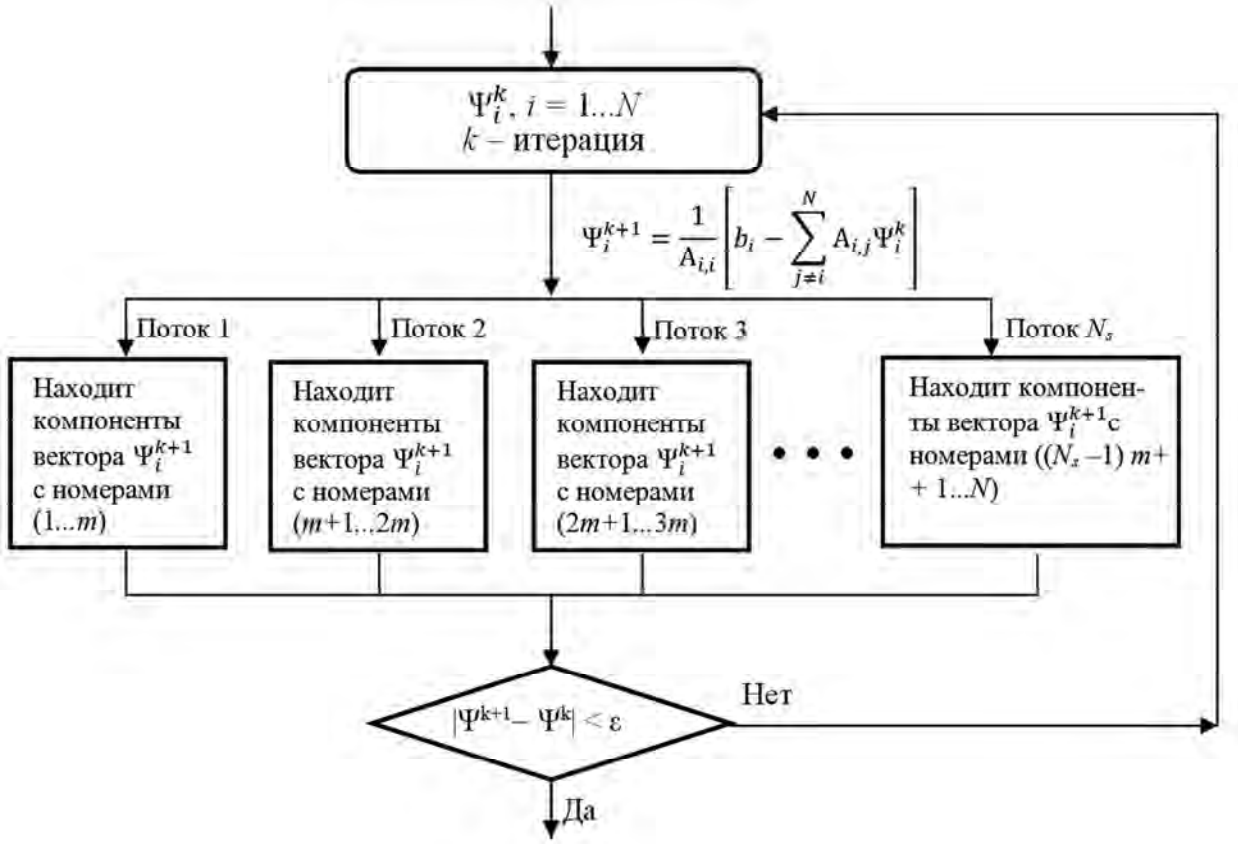

Рис. 2. Схема распараллеливания метода Якоби

b_i (компоненты вектора свободных членов) объявлены как общие (*shared*), чтобы каждая нить имела возможность считывать и записывать свои компоненты векторов. Значение суммы $\sum_{j\neq i}^{N} A_{i,j}\Psi_j^k$ объявлено частным (*private*), поскольку в различных потоках эта сумма принимает разное значение.

Несмотря на простоту и возможность полного распараллеливания алгоритма, метод Якоби обладает весьма малой скоростью сходимости и для достижения желаемой точности решения приходится совершать большое количество операций. Поэтому рассмотрен ещё один итерационный метод – метод верхней релаксации.

Метод верхней релаксации является разновидностью итерационных одношаговых методов и записывается в следующем виде: $(\mathbf{D}+\omega\mathbf{L})\left(\mathbf{\Psi}^{k+1}-\mathbf{\Psi}^k\right)/\omega+\mathbf{A}\mathbf{\Psi}^k=\mathbf{b}$.

Матрицы **D** и **L** получаются из разложения матрицы **A** на диагональную (**D**), верхний и нижний треугольники:

$$\mathbf{A} = \mathbf{D} + \mathbf{L} + \mathbf{U}.$$

Для сходимости данного метода достаточным условием служит выполнение следующих условий: матрица **A** симметрична и положительно определена. Последнее условие можно заменить на другое – матрица должна иметь доминирующую главную диагональ

$$|A_{i,i}| > \sum_{j\neq i}^{N} |A_{i,j}|. \qquad (8)$$

Симметричность матрицы следует из условия прозрачности границ ячеек расчётной сетки (количество нейтронов, покинувших объём ячейки № 22 в направлении ячейки № 32, равно количеству нейтронов, прибывших в объём ячейки № 32 из ячейки № 22, см. рис. 1). Выполнение условия доминирования главной диагонали становится очевидным при разложении уравнения (2) в конечно-разностный вид [2].

Для строки i матрицы **A** на побочных диагоналях расположены элементы, определяющие перетечки нейтронов из расчётного объёма i в соседние ячейки. На главной диагонали расположен элемент, определяющий суммарную перетечку нейтро-

нов из расчётного объёма i, а также поглощение нейтронов в данном объёме. Таким образом, элемент главной диагонали всегда отличается от суммы элементов побочной диагонали на величину сечения Σ_d увода нейтронов.

Поэлементный последовательный алгоритм метода верхней релаксации представлен следующим уравнением:

$$\mathrm{A}_{i,i}\Psi_i^{k+1} = -\omega\sum_{j=1}^{i-1}\mathrm{A}_{i,j}\Psi_j^{k+1} + (1-\omega)\mathrm{A}_{i,i}\Psi_i^k - \\ -\omega\sum_{j=i+1}^{N}\mathrm{A}_{i,j}\Psi_j^k + \omega b_i. \qquad (9)$$

Новые значения компонентов вектора $\mathbf{\Psi}^{k+1}$ с номерами меньше i вычисляются с использованием уже полученных компонентов вектора $\mathbf{\Psi}^{k+1}$. Компоненты вектора $\mathbf{\Psi}^{k+1}$ с номерами, большими или равными i, вычисляются с использованием предыдущего приближения $\mathbf{\Psi}^k$.

Напрямую распараллелить процесс вычисления нового приближения вектора $\mathbf{\Psi}$ не представляется возможным, так как особенностью данного метода является необходимость в строго последовательном осуществлении итераций по номерам i и последовательном вычислении элементов нового приближения вектора $\mathbf{\Psi}$. Тем не менее возможно распараллелить процесс вычисления одного (i-го) элемента нового приближения вектора $\mathbf{\Psi}$.

Анализ формулы (9) показывает, что с точки зрения машинного времени наиболее затратными являются операции вычисления сумм. Есть два способа распараллеливания процесса вычисления i-го элемента вектора $\mathbf{\Psi}^{k+1}$.

Первый способ состоит в применении конечного, неитеративного параллелизма. Организуются два потока, которые вычисляют стоящие в формуле (9) суммы. Существенным недостатком этого способа является неполное использование вычислительных ресурсов ЭВМ, поскольку будет задействовано только два потока.

Второй способ заключается в распараллеливании самого процесса вычисления указанных сумм. Данный способ более предпочтителен для применения, так как для вычисления сумм будет использовано максимальное количество доступных потоков, что очень удобно при работе с матрицами больших размерностей. Схема распараллеливания метода релаксации дана на рис. 3.

Приведенный выше отрывок программы состоит из двух идущих друг за другом параллельных областей. В первой области вычисляется произведение нового приближения вектора $\mathbf{\Psi}$ на матрицу $\mathbf{A}$ (первая сумма формулы (9)). В параллельной области инициализируются N_s потоков. Каждому потоку определяется m итераций из общего числа (i – 1). Распределение итераций по потокам осуществляется статически, при этом все итерации цикла делятся между нитями поровну ($m = (i - 1)/N_s$).

Каждый поток вычисляет значение суммы для своих номеров и записывает это значение в свою локальную переменную (объявленную *private*). При выходе из параллельной области все потоки суммируют значения своих локальных переменных, что даёт значение суммы по всем элементам (1...i – 1). Аналогичным способом вычисляется значение второй суммы уравнения (9).

Скорость сходимости релаксационного метода зависит от выбора ускоряющего параметра ω. При ω = 1 (метод Зейделя) для нахождения решения требуется порядка $O(N^2)$ итераций. При выборе значения параметра ω, равного оптимальному, сходимость метода улучшается и для нахождения решения требуется уже $O(N)$ итераций. Найти оптимальное значение ускоряющего параметра можно при помощи следующей формулы [3]:

$$\omega_{\text{опт}} = 2\Big/\left(1+\sqrt{1-\rho^2(\boldsymbol{\xi})}\right), \boldsymbol{\xi} = \mathbf{D}^{-1}(\mathbf{L}+\mathbf{U}). \quad (10)$$

Величина ρ в формуле (10) называется спектральным радиусом матрицы $\boldsymbol{\xi}$. По определению – это максимальное по модулю собственное число матрицы $\boldsymbol{\xi}$. Для нахождения спектрального радиуса использован степенной метод, который также распараллелен.

Пусть числа $\mu_1 ... \mu_N$ являются собственными числами матрицы $\boldsymbol{\xi}$. Для определённости будем считать $|\mu_1| > |\mu_2| > |\mu_3| > ... > |\mu_N|$. Тогда для нахождения числа μ_1 строится

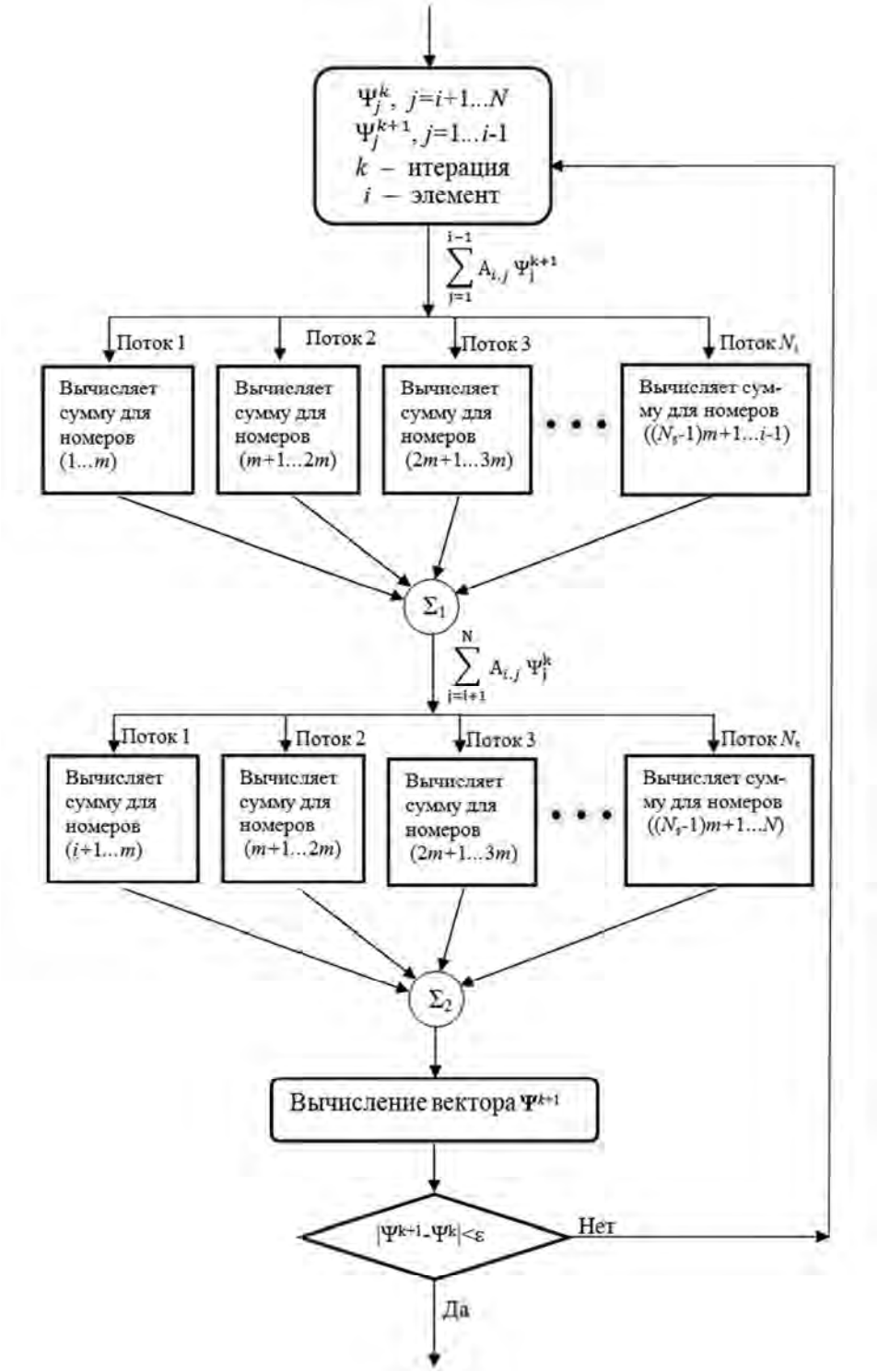

Рис. 3. Схема распараллеливания метода релаксации

итерационная схема

$$\boldsymbol{\eta}^{k+1} = \boldsymbol{\xi}\boldsymbol{\eta}^k\,; \qquad (11)$$

$$\mu_1 = \eta_i^{k+1}/\eta_i^k,\ i = 1\ldots N, \qquad (12)$$

где k – номер итерации, $\boldsymbol{\eta}$ – произвольный ненулевой вектор.

Определить число μ_1 можно по любой координате векторов $\boldsymbol{\eta}^{k+1}$ и $\boldsymbol{\eta}^k$. Также можно использовать среднеарифметическое значение чисел $\mu_1(i)$, определённых для всех N элементов.

Итерации останавливаются, когда отличие μ_1 соседних итераций становится меньше заданной точности ε.

В данном методе наиболее затратные, с точки зрения машинного времени, опера-

ции перемножения матрицы ξ на вектор $\boldsymbol{\eta}$, а также вычисление среднего значения μ_1.

Распараллеленный алгоритм степенного метода состоит из двух параллельных областей. В первой параллельной области осуществляется умножение текущего приближения вектора $\boldsymbol{\eta}$ на матрицу ξ. Организуётся N_s потоков, между которыми разделяется операция матричного умножения. Для равномерной загрузки потоков применено динамическое разделение итераций. Для организации доступа к данным текущее приближение вектора $\boldsymbol{\eta}^k$ и следующее приближение вектора $\boldsymbol{\eta}^{k+1}$ объявлены общими (*shared*), чтобы нити имели возможность осуществлять операции считывания и записи своих элементов.

Во второй параллельной области вычисляется среднее значение μ_1. Значения предыдущего и текущего приближений вектора $\boldsymbol{\eta}$ объявлены общими. Каждый поток вычисляет значение суммы $\sum_i \frac{\eta_i^{k+1}}{\eta_i^k N}$, которое записывается в своей локальной переменной. При выходе из параллельной области все потоки складывают значения своих локальных переменных, что даёт среднее значение μ_1.

Определённое по формуле (10) оптимальное значение ускоряющего параметра метода релаксации зависит от спектрального радиуса матрицы ξ, которая состоит из элементов матрицы $\mathbf{A}$ уравнения (5), которая в свою очередь состоит из элементов, зависящих от нейтронно-физических свойств расчётных элементов и геометрических характеристик сетки. В процессе счёта динамики нейтронно-физические свойства могут изменяться (перемещение РО СУЗ, изменение температур), что приведёт к изменению спектральных свойств матрицы ξ и необходимости пересчёта $\omega_{опт}$.

Для определения зависимости $\omega_{опт}$ от нейтронно-физических свойств проведены расчёты оптимального значения ускоряющего параметра для трёх вариантов положения РО СУЗ, которые показали, что изменение положения РО СУЗ не оказывает существенного влияния на оптимальное значение ускоряющего параметра. Исходя из этого, задачу определения оптимального значения ускоряющего параметра целесообразно решить один раз для текущей загрузки активной зоны, а значения $\omega_{опт}$ для всех групп нейтронов хранить в файле на жёстком диске и считывать при последующих запусках программы.

Для демонстрации эффекта, получаемого от распараллеливания, ниже приведены результаты расчётного (рис. 4 и 5) исследования влияния числа задействованных потоков на скорость счёта. Исследования проводились на 4-процессорной ЭВМ.

Полученные данные показывают, что метод релаксации при выборе значения ускоряющего параметра, равного оптимальному, обеспечивает самую высокую

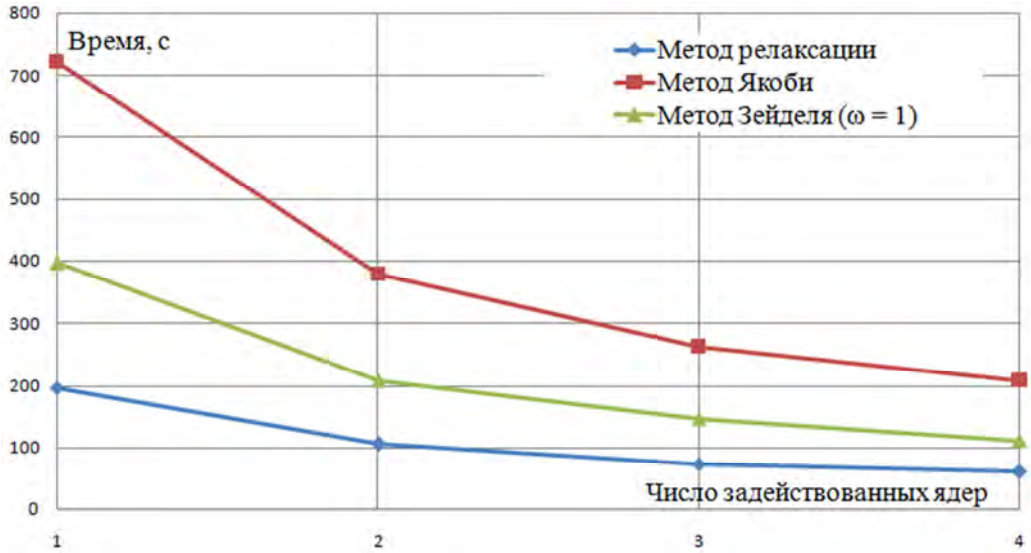

Рис. 4. Зависимость времени расчёта от числа задействованных ядер

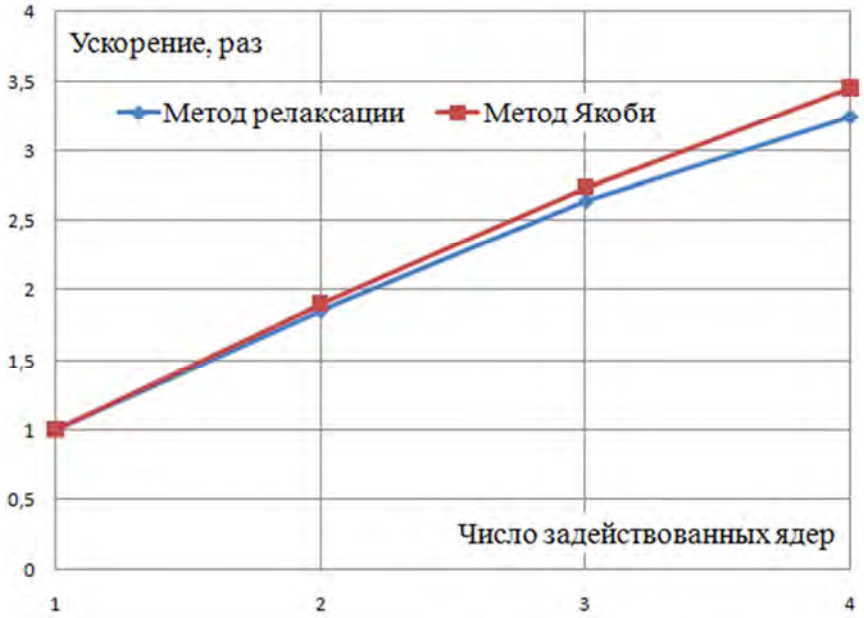

Рис. 5. Зависимость ускорения счёта от числа задействованных ядер

скорость сходимости и является предпочтительным для применения его в расчётном комплексе. При этом метод Якоби показывает большее ускорение при распараллеливании, чем метод релаксации.

Учитывая эти обстоятельства, итерационную схему (3) определения форм-функции можно построить, комбинируя метод релаксации с методом Якоби. Начальные итерации, когда величина ошибки в определении форм-функции достаточно велика, необходимо использовать для решения уравнения (5) методом релаксации, чтобы быстро уменьшить ошибку, а при достижении ошибкой некоторой пороговой величины можно переходить на счёт методом Якоби.

Заключение

Применение параллельных алгоритмов повысило быстродействие нейтронно-физического теплогидравлического кода PRISET-MBIR, а также позволило полноценно использовать вычислительные ресурсы современных ЭВМ.

Рассмотрены математические методы решения матричных уравнений больших размерностей – метод релаксации и метод Якоби. Показан способ распараллеливания этих методов. Показано, что оптимизация метода релаксации позволяет существенно увеличить скорость счёта. Приведенные результаты показывают эффективность применения параллельных вычислений в программном комплексе PRISET-MBIR и возможности их использования в расчётных комплексах с моделями трёхмерной нейтронной кинетики. Применение суперкомпьютеров позволит существенно сократить время счёта расчётного комплекса.

Список литературы

1. ***Антонов А.С.*** Параллельное программирование с использованием технологии OpenMP: Учебное пособие. М.: МГУ, 2009.

2. ***Платонов И.В., Ларионов И.А., Долгов Ю.А.*** Связанный нейтронно-физический и теплогидравлический программный комплекс PRISET-MBIR для исследования переходных и аварийных режимов и обоснования безопасности // ВАНТ. Сер. Обеспечение безопасности АЭС, 2013, вып. 33, с. 59–67.

3. ***Вычислительные методы*** в физике реакторов. Сб. статей под ред. Х. Гринспенна, К. Келбера, Д. Окрента. Пер. с англ. М.: Атомиздат, 1972.

Контактная информация –
Платонов Игорь Владимирович, н. с., тел.: 8 (499)763-03-81, e-mail: dolgov@nikiet.ru

Вопросы атомной науки и техники.
Сер. Физика ядерных реакторов, 2015, вып. 2,
с. 98–105.

УДК 621.039.54

Анализ области применимости термодинамических расчётов при проектировании твэлов с нитридным топливом

А.С. Иванов, А.А. Русинкевич, Г.В. Белов,
НИЦ “Курчатовский институт”, 123182, Москва, пл. Курчатова, 1,
Ю.А. Иванов,
ВНИИНМ им. А.А. Бочвара, 123098, Москва, ул. Рогова, 5а
Поступила в редакцию 30.10.2014 г.

Проведен анализ областей применимости термодинамических расчётов в процессе разработки нитридного топлива. Выполнены оценки характерных значений параметров, непосредственно влияющих на время установления концентрационного равновесия: скорость генерации нуклидов; характерные времена установления локального равновесия в рассматриваемой области температур; характерное время установления стационарного температурного профиля; характерное время установления квазистационарного поля концентраций на размерах, сопоставимых с размерами топливной таблетки. Показано, что равновесные термодинамические расчёты могут быть использованы для оценки химического и фазового состава топлива, однако для описания процессов переноса как в конденсированной, так и в газовой фазе необходима разработка двухслойной кинетической модели. При этом в горячей области в центральной части твэла для определения состава необходимо принимать во внимание диффузионный перенос.
Ключевые слова: нитридное топливо, термодинамика, продукты деления.

Analysis of the Applicability Range of Thermodynamic Calculations at the Design of Nitride Fuel.
A.S. Ivanov, A.A. Rusinkevich, G.V. Belov, *NRC “Kurchatov Institute”, 1, Kurchatov Sq., Moscow, 123182,*
Yu.A. Ivanov, *VNIINM Bochvar, 5a, Rogov St., Moscow, 123098.*
The paper presents the analysis of the applicability areas of the thermodynamic calculations in the development of nitride fuel. Characteristic values of parameters that directly affect the time of establishment of the equilibrium concentration were evaluated: rate of nuclides generation; characteristic times of the establishment of local equilibrium in the temperature range; the characteristic time of the stationary temperature profile; the characteristic time for the establishment of a quasi-stationary concentration field on the dimensions comparable to the size of the fuel pellet. It is shown that the equilibrium thermodynamic calculations can be used to evaluate the chemical and phase composition of the fuel, however, to describe transport processes condensed and in gaseous phases it is necessary to develop two-layer kinetic model. In the hot part, in the center of fuel, for determining the composition diffusive transport should be taken into account.
Key Words: Nitride Fuel, Thermodynamics, Fission Products.

Введение

Проблемы, которые приходится решать сегодня в науке и технике, зачастую уже нельзя решить с применением традиционных методов и средств. Во многих случаях для изучения процесса или явления приходится одновременно использовать несколько моделей. Такой подход к исследованию сложных систем в зарубежной литературе получил название многофизического (multiphysics) [1…3]. Речь идёт о моделировании взаимосвязанных процессов, которые имеют разную природу, например, процессы тепло- и массопереноса, сопровождающихся ядерными и химическими превращениями.

Ядерное топливо и конструкционные материалы, применяемые при изготовлении ядерных реакторов, являются сложными объектами с точки зрения термодинамического моделирования. Поэтому, несмотря на усилия многих исследователей, занимающихся решением проблем ядерной энергетики, до сих пор не существует надёжных методов, позволяющих прогнозировать состояние ядерного топлива на основании модельных представлений.

Протекание ядерных реакций во время работы реактора сопровождается образова-

нием новых химических элементов, которые вступают во взаимодействие с топливом и конструкционными материалами. С точки зрения термодинамики изучаемая система представляет собой многокомпонентный гетерогенный объект, образованный сотнями химических соединений, которые могут образовывать растворы. По мере выгорания топлива его элементный состав непрерывно меняется, что выводит систему из состояния равновесия. С другой стороны, протекающие в системе химические реакции стремятся привести её в состояние равновесия.

Образующиеся в системе конденсированные растворы, строго говоря, нельзя считать идеальными, список веществ, входящих в состав тех или иных растворов, тоже неизвестен. Поэтому при создании термодинамической модели ядерного топлива необходимо принять допущение о том, какие вещества могут образовывать растворы, а также выбрать модели растворов и определить параметры этих моделей.

Существующие средства расчёта равновесного состава сложных термодинамических систем снабжены базами данных по термодинамическим свойствам индивидуальных веществ. Однако любая база данных содержит сведения об ограниченном числе веществ. Результаты моделирования во многом зависят от полноты базы и качества содержащейся в ней информации.

Отсутствие в базе данных о веществе, которое в ощутимом количестве присутствует в равновесной системе, может существенно исказить результаты моделирования. С другой стороны, включение в базу ненадёжных данных может резко снизить достоверность результатов термодинамического моделирования.

Отдельного рассмотрения заслуживает вопрос о возможности описания свойств ядерного топлива с использованием математического аппарата равновесной термодинамики.

Вообще говоря, состояние термодинамического равновесия предполагает отсутствие каких-либо потоков (массы, энергии, импульса) в рассматриваемой системе. В технологических процессах при изготовлении смешанного нитридного топлива реализовать такое состояние системы вполне реально. Однако в твэле в рабочем состоянии из-за существующих температурных перепадов имеют место процессы переноса тепла. Кроме того, вследствие сильной зависимости некоторых констант химических реакций от температуры будет иметь место неоднородное распределение компонентов топлива и продуктов деления по таблеткам, что приводит к возникновению диффузионных потоков вещества. Всё это накладывает существенные ограничения на применение термодинамики к исследуемому объекту и требует тщательного анализа области её применимости в рабочем состоянии.

Чтобы исследовать методами равновесной термодинамики неравновесный процесс, протекающий в некоторой протяжённой области, эту область разбивают на достаточно мелкие части (термодинамические системы), в каждой из которых достигается состояние равновесия, и производят расчёт состава и свойств для каждой из них. На основании полученных результатов определяются характеристики процесса.

Если в системе существует частичное равновесие, то при проведении расчёта состава следует учитывать ограничения, обусловленные кинетическими факторами. Для этой цели можно исключить из рассмотрения часть веществ или зафиксировать их концентрации, если известно, что химические реакции с их участием не успевают пройти. Иными словами, в этом случае часть реакций замораживается. В данной работе выполнены оценки характерных врмён релаксации полей температур и концентраций и проведен анализ областей применимости термодинамических расчётов в процессе разработки нитридного топлива.

1. Оценки характерных времён процессов релаксации

В рассматриваемой задаче концентрация какого-либо компонента в окрестности выбранной точки топлива изменяется по трём основным причинам:

а) генерация атомов за счёт ядерных реакций,

б) химическое взаимодействие,

в) диффузионный перенос.

Чтобы оценить возможность использования термодинамических расчётов в тех или иных оценках работоспособности топлива, необходимо ранжировать протекающие процессы установления равновесия по времени [4].

Ядерная генерация изменяет концентрации компонентов, играет роль источника и не является релаксационным процессом. Однако при исследовании изменения химического состава в окрестности какой-либо точки топлива за счёт ядерной генерации возникает вопрос о времени установления локального равновесия, т.е. времени, за которое установится определённая концентрация и окажется возможным введение статистических термодинамических величин. Локальное равновесие в окрестности некоторой точки определяется характерным размером области, содержащей ~ $10^2 \ldots 10^3$ частиц рассматриваемого сорта. Этому значению соответствует замена статистических факториальных выражений термодинамических функций на их Стирлинговскую логарифмическую аппроксимацию с погрешностью порядка нескольких процентов.

Пусть скорость генерации компонента (i) равна G_i ат/(с·м^3) и не зависит от времени, температуры и т.п. Предположим, что химические реакции, имеющие место в выгорающем топливе, в рассматриваемой области температур идут достаточно быстро. Ниже приведём некоторые соображения в пользу этого предположения. За время Δt образуется $n = G_i \Delta t$ частиц в м^3. Положим $nv = 10^3$, где v – объём, занимаемый 10^3 частицами. Линейный размер этого объёма

$$l = \sqrt[3]{v} = 10/\sqrt[3]{n}. \qquad (1)$$

На этом размере должно быть реализовано диффузионное перемешивание частиц, которое характеризуется временем

$$\tau = l_{\text{дифф}}^2/D_i;\ l_{\text{дифф}} = \sqrt{\tau D_i}, \qquad (2)$$

где $l_{\text{дифф}}$ – диффузионная длина; D_i – коэффициент диффузии i-го компонента в топливе. Если $l_{\text{дифф}} \sim l$, то в рассматриваемом объёме установится состояние, близкое к равновесному. Следовательно, условие установления локального равновесия имеет вид

$$\sqrt{\tau D_i} = 10/\sqrt[3]{G_i \Delta t}. \qquad (3)$$

Положим $\tau = \Delta t = \tau^*$. При этом из соотношения (3) легко получить время установления локального равновесия

$$\tau^* = \sqrt[5]{10^6/(D_i^3 G_i^2)}. \qquad (4)$$

Это время является минимальным, на котором имеет смысл рассматривать термодинамику данной системы. Для конкретных оценок необходимо знать как скорости генерации элементов, так и их коэффициенты диффузии в смешанном топливе. Что касается скорости образования элементов, то она определяется конструкцией реактора, скоростью выгорания топлива и может быть получена из нейтронно-физического расчёта. В частности, в нашем случае скорость генерации основных элементов составляет ~ $10^{18} \ldots 10^{19}$ ат/(с·м^3). Приведём оценки τ^* в крайних точках рассматриваемого температурного диапазона (600…1 500 ^{o}C). Сведения о коэффициентах диффузии продуктов деления в смешанном (U, Pu)N топливе весьма ограничены.

В нашем распоряжении имеются данные для диффузии Xe в приемлемой области температур (1 573…2 673 K) в UN [5, 6]. Кроме того, имеются сведения о диффузионных параметрах (энергии активации Q и предэкспоненциальные множители D_o для самодиффузии урана, плутония и азота), т.е. сведения о подвижности соответствующих вакансий в смешанном уран-плутониевом нитриде. Однако использование этих данных для оценок диффузии металлических продуктов деления приведёт к сильно заниженным результатам, так как в этом случае мы пренебрегаем наиболее существенными каналами переноса, такими как поры, границы зёрен и т.п.

Согласно [5] для Xe $D_o = 2{,}05 \cdot 10^{-8}$ м^2/с, а Q = 215 кДж/моль. Соответствующий коэффициент диффузии в нитридном топливе при температуре 600 ^{o}C составляет D_{Xe} ~ $2{,}6 \cdot 10^{-21}$ м^2/с, а при температуре 1 500 ^{o}C D_{Xe} ~ $9 \cdot 10^{-15}$ м^2/с. Положим для оценки G_i = = 10^{19} ат/(с·м^3), при этом τ^*(600 ^{o}C) = $9 \cdot 10^5$ с

или ~ 10 суток, а τ*(1 500 °C) = 102 с или около двух минут.

Таким образом, рассматриваемые времена установления локального равновесия для ксенона существенно меньше характерных времён, связанных с работой топлива в ядерном реакторе как при высоких, так и при сравнительно низких температурах. Было бы интересно провести такие же оценки для металлических продуктов деления. Как отмечено выше, экспериментальных данных о диффузии продуктов деления в нитридном топливе нам найти не удалось. Поэтому для оценки воспользуемся данными, полученными для диффузии Cs, Ag и Sr в двуокиси урана [7]. Диффузионные параметры перечисленных элементов и рассчитанные на их основе коэффициенты диффузии и характерные времена установления локального равновесия для двух температур приведены в табл. 1.

Согласно приведенным оценкам практически во всех рассмотренных случаях за исключением стронция при пониженной температуре локальное равновесие успевает устанавливаться за вполне приемлемое время. Однако в случае стронция при температуре 600 °C это время приближается к $1{,}8\cdot10^{8}$ годам. Следовательно, к термодинамическим расчётам элементов с очень низкими коэффициентами диффузии необходимо относиться с осторожностью. Интересно отметить, что на начальной стадии выгорания термодинамические оценки, по-видимому, вообще не описывают реальную ситуацию до тех пор, пока время t работы реактора существенно не превысит τ*, т.е. пока не будет выполнено неравенство $\tau^* << t$.

Другим важным характерным временем является время установления химического равновесия. Вообще говоря, это время определяется временем пробега до столкновения с нужным компонентом и скоростью химических реакций. В общем виде скорость (константа скорости) химической реакции зависит от температуры T, энергии активации E_a и энтропии активации ΔS_a следующим образом [8]:

$$k = Z\mathrm{e}^{-\frac{E_a}{\mathrm{R}T}}\mathrm{e}^{\frac{\Delta S_a}{\mathrm{R}}}, \qquad (5)$$

где Z – в первом приближении общее число столкновений между молекулами; R – универсальная газовая постоянная.

Это уравнение отражает вероятность того, что столкнувшиеся молекулы имеют энергию, достаточную для их взаимодействия $\left(\mathrm{e}^{-\frac{E_a}{\mathrm{R}T}}\right)$, и вероятность нахождения столкнувшихся молекул в благоприятной для реакции ориентации в момент соударения $\left(\mathrm{e}^{\frac{\Delta S_a}{\mathrm{R}}}\right)$. В рассматриваемой области температур химические реакции идут достаточно быстро [9…11]. Характерное время большинства реакций не превышает нескольких минут. Что касается времени пробега до столкновения, оно, по-видимому, не более оценённых выше времён установления локального равновесия.

Для сравнения приведём оценку ещё одного быстрого процесса – процесса установления профиля температуры. Характерное время установления температурного распределения в системе определяется коэффициентом температуропроводности D_T и размером системы L:

$$\tau_T = L^2/D_T\ ;\ D_T = æ\,/(\rho c_p), \qquad (6)$$

где æ – теплопроводность; ρ – плотность, а c_p – теплоёмкость при постоянном давлении. В случае UN при 1 073 К æ ~ 20 Вт/ (м·К), c_p ~ 200 Дж/(кг·К), ρ ~ $14{,}3\cdot10^{3}$ кг/м^3 [12]. Соответственно $D_T = 0{,}7\cdot10^{-5}$м^2/ с. Положим $L = 10^{-2}$ м, тогда τ_T= 15 с. Таким образом, в нашем случае задача о распределении компонентов по топливу может быть рассмотрена в стационарном поле температур.

Т а б л и ц а 1. Диффузионные параметры и характерные времена установления равновесия Cs, Ag и Sr

Элемент	D_o, м^2/с	Q, кДж/моль	$D_{600\ ^\circ C}$, м^2/с	$D_{1\,500\ ^\circ C}$, м^2/с	τ*(600 °C), с	τ*(1 500 °C), с
Cs	$5{,}6\cdot10^{-8}$	209	$1{,}7\cdot10^{-20}$	$3{,}9\cdot10^{-14}$	$2{,}9\cdot10^{5}$	44
Ag	$6{,}7\cdot10^{-9}$	165	$8{,}7\cdot10^{-19}$	$9{,}2\cdot10^{-14}$	$2{,}7\cdot10^{4}$	26
Sr	$2{,}2\cdot10^{-3}$	488	$1{,}2\cdot10^{-32}$	$9{,}2\cdot10^{-18}$	$5{,}7\cdot10^{15}$	$0{,}7\cdot10^{4}$

2. Диффузионная кинетика в нитридном топливе

Выше мы провели оценки быстрых процессов, показавшие, что применение термодинамических расчётов для определения концентраций компонентов в условиях активной зоны реактора БН-1200 вполне уместно за исключением, может быть, только элементов с очень малыми коэффициентами диффузии в области низких температур.

К медленным процессам относятся диффузионные процессы на размерах порядка размеров таблетки твэла. Прежде всего сюда следует отнести процессы выхода из топлива газообразных продуктов деления. Кроме того, такого рода процессы могут иметь место из-за зависимости констант химических реакций от температуры. В связи с этим интересно сравнить диффузионные длины $l_{\text{дифф.}}$ за характерное время работы топлива (~ 1 год) с размерами топливной таблетки при крайних температурах рассматриваемого диапазона. Выполним эту оценку для Cs, воспользовавшись данными табл. 1. При температуре 600 °C $l_{\text{дифф}}$= 7,3·10^{-7} м, что на четыре порядка меньше характерного линейного размера топливной таблетки.

По-видимому, в данной области диффузионный перенос не будет играть заметной роли, и концентрации компонентов будут определяться в основном процессами наработки элементов за счёт ядерных превращений и химическими реакциями между ними и компонентами топлива. Следует отметить также, что из-за низкой скорости процесса выхода газообразных продуктов деления в более холодной области и неизотермичности рассматриваемой задачи давление газовой фазы под оболочкой, по-видимому, не достигнет равновесных значений. В связи с этим для расчёта термодинамики топлива может оказаться необходимым решение задачи не при постоянном объёме, равном свободному объёму под оболочкой твэла, а при постоянном давлении.

При 1 500 °C $l_{\text{дифф}}$ = 1,1·10^{-3} м. Это всего в пять раз меньше радиуса таблетки. Следовательно, в центральной области топливной таблетки, где температура максимальна, существует область, в которой процессы диффузионного переноса могут играть заметную роль. Можно ли пренебречь вкладом в распределение компонентов сильно разогретой центральной области? Есть, по крайней мере, одна причина, по которой ответ на данный вопрос не может быть положительным. Речь идет об оценке состояния газовой фазы под оболочкой твэла и возможных процессов конденсации паров компонентов в сравнительно холодных областях оболочки.

Давления насыщенных паров компонентов выгорающего топлива сильно (на порядки величин) зависят от температуры конденсированной фазы. В связи с этим высокотемпературная область таблетки может играть превалирующую роль в процессе формирования газовой фазы. Размер высокотемпературной области, в которой необходимо учитывать диффузионные процессы, может быть определён из сравнения эффективности двух механизмов изменения концентраций компонентов: генерации продуктов деления и диффузии в холодную область.

Разобьём таблетку на две цилиндрические области – внешнюю и внутреннюю радиуса r. В центральной части среднее изменение концентрации $\Delta c_{\text{дифф}}$ за время Δt за счёт диффузии компонента через боковую поверхность цилиндра радиуса r равно

$$\Delta c_{\text{дифф.}} = 2\pi r h Y_i \Delta t/(h\pi r^2),\ Y_i = D_i \nabla c_i, \qquad (7)$$

где Y_i – диффузионный поток компонента i, h – высота таблетки.

Изменение концентрации компонента Δc_g за счёт ядерной генерации равно

$$\Delta c_g = G_i \Delta t. \qquad (8)$$

Приравнивая эти величины, можно оценить характерный размер r^*, на котором вклад диффузионных процессов в изменение концентрации становится значительным:

$$r^* = 2D_i \nabla c_i / G_i. \qquad (9)$$

В полученное соотношение входит градиент концентрации компонента i. Его ве-

личина может быть оценена на основании термодинамических расчётов по известному температурному полю топливной таблетки. Проведём оценку для несвязанного в химические соединения Cs. Расчёты равновесного химического и фазового составов топлива выполнены с использованием программного комплекса ИВТАНТЕРМО [13]. Состав базовых элементов системы получен на основании нейтронно-физического расчёта [14].

Для расчёта термодинамического равновесия рассматривалась система, в которой все конденсированные компоненты выгорающего смешанного уран-плутониевого нитридного топлива разделялись на 2 раствора и отдельные фазы для остальных компонентов. В состав первого раствора включены все соединения с азотом, йодом и бромом. В состав второго раствора включены все соединения с углеродом и теллуром, а также чистые элементы. Теплота растворения компонентов растворов принята равной нулю – модель идеальных растворов. Расчётный интервал температур – 600…1 500 °C. В расчётах химического и фазового составов топлива рассматривалась система, представляющая собой топливный сердечник, зазор между топливом и оболочкой и 2 газосборника – верхний и нижний. Геометрические параметры твэла, необходимые для расчёта, приведены в табл. 2.

Т а б л и ц а 2. Геометрические параметры твэла

Параметр	Величина
Высота столба топлива, см	110
Диаметр столба топлива, см	0,86
Зазор между топливом и оболочкой, мм	0,1
Объём верхнего газосборника, см^3	49,29
Объём нижнего газосборника, см^3	22,17
Объём топлива, см^3	63,90
Свободный объём, см^3	72,95

Рассчитанная температурная зависимость количества Cs в твёрдой фазе при различных значениях выгорания (4, 8, 9,3, 12, 16 % FIMA) представлена на рисунке. Согласно приведенному рисунку изменение содержания Cs в топливе на границах рассматриваемого температурного интервала для всех значений выгорания составляет ~ 10^{-2} моля. Если предположить, что радиальное изменение температуры топлива линейно и соответствует рассматриваемому диапазону, то можно оценить средний градиент концентрации Cs по радиусу топливной таблетки. Отметим, что распределение температуры по радиусу в реальной ситуации нелинейно, поэтому мы в своей оценке получим заниженную величину градиента концентрации:

$$\nabla c_{Cs} = 10^{-2} N_A / Vr, \qquad (10)$$

где N_A – число Авогадро; V – объём топлива.

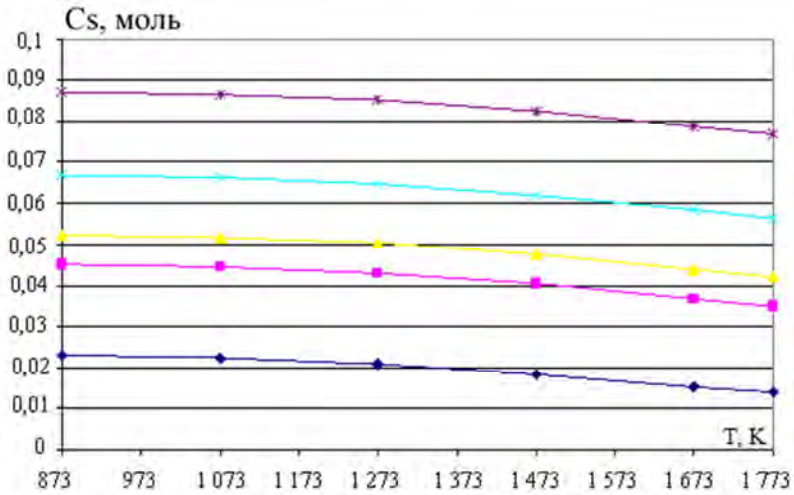

Рисунок. Температурная зависимость количества Cs при различных значениях выгорания (4 – , 8 – , 9,3 – , 12 – , 16 – % FIMA)

Полагая $G_{Cs} \sim 10^{18}$ ат/(с·м^3), из соотношений (9) и (10) находим $r^* \sim 1{,}7 \cdot 10^{-3}$ м. Радиус топливной таблетки составляет $4{,}3 \cdot 10^{-3}$ м, следовательно, размер внутренней области, в которой необходим учёт диффузионной кинетики, может иметь весьма заметную величину.

Таким образом, мы показали, что равновесные термодинамические расчёты могут быть использованы для оценки химического и фазового составов топлива, однако для описания процессов переноса как в конденсированной, так и в газовой фазе необходима разработка двухслойной кинетической модели. Построение модели, описывающей кинетику диффузионных процессов в топливе, выходит за рамки данного исследования и может быть реализовано в следующих работах.

Заключение

В работе проведен анализ областей применимости термодинамических расчётов в процессе разработки нитридного топлива. Проведены оценки характерных значений параметров, непосредственно влияющих на время установления концентрационного равновесия: скорость генерации нуклидов; характерные времена установления локального равновесия в рассматриваемой области температур; характерное время установления стационарного температурного профиля; характерное время установления квазистационарного поля концентраций на размерах, сопоставимых с размерами топливной таблетки.

Показано, что равновесные термодинамические расчёты могут быть использованы для оценки химического и фазового составов топлива, однако для описания процессов переноса как в конденсированной, так и в газовой фазе необходима разработка двухслойной кинетической модели. При этом в горячей области в центральной части твэла для определения состава необходимо принимать во внимание диффузионный перенос. Особый интерес в таком случае вызывает поведение газовой фазы из-за возможных процессов переконденсации компонентов топлива и продуктов деления, а также их химических соединений в более холодных областях под оболочкой твэла.

Список литературы

1. ***Brown D.L., Bell J., Estep D., Gropp W., Hedricson B., Keller-McNulty S., Keyes D., Tinsley Oden J., Petzold L., Wright M.*** Applied mathematics at the U.S. Department of Energy: Past, present, and a view to the future. Office of Science, U.S. Department of Energy, 2008. Available at: http://science.energy. gov/~/media/ascr/pdf/program-documents/docs/Br own_report_may_08.pdf (дата обращения: 05.10.2014).

2. ***Williamson R.L., Hales J.D., Novascone S.R., Tonks M.R., Gaston D.R., Permann C.J., Andrs D., Martineau R.C.*** Multidimensional multiphysics simulation of nuclear fuel behavior // J. of Nuclear Materials, 2012, vol. 423, p. 149–163.

3. ***Stan M.*** Multi-scale models and simulations of nuclear fuels // Nuclear engineering and technology, 2009, vol. 41, № 1, p. 39–52.

4. ***Каганович Б.М., Кейко А.В., Шаманский В.А.*** Равновесное термодинамическое моделирование диссипативных макроскопических систем. Иркутск: ИСЭМ СО РАН, 2007.

5. ***Beke D.L., Gas P., Sharma B.L.*** Landolt-Börnstein: Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology – Group III Condensed Matter. Diffusion in Semiconductors and Non-Metallic Solids (Part 1), Springer Berlin Heidelberg, 1999.

6. ***Bradbury M.H., Matzke Hj.*** Self-diffusion of plutonium in uranium-plutonium mononitride // J. Nucl. Mater, 1978, vol. 75, p. 68–76.

7. ***Fuel performance*** and fission product behavior in gas cooled reactors. IAEA-TECDOC-978. Int. Atomic Energy Agency, November 1997.

8. ***Даниэлс Ф., Олберти Р.*** Физическая химия. М.: Мир, 1978.

9. ***Schweiter C., Schmidt R.*** Physical Mechanisms of Generation and Deactivation of Singlet Oxygen // Chemical Review, 2003, vol. 103 (5), p. 1685–1787.

10. ***Чатт Дж., Л. да Камара Пина., Ричардс Р.*** Новое в химической фиксации азота. М.: Мир, 1983.

11. ***Suemitsu M., Enta Y., Takegawa Y., Miyamoto N.*** Mode transition between growth and decomposition of oxides on Si(001): Kinetically de-

termined critical coverage for oxidation // Appl. Phys. Lett., 2000, № **77**, 3179.
12. ***Забудько Л.М., Труфанов А.А.*** Исследование работоспособности твэла активной зоны реактора БН с нитридным топливом на основе имеющихся отечественных и зарубежных экспериментальных данных. Препринт ФЭИ-2954, Обнинск, 2002.
13. ***Белов Г.В.*** Расчёт равновесного состава и свойств термодинамических систем при повышенных давлениях // Математическое моделирование, 2001, т. 13, № 8, с. 9–12.
14. ***Глушков Е.С., Назаренко И.П., Паневин И.Г., Пономарёв-Степной Н.Н.*** Методы нейтронно-физического расчёта ядерных реакторов. М.: Изд-во МАИ, 2000.

Контактная информация –
Иванов Александр Сергеевич, проф., тел.: (499)196-72-38, e-mail: asi.kiae@gmail.com
Русинкевич Андрей Александрович, нач. лаб., тел.: (499)196-71-86, моб. – (903)735-56-80, e-mail: rusinkevich_andr@mail.ru

Вопросы атомной науки и техники.
Сер. Физика ядерных реакторов, 2015, вып. 2,
с. 106–113.

УДК 621.039.54

Некоторые особенности термодинамики нитридного уран-плутониевого топлива при выгорании

А.А. Русинкевич, А.С. Иванов, Г.В. Белов,
НИЦ “Курчатовский институт”, 123182, Москва, пл. Курчатова, 1,
М.В. Скупов,
ВНИИНМ им. А.А. Бочвара, 123098, Москва, ул. Рогова, 5а
Поступила в редакцию 30.10.2014 г.

Проведено расчётное исследование влияния примесей углерода и кислорода на химический и фазовый составы нитридного уран-плутониевого топлива в процессе выгорания с использованием кода ИВТАНТЕРМО. Показано, что с ростом выгорания количество молей UN уменьшается, а $UN_{1,466}$, $UN_{1,54}$ и $UN_{1,73}$ заметно возрастает. Присутствие примесей кислорода и углерода увеличивает содержание $UN_{1,466}$, $UN_{1,54}$ и $UN_{1,73}$ фаз в исходном топливе на порядки величины, особенно в области сравнительно низких температур. Вместе с тем наличие примесей резко снижает содержание свободного урана в невыгоревшем топливе. Плутоний в рассматриваемой системе образует соединения Pu, PuC, PuC_2, Pu_2C_3 и PuN. Карбиды плутония, как и урана, образуются в незначительных количествах. Бóльшая часть плутония остаётся в виде нитрида PuN, а несвязанный Pu присутствует только в областях малых выгораний и высоких температур.
Ключевые слова: нитридное топливо, термодинамика, продукты деления.

Some Thermodynamic Features of Nitride Uranium-Plutonium Fuel during Burnup. ***A.A. Rusinkevich, A.S. Ivanov, G.V. Belov,*** *NRC “Kurchatov Institute”, 1, Kurchatov Sq., Moscow, 123182,* ***M.V. Skupov,*** *VNIINM Bochvar, 5a, Rogov St., Moscow, 123098.*

In the paper the effect of carbon and oxygen impurities in the chemical and phase compositions of the nitride uranium-plutonium fuel during burnup is calculated using IVTANTERMO code. It is shown that with increasing burnup, the number of moles of UN decreases, and $UN_{1,466}$, $UN_{1,54}$ и $UN_{1,73}$ noticeably increases. The presence of oxygen and carbon impurities increases number of $UN_{1,466}$, $UN_{1,54}$ и $UN_{1,73}$ phases in the original fuel especially at relatively low temperatures. However, the presence of impurities leads to a drastic reduction of the free uranium amount in unburned fuel. Plutonium forms following compounds in the system: Pu, PuC, PuC_2, Pu_2C_3 and PuN. Plutonium and uranium carbides are produced in small quantities. Most of the plutonium is in the form of nitride PuN, and unbound Pu is present only in areas of low burnups and high temperatures.
Key Words: Nitride Fuel, Thermodynamics, Fission Products.

Введение

В настоящее время активизировался интерес к исследованию нитридного смешанного уран-плутониевого топлива для быстрых реакторов. В связи с этим рядом авторов предприняты усилия по изучению фазового и химического составов в процессе его изготовления по той или иной технологии, а также в процессе выгорания в ядерном реакторе. В частности, в работе [1] приводится описание методики термодинамического моделирования процесса производства нитридного ядерного топлива в диапазоне температур 1000…2 500 K. Для моделирования применена известная программа Thermocalc [2]. В рамках исследования авторы создали базу данных ALCHEMY по термодинамическим свойствам веществ.

В процессе производства нитридного топлива возможно его загрязнение углеродом и кислородом. Результаты исследований, приведенные в работе [3], свидетельствуют, что наличие примесей кислорода оказывает существенное влияние на физико-химические свойства топлива. В частности, присутствие 1 масс. % кислорода понижает его теплопроводность на 9…13 %.

В работе [4] приведены результаты теоретического и экспериментального исследования химического состава облучённого топлива U-Pu-N. Расчёт равновесного сос-

тава топлива осуществлялся с использованием программы SOLGASMIX. В статье приведены также термодинамические функции конденсированных веществ, которые были включены в состав модельной термодинамической системы: UN, U_2N_3, PuN, ZrN, CeN, YN, Mo_2N, Ba_3N_2, Sr_3N_2, URu_3, $PuRu_2$, Cs_2Te, BaNe, CsI.

Результаты вычислений показывают, что в равновесной системе в заметных количествах присутствуют следующие конденсированные вещества: UN, PuN, ZrN, Mo_2N, CeN, YN, URu_3, Ba_3N_2, Sr_3N_2, BaTe, Mo, Tc, Cs. Результаты экспериментальных исследований состава топлива позволяют предположить, что Zr, Nb, Y и редкоземельные элементы растворяются в решётке (U, Pu)N. Кроме того, наблюдались отдельные включения интерметаллидов типа URu_3, образованные элементами групп урана и платины, а также сплав на основе молибдена. Авторы исследования отмечают, что при проведении анализа им удалось учесть не все факторы.

В статьях [5, 6] приводятся результаты термодинамического моделирования фазового и химического составов смешанного U-Pu нитридного топлива в области температур 900…1 400 K, анализируется влияние продуктов деления на фазовый и химический составы ядерного топлива. Термодинамические расчёты проводились с применением программного комплекса АСТРА. В работе [7] методами термодинамики в диапазоне температур 1 500…2 000 K исследована система U-Pu-N-O. Предполагалась возможность существования следующих фаз:

$$U_{1-x3}Pu_{x3} + U_{1-x1}Pu_{x1}N_yO_zC_{1-y-z},$$
$$C + U_{1-x2}Pu_{x2}C_{1,5},$$
$$U_{1-x3}Pu_{x3}C_{1,5} + U_{1-x1}Pu_{x1}N_yO_zC_{1-y-z},$$
$$C + U_{1-x1}Pu_{x1}N_yO_zC_{1-y-z},$$
$$UN_{1,5} + U_{1-x1}Pu_{x1}N_yO_zC_{1-y-z},$$
$$C + UN_{1,5} + U_{1-x1}Pu_{x1}N_yO_zC_{1-y-z},$$

где $0 \le y \le 1$, $0 \le z \le 0{,}15$.

Результаты расчётов сравнивались с данными эксперимента. Установлено, что используемая термодинамическая модель позволяет с удовлетворительной точностью воспроизвести данные эксперимента. Термодинамический анализ и экспериментальные исследования, проведенные в работе [8], показали, что нитридное топливо термохимически стабильно до 1 700…1 800 °C. При этих температурах давление паров азота не превышает 2,1 Па.

Несмотря на выполненные исследования, многое в поведении нитридного топлива остаётся неясным. В частности, особый интерес вызывает влияние примесей углерода и кислорода на фазовый и химический составы топлива в процессе выгорания, поскольку присутствие этих компонентов в смешанном нитридном ядерном топливе с одной стороны может быть обусловлено технологией его получения, а с другой может оказать существенное влияние на его эксплуатационные характеристики. В настоящей работе проведен термодинамический анализ некоторых аномалий в поведении фазового и химического состава нитридного смешанного топлива при различных уровнях выгорания с использованием компьютерного кода ИВТАНТЕРМО [9].

1. Исходные данные и расчётная термодинамическая модель

Исследование химической термодинамики рассматриваемых многокомпонентных систем основано на использовании элементного состава ядерного топлива при выгорании, получаемого из нейтронно-физического расчёта [10]. В данной работе рассматривали топливо состава (U-Pu)N с массовой долей плутония 13,4 %.

В расчётах химического и фазового составов рассматривали систему, представляющую собой топливный сердечник, зазор между топливом и оболочкой и 2 газосборника – верхний и нижний. При этом объём топлива составлял 63,90 см^3, а объём газовой фазы 72,95 см^3. В состав конденсированной фазы исходного топлива входят следующие элементы и соединения: U, UN, $UN_{1,466}$, $UN_{1,54}$, $UN_{1,73}$, Pu, PuN. В газовой фазе имеются N, N_2, N_3, U, U_2, UN, UN_2, Pu, Pu_2, PuN, PuN_2 + 1E-04 моль Ar в качестве буферного газа. Мольный состав базовых химических элементов при различных значениях выгорания приведен в таблице.

Т а б л и ц а. Мольный состав базовых элементов

Базовый элемент		Количество элемента, моль					
		0 % FIMA	4 % FIMA	8 % FIMA	9,3 % FIMA	12 % FIMA	16 % FIMA
1	U	2,6738E+00	2,5473E+00	2,4209E+00	2,3797E+00	2,2944E+00	2,1679E+00
2	Pu	4,1244E-01	4,2989E-01	4,3760E-01	4,3844E-01	4,3812E-01	4,3396E-01
3	Xe	0,0000E+00	2,8916E-02	5,7907E-02	6,7329E-02	8,6922E-02	1,1519E-01
4	Kr	0,0000E+00	2,2947E-03	4,5332E-03	5,2607E-03	6,7554E-03	8,8965E-03
5	Br	0,0000E+00	1,6139E-04	3,1549E-04	3,6557E-04	4,6672E-04	6,0979E-04
6	I	0,0000E+00	2,2500E-03	4,2441E-03	4,8922E-03	6,1681E-03	7,9415E-03
7	Te	0,0000E+00	4,4037E-03	8,8531E-03	1,0299E-02	1,3317E-02	1,7677E-02
8	Cs	0,0000E+00	2,5501E-02	4,9780E-02	5,7670E-02	7,3491E-02	9,5766E-02
9	Rb	0,0000E+00	1,9499E-03	3,8748E-03	4,5003E-03	5,7901E-03	7,6396E-03
10	Ba	0,0000E+00	8,0465E-03	1,7369E-02	2,0399E-02	2,7306E-02	3,7840E-02
11	Sr	0,0000E+00	4,6426E-03	8,8319E-03	1,0193E-02	1,2941E-02	1,6832E-02
12	Zr	0,0000E+00	2,4353E-02	4,7994E-02	5,5678E-02	7,1648E-02	9,4678E-02
13	Ce	0,0000E+00	1,5030E-02	2,7779E-02	3,1922E-02	4,0456E-02	5,2718E-02
14	Y	0,0000E+00	2,4434E-03	4,6972E-03	5,4296E-03	6,9399E-03	9,1071E-03
15	La	0,0000E+00	3,9191E-02	8,0813E-02	9,4290E-02	1,2248E-01	1,6312E-01
16	Ru	0,0000E+00	4,2629E-02	8,1798E-02	9,4528E-02	1,2043E-01	1,5731E-01
17	Pd	0,0000E+00	1,5965E-02	3,5842E-02	4,2302E-02	5,6403E-02	7,7306E-02
18	Ag	0,0000E+00	1,2590E-03	2,5005E-03	2,9040E-03	3,7445E-03	4,9603E-03
19	Cd	0,0000E+00	2,2198E-03	4,5661E-03	5,3286E-03	6,9828E-03	9,4394E-03
20	Mo	0,0000E+00	2,6389E-02	5,3468E-02	6,2268E-02	8,0421E-02	1,0647E-01
21	C	0,0000E+00	7,7773E-03	1,5590E-02	1,8129E-02	2,3402E-02	3,1215E-02
22	N	3,0798E+00	3,0673E+00	3,0549E+00	3,0509E+00	3,0425E+00	3,0301E+00

Для расчёта термодинамического равновесия рассматривалась система, в которой все конденсированные компоненты разделялись на 2 раствора и отдельные фазы для остальных компонентов. В состав первого раствора включены все соединения с азотом, йодом и бромом. В случае присутствия кислорода оксиды добавляются в состав первого раствора. В состав второго раствора включены все соединения с углеродом и теллуром, а также чистые элементы. При наличии кислорода отдельными фазами также считаются карбонаты. Теплота растворения компонентов растворов принята равной нулю – модель идеальных растворов. Расчётный интервал температур 600…1 500 °C.

Оценка влияния примесей кислорода и углерода выполнена при условии постоянного свободного объёма *V*. Кислород и углерод могут присутствовать в топливе в качестве примесей, обусловленных технологией производства. Данная система содержит очень большое количество различных соединений (более 250). В связи с этим в процессе расчёта из-за ограничений, обусловленных принимаемой программой, ряд соединений не учитывался.

Отметим, что особый интерес представляют собой температурные зависимости концентраций несвязанных металлов как исходных компонентов, так и продуктов деления, поскольку они способны выходить из топлива в процессе диффузии.

2. Химический и фазовый составы конденсированной фазы топлива

Уран в данной системе образует следующие конденсированные соединения: U, UC, UC_2, U_2C_3, UN, $UN_{1,466}$, $UN_{1,54}$, $UN_{1,73}$. Согласно проделанным расчётам подавляющее большинство атомов урана остаётся в соединении с азотом UN. С ростом выгорания количество UN уменьшается, переходя в $UN_{1,466}$, $UN_{1,54}$ и $UN_{1,73}$. Концентрация UN практически не зависит от температуры. Карбиды урана образуются в незначительных количествах, в основном UC.

При низких значениях выгорания и высоких температурах уран также присутствует в несвязанном виде. Плутоний в рассматриваемой системе образует соединения Pu, PuC, PuC_2, Pu_2C_3 и PuN. Карбиды плутония, как и урана, образуются в незначительных количествах. Бóльшая часть плутония остаётся в виде нитрида PuN, а несвязанный Pu присутствует в заметном количестве только при условии малых выгораний и высоких температур.

Оценка влияния примесей углерода и кислорода на фазовый состав топлива проведена на исходном топливе и при выгорании 9,3 % FIMA. Содержание кислорода в системе принималось равным 0,15 масс. %, а углерода 0,1 масс. %. На рис. 1 приведены температурные зависимости содержания UN(*c*) в исходном топливе для систем с примесями и без примесей O и C. Здесь (*c*) – обозначение конденсированного состояния вещества. При наличии примесей содержание UN в топливе снижается на ~ 8 %.

На рис. 2 приведены температурные зависимости содержания UN(*c*) в выгоревшем топливе для систем с примесями и без примесей O и C. Сравнение рис. 1 и 2 показывает, что в выгоревшем топливе влияние примесей на содержание основной нитридной фазы UN урана заметно снижается.

На рис. 3 приведены температурные зависимости содержания различных нитридных фаз урана $UN_{1,466}$, $UN_{1,54}$ и $UN_{1,73}$ в исходном топливе при отсутствии примесей, а на рис. 4 при их наличии. Сравнение рис. 3 и 4 показывает, что присутствие при-

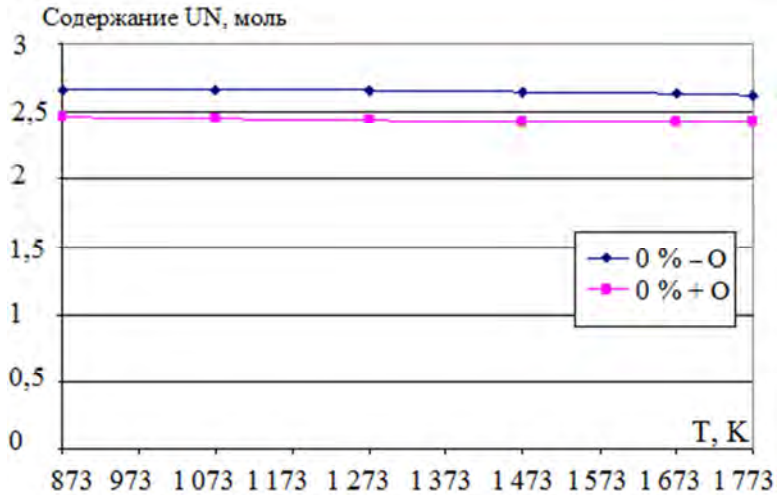

Рис. 1. Содержание UN(*c*) в исходном топливе без примесей (– O) и с примесями (+ O) кислорода и углерода

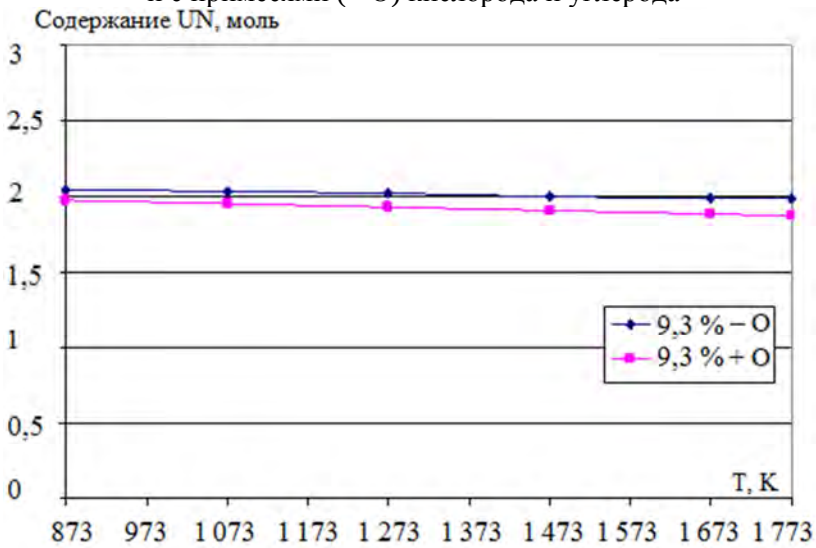

Рис. 2. Содержание UN(*c*) в топливе с выгоранием 9,3 % FIMA без примесей (– O) и с примесями (+ O) кислорода и углерода

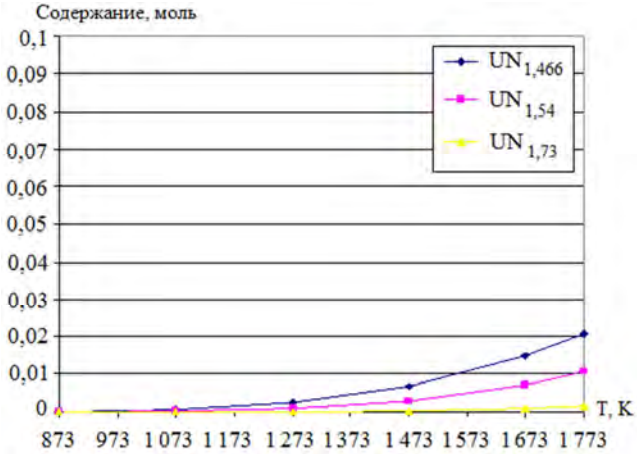

Рис. 3. Содержание $UN_{1,466}(c)$, $UN_{1,54}(c)$, $UN_{1,73}(c)$ в исходном топливе без примесей кислорода и углерода

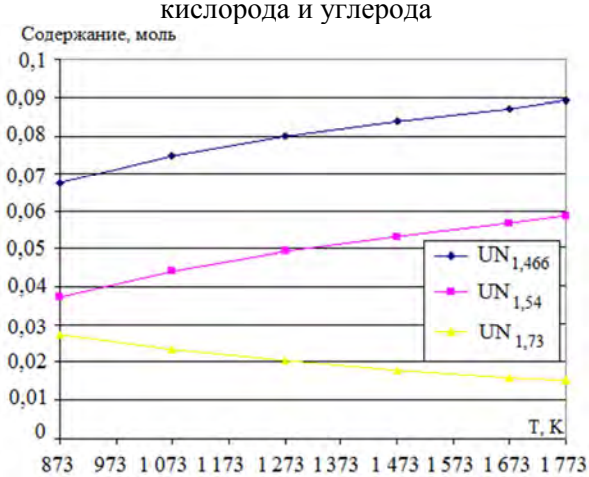

Рис. 4. Содержание $UN_{1,466}(c)$, $UN_{1,54}(c)$, $UN_{1,73}$ (c) в исходном топливе с примесями кислорода и углерода

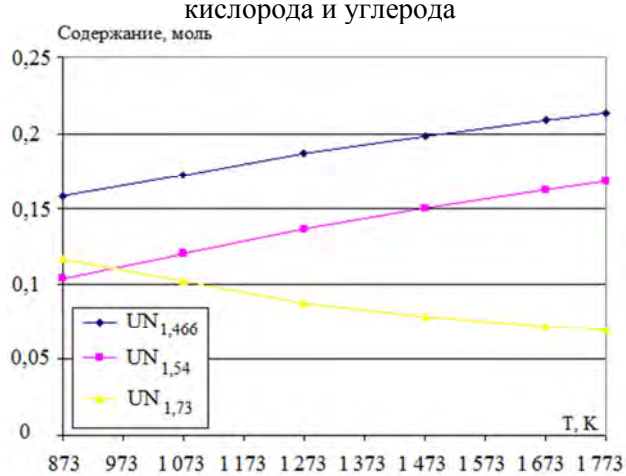

Рис. 5. Содержание $UN_{1,466}(c)$, $UN_{1,54}(c)$, $UN_{1,73}$ (c) в топливе с выгоранием 9,3 % FIMA без примесей кислорода и углерода

месей кислорода и углерода увеличивает количество рассматриваемых фаз на порядки величины, особенно в области сравнительно низких температур. Вместе с тем ясно, что доля этих фаз нитрида урана в целом невелика и по отношению к UN не превышает 8 % в исходном топливе. Влияние примесей на фазовый состав выгоревшего топлива представлено на рис. 5 и 6.

Согласно приведенным рис. 5, 6 доля нитридных фаз урана $UN_{1,466}(c)$, $UN_{1,54}(c)$, $UN_{1,73}(c)$ в общем содержании нитрида урана при выгорании 9,3 % FIMA может достигать 20 % и более. При этом наличие

примесей кислорода и углерода (рис. 6) приводит к некоторому снижению данного эффекта. Приведём теперь результаты расчёта температурных зависимостей содержания свободного урана в топливе (рис. 7, 8).

Согласно рис. 7 наличие примесей резко снижает содержание свободного урана в невыгоревшем топливе, по-видимому, за счёт образования диоксида урана. Это может привести к существенному подавлению процессов переноса урана в рассматриваемом топливе. Интересно отметить, что по мере выгорания концентрация свободного урана снижается, а влияние примесей на его содержание может изменить знак (рис. 8). Аналогичное несвязанному урану поведение в рассматриваемой системе демонстрирует несвязанный плутоний (рис. 9, 10). Однако его концентрация заметно

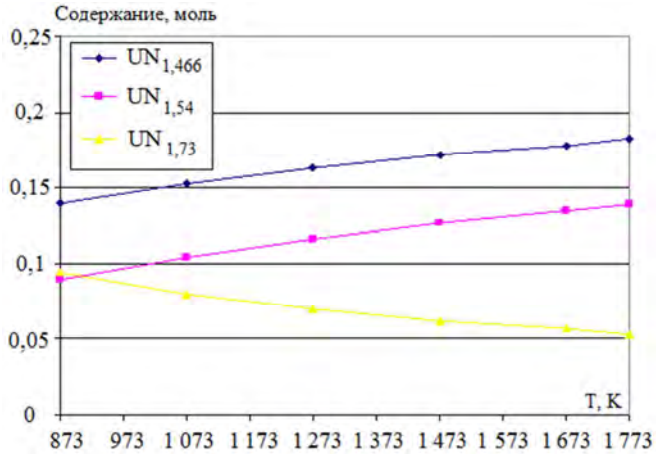

Рис. 6. Содержание $UN_{1,466}(c)$, $UN_{1,54}(c)$, $UN_{1,73}(c)$ в топливе с выгоранием 9,3 % FIMA с примесями кислорода и углерода

Рис. 7. Содержание U(*c*) в исходном топливе без примесей (– O) и с примесями (+ O) кислорода и углерода

Рис. 8. Содержание U(*c*) в топливе с выгоранием 9,3 % FIMA без примесей (– O) и с примесями (+ O) кислорода и углерода

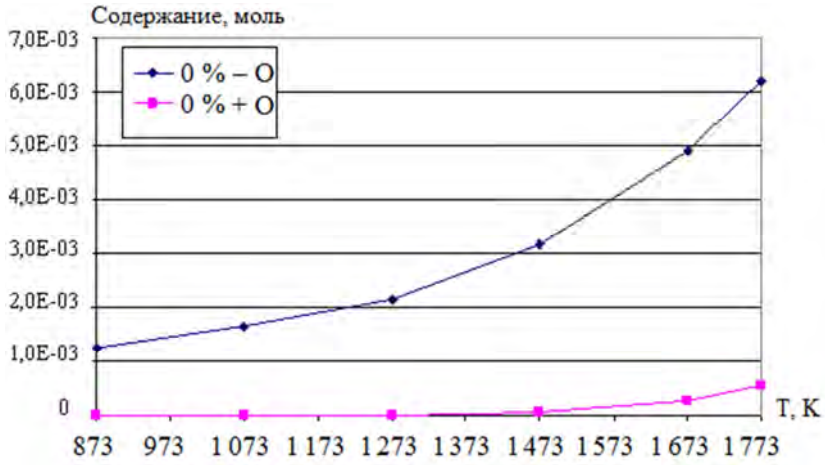

Рис. 9. Содержание Pu(*c*) в исходном топливе без примесей (– O) и с примесями (+ O) кислорода и углерода

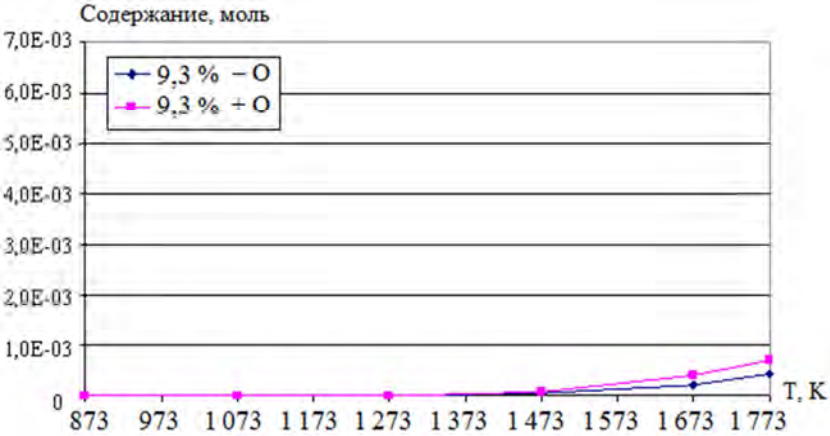

Рис. 10. Содержание Pu(*c*) в топливе с выгоранием 9,3 % FIMA без примесей (– O) и с примесями (+ O) кислорода и углерода

меньше концентрации несвязанного урана.

Следует отметить, что согласно проделанным расчётам примеси углерода и кислорода оказывают весьма малое влияние на температурную зависимость содержания нитрида плутония в исходном топливе. В выгоревшем топливе этим влиянием, по-видимому, можно пренебречь. Проведенное исследование влияния примесей углерода и кислорода на температурные зависимости концентраций несвязанных металлических продуктов деления, таких как Cs и Cd, не выявило заметных эффектов.

Заключение

В настоящей работе проведено исследование влияния примесей кислорода и углерода на фазовый и химический состав смешанного уран-плутониевого нитридного топлива. Анализ выполнен с использованием расчётного комплекса ИВТАНТЕРМО. Показано, что уран в данной системе образует следующие конденсированные соединения с углеродом и азотом: U, UC, UC_2, U_2C_3, UN, $UN_{1,466}$, $UN_{1,54}$, $UN_{1,73}$. Подавляющее большинство атомов урана при различных температурах остаётся в соединении с азотом. Однако с ростом выгорания количество молей UN уменьшается, а $UN_{1,466}$, $UN_{1,54}$ и $UN_{1,73}$ заметно возрастает. Присутствие примесей кислорода и углерода увеличивает содержание $UN_{1,466}$, $UN_{1,54}$ и $UN_{1,73}$ фаз в исходном топливе на порядки величины, особенно в области сравнительно низких температур.

Вместе с тем ясно, что доля этих фаз нитрида урана в исходном топливе невелика и по отношению к UN не превышает 8 %. Концентрация UN практически не зависит от температуры. Карбиды урана образуются в незначительных количествах, в ос-

новном UC. При низких значениях выгорания и высоких температурах уран также присутствует в несвязанном виде. Наличие примесей резко снижает содержание свободного урана в невыгоревшем топливе, по -видимому, за счёт образования диоксида урана. Это может привести к существенному подавлению процессов переноса урана в рассматриваемом топливе.

Интересно отметить, что по мере выгорания концентрация свободного урана снижается, а влияние примесей на его содержание может изменить знак. Плутоний в рассматриваемой системе образует соединения Pu, PuC, PuC_2, Pu_2C_3 и PuN. Карбиды плутония, как и урана, образуются в незначительных количествах. Бóльшая часть плутония остаётся в виде нитрида PuN, а несвязанный Pu присутствует только в областях малых выгораний и высоких температур. Влияние примесей кислорода и углерода приводит к существенному снижению концентрации несвязанного плутония в исходном топливе и при малых выгораниях.

В заключение отметим, что обнаруженные эффекты влияния примесей кислорода и углерода на фазовый и химический состав уран-плутониевого нитридного топлива необходимо принимать во внимание при проектировании соответствующих твэлов.

Список литературы

1. ***Jolkkonen M., Streit M., Wallenius J.*** Thermochemical Modelling of Uranium-Free Nitride Fuels // J. of Nucl. Science and Technol., 2004, vol. 41, № 4, p. 457–465.

2. ***Andersson J.O., Helander T., Ho¨glund L., Shi P.F., Sundman B.*** Thermo-Calc and DICTRA, computational tools for materials science // Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry (Calphad), 2002, vol. 26, № 2, p. 273–312.

3. ***Arai Y., Morihra M., Ohmichi T.*** The effect of oxygen impurity on the characteristics of uranium and uranium-plutonium mixed nitride fuels // J. of nuclear materials, 1993, vol. 202, № 1-2 , p. 70–78.

4. ***Arai Y., Maeda A., Shiozawa K., Ohmichi T.*** Chemical forms of solid fission products in the irradiated uranium-plutonium mixed nitride fuel. Ibidem, 1994, vol. 210, № 1-2 , p. 161–166.

5. ***Любимов Д.Ю., Андросов А.В., Булатов Г.С., Гедговд К.Н.*** Термодинамическое моделирование фазового состава смешанного уран-плутониевого мононитрида при облучении быстрыми нейтронами до выгорания 80 ГВт·сут/т и температуре 900…1 400 К // Атомная энергия, 2013, т. 114, № 4, с. 198–202.

6. ***Бондаренко Г.Г., Булатов Г.С., Гедговд К.Н., Любимов Д.Ю., Якункин М.М.*** Изменение химического и фазового составов облучённого быстрыми нейтронами уран-плутониевого топлива в результате электронного распада металлических продуктов деления // Металлы, 2011, № 6, с. 59–64.

7. ***Srivastava D., Carg S.P., Goswami G.L.*** Thermodynamic analysis of mixture carbide, carbonitride and nitride fuels for fast breeder reactors // J. of nuclear materials, 1989, vol. 161, № 1 , p. 44–56.

8. ***Rogozkin B.D., Stepennova N.M., Bergman G.A., Proshkin A.A.*** Thermochemical stability, radiation testing, fabrication, and reprocessing of mononitride fuel // Atomic Energy, 2003, vol. 95, № 6, p. 835–844.

9. ***Белов Г.В.*** Расчёт равновесного состава и свойств термодинамических систем при повышенных давлениях // Математическое моделирование, 2001, т. 13, № 8, с. 9–12.

10. ***Глушков Е.С., Назаренко И.П., Паневин И.Г., Пономарёв-Степной Н.Н.*** Методы нейтронно-физического расчёта ядерных реакторов. М.: Изд-во МАИ, 2000.

Контактная информация –
Иванов Александр Сергеевич, проф., тел.: (499)196-72-38, e-mail: asi.kiae@gmail.com;
Русинкевич Андрей Александрович, нач. лаб., тел.: (499)196-71-86, (903)735-56-80, e-mail: rusinkevich_andr@mail.ru

Вопросы атомной науки и техники.
Сер. Физика ядерных реакторов, 2015, вып. 2,
с. 114–121,

Семинар “Физика ядерных реакторов”

Начиная с 1999 г. в НИЦ “Курчатовский институт” работает семинар “Физика ядерных реакторов”. Руководитель семинара – начальник Отдела физики ядерных реакторов С.М. Зарицкий.

К моменту выпуска настоящего сборника состоялись 148 заседаний семинара, тематика которого по факту не ограничивается заявленной в его названии.

В качестве докладчиков и участников семинара выступают специалисты НИЦ КИ и других Институтов.

Информация о семинаре размещается на сайте НИЦ “Курчатовский институт” (www.nrcki.ru), а также рассылается участникам семинара.

В настоящее время семинар проходит по пятницам, в 11-00, в конференц-зале Курчатовского ядерно-технологического комплекса (здание № 158, помещение 412). Проход в здание свободный. Сотрудники внешних организаций проходят на территорию НИЦ КИ по списку. Заявки на включение в список принимает Старостина Елена Анатольевна по телефону 8(499)196-71-98 или по электронной почте zaritskiy_sm@nrcki.ru.

В 2014 году состоялись 7 заседаний семинара (со 134-го по 140-е). Информация о 134-137 заседаниях опубликована в выпуске № 1-2 за 2014 год, информация о 138-140 заседаниях семинара опубликована в выпуске № 4 за 2014 год научно-технического сборника “Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика ядерных реакторов”.

Ниже приводится информация о 141…148 заседаниях семинара и аннотации докладов, предоставленные докладчиками.

141-е заседание, 23 января 2015 г. (более 160 участников из НИЦ КИ и 20-ти других московских и Российских организаций и учебных заведений).

Тема: **Термоядерная энергетика. 60 лет исследований, что дальше?**

Докладчик: **В.С. Стрелков** (НИЦ “Курчатовский институт”).

Обсуждаются основные результаты и современное состояние исследований по магнитному удержанию плазмы. Результаты экспериментальных исследований показали, что из всех рассмотренных систем в токамаке реализуется наибольшая степень термоизоляции плазмы. Дальнейшие исследования на токамаках стали основным направлением программ всех стран термоядерного сообщества, которое на основании анализа результатов многочисленных экспериментов постепенно стало склоняться к выводу, что в токамаке можно получить термоядерную энергию, превышающую энергию, затраченную на поддержание высокой температуры D-T плазмы, а в дальнейшем получить и зажигание.

ИТЕР должен продемонстрировать достижение величины Q в пределах 5…10 (отношение ядерной мощности к мощности, вводимой в плазму извне). Опыт проектирования и сооружения ИТЕРа, а также результаты последних экспериментов позволяют надеяться на то, что заявленная программная цель ИТЕРа – достижение Q = 5…10 – будет выполнена. После демонстрации на ИТЕРе достижения Q = 5…10 останется нерешённой со стороны плазмы только одна, по существу инженерно-технологическая, проблема стационарной (т.е. непрерывной в течение месяцев) работы реактора. Для решения этой проблемы потребуются развитие методов эффективной генерации тока в плазме в течение 3…10 тысяч часов и обеспечение надёжной работы первой стенки в течение этого или большего времени.

142-е заседание, 12 марта 2015 г. (более 60 участников из НИЦ КИ и 14-ти других московских и Российских организаций и учебных заведений).

Тема: **Статистические методы измерения абсолютной мощности критсборок и реакторов.**

Докладчик: **Г.В. Лебедев** (НИЦ “Курчатовский институт”).

Обсуждаются статистические методы экспериментальных исследований размножающих систем. Рассматривается задача измерения абсолютной мощности критсборок и реакторов в стационаре и динамике в диапазоне от милливатт до киловатт. В качестве примеров приведены результаты измерений абсолютной мощности методом корреляционного анализа (МКА) на уровнях в несколько сотен ватт в большой серии наземных испытаний прототипа ЯЭУ “Енисей” и макета реактора ВВЭР-440 на стенде LR-0. Анализируются погрешности измерения абсолютной мощности МКА и возможности сведения погрешностей к минимуму. Обсуждается возможность создания на критсборках систем мониторинга мощности, основанных на показаниях мониторов, откалиброванных в подкритическом состоянии методом Фейнмана. Рекомендуется к использованию на всех критсборках и реакторах методика проверки каналов регистрации нейтронов на наличие помех.

143-е заседание, 27 марта 2015 г. (более 120 участников из НИЦ КИ и 26-ти других московских и Российских организаций и учебных заведений).

Тема: **Электроядерные установки и проблемы ядерной энергетики.**

Докладчик: **В.Ф. Колесов** (ВНИИЭФ, г. Саров).

Обсуждаются различные электроядерные установки (ЭЛЯУ), представляющие собой комплекс ускорителя протонов, подкритического ядерного реактора и генерирующей нейтроны мишени. Анализируются результаты работ по ЭЛЯУ, выполненных во многих странах в течение 1990-х годов и первого десятилетия текущего столетия. Достоинства ЭЛЯУ в сравнении с традиционными ядерными реакторами заключаются в полной свободе от взрывных аварий, в более оперативном управлении путём быстрого изменения мощности ускорителя и в большей доле избыточных нейтронов. На современном этапе приоритетным считается использование ЭЛЯУ в качестве трансмутаторов ядерных отходов. Рассмотрение указанных вопросов проводится на фоне констатации проблем мировой ядерной энергетики и поиска путей решения этих проблем.

144-е заседание, 10 апреля 2015 г. (более 80 участников из НИЦ КИ и 11-ти других московских и Российских организаций и учебных заведений).

Тема: **Защита конструкционных материалов от коррозии в жидких металлах.**

Докладчик: **Е.А. Орлова** (ФЭИ, г. Обнинск).

Представлены результаты экспериментальных и расчётных исследований конкретных способов снижения взаимодействия конструкционных материалов (КМ) ЯЭУ с различными жидкими металлами (ЖМ) в рамках единой модели коррозии.

Для жидких металлов характерен интенсивный массоперенос примесей в силу высоких скоростей теплоносителей в атомной энергетике и их высокой плотности относительно газов. При этом существенное значение приобретает синергетика (согласованность взаимодействия частей при образовании структуры как единого целого) системы “КМ – ЖМ”.

Показаны перспективные методы защиты КМ от коррозии в ЖМ и других средах применительно к новым задачам (карбонитридная защита внутренней поверхности оболочки твэла в контакте с нитридным топливом, формирование фторидных защитных покрытий и др.).

Предлагаются к обсуждению способы преодоления заявленных оппонентами технологических трудностей при использовании жидкометаллического внутритвэльного подслоя с антикоррозионными свойствами.

145-е заседание, 24 апреля 2015 г. (более 130 участников из НИЦ КИ и 17-ти других московских и Российских организаций и учебных заведений).

Тема: **Запроектные аварии на АЭС с разрушением топлива. Опыт создания и перспективы развития систем контроля.**

Докладчик: **В.Ф. Шикалов** (НИЦ “Курчатовский институт”).

На примере объекта “УКРЫТИЕ” на аварийном блоке № 4 Чернобыльской АЭС рассмотрены технические аспекты разработки методов и создания средств контроля состояния разрушенных ядерных установок. Обсуждается создание (с использованием опыта работ на ЧАЭС) системы контроля для аварийного бака отмывки топлива на блоке № 2 АЭС “Пакш”. С учётом аварии на АЭС “Фукусима” в Японии определены перспективные направления контроля при запроектных авариях, в частности, подробно рассмотрены возможности создания средств, устойчивых к внешним воздействующим факторам, для контроля остаточного энерговыделения.

146-е заседание, 22 мая 2015 г. (более 150 участников из НИЦ КИ и 26-ти других московских и Российских организаций и учебных заведений).

Тема: **Термоядерные процессы в кавитирующих пузырьках.**

Докладчик: академик **Р.И. Нигматулин** (Институт океанологии им П.П. Ширшова РАН).

Изложены экспериментальные и теоретические основы так называемого пузырькового термояда. В этом процессе в центре цилиндрической колбы с дейтерированным ацетоном при резонансном с частотой 20 кГц и сфокусированном акустическом воздействии создаётся кавитационный сферический кластер диаметром ~ 10^{-2} м из сферических пузырьков. Под действием акустического поля эти пузырьки совершают объёмные осцилляции с острым коллапсом в стадии сжатия. Около 50 акустических осцилляций кластер сохраняет околосферическую форму. В стадиях коллапсов кластер излучает с частотой ~ 2 000 $с^{-1}$ импульсы термоядерных нейтронов 2,5 МэВ. Производительность нейтронов ~ 10^5 $с^{-1}$. Параллельно с этой же производительностью идёт образование ядер трития.

Численное исследование показало, что в центральных пузырьках кластера с паром достаточно большой молекулярной массы в стадии коллапса образуются сходящиеся к центрам пузырьков сферические ударные (микроударные) волны, которые фокусируют энергию в центрах пузырьков. Во время отражения этих ударных волн от этих центров образуются экстремальные сферические (нано-сферические) зоны. Эти зоны имеют размер ~ 10^{-7} м, температуру ~ 10^8 К, плотность ~ 10^4 кг/м^3 в течение ~ 10^{-12} с. За это время в такой нано-сферической зоне образуется ~ 10 термоядерных нейтронов и ядер трития.

Парадоксально, но именно кластерная (а не стримерная) кавитация и достаточно высокая молекулярная масса пара (что обеспечивает в паре низкую скорость звука) D-ацетона C_3D_6O по сравнению, например, с паром дейтерированной воды D_2O в условиях наших экспериментов являются необходимыми условиями образования в центральных пузырьках пузырькового кластера сходящихся сферических микроударных волн. Именно эти волны создают достаточную для образования термоядерных актов фокусировку энергии в нано-сферических зонах около центров пузырьков.

Рост несферических возмущений течения и ударной волны предотвращает полную фокусировку энергии и снижает максимальные значения параметров. Но этот рост существенно тормозится газом. Чем больше плотность газа, тем этот рост меньше и тем больше ресурс кумуляции энергии. Поверхностное натяжение влияет в стадии кавитационного роста пузырька тем, что может существенно уменьшить возмущение сферичности его поверхности в момент его максимального размера, а вязкость жидкости может существенно задержать развитие этой несферичности. Конденсация пара способствует кумуляции.

Пузырьковые жидкости открывают перспективы использования их в промышленной энергетике благодаря тому, что околосферическая фокусировка энергии инерционной и вязкой жидкостью принципиально более устойчива и эффективна, чем фокусировка энергии паровым взрывом, инициированным оптическим суперкоротким лазерным ударом.

147-е заседание, 05 июня 2015 г. (более 80 участников из НИЦ КИ и 14-ти других московских и Российских организаций и учебных заведений).

Тема: **Создание оксидного топлива с повышенной теплопроводностью для реакторов различного назначения.**

Докладчик: **И.С. Курина** (ФЭИ, г. Обнинск).

Разработана технология изготовления и исследования свойств модифицированного ядерного топлива (UO_2, PuO_{2-x} + MgO, $(U,Th)O_2$, Am_2O_3 + MgO на имитаторе Eu_2O_3 и др.) для реакторов различного назначения. Приводятся основные технологические операции, позволяющие изготовить оксидное топливо с повышенной теплопроводностью (в 1,5…2 раза выше справочных данных).

Приведены результаты измерения теплопроводности топливных таблеток разными методами. На примере диоксида урана показано, что модифицированное топливо обладает повышенной (в 2 раза выше справочных данных) теплоёмкостью.

Представлены результаты испытаний твэлов с топливом UO_2 и (PuO_{2-x} + MgO) в реакторе БОР-60. Результаты реакторных испытаний и послереакторных исследований показали, что разработанное модифицированное топливо обладает большей, чем стандартное топливо, микроструктурной стабильностью и способностью к удержанию газообразных продуктов деления при облучении, обеспечивает более низкий градиент температуры по радиусу твэла.

Приведены сравнительные результаты исследований микроструктуры, отношения O/Me, электросопротивления, термостойкости и др. свойств модифицированного и стандартного топлива, а также экспериментально-теоретическое обоснование повышенной теплопроводности модифицированного оксидного топлива.

148-е заседание, 19 июня 2015 г. (более 70 участников из НИЦ КИ и 11-ти других московских и Российских организаций и учебных заведений).

Тема: **Решение уравнения переноса нейтронов и гамма-квантов на неструктурированных тетраэдрических сетках (программа РадугаТ).**

Авторы: **Л.П. Басс, Н.И. Коконков, О.В. Николаева** (ИПМ им. М.В. Келдыша), **В.С. Кузнецов** (НИЦ “Курчатовский институт”).

Рассматриваются решение стационарного многогруппового уравнения переноса нейтронов и гамма-квантов на неструктурированных тетраэдрических сетках и решающая его программа РадугаТ, разрабатываемая в ИПМ им. М.В. Келдыша. Представлены испытуемые алгоритмы:

1. Нодальная сеточная схема с разрывно-линейным представлением решения внутри ячеек и на их гранях.
2. Двухшаговый KP1 итерационный метод решения сеточных уравнений для одной энергетической группы.
3. Двухуровневый (MPI + OpenMP) алгоритм распараллеливания вычислений на многопроцессорных системах с распределённой памятью.
4. Способы построения сетки из тетраэдров и получения информации из библиотек констант.

Обсуждается современное состояние программы РадугаТ. Приведены результаты решения многогрупповых тестовых задач, показывающие точность и эффективность используемых алгоритмов.

Правила оформления статей

При подготовке статьи в сборник автор должен руководствоваться стандартом “Оригиналы авторские и текстовые издательские” (ОСТ 29.115 – 88). К авторским оригиналам, передаваемым для издания, предъявляются следующие требования.

1. Экземпляр статьи должен быть первым, отпечатан на одной стороне листа формата А4 **шрифтом № 12 через 2 интервала**. Статья должна быть составлена в следующем порядке: индекс УДК; **заглавие; инициалы и фамилии авторов; место работы каждого автора с почтовым адресом; аннотация (не более 10 строк); ключевые слова** – всё вышеперечисленное **на русском и английском языках**; текст; список литературы; таблицы; рисунки; подрисуночные подписи (на отдельном листе).

2. Статья должна также предоставляться обязательно **в виде электронной версии обычным шрифтом № 12 Times New Roman, междустрочный интервал – одинарный**, в редакторе Word 97 или более поздних версий. Текст не форматируется, в качестве имени файла используется ФИО первого автора статьи. **Кавычки** в тексте ставятся **при английской раскладке клавиатуры (“..”)**.

3. Содержание статьи должно быть кратким и чётким. Исключаются общие рассуждения, известные положения. Не допускается дублирование материала в тексте, таблицах, подрисуночных надписях. Необходимо соблюдать единообразие в написании терминов, наименований физических величин и единиц измерения, условных обозначений, сокращений, символов. Наименования и обозначения единиц физических величин необходимо приводить в системе СИ.

Необходимо обращать внимание на **написание прописных и строчных букв: русские и греческие буквы (α, β, γ, φ и т.д.) набираются прямо, а латинские (*x, y, z, w* и т.д.) – курсивом**. Те же требования в обозначениях нужно соблюдать при написании индексов и степеней в формулах. **Обозначения матриц и векторов набираются полужирным шрифтом прямо**. Формулы, включённые в текст, следует набирать без увеличения интервала между строками, например b/d, $\exp(x/e)$.

4. Таблицы нумеруются, **каждая таблица должна иметь заголовок**. Сокращения в графах таблицы не допускаются. В тексте необходимы ссылки на все таблицы. **Каждая таблица печатается на отдельном листе, а в электронном виде представляется в отдельном файле.**

5. Формулы нумеруются арабскими цифрами, номер ставится с правой стороны листа в круглых скобках. **Нумеровать следует только те формулы и уравнения, на которые есть ссылка в последующем изложении**. Формулы выполняются в редакторах Equation 3.0 или MathType при невозможности набора на клавиатуре ($x_n^2, y_m^n, \sqrt{x}, \int_0^1 x, \frac{1}{y}$ и т.д.). Подстрочные и надстрочные индексы вводятся с клавиатуры (x_3, км^2 и т.д.), греческие буквы вставляются через Меню *Вставка* → *символ*.

6. В тексте статьи рисунок обязательно представляется на отдельном листе формата не более А4. На рисунках допускается минимальное число обозначений – краткие цифровые (по порядку номеров слева направо или по часовой стрелке) или буквенные обозначения. Все пояснения выносятся в подрисуночные подписи. **Внутренние надписи на рисунках набираются шрифтом № 11**. Внизу каждого рисунка должны быть приведены его номер и **подрисуночная подпись шрифтом № 11**. При наличии нескольких различных графиков на одном рисунке каждый из них обозначается русскими буквами а), б), в) и т.д. и расшифровывается.

В компьютерном виде рисунки представляются в отдельных файлах, выполненные в графических редакторах *Paint, PhotoShop, CorelDraw, jpg, png* (фотографии в растровом формате *tif, dpi*-300). Рисунки в Word не вставлять кроме случаев, когда рисунок изначально выполнен в Word.

7. Ссылки на литературу в тексте даются по порядку арабскими цифрами в квадратных скобках. **Список литературы составляется в той же последовательности, в которой приводятся ссылки на литературу**. Фамилии и инициалы авторов набираются полужирным курсивом.

8. Список литературы следует оформлять в соответствии с Государственным стандартом “Библиографическая ссылка” (ГОСТ Р 7.0.5–2008), в частности, необходимо указать :

а) для журнальных статей – фамилии и инициалы **всех** авторов, название статьи, название журнала (без кавычек), год, том, выпуск, номер, страницы;

б) для книг – фамилии и инициалы **всех** авторов, полное название книги, место издания, издательство (без кавычек), год издания;

в) для авторефератов диссертаций – фамилию и инициалы автора, название автореферата диссертации, на соискание какой учёной степени написана диссертация, место и год защиты;

г) для препринтов – фамилии и инициалы **всех** авторов, название препринта, наименование издающей организации, шифр и номер, место и год издания;

д) для патентов – фамилии и инициалы **всех** авторов, название патента, страну, номер и класс патента, дату и год заявления и опубликования патента;

е) для отчётов – фамилии и инициалы **всех** авторов, название отчёта, инвентарный №, наименование организации, год выпуска;

ж) **для электронных источников – полный электронный адрес (включая дату обращения к источнику)**, позволяющий обратиться к публикации.

9. В конце текста указывается контактная информация об авторах статьи: фамилия, имя и отчество (полностью), должность, телефон, e-mail и по желанию автора – домашний почтовый адрес.

ВОПРОСЫ АТОМНОЙ НАУКИ И ТЕХНИКИ

С е р и я: Физика ядерных реакторов

Выпуск 2

Ответственный за выпуск **С.М. Зарицкий**
(тел./факс: (499)196-71-98, e-mail: zaritskiy_sm@nrcki.ru)

Редактор **В.В. Пчелин**
(тел./факс: (499)196-99-44, e-mail: pchelin_vv@nrcki.ru)

Подписано в печать 22.06.15. Формат 70×108/16
Печать цифровая. Усл. печ. л. 16. Уч.-изд. л. 15. Тираж 250. Индекс 3646. 14 статей. Заказ 31

Отпечатано в НИЦ “Курчатовский институт”
123182, Москва, пл. Академика Курчатова, 1