



ВНИИАЭС
РОСАТОМ

УЧЕТ ГЕТЕРОГЕННЫХ ЭФФЕКТОВ ПРИ ПОДГОТОВКЕ МНОГОГРУППОВЫХ КОНСТАНТ ДЛЯ РАСЧЕТОВ РЕАКТОРОВ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО ПО ПРОГРАММЕ MNT-CUDA

«Нейтроника-2024»/АО «ГНЦ РФ – ФЭИ»

Грушин Никита Анатольевич

О.Н. Андрианова, С.А. Бычков, В.А. Варфоломеева, И.Е. Иванов

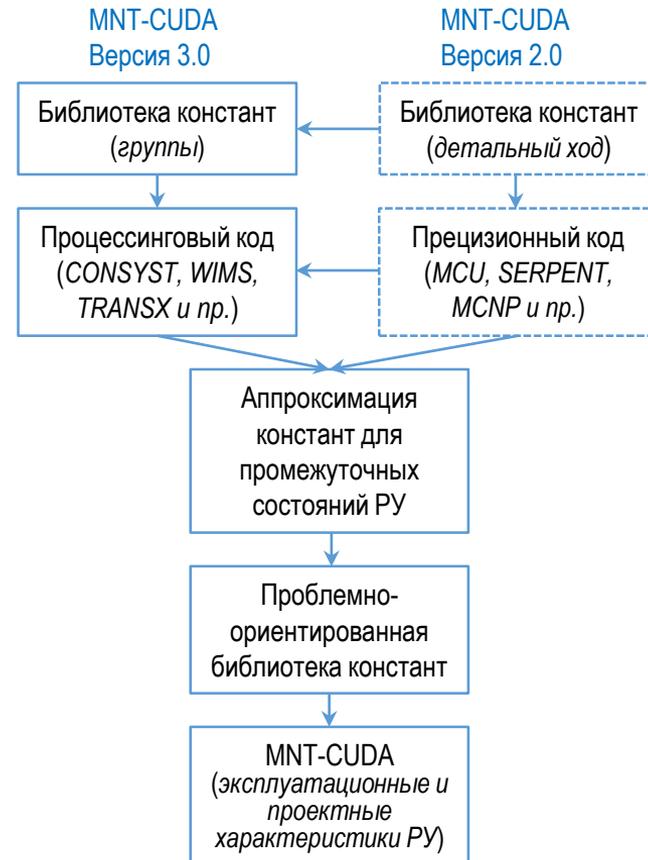
План доклада

- Программа MNT-CUDA
- Новые возможности программы MNT-CUDA
- Методы учета гетерогенных эффектов резонансной экранировки нейтронных сечений в современных кодах подготовки групповых макроконстант
- Влияние гетерогенных эффектов на резонансное поглощение нейтронов в РБМК
- Методика учета гетерогенных эффектов экранировки нейтронных сечений
- Сопоставление методов оценки гетерогенной поправки
- Сравнение результатов групповых и детальных расчетов НФХ



Постановка задачи

Разработка специализированных модулей автоматизированного подключения библиотек нейтронных констант общего назначения для быстродействующего кода MNT-CUDA, реализующего групповой метод Монте-Карло на графических процессорах и предназначенного для выполнения проектных и эксплуатационных расчетов нейтронно-физических характеристик реакторных установок с тепловым и быстрым спектром нейтронов.



Программа MNT-CUDA

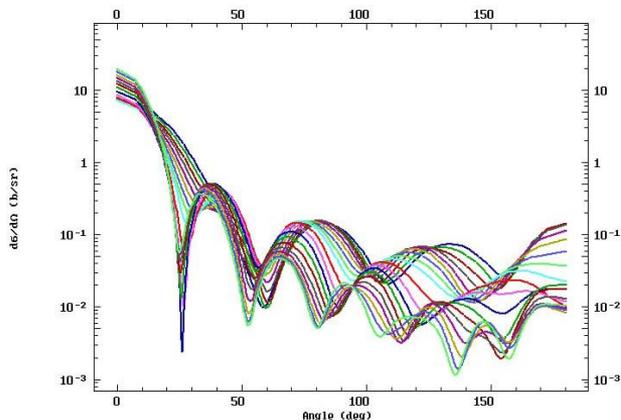


Программа MNT-CUDA, вследствие эффективного распараллеливания вычислений на графических процессорах, позволяет выполнять расчетное полномасштабное моделирование активных зон реакторов с точностью сопоставимой с прецизионными кодами (со статистикой несколько миллиардов частиц) за время, сравнимое со временем расчета по инженерным кодам (минуты).



- Версия 1.0 (Аттестационный паспорт – № 437 от 17.04.2018 г.) – полномасштабный расчет НФХ РБМК-1000 в малогрупповом приближении с квазигетерогенным описанием геометрии; константы – расчет по MSU.
- Версия 2.0 (Аттестационный паспорт – № 524 от 13.11.2021 г.) – версия 1.0 + дополнительные возможности:
 - Комбинированные и детальные многогрупповые расчеты;
 - Модуль расчета изменения изотопного состава;
 - Решение задачи с источником для подкритических систем.
- Версия 2.1 – версия 2.0 + новый тип топлива;
- Версия 3.0 – Универсальная инженерная программа (расчет систем различного типа) + возможность подготовки констант с использованием CONSYST/БНАБ-РФ.

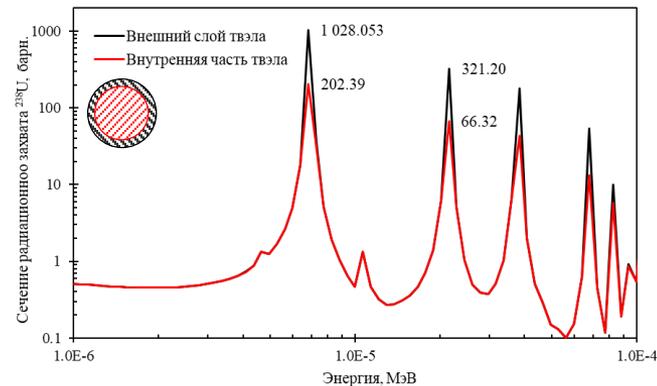
Новые возможности программы MNT-CUDA



Законы рассеяния ^{208}Pb при энергиях ~ 20 МэВ

- В групповом представлении анизотропия рассеяния описывается разложением по полиномам Лежандра (в БНАБ-РФ используется P_5 -приближение).
- Для групповых кодов Монте-Карло необходимо осуществить преобразование от P_5 -приближения в эквивалентное дискретное распределение.
- **Реализованы различные алгоритмы моделирования анизотропии рассеяния, подобные тем, которые используются в групповых версиях зарубежных кодов MCNP и KENO.**

- Использование групповых библиотек нейтронных констант общего назначения требует применения специальных алгоритмов учета влияния гетерогенных эффектов.
- Реализованные в современных процессинговых кодах подходы, базирующиеся на вычислении средней хорды и введении поправок Данкова, Белла, Левита и пр., не позволяют учесть изменение резонансного поглощения по объему твэла.
- **Разработана альтернативная методика параметризации зависимости концентрации фиктивного нуклида (δ -рассеивателя) от глубины выгорания, температуры материалов активной зоны и плотности теплоносителя.**



Сечение радиационного захвата ^{238}U , барн

Учет гетерогенных эффектов резонансной экранировки нейтронных сечений (1)

В групповом представлении учет эффектов резонансной экранировки сечений осуществляется на основе факторов Бондаренко, которые зависят от T температуры материала и σ_0 сечения разбавления i -го резонансного нуклида.

$$\bar{\sigma}_{x,g}^i(\sigma_{0,g}^i, T) = \sigma_{x,g}^i \cdot f_x^i(\sigma_{0,g}^i, T)$$

В групповой библиотеке БНАБ-РФ для всех изотопов принят единый набор из 26 значений сечений разбавления от 10^{-3} до 10^7 барн и 6-ти температур (300, 550, 900, 1400, 2100 и 3000 К).

Эффекты гетерогенной блокировки учитываются на основании принципа эквивалентности путем введения фиктивного изотопа, т.н. δ -рассеивателя.

$$\sigma_{0,g}^{i \text{zem}} = \frac{1}{N_i} \left(\sum_{j \neq i} N_j \bar{\sigma}_{t,g}^j + \Sigma_e \right) = \sigma_{0,g}^{i \text{zem}} + \frac{\Sigma_e}{N_i}$$

$$\sigma_{0,i}^g = \frac{1}{N_i} \sum_{j \neq i} N_j \bar{\sigma}_{t,0,j}^g + \frac{N_{D-SC} \sigma_t^{D-SC} (= 1 \text{ барн})}{N_i}$$

Для изолированного топливного стержня, гетерогенная поправка определяется через длину средней хорды в материале ($\ell = 4V/S$).

$$\Sigma_e = \frac{1}{\ell}$$

Учет гетерогенных эффектов резонансной экранировки нейтронных сечений (2)

Тип гетерогенного размещения материалов	Σ_e (гетерогенная поправка)	Пояснения
Изолированный топливный стержень	$1/\ell$	$\ell = 4 V/S$ – средняя хорда
Цилиндрическая ячейка Вигнера-Зейца	D/ℓ	D – поправка Данкова, $D = 1/(1+C) \approx 1-C$, при малых C $C = 1/(1+\omega^1)$
Изолированная пара стержней	$a D/\ell$	a – поправка Бела, принимается равной $a = 0,79$ $C = 1/(1+\omega)$
Решетка из взаимодействующих стержней	$a D/[\ell(a(D-1)+D)]$	a может быть вычислена по одной из трех формул ³ $C = \exp(-\tau^2 \omega)/(1+(1-\tau_1) \omega)$

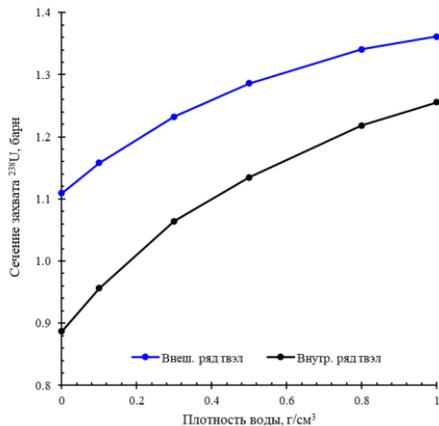
¹ $\omega = \Sigma_M \ell V_M/V_F$,
где Σ_M – полное сечение замедлителя, V_F и V_M – объемы топлива и суммарный объем замедлителя, оболочки и зазора;
² $\tau = \left[\sqrt{s_1} \cdot \sqrt{1+V_M/V_F} - 1 \right] \cdot V_F/V_M - s_2$, $\tau_1 = \tau + \omega/(7 + \omega \cdot s_3)$,
где $s_1 = 0,9523$, $s_2 = 0,12$, $s_3 = 2,125$ для треугольной решетки, $s_1 = 0,8862$, $s_2 = 0,08$, $s_3 = 5,67$ для квадратной решетки;
³ Поправка Бела может быть вычислена по следующим формулам:
(1) реализовано в CONSYST: $a = (1 + 2,71 \cdot b)/(1 + 2,34 \cdot b)$, $b = D/(\ell \cdot \Sigma_F)$,
где Σ_F – полное сечение топлива;
(2) реализовано в WIMS: $a = (1 + 2,71 \cdot b)/(1 + 2,34 \cdot b)$, $b = 0,5 \cdot D/[R_F(\Sigma_p + 3,2 \cdot N^{U238})]$,
где R_F – радиус топлива, Σ_p – сечение потенциального рассеяния, N^{U238} – ядерная концентрация ²³⁸U;
(3) $a = b^2/(b^2 - 1,866 \cdot D)$, $b = 2,366 + D$
(4) в TRANSX не вычисляется, принимается равным $a = 1,35$

В процессинговых кодах (CONSYST-RF, WIMS, TRANSX, BONAMI и пр.) реализовано вычисление гетерогенных поправок для следующих гетерогенных систем: изолированный топливный стержень, изолированная пара стержней, цилиндрическая ячейка Вигнера-Зейца, симметричная плоская ячейка из слоев замедлителя и топлива, а также для решеток из взаимодействующих стержней – это цилиндрические стержни в квадратной и треугольной периодических решетках.

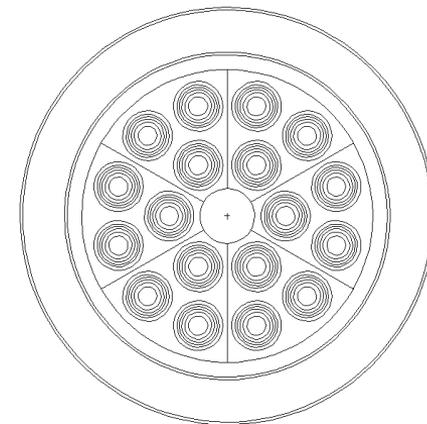
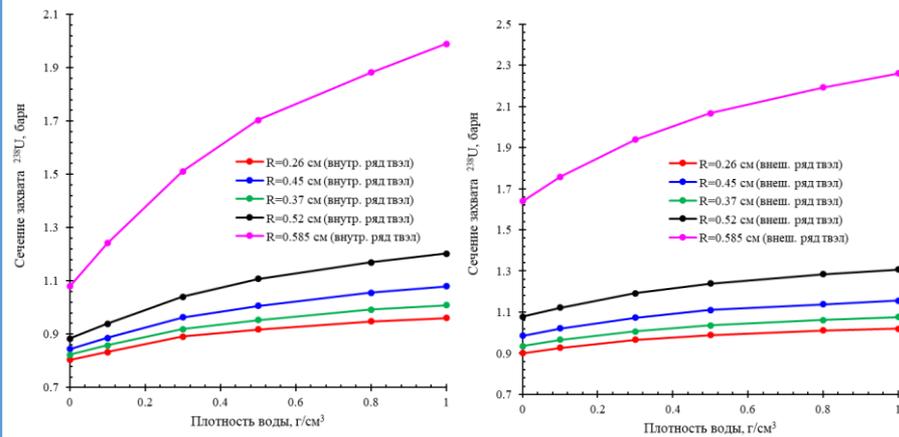
Пример влияния гетерогенных эффектов на резонансное поглощение нейтронов в РБМК

Сечение захвата ^{238}U

Без разделения твэла на зоны



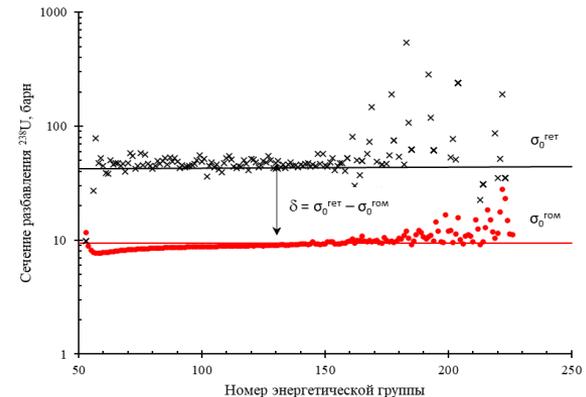
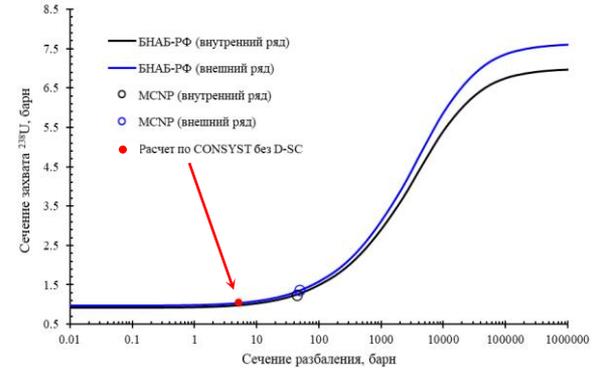
С разделением твэлов на 5 зон



Ячейка РБМК-1000 (разбиение на пять цилиндрических зон с радиусами $0,585\sqrt{(1/5)}$ см, $0,585\sqrt{(2/5)}$ см, $0,585\sqrt{(3/5)}$ см, $0,585\sqrt{(4/5)}$ см и $0,585$ см)

Методика учета гетерогенных эффектов экранировки нейтронных сечений

- 1) Выявить основной резонансный нуклид, оказывающий наибольшее влияние на НФХ.
- 2) Определить из прецизионных расчетов ϕ^g , σ_γ^g , σ_f^g значения $\langle\sigma_\gamma\rangle^{gem}$, $\langle\sigma_f\rangle^{gem}$ и/или I_γ^{gem} , I_f^{gem} для основного резонансного нуклида в интересующих материальных зонах (например, по рядам и радиусу твэл).
- 3) Построить аналитическую зависимость $\langle\sigma_\gamma(\sigma_0)\rangle$, $\langle\sigma_f(\sigma_0)\rangle$ и/или $I_\gamma(\sigma_0)$, $I_f(\sigma_0)$ на основе табулированных от σ_0 значений факторов Бондаренко.
- 4) Из сопоставления аналитической зависимости $\langle\sigma_\gamma(\sigma_0)\rangle$ и прецизионных расчетов $\langle\sigma_\gamma\rangle^{gem}$ определить σ_0^{gem} .
- 5) Оценить необходимую для данного нуклида гетерогенную поправку δ (задаваемую в CONSYST) для каждой из интересующих материальных зон.



Зависимость резонансного интеграла от сечения разбавления в РБМК

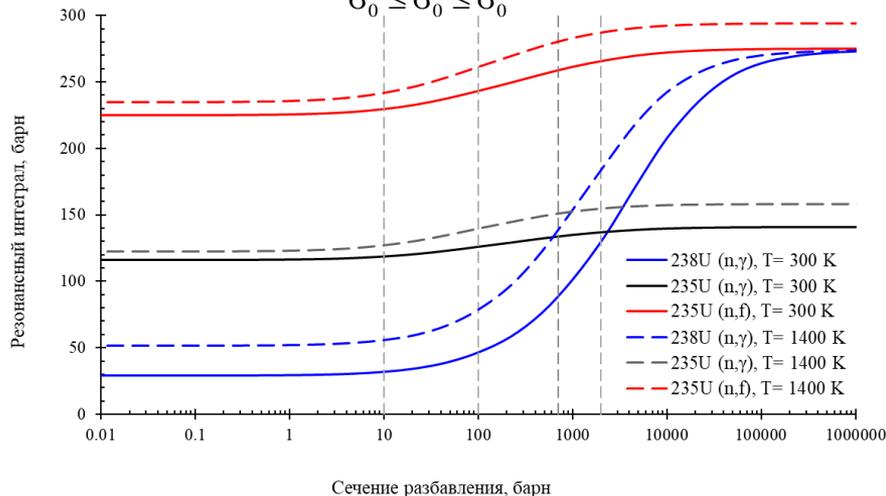
Один из способов параметризации факторов
Бондаренко от сечения разбавления:

$$f(\sigma_0) = \sigma_x(\sigma_0) / \sigma_x(10^7) = A \cdot \text{th}(B \ln(\sigma_0) + C) + D$$

$$A = (1 - f(\sigma_0 = 0)) / 2$$

$$B = (1 + f(\sigma_0 = 0)) / 2$$

$$\sigma_0^n \leq \sigma_0 \leq \sigma_0^{n+1}$$



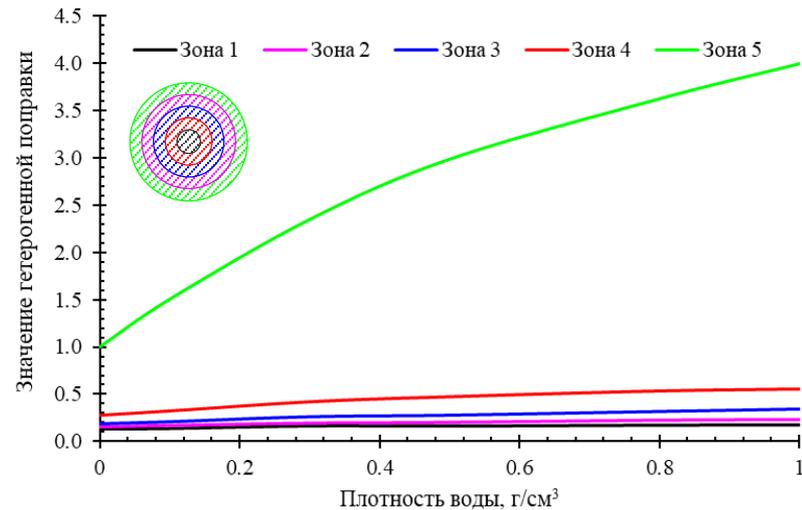
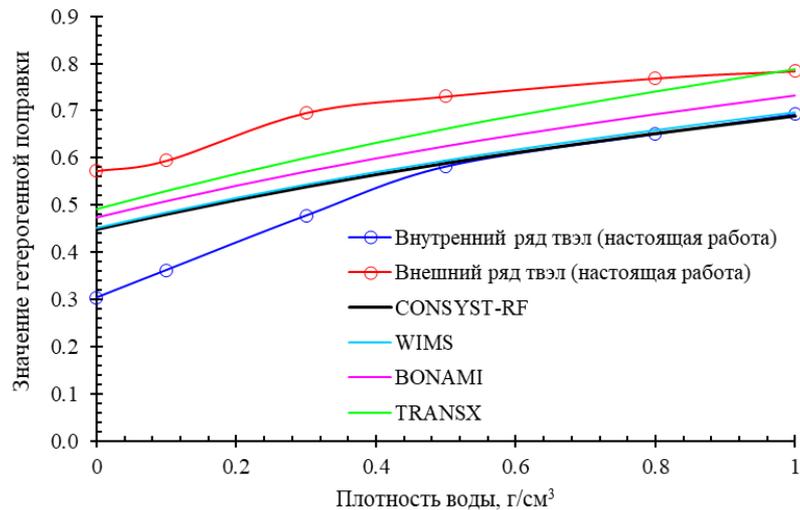
Интервал изменения сечения разбавления ^{238}U :

20 – 40 барн (внутренние зоны твэла) и 100 – 1500 барн (внешняя поверхность твэла), в этом диапазоне резонансный интеграл захвата ^{238}U может изменяться от 30% до 3 раз.

Интервал изменения сечения разбавления ^{235}U :

700 – 1000 барн, в этом диапазоне резонансный интеграл захвата и деления ^{235}U может изменяться не более чем на 3%.

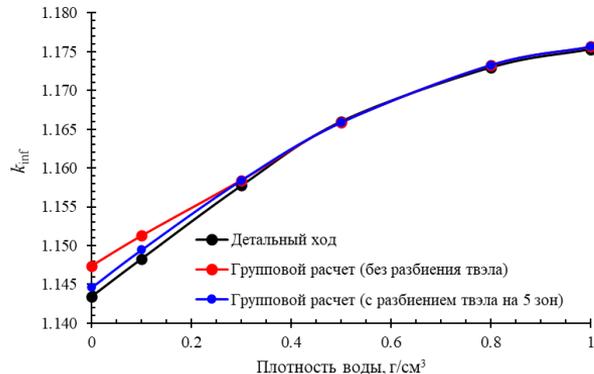
Сопоставление методов оценки гетерогенной поправки (для ячейки РБМК)



Предложенная методика (в отличие от общепринятых и реализованных в современных процессинговых кодах подходов, базирующихся на вычислении гетерогенной поправки на основе средней хорды и коэффициентов Данкова, Белла, Левита и пр.) позволяет учесть изменение резонансного поглощения по объему твэла, что способствует, в частности, более точному описанию нуклидной кинетики топлива и выгорающих поглотителей.

Пример применения методики для ячеек РБМК

Сравнение результатов расчетов коэффициента размножения в групповом и детальном приближении



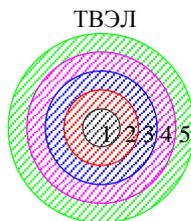
Сравнение результатов прецизионных и групповых расчетов скоростей реакций в ячейке РБМК (с/без деления ТВЭЛ на зоны)

Зона	Реакция	РОСФОНД	БНАБ-РФ	Отн.	БНАБ-РФ	Отн.
			наст. работа	откл., %	наст. работа	откл., %
		Без деления на зоны		С делением на зоны		
Вода	Захват	46,60	46,63	0,1 %	46,61	0,0 %
Графит		27,49	27,30	-0,7 %	27,33	-0,6 %
Топливо	Деление	300,95	301,53	0,2 %	301,09	0,05 %
		408,66	408,65	0,0 %	408,65	0,00 %
Ячейка	Поглощение	375,05	375,46	0,1 %	375,03	0,00 %
k_{inf}		1,2340	1,2363	0,2 %	1,2347	0,06 %

*значения помножены на коэффициент 1000/Скорость генерации

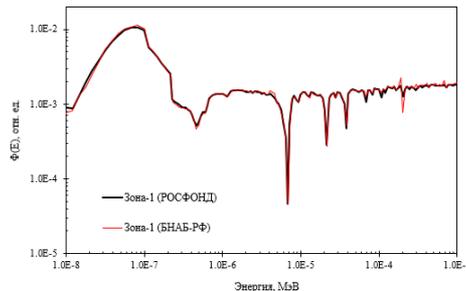
Максимальные по всем состояниям значения относительных отклонений групповых расчетов от прецизионных:

Параметр	Без разбиения	С разбиением
Деление в топливе	0,21%	0,06%
Захват в топливе	0,30%	0,11%
k_{inf}	0,25%	0,12%

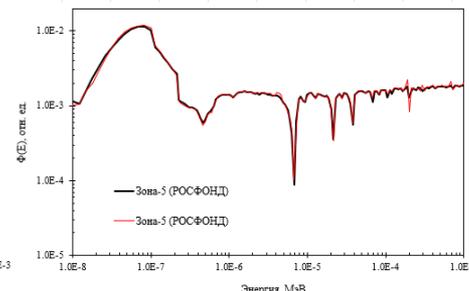


Сравнение потоков по зонам ТВЭЛ

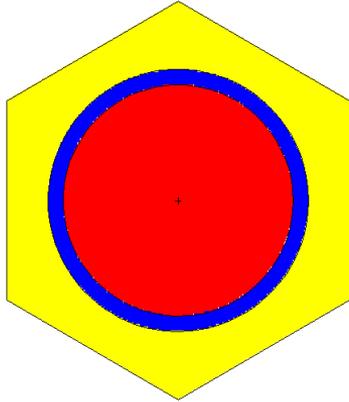
Зона 1 (центральная)



Зона 5 (внешняя)



Пример применения методики для ячеек ВВЭР (1)



Рассмотрено 54 вариантов водо-водяных ячеек с изменяемыми параметрами, таким как:

- шаг решетки от 0,9 до 1,8 см (6 вариантов),
- плотность воды от 0,2 до 1 г/см³ (5 вариантов),
- обогащение топлива от 0,7 до 6% (9 вариантов),
- различные температуры топлива и теплоносителя,
- наличие/отсутствие выгорающих поглотителей в топливе и теплоносителе,
- наличие/отсутствие ксенона в топливе.

Расчеты были выполнены по прецизионному коду MCNP с библиотекой РОСФОНД и MNT-CUDA с групповой библиотекой БНАБ-РФ с учетом резонансных гетерогенных эффектов с помощью блока GETER/CONSYST.

Относительные отклонения групповых от прецизионных расчетов (мин – макс):

k_{inf}	от 0,1 до 0,46%
Поглощение в топливе	от 0,2 до 1%
Поглощение в оболочке	от 7 до 9%

Пример применения методики для ячеек ВВЭР (2)

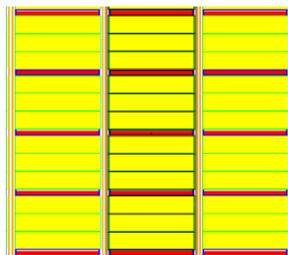
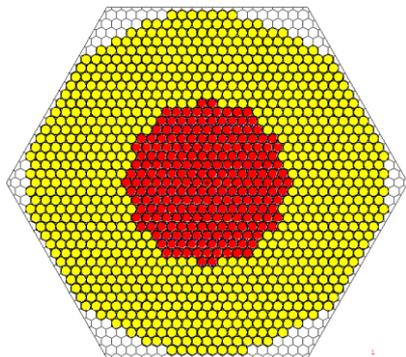
Сравнение результатов прецизионных и групповых расчетов скоростей реакций в ячейке ВВЭР
(разные способов вычисления гетерогенных поправок)

Зона	Скорость реакции	РОСФОНД	БНАБ-РФ GETER	Отн. откл., %	БНАБ-РФ наст. работа	Отн. откл., %
Топливо	Захват	433	428	-1,0 %	433	-0,02 %
	Деление	405	405	0,0 %	405	0,0 %
Оболочка	Захват	9,98	10,9	9,7 %	9,98	0,0 %
Вода	Захват	32,44	32,4	-0,1 %	32,41	-0,07 %
Ячейка	Поглощение	880	877	-0,4 %	880	0,0 %
k_{inf}		1,13824	1,14285	0,4 %	1,13861	0,01%

Разработанная методика позволяет уменьшить отклонения групповых от прецизионных расчетов до статистической погрешности расчетов

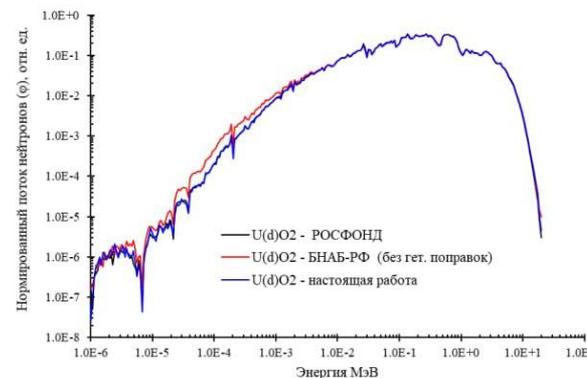
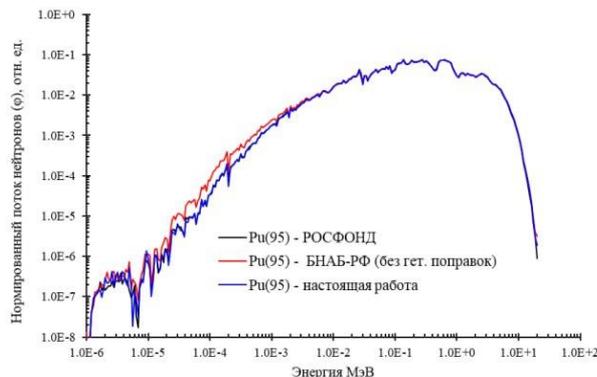
Пример применения методики для экспериментов на стендах БФС

БФС-49/1а



Сравнение результатов прецизионных и групповых расчетов скоростей реакций в БФС (с/без гетерогенной поправки)

Материал	Скорость реакции	РОСФОНД	БНАБ-РФ (без поправок)	Отн. откл., %	БНАБ-РФ наст. работа	Отн. откл., %
АЗ+БЭ+ТЭ (U и Pu)	Захват	607,81	606,54	-0,2 %	608,24	0,07 %
	Деление	343,98	343,99	0,0 %	343,78	-0,06 %
Fe	Захват	13,43	12,01	-10,6 %	13,42	-0,02 %
Al	Захват	1,51	1,14	-24,5 %	1,51	0,00 %
$k_{эф}$		0,99491	0,99567	0,1 %	0,99635	-0,1 %



Заключение

- Подготовленные на основе CONSYST/БНАБ-РФ с применением предложенной методики многогрупповые блокированные макроконстанты позволили обеспечить хорошее согласие расчетов нейтронно-физических характеристик реактора РБМК-1000 с аналогичными расчетами, выполненными по прецизионному коду с библиотекой оцененных нейтронных данных РОСФОНД (расхождения в k_{inf} не превышает 0,2%).
- Переход от константного обеспечения, сформированного на основе полномасштабных прецизионных расчётов, к подготовке констант на основе групповой библиотеки общего назначения позволило сократить машинное время подготовки блокированных макроконстант от недель до нескольких часов без потери точности расчетов.
- Предложенная методика может быть применима для учета гетерогенных эффектов в системах как с тепловым, так и быстрым спектром нейтронов и будет в дальнейшем использоваться для разработки встроенных модулей MNT-CUDA автоматизированной подготовки групповых нейтронных макроконстант.

Список использованных источников



1. <https://docs.nvidia.com/cuda/cuda-c-best-practices-guide/index.html>
2. Аттестационный паспорт программного средства MNT-CUDA (версия 1.0) № 437; <https://www.secnr.ru/expertise/software-review/%D0%9F%D0%A1-10-2018.pdf>.
3. Аттестационный паспорт программного средства «MNT-CUDA (версия 2.0)» № 524; [secnr.ru/expertise/software-review/База_аттестационных_паспортов_ноябрь_2023.pdf](https://www.secnr.ru/expertise/software-review/База_аттестационных_паспортов_ноябрь_2023.pdf)
4. Грушин Н.А., Бычков С.А., Дружинин В.Е., Знаков Д.Л., Иванов И.Е., Лысов Д.А., Плеханов Р.В., Шмонин Ю.В. Групповые расчеты реакторов методом Монте-Карло с детальным описанием геометрии. Программа MNT-CUDA версия 2.0. Вопросы атомной науки и техники. Серия: Ядерно-реакторные константы. – 2022. – № 4. – с. 46 – 58.
5. CONSYST-RF Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ. – № 2016612865. – 2016.
6. БНАБ-РФ Свидетельство о государственной регистрации базы данных. – № 2016620461. – 2016.

Спасибо за внимание

Грушин Никита Анатольевич
Ведущий инженер

Тел,: +7 (495) 376-12-53
E-mail: NAGrushin@vniiAES.ru

