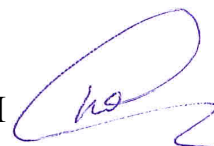


Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ БЕЗОПАСНОГО РАЗВИТИЯ АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
(ИБРАЭ РАН)

На правах рукописи

КОЛТАШЕВ ДМИТРИЙ АЛЕКСАНДРОВИЧ



**СВЯЗАННЫЕ РАСЧЕТЫ МАКРОЯЧЕЕК РЕАКТОРА НА БАЗЕ
ТРЕХМЕРНЫХ НЕЙТРОННО-ФИЗИЧЕСКИХ И
ТЕПЛОГИДРАВЛИЧЕСКИХ КОДОВ**

05.14.03 – Ядерные энергетические установки, включая проектирование,
эксплуатацию и вывод из эксплуатации

ДИССЕРТАЦИЯ
на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Научный руководитель:
д.ф.-м.н. В.Ф.Стрижов

Москва – 2021

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение.....	5
1 Постановка задачи	12
1.1 Использование нейтронно-физических кодов в связанных расчетах	14
1.2 Использование теплогидравлических кодов в связанных расчетах на базе Монте-Карло кодов.....	17
1.3 Мировой опыт проведения связанных расчетов.....	18
1.4 Построение согласованной расчетной модели в связанных расчетах с использованием Монте-Карло кодов	20
1.4.1 Обеспечение корректности и устойчивости результатов Монте-Карло расчетов	21
1.4.2 Определение критерия сходимости связанных расчетов	23
1.4.3 Согласование вычислительных сеток.....	26
1.5 Выводы по главе 1	28
2 Разработка программной оболочки для обеспечения связанных расчетов 30	
2.1 Описание расчетных кодов.....	32
2.1.1 Нейтронно-физические коды семейства MCU	32
2.1.2 Канальные теплогидравлические коды семейства HYDRA-IBRAE 36	
2.1.3 Пакет OpenFOAM	37
2.2 Оболочка Coupled Calculation Shell.....	38
2.2.1 Архитектура оболочки	42
2.2.2 Задание входных данных для расчета.....	44
2.2.3 Запуск расчетов	48
2.2.4 Формат выходных данных	49

2.3 Выводы по главе 2	50
3 Связанные стационарные расчеты макроячеек реакторов с водяным и свинцовым теплоносителем.....	51
3.1 Апробация технологии связанных расчетов на базе макроячеек реакторов с водяным теплоносителем	51
3.1.1 Описание расчетных моделей.....	51
3.1.2 Анализ влияния параметров нейтронно-физической модели и расчетных параметров на результаты связанных расчетов	58
3.1.3 Сравнение результатов, полученных с применением CFD кода OpenFOAM и канального кода HYDRA-IBRAE/H ₂ O	82
3.2 Связанные расчеты ячейки реактора со свинцовым теплоносителем	89
3.2.1 Описание расчетной модели.....	90
3.2.2 Определение критерия сходимости для завершения расчетов	91
3.2.3 Анализ результатов связанных расчетов ячейки реактора с распуханием в центральной части твэла.....	93
3.2.4 Анализ результатов связанных расчетов ячейки реактора с изменением площади проходного сечения в её нижней части.....	96
3.2.5 Анализ результатов связанных расчетов при различной скорости теплоносителя.....	101
3.3 Связанные расчеты активной зоны реакторной установки со свинцовым теплоносителем	103
3.3.1 Описание расчетной модели интегрального кода	104
3.3.2 Описание расчетной модели в связанных расчетах по кодам MCU-FR и OpenFOAM	107
3.3.3 Сравнение полученных результатов	107
3.4 Выводы по главе 3	109

Заключение	114
Список сокращений	115
Список литературы	116
Основные публикации по теме диссертации.....	123

Введение

Актуальность работы

Современные требования к обоснованию безопасности реакторных установок как с водяным, так и с жидкометаллическим теплоносителем обуславливают необходимость моделирования широкого класса процессов, протекающих в активных зонах, на базе комплексных моделей с использованием нейтронно-физических и теплогидравлических кодов, выполняющих связанные расчеты.

Особое внимание уделяется применению прецизионных методов расчета, поскольку их использование позволяет определять характеристики в локальных областях, задаваемых в 3D моделях в соответствии с конструктивными особенностями элементов моделируемых систем, а также учитывать локальные эффекты, связанные с различными пространственными и плотностными неоднородностями, вызванными, в том числе кипением теплоносителя, деформированием оболочек тепловыделяющих элементов, распуханием топлива, блокировкой проходного сечения ТВС и др.

Актуальность развития технологии прецизионных связанных расчетов обуславливается необходимостью получения численных решений ввиду объективной сложности, высокой стоимости или невозможности получения экспериментальных данных для объектов ядерной энергетики, что особенно актуально для разрабатываемых новых проектов АЭС с жидкометаллическим (свинцовым) теплоносителем.

Для выполнения связанных расчетов требуется построение согласованной расчетной модели, от параметров которой во многом зависят результат и степень доверия к нему. Создание согласованной расчетной модели предполагает формирование расчетных сеток для нейтронно-физического и теплогидравлического кодов на базе единого набора исходных данных, а также определение начальных и граничных условий. Создание согласованной расчетной модели в «ручном режиме» является очень трудоемким, зачастую приводящим потенциально к критическим ошибкам, которые, к тому же, трудно

идентифицировать. Актуальной задачей является создание инструмента для автоматизированной подготовки согласованной расчетной модели.

В данной работе разработана и апробирована технология проведения связанных расчетов с использованием прецизионных нейтронно-физических кодов семейства MCU (MCU-FREE, MCU-FR) и двух теплогидравлических кодов – трехмерного кода OpenFOAM, распространяемого по свободной лицензии GNU General Public Licence, и аттестованного инженерного канального теплогидравлического кода семейства HYDRA-IBRAE для установок с водяным (HYDRA-IBRAE/H₂O) и свинцовым (HYDRA-IBRAE/LM) теплоносителями.

Цель диссертационной работы

Цель работы заключается в разработке технологии и проведении связанных стационарных нейтронно-физических (на базе методов Монте-Карло) и теплогидравлических (на базе CFD и канальных кодов) расчетов макроячеек реактора с водяным и жидкометаллическим теплоносителем.

Поставленная цель предполагает решение следующих задач:

- разработка программной оболочки, содержащей инструментальные средства для формирования согласованной расчетной модели, включая построение сеточных моделей на базе единых данных о геометрии моделируемого объекта, и обеспечения обмена данными для выполнения связанных расчетов;
- построение с помощью программной оболочки согласованных расчетных моделей для выполнения связанных стационарных расчетов макроячеек реактора с водяным и жидкометаллическим теплоносителем с использованием кодов семейства MCU (MCU-FREE и MCU-FR) и CFD кода OpenFOAM или теплогидравлических канальных кодов семейства HYDRA-IBRAE (HYDRA-IBRAE/H₂O и HYDRA-IBRAE/LM);
- проведение связанных стационарных расчетов макроячеек реакторов с водяным теплоносителем с использованием нейтронно-физических кодов семейства MCU и валидированного канального одномерного

- теплогидравлического кода HYDRA-IBRAE/H₂O или CFD кода OpenFOAM, анализ и сравнение полученных результатов, отработка методических вопросов и верификация программной оболочки;
- проведение расчетов модельной тепловыделяющей сборки со свинцовым теплоносителем и анализ влияния возмущений теплогидравлических параметров, вызванных распуханием оболочек и топлива тепловыделяющих элементов, на нейтронно-физические характеристики;
 - проведение прецизионных расчетов по кодам MCU-FR и OpenFOAM, с учетом локальных характеристик энерговыделения и теплообмена в контурных расчетах реакторной установки со свинцовым теплоносителем для определения температуры наиболее энергонапряженного твэла, а также сравнение с результатами, полученными по интегральному коду ЕВКЛИД/V1.

Научная новизна работы

Впервые для нейтронно-физических кодов семейства MCU (MCU-FREE и MCU-FR) и теплогидравлических кодов CFD класса OpenFOAM и канальных семейства HYDRA-IBRAE (HYDRA-IBRAE/H₂O и HYDRA-IBRAE/LM) разработана программная оболочка Coupled Calculation Shell (CCS), содержащая инструментальные средства для построения согласованной расчетной модели в связанных стационарных расчетах.

С помощью программной оболочки построены согласованные расчетные модели для проведения связанных стационарных расчетов макроячеек реактора с водяным и жидкометаллическим теплоносителем с использованием кодов семейства MCU (MCU-FREE и MCU-FR) и CFD кода OpenFOAM или теплогидравлических канальных кодов семейства HYDRA-IBRAE (HYDRA-IBRAE/H₂O и HYDRA-IBRAE/LM).

Для макроячейки реактора с водяным теплоносителем показано согласие результатов связанных расчетов интегральных характеристик, полученных с

помощью разработанной модели, с результатами, полученными международным сообществом и опубликованными в свободном доступе.

С использованием нейтронно-физического кода MCU-FR и пакета OpenFOAM проанализировано влияние возмущения расчетных параметров, обусловленного распуханием оболочек и топлива ТВЭЛОВ, на теплогидравлические и нейтронно-физические характеристики в расчетах макроячеек реактора со свинцовым теплоносителем.

С помощью связанных расчетов по кодам MCU-FR и OpenFOAM для ТВС реакторной установки со свинцовым теплоносителем проанализировано влияние локальных характеристик энерговыделения и теплообмена на температуру топлива, показано, что температура топлива наиболее энергонапряженного ТВЭЛА в пределах диапазона неопределенностей соответствует результатам расчетов по коду ЕВКЛИД/V1.

Практическая значимость

Разработанная программная оболочка Coupled Calculation Shell (CCS, свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2021610112 от 12 января 2021 г.) может использоваться для проведения в автоматизированном режиме связанных стационарных расчетов макроячеек реакторов с водяным или жидкометаллическим теплоносителем по нейтронно-физическим кодам семейства MCU и теплогидравлическим канальным кодам семейства HYDRA-IBRAE или CFD коду OpenFOAM или по другим кодам схожей области применимости.

Верифицированная на базе макроячеек реакторов с водяным теплоносителем программная оболочка для кодов MCU-FREE, MCU-FR, HYDRA-IBRAE/H₂O, HYDRA-IBRAE/LM, OpenFOAM может использоваться для проведения уточняющих связанных расчетов локальных характеристик реакторных установок с водяным или жидкометаллическим теплоносителем, а также для кросс-верификации инженерных расчетных кодов и методик.

Результаты стационарных расчетов макроячеек реакторов с водяным и свинцовым теплоносителем, полученные с применением нейтронно-физических

кодов семейства MCU (MCU-FREE и MCU-FR) и канальных теплогидравлических кодов семейства HYDRA-IBRAE (HYDRA-IBRAE/H₂O или HYDRA-IBRAE/LM) или CFD кода OpenFOAM, могут быть использованы для сравнения с результатами, получаемыми с помощью других программ.

Положения, выносимые на защиту

Программная оболочка Coupled Calculation Shell (CCS), содержащая инструментальные средства для построения согласованных расчетных моделей и проведения связанных стационарных расчетов по нейтронно-физическим кодам семейства MCU (MCU-FREE и MCU-FR) и CFD коду OpenFOAM или канальным теплогидравлическим кодам семейства HYDRA-IBRAE (HYDRA-IBRAE/H₂O и HYDRA-IBRAE/LM) и разработанные с её помощью согласованные модели макроячеек реакторов с водяным и свинцовым теплоносителем.

Результаты стационарных расчетов макроячеек реакторов с водяным теплоносителем, полученные с применением нейтронно-физического кода MCU-FREE и теплогидравлического канального кода HYDRA-IBRAE/H₂O и CFD кода OpenFOAM, на базе расчетных моделей с обоснованием выбора параметров расчета (статистические параметры, параметры источников, зон регистрации и др.).

Результаты стационарных расчетов макроячеек реактора со свинцовым теплоносителем с возмущением параметров, вызванных распуханием оболочек тепловыделяющих элементов, полученные с применением кодов MCU-FR и OpenFOAM.

Расчетная модель установки со свинцовым теплоносителем и результаты расчетов стационарного состояния модельной ТВС на номинальном уровне мощности с применением кодов MCU-FR и OpenFOAM для определения максимальной температуры наиболее энергонапряженного твэла, а также результаты расчетов с помощью интегрального кода ЕВКЛИД/V1.

Достоверность и обоснованность результатов работы

Достоверность и обоснованность результатов работы подтверждается сравнением результатов расчетов с реперными значениями, представленными в открытых источниках, результатами методических расчетов, а также результатами многовариантных расчетов, выполненных с применением валидированных или аттестованных расчетных кодов (HYDRA-IBRAE/H₂O, HYDRA-IBRAE/LM, ЕВКЛИД/V1).

Личный вклад автора заключается

В реализации программной оболочки Coupled Calculation Shell (CCS), содержащей инструментальные средства для построения согласованных расчетных моделей и проведения связанных стационарных расчетов по нейтронно-физическим кодам семейства MCU (MCU-FREE и MCU-FR), CFD коду OpenFOAM и теплогидравлическим канальным кодам семейства HYDRA-IBRAE (HYDRA-IBRAE/H₂O и HYDRA-IBRAE/LM).

В подготовке расчетных моделей макроячеек реакторов с водяным и жидкометаллическим теплоносителем для расчетов по нейтронно-физическим кодам MCU-FREE и MCU-FR, а также теплогидравлическим кодам HYDRA-IBRAE/H₂O, HYDRA-IBRAE/LM и OpenFOAM.

В проведении многовариантных расчетов макроячеек реакторов с водяным и свинцовым теплоносителем с применением нейтронно-физических кодов семейства MCU – MCU-FREE и MCU-FR и теплогидравлического кода HYDRA-IBRAE/H₂O и CFD кода OpenFOAM, анализе и обосновании достоверности полученных результатов.

В проведении связанных расчетов наиболее энергонапряженной ТВС реакторной установки со свинцовым теплоносителем с использованием кодов MCU-FR и OpenFOAM, а также в разработке нейтронно-физической модели активной зоны реакторной установки со свинцовым теплоносителем и проведении интегральных расчетов по коду ЕВКЛИД/V1.

Апробация работы

Результаты диссертации докладывались и обсуждались на следующих российских и международных конференциях:

- Школа молодых ученых ИБРАЭ РАН в 2013 — 2017, 2019 гг. (г. Москва, Россия);
- Конференция молодых специалистов «Инновации в атомной энергетике» в 2015, 2017 гг. (г. Москва, Россия);
- 59-я Всероссийская научная конференция МФТИ в 2016 г. (г. Москва, Россия);
- Международная научно-практическая конференция по атомной энергетике. Безопасность, эффективность, ресурс. МНПК-2017 в 2017 г. (г. Севастополь, Россия).

Публикации. По теме диссертации опубликовано 15 научных работ из них 5 статей, включая 4 статьи в журналах из перечня ВАК Минобрнауки России, 1 препринт и 9 докладов на российских конференциях и семинарах.

Структура и объем работы

Диссертация состоит из введения, 3 глав, заключения, списка литературы из 60 библиографических ссылок. Общий объем работы составляет 125 страниц основного текста, включая 14 таблиц и 65 рисунков.

1 Постановка задачи

Компьютерное моделирование с использованием современных вычислительных технологий приобретает все большее значение ввиду объективной сложности, высокой стоимости или полной невозможности получения экспериментальных данных для новых объектов ядерной энергетики.

Одним из передовых направлений расчетных обоснований является проведение прецизионных расчетов стационарных состояний с использованием нейтронно-физических кодов на базе методов Монте-Карло и теплогидравлических CFD кодов.

Широко используемыми в России нейтронно-физическими кодами на базе методов Монте-Карло является семейство кодов MCU (разработчик – НИЦ «Курчатовский институт»), в том числе версия MCU-FREE, предназначенная для учебных и научно-поисковых целей. Коды этого семейства используются как для обоснования безопасности РУ технологии ВВЭР, так и РУ со свинцовым теплоносителем и ряда других установок. Использование CFD кодов для обоснования теплогидравлических характеристик реакторных установок становится все более популярным. В основном используются коды, распространяемые на коммерческой основе (STAR-CCM+, ЛОГОС, FlowVision). В то же время можно отметить широкое использование CFD кодов, распространяемых по свободной лицензии GNU General Public Licence, например, OpenFOAM. Возможность использования свободно распространяемых кодов гарантирует независимость от различного рода санкций и наличия финансовых ресурсов. Кроме того, задачи, решенные для открытых кодов, в ряде случаев, с минимальными трудозатратами могут быть подготовлены для использования коммерческими кодами. В данной работе рассматривается актуальная задача разработки технологии выполнения связанных стационарных расчетов с использованием нейтронно-физических кодов семейства MCU (MCU-FREE, MCU-FR) и теплогидравлического кода OpenFOAM, а также валидированных канальных теплогидравлических кодов семейства HYDRA-IBRAE (HYDRA-

IBRAE/H₂O для установок с водным теплоносителем и HYDRA-IBRAE/LM для установок с жидкометаллическим теплоносителем). Использование канальных подходов актуально для решения задач, в которых возникают режимы течения и теплообмена двухфазных потоков, например, задач с кипением теплоносителя, которые в настоящее время не могут быть эффективно решены с использованием кодов CFD класса.

Современный уровень моделирования активных зон реакторных установок предполагает использование связанных расчетов на базе комплексных расчетных моделей с применением известных и широко распространенных нейтронно-физических, теплогидравлических, термомеханических и др. кодов.

При практическом применении связанных стационарных расчетов макроячеек реактора на базе трехмерных нейтронно-физических и теплогидравлических кодов возникает задача обоснования получаемых результатов, связанная с отсутствием аналитических решений или реперных значений нейтронно-физических и теплогидравлических характеристик, поскольку применение прецизионных расчетов ориентировано на области, в которых подобные значения отсутствуют. При проведении связанных расчетов на базе последовательных итераций результат зависит от вычисляемых на каждой итерации характеристик, в том числе используемых для обмена данными между кодами (распределение энерговыделения, температуры материалов и плотности теплоносителя), а также корректностью и устойчивостью алгоритма, использующегося для решения связанной задачи. Во многих работах показано влияние расчетных параметров (статистических, геометрических и др.) на распределение плотности потока нейтронов и связанных функционалов (энерговыделения) при проведении нейтронно-физических расчетов методом Монте-Карло. Для определения набора параметров, обеспечивающих в Монте-Карло расчетах корректность вычисляемых локальных характеристик, проводятся многовариантные связанные расчеты с возмущенными расчетными параметрами. В рамках многовариантных связанных расчетов обычно применяются одномерные канальные коды для сокращения временных и вычислительных ресурсов. Сформированный на базе

многовариантных расчетов набор параметров используется при определении параметров прецизионного моделирования с применением Монте-Карло и CFD кодов, при этом результаты прецизионных расчетов анализируются в сравнении с данными, полученными с применением одномерных кодов.

Мировой опыт проведения связанных расчетов, а также существующая база экспериментальных и расчетных данных, в большей степени накопленных для установок с водяным теплоносителем, обуславливает применение макроячеек таких реакторов для апробации и кросс-верификации новых разработок в области связанных расчетов. Апробация технологии связанных расчетов, анализ чувствительности нейтронно-физического кода к возмущению параметров и верификация автоматизированного инструмента для подготовки согласованной расчетной модели (в данной работе называемого программной оболочкой) могут быть выполнены путем проведения стационарных расчетов для макроячеек гетерогенных реакторов с водяным теплоносителем на базе расчетных моделей с возмущением теплогидравлических и нейтронно-физических параметров и анализа влияния указанных возмущений на вычисляемые характеристики.

Задача адаптации отработанной на базе макроячеек реактора с водяным теплоносителем технологии к моделированию макроячеек жидкометаллических реакторов является актуальной и требует дополнительного анализа с учетом специфики спектра и времени жизни нейтронов, особенностей теплоносителя и др.

1.1 Использование нейтронно-физических кодов в связанных расчетах

Для решения практических задач физики реакторов применяются инженерные и прецизионные нейтронно-физические коды.

В основе инженерного подхода традиционно лежит использование различных приближений уравнения Больцмана для переноса нейтронов. Наиболее распространенным подходом является использование диффузионного приближения в малогрупповом представлении. Инженерные расчеты сопряжены с большим количеством упрощений (упрощенная геометрия, гомогенизированные

концентрации, макросечения реакций в групповом представлении и др.). В то же время инженерные коды широко применяются при решении реакторных задач и ориентированы на моделирование существующих установок, в том числе для уточнения эксплуатационных и проектных аварийных режимов. Использование упрощений позволяет существенно сократить расчетное время, что важно при моделировании эксплуатационных режимов специалистами АЭС или при разработке различных тренажеров для подготовки персонала, в том числе в при проведении расчетов в реальном времени. При этом использование описанных приближений и упрощений ограничивает область применимости кодов и обуславливает необходимость наличия реперных данных для настройки кодов на конкретный тип реактора или моделируемые режимы.

Коды, базирующиеся на методах Монте-Карло, лишены недостатков, присущих инженерным методам, и активно применяются для моделирования разрабатываемых установок и более детального исследования различных режимов существующих установок. В этих кодах осуществляется прямое моделирование переноса нейтронов в среде с момента рождения до момента поглощения либо вылета из системы. Взаимодействие нейтронов с ядрами среды моделируется с использованием библиотек нейтронно-физических констант, которые формируются непосредственно на базе файлов оцененных ядерных данных.

Метод Монте-Карло является наиболее универсальным методом, применяемым для расчета переноса нейтронов с возможностью моделирования на основе библиотек ядерно-физических данных в поточечном представлении (в отличие от инженерных, где используются групповые) и точного задания 3D геометрии без гомогенизации материальных составов и дополнительных упрощений (например, дискретизации направлений полета частиц). Коды Монте-Карло позволяют рассчитывать функционалы в малых локальных областях, в том числе при наличии различных пространственных и плотностных неоднородностей, вызванных особенностями геометрической компоновки реакторной установки или физическими явлениями, например, кипением теплоносителя. В условиях отсутствия реперных и экспериментальных данных

при разработке новых реакторных установок и расширенном анализе аварийных режимов нейтронно-физические Монте-Карло коды не имеют альтернативы. В свою очередь результаты расчетов по Монте-Карло кодам могут использоваться в качестве реперных значений для сопоставления с результатами расчетов по инженерным кодам и оценки погрешностей, связанных с теми или иными упрощениями.

Формулирование основных принципов и методик применения методов Монте-Карло в нейтронно-физических расчетах послужило началом развития компьютерных кодов на базе описанной группы методов [1]. Первые компьютерные коды были направлены на решение конкретных задач и реализованы с применением машинных языков. Развитие вычислительных технологий и появление языков программирования высокого уровня послужило предпосылками к созданию универсальных компьютерных программ, реализующих методы Монте-Карло. Первым универсальным кодом можно считать программу MCS, разработанную в Лос-Аламосской лаборатории в 1963 г. [2]. Ключевым преимуществом данного кода являлась возможность его использования сторонними пользователями без изменений исходных кодов программы. В дальнейшем данный код лег в основу семейства программ MCNP – самого распространенного и широко применяемого за последние 30 лет в мире нейтронно-физического кода.

Современные нейтронно-физические Монте-Карло коды представляют собой универсальные расчетные инструменты, реализованные с применением высокоуровневых языков программирования. Они обладают пользовательскими интерфейсами, обеспечивающими их отчуждаемость при решении различных задач ядерной и радиационной безопасности. На данный момент в мире существуют и широко используются различные коды, использующие методы Монте-Карло, такие как уже упомянутый код MCNP, разрабатываемый в Лос-Аламосской национальной лаборатории, коды TRIPOLI (Франция), TMCC (Китай), Serpent (Финляндия), MC21 (США), OpenMC (США), а также российские

коды, такие как коды семейства MCSU (НИЦ Курчатовский институт), TDMSS (РФЯЦ – ВНИИЭФ), ПРИЗМА (РФЯЦ – ВНИИТФ), ММК-KENO (ГНЦ РФ ФЭИ).

1.2 Использование теплогидравлических кодов в связанных расчетах на базе Монте-Карло кодов

В настоящий момент существует значительное количество коммерческих и свободно распространяемых теплогидравлических кодов, которые широко применяются в различных задачах физики реакторов.

Наиболее широкое распространение при проведении инженерных расчетов реакторных установок получили системные теплогидравлические коды (англ. System codes). Такие коды позволяют моделировать различные узлы реакторных установок, включая первый и второй контур, парогенераторы и др. при различных режимах работы. Как правило, такие коды реализуют решение системы уравнений в одномерном представлении для моделирования однофазного/двухфазного течения теплоносителя и базируются на обобщении эмпирических данных (замыкающих соотношений). При этом применение таких кодов ограничивается областью, для которой были получены обобщенные данные. Системные коды позволяют использовать различные нодализационные схемы моделируемой системы, отличающиеся компоновкой расчетной модели, а также детализацией расчетной сетки. Одним из распространенных современных подходов является моделирование активной зоны реактора в виде системы параллельных каналов, что позволяет таким образом учесть пространственное распределение температур и плотностей в расчетной модели, как в плане, так и в аксиальном направлении.

Ячейковые теплогидравлические коды (англ. Sub-channel codes) предназначены для моделирования процессов, протекающих в активной зоне реактора, в том числе и с учетом горизонтального массообмена между соседними параллельными участками (ячейками/субканалами).

В последнее время все большее значение приобретают CFD-коды (англ. Computational fluid dynamics), базирующиеся на использовании трехмерных уравнений гидродинамики. В отличие от системных кодов CFD-коды в меньшей степени зависят от эмпирических данных и могут быть применены к более широкому спектру моделируемых явлений. Использование CFD-кодов позволяет проводить детальный анализ с учетом различных пространственных и плотностных неоднородностей, несимметричности и трехмерного характера распределений. Современные CFD-коды включают широкий набор моделей для описания различных процессов, таких как теплообмен, эффекты турбулентности и др. Модели могут отличаться уровнем точности и областью применимости, что необходимо учитывать при проведении моделирования.

Использование CFD-кодов в реакторном моделировании становится все более востребованным. Международный опыт применения таких кодов при решении практических задач физики реакторов в основном базируется на расчетах установок с водяным теплоносителем. Использование CFD-кодов в расчетах установок со свинцовым теплоносителем может быть обусловлено необходимостью учета локальных эффектов [3].

1.3 Мировой опыт проведения связанных расчетов

В настоящее время существуют коммерческие версии полномасштабных интегральных расчетных кодов, выполняющих самосогласованное моделирование различных физических процессов, для моделирования реакторных установок с водо-водяным и жидкометаллическим теплоносителем на базе инженерных нейтронно-физических расчетов. В нашей стране актуальным направлением является разработка интегральных кодов, ориентированных на моделирование реакторных установок с быстрым спектром нейтронов, для обоснования безопасности перспективных реакторных установок с жидкометаллическим теплоносителем. Одним из таких кодов, разрабатываемых в ИБРАЭ РАН, является код ЕВКЛИД/V1 [4], предназначенный для мультифизического моделирования РУ со свинцовым и натриевым теплоносителями.

Вопросы развития методики прецизионных связанных расчетов рассматриваются с 2007 года на ведущих конференциях, посвященных ядерной безопасности и реакторному моделированию, таких как PHYSOR (The Physics of Reactors Conference) и M&C (International Conference on Mathematics & Computational Methods), специалистами ведущих ядерных центров и исследовательских лабораторий из США, Германии, Китая, России и др.

Развитие методики связанных расчетов требует определения параметров согласованной расчетной модели, включая параметры Монте-Карло расчетов (статистические параметры, параметры источника и зон регистрации), сеточные параметры и др., а также отработки технологии моделирования на базе бенчмарк-расчетов. Бенчмарк расчеты позволяют отработать методику определения сеточных параметров в связанных расчетах при полномасштабном моделировании.

В реакторном моделировании наиболее распространены связанные расчеты водо-водяных реакторных установок (PWR, BWR, ВВЭР). Многовариантные модельные расчеты с использованием одномерных теплогидравлических кодов позволяют уточнить расчетные параметры, необходимые для формирования согласованных расчетных моделей исследуемых объектов, для использования в расчетах с применением трехмерных CFD кодов. В мире для отработки методики связанных расчетов с применением нейтронно-физического Монте-Карло кода MCNP в расчетах ячеек LWR реакторов использовались ячейковые теплогидравлические коды SUBCHANFLOW [5], COBRA/CTF [6, 7, 8] и др. Активно ведутся работы по развитию методики связанных расчетов с использованием нейтронно-физических Монте-Карло кодов таких как MC21 [9, 10], OpenMC [11], TRIPOLI [12], Serpent [13, 14] и др. Российский код MCU использовался для проведения связанных расчетов ячейки реактора ВВЭР-1000 в работе [15]. Код MCNP используется для связанных расчетов моделей как существующих реакторных установок, так и проектов перспективных водоохлаждаемых реакторов со сверхкритическими параметрами, таких как SCWR и HPLWR [16, 17].

Наработанный опыт связанных расчетов с применением одномерных теплогидравлических кодов обеспечивает возможность проведения прецизионных расчетов с использованием трехмерных теплогидравлических CFD-кодов. Связанные расчеты с применением кода MCNP и коммерческих теплогидравлических CFD кодов STAR-CCM+ [18] и STAR-CD [19] осуществлялись в США для ячеек твэлов реактора PWR. С применением кодов TRIPOLI и CFX в Словении осуществлялось моделирование нестационарных режимов исследовательского реактора TRIGA [20]. Нейтронно-физический код TMCC использовался в связанных расчетах с кодом CFX специалистами из Китая для стационарных и нестационарных расчетов ячеек твэлов реактора LWR [21]. Активные работы ведутся в Финляндии по исследованию методики связанных расчетов на базе свободно распространяемого кода OpenFOAM и нейтронно-физического кода Serpent применительно к водо-водяным и жидкометаллическим реакторным установкам [22, 23].

Анализ мирового опыта проведения связанных расчетов подтверждает необходимость отработки расчетной технологии на базе макроячеек реакторов с водяным теплоносителем и исследования особенностей построения согласованной расчетной модели. Методика связанных расчетов, отработанная для систем с водяным теплоносителем, может быть распространена на моделирование перспективных систем с жидкометаллическим теплоносителем.

1.4 Построение согласованной расчетной модели в связанных расчетах с использованием Монте-Карло кодов

Связанные расчеты с применением распространенных и зарекомендовавших себя теплогидравлических и нейтронно-физических кодов приводят к необходимости решения проблемы построения согласованной расчетной модели.

Нейтронно-физические и теплогидравлические коды имеют свою расчетную специфику, которая во многом определяется уровнем используемых “прикладных” данных, особенностями методов и др. В нейтронно-физических расчетах применяются ядерные данные, в теплогидравлических кодах

используются замыкающие соотношения, модели турбулентности и др. для связи основных тепло-гидравлических характеристик. Формирование согласованной расчетной модели требует учета специфики указанных данных и используемых алгоритмов, включая допустимые интервалы расчетных параметров, особенности сходимости методов, параметры вычислительных сеток и др.

1.4.1 Обеспечение корректности и устойчивости результатов Монте-Карло расчетов

Моделирование реакторных систем на основе связанных расчетов инициирует в качестве ключевой проблему обоснования получаемых результатов, достоверность которых требует подтверждения, на каждом из этапов выполнения расчетов ввиду отсутствия аналитических решений и реперных значений. Надежность связанных расчетов напрямую зависит от значений «связующих» характеристик (обратных связей), вычисляемых в используемых кодах. Анализ указанных характеристик предполагает необходимый уровень знаний относительно специфики используемых кодов, включая численные методы, условия сходимости и др.

Одной из центральных задач при использовании Монте-Карло кодов является проблема определения расчетных параметров, которые обеспечивают устойчивость и корректность рассчитываемых функционалов. Под корректностью подразумевается соответствие вычисляемых распределений уравнению переноса нейтронов. Устойчивость функционалов предполагает сохранение их значений в рамках погрешности при возмущении параметров модели (размеры и положение зон регистрации) и расчетных параметров (статистические параметры, параметры источников и др.). Во многих работах приводятся результаты расчетов, иллюстрирующие влияние таких расчетных параметров, как статистические, геометрические, параметры зон регистрации и т.д. на распределения потоков нейтронов и связанных с ними функционалов. Так, например, для слабосвязанных систем при изменении статистических параметров или параметров источника характерный вид распределения плотности потока нейтронов может существенно

изменяться, вплоть до получения нефизичных результатов. Для макроячеек реакторов или моделей отдельных твэлов, которые традиционно не являются слабосвязанными, также распределения плотности потока нейтронов и скоростей реакций существенно зависят от расчетных параметров.

Традиционно проведение расчетов методом поколений направлено на получение значения $K_{эф}$, что не гарантирует обеспечения корректности и устойчивости распределений потоков нейтронов. Погрешность рассчитываемых функционалов может не соответствовать их заявленной статистической погрешности, что отмечается многими специалистами во многих работах [24, 25]. В данной связи исследование локальных функционалов потоков является обязательным.

При проведении связанных расчетов особого внимания требует распределение энерговыделения, поскольку именно оно используется в теплогидравлическом коде для расчета распределений плотности и температуры. Исследование энергораспределения является обязательным при проведении связанных расчетов на базе нейтронно-физических Монте-Карло кодов для любых систем, и используемые подходы зависят от особенностей конкретной задачи. В данной работе анализ чувствительности нейтронно-физических характеристик, вычисляемых в Монте-Карло расчетах, к возмущению теплогидравлических параметров исследуется с применением многовариантных расчетов.

Для анализа результатов Монте-Карло расчетов могут применяться традиционные статистические методы обработки данных с использованием математических характеристик, таких как дисперсия, математическое ожидание, и энтропия Шеннона, демонстрирующая “траекторию” изменения нейтронно-физической характеристики [26]. Анализ осуществляется на базе выбранных нейтронно-физических характеристик, например, скорость реакции или плотность потока нейтронов.

В данной работе для анализа значений $K_{эф}$ используются их средние значения по итерациям и среднеквадратичные отклонения, для анализа распределений энерговыделения используются средние значения и среднеквадратичные отклонения в отдельных ячейках. Анализ $K_{эф}$ используется для отработки технологии исследования устойчивости нейтронно-физических характеристик, которая в дальнейшем применяется для анализа потоков нейтронов и производных от них функционалов.

1.4.2 Определение критерия сходимости связанных расчетов

Выбор критерия сходимости, определяющего номер итерации, после которой счет прекращается, существенно влияет на общее время расчетов и получаемые результаты. Значительные вычислительные и временные затраты на каждой итерации в расчетах с использованием Монте-Карло и CFD кодов обуславливают повышенные требования к определению критерия сходимости. Компонентные и композиционные особенности моделируемых систем приводят к возникновению локальных неоднородностей, влияющих на значения нейтронно-физических характеристик. Анализ сходимости связанных расчетов базируется на использовании различных нейтронно-физических и теплогидравлических характеристик, таких как энерговыделение, температура теплоносителя, топлива, оболочки или конструкционных материалов. Для определения критерия сходимости может использоваться значение статистической ошибки расчета потока нейтронов и скорости реакции в кодах Монте-Карло, это обуславливается тем, что в большей степени погрешность связанных расчетов определяется точностью расчета нейтронно-физических характеристик. При этом в связанных расчетах необходимо учитывать реальные значения погрешности, которая значительно превышает указываемую в Монте-Карло кодах статистическую погрешность.

На данном этапе развития технологии связанных расчетов не существует универсального критерия сходимости, и в различных работах [6, 14, 27, 28]

формируются критерии на базе различных теплогидравлических и нейтронно-физических характеристик.

В работе [27] система связанных кодов применяется для расчетов модели активной зоны экспериментального реактора на быстрых нейтронах со свинцово-висмутовым теплоносителем. В качестве критерия сходимости ε используется 3 σ значение относительной погрешности скорости реакции деления в Монте-Карло расчетах. Данное значение определяется на первой итерации и сохраняется на протяжении всех расчетов, поскольку изменение критерия в процессе счета может привести к нестабильности расчета.

На каждой итерации исследуется относительное изменение рассматриваемой характеристики в каждой расчетной ячейке с использованием выбранного критерия ε :

$$\frac{\Delta X}{X} = \frac{X^n - X^{n-1}}{X^n} \leq \varepsilon_x, \quad (1)$$

где в качестве X^n фигурируют температуры топлива, оболочки и теплоносителя в рассматриваемой ячейке на итерации n . По результатам анализа авторами заключается, что из представленных характеристик наибольшее влияние на сходимость расчетов оказывает температура топлива из-за характера обратных связей, влияющих на энерговыделение.

В работе [14] осуществляется моделирование ячейки ТВС реактора PWR. Для исследования сходимости используется формула (1), где в качестве исследуемых характеристик рассматриваются температура топлива или плотность теплоносителя. При этом критерий сходимости ε определяется пользователем, и его корреляция с погрешностью Монте-Карло расчетов в рамках работы не представляется. Дополнительно анализируется интегральная характеристика $K_{эф}$ с использованием критерия ε_k , который также определяется пользователем.

В работе [28] проводятся расчеты ячейки ТВС реактора PWR, при этом для исследования сходимости используется распределение энерговыделения.

Рассматривается относительное изменение энерговыделения (Q) на каждом итерационном шаге (n) в каждой ячейке расчетной сетки (k):

$$\delta Q_k = \left| \frac{Q_k^n - Q_k^{n-1}}{Q_k^n} \right|.$$

Так как в периферийных зонах из-за малого абсолютного значения относительное изменение энерговыделения может быть значительно выше, чем в центре, для исследования сходимости используются весовые коэффициенты, зависящие от абсолютного значения:

$$\theta_k = \frac{Q_k}{\sum Q_k}.$$

Относительное изменение энерговыделения с учетом весового коэффициента сравнивается с критерием сходимости:

$$\max \left| \theta_k \cdot \delta Q_k \right| < \varepsilon_p.$$

При этом критерий сходимости определяется авторами исследования и задается фиксированным, его возможные корреляции с погрешностью расчета энерговыделения авторами исследования не устанавливаются.

В работе [13] исследуется распределение энерговыделения по аксиальным зонам ТВС реактора PWR с UO_2 и MOX-топливом. Во всех аксиальных зонах проверяется вхождение значения энерговыделения в доверительный интервал, определяемый на предыдущей итерации. Величина доверительного интервала определяется как 3σ , где σ - статистическая погрешность Монте-Карло расчетов. В качестве условия выполнения критерия определяется попадание не менее 95% значений энерговыделения в аксиальных зонах в указанный интервал.

В работе [6] осуществляются связанные расчеты ячейки ТВС реактора PWR. На каждой итерации по всем расчетным ячейкам определяется наибольшее значение относительного изменения температуры топлива, а также температуры и плотности теплоносителя. Полученные значения сравниваются с критерием

сходимости ε , который определяется авторами исследования и задается фиксированным:

$$\begin{aligned} (\Delta T_f / T_f)_{\max} &\leq \varepsilon \\ (\Delta T_c / T_c)_{\max} &\leq \varepsilon \\ (\Delta \rho_c / \rho_c)_{\max} &\leq \varepsilon \end{aligned} .$$

Наиболее простым подходом является использование критериев сходимости, основанных на исследовании конкретной нейтронно-физической или теплогидравлической характеристики (“однопараметрические”). Использование подобных критериев может оказаться недостаточным и приводить к проблемам сходимости расчетов. Лучшие результаты демонстрирует использование “многопараметрических” критериев сходимости, в основе которых лежит совокупный анализ нескольких нейтронно-физических и теплогидравлических характеристик. Применение таких критериев обеспечивает гораздо лучшую сходимость результатов не только по $K_{\text{эф}}$, но и функционалов [6, 14, 27].

1.4.3 Согласование вычислительных сеток

Геометрические параметры расчетных сеток в связанных расчетах в большей степени определяются особенностями теплогидравлических кодов, при этом нейтронно-физические коды накладывают собственные ограничения на положение и размеры расчетных ячеек. При проведении автономных теплогидравлических расчетов для получения высокой точности результатов используются достаточно мелкие сетки, обеспечивающие более точное задание граничных условий теплоотдачи и распределения энерговыделения в моделируемой системе. Неограниченное уменьшение размеров ячеек в расчетах по кодам Монте-Карло, приводит к уменьшению точности расчета распределения плотности потока нейтронов, что связано с алгоритмическими особенностями методов. Согласование расчетных сеток требует учета геометрических особенностей сеток, сформированных в нейтронно-физическом и теплогидравлическом кодах (форма и размер ячеек). Влияние параметров сформированной расчетной модели на результат моделирования показано в

работе [9]. При этом полученные результаты не являются универсальными, что обуславливает проведение подобного анализа для каждой рассчитываемой системы.

Размеры расчетных ячеек теплогидравлического кода в полномасштабных реакторных расчетах могут изменяться от масштаба твэла до масштаба активной зоны целиком. Широкое распространение получили расчетные сетки с разбиением на ячейки в форме концентрических колец, позволяющие объединить области с близкими теплогидравлическими параметрами. Использование грубых расчетных сеток в теплогидравлическом коде не позволяет использовать детальное задание граничных и начальных условий, что существенно влияет на точность моделирования, особенно при наличии локальных пространственных неоднородностей и особенностей компоновки.

При проведении связанных расчетов макроячеек расчетов с использованием канальных кодов, в которых основным элементом нодализационной схемы являются каналы, в различных работах применяются как расчетные сетки, построенные из ячеек, центрированных по твэлам (рисунок 1а), так и расчетные сетки, построенные из ячеек, центрированных по межтвэльным зазорам (рисунок 1б) [29]. При этом в связанных расчетах ячеек твэлов по кодам Монте-Карло в большинстве работ задаются зоны регистрации и материальные зоны, центрированные по твэлам, что может не совпадать с разбиением, используемым в теплогидравлических расчетах. В данной работе при использовании в связанных расчетах канального кода рассматриваются оба подхода, представленных на рисунке 1. В случае использования каналов, центрированных по межтвэльным зазорам, при формировании входного файла Монте-Карло расчетов теплогидравлические параметры усредняются для каждого твэла. Параметры энерговыделения также рассчитываются с учетом площадей поверхности твэлов, граничащих с каждым каналом. При использовании CFD кода теплогидравлические параметры, рассчитанные для существенно более мелких ячеек, в рамках формирования входного файла Монте-Карло расчетов усредняются с учетом заданного в нейтронно-физическом расчете аксиального

разбиения. Источники энерговыделения в теплогидравлическом расчете также задаются с учетом аксиального разбиения.

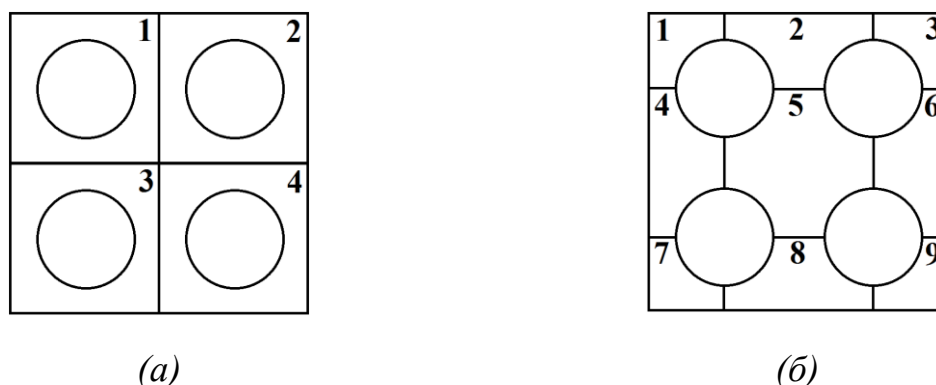


Рисунок 1 – Разбиение модели на ячейки центрированные по твэлам (а) и ячейки центрированные по межтвэльным зазорам (б)

Ввиду отсутствия универсального алгоритма построение согласованной модели осуществляется для каждой задачи с учетом компоновки расчетной модели, особенностей кодов и целей моделирования.

1.5 Выводы по главе 1

В главе 1 рассмотрены ключевые особенности нейтронно-физических и теплогидравлических кодов в контексте их применения для проведения прецизионных связанных расчетов. В контексте актуальности развития методики прецизионных связанных расчетов сформулированы основные проблемы, требующие рассмотрения в рамках формирования согласованной расчетной модели. Для обоснования корректности и устойчивости результатов Монте-Карло расчетов и определения наборов расчетных параметров требуется проведение расчетов с возмущением расчетных параметров и анализом влияния указанных возмущений на результаты. Для анализа сходимости связанных расчетов должны использоваться многовариантные критерии на базе набора из выбранных нейтронно-физических (энерговыделение) и теплогидравлических (температура теплоносителя и оболочки) характеристик, при этом ввиду отсутствия

универсальной методики при формировании данного критерия должны учитываться особенности конкретной задачи. Согласование вычислительных сеток требует соответствующего усреднения и интерполяции данных по ячейкам расчетной системы.

2 Разработка программной оболочки для обеспечения связанных расчетов

Связность расчетов «нейтроника-теплогидравлика» обеспечивается с помощью специального алгоритма, в котором в качестве «связующих» характеристик используются распределения температуры, плотности и энерговыделения.

Распределение плотности потока нейтронов ψ в системе подчиняется стационарному уравнению переноса нейтронов:

$$\begin{aligned} \Omega \nabla \psi(\mathbf{r}, \Omega, E) + \sigma(\mathbf{r}, E, T, \rho) \psi(\mathbf{r}, \Omega, E) = \\ \int \int d\Omega' dE' \sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \Omega' \rightarrow \Omega, T, \rho) \psi(\mathbf{r}, \Omega', E') + \\ \frac{\chi(\mathbf{r}, E)}{k} \int \int d\Omega' dE' \nu \sigma_f(\mathbf{r}, E', T, \rho) \psi(\mathbf{r}, \Omega', E'), \end{aligned}$$

где \mathbf{r} – радиус-вектор местоположения; Ω – направление вектора скорости нейтронов; E – энергия; T и ρ – температура и плотность материалов соответственно; σ_s , σ_f , σ – сечения рассеяния, деления и полное сечение взаимодействия соответственно; χ – спектр деления нейтронов; k – эффективный коэффициент размножения нейтронов; ν – число нейтронов, образующихся в результате одного деления.

Данное уравнение решается в нейтронно-физическом коде, в результате чего получается распределение плотности потока нейтронов.

С использованием полученного распределения плотности потока нейтронов и энергии ε , выделяющейся в результате одной реакции деления, рассчитывается объемное тепловыделение:

$$Q(\mathbf{r}) = \int \int d\Omega dE \varepsilon \sigma_f(\mathbf{r}, E, T, \rho) \psi(\mathbf{r}, \Omega, E).$$

При этом объемное тепловыделение связывается с распределением температуры топлива с помощью уравнения теплопроводности:

$$-\nabla \kappa(T) \nabla T = Q(\mathbf{r}),$$

где $\kappa(T)$ – коэффициент теплопроводности.

Расчет температуры топлива осуществляется в теплогидравлическом коде. Температура топлива, в свою очередь, используется в рамках теплогидравлического расчета при задании граничных условий по теплопередаче.

Связность расчетов “нейтроника-теплогидравлика” осуществляется за счет обратных связей, учитывающих зависимость температуры и плотности от энерговыделения, а также зависимость ядерно-физических данных от температурно-плотностных параметров.

В теплогидравлическом коде для каждой ячейки i ($1, \dots, m$) расчетной сетки (сетка теплогидравлического кода), задаваемой в коде, рассчитываются температура (T_i) и плотность материалов (ρ_i) с использованием распределения энерговыделения (Q_j), полученного в нейтронно-физическом коде для сетки с ячейками j ($1, \dots, n$) (сетка нейтронно-физического кода):

$$T_i = T_i(Q_1 \dots Q_n)$$

$$\rho_i = \rho_i(Q_1 \dots Q_n).$$

В нейтронно-физическом коде для каждой ячейки j рассчитывается энерговыделение с использованием распределений температуры и плотности, полученных по теплогидравлическому коду:

$$Q_j = Q_j(T_1 \dots T_m, \rho_1 \dots \rho_m).$$

Решение связанной задачи получается на основе итераций (k -номер итерации):

$$T_i^{k+1} = T_i(Q_1^k \dots Q_n^k)$$

$$\rho_i^{k+1} = \rho_i(Q_1^k \dots Q_n^k)$$

$$Q_j^{k+1} = Q_j(T_1^{k+1} \dots T_m^{k+1}, \rho_1^{k+1} \dots \rho_m^{k+1}).$$

В расчетах “нейтроника-теплогидравлика” сложных гетерогенных систем особое место уделяется вычислению локальных функционалов в малых в особенности в пограничных областях. Поскольку прецизионные расчеты должны обеспечивать определенный уровень точности вычисляемых функционалов, необходимо учитывать реальные значения погрешности, которые могут

значительно превышать указываемую в Монте-Карло кодах статистическую погрешность. Влияние таких погрешностей может проявляться в существенном изменении вычисляемых характеристик при изменении параметров расчета. В связанных расчетах это в первую очередь относится к энерговыделению, вычисляемому в нейтронно-физическом коде. Учет реальной погрешности Монте-Карло расчетов представляет отдельную задачу с обеспечением в последующих теплогидравлических расчетах устойчивости итерационного процесса и корректности расчета.

В связанных расчетах применяются разные методы ускорения сходимости, в частности, основанные на использовании релаксаций [30]:

$$T_i^{k+1} = \alpha T_i(Q_1^k \dots Q_n^k) + (1 - \alpha) T_i^k$$

$$\rho_i^{k+1} = \alpha \rho_i(Q_1^k \dots Q_n^k) + (1 - \alpha) \rho_i^k$$

$$Q_j^{k+1} = \alpha Q_j(T_1^{k+1} \dots T_m^{k+1}, \rho_1^{k+1} \dots \rho_m^{k+1}) + (1 - \alpha) Q_j^k.$$

2.1 Описание расчетных кодов

Для связанных расчетов «нейтроника – теплогидравлика» разработана программная оболочка CCS [30], содержащая инструментальные средства для построения согласованных расчетных моделей и проведения связанных стационарных расчетов по нейтронно-физическим кодам семейства MCU (MCU-FREE и MCU-FR) [31] и CFD коду OpenFOAM [32], или канальным теплогидравлическим кодам семейства HYDRA-IBRAE (HYDRA-IBRAE/H2O и HYDRA-IBRAE/LM) [33]. Для этого в составе оболочки были реализованы интерфейсные модули для указанных кодов, которые осуществляют передачу данных, включая чтение выходных и формирование входных файлов, а также интерполяцию и усреднение указанных данных.

2.1.1 Нейтронно-физические коды семейства MCU

Расчетные коды семейства MCU предназначены для моделирования процессов переноса излучения (нейтронов, гамма-квантов, электронов и

позитронов) методами Монте-Карло в 3D геометрии с использованием библиотек ядерно-физических данных в непрерывном и групповом представлениях.

В расчетах ячеек с водяным теплоносителем используется версия MCU-FREE, сформированная на базе пакета MCU-5, ориентированная на решение учебных и научно-поисковых задач. Вместе с кодом поставляется константное обеспечение в виде банка данных MCUIDB50. Банк данных включает различные библиотеки, включая библиотеку VESTA для моделирования столкновений нейтронов с ядрами замедлителей с учетом непрерывного изменения энергии нейтронов в области термализации. Библиотека включает данные для воды при заданном наборе температур.

В расчетах систем с жидкометаллическим теплоносителем используется версия программы MCU-FR, ориентированная на расчёты методом Монте-Карло параметров ядерных реакторов с быстрым спектром нейтронов и сформированная на базе модулей пакета MCU-6 [34]. Данная версия кода включает библиотеку MDBFR60, важной особенностью которой является наличие библиотек ядерно-физических данных в формате ACE. Использование указанного формата позволяет формировать библиотеки для конкретных значений температур с применением кода NJOY [35] на базе данных РОСФОНД [36].

Код MCU имеет модульную структуру и включает различные модули, такие как геометрический модуль, модуль источников, модуль регистрации, составной физический модуль, осуществляющий розыгрыш нейтронов и др.

Геометрический модуль позволяет моделировать трехмерные системы с произвольной геометрией, используя комбинаторный подход, при котором сложные пространственные формы представляются в виде комбинаций простых тел. Использование подобного подхода позволяет задавать 3D геометрию рассматриваемой системы без приближений и упрощений. При этом в общем случае зоны регистрации, в которых рассчитываются значения нейтронно-физических функционалов, могут не совпадать с заданными геометрическими и

материальными зонами. Данные для расчета с применением указанных модулей задаются в едином входном файле.

2.1.1.1 Использование библиотек ядерно-физических данных

Библиотеки ядерно-физических данных, используемые в Монте-Карло расчетах имеют сильную зависимость от температуры материалов. Поставляемые вместе с кодами библиотеки традиционно включают данные для фиксированных значений температуры. Этим обуславливаются проблемы в части учета в связанных расчетах температурной зависимости ядерно-физических данных при подготовке библиотек для конкретных температур [6, 12, 14, 21, 37, 38].

Поскольку среди различных температурно-плотностных обратных связей в расчетах тепловых реакторов наибольшее влияние на значения нейтронно-физических характеристик оказывают параметры теплоносителя, на начальном этапе отработки методики связанных расчетов на базе макроячеек реакторов с водяным теплоносителем температуры топлива и оболочки считаются постоянными [30, 39]. При этом в последующих расчетах исследуется влияние температуры топлива и оболочки ТВЭЛов на вычисляемые характеристики.

Анализ мирового опыта показывает, что в связанных расчетах могут использоваться ядерно-физические данные, подготовленные непосредственно во время расчета с помощью процессинговых систем, например, NJOY [35]. Данный подход в работе не рассматривался ввиду существенных временных затрат на подготовку библиотек. В практических расчетах широкое применение находит подход, использующий псевдо-материалы, которые задаются в виде смеси из двух одинаковых по составу материалов, имеющих различные температуры. При этом применяются различные модели, основанные на линейной и квадратичной интерполяции имеющихся данных. Подходы, базирующиеся на интерполяции значений, представленных в файлах оцененных ядерных данных, требуют тщательного анализа и учета специфики конкретных данных.

В коде MCU-FREE температура материалов задается с точностью до градуса. Исключение составляют отдельные модели замедлителей нейтронов,

включая воду. Для воды в банк ядерных данных MCUDB50 кода MCU-FREE, включены полные ядерно-физические данные при температурах 300, 350, 400 К и температурах рабочего диапазона реактора ВВЭР-1000 – 533, 555, 579 и 600 К. Для определения значений температуры водяного теплоносителя, задаваемых в расчетах, требуется предварительный анализ, включающий многовариантные модельные автономные нейтронно-физические расчеты с использованием библиотек ядерно-физических данных для различных значений температуры с анализом влияния указанных библиотек на результаты.

Код MCU-FR включает библиотеки в формате ACE, подготовленные для конкретных значений температуры, при этом использование формата ACE позволяет самостоятельно подготовить необходимые библиотеки, как на предварительном этапе, так и в процессе расчетов.

2.1.1.2 Параметры источника нейтронов нулевого поколения

При проведении связанных расчетов с применением итерационных методов на базе нейтронно-физических Монте-Карло кодов большое внимание уделяется источнику нейтронов нулевого поколения. Во многих работах показано влияние источника нейтронов нулевого поколения на распределение потока нейтронов и связанные с ним функционалы.

Традиционно в связанных расчетах применяется источник нейтронов с равномерным пространственным распределением. При этом данный тип источника не зависит от номера итерации. Существуют различные подходы задания равномерного источника: по всему объему расчетной модели, по областям, содержащим топливо, по ТВЭЛу с максимальным энерговыделением или, наоборот, по области, не содержащей топливо и др. По результатам мирового опыта и предварительного анализа было определено, что при задании равномерного источника в данной работе оптимальным будет использовать источник, заданный по областям, содержащим топливо.

В работах [10, 40] для повышения эффективности связанных расчетов с применением кодов Монте-Карло рассматривается динамический источник

нейтронов. При этом на каждой итерации при задании источника нейтронов используется распределение нейтронов, полученное на предыдущей итерации, что обуславливает ускорение сходимости Монте-Карло расчетов при неизменной статистике.

В данной работе для исследования особенностей сходимости расчетов Монте-Карло используются оба вида источников, и на базе результатов моделирования анализируется влияние типа выбранного источника на результаты.

2.1.2 Канальные теплогидравлические коды семейства HYDRA-IBRAE

Отсутствие априорных решений, связанных с распределением нейтронно-физических и теплогидравлических характеристик, обуславливает проведение модельных расчетов с упрощенной геометрией и усредненными по ячейкам расчетными параметрами. Многовариантные модельные расчеты с использованием одномерных теплогидравлических кодов позволяют уточнить расчетные параметры, включая в первую очередь параметры Монте-Карло расчетов, необходимые для формирования согласованных расчетных моделей исследуемых объектов, для использования в расчетах с применением трехмерных CFD кодов.

Анализ чувствительности нейтронно-физических характеристик к возмущению расчетных параметров выполняется в рамках ячеечных расчетов с помощью кодов семейства MCU и канальных теплогидравлических кодов семейства HYDRA-IBRAE, осуществляющих моделирование на основе неравновесной двухжидкостной модели. В основе моделирования с использованием кодов семейства HYDRA-IBRAE лежит решение уравнений массы, импульса и энергии с использованием эмпирических моделей (замыкающих соотношений). Данные коды предназначены для моделирования стационарных и нестационарных теплогидравлических процессов в контурах ядерных энергетических установок с водо-водяным реактором под давлением и реакторных установок с жидкометаллическим теплоносителем. Также они

включают базу данных по свойствам материалов, что позволяет использовать в расчетах различные теплоносители и конструкционные материалы.

В кодах семейства HYDRA-IBRAE теплогидравлическая сеть строится из набора элементов, основным из которых является канал. В аксиальном направлении канал разбивается на расчетные ячейки. Использование параллельных каналов с соответствующими параметрами (рисунок 1) позволяет, в том числе, рассчитывать распределение теплогидравлических характеристик в радиальном направлении расчетной модели.

Использование кодов семейства HYDRA-IBRAE позволяет отработать технологию связанных расчетов с использованием трёхмерных нейтронно-физических Монте-Карло кодов семейства MCU с поканальным расчетом теплогидравлических процессов, не требующих детального 3D моделирования.

2.1.3 Пакет OpenFOAM

Для создания согласованной модели важно обеспечить сопоставимый уровень детализации при описании модели в нейтронно-физическом и теплогидравлическом кодах. Возможности Монте-Карло кодов в связанных расчетах систем с потвэльным представлением (без упрощений) и счета функционалов в малых локальных областях обуславливают использование теплогидравлических CFD (computational fluid dynamics/вычислительная гидродинамика) кодов. В настоящей работе в качестве трехмерного CFD кода используется пакет OpenFOAM.

Пакет OpenFOAM является свободным программным обеспечением с открытым кодом, распространяемым по свободной лицензии GNU General Public License, для решения задач механики сплошных сред, в том числе вычислительной гидродинамики (CFD). В основе моделирования с использованием OpenFOAM лежит решение уравнений сохранения массы, импульса и энергии в трехмерном приближении с использованием метода конечных объемов. Пакет включает обширный набор решателей, ориентированных на решение различных задач. В контексте проведения

связанных расчетов «нейтроника-теплогидравлика», наиболее широкое применение находит решатель `chtMultiRegionFoam` (`chtMultiSimpleRegionFoam`), обеспечивающий согласованное моделирование теплообмена в жидкости и твердом теле [41]. Для этого в рамках внутренней итерационной процедуры реализовано последовательное решение соответствующих уравнений для жидкости/твердого тела с использованием этих решений в качестве граничных условий на следующей итерации. Модификация `chtMultiRegionSimpleFoam`, построенная на базе полунявного метода для связывающих давление уравнений (SIMPLE), ориентирована на решение стационарной задачи. Решатель `chtMultiRegionFoam` построен на базе метода PIMPLE, являющегося комбинацией методов PISO [42] и SIMPLE [43] и ориентирован на решение нестационарных задач. OpenFOAM обеспечивает широкий набор разных расчетных моделей, в частности, моделей турбулентности. Пакет позволяет моделировать ламинарное течение и турбулентное течение с использованием RANS (k - ϵ , k - ω , k - ω -SST и др.) и LES (Смагоринского, k - ω -SST-DES и др.) моделей.

OpenFOAM обеспечивает широкий набор инструментов для задания геометрических параметров расчетной модели. При задании геометрии может использоваться комбинаторный подход, STL-модели, разработанные с помощью специализированных средств, и др. В пакете реализованы гибкие функциональные средства построения блочно-структурированных и неструктурированных сеток и др.

2.2 Оболочка Coupled Calculation Shell

Для проведения связанных стационарных ячеечных расчетов разработана программная оболочка Coupled Calculation Shell (CCS) [30], содержащая инструментальные средства для построения согласованных расчетных моделей. Оболочка CCS включает интерфейсы, для связи различных (нейтронно-физическими, теплогидравлическими и др.) модулей, а также обеспечивает средства для контроля данных и их представления в необходимом формате.

Связанные расчеты строятся на базе последовательных итераций. Общая схема расчета с применением программной оболочки приведена на рисунке 2.

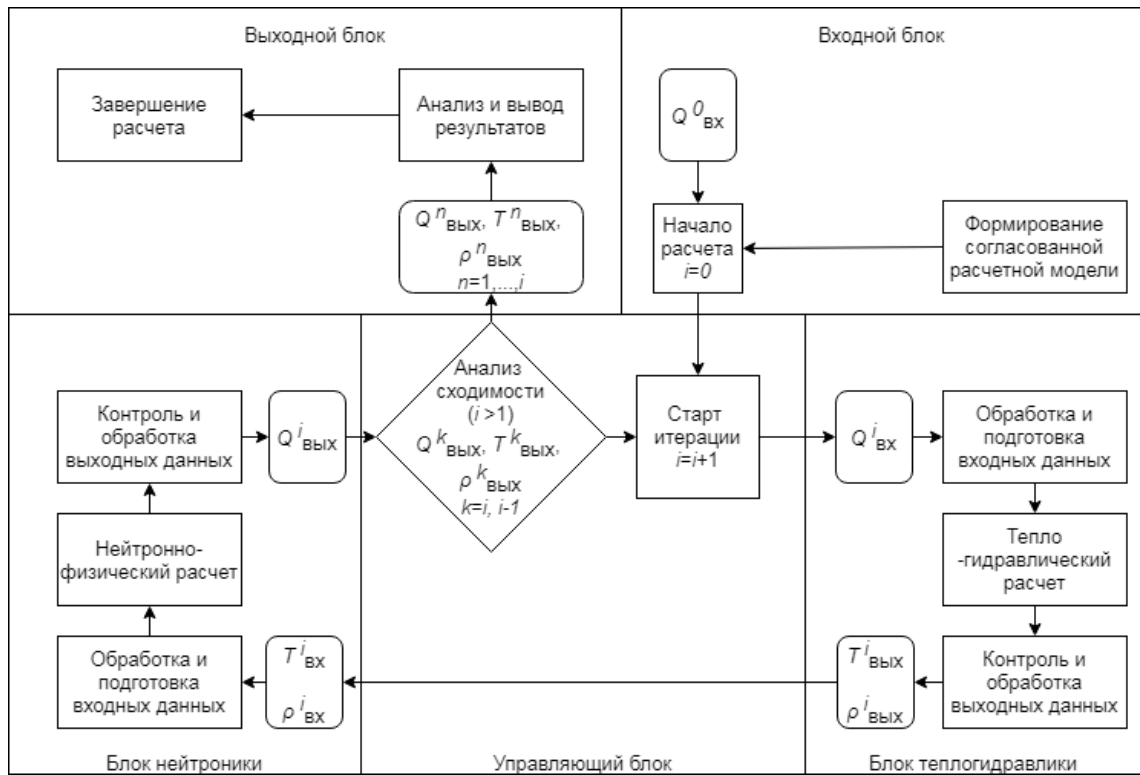


Рисунок 2 – Схема расчета в оболочке Coupled Calculation Shell

Ключевым элементом входного блока является построение согласованной расчетной модели (рисунок 3). Согласованная расчетная модель формируется на базе единого набора данных, задаваемых во входном файле. С его использованием осуществляется определение параметров геометрии нейтронно-физической модели (включая расположение и размер материальных зон и зон регистрации) и формирование расчетной сетки теплогидравлической модели. С учетом подготовленных данных формируются обменные интерфейсы для передачи данных. Определение статистических параметров, параметров источника и библиотек ядерно-физических данных в Монте-Карло расчетах, а также параметров для задания граничных условий, свойств материалов и временных параметров теплогидравлического расчета осуществляется на базе тестовых расчетов.

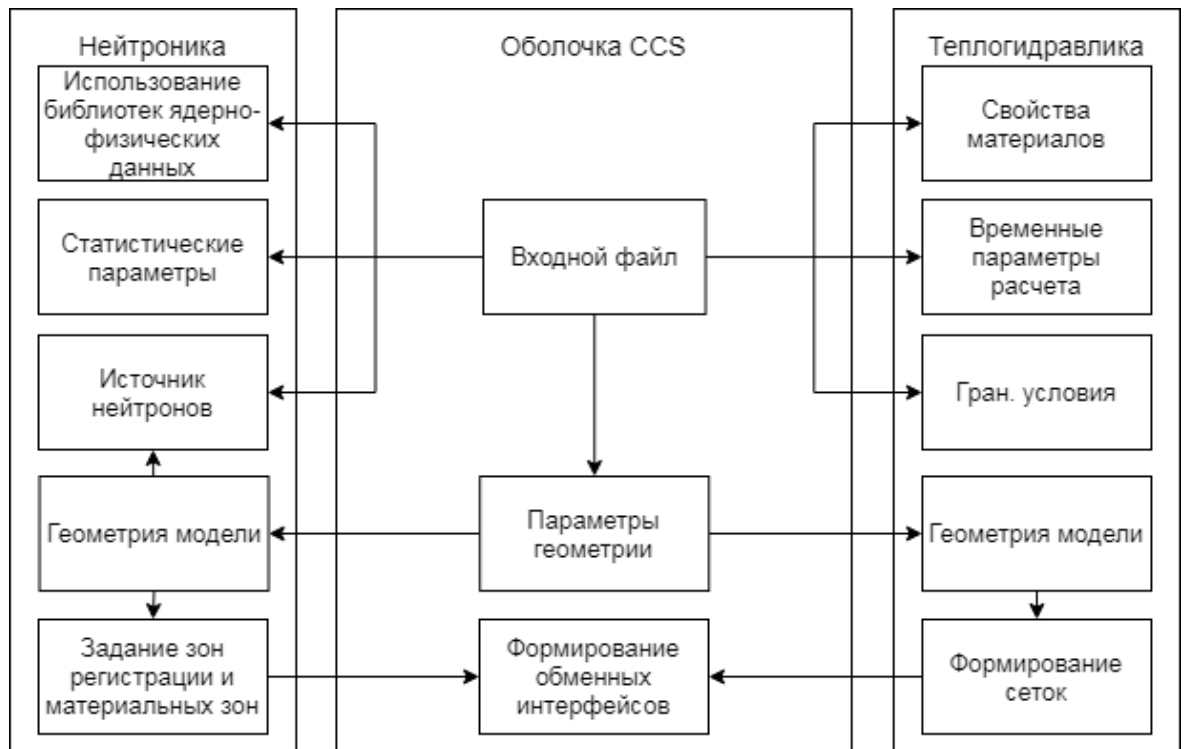


Рисунок 3 – Формирование согласованной расчетной модели

В качестве начального приближения энерговыделения $Q_{\text{ВХ}}^0$ используется равномерное распределение либо энергораспределение, сформированное в рамках предварительного анализа на базе методических расчетов с упрощенными расчетными моделями, уменьшенной суммарной статистикой и т.д. Теплогидравлический код с учетом энерговыделения $Q_{\text{ВХ}}^i$ рассчитывает распределение температуры $T_{\text{ВХ}}^i$ и плотности теплоносителя $\rho_{\text{ВХ}}^i$, нейтронно-физический код с учетом $T_{\text{ВХ}}^i$ и $\rho_{\text{ВХ}}^i$ рассчитывает $Q_{\text{ВХ}}^i$. Входные данные ($Q_{\text{ВХ}}^i$) теплогидравлического и нейтронно-физического ($T_{\text{ВХ}}^i, \rho_{\text{ВХ}}^i$) кодов формируются с использованием соответствующих выходных данных ($Q_{\text{ВХ}}^i, T_{\text{ВХ}}^i, \rho_{\text{ВХ}}^i$), полученных на текущей или предыдущих итерациях, и параметров расчетных сеток обоих кодов. Анализ сходимости значений $Q_{\text{ВХ}}^k, T_{\text{ВХ}}^k$ и $\rho_{\text{ВХ}}^k$ осуществляется на каждой итерации с использованием распределений, полученных на предшествующих итерациях. При выполнении критерия сходимости расчет завершается с выводом данных, сформированных для всех выполненных итераций. При этом параметры критерия (рассматриваемые

характеристики, анализируемые параметры и др.) также задаются пользователем при формировании входного файла.

Оболочка разработана на языке программирования C# с использованием средств объектно-ориентированного программирования (ООП), что позволяет обеспечить модульную структуру кода и его кросс-платформенность. Модульность и кросс-платформенность являются одними из ключевых требований при разработке современного программного обеспечения.

Модульная структура кода позволяет реализовать интерфейсы, организующие связь программной оболочки с различными нейтронно-физическими и теплогидравлическими кодами. На данный момент в программной оболочке CCS реализованы интерфейсы для расчетов с применением нейтронно-физических кодов семейства MCU (MCU-FREE и MCU-FR) [31] и CFD кода OpenFOAM [32] или канальных теплогидравлических кодов семейства HYDRA-IBRAE (HYDRA-IBRAE/H2O и HYDRA-IBRAE/LM) [33]. С применением языка программирования Python реализованы вспомогательные интерфейсные и пользовательские подпрограммы для интеграции кода OpenFOAM и представления результатов расчетов распределений основных теплогидравлических характеристик.

Кросс-платформенность программной оболочки обуславливает возможность ее применения в расчетах на базе различных ОС, таких как ОС Windows или ОС Linux/UNIX. Использование ОС Linux/UNIX обеспечивает возможность дальнейшего применения оболочки в условиях полномасштабного моделирования на базе многопроцессорных кластеров. Оболочка использовалась для расчетов с применением персональных компьютеров на базе операционных систем Windows и Ubuntu. Программная оболочка CCS реализована с применением платформы .NET Framework [44]. В данной связи под ОС Ubuntu было использовано программное обеспечение Mono [45], являющееся реализацией платформы .NET Framework на базе свободного программного обеспечения и включающее компилятор языка C# и необходимые библиотеки.

Для проведения расчетов с помощью оболочки CCS на базе кластера ИБРАЭ РАН был использован протокол SSH, позволяющий производить удалённое управление операционной системой и передачу файлов.

2.2.1 Архитектура оболочки

Поскольку в основе разработки оболочки лежат принципы объектно-ориентированного программирования, главным структурным элементом архитектуры оболочки является класс. Список основных классов программы представлен в таблице 1.

Таблица 1 – Список основных классов оболочки CCS

Имя класса	Имя родительского класса	Описание
Iteration	Нет	Базовый класс, который содержит все данные расчета одной итерации.
NeutronicData	Iteration	Класс, содержащий входные и выходные данные нейтронно-физического расчета.
HydraulicData	Iteration	Класс, содержащий входные и выходные данные теплогидравлического расчета.
Qout	NeutronicData	Класс, содержащий распределение энерговыделения, рассчитанное в нейтронно-физическом коде.
Qin	HydraulicData	Класс, содержащий распределение энерговыделения, сформированное для расчета по теплогидравлическому коду.

Продолжение таблицы 1

Имя класса	Имя родительского класса	Описание
Dout	HydraulicData	Класс, содержащий распределения температуры и плотности, рассчитанные в теплогидравлическом коде.
Din	NeutronicData	Класс, содержащий распределения температуры и плотности, сформированные для расчета по теплогидравлическому коду.
Neutronic	Нет	Базовый класс, реализующий интерфейс для подключения нейтронно-физического кода.
ThermalHydraulic	Нет	Базовый класс, реализующий интерфейс для подключения теплогидравлического кода.
NeutronicWrite	Neutronic	Класс подготовки файлов входных данных для нейтронно-физического кода.
NeutronicCalc	Neutronic	Класс запуска расчета по нейтронно-физическому коду.
NeutronicRead	Neutronic	Класс чтения файлов выходных данных, полученных по нейтронно-физическому коду.
HydraulicWrite	ThermalHydraulic	Класс подготовки файлов входных данных для теплогидравлического кода

Продолжение таблицы 1

Имя класса	Имя родительского класса	Описание
HydraulicCalc	ThermalHydraulic	Класс запуска расчета по теплогидравлическому коду.
HydraulicRead	ThermalHydraulic	Класс чтения файлов выходных данных, полученных по теплогидравлическому коду.

Запись входных данных для расчета осуществляется с помощью классов NeutronicWrite и HydraulicWrite в файлы, подготовленные в стандартном формате нейтронно-физического и теплогидравлического кодов. После завершения соответствующего расчета классы NeutronicRead и HydraulicRead осуществляют чтение выходных данных.

Классы Qout и Qin используются для хранения выходного и входного распределений энерговыделения по ячейкам расчетной сетки нейтронно-физического и теплогидравлического кодов соответственно. В свою очередь классы Din и Dout используются для хранения входного и выходного распределений плотности и температуры материалов по ячейкам расчетной сетки нейтронно-физического и теплогидравлического кодов соответственно.

2.2.2 Задание входных данных для расчета

Создание согласованной расчетной модели предполагает формирование расчетных сеток для нейтронно-физического и теплогидравлического кодов на базе единого набора исходных данных, задаваемых в едином входном файле.

Файл входных данных оболочки CCS представляет текстовый файл, включающий описание нейтронно-физических и теплогидравлических параметров рассчитываемой модели.

Задание данных осуществляется с применением определенных ключевых слов, предшествующих значениям расчетных параметров. Порядок задания данных строго определен и в случае нарушения данного порядка оболочка выдаст пользователю диагностическое сообщение об ошибке.

2.2.2.1 Задание входных данных для нейтронно-физического расчета

Нейтронно-физические данные включают параметры Монте-Карло расчета, такие как число нейтронов в поколении и число поколений, а также параметры модели такие, как шаг решетки, параметры твэлов и их размещение в картограмме. Также файл входных данных включает нуклидный состав топлива, оболочки и теплоносителя.

Набор данных, заданных пользователем, используется для создания файла входных данных со стандартным синтаксисом нейтронно-физического кода. При этом для хранения данных в оболочке реализован дополнительный класс, что упрощает возможное подключение других нейтронно-физических Монте-Карло кодов для дальнейших расчетов.

В оболочке реализована возможность задания нескольких типов твэлов/пэлов, содержащих разные материалы топлива и оболочки, что позволяет также моделировать, например, различные направляющие трубки и поглощающие элементы. Картограмма расчетной модели формируется с использованием заданных типов. Поскольку используемая оболочка ориентирована на ячеечные расчеты, то в качестве граничных условий задается утечка в аксиальном направлении и условия симметрии на боковых гранях.

2.2.2.2 Задание входных данных для теплогидравлического расчета

Оболочка CCS разработана с учетом возможности подключения интерфейсов, реализующих связь с различными одномерными и трехмерными теплогидравлическими кодами. На данный момент в оболочке реализованы интерфейсы для расчетов с применением канальных кодов семейства HYDRA-IBRAE или CFD кода OpenFOAM. Набор входных данных, используемых в

расчетах по указанным кодам, значительно различается, в данной связи имеется возможность указать в файле входных данных тип используемой опции и в зависимости от указанного типа задать набор требуемых параметров.

2.2.2.2.1 Задание входных данных для теплогидравлического расчета с применением семейства канальных кодов HYDRA-IBRAE

Основным структурным элементом гидравлической сети в расчетах по кодам семейства HYDRA-IBRAE является канал. Для канала рассчитываются параметры участка потока теплоносителя между точками ветвления или другими элементами нодализационной схемы.

В связанных расчетах с применением оболочки CCS нодализационная схема рассчитываемой модели состоит из параллельных вертикальных каналов без горизонтального массообмена. Теплогидравлические параметры, задаваемые во входном файле, включают относительные площади каналов, параметры граничных условий на входе и выходе, а также связи каналов с источником энерговыделения и друг с другом.

Абсолютные значения площадей каналов рассчитываются с использованием геометрических характеристик твэлов. Возможность задания связи каналов с источниками энерговыделения позволяет задавать различное разбиение расчетной модели на расчетные ячейки в теплогидравлическом расчете, что имеет особую важность для формирования согласованной расчетной модели. Связи каналов друг с другом позволяют моделировать теплообмен между соседними каналами, что имеет особое значение в расчетах, характеризующихся существенной неравномерностью энерговыделения. Базовая нодализационная схема, используемая в расчетах бенчмарков BWR и PWR 3x3 Pin Cluster, состоит из 9 параллельных расчетных каналов (рисунок 4). При использовании данной модели согласование расчетных сеток, используемых в нейтронно-физическом и теплогидравлическом кодах, не требует дополнительного усреднения и интерполяции данных. На рисунке представлен пример набора входных данных, описывающих заданную систему (рисунок 5). Система состоит из 9 каналов

одинаковой площади (относительные площади задаются под ключевым словом CHANNELS), каждый из которых связан с одним твэлом (задается под ключевым словом HEAT). Связи каналов между собой (задаются под ключевым словом LINKS) и их нумерация определяются в соответствии с рисунком.

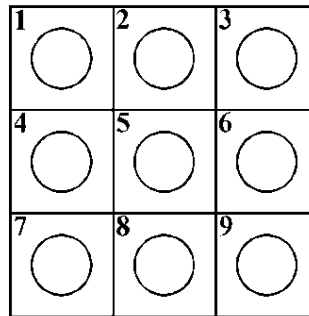


Рисунок 4 – Нодализационная схема расчетной модели

CHANNELS	HEAT	LINKS
1	1 1	1 2
1	2 2	2 3
1	3 3	4 5
1	4 4	5 6
1	5 5	7 8
1	6 6	8 9
1	7 7	1 4
1	8 8	4 7
1	9 9	2 5
1		5 8
		3 6
		6 9

Рисунок 5 – Пример задания входных данных для расчета по кодам семейства

HYDRA-IBRAE

Представленные в разделе LINKS связи задают теплообмен между соседними областями течения теплоносителя, выделенными в отдельные каналы.

Задаваемая таким образом расчетная модель позволяет получить распределения температур и плотностей, в определенном диапазоне режимов согласующиеся с распределениями по трехмерным кодам с учетом требуемой точности.

Помимо параметров геометрии также необходимо задать граничные условия на входе и выходе расчетной модели, при этом на входе может задаваться как скорость потока, так и массовый расход теплоносителя. На выходе при этом задается граничное условие по давлению теплоносителя.

2.2.2.2.2 Задание входных данных для теплогидравлического расчета по коду OpenFOAM

Полный набор входных данных состоит из геометрических параметров расчета, задаваемых во входном файле оболочки CCS, и дополнительных параметров, таких как свойства материалов, параметры расчетных моделей и др., задаваемых с помощью стандартных средств OpenFOAM.

Для расчета с применением кода OpenFOAM используется точное задание геометрии и граничных условий. В данной связи при использовании опции расчета с применением OpenFOAM расчетная геометрия формируется оболочкой CCS с использованием средств OpenFOAM и параметров твэлов, описанных в нейтронно-физической части. Для расчета необходимо задать граничные условия на входе и на выходе так же как это делается при использовании кодов семейства HYDRA-IBRAE. При этом на боковых границах расчетной модели задается граничное условие симметрии.

2.2.3 Запуск расчетов

Оболочка CCS позволяет осуществлять расчеты в автоматическом режиме. При этом пользователь только формирует входные файлы и обрабатывает полученные результаты. Обмен данными между кодами и запуск отдельных модулей полностью осуществляется средствами интерфейсов оболочки. Особую важность это имеет при проведении многовариантных расчетов. Оболочка позволяет проводить расчеты как с использованием персонального компьютера, так и с использованием многопроцессорного кластера.

Для запуска расчетов на персональном компьютере используются bat-файлы, с указанием исполняемого файла расчетного кода и соответствующих атрибутов.

Для запуска расчетов на кластере используется протокол SSH и соответствующая библиотека SharpSSH для платформы .NET, позволяющая осуществлять обмен файлами и передавать консольные команды удаленному серверу. Данный интерфейс реализован в оболочке CCS в виде отдельного класса. Использование в расчетах кластера направлено на проведение многовариантных расчетов.

2.2.4 Формат выходных данных

Результаты расчетов, вместе с набором расчетных параметров, сохраняются в текстовый файл.

Блок результатов включает $K_{эф}$ в зависимости от номера итерации, а также распределения локальных характеристик, таких как температура и плотность теплоносителя, температура оболочки и конструкционных материалов, а также энерговыделение.

Распределения локальных функционалов группируются в два блока: блок нейтронно-физических и блок теплогидравлических расчетов. Каждый блок включает входные и выходные данные на каждой итерации. Распределения представляются в аксиальном виде, для каждой расчетной ячейки в плане. При этом в нейтронно-физическом блоке все аксиальные распределения представлены для каждого твэла. В теплогидравлическом блоке распределения представлены для каждого канала, при проведении расчетов по коду OpenFOAM результаты усредняются по ячейкам, центрированным по твэлам для удобства дальнейшего анализа, при этом результаты расчетов в формате кода OpenFOAM также доступны пользователю.

Дополнительно в файл записываются отклонения значений интегральных характеристик от значений, полученных на предыдущей итерации. Для локальных

характеристик приводятся среднеквадратичное и максимальное отклонения, рассчитанные по всей расчетной сетке, эти значения используются при анализе сходимости связанных расчетов.

2.3 Выводы по главе 2

В главе 2 описана программная оболочка Coupled Calculation Shell (CCS), содержащая инструментальные средства для построения согласованных расчетных моделей и проведения связанных стационарных расчетов по нейтронно-физическим кодам семейства MCU (MCU-FREE и MCU-FR) и CFD коду OpenFOAM или семейству теплогидравлических канальных кодов HYDRA-IBRAE (HYDRA-IBRAE/H₂O и HYDRA-IBRAE/LM). Цель разработки оболочки – построение согласованной расчетной модели с использованием расчетных кодов на базе различных приближений и проведение расчетов на базе последовательных итераций. Представлено краткое описание нейтронно-физических кодов MCU-FREE и MCU-FR, семейства теплогидравлических кодов HYDRA-IBRAE и CFD кода OpenFOAM, используемых в данной работе. Для определения значений температуры водяного теплоносителя, задаваемых в расчетах по коду MCU-FREE, требуется предварительный анализ, включающий многовариантные модельные расчеты с использованием библиотек ядерно-физических данных для различных значений температуры. Для исследования особенностей сходимости расчетов Монте-Карло необходимы расчеты с использованием равномерного и динамического источников с последующим анализом влияния типа выбранного источника на результаты.

3 Связанные стационарные расчеты макроячеек реакторов с водяным и свинцовым теплоносителем

В настоящей главе рассмотрены результаты апробации технологии связанных расчетов на базе стационарных ячеечных расчетов. Ячеечные расчеты позволяют исследовать основные особенности кодов, их чувствительность к изменению геометрических, статистических, температурных параметров и определить расчетные параметры перед построением согласованной модели нейтроника-теплогидравлика.

3.1 Апробация технологии связанных расчетов на базе макроячеек реакторов с водяным теплоносителем

Апробация предлагаемой технологии проведения связанных расчетов на базе макроячеек реактора с водяным теплоносителем осуществляется с применением нейтронно-физического кода MCU-FREE.

3.1.1 Описание расчетных моделей

3.1.1.1 Ячейка твэла реактора ВВЭР

Параметры модели соответствуют традиционным параметрам твэла реактора ВВЭР. Внутри твэла радиусом 9,1 мм и высотой 3600 мм находится свежее диоксидурановое топливо с обогащением 4,4%. Оболочка состоит из циркониевого сплава, топливо и оболочка разделены гелиевым зазором.

В расчетах с применением кода MCU-FREE задается разбиение на 20 аксиальных ячеек высотой 18 см. Данное разбиение обусловлено предварительно определенным размером зон регистрации. Снизу и сверху расположен слой воды толщиной 20 см. На границе заданы радиальные условия отражения и аксиальные условия утечки.

В расчетах с применением канального кода HYDRA-IBRAE/H₂O задается модель в виде одномерного канала, который разбивается на 22 расчетные ячейки, включающие 1 ячейку на входе в канал, 1 ячейку на выходе из канала и 20 ячеек в

топливной части, которые соответствуют 20 топливным ячейкам в коде MCU-FREE (рисунок 6).

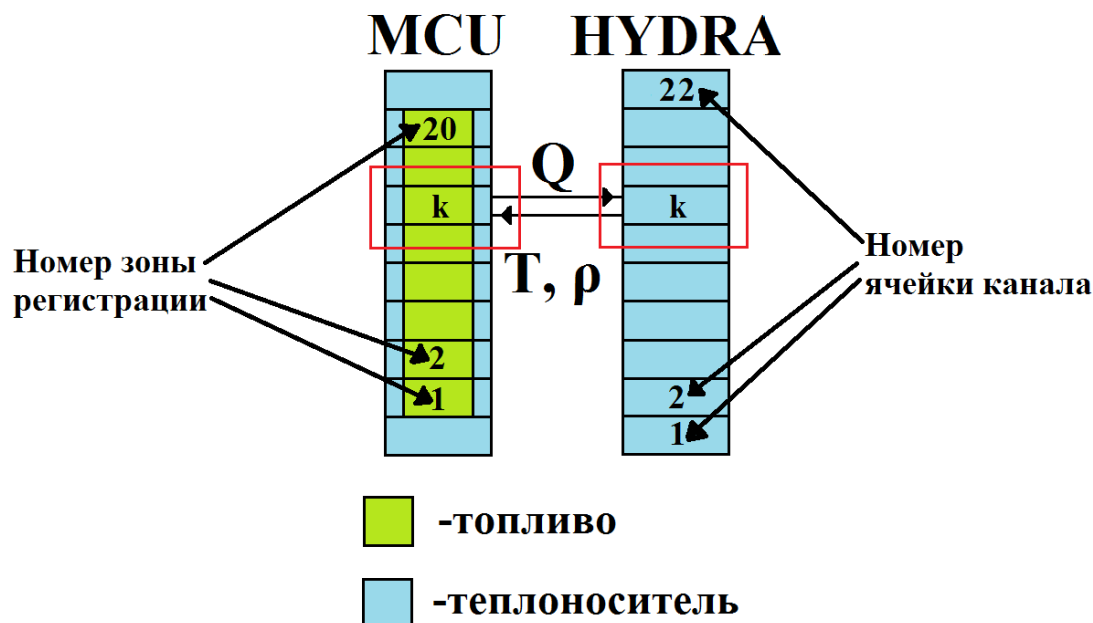


Рисунок 6 – Схема расчетной модели ячейки твэла

Граничные условия задаются по скорости потока (5,5 м/с) на входе и по давлению (16,2 МПа) на выходе.

Для получения энергораспределения (Q) скорость реакции в 20 зонах регистрации нормируется на среднюю тепловую мощность 1 твэла реактора ВВЭР.

С учетом полученного энерговыделения по коду HYDRA-IBRAE/H₂O рассчитывается аксиальные распределения плотности и температуры теплоносителя. При этом температура и плотность топлива, оболочки и конструкционных материалов остаются неизменными. Расчет выполнен для 30 итераций (от 0 до 29). В качестве начальных условий задается одинаковая во всех ячейках плотность и температура теплоносителя.

3.1.1.2 Система BWR 3x3 Pin Cluster

Связанные расчеты реактора с кипящей водой представляют особый интерес, так как при кипении возникают сильные перепады плотности теплоносителя, оказывающие значительный эффект на характер обратных связей.

В тестовой задаче BWR 3x3 Pin Cluster [46] рассматривается система, состоящая из 9 твэлов реактора BWR с традиционным диоксидурановым топливом. Параметры расчетной модели представлены в таблице 2.

Таблица 2 – Основные параметры расчетной модели BWR 3x3 Pin Cluster

Параметр	Значение	Параметр	Значение
Высота топливной части, м	3,71	Радиус оболочки твэла, см	0,5375
Температура теплоносителя на входе, К	551,78	Радиус топливной таблетки, см	0,4555
Суммарный расход теплоносителя, кг/с	1,1205	Шаг решетки твэлов, см	1,43
Суммарное энерговыделение, МВт	0,551	Обогащение топлива, %	3,95
Давление теплоносителя на выходе, МПа	7,06	Плотность топлива, г/см ³	10,25

Используемая в теплогидравлических расчетах с применением канального кода HYDRA-IBRAE/H₂O нодализационная схема состоит из девяти параллельных каналов, центрированных по твэлам. Горизонтальный массообмен между каналами отсутствует, при этом моделируется теплообмен между соседними каналами. Граничные условия в теплогидравлических расчетах задаются по расходу теплоносителя на входе и по давлению на выходе, в нейтронно-физических расчетах задается условие отражения на боковых границах и аксиальное условие утечки.

В нейтронно-физическом и теплогидравлическом расчетах задается одинаковое разбиение модели по высоте. Расчеты выполнены для двух моделей – с 60-ю аксиальными ячейками высотой $h \sim 6$ см (аналогично работе [46]) и укрупненными 20-ю ячейками с $h \sim 18$ см.

3.1.1.3 Система PWR 3x3 Pin-cluster

Система PWR 3x3 Pin Cluster представляет особый интерес в контексте исследования слабосвязанных систем в Монте-Карло расчетах [47, 48]. Рассматриваемая система, так же как и система BWR 3x3 Pin Cluster, может быть отнесена к слабосвязанным, что может способствовать появлению в расчетах колебательного характера распределения потока нейтронов. Наличие направляющей трубки в центральной ячейке дополнительно усиливает слабосвязанность системы.

Данная система представляет особый интерес в контексте методических исследований особенностей связанных расчетов нейтроника-теплогидравлика и использовалась для отработки технологии связанных расчетов с применением кодов MCNP5/SUBCHANFLOW [5], MCNP6/CTF [7] и MCNP5/STAR-CD [19].

Расчетная модель состоит из 9 ячеек, при этом в центральной ячейке расположена направляющая трубка, а в остальных ячейках - твэлы реактора PWR с традиционным диоксидурановым топливом (рисунок 7). Основные параметры расчетной модели представлены в таблице 3.

В теплогидравлических расчетах с применением канального кода HYDRA-IBRAE/H₂O модель разбивается на 9 параллельных каналов (рисунок 7). Горизонтальный массообмен между каналами отсутствует, при этом моделируется теплообмен между соседними каналами.

Таблица 3 – Основные параметры расчетной модели

Параметр	Значение	Параметр	Значение
Высота топливной части, м	3,9	Радиус оболочки твэла, см	0,475
Температура теплоносителя на входе, К	565,15	Радиус топливной таблетки, см	0,411
Суммарный расход теплоносителя, кг/с	2,58	Шаг решетки твэлов, см	1,43
Суммарное энерговыделение, МВт	0,532	Обогащение топлива, %	3,95
Давление теплоносителя на выходе, МПа	15,8	Плотность топлива, г/см ³	10,25

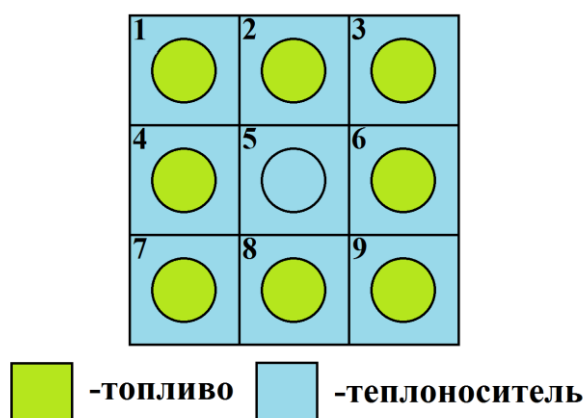


Рисунок 7 – Сечение расчетной модели

Граничные условия в теплогидравлических расчетах с применением канального кода задаются по расходу теплоносителя на входе (одинаковый для всех каналов) и по давлению на выходе, в нейтронно-физических расчетах задается условие отражения на боковых границах и аксиальное условие утечки.

В нейтронно-физическом и теплогидравлическом расчетах задается одинаковое разбиение модели по высоте. В расчетах по умолчанию используется разбиение модели по высоте на 10 аксиальных ячеек высотой $h \sim 39$ см. Дополнительно используется разбиение на 20 ячеек ($h \sim 19,5$ см).

В расчетах с применением кода OpenFOAM задается набор граничных условий для основных теплогидравлических характеристик, таких как скорость (U), температура (T), массовая плотность турбулентной энергии, скорость диссипации турбулентной энергии и давление (P). Поскольку рассматриваемая система является элементом бесконечной решетки, на границах модели в радиальном направлении задаются условия симметрии для всех описанных теплогидравлических характеристик. На верхнем и нижнем основании задаются граничные условия, представленные в таблице 4.

Таблица 4 – Граничные условия, задаваемые в расчете по коду OpenFOAM

Величина	Нижнее основание	Верхнее основание
U	Заданный массовый расход теплоносителя	Вычисляется в коде
T	Заданное постоянное значение	Условие нулевого градиента температур
k	Заданное постоянное значение интенсивности турбулентности	Вычисляется в коде
ε	Заданное постоянное значение длины пути перемешивания	Вычисляется в коде
P	Вычисляется в коде	Заданное постоянное значение

В расчетах с применением кода OpenFOAM используется точное задание 3D геометрии, при этом расчетная сетка генерируется автоматически с помощью сеточного построителя blockMesh, разбивающего расчетную область на равномерные кубические ячейки (рисунок 8). Подобные расчетные сетки позволяют отработать методику связанных расчетов, для получения детальных распределений основных теплогидравлических характеристик могут

использоваться различные типы расчетных сеток, включая криволинейные блочно-структурированные сетки, тетраэдральные сетки, гибридные сетки и др.

Программно-вычислительные средства оболочки CCS обеспечивают настройку теплогидравлического распределения для сеток, полученных в OpenFOAM, с последующим формированием согласованной расчетной модели с учетом разбиения модели на материальные зоны в коде MCU-FREE (рисунок 9).

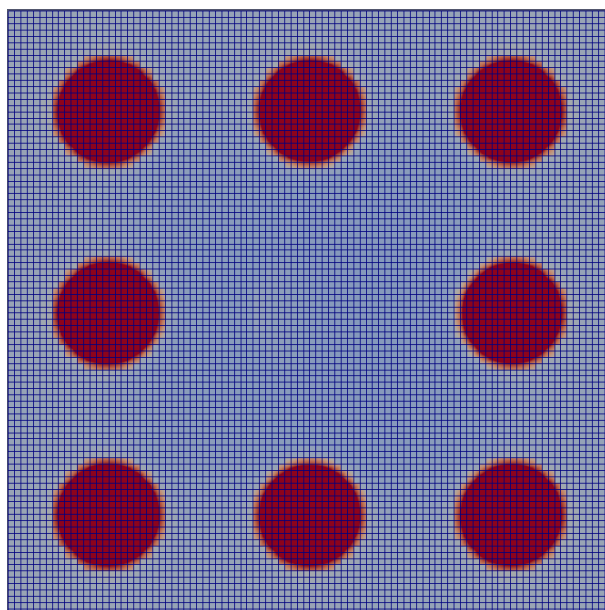


Рисунок 8 – Пример сетки, в расчетах по коду OpenFOAM

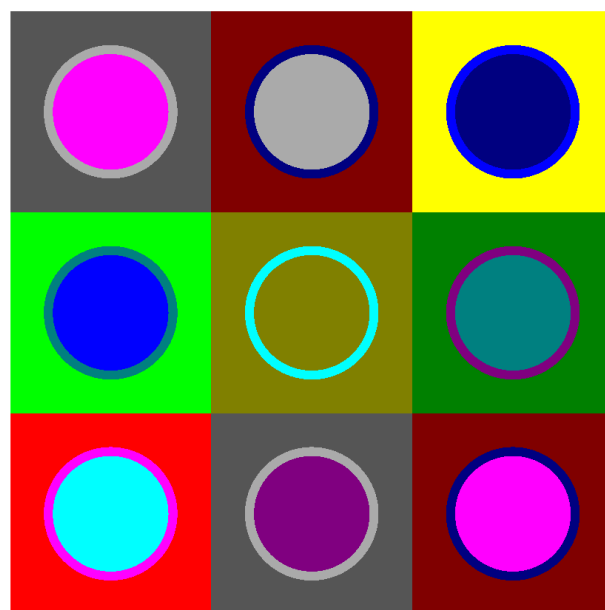


Рисунок 9 – Разбиение на материальные зоны в коде MCU

В расчетах системы PWR 3x3 Pin-cluster с применением пакета OpenFOAM используется стационарный решатель chtMultiRegionSimpleFoam, позволяющий осуществлять согласованный расчет теплогидравлических характеристик теплоносителя и распределений температуры в топливе и оболочке. В расчетах используется k-ε модель турбулентности, основанная на использовании системы двух нелинейных уравнений: уравнения для массовой плотности турбулентной энергии (k) и уравнения для скорости диссипации турбулентной энергии (ε) [49]. В расчетах интегральных характеристик данная модель позволяет при небольших

затратах расчетного времени получить значения теплогидравлических характеристик с требуемой точностью.

3.1.2 Анализ влияния параметров нейтронно-физической модели и расчетных параметров на результаты связанных расчетов

Во многих работах показано влияние различных параметров Монте-Карло расчета, таких как статистические, геометрические, параметры зон регистрации на значения основных нейтронно-физических характеристик [50].

Определение параметров расчета, обеспечивающих корректные результаты, является одной из ключевых задач в связанных расчетах с применением кодов Монте-Карло [51].

Для исследования влияния возмущений параметров нейтронно-физической модели и расчетных параметров на вычисляемые характеристики проведены методические связанные расчеты описанных ячеек реакторов по кодам MCU-FREE и HYDRA-IBRAE/H₂O.

В связанных расчетах проанализированы значения основных нейтронно-физических и теплогидравлических характеристик, таких как энерговыделение, температура и плотность теплоносителя, а также температура топлива и оболочки. Дополнительно анализируется эффективный коэффициент размножения нейтронов. $K_{эф}$ является интегральной характеристикой, которая непосредственно не используется при проведении связанных расчетов, и корректность значения $K_{эф}$ не является достаточным условием для обеспечения корректности распределений потоков нейтронов и производных от них функционалов [47, 50]. Однако исследование $K_{эф}$ позволяет отработать критерии устойчивости и корректности значений основных нейтронно-физических характеристик.

3.1.2.1 Влияние температуры и плотности

Для проведения связанных расчетов с использованием нейтронно-физического и теплогидравлического кодов необходимо уяснить особенности

механизма связи, основанного на температурно-плотностных зависимостях ядерных данных.

В рамках предварительного анализа исследовано влияние температурно-плотностных обратных связей на скорость реакции деления для модели ячейки твэла реактора типа ВВЭР в автономных нейтронно-физических расчетах по коду MCU-FREE.

В методических нейтронно-физических расчетах используется разбиение на 6 аксиальных зон регистрации, высотой 60 см (рисунок 10).

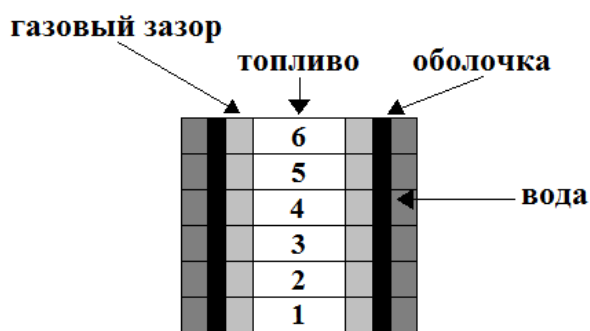


Рисунок 10 – Схема модели твэла с указанием аксиальных расчетных ячеек

Предварительные оценки показывают, что данное разбиение обеспечивает высокую точность расчетов локальных нейтронно-физических характеристик при относительно небольшой статистике. Анализируется скорость реакции деления в ячейке 4 в многовариантных расчетах (варианты 1–12) с различной плотностью и температурой воды, задаваемой в рассматриваемой ячейке (таблица 5).

Температура и плотность теплоносителя в других ячейках (ячейки 1–3 и 5–6, рисунок 10) системы одинаковы во всех расчетных вариантах и получены по коду HYDRA-IBRAE/H₂O для условий нормальной эксплуатации на номинальной мощности (таблица 6) и для кипения теплоносителя, вызванного увеличенным значением энерговыделения. Расчет с кипением проводится для

исследования влияния обратных связей в условиях со значительной плотностной гетерогенностью, отличающихся от эксплуатационных.

Температура топлива (900 К) и оболочки (600К) задается постоянной во всех расчетах.

Таблица 5 – Температура и плотность воды в ячейке 4 для различных расчетных вариантов

Плотность, г/см ³	Номер варианта		
	Температура, К		
	555	579	600
0,518	1	2	3
0,645	4	5	6
0,701	7	8	9
0,747	10	11	12

Таблица 6 – Плотность и температура воды в ячейках твэла

Номер	Плотность, г/см ³	Температура, К
1	0,730	555
2	0,720	579
3	0,707	579
4	см. таблицу 5	
5	0,672	600
6	0,662	600

При неизменной плотности воды как в условиях эксплуатации (рисунок 11а), так и условиях кипения (рисунок 11б) скорость реакции деления в ячейке 4 изменяется менее чем на 1% при изменении температуры.

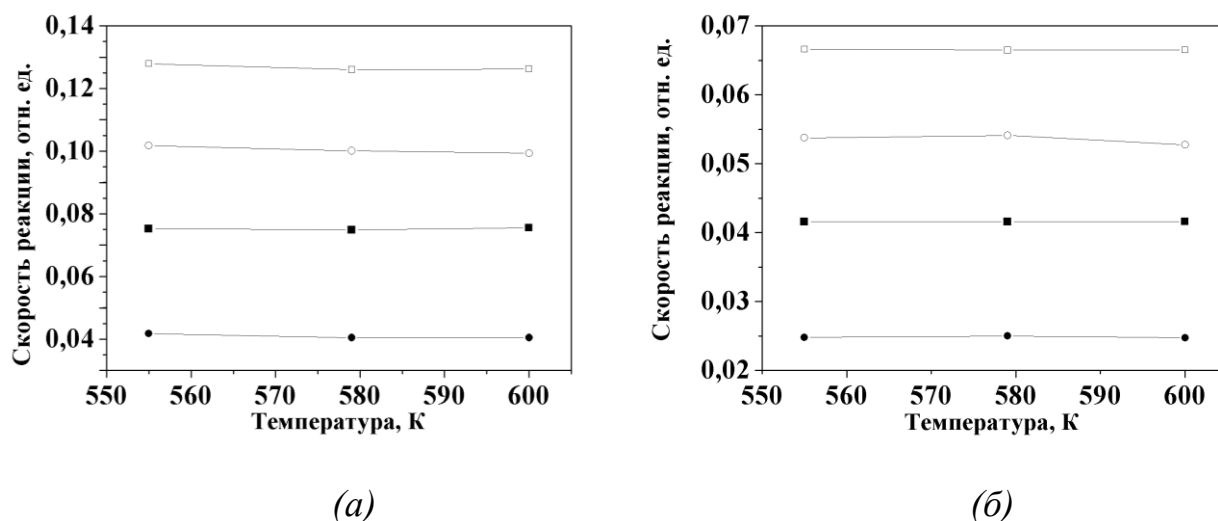
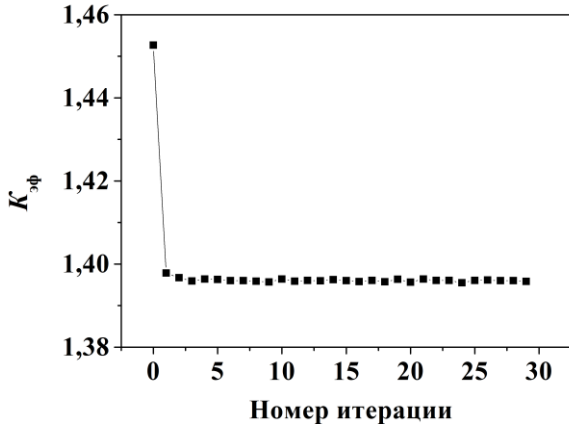


Рисунок 11 – Скорость реакции деления в зависимости от температуры при заданной плотности – 0,518 г/см³ (●), 0,645 г/см³ (■), 0,701 г/см³ (○), 0,747 г/см³ (□) для эксплуатационного режима (а) и кипения (б)

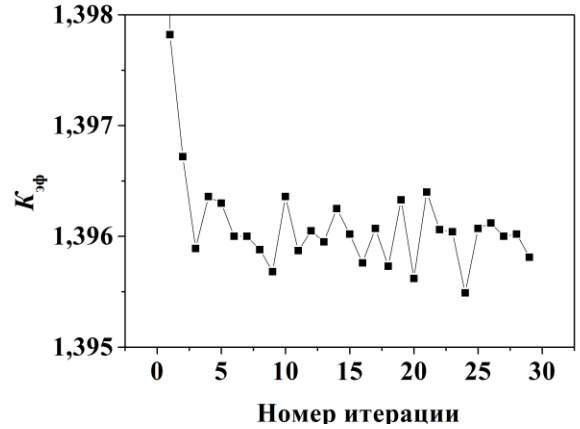
Статистическая погрешность для указанных расчетов составляет ~0,1%. С учетом значительно меньшего эффекта обратных связей по температуре на значения скорости реакции по сравнению с эффектом обратных связей по плотности в дальнейших расчетах для воды задается ближайшее к реальной температуре значение, представленное в библиотеках ядерных данных.

3.1.2.2 Влияние номера итерации

В связанных расчетах модели твэла реактора ВВЭР наблюдаются колебания $K_{эф}$ около некоторого среднего значения (рисунок 12), среднее отклонение значения $K_{эф}$, полученное по последним 10 итерациям, составляет ~0,01%.



(а)



(б)

Рисунок 12 – Значения $K_{эф}$ в зависимости от номера итерации в обычном (а) и увеличенном масштабе (б)

Распределения энерговыделения (рисунок 13) и плотности теплоносителя (рисунок 14) не претерпевают значительных изменений, начиная с итерации 1.

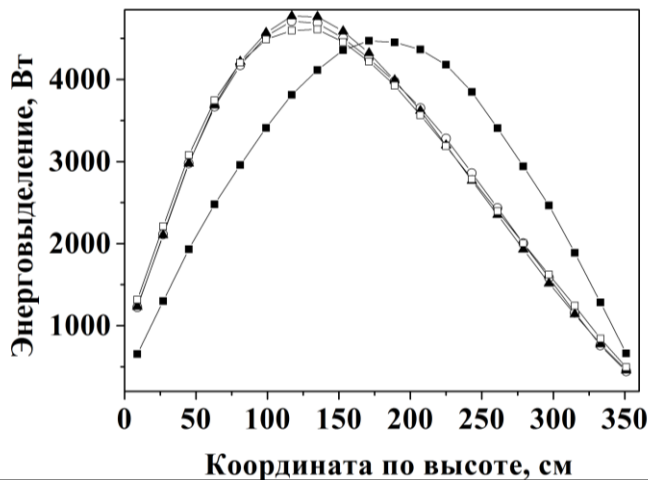


Рисунок 13 – Аксиальное энергораспределение для итераций 0 (■), 1 (○), 5 (▲) и 29 (□)

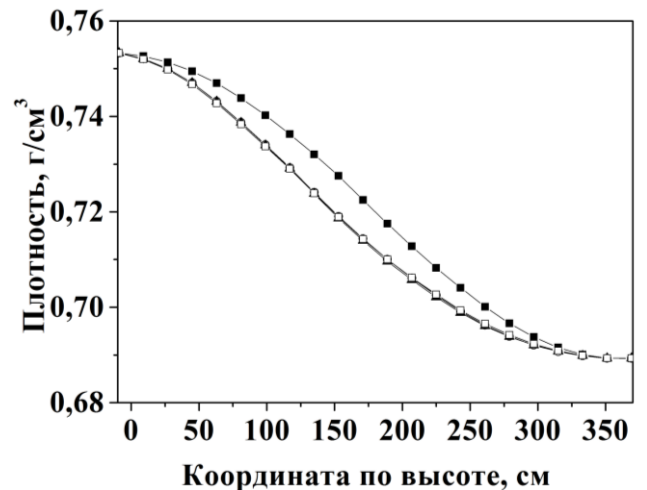


Рисунок 14 – Аксиальное распределение плотности теплоносителя для итераций 0 (■) и 29 (□)

Распределения плотности теплоносителя для итераций 1 и 5 не приводятся, ввиду практически точного совпадения с распределением для итерации 29.

Анализ энерговыделения в конкретной аксиальной ячейке твэла в зависимости от итерации проводится на примере ячейки 1, расположенной на периферии расчетной модели. Наблюдаются колебания (~5%) энерговыделения (рисунок 15), сохраняющиеся на протяжении всего расчета, которые практически на порядок превосходят статистическую ошибку Монте-Карло расчетов (~0,7%).

Для модели системы BWR 3x3 Pin Cluster с 60-ю ячейками также характерно наличие колебаний распределения энерговыделения (рисунок 16).

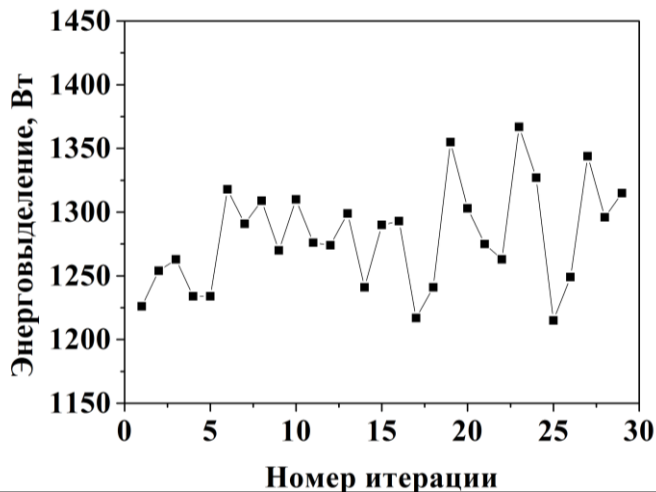


Рисунок 15 – Энерговыделение в ячейке 1 в зависимости от номера итерации

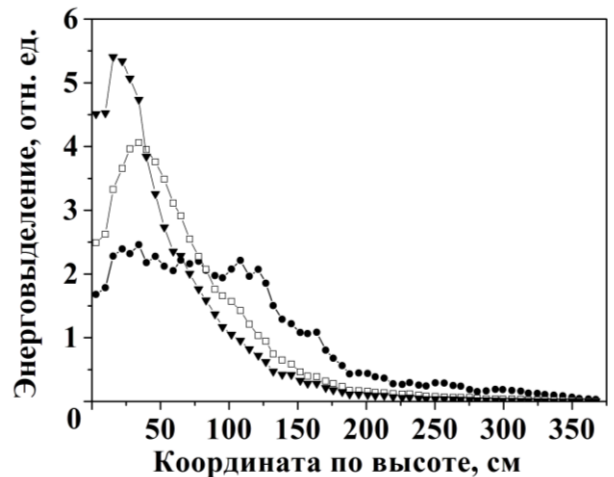


Рисунок 16 – Аксиальное энергораспределение для итераций 7 (●), 8(□) и 9(▼)

Связность системы является важной характеристикой при проведении нейтронно-физических расчетов методом Монте-Карло [47, 48]. Слабосвязанные системы требуют дополнительных нейтронно-физических расчетов для уточнения параметров, обеспечивающих корректность и устойчивость результатов. Реакторные системы традиционно не являются слабосвязанными

(“сильносвязанные”). Система BWR 3x3 Pin Cluster не относится к “сильносвязанным”, что объясняет появление колебательного характера энергораспределения.

Для получения точных значений локальных функционалов в конкретной ячейке на определенном итерационном шаге можно использовать различные техники для уменьшения амплитуды колебаний [50].

При моделировании аварийных ситуаций, связанных с анализом нейтронно-физических величин в малых локальных областях, часто не удается обеспечить “неколебательный” характер решений и получить зависимости в виде гладких кривых. Моделирование подобных режимов с использованием кодов Монте-Карло дает возможность проведения сравнительного анализа вычисляемых нейтронно-физических характеристик в зависимости от параметров задачи, что даже при отсутствии решений в виде гладких кривых представляется важным и информативным для дальнейших исследований.

3.1.2.3 Влияние параметров релаксации

В связанных расчетах применяются разные методы обеспечения сходимости и уменьшения колебаний связующих величин, в частности, с использованием релаксаций. При проведении связанных расчетов с использованием кодов Монте-Карло для решения задач реакторов LWR показан положительный эффект использования метода релаксаций на сходимость связанных расчетов, при этом установлено, что наибольший эффект дает значение $k_{\text{рел}} \sim 0,4 - 0,5$ [6, 14, 46].

Метод основан на использовании весового коэффициента ($k_{\text{рел}}$) для пересчета значений нейтронно-физических и теплогидравлических характеристик с использованием значений, полученных на предыдущей итерации:

$$f_n' = (1 - k_{\text{рел}}) f_n + k_{\text{рел}} f_{n-1},$$

где f_n – значение соответствующей характеристики, на шаге n , f_n' – значение характеристики, полученное с учетом введенного коэффициента релаксации.

Для отработки методики анализа сходимости рассматриваются значения $K_{эф}$ в связанных расчетах модели твэла реактора ВВЭР при различных значениях коэффициента релаксации (рисунок 17).

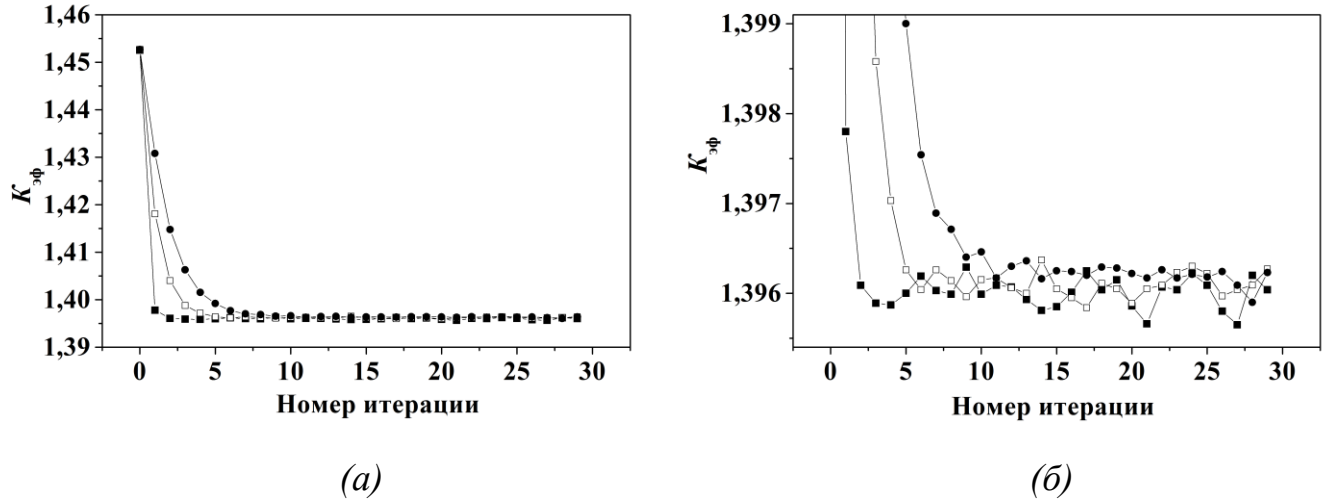


Рисунок 17 – Значения $K_{эф}$ в зависимости от номера итерации при различных $k_{рел}$: 0 (■), 0,3 (□), и 0,5 (●) в обычном (а) и увеличенном масштабе (б)

Значение $K_{эф}$ на первой итерации получено при начальных условиях $\rho_0=1$ г/см³, $T_0=300$ К.

Колебания наблюдаются при всех значениях $k_{рел}$ и при увеличении $k_{рел}$ они уменьшаются. Для $K_{эф}$ приведены средние по последним 10 итерациям значения и среднеквадратичные отклонения (σ) при разных значениях $k_{рел}$ (таблица 7).

Таблица 7 – Средние значения $K_{эф}$ в зависимости от $k_{рел}$

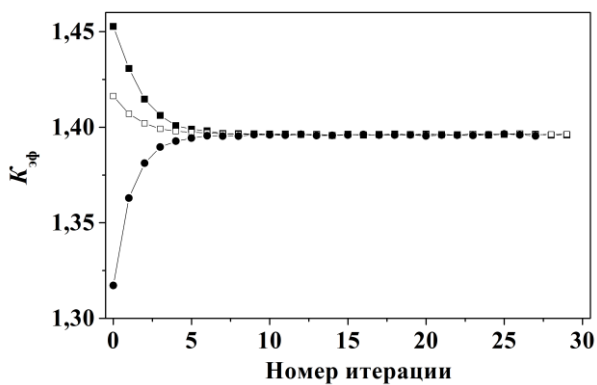
$k_{рел}$	$\overline{K_{эф}}$	$\sigma, 10^{-5}$
0	1,39599	9,6
0,3	1,39609	8,3
0,5	1,39621	8,0

Увеличение $k_{\text{рел}}$ вызывает уменьшение среднего отклонения. При этом среднее значение $K_{\text{эф}}$ с увеличением $k_{\text{рел}}$ увеличивается, что может обуславливаться выбором начальных условий.

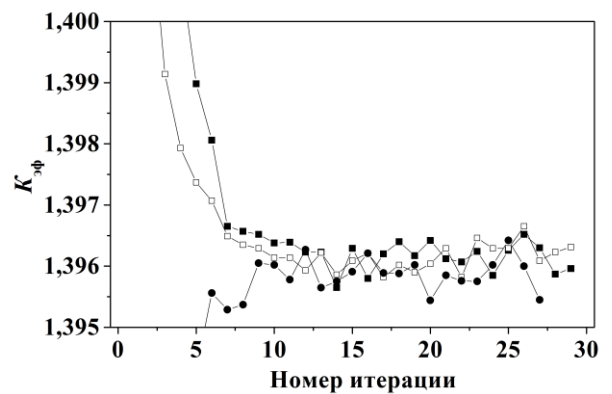
Для $k_{\text{рел}}=0,5$ при разных начальных условиях (таблица 8) получены значения $K_{\text{эф}}$ в зависимости от номера итерации (рисунок 18).

Таблица 8 – Начальная температура и плотность для расчетных вариантов

Номер варианта	T_0, K	$\rho_0, \text{г/см}^3$
1	300	1
2	400	0,9
3	533	0,8
4	579	0,7
5	600	0,5



(а)



(б)

Рисунок 18 – Значения $K_{\text{эф}}$ в зависимости от номера итерации при $k_{\text{рел}}=0,5$ для вариантов 1 (■), 3 (□) и 5 (●) в обычном (а) и увеличенном масштабе (б)

Колебания значения $K_{эф}$ наблюдаются для всех указанных вариантов. При любых начальных условиях требуется ~ 10 итераций для получения устойчивого с учетом ошибки значения $K_{эф}$. Для всех вариантов получены средние значения $K_{эф}$, приведенные в таблице 9.

Таблица 9 – Средние значения $K_{эф}$ в зависимости от начальной температуры

T_0, K	$\overline{K_{эф}}$
300	1,39616
400	1,39614
533	1,39614
579	1,39597
600	1,39589

При значении $k_{рел}=0,5$ наблюдается зависимость среднего значения $K_{эф}$ от начальных условий, что требует особого внимания при проведении связанных расчетов. Как показано в таблице 9, различие значений $\overline{K_{эф}}$ для $T_0=300 \text{ K}$ и $T_0=600 \text{ K}$ при $k_{рел}=0,5$ составляет $\sim 0,03\%$, что на порядок больше, чем в расчетах без использования $k_{рел}$.

Для всех начальных условий по всем итерациям получено усредненное значение $K_{эф}=1,396$ с доверительным интервалом $0,0005$, в который укладывается 95% значений. Отношение величины данного доверительного интервала к ошибке расчета значения $K_{эф}$ в коде MCU-FREE составляет ~ 20 . Это необходимо учитывать при определении критерия сходимости на основании погрешности расчета в коде MCU.

Показан положительный эффект использования метода релаксаций на сходимость связанных расчетов для ячейки твэла реактора ВВЭР, при этом установлено, что наибольший эффект дает значение $k_{рел} \sim 0,4 - 0,5$. Использование коэффициента релаксации в связанных расчетах для ячейки твэла

реактора ВВЭР позволяет уменьшить расчетное время практически в 4 раза за счет уменьшения суммарной статистики.

3.1.2.4 Влияние точности представления теплогидравлических параметров

Согласование расчетных сеток требует соответствующего усреднения и интерполяции нейтронно-физических и теплогидравлических параметров, при этом важно обеспечить сохранение точности вычисляемых характеристик и избежать появления источников дополнительных расчетных погрешностей. В данной связи в связанных расчетах нейтроника-теплогидравлика важной задачей является исследование зависимости результатов расчетов от точности представления основных нейтронно-физических и теплогидравлических характеристик. Для связанных расчетов точность значений, используемых в качестве связки, может оказывать значительное влияние на сходимость и устойчивость получаемых нейтронно-физических характеристик. Для исследования влияния точности представления плотности воды на устойчивость получаемых значений $K_{эф}$ выполнены связанные расчеты твэла реактора ВВЭР. В расчетах плотность вычисляется по коду HYDRA-IBRAE\H2O, и при задании во входном файле кода MCU-FREE используется разное представление плотности – с пятью знаками после запятой (без округления) и с тремя знаками после запятой (с округлением). Значения $K_{эф}$ анализируются в зависимости от точности представления плотности для $k_{рел} = 0,5$ (рисунок 19).

Для представления с пятью знаками после запятой характерны колебания $K_{эф}$, которые сохраняются и после 30-ой итерации. При округлении до третьего знака колебания значений $K_{эф}$ после 15-ой итерации не наблюдаются, и получается устойчивое значение $K_{эф} = 1,3964$, которое отличается от усредненного $K_{эф}$ в расчетах без округления. Полученное отличие существенно превосходит величину среднеквадратичного отклонения.

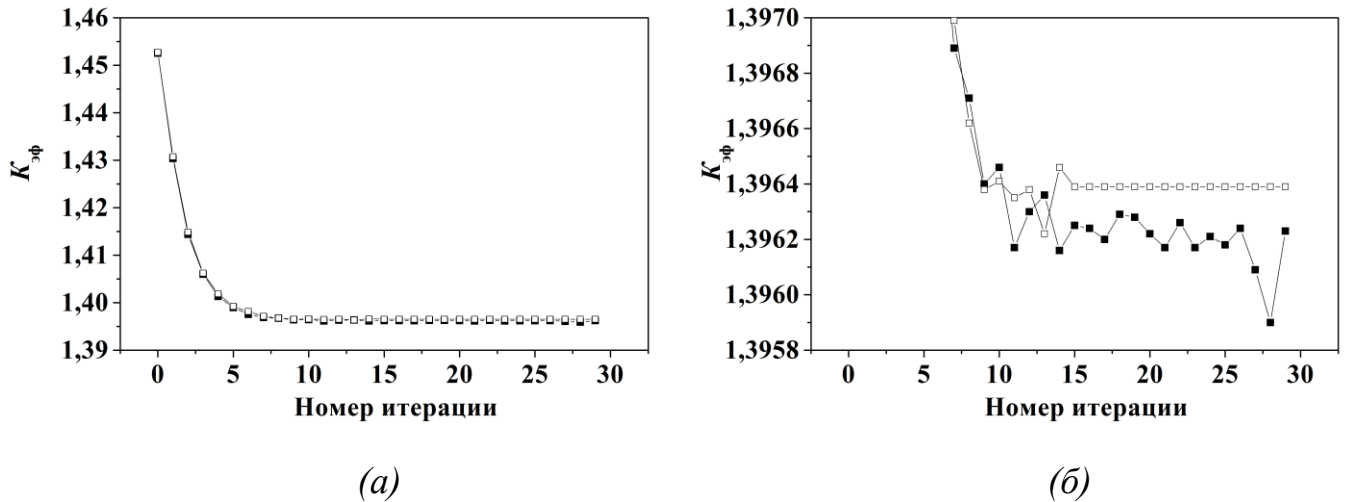


Рисунок 19 – Значения $K_{эф}$ в расчетах без округления (■) и с округлением (□) в обычном (а) и увеличенном масштабе (б)

Данный пример иллюстрирует влияние представления вычисляемых нейтронно-физических и теплогидравлических характеристик на результаты расчетов, что подтверждает необходимость использования автоматизированных инструментов для обмена данными между кодами с сохранением расчетной точности. В дальнейших расчетах используется представление плотности теплоносителя с точностью не менее пяти знаков после запятой.

3.1.2.5 Влияние статистических параметров

В рамках исследования влияния статистических параметров на $K_{эф}$ и распределения локальных характеристик анализируются результаты расчетов при различной статистике $NPS = N_n * N_{пок}$, где N_n – число нейтронов в поколении, $N_{пок}$ – число поколений.

На базе связанных расчетов системы BWR 3x3 Pin-cluster получены усредненное по итерациям аксиальное распределение плотности теплоносителя (рисунок 20) и аксиальное распределение энерговыделения (рисунок 21) при различной статистике $NPS=1000*200, 20000*1000$.

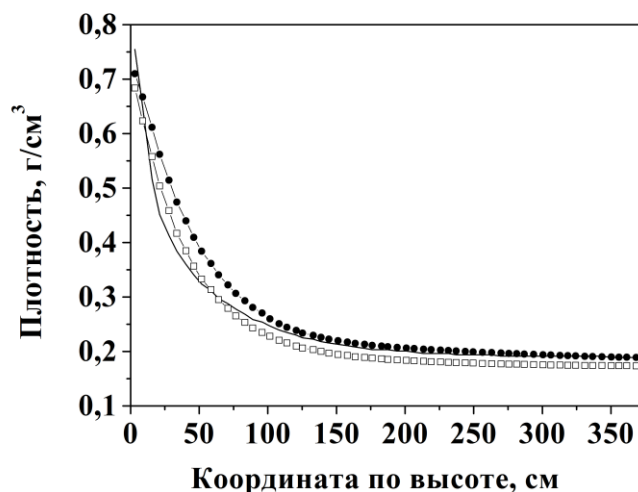


Рисунок 20 – Усредненное по итерациям аксиальное распределение плотности теплоносителя для $NPS=1000*200$ (●), $20000*1000$ (□), [46] (—)

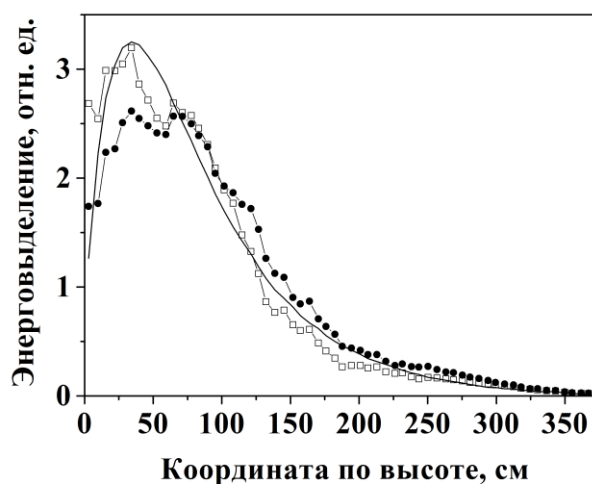


Рисунок 21 – Усредненное по итерациям аксиальное распределение энерговыделения для $NPS=1000*200$ (●), $20000*1000$ (□), [46] (—)

Распределения согласуются с [46]. Наибольшее расхождение в области кипения теплоносителя объясняется особенностями используемых алгоритмов и замыкающих теплогидравлических соотношений.

Результаты с большей статистикой Монте-Карло расчетов лучше согласуются с [46].

В связанных расчетах модели PWR 3x3 Pin-cluster по кодам MCU-FREE и HYDRA-IBRAE\H2O анализируются значения $K_{эф}$ для четырех вариантов с NPS – 500*100, 5000*500, 20000*1000, 50000*1000. Во всех расчетах наблюдаются колебания $K_{эф}$ (рисунок 22).

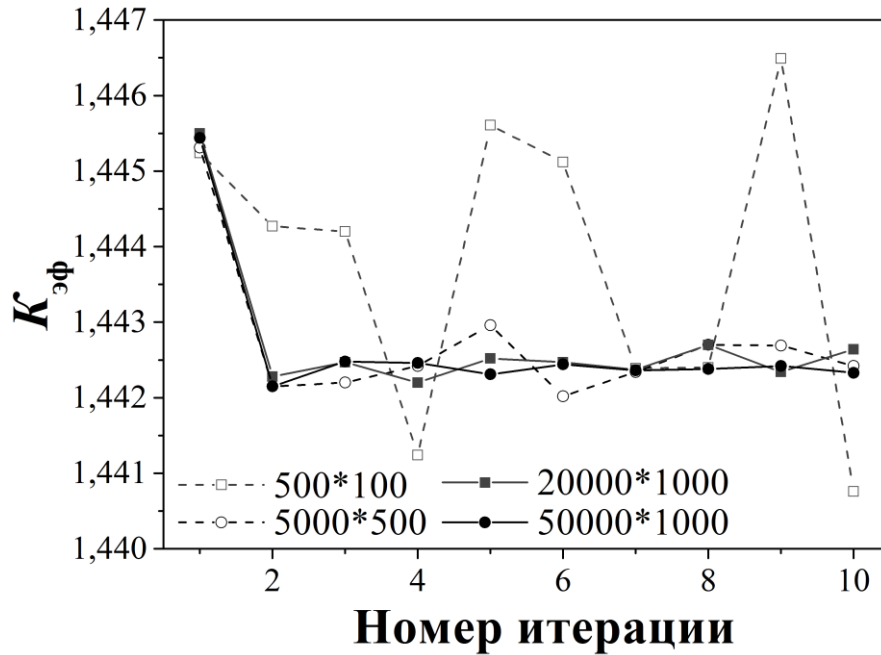


Рисунок 22 – Значение $K_{эф}$ в зависимости от номера итерации при различной статистике

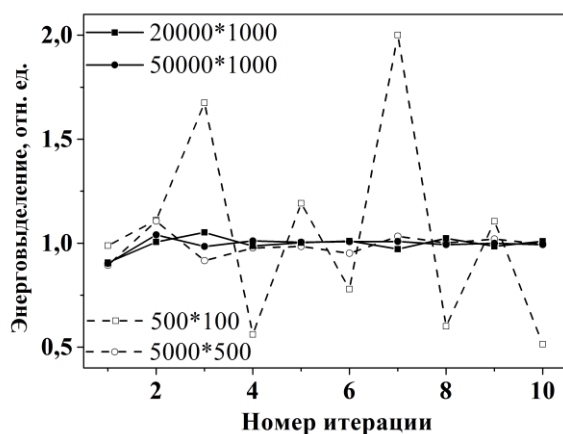
При увеличении NPS наблюдается уменьшение среднего отклонения (δ) значения $K_{эф}$ (таблица 10). При $NPS > 5000*500$ наблюдается зависимость $\delta \sim 1/\sqrt{NPS}$. В данной связи можно заключить, что колебания в большей степени обуславливается статистической ошибкой Монте-Карло расчетов (Δ), линейно зависящей от $1/\sqrt{NPS}$.

Дальнейшее увеличение NPS при $NPS > 20000*1000$ не приводит к существенному уменьшению амплитуды колебаний $K_{эф}$.

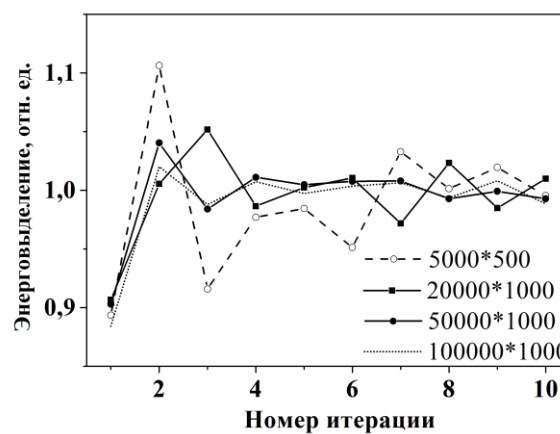
Таблица 10 – Среднее отклонение значения $K_{эф}$ при различных NPS

Статистика	Среднее отклонение
500*100	$1,9 \cdot 10^{-3}$
5000*500	$2,1 \cdot 10^{-4}$
20000*1000	$1,3 \cdot 10^{-4}$
50000*1000	$3,5 \cdot 10^{-5}$

Значения относительного энерговыделения при различной статистике NPS – 500*100, 5000*500, 20000*1000, 50000*1000, 100000*1000 приведены для периферийной (рисунок 23) и центральной (рисунок 24) аксиальных ячеек углового твэла. Исследование значений локальных функционалов в периферийных областях имеет особую важность в связанных расчетах “нейтроника-теплогидравлика”.



(а)



(б)

Рисунок 23 – Значение энерговыделения в периферийной ячейке в зависимости от номера итерации при различной статистике в обычном (а) и укрупненном масштабе (б)

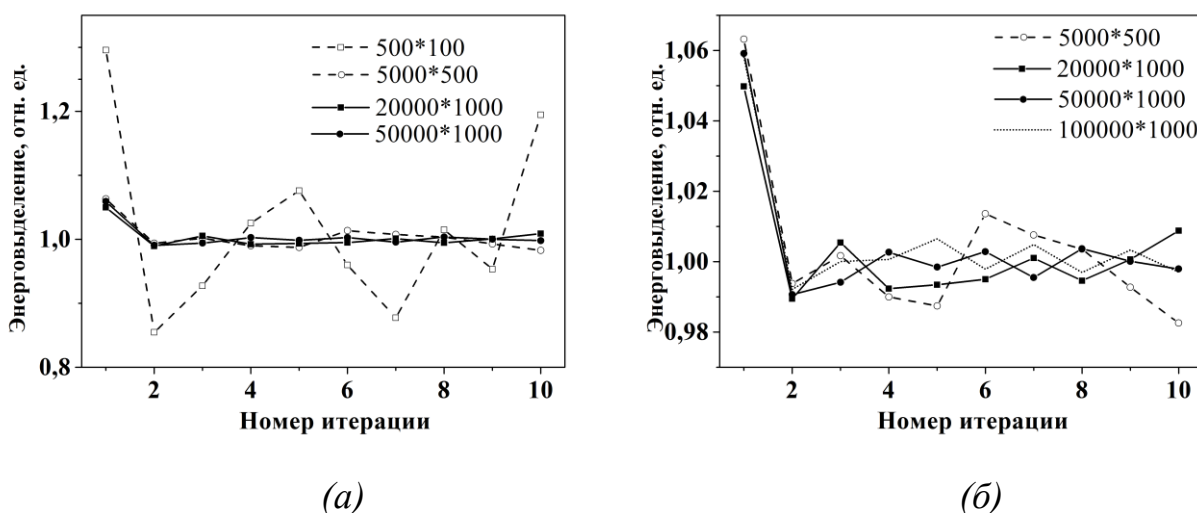


Рисунок 24 – Значение энерговыделения в центральной ячейке в зависимости от номера итерации при различной статистике в обычном (а) и укрупненном масштабе (б)

Для локальных функционалов, как и для интегральных характеристик, наблюдаются колебания энерговыделения, которые уменьшаются с ростом статистики расчетов. При этом колебания относительного значения энерговыделения в периферийной ячейке значительно превышают колебания энерговыделения в центральной ячейке. Дальнейшее увеличение NPS при $NPS > 20000*1000$ не приводит к значительным изменениям энерговыделения. По результатам проведенного анализа показано, что статистика $NPS = 20000*1000$ обеспечивает сходимость и достаточную точность связанных расчетов.

3.1.2.6 Влияние параметров зон регистрации

Размеры зон регистрации в Монте-Карло расчетах оказывают существенное влияние на результаты расчетов функционалов потоков. В рамках методических расчетов ячеек BWR 3x3 Pin Cluster и PWR 3x3 Pin Cluster проанализировано влияние высоты аксиальных ячеек на интегральные и локальные характеристики.

Связанные расчеты системы BWR 3x3 Pin-cluster с применением кодов MCU-FREE и HYDRA-IBRAE\H2O с укрупненными ячейками приводят к заметному уменьшению колебаний энергораспределения. При кипении теплоносителя усреднение теплогидравлических параметров, вызванное

объединением аксиальных ячеек в области кипения, приводит к изменению формы распределения – исчезает максимум и распределение становится убывающим (рисунок 25). Также изменяется характер распределения плотности теплоносителя (рисунок 26).

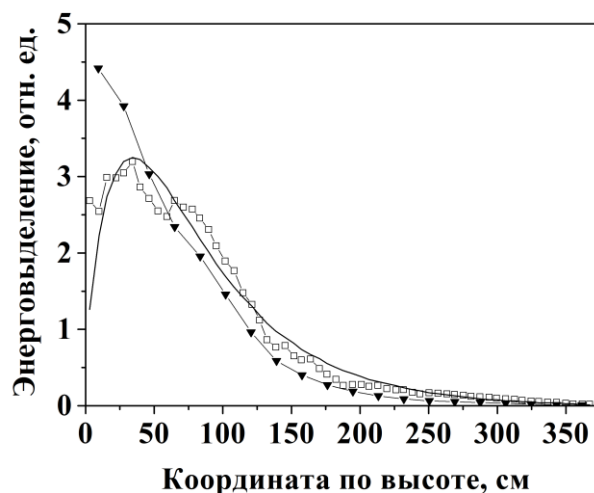


Рисунок 25 – Усредненное по итерациям аксиальное распределение энерговыведения (□) в сравнении с [46] (—) и расчетами с укрупненными ячейками (▼)

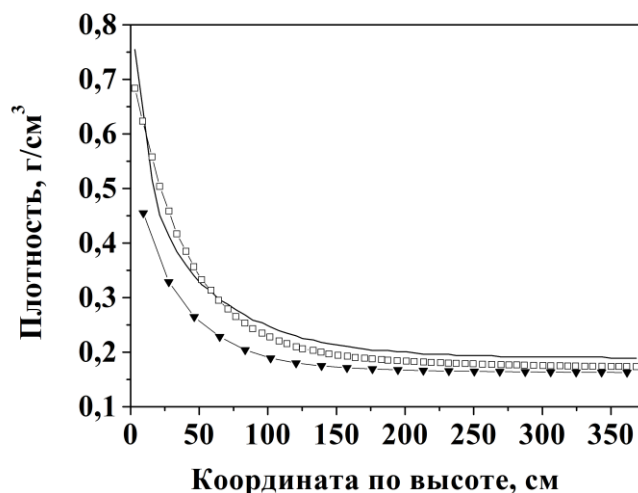


Рисунок 26 – Усредненное по итерациям аксиальное распределение плотности теплоносителя (□) в сравнении с [46] (—) и расчетами с укрупненными ячейками (▼)

Значения $K_{эф}$ в связанных расчетах по кодам MCU-FREE и HYDRA-IBRAE\H2O для базовой модели бенчмарка PWR 3x3 Pin Cluster с числом аксиальных ячеек $N=10$ ($h \sim 39$ см) и уточненных моделей с $N=20$ ($h \sim 19,5$ см) и $N=40$ ($h \sim 9,75$ см) приведены на рисунке 27.

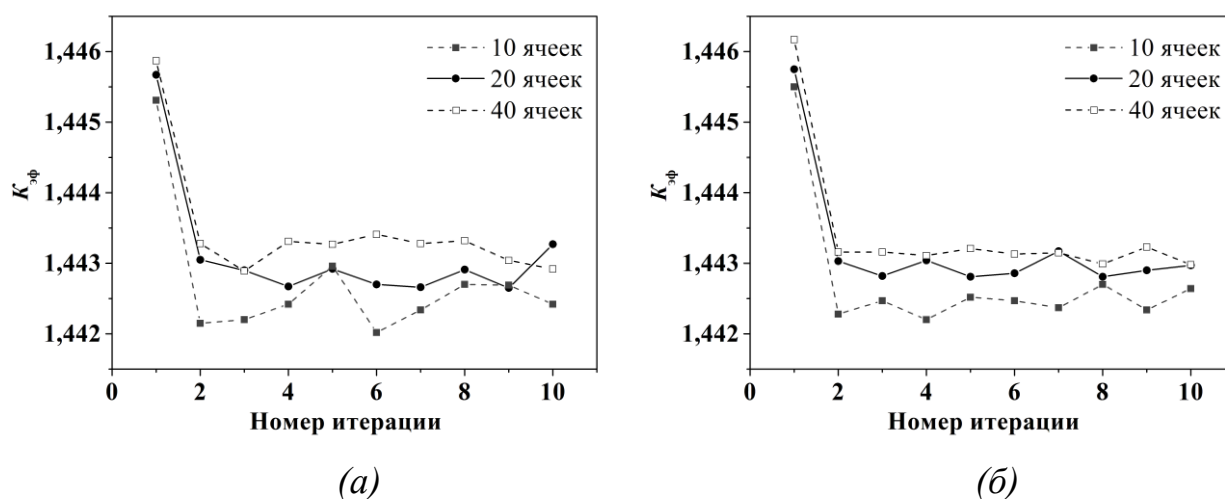


Рисунок 27 – Значение $K_{эф}$ в зависимости от номера итерации для модели с 10,20 и 40 ячейками при статистике 5000*500(а) и 20000*1000(б)

Колебательный характер $K_{эф}$ наблюдается для всех размеров ячеек. При этом увеличение количества аксиальных ячеек приводит к уменьшению амплитуды колебаний и увеличению усредненного $K_{эф}$, что обусловлено изменением характерной формы аксиального энергораспределения.

Полученные значения $K_{эф}$ показывают, что для уточненных моделей отличие от $K_{эф}$ базовой модели превышает среднее отклонение δ (таблица 11), что подтверждает систематический характер изменения $K_{эф}$ при изменении размера ячеек. При этом с ростом числа ячеек N происходит уменьшение значения δ . Дальнейшее уменьшение размера аксиальных ячеек при неизменной статистике NPS может приводить к увеличению статистической погрешности.

Таблица 11 – Среднее значение $K_{эф}$ для модели с 10, 20 и 40 ячейками при статистике 5000*500 и 20000*1000

Статистика	Количество аксиальных ячеек	Среднее значение	Отличие от базового	Среднее отклонение
5000*500	10	1,442721	–	$2,1 \cdot 10^{-4}$
	20	1,44314	$4,2 \cdot 10^{-4}$	$2,0 \cdot 10^{-4}$
	40	1,443459	$3,2 \cdot 10^{-4}$	$1,7 \cdot 10^{-4}$
20000*1000	10	1,442749	–	$1,3 \cdot 10^{-4}$
	20	1,443216	$4,7 \cdot 10^{-4}$	$1,0 \cdot 10^{-4}$
	40	1,443429	$2,1 \cdot 10^{-4}$	$8,9 \cdot 10^{-5}$

Значения относительного энерговыделения в периферийной (рисунок 28) и центральной (рисунок 29) аксиальных ячейках углового твэла модели PWR 3x3 Pin Cluster анализируются для различных аксиальных разбиений ($N=10, 20, 40, 120$). При этом характерный размер аксиальной ячейки h изменяется от 39 см до ~3 см.

При различном аксиальном разбиении со значительным различием размеров ячеек не происходит характерного изменения поведения относительного энерговыделения. Колебательный характер сохраняется, амплитуда колебаний для размеров аксиальных ячеек остается практически постоянной.

По результатам проведенного анализа результатов расчетов по кодам MCU-FREE и HYDRA-IBRAE\H2O определено, что разбиение топливной части на 10 аксиальных ячеек является оптимальным в части точности получаемых результатов и затраченного времени расчета для рассматриваемых задач PWR 3x3 Pin Cluster и модели ячейки твэла ВВЭР. Для системы BWR 3x3 Pin Cluster

необходимо использовать не менее 60 расчетных ячеек для корректного учета кипения теплоносителя.

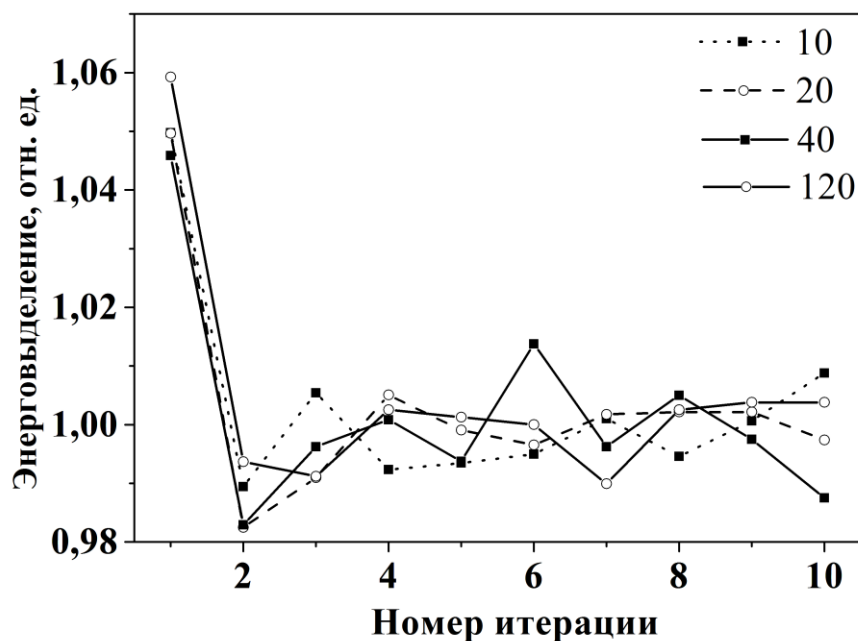


Рисунок 28 – Энерговыведение в периферийной ячейке в зависимости от номера итерации при различном аксиальном разбиении

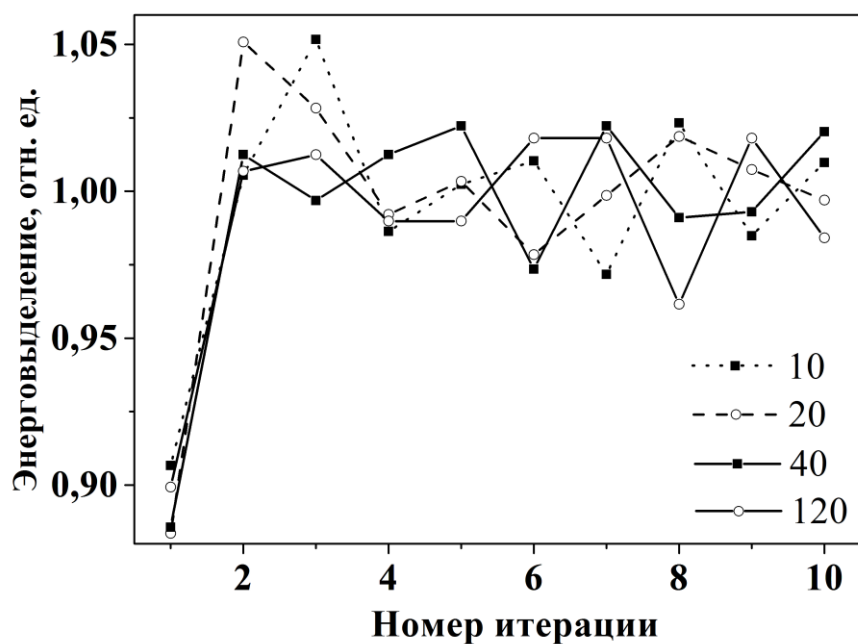


Рисунок 29 – Энерговыведение в центральной ячейке в зависимости от номера итерации при различном аксиальном разбиении

3.1.2.7 Влияние учета температуры топлива и оболочки

Среди различных температурно-плотностных обратных связей в расчетах тепловых реакторов наибольшее влияние на значения нейтронно-физических характеристик оказывают параметры теплоносителя. При этом для уточняющих расчетов также необходимо исследовать влияние температуры топлива и оболочки ТВЭЛОВ.

Влияние температуры топлива и оболочки анализируется на базе двух вариантов расчетов модели PWR 3x3 Pin-cluster – с учетом рассчитываемых в коде HYDRA-IBRAE/H₂O значений температуры топлива и оболочки и при фиксированных на протяжении всего расчета значениях, заданных на старте расчета (рисунок 30). При этом задаются одинаковые для всех ТВЭЛОВ и всех аксиальных ячеек значения температуры оболочки и топлива близкие к расчетным.

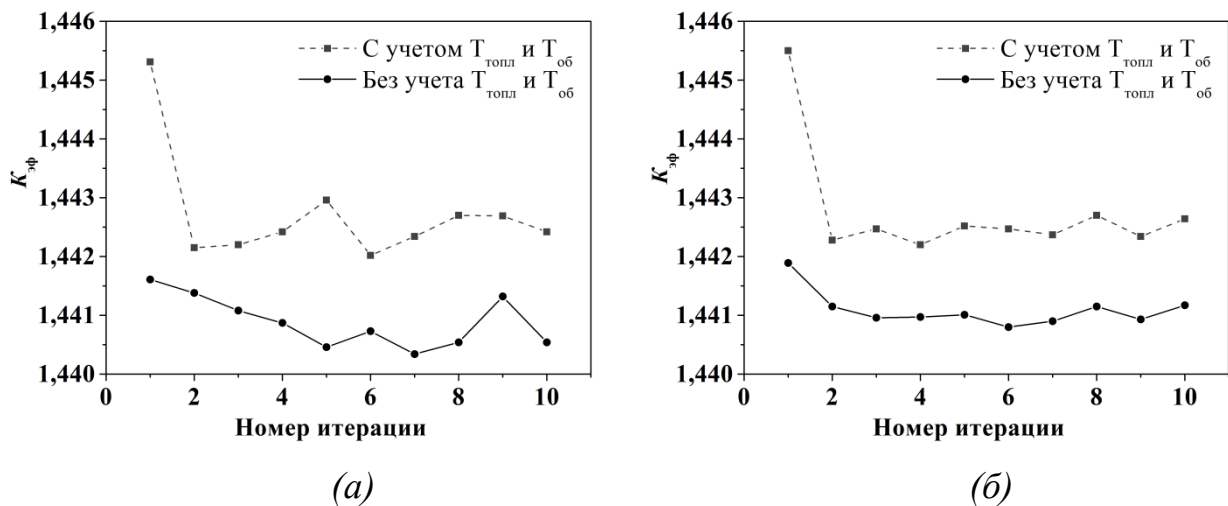


Рисунок 30 – Значение $K_{эф}$ в зависимости от номера итерации с учетом и без учета изменения температуры топлива $T_{топл}$ и оболочки $T_{об}$ при статистике 5000*500 (а) и 20000*1000 (б)

Для этих двух вариантов наблюдается значительное отличие $K_{эф}$, что обусловлено в большей степени Доплер-эффектом при изменении температуры

топлива. При этом колебательный характер $K_{эф}$ сохраняется в расчетах независимо от используемого температурного представления модели. Учет температуры топлива и оболочки приводит к значительному отличию характерного значения $K_{эф}$ от значения, получаемого при начальных условиях. На первой итерации при расчете $K_{эф}$ используется модельное распределение температуры топлива, полученное в теплогидравлических расчетах с равномерным аксиальным энерговыделением. На следующих итерациях распределение температуры топлива принимает профиль характерный для установившегося распределения энерговыделения (рисунок 31).

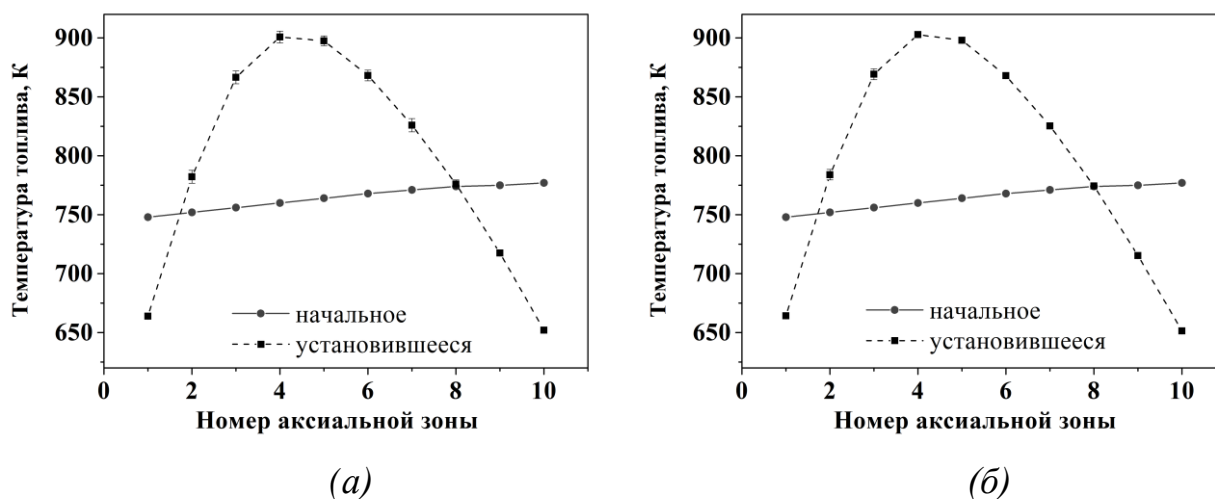
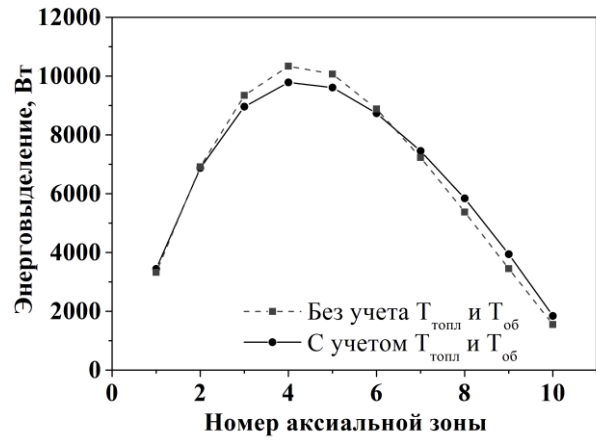


Рисунок 31 – Усредненное по всем твэлам начальное и установившиеся аксиальные распределения температуры топлива при статистике 5000*500 (а) и 20000*1000 (б)

Различие распределения энерговыделения в расчетах с учетом и без учета изменения температуры топлива и оболочки связано с зависимостью ядерно-физических данных от температуры (рисунок 32).



(а)



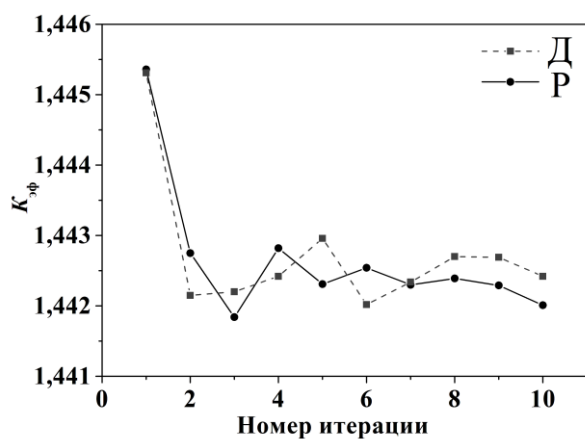
(б)

Рисунок 32 – Аксиальное энергораспределение с учетом и без учета изменения температуры топлива $T_{топл}$ и оболочки $T_{об}$ при статистике $5000*500$ (а) и $20000*1000$ (б)

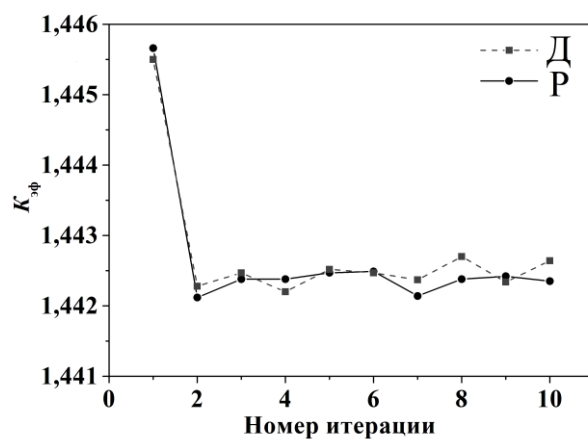
Таким образом, обратные связи по температуре топлива и оболочки имеют значительное влияние на основные нейтронно-физические и теплогидравлические характеристики в связанных расчетах и должны приниматься во внимание при построении согласованной расчетной модели в уточняющих расчетах.

3.1.2.8 Влияние источника нейтронов

Использование динамического источника нейтронов в практических расчетах ориентировано на ускорение сходимости Монте-Карло расчетов. Изменение значений $K_{эф}$ от итерации к итерации наблюдается для системы PWR 3x3 Pin-cluster при использовании динамического (Д) и равномерного (Р) источников (рисунок 33).



(а)



(б)

Рисунок 33 – Значение $K_{эф}$ в зависимости от номера итерации с использованием Р и Д источников при статистике $5000 \cdot 500$ (а) и $20000 \cdot 1000$ (б)

Колебательный характер значений $K_{эф}$ наблюдается при использовании источников обоих типов, при этом использование Д источника приводит к незначительному уменьшению амплитуды колебаний $K_{эф}$, что позволяет уменьшить расчетное время практически в 2 раза за счет уменьшения суммарной статистики (таблица 12).

Таблица 12 – Среднее отклонение $K_{эф}$ для Р и Д источников

NPS	Тип источника	δ
5000*500	Р	$2,1 \cdot 10^{-4}$
	Д	$1,3 \cdot 10^{-4}$
20000*1000	Р	$1,3 \cdot 10^{-4}$
	Д	$8,9 \cdot 10^{-5}$

3.1.3 Сравнение результатов, полученных с применением CFD кода OpenFOAM и канального кода HYDRA-IBRAE/H₂O

После того как на базе макроячеек реакторов с водяным теплоносителем отработана технология связанных расчетов с использованием кода MCU-FREE и канального кода HYDRA-IBRAE/H₂O и показано согласие результатов с представленными в открытых источниках, проведена апробация технологии прецизионных расчетов системы PWR 3x3 Pin Cluster с использованием кода MCU-FREE и трехмерного кода OpenFOAM, реализующего методы вычислительной гидродинамики [39]. Полученные результаты сравниваются с результатами по коду HYDRA-IBRAE/H₂O и результатами, опубликованными в открытых источниках.

Сходимость интегральных характеристик, таких как эффективный коэффициент размножения, не гарантирует сходимость локальных функционалов потока нейтронов [52]. В данной связи для исследования сходимости и устойчивости связанных расчетов “нейтроника–теплогидравлика” необходимо анализировать распределения локальных нейтронно-физических и теплогидравлических характеристик, использующихся при учете обратных связей.

Распределение энерговыделения по твэлам для системы PWR 3x3 Pin Cluster, полученное по кодам MCU-FREE/HYDRA-IBRAE/H₂O и MCU-FREE/OpenFOAM, сравнивается со значениями [5], полученными по кодам MCNP5/SUBCHANFLOW (таблица 13).

Характер энергораспределения по твэлам хорошо согласуется с расчетами по кодам MCNP/SUBCHANFLOW. При этом среднее отклонение значений энерговыделения в симметричных твэлах по кодам MCU-FREE/HYDRA-IBRAE/H₂O и MCU-FREE/OpenFOAM достигает 0,03% и 0,08% соответственно, что обуславливается погрешностью расчетов. При этом увеличение общей статистики расчетов не гарантирует повышение точности ввиду особенностей алгоритмов Монте-Карло и слабосвязанности системы.

Таблица 13 – Относительное значение энерговыделения в твэле

Номер твэла	MCNP/ SUBCHANFLOW	MCU-FREE/HYDRA- IBRAE/H2O		MCU-FREE/OpenFOAM	
		Значение	Отклонение, %	Значение	Отклонение, %
1	1,1081	1,1081	0,00%	1,1075	0,05%
2	1,1420	1,1428	0,07%	1,1425	0,04%
3	1,1079	1,1076	0,03%	1,1074	0,05%
4	1,1421	1,1426	0,04%	1,1423	0,02%
6	1,1420	1,1424	0,04%	1,1432	0,11%
7	1,1081	1,1073	0,07%	1,1071	0,09%
8	1,1418	1,1420	0,02%	1,1427	0,08%
9	1,1080	1,1072	0,07%	1,1072	0,07%

Распределения температуры (рисунок 34) и плотности (рисунок 35) теплоносителя по кодам MCU-FREE/OpenFOAM и MCU-FREE/HYDRA-IBRAE/H2O согласуются с распределениями по кодам MCNP5/SUBCHANFLOW[5] и MCNP6/CTF [7].

При этом различие значений плотности теплоносителя по коду MCU-FREE/OpenFOAM от значений [5, 7] достигает 1,5% в нижней части расчетной модели ($z < 100$ см).

Распределения температуры топлива по кодам MCU-FREE/OpenFOAM и MCU-FREE/HYDRA-IBRAE/H2O согласуются с [5, 7] с наибольшим различием ~ 50 К в центральной части твэла (рисунок 36).

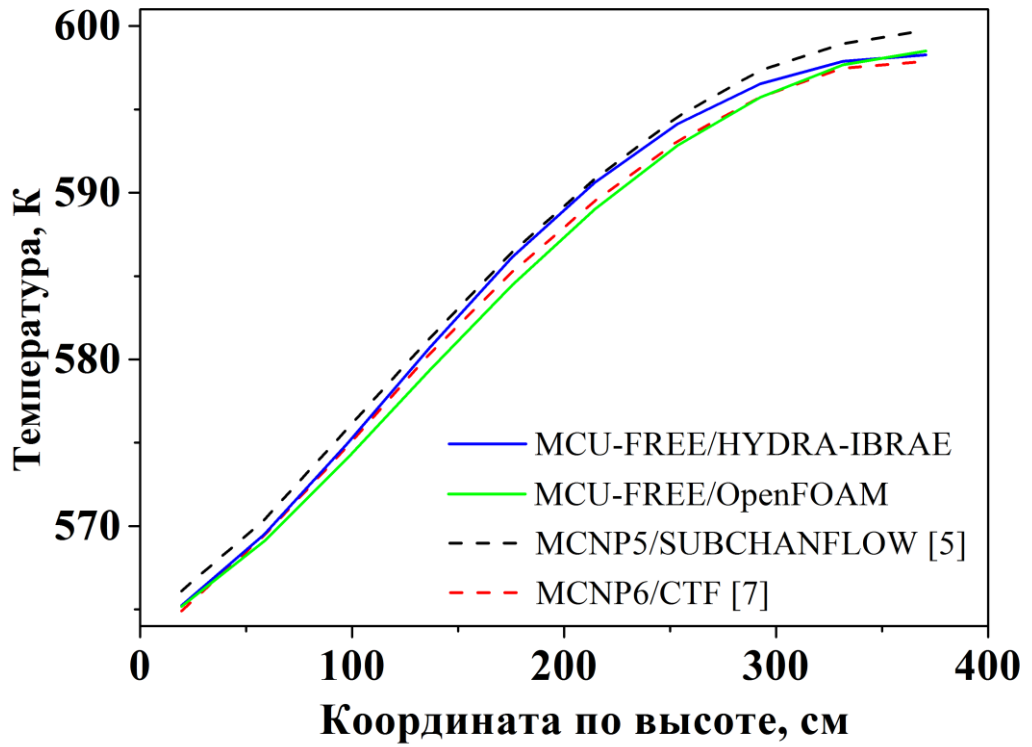


Рисунок 34 – Распределение температуры теплоносителя в связанных расчетах

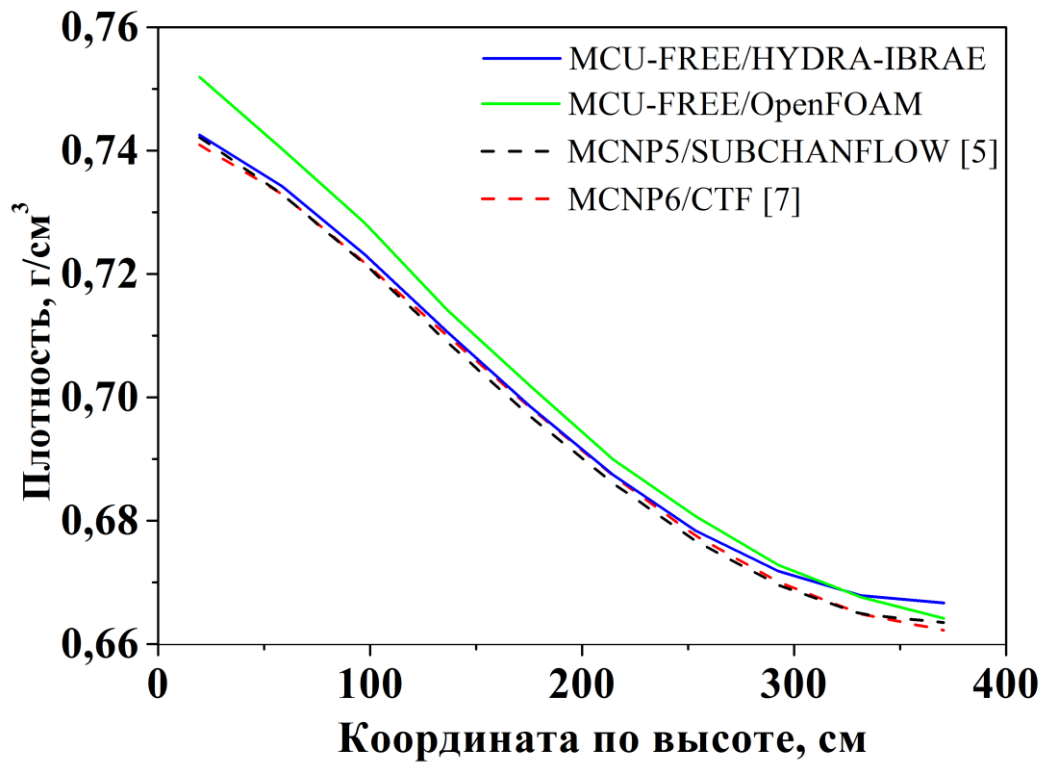


Рисунок 35 – Распределение плотности теплоносителя в связанных расчетах

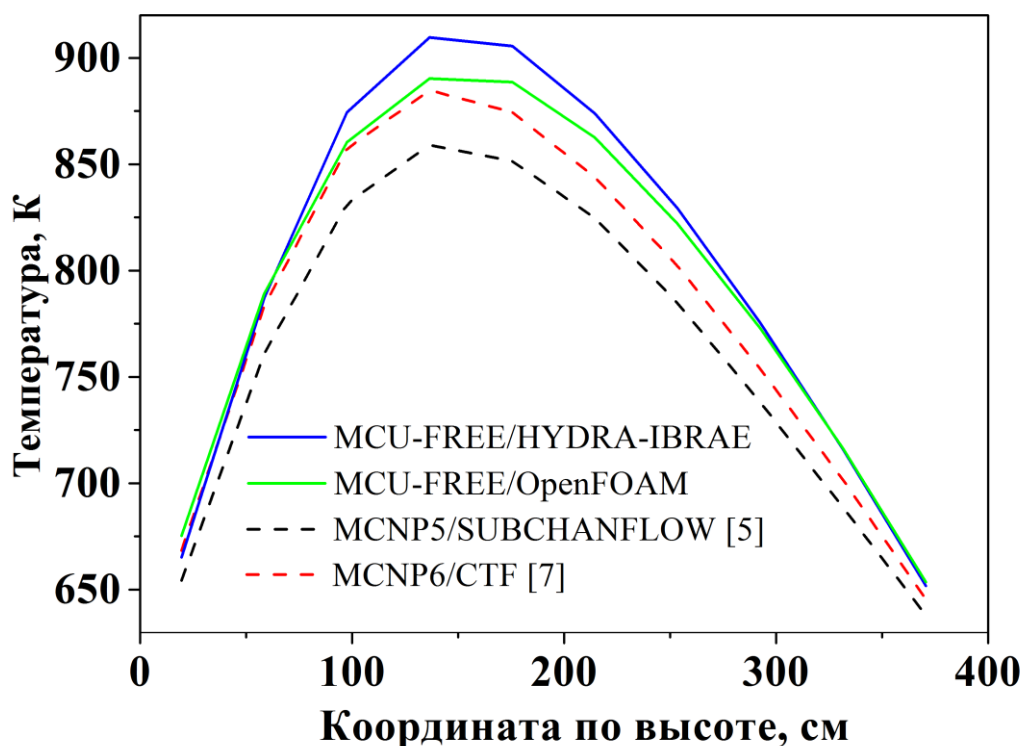


Рисунок 36 – Распределение температуры топлива в связанных расчетах

С применением пакета ParaView получены распределения температуры всех материалов и скорости теплоносителя в связанных расчетах по кодам MCU-FREE/OpenFOAM.

Наблюдаются значительные отличия температуры теплоносителя (рисунок 37) в периферийной части (вблизи твэлов) от температуры в центральной части (вблизи направляющей трубы) модели, что отражает реальное состояние системы и подтверждается отдельными ячейными расчетами. Различие температуры теплоносителя в ячейках твэлов приводит к различиям значений энерговыделения. Несимметричность распределения температуры обусловлена в большей степени статистической ошибкой Монте-карло расчетов и особенностями алгоритмов.

Распределение температуры топлива (рисунок 38) демонстрирует увеличение температуры топлива от центра к оболочке твэла.

Распределение скорости теплоносителя иллюстрирует уменьшение скорости до 0 вблизи поверхности твэлов в соответствии с заданным граничным условием (рисунок 39).

Ввиду значительного размера расчетной модели по высоте по сравнению с поперечными размерами аксиальные распределения для наглядности масштабированы в 20 раз средствами пакета ParaView. Распределения температуры теплоносителя (рисунок 40), топлива (рисунок 41) и оболочки (рисунок 42) в аксиальной плоскости позволяют проанализировать характер распределения температур в рассматриваемой системе. Распределение скорости теплоносителя в аксиальной плоскости (рисунок 43) демонстрирует переход от равномерной скорости на входе к результирующему распределению.

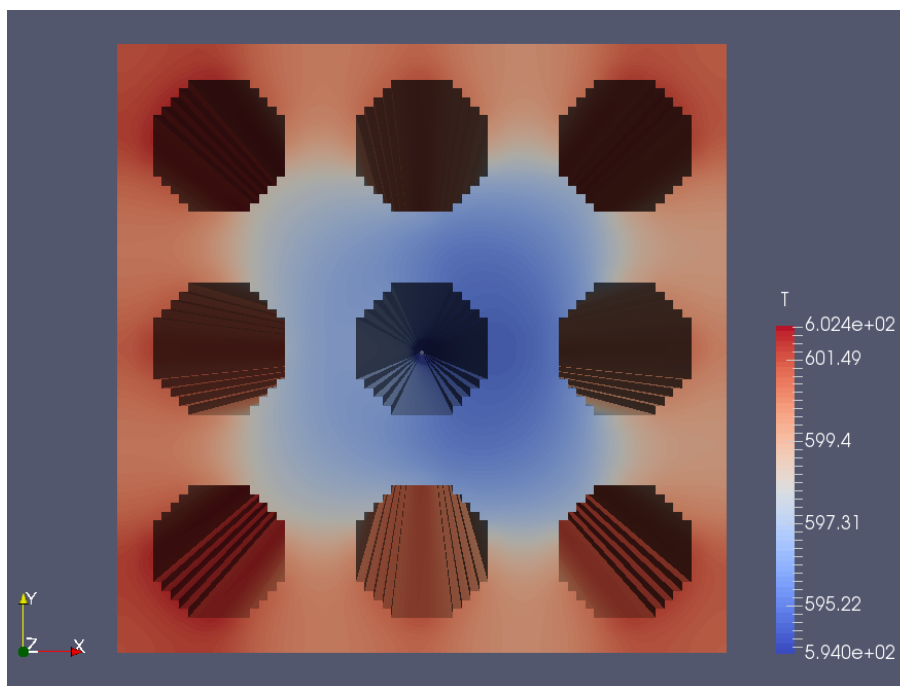


Рисунок 37 – Распределение температуры теплоносителя в центральном сечении рассматриваемой модели

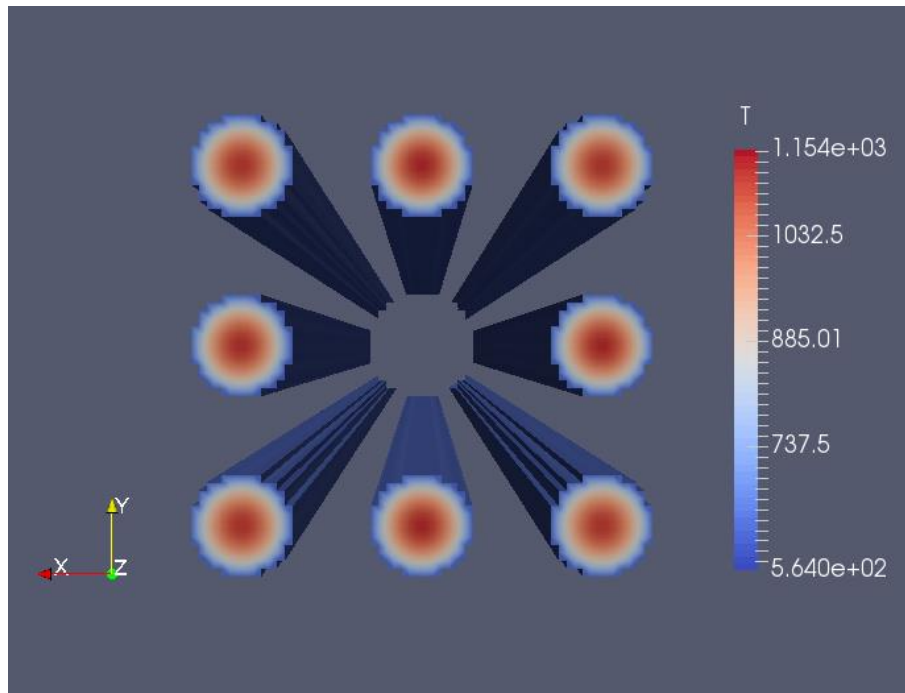


Рисунок 38 – Распределение температуры топлива в центральном сечении рассматриваемой модели

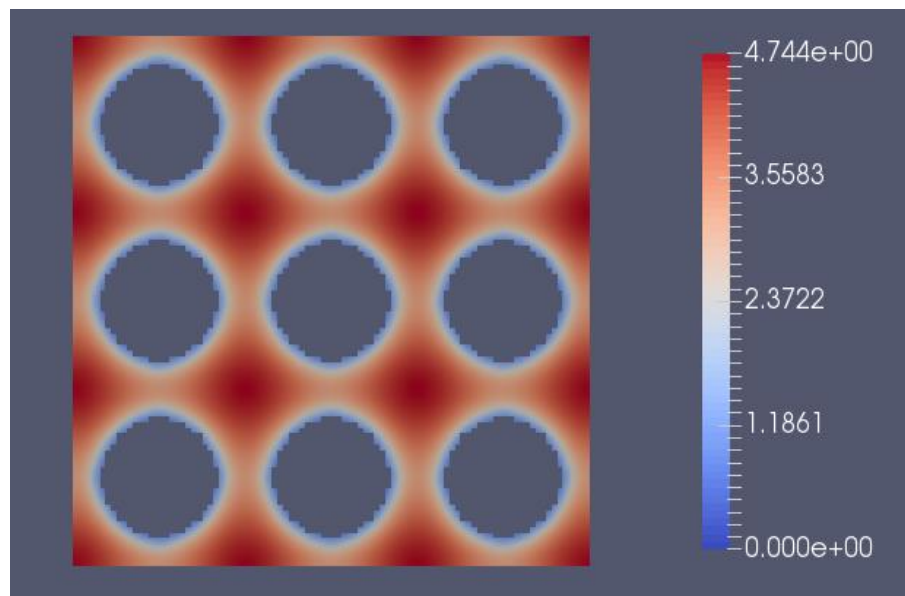


Рисунок 39 – Распределение скорости теплоносителя в центральном сечении рассматриваемой модели

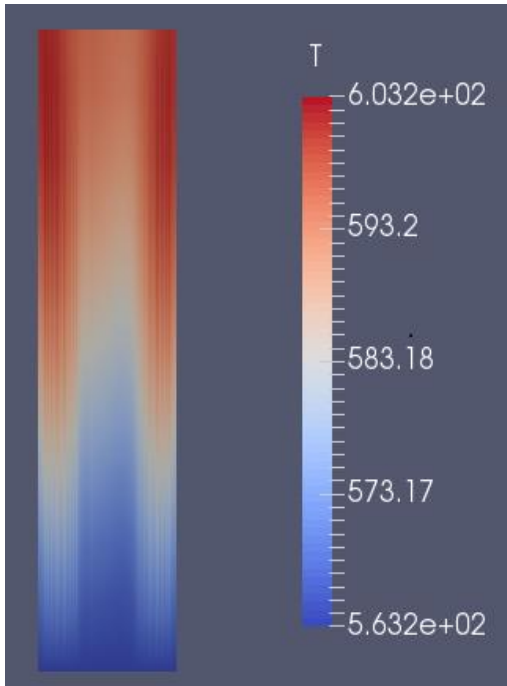


Рисунок 40 – Распределение температуры теплоносителя в аксиальной плоскости

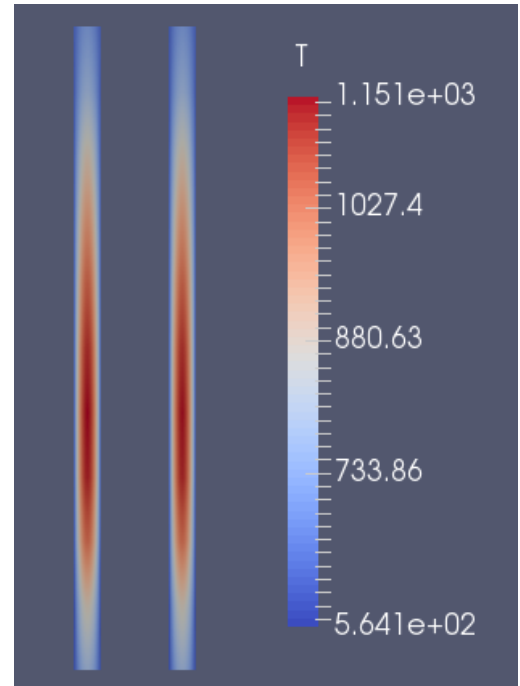


Рисунок 41 – Распределение температуры топлива в аксиальной плоскости

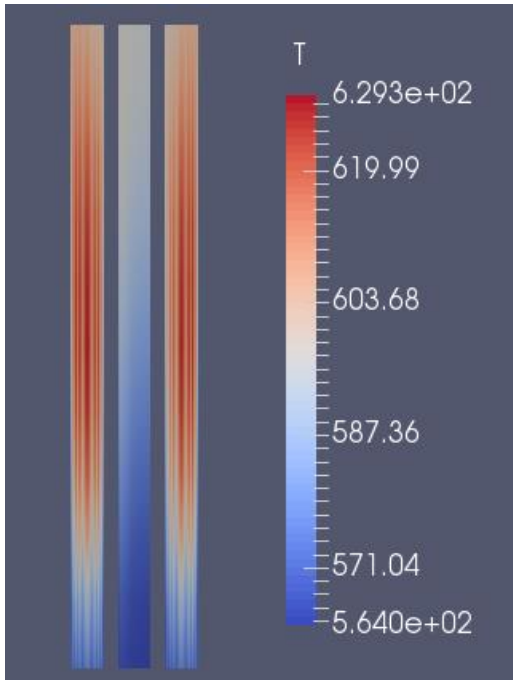


Рисунок 42 – Распределение температуры оболочки в аксиальной плоскости

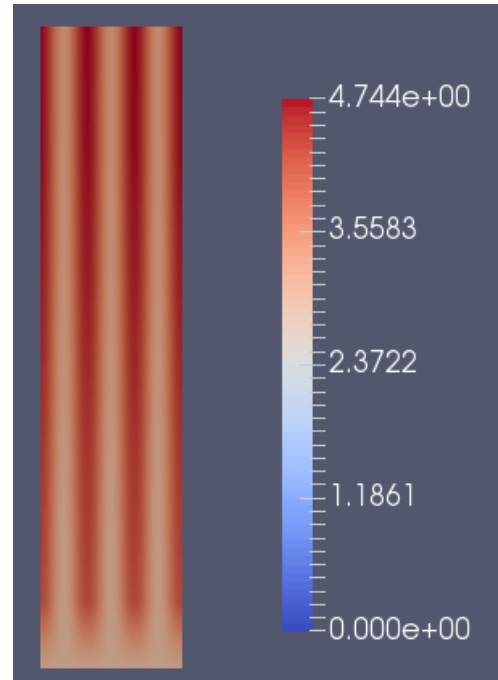


Рисунок 43 – Распределение скорости теплоносителя в аксиальной плоскости

Полученные в связанных расчетах по коду MCU-FREE с применением канального кода HYDRA-IBRAE/H₂O и CFD кода OpenFOAM энергораспределения практически совпадают (рисунок 44).

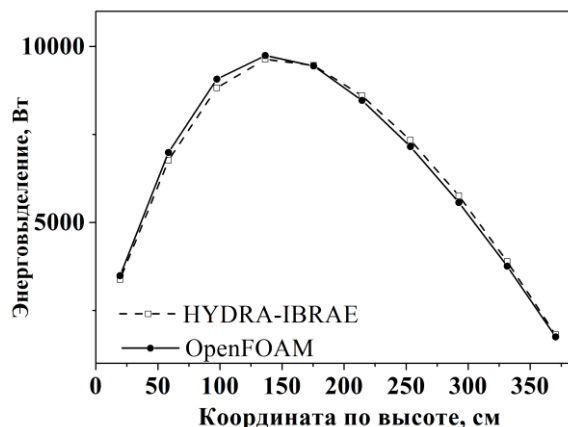


Рисунок 44 – Аксиальное распределение энерговыведения по кодам HYDRA-IBRAE и OpenFOAM

Таким образом, проведенные расчеты демонстрируют удовлетворительное согласие интегральных характеристик, полученных с применением одномерного кода HYDRA-IBRAE/H₂O и CFD-моделирования на базе пакета OpenFOAM, с международными данными, представленными в открытых источниках.

3.2 Связанные расчеты ячейки реактора со свинцовым теплоносителем

Отработанная для ячеек тепловых реакторов технология проведения связанных расчетов была применена для расчетов ячеек с жидкометаллическим теплоносителем. В данном случае особое значение при построении согласованной расчетной модели приобретает учет в теплогидравлических расчетах особенностей поперечного теплообмена, обусловленных малыми значениями чисел Прандтля, которые позволяют учесть используемую модель Кайса для определения турбулентного числа Прандтля.

В нейтронно-физических расчетах ячеек с жидкометаллическим теплоносителем выбор библиотеки ядерных констант оказывает большее влияние

на рассчитываемые характеристики по сравнению с расчетами ячеек с водяным теплоносителем, что обусловлено спецификой быстрого спектра нейтронов, ядерных данных в резонансной области и большим разбросом ядерных данных для отдельных нуклидов в существующих стандартных библиотеках. Так замена данных только для изотопов свинца, подготовленных на базе РОСФОНД (JEFF-3.1) [36], на данные из ENDF/B-VII.1 [53] в проведенных ячейчных расчетах приводит к отклонениям значений плотности потока нейтронов до 5%. В этой связи во всех представленных связанных расчетах использовалась единая библиотека ядерно-физических данных на базе РОСФОНД, поставляемая вместе с кодом MCU-FR.

Для уточнения методики прецизионных связанных расчетов в условиях локальных пространственных неоднородностей проведены расчеты тестовой модели ячейки реактора со свинцовым теплоносителем с измененной геометрией твэлов, вызванной распуханием оболочки и топлива. Отсутствие экспериментальных данных по параметрам распухания в подобных установках обуславливает для обеспечения консервативного анализа проведение многовариантных расчетов с различными параметрами, включая расположение области распухания, внешний диаметр оболочки и др.

Связанные расчеты для тестовой модели ячейки реактора со свинцовым теплоносителем проведены с помощью кодов MCU-FR и OpenFOAM.

3.2.1 Описание расчетной модели

В методических расчетах используется упрощенная расчетная модель из 2x2 твэлов с двумя аксиальными ячейками в расчетах по коду MCU-FR. Основная расчетная модель состоит из 9 твэлов со смешанным уран-плутониевым (СНУП) топливом высотой 110 см, расположенных в узлах квадратной решетки 3x3 с шагом 1,34 см. Аксиальное разбиение твэлов в процессе предварительных расчетов варьировалось, проводились расчеты с различной высотой ячеек, по результатам предварительных расчетов было выбрано разбиение на 10 аксиальных ячеек высотой 11 см в расчетах по коду MCU-FR. Данное разбиение

позволяет наблюдать влияние пространственных и плотностных неоднородностей, обеспечивая необходимую точность Монте-Карло расчетов. Моделируется восходящее движение теплоносителя со скоростью на входе 1,5 м/с, температурой теплоносителя на входе 693 К, давлением теплоносителя на выходе 0,74 МПа и суммарным энерговыделением в ячейке – 0,54 МВт. Свойства материалов (плотность, теплоемкость, теплопроводность и др.), включая свинцовый теплоноситель, топливо и сталь, в расчетах задаются с использованием единой базы данных по свойствам материалов для кодов нового поколения проектного направления «Прорыв» (свидетельство о государственной регистрации базы данных №2020621823 от 9 октября 2020 г.), при этом используются модельные параметры распухания топлива и оболочки. Моделирование систем с варьированием параметров, обусловленным различными возмущающими факторами, позволяет с большей надежностью оценить получаемые результаты с точки зрения значений основных характеристик и их погрешности. Рассматриваются разные условия распухания, включая внешний диаметр оболочки твэла, положение области распухания по высоте (в центральной или нижней части) и положение конкретного моделируемого твэла с распуханием. Моделируются состояния с распуханием центрального твэла, периферийного твэла, распуханием обоих твэлов и распуханием всех девяти твэлов. Параметры моделирования, определяемые на этапе предварительных модельных расчетов, позволяют обеспечить консервативные оценки основных нейтронно-физических и теплогидравлических характеристик.

3.2.2 Определение критерия сходимости для завершения расчетов

Связанные расчеты строятся на базе последовательных итераций с пошаговой проверкой сходимости. При этом итерация рассматривается в расширенном смысле: на каждой итерации рассчитывается энергораспределение (по MCU-FR) и распределение температуры и плотности материалов (по OpenFOAM) [54]. Основные механизмы обратной связи обусловлены температурным изменением плотности теплоносителя и температурной

зависимостью эффективных микроскопических сечений. Обмен данными между кодами осуществляется с помощью реализованного интерфейса. Аналогичная схема использовалась при расчете бенчмарков PWR и BWR [30].

В рамках анализа сходимости рассматриваются значения теплогидравлических характеристик, усредненные по аксиальным ячейкам, используемым в нейтронно-физическом расчете. Анализ сходимости расчетов строится на основе вычисления отклонений температуры топлива и теплоносителя от значений, полученных на предыдущей итерации:

$$\Delta T_n^{k,i} = T_n^{k,i} - T_{n-1}^{k,i},$$

где n – номер итерации, k – номер твэла, i – номер аксиальной ячейки.

С учетом полученных отклонений рассчитываются их относительные значения $t_n^{k,i}$:

$$t_n^{k,i} = \frac{T_n^{k,i} - T_{n-1}^{k,i}}{\Delta T_1^{k,i}} = \frac{T_n^{k,i} - T_{n-1}^{k,i}}{T_1^{k,i} - T_0^{k,i}},$$

где $\Delta T_1^{k,i}$ – отклонения, полученные на первой итерации, $T_0^{k,i}$ – температура, полученная при начальных условиях.

Среднеквадратичное отклонение определяется как:

$$t_n^{cp} = \sqrt{\frac{1}{KI} \sum_{k=1..K, i=1..I} (t_n^{k,i})^2},$$

где K – суммарное число твэлов, I – суммарное число аксиальных ячеек.

Также рассчитывается максимальное отклонение:

$$t_n^{\max} = \max(t_n^{1,1} \dots t_n^{K,I}).$$

Анализ сходимости осуществляется на основе полученных среднеквадратичных и максимальных значений. Расчет завершается при достижении максимального отклонения температуры топлива и теплоносителя $\sim 0,02$. Данный критерий не является универсальным и определен на этапе предварительных методических расчетов.

3.2.3 Анализ результатов связанных расчетов ячейки реактора с распуханием в центральной части твэла

В настоящем разделе проведен анализ результатов многовариантных расчетов модели с распуханием в центральной части центрального твэла. В расчетах задаются различные значения внешнего диаметра оболочки твэла (рисунок 45). При этом вариант 1 соответствует исходной неизменной геометрии (без распухания), в расчетных вариантах 2–6 моделируются твэлы с распуханием топлива. Вариант 6 соответствует наибольшему распуханию твэла, при этом параметры распухания выбраны консервативно, так что изменение площади проходного сечения достигает 50%. На рисунке 46 представлено поперечное сечение расчетной модели.

Распухание твэла, расположенного в центре, оказывает влияние на распределение теплогидравлических параметров по всему объему рассматриваемой модели, в данной связи анализируется распределение скорости и температуры теплоносителя по высоте в центральной и периферийной ячейках. Увеличение скорости теплоносителя в периферийной ячейке достигает ~5% (рисунок 47а), в центральной ячейке ~25% (рисунок 47б).

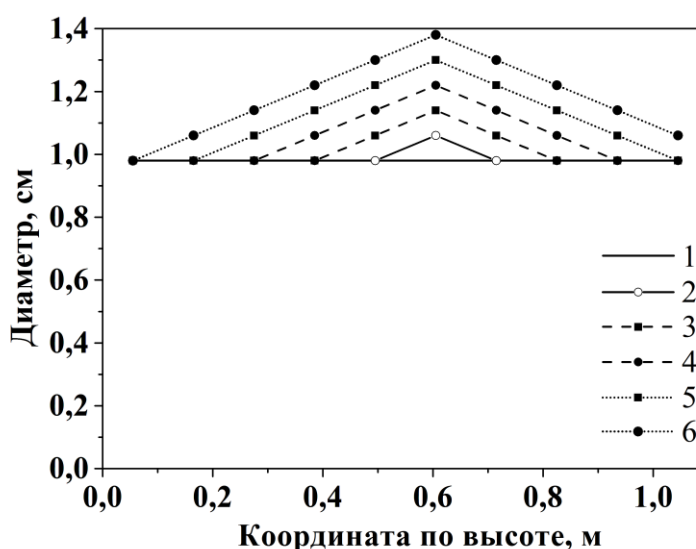


Рисунок 45 – Внешний диаметр оболочки твэла для вариантов 1–6

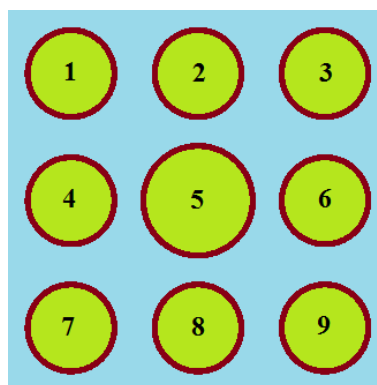


Рисунок 46 – Поперечное сечение расчетной модели

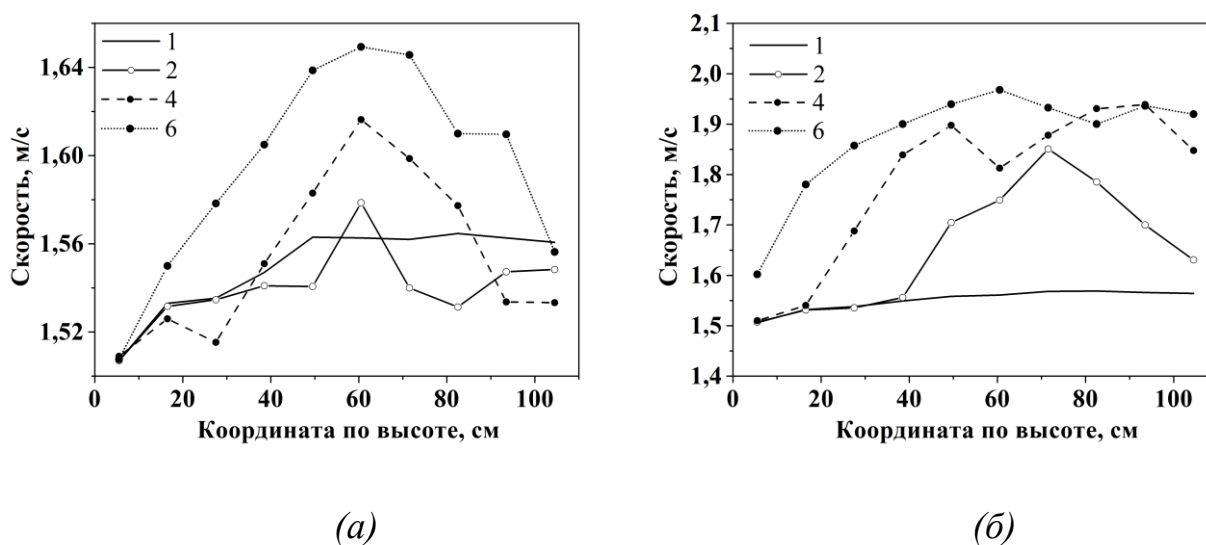


Рисунок 47 – Скорость теплоносителя в периферийной (а) и центральной (б) ячейке для различного распухания (варианты 1,2,4 и 6)

В обоих случаях максимальное увеличение наблюдается в центре по высоте (область утолщения) в варианте с наибольшим распуханием.

В центральной ячейке максимальное увеличение температуры теплоносителя (рисунок 48) достигает $\sim 10^{\circ}\text{C}$. В периферийной ячейке наблюдается небольшое увеличение до $\sim 5^{\circ}\text{C}$, в этой связи графики температуры для периферийной ячейки при различном распухании не приводятся ввиду малого отличия друг от друга. В обоих случаях максимальное увеличение наблюдается в верхней ячейке в варианте с наибольшим распуханием. Распухание центрального твэла оказывает значительное влияние на теплогидравлические характеристики

центральной ячейки, характеристики периферийной ячейки изменяются в меньшей степени. Нейтронно-физические характеристики не приводятся ввиду их малого изменения.

С учетом указанного в п. 3.2.2 критерия сходимости расчет завершается на итерации 11 (рисунок 49).

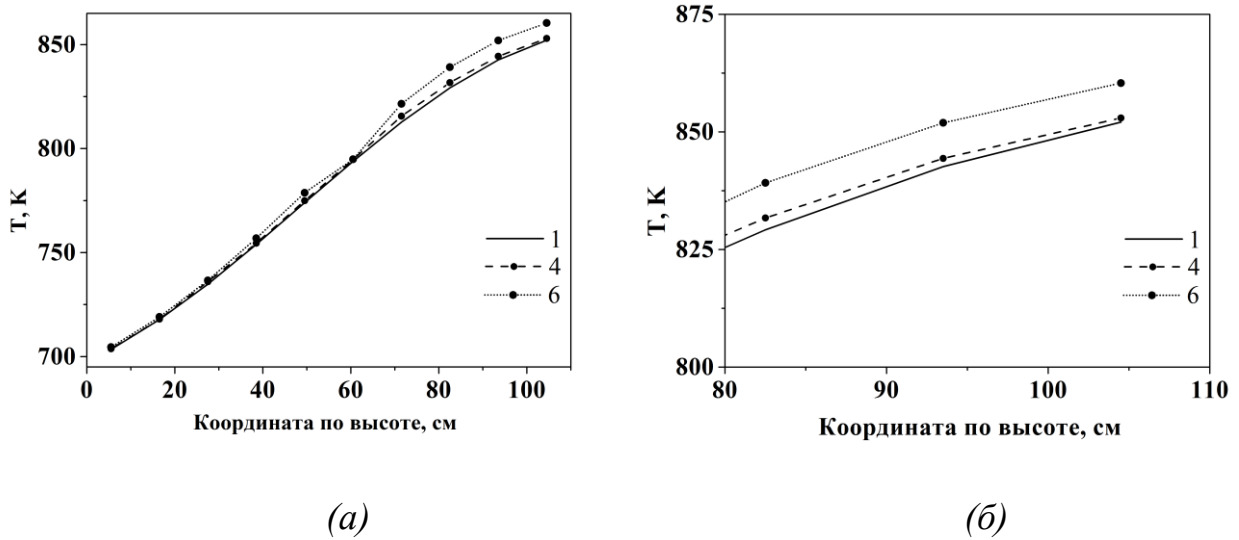


Рисунок 48 – Температура теплоносителя в центральной ячейке в обычном (а) и увеличенном (б) масштабе для различного распухания (варианты 1, 4, 6)

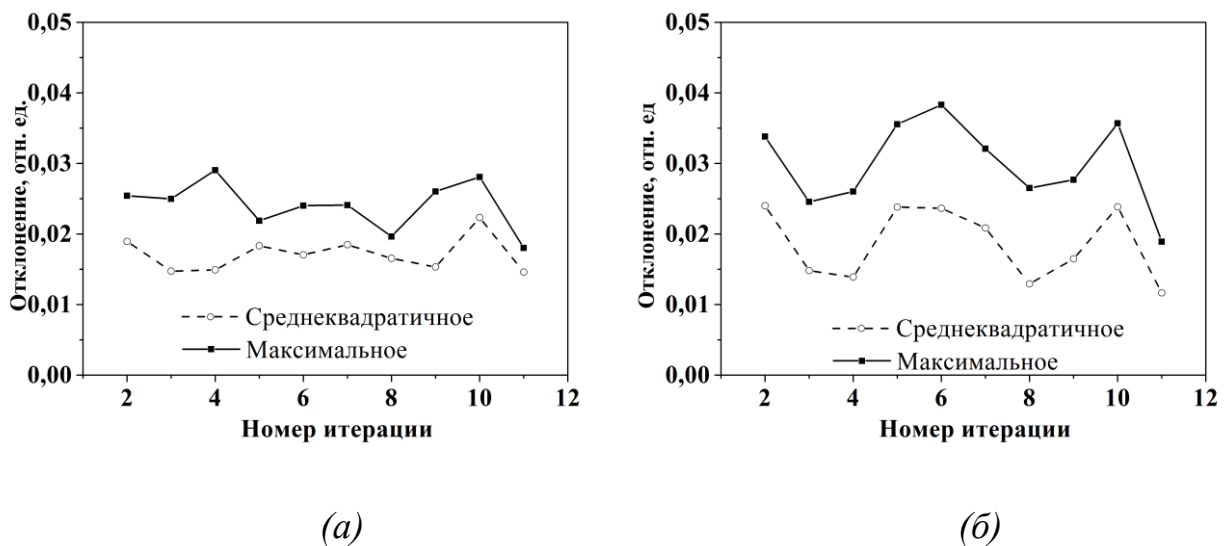


Рисунок 49 – Среднеквадратичное и максимальное отклонения температуры топлива (а) и теплоносителя (б)

3.2.4 Анализ результатов связанных расчетов ячейки реактора с изменением площади проходного сечения в её нижней части

В данном разделе анализируются результаты многовариантных расчетов модели с изменением площади проходного сечения в нижней части макроячейки, которое задается с помощью изменения диаметра твэлов. При этом проводятся расчеты шести вариантов с изменением диаметра центрального твэла (рисунок 50) и расчеты с максимальным (вариант 6) изменением диаметра нескольких твэлов. Изменение площади проходного сечения оказывает существенное влияние на распределение теплогидравлических параметров по всей высоте, что обуславливает консервативность расчета.

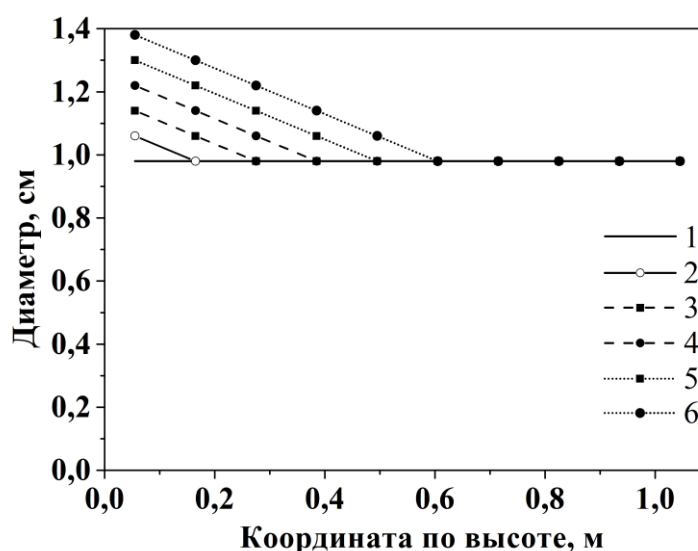


Рисунок 50 – Внешний диаметр оболочки твэла для вариантов 1–6

На рисунке 51 показано влияние изменения диаметра центрального твэла на распределение скорости и температуры теплоносителя по высоте в центральной и периферийной ячейках. При больших изменениях наблюдается уменьшение скорости теплоносителя в периферийной ячейке, достигающее ~10% при максимальном изменении диаметра центрального твэла (вариант 6). При этом увеличение скорости теплоносителя в центральной ячейке достигает 20%

(рисунок 51б) для вариантов 4 – 6. В обоих случаях максимальное изменение скорости потока наблюдается в центральной зоне по высоте.

Увеличение температуры теплоносителя в периферийной (рисунок 52а) и центральной (рисунок 52б) ячейках составляет ~ 15 °С. В обоих случаях максимальное увеличение наблюдается в верхней ячейке в варианте с наибольшим изменением проходного сечения (вариант 6).

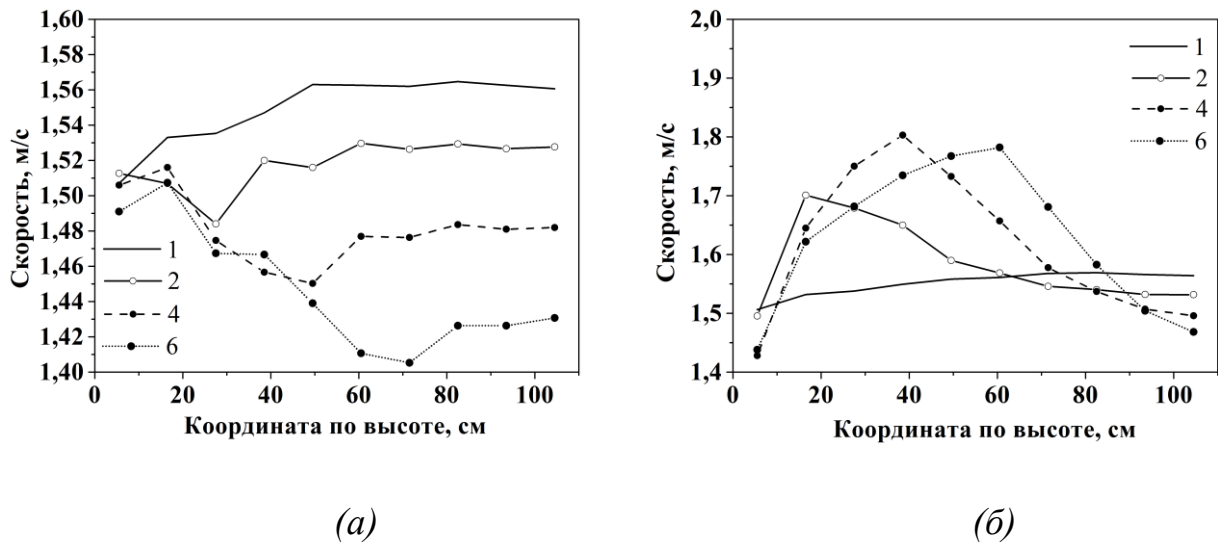
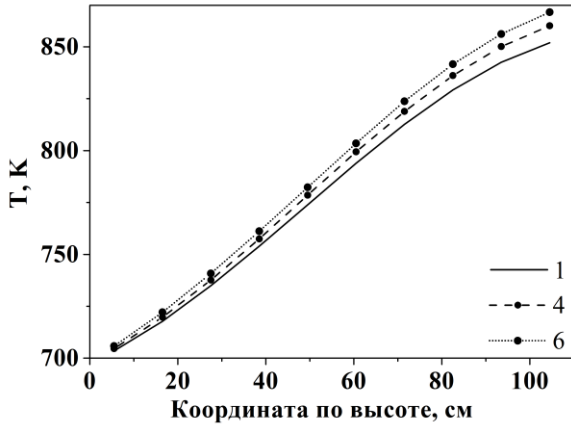


Рисунок 51 – Скорость теплоносителя в периферийной (а) и центральной (б) ячейке для различного изменения площади проходного сечения (варианты 1, 2, 4, 6)

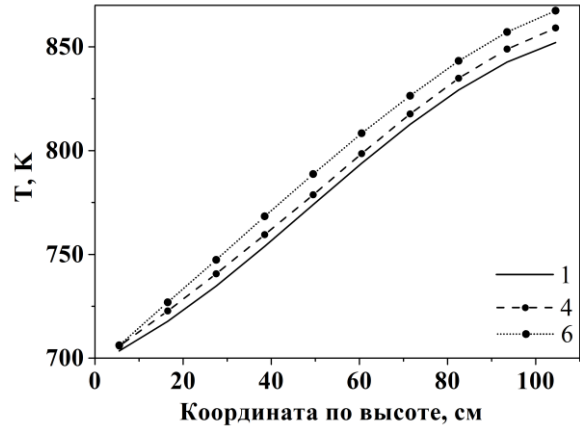
С учетом указанного в п. 3.2.2 критерия сходимости расчет завершается на итерации 5 (рисунок 53).

Влияние изменения диаметра нескольких твэлов на теплогидравлические характеристики исследуется на основе результатов расчетов с изменением диаметра центрального твэла, периферийного твэла, обоих твэлов и всех девяти твэлов. Для этих расчетов изменение максимального диаметра твэлов соответствовало варианту 6, представленному на рисунке 50. На рисунке 54 приведена скорость теплоносителя в периферийной и центральной ячейках, а на

рисунке 55 – распределение температуры по высоте. При этом вариант, отмеченный как «центр» на рисунках 54 и 55, соответствует варианту 6 на рисунках 51 и 52, соответственно.

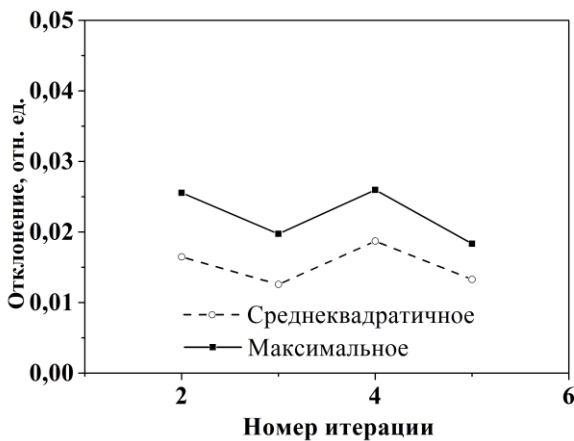


(a)

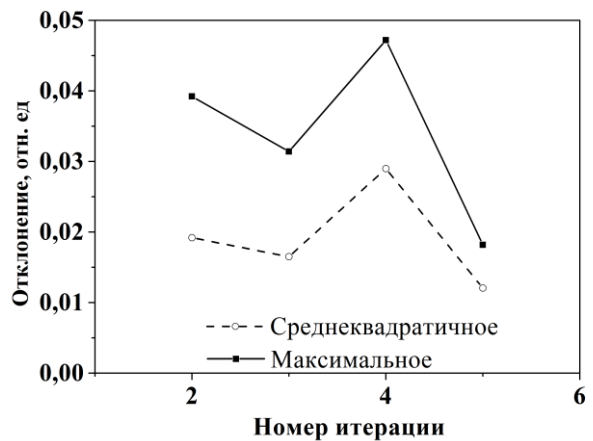


(б)

Рисунок 52 – Температура теплоносителя в периферийной (a) и центральной (б) ячейке для различного изменения площади проходного сечения (варианты 1,4,6)

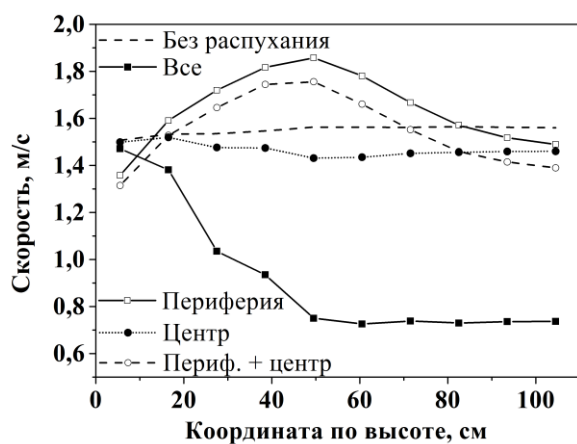


(a)

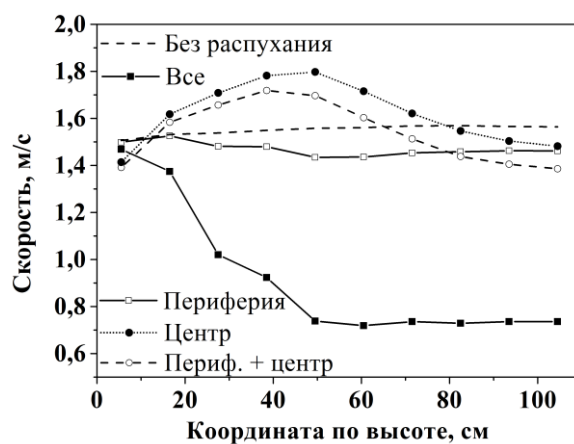


(б)

Рисунок 53 – Среднеквадратичное и максимальное отклонения температуры топлива (a) и теплоносителя (б)

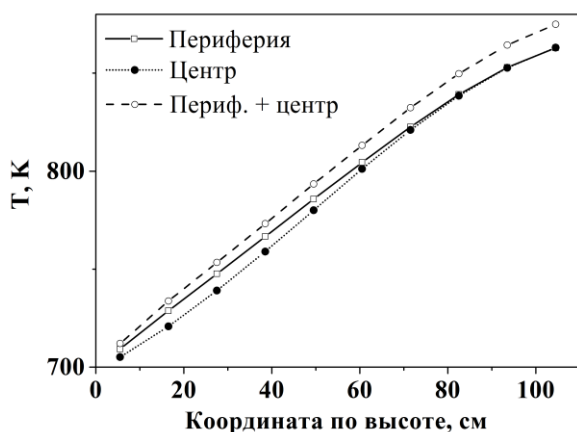


(a)

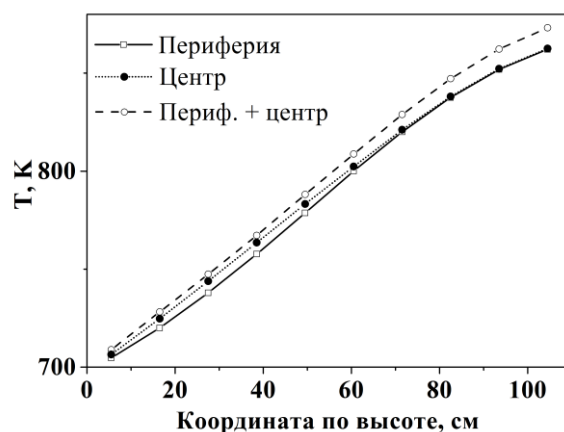


(б)

Рисунок 54 – Скорость теплоносителя в периферийной (a) и центральной (б) ячейке в расчетах с изменением диаметра центрального, периферийного, обоих твэлов и всех девяти твэлов



(a)



(б)

Рисунок 55 – Температура теплоносителя в периферийной (a) и центральной (б) ячейке в расчетах с изменением диаметра центрального, периферийного и обоих твэлов

При изменении площади проходного сечения, вызванного изменением диаметра одного (центрального или периферийного) и двух твэлов наблюдается локальное увеличение скорости теплоносителя в ячейке с изменением площади проходного сечения и соответствующее уменьшение в ячейке без изменения (до

10%). Максимальное увеличение скорости теплоносителя для центральной (~15%) и периферийной (~20%) ячеек достигается в случае изменения диаметра только одного твэла. При изменении диаметра всех твэлов наблюдается уменьшение скорости теплоносителя во всех ячейках до ~50%. Это связано со снижением суммарного расхода, вызванного уменьшением площади поперечного сечения при постоянной скорости теплоносителя на входе.

Распределение температуры в случае изменения диаметра всех девяти твэлов представлено только для центральной ячейки ввиду практически полного соответствия распределений в центральной и периферийной ячейках. Максимальное увеличение температуры теплоносителя на выходе в случае изменения диаметра одного твэла составляет ~10°C, двух твэлов ~20°C, в случае изменения диаметра всех твэлов ~180°C (рисунок 56).

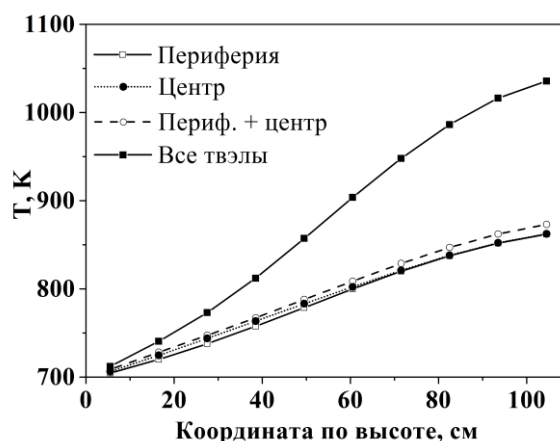


Рисунок 56 – Температура теплоносителя в центральной ячейке в расчетах с изменением диаметра центрального, периферийного, обоих твэлов и всех девяти твэлов

Распределение энерговыделения в случае изменения диаметра центрального, периферийного и всех девяти твэлов приведено на рисунке 57.

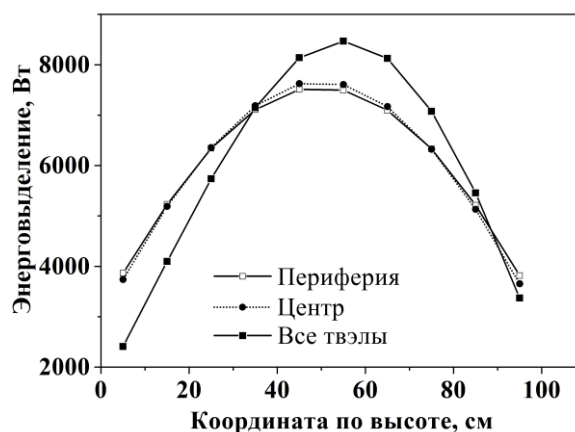


Рисунок 57 – Энерговыделение в центральном твэле в расчетах с распуханием центрального, периферийного и всех девяти твэлов

Данный рисунок демонстрирует зависимость распределения энерговыделения от параметров геометрии твэлов, вызванного влиянием температурно-плотностных обратных связей. Энерговыделение в расчетах с изменением диаметра двух твэлов не приводится ввиду почти полного совпадения с распределением в расчетах с изменением диаметра центрального твэла.

3.2.5 Анализ результатов связанных расчетов при различной скорости теплоносителя

В настоящем разделе рассмотрены результаты связанных расчетов при различной скорости теплоносителя на входе, вместе с базовым вариантом (1,52 м/с) рассматриваются вариант с увеличенной на 10% (1,67 м/с) и уменьшенной на 10% скоростью (1,37 м/с). В данном случае анализируются результаты расчетов с одинаковым распуханием оболочки и топлива всех девяти твэлов, при этом используются модельные параметры распухания (рисунок 58). При этом максимальный внешний диаметр оболочки задается в центральной части твэла по высоте и составляет 1,14 см. Ближе к краям твэла диаметр задается равным исходному диаметру твэла.

Для заданной модели распухания получены распределения скорости (рисунок 59), температуры теплоносителя по высоте (рисунок 60), температуры

оболочки (рисунок 61) и топлива (рисунок 62). Распределения энерговыделения не приводятся ввиду почти полного соответствия во всех трех вариантах.

Максимальное изменение скорости по сравнению с базовым вариантом составляет 23 %, температуры теплоносителя – 32 °С, оболочки – 33 °С , топлива – 32 °С. Максимальное изменение энерговыделения составляет ~0,8% и обуславливается влиянием температурно-плотностных обратных связей.

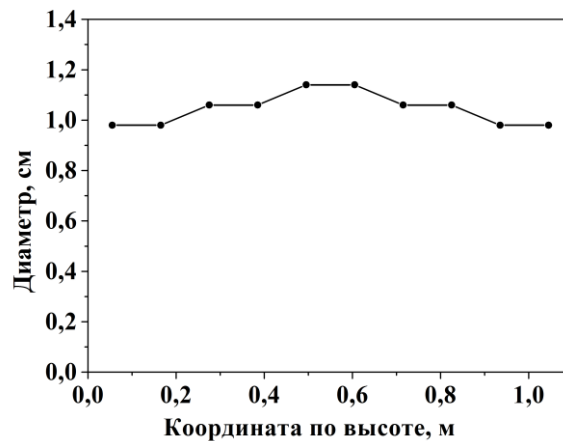


Рисунок 58 – Внешний диаметр оболочки ТВЭЛ от высоты

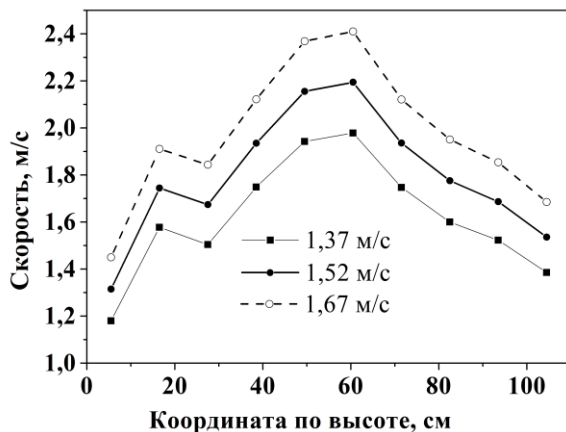


Рисунок 59 – Распределение скорости теплоносителя в расчетах с разной скоростью теплоносителя на входе

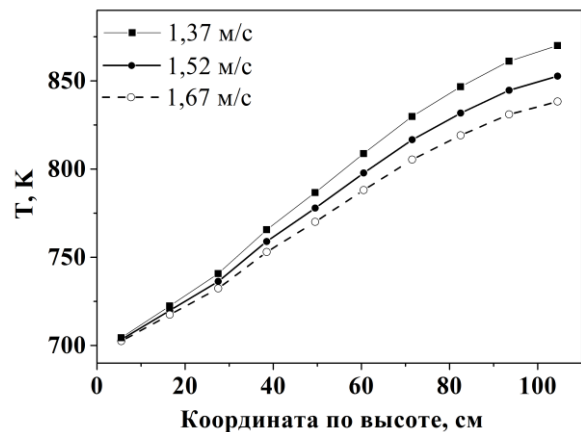


Рисунок 60 – Распределение температуры теплоносителя в расчетах с разной скоростью теплоносителя на входе

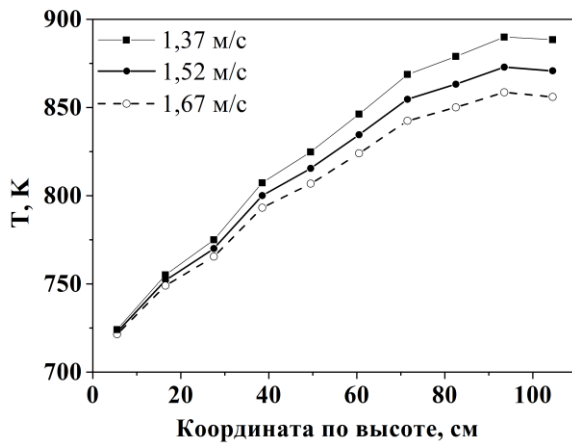


Рисунок 61 – Распределение температуры оболочки в расчетах с разной скоростью теплоносителя на входе

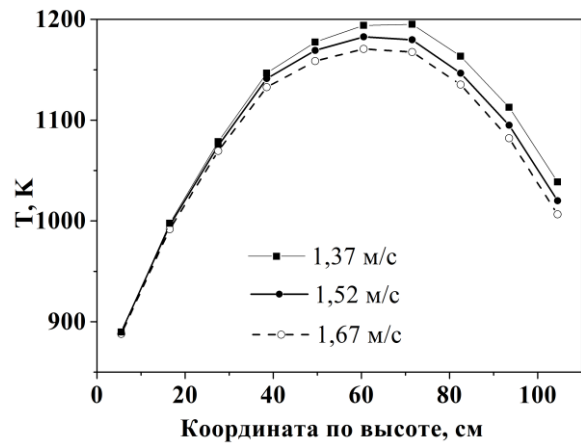


Рисунок 62 – Распределение температуры топлива в расчетах с разной скоростью теплоносителя на входе

3.3 Связанные расчеты активной зоны реакторной установки со свинцовым теплоносителем

При консервативной оценке безопасности реакторных установок со свинцовым теплоносителем традиционно используются инженерные коды для расчета интегральных характеристик. С применением кода ЕВКЛИД/V1 [4], разрабатываемого в ИБРАЭ РАН в рамках проектного направления «ПРОРЫВ» и аттестованного для расчета элементов РУ со свинцовым теплоносителем, проводится интегральный расчет модели реакторной установки со свинцовым теплоносителем со СНУП топливом.

В расчетах по коду ЕВКЛИД/V1 моделируется стационарное состояние установки на номинальном уровне мощности. Для уточнения оценки значений температуры топлива в наиболее энергонапряженной ТВС, полученных в интегральном расчете, проведены прецизионные связанные расчеты по кодам MCU-FR и OpenFOAM.

Код ЕВКЛИД/V1 имеет модульную структуру, включая три основных модуля: системный теплогидравлический модуль HYDRA-IBRAE/LM, твэльный модуль БЕРКУТ и нейтронно-физический модуль DN3D, и обеспечивает

самосогласованное моделирование на базе связанных расчетов с применением указанных модулей. В расчетах по коду ЕВКЛИД/V1 используется диффузионное приближение с гомогенизацией материальных составов по расчетным ячейкам и библиотеками ядерно-физических данных в 26-групповом представлении, подготовленными с помощью программы CONSYST [55] на базе данных РОСФОНД [36]. В рамках кросс-верификации нейтронно-физического модуля кода ЕВКЛИД/V1 показано согласие результатов расчетов модели активной зоны РУ БРЕСТ-ОД-300 с результатами, полученными по коду MCU-FR [56, 57].

Интегральный код ЕВКЛИД/V1 используется для моделирования различных режимов реакторных установок с жидкометаллическим теплоносителем, в том числе включая режимы, вызванные, например, попаданием водяного пара в первый контур установки с тяжелым жидкометаллическим теплоносителем [58].

3.3.1 Описание расчетной модели интегрального кода

Рассматриваемая расчётная модель включает активную зону вместе с нижним, верхним и боковыми отражателями, а также первый и частично второй контуры реакторной установки. Моделирование второго контура ограничено заданием граничных условий по парогенератору.

В нейтронно-физическом расчете материалы ТВС гомогенизируются по расчетным ячейкам и значения нейтронно-физических характеристик рассчитываются для ячеек в целом, что не позволяет учесть в расчетах неравномерность энергораспределения внутри ТВС.

В теплогидравлическом расчете активной зоны ТВС с близкими теплогидравлическими характеристиками объединяются в каналы, при этом все параметры рассчитываются для канала в целом. Такой подход позволяет в практических расчетах обеспечить желаемую точность за приемлемое расчетное время. Нодализационная схема активной зоны в теплогидравлическом расчете представлена на рисунке 63.

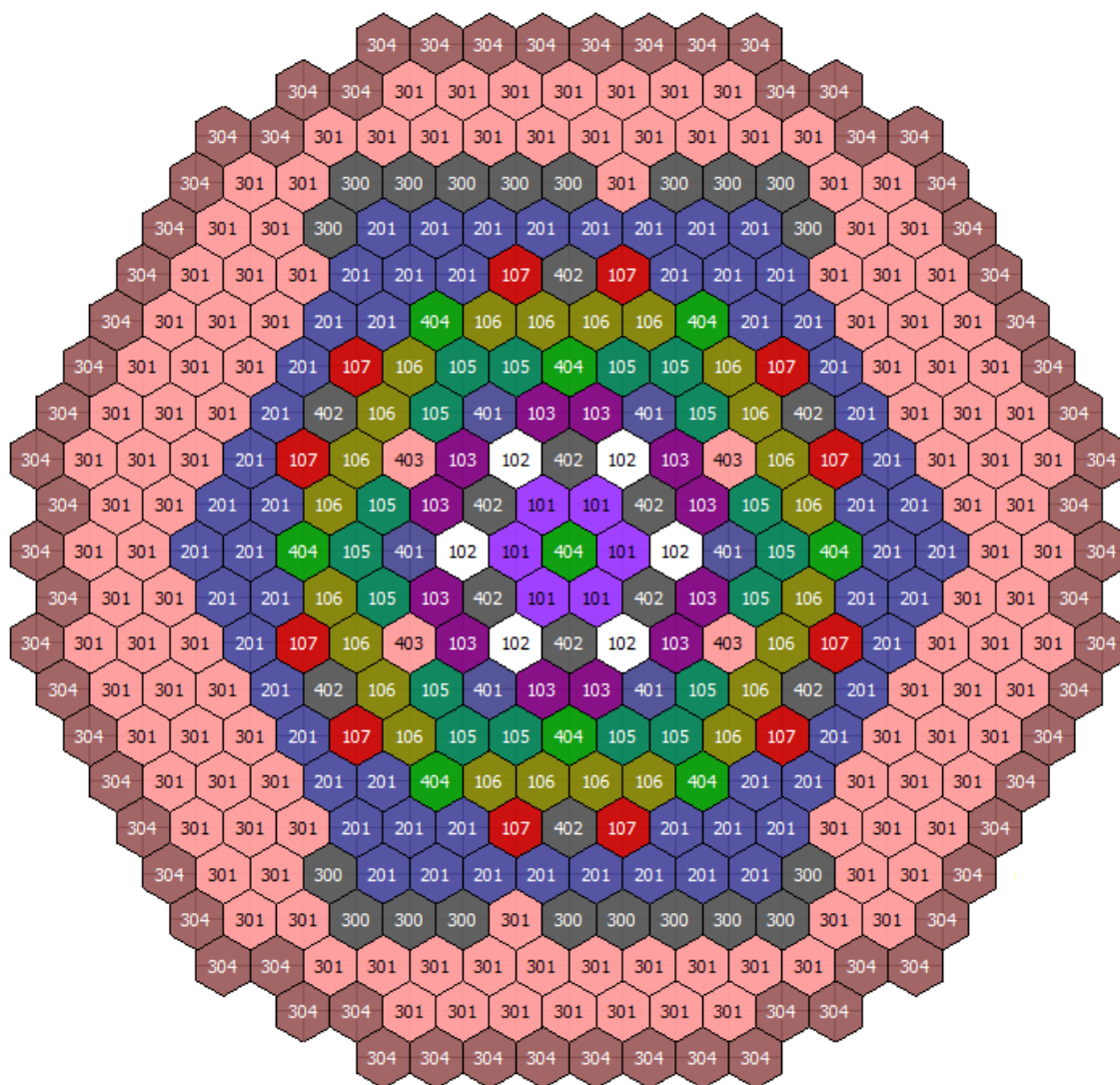


Рисунок 63 – Нодализация схема активной зоны в тепрогидравлическом расчете

При формировании согласованной расчетной модели активной зоны реактора каждая тепловыделяющая сборка разбивается на аксиальные ячейки высотой 10 см. Полученное разбиение позволяет рассчитать аксиальные распределения основных нейтронно-физических и теплогидравлических характеристик без учета локальных эффектов, возникающих внутри сборки.

По коду ЕВКЛИД/V1 проведен многовариантный расчет с варьированием параметров расчетной модели, при этом параметры варьирования выбраны согласно методике, разработанной в ИБРАЭ РАН [59] (таблица 14).

Таблица 14 – Перечень параметров, которые варьировались при выполнении расчётов

Параметр	Диапазон варьирования
Относительная частота вращения ГЦНА (отношение к номиналу)	0,95 – 1,05
Температура питательной воды на входе в ПГ, °С	335 – 345
Тепловая мощность а.з., МВт	665 – 735
Диаметр таблетки в твэлах ЦЗ, мм	8,4 – 8,5
Диаметр таблетки в твэлах ПЗ, мм	9,2 – 9,3
Теплопроводность топлива, Вт/(м·К)	±8%
Теплопроводность газового зазора, Вт/(м·К)	±3%

По результатам расчета по коду ЕВКЛИД/V1 определяется, что наибольшую температуру топлива имеют твэлы, расположенные в зоне под номером 101. В расчете с применением интегрального кода все нейтронно-физические и теплогидравлические характеристики усредняются по аксиальным ячейкам ТВС, таким образом, с учетом анализа неопределенности получено усредненное значение температуры твэла для наиболее энергонапряженной ТВС. При этом на практике твэлы указанной зоны могут иметь существенно различающиеся значения нейтронно-физических и теплогидравлических характеристик. Для того чтобы обеспечить консервативность оценки при использовании инженерных методов, могут использоваться корректирующие коэффициенты (коэффициенты запаса) для расхода теплоносителя или энерговыделения. Указанные корректирующие коэффициенты могут быть получены по результатам прецизионных связанных расчетов на базе Монте-Карло кодов.

3.3.2 Описание расчетной модели в связанных расчетах по кодам MCU-FR и OpenFOAM

В расчетах аварийных режимов определение температуры твэлов имеет особую важность ввиду возможного плавления материалов а.з., в этой связи расчет температуры наиболее энергонапряженных твэлов является актуальной задачей. Применение прецизионных связанных расчетов позволяет рассчитать распределение температуры твэлов внутри ТВС с учетом температурно-плотностных обратных связей.

В рамках уточняющего связанного расчета с применением кодов MCU-FR и OpenFOAM, моделируется ТВС с наибольшей средней температурой топлива, расположенная в теплогидравлической зоне под номером 101.

Расчетная модель формируется с помощью средств оболочки CCS с заданием параметров модели в едином входном файле. При этом в качестве суммарного энерговыделения, температуры и массового расхода теплоносителя на входе в ТВС, давления на выходе задаются средние значения данных величин, полученные в интегральном расчете.

Осуществляется потвэльный расчет модели ТВС, при этом все энерговыделения рассчитываются в виде распределений по аксиальным ячейкам высотой 10 см, температурно-плотностные параметры задаваемые в нейтронно-физическом расчете также усредняются по указанным аксиальным ячейкам.

3.3.3 Сравнение полученных результатов

В связанном расчете с использованием расчетного кода OpenFOAM получены распределения максимальной и минимальной температуры топлива по высоте для отдельных твэлов рассматриваемой ТВС. По интегральному коду ЕВКЛИД/V1 получено усредненное (среднее по всем твэлам) по ТВС аксиальное распределение температуры топлива. С применением многовариантных интегральных расчетов получен диапазон неопределенностей результатов

расчетов по коду ЕВКЛИД/V1. Полученные распределения сравниваются на рисунке 64.

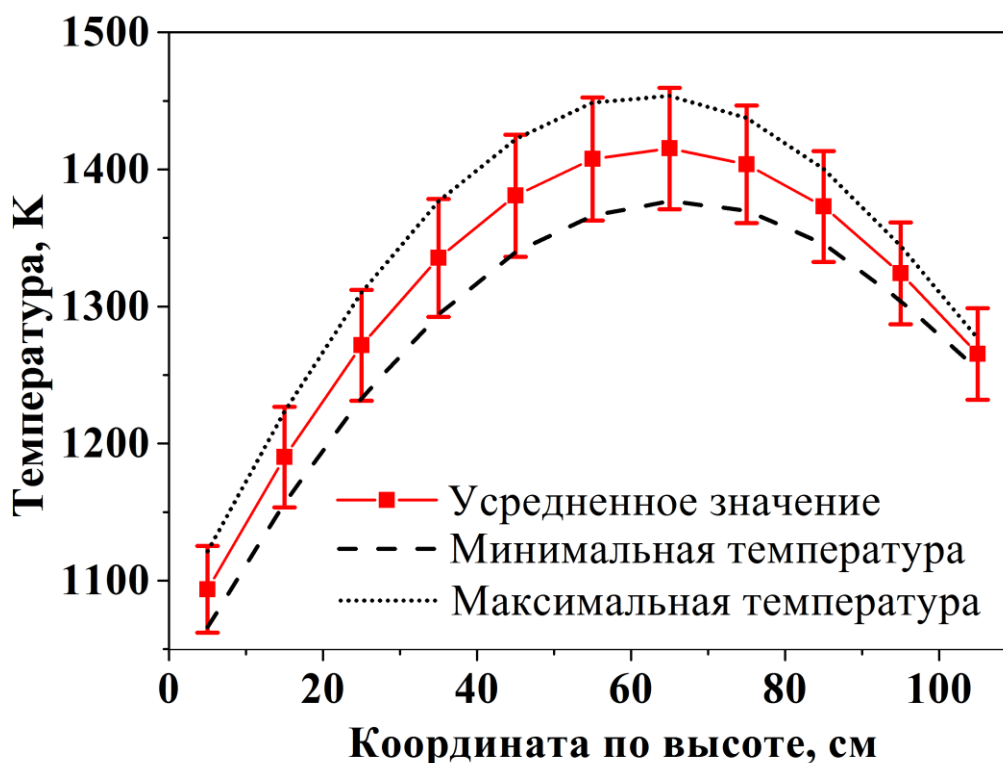


Рисунок 64 – Аксиальное распределение температуры топлива

Полученное различие обусловлено использованием в расчетах по коду ЕВКЛИД/V1 усредненного значения энерговыделения на кассету. Полученное в расчетах по кодам MCU-FR и OpenFOAM распределение энерговыделения представлено на рисунке 65. При этом в сборке присутствуют 9 направляющих трубок с управляющими стержнями, энерговыделение в которых равно 0 (на рисунке изображены незакрашенными). Максимальное значение энерговыделения получено для периферийных твэлов, что обусловлено граничными условиями отражения.

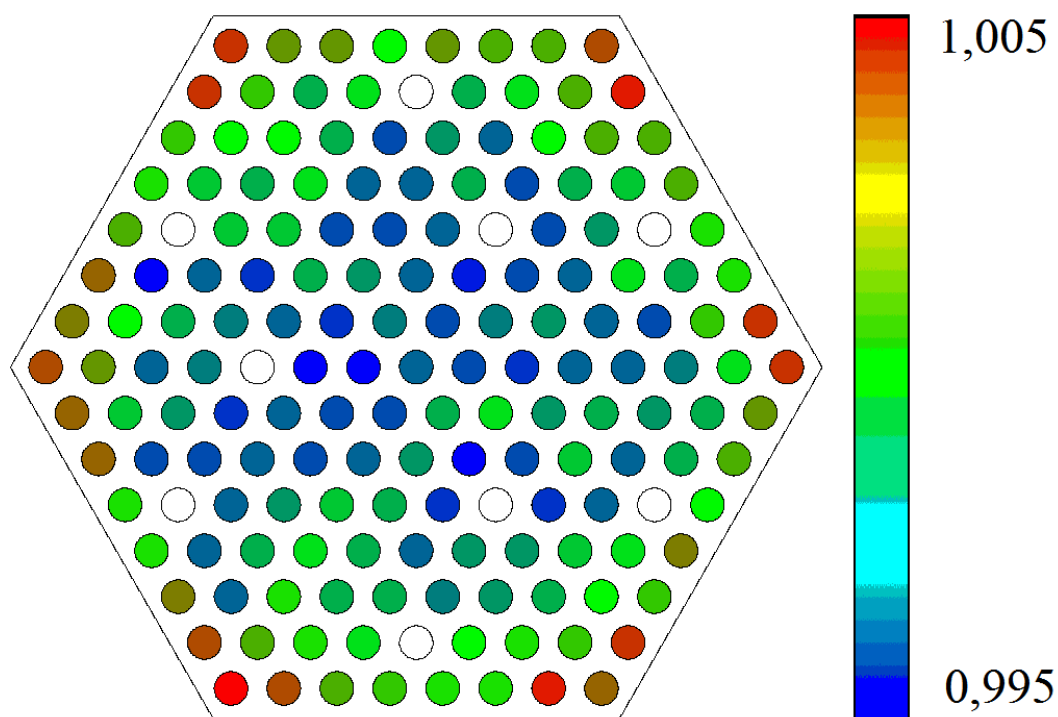


Рисунок 65 – Распределение энерговыделения в рассматриваемой ТВС

Таким образом, продемонстрировано возможное практическое применение разработанной технологии связанных расчетов для обоснования консервативности получаемых по инженерным методикам результатов или для расчета соответствующих корректирующих коэффициентов (коэффициентов запаса).

3.4 Выводы по главе 3

В главе 3 представлены результаты связанных расчетов систем с водяным и свинцовым теплоносителем, полученные с применением нейтронно-физических кодов семейства MCU, базирующихся на методах Монте-Карло. На базе систем с водяным теплоносителем проведена апробация и верификация программной оболочки в рамках разработанной методики связанных расчетов.

В рамках предварительного анализа исследовано влияние температурно-плотностных обратных связей на скорость реакции деления для модели ячейки твэла реактора типа ВВЭР в автономных нейтронно-физических расчетах по коду MCU-FREE. Показано значительно меньшее влияние обратных связей по

температуре на значения скорости реакции по сравнению с эффектом обратных связей по плотности. В дальнейших расчетах по коду MCU-FREE для воды задается ближайшее к рассчитанной по теплогидравлическому коду температуре значение, представленное в библиотеках ядерных данных.

В рамках отработки технологии проанализировано влияние параметров нейтронно-физической модели, включая параметры статистики, источника и зон регистрации, а также расчетных параметров, таких как параметры релаксации, представления теплогидравлических данных и др. на вычисляемые характеристики в связанных расчетах с применением кодов MCU-FREE и HYDRA-IBRAE/H₂O. Анализ особенностей поведения величин, вычисляемых в связанных расчетах, проведен с использованием модели ячейки твэла реактора ВВЭР, систем BWR и PWR 3x3 Pin Cluster.

Для модели ячейки твэла реактора ВВЭР и системы BWR 3x3 Pin Cluster проанализированы значения локальных характеристик и $K_{эф}$ в зависимости от номера итерации. Показано, что отклонения по итерациям вычисляемых характеристик, превосходят статистическую ошибку Монте-Карло расчетов, что подтверждает необходимость применения в связанных расчетах методик для уменьшения наблюдаемых колебаний.

Для ячейки твэла реактора ВВЭР проанализировано влияние коэффициента релаксации ($k_{рел}$) и точности представления плотности теплоносителя на $K_{эф}$. Наблюдаются колебания $K_{эф}$ при всех значениях $k_{рел}$, но при увеличении $k_{рел}$ они уменьшаются. Показан положительный эффект использования метода релаксаций на сходимость связанных расчетов для ячейки твэла реактора ВВЭР, при этом установлено, что наибольший эффект дает значение $k_{рел} \sim 0,4 - 0,5$. Использование коэффициента релаксации в связанных расчетах для ячейки твэла реактора ВВЭР позволяет уменьшить расчетное время практически в 4 раза за счет уменьшения суммарной статистики.

Для моделей BWR 3x3 Pin Cluster и PWR 3x3 Pin Cluster проанализировано влияние статистических параметров на вычисляемые нейтронно-физические

характеристики. Энергораспределение, полученное для системы BWR 3x3 Pin Cluster с помощью кодов MCU-FREE и HYDRA-IBRAE/H₂O, согласуется с энергораспределением, полученным по коду MCNP5/SUBCHANFLOW [5]. Наибольшее расхождение в области кипения теплоносителя объясняется особенностями используемых алгоритмов и теплогидравлических замыкающих соотношений.

Для модели PWR 3x3 Pin Cluster в расчетах с $NPS=500*100$, $5000*500$, $20000*1000$, $50000*1000$ показано влияние статистических параметров на $K_{эф}$ и распределение энерговыделения. Во всех расчетах наблюдаются колебания $K_{эф}$, которые уменьшаются с ростом статистики расчетов. Результаты анализа $K_{эф}$ показывают, что в дальнейших расчетах целесообразно использовать $NPS = 20000*1000$, ввиду незначительного уменьшения колебаний при дальнейшем росте NPS.

Размеры зон регистрации в Монте-Карло расчетах оказывают существенное влияние на результаты расчетов функционалов потоков. В рамках методических расчетов ячеек BWR 3x3 Pin Cluster и PWR 3x3 Pin Cluster проанализировано влияние высоты аксиальных ячеек на интегральные и локальные характеристики.

Расчеты модели BWR 3x3 Pin-cluster с укрупненными ячейками (20 ячеек в нейтронно-физических и теплогидравлических расчетах, вместо стандартных 60) приводят к заметному уменьшению колебаний энергораспределения. При кипении теплоносителя усреднение теплогидравлических параметров, вызванное объединением аксиальных ячеек в области кипения, приводит к изменению формы распределения – исчезает максимум и распределение становится убывающим. Также изменяется характер распределения плотности теплоносителя.

В расчетах модели PWR 3x3 Pin Cluster колебательный характер $K_{эф}$ наблюдается для всех размеров ячеек. При этом увеличение количества аксиальных ячеек приводит к уменьшению амплитуды колебаний и увеличению

усредненного $K_{эф}$, что обусловлено изменением характерной формы аксиального энергораспределения.

По результатам проведенного анализа было определено, что разбиение топливной части на 10 аксиальных ячеек является оптимальным в части точности получаемых результатов и затраченного времени расчета для рассматриваемых задач PWR 3x3 Pin Cluster и модели ячейки твэла ВВЭР. Для системы BWR 3x3 Pin Cluster необходимо использовать не менее 60 расчетных ячеек для корректного учета кипения теплоносителя.

Среди различных температурно-плотностных обратных связей в расчетах тепловых реакторов наибольшее влияние на значения нейтронно-физических характеристик оказывают параметры теплоносителя. Влияние температуры топлива и оболочки на интегральные и локальные характеристики проанализировано на базе двух вариантов расчетов модели PWR 3x3 Pin-cluster – с учетом рассчитываемых в коде HYDRA-IBRAE/H₂O значений температуры топлива и оболочки и при фиксированных на протяжении всего расчета значениях, заданных на старте. Для этих двух вариантов наблюдается значительное различие $K_{эф}$, что обусловлено в большей степени Доплер-эффектом при изменении температуры топлива. При этом колебательный характер $K_{эф}$ сохраняется в расчетах независимо от используемого температурного представления модели. Обратные связи по температуре топлива и оболочки имеют значительное влияние на основные нейтронно-физические и теплогидравлические характеристики в связанных расчетах и должны учитываться при построении согласованной расчетной модели в уточняющих расчетах.

Использование динамического источника нейтронов в практических расчетах ориентировано на ускорение сходимости Монте-Карло расчетов. Влияние динамического источника на $K_{эф}$ проанализировано для системы PWR 3x3 Pin-cluster. Изменение значений $K_{эф}$ от итерации к итерации наблюдается при использовании динамического и равномерного источников, при этом

использование динамического источника приводит к незначительному уменьшению амплитуды колебаний $K_{эф}$, что позволяет уменьшить расчетное время практически в 2 раза за счет уменьшения суммарной статистики.

Для прецизионных расчетов модели PWR 3x3 Pin Cluster применяется пакет OpenFOAM, реализующий методы вычислительной гидродинамики. Распределения температуры и плотности теплоносителя по кодам MCU/OpenFOAM и MCU/HYDRA-IBRAE согласуются с распределениями, полученными по кодам MCNP5/SUBCHANFLOW и MCNP6/CTF [5, 60].

Для модели ячейки из 3x3 твэлов реактора со свинцовым теплоносителем проанализированы особенности построения согласованной расчетной модели в условиях пространственной гетерогенности, вызванной распуханием топлива и оболочки. Для состояний с различными параметрами распухания определен критерий сходимости для завершения расчета на базе эффективного коэффициента размножения нейтронов. Используются модельные параметры распухания с распуханием центрального твэла, периферийного твэла, распуханием обоих твэлов и распуханием всех девяти твэлов. Проанализированы распределения скорости и температуры теплоносителя в условиях распухания твэлов и при его отсутствии.

Для модели реакторной установки со свинцовым теплоносителем по коду ЕВКЛИД/V1 проведен расчет стационарного состояния на номинальном уровне мощности. Для наиболее энергонапряженной ТВС проведен уточняющий связанный расчет с применением кодов MCU-FR и OpenFOAM для получения потвэльного распределения температуры топлива. Полученные таким образом значения максимальной температуры топлива превышают средние значения, полученные в рамках инженерного интегрального расчета на величину до 41 К (3,0%), однако, даже с учетом такого отклонения значения укладываются в доверительный интервал полученный по результатам расчета с учетом анализа неопределенностей (до 45 К).

Заключение

1. Разработана программная оболочка Coupled Calculation Shell (CCS, свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2021610112 от 12 января 2021 г.), содержащая инструментальные средства для построения согласованных расчетных моделей и проведения связанных стационарных расчетов по нейтронно-физическим кодам семейства MCU (MCU-FREE и MCU-FR) и CFD коду OpenFOAM и канальным теплогидравлическим кодам семейства HYDRA-IBRAE (HYDRA-IBRAE/H2O и HYDRA-IBRAE/LM).
2. Выполнена верификация разработанной программной оболочки на базе ячеечных расчетов макроячеек реактора с водяным теплоносителем с применением нейтронно-физического кода MCU-FREE и теплогидравлических кодов HYDRA-IBRAE/H2O и OpenFOAM. Подтверждено удовлетворительное согласие интегральных характеристик, полученных с применением одномерного кода HYDRA-IBRAE/H2O и CFD-моделирования на базе пакета OpenFOAM, с международными данными, представленными в открытых источниках.
3. Получены результаты расчетов макроячейки реактора со свинцовым теплоносителем с возмущением параметров, вызванных распуханием оболочки и топлива тепловыделяющих элементов. Показано влияние параметров распухания на рассчитываемые теплогидравлические характеристики. Нейтронно-физические характеристики при этом изменяются незначительно.
4. С использованием кода ЕВКЛИД/V1 проведен расчет стационарного состояния на номинальном уровне мощности для модели реакторной установки со свинцовым теплоносителем. В связанном расчете с применением кодов MCU-FR и OpenFOAM получены уточненные значения максимальной температуры топлива, которые попали в диапазон неопределенностей результатов расчетов по коду ЕВКЛИД/V1.

Список сокращений

а.з.	-	активная зона
ВВЭР	–	Водо-Водяной Энергетический Реактор
РУ	–	реакторная установка
ТВС	–	тепловыделяющая сборка
ТВЭЛ	–	тепловыделяющий элемент
BWR	–	Кипящий водо-водяной реактор (англ. boiling water reactor)
CFD	–	вычислительная гидродинамика (от англ. computational fluid dynamics)
LWR	–	Легководный реактор (англ. light-water reactor)
PWR	–	Реактор с водой под давлением (англ. pressurized water reactors)

Список литературы

1. Metropolis N., Ulam S. The monte carlo method //Journal of the American statistical association, 1949. – Vol. 44. – №. 247. – Pp. 335-341.
2. MCNP X. Monte Carlo Team, MCNP–A General Purpose Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5. – LA-UR-03 1987, Los Alamos National Laboratory, April 2003, The MCNP5 code can be obtained from the Radiation Safety Information Computational Center (RSICC), PO Box 2008. Oak Ridge, TN, 37831-6362, 5.
3. Jeltsov M., Villanueva W., Kudinov P. Steam generator leakage in lead cooled fast reactors: Modeling of void transport to the core //Nuclear Engineering and Design, 2018. – Vol. 328. – Pp. 255-265.
4. Аввакумов А.В., Березнев В.П., Васекин В.Н., Вепрев Д.П., Грушин Н.А., Колобаева П.В., Колташев Д.А., Селезнёв Е.Ф., Семёнова М.М., Стаханова А.А., Мосунова Н.А., Стрижов В.Ф., Ханбиков И.Н. Обоснование применимости интегрального кода нового поколения ЕВКЛИД/V1 для расчета РУ БРЕСТ-ОД-300 / Инновационные проекты и технологии ядерной энергетики. IV Международная научно-техническая конференция НИКИЭТ 2016. Сборник докладов. Москва, 2016. – Т. 2. – С. 8–19.
5. Ivanov A., Sanchez V., Stieglitz R., Ivanov K. High fidelity simulation of conventional and innovative LWR with the coupled Monte-Carlo thermal-hydraulic system MCNP-SUBCHANFLOW //Nuclear engineering and design, 2013. – Vol. 262. – С. 264-275.
6. Sanchez V., Al-Hamry A. Development of a Coupling Scheme Between MCNP and COBRATF for the Prediction of the Pin Power of a PWR Fuel Assembly // Proc. of International Conference on Mathematics, Computational Methods & Reactor Physics (M&C 2009). – 2009.
7. Bennett A., Avramova M., Ivanov K. Coupled MCNP6/CTF code: Development, testing, and application //Annals of Nuclear Energy, 2016. – Vol. 96. – Pp. 1-11.

8. Capellan N., Wilson J., David S., Meplan O. 3D coupling of Monte Carlo neutronics and thermal-hydraulics calculations as a simulation tool for innovative reactor concepts //Proc. Int. Conf. GLOBAL. – 2009.
9. Hanna B. R., Gill D. F., Griesheimer D. P. Spatial homogenization of thermal feedback regions in Monte Carlo reactor calculations // Proc. of PHYSOR 2012. – 2012
10. D. F. Gill, D. L. Aumiller, and D. P. Griesheimer, Monte Carlo and thermal-hydraulic coupling via PVMEXEC // Proceed. of PHYSOR 2014. – 2014.
11. Mylonakis A.G., Varvayanni M., Catsaros N. A Newton-based Jacobian-free approach for neutronic-Monte Carlo/thermal-hydraulic static coupled analysis //Annals of Nuclear Energy, 2017. – Vol. 110. – Pp. 709-725.
12. Hoogenboom J.E., Ivanov A., Sanchez V., Diop C. A flexible coupling scheme for Monte Carlo and thermal-hydraulics codes // Proc. of International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering (M&C 2011). – 2011. – P. 22.
13. Wu X., Kozlowski T. Development of a New Convergence Criteria for Monte Carlo Simulation with Thermal hydraulics Feedback //Proc. of PHYSOR 2014. – 2014.
14. Daeubler M., Jimenez J., Sanches V. Development of a high-fidelity Monte Carlo thermal-hydraulics coupled code system Serpent/SUBCHANFLOW—first results // Proc. of PHYSOR 2014. – 2014.
15. Bahdanovich R.B., Bogdanova E.V., Gamtsemlidze I.D., Nikonov S.P., Tikhomirov G.V. Test case for VVER-1000 complex modeling using MCU and ATHLET //Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2017. – Vol. 781. – №. 1
16. Waata C.L., Coupled Neutronics/Thermal-hydraulics Analysis of a High-Performance Light-Water Reactor Fuel Assembly, Ph.D. thesis. – 2006.
17. Reiss T., Coupled Neutronics – Thermal hydraulics Analysis of SCWRs, Ph.D. thesis. – 2011.

18. Cardoni, Rizwan-uddin J. N. Nuclear reactor multi-physics simulations with coupled MCNP5 and STAR-CCM+ // Proc. of International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering (M&C2011). – 2011.
19. Seker V., Thomas J. W., Downar T. J. Reactor simulation with coupled Monte Carlo and computational fluid dynamics // Proceedings of the Joint International Topical Meeting on Mathematics and Computations and Supercomputing in Nuclear Applications. – 2007.
20. Henry R., Tiselj I., Snoj L. CFD/Monte-Carlo neutron transport coupling scheme, application to TRIGA reactor // Annals of Nuclear Energy, 2017. – Vol. 110. – Pp. 36-47.
21. Li, K. Wang, The first-principle coupled calculations using TMCC and CFX for the pin-wise simulation of LWR // Proc. of PHYSOR 2012. – 2012
22. Tuominen R., Valtavirta V., Peltola J., Leppanen J. Coupling Serpent and OpenFOAM for neutronics – CFD multi-physics calculations // PHYSOR 2016, Sun Valley, ID, USA. – 2016.
23. Tuominen R., Valtavirta V., Leppanen J. Application of the Serpent–OpenFOAM Coupled Code System to the SEALER Reactor Core. // Proc. of PHYSOR 2018, Cancun, Mexico. – 2018.
24. Майоров Л.В. Оценки смещения результатов при расчете реакторов и хранилищ ядерного топлива методом Монте-Карло // Атомная энергия, 2005. – Т. 99. – №. 4. – С. 243-256.
25. Олейник Д.С. Расчет слабосвязанных систем методом Монте-Карло // Атомная энергия, 2005. – Т. 99. – №. 4. – С. 256-264.
26. Brown F.B. On the use of Shannon entropy of the fission distribution for assessing convergence of Monte Carlo criticality calculations // ANS topical meeting on reactor physics (PHYSOR 2006). Canadian Nuclear Society, Canada. – 2006.

27. Vazquez M., Tsige-Tamirat H., Ammirabile L., Matrin-Fuertes F. Coupled neutronics thermal-hydraulics analysis using Monte Carlo and sub-channel codes // Nuclear Engineering and Design, 2012. – Vol. 250. – Pp. 403-411.
28. Kotlyar D., Shwageraus E. Numerically stable Monte Carlo-burnup-thermal hydraulic coupling schemes // Annals of Nuclear Energy, 2014. – Vol. 63. – Pp. 371-381.
29. Espel F.P., Avramova M.N., Ivanov K.N., Misu S. New developments of the MCNP/CTF/NEM/NJOY code system—Monte Carlo based coupled code for high accuracy modeling // Annals of Nuclear Energy, 2013. – Vol. 51. – Pp. 18-26.
30. Колташев Д. А., Митенкова Е. Ф. Особенности связанных расчетов на базе кодов МСи и HYDRA-IBRAE для систем с сильной пространственной и плотностной гетерогенностью // Известия Российской академии наук. Энергетика, 2017. – №. 1. – С. 149-163.
31. 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. Серия: Физика ядерных реакторов, 2011. – Вып. 4. – С. 5–23.
32. OpenFOAM® – Official home of The Open Source Computational Fluid Dynamics (CFD) Toolbox [Электронный ресурс]. URL: <http://www.openfoam.com> (дата обращения: 25.01.2020).
33. Алипченков В.М., Беликов В.В., Давыдов А.В., Емельянов Д.А., Мосунова Н.А. Рекомендации по выбору замыкающих соотношений для расчета потерь давления на трение в контурах АЭС с ВВЭР // Теплоэнергетика, 2013. – №5. – С. 28–34.
34. Гуревич М.И., Калугин М.А., Олейник Д.С., Шкаровский Д.А. Характерные особенности MCU-FR // ВАНТ. Серия: Физика ядерных реакторов, 2016. – №. 5. – С. 17-21.
35. MacFarlane R. E. et al. The NJOY Nuclear data processing system—LA-UR-12-27079. – 2012.

- 36.Забродская С.В., Игнатюк А.В., Кощев В.Н., Николаев М.Н. и др. РОСФОНД-российская национальная библиотека оцененных нейтронных данных //Вопросы атомной науки и техники. Серия: Ядерные константы, 2007. – №. 1-2. – С. 3-21.
- 37.Vasquez M., Martin-Fuertes F. 3D neutronic/thermal-hydraulic coupled analysis of MYRRHA // Proc. of PHYSOR 2012. – 2012
- 38.Ivanov A. et al. Large-scale Monte Carlo neutron transport calculations with thermal hydraulic feedback //Annals of Nuclear Energy, 2015. – Vol. 84. – Pp. 204-219.
- 39.Колташев Д. А. Проведение связанных расчетов тестовой задачи PWR 3x3 Pin Cluster с помощью кодов MCU-FREE и HYDRA-IBRAE //Проблемы современной физики-2016. – 2016. – С. 98-100.
- 40.Valtavirta V., Leppanen J., Viitanen T. Coupled neutronics–fuel behavior calculations in steady state using the Serpent 2 Monte Carlo code //Annals of Nuclear Energy, 2017. – Vol. 100. – Pp. 50-64.
- 41.Tuominen R. Coupling Serpent and OpenFOAM for neutronics. Master of Science thesis. Aalto University. – 2015. – P. 71.
- 42.Issa R.I. Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting //Journal of computational physics, 1986. – Vol. 62. – №. 1. – Pp. 40-65.
- 43.Patankar, S.V., Spalding D.B. A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows//Int. J. of Heat and Mass Transfer, 1972. – Vol. 15. – Iss. 10. – Pp. 1787-1806.
- 44.NET – Powerful Open Source Cross Platform Development - Microsoft [Электронный ресурс] URL: <https://www.microsoft.com/net> (Дата обращения: 28.07.2017)
- 45.Mono Project [Электронный ресурс] URL: <http://www.mono-project.com> (Дата обращения: 28.07.2017)
- 46.Ivanov A., Imke U., Sanchez V. Development of a coupling scheme between MCNP5 and SUBCHANFLOW for the pin- and fuel assembly-wise simulation of LWR and innovative reactors// Proc. of International Conference on Mathematics

and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering (M&C 2011).– 2011.

47. Митенкова Е.Ф., Колташев Д.А., Кизуб П.А. Распределение скорости реакции деления в слабосвязанной системе для тестовой модели «шахматная доска» //Атомная энергия, 2014. – Т. 116. – №. 6. – С. 345-349.
48. Кизуб П.А., Митенкова Е.Ф. Особенности распределения источника деления слабосвязанной системы «твэл» в монте-карло расчетах //Вопросы атомной науки и техники. Серия: Ядерно-реакторные константы, 2017. – №. 1. – С. 56-65.
49. Launder B. E., Spalding D. B. The numerical computation of turbulent flows //Numerical prediction of flow, heat transfer, turbulence and combustion. – Pergamon, 1983. – С. 96-116.
50. Кизуб П.А., Колташев Д.А., Митенкова Е.Ф. Анализ нейтронно-физических характеристик в ячеечных расчетах реактора ВВЭР с использованием кодов MCNP5 и MCU-FREE: Препринт № IBRAE-2013-04. 23 С.
51. Dufek J., Hoogenboom J. E. Description of a stable scheme for steady-state coupled Monte Carlo–thermal–hydraulic calculations //Annals of Nuclear Energy, 2014. – Vol. 68. – Pp. 1-3.
52. Salino V., Hebert A. On steady-state multiphysics stability and related in-core fuel management capabilities in DONJON5 //PHYSOR 2016, Sun Valley, ID, USA. – 2016.
53. Chadwick M. B. et al. ENDF/B-VII. 1 nuclear data for science and technology: cross sections, covariances, fission product yields and decay data //Nuclear data sheets, 2011. – Vol. 112. – №. 12. – Pp. 2887-2996.
54. Колташев Д.А., Митенкова Е.Ф. Разработка согласованной модели в прецизионных расчетах нейтроники—теплогидравлика с использованием CFD-кодов //Атомная энергия, 2018. – Т. 125. – №. 2. – С. 125-127.
55. Мантуров Г.Н., Николаев М.Н., Цибуля А.М. Программа подготовки констант Consyst. Описание применения //Препринт ФЭИ-2828. – 2000.

56. Колташев Д.А. Применение кода MCU-FR для кросс-верификации интегрального кода ЕВКЛИД в расчетах реактора БРЕСТ-ОД-300 // Инновации в атомной энергетике: сб. докладов конференции молодых специалистов. 25–26 ноября 2015 г., Москва – М.: Изд-во АО «НИКИЭТ» . – 2015. – С. 225-234.
57. Колташев Д.А. Применение кода MCU-FR для кросс-верификации интегрального кода ЕВКЛИД/V1 в расчетах стационарных состояний реактора БРЕСТ-ОД-300 на различных уровнях мощности // Инновации в атомной энергетике: сб. докладов конференции молодых специалистов. 23–24 мая 2017 г., Москва – М.: Изд-во АО «НИКИЭТ» . – 2017. – С. 379-388.
58. Колташев Д.А. Расширенная модель нейтронно-физического модуля кода ЕВКЛИД/V1 для расчета активной зоны РУ БРЕСТ-ОД-300 при разрыве трубок парогенератора // В сб.: XX научная школа молодых ученых ИБРАЭ РАН. – 2019. – С. 103—106.
59. Моисеенко Е. В., Мосунова Н. А. Методика оценки неопределённостей результатов расчёта для задач обоснования безопасности объектов использования атомной энергии // Вопросы радиационной безопасности, 2018. – №. 2. – С. 24-34.
60. Bennet A. Development and testing of a coupled MCNP6/CTF code. Master of Science thesis. The Pennsylvania State University. – 2015. – 61 С.

Основные публикации по теме диссертации

- 1) Митенкова Е.Ф., Колташев Д.А., Кизуб П.А. Распределение скорости реакции деления в слабосвязанной системе для тестовой модели «шахматная доска». – Атомная энергия, том 116, выпуск 6, Москва, 2014, с. 345 – 349.
- 2) Колташев Д.А., Митенкова Е.Ф. Особенности связанных расчетов на базе кодов MCU и HYDRA-IBRAE для систем с сильной пространственной и плотностной гетерогенностью. – Известия РАН. Энергетика, вып. 1, Москва, январь-февраль 2017, с. 149 – 163.
- 3) Колташев Д.А., Митенкова Е.Ф. Разработка согласованной модели в прецизионных расчетах «нейтроника–теплогидравлика» с использованием CFD кодов. – Атомная энергия, том 125, вып. 2, Москва, 2018, с. 125 – 127.
- 4) Колташев Д.А. Моделирование активной зоны реактора со свинцовым теплоносителем при попадании водяного пара с помощью кода ЕВКЛИД/V1. – Атомная энергия, том 128, вып. 2, Москва, 2020, с. 114 – 116.
- 5) Кизуб П.А., Колташев Д.А., Митенкова Е.Ф. Анализ нейтронно-физических характеристик в ячеечных расчетах реактора ВВЭР с использованием кодов MCNP5 и MCU-FREE: Препринт № IBRAE-2013-04. 23 с.
- 6) Колташев Д.А. Отработка технологии связанных расчетов с применением кода MCU, базирующегося на методах Монте-Карло. Сборник трудов XIV научной школы молодых ученых ИБРАЭ РАН, проходившей 25 – 26 апреля 2013 г. – (Препринт / Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН, апрель 2013, № IBRAE-2013-03).-М. ИБРАЭ РАН, 2013. с. 112 – 115.
- 7) Колташев Д.А. Особенности расчетов Кэф и распределения скорости деления в слабосвязанных системах методом Монте-Карло. Сборник трудов XV научной школы молодых ученых ИБРАЭ РАН, проходившей 24 – 25

апреля 2014 г. – (Препринт / Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН, апрель 2014, № IBRAE-2014-02).-М. ИБРАЭ РАН, 2014. с. 116 – 119.

8) Колташев Д.А. Особенности связанных расчетов с использованием нейтронно-физического кода, базирующегося на методах Монте-Карло. Сборник трудов XVI научной школы молодых ученых ИБРАЭ РАН, проходившей 23 – 24 апреля 2015 г. – (Препринт / Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН, апрель 2015, № IBRAE-2015-01).-М. ИБРАЭ РАН, 2015. с. 100 – 103.

9) Колташев Д.А. Проведение связанных расчетов тестовой задачи BWR 3x3 Pin Cluster с применением нейтронно-физического кода, базирующегося на методах Монте-Карло. Сборник трудов XVII научной школы молодых ученых ИБРАЭ РАН, проходившей 21 – 22 апреля 2016 г. / под общ. ред чл.-кор. РАН Л.А.Большова; Ин-тут проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук. -М.: ИБРАЭ РАН, 2016. с. 114 – 117.

10) Колташев Д.А. Проведение связанных расчетов тестовой задачи PWR 3x3 Pin Cluster с помощью кодов MCU-FREE и HYDRA-IBRAE. Труды 59-й научной конференции МФТИ. Проблемы современной физики / под общей ред. проф. А. Г. Леонова; сост. Е. Ю. Чиркина.– М. : МФТИ, 2016. с. 98 – 100.

11) Колташев Д.А. Связные расчеты тестовой задачи PWR 3x3 Pin Cluster по кодам MCU и OpenFOAM. Сборник трудов XVIII научной школы молодых ученых ИБРАЭ РАН, проходившей 16 – 17 ноября 2017 г. / под общ. ред чл.-кор. РАН Л.А.Большова; Ин-тут проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук. -М.: ИБРАЭ РАН, 2017. с. 90 – 93.

12) Колташев Д.А., Митенкова Е.Ф. Обеспечение надежности связанных расчетов тепловых реакторных систем с использованием кодов MCU и HYDRA-IBRAE. Сборник тезисов докладов 13-й Международной научно-практической конференции по атомной энергетике «Безопасность,

эффективность, ресурс». – Севастополь, Оргкомитет МНПК АЭ-2017. – 132 с.: илл. с. 90 – 92.

13) Koltashev D. A., Stakhanova A. A. Neutronic calculation of fast reactors by the EUCLID/V1 integrated code //Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2017. – Т. 781. – №. 1. – С. 012003.

14) Колташев Д.А., Митенкова Е.Ф. Обеспечение надежности связных расчетов тепловых реакторных систем с использованием кодов MCU и HYDRA-IBRAE. – Энергетические установки и технологии, том 4, номер 1, Севастополь, 2018, с. 30 – 35.

15) Колташев Д.А. Расширенная модель нейтронно-физического модуля кода ЕВКЛИД/V1 для расчета активной зоны РУ БРЕСТ-ОД-300 при разрыве трубок парогенератора. Сборник трудов XX научной школы молодых ученых ИБРАЭ РАН, проходившей 12-13 сентября 2019 г. – (Препринт / Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН, сентябрь 2019, № IBRAE-2019-02). – М. ИБРАЭ РАН, 2019. С. 103-106.