

10. Ito Y., Shih A.M., Soni B. K. Reliable Isotropic Tetrahedral Mesh Generation based on an Advancing front method // Proceedings of the 13<sup>th</sup> International meshing roundtable, Williamsburg, VA., 2004. P. 95-105.
11. Shimada K., Yamakawa A., Itoh T. Anisotropic triangular meshing of parametric surfaces via close packing of ellipsoidal bubbles // 6<sup>th</sup> International Meshing roundtable, 1997. P. 375–390.
12. Li X. Y., Teng S. H., Ungor A. Biting spheres in 3D // 8<sup>th</sup> International Meshing Roundtable.
13. Miller G. L., Talmor D., Teng S. H., Walkington N. A delaunay based numerical method for three dimensions: generation, formulation and partition // Proc. 27<sup>th</sup> Annu ACM Sympos.Theor. Comput, 1995. P. 683–692
14. Сидоров М. Л. Модификация алгоритма Боуэра–Уотсона генерации топологически двумерных неструктурированных сеток в областях произвольной формы // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2011. Вып. 3.
15. Артемьев А. Ю., Бартенев Ю. Г., Басалов В. Г. и др. Библиотека решателей разреженных линейных систем // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2004. Вып. 7. С. 80–95.

## **ПРОГРАММА «ТАНДЕМ» И ПРОТОТИП ГРАФИЧЕСКОГО ИНТЕРФЕЙСА ДЛЯ ОБЕСПЕЧЕНИЯ ПРОВЕДЕНИЯ СВЯЗАННЫХ РАСЧЕТОВ АКТИВНЫХ ЗОН РЕАКТОРОВ**

*И. Ю. Силантьева, Л. М. Зуева, Е. А. Кашаева, Г. Н. Малышкин, Д. Г. Модестов,  
Д. В. Могиленских, С. Ю. Мокшин, М. В. Никульшин, В. Г. Орлов, Е. Ю. Язова*

Российский федеральный ядерный центр –  
ВНИИ технической физики им. Е. И. Забабахина, г. Снежинск

### **Введение**

Полномасштабный физический расчет кампании реактора включает в себя моделирование ряда физических процессов и в первую очередь тех, которые происходят в активной зоне. Соответственно, сам расчет подразделяется на решение набора задач, направленных на получение характеристик этих процессов. При этом временная зависимость указанных характеристик определяется изменением ядерного состава элементов активной зоны. Кинетика этого процесса связана с конфигурацией нейтронного поля. Последнее, в свою очередь, зависит как от ядерного состава, так и от распределения температуры в объеме активной зоны. Таким образом, расчет кампании требует проведения как минимум трех видов расчетов:

- расчеты изменения со временем нуклидного состава топлива в реакторе за счет его выгорания;
- расчеты нейтронно-физических характеристик активной зоны, включающие оценку скоростей наработок различных ядер и пространственного распределения энерговыделения в рамках решения условно-критической задачи для уравнения переноса;
- теплогидравлический расчет активной зоны реактора, заключающийся в определении пространственного распределения температуры топлива и конструкционных элементов, температуры и плотности теплоносителя, скорости его потока с учетом возможной деформации топлива и оболочек ТВЭЛов под действием термоупругих напряжений.

Основной функцией программного комплекса (ПК) ТАНДЕМ является обеспечение связи между программами, осуществляющими моделирование различных физических процессов. ПК ТАНДЕМ состоит из ядра и набора внешних программ. В настоящее время в их число входят программы, представленные ниже.

Для прецизионных расчетов нейтронно-физических параметров активной зоны реактора используются программы метода Монте-Карло. В РФЯЦ-ВНИИТФ для решения задач переноса ионизирующего излучения методом Монте-Карло создана и постоянно совершенствуется программа ПРИЗМА [3, 4]. Для расчетов изменения со временем нуклидного состава топлива в реакторе за счет его выгорания используется модуль РИСК [5].

При расчетах нейтронно-физических параметров активной зоны реактора программа ПРИЗМА использует пространственное распределение температуры и данные о плотности теплоносителя, полученные при теплогидравлическом расчете. В качестве тепловой нагрузки в расчетах теплогидравлики задается изменяющееся по высоте активной зоны и радиусу топливного элемента энерговыделение для каждого топливного элемента тепловыделяющей сборки. Радиационное энерговыделение рассчитывается по программе ПРИЗМА.

В настоящее время существует достаточно большое число отличающихся по своим возможностям программ для расчета теплогидравлических характеристик активной зоны реактора. В рамках проводимых научно-исследовательских работ рассматривались такие CFD программы, как:

- программа CONV 3D, разработанная в ИБРАЭ РАН [6];
- открытая интегрируемая платформа для численного моделирования задач механики сплошных сред OpenFOAM [7].

Все три вида расчетов являются взаимосвязанными, то есть имеется обратная связь между изменениями нейтронно-физических, теплогидравлических характеристик активной зоны реактора и нуклидного состава топлива. Так, пространственное распределение плотности потока нейтронов и связанное с ним распределение энерговыделения зависят от нуклидного состава топлива, распределения температуры и плотности теплоносителя. В свою очередь, распределение температуры в активной зоне определяется распределением энерговыделения в активной зоне и скоростью движения теплоносителя. Причем даже при постоянно поддерживаемом уровне мощности реактора эти распределения изменяются в течение кампании реактора за счет неравномерного по объему активной зоны выгорания делящихся нуклидов в топливе и перемещения органов регулирования реактивностью реактора.

### Технология проведения связанных расчетов

В связи с вышеизложенным возникла необходимость разработки технологии, обеспечивающей проведение связанных расчетов нейтронно-физических и теплогидравлических характеристик активных зон реакторов различных типов с учетом обратных связей по температуре и плотности материалов активной зоны (рис. 1).

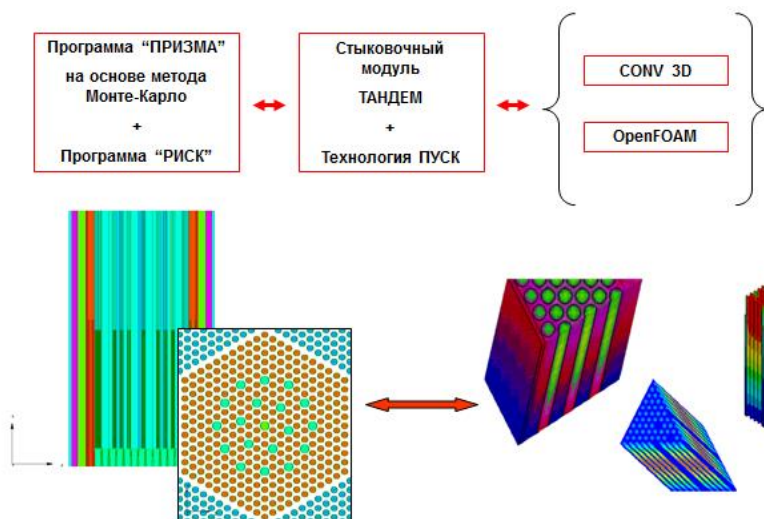


Рис. 1. Технология проведения связанных расчетов

Для обмена данными между программами CFD и ПРИЗМА создан ПК ТАНДЕМ. В отдельных режимах он выполняет обработку данных сразу же для всех ТВС, а в других - только для конкретной ТВС. Это позволяет осуществлять обмен данными между распределенными расчетами теплогидравлики и параллельным расчетом нейтронно-физических характеристик.

Для проведения связанных расчетов под управлением ОС Linux разработан скрипт запуска комплекса расчетов, который обеспечивает совместную работу программ ПРИЗМА, CFD и ПК ТАНДЕМ. Скрипт ПУСК обеспечивает многоэтапный процесс, позволяющий проводить запуск программ, участвующих в связанном расчете, на вычислительных серверах как в параллельном, так и в распределенном режимах. Описание запуска для каждой из программ делается независимо.

Входная информация, необходимая для работы ПК ТАНДЕМ, задается в управляющем файле в формате XML. Она содержит информацию о константах, используемых в различных формулах, преобразовании системы координат, расстановке ТВС согласно картограмме, разбиении на слои. Также там присутствуют разделы, содержащие данные о CFD программе, участвующей в расчете, и управляющую информацию для расчета и вывода статистических и рассчитанных данных.

Связанные расчеты являются итерационным процессом. После каждой итерации ПК ТАНДЕМ по полученным данным о температурах в узлах сетки на текущей и предыдущей итерации принимает решение об окончании расчета. Определяется разность температур в соответствующих узлах сетки, и если она меньше значения, заданного во входной информации ПК ТАНДЕМ, то расчет считается завершенным.

Из представленной схемы на рис. 2 видно, как при расчете используются заказанные для него вычислительные ресурсы. Программа ПРИЗМА использует все ресурсы, распараллеливая расчет с использованием tri-процессов. ПК ТАНДЕМ и CFD программа запускаются на этих же ресурсах в распределенном режиме. При этом CFD программа может сама считаться в параллельном режиме.

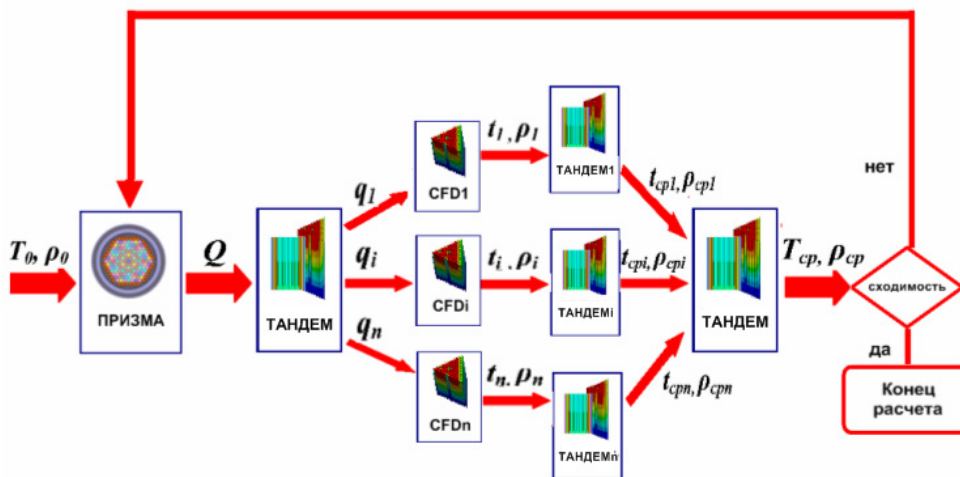


Рис. 2. Схема технологии проведения связанных расчетов

Передача данных для связанных расчетов проводится поэтапно. Программа ПРИЗМА рассчитывает энерговыделение в каждом слое активной зоны реактора. Это распределение является ненормированным. ПК ТАНДЕМ устанавливает значение энерговыделения для всех ячеек тепловой модели, производя нормировку на заданную тепловую мощность реактора. А затем записывает входные файлы с данными об энерговыделении для каждой ТВС в соответствующие каталоги для последующего проведения теплогидравлического расчета.

По рассчитанному энерговыделению в топливе проводится расчет температурного поля каждой отдельной ТВС. ПК ТАНДЕМ рассчитывает среднюю температуру и плотность для каждой ТВС в каждом слое. Затем данные объединяются по всем ТВС, записываются в двоичные файлы определенной структуры и передаются программам ПРИЗМА и РИСК.

### Согласование данных при проведении связанных расчетов

Для проведения корректных связанных расчетов необходимо, чтобы в программах было согласовано описание геометрических объектов в одной системе координат. ПК ТАНДЕМ обеспечивает согласование единиц измерения физических величин, используемых в разных программах, и однозначное соответствие рассчитываемых значений параметров системы (температуры, плотности, удельной мощности энерговыделения) в узлах сетки программы теплогидравлического расчета значениям параметров в областях разбиения системы, которым соответствуют данные узлы, в программе метода Монте-Карло.

ПК ТАНДЕМ учитывает несоответствие задания начальных данных для программы ПРИЗМА и программ расчета теплогидравлики. Так, в программе ПРИЗМА описывается трехмерная полномасштабная модель реакторной установки, включающая активную зону, опоры ТВС, нижнюю опорную плиту, пространство над активной зоной. Модель описывается комбинаторным теоретико-множественным методом в формате ПРИЗМА (рис. 3, слева). При проведении теплогидравлических расчетов рассматривается только активная зона реактора. В ней могут находиться ТВС различных конфигураций. Соответственно, строится несколько тепловых моделей ТВС. На основе геометрии моделей строятся целевые сетки из конечных элементов (рис. 3, справа).

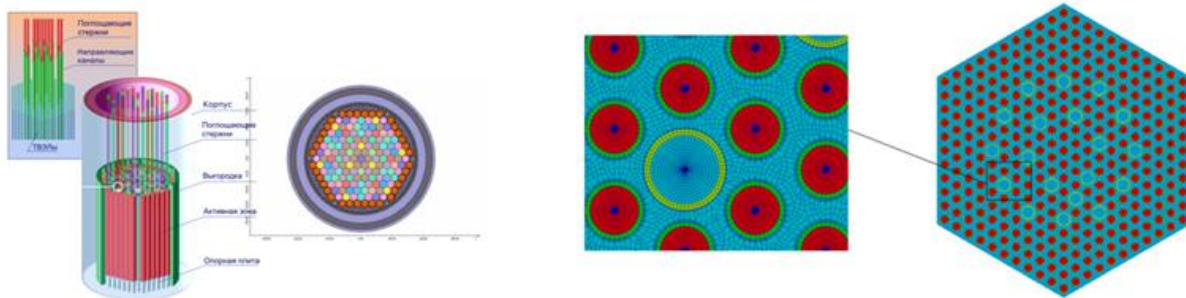


Рис. 3. 3D комбинаторная модель активной зоны ВВЭР (слева) и расчетная сетка одной ТВС ВВЭР (справа)

Следующей особенностью проведения связанных расчетов является то, что CFD программы рассчитывают температуру и плотность в узлах сетки, а в комплексе ПРИЗМА расчеты ведутся методом Монте-Карло и расчетные сетки не используются. Поэтому было принято решение разбить всю область реактора по высоте на интервалы (слои). ПК ТАНДЕМ осуществляет обмен данными, рассчитанными для слоя. Обмен данными идет на файловом уровне.

Также ПК ТАНДЕМ учитывает, что программа ПРИЗМА рассчитывает сразу всю активную зону реактора, а теплогидравлические расчеты из-за больших объемов сетки для всей активной зоны провести нельзя. Они проводятся в распределенном режиме для каждой ТВС. Для расчета всей активной зоны была разработана модель независимых ТВС.

### Модель независимых ТВС

Расчет каждой из ТВС ведется с учетом своего энерговыделения, полученного при решении условно-критической задачи, и расходом теплоносителя. Граничные условия для каждой из ТВС считаются одинаковыми. Для оценки погрешностей такого представления был проведен ряд методических расчетов модельных систем. Сравнивались модели с постоянным значением скорости теплоносителя на входе в активную зону и модели с использованием в качестве граничного условия перепада давления. Также проведена оценка влияния соседей, тепловых и вещественных потоков через боковые поверхности ТВС.

Была рассмотрена система из трехборок, поперечное сечение которой показано на рис. 4. Белые круги соответствуют твэлам, черные – направляющим каналам. Из центра ТВС 1 в центры других борок были проведены две линии. В качестве результатов расчетов рассматривалось распределение температуры теплоносителя вдоль этих линий.

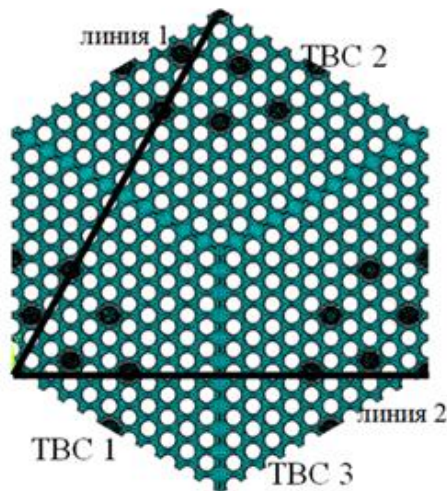


Рис. 4. Поперечное сечение системы из трех ТВС

Всего были рассмотрены четыре системы, описание которых приведено в таблице. Здесь под обычной ТВС подразумевается сборка с направляющими каналами, заполненными теплоносителем. Исключение составляет система 4, где в каналах ТВС 2 находятся стержни с выгорающим поглотителем (СВП). Интегральное энерговыделение ТВС задавалось исходя из средней номинальной мощности, приходящейся на одну сборку. Параметр неравномерности  $\zeta$  отличен от единицы только для ТВС 3 в некоторых системах.

#### Расчетные системы из трех ТВС

Система	ТВС 1	ТВС 2	ТВС 3
1	Обычная, $\zeta = 1$	Обычная, $\zeta = 1$	Обычная, $\zeta = 1$
2	Обычная, $\zeta = 1$	Обычная, $\zeta = 1$	Обычная, $\zeta = 1/2$
3	Обычная, $\zeta = 1$	Обычная, $\zeta = 1$	Обычная, $\zeta = 2$
4	Обычная, $\zeta = 1$	С СВП, $\zeta = 1$	Обычная, $\zeta = 1$

Система 1 рассматривалась как эталонная. По отклонению распределений температуры теплоносителя в ТВС 1, которая во всех расчетных системах была одинаковой, от эталонной оценивалось влияние соседних ТВС, рассматриваемых как возмущающие.

По результатам методических расчетов (рис. 5, 6) сделаны выводы:

- если в системе присутствуют сборки с различной геометрической конфигурацией, наибольшее влияние на результаты расчета оказывает используемое граничное условие;
- наиболее разумной расчетной схемой является использование давления в качестве граничного условия;
- влияние перетечек от соседних ТВС ощутимо только в некоторых случаях в приграничной области, а их интегральное влияние на расчетные нейтронно-физические характеристики представляется существенно меньшим, чем влияние граничного условия.

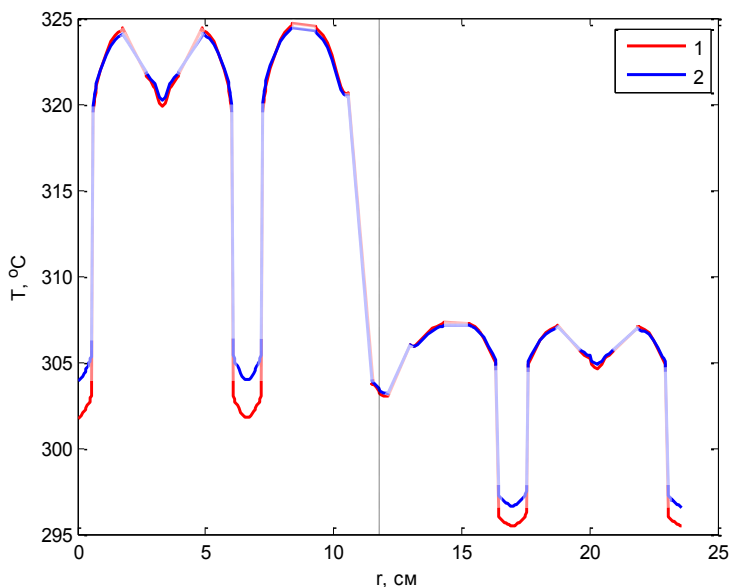


Рис. 5. Распределение температуры теплоносителя вдоль линии 2 в системе 2 для разных граничных условий: 1 – давление, 2 – скорость

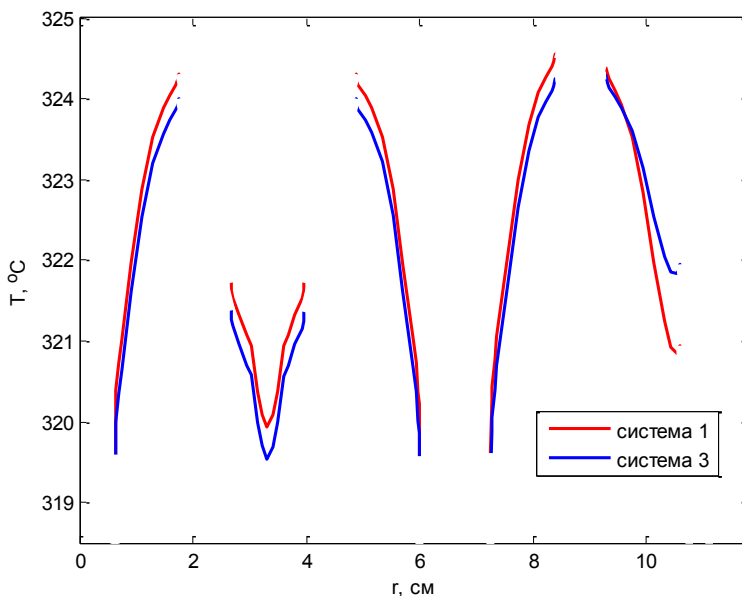


Рис. 6. Распределение температуры теплоносителя в ТВС 1 вдоль линии в системах 1 и 3 для заданного значения давления

В настоящий момент ведутся методические работы по созданию более точной схемы расчета всей активной зоны реактора.

### Прототип графического интерфейса пользователя

Проведение связанных расчетов требует больших трудозатрат как при задании расчетных моделей, так и при формировании запуска расчетов таких разнородных программ как ПРИЗМА и программы теплогидравлики. Одной из важных задач дальнейшего развития ПК ТАНДЕМ стало создание прототипа графического интерфейса пользователя, который позволяет задавать входные данные, необ-

ходимые для проведения связанных расчетов. Прототип графического интерфейса пользователя написан на языке программирования C# с использованием библиотеки классов Windows Forms и платформы Windows Presentation Foundation (WPF).

В активной зоне реакторной установки могут находиться ТВС различных типов. Они отличаются между собой по геометрии, по степени обогащения топлива, по наличию выгорающих поглотителей и поглощающих элементов (ПЭЛ). Графический интерфейс пользователя позволяет составлять все типы ТВС согласно картограмме топливной загрузки реактора (рис. 7). При этом формируются xml-файлы с конфигурацией реактора заданного типа.

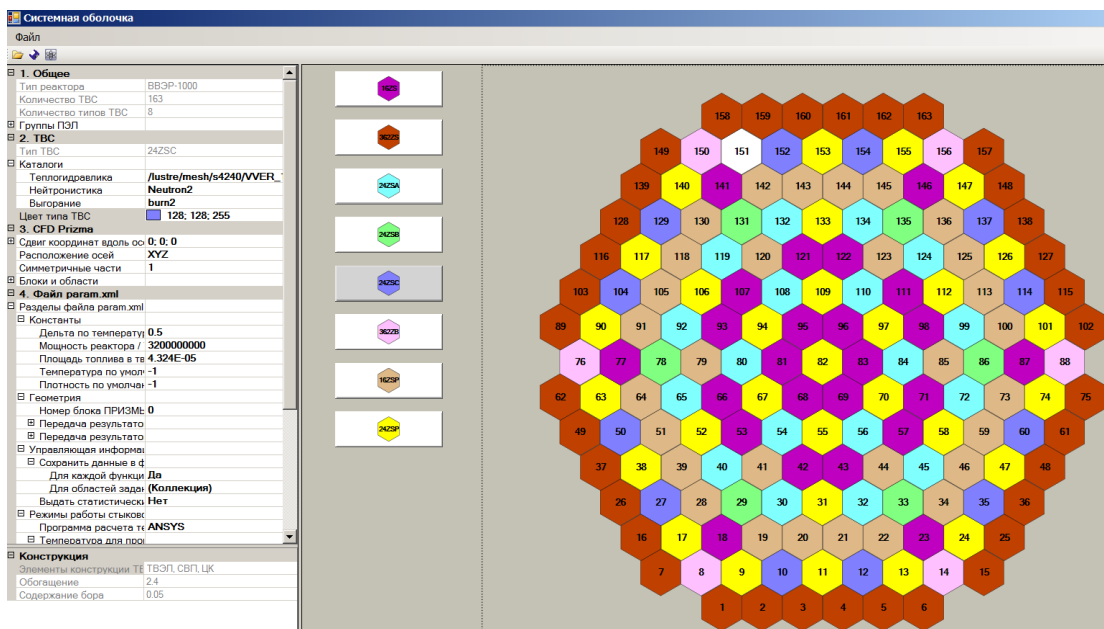


Рис. 7. Формирование картограммы загрузки активной зоны

Прототип графического интерфейса пользователя формирует управляющий файл в формате XML, содержащий необходимую информацию для работы ПК ТАНДЕМ (рис. 8).

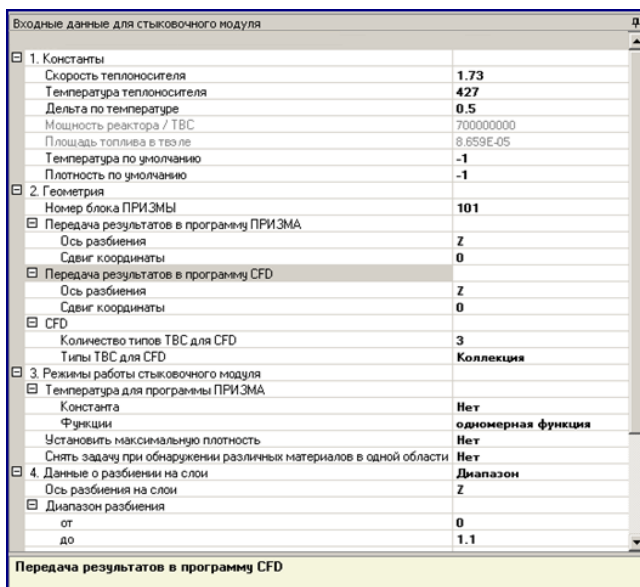


Рис. 8. Формирование входных данных для ПК ТАНДЕМ

Прототип графического интерфейса пользователя позволяет задать тип связанного расчета, каждый тип рассчитывается по своей схеме. По типам расчеты подразделяются на расчет стационарных задач и расчет кампании реактора. В соответствии с принятой схемой расчета производится выбор расчетных кодов (рис. 9).

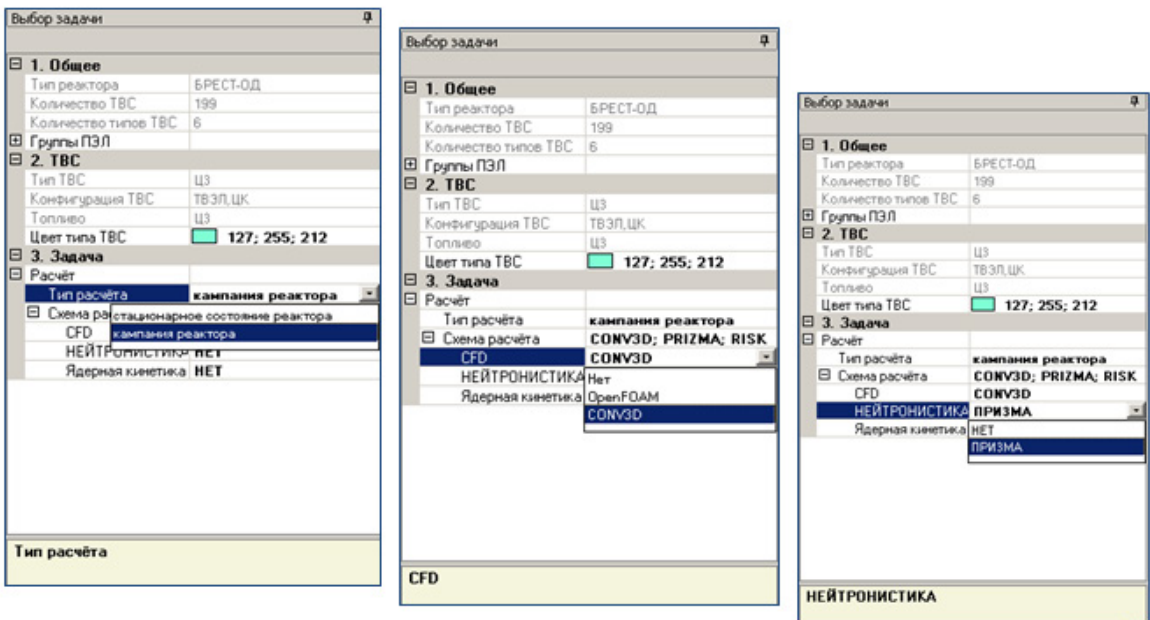


Рис. 9. Выбор типа расчета и расчетных кодов

В соответствии с заданными картограммой и схемой связанного расчета прототип графического интерфейса пользователя позволяет сформировать входные файлы для программ нейтроники, ядерной кинетики и ПК ТАНДЕМ (рис. 10). Также данный программный модуль формирует скрипт запуска комплекса расчетов для проведения связанных расчетов под управлением ОС Linux.

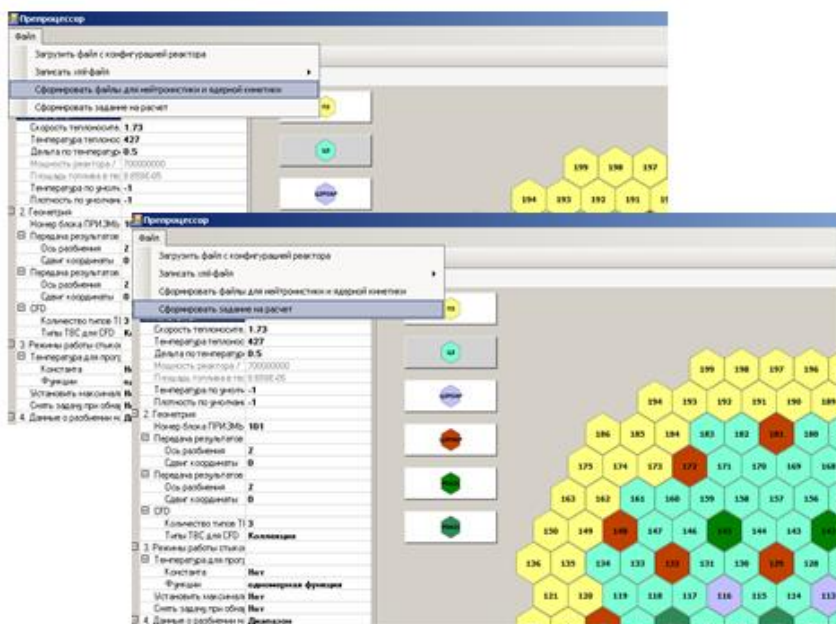


Рис. 10. Формирование входных данных и задания на расчет



## Заключение

В РФЯЦ-ВНИИТФ проводятся связанные расчеты нейтронно-физических и теплогидравлических характеристик активных зон реакторов следующих типов: ВВЭР-1000, ВВЭР-1200 и РУ типа БРЕСТ. Результаты расчетов могут быть представлены разными способами: в виде полей физических величин, таблиц, в виде картограмм, а также в виде графиков. В результате расчетов можно оценить среднюю температуру теплоносителя при заданных начальных параметрах, при которой работа реактора была бы наиболее эффективной и безопасной.

Проведенные расчеты показывают возможность вычисления на современных вычислительных системах теплогидравлических характеристик реактора с использованием нейтронно-физических характеристик, оцененных методами статистического моделирования. В то же время проверочные расчеты позволили наметить пути дальнейшего развития методик. В настоящее время разрабатывается методика учета переноса тепловых потоков между соседними ТВС. В ближайшей перспективе предполагается проведение расчета теплогидравлических характеристик всей активной зоны реактора.

## Литература

1. Кириллов П. Л., Богословская Г. П. Тепломассообмен в ядерных энергетических установках: Учебное пособие для вузов. М.: ИздАт, 2008.
2. IAEA Nuclear Data Centre. [Electronic resource]. Mode of access: <http://www-nds.iaea.org>.
3. Зацепин О. В., Кандиев Я. З., Кашаева Е. А. и др. Расчеты методом Монте-Карло по программе ПРИЗМА нейтронно-физических характеристик активной зоны ВВЭР-1000 // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика ядерных реакторов. 2011. Вып. 4. С. 64–74.
4. Кандиев Я. З., Куропатенко Э. С., Шмаков В. М., Черепанова Е. И. Библиотеки системы константного обеспечения расчетов КОБРА. Использование библиотек ENDL, ENDF // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1986.
5. Модестов Д. Г. Разработка программного комплекса для расчета кампании реактора // XI Забабахинские научные чтения. 16–20 апреля, 2012. Снежинск: Изд-во РФЯЦ-ВНИИТФ, 2013.
6. Chudanov V. V. et al. Current status and validation of CONV2D\&3D code // Proc. OECD/CSNI Workshop on in vessel core debris retention and coolability, Garching near Munich, Germany, March 3–6, 1998 // Nuclear Safety NEA/CSNI/R 1999. (98) 18. P. 223–224.
7. OpenFOAM. [Electronic resource]. Mode of access: <http://opencfd.co.uk/openfoam>.

## ТРЕХСТАДИЙНЫЕ СИМПЛЕКТИЧЕСКИЕ РАЗНОСТНЫЕ СХЕМЫ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ. КЛАССИФИКАЦИЯ, СРАВНИТЕЛЬНОЕ ЧИСЛЕННО-АНАЛИТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

*В. Н. Софронов, В. Е. Шемарулин*

Российский федеральный ядерный центр –  
Всероссийский НИИ экспериментальной физики, г. Саров

## Введение

Представлены результаты исследования многообразия трехстадийных симплектических разностных схем, предназначенных для численного решения натуральных гамильтоновых систем обык-