

ОПТИМИЗАЦИЯ АЛГОРИТМА ПОИСКА РЕШЕНИЯ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ В ЗАДАЧЕ МЕХАНИКИ ТЕПЛО ВЫДЕЛЯЮЩЕГО ЭЛЕМЕНТА ЯДЕРНОГО РЕАКТОРА

© 2021 г. А. П. Долгодворов*

*Институт проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук,
Москва, 115191, Россия*

**e-mail: alexey.dolgodvorov@ibrae.ac.ru*

Поступила в редакцию 20.12.2020 г.

После доработки 25.02.2021 г.

Принята к публикации 09.03.2021 г.

Неотъемлемой частью моделирования поведения тепловыделяющего элемента (ТВЭЛ) ядерного реактора как на быстрых, так и на тепловых нейтронах в условиях эксплуатации наряду с тепловой задачей является нахождение напряженно-деформированного состояния топливной таблетки и оболочки ТВЭЛ. Система уравнений, описывающая механическое поведение ТВЭЛ, включает в себя помимо деформации упругости, термической деформации и деформации радиационного распухания, также деформацию ползучести как термической, так и радиационной, что делает систему нелинейной относительно переменных межслойных и аксиальных давлений. Решение подобного рода систем уравнений требует эффективных итерационных методов. В работе усовершенствован алгоритм поиска решения для системы нелинейных уравнений механики ТВЭЛ ядерного реактора путем замены метода Гаусса на метод прогонки, адаптированный под вид матрицы линеаризованной системы. Оптимизация дает существенное ускорение при нахождении решения возникающей в задаче системы линейных уравнений: при дискретизации на 10 слоев время расчета сокращается в 10 раз, при дискретизации на 20 слоев – в 100 раз. В итоге время решения нелинейной системы уравнений методом Ньютона сокращается для 10 слоев в 1.3 раза, для 20 слоев – в 2 раза.

Ключевые слова: тепловыделяющий элемент, уравнения механики, метод прогонки

DOI: 10.1134/S2304487X21010053

ВВЕДЕНИЕ

Оптимизация алгоритмов вычислительных кодов является существенной частью их разработки. В особенности оптимизация важна для модулей, обращение к которым в процессе вычисления происходит многократно. При многократном обращении к модулю с более совершенным алгоритмом, при котором затрачивается меньше времени для получения решения, общее время вычисления может значительно сокращаться.

К оптимизациям в решении систем линейных алгебраических уравнений относится замена решения методом Гаусса на методы, построенные по типу прогонки. Классическим примером служит конечно-разностная аппроксимация одномерного уравнения теплопроводности [1, 2]. Вычислительная сложность метода Гаусса составляет $O(M^2)$, где M – размер матрицы. Методы, основанные на прогонке, дают линейную зависимость от размера матрицы, т.е. $O(M)$. Таким образом, если вид матрицы в решаемой задаче позволяет сделать замену метода Гаусса, то усилия, за-

трачиваемые на разработку алгоритма, вполне оправданы, т.к. дают существенное ускорение вычисления.

В настоящей работе рассматривается разработка и анализ метода, основанного на прогонке, при решении уравнений механики для нахождения напряженно-деформированного состояния оболочки ТВЭЛ. Этот вид уравнения решается в таких ТВЭЛных кодах, как, например, в отечественном коде БЕРКУТ [3], или зарубежном коде FINIX [4, 5].

ФОРМУЛИРОВКА МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ЗАДАЧИ И АЛГОРИТМА

Постановка задачи

В данном разделе приводится краткое изложение основных положений модели [3, 6], понимание которых необходимо для описания методов численного решения.

ТВЭЛ рассматривается в виде полого тонкостенного цилиндра, соответствующего оболочке,

и вложенного в него с некоторым зазором сплошного цилиндра, соответствующего топливу. Проводится пространственная дискретизация твэла в осевом направлении на аксиальные ячейки, а также в радиальном направлении для топлива, зазора и оболочки на цилиндрические коаксиальные слои таким образом, что границы топливозазор и зазор-оболочка совпадают с границами слоев. Для каждой аксиальной ячейки формулируется система уравнений механики для топлива или оболочки на основе условия неразрывности перемещений в радиальном направлении и условия обобщенной плоской деформации

$$R_i^{ex} = R_{i+1}^{in}, \quad (1)$$

$$H_i = H_{i+1}, \quad (2)$$

где R_i^{ex} и H_i – внешний радиус и высота слоя i , находящегося под нагрузкой, а R_{i+1}^{in} и H_{i+1} – внутренний радиус и высота слоя $i+1$, находящегося под нагрузкой. Уравнения (1) и (2) рассматриваются для одной заданной аксиальной ячейки. Взаимное влияние соседних аксиальных ячеек осуществляется через давление в зазоре между топливом и оболочкой – 1.5-D подход. Под нагрузкой понимаются наличие давлений теплоносителя и газовой смеси в зазоре, нагрев и распухание, обусловленное делением атомных ядер и сопутствующими термомеханическими явлениями в топливе и оболочке. На основе предположения о малости деформаций размеры нагруженного слоя могут быть выражены через размеры слоя без нагрузки

$$R_i = r_i(1 + \varepsilon_{\theta,i}), \quad (3)$$

$$L_i = l_i(1 + \varepsilon_{r,i}), \quad (4)$$

$$H_i = h_i(1 + \varepsilon_{z,i}), \quad (5)$$

где R_i – радиус середины слоя i под нагрузкой, $R_i = 1/2(R_i^{in} + R_i^{ex})$; L_i – толщина нагруженного слоя i , $L_i = R_i^{ex} - R_i^{in}$; r_i , l_i и h_i – радиус середины разгруженного слоя, его толщина и высота; $\varepsilon_{\chi,i}$, $\chi = r, \theta, z$ – полная деформация. Величина $\varepsilon_{\chi,i}$ включает в себя упругую $\varepsilon_{\chi,i}^{el}$, термическую деформацию $\varepsilon_{\chi,i}^{th}$, радиационное распухание $\varepsilon_{\chi,i}^{sw}$ и деформацию ползучести $d\varepsilon_{\chi,i}^{cr}$

$$\varepsilon_{\chi,i} = \varepsilon_{\chi,i}^{el} + \varepsilon_{\chi,i}^{th} + \varepsilon_{\chi,i}^{sw} + d\varepsilon_{\chi,i}^{cr}. \quad (6)$$

Последнее слагаемое состоит из двух частей: термической деформации ползучести $d\varepsilon_{\chi,i}^{cr-th}$ и радиационной деформации ползучести $d\varepsilon_{\chi,i}^{cr-rd}$, т.е. $d\varepsilon_{\chi,i}^{cr} = d\varepsilon_{\chi,i}^{cr-th} + d\varepsilon_{\chi,i}^{cr-rd}$. Для деформации ползучести использован знак дифференциала, т.к. эта величина зависит от времени.

Деформация упругости связана с напряжениями $\sigma_{\chi,i}$ законом Гука

$$\varepsilon_{r,i}^{el} = \frac{1}{E_i} (\sigma_{r,i} - \nu_i(\sigma_{\theta,i} + \sigma_{z,i})), \quad (7)$$

$$\varepsilon_{\theta,i}^{el} = \frac{1}{E_i} (\sigma_{\theta,i} - \nu_i(\sigma_{r,i} + \sigma_{z,i})), \quad (8)$$

$$\varepsilon_{z,i}^{el} = \frac{1}{E_i} (\sigma_{z,i} - \nu_i(\sigma_{r,i} + \sigma_{\theta,i})), \quad (9)$$

где E_i и ν_i – модуль Юнга и коэффициент Пуассона, определенные для текущей температуры слоя i .

Независимыми переменными, относительно которых решается система уравнений механики (1) и (2), служат межслойные давления P_i и аксиальные давления N_i . Напряжения $\sigma_{\chi,i}$ могут быть выражены через эти переменные на основе соотношений

$$\sigma_{r,i} = -\frac{1}{2}(P_i + P_{i+1}), \quad (10)$$

$$\sigma_{\theta,i} = \frac{P_i r_i^{in} - P_{i+1} r_i^{ex}}{l_i}, \quad (11)$$

$$\sigma_{z,i} = -N_i, \quad (12)$$

где r_i^{in} – внутренний радиус разгруженного слоя i , $r_i^{in} = r_i - 1/2l_i$, а r_i^{ex} – внешний радиус разгруженного слоя i , $r_i^{ex} = r_i + 1/2l_i$. Для каждого слоя вводится собственное обозначение для радиуса внешней и внутренней границ, т.к. в общем случае $r_i^{ex} \neq r_{i+1}^{in}$ из-за различия в накопленных деформациях ползучести в каждом слое.

Деформация ползучести связана с напряжением через уравнение закона течения (для примера приведена деформация термической ползучести, для радиационной ползучести выражение аналогичное)

$$d\varepsilon_{\chi,i}^{cr-th} = \frac{3}{2} A_i^{th} \sigma_{int,i}^{n_i^{th}-1} \delta_{\chi,i} e^{\frac{Q_i^{th}}{RT_i}} \Delta t, \quad (13)$$

где A_i^{th} , Q_i^{th} , n_i^{th} – коэффициенты, R – универсальная газовая постоянная, T_i – температура. Выражение для интенсивности напряжений $\sigma_{int,i}$ имеет вид

$$\sigma_{int,i} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(\sigma_{r,i} - \sigma_{\theta,i})^2 + (\sigma_{\theta,i} - \sigma_{z,i})^2 + (\sigma_{z,i} - \sigma_{r,i})^2}. \quad (14)$$

Девиатор напряжений выражается через компоненты напряжения следующим образом

$$\delta_{\chi,i} = \sigma_{\chi,i} - \sigma_{0,i}, \quad (15)$$

где $\sigma_{0,i}$ – среднее значение компонент напряжений, $\sigma_{0,i} = (\sigma_{r,i} + \sigma_{\theta,i} + \sigma_{z,i})/3$.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	
1	b1	b1	d1	e1										f1
2	a2	b2	c2	d2	e2									f2
3		a3	b3	c3	d3	e3								f3
4			a4	b4	c4	d4	e4							f4
5				a5	b5	c5	d5	e5						f5
6					a6	d6	c6	d6	e6					f6
7						a7	b7	c7	d7	e7				f7
8							a8	d8	c8	d8	e8			f8
9								a9	b9	c9	d9			f9
10									a10	B10	c10			f10
11										a11	b11			f11
12											a12			f12
13	B1	B2	B3	B4	B5	B6	B7	B8	B9	B10	B11			f13

Рис. 1. Вид матрицы линейризованной системы уравнений для числа слоев $m = 7$, ячейки темного цвета соответствуют ненулевым коэффициентам матрицы, ячейки белого цвета – нулевым коэффициентам, ячейки без буквенного обозначения соответствуют коэффициентам, не участвующим в алгоритме, f_i – коэффициенты правой части.

Таким образом, величины $\sigma_{int,i}$ и $\delta_{\chi,i}$ в выражении (13) могут быть вычислены через давления P_i , N_i и P_{i+1} посредством формул (10)–(12). Уравнения (1)–(2) становятся нелинейными уравнениями относительно искомым давлений. Замыкающее уравнение в системе отвечает за равновесное положение в аксиальном направлении. Уравнение для топливной таблетки имеет вид

$$\begin{aligned}
 x_1 &= N_0, \\
 x_2 &= P_1, \\
 x_3 &= N_1, \\
 &\dots, \\
 x_{M-1} &= P_{m-1}, \\
 x_M &= N_{m-1},
 \end{aligned}
 \tag{18}$$

где $M = 2m - 1$ – размер матрицы, а уравнений в системе в следующем порядке

$$\begin{aligned}
 R_0^{ex} &= R_1^{in}, \\
 H_0 &= H_1, \\
 R_1^{ex} &= R_2^{in}, \\
 H_1 &= H_2, \\
 &\dots
 \end{aligned}
 \tag{19}$$

$$2 \sum_{j=0}^{m-1} N_j l_j r_j = \left(\left(r_{m-1} + \frac{1}{2} l_{m-1} \right)^2 - \left(r_0 - \frac{1}{2} l_0 \right)^2 \right) P_{gap}, \tag{16}$$

где $r_0 - \frac{1}{2} l_0$ – радиус центрального отверстия в таблетке, и уравнение для оболочки твэла

$$2 \sum_{j=0}^{m-1} N_j l_j r_j = \left(r_{m-1} + \frac{1}{2} l_{m-1} \right)^2 P_{cool} - \left(r_0 - \frac{1}{2} l_0 \right)^2 P_{gap},$$

где m – число слоев, на которые разбита топливная таблетка или оболочка, нумерация слоев для удобства берется с 0. Величины P_{gap} и P_{cool} – давления в зазоре между топливом и оболочкой и в теплоносителе.

для примера система уравнений взята для оболочки, схематическое изображение матрицы примет вид (рис. 1).

Первым шагом осуществляется обнуление коэффициентов A_i , $i = 2, \dots, m - 1$ (рис. 1)

Описание алгоритма

Рассмотренная система уравнений является нелинейной. Для ее решения используется метод Ньютона. На каждой итерации выполняется линейризация системы с подстановкой последнего найденного приближения. В данной работе рассматривается алгоритм решения линейризованной системы уравнений. При расположении переменных представленным образом

$$a_{2i} = a_{2i}^* - b_{2i-1} \frac{A_i}{a_{2i-1}}, \tag{20}$$

$$b_{2i} = b_{2i}^* - c_{2i-1} \frac{A_i}{a_{2i-1}}, \tag{21}$$

$$c_{2i} = c_{2i}^* - d_{2i-1} \frac{A_i}{a_{2i-1}}, \tag{22}$$

$$d_{2i} = d_{2i}^* - e_{2i-1} \frac{A_i}{a_{2i-1}}, \tag{23}$$

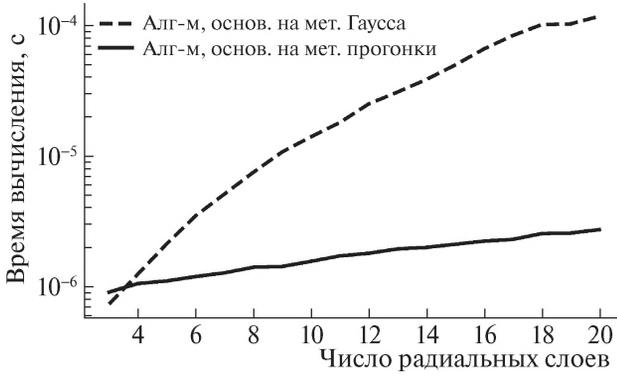


Рис. 2. Зависимость времени решения линеаризованной системы уравнений от числа радиальных слоев.

$$f_{2i} = f_{2i}^* - f_{2i-1} \frac{A_i}{a_{2i-1}}, \quad (24)$$

где f_{2i} — четные элементы правой части. Далее выполняется обнуление коэффициентов нижней строки B_i , где $i = 1, \dots, M-4$

$$B_{i+1}^* = B_{i+1} - b_{i+1} \frac{B_i}{a_{i+1}}, \quad (25)$$

$$B_{i+2}^* = B_{i+2} - c_{i+1} \frac{B_i}{a_{i+1}}, \quad (26)$$

$$B_{i+3}^* = B_{i+3} - d_{i+1} \frac{B_i}{a_{i+1}}, \quad (27)$$

$$B_{i+4}^* = B_{i+4} - e_{i+1} \frac{B_i}{a_{i+1}}, \quad (28)$$

$$f_M^* = f_M - f_{i+1} \frac{B_i}{a_{i+1}}, \quad (29)$$

где $i = 1, \dots, M-4$. При $i = M-3$, последовательность преобразований будет аналогичной, за исключением отсутствия уравнения (28), т.к. коэффициент e_{i+1} выходит за пределы матрицы. Аналогично для случая $i = M-2$, где будут отсутствовать уравнения (27) и (28). После переименования коэффициентов $a_M = B_{M-1}^*$ и $b_M = B_M^*$ осуществляется прямой ход прогонки

$$c_i' = \frac{c_i}{b_i}, \quad d_i' = \frac{d_i}{b_i}, \quad e_i' = \frac{e_i}{b_i}, \quad f_i' = \frac{f_i}{b_i}, \quad (30)$$

$$c_i' = \frac{c_i - a_i d_{i-1}}{b_i - a_i c_{i-1}}, \quad (31)$$

$$d_i' = \frac{d_i - a_i e_{i-1}}{b_i - a_i c_{i-1}}, \quad (32)$$

$$e_i' = \frac{e_i}{b_i - a_i c_{i-1}}, \quad (33)$$

$$f_i' = \frac{f_i - a_i f_{i-1}}{b_i - a_i c_{i-1}}, \quad (34)$$

где $i = 2, \dots, M$. Формулы для обратной прогонки, приводящие к решению системы уравнений, имеют вид

$$x_M = f_M, \quad (35)$$

$$x_{M-1} = f_{M-1} - x_M c_{M-1}', \quad (36)$$

$$x_{M-2} = f_{M-2} - x_{M-1} c_{M-2}' - x_M d_{M-2}', \quad (37)$$

$$x_i = f_i - x_{i+1} c_i' - x_{i+2} d_i' - x_{i+3} e_i', \quad i = M-3, \dots, 1. \quad (38)$$

Искомые давления равны: $N_0 = x_1$, $P_i = x_{2i}$ и $N_i = x_{2i+1}$, где $i = 1, \dots, m-1$.

Алгоритм работает для числа слоев m , начиная с 3. Алгоритм дает следующее число операций с плавающей точкой *FLOP*

$$FLOP = 69m - 99, \quad (39)$$

где $m > 2$.

АНАЛИЗ ВРЕМЕНИ ПОИСКА РЕШЕНИЯ

На рис. 2 представлена зависимость времени поиска решения от числа радиальных слоев m . Расчет для каждого фиксированного значения m проводился 100 раз, затем бралось среднее время вычисления. Из рис. 2 видно, что при малых величинах m использование алгоритма, основанного на методе прогонки, неэффективно. Но с ростом числа слоев выигрыш во времени становится заметным, достигая величины примерно в два порядка при $m = 20$. Обычно для моделирования напряженно-деформированного состояния твэла производится пространственная дискретизация топливной таблетки на 20 слоев, оболочки — на 10 слоев.

Ниже приводится анализ времени нахождения решения нелинейной системы уравнений, где решение линеаризованной системы уравнений на каждой итерации осуществляется либо методом Гаусса, либо методом, основанном на прогонке. Для тестовой задачи выполняется расчет напряженно-деформированного состояния оболочки из циркониевого сплава Э110, на временном шаге 1 час, при давлении в зазоре между топливом и оболочкой 2 МПа и давлении теплоносителя 16 МПа. Для увеличения эффекта нелинейности, за который отвечает термическая ползучесть, была взята завышенная температура 1373 К, которая не характерна для нормальной эксплуатации реактора типа ВВЭР. При этих условиях метод Ньютона сходится за 4 итерации. Было проведено 300 расчетов для каждого фиксированного значения m , после чего было рассчитано среднее время. Зависимость времени расчета для двух сравниваемых алгоритмов представлена на рис. 3.

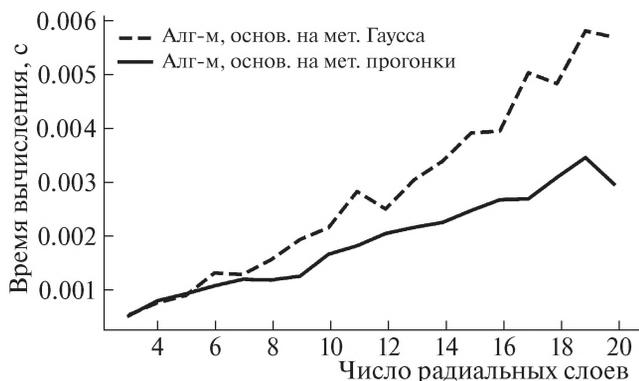


Рис. 3. Зависимость времени решения нелинейной системы уравнений от числа радиальных слоев.

Из рис. 3 видно, что при $m = 10$ время решения нелинейной системы сокращается чуть менее чем в 1.5 раза, при $m = 20$ – примерно в 2 раза. Большая часть вычислений при поиске решения нелинейной системы уравнения тратится на нахождение коэффициентов, зависящих от деформаций термической ползучести, формировании матрицы на каждой итерации и т.п. В связи с этим, сокращение времени нахождения решения линеаризованной системы на порядки приводит к общему сокращению времени расчета в разы.

ВЫВОДЫ

Анализ вида матрицы, соответствующей линеаризованной системы уравнений, возникающей при решении нелинейной системы уравнений для нахождения напряженно-деформированного состояния твэла, позволил разработать алгоритм, основанный на методе прогонки. Время решения

линеаризованной системы уравнений рассматриваемым методом сокращается более чем на порядок при числе радиальных слоев более 10 по сравнению с методом Гаусса. При этом время решения нелинейной системы сокращается примерно в 1.3 раза для 10 радиальных слоев и примерно в 2 раза для 20.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Калиткин Н.Н.* Численные методы. М.: Наука, 1978.
2. *Самарский А.А., Гулин А.В.* Численные методы. М.: Наука, 1989
3. *Boldyrev A.V., Chernov S.Yu., Dolgodvorov A.P., Dolinsky I.O., Ozrin V.D., Tarasov V.I.* BERKUT – Best Estimate Code for Modelling of Fast Reactor Fuel Rod Behaviour under Normal and Accidental Conditions. Proc. Int. Conf. on Fast Reactors and Related Fuel Cycles (FR17), Paper IAEA-CN-245-363. Ekaterinburg, 2017.
4. *Ikonen T., Loukusa H., Syrjälähti E., Valtavirta V., Lepänen J., Tulkki V.* Module for thermomechanical modeling of LWR fuel in multiphysics simulations. Annals of Nuclear Energy. 2015. V. 84. P. 111–121.
5. *Loukusa H., Valtavirta V.* FINIX – Fuel behavior model and interface for multiphysics applications – Code documentation for version 0.17.12 RESEARCH REPORT VTT-R-06793-17.
6. *Болдырев А.В., Беликова Г.В., Венрев Д.П. и др.* Усовершенствованная версия твэльного кода БЕРКУТ, моделирующего поведение в быстрых реакторах твэла с нитридным и оксидным топливом. Учебная версия 1.0 БЕРКУТ-У/Е1.0 Учебное пособие, Издание 3-е, исправленное и дополненное, Москва, 2020.

Vestnik Natsional'nogo issledovatel'skogo yadernogo universiteta "MIFI", 2021, vol. 10, no. 1, pp. 41–46

Optimization of an Algorithm for Search for the Solution of the System of Equations in the Nuclear Reactor Fuel Rod Mechanics Problem

A. P. Dolgodvorov[#]

Nuclear Safety Institute, Russian Academy of Sciences, Moscow, 115191 Russia

[#]e-mail: alexey.dolgodvorov@ibrae.ac.ru

Received December 20, 2020; revised February 25, 2021; accepted March 9, 2021

Abstract—An essential part of the simulation of the behavior of a fuel rod for fast-neutron and thermal-neutron nuclear reactors is finding the stress–strain state of the fuel pellet and the fuel rod cladding in addition to the thermal problem. The system of equations that describes the fuel rod mechanical behavior includes not only the elastic strain, thermal strain, and radiation swelling strain but also thermal and radiation creep strain that makes the system of equations nonlinear with respect to the interlayer and axial pressure variables. The

solution of that kind of equations demands effective iteration methods. In this work, the algorithm for search for the solution of the system of nonlinear equations of nuclear fuel rod mechanics has been advanced by replacing the Gauss elimination method with the sweep method adapted to the matrix type of the linearized system. Optimization gives substantial acceleration in finding the solution of the system of linear equations that is raised in the problem: the discretization computational time at 10 and 20 layers decreases by one and two orders of magnitude, respectively. As a result, the time of finding the solution of the nonlinear system of equations by the Newton method for 10 and 20 layers decreases by a factor of 1.3 and 2, respectively.

Keywords: fuel rod, equations of mechanics, sweep computational method

DOI: 10.1134/S2304487X21010053

REFERENCES

1. Kalitkin N.N. *Chislenniye metody* [Numerical methods]. Moscow, “Nauka”, 1978.
2. Samarskiy A.A., Gulin A.V. *Chislenniye metody* [Numerical methods]. Moscow, “Nauka”, 1989.
3. Boldyrev A.V., Chernov S.Yu., Dolgodvorov A.P., Dolinsky I.O., Ozrin V.D., Tarasov V.I. BERKUT – Best Estimate Code for Modelling of Fast Reactor Fuel Rod Behaviour under Normal and Accidental Conditions. *Proc. Int. Conf. on Fast Reactors and Related Fuel Cycles (FR17)*, Paper IAEA-CN-245-363, Ekaterinburg, 2017.
4. Ikonen T., Loukusa H., Syrjälähti E., Valtavirta V., Leppänen J., Tulkki V. Module for thermomechanical modeling of LWR fuel in multiphysics simulations. *Annals of Nuclear Energy*, 2015, vol. 84, pp. 111–121.
5. Loukusa H., Valtavirta V. *FINIX – Fuel behavior model and interface for multiphysics applications – Code documentation for version 0.17.12 RESEARCH REPORT VTT-R-06793-17*.
6. Boldyrev A.V., Belikova G.V., Veprev D.P., etc. *Usovershenyvannaya versia tvelnogo koda BERKUT, modeliruyushchego povedenie v bystryh reaktorah tvela s nitridnym i oxidnym toplivom. Uchebnaya versiya 1.0 BERKUT-U/E1.0* [Advanced version of the fuel performance code BERKUT modeling fuel rod behavior in fast-neutron reactors with the nitride and oxide fuel. Training version 1.0 BERKUT-U/E1.0]. Textbook, 3rd edition, revised and expanded, Moscow, 2020.