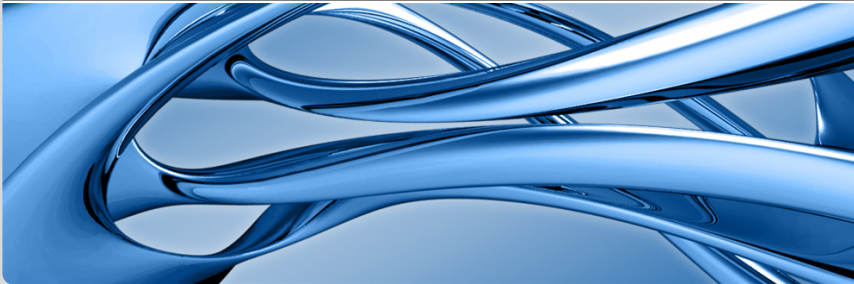


PIRS: Интерфейсы языка программирования Python для программ расчета реакторов

Безопасность АЭС и подготовка кадров, Обнинск-2013

Institute for Neutron Physics and Reactor Technology



- Введение: определения и пример
- Концепция
- текущий статус разработки
- что впереди

PIRS: Python Interfaces for Reactor Simulations

Набор пакетов для языка программирования Питон, которые облегчают взаимодействие пользователя с программами расчета реакторов.

Python

- www.python.org
- свободно распространяемый
- интерпретируемый
- ОС-независимый
- большая группа пользователей
- широкий спектр пакетов

Взаимодействие

- описание модели
- подготовка инпута
- запуск программы расчета
- чтение результатов расчета

Для чего PIRS нужен?

- Рутинная подготовка интпутов
- Организация совместных итерационных расчетов
- ...

Пример: упрощенная нейтронно-физическая модель ТВЭЛа

Описание геометрии

```
from hpmc import Box, Cylinder

b = Box(X=1.2, Y=1.2, Z=110)
c = Cylinder(R=0.5, Z=100)
b.insert(0, c)

b.material = 'water'
c.material = 'fuel'

b.dens.set_grid([1, 1])
b.dens.set_values(1.)

c.temp.set_grid([1]*3)
c.temp.set_values([300, 500, 350])

c.heat.set_grid([1]*10)
```

Пример: упрощенная нейтронно-физическая модель ТВЭЛа

Описание нейтронно-физических характеристик

```
from hpmc import McnpInterface
from mcnp import Material

m = McnpInterface(b)

u = Material((92235, 0.5, 2),
            (92238, 95.5, 2))

o = Material('O')
h = Material('H')

f = u + 2*o
w = h*2 + o
w.thermal = 'lwtr'
```

```
f.sdict[8018] = 8016
w.sdict[8018] = 8016

m.materials['fuel'] = f
m.materials['water'] = w

m.bc['radial'] = '*'

m.adc.append('ksrc 0 0 0')
m.adc.append('kcode 500 1. 20 100')

m.run('P')

r = m.run('R')
```

Пример: упрощенная нейтронно-физическая модель ТВЭЛа

```
c title
1 0 -3 4 -5 6 -2 1 fill=1 imp:n=1
2 0 -7 fill=2 imp:n=1 u=1
3 1 -1.0 -8 imp:n=1 tmp=2.585203e-08 u=2
4 2 -1.0 8 -9 imp:n=1 tmp=4.308671e-08 u=2
5 3 -1.0 9 imp:n=1 tmp=3.016070e-08 u=2
6 4 -1.0 -10 7 imp:n=1 tmp=2.585203e-08 u=1
7 4 -1.0 10 7 imp:n=1 tmp=2.585203e-08 u=1
8 0 11 (3:-4:5:-6:2:-1) imp:n=0 tmp=2.585203e-08
```

```
c surfaces
1 pz -55.0
2 pz 55.0
*3 px 0.6
*4 px -0.6
*5 py 0.6
*6 py -0.6
7 rcc 0.0 0.0 -50.0 0.0 0.0 100.0 0.5
8 pz -16.6666666667
9 pz 16.6666666667
10 pz 0.0
11 pz -1055.01817881
```

c data cards

c materials

```
m1 $ mixture U-0 at 300 K
92235.31c 5.0000000e-01
92238.31c 9.5500000e+01
```

```
8016.31c 1.9951400e+00
8017.31c 7.6000000e-04
8016.31c 4.1000000e-03

m2 $ mixture U-0 at 500 K
92235.31c 3.9962042e-01 92235.40c 1.0037958e-01
92238.31c 7.6327500e+01 92238.40c 1.9172500e+01
8016.31c 1.5945974e+00 8016.40c 4.0054263e-01
8017.31c 6.0742304e-04 8017.40c 1.5257696e-04
8016.31c 3.2768874e-03 8016.40c 8.2311256e-04

m3 $ mixture U-0 at 350 K
92235.31c 5.0000000e-01
92238.31c 9.5500000e+01
8016.31c 1.9951400e+00
8017.31c 7.6000000e-04
8016.31c 4.1000000e-03

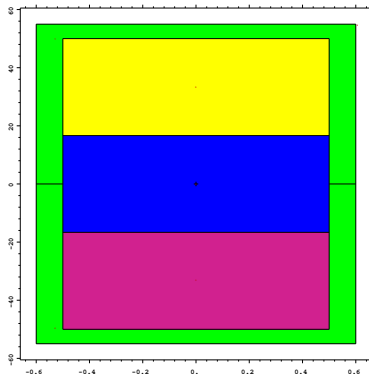
m4 $ mixture H-0 at 300.0 K
1001.31c 1.9997700e+00
1002.31c 2.3000000e-04
8016.31c 9.9757000e-01
8017.31c 3.8000000e-04
8016.31c 2.0500000e-03

mt4 lwtr01.31t $ thermal data at 293.606K
c tallies
fmesh14:n $ heat in ('/', 0)
geom=cyl
origin=0.0 0.0 -50.0
axs=0.0 0.0 1.0
vec=1.0 0.0 0.0
imesh= 0.5
jmesh= 10.0 20.0 30.0 40.0 50.0 60.0
70.0 80.0 90.0 100.0
kmesh= 1.0
```

Пример: упрощенная нейтронно-физическая модель ТВЭЛа

```
09/10/13 13:02:39  
c title
```

```
probid = 09/10/13 13:02:39  
basis: XZ  
( 1.000000, 0.000000, 0.000000)  
( 0.000000, 0.000000, 1.000000)  
origin:  
( 0.00, 0.00, 0.00)  
extent = ( 0.66, 60.50)  
cell labels are  
cell names
```



Типы классов

- Для описания расчетной геометрии: Базовые объемы (цилиндр, бокс), которые можно вставлять друг в друга и задавать положение.
- Интерфейсы низкого уровня: Правильность синтаксиса входного файла, процедуры для чтения результатов расчета, правила запуска расчетных програм.
- Интерфейсы высокого уровня: Конвертация геометрии в инпут и результатов обратно в геометрию, определение параметров, специфических для кода (путь файлам данных для MCNP, например)

Типы пользователей

- расчетчики: используют геометрические классы и классы высокого уровня
- разработчики интерфейсов: пишут интерфейсы

Группа классов
для описания
геометрии:

hpmc.Cylinder
hpmc.Box
hpmc.Sphere

Группа интерфейсов
высокого уровня

hpmc.McnpInterface

hpmc.ScfInterface

Группа интерфейсов
низкого уровня

mcnp.Model

Scf.Model

Программы расчета

mcnp5

SCF

Определен во многом целями проекта, в рамках которого PIRS разрабатывается: НФ и ТГ моделирование АЗ PWR.

Геометрия

- Cylinder: вертикальный цилиндр конечной высоты
- Box: прямоугольный параллелепипед со сторонами перпендикулярными к осям

Интерфейс MCNP

- для произвольной геометрии
- использование решетки (lattice card)
- описание материалов
- чтение meshtal

Интерфейс SCF

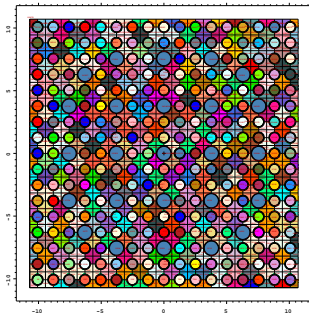
- для геометрии TBC
- чтение результатов из output.txt

Пример: результат совместного итеративного расчета

Модель: ТВС 17×17 с каналами для замедлителя и двумя типами ТВЭЛов.
Совместный MCNP – SCF расчет, организованный с помощью PIRS

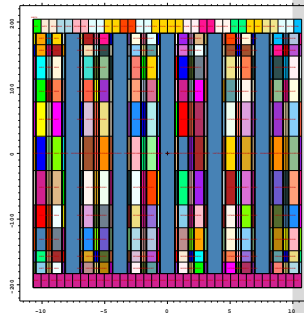
09/10/13 17:32:56
c title

```
probid = 09/10/13 17:32:29  
basis: XY  
( 1.000000, 0.000000, 0.000000)  
( 0.000000, 1.000000, 0.000000)  
origin:  
( 0.00, 0.00, 0.00)  
extent = ( 11.78, 11.78)  
cell labels are  
cell names
```



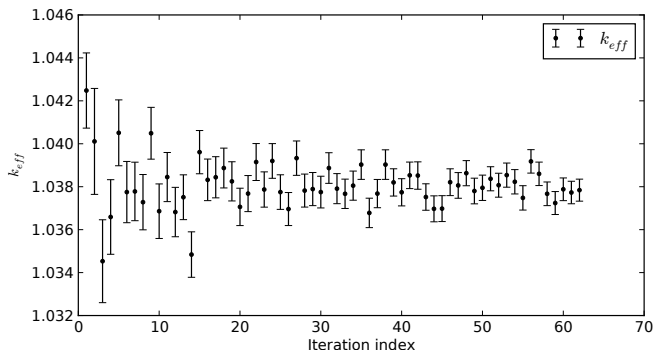
09/10/13 17:32:58
c title

```
probid = 09/10/13 17:32:29  
basis: XZ  
( 1.000000, 0.000000, 0.000000)  
( 0.000000, 0.000000, 1.000000)  
origin:  
( 0.00, 0.00, 0.00)  
extent = ( 11.78, 224.73)  
cell labels are  
cell names
```



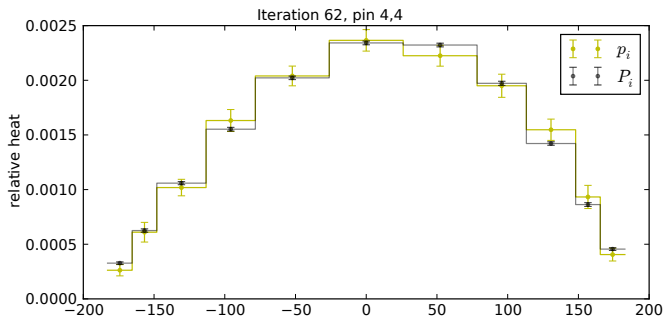
Пример: результат совместного итеративного расчёта

Изменение k_{eff} с итерациями



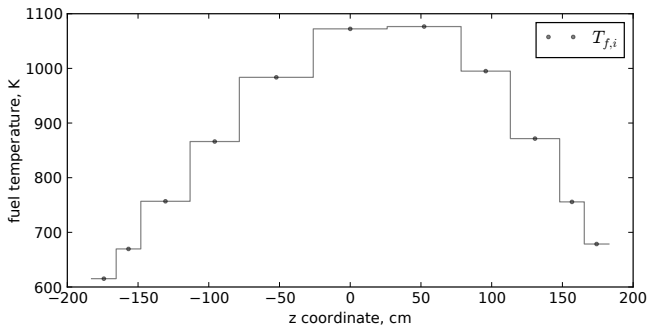
Пример: результат совместного итеративного расчёта

Аксиальное распределение энерговыделения в одном из ТВЭЛов



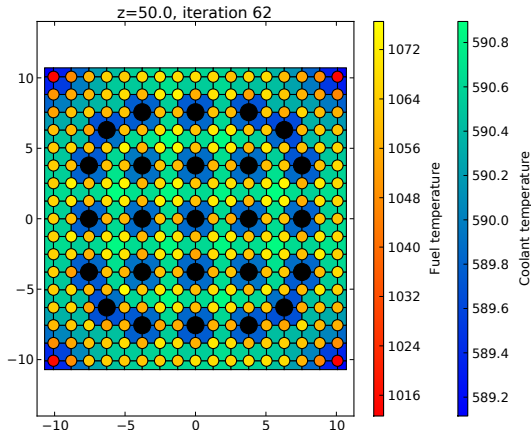
Пример: результат совместного итеративного расчёта

Аксиальное распределение температуры в топливе в том-же ТВЭЛе



Пример: результат совместного итеративного расчета

Картограмма температурных полей



Сейчас

- Интерфейс для SERPENT-2
- Применение на суперкомпьютере в Юлихе
- документация

В будущем

- Переписать интерфейс к SCF
- отрисовка геометрии
- интерфейс к NMC

Есть желающие? anton.travleev@kit.edu