



Agenzia Nazionale per le Nuove Tecnologie,
l'Energia e lo Sviluppo Economico Sostenibile



Ministero dello Sviluppo Economico

RICERCA DI SISTEMA ELETTRICO

Studio dei codici "stato dell'arte" di neutronica per reattori termici

P. Console Camprini, D. Mostacci, M. Sumini, F. Teodori



STUDIO DEI CODICI "STATO DELL'ARTE" DI NEUTRONICA PER REATTORI TERMICI

P. Console Camprini, D. Mostacci, M. Sumini, F. Teodori

Novembre 2011

Report Ricerca di Sistema Elettrico

Accordo di Programma Ministero dello Sviluppo Economico – ENEA

Area: Governo, gestione e sviluppo del sistema elettrico nazionale

Progetto: Fissione nucleare: metodi di analisi e verifica di progetti nucleari di generazione evolutiva ad acqua pressurizzata

Responsabile Progetto: Massimo Sepielli, ENEA

Titolo

Studio dei codici "stato dell'arte" di neutronica per reattori termici

Ente emittente CIRTEN – Università di Bologna

PAGINA DI GUARDIA

Descrittori**Tipologia del documento:****Collocazione contrattuale:** ACCORDO DI PROGRAMMA Ministero dello Sviluppo Economico – ENEA sulla Ricerca di Sistema Elettrico PIANO ANNUALE DI REALIZZAZIONE 2010 Progetto 1.3.2.a: Fissione nucleare; Metodi di analisi e verifica di progetti nucleari di generazione evolutiva ad acqua pressurizzata.**Argomenti trattati:** Neutronica, Reattori nucleari ad acqua, Software**Sommario**

Una valutazione dei codici di calcolo deterministici utilizzabili per la modellizzazione dei reattori ad acqua (e con efficacia comparabile con i codici Monte Carlo che sembrano essere divenuti uno standard di riferimento) deve prendere in considerazione non solo la capacità di affrontare il tema della descrizione di strutture fortemente eterogenee, ma anche aspetti prettamente computazionali, quali in particolare la portabilità in ambiente massicciamente parallelo, unica via per raggiungere l'obiettivo in modo competitivo. Questo criterio di analisi porta ad individuare alcuni codici su cui in questi anni si è molto investito in termini di efficacia di programmazione e di implementazione di tecniche numeriche avanzate.

Note

Allegato B al Deliverable PAR2010-CIRTEN-LD1-028
Riferimento: CERSE-UNIBO RL 1002/2011

Autori: P. Console Camprini, D. Mostacci, M. Sumini, F. Teodori

Copia n.**In carico a:**

2			NOME			
			FIRMA			
1			NOME			
			FIRMA			
0	EMISSIONE	05/12/11	NOME	G. Grasso	P. Meloni	M. Sepielli
			FIRMA			
REV.	DESCRIZIONE	DATA	CONVALIDA	VISTO	APPROVAZIONE	



CIRTEN

Consorzio Interuniversitario per la Ricerca Tecnologica Nucleare

UNIVERSITA' Di BOLOGNA

Dipartimento di Ingegneria Energetica, Nucleare e del Controllo Ambientale

DIENCA

Progetto 1.3.2.a "Fissione nucleare: Metodi di analisi e verifica di progetti nucleari di generazione evolutiva alimentati ad acqua pressurizzata"

**Obiettivo 5.2 – Attività D.1 - Studio dei codici "stato dell'arte"
di neutronica per reattori termici**

Autori

UNIBO : **Patrizio Console Camprini**
 Domiziano Mostacci
 Marco Sumini
 Francesco Teodori

BOLOGNA, NOVEMBRE 2011

CERSE-UNIBO RL 1002/2011

Lavoro svolto in esecuzione dell'Obiettivo 5.2 Attività D1
AdP MSE-ENEA sulla Ricerca di Sistema Elettrico
Piano Annuale di Realizzazione 2010 Progetto 1.3.2.a "Fissione nucleare: Metodi di analisi e verifica di progetti nucleari di generazione evolutiva alimentati ad acqua pressurizzata"

Indice

1	Introduzione.....	5
1.1	Strumenti per il calcolo neutronico dei reattori ad acqua.....	5
1.2	Capacita' di calcolo	6
1.3	Obiettivi.....	7
2	DENOVO (SCALE 6.1).....	8
3	PARTISN	10
4	PENTRAN™.....	12
5	ATTILA™.....	14
6	APOLLO	17
7	Conclusioni.....	17
8	Bibliografia essenziale	18

1 INTRODUZIONE

1.1 Strumenti per il calcolo neutronico dei reattori ad acqua

La verifica della letteratura e della disponibilit  di codici neutronici di progetto per i reattori ad acqua, deterministici, cioe' basati sulla mappatura di un domiio discreto dell'equazione del trasporto per i neutroni, ha consentito di definire i termini di un "challenge" ancora effettivo, vale a dire l'assenza a oggi di strumenti di calcolo integrato ("approccio olistico") in grado di consentire in modo efficace e "user-friendly" la simulazione dinamica di strutture moltiplicanti fortemente eterogenee, come appunto un reattore nucleare.

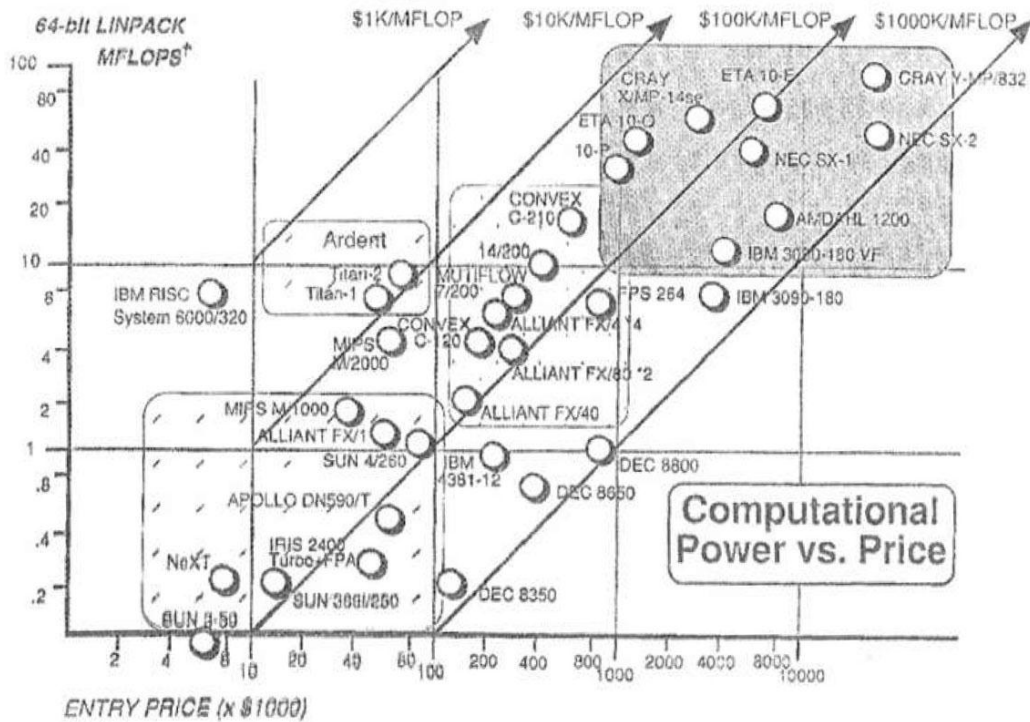
La necessit  di integrazione con le librerie di dati nucleari, solo parzialmente standardizzate, il cui utilizzo richiede strumenti di messa a punto specifici per ogni codice, la difficile integrazione con codici fluidodinamici-termoidraulici caratterizzati da necessit  di discretizzazione su uno spazio delle fasi radicalmente diverse, l'ambizione conseguente di un inquadramento del problema in codici "multiphysics" (es. COMSOL [...]) fanno si che di fatto, come dimostrano le soluzioni adottate in alcuni tipici simulatori commerciali (vedi ad esempio [ORCHID...]), si sia ancora lontani dalla soluzione.

In questo lavoro verranno analizzati alcuni strumenti di calcolo comunque disponibili a livello di librerie di codici e dati (rif.: Radiation Safety Information Computational Center, RSICC-ORNL, Nuclear Energy Agency, OECD-NEA Data Bank) e verr  dato conto anche di alcuni strumenti di tipo commerciale il cui costo di utilizzo, come prima si accennava, dipende praticamente in misura inferiore dalla licenza rispetto ai costi di realizzazione e messa a punto delle opportune librerie di dati nucleari. Questa, d'altra parte, e' una delle ragioni per cui ci si affida sempre piu' spesso a codici di tipo Monte Carlo che, per loro natura, sono piu' facilmente in grado di gestire direttamente le librerie "grezze" o preparabili con poca fatica.

Se ci e' consentito un parere di natura "politico-strategica", e' un fatto che negli ultimi dieci anni abbiamo assistito ad un venir meno in larga misura di quella comunit  scientifica internazionale di interessi per lo sviluppo e soprattutto la condivisione di strumenti di calcolo adeguati: i progetti attualmente in vita sono relativamente pochi, spesso fortemente vincolati in fase di diffusione (EU, USA), caratterizzati da una forte polarizzazione su pochi soggetti, piu' per ragioni economiche che di tipo scientifico.

1.2 Capacita' di calcolo

Se i codici sono un aspetto del problema, l'altro e' costituito dall'evoluzione della capacita' di calcolo disponibile, pensata in funzione dell'obiettivo del cosiddetto approccio "olistico" cui prima si accennava. In figura 1 e' riportata l'immagine classica (1990, J. Dongarra) sull'ipotesi dell'evoluzione della potenza di calcolo:



† source: J. Dongarra; University of Tennessee (Tech. Report CS-89-85, Jan 90)

Figura 1. Il riferimento attuale e' il PetaFlop, quindi nove ordini di grandezza in vent'anni.

In Figura 2 e' riportata un'immagine della macchina JAGUAR da 1.64 PF press oil National Center for Computational Science di Oak Ridge.



Figura 2. JAGUAR, 1.64 PF Cray XT con 45376 processori Quad-Core e 362 TB di memoria.

Dal punto di vista nazionale, il nostro riferimento locale e' il CINECA, costantemente e storicamente inserito nelle piattaforme europee DEISA (Distributed European Infrastructure for Supercomputing Applications), DEISA2, PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe), European Technology Platform, ecc., che dispone attualmente macchine di potenza di calcolo di un ordine di grandezza inferiore.

Cio' che emerge, comunque, e' che un aspetto cruciale diventa quello dell'utilizzabilità della potenza di calcolo disponibile, e quindi della parallelizzabilità effettiva di metodi e necessità di accesso alle strutture dati.

1.3 Obiettivi

Nostro obiettivo e' dunque quello di chiarire le potenzialità e le prospettive di alcuni degli strumenti di calcolo attualmente a disposizione. Un buon quadro di riferimento e' costituito dai benchmark periodicamente lanciati dalla OECD-NEA.

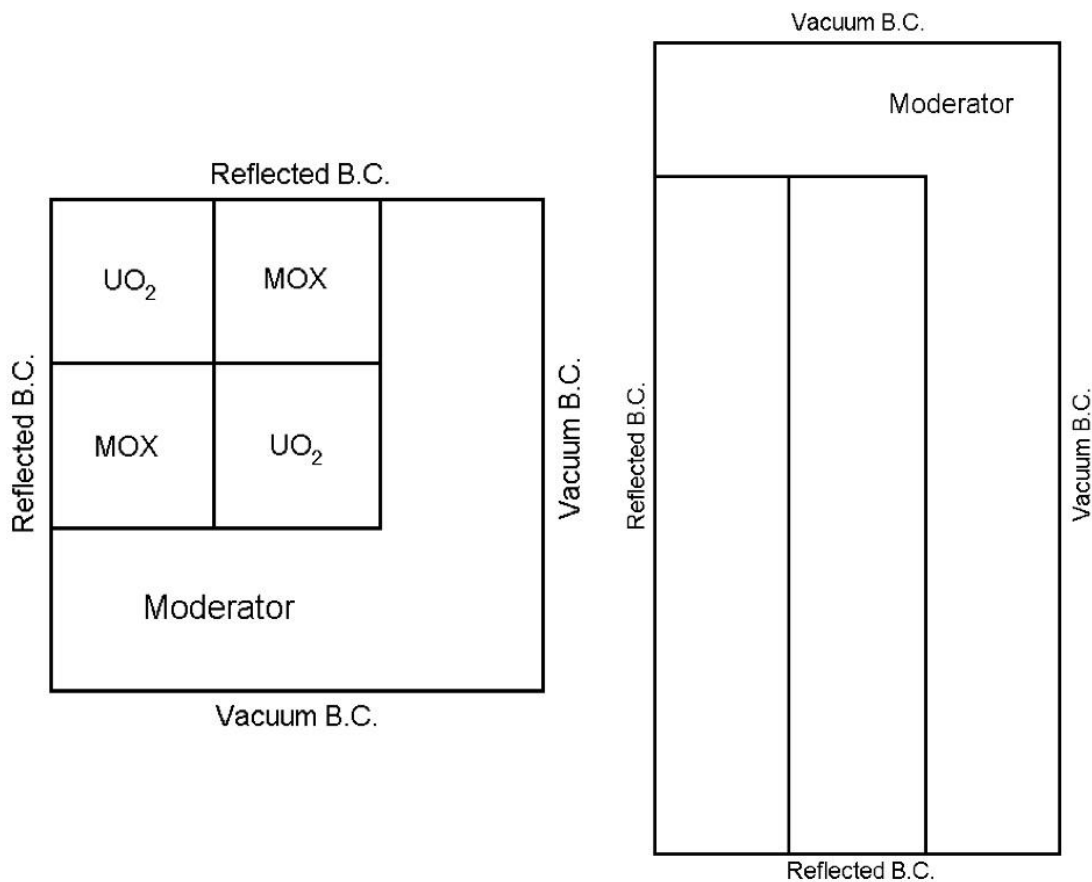


Figura 3. Geometria del benchmark C5 NEA.

Code names	Angular approximation	Spatial approximation
CRONOS2-SN	Discrete ordinates	Finite element method
TORT-GRS	Discrete ordinates	Cartesian finite differences, linear spatial differencing
THREEDANT	Discrete ordinates	Spatial Cartesian mesh with linear spatial differencing
DeCART	Method of characteristics-2-D diffusion-1-D	Flat source arbitrary spatial mesh
CRX	Method of characteristics-2-D S_N -1-D	Flat source arbitrary spatial mesh
MCCG3D	Method of characteristics	QSD-Linear arbitrary spatial mesh
UNKGRO	Method of characteristics with stochastic rays	Flat source arbitrary spatial mesh
VARIANT-SE	Nodal spherical harmonics	Finite element method
PARTISN	Discrete ordinates	Spatial Cartesian mesh, diamond differencing
ATTILA	Discrete ordinates	Unstructured tetrahedral mesh with linear discontinuous spatial differencing
TORT-ORNL	Discrete ordinates	Cartesian finite differences, linear spatial differencing

Figura 4. Tabella dei codici partecipanti al benchmark C5.

Uno, in modo particolare, e' il benchmark internazionale bandito dall'Expert Group on 3-D Radiation Transport Benchmark, sezioni d'urto ottenute dal codice basato sulla probabilità di collisione DRAGON, proposto nel marzo 2001, concluso in due fasi, 2003 e 2005.

Il cosiddetto C5 e' a tutt'oggi un test di riferimento finalizzato soprattutto alla validazione di codici rispetto alla modellizzazione 3-D senza omogenizzazione spaziale.

2 DENOVO (SCALE 6.1)

SCALE (ORNL) giunto alla versione 6.1, e' ormai un sistema di codici multi-piattaforma (Windows, MAC, Linux) gia' predisposto per una minima parallelizzazione (8 processori), contiene al suo interno un modulo di trasporto deterministico (DENOVO) in realtà non pensato "per se", ma piuttosto ai fini di un opportuno bias di un codice MC (MONACO). Di fatto tuttavia DENOVO, complementato da un altro modulo SCALE, MAVRIC, sta acquisendo vita propria per calcoli neutronici (vedi Figura 5). DENOVO e' destinato a sostituire TORT come codice di riferimento presso l'ORNL. La filosofia di parallelizzazione prevede una decomposizione in energia e uno 'sweep' bi-dimensionale.

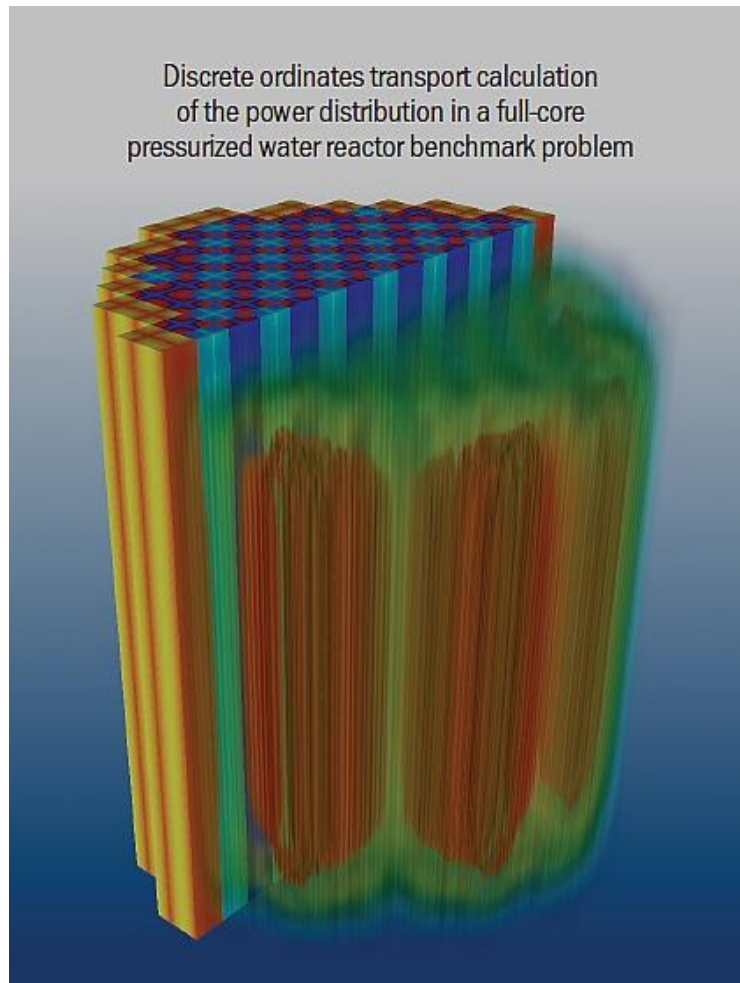


Figura 5. Immagine relativa ad un'applicazione indipendente (cioè non 'al servizio' di SCALE) DENOVO effettuata sul Jaguar XT5 all'ORNL.

	k_{eff}	Relative Error (%)
Reference MCNP	1.183810 ± 0.00008	
SCALE/KENO-V.a	1.183780 ± 0.00002	-0.002
Denovo	1.186430 ± 0.00004	0.219

Figura 6. Benchmark C5, autovalore.

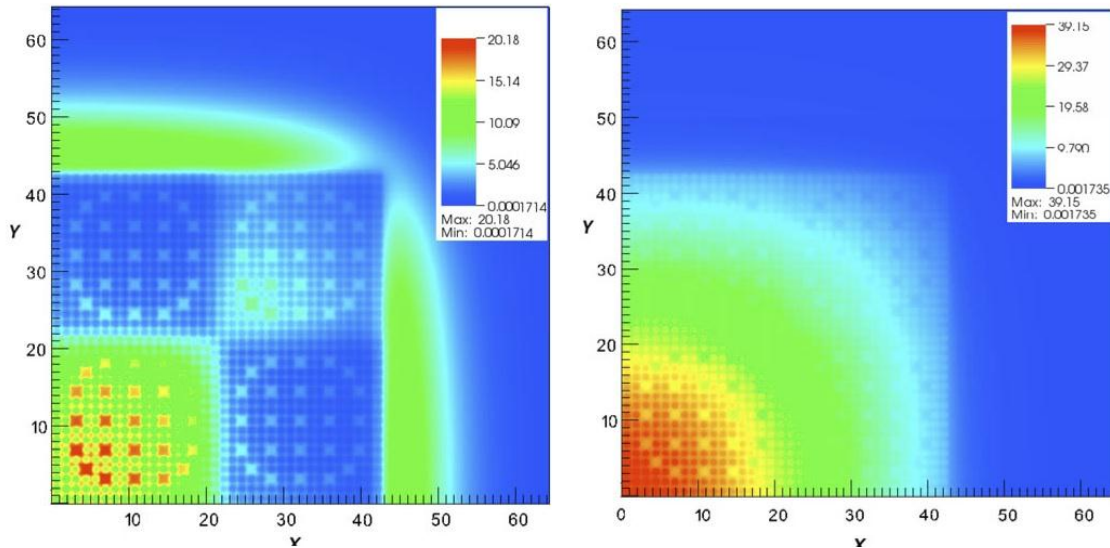


Figura 7. Flussi termico e veloce, Benchmark C5.

3 PARTISN

Il codice PARAllel Time Dependent SN, PARTISN, (rif. 5.97 CCC-0760/01 A nel data base OECD-NEA/RSICC), successore del sistema CCC-547/DANTSYS, giunto alla versione 5.97, e' un codice deterministico multidimensionale per l'equazione del trasporto (2-D o 3-D, sia in geometria cartesiana, sia in geometria cilindrica (r-z-theta), alti ordinidi anisotropia dello scattering, condizioni al contorno di vuoto, riflessione, periodiche, di sorgente, ...), multigruppo, alle ordinate discrete, anche con dipendenza temporale ed anche con sezioni d'urto variabili nel tempo. La possibilità di parallelizzazione e' implementata grazie ad una decomposizione spaziale bidimensionale ed uno schema MPI. Schema di input classico (FIDO) o sue varianti. Il codice necessita di librerie di sezioni d'urto secondo lo schema (ANISN) ISOTXS (file binario ordinato per isotopi) o GRUPXS (file binario ordinato per gruppi). Il codice e' stato utilizzato in vari benchmark NEA. In qualche misura e' il predecessore/competitor di ATTILA™ e PENTRAN™ come si evince dai risultati dei due benchmark NEA sui MOX.

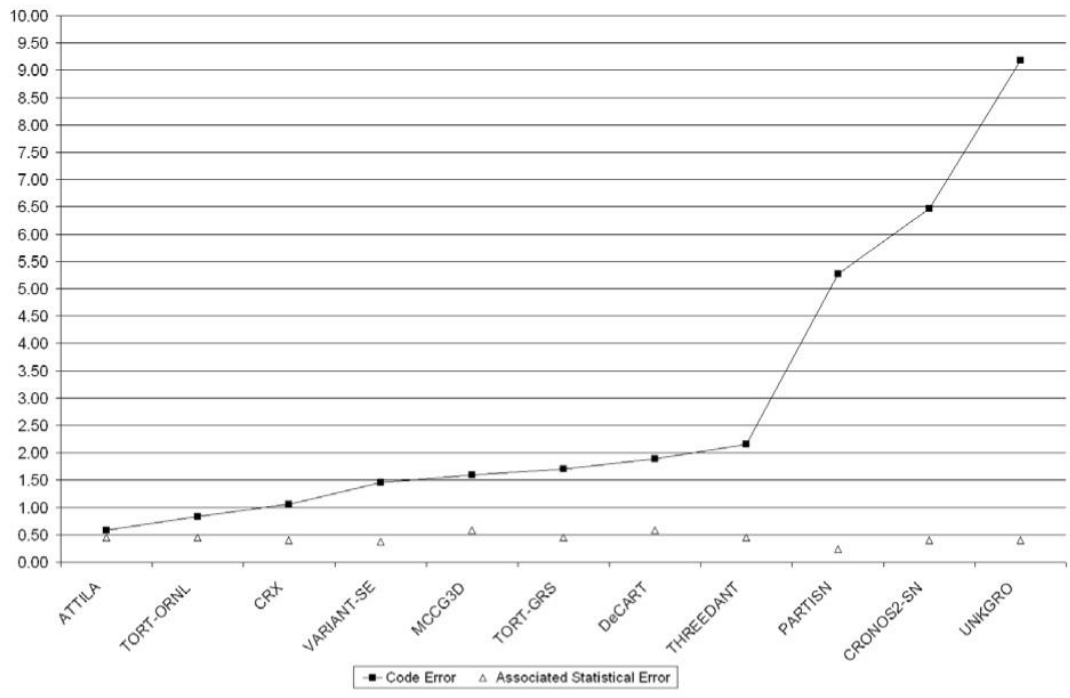


Figura 8. Risultato del benchmark 2D-3D MOX. Errore percentuale massimo sulla potenza della pin.

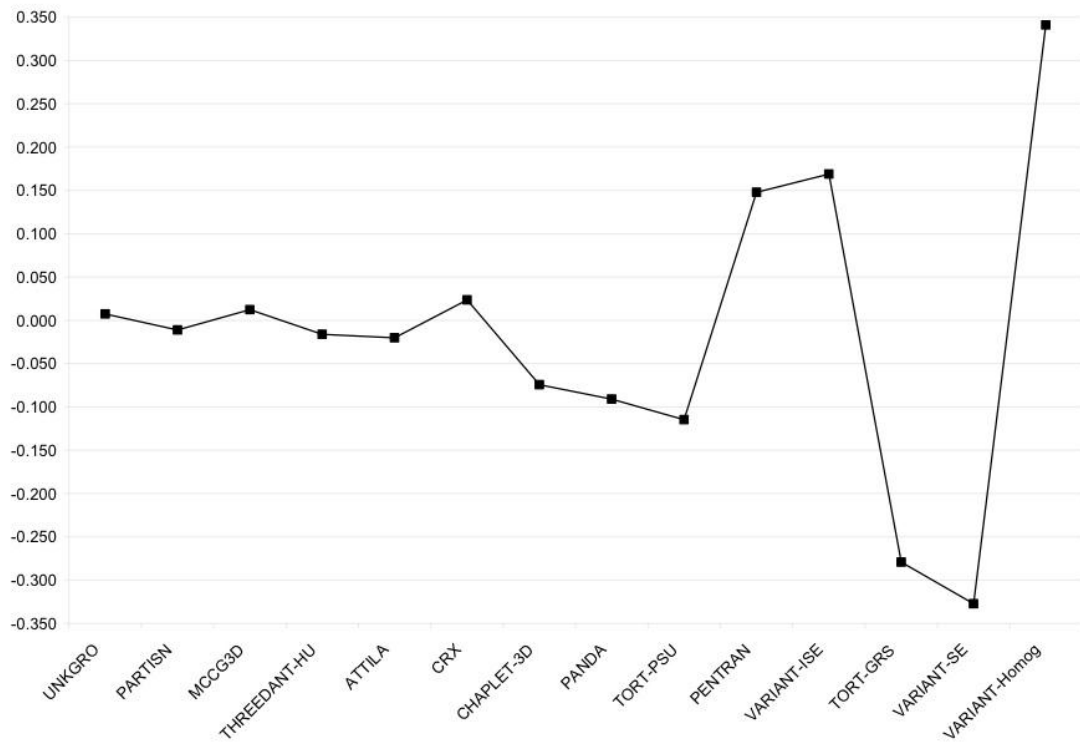


Figura 9. Risultato del benchmark MOX 3D extended. Errore percentuale sull'autovalore a barra di controllo estratta.

4 PENTRAN™

PENTRAN™, e' un codice scritto in FORTRAN-90, nato nel 1996 ed attualmente e' un codice commerciale (HSW Technologies LLC). Puo' essere considerato l'erede di codici classici, quali TWOTRAN-II, THREEDANT, DORT e TORT. Testato su macchine parallele (IBM, CRAY) e su cluster di PC (classe "Beowulf" : piccole reti di PC con BSD, Linux o Solaris). Inizialmente sviluppato per dimostrare la scalabilità di un codice di trasporto in 3-D e quindi progettato esplicitamente per un ambiente di calcolo parallelo in termini di strategie di decomposizione del problema, load balancing, ecc. Utilizza il metodo delle Ordinate discrete. Nel dettaglio risolve iterativamente il problema in 3-D, multigruppi e con scattering anisotropo approssimato mediante i polinomi di Legendre, con approssimazione S_n rispetto alla quadratura angolare, simmetrizzata. Utilizza in input il sistema input FIDO free format, condizioni al contorno di vuoto o con riflessione. Possibilita' di sorgenti piane o volumetriche, flusso incidente variabile in spazio, angolo ed energia. Mesh variabili, tecniche di accelerazione numerica (direzioni alternate, ecc.). Utilizza librerie MPI. E' stato utilizzato in vari benchmark. Gli autori citano espressamente il benchmark effettuato sul reattore test VENUS-3 dell'SCH, il benchmark Kobayashi 3-D ed il benchmark numerico 'TIEL' messo a punto da B. Ganapol. Da citare anche il riferimento 'classico' del benchmark NEA sui MOX.

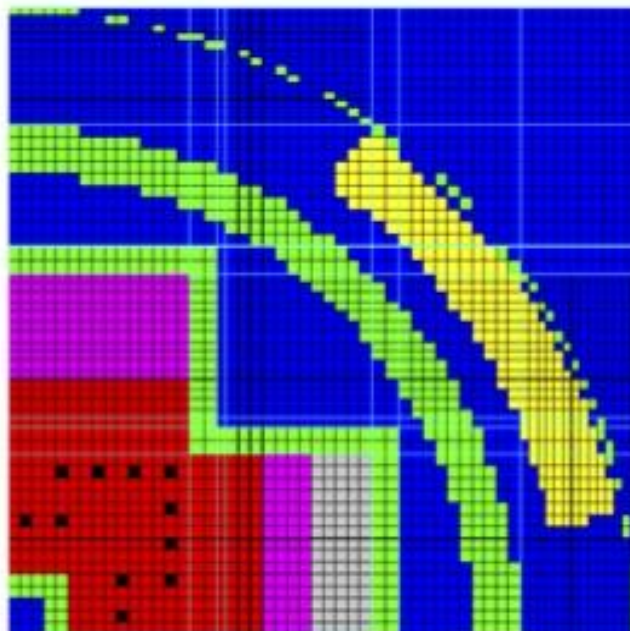


Figura 10. Modellizzazione PENTRAN per VENUS-3.

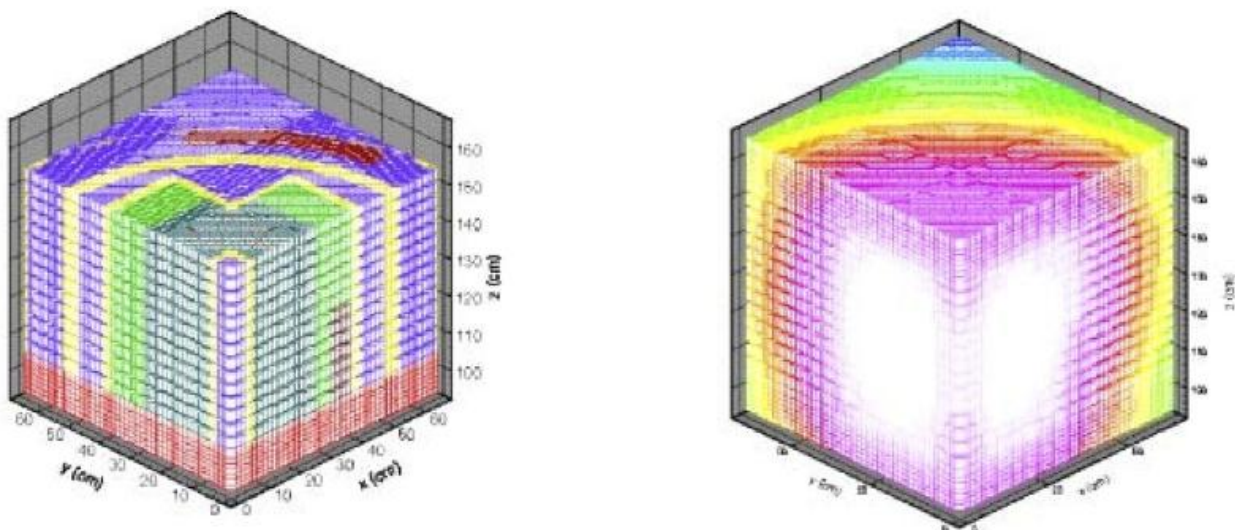


Figura 11. A sinistra la geometria discretizzata, 85.000 celle, 26 gruppi energetici, P3-S8 ordinate discrete. A destra la distribuzione di potenza. Tempo di calcolo 1.4 ore su un IBM-SP2 con 32 processori.

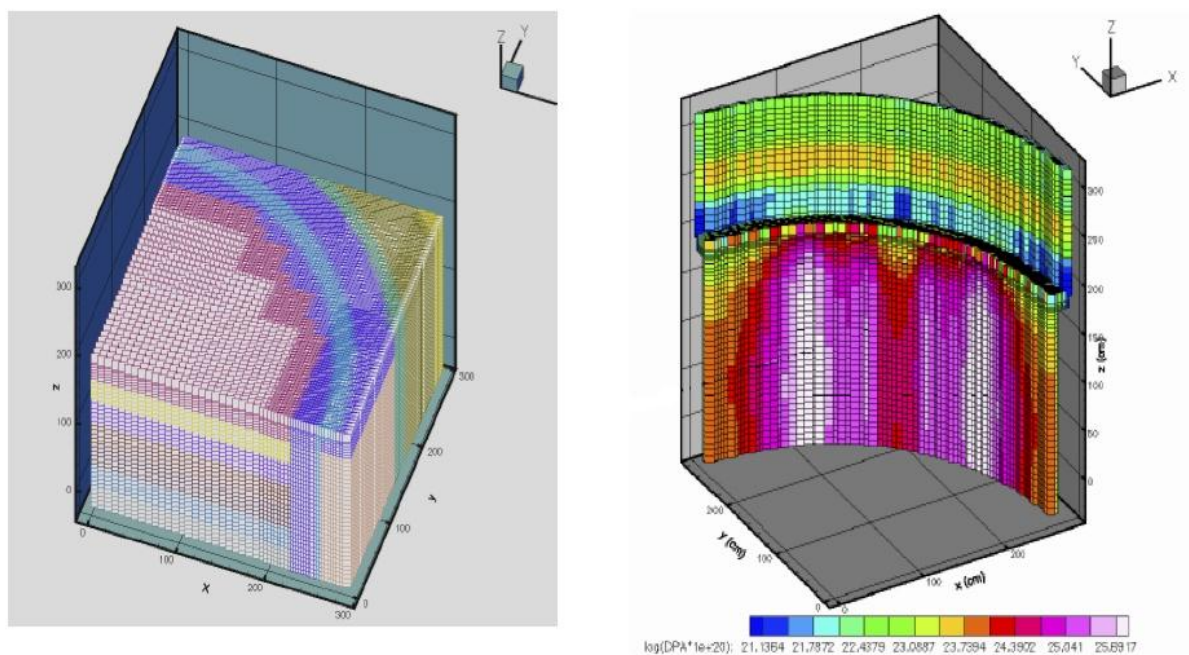


Figura 12. Simulazione di un reattore BWR completo dettagli impiantistici (Core Shroud, baffles, jet pumps, grado di vuoto, ecc.). Tempo di calcolo richiesto : 12 ore su IBM-SP2 con 48 processori.

Case	No. of Directions	No. of Processors	Domain Decomposition (A/G/S) ¹	Wall-Clock time per iteration (s)
1	24	6	1/1/6	30.12
2	48	12	1/1/12	33.28
3	80	24	4/1/6	29.52
4	169	48	8/1/6	36.12

Figura 13. Performances nel caso di simulazione del BWR.

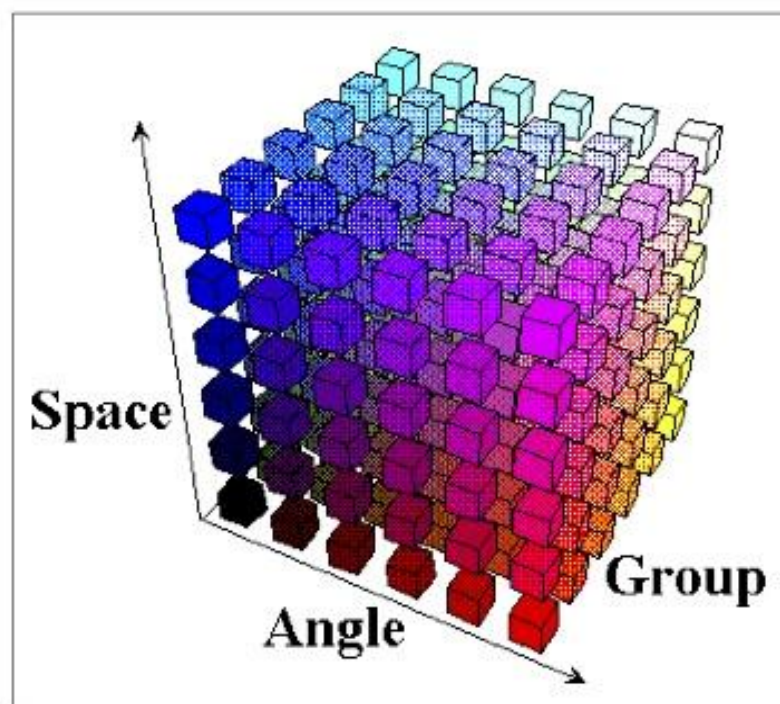


Figura 14. Matrice dei processi di parallelizzazione.

5 ATTILA™

ATTILA™ e' un codice, inizialmente sviluppato a Los Alamos ma ora commerciale, (Transpire, Inc., Gig Harbor, WA) agli elementi finiti in grado di simulare in ambito ordinate discrete il trasporto di particelle neutr e cariche in geometria 3-D, interfacciandosi con input di origine CAD (Solid Works, Pro/Engineer, ecc.). Utilizza elementi finiti bilineari in 2-D, e lineari in 3-D, utilizzando per la creazione della griglia ICEM CFD Engineering Quad.

Il codice e' attualmente (come strumento di validazione indipendente) utilizzato per le verifiche di licensing della Canadian Nuclear Safety Commission (CNSC) dal punto di vista dell'applicazione a diversi tipi di reattori (CANDU, LWR, reattori di ricerca). E' stato ad esempio pubblicato un lavoro su un benchmark relativo ad un PWR Westinghouse con MOX con un confronto ATTILA™/MCNP.

Vengono anche riportate alcune figure relative al test NEA Venus.

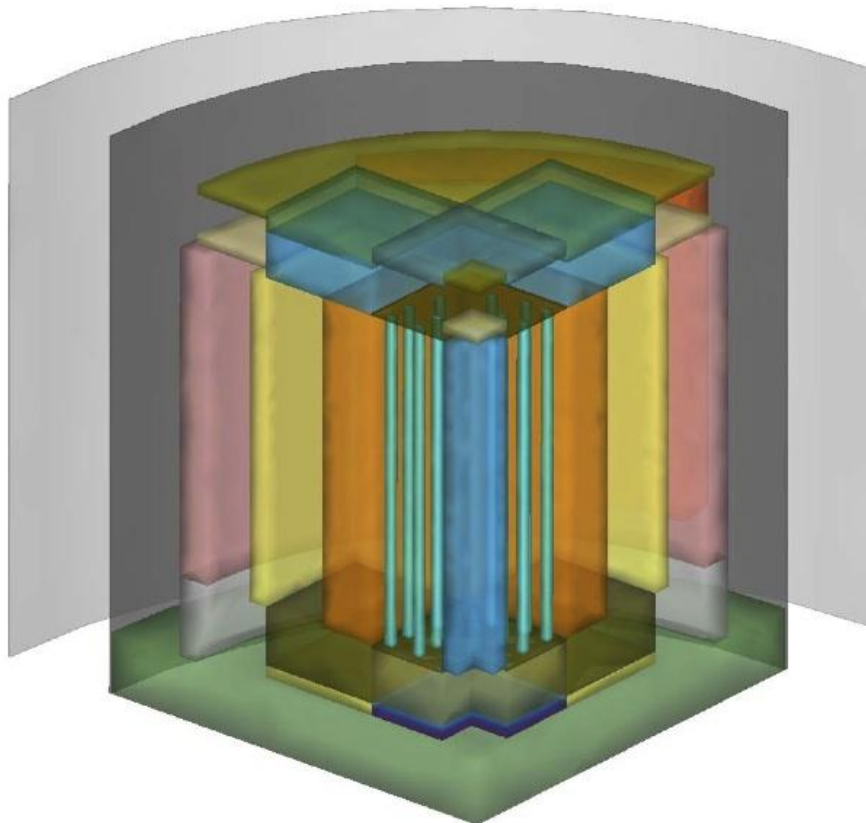


Figura 15. Schematizzazione per il benchmark Venus (SolidWorks™).

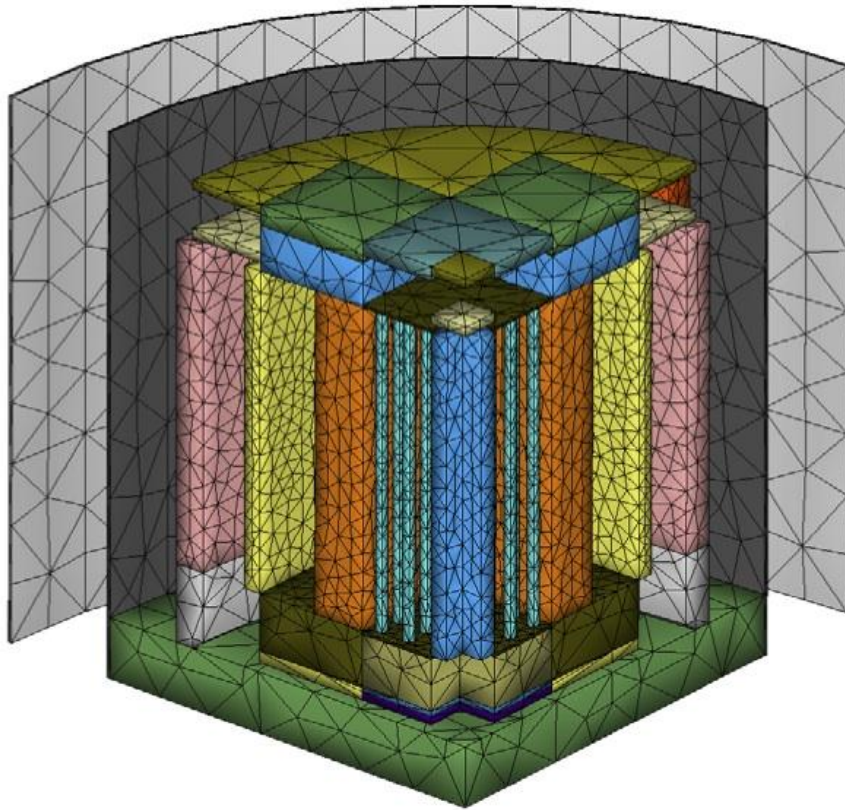


Figura 16. Magliaggio effettuato da Attila™.

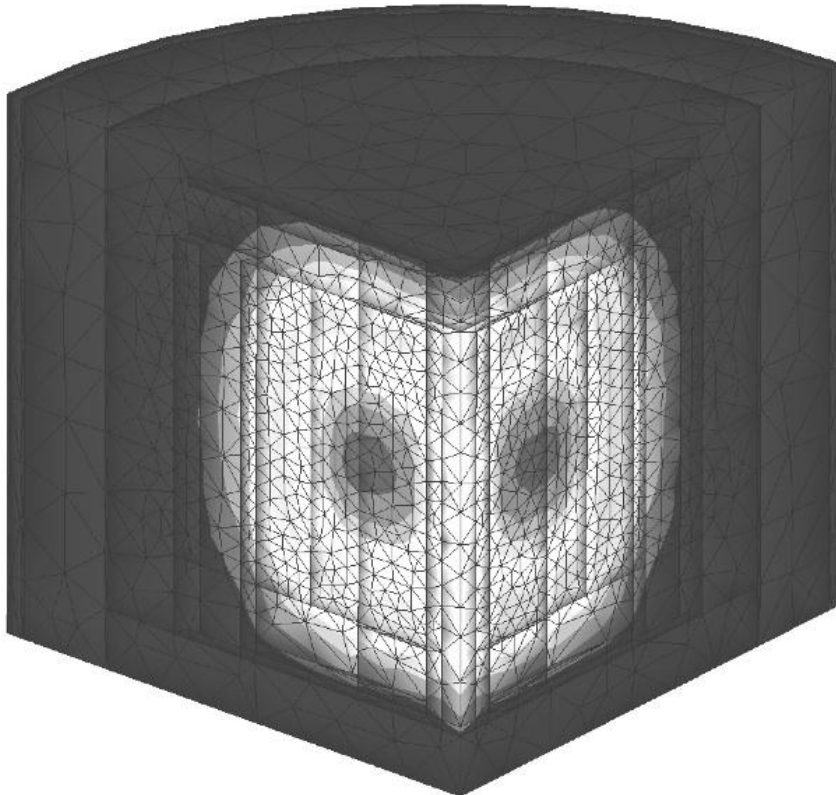


Figura 17. Flusso scalare totale calcolato da Attila™.

6 APOLLO

Il codice APOLLO 2 (arrivato alla 2.8), sviluppato a partire dal 1983 dal CEA e' il risultato di una 'joint-venture' fra CEA, EDF e Framatome. Risolve l'equazione di Boltzmann per i neutroni sia in forma integrale grazie al metodo delle probabilità di collisione, sia in forma differenziale con il metodo delle caratteristiche basato sull'approssimazione alle ordinate discrete. Come codice di cella accoppiato con CRONOS2 (elementi finiti) e' un sistema equivalente a quelli precedentemente analizzati. I dati relativi a portabilità e scalabilità non sono tuttavia adeguatamente disponibili e confrontabili. Dai benchmark NEA a disposizione si evince un'elevata precisione di calcolo ma una minor efficienza in termini computazionali.

7 CONCLUSIONI

L'idea di un approccio 'olistico' alla progettazione neutronica dei cores dei reattori ad acqua deve avere come riferimento i codici brevemente analizzati: cio' che si evince dall'analisi (per i dettagli vedere i lavori citati in bibliografia) e' che le migliori prospettive vengono da un ulteriore sviluppo indipendente di tools quali DENOVO, pur inserito in SCALE cui e' debitore per la parte relativa alle librerie di sezioni d'urto, e commerciali quali PENTRAN™ e ATTILA™. E' da rilevare anche, come si evince dalla letteratura, che man mano che questi tools entrano nella sfera commerciale, diventa essenziale per il loro sviluppo l'applicazione anche a problemi di trasporto di radiazione in ambito medicale, quindi sono in qualche modo 'costretti' ad un'area completamente diversa. I codici CEA, rimangono al momento un riferimento dedicato, ma va probabilmente ripensata la filosofia di parallelizzazione.

8 BIBLIOGRAFIA ESSENZIALE

1. G. Yesilyurt, K. T. Clarno, T. M. Evans, G. G. Davidson, P. B. Fox, A C5 Benchmark Problem with the Discrete Ordinates Radiation Transport Code Denovo, Nuclear Technology, Volume 176, Number 2, Pages 274-283 November 2011.
2. Alain Hebert, Applied Reactor Physics, Press Internationales Polytechnique, Montreal 2010.
3. Expert Group on 3-D Radiation Transport Benchmarks, Benchmark specification for deterministic 2-D/3-D MOX fuel assembly transport calculations without spatial homogenisation (C5G7 MOX), NEA/NSC/DOC(2001)4.
4. T. M. EVANS, A. S. STAFFORD, R. N. SLAYBAUGH, and K. T. CLARNO, "Denovo: A New Three-Dimensional Parallel Discrete Ordinates Code in SCALE," *Nucl. Technol.*, **171**, 171 (2010).
5. T. M. EVANS, G. G. DAVIDSON, and R. N. SLAYBAUGH, and K. CLARNO, "Three-Dimensional Full-Core Power Calculations for Pressurized Water Reactors," presented at Scientific Discovery Through Advanced Computing Program ~SciDAC 2010!, Chattanooga, Tennessee, July 11–15, 2010.
6. R.E. Ray E. Alcouffe, Randal S. Baker, Jon A. Dahl, Scott A. Turner, and Robert C. Ward, PARTISN: A Time-Dependent, Parallel Neutral Particle Transport Code System, LA-UR-08-07258, Nov. 2008.
7. [G. Sjoden, A. Haghghat, PENTRAN™, Parallel Environmental Neutral-Particle Transport, Parallel Distributed Decomposition of Discrete Ordinates (Sn) in 3-D Cartesian Geometry, Users Guide to Version 9.4X.5 Series, HSW Technologies, Nov. 2008.
8. SINBAD, VENUS-3 LWR-PVS Benchmark Experiment (1988).
9. K. Kobayashi, N. Sugimura, Y. Nagaya, £-D radiation Transport Benchmark Problems and Results for Simple Geometris with Void Regions, NEA, Nov. 2000
10. B. Ganapol, "Analytical Benchmarks for Steady State Neutron Transport in Infinite Media (Source Series I)," *Joint Benchmark Committee of the American Nuclear Society, Mathematics and Computation Division*, (2006).
11. G. Longoni, A. Haghghat, The Even-Parity Simplified SN Equations Applied to a MOX Fuel Assembly Benchmark Problem on Distributed Memory Environments.

- PHYSOR 2004 -The Physics of Fuel Cycles and Advanced Nuclear Systems: Global Developments* Chicago, Illinois, April 25-29, 2004, on CD-ROM, American Nuclear Society, Lagrange Park, IL. (2004).
12. Benchmark on Deterministic Transport Calculations Without Spatial Homogenisation, A 2-D/3-D MOX Fuel Assembly Benchmark, NEA/NSC/DOC(2003)16.
 13. Kucukboyaci, V., A. Haghghat, G. Sjoden, and B. Petrovic, "Modeling of the BWR for Neutron and Gamma Fields Using PENTRAN," ASTM STP-1398: Reactor Dosimetry, John G. Williams, David W. Vehar, et. al, Eds., American Society For Testing and Materials, West Conshohocken, PA, 2000.
 14. T. A. Wareing, J. M. McGhee, and J. E. Morel, "ATTILA: A Three-Dimensional Unstructured Tetrahedral Mesh Discrete-Ordinates Transport Code," in Proceedings of the American Nuclear Society Annual Winter Meeting, Washington, D.C., November 10–15 1996.
 15. R.P. Rulko¹, M. Belal², and D.I. Tomasevic, "Heterogeneous 3-D SN Transport Reactor Calculations Using Attila," *2nd Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications and Monte Carlo 2010 (SNA + MC2010)* Hitotsubashi Memorial Hall, Tokyo, Japan, October 17-21, 2010.
 16. VENUS-2 MOX-fuelled Reactor Dosimetry Calculations, Final Report, NEA/NSC/DOC(2005)22.
 18. Benchmark on Deterministic Transport Calculations Without Spatial Homogenisation, MOX Fuel Assembly 3-D Extension Case, NEA/NSC/DOC(2005)16.
 19. Marleau, G., A. Hébert, R. Roy, *A User's Guide for DRAGON*, Ecole Polytechnique de Montréal, December 1997.
 20. R. Sanchez, J. Mondot, "APOLLO2": a User-Friendly Code for Multigroup Transport Calculations, Santa Fe Conference - April 1989.
 21. Zmijarevic, I. 1999. Multidimensional discrete ordinates nodal and characteristics methods for the APOLLO2 code. In: Proceedings of the International Conference Mathematics and Computation, Reactor Physics and Environmental Analysis of Nuclear Systems, Madrid, Spain, pp. 1587–1597.

22. P. Blaise, N. Huot, N. Thiollay, P. Fougeras, A. Santamarina, High-burn up 10x10 100%MOX ABWR core physics analysis with APOLLO2.8 and TRIPOLI-4.5 codes, *Annals of Nuclear Energy* 37 (2010) 899–909.