

ЭКСПЛУАТАЦИЯ ОБЪЕКТОВ
АТОМНОЙ ОТРАСЛИ
OPERATION OF FACILITIES
NUCLEAR INDUSTRY

УДК 621.039.5 : 519.876.5 : 004.43
DOI 10.26583/gns-2023-01-07
EDN QXXMFL

ВЫБОР АЛГОРИТМА ВЫГОРАНИЯ В OPENMC НА ПРИМЕРЕ
РАСЧЕТНОГО БЕНЧМАРКА СБОРКИ LEU И МОХ-ТОПЛИВА
ВВЭР-1000

© 2023 Хамза Ахмад Танаш¹, Денис Алексеевич Соловьёв²,
Вячеслав Геннадьевич Зимин³, Алексей Леонидович Лобарев⁴,
Денис Алексеевич Плотников⁵, Николай Васильевич Щукин⁶

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия

¹tanash_hamza@yahoo.com, <http://orcid.org/0000-0002-7831-8516>

²vulture@inbox.ru, <http://orcid.org/0000-0002-0507-0839>

³vgzimin@mail.ru, <http://orcid.org/0000-0002-0334-3741>

⁴lobarev.alexey@gmail.com, <http://orcid.org/0000-0001-5258-3357>

⁵pda1995@gmail.com, <http://orcid.org/0000-0001-9387-170x>

⁶pikenv@gmail.com, <http://orcid.org/0000-0002-4228-7228>

Аннотация. *OpenMC* – это современный код моделирования процессов переноса нейтронов методом Монте-Карло, который использует в качестве программного интерфейса (API) язык программирования *Python*. *OpenMC* поддерживает восемь алгоритмов моделирования выгорания. В этом исследовании представлены результаты выбора метода интегрирования при моделировании выгорания ТВС с выгорающими поглотителями для реакторов ВВЭР-1000. Результаты моделирования выгорания, полученные по *OpenMC*, сравнивались с результатами, представленными в бенчмарк *OECD*. Для моделирования выгорания в коде *OpenMC* можно использовать 8 различных численных интеграторов: *PI*, *CE/CM*, *LE/QI*, *CE/LI*, *CF4*, *EPC-RK4*, *SI-CE/LI*, *SI-LE/QI*. Результаты тестов показали, что интеграторам *SI-CE/LI*, *SI-LE/QI* требуется значительно больше времени для расчета одного шага по выгоранию, чем остальным при одинаковой точности, поэтому они были исключены из дальнейшего рассмотрения. Интегратор *PI* показал низкую точность интегрирования при одинаковых шагах по выгоранию с другими интеграторами. Однако *PI* обладает высоким быстродействием, в сравнении с другими интеграторами, и по мере уменьшения шага интегрирования обладает сходимостью к одному решению, которое может быть выбрано как реперное для оценки качества других интеграторов. На основе результатов, полученных с использованием интегратора *PI* с мелким шагом, было принято решение использовать для дальнейшей работы интегратор *CE/LI*. Результаты, полученные с помощью *CE/LI*, были сравнены с результатами, полученными в бенчмарке *VVER-1000 LEU and MOX* по кодам: *MCU*, *TVS-M*, *WIMS8A*, *HELIOS*, *MULTICELL*, и показали хорошее совпадение. Таким образом можно сделать вывод применимости интегратора *CE/LI* в составе *OpenMC* для моделирования выгорания ТВС, содержащих выгорающие поглотители. При проведении работ были использованы ресурсы высокопроизводительного вычислительного центра НИЯУ МИФИ

Ключевые слова: *OpenMC*, выгорание, методы интегрирования, бенчмарк *OECD*, реакторов ВВЭР-1000, метод переноса нейтронов, предиктор интегратор (*PI*), *CE/LI* Интегратор, *ENDF/B-VII.1*, коэффициент размножений нейтронов.

Для цитирования: Танаш Х.А., Соловьёв Д.А., Зимин В.Г., Лобарев А.Л., Плотников Д.А., Щукин Н.В. Выбор алгоритма выгорания в *OpenMC* на примере расчетного бенчмарка сборки *LEU* и *MOX*-топлива ВВЭР-1000 // Глобальная ядерная безопасность. – 2023. – № 1(46). – С. 79-91 <http://dx.doi.org/10.26583/gns-2023-01-07>.

Поступила в редакцию 15.12.2022

После доработки 16.02.2023

Принята к публикации 21.02.2023

Введение

OpenMC представляет собой код моделирования переноса нейтронов методом Монте-Карло с программным интерфейсом на языке программирования *Python* [1]. Одной из интересных возможностей *OpenMC* является возможность использования различных алгоритмов численного интегрирования (интеграторов) при решении задачи выгорания ядерного топлива. В качестве интеграторов в *OpenMC* могут быть использованы: предиктор интегратор (*PI*), интегратор с постоянной экстраполяцией и постоянной средней точкой (*CE/CM*), интегратор с линейной экстраполяцией и квадратичной интерполяцией (*LE/QI*), интегратор с постоянной экстраполяцией и линейной интерполяцией (*CE/LI*), интегратор четвертого порядка без коммутатора (*CF4*), интегратор с расширенным предиктор-корректором с методом Рунге-Кутты четвертого порядка (*EPC-RK4*), стохастический неявный *CE/LI* (*SI-CE/LI*) и стохастический неявный *LE/QI* (*SI-LE/QI*) интеграторы [2, 3].

Возможности по моделированию выгорания кодом *OpenMC* были представлены авторами в работе [4]. В ней было выполнено моделирование ячейки реактора с водой под давлением (*PWR*), а также моделирование ТВС реактора на быстрых нейтронах с натриевым теплоносителем (*SFR*). Дополнительно для проверки качества моделирования коэффициента размножения нейтронов и концентраций нуклидов в процессе выгорания топлива было произведено сравнение с результатами, полученными по аналогичному коду *Serpent2*, для теста *VERA* [5]. Таким образом была показана возможность корректного моделирования выгорания топлива с использованием кода *OpenMC*.

Однако используемые в *OpenMC* алгоритмы численного интегрирования при выгорании имеют различную точность и быстродействие. Какой из методов следует использовать при моделировании выгорания ТВС [6] для реакторов ВВЭР-1000? Проведем численные тесты и на основе результатов этих тестов сделаем выбор подходящего метода интегрирования.

Для начала приведем краткое описание используемых в *OpenMC* алгоритмов численного интегрирования при моделировании выгорания.

1 Алгоритмы численного интегрирования при моделировании выгорания

Выгорание топливных материалов в течение топливной кампании реактора происходит из-за протекающих ядерных реакций и спонтанного радиоактивного распада. Все это изменяет материальный состав топлива. Уравнения Бейтмана описывают эти превращения материалов во времени. Простейшая форма уравнения Бейтмана может быть записана следующим образом (1):

$$\frac{dx(t)}{dt} = F(x(t), t)x(t), \quad (1)$$

где $F(x(t), t)$ – матрица коэффициентов выгорания в момент времени t ;

$x(t)$ – вектор с концентрациями нуклидов.

Для решения уравнения (1) в *OpenMC* представлено 8 различных численных интеграторов: *PI*, *CE/CM*, *LE/QI*, *CE/LI*, *CF4*, *EPC-RK4*, *SI-CE/LI*, *SI-LE/QI*. Рассмотрим их подробнее [7,8].

1.1 *PI* Предиктор Интегратор

Предиктор Интегратор – это простейший численный метод, используемый для решения уравнения Бейтмана. Этот интегратор работает с $F(x(t), t)$ как с постоянной

матрицей. При этом предположении решение стало более простым, как показано в уравнении (2), но в то же время снизилась точность предсказания концентрации нуклидов во времени:

$$x(t) = X(0)e^{Ft}. \quad (2)$$

Для оценки $F(x(t), t)$ используется кусочно-постоянная аппроксимация начале временного шага. Интегрирование может быть выполнено, как показано в уравнении (3):

$$x_{i+1} = x_i e^{F_i h}, \quad (3)$$

где h – временной интервал шага выгорания;
 i – номер шага.

1.2 CE/CM Интегратор

CE/CM является методом интегрирования, используемым по умолчанию в коде *MCNP6* [9, 10]. Этот метод интегрирования означает постоянную экстраполяцию, а также постоянную среднюю точку на шаге предиктора и шаге корректора. В алгоритме *CE/CM* предиктор выгорает до средней точки, после чего оценивается матрица распада. Только эта новая матрица используется до конца временного шага корректором. Уравнения (4)-(5) описывают решение для этого метода интегрирования, где y – вектор концентраций нуклидов, оцененных в середине временного шага:

$$y = e^{F(x_i, t_i) \frac{h}{2}}, \quad (4)$$

$$x_{i+1} = x_i e^{F(y, t + \frac{h}{2})h}. \quad (5)$$

1.3 CE/LI Интегратор

CE/LI обозначает постоянную экстраполяцию на шаге предиктора и линейную интерполяцию на шаге корректора. Этот интегратор используется в коде *Serpent2* в качестве метода интегрирования, используемого по умолчанию [11]. При использовании этого метода интегрирования процесс выгорания занимает больше времени, чем при использовании предиктора интегратора, потому что вычисление предиктора производится до конца временного шага, и после этого в конце временного шага вычисляется обновленная матрица распада. Уравнения (6)-(7) описывают решение для этого метода интегрирования. Шаг линейного корректора усредняет матрицу распада в начале и конце временного шага, как показано в уравнении (7), что повышает эффективность предсказания концентраций нуклидов:

$$y = e^{F(x_i, t_i)h}, \quad (6)$$

$$x_{i+1} = x_i e^{\left[\frac{1}{2}F(y, t_i+h) + \frac{1}{2}F(x_i, t_i)\right]h}, \quad (7)$$

где y – концентрация нуклидов, рассчитанная в конце временного шага интегратором предиктора. Матрица $F(x(t), t)$ как в начале, так и в конце временного шага усредняется при интегрировании корректора.

1.4 CF4 Интегратор

CF4 означает без коммутаторный метод интегрирования четвертого порядка. Этот метод интегрирования имеет высокую точность четвертого порядка и требует двух

экспоненциальных матриц для расчета. Уравнения (8)-(15) показывают, как работает процедура *CF4* для расчета концентраций нуклидов:

$$F_1 = hF(x_0), \quad (8)$$

$$x_1 = x_0 e^{\left(\frac{1}{2}F_1\right)}, \quad (9)$$

$$F_2 = hF(x_1), \quad (10)$$

$$x_2 = x_0 e^{\left(\frac{1}{2}F_2\right)} \quad (11)$$

$$F_3 = hF(x_3), \quad (12)$$

$$x_3 = x_1 e^{\left(F_3 - \frac{1}{2}F_1\right)}, \quad (13)$$

$$x_4 = hF(x_3), \quad (14)$$

$$x_4 = x_0 e^{\left(\frac{1}{4}F_1 + \frac{1}{6}F_2 + \frac{1}{6}F_3 - \frac{1}{12}F_4\right)} * e^{\left(\frac{-1}{12}F_1 + \frac{1}{6}F_2 + \frac{1}{6}F_3 + \frac{1}{4}F_4\right)}. \quad (15)$$

1.5 EPC-RK4 Интегратор

EPC-RK4 – этот метод интегрирования представляет собой комбинированный метод, который включает предиктор-корректор с методом Рунге-Кутты [5]. Этот интегратор имеет высокую точность, хотя он относится к методам второго порядка. Математическое выражение для этого метода может быть выражено в следующих уравнениях (16)-(22) для получения концентраций нуклидов и матричной экспоненты:

$$x_1 = x_0 e^{\left(\frac{1}{2}F_1\right)}, \quad (16)$$

$$F_2 = hF(x_1), \quad (17)$$

$$x_2 = x_0 e^{\left(\frac{1}{2}F_2\right)}, \quad (18)$$

$$F_3 = hF(x_2), \quad (19)$$

$$x_3 = x_0 e^{\left(\frac{1}{2}F_3\right)}, \quad (20)$$

$$F_4 = hF(x_3), \quad (21)$$

$$x_4 = x_0 e^{\left(\frac{1}{6}F_1 + \frac{1}{3}F_2 + \frac{1}{3}F_3 + \frac{1}{6}F_4\right)}. \quad (22)$$

1.6 LE/QI Интегратор

LE/QI – это сокращение от линейной экстраполяции на шаге предиктора и квадратичной интерполяции на шаге корректора [4]. Этот метод интегрирования относится к семейству методов второго порядка по экстраполяции и третьего порядка по точности интерполяции. Интегратор *LE/QI* использует концентрации нуклидов с предыдущих временных шагов, но это требует больших затрат по памяти для хранения данных. Следующие уравнения (23)-(24) объясняют работу этого метода интегрирования математически:

$$y = e^{\frac{-h_j}{2h_{j-1}}F(x_{j-1,j-1}) + \left(1 + \frac{h_j}{2h_{j-1}}\right)F(x_{j,j})}, \quad (23)$$

$$x_{j+1} = x_j e^{\left[\frac{-h_j^2}{6h_{j-1}(h_{j-1}+h_j)}F(x_{j-1,j-1}) + \left(\frac{1}{2} + \frac{h_j}{6h_{j-1}}\right)F(x_{j,j}) + \left(\frac{1}{2} - \frac{h_j^2}{6h_{j-1}(h_{j-1}+h_j)}\right)F(x_{j+1,j+1})\right]}. \quad (24)$$

1.7 Стохастический неявный метод

В стохастическом неявном методе Эйлера (*SI-E*) для того, чтобы повысить точность и стабильность работы метода, шаг интегрирования предиктора преобразуется

в неявную форму. Метод стохастического градиентного спуска используется для определения концентраций нуклидов и скоростей реакций на этапе предсказания. Основная идея метода может быть выражена математически следующим образом, уравнения (25)-(29):

$$x_{i+1}^0 = x_i e^{F(x_i, i)h} \quad (25)$$

$$F(i+1)^n = F(i+1, x_{i+1}^n) \quad (26)$$

$$\bar{F}(i+1)^n = \frac{1}{n+1} \sum_{j=0}^n F(i+1)^j \quad (27)$$

$$x_{i+1}^n = x_i e^{\bar{F}(i+1, x_{i+1}^{n-1})} \quad (28)$$

$$x_{i+1} = x_i^m, \quad (29)$$

где n – текущий подшаг;

m – количество подшагов.

В коде *OpenMC* реализовано два интегратора на основе стохастических неявных методов: *SI-CE/LI* и *SI-CE/QI*, которые расширяют стохастический неявный метод Эйлера на существующие интеграторы *CE/LI* и *LE/QI* соответственно. Оба обеспечивают повышенную стабильность при решении уравнений выгорания очень больших систем, в которых могут наблюдаться осцилляции ксенона.

1.8. Обобщенные характеристики методов интегрирования

Обобщенные характеристики различных интеграторов высокого порядка, реализованных в *OpenMC*, приведены в таблице 1.

Таблица 1 – Обзор численных интеграторов высокого порядка [Overview of high order numerical integrators]

Алгоритмы	Время расчета на один шаг	Тип предиктора	Тип корректора	Точность
<i>PI</i>	1	Постоянный	Отсутствует	$O(1)$
<i>CE/LI</i>	2	Постоянный	Линейный	$O(2)$
<i>CE/CM</i>	2	Постоянный	Постоянный	$O(2)$
<i>LE/QI</i>	3	Линейный	Квадратичный	$O(2)$
<i>EPC-RK4</i>	4	Подшаг	Подшаг	$>O(2)$
<i>CF4</i>	4	Подшаг	Подшаг	$>O(2)$
<i>SI-CE/LI</i>	>50	Постоянный	Линейный	$>O(2)$
<i>SI-LE/QI</i>	>50	Линейный	Квадратичный	$>O(2)$

Моделирование выгорания проводилось с использованием только 6 интеграторов. Интеграторы *SI-CE/LI* и *SI-CE/QI* не использовались из-за большого времени расчета (используют более 50 расчетных шагов на один шаг по выгоранию при этом результаты так и не были получены). При этом как указывается в работе [12] точность расчета $K_{эфф}$ при моделировании выгорания с помощью *SI-CE/LI* и *SI-CE/Q* сопоставима с результатами, полученными с помощью других интеграторов.

2 Бенчмарк VVER-1000 LEU and MOX

2.1 Спецификация бенчмарка

Бенчмарк *VVER-1000 LEU and MOX* был впервые опубликован в 2002 г. [8]. Многие исследователи использовали его как эталон для проведения сравнительных проверок [12]. Этот бенчмарк состоит из двух разных ТВС ВВЭР-1000: однородной ТВС *LEU* с 12 ТВЭлами из уран-гадолиния и профилированной ТВС *MOX* с 12 ТВЭлами из уран-гадолиния. Шестиугольная конструкция ТВС *LEU* показана на рисунке 1. Эта ТВС состоит из 300 ТВЭлов с обогащением по ^{235}U 3,7 вес.% и 12 уран-гадолиниевых ТВЭлов с обогащением по ^{235}U 3,6 вес.% и 4 вес.% Gd_2O_3 , с одной центральной трубкой,

заполненной теплоносителем, и 18 направляющими трубками под стержни управления, которые также заполнены теплоносителем. В этом бенчмарке рассчитывались значения физических параметров ТВС в различных состояниях по пяти кодам: *MCU*, *TVS-M*, *WIMS8A*, *HELIOS* и *MULTICELL* с удельной мощностью для всей ТВС в 108 МВт/м³.

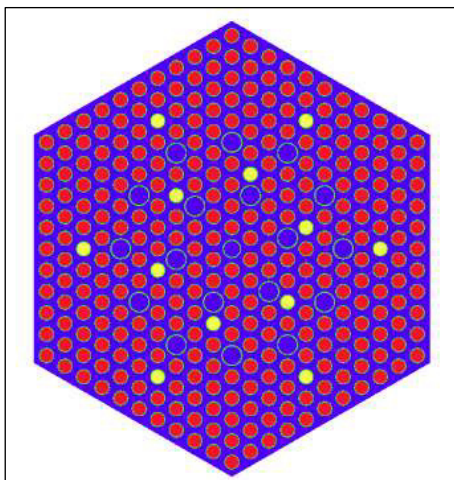


Рисунок 1 – Конструкция ТВС *LEU* [*LEU* Fuel assembly design]

2.2 Расчет *OpenMC*

В этом исследовании используется код *OpenMC* версии 0.13.0. Для проведения расчета ТВС используются следующие значения расчетных параметров: 300 000 историй нейтронов для каждого расчетного шага, 50 неактивных и 100 активных шагов расчета соответственно. Также используются версия файлов *ENDF/B-VII.1*, содержащих данные о нейтронных сечениях нуклидов. Для моделирования выгорания использовались цепочки распадов, содержащих информацию по всем нуклидам.

На первом этапе исследования проводилось сравнение результатов моделирования выгорания ТВС с использованием различных интеграторов, входящих в *OpenMC*, между собой и выбирался наилучший. Выбор интегратора производился на основе сравнения точности и скорости работы интеграторов. На втором этапе результаты, полученные с помощью выбранного интегратора, сравнивались с результатами, полученными в бенчмарке *VVER-1000 LEU and MOX*.

Расчеты выгорания выполнены для состояния *SI* этого бенчмарка при температуре топлива 1027 К и 575 К для температуры теплоносителя и оболочки ТВЭЛ. С равновесными концентрациями ¹³⁵Xe и ¹⁴⁹Sm. При плотности теплоносителя 0,7235 г/см³ с концентрацией борной кислоты 0,6 г/кг. Объемное энерговыделение в ТВС устанавливалось равным 108 МВт/м³. Расчет выгорания производился до глубины выгорания 40 МВт*сут/кг тяжелых атомов (МВт*сут/кгТА). При этом выбирались следующие шаги по выгоранию: вначале было использовано 15 шагов по 1 МВт*сут/кгТА, а затем 5 шагов по 5 МВт*сут/кгТА. Для корректного моделирования выгорания ТВЭГ (ТВЭЛов с гадолинием) их топливные таблетки разбивались на 10 одинаковых по площади зон вдоль радиуса.

3 Результаты

3.1 Коэффициент размножений нейтронов

Изменение $K_{эфф}$ в зависимости от выгорания ТВС с *LEU* при использовании различных алгоритмов выгорания в *OpenMC* для состояния *SI* представлено на рисунке 2. При этом все алгоритмы численного интегрирования, используемые в *OpenMC* при моделировании выгорания ядерного топлива, дали приблизительно одинаковы тренды, за исключением интегратора *PI*, особенно в первые 10 МВт*сут/кгТА и в конце процесса выгорания, как показано на рисунке 2.

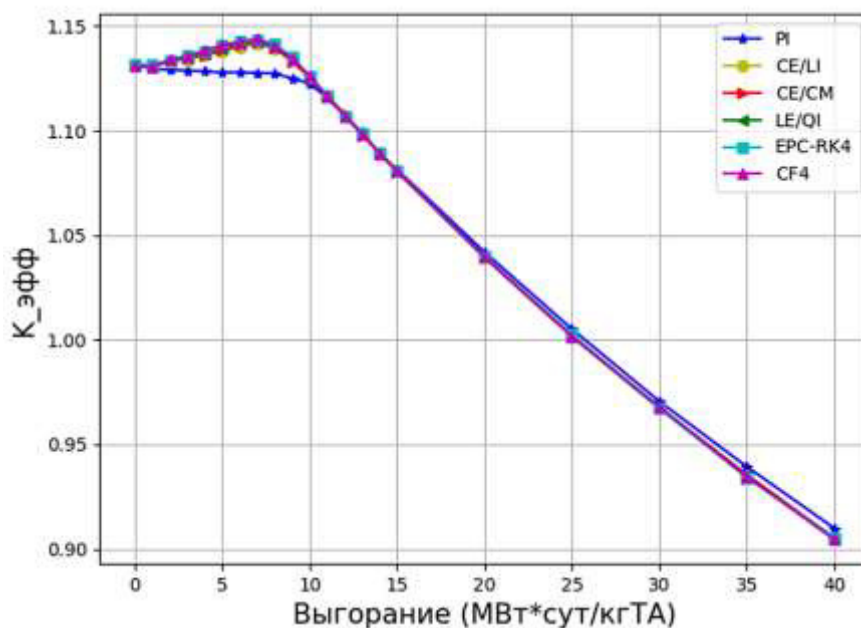


Рисунок 2 – Изменение $K_{\text{эфф}}$ в зависимости от выгорания ТВС LEU при использовании различных алгоритмов выгорания в *OpenMC* [Variation of K_{eff} as a function of LEU fuel burn-up when using different burn-up algorithms in *OpenMC*]

Снижение точности прогноза интегратора *PI* связано с большим интервалом шага выгорания, который равнялся 1 МВт*сут/кгТА для диапазона с 1 по 15 МВт*сут/кгТА и 5 МВт*сут/кгТА для диапазона выгорания с 15 по 40 МВт*сут/кгТА. Низкая точность в начале моделирования выгорания связана с неточностью в определении концентраций изотопов гадолиния ^{155}Gd и ^{157}Gd при таком большом шаге выгорания для *PI*[13]. Результат моделирования концентраций изотопов гадолиния представлен на рисунке 3. Отклонение при моделировании $K_{\text{эфф}}$ с использованием *PI* в конце процесса выгорания связано с ошибками в определении концентраций изотопов урана ^{235}U и ^{238}U , что показано на рисунке 4. Однако интегратор *PI* обладает высоким быстродействием в сравнении с другими интеграторами. Поэтому попробуем уменьшать шаг интегратора *PI* и посмотрим, даст ли нам это существенный выигрыш по скорости при достижении аналогичной точности других интеграторов.

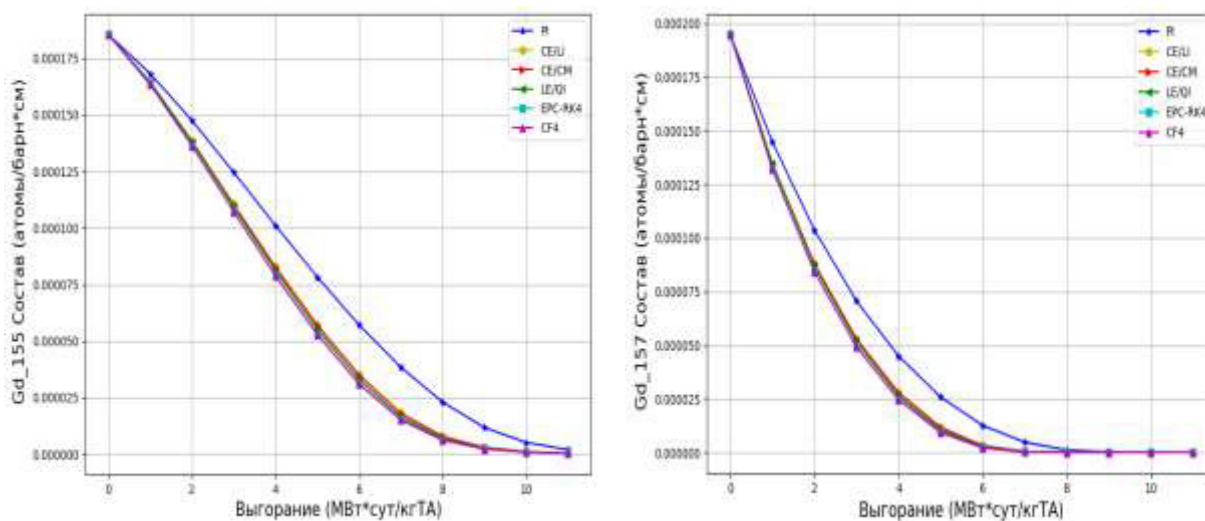


Рисунок 3 – Концентрации изотопов гадолиния ^{155}Gd и ^{157}Gd в начале моделирования процесса выгорания [Concentrations of gadolinium isotopes ^{155}Gd and ^{157}Gd at the start of the burn-up simulation]

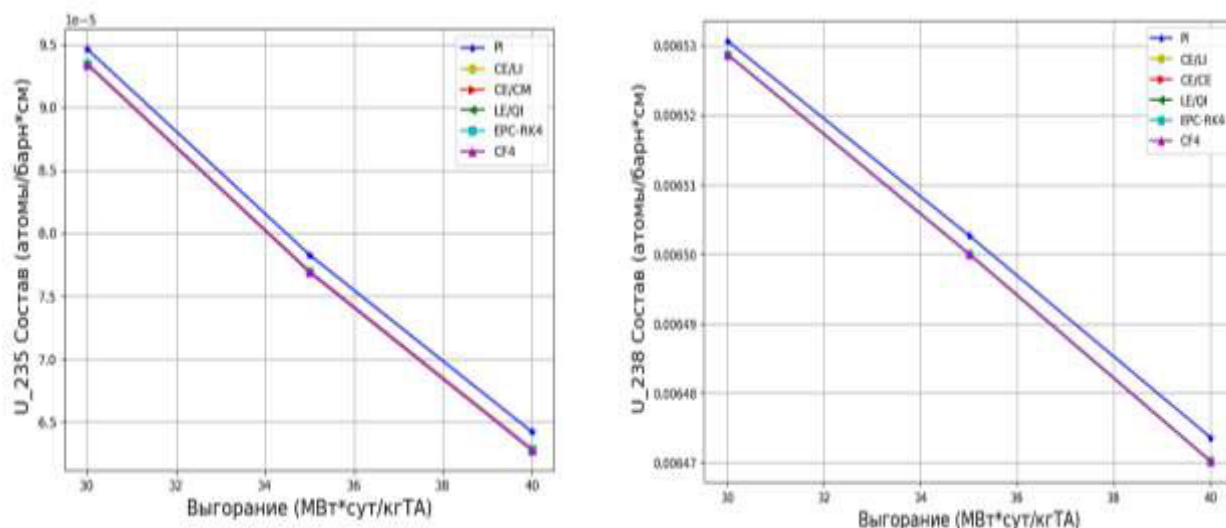


Рисунок 4 – Концентрации изотопов урана ^{235}U и ^{238}U в конце моделирования процесса выгорания [Uranium isotope concentrations of ^{235}U and ^{238}U at the end of the simulated burn-up process]

Для того чтобы понять какой шаг по выгоранию следует выбрать при моделировании выгорания с помощью интегратора PI , были выполнены расчеты выгорания с различными уменьшающимися интервалами по выгоранию. Для каждой новой серии расчетов шаг уменьшался в два раза. Поиск шага повторялся до тех пор, пока результаты расчета для текущей серии не перестали отличаться от результатов предыдущей серии. Результаты выбора шага представлены на рисунке 5. Видно, что по мере уменьшения шага, результаты, полученные с помощью интегратора PI , начинают приближаться к результатам, полученным с помощью других интеграторов (рис. 6 и 7).

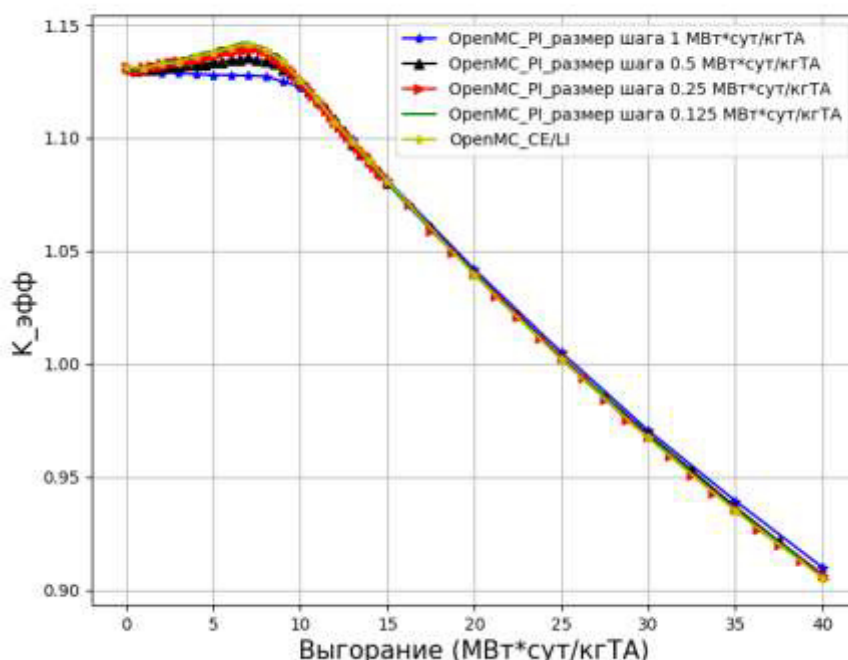


Рисунок 5 – Моделирование $K_{\text{эфф}}$ в зависимости от глубины выгорания ТВС LEU при различных величинах расчетного шага интегратора PI [Modelling of $K_{\text{эфф}}$ as a function of LEU fuel assembly burn-up depth at different values of the calculated integrator step PI]

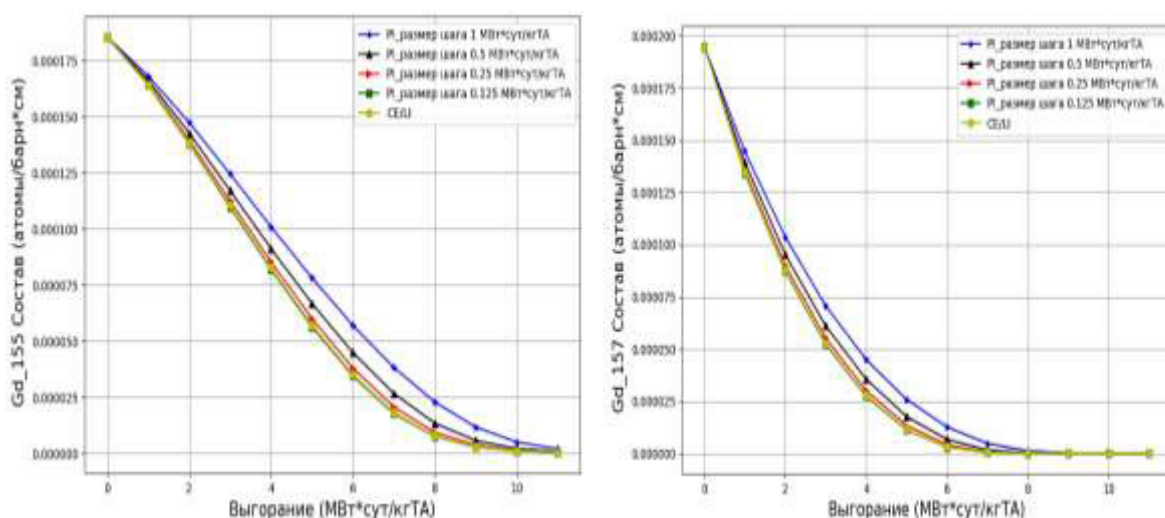


Рисунок 6 – Концентрации изотопов гадолиния ^{155}Gd и ^{157}Gd в начале моделирования процесса выгорания ТВС *LEU* при различных величинах расчетного шага интегратора *PI* [Concentrations of gadolinium isotopes ^{155}Gd and ^{157}Gd at the beginning of *LEU* fuel assembly burn-up simulation at different values of the calculated integrator step *PI*]

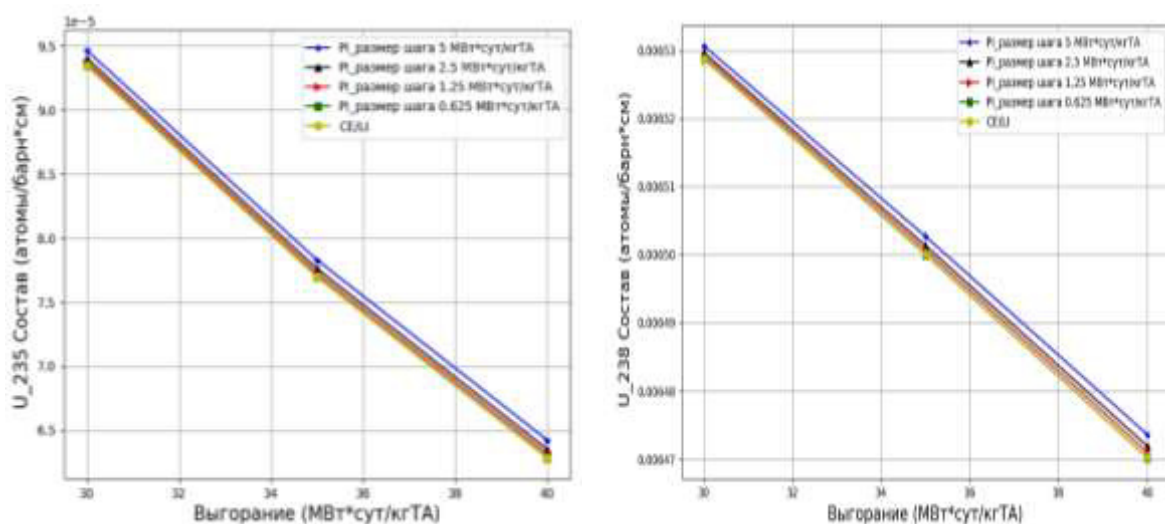


Рисунок 7 – Концентрации изотопов гадолиния ^{235}U и ^{238}U в конце моделирования процесса выгорания ТВС *LEU* при различных величинах расчетного шага интегратора *PI* [Concentrations of gadolinium isotopes ^{235}U and ^{238}U at the end of the *LEU* fuel assembly burn-up simulation at different values of the calculated integrator step *PI*]

По мере уменьшения шага интегрирования интегратор *PI* дает сходящиеся к верному решению результаты. Это позволяет произвести выбор наиболее эффективного по точности и скорости работы интегратора. Сравним между собой результаты, полученные с помощью других методов интегрирования, используемых в *OpenMC*, и результаты, полученные с помощью интегратора *PI* с малым шагом. Для сравнения выберем результаты моделирования $K_{\text{эфф}}$ для состояния *S1* для ТВС *LEU*. Результаты сравнения представлены на рисунке 8. Относительное отличие результатов, полученных с помощью других интеграторов, от *PI* будем оценивать в *pct* ($pct = \left(\frac{K_{\text{эфф}i} - K_{\text{эфф}PI}}{K_{\text{эфф}PI}} \right) * 10^5$). Итак, *CF4* и *EPC-RK4* показали одинаковые значения отклонений от *PI* в диапазоне $[-150, 240]$ *pct*, в то время как отклонения от *PI* для *CE/LI* и *CE/CM* были меньше и находилась в диапазоне $[-100, 100]$ *pct*. Свой выбор остановим на интеграторе *CE/LI*, поскольку для него отклонение от результатов *PI* на начальном участке моделирования выгорания меньше (область выгорания гадолиния), чем для *CE/CM*.

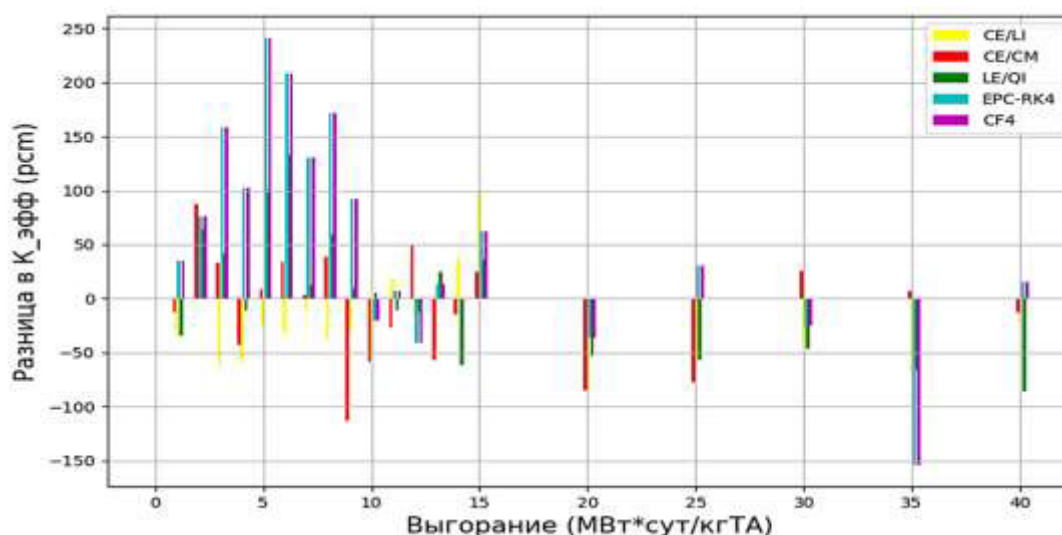


Рисунок 8 – Отклонения $K_{\text{эфф}}$ для интеграторов *OpenMC* от *PI* с мелким шагом по выгоранию [Deviations of $K_{\text{эфф}}$ for *OpenMC* integrators from *PI* with fine pitch on burnout]

Кроме того, хочется добавить, что использование интегратора *PI* при моделировании выгорания ТВС, содержащих выгорающие поглотители, оказывается неэффективным, т.к. уменьшение шага в 4 раза не позволяет достигнуть сопоставимой с другими интеграторами точности, а при этом на расчет требуется больше времени, поскольку интегратор *CE/LI* тратит на такой же расчет 2 единицы времени, вместо 4.

3.2 Сравнение с расчетным бенчмарком *VVER-1000 LEU and MOX*

В бенчмарке *VVER-1000 LEU and MOX* ТВС моделирование $K_{\text{эфф}}$ в процессе выгорания для ТВС *LEU* было выполнено пятью различными кодами: *MCU*, *TVS-M*, *WIMS8A*, *HELIOS* и *MULTICELL*. На основе результатов, полученных по этим кодам, для ТВС *LEU* был вычислен средний тренд $K_{\text{эфф}}$, зависящий от выгорания. А затем были построены отклонения трендов $K_{\text{эфф}}$, полученных по каждому из пяти кодов, от среднего тренда $K_{\text{эфф}}$. Эти результаты представлены на рисунке 9. Для выбранного в *OpenMC* интегратора *CE/LI* также было построено аналогичное отклонение результатов, полученных с его помощью, от среднего тренда $K_{\text{эфф}}$. При этом результаты, полученные по *OpenMC*, не были использованы при построении среднего тренда $K_{\text{эфф}}$.

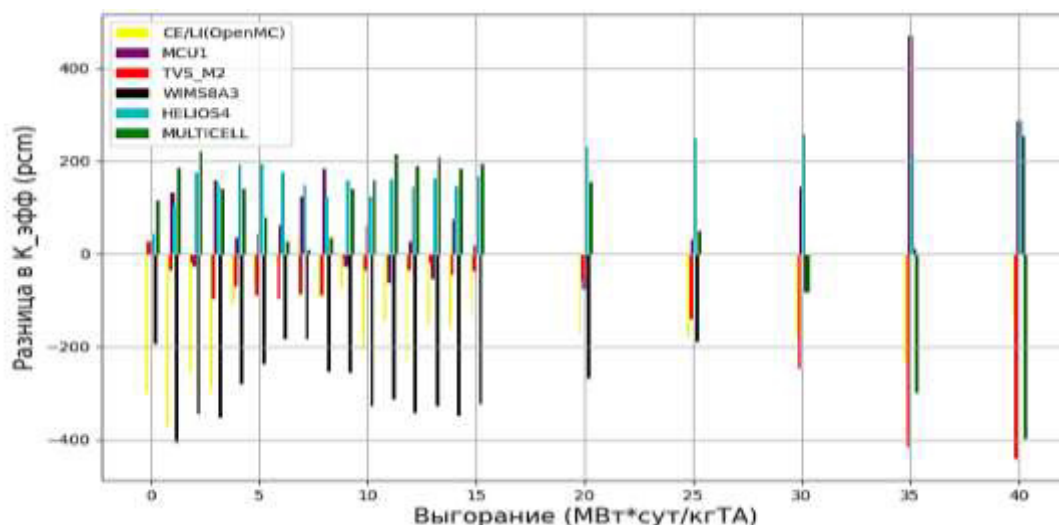


Рисунок 9 – Отклонения кодов *MCU*, *TVS-M*, *WIMS8A*, *HELIOS*, *MULTICELL* и *CE/LI OpenMC* от среднего тренда $K_{\text{эфф}}$ для ТВС *LEU* [Deviations of *MCU*, *TVS-M*, *WIMS8A*, *HELIOS*, *MULTICELL* and *CE/LI OpenMC* codes from the average $K_{\text{эфф}}$ trend for *LEU* fuel assembly]

Результаты, полученные с помощью интегратора *CE/LI* в составе кода *OpenMC*, показали хорошее совпадение с результатами, полученными по другим программам, т.к. максимальное отклонение не превышает 400 *pcm*, а отклонение до 1000 *pcm* считается приемлемым.

4 Выводы

Целью данной работы был выбор алгоритма численного интегрирования, используемого для моделирования выгорания ТВС, содержащих выгорающие поглотители, в коде *OpenMC*. Для моделирования выгорания в коде *OpenMC* можно использовать 8 различных численных интеграторов: *PI*, *CE/CM*, *LE/QI*, *CE/LI*, *CF4*, *EPC-RK4*, *SI-CE/LI*, *SI-LE/QI*. Результаты тестов показали, что интеграторам *SI-CE/LI*, *SI-LE/QI* требуется значительно больше времени для расчета одного шага по выгоранию, чем остальным при одинаковой точности, поэтому они были исключены из дальнейшего рассмотрения. Интегратор *PI* показал низкую точность интегрирования при одинаковых шагах по выгоранию с другими интеграторами. Однако *PI* обладает высоким быстродействием в сравнении с другими интеграторами и по мере уменьшения шага интегрирования обладает сходимостью к одному решению, которое может быть выбрано как реперное для оценки качества других интеграторов. На основе результатов, полученных с использованием интегратора *PI* с мелким шагом, было принято решение использовать для дальнейшей работы интегратор *CE/LI*. Результаты, полученные с помощью *CE/LI*, были сравнены с результатами, полученными в бенчмарке *VVER-1000 LEU and MOX* по кодам: *MCU*, *TVS-M*, *WIMS8A*, *HELIOS*, *MULTICELL*, и показали хорошее совпадение. Таким образом, можно сделать вывод о применимости интегратора *CE/LI* в составе *OpenMC* для моделирования выгорания ТВС, содержащих выгорающие поглотители.

Дополнительно для корректного моделирования выгорания следует отметить важность разбиения твэг на зоны с независимыми материальными составами.

При проведении работ были использованы ресурсы высокопроизводительного вычислительного центра НИЯУ МИФИ.

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

1. Romano P.K., Horelik N.E., Herman B.R., Nelson A.G., Forget B., Smith, K. Openmc: A state-of-the-art monte carlo code for research and development. *Annals of nuclear Energy*, 2015, V. 82, pp. 90-97.
2. Dufek J., Kotlyar D., Shwageraus E. The stochastic implicit euler method—a stable coupling scheme for monte carlo burnup calculations. *Annals of nuclear Energy*, 2013, V. 60, pp. 295-300.
3. Iserles A., Munthe-Kaas H.Z., Nørsett S.P., Zanna A. Lie-group methods. *Acta numerica*. Acta Numer, 2000, V. 9, pp. 215-365.
4. Isotalo A.E., Aarnio P. Higher order methods for burnup calculations with bateman solutions. *Annals of nuclear Energy*, 2011, V. 38, pp. 1987-1995.
5. Josey. Development and analysis of high order neutron transport-depletion coupling algorithms, Ph.D. thesis, (Massachusetts Institute of Technology, 2017).
6. Богданович, Р.Б. Полная энергия деления в зависимости от глубины выгорания топлива для ВВЭР-1000 / Р.Б. Богданович Р.Б., А.С. Герасимов, Г.В. Тихомиров // Журнал физики: Серия конференции. – 2020. – № 1439.
7. Thilagam L., Sunil Sunny C., Jagannathan V., A VVER-1000 LEU and MOX assembly computational benchmark analysis using the lattice burnup code EXCEL. *Annals of nuclear Energy*, 2009, V. 36, pp. 505-519.
8. NEA/NSC/DOC. A VVER-1000 LEU and MOX Assembly Computational Benchmark. Nuclear Energy Agency, 2002.
9. Park, J., Khassenov, A., Kim, W., Choi, S., Lee, D. Comparative analysis of vera depletion benchmark through consistent code-to-code comparison. *Annals of nuclear Energy*, 2019, V. 124, pp. 385-398.
10. Muir, R. E. M. and D. W. The NJOY Nuclear Data Processing System, 1994.

11. Leppänen, J. Serpent—a continuous-energy monte carlo reactor physics burnup calculation code. VTT Technical Research Centre of Finland. Vol. 4.
12. Jiankai Yu a, B. F. Verification of depletion capability of OpenMC using VERA depletion benchmark. *Annals of nuclear Energy*, 2022, V. 170.
13. Девятко, Ю.Н. Моделирование распределения температуры и выгорания в уран-гадолиниевом твэле ВВЭР / Ю.Н. Девятко, В.В. Новиков, О.В. Хомяков // *Физика атомного ядра*. — 2018. — № 81 — С. 1257-1275.

REFERENCES

- [1] Romano P.K., Horelik N.E., Herman B.R., Nelson A.G., Forget B., Smith, K. Openmc: A State-of-the-Art Monte Carlo Code for Research and Development. *Annals of Nuclear Energy*, 2015, V. 82, pp. 90-97 (in English).
- [2] Dufek J., Kotlyar D., Shwageraus E. The Stochastic Implicit Euler Method—a Stable Coupling Scheme for Monte Carlo Burnup Calculations. *Annals of Nuclear Energy*, 2013, V. 60, pp. 295-300 (in English).
- [3] Iserles A., Munthe-Kaas H.Z., Nørsett S.P., Zanna A. Lie-Group Methods. *Acta Numerica*. Acta Numer, 2000, V. 9, pp. 215-365 (in English).
- [4] Isotalo A.E., Aarnio P. Higher Order Methods for Burnup Calculations with Bateman Solutions. *Annals of Nuclear Energy*, 2011, V. 38, pp. 1987-1995 (in English).
- [5] Josey. Development and Analysis of High Order Neutron Transport-Depletion Coupling Algorithms, Ph.D. thesis, (Massachusetts Institute of Technology, 2017) (in English).
- [6] Bahdanovich R, Gerasimov A, Tikhomirov G. Polnaya energiya deleniya v zavisimosti ot glubiny vygoraniya topliva dlya VVER-1000 [Total Fission Energy Depending on WWER-1000 Fuel Burnup]. *Zhurnal fiziki: Seriya konferencii* [Journal of Physics: Conference Series] 2020. No.1439 (in Russian).
- [7] Thilagam L., Sunil Sunny C., Jagannathan V., A WWER-1000 LEU and MOX Assembly Computational Benchmark Analysis Using the Lattice Burnup Code EXCEL. *Annals of Nuclear Energy*, 2009, V. 36, pp. 505-519 (in English).
- [8] NEA/NSC/DOC. A WWER-1000 LEU and MOX Assembly Computational Benchmark. Nuclear Energy Agency, 2002 (in English).
- [9] Park, J., Khassenov, A., Kim, W., Choi, S., Lee, D. Comparative Analysis of Vera Depletion Benchmark through Consistent Code-To-Code Comparison. *Annals of Nuclear Energy*, 2019, V. 124, pp. 385-398 (in English).
- [10] Muir, R. E. M. and D. W. The NJOY Nuclear Data Processing System, 1994 (in English).
- [11] Leppänen, J. Serpent—a Continuous-Energy Monte Carlo Reactor Physics Burnup Calculation Code. VTT Technical Research Centre of Finland. Vol. 4 (in English).
- [12] Jiankai Yu a, B. F. Verification of Depletion Capability of OpenMC Using VERA Depletion Benchmark. *Annals of Nuclear Energy*, 2022, V. 170 (in English).
- [13] Devyatko, Y.N., Novikov, V. V. & K. Modelirovanie raspredeleniya temperatury i vygoraniya v uran-gadolinievom tvele VVER [Modeling of Temperature and Burnup Distributions in the Uranium-Gadolinium Fuel Element of VVER]. *Fizika atomnogo yadra*. [Physics of the Atomic Nucleus] 2018, V. 81, pp. 1257-1275 (in Russian).

Selecting Burnup Algorithms in OpenMC Using the Calculated Benchmark of LEU Assembly and MOX Fuel

© 2023 Hamza A. Tanash¹, Denis A. Solovyov², Vyacheslav G. Zimin³, Alexey L. Lobarev⁴, Denis A. Plotnikov⁵, Nikolay V. Schukin⁶

National Research Nuclear University (MEPhI), Kashirskoyeshosse, 31, Moscow, Russia

¹ tanash_hamza@yahoo.com, ORCID iD: 0000-0002-7831-8516, WoS Researcher ID: ABD-2895-2022

² vulture@inbox.ru, ORCID iD: 0000-0002-0507-0839, WoS Researcher ID: AFT-1248-2022

³ vgzimin@mail.ru, ORCID iD: 0000-0002-0334-3741, WoS Researcher ID: L-5807-2109

⁴ lobarev.alexey@gmail.com, ORCID iD: 0000-0001-5258-3357, WoS Researcher ID: AFT-1155-2022

⁵ pda1995@gmail.com, ORCID iD: 0000-0001-9387-170x, WoS Researcher ID: AFT-1105-2022

⁶ pikenv@gmail.com, ORCID iD: 0000-0002-4228-7228, WoS Researcher ID: AFT-1678-2022

Received by the editorial office on 12/15/2022

After revision on 02/16/2023

Accepted for publication 02/21/2023

Abstract. OpenMC is a state-of-the-art Monte Carlo neutron transport simulation code that uses the Python programming language as an API. OpenMC supports eight burnout simulation algorithms. This study presents the results of choosing an integration method for modeling the burnup of fuel assemblies with burnable poisons for WWER-1000 reactors. Burnout simulation results from OpenMC were compared with those reported in the OECD benchmark. 8 different numerical integrators can be used to model burnout in OpenMC code: PI, CE/CM, LE/QI, CE/LI, CF4, EPC-RK4, SI-CE/LI, SI-LE/QI. The test results showed that the SI-CE/LI, SI-LE/QI integrators require significantly more time to calculate one burnup step than the others with the same accuracy, so they were excluded from further consideration. The PI integrator showed low integration accuracy at the same burnup steps with other integrators. However, PI has a high performance compared to other integrators, and as the integration step decreases, it converges to one solution, which can be chosen as a reference for assessing the quality of other integrators. Based on the results obtained using the fine step PI integrator, it was decided to use the CE/LI integrator for further work. The results obtained with CE/LI were compared with those obtained with the VVER-1000 LEU and MOX benchmark for codes: MCU, TVS-M, WIMS8A, HELIOS, MULTICELL and showed good agreement. Thus, we can conclude the applicability of the CE/LI integrator as part of OpenMC for modeling the burnup of fuel assemblies containing burnable poisons. During the work, the resources of the high-performance computer center of the National Research Nuclear University MEPHI were used.

Keywords: OpenMC, burnup, integration methods, OECD benchmark, WWER-1000 reactors, neutron transfer method, predictor integrator (PI), CE/LI Integrator, ENDF/B-VII.1 Neutron multiplication factor.

For citation: H.A. Tanash, D.A. Solovyov, V.G. Zimin, A.L. Lobarev, D.A. Plotnikov, N.V. Schukin. Selecting Burnup Algorithms in OpenMC Using the Calculated Benchmark of LEU Assembly and MOX Fuel // Global Nuclear Safety. – 2023. – No. 1(46). – P. 79-91 <http://dx.doi.org/10.26583/gns-2023-01-07>.