
Archiv-Ex.:

FZR-84

April 1995

U. Grundmann, D. Lucas, S. Mittag und U. Rohde

**Weiterentwicklung und Verifikation
eines dreidimensionalen Kernmodells
für Reaktoren vom Typ WWER und seine
Ankopplung an den Störfallcode ATHLET**

Forschungszentrum Rossendorf e.V.

Postfach 51 01 19 · D-01314 Dresden

Bundesrepublik Deutschland

Telefon (0351) 591 3460

Telefax (0351) 591 2383

E-Mail rohde@fz-rossendorf.de

Fördervorhaben

**Weiterentwicklung und Verifikation eines dreidimensionalen
Kernmodells für Reaktoren vom Typ WWER und seine
Ankopplung an den Störfallcode ATHLET**

U.Grundmann, D.Lucas, S.Mittag, U.Rohde

Abschlußbericht

Das diesem Bericht zugrundeliegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie unter dem Förderkennzeichen 150 0925 gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt des Berichtes liegt allein bei den Autoren.

Kurzfassung

Der Schwerpunkt des Vorhabens bestand in der Ankopplung des im FZR entwickelten dreidimensionalen Kernmodells DYN3D für Reaktoren der russischen Bauart WWER an den Thermohydraulikcode ATHLET. Die Kopplung wurde über zwei prinzipiell verschiedene Wege realisiert:

- die Einbindung nur der Neutronenkinetik von DYN3D in ATHLET (interne Kopplung),
- die Ankopplung des kompletten Kernmodells DYN3D einschließlich Neutronenkinetik, Thermohydraulik und Brennstabmodell über Datenschnittstellen am Kernein- und -austritt (externe Kopplung).

Zur Erprobung der Kopplung wurden Vergleichsrechnungen zwischen interner und externer Kopplung für einen LOCA und einen Reaktivitätsstörfall durchgeführt. Weitere Ergebnisse des Vorhabens bestehen in:

- der Entwicklung einer DYN3D-Version für die Abbrandberechnung,
- der Verifikation von DYN3D anhand von Benchmarkaufgaben und experimentellen Daten zum Brennstabverhalten,
- einer Recherche zur Erweiterung der neutronenphysikalischen Datenbasis.

Die Ergebnisse des Vorhabens bilden einen Beitrag zur Entwicklung fortgeschrittener Berechnungsmethoden für die Sicherheitsanalyse von WWER-Reaktoren. Das Ziel künftiger Arbeiten besteht vor allem in der Verifikation des gekoppelten Programmkomplexes DYN3D-ATHLET.

Abstract

The main goal of the project was the coupling of the 3D core model DYN3D for Russian VVER-type reactors, which has been developed in the RCR, with the thermohydraulic code ATHLET. The coupling has been realized on two basically different ways:

- the implementation of only the neutron kinetics model of DYN3D into ATHLET (internal coupling),
- the connection of the complete DYN3D core model including neutron kinetics, thermohydraulics and fuel rod model via data interfaces at the core top and bottom (external coupling).

For the test of the coupling, comparative calculations between internal and external coupling versions have been carried out for a LOCA and a reactivity transient. Complementary goals of the project were:

- the development of a DYN3D version for burn-up calculations,
- the verification of DYN3D on benchmark tasks and experimental data on fuel rod behaviour,
- a study on the extension of the neutron-physical data base.

The project contributed to the development of advanced tools for the safety analysis of VVER-type reactors. Future work is aimed to the verification of the coupled code complex DYN3D-ATHLET.

Inhalt	Seite
1. Einleitung	1
2. Zielstellung des Vorhabens	3
3. Die Kopplung der Programme DYN3D und ATHLET	5
3.1 Wahl der Kopplungsstrategie	5
3.2 Externe Kopplung der Codes über GCSM-Schnittstelle	8
3.2.1 Grundprinzip der externen Kopplung	8
3.2.2 Praktische Realisierung der externen Kopplung	8
3.2.3 Numerische Probleme und deren Lösung	10
3.2.4 Eingabedatensätze und Ausgabedateien bei externer Kopplung	12
3.2.5 Restart bei externer Kopplung	13
3.2.6 Borsäurekonzentration und Vermischungsmodell	13
3.3 Interne Ankopplung der 3D Neutronenkinetik an ATHLET	15
3.3.1 Grundprinzipien der internen Kopplung	15
3.3.2 Datenaustausch in der internen Kopplung	16
3.3.3 Ein- und Ausgabe der Daten bei interner Kopplung	18
3.3.4 Programmtechnische Realisierung der internen Kopplung	18
4. Funktionstest des Komplexes DYN3D - ATHLET anhand ausgewählter Testfälle	23
4.1 Testrechnungen für die externe Kopplung	23
4.1.1 Eingangsdatensätze	23
4.1.2 Testfall 1: Unkontrolliertes Ausfahren einer Regelgruppe	24
4.1.3 Testfall 2: Prompte Reaktivitätszufuhr	25
4.1.4 Testfall 3: Großes Leck im heißen Strang	27
4.2 Vergleich der Kopplungsoptionen	29
4.2.1 Zielstellung und Auswahl der Testfälle	29
4.2.2 Unterschiede in den Modellen	30
4.2.3 LOCA-Testfall	31
4.2.4 Auswurf der Regelgruppe K6	36
5. Die Entwicklung einer DYN3D-Version mit Abbrandberechnung	42
5.1 Zielstellung	42
5.2 Programmtechnische Umsetzung	42
5.2.1 Prinzipielle Arbeitsweise	42
5.2.2 Berechnung von Abbrandzyklen	43
5.2.3 Modellierung der Reaktorregelung	43
5.2.4 Zeitschrittsteuerung	43
5.2.5 Bereitstellung von makroskopischen Gruppendaten	44

	Seite
5.2.6 Ausgabe von Ergebnissen	45
5.2.7 Restart-Option	45
5.3 Ergebnisse von Testrechnungen	46
5.3.1 Das AER-Benchmarkproblem des KKW Paks	46
5.3.2 Modellierung des WWER-440 mit DYN3D	46
5.3.3 Abbrandrechnung	47
5.3.4 Regelstabwirksamkeiten	48
5.3.5 Schlußfolgerungen aus den Testergebnissen	61
6. Stand der nuklearen Datenversorgung für DYN3D und Möglichkeiten der Erweiterung	62
7. Stand der Verifikation und Ableitung weiterer Erfordernisse	63
7.1 Überblick zur Verifikation von DYN3D	63
7.1.1 Stationäre Neutronenflußberechnung	63
7.1.2 Neutronenkinetik	64
7.1.3 Thermohydraulik und Brennstabmodell	65
7.1.4 Integrales Kernmodell	66
7.2 Benchmarkaufgaben für die 3D Neutronenkinetik	68
7.2.1 Beschreibung des Problems	68
7.2.2 Ergebnisse des Programmvergleichs	68
7.3 Verifikation des Brennstabmodells an RIA-Experimenten	78
7.4 Ableitung des weiteren Verifikationsbedarfs für DYN3D und den Komplex DYN3D - ATHLET	85
8. Zusammenfassung der Ergebnisse	88
Literaturverzeichnis	92
Anhang A: Beschreibung der Eingabedaten für die externe Kopplung und Datensatzbeispiel	
Anhang B: Beschreibung der Eingabedaten für die interne Kopplung und Datensatzbeispiel	
Anhang C: Beschreibung der Eingabedaten für die Abbrandberechnung in DYN3D und Datensatzbeispiel	

1. Einleitung

Für die Sicherheitsanalyse von Kernreaktoren gewinnen best-estimate-Codes zur Simulation des Anlagenverhaltens bei hypothetischen Störfällen zunehmend an Bedeutung. Diese Codes zeichnen sich durch eine entsprechend dem Stand des Wissens möglichst realistische Modellierung der Einzelphänomene einerseits und eine komplexe Modellierung der Gesamtanlage bzw. des gesamten Störfallablaufs von der Einleitungs- bis zur möglichen Kernzerstörungsphase andererseits aus.

Es existiert eine Reihe von fortgeschrittenen Störfallanalyseprogrammen (ATHLET, RELAP, CATHARE, TRAC) zur Modellierung des thermohydraulischen Anlagenverhaltens, die einen hohen Stand der Verifikation bezüglich westlicher Druckwasserreaktoren erreicht haben. Diese Codes werden zunehmend auch für Störfallablaufanalysen zu Reaktoren der russischen Bauart WWER in den mittel- und osteuropäischen Betreiberländern eingesetzt. Die WWER-Reaktoren besitzen eine Reihe konstruktiver Besonderheiten, welche eine spezielle Verifikation der Codes erfordern. Von einer OECD/CSNI-Arbeitsgruppe wurde eine abgestimmte Verifikationsmatrix erarbeitet, mit deren Umsetzung begonnen wurde.

Zur Analyse reaktivitätsinduzierter Störfälle (RIA) werden bereits standardmäßig dreidimensionale Reaktorkernmodelle eingesetzt. Für westliche Reaktoren existiert eine ganze Reihe gut verifizierter 3D-Neutronenkinetikcodes, z.B. das Programm QUABOX/CUBBOX der GRS. Bezüglich der Reaktoren russischer Bauart gibt es hier Entwicklungsrückstände. Eine wesentliche Besonderheit der WWER-Baureihe besteht in der hexagonalen Struktur der Brennstoffkassetten, welche die Anwendung westlicher Codes, die meist eine quadratische Brennelementgeometrie voraussetzen, nicht erlaubt. Einige westliche Codes, welche die Behandlung der hexagonalen Kerngeometrie erlauben, sind nur kommerziell verfügbar, da sie von Reaktorentwicklern oder -betreibern bzw. in deren Auftrag entwickelt worden sind (z.B. HEXTIME von Siemens KWU, PANTHER von Nuclear Electric, DIF3D von Westinghouse und insbesondere der finnische Code HEXTRAN für WWER). Mit der Entwicklung eigener fortgeschrittener 3D Codes für WWER wurde in einigen Betreiberländern begonnen (KIKO3D in Ungarn, BIPR-8 und RADUGA in Rußland). Darüber hinaus existieren vereinfachte 3D-Modelle (Eingruppen-Diffusionsnäherung, Grobgitterverfahren), die nicht immer den Genauigkeitsanforderungen genügen (z.B. MOST-10 im Kurtschatow-Institut Moskau).

Im Forschungszentrum Rossendorf wurde das dreidimensionale Reaktorkernmodell DYN3D für die Analyse von RIA und Transienten in WWER-Reaktoren entwickelt /Gru89/. Das Programm DYN3D umfaßt die Modellierung:

- der dreidimensionalen Neutronenkinetik in Zweigruppen-Diffusionsnäherung mit einem nodalen Entwicklungsverfahren für hexagonale Brennelementgeometrie,
- der Thermohydraulik des Reaktorkerns mit ein- oder zweiphasiger Kühlmittelströmung im Rahmen eines 4-Gleichungs-Modells,
- des transienten Brennstabverhaltens mit detaillierter Beschreibung des Wärmeübergangs im Gasspalt und der Ermittlung von Brennstab-Versagenskriterien,

- der neutronenphysikalischen Rückkopplung über die Abhängigkeit der homogenisierten makroskopischen Wirkungsquerschnitte von der Brennstofftemperatur, Moderator- und -dichte sowie der Borsäurekonzentration,
- der Kühlmittelvermischung im Downcomer und unteren Plenum für WWER-440.

Der Code verfügt über einen guten Stand der Verifikation anhand von Benchmarkproblemen, kinetischen Experimenten an Nulleistungsanordnungen, Experimenten zum Brennstabverhalten bei RIA und Inbetriebnahmemessungen an KKW. Ein Überblick über bisher durchgeführte Arbeiten zur Verifikation von DYN3D wird im Abschnitt 7.1 gegeben. DYN3D wurde im Rahmen des Technical Cooperation Project "Safety Assessment of WWER-440 Reactors" der IAEA einer Reihe von Forschungseinrichtungen und Aufsichtsbehörden in Bulgarien, der Slowakei, der Tschechischen Republik und der Ukraine zur Verfügung gestellt und wird dort teilweise recht intensiv für Sicherheitsanalysen genutzt.

In zunehmendem Maße werden in die Sicherheitsbetrachtungen entsprechend den Richtlinien der hochentwickelten Länder Störfallablaufanalysen einbezogen, die eine komplexe Berücksichtigung des thermohydraulischen Anlagenverhaltens und der räumlichen Neutronenkinetik im Reaktorkern erfordern (ATWS-Störfälle, Frischdampflecks, Störungen der Borsäurekonzentration). Störungen in einzelnen Kühlkreislaufschleifen bewirken asymmetrische Reaktivitätsstörungen im Reaktorkern, die über die Reaktorleistung wiederum auf die Thermohydraulik rückwirken. Die o.g. Thermohydraulikcodes verfügen meist nur über Punktmodelle oder 1D-Modelle der Neutronenkinetik, während für die Kernmodelle die thermohydraulischen Randbedingungen vorgegeben werden müssen. Aus diesem Grund wird intensiv die Kopplung von thermohydraulischen Anlagenmodellen mit 3D Neutronenkinetikcodes betrieben. Als Beispiel sollen hier die Kopplung des Codes PANBOX der Siemens KWU mit RELAP5 /Kn94/, die Kopplung eines 3D-Modells mit RELAP5 im Idaho NEL /Ju94/ und die Verkopplung der französischen Codes CRONOS-2, FLICA-4 und FLICA-S /Ray94/ genannt werden. Speziell für WWER-Reaktoren wurden in Finnland die Codes HEXTRAN und SMABRE gekoppelt. In Ungarn gibt es Pläne zur Kopplung von KIKO4D mit RELAP.

Das Hauptziel des abgeschlossenen Vorhabens bestand in der Ankopplung des Programmes DYN3D an den Code ATHLET. Das Vorhaben ordnet sich in die Bemühungen der GRS ein, durch Ankopplung weiterer 3D Kernmodelle für quadratische und hexagonale Geometrie (Codes QUABOX/CUBBOX, BIPR-8) ein fortgeschrittenes Hilfsmittel für die Störfallablaufanalyse sowohl deutscher, als auch russischer Kernreaktoren zu entwickeln. Darüber hinaus wurden im Vorhaben Beiträge zur Weiterentwicklung von DYN3D und weiteren Verifikationen des Programmes geleistet.

2. Zielstellung des Vorhabens

Das Ziel des Vorhabens besteht darin, einen Beitrag zur Vervollkommnung von Berechnungsmethoden für eine realistische Einschätzung der Sicherheit von Kernreaktoren der russischen Bauart WWER zu leisten. Die Ankopplung des Kernmodells DYN3D an den Code ATHLET stellt den Schwerpunkt des Projektes dar. Weitere Einzelzielsetzungen bestanden in

- der Schaffung einer Option von DYN3D für Abbrandberechnungen,
- Recherchen zum notwendigen Umfang der Ergänzung und Modernisierung der neutronenphysikalischen Datenbasis für das Kernmodell,
- der weiteren Verifikation des Programmes DYN3D,
- dem Funktionstest des gekoppelten Programmkomplexes DYN3D-ATHLET.

Für die Kopplung der Programme DYN3D und ATHLET war zunächst gemeinsam mit der GRS eine Konzeption für die Kopplungsstrategie zu erarbeiten. Die Definition der Schnittstellen muß gewährleisten, daß auch eine Ankopplung weiterer Programme über diese Schnittstellen möglich ist. Auf der Basis dieser Konzeption erfolgte die programmtechnische Umsetzung der Kopplung. Anhand verschiedener Testfälle sollten zunächst mathematische Funktionstests des gekoppelten Programmkomplexes (numerische Stabilität und Konsistenz der Lösung) durchgeführt werden. Durch Vergleich verschiedener Modelle war die physikalische Sinnfälligkeit der Ergebnisse nachzuweisen. Eine umfassende Verifikation des Komplexes DYN3D - ATHLET war im Vorhaben nicht vorgesehen und ist Gegenstand künftiger Arbeiten.

Das Ziel der Entwicklung einer DYN3D-Option mit Abbrandberechnung besteht in erster Linie in der Berechnung des stationären Reaktorzustandes für einen bestimmten Zeitpunkt eines Brennstoffzyklus als Anfangsbedingung für anschließende Störfallanalysen. Bisher mußte die jeweils aktuelle Abbrandverteilung für DYN3D vorgegeben werden.

Eine Recherche zu verfügbaren Bibliotheken makroskopischer Wirkungsquerschnitte für WWER-Reaktoren sollte klären, welche Bibliotheken zur Ergänzung der neutronenphysikalischen Datenbasis von DYN3D dienen können. Bisher beruht die Datenversorgung für DYN3D auf der MAGRU-Bibliothek der K.A.B. AG Berlin für WWER-440, die jedoch nur mit Einschränkungen zur Verfügung steht.

Einen Schwerpunkt der Verifikation des Thermohydraulikmodells FLOCAL in DYN3D stellt die Nachrechnung von Experimenten an Impulsreaktoren zum Brennstabverhalten bei RIA dar. Bei diesen Experimenten wurden verkürzte Proben von Brennstäben, die sich in einer Kapsel mit ruhendem Kühlmittel befinden, durch einen nuklearen Leistungsimpuls aufgeheizt. Im Rahmen eines über das Vorhaben finanzierten Arbeitsaufenthaltes eines Mitarbeiters aus dem Kurtschatow-Institut Moskau wurden experimentelle Daten zum Verhalten von WWER-Brennstabproben unter RIA-Bedingungen zugänglich gemacht, die am russischen Forschungsreaktor IGR erhalten wurden.

Beiträge zur Verifikation der Neutronenkinetik von DYN3D wurden im Rahmen des Vorhabens durch Nachrechnung von Benchmarkproblemen der internationalen Vereinigung Atomic Energy Research (AER) erbracht. Diese Benchmarkprobleme sind für die Codeverifikation besonders geeignet, da eine Serie von Aufgaben definiert wird, wobei angefangen vom ersten rein kinetischen Problem ohne Rückkopplung sukzessive weitere Effekte (einfache Rückkopplung, Thermohydraulik des Reaktorkerns) zugeschaltet werden und so eine systematische Aufklärung von Differenzen möglich wird. An der Lösung der Benchmarks beteiligen sich Institutionen aus WWER-Betreiberländern (Codes HEXTRAN, KIKO3D, BIPR-8).

Zur Verifikation der neuentwickelten Abbrandoption von DYN3D wurde ebenfalls ein Benchmarkproblem des AER genutzt, das die Berechnung der Abbrandgeschichte und von Kritikalitätsparametern (Borsäurekonzentration, Regelstabwirksamkeiten, Reaktivitätskoeffizienten) vom Ende des 3. bis zum Ende des 7. Beladezyklus für das KKW Paks (Ungarn) beinhaltet. Für Regelstabwirksamkeiten liegen zum Vergleich entsprechende Meßwerte aus Paks vor.

3. Die Kopplung der Programme DYN3D und ATHLET

3.1 Wahl der Kopplungsstrategie

Ausgehend von der Struktur des Programmes ATHLET ist die Ankopplung eines 3D Kernmodells auf verschiedene Weise möglich - angefangen von der Integration nur des neutronenkinetischen Teils in analoger Weise zu bereits vorhandenen Kinetikmodellen über die Nutzung einzelner Teilmodelle (z.B. Neutronenkinetik und Brennstabmodell) bis hin zur Einbindung des kompletten Programmes DYN3D als unabhängiger Modul mit eigener Zeitintegration.

Im abgeschlossenen Vorhaben wurde die Kopplung der Codes in zwei verschiedenen Optionen realisiert:

- die Einbindung des neutronenkinetischen Teils von DYN3D als Teilmodell "Neutronenkinetik" in ATHLET in Analogie zu vorhandenen Punktkinetik- und 1D-Modellen (im folgenden **interne Kopplung** genannt),
- die Ankopplung des kompletten Kernmodells DYN3D, bestehend aus Neutronenkinetik, Thermohydraulik und Brennstabmodell, als nutzerdefinierte GCSM-Routinen (weiterhin als **externe Kopplung** bezeichnet).

Im Fall der internen Kopplung wird nur der Neutronenkinetikteil von DYN3D genutzt. Die Modellierung der Thermohydraulik des Reaktorkerns erfolgt durch ATHLET. Bei der externen Kopplung über GCSM wird hingegen der gesamte Kernbereich aus der ATHLET-Modellierung herausgeschnitten und durch das DYN3D-Modell ersetzt. Im Rahmen des General Control and Simulation Modules (GCSM) von ATHLET ist u.a. eine Schnittstelle zur Einbindung nutzerdefinierter Modelle vorbereitet, die hier für die Ankopplung on DYN3D genutzt wurde. Die Randbedingungen für Druck, Massenstrom und Enthalpie werden als GCSM-Signale übergeben.

Im Fall der internen Kopplung ist die Zahl der zwischen beiden Programmen auszutauschenden Parameter viel größer als für die externe Kopplung, da die Kopplung zwischen allen Nodes des DYN3D-Neutronenkinetikmodells und allen im Kernbereich liegenden Thermofluid- bzw. Wärmeleitungsobjekten erfolgen muß. Das Interface muß die wechselseitige Zuordnung dieser Objekte zu den Neutronenkinetiknodes auch bei unterschiedlicher geometrischer Modellierung gewährleisten.

Der GCSM-Modul ermöglicht eine bequeme Realisierung der zweiten Kopplungsart. Über die GCSM-Option "LIBRARY" ist die Verzweigung zu nutzerdefinierten Unterprogrammen sowie ein übersichtlicher und einfach handhabbarer Datentransfer möglich. Dabei ist ein Eingriff in das eigentliche ATHLET-Programm nicht erforderlich.

Bei der internen Kopplung wird die gesamte Thermohydraulik von ATHLET modelliert. Das bringt vor allem den Vorteil, das der Kühlkreislauf in geschlossener Form behandelt werden kann. Die thermohydraulischen Gleichungen können für das gesamte System mit einem einheitlichen impliziten Verfahren gelöst werden. Im Fall der externen Kopplung wird das thermohydraulische System in zwei Teilsysteme zerlegt, für die eine getrennte Lösung der thermohydraulischen Gleichungen erfolgt. Die Ver-

knüpfung der beiden Lösungen erfolgt explizit. Eine implizite Verknüpfung würde tiefgehende Eingriffe in die Strukturen der Gleichungssysteme beider Programme erfordern. Die Bilanzgleichungen können nicht für ein geschlossenes System gelöst werden, sondern es muß mit aufgeprägten Randbedingungen an den Coregrenzen gerechnet werden. Das ist der wesentlichste Nachteil der externen Kopplung, da daraus numerische Probleme entstehen können. Die externe Kopplung besitzt dagegen folgende Vorteile:

- Übersichtlichkeit der Schnittstelle,
- weitgehende Unabhängigkeit der Programme, die auch eine unabhängige Programmpflege und Weiterentwicklung ermöglicht,
- *detaillierte Erfassung ortsabhängiger Effekte* durch einfache 1:1 Zuordnung von Brennstoffkassetten und Kühlkanälen,
- Möglichkeit der Nutzung des Brennstabmodells und des Vermischungsmodells für das untere Plenum aus DYN3D.

Ein weiterer Nachteil der externen Kopplung besteht in einigen Einschränkungen des Thermohydraulikmodells von DYN3D gegenüber ATHLET. So ist in DYN3D keine Gemischspiegelbeschreibung und keine globale Umkehr der Strömungsrichtung möglich. Die geometrisch Modellierung ist weniger flexibel und nur auf parallele Kühlkanäle zugeschnitten, zwischen denen kein Queraustausch möglich ist.

Die Vorteile der internen Kopplung sind in folgenden Punkten zu sehen:

- Integrität des ATHLET-Anlagenmodells in physikalischer und mathematischer Hinsicht bleibt erhalten,
- die geschlossene implizite numerische Lösung des ATHLET-Gleichungssystems ist möglich,
- die interne Kopplung wird seitens der GRS für die Ankopplung weiterer 3D Neutronenkinetikmodelle bevorzugt.

Nachteile der internen Kopplung bestehen darin, daß :

- ein detailliertes Eindringen in die interne Datenstruktur von ATHLET erforderlich ist,
- die Nutzung einiger in DYN3D enthaltener Modelle (Brennstabmodell, Vermischungsmodell) nicht möglich ist,
- bei der Modellierung vieler paralleler Kühlkanäle große, aufwendige Eingabendatensätze generiert werden müssen.

Da anfangs nicht abzusehen war, welcher dieser beiden Wege schneller und besser zum Erfolg führt, wurden beide Strategien zunächst mit dem Ziel verfolgt, später die optimale Kopplungsstrategie auszuwählen. Aufgrund der inzwischen gesammelten Erfahrungen erwies es sich, daß beide Wege ihre spezifischen Vor- und Nachteile auch bezüglich der Anwendung haben (siehe Abschnitt 8). Die parallele Verfolgung unterschiedlicher Strategien brachte einen hohen methodischen Kenntnisszuwachs. Zudem erwies es sich, daß Vergleichsrechnungen zwischen den Kopplungsvarianten äußerst hilfreich für die Auffindung und Beseitigung von Programmfehlern im Zusammenhang mit der Kopplung waren (mathematischer Funktionstest) und auch für physikalische Sinnfälligkeitstests genutzt werden können, da in beiden Varianten

unterschiedliche, unabhängige Thermohydraulikmodelle im Bereich des Reaktorkerns benutzt werden. Aus diesen Gründen wurden beide Kopplungsstrategien bis zum Abschluß geführt und stehen für Anwendungen zur Verfügung.

Die Umsetzung beider Kopplungsstrategien, dabei zu lösende Aufgaben und aufgetretene Probleme werden im folgenden detaillierter beschrieben.

Ein prinzipielles Schema des Datenaustauschs für beide Kopplungsvarianten ist in Abb. 3.1.1 dargestellt.

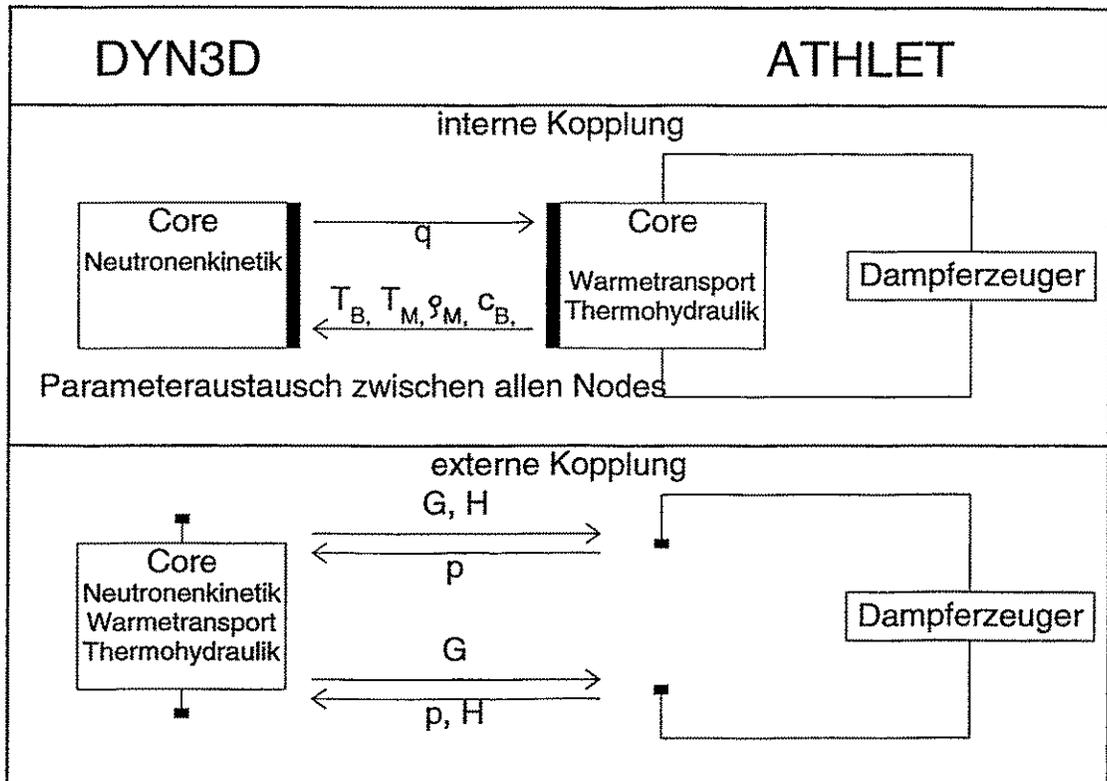


Abb. 3.1.1: Parameterraustausch bei den beiden Kopplungsstrategien

3.2 Externe Kopplung der Codes über GCSM-Schnittstelle

3.2.1 Grundprinzip der externen Kopplung

Bei der externen Kopplung wird der gesamte Kernbereich aus dem ATHLET-Anlagenmodell herausgeschnitten und durch DYN3D modelliert. Die Schnittstellen zwischen beiden Programmen sind in diesem Fall also am Coreeintritt und Coreaustritt lokalisiert. Die Kopplung erfolgt innerhalb der Thermohydraulik. Daher müssen die thermohydraulischen Parameter am Coreein- und Coreaustritt übergeben werden. Das sind jeweils der Druck, die Enthalpie und der Massenstrom, im einfachsten Fall also insgesamt 6 Parameter. Jedes Teilprogramm benötigt drei dieser Parameter als Randbedingung und berechnet die anderen drei, die dann wieder als Randbedingung in das andere Teilprogramm eingehen.

Ein Ziel der externen Kopplung ist es, die Kopplung möglichst ohne tiefgreifende Veränderungen in den einzelnen Teilprogrammen zu realisieren. Daher bietet sich die von ATHLET bereitgestellte Junction "FILL" für die Parameterübergabe an. Ein "FILL" ermöglicht das Abzapfen bzw. Einspeisen eines Fluids aus bzw. in ein von ATHLET modelliertes thermohydraulisches System. Wird das Fluid abgezapft, so genügt die Angabe des Massenstroms, während im Fall einer Einspeisung der Massenstrom und die Enthalpie des Fluids vorzugeben sind. Die Nutzung der ATHLET-Junction "FILL" für die Parameterübergabe führt also zwangsläufig zu folgendem Vorgehen (siehe auch Abb. 3.1.1):

- Die Drücke am Coreein- und Coreaustritt, sowie die Enthalpie am Coreeintritt werden von ATHLET berechnet und als zeitabhängige Randbedingungen an DYN3D übergeben.
- DYN3D berechnet die Massenströme am Coreein- und am Coreaustritt und die Austrittsenthalpie.

Während der stationären Rechnung erfolgt eine Iteration zwischen beiden Programmteilen, während bei der transienten Rechnung die DYN3D-Rechnung am Ende eines ATHLET-Zeitschritts erfolgt.

3.2.2 Praktische Realisierung der externen Kopplung

Das General Control and Simulation Modul (GCSM) von ATHLET bietet die Möglichkeit, die Kopplung auf einfache Weise und fast ohne Eingriffe in die einzelnen Programme zu realisieren. Es gestattet von ATHLET aus zu nutzerdefinierten Unterprogrammen zu verzweigen. Die Massenströme bzw. Enthalpien für die FILLS sind ebenfalls als GCSM-Signale vorzugeben. Es bietet sich also an, dieses Modul für die praktische Realisierung der Kopplung zu nutzen. ATHLET bleibt dabei das Hauptprogramm, welches DYN3D als "nutzerdefiniertes Unterprogramm" aufruft. Prinzipiell gibt es zwei Möglichkeiten von dem GCSM-Modul zu nutzerdefinierten Unterprogrammen zu verzweigen und zwar über die Controller "GUSER" und "LIBRARY". Die ersten Kopplungsvarianten wurden über GUSER realisiert. Dabei ist die Anzahl der Eingangsparameter auf 4 beschränkt. Soll das in DYN3D enthaltene Vermischungsmodell

genutzt werden, ist aber die Übergabe von mehr Parametern erforderlich (siehe Abschnitt 3.2.6). Daher wird in der nun vorliegenden Variante der Kopplung über LIBRARY zu DYN3D verzweigt.

Die Steuerung der Kopplung erfolgt mit Hilfe einer Interfacerroutine. Der Aufruf dieser Interfacerroutine mußte im ATHLET-Unterprogramm GLIB eingefügt werden. Außerdem war es erforderlich, die Dimensionierung der Felder für die GCSM-Library im ATHLET-Unterprogramm GLIBD zu organisieren. Weitere Eingriffe in ATHLET waren auf Grund der Möglichkeiten, die das GCSM-Modul bietet, nicht notwendig.

Im ATHLET-Eingabedatensatz wurde ein spezieller GCSM-Block für die Kopplung eingeführt (siehe Anhang A). Die an DYN3D zu übergebenden Parameter werden als Prozeßsignale im Node unmittelbar vor dem FILL definiert und damit von der ATHLET-Thermohydraulik an das GCSM-Modul übergeben. Die von DYN3D an ATHLET zu übergebenden Parameter werden in dem GCSM-Block definiert. Als Controller ist dabei "LIBRARY" anzugeben. Eingangssignale sind bei der Signaldefinition nicht anzugeben. Sie werden am Ende des GCSM-Eingabeteils unter dem Controlword "DYN3D" aufgeführt (siehe Anhang A). Der Parameter IOPT bestimmt, welcher Parameter definiert wird. Für die Kopplung mit DYN3D wurden folgende Zuordnungen festgelegt:

IOPT = -20 Austrittsenthalpie,
IOPT = -21 Massenstrom am Coreaustritt,
IOPT = -22 Massenstrom am Coreeintritt,
IOPT = -23 Nukleare Reaktorleistung.

Die Austrittsenthalpie muß dabei immer zuerst definiert werden, da nur in diesem Fall eine DYN3D-Rechnung erfolgt. Für die anderen Größen organisiert die Interfacerroutine nur die Datenübergabe. Die nukleare Reaktorleistung wird für die Kopplung nicht unbedingt benötigt, kann aber im GCSM-Modul zur Anlagensteuerung benutzt werden.

Die Interfacerroutine wird am Ende eines ATHLET-Zeitschritts aufgerufen. Sie verzweigt je nach Programmzustand zu den DYN3D-Unterprogrammen zum Einlesen der DYN3D-Eingangsdaten, zur stationären bzw. zur transienten Rechnung für einen Zeitschritt auf und realisiert den Datenaustausch. Zur Feststellung des jeweiligen Programmzustands und zur Datenübergabe von ATHLET an die Interfacerroutine werden von ATHLET zur Verfügung gestellte Steuervariablen und Unterprogramme genutzt. Auf weitere Funktionen der Interfacerroutine wird im folgenden noch näher eingegangen.

Beide Teilprogramme haben ihre eigene separate Zeitschrittsteuerung. Die Bestimmung der Zeitschrittweiten erfolgt dabei nach unterschiedlichen Kriterien. In der Interfacerroutine werden die aktuellen ATHLET- und DYN3D-Problemzeiten verglichen. Ist die DYN3D-Zeit kleiner als die ATHLET-Zeit so erfolgt eine DYN3D-Rechnung für einen Zeitschritt. Das wird solange wiederholt, bis die DYN3D-Zeit größer als die ATHLET-Zeit ist. Dann erfolgt eine Interpolation der an ATHLET zu übergebenden Parameter aus den aktuellen Werten und den Werten des letzten DYN3D-Zeitschritts

auf die aktuelle ATHLET-Zeit. Ist die DYN3D-Zeit bereits beim Aufruf der Interfacerroutine größer als die ATHLET-Zeit, was möglich ist, wenn die DYN3D-Zeitschrittweite größer als die ATHLET-Zeitschrittweite ist, so erfolgt keine DYN3D-Rechnung, sondern nur eine Interpolation. Dieses Verfahren ermöglicht, daß sowohl die ATHLET-Zeitschrittweite als auch die DYN3D-Zeitschrittweite die jeweils größere sein kann.

DYN3D erlaubt die Vorgabe verschiedener Randbedingungen u.a. auch die Vorgabe des Drucks am Coreaustritt und der Druckdifferenz über das Core. Diese Option wurde für die Kopplung genutzt.

In DYN3D waren einige kleinere Programmänderungen erforderlich. Sie betrafen im Fall der Kopplung überflüssige Eingangsdaten, die klare Trennung der Routinen für das Einlesen, die stationäre Rechnung und die transiente Rechnung für einen Zeitschritt sowie die Übergabe der in ATHLET als Randbedingung benötigten Parameter an die Interfacerroutine. Statt der im DYN3D-Eingangsdatensatz vorgesehenen Angabe einer Zeit, bis zu der Anfangszeit nicht erhöht wird, kann jetzt ein Zeitintervall vorgegeben werden, in dem ein ebenfalls anzugebender Wert für die Zeitschrittweite nicht überschritten wird. Das war erforderlich, da im Gegensatz zu reinen DYN3D-Rechnungen die Transiente im gekoppelten Programm oft nicht beim Zeitpunkt 0 beginnt.

3.2.3 Numerische Probleme und deren Lösung

Nach der prinzipiellen Realisierung der Kopplung zeigte sich sehr schnell, daß diese Koppelstrategie zu numerischen Problemen führt. Diese bestehen darin, daß sich bei anwachsendem Zeitschritt die von DYN3D berechneten Massenströme und die von ATHLET berechnete Druckdifferenz über das Core gegenseitig aufschaukeln. Dieser Effekt trat auch bei der Kopplung mit einfachen Thermohydraulikmodellen ohne Neutronenkinetik, mit denen die ersten Versuche zur Kopplung durchgeführt wurden, auf. Die Ursache dafür liegt in der expliziten Kopplung beider Programmteile. Die typischen Zeitkonstanten für die Rückkopplungen zwischen Massenströmen und Drücken werden von der Schallgeschwindigkeit bestimmt und sind daher sehr klein. Dementsprechend erhielt man numerisch stabile Rechnungen nur für sehr kleine Zeitschrittweiten ($<0,01$ s). Begrenzt man die Maximalzeitschrittweiten auf so kleine Werte, sind die Rechenzeiten für praktische Anwendungen viel zu groß. Eine implizite Kopplung beider Programmteile würde entweder tiefgreifende Änderungen in den Programmen erfordern oder im Fall eines iterativen Verfahrens zu großen Rechenzeiten führen. Daher mußte eine Möglichkeit gefunden werden, numerisch stabile Rechnungen für die vorliegende Koppelstrategie auch bei größeren Zeitschrittweiten zu erhalten.

Bei dem in ATHLET verwendeten Integrationsverfahren wird zur Erhöhung der Verfahrensordnung jeder Zeitschritt in mindestens zwei Unterzeitschritte zerlegt. Nach der Berechnung des Lösungsvektors mit der Schrittweite DT erfolgt die Berechnung eines zweiten Lösungsvektors durch zwei Integrationsschritte mit der Schrittweite $DT/2$. Aus diesen beiden Lösungsvektoren wird durch ein Extrapolationsverfahren ein neuer Lösungsvektor berechnet. Je nach Konvergenzverhalten erfolgen weitere

Unterteilungen der Zeitschrittweiten und Extrapolationen. Ziel ist es dabei, eine Extrapolation auf die Zeitschrittweite 0 durchzuführen. Können die vorgegebenen Fehlerschranken für die Zeitschrittweite DT nicht unterschritten werden, erfolgt eine Reduktion des Zeitschritts. Dann beginnt das ganze Verfahren von vorn. Das GCSM-Modul erlaubt auch eine Verzweigung zu DYN3D bei jedem Unterzeitschritt (enge Kopplung, Parameter ICB im Kopf des GCSM-Blocks gleich 2). Dadurch erhält man zwar kleinere Zeitschrittweiten für die Kopplung, jedoch ergeben sich aus dem Extrapolationsverfahren zusätzliche numerische Probleme. Daher wurde die sogenannte "Tandem-Kopplung" (ICB=1) realisiert, d.h. die DYN3D-Rechnung erfolgt erst nach dem vollständigen Abschluß eines ATHLET-Zeitschritts.

Zur Überwindung der numerischen Schwierigkeiten wurden Versuche mit verschiedenen Relaxationsmodellen durchgeführt, was jedoch nur zu Teilerfolgen führte. Eine Lösung des Problems konnte erst durch die Einführung eines Tiefpaßfilters erster Ordnung für die an DYN3D als zeitabhängige Randbedingung übergebene Druckdifferenz über das Core erreicht werden.

Die Differentialgleichung für ein Tiefpaßfilter erster Ordnung lautet:

$$y(t) + \tau \frac{dy(t)}{dt} = x(t) \quad (1)$$

wobei τ die Zeitkonstante des Filters, $x(t)$ das Eingangssignal und $y(t)$ das Ausgangssignal ist. Das Eingangssignal ist in diesem Fall die von ATHLET berechnete Druckdifferenz über das Core DP_{ATHLET} und das Ausgangssignal die an DYN3D als Randbedingung zu übergebende Druckdifferenz DP_{neu} . DP_{alt} ist die beim vorhergehenden Zeitschritt an DYN3D übergebene Druckdifferenz. Damit läßt sich die Gleichung folgendermaßen schreiben:

$$DP_{neu} + \tau \frac{DP_{neu} - DP_{alt}}{DT} = DP_{ATHLET} \quad (2)$$

Durch Umstellen erhält man:

$$DP_{neu} = \frac{1}{1 + \tau / DT} DP_{ATHLET} + \left(1 - \frac{1}{1 + \tau / DT}\right) DP_{alt} \quad (3)$$

Die Differenz zwischen DP_{ATHLET} und DP_{neu} wird auf die Absolutdrücke am Coreein- und Coreaustritt aufgeteilt:

$$\begin{aligned} P_{DYN3D, In} &= P_{ATHLET, In} - (DP_{ATHLET} - DP_{neu}) / 2 \\ P_{DYN3D, Out} &= P_{ATHLET, Out} + (DP_{ATHLET} - DP_{neu}) / 2 \end{aligned} \quad (4)$$

Die Absolutdrücke werden daher durch das Tiefpaßfilter nur unwesentlich beeinflusst. Mit diesem Tiefpaßfilter erhält man bei einer Zeitschrittweite von 1 s numerisch stabile Rechnungen für Zeitkonstanten des Tiefpaßfilters von 1 s oder größer. Das Tiefpaßfilter modifiziert nur die an DYN3D als zeitabhängige Randbedingung übergebene Druckdifferenz über das Core. Es verändert nicht die berechneten Lösungsvektoren.

Das Tiefpaßfilter hat praktisch keinen Einfluß auf die zu berechnenden Transienten. Es dämpft lediglich hochfrequente numerische Instabilitäten. Eine Verfälschung der

Ergebnisse könnte nur im Fall der Untersuchung von Druckwellenausbreitungen auftreten, wofür ATHLET allerdings ohnehin nur bedingt geeignet ist. Wie die betrachteten Testfälle belegen, hat das Tiefpaßfilter auch bei sehr schnellen Transienten mit plötzlichen und starken Druckänderungen im Core praktisch keinen Einfluß (siehe Abschnitt 4.1).

Die Zeitkonstante für das Tiefpaßfilter kann im ATHLET-Eingangsdatensatz unter dem Controlword DYN3D (siehe Eingangsdatenbeschreibung) angegeben werden. Es wird ein Wert von 2 s empfohlen.

3.2.4 Eingabedatensätze und Ausgabedateien bei externer Kopplung

Wie bereits beschrieben, sind die beiden Teilprogramme im wesentlichen nur durch eine Interfacerroutine gekoppelt. Sie können jeweils als eigenständige Programme genutzt werden. In dieser modularen Programmstruktur liegt ein Vorteil der externen Kopplung. Sie soll weitgehend erhalten bleiben. Daher verfügen beide Programme auch weiterhin über eigene separate Eingabedatensätze und Ausgabedateien. Eine Beschreibung der Modifikationen, die in den Eingangsdatensätzen im Fall der Kopplung durchzuführen sind, ist im **Anhang A** enthalten.

Die Ausgabe der Ergebnisse erfolgt ebenfalls in getrennte Dateien mit der Ausnahme, daß die wichtigsten DYN3D-Ergebnisse zusätzlich in den ATHLET-Plotdatenfile geschrieben werden und damit auch im "MAIN EDIT" des Listfiles erscheinen. Folgende DYN3D-Parameter wurden in den ATHLET-Plotdatenfile integriert:

- die aktuelle DYN3D-Zeit,
- die nukleare und die thermische Leistung,
- der mittlere Massenstrom,
- die mittleren Temperaturen und Enthalpien am Reaktoreintritt,
- die Druckdifferenz über das Core,
- die Reaktivität,
- die Werte am Austritt: Druck, Massendampfgehalt, Sättigungstemperatur, Sättigungsenthalpie, Verdampfungswärme, Dampfenenthalpie, Dichten der flüssigen und der dampfförmigen Phase,
- sowie für jedes Node im Kern: Druck, Massendampfgehalt, Temperatur der dominanten Phase, Volumendampfgehalt, Dichte, an das Kühlmittel übertragene Wärme, Hüllrohroberflächentemperatur, Temperatur in der Brennstoffmitte, radial gemittelte Brennstofftemperatur, Wärmeübertragungskoeffizienten im Gasspalt und zum Kühlmittel, Dicke der Oxidschicht und Deformation.

Die Ausgabe dieser Daten in den ATHLET-Plotdatenfile ermöglicht das Herausziehen der Werte mit dem ATHLET-Postprozessor und die einheitliche graphische Auswertung der Ergebnisse. Das hat sich insbesondere bei den Vergleichsrechnungen zwischen den Koppeloptionen (siehe Abschnitt 4.2) als hilfreich erwiesen. Die Ausgabe wird von der Interfacerroutine durch Aufruf eines kurzen Unterprogramms, welches die von ATHLET bereitgestellten Routinen zur Ausgabe in den Plotdatenfile nutzt, realisiert.

Zusätzlich zu den bisherigen Ausgaben besteht die Möglichkeit, sich für die Kopplung relevante Parameter in eine separate Datei ausgeben zu lassen. In dieser Datei werden u.a. die von ATHLET berechneten und die nach dem Tiefpaßfilter tatsächlich an DYN3D übergebenen Druckdifferenz gegenübergestellt. Außerdem ist ersichtlich, wann ein DYN3D-Zeitschritt gerechnet wird und wann nur Interpolationen durchgeführt werden.

3.2.5 Restart bei externer Kopplung

Die GCSM Option LIBRARY bietet die Möglichkeit die Daten nutzerdefinierter Unterprogramme in sogenannte INTEGER- bzw. REAL-Pools abzulegen. Das wird von der Interfacerroutine realisiert. Das Wegschreiben der Daten in den Restart-Datensatz, sowie das Lesen der Daten im Fall eines Restarts wird dann automatisch von ATHLET organisiert. Der Nutzer des gekoppelten Programms kann daher die Restart-Möglichkeiten von ATHLET in der gewohnten Art und Weise nutzen.

3.2.6 Borsäurekonzentration und Vermischungsmodell

Zusätzlich zu den oben erwähnten 6 thermohydraulischen Parametern, die bei der externen Kopplung zwischen den Teilprogrammen ausgetauscht müssen, benötigt DYN3D für die Neutronenkinetik noch die Eintrittsborsäurekonzentration. Diese muß als GCSM-Signal definiert werden und der Signalname unter dem Controlwort DYN3D im ATHLET-Eingangsdatensatz aufgeführt werden (siehe Eingangsdatenbeschreibung). Die Interfacerroutine übergibt den jeweils aktuellen Wert in analoger Weise zur Eintrittsenthalpie an DYN3D. Die Borsäurekonzentration am Coreeintritt kann z.B. mit dem in ATHLET verfügbaren Borsäure-Tracking-Modell bestimmt werden.

Soll das in DYN3D enthaltene Vermischungsmodell für den WWER-440 genutzt werden, genügt es nicht, nur jeweils einen Wert für die Eintrittsenthalpie und die Eintrittsborsäurekonzentration von ATHLET an DYN3D zu übergeben. Stattdessen müssen je nach der betrachteten Schleifenzahl 2 bis 6 Werte für die entsprechenden Schleifenparameter übergeben werden. Das Vermischungsmodell liefert die Enthalpie- bzw. Borsäureverteilungen am Coreeintritt, d.h. die Eintrittswerte für die einzelnen Kassetten.

Das z.Z. in DYN3D integrierte Vermischungsmodell gilt nur für stationäre Zustände und stellt daher für transiente Prozesse nur eine Näherung dar. Es gilt weiterhin nur bei ungefähr gleichen Massenströmen in den einzelnen Schleifen (Abweichungen < 5%). Es ist geplant, dieses Modell für instationäre Vorgänge und ungleiche Schleifenmassenströme zu erweitern.

Das Vermischungsmodell wird quasistationär angewandt, d.h. die Parameterverteilung am Coreeintritt wird in jedem Moment ohne Transportzeitverzögerung aus den Parametern in den Schleifen berechnet. Daher sollten im Fall der Nutzung des Vermischungsmodells auch der Downcomer und das untere Plenum entsprechend der modellierten Schleifenzahl getrennt weitergeführt werden und die Werte am Austritt

des unteren Plenums an das Vermischungsmodell übergeben werden. Auf diese Weise wird die Transportverzögerung dann in ATHLET berechnet.

Im ATHLET-Eingangsdatensatz ist unter dem Controlwort "DYN3D" die Anzahl der modellierten Schleifen und die Namen der GCSM-Signale für die entsprechenden Schleifenwerte für Enthalpie und Borsäurekonzentration anzugeben. Außerdem müssen die einzelnen Schleifenmassenströme als GCSM-Signal definiert werden, wobei nur die Relationen der einzelnen Werte wichtig sind.

3.3 Interne Ankopplung der 3D Neutronenkinetik an ATHLET

3.3.1 Grundprinzipien der internen Kopplung

Das Kernmodell DYN3D/M2 besteht aus 3 wesentlichen Teilen:

- 3-dimensionale Neutronenkinetik
- Thermohydraulik und Brennstabmodell (Code FLOCAL)
- Berechnung der Wirkungsquerschnitte

Die interne Kopplung besteht in der Ankopplung des neutronenkinetischen Teils einschließlich der Querschnittsberechnung an ATHLET. Die Generierung der makroskopischen Wirkungsquerschnitte, die für die gegenwärtige DYN3D-Version (sowohl für die interne, als auch die externe Kopplung) auf der Gruppendatenbibliothek MAGRU der KAB AG beruht /Agt90/, wird im Abschnitt 6 näher beschrieben.

Bei der internen Kopplung erfolgt die gesamte Modellierung des Kreislaufsystems einschließlich der thermohydraulischen Berechnung der Kühlkanäle des Reaktorkerns und der Temperaturen des Brennstoffes im Code ATHLET. Daher kann man erwarten, daß keine besonderen Maßnahmen zur Dämpfung von numerisch bedingten Schwingungen im gekoppelten System erforderlich sind, wie es für die externe Kopplung der Fall ist. Bei der externen Kopplung wird der ATHLET-Kreislauf aufgeschnitten, und am Ein- und Austritt werden gewissermaßen Massenstromrandbedingungen aufgezwungen. Weiterhin lagen Erfahrungen von der Implementation der Punktkinetik und eindimensionalen Kinetik in den ATHLET-Code vor. Bei der internen Kopplung sollte deshalb analog vorgegangen werden.

Die 3-dimensionale Neutronenkinetik zur Lösung der Neutronendifusionsgleichung basiert auf einer nodalen Methode für hexagonale Geometrie. Dabei werden für die Lösung der stationären und instationären Gleichung unterschiedliche numerische Verfahren benutzt. Zur Lösung der statischen Aufgabe wird das Eigenwertproblem mit Hilfe von Quelliterationen behandelt. Zur Integration der zeitabhängigen Gleichung wird eine Exponentialtransformation zusammen mit einem impliziten Differenzenverfahren verwendet, womit das Gleichungssystem in ein stationäres inhomogenes Gleichungssystem überführt wird.

Die interne Kopplung erforderte umfangreiche Vorarbeiten am Programm DYN3D, da Neutronenkinetik einerseits und Thermohydraulik und Brennstofftemperaturberechnung andererseits nicht gleichberechtigt nebeneinander standen. Entsprechend der historischen Entwicklung des Programms wurde zuerst das rein neutronenkinetische Rechenprogramm HEXDYN3D (stationär und transient) entwickelt. Dieses wurde danach mit einer einfachen Temperaturberechnung für Kühlmittel und Brennstoff ergänzt (DYN3D/M1). In DYN3D/M2 wurde die einfache Temperaturberechnung durch Implementation der entsprechenden FLOCAL-Routinen im Programm ersetzt. In der Variante der internen Kopplung mit ATHLET sollte entsprechend der Integration der eindimensionalen Kinetik die neutronenkinetische Berechnung als Teil von ATHLET betrachtet werden. Es war dabei beabsichtigt, die Arbeiten zur internen Kopplung eng mit den Vorhaben zur Kopplung anderer 3-dimensionaler Kernmodelle wie QUABOX/-

CUBBOX oder BIPR-8 abzustimmen. Dazu mußte DYN3D so organisiert werden, daß der Aufruf der stationären und instationären Neutronenflußberechnung von DYN3D über Interface-Routinen möglich wird.

In Absprache mit der GRS wurde zunächst vorgesehen, daß die interne Kopplung für die Option "Lose Kopplung" von ATHLET verwirklicht wird. Dabei wird die neutronenkinetische Integration für einen gegebenen ATHLET-Zeitschritt nach der fluiddynamischen Rechnung ausgeführt. Eine Iteration zwischen beiden Rechnungen ist dabei nicht durchgeführt. Weiterhin mußten folgende allgemeine Forderungen erfüllt werden:

- Die Namen aller Subroutinen von DYN3D müssen mit ND anfangen.
- Alle benannten COMMON-Blöcke von DYN3D müssen mit CND beginnen.
- Es dürfen in DYN3D Routinen keine COMMON-Blöcke von ATHLET verwendet werden. Benötigte Variablen und Arrays von Athlet dürfen nur als formale Parameter in DYN3D-Routinen auftreten. Die Übergabe der Variablen muß über die definierten Interface-Routinen erfolgen.
- Der Aufruf der DYN3D-Routinen erfolgt ebenfalls über diese Interface-Routinen.
- Die geometrische Definition der Thermofluidobjekte und Wärmeübertragungsobjekte in ATHLET und die geometrische Unterteilung des Reaktorkerns in DYN3D soll weitgehend unabhängig sein. Zur Parameterübergabe müssen die Variablen für das jeweils andere Gitter geeignet transformiert werden.
- Eingabe der Daten, Ausgabe von Ergebnissen sowie der Restart ist in die von ATHLET benutzten Files zu integrieren.

Mit diesen Forderungen kommt es zu keiner Kollision mit den in ATHLET verwendeten Bezeichnungen und bei der weiteren ATHLET-Entwicklung treten keine Beschränkungen auf, die auf das angekoppelte 3D Modell zurückzuführen sind.

3.3.2 Datenaustausch in der internen Kopplung

3.3.2.1 Datenübertragung von DYN3D zu ATHLET

Im Programm DYN3D (neutronenkinetischer Teil) wird die stationäre und instationäre 2-Gruppen-Neutronendiffusionsgleichung gelöst. Aus den Neutronenflüssen der Noden wird die Leistungsdichte berechnet. Eine Node ist ein Teilstück eines hexagonalen Brennelementes, dessen Länge von dem gewählten axialen Gitter abhängt. Die axiale Einteilung kann in DYN3D im Prinzip beliebig gewählt werden. Die Leistungsdichte wird zunächst für dieses axiale Gitter berechnet, wobei über mehrere Brennelemente gemittelt werden kann. Diese Möglichkeit der radialen Mittelung wurde eingeführt, um Kernbereiche aus mehreren Brennelementen zusammenzufassen und in ATHLET

nur durch ein Thermofluidobjekt beschreiben zu können. Diese Option ist vorteilhaft, da die Rechenzeit von ATHLET mit der Anzahl der gewählten parallelen Thermofluidobjekte stark ansteigt.

Diese Leistungsdichten werden für ATHLET auf Brennstableistungen umgerechnet, wobei eine Umrechnung auf das axiale ATHLET-Gitter erfolgt, das mit dem axialen DYN3D-Gitter nicht übereinstimmen muß. Diese Umrechnung basiert in DYN3D auf der axialen Neutronenflußentwicklung, über welche entsprechend dem ATHLET-Gitter integriert wird.

3.3.2.2 Datentransfer von ATHLET zu DYN3D

Für die Berücksichtigung der neutronenkinetischen Rückkopplung ist es erforderlich, Brennstofftemperaturen, Moderatortemperaturen, Moderatorichten und Borsäurekonzentrationen von ATHLET zu DYN3D zu übertragen. Dabei muß eine Transformation auf das DYN3D-Gitter erfolgen. Da die Nodalisierung der Brennstäbe als Wärmeleitungsobjekte sich von der Nodalisierung der Thermofluidobjekte unterscheiden kann, müssen die Brennstofftemperaturen und die Parameter der Thermofluidobjekte gesondert betrachtet werden. Für die Bereitstellung der Variablen, die übertragen werden sollen, konnten Vorarbeiten genutzt werden, die zur Ankopplung der verschiedenen 3-dimensionalen Modelle durchgeführt wurden /Fom93/.

Brennstofftemperaturen:

Die Brennstofftemperaturen werden zunächst über die gewählten radialen Schichten gemittelt. Es stehen damit die Mittelwerte der axialen Noden der Wärmeleitungsobjekte in ATHLET zur Verfügung. Diese Mittelwerte werden dann auf das DYN3D-Gitter transformiert. Dabei wird zunächst die Brennstofftemperaturverteilung in axialer Richtung mittels Splineinterpolation geglättet. Die im DYN3D-Gitter benötigten Mittelwerte werden daraus berechnet. Im Falle der Übereinstimmung des Gitters des Wärmeleitobjektes mit dem axialen DYN3D-Gitter wird auf diese Prozedur verzichtet.

Parameter der Thermofluidobjekte:

Die Parameter des Fluids sind an den oberen Grenzen der Kontrollvolumina gegeben. Das gleiche gilt auch für die Konzentration der Borsäure. Zuerst erfolgt eine Berechnung der über die Phasen gemittelten Werte von Fluidtemperatur und Fluidichte in den Kontrollvolumina der Thermofluidobjekte. Diese Werte werden mittels linearer Interpolation auf das DYN3D-Gitter umgerechnet. Auch wenn die Grenzen der Thermofluidobjekte mit dem DYN3D-Gitter übereinstimmen, müssen aus den Variablen an den Grenzen der Kontrollvolumina die axialen Mittelwerte berechnet werden. Für das erste Volumen am Spaltzoneneintritt wird der Mittelwert gleich dem Wert am Austritt gesetzt, da kein Wert am Eintritt zur Verfügung steht.

Die für die Transformationen von DYN3D benötigten Daten der ATHLET-Objekte werden aus dem Eingabedatensatz gelesen und gespeichert. Damit können die Daten in einer für die Transformationen geeigneten Form gespeichert werden und es muß nicht auf Arrays von ATHLET zurückgegriffen werden.

3.3.3 Ein- und Ausgabe der Daten bei interner Kopplung

Die für das neutronenkinetische Modell DYN3D spezifischen Daten müssen bei Verwendung des Modells unter dem speziellen Keyword NEUKIN3D in den Eingabedatenesatz von ATHLET integriert werden. Die Beschreibung dieser Eingabedaten erfolgt in **ANHANG B**. Für die interne Kopplung mußten an DYN3D umfangreiche Änderungen der Programmstruktur vorgenommen werden, die sich auch in den Eingabedaten widerspiegeln. Die Struktur der DYN3D-Eingabedaten für die interne Kopplung entspricht nur in Teilen der Dateneingabe für das externe DYN3D. Die Eingabedatenbeschreibung für die interne Kopplung wird deshalb komplett dargestellt. Die Bibliothek der parametrisierten Neutronenwirkungsquerschnitte wird auf einem gesonderten File bereitgestellt. Im Moment ist die MAGRU-Bibliothek für den WWER-440 an das Programm angeschlossen. Es ist beabsichtigt, die Arbeiten zur Einbeziehung weiterer Bibliotheken im Folgeprojekt durchzuführen.

Die Ausgabe der Daten, die für die Neutronenkinetik spezifisch sind, ist in das Ausgabefile von ATHLET integriert. Die Stableistungen werden auf den entsprechenden Feldern von ATHLET abgespeichert und ihre Ausgabe erfolgt zusammen mit der Ausgabe der anderen Variablen von ATHLET. Das gleiche gilt für die Plotdaten. Zusammen mit dem MAIN EDIT werden die neutronenkinetischen Ergebnisse im Output-Listing ausgegeben.

3.3.4 Programmtechnische Realisierung der internen Kopplung

Ohne zu stark auf Details einzugehen, sollen hier einige wesentliche Punkte der programmtechnischen Realisierung beschrieben werden.

Wie schon erwähnt, sollte es möglich sein, mehrere hexagonale Brennelemente zusammenzufassen und durch einen Kühlkanal zu beschreiben. Diese Option ist auch im eigenständigen Programm DYN3D und damit speziell für die GCSM-Kopplung von Bedeutung. Deshalb wurde diese Möglichkeit zuerst im DYN3D realisiert. Danach erfolgten speziell für die interne Kopplung die Änderungen in der Programmorganisation, so daß der Aufruf der stationären und instationären neutronenkinetischen Berechnung in den ATHLET-Interfacerroutinen möglich wird. Zur Realisierung der internen Kopplung stand zunächst die ATHLET-Version 1.1A zur Verfügung. Der Übergang zur Version 1.1B erforderte verschiedene weitere Änderungen.

Abb. 3.3.1 zeigt ein grobes Schema der internen Kopplung von DYN3D mit ATHLET 1.1B. Die schwarzen Pfeile symbolisieren den hierarchischen Aufruf der Routinen und die grauen Pfeile die wesentlichsten Datentransfers. Von den Interface-Routinen NINPUT, NINTER, NSET ARESTI UND ARESTO, die für die Einbeziehung von Punktkinetik und eindimensionaler Kinetik im ATHLET-Code verwendet werden, erfolgt der Aufruf der speziellen Interface-Routinen N3INP, N3INTE, N3SET und N3REST für die dreidimensionale Kinetik. Diese Routinen weisen eine einheitliche Grundstruktur für die verschiedenen 3D-Modelle auf. Darüberhinaus waren verschiedene Programmänderungen erforderlich, die speziell für die Kopplung mit DYN3D von

Bedeutung sind. Es ist gesichert, daß die Aufrufe dieser Interface-Routinen in ATHLET einheitlich sind, d.h. diese Routinen in der gekoppelten Version ohne Änderungen in ATHLET ersetzt werden können. Die einzelnen Routinen haben folgende Funktion:

- N3INP: Aufruf der DYN3D-Routine NDISTA zum Input der Eingabedaten
- N3INTE: Aufruf der stationären und instationären neutronenkinetischen Rechnung über die Routinen NDSTAT und NDTRAN
- N3SET: Preparation der Rückkopplungsgrößen wie Brennstofftemperaturen, Kühlmitteltemperaturen, Kühlmitteldichten und Borsäurekonzentration. Bei Berechnung der Borsäurekonzentration muß zum Teil das verwendete Rückkopplungsmodell beachtet werden. Es ist wichtig, ob volumenbezogene oder teilchenbezogene Größen benötigt werden. Die Berechnung der Wirkungsquerschnitte mit Hilfe der MAGRU-Library erfolgt mit der auf den Moderator bezogenen Konzentration der Borsäure, die bei der Berechnung der makroskopischen Querschnitte mit der mittleren Dichte des Moderators multipliziert wird.
- N3REST: Erzeugen und Lesen des Restart-File. In diese Routine mußten die Variablen und Arrays von DYN3D integriert werden, die zum Restart erforderlich sind. Entsprechende Befehle zum Speichern und Lesen dieser Größen unter Verwendung der in ATHLET-Subroutine ARESIO wurden in diese Routine integriert.

Von diesen Interfacerroutinen werden die entsprechenden DYN3D-Unterprogramme aufgerufen:

- NDISTA: In NDISTA und weiteren Unterprogrammen erfolgt das Einlesen der Daten für die 3D-Neutronenkinetik aus dem ATHLET-Inputfile. Die Daten werden unter dem dem Keyword 'NEUKIN3D' im Inputfile gelesen. Das Eingabeschema von DYN3D wurde weitgehend beibehalten. Für die Kopplung mußten einige zusätzliche Daten aufgenommen werden. Die neutronenphysikalischen Daten wie parametrisierte Wirkungsquerschnitte können von einem separaten File eingelesen werden. Es ist auch möglich, sie direkt in das ATHLET-Inputfile aufzunehmen. Dies ist z.B. sinnvoll, wenn nur wenige Datensätze benötigt werden. Weiterhin werden zur Transformation der übergebenen Daten von DYN3D zu ATHLET und umgekehrt einige geometrische Daten der ATHLET-Modelle aus dem ATHLET-Inputfile gelesen und zur Verwendung in DYN3D separat gespeichert. Die Eingabedaten werden im Outputlisting ausgegeben.
- NDSTAT: In NDSTAT erfolgt der Aufruf der Routinen zur stationären Neutronenfluß- und Eigenwertberechnung. Die Leistungen für die Brennstäbe werden berechnet, auf das ATHLET-Gitter transformiert und dem ATHLET-Array QD (COMMON CNKQD) abgespeichert. Während des wechselseitigen Aufrufes der thermohydraulischen und Brennstab-Berechnung einerseits und der Neutronenfeldberechnung andererseits wird der

Eigenwert des gekoppelten Systems ermittelt.

- NDTRAN:** Die transiente Neutronenflußberechnung wird in NDTRAN aufgerufen. NDTRAN löst in einem oder mehreren neutronenkinetischen Zeitschritten die instationäre Neutronendiffusionsgleichung für einen ATHLET-Zeitschritt. Es wird die lose Kopplung zwischen Thermohydraulik und Neutronenkinetik angewandt, d.h. Thermohydraulik und Neutronenkinetik werden nacheinander aufgerufen. Vergleichsrechnungen zwischen loser und enger Kopplung mit dem System ATHLET-BIPR8 zeigten bisher keinen Vorteil der engen Kopplung hinsichtlich Rechenzeit bei erreichter Genauigkeit.
- Der neutronenkinetische Zeitschritt ist kleiner oder gleich dem ATHLET-Zeitschritt. Er wird im wesentlichen aus dem letzten Kinetik-Zeitschritt bestimmt. Falls nach längerer Rechnung mit geringer Störung der neutronenkinetische Zeitschritt z.B. infolge eines Regelstabauswurfes plötzlich stark verkürzt werden muß, so verkürzt man den maximalen ATHLET-Zeitschritt in diesem Zeitbereich über die Eingabedaten von ATHLET. Im Verlaufe der Verifikation des gekoppelten Programms ist eine automatische Steuerung anzustreben.
- Die Stableistungen werden in analoger Weise wie in NDSTAT aus den Neutronenflußverteilungen berechnet, auf das ATHLET-Gitter transformiert und dem ATHLET-Array QD abgespeichert.
- NDFTRA:** Die über die radialen Schichten des Brennstabes gemittelten Temperaturen werden auf das DYN3D-Gitter transformiert. Hierbei wird mittels Spline-Interpolation eine Kurve erzeugt, aus der die mittleren Temperaturen des DYN3D-Gitters durch Integration gewonnen werden. Im Falle gleichen Gitters unterbleibt diese Prozedur. Die Brennstofftemperaturen werden zur Berechnung der Rückkopplung auf ein DYN3D-Array gespeichert. Fallen in einen ATHLET-Zeitschritt mehrere neutronenkinetische Zeitschritte, so werden die Brennstofftemperaturen von Anfang und Ende des ATHLET-Zeitschrittes linear interpoliert.
- NDOTRA:** Nach Berechnung der Mittelwerte für Kühlmitteldichte, Kühlmitteltemperatur und Borsäurekonzentration in der Interfaceroutine N3SET werden die Mittelwerte für das DYN3D-Gitter mittels linearer Interpolation berechnet. Es wird hier linear interpoliert, damit mögliche unphysikalische Werte, die bei Anwendung der Spline-Interpolation im Falle starker axialer Änderungen der Größen auftreten können, vermieden werden. Bei gleichem Gitter wird eine Mittelung der ATHLET-Variablen über dem axialen Gitter vorgenommen, da die Variablen im ATHLET am Austritt der Kontrollvolumen vorliegen und DYN3D die Mittelwerte im Intervall benötigt. Im untersten Kontrollvolumen am Kerneintritt steht nur der Austrittswert zur Verfügung, da in N3SET die Werte des vorhergehenden Kontrollvolumens nicht vorliegen. In diesem Falle wird der Mittelwert gleich dem Austrittswert gesetzt. Da sich dieses Kontrollvolumen im allgemeinen am untersten Rand des Reaktorkerns im Bereich niedrigen Neutronenflusses befindet, kann diese Näherung als ausreichend gelten.

Die auf das DYN3D-Gitter von NDFTRA und NDOTRA transformierten Größen werden an die Routinen zur Querschnittsberechnung in NDSTAT bzw. NDTRAN übergeben, um die Rückkopplung zu berücksichtigen.

Während der stationären Rechnung erfolgt der wechselseitige Aufruf von ATHLET und DYN3D, wobei der Eigenwert k_{eff} des rückgekoppelten Reaktorkerns berechnet wird. Der Eigenwert, der sich am Ende der stationären Iterationen einstellt, wird zur Korrektur der Neutronenmultiplikation in der transienten Rechnung benutzt. In der transienten Rechnung erfolgt im Rahmen der losen Kopplung ein wechselseitiger Aufruf von thermohydraulischer Rechnung und Neutronenkinetik. Zuerst erfolgt eine thermohydraulische Rechnung mit ATHLET und danach wird in DYN3D die Neutronenkinetik über einen oder mehrere Zeitschritte integriert. Die Länge des neutronenkinetischen Zeitschrittes wird ausgehend von den Neutronenflußänderungen des vorhergehenden Zeitschrittes gesteuert. Weiterhin werden maximale und minimale Grenzen sowie die Länge des ATHLET-Zeitschrittes als obere Grenze eingehalten. Im Verlaufe des geplanten Folgeprojektes sind Vervollkommnungen der Zeitschrittsteuerung vorgesehen.

Die Ausgabe neutronenkinetischer Daten erfolgt im ATHLET-Listing. Weiterhin werden globale neutronenkinetische Daten wie nukleare Leistung, relative Leistung und Reaktivität in das Plot-File geschrieben. Zusätzlich ist es wahlweise möglich, normierte Leistungsdichteverteilungen im Plot-File auszugeben. Zur Ausgabe DYN3D-interner Variablen wurde der Aufruf der ATHLET-Routine SOCMP in das neutronenkinetische Programm NDPLLOT aufgenommen.

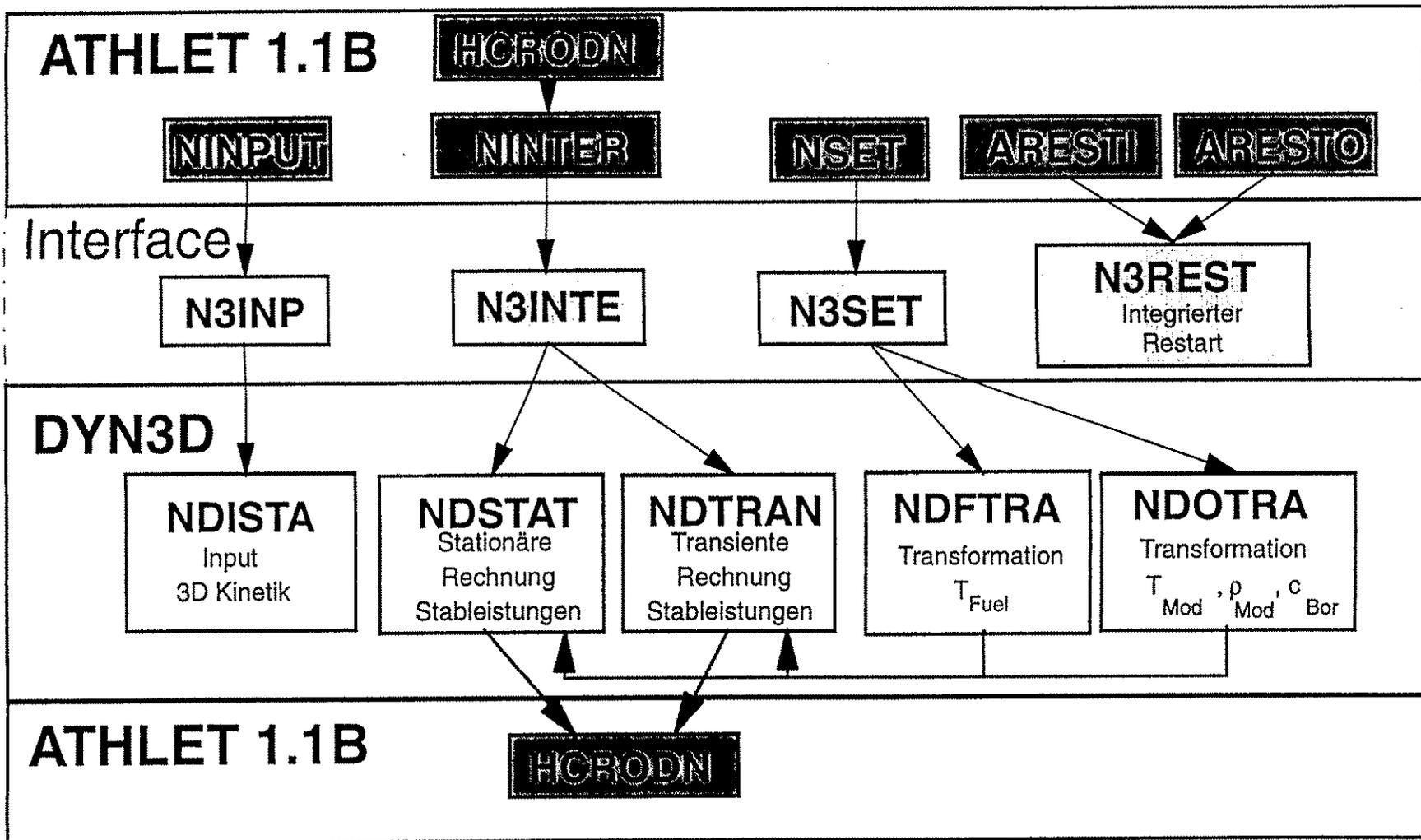


Abb. 3.3.1: Prinzipielles Schema der internen Kopplung Neutronenkinetik DYN3D - ATHLET

4. Funktionstest des Komplexes DYN3D-ATHLET anhand ausgewählter Testfälle

4.1 Testrechnungen für die externe Kopplung

4.1.1 Eingangsdatensätze

Die im folgenden vorgestellten Rechnungen sind erste Funktionstests für die externe Kopplung. Mit diesen Rechnungen sollte die Stabilität des gekoppelten Programms, der Einfluß des Tiefpaßfilters und die physikalische Sinnfälligkeit der Ergebnisse untersucht werden. Dafür wurden 3 Testfälle betrachtet. Für diese Testfälle wurden reine ATHLET-Rechnungen mit Punktkinetik und Rechnungen mit dem gekoppelten Programm durchgeführt.

Grundlage für die Rechnungen ist der von der GRS erstellte ATHLET-Datensatz für den WWER-440/213. Für die Testrechnungen wurde dieser stark vereinfacht, um bei der großen Anzahl der durchgeführten Rechnungen Rechenzeit zu sparen. Während die Modellierung des Primärkreislaufs im wesentlichen unverändert blieb, wurden sämtliche Noteinspeisesysteme aus dem Datensatz entfernt und der Sekundärkreislauf auf die Dampferzeugersekundärseiten beschränkt.

Das Nodalisierungsschema des Datensatzes ist in der Abb. 4.1.1 dargestellt. Es wird

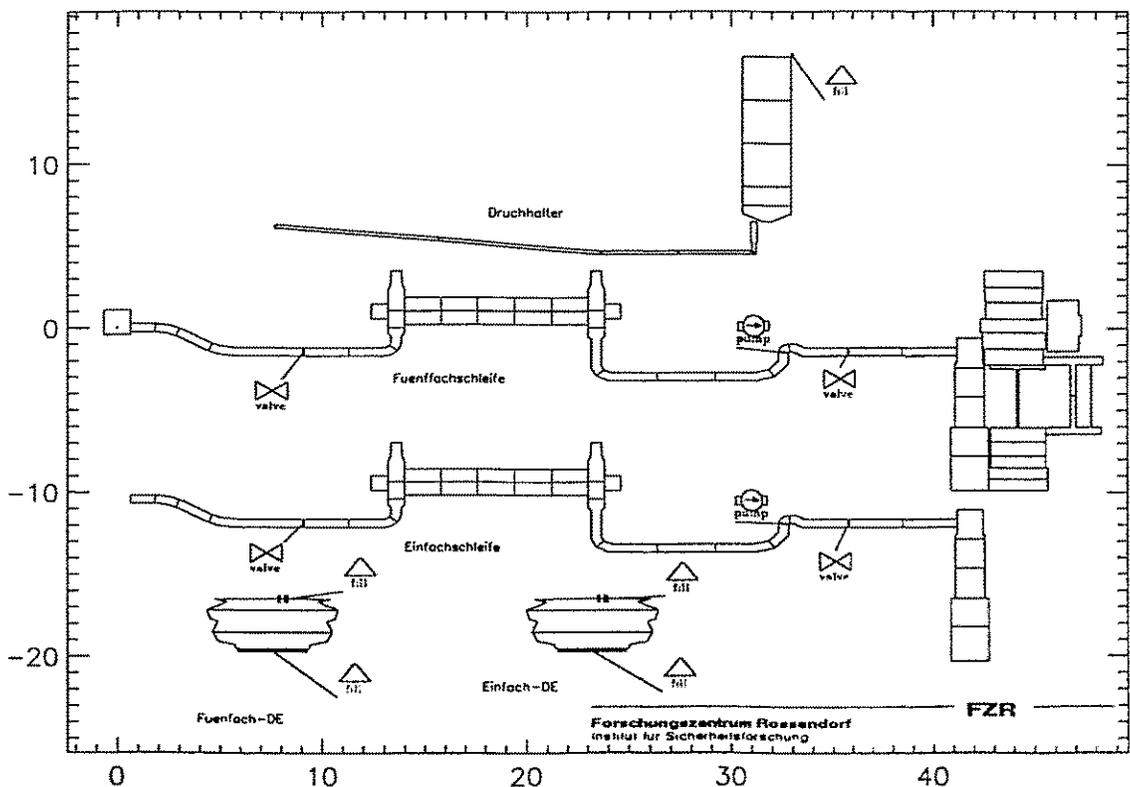


Abb. 4.1.1: Nodalisierungsschema für den Testdatensatz

eine Fünffach- und eine Einzelschleife modelliert. Die erste Prioritätskette führt vom Außenring des oberen Plenums über die Fünffachschleife (heißer Strang, Dampferzeuger, kalter Strang mit Hauptumwälzpumpe), den Downcomer, das untere Plenum, den Core-Bypass und das obere Plenum wieder zum Beginn. In einer zweiten Prioritätskette wird im Fall der reinen ATHLET-Rechnung parallel zum Bypass das auf einen Kühlkanal reduzierte Core definiert. Für die Rechnungen mit dem gekoppelten Programm werden dann statt des Cores in ATHLET die Fills für den Coreintritt und -austritt definiert. Die sechste Kühlschleife bildet als Einzelschleife parallel zur Fünffachschleife die dritte Prioritätskette. Weitere Prioritätsketten beschreiben den Druckhalter und Teile der Dampferzeuger.

Die Sicherheitsventile am Druckhalter werden durch Fills nachgebildet. Sie sprechen bei einem Druck von 14,0 MPa (Ventil 1) und 14,6 MPa (Ventil 2) an. Werden diese Drücke erreicht, wird ein fester Massenstrom vorgegeben. Das Öffnen und das Schließen wird durch Zwischenschaltung eines Tiefpaßfilters für die Massenströme in den GCSM-Eingangsdaten simuliert.

Der Sekundärkreislauf wird nur durch einen 5-fach und einen einzelnen Dampferzeuger mit Fills am Ein- und Ausgang modelliert. Der Speisewassermassenstrom wird über den Höhenstand im Dampferzeuger und der Austrittsmassenstrom über den Druck im Dampferzeuger geregelt.

Im Fall des gekoppelten Programms wurde mit 37 Kühlkanälen, was einem 30°-Sektor des WWER-440-Reaktorcores entspricht, gerechnet.

4.1.2 Testfall 1: Unkontrolliertes Ausfahren einer Regelgruppe

Im ersten Testfall wird das Verhalten der Reaktoranlage bei unkontrolliertem Ausfahren der Regelgruppe K6 simuliert. Von 0 bis 500 s erfolgt eine stationäre Rechnung. Von 500 s bis 530 s wird die Regelgruppe K6 von 175 cm auf 250 cm (Endstellung) herausgefahren. Eine Reaktorabschaltung erfolgt nicht.

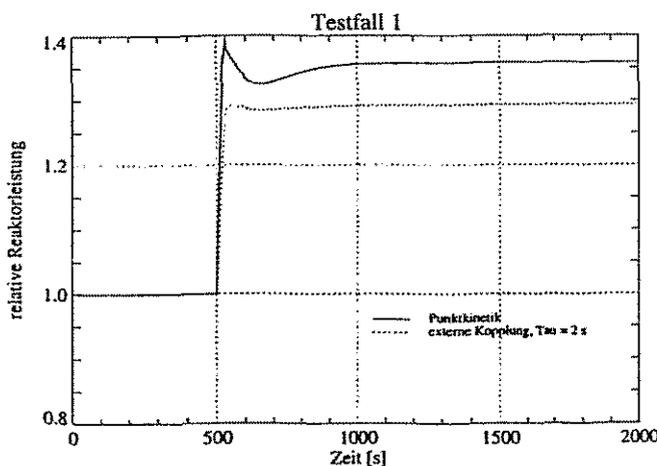


Abb. 4.1.2: Relative Reaktorleistung beim Testfall 1

Für den Fall der reinen ATHLET-Rechnung mit Punktkinetik wurde die Regelstabwirksamkeit als Tabelle im Eingangsdatensatz vorgegeben, so daß die entsprechende externe Reaktivität dem Punktkinetikmodell von ATHLET als GCSM-Signal übergeben werden kann. Dabei wurde die im ATHLET-Datensatz enthaltene Tabelle verwendet. Es erfolgte also kein Abgleich mit den DYN3D-Daten,

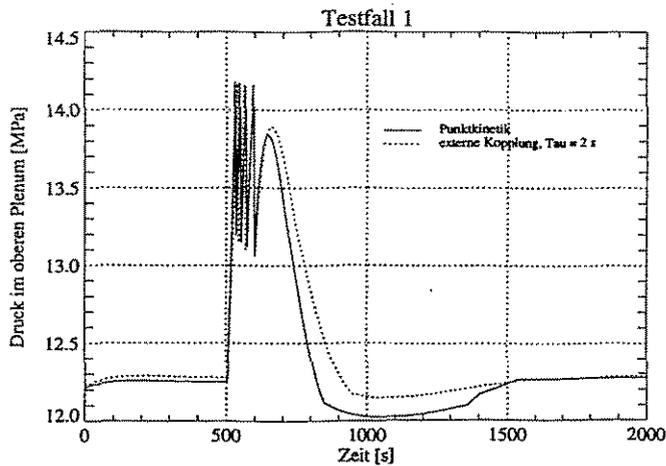


Abb. 4.1.3: Druck im oberen Plenum beim Testfall 1

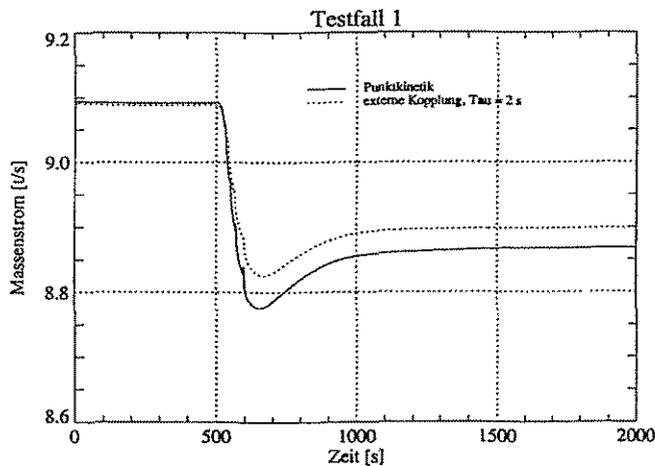


Abb. 4.1.4: Massenstrom am Core Austritt beim Testfall 1

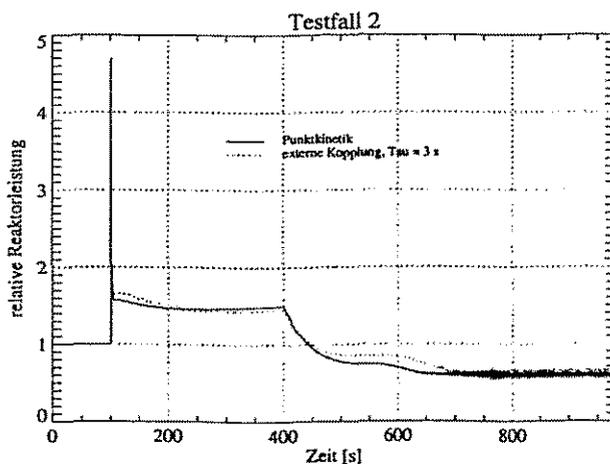


Abb. 4.1.5: Relative Reaktorleistung beim Testfall 2

da es sich nur um einen ersten Plausibilitätstest für die externe Kopplung handelt. Bei der Rechnung mit dem gekoppelten Programm wird das Ziehen der Stäbe im DYN3D-Eingangsdatensatz simuliert.

Die in dem ATHLET-WWER-440-Datensatz enthaltenen Parameter, wie z.B. die Reaktivitätskoeffizienten für die Rückkopplung, wurden nicht verändert.

Der mit dem Leistungsanstieg (s. Abb. 4.1.2.) verbundene Druckanstieg (s. Abb. 4.1.3.) führt zum mehrmaligen Öffnen des ersten Druckhalterventils, bevor nach ca. 1500 s wieder ein stabiler Zustand erreicht wird. Im Zeitraum von ca. 800 s bis 1500 s arbeiten die Druckhalter-Heizer. Dampf tritt im ersten Kreislauf nicht auf. Die Ergebnisse beider Rechnungen stimmen qualitativ überein, quantitative Abweichungen haben ihre Ursache in den unterschiedlichen Modellen für die Neutronenkinetik, für die Wärmeübertragung und die Thermohydraulik im Core und die Verwendung unterschiedlicher Daten.

4.1.3 Testfall 2: Prompte Reaktivitätszufuhr

In einem zweiten Testfall sollte das Verhalten des gekoppelten Programms beim Auftreten von Dampf an den Koppelstellen untersucht werden. Dafür wurde folgende Situation simuliert:

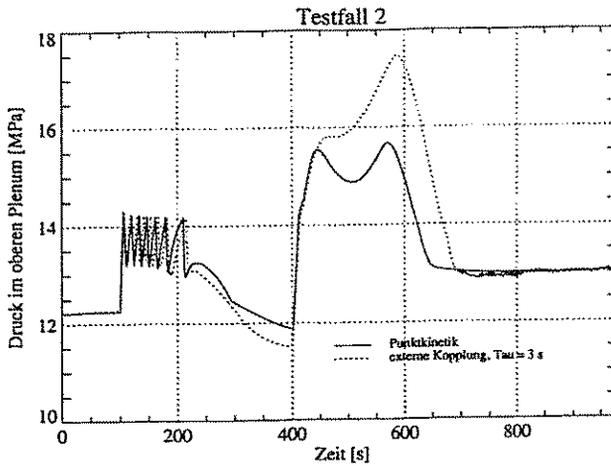


Abb. 4.1.6: Druck im oberen Plenum beim Testfall 2

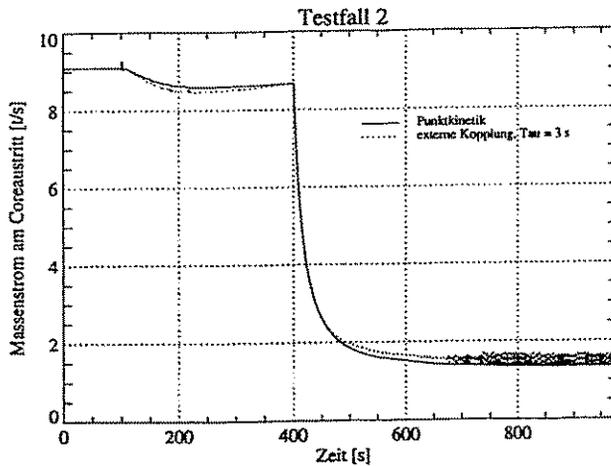


Abb. 4.1.7: Massenstrom am Coreaustritt beim Testfall 2

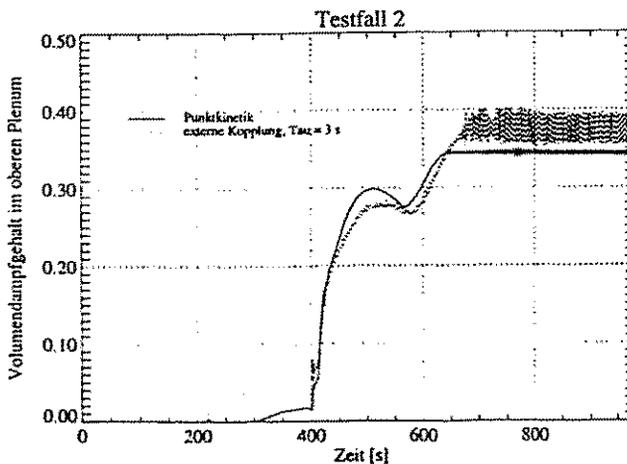


Abb. 4.1.8: Volumendampfgehalt im oberen Plenum beim Testfall 2

Von 0 bis 100 s Problemzeit erfolgt eine stationäre Rechnung. Im Fall der reinen ATHLET-Rechnung erfolgt von 100 s bis 101 s eine lineare Reaktivitätszufuhr von 0,7%, also ca. 1\$. Im Fall des gekoppelten Programms wird in dieser Zeit die Borsäurekonzentration linear von 7 g/kg auf 6,6 g/kg verringert. Das hat einen etwa gleichen Zuwachs an externer Reaktivität zur Folge. Eine Abschaltung des Reaktors wurde verhindert, so daß die zugeführte Reaktivität als externe Reaktivität bei $t > 101$ s wirksam bleibt.

Die hohe Reaktivitätszufuhr führt zu einem schnellen Temperatur- und Druckanstieg (siehe Abb. 4.1.6) im ersten Kreislauf. Daher kommt es in den ersten 100 s nach der Reaktivitätszufuhr mehrfach zum Öffnen des ersten Druckhalterventils. Die Druckhalter-Heizer sind von ca. 350 s bis 400 s Problemzeit in Betrieb. Da der Höhenstand in den Sekundärseiten der Dampferzeuger unter 1,50 m abfällt, kommt es bei ca. 400 s zum Abschalten der Hauptumwälzpumpen. Das führt zu einem raschen Abfall des Massenstroms und damit zu einem sehr starken Temperatur- und Druckanstieg im ersten Kreislauf. Das Druckhalterventil 1 öffnet ca. 10 s nach dem Abschalten der Pumpen, das Druckhalterventil 2 nach ca. 20 s. Sie schließen dann erst bei ca. 650 s Problemzeit. Nach dem Abschalten der Pumpen tritt Dampf in den Bereichen vom Core bis zu den Dampferzeugern auf.

Ausgewählte Ergebnisse dieser Rechnungen sind in den Abbildungen 4.1.5 bis 4.1.8 dargestellt. Ab ca. 700 s kommt es in beiden Fällen zu Schwingungen der Reaktorleistung, die im Fall der Kopplung eine größere Amplitude haben. Es schwingt die Reaktorleistung gegen den Dampfgehalt. Ein Ansteigen der Reaktorleistung führt zu einem höheren Volumendampfgehalt, der wiederum einen Abfall der Leistung hervorruft. Für diesen Testfall wurde auch eine Rechnung mit einer Zeitkonstante für das Tiefpaßfilter von 5 s durchgeführt, um den Einfluß des Filters auf die Ergebnisse zu untersuchen. Die Ergebnisse dieser Rechnung fielen außer im Bereich diese Leistungsschwankungen praktisch mit den hier vorgestellten zusammen. Die Leistungsschwankungen haben eine etwas kleinere Amplitude, die Mittelwerte für die betrachteten Parameter in diesen Zeitbereich bleiben aber unverändert. Die Amplitude der Schwingungen änderte sich auch bei reinen ATHLET-Rechnungen mit Punktkinetik bei Veränderung der Maximalzeitschrittweite. Weitere Untersuchungen, ob die Schwingungen im wesentlichen physikalisch begründet sind oder aus der Numerik resultieren, wurden nicht durchgeführt.

4.1.4 Testfall 3: Großes Leck im heißen Strang

Der dritte Testfall sollte vor allem der Untersuchung des Einflusses des Tiefpaßfilters auf die Rechenergebnisse und der Stabilität des Programms bei sehr starken Druckänderungen an den Koppelstellen dienen. Daher wurde versucht, eine extreme Situation zu simulieren, die eine hohe Belastung der Koppelstellen bewirkt. Dabei wurde weniger Wert auf eine realistische Störfallmodellierung gelegt.

Bei 100 s Problemzeit wurde ein großes Leck mit einer Querschnittsfläche von 426 cm² (entspricht 23,3 cm Durchmesser bei einem kreisförmigen Loch) am Beginn des heißen Strangs der Einfachschleife plötzlich geöffnet. Dieses Leck wurde über ein FILL realisiert, um das plötzliche Öffnen simulieren zu können. Die Größe des Lecks wurde dadurch bestimmt, daß die ATHLET-Rechnung mit Punktkinetik bei einem noch größeren Leck auf Grund der unrealistischen Simulation durch das FILL abstürzte.

Für den Leckmassenstrom (siehe Abb. 4.1.9) wurde folgende Beziehung verwendet:

$$G = A \sqrt{2 \rho p_i \left(1 - \frac{p_a}{p_i}\right)} \quad (1)$$

wobei ρ die Dichte des ausströmenden Fluids, p_i der Druck vor dem Leck, p_a der Außendruck, A die Querschnittsfläche und G der Leckmassenstrom sind.

Beginnend bei 100 s wird dieser Massenstrom abgezapft. Das führt zu einem schlagartigen Druckabfall im ersten Kreislauf auf ca. 60% des normalen Anlagendrucks. Dann fällt der Druck langsamer ab. In den Abbildungen 4.1.9 bis 4.1.11 sind Ergebnisse von Rechnungen mit verschiedenen Zeitkonstanten für das Tiefpaßfilter der reinen ATHLET-Rechnung gegenübergestellt. Die Größe der Zeitkonstante des Tiefpaßfilters hat im Rahmen dieser Variation kaum Einfluß auf die Ergebnisse. Für

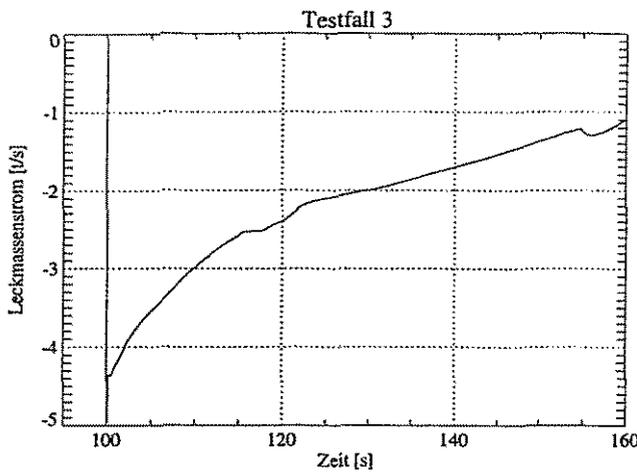


Abb. 4.1.9: Leckmassenstrom beim Testfall 3

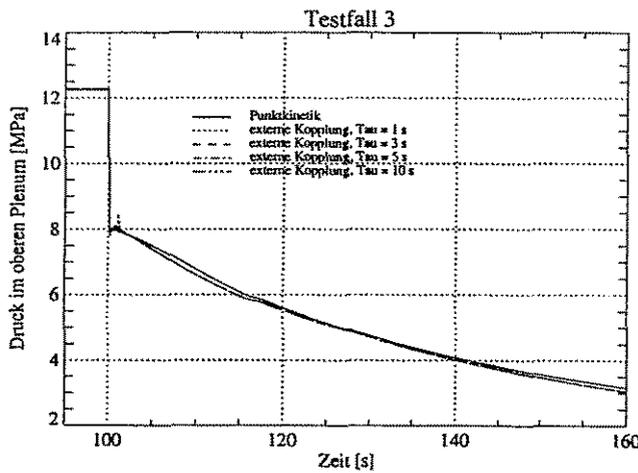


Abb.4.1.10: Druck im oberen Plenum beim Testfall 3

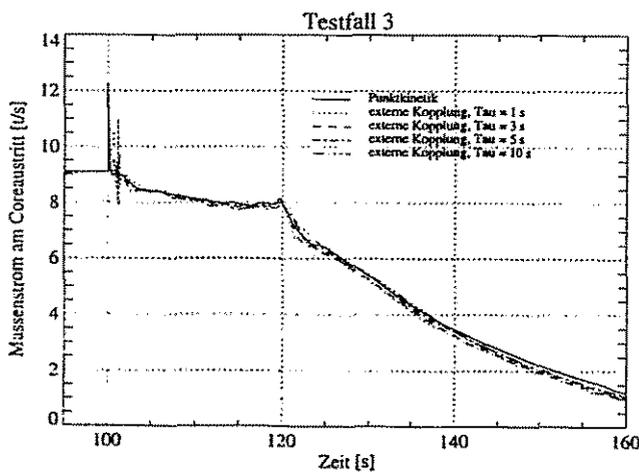


Abb.4.1.11: Massenstrom am Coreaustritt beim Testfall 3

eine Zeitkonstante von 1 s trennen kurz nach dem Öffnen des Lecks Schwankungen des Massenstroms auf, die aber schnell gedämpft werden (siehe Abb. 4.1.11). Der Massenstrom ist der am stärksten vom Tiefpaßfilter beeinflusste Parameter, da er von DYN3D aus der Druckdifferenz über das Core berechnet wird. Selbst bei einer Zeitkonstante für das Tiefpaßfilter von 10 s tritt praktisch keine Veränderung der berechneten Transienten auf. Da es sich hier um einen Extremfall handelt, kann erwartet werden, daß es bei realistischen Rechnungen zu keiner spürbaren Verfälschung der Rechenergebnisse für das Tiefpaßfilter kommt.

Neben den hier dargestellten Testrechnungen wurden zahlreiche weitere Tests zur Stabilität der Rechnungen, zum Einfluß des Tiefpaßfilters und zur Überprüfung der Funktion spezieller Optionen wie z.B. des Vermischungsmodells und des Restarts durchgeführt.

4.2 Vergleich der Kopplungsoptionen

4.2.1 Zielstellung und Auswahl der Testfälle

Das Ziel der Vergleichsrechnungen zwischen interner und externer Variante der Kopplung DYN3D - ATHLET bestand:

- im mathematischen Funktionstest der Kopplung,
- im Test auf physikalische Sinnfälligkeit der Ergebnisse.

Die Vergleichsrechnungen zwischen den beiden Koppeloptionen haben sich für das Auffinden von Programmfehlern als sehr nützlich erwiesen. Dafür war es aber notwendig, eine möglichst gute Vergleichbarkeit der Rechnungen zu gewährleisten. Durch Rechnungen unter Verwendung weitgehend analoger Eingabedatensätze konnten auch kleine Programmfehler, die nur eine geringe Auswirkung auf die Ergebnisse hatten, gefunden werden.

Um die physikalische Sinnfälligkeit der Ergebnisse zu testen, wurden bewußt Testfälle ausgewählt, bei denen Ortseffekte keine große Rolle spielen, um eine gute Vergleichbarkeit mit der bisherigen ATHLET-Version mit Punktkinetik zu gewährleisten. Die Testfälle sollten verschiedene Klassen von Störfällen repräsentieren und möglichst harte Anforderungen an das gekoppelte Programm stellen. Die möglichst realistische Simulation möglicher Störfallabläufe stand nicht im Vordergrund. Deshalb wurden für die Vergleichsrechnungen der im Abschnitt 4.1 beschriebene Leckstörfall und ein Reaktivitätsstörfall mit Auswurf einer gesamten Regelgruppe für einen Reaktor vom Typ WWER-440 ausgewählt. In beiden Fällen wurde das Versagen der Reaktorschnellabschaltung unterstellt.

Für die Vergleichsrechnungen wurde der in 4.1.1 kurz charakterisierte ATHLET-Datensatz verwendet. Einige Parameter wurden geändert, um eine möglichst gute Vergleichbarkeit zu erreichen. Die neutronenphysikalischen Eingabedaten für das Kernmodell gelten für beide Kopplungsvarianten. Die Eingabedaten basieren auf einer Konfiguration, wie sie für eine frische Spaltzone in einem WWER-440 üblich ist. Für die Rechnungen wurde eine 30° Symmetrie der Spaltzone angenommen. Die makroskopischen Wirkungsquerschnitte der Neutronen für 2 Energiegruppen wurden der MAGRU-Bibliothek /Agt90/ entnommen. Die Bibliothek enthält auch die Rückkopplungsparameter der einzelnen Querschnitte.

Die neutronenphysikalische Rechnung erfolgt entsprechend der Symmetrie mit 37 radialen Nodes, die den Brennelementen entsprechen. Axial wurden 10 Schichten mit 25 cm Schichtdicke für die Rechnung verwendet. Insgesamt wurde also mit 370 Nodes gerechnet. In beiden betrachteten Störfällen ist die Regelgruppe K6 in den Kern eingetaucht.

Die Rückkopplungskoeffizienten und Regelstabwirksamkeiten für die Punktkinetikrechnungen wurden mit DYN3D bei Nennleistung berechnet und als Tabelle im Eingabedatensatz vorgegeben.

4.2.2 Unterschiede in den Modellen

Bei den Vergleichsrechnungen muß man beachten, daß zwischen den beiden Koppleoptionen Modellunterschiede bezüglich der Thermohydraulik und des Wärmeübergangs im Corebereich (ATHLET-Modelle im Fall der internen Kopplung, DYN3D-Modelle im Fall der externen Kopplung) bestehen. Die wichtigsten Unterschiede und ihr möglicher Einfluß bei den Vergleichsrechnungen sollen im folgenden kurz diskutiert werden:

- Das Brennstabmodell von DYN3D ermöglicht eine Modellierung des Gasspaltverhaltens und damit des Wärmeübertragungskoeffizienten im Gasspalt zwischen Brennstoff und Hülle während einer Transiente in Abhängigkeit von den Temperaturen, der Gaszusammensetzung im Spalt, dem mechanischen Verhalten des Hüllrohres. Da in ATHLET eine solche Option nicht vorgesehen ist, wurde bei den Rechnungen für die externe Kopplung der gleiche Wärmeübertragungskoeffizient als Konstante vorgegeben wie bei der internen Kopplung. Bei den Vergleichsrechnungen dürften daher keine Unterschiede auf Grund der unterschiedlichen Modellierung der Gasspaltbreite auftreten.
- Die Berechnung des Wärmeübergangskoeffizienten von der Hüllrohroberfläche an das Kühlmittel für die verschiedenen Wärmeübergangsregime erfolgt durch unterschiedliche Modelle.
- In beiden Programmen werden unterschiedliche Ansätze für die Reibungskoeffizienten benutzt. Die Koeffizienten wurden so abgeglichen, daß sich im stationären Zustand die gleichen Massenströme ergeben, doch können im instationären Verlauf aufgrund unterschiedlicher Parameterabhängigkeiten Differenzen auftreten.
- Die beiden Programme nutzen unterschiedliche Verdampfungsmodelle. DYN3D berücksichtigt z.B. das unterkühlte Sieden im Dampfgehalt. In ATHLET wird das unterkühlte Sieden hingegen nur bei der Berechnung der Wärmeübertragung an das Kühlmittel beachtet. Bei der internen Kopplung wurde das in ATHLET enthaltene DRUFAN-Modell für die Verdampfung genutzt (Parameter IGVK unter dem Controlwort EVAPORATE gleich 1). Diese Modelle lassen im Gegensatz zu dem in DYN3D integrierten Modell eine Überhitzung der flüssigen Phase zu. Der Massendampfgehalt ist aus diesen Gründen in den ATHLET-Modellen oft etwas geringer als in DYN3D. Das hat dann auf Grund der Rückkopplung Auswirkungen auf die Reaktorleistung.
- Die in Modelle zur Berechnung des Phasenschlupfs (Flooding based drift model in ATHLET, MOLOČNIKOV /Mo82/ in DYN3D) liefern teilweise erhebliche Unterschiede im berechneten Schlupf. Das führt zu Unterschieden im Volumendampfgehalt im Core, der wiederum die Reaktorleistung beeinflusst.

Neben den Unterschieden der in ATHLET und DYN3D enthalten Modelle gibt es auch Unterschiede, die mit der Kopplung selbst verbunden sind:

- In DYN3D finden während der Rechnung für einen Zeitschritt Iterationen zwischen der Neutronenkinetik und der Thermohydraulik statt. Bei der internen Kopplung erfolgt die Rechnung für die Neutronenkinetik nach Abschluß der Thermohydraulikrechnung für einen Zeitschritt. Es findet keine Iteration zwischen Neutronenkinetik und Thermohydraulik statt. Der Einfluß der fehlenden Iteration läßt sich durch den Vergleich von Rechnungen mit unterschiedlichen Zeitschrittweiten abschätzen. Für die im folgenden diskutierten Vergleichsrechnungen war der Einfluß offenbar vernachlässigbar. Dies zeigten zusätzliche Rechnungen, die mit geringerer Schrittweite durchgeführt wurden.
- Die Vergleichsrechnungen erfolgten mit unterschiedlichen ATHLET-Versionen. Während die Rechnungen für die externe Kopplung mit der derzeit aktuellen ATHLET-Version 1.1 Mod A durchgeführt wurden, erfolgte die Realisierung der internen Kopplung für die noch nicht allgemein verfügbare ATHLET-Version 1.1 Mod B, da die Schnittstellen endgültig für die Kopplung in dieser Version definiert wurden. Eine Vergleichsrechnung zwischen beiden ATHLET-Versionen für den gleichen Datensatz (Rechnung mit Punktkinetik) zeigte, daß nur relativ geringe Unterschiede in den Ergebnissen erkennbar sind.

4.2.3 LOCA-Testfall

Die stationäre Rechnung erfolgt von 0 bis 100 s. Für die ersten Vergleichsrechnungen wurde der im Abschnitt 4.1.4 beschriebene Fall des plötzlichen Öffnens eines großen Lecks im heißen Strang genutzt. Der Leckmassenstrom für diesen Fall ist in der Abb. 4.1.9 dargestellt. Die Abbildungen 4.2.1 bis 4.2.4 zeigen Ergebnisse von Rechnungen, bei denen für die Punktkinetik mit einem Kühlkanal und für die gekoppelten Programme mit 37 Kühlkanälen (30°-Sektor des WWER-440) gerechnet wurde. Die Regelgruppe K6 war in diesem Fall 75 cm in den Kern eingetaucht. In den Abb. 4.2.1 und 4.2.2 sind der Druck im oberen Plenum und der Massenstrom am Coreaustritt für Rechnungen mit Punktkinetik, interner Kopplung und externer Kopplung (Zeitkonstante des Tiefpaßfilters 2 s) gegenübergestellt. Für diese Größen ist die Übereinstimmung zwischen den 3 Modellen sehr gut. Auch der schlagartige Druckabfall wird in allen drei Fällen gleich berechnet. Leichte Abweichungen haben ihre Hauptursache in Unterschieden in der berechneten Reaktorleistung, die in der Abb. 4.2.3 dargestellt ist. Diese Differenzen resultieren wiederum im wesentlichen aus dem unterschiedlichen Volumendampfgehalt (Abb. 4.2.4).

Nach dem Öffnen des Lecks fällt die nukleare Reaktorleistung im Fall der externen Kopplung am schnellsten, während der Leistungsabfall bei der Punktkinetik erst verzögert erfolgt. Die Ursache dafür liegt in den unterschiedlichen Dampfgehalten. Während bei den gekoppelten Rechnungen in einzelnen, besonders heißen Kanälen schon Dampf auftritt, erreicht die radial über das Core gemittelte Temperatur, die ja bei der Punktkinetik in einem mittleren Corekanal berechnet wird, noch nicht die Sättigungstemperatur. Der im weiteren Verlauf stärkere Abfall der Leistung bei der Punktkinetik könnte mit der stärkeren Rückkopplung des entstandenen Dampfes auf die nukleare Leistung im Punktkinetikmodell begründet werden. Der Abgleich der Reaktivitätskoeffizienten für die Punktkinetik erfolgte für den Nominalzustand des Reaktors.

Auf Grund der sehr großen Änderungen der Parameter im Core sind dadurch ebenfalls Abweichungen zu erwarten.

Die Differenzen zwischen den beiden Koppelloptionen im Leistungsverlauf resultieren hauptsächlich aus den oben erwähnten Unterschieden in den verwendeten Verdampfungs- und Schlupfmodellen. Um diese Vermutung quantitativ zu belegen, wurde versucht, für eine Testrechnung diese Unterschiede möglichst gering zu halten. Im einzelnen wurden dafür folgende Änderungen durchgeführt:

- Das unterkühlte Sieden wurde in DYN3D unterdrückt.
- Das in DYN3D enthaltene Schlupfmodell nach MOLOČNIKOV wurde durch das BANKOFF-Modell ersetzt, welches ähnlich große Werte liefert, wie das in ATHLET integrierte "Flooding Based Drift Model".
- Durch eine Erhöhung des ATHLET-Eingabeparameters "Blasenzahl pro Einheitsvolumen" (ZB0) um 4 Größenordnungen wurde die Überhitzung der flüssigen Phase in ATHLET unterdrückt.

Diese Änderungen wurden nur für Testrechnungen zur Aufklärung der Unterschiede der berechneten Volumendampfgehalte bei der internen und der externen Kopplung durchgeführt. Dabei wurde aus Gründen der Einfachheit mit nur einem Corekanal gerechnet. Ohne die Änderungen traten dabei ähnliche Unterschiede in der berechneten Leistung auf wie sie in der Abb. 4.2.3 ersichtlich sind. Die Abbildung 4.2.5 zeigt die Ergebnisse dieser Testrechnungen. Die Reaktorleistungen stimmen jetzt, ebenso wie alle anderen Parameter, sehr gut überein. Die Abweichungen der Kurven in den Abbildungen 4.2.1 bis 4.2.4 resultieren also tatsächlich im wesentlichen aus den oben dargestellten Modellunterschieden. Aus den aufgetretenen Unterschieden resultiert keine Wertung der Modelle.

Bei einem Vergleich der Rechenzeiten muß beachtet werden, daß die Rechnungen mit verschiedenen ATHLET-Versionen, die verschiedene FEBE-Solver benutzen, ausgeführt wurden. Für die Berechnung des gleichen Problems mit Punktkinetik benötigte die ATHLET-Version 1.1 Mod B ca. doppelt so lange wie die Version 1.1 Mod A. Für die LOCA-Rechnung betrug die Rechenzeit der internen Kopplung ca. das 5-fache der Rechenzeit mit der externen Kopplung und das 10-fache der Rechenzeit für die interne Rechnung mit einem Corekanal.

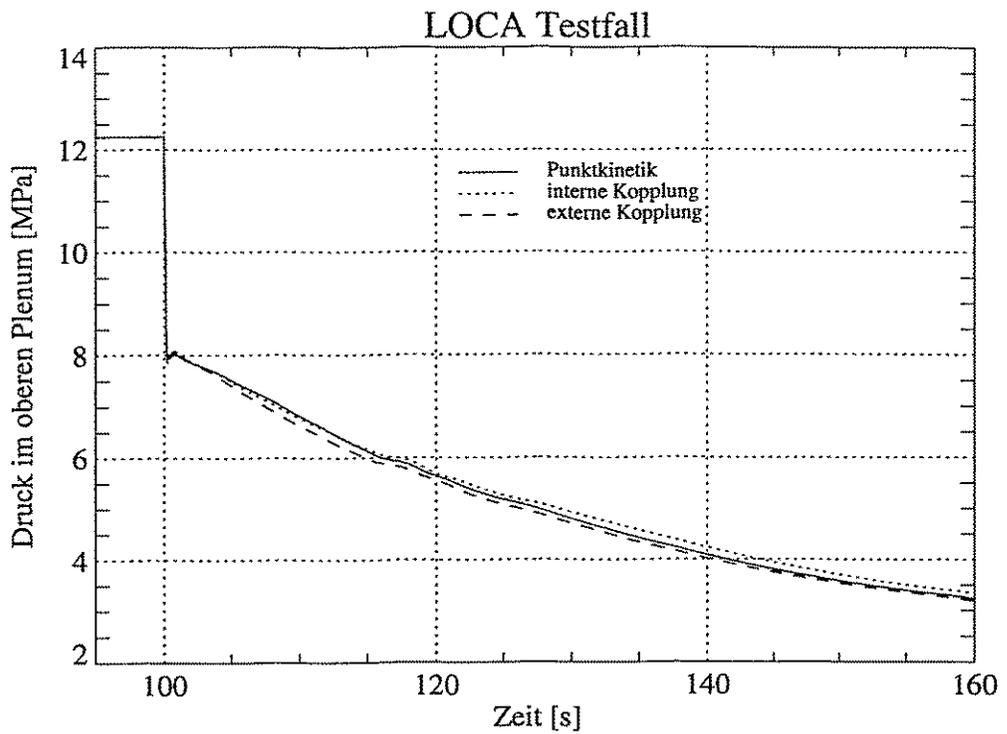


Abb. 4.2.1: Druck im oberen Plenum

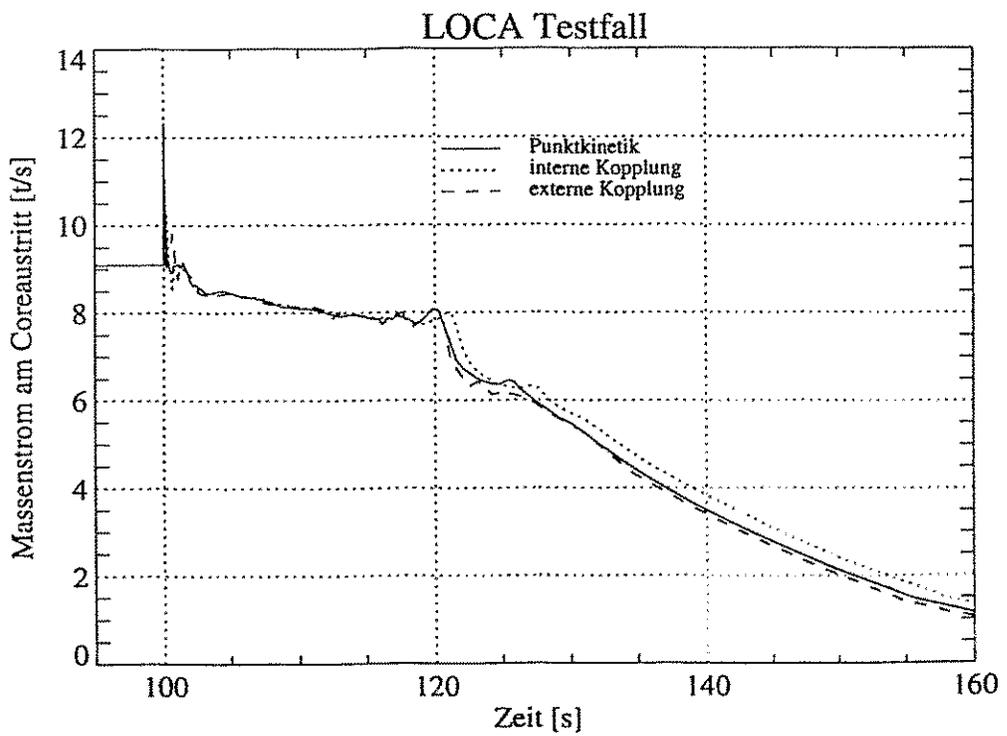


Abb. 4.2.2: Massenstrom am Coreaustritt

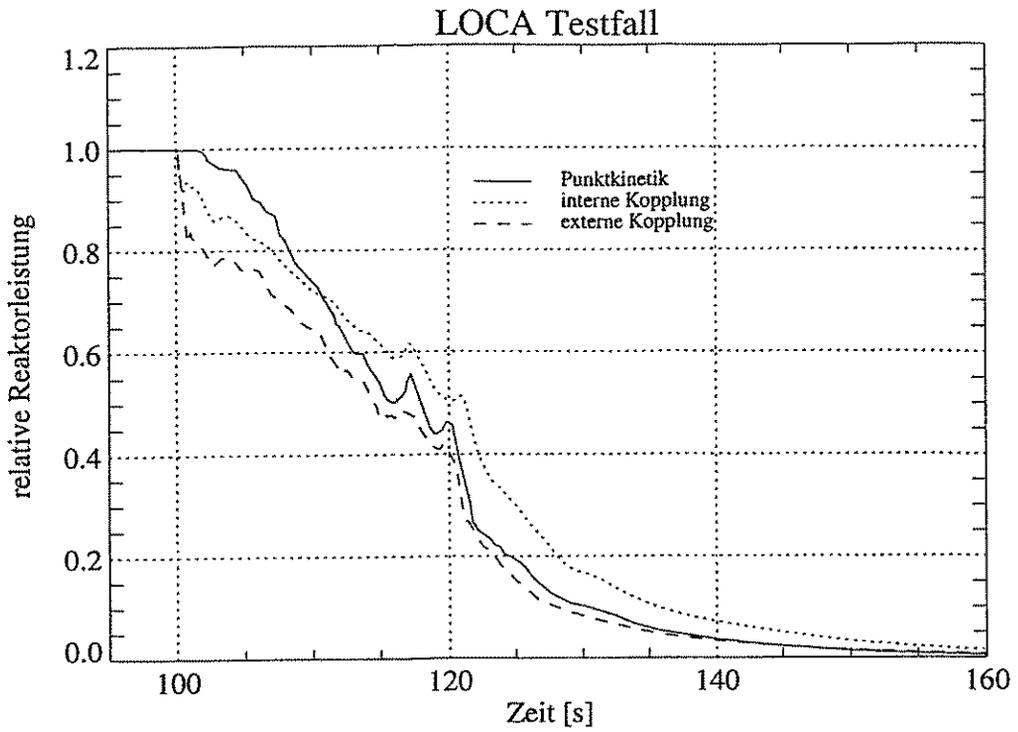


Abb. 4.2.3: Relative Reaktorleistung

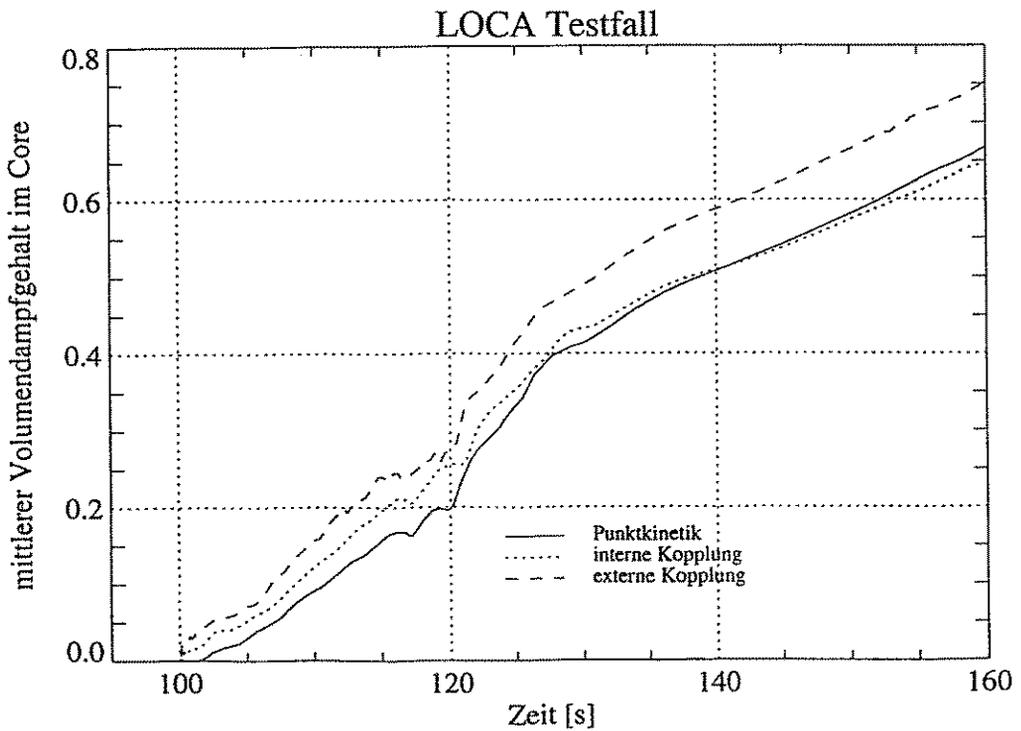


Abb. 4.2.4: Mittlerer Dampfgehalt im Core

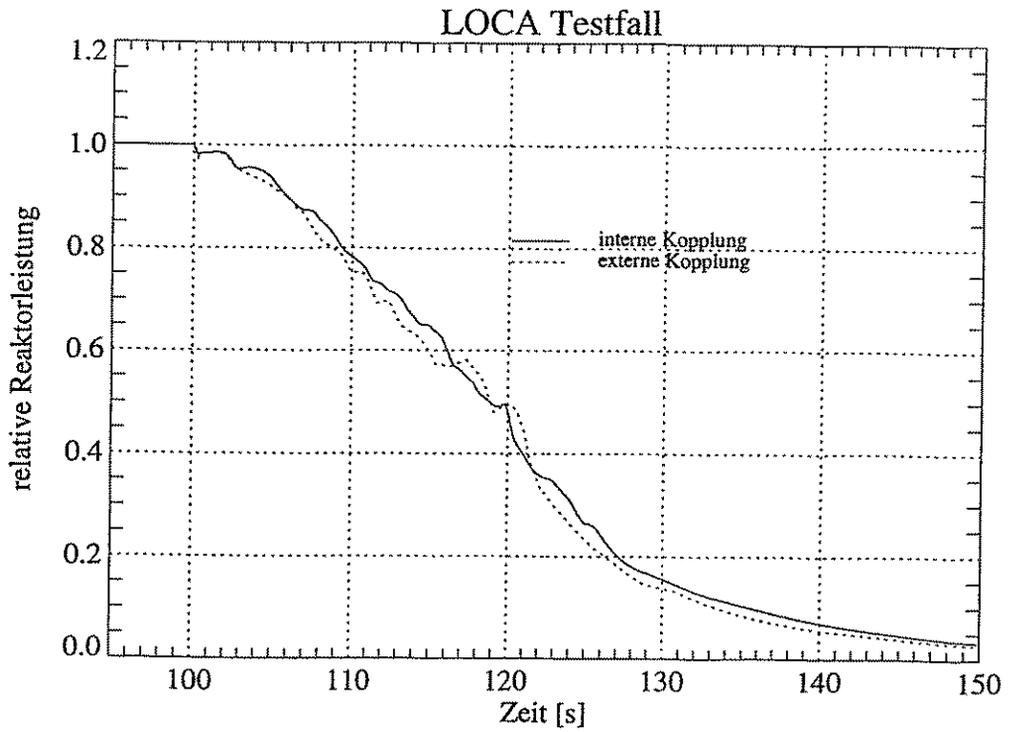


Abb. 4.2.5: Relative Reaktorleistung bei Anpassung der Modelle

Testfall: Auswurf K6

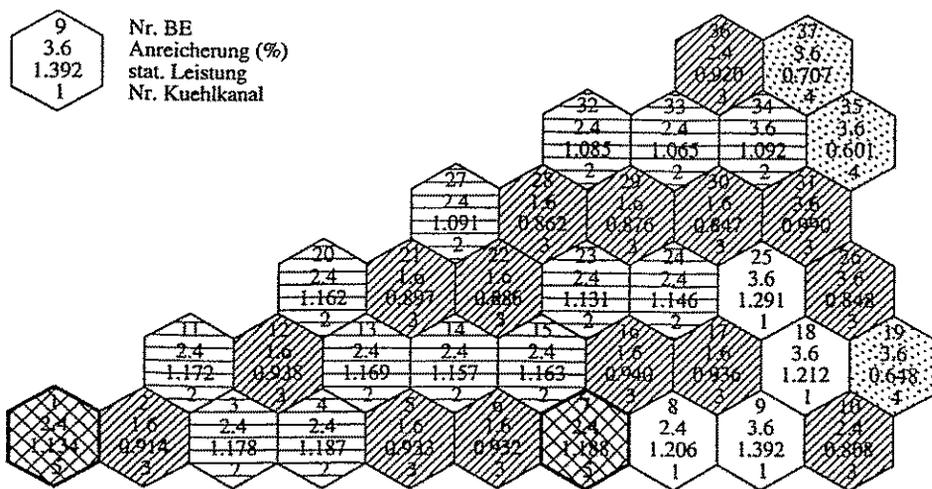


Abb. 4.2.6: Kernausschnitt mit Zuordnung der Kuehlkanäle

4.2.4 Auswurf der Regelgruppe K6

In einem zweiten Testfall wurde der Auswurf der Regelgruppe K6 von einer Anfangsstellung von 125 cm innerhalb 0,1 s betrachtet.

Der Auswurf wurde zunächst mit 5 Kühlkanälen im Kern behandelt. Dazu wurden für den stationären Zustand mit ausgeworfener Regelgruppe separate DYN3D-Rechnungen durchgeführt. Ausgehend von der normierten Leistungsverteilung erfolgte die Zuordnung der Brennelemente zu den 5 Kühlkanälen. Dabei wurden die ausgeworfenen Stäbe in eine Gruppe genommen. Tabelle 4.2.1 zeigt das der Einteilung zugrunde liegende Schema. Rechnungen mit einem ähnlichen Vorgehen zeigten für einen Einzelstabauswurf bei HZP gute Übereinstimmung mit einer Rechnung, in der jedes Brennelement mit einem separaten Kühlkanal gekoppelt war /Gru93/. Diese Modellierung ist für die Verwendung der internen Kopplung interessant, da die Rechenzeit von ATHLET mit der Anzahl paralleler Kanäle zunimmt.

Tabelle 4.2.1: Zuordnung der Brennelemente zu den Kühlkanälen

Leistungsbereich	Kanal
$1,2 \leq P_i < 1,4$	1
$1,0 \leq P_i < 1,2$	2
$0,8 \leq P_i < 1,0$	3
$0,6 \leq P_i < 0,8$	4
Regelgruppe K6	5

Abbildung 4.2.6 zeigt den Kernausschnitt mit der Nummer der Brennelemente, der Anreicherung des Brennstoffs, dem Wert der stationären normierten Leistung und der Nummer des Kühlkanals.

Die stationäre Rechnung erfolgt von 0 bis 500 s. Ausgewählte Ergebnisse dieser Rechnungen sind in den Abbildungen 4.2.7 bis 4.2.12 dargestellt. Abb. 4.2.7 zeigt den Verlauf der relativen Reaktorleistung für beide Kopplungsvarianten. Die plötzliche hohe Reaktivitätszufuhr bewirkt einen kurzzeitigen Anstieg der Reaktorleistung. Der Dopplereffekt ist der Rückkopplungseffekt, der relativ prompt wirkt und zu einer schnellen Reduktion der Leistung führt. Die Rückkopplungseffekte durch Änderungen der Moderatorichte wirken demgegenüber verzögert. Erwartungsgemäß ist der Leistungspeak bei der Punktkinetik mit einem Faktor von ca. 46 am größten. Für die interne Kopplung wird ein Faktor von ca. 31 und bei der externen Kopplung von ca. 26 erreicht. Im weiteren Verlauf zeigen die Leistung und die anderen Parameter keine wesentlichen Unterschiede. Dreidimensionale Effekte spielen hauptsächlich während des Auswurfs der Regelgruppe eine Rolle.

Aufgrund der Brennstofftemperaturrückkopplung sinkt die Leistung sehr schnell wieder auf Werte von ca. 170% der Ausgangsleistung (Abb. 4.2.8). Mit dem Leistungsanstieg ist ein hoher Druckanstieg im ersten Kreislauf verbunden, der zum mehrmaligen Öffnen der Druckhaltersicherheitsventile führt (Abb. 4.2.9 und 4.2.10). Ab ca. 530 s (30 s nach der Störung) tritt im Core Dampf auf. Die Abbildungen 4.2.11 und 4.2.12 zeigen den Massenstrom bzw. die Temperatur der dominanten Phase am Coreaustritt.

In den Abbildungen 4.2.8 bis 4.4.12 wurden der internen Kopplung zwei Rechnungen der externen Kopplung (Zeitkonstante für das Tiefpaßfilter jeweils 2 s) gegenübergestellt. Die Rechnung 1 wurde mit dem Original-DYN3D-Modell ausgeführt, bei der Rechnung 2 wurde wiederum das unterkühlte Sieden in DYN3D unterdrückt und das Schlupfmodell nach BANKOFF verwendet. Auch in diesem Fall liegen die Abweichungen zwischen interner und externer Kopplung (Rechnung 1) in den Modellunterschieden begründet. Die Größe der Unterschiede resultiert daraus, daß das Druckhalterventil aufgrund des leicht unterschiedlichen Verhaltens der Leistung und damit des Drucks bei der Rechnung 1 für die externe Kopplung einmal mehr öffnet, was für den folgenden Verlauf zu einem unterschiedlichen Kühlmittelinventar führt.

Da die Rechenzeit besonders bei der internen Kopplung mit Vergrößerung der Anzahl der Kühlkanäle sehr stark ansteigt, wurden die Untersuchungen zu beiden Koppelversionen zunächst nur mit 5 Kühlkanälen durchgeführt. Vergleichsrechnungen mit 37 Kanälen zeigen, daß etwas geringere Abweichungen zwischen interner und externer Kopplung auftreten als in den Rechnungen mit 5 Kanälen. Abb. 4.2.13 zeigt den Verlauf der relativen Reaktorleistung nach dem Leistungspeak für die Rechnungen mit 37 Kanälen. Zum Vergleich wurde zusätzlich eine Rechnung mit 5 Kanälen dargestellt. Ähnlich liegen die Verhältnisse beim Verlauf des Druckes (Abb. 4.2.14). Beim Auswurf einer ganzen Regelgruppe sind die Ortseffekte in radialer Richtung relativ gering. Deshalb sind für den betrachteten Störfall die Unterschiede zwischen den Rechnungen mit 37 und mit 5 Kühlkanälen verhältnismäßig klein, d.h. die Kanäle lassen sich gut zu Gruppen zusammenfassen. Größeren Einfluß haben die unterschiedlichen Siedemodelle, die von den Kopplungsversionen im Reaktorkern verwendet werden und die letztendlich über die Rückkopplung den Verlauf der Reaktorleistung beeinflussen.

Die Rechenzeitunterschiede zwischen interner und externer Kopplung liegen bei der Rechnung mit 5 Kanälen ungefähr bei einem Faktor 2, was dem Rechenzeitunterschied der verschiedenen ATHLET-Versionen entspricht. Beim Übergang zu 37 Kanälen wird das Verhältnis für die interne Kopplung ungünstiger, da die Rechenzeit in diesem Fall auf ca. das Zehnfache ansteigt, also überproportional im Verhältnis zur Anzahl der Kanäle. Dieser Effekt entsteht durch eine Verkleinerung der Zeitschrittweiten durch die automatische Steuerung.

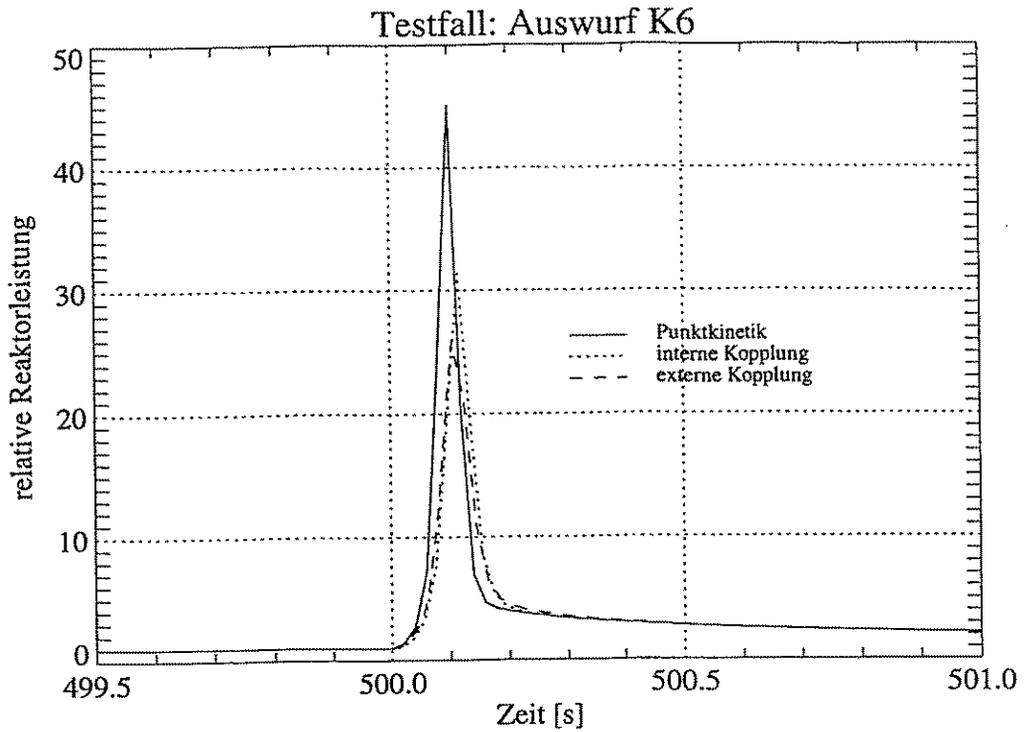


Abb. 4.2.7: Relative Reaktorleistung unmittelbar nach dem Auswurf der Regelgruppe

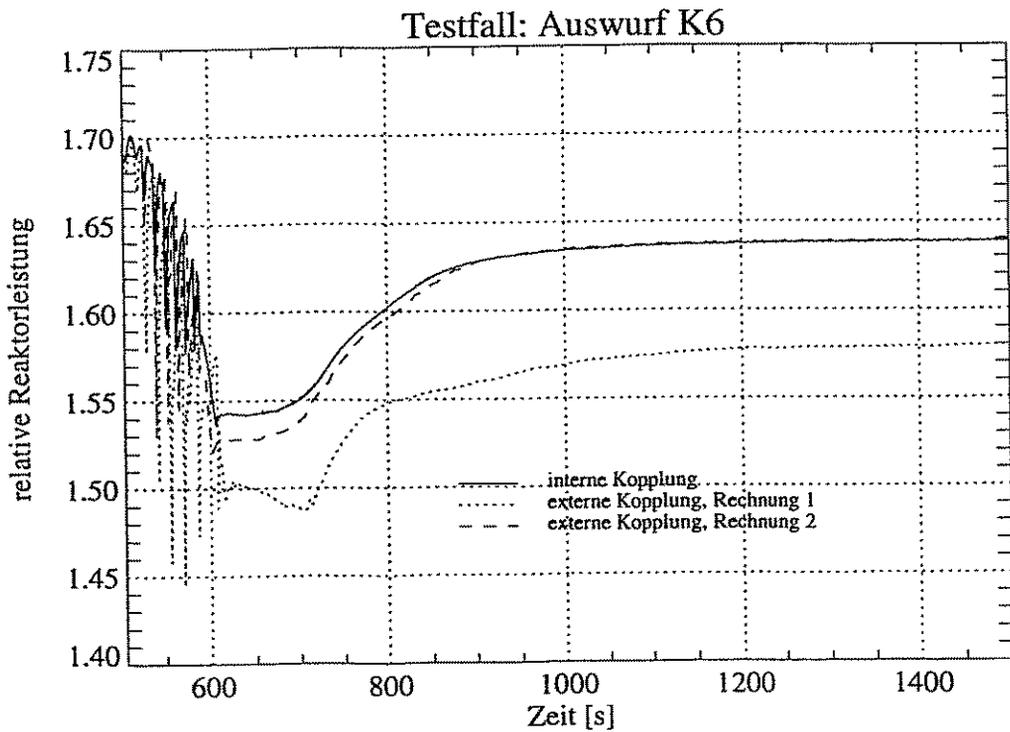


Abb. 4.2.8: Relative Reaktorleistung nach dem Leistungspeak

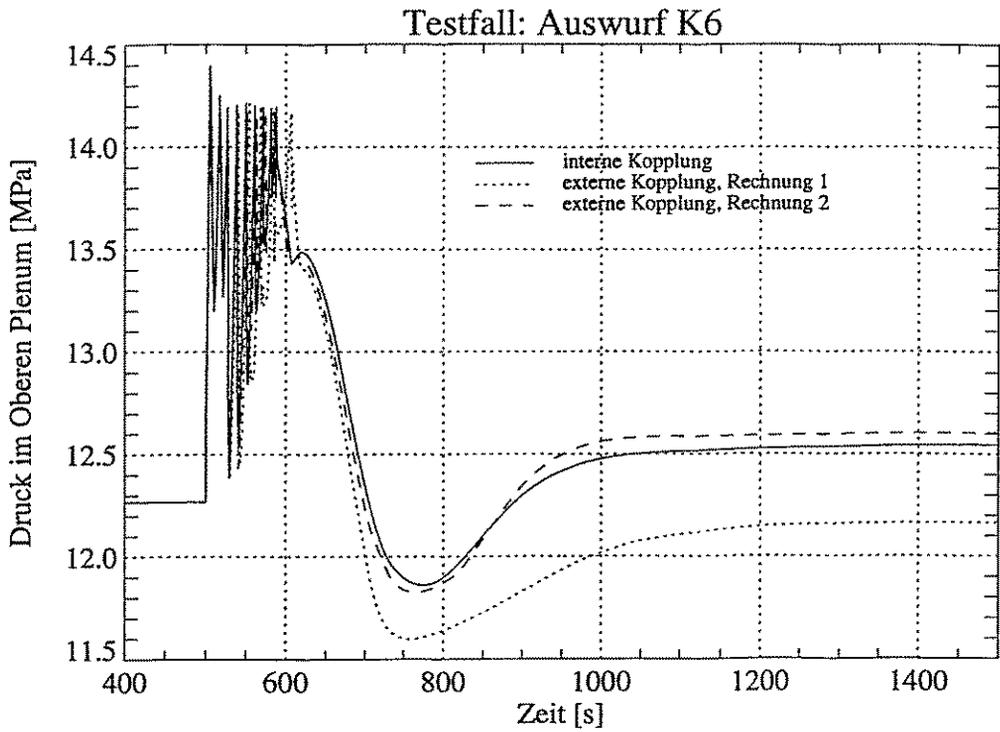


Abb. 4.2.9: Druck im oberen Plenum

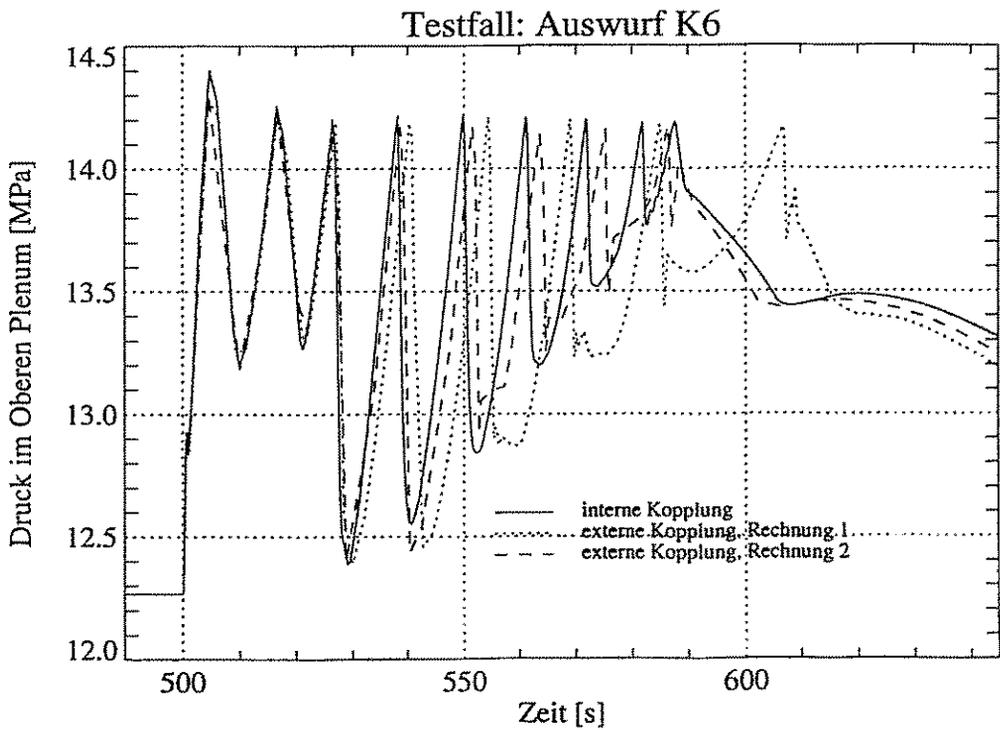


Abb. 4.2.10: Druck im oberen Plenum während des mehrmaligen Öffnens und Schließens der Druckhalterventile

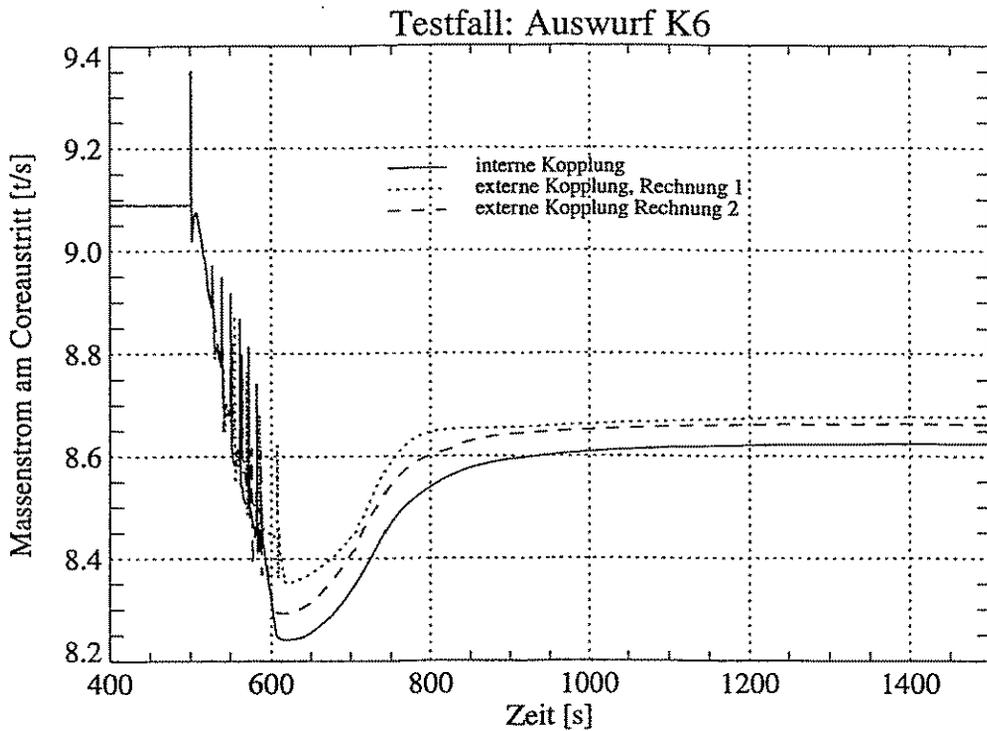


Abb. 4.2.11: Massenstrom am Coreaustritt

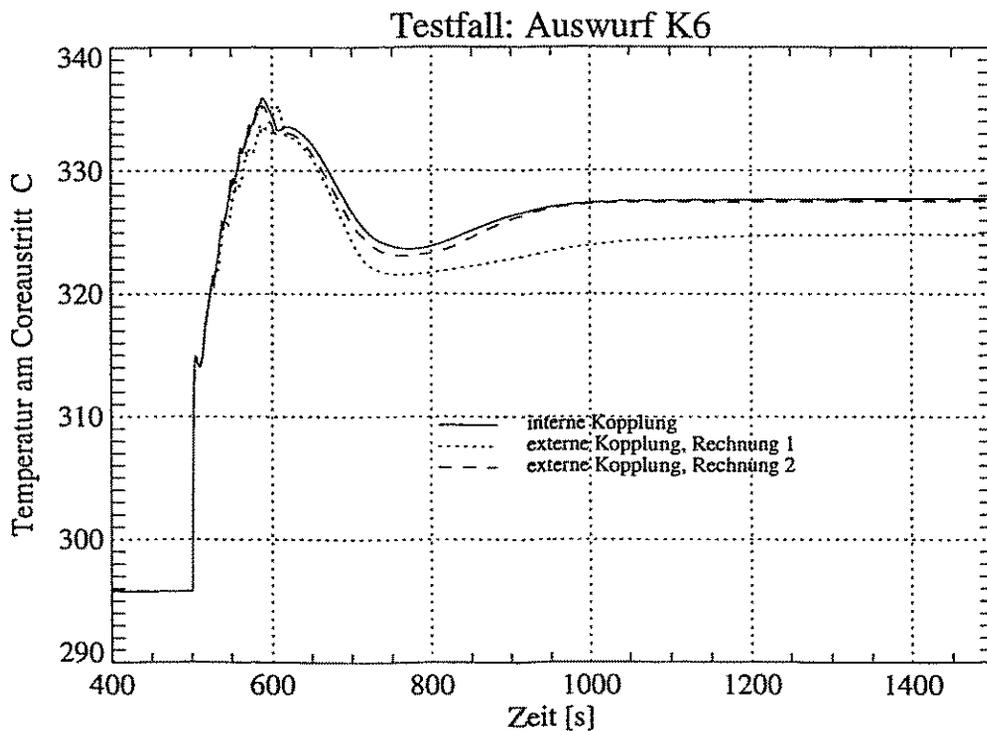


Abb. 4.2.12: Temperatur am Coreaustritt

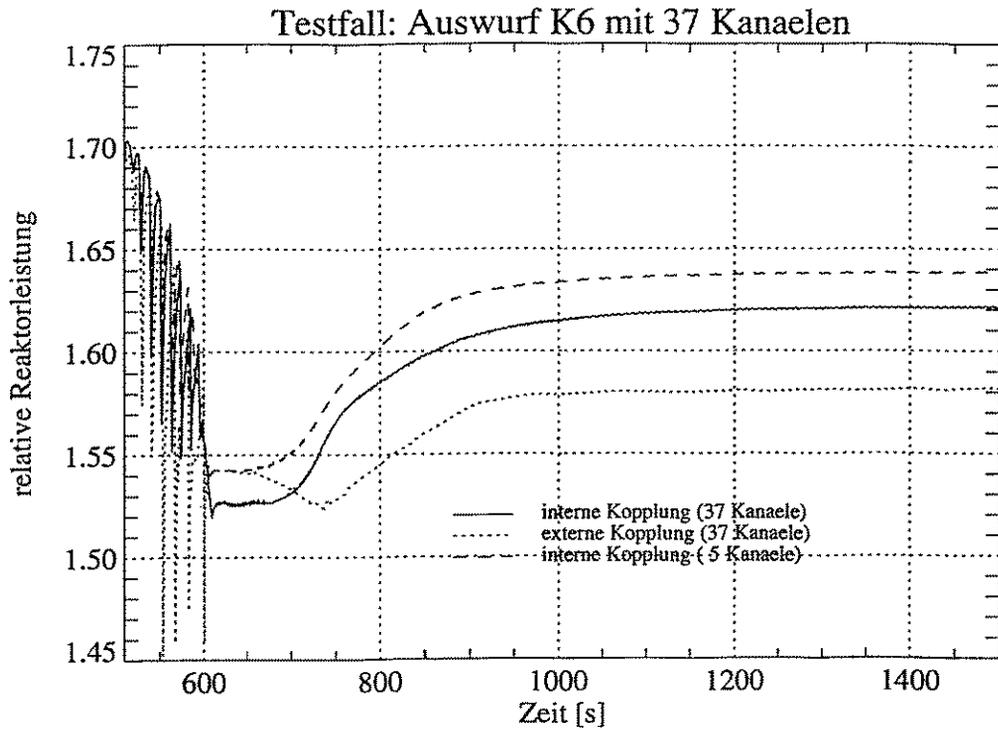


Abb. 4.2.13: Vergleich der relativen Reaktorleistung nach dem Leistungspeak

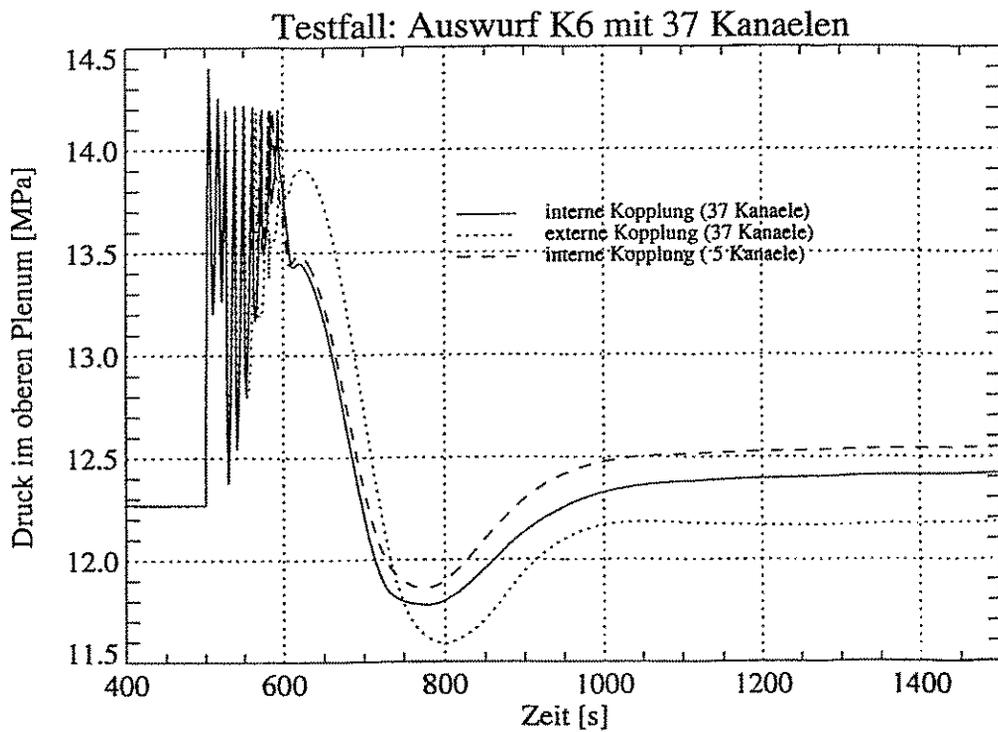


Abb. 4.2.14: Vergleich des Druckverlaufes der Rechnungen mit 37 Kanälen und der internen Kopplung mit 5 Kanälen

5. Die Entwicklung einer DYN3D-Version mit Abbrandberechnung

5.1 Zielstellung

Der DYN3D-Nutzer sollte in der Lage sein, Reaktorverhalten und Störfälle für alle möglichen Zustände der Spaltzone zu simulieren. Im Verlauf des Reaktorbetriebes ändert sich die Abbrandverteilung in der Spaltzone zeitlich kontinuierlich. Eine Abbrandverteilung zu einem bestimmten Operationszeitpunkt wird vom Grad der Anreicherung in den einzelnen Brennelementen und der Regelungsvorgeschichte bestimmt. Um dem DYN3D-Nutzer die Möglichkeit zu geben, mit dem Programm selbst realistische 3-dimensionale Abbrandverteilungen zu berechnen, wurde eine Abbrandversion von DYN3D entwickelt. Die mit diesem Programm erzeugten Abbranddaten können im Anschluß für reaktordynamische Modellrechnungen weiterverwendet werden. Der Nutzer ist damit nicht auf die Bereitstellung von Abbrandverteilungen durch den Reaktorbetreiber bzw. die Verwendung spezieller Abbrandprogramme angewiesen.

5.2 Programmtechnische Umsetzung

5.2.1 Prinzipielle Arbeitsweise

Im Gegensatz zu früheren Versionen von DYN3D werden Neutronengruppendaten und -parameter benötigt, welche (für jeden Brennelementtyp) die Generierung der Wirkungsquerschnitte und Diffusionskoeffizienten nicht nur für einen, sondern für alle praktisch erreichbaren Abbrandwerte erlauben. Die Abbrandrechnung selbst wird durch einen erweiterten stationären Teil von DYN3D und die Verwendung der genannten Daten ermöglicht.

Die Erweiterung besteht im wesentlichen in der Realisierung einer Abbrandschleife um das Kernstück von DYN3D, in dem die Berechnung der nodalen Neutronenfluß- und Temperaturverteilung erfolgt. Ausgangspunkt der Rechnung ist eine vorgegebene Material- und Abbrandverteilung, die die Vorgeschichte der Reaktorspaltzone widerspiegelt. Für diesen Zustand werden aus den o. g. Daten die aktuellen abbrand-spezifischen nodalen Gruppensdaten generiert und die zugehörige Leistungsdichte berechnet, wobei die Temperaturrückkopplung (Brennstabmodell) berücksichtigt wird. Die Leistungsdichte wird für ein bestimmtes Zeitintervall, in dem sich der Abbrand nur geringfügig ändert, als konstant angenommen. Aus dieser Abbrandzeitschrittweite, der nodalen Leistungsdichte und der ursprünglich im Brennelement vorhandenen Uranmasse wird ein Abbrandzuwachs für jeden Node berechnet. Für die sich so ergebende neue Abbrandverteilung werden neue Gruppensdaten für den nächsten Zeitschritt abgeleitet. Auf diese Weise erfolgt die Abbrandberechnung Schritt für Schritt in einer Programmschleife bis zu dem Zeitpunkt, für den die Abbrandverteilung benötigt wird.

5.2.2 Berechnung von Abbrandzyklen

Eine durchgehende Abbrandrechnung kann immer nur für einen Reaktorzyklus erfolgen. Am Ende der Rechnung wird die erhaltene Abbrandverteilung (bei Bedarf auch die aktuelle Samarium- und Prometiumverteilung) ausgegeben. Zur Berechnung des nächsten Zyklus ist ein Neustart von DYN3D erforderlich. Dabei wird das Beladungsschema (Materialverteilung) und die Abbrandverteilung des vorangegangenen Zyklus eingelesen. Anschließend erfolgt die Brennelementumverteilung in der Spaltzone nach einem vorher eingelesenen Schema (vgl. Anhang C): weit abgebrannte Kassetten werden entfernt und durch frische ersetzt, andere in neue Positionen gebracht. Die Abbrand-, Samarium- und Prometiumverteilungen werden in der gleichen Weise behandelt. Die neue Materialverteilung wird ausgegeben, um bei Bedarf im nächsten Abbrandzyklus verwendet zu werden.

5.2.3 Modellierung der Reaktorregelung

Im Programm werden Regelgruppen definiert, in denen die Nummern der Brennelemente mit Regeleinrichtung bestimmten Gruppennummern zugeordnet werden. Die Gruppenzuordnung wird im Eingabedatensatz (vgl. Anhang C) festgelegt. Am Beginn der Abbrandschleife liest DYN3D die Regelgruppenpositionen und die thermische Leistung für die einzelnen Zeitabschnitte des Reaktorzyklus ein. Aus den Gruppenpositionen wird für den aktuellen Abbrandzeitschritt die entsprechende 3-dimensionale Materialverteilung berechnet. Dabei wird der spezielle Aufbau der Regelelemente im WWER-440 berücksichtigt. Sie bestehen aus einem Absorberteil und einem Brennstoffunterteil ("Brennstofffolger"); beide Teile sind durch ein Zwischenstück ("Koppler") starr miteinander verbunden. Wenn das Regelelement vollständig ausgefahren ist, schließt die Unterkante des Brennstofffolgers mit der Core-Unterkante ab. Jeder Brennstofffolger enthält in seinem oberen Teil, der mit dem Zwischenstück verbunden ist, eine ca. 10 cm hohe Stahlpelletsäule anstelle von Brennstoff. Die Höhe dieses Stahlpelletsteils sowie des Zwischenstücks sind im Eingabedatensatz frei wählbar. Beim Einfahren des Absorbers wird das Brennstoffteil nach unten aus der aktiven Zone herausgeschoben. Entsprechend werden auch seine axiale Abbrand- und Samariumverteilung sowie Koppler und Stahlpellets gegen das Core verschoben. Alle diese Besonderheiten werden im Programm im Falle von Regelstabbewegungen modelliert.

5.2.4 Zeitschrittsteuerung

Das Abbrandzeitintervall wird im Eingabedatensatz als Konstante vorgegeben. Es ist in der Regel kleiner als die Betriebszeitintervalle, in denen Leistung und Stabpositionen unverändert bleiben. Wenn in einer bestimmten Phase der Abbrandrechnung ein Regelzeitpunkt innerhalb des Abbrandintervalls liegt, dann wird das Zeitintervall für den betreffenden Abbrandschritt automatisch so verkleinert, daß seine obere Grenze mit dem Regelzeitpunkt übereinstimmt. Im folgenden wird mit der ursprünglich vorgegebenen Intervallbreite weitergearbeitet.

5.2.5 Bereitstellung von makroskopischen Gruppendaten

In jedem Abbrandzeitschritt werden für jeden Node die aktuellen Gruppendaten Σ zum aktuellen nodalen Abbrandwert A benötigt. Die bisher in DYN3D verwendeten Formeln zur Gruppendatenberechnung werden durch die Abbrandabhängigkeit erweitert.

Die Bezugsgrößen Σ^0 für Wirkungsquerschnitte und Diffusionskoeffizienten sowie die Parameter α und β in der unten angegebenen Formel hängen vom Abbrand A ab. In der MAGRU-Datenbibliothek von KAB Berlin /Agt90/ sind die Größen Σ_{AS}^0 für äquidistante Abbrandstützstellen gegeben, die aktuellen Werte werden von DYN3D durch lineare Interpolation berechnet.

$$\Sigma(A, T_F, R_M, C_B) = \Sigma^0(A) \times K_{TF}(A) \times K_{RM}(A) \times K_{CB}(A)$$

$$K_{TF}(A) = 1 + \alpha_{TF}(A) (\sqrt{T_F} - \sqrt{T_M})$$

$$\alpha_{TF}(A) = a_0^{TF} + a_1^{TF}A + a_2^{TF}A^2$$

$$K_{RM}(A) = 1 + \alpha_{RM}(A) (\rho_M - \rho_M^0) + \beta_{RM}(A) (\rho_M - \rho_M^0)^2$$

$$\alpha_{RM}(A) = a_0^{RM} + a_1^{RM}A + a_2^{RM}A^2$$

$$\beta_{RM}(A) = b_0^{RM} + b_1^{RM}A + b_2^{RM}A^2$$

$$K_{CB}(A) = 1 + \alpha_{CB}(A) (C_B \rho_M - C_B^0 \rho_M^0) + \beta_{CB}(A) (C_B \rho_M - C_B^0 \rho_M^0)^2$$

$$\alpha_{CB}(A) = a_0^{CB} + a_1^{CB}A + a_2^{CB}A^2$$

$$\beta_{CB}(A) = b_0^{CB} + b_1^{CB}A + b_2^{CB}A^2$$

$$\Sigma^0(A) \dots \text{interpoliert aus Stützstellen } \Sigma_{AS}^0$$

Weiterhin sind die Koeffizienten a_0 , a_1 , a_2 und b_0 , b_1 , b_2 zu den speziellen Querschnitten und Diffusionskoeffizienten (Σ) für die verschiedenen Anreicherungen (Brennstofftypen) in der Gruppendatenbibliothek gespeichert. Für Materialien, die keinen Brennstoff enthalten (Reflektoren sowie Absorber-, Koppler-, und Stahlpellettelemente), deren Größen Σ also nicht vom Abbrand abhängen, sind die Parameter α und β in der Bibliothek direkt angegeben.

Alle benötigten Gruppendaten werden schon vor dem Eintritt in die Abbrandschleife aus der Bibliothek eingelesen. Am Beginn eines Abbrandschrittes berechnet DYN3D dann für jeden Brennstoff-Node die benötigten aktuellen Bezugsquerschnitte Σ^0 sowie die Parameter α und β . Anschließend werden im Programm unter ständiger Aktualisierung der Größen Σ (über die Faktoren K_{TF} , K_{RM} und K_{CB} , welche die Abhängigkeit von der Brennstofftemperatur T_F , der Moderatortemperatur T_M , der Moderatordichte ρ_M und der Borsäurekonzentration C_B beschreiben) die kritische Borsäurekonzentration sowie die Neutronenfluß-, Brennstofftemperatur-, Moderatordichte-, Xenon-, und Samariumverteilung solange iterativ berechnet, bis der stationäre Zustand erreicht ist.

Für die Berechnung der konkreten aktuellen Gruppendaten Σ durch Interpolation bzw. aus den in obiger Formel gegebenen Parametrisierungen wird das Transgenerationsprogramm TRSLRA /Lan88/ an den entsprechenden Stellen in DYN3D als Subroutine aufgerufen .

5.2.6 Ausgabe von Ergebnissen

DYN3D ermöglicht optional die Ausgabe der kritischen Borsäurekonzentration sowie aller interessierenden Verteilungen am Ende jedes Abbrandintervalles.

Zum Abschluß einer Abbrandrechnung, nach der Abarbeitung des letzten Abbrandzeit-schrittes, ist die kritische Borsäurekonzentration am Ende des Reaktorzyklus zu bestimmen. Deshalb werden für eine letzte stationäre Rechnung nochmals die Querschnitts- und Parameterverteilungen (Σ^0 , α , β) für den zuletzt erhaltenen Abbrandzustand und die zugehörigen Regelgruppenpositionen generiert. Diese Verteilungen werden bei Bedarf auch auf eine spezielle Datei ausgegeben, die für anschließende Transientenrechnungen genutzt werden kann.

5.2.7 Restart-Option

Im Falle eines irregulären Abbruches der Abbrandrechnung ist eine spätere Fort-führung des Rechnung möglich, die mit dem Zeitintervall beginnt, in dem vorher die Störung auftrat (Restart-Option). Dies wird dadurch ermöglicht, daß nach jedem abgeschlossenen Abbrandschritt die aktuelle Abbrandverteilung in einer Datei gesichert wird.

5.3 Ergebnisse von Testrechnungen

5.3.1 Das AER-Benchmark-Problem des KKW Paks

Eine erste Verifizierung des Programmes wurde mit der Beteiligung an einem AER¹-Benchmark-Problem /Kor92,Kor92a,Kor94a/ realisiert. Die AER-Aufgabe besteht primär in der Berechnung von Regelstabwirksamkeiten für bestimmte Beladungs- und Abbrandzustände eines WWER-440 im KKW Paks, Ungarn. Jeder Teilnehmer am Benchmark-Problem hat jedoch die entsprechenden Abbrandverteilungen selbst zu berechnen, so daß die Behandlung dieses Problems eine geeignete Möglichkeit zum Test eines Abbrandprogrammes darstellt. Von Seiten des KKW Paks liegen nur wenige experimentell ermittelte Vergleichsdaten für Stabwirksamkeiten vor, so daß Vergleiche vorwiegend zwischen den Ergebnissen verschiedener Rechenprogramme und zugehöriger Datenbibliotheken im AER durchgeführt wurden.

Bisherige Teilnehmer am AER-Benchmark sind:

- KKW Paks (Ungarn),
- IVO Vantaa (Finnland),
- Škoda Pilsen (Tschechische Republik),
- VUJE Trnava (Slowakische Republik),
- KAB Berlin (Deutschland),
- FZ Rossendorf (Deutschland).

Ausgangspunkt der Testaufgabe ist das Beladungsschema und die 3-dimensionale Abbrandverteilung der Spaltzone am Ende des 3. Reaktorzyklus des 2. Blocks von Paks. Weiterhin sind die Umladungsschemata und Informationen über die Reaktorregelung im Zeitverlauf der Zyklen 4 bis 7 gegeben. Der Kühlmitteldurchsatz durch die Spaltzone betrug 8100 kg/s.

5.3.2 Modellierung des WWER-440 mit DYN3D

Zur Lösung des o. g. Benchmarkproblems /Mi94a/ wurden die radialen und axialen Randgebiete der Spaltzone durch Reflektor-Nodes modelliert, deren äußere Randflächen wiederum mit Vakuum-Albedo-Koeffizienten beschrieben wurden. Die Dicke der oberen und unteren Reflektorschicht betrug jeweils 25 cm. Als radialer Reflektor diente im Modell ein Mantel von homogenen hexagonalen Prismen von der Form und Größe der Brennelemente (Schlüsselweite 14,1 cm). Die Regelelemente wurden ebenfalls als Nodes behandelt, mit Höhen von 30 cm für das Zwischenstück und 10 cm für den Stahlpelletteil (vgl. Abschnitt 5.2.3).

Die Spaltzone, einschließlich Reflektoren, wurde in 60 Schichten unterteilt, so daß die Höhe aller hexagonalen Nodes 5 cm betrug. Durch diese relativ feine axiale Einteilung

¹ AER: Atomic Energy Research, Vereinigung von Instituten aus: Bulgarien, Tschechische Republik, Finnland, Deutschland, Ungarn, Rußland, Slowakische Republik, Polen.

konnte sowohl die Materialstruktur als auch die Bewegung der Regelelemente ohne Materialmischung (innerhalb von Nodes) modelliert werden, da als Regelstabpositionen nur ganzzahlige Vielfache vom 5 cm vorgegeben waren.

Für die Brenn- und Regelelemente sowie die Reflektoren wurden entsprechend Abschnitt 5.2.4 homogenisierte Gruppendaten verwendet. Jedem der drei Reflektortypen (oberer, unterer und radialer Typ) wurde jeweils ein spezieller Satz von Gruppendaten zugeordnet. Schließlich sei hervorgehoben, daß für die Rechnungen mit DYN3D ausschließlich die Original-MAGRU-Daten des KAB Berlin verwendet wurden, es wurde keinerlei Anpassung oder Modifikation von Gruppendaten bzw. Randbedingungen vorgenommen.

Alle DYN3D-Rechnungen erfolgten mit stationärer Xenonkonzentration.

5.3.3 Abbrandrechnung

Die Abbrandrechnung für die Reaktorzyklen 4 bis 7 wurde unter Verwendung der in den vorhergehenden Abschnitten beschriebenen Daten und Informationen realisiert. Die Kühlmiteleintrittstemperatur hatte zu allen Zeitpunkten den Wert von 266.2 °C. Alle Rechnungen wurden im 60-Grad-Symmetriesektor der Spaltzone ausgeführt (Abb. 5.3.1).

Tabelle 5.3.1 zeigt die Reaktivitäten, die sich am jeweils am Ende der vier berechneten Zyklen bei Nennleistung ($P_{th} = 1375$ MW) ergaben. Die Werte werden den Ergebnissen von HEXBU-3D /Kuu93/ und MOBY-DICK /Kop93/ gegenübergestellt. Der Reaktorbetreiber in Paks gibt die Reaktivität Null für das Ende aller Zyklen an /Kor94/. DYN3D liefert nur für den 5. Zyklus einen Wert nahe Null; die Abweichungen von der Größe Null im Falle der restlichen Zyklen ist betragsmäßig mit denen der anderen Autoren vergleichbar. Die Differenzen zwischen den vier DYN3D-Werten untereinander zeigen das gleiche Verhalten wie die entsprechenden Differenzen der anderen Autoren. Diese Tatsache unterstützt die bereits in /Kuu93/ geäußerte Vermutung, daß die realen Reaktorparameter an den einzelnen Zyklusenden sich bis zu einem gewissen Grade voneinander unterschieden haben.

In Abb. 5.3.1 werden die mit DYN3D erhaltenen Abbrandwerte für die einzelnen Brennelemente am Ende des 7. Zyklus mit den Referenzwerten aus Paks /Kor92/ verglichen. Die maximale relative Abweichung beträgt 4,9 %, absolute Differenzen liegen bei maximal 0,5 MWd/kgU. Die größten relativen Abweichungen treten am Spaltzonenrand in den Brennelementen Nr. 41, 47, 52 und 56 auf; für die restlichen Brennelemente ist die Abweichung nicht größer als 2,7 %. Die Ursache für die größere Diskrepanz in den speziellen Randgebieten kann dadurch bedingt sein, daß nur ein einziger Typ von Gruppendaten für alle radialen Reflektornodes verfügbar war. In der Realität unterscheiden sich die radialen Reflektorgebiete insbesondere durch geringfügig verschiedene Stahl- und Wasseranteile voneinander. Die Verwendung entsprechend unterschiedlicher Materialtypen für die radialen Reflektornodes könnte zu verbesserter Übereinstimmung in den Randgebieten führen.

Ein Vergleich der mit dem Programm MOBY-DICK und der Datenbibliothek MAGDA (Škoda Plzeň /Kop93/) erhaltenen Abbrandwerte mit den Referenzwerten aus Paks ergibt eine ähnliche Qualität der Übereinstimmung wie in Abb. 5.3.1; die maximale relative Abweichung beträgt hier 4,5 %.

5.3.4 Regelstabwirksamkeiten

Der Benchmark-Vergleich der Regelstabwirksamkeiten liefert auch eine Aussage über die Qualität der Abbrandverteilung, insbesondere der axialen Verteilung in der Nähe der Regelelemente sowie innerhalb der Brennstoffolger, die gemeinsam mit den Absorbern nach oben und unten bewegt werden (vgl. Abschnitt 5.2.3.).

Die entsprechenden stationären DYN3D-Rechnungen wurden wiederum im 60-Grad-Sektor ausgeführt; im Falle der Verletzung der 60-Grad-Symmetrie (durch Bewegung bzw. Zurückbleiben eines einzelnen Regelelementes in den Benchmark-Teilaufgaben b), e) und f), siehe unten) mußte die gesamte Spaltzone berechnet werden.

Am Ende des 7. Zyklus (EOC-7) wurde mit der stationären Samariumverteilung für Nennleistung gerechnet. Im Falle von BOC-7 erfolgten die Berechnungen unter der Annahme, daß das gesamte Prometium, das sich noch am Ende des 6. Zyklus in der Spaltzone befand, zu Samarium zerfallen ist.

Die Ergebnisse werden im folgenden in der gleichen Reihenfolge a) bis f) präsentiert, wie in /Kor92a/ vorgegeben. Die Regelstabwirksamkeiten sind als Änderungen der Spaltzonenreaktivität $\rho = 1 - 1/k_{\text{eff}}$ definiert. Alle DYN3D-Ergebnisse werden mit den Resultaten verglichen, die mit den Programmen HEXBU-3D /Kuu93/, MOBY-DICK /Kop93/, BIPR-5AK /Kor92a/, C-PORCA /Kor93/, PYTHIA-Q /Tho93/, BIPR-7 /Ste93/ erhalten wurden. In den Fällen b) und c) liegen auch experimentelle Werte aus Paks vor /Kor92a/.

a) Integrale Wirksamkeit aller Regelgruppen (1-6) bei Nulleistung.

Die Moderatorntemperatur wird auf $T_{\text{mod}} = 260 \text{ °C}$ festgelegt. Vom kritischen Zustand ausgehend werden die Regelgruppen 1 bis 5 von ihrer oberen Position ($h(1-5) = 250 \text{ cm}$), sowie die "Arbeits"-Regelgruppe 6 von der Stellung $h(6) = 200 \text{ cm}$ vollständig in die Spaltzone eingefahren.

In Abb. 5.3.1 sind die Regelelemente durch stärkere Linien (Sechsecke) hervorgehoben. Die Elemente Nr. 1 und 7 bilden die Gruppe 6.

Die berechneten Regelstabwirksamkeiten sind in Tab. 5.3.2 zusammengestellt. Die größten relativen Abweichungen zwischen den Programmerngebnissen liegen bei ca. 30%. Die DYN3D-Ergebnisse liegen bei den höheren Werten.

b) Integrale Wirksamkeit aller Regelelemente außer einem einzelnen Element der Gruppe 4 (Element Nr. 50 in Abb. 5.3.1), das in der oberen Position $h(4) = 250 \text{ cm}$ verbleibt. Alle anderen Bedingungen wie in a).

Tabelle 5.3.3 zeigt die berechneten Stabwirksamkeiten sowie einen Meßwert für den Beginn des 7. Zyklus. Alle Rechenprogramme unterschätzen den experimentellen Wert, die maximale relative Abweichung liegt bei 21 %, DYN3D liefert eine Differenz von ca. 5 % zum Meßwert.

- c) Differentielle und integrale Wirksamkeit der Gruppe 6 im Bereich von (0...250) cm, in Schritten von 25 cm, bei Nulleistung. $T_{\text{mod}} = 260\text{ °C}$, $h(1-5) = 250\text{ cm}$.

Die mit DYN3D berechneten integralen Gruppenwirksamkeiten sind in Tabelle 5.3.4 gegeben. In den Abbildungen 5.3.2 - 5.3.5 werden die von den Benchmarkteilnehmern erhaltenen integralen und differentiellen Werte miteinander verglichen.

Für den Fall BOC-7 (Abb. 5.3.3) liegen auch experimentelle Ergebnisse vor. DYN3D liefert eine befriedigende Beschreibung der Meßwerte. In den mittleren Bereichen der Gruppenposition liegen die DYN3D-Werte, ebenso wie fast alle anderen berechneten differentiellen Wirksamkeiten, etwas unterhalb der Meßergebnisse.

Abb. 5.3.5 enthält die entsprechenden Ergebnisse für das Ende des 7. Zyklus (EOC-7). Ein Vergleich der Abbildungen 5.3.3 und 5.3.5 zeigt den Einfluß des im 7. Zyklus produzierten Abbrandzuwachses auf die differentiellen Stabwirksamkeiten. Speziell der Anstieg bei den oberen Stabpositionen (160...220) cm wird im wesentlichen durch die Anwesenheit der Brennstoffolger (vgl. Abschnitt 5.2.3.) hervorgerufen. Die unteren 60 cm dieser Brennelemente befanden sich in den ersten 280 Tagen des 7. Zyklus außerhalb der Spaltzone; erst während der letzten 26 Tage des 306-Tage-Abbrandzyklus wurden sie schrittweise von unten eingefahren (in dem Maße, wie die Absorber-elemente nach oben herausgezogen wurden). Da die Brennstoffolger der Gruppe 6 am Beginn des Zyklus frischen Brennstoff enthielten, hatten ihre unteren Teile (60 cm) auch am Zyklusende nur sehr geringe Abbrandwerte aufzuweisen. Aus diesem Grunde führte ein Einfahren dieser Teile zu einem relativ großen Reaktivitätsanstieg.

- d) Regelgruppenwirksamkeiten wie unter c), jedoch bei Nennleistung.

Die Ergebnisse sind in Tab. 5.3.5 und den Abbildungen 5.3.6 - 5.3.9 dargestellt.

- e) Integrale Wirksamkeit eines einzelnen Regelelementes der Gruppe 6 - Imitation eines Regelstabauswurfes.

Bei Nulleistung und $T_{\text{mod}} = 260\text{ °C}$ wird Element Nr. 7 (Abb. 5.3.1) von der Position $h = 50\text{ cm}$ zur oberen Endstellung (250 cm) bewegt. Das zentrale (Nr. 1) und die restlichen 5 "dezentralen" Regelelemente der Gruppe 6 sowie die anderen Gruppen befinden sich dabei auf der Höhe $h = 250\text{ cm}$.

In Tabelle 5.3.6 sind die Ergebnisse der Benchmarkteilnehmer zusammengestellt. Die maximalen Abweichungen liegen bei ca. 30%.

- f) **Integrale Wirksamkeit eines einzelnen Regelelementes der Gruppe 6 bei Nulleistung.**

Es gelten die gleichen Bedingungen wie unter e), außer der höheren Ausgangsposition $h = 150$ cm für den Regelstabauswurf.

Tabelle 5.3.7 zeigt die entsprechenden Ergebnisse. Es sind die gleichen Tendenzen wie im Falle e) zu beobachten.

Zusätzlich zur AER-Aufgabenstellung wurden Testrechnungen zur Untersuchung des Einflusses von Koppler und Stahlpellets in den Regelelementen auf Reaktivitäten und Stabwirksamkeiten durchgeführt. Einige der oben beschriebenen Rechnungen wurden ohne die Anwesenheit der genannten Regelelemente wiederholt, d. h. die Längen von Koppler- und Stahlpelletteil wurden einfach auf Null gesetzt, so daß das Brennstoffteil direkt an den BorstahlabSORBER angrenzt. Alle anderen Spaltzoneneigenschaften blieben unverändert.

Bei Nulleistung am Beginn des 7. Zyklus, wenn alle Regelelemente vollständig ausgefahren sind ($h(1-6) = 250$ cm), führt die Anwesenheit der Stahlpellets (10 cm) zu einer Verminderung der Reaktivität um 0,043 %. Beim vollständigen Eintauchen aller Regelgruppen ($h(1-6) = 0$ cm) erhöht die Anwesenheit der Koppler (30 cm) die Reaktivität um 0.207 %, verglichen mit dem Fall ihrer Abwesenheit.

Die Abbildungen 5.3.10 - 5.3.13 zeigen, wie die Vernachlässigung von Kopplern und Stahlpellets die DYN3D-Ergebnisse im Benchmark-Testfall c) beeinflusst. Die dicken durchgezogenen Linien zeigen die ursprünglichen Ergebnisse aus den Abbildungen 5.3.2 - 5.3.5. Die strich-punktieren Linien stellen Resultate aus Reaktivitätsrechnungen ohne Koppler und Stahlpellets dar, wobei die "alte" Abbrandverteilung, die bei Anwesenheit von Kopplern und Stahlpellets bestimmt wurde, in die Rechnung einging. In einem dritten Satz von Rechnungen (gestrichelte Linien), wurden sowohl die Abbrand- als auch die Reaktivitätsrechnungen ohne Koppler und Stahlpellets durchgeführt. Im Falle BOC-7 sind die Einflüsse der angenommenen Regelelementmanipulationen relativ gering. Am Ende des 7. Zyklus treten jedoch Änderungen im Verlauf der Reaktivitätskurven auf, die in der Größenordnung der Abweichungen zwischen den Resultaten der verschiedenen Benchmarkteilnehmer liegen. Speziell Abb. 5.3.13 zeigt, daß eine Vernachlässigung von Kopplern und Stahlpellets zu höheren Peaks im Verlauf der differentiellen Stabwirksamkeit bei Positionen von ca. 210 cm führt.

Zyklus	HEXBU-3D C_B (ppm)	MOBY-DICK ρ (%)	DYN3D ρ (%) ($C_B=0$)	DYN3D C_B (ppm) ($\rho=0$)
4	-24	-0.280	+0.257	+28
5	-56	-0.572	+0.021	+ 2
6	-13	-0.234	+0.387	+43
7	-40	-0.493	+0.165	+18

Tabelle 5.3.1: Reaktivitäten (Borkonzentrationen) am Ende der Zyklen 4 - 7

	BOC, ρ (%)	EOC, ρ (%)
HEXBU-3D	8.90	8.65
MOBY-DICK	8.59	8.63
BIPR-5AK	9.41	9.51
C-PORCA	8.28	8.03
PYTHIA-Q	10.37	9.96
BIPR-7	11.04	10.68
DYN3D	10.58	10.41

Tabelle 5.3.2: Integrale Wirksamkeiten aller Regelelemente

	BOC, ρ (%)	EOC, ρ (%)
HEXBU-3D	6.55	6.26
MOBY-DICK	6.38	6.23
BIPR-5AK	7.51	7.16
C-PORCA	7.10	6.77
PYTHIA-Q	7.30	6.81
BIPR-7	7.93	7.31
DYN3D	7.68	7.29
Experiment	8.09	-

Tabelle 5.3.3: Integrale Wirksamkeiten aller Regelelemente, ausgenommen ein einzelnes Element der Gruppe 4

h6 (cm)	BOC, $\rho(\%)$	EOC, $\rho(\%)$
250.0	2.0231	1.9536
225.0	1.9225	1.7113
200.0	1.7651	1.3766
175.0	1.5850	1.0508
150.0	1.3920	0.8007
125.0	1.1687	0.5942
100.0	0.8911	0.3953
75.0	0.5535	0.2045
50.0	0.2308	0.0715
25.0	0.0557	0.0162
0.0	0.0000	0.0000

Tabelle 5.3.4: Integrale Wirksamkeit der Gruppe 6 bei Nulleistung

h6 (cm)	BOC, $\rho(\%)$	EOC, $\rho(\%)$
250.0	2.1110	2.0738
225.0	2.0227	1.9289
200.0	1.8633	1.6993
175.0	1.6547	1.4417
150.0	1.4209	1.1969
125.0	1.1661	0.9717
100.0	0.8889	0.7594
75.0	0.5934	0.5216
50.0	0.3052	0.2875
25.0	0.0939	0.0976
0.0	0.0000	0.0000

Tabelle 5.3.5: Integrale Wirksamkeit der Gruppe 6 bei Nennleistung

	BOC, ρ (%)	EOC, ρ (%)
HEXBU-3D	0.60	0.59
MOBY-DICK	0.65	0.65
BIPR-5AK	0.63	0.75
C-PORCA	0.52	0.56
PYTHIA-Q	0.77	0.81
BIPR-7	0.75	0.82
DYN3D	0.67	0.71

Tabelle 5.3.6: Integrale Wirksamkeit eines Regelelementes der Gruppe 6 bei Nulleistung, Teilaufgabe e)

	BOC, ρ (%)	EOC, ρ (%)
HEXBU-3D	0.11	0.14
MOBY-DICK	0.13	0.19
BIPR-5AK	0.10	0.15
C-PORCA	0.11	0.13
PYTHIA-Q	0.11	0.15
BIPR-7	0.17	0.16
DYN3D	0.11	0.13

Tabelle 5.3.7: Integrale Wirksamkeit eines Regelelementes der Gruppe 6 bei Nennleistung, Teilaufgabe f)

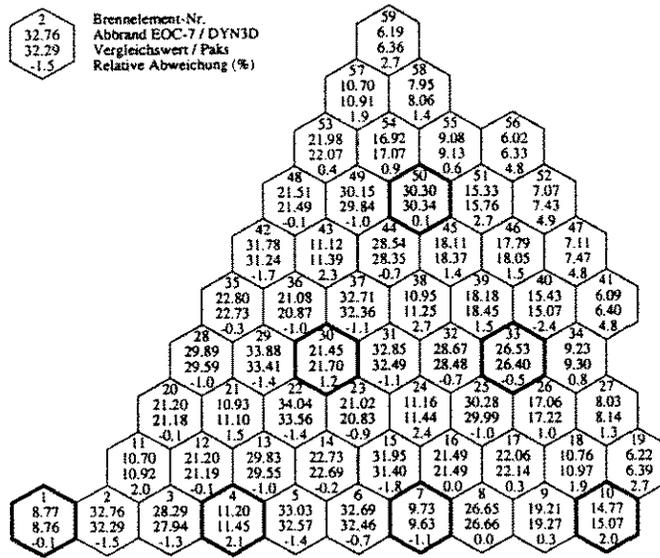


Abb. 5.3.1: Abbrandverteilung (in MWd/kgU), Paks-2, Ende des 7. Zyklus.

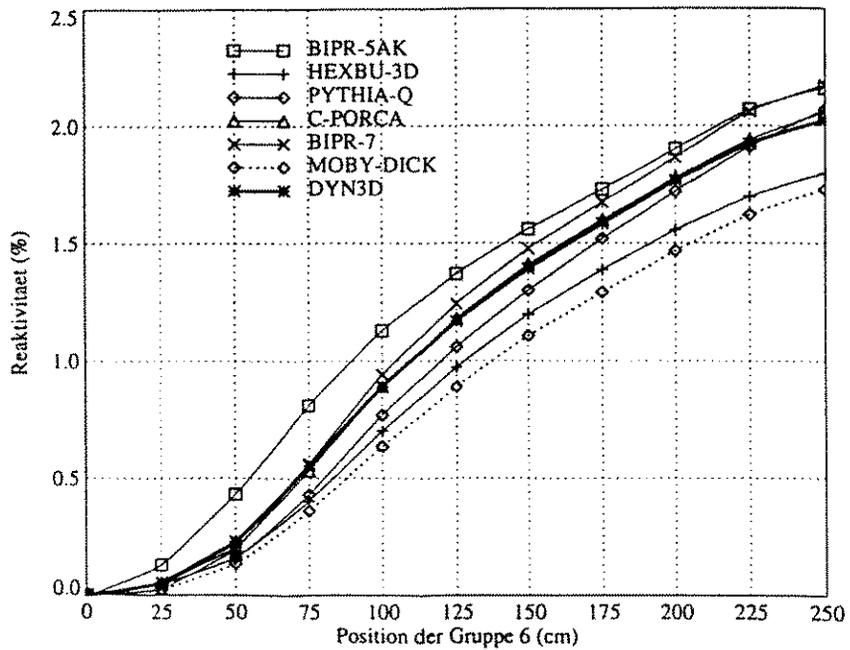


Abb. 5.3.2: Integrale Stabwirksamkeit, Regelgruppe 6, BOC, N=0%.

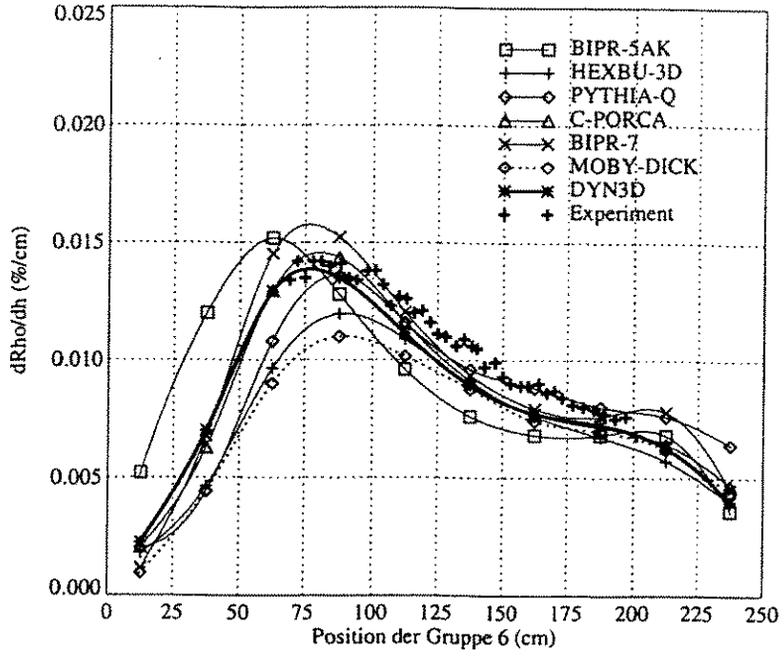


Abb. 5.3.3: Differentielle Stabwirksamkeit, Gruppe 6, BOC, N=0%.

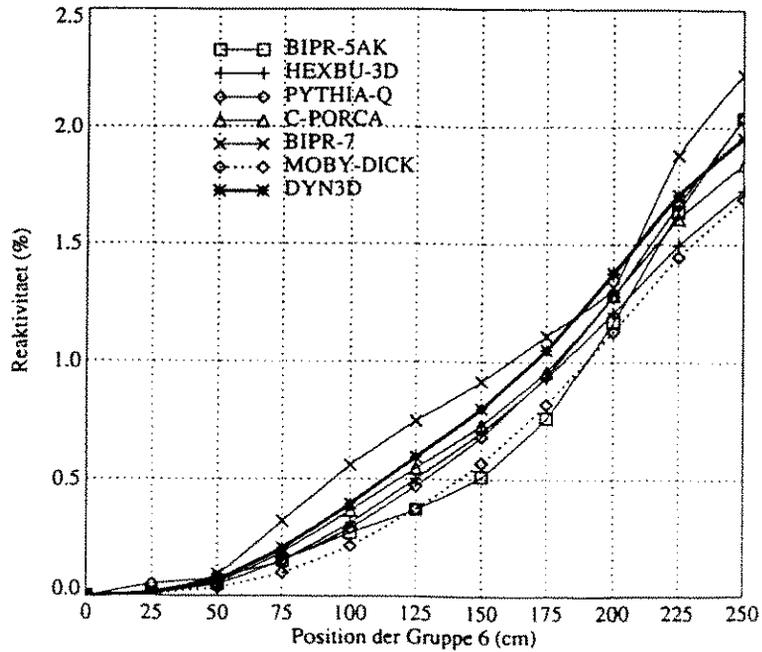


Abb. 5.3.4: Integrale Stabwirksamkeit, Gruppe 6, EOC, N=0%.

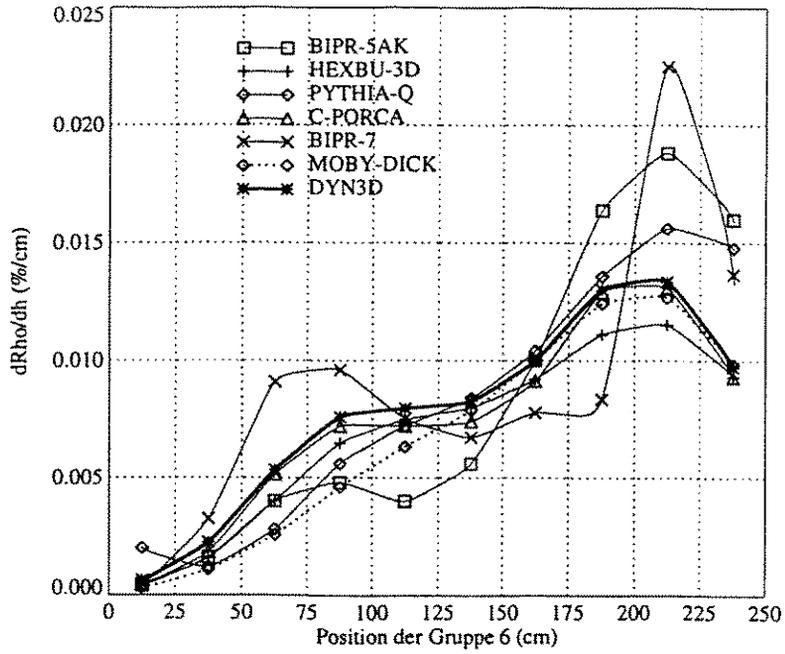


Abb. 5.3.5: Differentielle Stabwirksamkeit, Gruppe 6, EOC, N=0%.

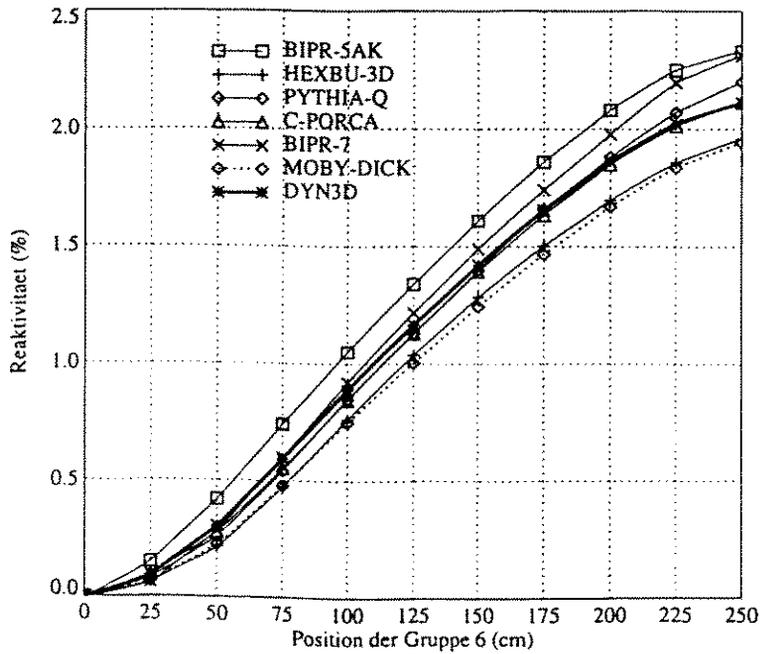


Abb. 5.3.6: Integrale Stabwirksamkeit, Gruppe 6, BOC, N=100%.

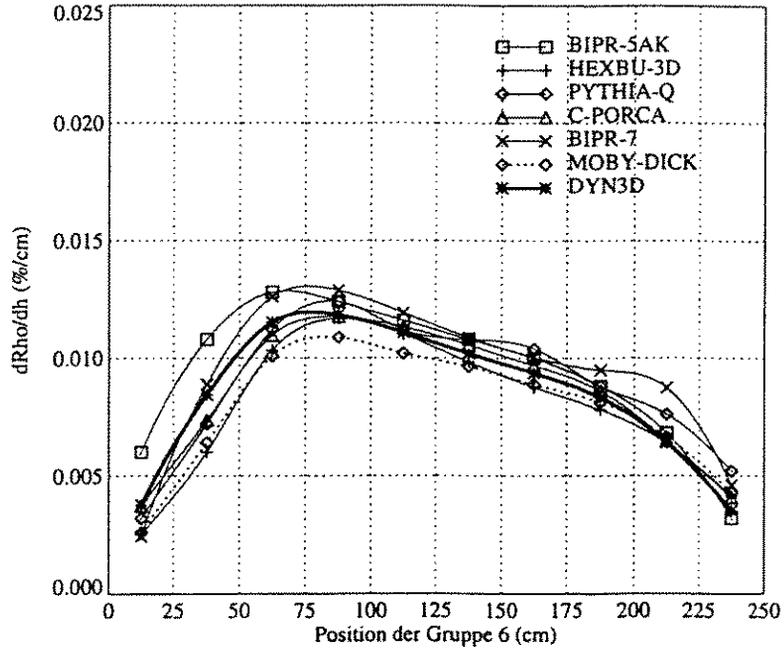


Abb. 5.3.7: Differentielle Stabwirksamkeit, Gruppe 6, BOC, N=100%.

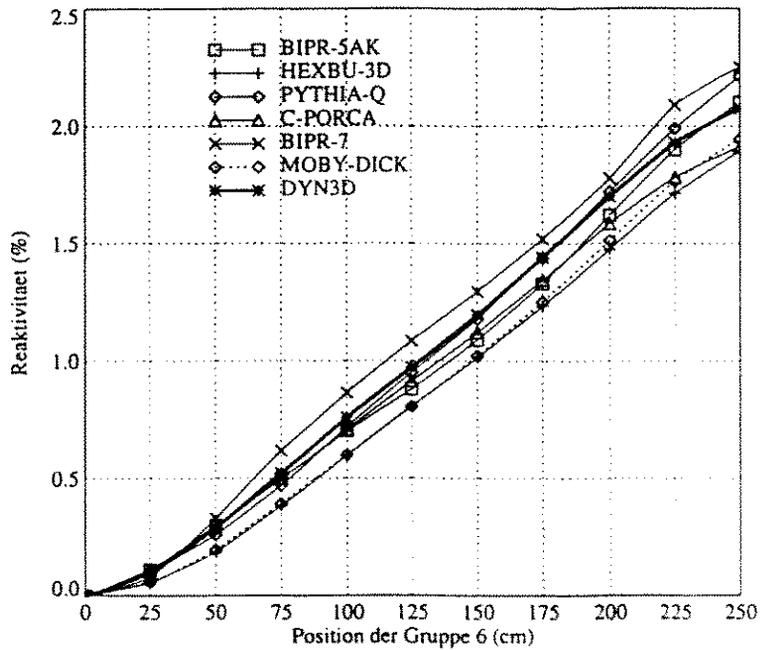


Abb. 5.3.8: Integrale Stabwirksamkeit, Gruppe 6, EOC, N=100%.

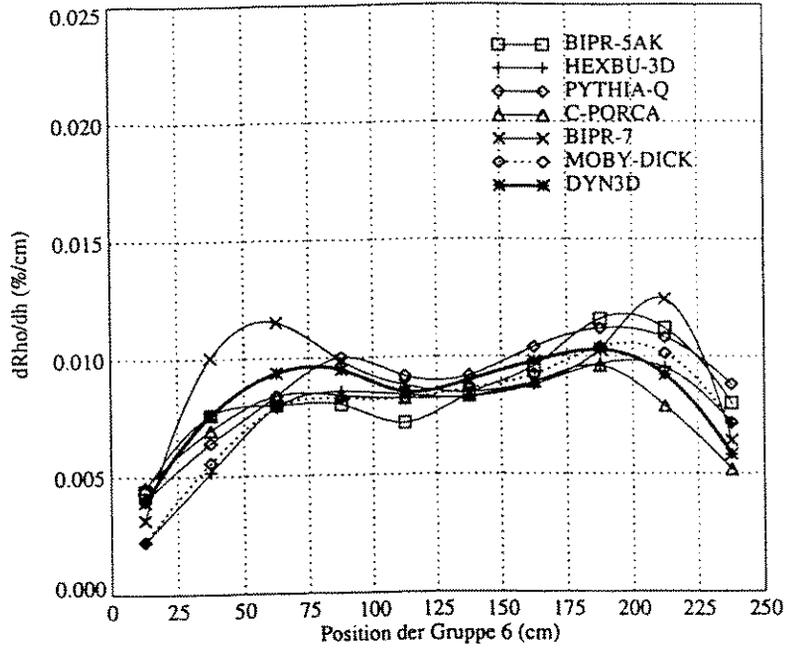


Abb. 5.3.9: Differentielle Stabwirksamkeit, Gruppe 6, EOC, N=100%.

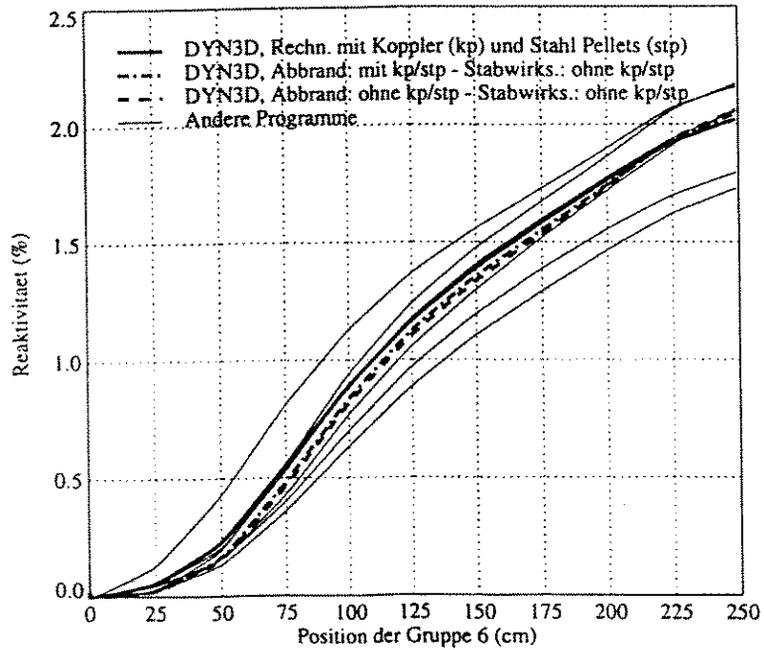


Abb. 5.3.10: Integrale Stabwirksamkeit, Gruppe 6, BOC, N=0%.

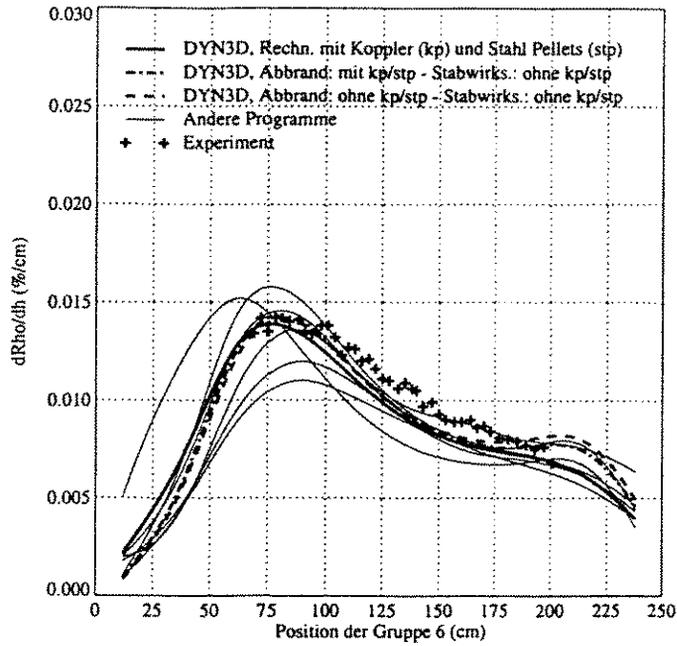


Abb. 5.3.11: Differentielle Stabwirksamkeit, Gruppe 6, BOC, N=0%.

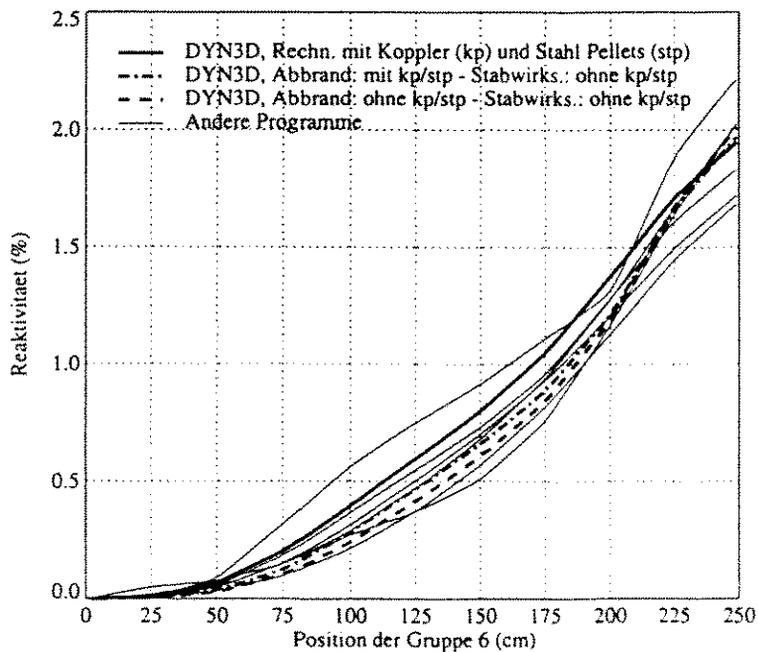


Abb. 5.3.12: Integrale Stabwirksamkeit, Gruppe 6, EOC, N=0%.

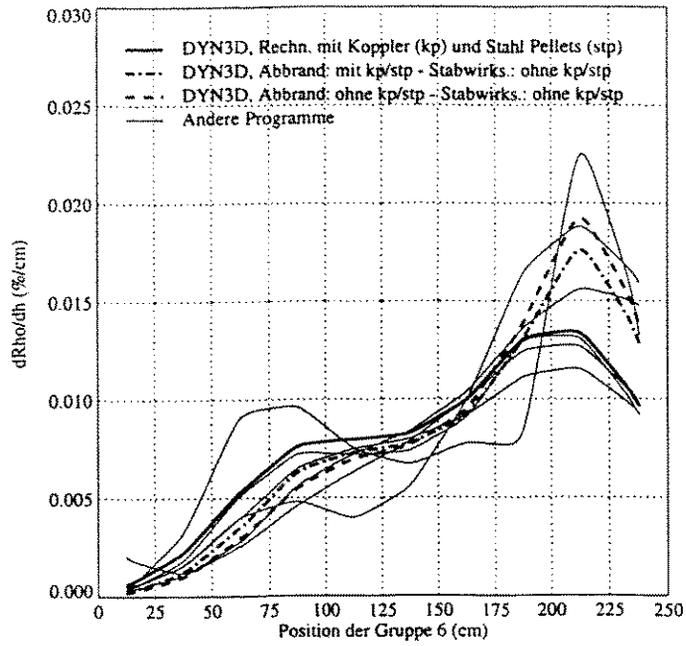


Abb. 5.3.13: Differentielle Stabwirksamkeit, Gruppe 6, EOC, N=0%.

5.3.5 Schlußfolgerungen aus den Testergebnissen

Die Benchmark-Ergebnisse der einzelnen Autoren zeigen zum Teil große Unterschiede. Eine Ursache dafür ist in der Komplexität der gestellten Aufgabe zu sehen: Jeder Teilnehmer hatte mit eigenem Diffusionsprogramm und eigener Datenbibliothek vier Abbrandzyklen durchzurechnen und unter Verwendung der Ergebnisse Regelstabwirksamkeiten zu bestimmen. Im Verlauf einer solchen komplexen Modellierung können sich die Fehlereinflüsse aus Diffusionsprogramm und Datenbibliothek aufsummieren. Eine Möglichkeit zur Separation der Ursachen für die Abweichungen wäre eine Wiederholung der Neutronendiffusionsrechnungen mit allen Rechenprogrammen und gleichen Gruppendaten. Andererseits wäre die parallele Nutzung unterschiedlicher Datenbibliotheken in einem Neutronendiffusionsprogramm sinnvoll. Daher wird im FZ Rossendorf die zusätzliche Anwendung einer anderen Bibliothek für den WWER-440 in Erwägung gezogen (vgl. Kap. 6). Weiterhin könnten die Berechnungen zur Stabwirksamkeit mit einheitlich vorgegebenen Abbrandverteilungen wiederholt werden (vgl. ursprüngliche Formulierung des Paks-Benchmarks in /Kor92/).

Insgesamt zeigen die in den vorhergehenden Abschnitten dargestellten Ergebnisse der Berechnung von Abbrand und Regelstabwirksamkeiten, insbesondere auch der Vergleich mit experimentell ermittelten Daten, die Eignung der Kombination DYN3D/MAGRU-Datenbibliothek zur Abbrandberechnung von Druckwasserreaktoren vom Typ WWER-440.

6. Stand der nuklearen Datenversorgung für DYN3D und Möglichkeiten der Erweiterung

Für Abbrandrechnungen mit DYN3D stehen abbrandabhängige makroskopische Gruppendaten aus der KAB-Bibliothek für den WWER-440 /Agt90/ zur Verfügung. Bei reaktordynamischen DYN3D-Rechnungen wurden bisher spezielle Datenfiles verwendet, die mit Hilfe des MAGRU-Verwaltungsprogrammes PREPAR aus der MAGRU-Bibliothek und einer gegebenen nodalen Abbrandverteilung generiert wurden. Diese Files enthalten für jeden Node n mit dem Abbrand A_n die Bezugsgruppendaten $\Sigma^0(A_n)$ mit den zugehörigen Parametern $\alpha(A_n)$ und $\beta(A_n)$ (vgl. Abschnitt 5.2.5). Die DYN3D-Abbrandversion ermöglicht die Erzeugung der betreffenden Datenfiles direkt im Anschluß an die Abbrandrechnung. In reaktordynamischen DYN3D-Rechnungen können, wie bisher, diese speziellen Datenfiles verwendet werden; zusätzlich ist auch die Möglichkeit des direkten Einlesens der allgemeingültigen Bibliothek und der speziellen Abbrandverteilung vorgesehen.

Im Rahmen des laufenden Projektes wurde eine Recherche zu existierenden WWER-Gruppendatenbibliotheken erarbeitet /Mi94/. Die Arbeit gibt eine Übersicht über die im Rahmen des AER verfügbaren Daten. Tests und Vergleiche zeigen keine signifikanten Qualitätsunterschiede zwischen den einzelnen Datenbibliotheken. Die Datenbibliotheken von Škoda Plzeň, KFKI Budapest und KAB Berlin (WWER-1000) sind nur kommerziell verfügbar. Die Bibliotheken von EGP Prag (WWER-440 und WWER-1000) werden dem Forschungszentrum Rossendorf im Austausch gegen das Programm DYN3D kostenlos zur Nutzung zur Verfügung gestellt.

Die EGP-Bibliotheken, die mit Hilfe des russischen Programms KASSETA erzeugt wurden /Tin93a/, enthalten u. a. mehr Datensätze zur detaillierteren Beschreibung der radialen Reflektorzonen. Damit kann möglicherweise die Genauigkeit der Leistungsdichte- und Abbrandberechnung in den radialen Randgebieten der Spaltzone verbessert werden (vgl. Abschnitt 5.3.3.). Von EGP Prag werden bereits DYN3D-Rechnungen unter Nutzung der o. g. Gruppendaten durchgeführt /Tin93/. Um diese Daten auch in der Abbrandversion von DYN3D nutzen zu können, sind entsprechende Anpassungen bzw. geeignete Parametrisierungen der Abbrandabhängigkeit vorzunehmen.

Die bisher mit MAGRU-440-Daten ausgeführten DYN3D-Rechnungen (vgl. z. B. Abschnitt 5.3) können dann mit den EGP-Daten wiederholt werden, mit dem Ziel, eine quantitative Aussage über den Einfluß der Gruppendaten auf die Ergebnisse im Sinne einer Fehlerabschätzung zu gewinnen. Um derartige Rechnungen und Vergleiche auch für den WWER-1000 durchführen zu können, wäre die Bereitstellung einer MAGRU-1000-Bibliothek /Bec94/ für das FZ Rossendorf anzustreben.

Weiterhin besteht ein Angebot der Universität Stuttgart, Institut für Kernenergetik und Energiesysteme, mit Hilfe des Programmes RSYST Neutronengruppendaten für hexagonale Geometrie (WWER-440 und WWER-1000) zu erzeugen. Das Institut für Raumflug- und Reaktortechnik der Technischen Universität Braunschweig verfügt ebenfalls über ein geeignetes Programm zur Gruppendatengenerierung.

7. Stand der Verifikation und Ableitung weiterer Erfordernisse

7.1 Überblick zur Verifikation von DYN3D

Eine detaillierte Darstellung der bisher, auch außerhalb des Vorhabens, durchgeführten Arbeiten zur Verifikation von DYN3D und die erzielten Ergebnisse erfolgte in einem Technischen Fachbericht /Gru94/, der im Rahmen des abgeschlossenen Vorhabens erarbeitet wurde. An dieser Stelle soll dazu nur ein kurzer Überblick gegeben werden. In den folgenden Abschnitten wird ausführlicher über ergänzende Verifikationsarbeiten berichtet, die im Rahmen des Vorhabens durchgeführt wurden. Dies betrifft Arbeiten zur Verifikation der Neutronenkinetik anhand von Benchmarkaufgaben, zur Erprobung des Brennstabmodells durch Nachrechnung von RIA-Experimenten an Impulsreaktoren und zum Test der Abbrandversion.

Die bisherigen Arbeiten zur Verifikation von DYN3D umfassen folgende Teilgebiete:

7.1.1 Stationäre Neutronenflußberechnung

Zur Erprobung der stationären Neutronenflußberechnung wurden Vergleiche mit Codes auf der Basis endlicher Differenzenverfahren durchgeführt, welche durch Verringerung der Gitterschrittweite die Erzeugung einer mathematisch exakten Lösung erlauben. Für eine zweidimensionale Testaufgabe wurde mit Hilfe des Programmes MNATA aus dem NRI Rez durch Extrapolation der Gitterschrittweite auf Null eine echte Benchmarklösung erzeugt. Die relative Abweichung des mit DYN3D berechneten Eigenwertes k_{eff} zum Referenzwert beträgt 0,05%, die maximale Abweichung in der Leistungsdichte 1.2% /Gru94/.

Berechnete Werte für die integrale Effektivität verschiedener Regelstabgruppen und die kritische Borsäurekonzentration in Abhängigkeit von der Regelgruppenstellung wurden mit Meßwerten für die frischen Zustände der Blöcke 2 und 3 des KKW Greifswald verglichen. Als neutronenphysikalische Datenbasis wurde die MAGRU-Querschnittsdatenbibliothek der KAB AG Berlin benutzt /Agt90/.

Umfangreiche Vergleiche von DYN3D-Ergebnissen mit Werten zur kritischen Borsäurekonzentration, integralen und differentiellen Stabwirksamkeitensowie Reaktivitätskoeffizienten der Borsäurekonzentration und der Temperatur aus Inbetriebnahmemessungen für den Block 4 des KKW Dukovany wurden bei Energoprojekt Prag durchgeführt /Tin93/. Die Abweichungen liegen i.a. innerhalb der Fehlergrenzen der Meßwerte. Vergleiche zwischen berechneten und mit Hilfe der Rod-drop-Methode zu Beginn des 11. Zyklus am Block 3 des KKW Dukovany gemessenen Regelstabreaktivitäten wurden bei VUJE Trnava (Slowakei) angestellt /Sar94/. Die Ungenauigkeit der Reaktivitätsmessung mit Hilfe von out-core-Ionisationskammern aufgrund von Ortseffekten relativiert den Wert der Vergleiche mit den rod-drop-Experimenten. Die tschechischen und slowakischen Autoren benutzen als Datenbasis mit Hilfe des russischen Codes KASSETA erzeugte Bibliotheken makroskopischer Wirkungsquerschnitte, die in vielen WWER-Betreiberländern verfügbar sind.

Mit der Nachrechnung von Inbetriebnahmeexperimenten am Block 5 des KKW Saporoshje (Ukraine) im frischen Zustand wurde begonnen. Hier handelt es sich um einen WWER-1000. Für diesen Reaktortyp liegen bisher nur wenige Verifikationsergebnisse vor. Für die Nachrechnung ebenfalls vorhandener Daten für Reaktorzustände mit Abbrand ist noch keine Querschnittsdatenbasis verfügbar.

Einen wesentlichen Beitrag zur Verifikation der stationären Reaktorberechnung (einschließlich Abbrandgeschichte) mit DYN3D stellt die Nachrechnung eines Benchmarkproblems des AER zum KKW Paks dar, über die im Abschnitt 5.3 ausführlicher berichtet wird.

7.1.2 Neutronenkinetik

Zur Verifikation der zeitabhängigen Neutronenflußberechnung ohne thermohydraulische Rückkopplung konnten kinetische Experimente an der Nulleistungsanordnung LR-0 im Kernforschungsinstitut (NRI) Řež bei Prag genutzt werden. Der LR-0 besteht aus Brennelementen des WWER-1000, die in der Länge auf 125 cm verkürzt sind. In den Jahren 1986 bis 1988 wurden mehrere kinetische Experimente mit trapezförmigem Verfahren, Einfahren oder Einfallen ("rod drop") jeweils eines exzentralen oder zentralen Clusterelements durchgeführt. Zur Messung des Neutronenflusses wurden Mikrospaltkammern an verschiedenen in-core Positionen eingesetzt. Eine Beschreibung der Experimente und der gemeinsam mit dem NRI Řež durchgeführten Rechnungen wurde in den Publikationen /Ryp90/ und /Gru91/ dargelegt, eine Übersicht wird im Bericht /Gru94/ gegeben. Die instationäre Neutronenflußverteilung weist ausgeprägte ortsabhängige Effekte auf. Es wurde generell eine sehr gute Übereinstimmung der Rechnungen mit den experimentellen Ergebnissen für die relativen Detektorraten erzielt. Da die Stabilität der Spaltkammern über längere Zeiten nicht gewährleistet war, konnten keine stationären Flußverteilungen gemessen werden. Für die Rechnungen wurden zum Teil homogenisierte Gruppenkonstanten benutzt, die mit den tschechischen Programmen MICROBE und BRETISLAV erzeugt wurden, zum Teil Gruppendaten, welche mit dem Code NESSEL der KAB AG Berlin berechnet worden sind. Während die MICROBE-Daten für eingetauchte Absorbercluster anhand experimenteller Reaktivitätswerte korrigiert werden mußten, wurde mit unkorrigierten NESSEL-Daten eine sehr gute Übereinstimmung erzielt. NESSEL bildet die Basis für die MAGRU-Datenbibliothek für WWER-440-Reaktoren, die zur Zeit standardmäßig an DYN3D angeschlossen ist.

Einen weiteren Schwerpunkt der Verifikation der Neutronenkinetik von DYN3D bildete die Beteiligung an Benchmarkproblemen, die im Rahmen der internationalen Forschungsvereinigung "Atomic Energy Research" (AER) unter Mitarbeit des FZR bearbeitet werden. Da einige der beteiligten Codes aus WWER-Betreiberländern (KIKO3D, BIPR-8) noch keine Thermohydraulikmodelle beinhalteten, wurden die ersten Benchmarkaufgaben als rein neutronenkinetische Probleme definiert. Der sukzessive Aufbau der Benchmarks durch "Zuschalten" von Effekten wie Rückkopplung und Thermohydraulik erlaubt eine systematische Auswertung und Aufklärung auftretender Differenzen. Das 1. Benchmarkproblem beinhaltete den Auswurf einer exzentralen Regelstabs für ein vereinfachtes WWER-440-Kernmodell mit darauffolgendem Einfahren aller Abschaltstäbe. Für die 2. Benchmarkaufgabe wurde

anstelle der Havarieabschaltung eine einfache Rückkopplung proportional zur integralen Energiefreisetzung angenommen. An der Lösung waren die Codes KIKO3D, BIPR-8, HEXTRAN und DYN3D beteiligt. Eine detaillierte Darstellung der Ergebnisse erfolgt im Abschnitt 7.2. Gegenwärtig wird das 3. AER-Benchmark zur Reaktordynamik erarbeitet, wobei die Thermohydraulik im Reaktorkern einbezogen wird. Eine weitere Beteiligung an den AER-Benchmarks für die DYN3D-Verifikation ist sinnvoll.

7.1.3 Thermohydraulik und Brennstabmodell

Für die Verifikation des Thermohydraulik- und Brennstabmodells in DYN3D wurden

- Einzeleffektexperimente aus der Literatur nachgerechnet,
- Benchmarkrechnungen, Programmvergleiche mit ähnlichen Codes und Empfindlichkeitsuntersuchungen durchgeführt,
- Experimente zum Brennstabverhalten bei schnellen Leistungsexkursionen nachgerechnet, die in Rußland und Japan an Impulsreaktoren durchgeführt worden sind (RIA-Experimente).

Bei der Entwicklung des in DYN3D integrierten Thermohydraulik- und Brennstabmodells FLOCAL wurden insbesondere Aspekte berücksichtigt, die unter den Bedingungen reaktivitätsinduzierter Störfälle relevant sind (große und schnelle Leistungsänderungen, Wärmeübergang bei hohen Wärmestromdichten und relativ hohen Fluidunterkühlungen, detaillierte Modellierung des Gasspalts im Brennstab). Andererseits werden Effekte, die für Kühlmittelverluststörfälle typisch sind, wie Aufsieden bei starkem Druckabfall, Ausbildung eines Gemischspiegels oder Wasser-Dampf-Gegenstrom nicht berücksichtigt bzw. nur näherungsweise erfaßt.

Die Einzeleffektverifikation beinhaltete dementsprechend vor allem die Nachrechnung von experimentellen Daten aus der Literatur zum unterkühlten Sieden, zur kritischen Heizflächenbelastung und zum nachkritischen Wärmeübergang. Eine Übersicht wird im Bericht /Gru94/ gegeben. Auf der Grundlage der Nachrechnungen wurde die Berechnung des unterkühlten Siedens modifiziert. Es wurden Korrekturen zur Berücksichtigung der Fluidunterkühlung bei der Berechnung des Wärmeüberganges im nachkritischen Bereich eingeführt /Gru94, Ro91/.

Zur integralen Verifikation des Thermohydraulikmodells wurden Vergleichsrechnungen mit ähnlichen Codes anhand ausgewählter Testfälle durchgeführt. Anhand dieser Testfälle wurden auch Empfindlichkeitsuntersuchungen bezüglich der Numerik und zum Einfluß verschiedener Modelloptionen, z.B. für die Berechnung des Wärmeübergangs, angestellt. Für folgende Testfälle erfolgten Vergleichsrechnungen mit dem Thermohydraulikprogramm INCO der KAB AG:

- Drosselung des Kühlmittelmassenstromes durch eine Brennstoffkassette,
- Ausfall von Hauptkühlmittelpumpen,
- Leistungsexkursionen infolge von Regelstabauswürfen.

Anhand der Leistungsexkursionen wurden Variantenrechnungen mit Variation der Impulshöhe und der Zustandsparameter der Brennstäbe durchgeführt. In diesen Va-

riantenrechnungen konnten die Kriterien und Mechanismen für das Brennstabversagen in Abhängigkeit von der Energiefreisetzung und vom Abbrandzustand im Vergleich mit Aussagen in der Literatur qualitativ gut reproduziert werden.

Für eine Benchmarkaufgabe aus der Literatur (plötzliches Zuschalten einer Wärmequelle in einem durchströmten Rohr) wurden FLOCAL-Ergebnisse auch mit ATHLET-Rechnungen verglichen.

Einen wichtigen Schwerpunkt der Arbeiten zur Verifikation von FLOCAL bildete die Nachrechnung von Experimenten zum Brennstabverhalten bei reaktivitätsinduzierten Störfällen. Neben aus der Literatur bekannten Experimenten am Nuclear Safety Research Reactor des JAERI konnten im Rahmen eines über das Vorhaben finanzierten Arbeitsaufenthaltes eines Mitarbeiters aus dem Kurtschatow-Institut (KI) Moskau in Rossendorf experimentelle Ergebnisse des KI, die am Impulsreaktor IGR erhalten wurden, verfügbar gemacht werden. Eine ausführliche Darstellung der Ergebnisse von Nachrechnungen der RIA-Experimente wird im Abschnitt 7.3 dieses Berichts gegeben.

7.1.4 Integrales Kernmodell

Für die Verifikation des Zusammenwirkens von Neutronenflußberechnung, Thermohydraulik und neutronenphysikalischer Rückkopplung über die Wirkungsquerschnitte im Kernmodell stehen folgende Möglichkeiten zur Verfügung:

- numerische Konsistenz- und Empfindlichkeitsuntersuchungen,
- Lösung von Benchmarkaufgaben, die alle relevanten Effekte berücksichtigen,
- Vergleich mit Daten aus Inbetriebnahmemessungen an KKW,
- Nachrechnungen zu transienten Prozessen in KKW.

Bisher liegen für die integrale Verifikation des Kernmodells noch relativ wenige Ergebnisse vor.

Mit der Definition des 3. Reaktordynamik-Benchmarks des AER wurde mit dem internationalen Vergleich von Programmen für die 3D Kernmodellierung von WWER-Reaktoren mit Einbeziehung der Thermohydraulik begonnen. Darüber hinaus gibt es auch Benchmarkvergleiche mit Entwicklern von Programmen für hexagonale Brennelementgeometrie außerhalb des AER /Kni95/.

Vergleiche mit Daten aus Inbetriebnahmeexperimenten an WWER-Reaktoren wurden im Unterpunkt 1 dieses Abschnitts erwähnt. Da die Inbetriebnahmemessungen meist bei Nulleistung durchgeführt werden, spielt die Thermohydraulik nur eine untergeordnete Rolle. Das Fehlen von in-core Meßsystemen für WWER-440 und die Mängel dieser Meßsysteme in WWER-1000, die mit Rhodiumemittern mit hohen, ungenau bekannten verzögerten Signalanteilen ausgestattet sind, bedingen den Mangel an Messungen von stationären und instationären Leistungsdichteverteilungen. Eine Möglichkeit der Verifikation von DYN3D für Leistungszustände bot die Beteiligung am Benchmarkproblem des AER zur des Block 2 im KKW Paks, wobei Regelstabwirksamkeiten und Abbrandverteilungen mit Referenzwerten aus dem KKW verglichen werden konnten.

Ein Vergleich mit Meßwerten zu einem transienten Prozeß wurde durch Nachrechnung eines Störfalls im Block 5 des KKW Greifswald (WWER-440) möglich, der sich im November 1989 ereignete. Durch einen Fehler im Regelsystem wurde bei ca. 50% Leistung eine von drei in Betrieb befindlichen Hauptumwälzpumpen abgeschaltet. Der automatische Havarieschutz versagte und die Reaktorschellabschaltung wurde nach ca. 40 s vom Operator per Hand ausgelöst. Ergebnisse der Nachrechnung dieses Störfalls mit Hilfe von DYN3D wurden mit Meßsignalen der Kühlmitteltemperaturen am Austritt von Brennstoffkassetten verglichen. Die Fehlerabschätzung für die Aufheizspanne des Kühlmittels im Reaktorkern ergab allerdings $\pm 4\text{K}$ bereits für den stationären Ausgangszustand. Die hohen Meßungenauigkeiten relativieren den Wert der Nachrechnung für die Programmverifikation.

Verifikationsbedarf für DYN3D besteht vor allem noch für den WWER-1000. Von besonderem Interesse ist hier der Vergleich von berechneten und gemessenen stationären Leistungsdichteverteilungen. Die Nachrechnung von Meßdaten zu Kritikalitätsparametern und Leistungsdichteverteilungen für verschiedene Leistungs- und Abbrandzustände soll unter Einbeziehung von Partnern aus WWER-Betreiberländern systematisch fortgeführt werden. Darüber hinaus müssen Meßdaten zu Transienten in KKW aquiriert werden, die für die Codeverifikation geeignet sind. Hier sind allerdings ähnliche Probleme zu erwarten wie oben erwähnt.

7.2 Benchmarkaufgaben für die 3D Neutronenkinetik

7.2.1 Beschreibung des Problems

Im Abschnitt 7.1 wurden die AER-Benchmarkprobleme zur Verifikation der 3D Neutronenkinetik und Reaktordynamik erwähnt. Nach der Lösung des ersten, rein kinetischen Benchmarks wurde eine zweite Benchmarkaufgabe definiert, die gegenüber dem ersten Benchmark um eine einfache Rückkopplung erweitert wurde /Gru93a/. Als das Benchmark definiert wurde, verfügten die Codes KIKO3D und BIPR-8 noch nicht über ein vollständiges Thermohydraulikmodell. Deshalb wurde im 2. AER Benchmark zur Modellierung der Rückkopplung eine adiabatische Aufheizung des Brennstoffes vorgesehen, die sich mit einem Kinetikcode relativ einfach modellieren läßt. Die Programme DYN3D und HEXTRAN, die schon über ein Thermohydraulikmodell verfügen, wurden an das Problem angepaßt. Die Arbeiten zur Lösung des 2. AER-Benchmarkproblems wurden im Rahmen des abgeschlossenen Vorhabens durchgeführt.

Der betrachtete Störfall simuliert den Auswurf eines Regelstabes aus einem WWER-440. Ein asymmetrischer Regelstab der Bank K6 wird in 0,16 s aus dem Kern ausgeworfen. Die für die Berechnung notwendigen Eingabedaten wurden vorgegeben. Das betrifft auch die makroskopischen Wirkungsquerschnitte in den Noden des Kernmodells. Die Geometrie wurde möglichst realistisch gewählt. Einige Daten wurden verändert, um für den Programmvergleich einen Störfall zu simulieren, der über die realen Verhältnisse im WWER-440 hinausgeht. So wurde angenommen, daß die bei dem Auswurf eines einzelnen Regelstabes freigesetzte Reaktivität nahezu 2β beträgt. Dazu wurde der Absorptionsquerschnitt der Regelstäbe künstlich erhöht und der β -Wert der verzögerten Neutronen auf 0,5 % abgesenkt. Auf Basis der adiabatischen Aufheizung des Brennstoffes wurde der Dopplereffekt als einziger Rückkopplungseffekt betrachtet. Abb. 7.2.1 zeigt den Symmetriesektor eines WWER-440 mit frischem Brennstoff, die Verteilung der Anreicherungen und Positionen der Regelstäbe.

7.2.2 Ergebnisse des Programmvergleichs

Die Ergebnisse des Programmvergleichs sind auf dem 4. AER Symposium vorgestellt worden /Gru94a/. Zuerst wurden die stationären Ergebnisse verglichen. Es zeigten sich Differenzen in der Leistungsverteilung in der Nähe der Regelorgane und dem Reflektor. Dazu muß bemerkt werden, daß im WWER-440 Reflektor und Regelorgane nichtmultiplizierende Medien sind. Die Modellierung dieser Materialien erfolgt in den verschiedenen Codes in unterschiedlicher Weise. In HEXTRAN werden z.B. nicht-multiplizierende Materialien besser durch Randbedingungen als durch makroskopische Querschnitte und Diffusionstheorie beschrieben. Nicht alle beteiligten Codes können die Absorber als innere Ränder beschreiben. Da in KIKO3D beides möglich ist, wurden mit Hilfe dieses Programms die Albedos für die Randbedingungen aus den vorgegebenen Querschnitten von Absorber und Reflektor berechnet. Die Programme konnten wahlweise die einen oder anderen Neutronenkonstanten benutzen. DYN3D benutzte an der Grenze Kern-Reflektor Albedos und für die Regelstäbe die makroskopischen Konstanten.

Die Eigenwerte der stationären Zustände mit und ohne ausgeworfenem Stab sowie die statische Reaktivität des ausgeworfenen Stabes sind in Tabelle 7.2.1 dargestellt. Man sieht eine sehr gute Übereinstimmung des Eigenwertes $k_{\text{eff},0}$ des Anfangszustandes zwischen KIKO3D und DYN3D. Etwas größere Differenzen bestehen zu den Ergebnissen von HEXTRAN und BIPR-8. Ähnlich liegen die Übereinstimmungen für den Eigenwert des Zustandes mit ausgeworfenem Stab und die Reaktivität des Stabes. Die Unterschiede in der Reaktivität lassen Differenzen während des Störfalles erwarten. Die normierte Verteilung der Brennelementleistungen für $t = 0.0$ s zeigt Abbildung 7.2.2. Die Ergebnisse von DYN3D wurden aus praktischen Gründen als Referenzwerte benutzt, ohne bei diesem Vergleich ein Rechenprogramm herauszustellen zu wollen. Eine Bewertung der unterschiedlichen Ergebnisse kann nur mit Hilfe einer Benchmarklösung durchgeführt werden, die aber nicht zur Verfügung stand. Der Vergleich der stationären Leistungsverteilung zeigt Abweichungen am Rand des Reaktorkerns, wobei KIKO3D und DYN3D untereinander gut übereinstimmen. Etwas größere Abweichungen dieser beiden Codes gibt es zu BIPR-8 und HEXTRAN, deren Ergebnisse wiederum näher beieinander liegen. Ähnlich ist es mit den Abweichungen in der Umgebung der Regelstäbe. Die Abweichungen von KIKO3D und DYN3D in den Brennelementen mit eingefahrenem Regelstab betreffen die 2 Noden unter dem eingetauchten Stab, wo die Leistungsdichte sehr klein ist und kleine absolute Abweichungen zu einem großen relativen Fehler führen.

Zu den Vergleichen der stationären Rechnungen kann man sagen, daß die Differenzen in den Eigenwerten und der Reaktivität offensichtlich auf Unterschiede bei der Berechnung der Neutronenflußverteilung zurückzuführen sind.

Die Abweichungen in der Reaktivität des ausgeworfenen Stabes führen dann zu Unterschieden im transienten Verlauf (Abb. 7.2.3). Es ist zu erkennen, daß die Peaks in der Leistung bei größerer Reaktivität höher sind. Erwartungsgemäß liegen die Ergebnisse von DYN3D und KIKO3D einerseits und BIPR-8 und HEXTRAN andererseits nahe beieinander. Vergleicht man die maximale Brennstofftemperatur, so ergeben sich ähnliche Verhältnisse (Abb. 7.2.4).

Abb. 7.2.5 zeigt den Verlauf des Leistungspeakfaktors von DYN3D. Der Leistungspeak befindet sich im Brennelement 2 in der Nähe des ausgeworfenen Stabes. Er zeigt ein Maximum nach dem Auswurf des Stabes und wird dann durch den höheren Dopp-lerrückkopplungseffekt im Leistungsmaximum wieder etwas reduziert. Vergleicht man in Tabelle 7.2.2 die Leistungspeakfaktoren der einzelnen Rechenprogramme zu verschiedenen Zeiten, so kann man keine gravierenden Abweichungen zwischen den Programmen feststellen. Das ist in Übereinstimmung mit der Verteilung der Leistungen in den Brennelementen zur Zeit $t = 0,16$ s, wenn der Stab seine obere Position erreicht hat (Abb. 7.7.6). Die Übereinstimmung der Leistung in dem Brennelement 2, in welchem der Maximalwert auftritt, ist für alle 4 Rechenprogramme gut. Nach $t=2,0$ s zeigt sich ungefähr das gleiche Bild (Abb. 7.7.7).

Diese Vergleiche zeigen, daß die Differenzen in der maximalen Brennstofftemperatur nicht direkt auf Abweichungen in den Verteilungen, sondern auf Unterschiede in der Reaktivität zurückzuführen sind. Die Ergebnisse von DYN3D stimmen wieder gut mit KIKO3D überein. Abweichungen gibt es zu den Programmen BIPR-8 und HEXTRAN,

deren Ergebnisse ebenfalls gut miteinander übereinstimmen.

Betrachtet man insgesamt die Übereinstimmung der Ergebnisse, so kann man sagen, daß sie für realistische Sicherheitsanalysen ausreichend ist. Hierbei muß berücksichtigt werden, daß größere Unsicherheiten durch die verwendeten Daten hinzukommen. Im 3. Benchmark, das zur Zeit bearbeitet wird, erfolgt die Simulation dieses Störfalls mit Einbeziehung des thermohydraulischen Modells. Um die Unterschiede in der Neutronenkinetik zu verringern, erfolgt eine Anpassung der Konstanten für die Absorber, so daß der ausgeworfene Stab in allen Rechnungen die gleiche Reaktivität besitzt. Es ist zu erwarten, daß Differenzen zwischen den einzelnen Rechnungen durch die unterschiedlichen thermohydraulischen Modelle bedingt sind.

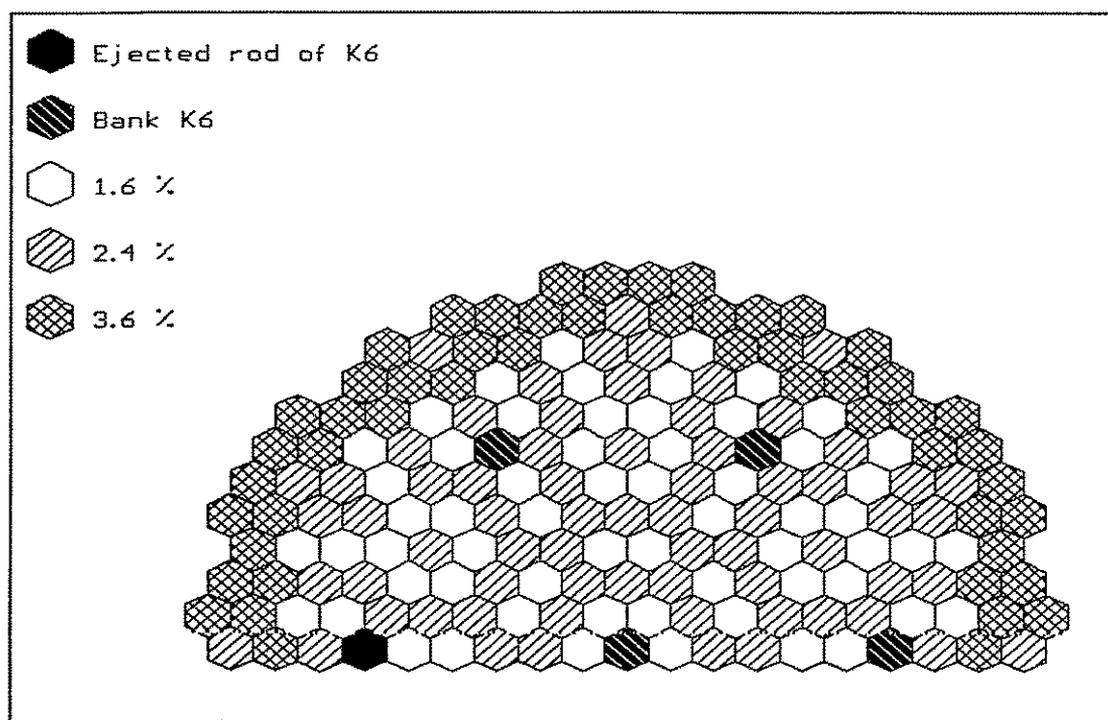


Abb. 7.2.1: 2. kinetisches AER-Benchmark: Schema des WWER 440. Regelgruppe K6 200 cm eingetaucht.

Table 7.2.1: Statischer Eigenwert $k_{\text{eff},0}$ bei $t = 0,0$ s und Eigenwert $k_{\text{eff},1}$ des Anfangszustandes mit ausgeworfenem Stab sowie Reaktivität des ausgeworfenen Stabes

Code	$k_{\text{eff},0}$	$k_{\text{eff},1}$	Reaktivität(%) $\rho = 1 - k_{\text{eff},0} / k_{\text{eff},1}$	$(\rho_{\text{Code}} / \rho_{\text{DYN3D}} - 1) * 100\%$
BIPR8	0.998442	1.008673	1.0143	4.
DYN3D	0.999941	1.009792	0.9755	-
HEXTRAN	0.99902	1.009181	1.0069	3.2
KIKO3D ¹	0.999994	1.009926	0.9834	0.
KIKO3D ²	1.000001	1.009933	0.9834	0.8

KIKO3D¹: Verwendung von Querschnitten für die Absorber

KIKO3D²: Verwendung der äquivalenten Albedos für die Absorber

Table 7.2.2: Leistungspeakfaktoren zu verschiedenen Zeitpunkten während der Transiente

Time (s)	0.0	0.16	power maximum (~ 0.25 s)	0.4	2.0
BIPR8	2.30	7.76	6.13	5.65	5.29
DYN3D	2.33	7.69	6.53	5.67	5.30
HEXTRAN	2.33	7.77	6.52	5.66	5.32
KIKO3D	2.34	7.78	6.41	5.68	5.30

2. Kinetisches AER Benchmark

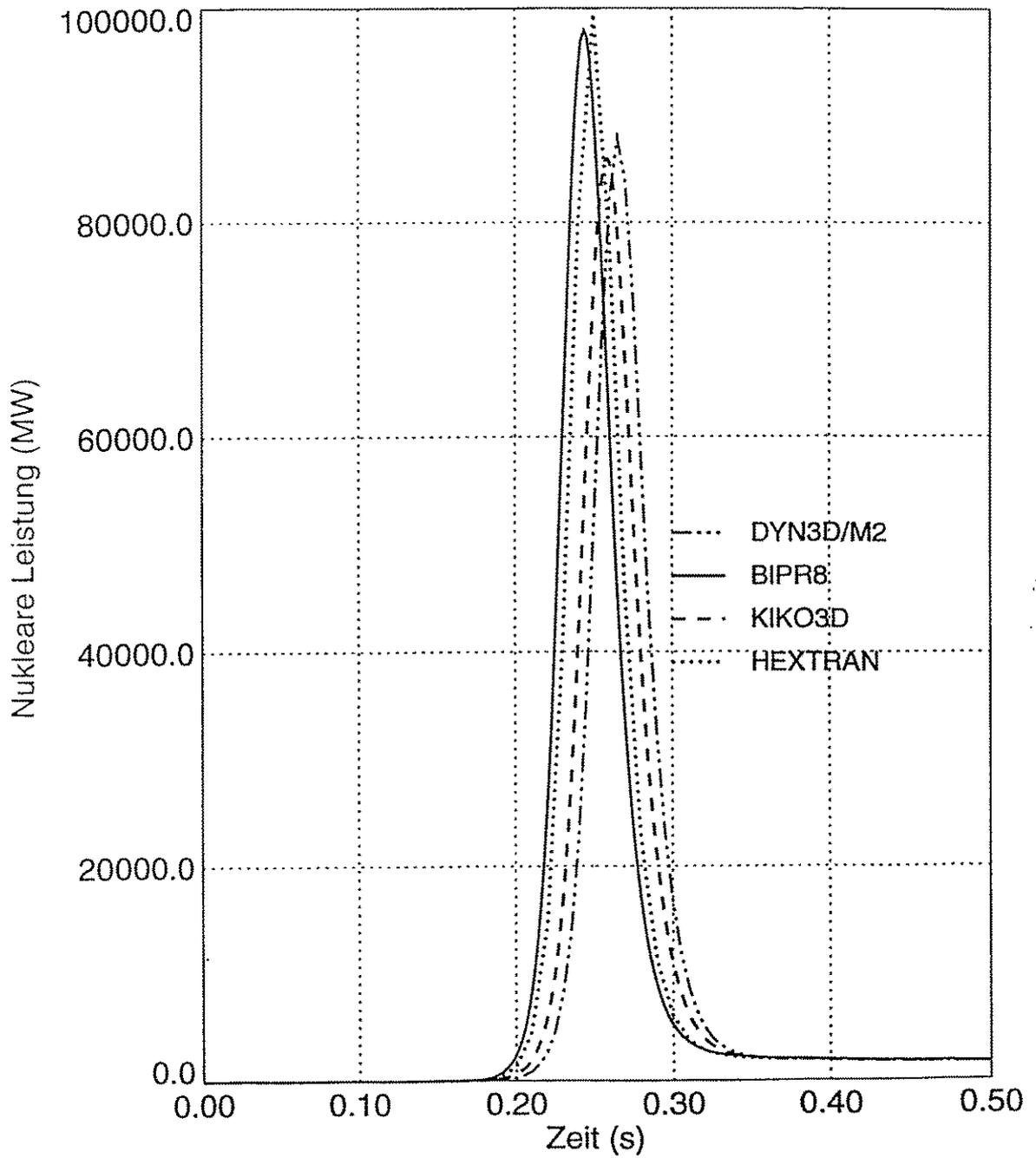


Abb. 7.2.3: Zeitverlauf der nuklearen Leistung

2. Kinetisches AER Benchmark

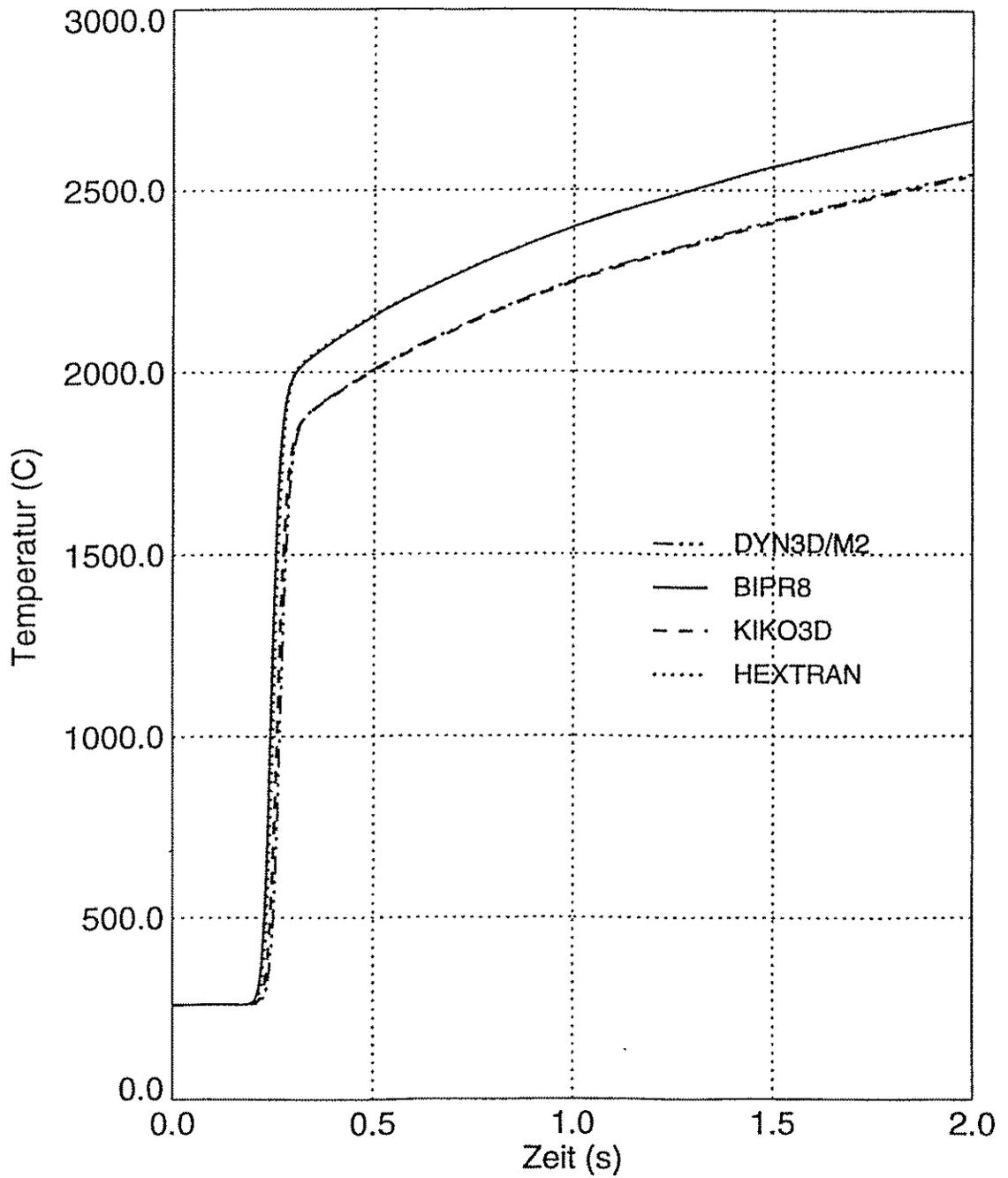


Abb. 7.2.4: Zeitverlauf der maximalen Brennstofftemperatur

2. Kinetisches AER Benchmark

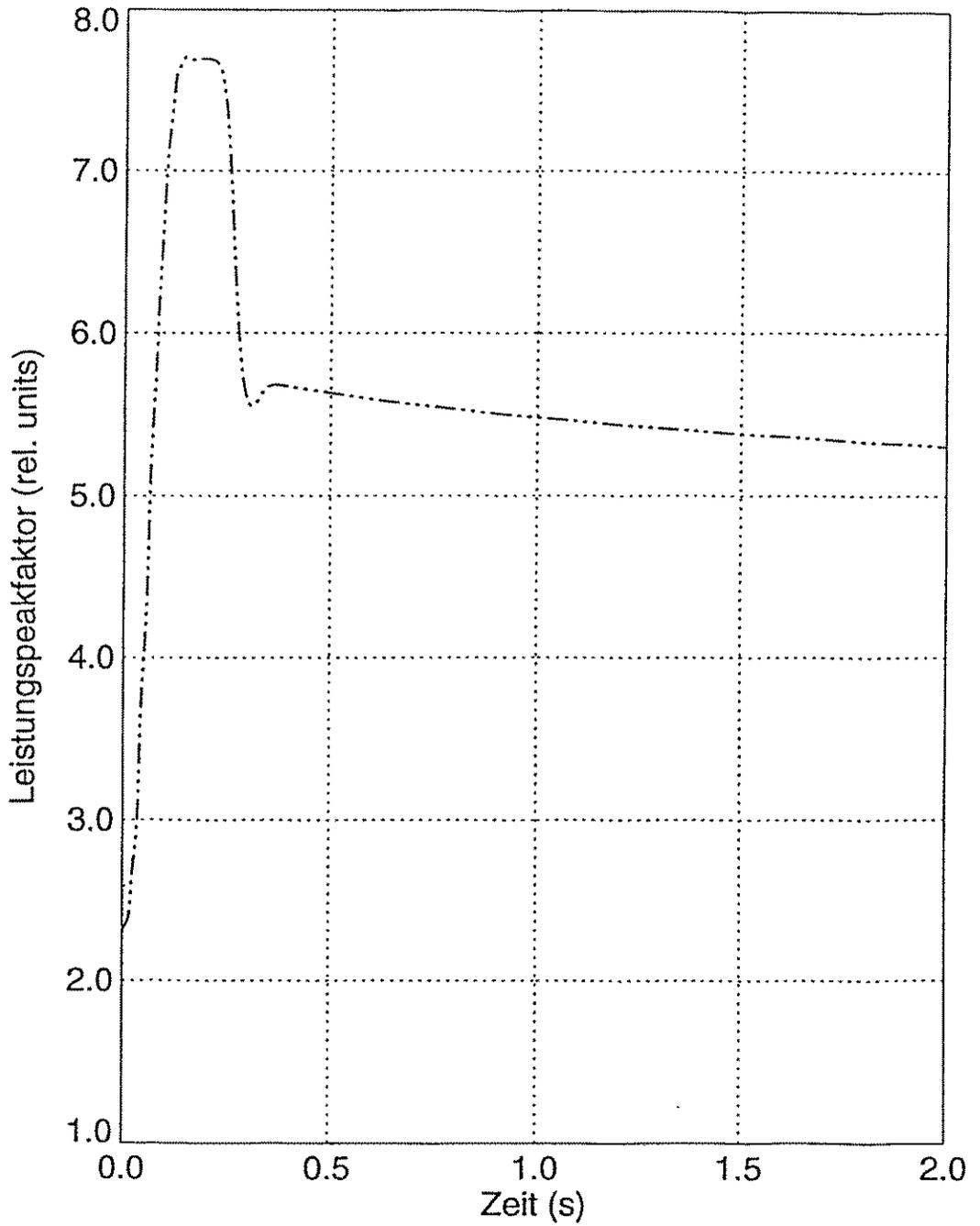
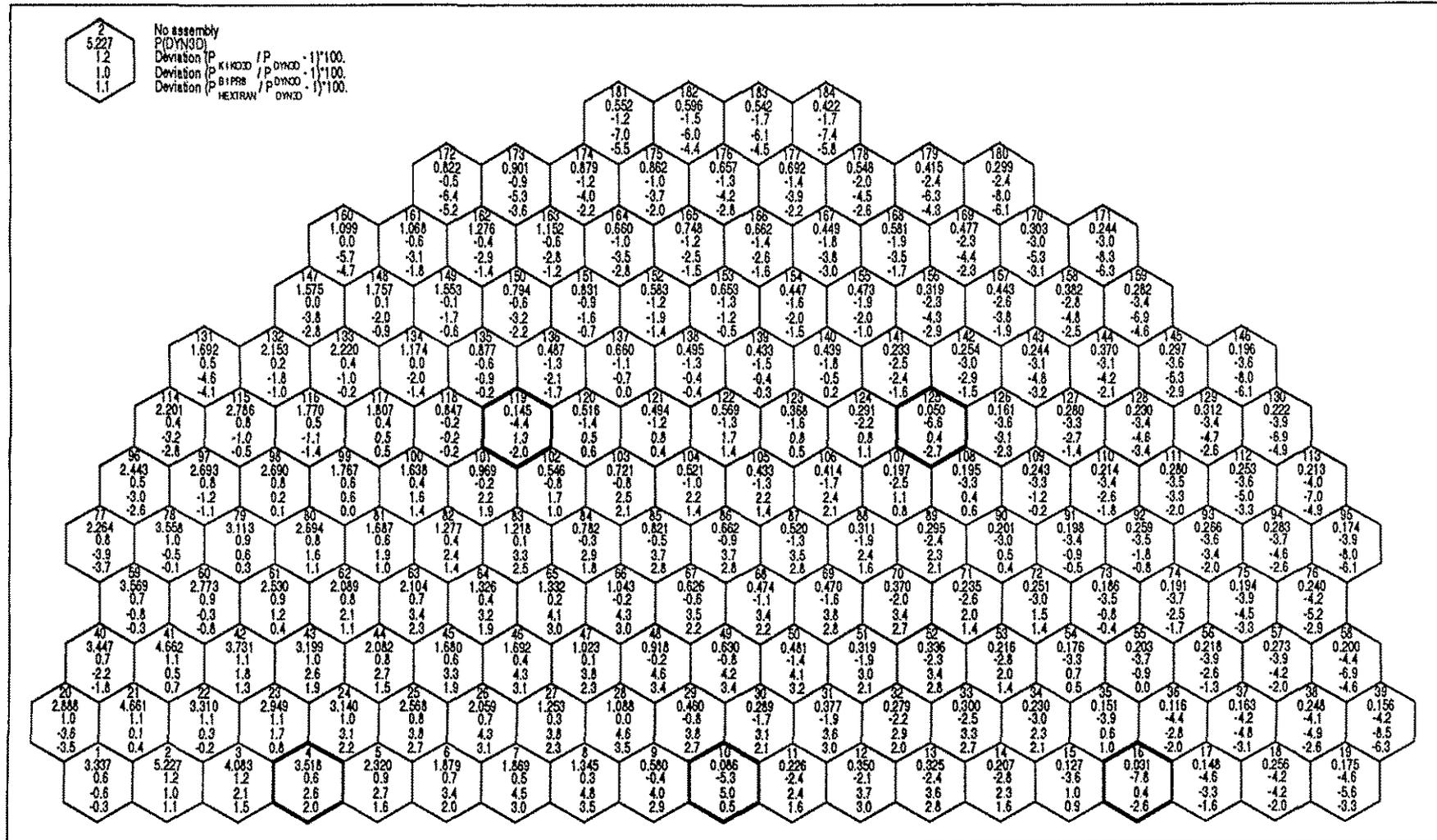


Abb. 7.2.5: DYN3D/M2: Zeitverlauf des Leistungsfaktors


 Abb. 7.2.6: 2. Kinetisches AER Benchmark: Vergleich der Leistungen der Brennelemente bei $t = 0.16$ s.

7.3 Verifikation des Brennstabmodells an RIA-Experimenten

Im Rahmen des Vorhabens wurden Arbeiten zur Verifikation des Brennstab- und Thermohydraulikmodells FLOCAL im Code DYN3D durch Nachrechnung von Experimenten zum Brennstabverhalten bei großen Leistungsexkursionen durchgeführt. Durch Zusammenarbeit mit dem Kurtschatow-Institut Moskau konnten die Ergebnisse einiger Experimente aus Versuchsserien zugänglich gemacht werden, die unter Leitung des KI am Impulsreaktor IGR in Semipalatinsk durchgeführt worden sind. Dabei wurden verkürzte Proben von WWER-Brennstäben in Luft- und Wasserumgebung verwendet. Die Impulsbreite des IGR ist im Gegensatz z.B. zum japanischen Forschungsreaktor NSRR relativ groß. In der Literatur zugängliche Experimente am NSRR wurden bereits früher mit FLOCAL nachgerechnet /Ro91/. Die unterschiedlichen Impulsbreiten beider Reaktoren ergeben sich aus deren Konstruktion. Der NSRR besitzt U-ZrH-Brennstoff-Moderator-Elemente mit einer sehr effektiven prompten Temperaturrückkopplung, der IGR ist ein graphitmoderierter Impulsreaktor.

Entsprechend den Anwendungsgrenzen des FLOCAL-Modells werden folgende Phänomene modelliert:

- Wärmeleitung in Brennstoff und Hülle,
- Verhalten des Gasspalts zwischen Brennstoff und Hülle,
- thermomechanisches Verhalten der Hülle, soweit es für die Wärmeübergangsproblematik relevant ist,
- u.U. Zirkoniumoxidation im Hochtemperaturbereich,
- Wärmeübergang an das Kühlmittel unter den Bedingungen extremen thermodynamischen Nichtgleichgewichts.

Die Wärmeleitung wird in FLOCAL eindimensional (in radialer Richtung) betrachtet. Für den Wärmeübergang im Gasspalt zwischen Brennstoff und Hülle werden die Wärmeleitung im Gas, die Wärmestrahlung und gegebenenfalls die Kontaktleitung berücksichtigt. Zur Ermittlung der Spaltweite und des Kontaktdruckes bei geschlossenem Spalt werden die thermische Ausdehnung von Brennstoff und Hülle sowie die elastische und plastische Deformation des Hüllrohres betrachtet. Die plastische Hüllrohrdeformation wird nach einem quasistatischem Fließgesetz berechnet. Die im Hochtemperaturbereich einsetzende Metall-Wasser-Reaktion wird als Wärmequelle berücksichtigt, der Einfluß der sich bildenden Oxidschicht auf die mechanischen Eigenschaften des Hüllrohres wird vernachlässigt (gültig für dünne Oxidschichten). Bei der Ermittlung des Wärmeüberganges Brennstab - Kühlmittel werden Nichtgleichgewichtskorrekturen zur Berücksichtigung von Dampfüberhitzung und Fluidunterkühlung eingeführt.

Teilweise wurden Vergleichsrechnungen mit dem Programm MAIVA des Kurtschatow-Instituts durchgeführt /As87/. MAIVA erlaubt eine 2D und 3D Lösung der Wärmeleitungsgleichung in Zylindergeometrie, die aber hier nicht angewandt wurde. Der Einfluß der Thermomechanik der Hülle auf die Veränderung der Gasspaltweite wird nicht berücksichtigt. Hüllrohrversagen und die Zerstörung der Brennstäbe bei entsprechend hoher Energiefreisetzung werden in beiden Programmen nicht modelliert. Die Neutronenkinetik der Impulsreaktoren wurde bei der Nachrechnung der Experimente nicht

einbezogen, der zeitliche Verlauf der Leistungsfreisetzung wurde als gegeben angenommen.

Die Tabelle 7.3.1 gibt eine Übersicht über die mit FLOCAL nachgerechneten Experimente.

	NSSR-Experimente			Experimente des Kurtschatow-Instituts				
Exp. Nr.	1	2	3	4	5	6	7	8
Energiefreisetzung /cal g ⁻¹ /	190	190	190	207	284	326	360	93
Impulshalbreite /ms/	7	7	7	1500	1150	910	1500	4300
Fluidunterkühlung /K/	10	40	80	80	80	80	80	*)

*) In diesen Fall ist das Kühlmittel Luft, in allen anderen Fällen Wasser.

In den Abb. 7.3.1 und 7.3.2 sind die Resultate von Vergleichsrechnungen zwischen FLOCAL und MAIVA für die Experimente Nr. 4 und 6 dargestellt. Im Versuch Nr.4 wurde übereinstimmend zwischen Rechnung und Experiment kein Eintreten der Wärmeübergangskrise beobachtet. Die Diskrepanzen zwischen den gemessenen und berechneten Temperaturen können sicher darauf zurückgeführt werden, daß in diesem Temperaturbereich die Wärmeabgabe an das Kühlmittel durch die Zirkulation in der Zelle bei Kühlmittelsieden bestimmt wird, dieser Effekt in den Codes aber nicht modelliert wird.

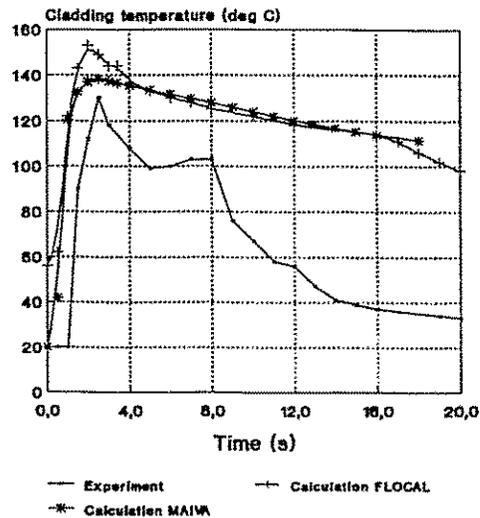


Abb. 7.3.1: Nachrechnung des Experiments Nr.4 mit FLOCAL und MAIVA

Es erwies sich, daß für eine erfolgreiche Nachrechnung die Berücksichtigung der oben erwähnten Nichtgleichgewichts-

korrektur für den nachkritischen Wärmeübergangskoeffizienten und die Leidenfrosttemperatur äußerst signifikant ist. Ohne diese Korrektur wird der Wärmeübergang erheblich unterschätzt und der Temperaturverlauf kann nicht einmal qualitativ nachvollzogen werden. Erst mit einer entsprechenden Korrektur auch im Code MAIVA konnten die dargestellten Ergebnisse erhalten werden.

Abb. 7.3.3 zeigt die Ergebnisse der Nachrechnung von japanischen RIA-Experimenten mit FLOCAL. Diese Experimente bieten aufgrund der Variation der Fluidunterkühlung die Möglichkeit einer gewissen Verifikation des Nichtgleichgewichtsansatzes.

Es muß jedoch eingeschätzt werden, daß die Beschreibung des Wärmeüberganges unter diesen Bedingungen noch unbefriedigend ist, insbesondere die Modellierung des transienten Bereichs zwischen Blasen- und Filmsieden, der hier von relevantem Einfluß ist.

In den NSRR-Experimenten erreichen die Hülltemperaturen trotz niedrigerer Energiefreisetzung den Hochtemperaturbereich. Diese Tatsache läßt sich aus der wesentlich geringeren Impulsbreite erklären. Die gesamte freigesetzte Energie bleibt im ersten Moment praktisch im Brennstoff, während bei einem breiteren Impuls bereits während des Impulses die Wärme teilweise an das Kühlmedium abgeführt wird. Im Hochtemperaturbereich werden weitere Phänomene, und zwar die plastische Deformation der Hüllen und die Zirkonium-Wasser-Reaktion relevant und bestimmen die Temperaturverläufe wesentlich mit. Beide Phänomene werden im Rahmen des relativ einfachen Brennstabmodells von FLOCAL soweit berücksichtigt, wie sie das Wärmeübergangsverhalten beeinflussen. Die auftretende plastische Deformation der Hülle durch den Gasinnendruck führt zu einer Vergrößerung der Gasspaltweite und somit einer Verschlechterung des Wärmeüberganges Brennstoff - Hülle, der eine raschere Abkühlung des Hüllrohres zur Folge hat. Die Metall-Wasser-Reaktion ist vor allem als zusätzliche Wärmequelle relevant. Für die wassergekühlten Experimente konnte insgesamt eine gute qualitative Übereinstimmung zwischen berechneten und gemessenen Hüllrohrtemperaturverläufen erzielt werden, wenn man die Komplexität der relevanten physikalischen Effekte und die Unsicherheiten der Temperaturmessungen (eine Fehlerabschätzung kann nicht angegeben werden) in Betracht zieht.

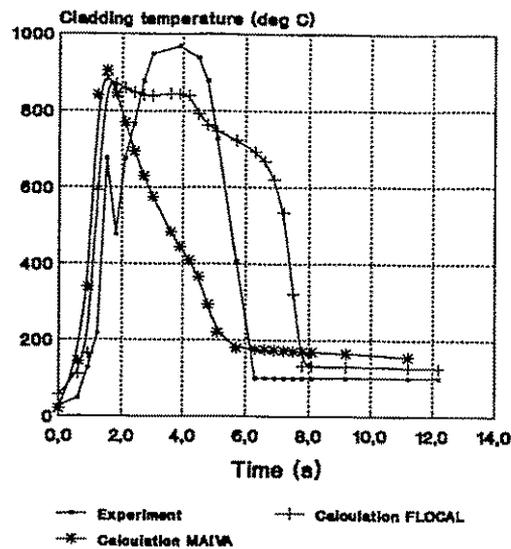


Abb. 7.3.2: Nachrechnung des Experiments Nr. 6 mit FLOCAL und MAIVA

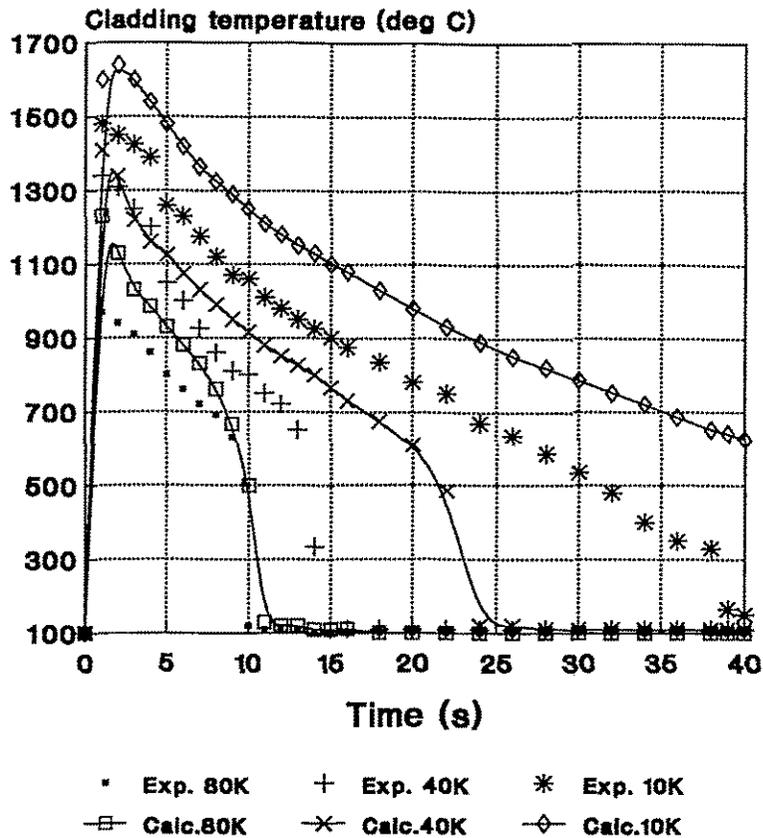
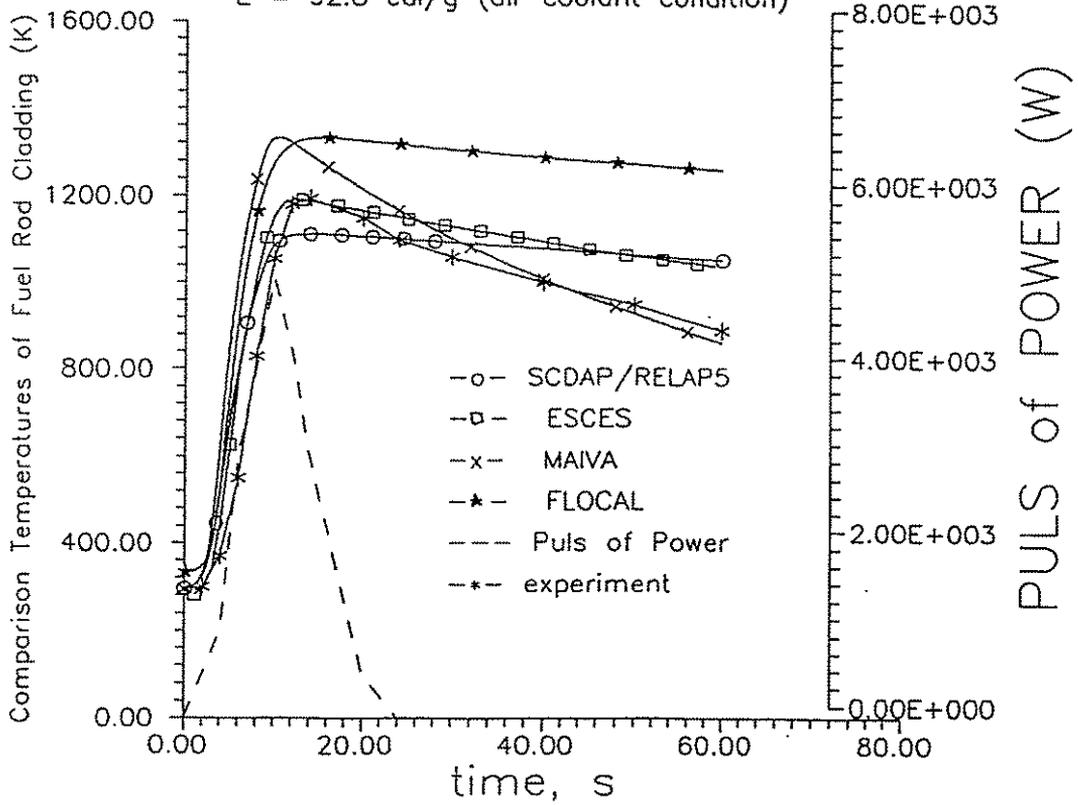


Abb. 7.3.3:
Nachrechnung von RIA-Experimenten am Reaktor NSRR mit FLOCAL

Abb. 7.3.4 schließlich beinhaltet einen Vergleich verschiedener Codes zum luftgekühlten Experiment Nr. 8. Die Rechnungen dazu mit den übrigen Codes (außer FLOCAL) wurden im KI durchgeführt. Für die Nachrechnung dieses Experiments wurde FLOCAL speziell modifiziert, um den Wärmeübergang an Luft berechnen zu können. Die luftgekühlten Experimente sind weniger aussagekräftig, da die mit dem Kühlmittelsieden verbundene Wärmeübergangsproblematik keine Rolle spielt. Der mit FLOCAL berechnete, im Vergleich zu den anderen Codes schwächere zeitliche Abfall der Hülltemperatur ist wahrscheinlich dadurch bedingt, daß Wärmeverluste der Zelle an die Umgebung vernachlässigt wurden, obwohl die Lufttemperatur in der Zelle ca. 400 °C erreicht.

SPARC-1, Oct.1993, RCR, Comparison Results for
 Russian RIA Experiment with Energy Release
 $E = 92.8 \text{ cal/g}$ (air coolant condition)



Aus den Nachrechnungen der wassergekühlten Experimente können folgende Schlußfolgerungen gezogen werden:

- Die Rechnungen stellen einen wesentlichen Beitrag zur Verifikation des Brennstab- und Wärmeübergangsmodells von FLOCAL dar und zeigen, daß der Code für die Berechnung der Thermohydraulik bei reaktivitätsinduzierten Störfällen mit großen Leistungsexkursionen anwendbar ist. Die Ergebnisse der Experimente sind allerdings aufgrund der qualitativ anderen Druck- und Strömungsverhältnisse nicht ohne weiteres auf die Reaktorbedingungen übertragbar.
- Es besteht Bedarf an weiteren RIA-Experimenten, insbesondere auch mit abgebranntem Brennstoff, die für die Codeverifikation geeignet sind.
- Grundsätzlich wird ein weiterer Forschungsbedarf zum transienten Wärmeübergang unter Nichtgleichgewichtsbedingungen gesehen.

Es wurde darauf hingewiesen, daß die Übertragbarkeit der Ergebnisse zu den RIA-Experimenten auf die Bedingungen im Leistungsreaktor problematisch ist. Deshalb wurden als physikalische Sinnfälligkeitstest für FLOCAL in Bezug auf die Modellierung des Brennstabverhaltens Variantenrechnungen für den Testfall einer Leistungsexkursion mit Variation der Peakhöhe F und der Anfangsbedingungen für die Brennstabparameter (Abbrandzustand A) durchgeführt /Ro91/.

Tabelle 7.3.2 beinhaltet eine Zusammenstellung der sicherheitsrelevanten Parameter Energiedeposition im Brennstoff ΔE , maximale Brennstoff- und Hüllrohrtemperaturen $T_{B,max}$ bzw. $T_{H,max}$, der Zeit bis zum vollständigen Wiederbenetzen des Brennstabes t_{WET} aus den Variantenrechnungen für den Testfall. Die Parameter für den Ausgangszustand des mittleren Brennstabes in Abhängigkeit vom Abbrand wurden aus Rechnungen mit dem detaillierten Brennstabprogramm STOFFEL /Rei85/ entnommen. Die Aussagen zum Brennstabverhalten aus den Variantenrechnungen wurden zu Erkenntnissen aus der Literatur in Beziehung gesetzt.

Es ist ersichtlich, daß die Versagensgrenzen bezüglich der Energiedeposition im Brennstoff und die Versagensmechanismen (Abschmelzen bei frischem Brennstoff, mechanisches Hüllrohrversagen bei einer wesentlich niedrigeren Energie) in guter qualitativer Übereinstimmung mit Aussagen aus der Literatur stehen.

Anhand verschiedener Varianten des Testfalles wurde auch eine Reihe von Empfindlichkeitsuntersuchungen bezüglich des Einflusses verschiedener Modelloptionen durchgeführt. Die Ergebnisse können etwa folgendermaßen zusammengefaßt werden:

- Die Modellierung des Gasspaltverhaltens während der Exkursion einschließlich der zumindest groben Berücksichtigung des Hochtemperaturverhaltens der Hülle ist von bedeutender Relevanz für die RIA-Analyse.
- Die Beschreibung des nachkritischen Wärmeüberganges (einschließlich des Wiederbenetzens) ist noch eine Quelle größerer Unsicherheiten. Bei Anwendung verschiedener aus der Literatur bekannter Ansätze für die Nichtgleichgewichtskorrekturen ergaben sich z.B. maximale Unterschiede in den Hüllrohrtemperaturen von ca. 100 K. Die Benutzung verschiedener Korrelationen für die

kritische Wärmestromdichte dagegen wirkt sich bei solchen schnellen Leistungsexkursion kaum aus, da das Verhalten durch den nachkritischen Bereich dominiert wird.

- Für Reaktorbedingungen bei RIA-Störfällen (hoher Kühlmitteldruck, hoher Massenstrom) ergab sich teilweise ein qualitativ anderes Verhalten als bei den RIA-Experimenten (niedriger Kühlmitteldruck, ruhendes Fluid). Die einsetzende plastische Deformation der Hülle im Hochtemperaturbereich z.B. führt bei hohem Außendruck zum Schließen des Gasspaltes und damit im Gegensatz zum Effekt bei den RIA-Experimenten zur Verbesserung der Wärmeabgabe an das Kühlmittel.

Insgesamt kann wohl eingeschätzt werden, daß der FLOCAL in der Lage ist, die für RIA-Störfälle relevanten thermohydraulischen Prozesse einschließlich des Brennstoffabverhaltens adäquat zu modellieren, wenn auch Bedarf an weiteren Modellverbesserungen und Nachrechnungen von RIA-Experimenten für die Codeverifikation besteht.

Tabelle 7.3.2

Variantenuntersuchungen an einer Leistungsexkursion

Parameter des Testfalles	ΔE /calg ⁻¹ /	T _{B,max} /°C/	T _{H,max} /°C/	t _{WET} /s/	Brennstoffverhalten
A=0, F= 30	109	1730	821	15.6	Schließen des Gasspaltes durch plastische Deformation
A=0, F= 75	202	2635	1310	18	beginnende Hüllrohroxidation
A=0, F= 90	233	>2800	1644	>20	Beginn des Brennstoffschmelzens, Oxidschichtdicke 20µm
A=0, F=120	252	>2800	>1850	-	Abschmelzen des Brennstabes
A=20, F=30	123	1942	841	9.8	Kontakt Brennstoff-Hülle
A=25, F=30	122	1920	805	9.0	Erreichen der Streckgrenze des Hüllmaterials

F = Peakhöhe relativ zur Nennleistung

A = Abbrandtiefe in 1000 MWd/t

7.4 Ableitung des weiteren Verifikationsbedarfs für DYN3D und den Komplex DYN3D - ATHLET

Der Stand der Verifikation von DYN3D wurde im Bericht /Gru94/ dargelegt. Eine Übersicht dazu wurde im Abschnitt 7.1 des vorliegenden Berichts gegeben. Eine ausführlichere Darstellung der im Rahmen des Vorhabens durchgeführten Verifikationsarbeiten erfolgte in den Abschnitten 7.2, 7.3 und für die Abbrandberechnung in Abschn. 5.3. Daraus ergibt sich folgendes Bild über den erreichten Stand der Verifikation:

Teilgebiet	Aktivitäten	Stand
stationäre Neutronenflußberechnung	- Benchmarkaufgaben	+
Neutronenkinetik	- Experimente am Reaktor LR-0 (Kernforschungsinstitut Řež bei Prag) - AER-Benchmarkprobleme	+
Thermohydraulik des Reaktorkerns	- Einzeleffekttests - Vergleich mit anderen Codes	+
Brennstabmodell	- RIA-Experimente - Sensitivitätsuntersuchungen	o
Vermischungsmodell (HWT Zittau)	- Messungen an einem luftgekühlten 1:5 Modell - Nachrechnungen exp. Daten aus KKW	-/o
Gesamtmodell DYN3D - stationär (einschl. Abbrandberechnung)	- Vergleiche mit gemessenen Kritikalitätsparametern - AER-Benchmark zur Zyklusberechnung	o
Gesamtmodell DYN3D - instationär	- Konvergenzuntersuchungen - Vergleich mit anderen Codes - ATWS-Störfall im KKW Nord	o
DYN3D - ATHLET: - Verifikation der Kopplung	- Vergleiche zwischen Kopplungsoptionen	o
DYN3D - ATHLET: - Validierung der Physik		

- + ausreichend verifiziert
- o teilweise verifiziert
- Verifikation steht noch aus

Die Arbeiten zur Verifikation der schraffiert gekennzeichneten Bereiche sind im Rahmen eines Vorhabens "Qualifizierung des Kernmodells DYN3D im Komplex mit dem Störfallcode ATHLET als fortgeschrittenes Werkzeug für die Störfallanalyse von WWER-Reaktoren" vorgesehen, das beim BMBF beantragt wurde.

Zur Verifikation der stationären Reaktorberechnung mit DYN3D liegt bereits eine Reihe von Ergebnissen zur Nachrechnung von Inbetriebnahmemessungen an KKW mit WWER-440 vor. Diese Arbeiten sollen durch weitere systematische Nachrechnung von Meßdaten aus KKW zu

- integralen und differentiellen Wirksamkeiten von Regelorganen,
- kritischen Borsäurekonzentrationen,
- Reaktivitätskoeffizienten,
- Leistungsdichteverteilungen

für verschiedene Reaktorzustände (Abbrandtiefe, Leistungszustand), insbesondere für WWER-1000-Reaktoren ergänzt werden.

Die Beschaffung geeigneter Daten für die Verifikation der transienten Kern- bzw. Anlagenberechnung mit DYN3D bzw. dem Programmkomplex DYN3D - ATHLET ist problematisch, da verfügbare Daten aufgrund der mangelhaften Instrumentierung der WWER nicht immer die für die Programmverifikation geforderte Qualität haben. Geeignete experimentelle Daten aus KKW müssen in Zusammenarbeit mit der GRS und unter Nutzung bestehender Kooperationsbeziehungen mit mittel- und osteuropäischen WWER-Betreibern recherchiert, eingeschätzt und aufbereitet werden.

Weitere Möglichkeiten der Validierung ergeben sich aus Programmvergleichen. In Zusammenarbeit zwischen der GRS und dem Kurtschatow-Institut wurde die Ankopplung des neutronenkinetischen Teils des russischen Codes BIPR-8 an ATHLET realisiert (in analoger Weise zur internen Kopplung DYN3D - ATHLET). Vergleichsrechnungen zwischen beiden Programmkomplexen sowohl für Benchmarkprobleme als auch durch gemeinsame Nachrechnung von Transienten und betriebsnahen Störfällen aus KKW mit WWER, die vom Kurtschatow-Institut im Rahmen der WTZ zur Verfügung gestellt werden, bilden einen wesentlichen Schwerpunkt der Validierung. Eine zusätzliche Möglichkeit der Verifikation ist durch Vergleiche zwischen den beiden verschiedenen Varianten der Kopplung DYN3D - ATHLET gegeben. Beide Varianten verfügen über unabhängige Kernmodelle und wurden auf der Basis prinzipiell verschiedener Kopplungsstrategien realisiert. Mit solchen Vergleichsrechnungen wurde im abgeschlossenen Vorhaben begonnen (siehe Abschnitt 4.2). Für die Validierung der Kernberechnung können weiterhin die AER-Benchmarkprobleme zur Reaktordynamik genutzt werden.

Der noch vorhandene Verifikationsbedarf für das Brennstabmodell und das Vermischungsmodell wird im Rahmen des o.g. beantragten Folgevorhabens nicht abgedeckt.

Mit dem in DYN3D integrierten Vermischungsmodell für den Downcomer und das untere Plenum von WWER-440 steht ein Hilfsmittel zur Verfügung, das zumindest

eine Abschätzung des Einflusses der turbulenten Vermischung auf den Verlauf von Transienten mit Störung der Temperatur- bzw. Borsäureverteilung am Kereintritt erlaubt. Die Verifikation anhand von Messungen an einem mit Luft betriebenen Strömungsmodell des WWER-440 im Maßstab 1:5 und erste Vergleiche mit Meßdaten aus KKW im Rahmen der Erstellung des Modells an der Ingenieurhochschulke Zittau /Dr87/ zeigten gute Ergebnisse, die das Modell als deutlichen Fortschritt gegenüber üblichen vereinfachten Vermischungsannahmen ausweisen. Eine umfassende Verifikation des Vermischungsmodells würde

- die Aquisition und Beschaffung von Meßdaten aus KKW (in Ungarn und Tschechien sind entsprechende Messungen durchgeführt worden),
- den Vergleich mit detaillierten mehrdimensionalen Strömungsmodellen,
- gegebenenfalls ergänzende Experimente an einem skalierten Strömungsmodell

erfordern.

8. Zusammenfassung der Ergebnisse

Das Ziel des Vorhabens bestand darin, einen Beitrag zur Vervollkommnung von Berechnungsmethoden für eine realistische Einschätzung der Sicherheit von Kernreaktoren der russischen Bauart WWER zu leisten. Das Vorhaben beinhaltete insbesondere die Ankopplung des Reaktorkernmodells DYN3D/M2, das im Forschungszentrum Rossendorf zur dreidimensionalen Simulation des Kernverhaltens von WWER bei Reaktivitätsstörfällen entwickelt worden ist, an den Störfallcode ATHLET der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS). Es ordnet sich damit auch in den größeren Rahmen der Ankopplung weiterer dreidimensionaler Kernmodelle für hexagonale und quadratische Kerngeometrie an den Code ATHLET ein. Die Ankopplung des Kernmodells DYN3D an ATHLET stellte den Schwerpunkt des Projektes dar. Weitere Einzelzielsetzungen bestanden in:

- der Schaffung einer Option von DYN3D für Abbrandberechnungen,
- Recherchen zum notwendigen Umfang der Ergänzung und Modernisierung der neutronenphysikalischen Datenbasis für das Kernmodell,
- der weiteren Verifikation des Programmes DYN3D,
- dem Funktionstest des gekoppelten Programmkomplexes DYN3D-ATHLET.

Bei der Umsetzung der Programmkopplung wurden zwei grundsätzlich verschiedene Wege realisiert:

- die Einbindung des neutronenkinetischen Teils von DYN3D als Teilmodell "Neutronenkinetik" in ATHLET in Analogie zu vorhandenen Punktkinetik- und 1D-Modellen (interne Kopplung),
- die Ankopplung des kompletten Kernmodells DYN3D, bestehend aus Neutronenkinetik, Thermohydraulik und Brennstabmodell, als nutzerdefinierte GCSM-Routinen (externe Kopplung). Dabei wird der Reaktorkern aus dem ATHLET-Modell "herausgeschnitten" und durch das DYN3D-Modell ersetzt. Die Randbedingungen für Druck, Massenstrom und Enthalpie werden über GCSM-Signale übergeben.

Beide Kopplungsvarianten haben spezifische Vor- und Nachteile, die für künftige Untersuchungen und Anwendungen auszunutzen sind (siehe Abschn. 3.1). Bezüglich der Anwendung besitzt die externe Kopplung den Vorteil, daß eine Vollkernmodellierung mit einfacher 1:1 Zuordnung von Brennstoffkassetten und Kühlkanälen bei gleichzeitiger Nutzung des Vermischungsmodells für das untere Plenum möglich ist. Die Rechenzeit der internen Koppelvariante steigt bei Erhöhung der Anzahl der Kühlkanäle im Reaktorkern sehr stark an. Ein Nachteil der externen Kopplung ist in einigen Einschränkungen des Thermohydraulikmodells von DYN3D gegenüber ATHLET zu sehen (keine Modellierung eines Gemischspiegels, keine globale Strömungsumkehr möglich). Numerische Schwierigkeiten bei der externen Kopplung, die durch das Aufschneiden des ATHLET-Kreislaufs entstanden, konnten durch Zwischenschalten eines Tiefpassfilters für die Druckdifferenz über dem Reaktorkern überwunden werden. Testrechnungen anhand verschiedener Testfälle zeigten, daß das Tiefpaßfilter selbst bei extrem schnellen Druck- und Massenstromänderungen keinen relevanten Einfluß auf die Ergebnisse hat.

Für den Funktionstest des gekoppelten Programmsystems erwiesen sich Vergleichsrechnungen zwischen den beiden Koppeloptionen als äußerst hilfreich. Es wurden ein Kühlmittelverluststörfall mit einem großen Leck und ein Reaktivitätsstörfall mit hypothetischem Auswurf einer Regelgruppe für den WWER-440 für die Testrechnungen ausgewählt. Die Rechnungen erfolgten zunächst mit vereinfachter Kernmodellierung (5 Kühlkanäle) und nach Bereitstellung von ATHLET Mod 1.1 Cycle B mit 1:1 Zuordnung zwischen Brennstoffkassetten und Kühlkanälen (37 Kühlkanäle für einen 30°-Sektor des Kerns). In beiden Fällen wurde das Versagen der Reaktorschnellabschaltung angenommen.

Im Ergebnis der Testrechnungen wurde eine gute Übereinstimmung zwischen den beiden Kopplungsvarianten erzielt. Verbleibende Differenzen konnten durch Modellunterschiede zwischen DYN3D und ATHLET erklärt werden. Aufgrund unterschiedlicher Ansätze für den Phasenschlupf und unterschiedlicher Behandlung des unterkühlten Siedens im Reaktorkern ergeben sich Differenzen im Volumendampfgehalt, die sich über die Rückkopplung auf den Verlauf der Reaktorleistung auswirken. Als Plausibilitätstest wurde jeweils mit reinen ATHLET-Rechnungen unter Verwendung des Punktkinetikmodells verglichen. Da bei den Testfällen keine stark ausgeprägten ortsabhängigen Effekte in den Neutronenflußverteilungen auftraten, gab es keine gravierenden Unterschiede zwischen Punktkinetik und dreidimensionaler Neutronenkinetik. Die Fälle wurden speziell unter diesem Gesichtspunkt ausgewählt, um einen Test auf physikalische Sinnfälligkeit zu ermöglichen. Die Aussage ist deshalb keinesfalls verallgemeinerbar.

Im Rahmen des Vorhabens wurde eine DYN3D-Option für Abbrandberechnung entwickelt und erprobt. Bei Vorgabe einer Anfangsverteilung für die Abbrandtiefe, der Leistungs- und Operationsgeschichte des Reaktors (Stellung der Regelorgane) und des Umladeschemas nach Zyklusende kann eine Berechnung des Kernzustandes für einen bestimmten Zeitpunkt eines Brennstoffzyklus, gegebenenfalls über mehrere Zyklen hinweg, durchgeführt werden. Dafür wird automatisiert eine Reihe von stationären Rechnungen mit DYN3D organisiert, wobei die Abbrandtiefe aufsummiert wird und Materialverschiebungen berücksichtigt werden. Die makroskopischen Wirkungsquerschnitte werden für jeden Schritt aus einer vorhandenen Datenbibliothek generiert. Das Ziel besteht in erster Linie in der Berechnung des stationären Reaktorzustandes als Anfangsbedingung für anschließende Störfallanalysen.

Gegenwärtig wird die makroskopische Querschnittsdatenbibliothek MAGRU der KAB AG Berlin als Datenbasis für DYN3D benutzt. Die Bibliothek weist einen guten Stand der Verifikation auf, ist aber gegenwärtig nur eingeschränkt verfügbar. Es wurde eine Recherche zu Bibliotheken makroskopischer Wirkungsquerschnitte für WWER-Reaktoren, die als mögliche Ergänzung der neutronenphysikalischen Datenbasis von DYN3D dienen können, in Form eines Technischen Fachberichts /Mi94/ erarbeitet. Im Bericht wird eine Übersicht über bekannte Datenbibliotheken für WWER hinsichtlich der Primärdatenbasis, Berechnungsmethoden und Gültigkeitsbereiche gegeben. Zur Beurteilung der Qualität der Daten wurden Vergleiche zwischen gemessenen und berechneten Reaktorparametern zusammengestellt. Die vorhandenen Informationen ergeben keine wesentlichen Qualitätsunterschiede zwischen den einzelnen Daten-

bibliotheken. Aufgrund der guten Verfügbarkeit in vielen WWER-Betreiberländern und von im FZR erbrachten Vorleistungen zur Verarbeitung des Bibliotheksformats in DYN3D werden auf der Basis des russischen Zellberechnungs-Codes KASSETA erstellte Bibliotheken für die Erweiterung der Datenbasis von DYN3D empfohlen.

Die Arbeiten zur Verifikation der Neutronenkinetik von DYN3D durch Nachrechnung von Benchmarkproblemen im Rahmen der internationalen Vereinigung Atomic Energy Research (AER) wurden fortgesetzt. Die Auswertung des zweiten, durch das FZR definierten kinetischen Benchmarkproblems mit einfacher Rückkopplung, an dessen Lösung sich IVO und VTT Finnland (Code HEXTRAN), KFKI Budapest (Code KIKO3D), Kurtschatow-Institut Moskau (BIPR-8) und FZR (DYN3D) beteiligten, wurde abgeschlossen. Die Übereinstimmung zwischen den Codes ist gut, Unterschiede im Zeitverhalten ergeben sich in erster Linie aus Differenzen von 3-4% in den statischen Reaktivitätswerten, also aus der Genauigkeit der stationären Rechnung.

Zur Verifikation der neuentwickelten Abbrandoption von DYN3D wurde ein Benchmarkproblem des AER gerechnet, das die Modellierung der Abbrandgeschichte und die Ermittlung von Kritikalitätsparametern (Borsäurekonzentration, Regelstabwirksamkeiten, Reaktivitätskoeffizienten) vom Ende des 3. bis zum Ende des 7. Beladezyklus für das KKW Paks (Ungarn) beinhaltet. Die geforderte Verfolgung der Abbrandgeschichte über mehrere Zyklen gestaltete die Aufgabe hinreichend kompliziert. In der Konsequenz ergab sich eine relativ große Streubreite zwischen den Ergebnissen der acht verschiedenen beteiligten Codes. Die DYN3D-Ergebnisse liegen innerhalb der Streubreite. Mit DYN3D wurde eine sehr gute Übereinstimmung mit Meßwerten aus dem KKW Paks zur differentiellen Stabwirksamkeit bei heißer Nulllast am Beginn des 7. Zyklus erzielt. Dabei erwies sich die korrekte Modellierung des Verbindungsstücks zwischen Absorberteil und Brennstofffolger der WWER-440-Regelorgane als wesentlich.

Das Thermohydraulikmodell FLOCAL des Codes DYN3D wurde unter spezieller Berücksichtigung der Bedingungen bei reaktivitätsinduzierten Störfällen (RIA) entwickelt (große und schnelle Leistungsänderungen, detailliertes Brennstabmodell, große Abweichungen vom thermodynamischen Gleichgewicht beim Wärmeübergang). Einen Schwerpunkt der Verifikation stellt deshalb die Nachrechnung von Experimenten an Impulsreaktoren zum Brennstabverhalten bei RIA dar. Bei diesen Experimenten wurden verkürzte Proben von Brennstäben, die sich in einer Kapsel mit ruhendem Kühlmittel befinden, durch einen nuklearen Leistungsimpuls aufgeheizt. Neben aus der Literatur bekannten Experimenten am Nuclear Safety Research Reactor des JAERI (Japan) konnten im Rahmen eines über das Vorhaben finanzierten Arbeitsaufenthaltes eines Mitarbeiters aus dem Kurtschatow-Institut Moskau experimentelle Daten zum Verhalten von WWER-Brennstabproben unter RIA-Bedingungen zugänglich gemacht werden, die am russischen Forschungsreaktor IGR erhalten wurden. Die Ergebnisse wurden teilweise mit denen des russischen Programmes MAIVA verglichen.

Zum Stand der Verifikation von DYN3D wurde ein Technischer Fachbericht zum Vorhaben erarbeitet /Gru94/. Verifikationsbedarf besteht noch für das Gesamtmodell von DYN3D, also für das Zusammenwirken von Neutronenflußberechnung, Thermohydraulik und Querschnittsdatengenerierung und vor allem für Reaktoren vom Typ

WWER-1000. Zur Deckung dieses Verifikationsbedarfs ist die Nachrechnung von weiteren Inbetriebnahmeexperimenten an WWER-Reaktoren und von Transienten an KKW bei geeigneter Aufbereitung der Meßdaten sowie die Fortführung der Beteiligung an Benchmarkproblemen mit Einbeziehung der Thermohydraulik vorgesehen.

Schwerpunkt künftiger Arbeiten ist vor allem die Verifikation des gekoppelten Programmes DYN3D - ATHLET, um das entwickelte Tool für die fortgeschrittene Sicherheitsanalyse von WWER-Reaktoren nutzbar zu machen. Neben der Nachrechnung von geeigneten Meßdaten aus KKW sind hier insbesondere Programmvergleiche (Nutzung der Programmkopplung BIPR-8/ATHLET) heranzuziehen. Die Verifikation des Programmpakets bildet den Schwerpunkt eines beantragten Folgevorhabens zur Kopplung DYN3D - ATHLET. Weitere Arbeitsinhalte des Folgevorhabens sind:

- die anwendungsorientierte Weiterentwicklung von DYN3D (verbesserte Beschreibung von Regelstabbewegungen, Berücksichtigung von Hardware-Actions aus ATHLET, Einbau der Nachzerfallswärmeberechnung, Schaffung einer Option zur Xenon-Berechnung),
- Voruntersuchungen zur Parallelisierung des numerischen Algorithmus von DYN3D,
- Durchführung ausgewählter Störfallanalysen (Borsäurestörungen, Frischdampflecks),

sowie Beiträge zur Verifikation von ATHLET für die Modellierung des Naturumlaufverhaltens von WWER-Reaktoren bei Restwärmeabfuhr (Thermohydraulik ohne Neutronenkinetik).

Weiterer Entwicklungs- und Verifikationsbedarf besteht auch für die Beschreibung der Kühlmittelvermischung im Downcomer und unteren Plenum. Im Folgevorhaben ist eine Erweiterung des derzeit nutzbaren Vermischungsmodells auf den Fall unterschiedlicher Schleifendurchsätze vorgesehen.

Literatur

Technische Fachberichte zum Vorhaben

- /Gru94/ Grundmann U., Rohde U.: "Verifikation des 3-dimensionalen Kernmodells DYN3D/M2", Report FZR-47, Rossendorf, Juni 1994
- /Mi94/ Mittag S.: "Recherche zu Gruppendatenbibliotheken für die Anwendung des Programmes DYN3D auf Reaktoren vom Typ WWER", Report FZR-46, Rossendorf, Juni 1994

Sonstige Literatur

- /Agt90/ Agthe G., Kretzschmar H.-J.: "Zur automatisierten Bereitstellung neutronenphysikalischer Weniggruppenparameter für die makroskopische Berechnung von Spaltzonen thermischer Reaktoren", Kernenergie 33 (1990), Teil I: Heft 4, S.165, Teil II: Heft 5, S. 214
- /Ath93/ ATHLET Mod 1.1 - Cycle A Input Data Description, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit, Garching, Februar 1993
- /Bec94/ Becker R., Schulz G., Thomas S.: "Accuracy Assessment of the 3D Nodal Code TRAPEZ", 4th Symposium of AER, 10.-14.10.1994, Sozopol (Bulgarien), Proceedings S. 103
- /As87/ Asmolov V.G. et al.: "Rechnerische und experimentelle Untersuchung des Verhaltens eines einzelnen Brennelements bei großen Leistungsänderungen", Kernenergie 30 (1987), S. 299-304
- /Dr87/ Dräger, P.: "Makroskopische Kühlmittelvermischung in Druckwasserreaktoren", Dissertation, Ingenieurhochschule Zittau, 1987
- /Fom93/ Fomitchenko P., Lizorkin M., Gilvanov L., Austregesilo H., Langenbuch S.: "Coupling of the thermal-hydraulic system code ATHLET and the 3D-neutronics model BIPR8", Interim report, RRI Moskau, GRS Garching, 1993
- /Gru89/ Grundmann U., Rohde U.: "DYN3D/M2 - a Code for the Calculation of Reactivity Transients in Cores with Hexagonal Geometry", IAEA Technical Committee Meeting on Reactivity Initiated Accidents, Wien 1989 Report ZfK-690, Rossendorf 1989
Nachdruck Bericht FZR 93 - 01, Rossendorf 1993
- /Gru91/ Grundmann U., Hádek J.: "Calculations of Neutron Kinetics Experiments on the LR-0 Reactor with the Three-Dimensional Code DYN3D/M1", Kernenergie 34 (1991) S. 12-20

- /Gru93/ Grundmann U., Rohde U.: "3D-Simulation of Reactivity Transients in Cores of VVER-Reactors", Proc. SCS Simulation Multiconference on the International Simulators Conference, Arlington(USA), 29.03.-01.04.1993
- /Gru93a/ Grundmann U., Rohde U.: "Definition of the Second Kinetic Benchmark of AER", 3rd Symposium of AER, 27.09.-1.10.1993, Piešťany (Slowakei), Proceedings S. 105
- /Gru93b/ Grundmann U., Rohde U.: "The code DYN3D/M2 for the Calculation of Reactivity Initiated Transients in Light Water Reactors with Hexagonal Fuel Elements - Code Manual and Input Data Description", Report FZR 93-02, 5th revised Edition, Rossendorf, Dezember 1994
- /Gru94/ Grundmann U., Rohde U.: "Verifikation des 3-dimensionalen Kernmodells DYN3D/M2", Technischer Fachbericht zum Vorhaben 150 0925, Report FZR-47, Rossendorf, Juni 1994
- /Gru94a/ Grundmann U.: "Results of Second Kinetic Benchmark", 4th Symposium of AER, 10.10.-14.10.1994, Sozopol (Bulgarien), Proceedings S. 397
- /Ju94/ Judd J.L. et al.: "A Three-dimensional Nodal Neutron Kinetics Capability for RELAP5", ANS Topical Meeting on Advances in Reactor Physics, Knoxville (Tennessee), 11.-15. April 1994, Proc. Vol. 2, p.269
- /Kni95/ Knight M. P., Brohan P., Finnemann H., Hüsken J., Grundmann U., Rohde U.: "Comparison of Rod-Ejection Transient Calculations in Hexagonal-Z-Geometry" (in Vorbereitung)
- /Kn94/ Knoll A., Müller R.: "Coupling RELAP5 and PANBOX2: A Three-dimensional Space-Time Neutron Kinetics Application with RELAP5", Internat. Conference "New Trends in Nuclear system Thermohydraulics", Pisa, 30.05.-2.06.1994, Proc. p. 255
- /Kop93/ Kopp M., Krýsl V., Mikoláš P.: "Solution of AER Benchmark Problem on Control Rod Worth of Paks VVER-440 Reactor", 3rd Symposium of AER, 27.9.-1.10.1993, Piešťany (Slowakei), Proceedings S. 265
- /Kor92/ Korpás L., Nemes I., Szécsényi Zs.: "AER Benchmark Problem for Calculation of Control Rod Worth of VVER-440 Reactor", Working Group B Meeting of AER, May 1992, Piešťany (Slowakei)
- /Kor92a/ Korpás L., Nemes I., Gyolcsos Cs.: " Solution of AER Benchmark Problem for Calculation of Control Rod Worth of VVER-440 Reactor", 2nd Symposium of AER, 21.9.-26.9.1992, Paks (Ungarn), Proceedings S. 293
- /Kor93/ Korpás L., Szécsényi Zs.: "Solution of AER Benchmark Problem on Control Rod Worth of Paks VVER-440 Reactor", 3rd Symposium of AER, 27.9.-1.10.1993, Piešťany (Slowakei), Proceedings S. 179

- /Kor94/ Korpás L.: Private Communication, Oktober 1994
- /Kor94a/ Korpás L.: "Summary of AER Benchmark Problem Concerning Control Rod Worth of VVER-440 Reactor", 4th Symposium of AER, 10.-14.10.1994, Sozopol (Bulgarien), Proceedings S. 463
- /Kuu93/ Kuusisto J., Antila M., Siltanen P.: "Solution of AER Benchmark Problem on Control Rod Worth of Paks VVER-440 Reactor", 3rd Symposium of AER, 27.9.-1.10.1993, Piešťany (Slowakei), Proceedings S. 163
- /Lan88/ Langenbuch S.: "Vorläufige Beschreibung der Transgenerationen zur Erstellung einer Wirkungsquerschnittsbibliothek und deren Auswertung mit dem Programm WQTRANS", GRS-Bericht, Garching 1988
- /Mi94/ Mittag S.: "Recherche zu Gruppendatenbibliotheken für die Anwendung des Programmes DYN3D auf Reaktoren vom Typ WWER", Technischer Fachbericht zum Vorhaben 150 0925, Report FZR-46, Rossendorf, Juni 1994
- /Mi94a/ Mittag, S.: "Solution of AER Benchmark Problem on Control Rod Worth of Paks VVER-440 by the code DYN3D", 4th Symposium of AER, 10.-14.10.1994, Sozopol (Bulgarien), Proceedings S. 443
- /Ray94/ Raymond P., Caruge D., Paik H.J.: "Coupling of 3D Core Computational Codes and a Reactor Simulation Software for the Computation of PWR Reactivity Accidents Induced by Thermal-Hydraulic Transients", ANS Topical Meeting on Advances in Reactor Physics, Knoxville (Tennessee), 11.-15. April 1994, Proc. Vol. 2, p. 122
- /Rei85/ Reinfried, D.: "Zur mathematischen Modellierung des Bestrahlungsverhaltens von Druckwasserreaktorbrennstäben", Dissertation, Rossendorf, 1985
- /Ro91/ Rohde U.: "Modelling of Fuel Rod Behaviour and Heat Transfer in the Code FLOCAL for Reactivity Accident Analysis of Reactor Cores", 1st Baltic Heat Transfer Conference, Göteborg August 1991, publiziert in: Transport Processes in Engineering, 2: Recent Advances in Heat Transfer, Elsevier Publ., Amsterdam, 1992
- /Ryp90/ Rypar V., Racek J., Fähmann K.H., Grundmann U.: "Neutron Kinetics Investigations at the LR-0 Zero Power Reactor", Nucl. Sc. Engng. **105** (1990) 218
- /Sar94/ Šarvaic I., Minarčín M., Rohár M.: "Calculation and Measurement of Spatial Reactivity Effects in VVER-440 Reactors", 4th Symposium of AER, 10.-14.10.1994, Sozopol (Bulgarien), Proceedings S. 713

- /Ste93/ Štepanovič N., Rohár M.: "Solution of AER Benchmark Problem for Calculation of Control Rod Worth of VVER-440 Reactor", Working Group B Meeting of AER, 10.5.-14.5.1993, Pilsen (Tschechische Republik)
- /Tho93/ Thomas S., Rebohm H.: "Solution of AER Benchmark Problem on VVER Control Rod Worth", 3rd Symposium of AER, 27.9.-1.10.1993, Piešťany (Slowakei), Proceedings S. 333
- /Tin93a/ Tinka I.: "VVER Diffusion Data Libraries Prepared by the KASSETA Code", 3rd Symposium of AER, 27.9.-1.10.1993, Piešťany (Slowakei), Proceedings S. 42
- /Tin93/ Tinka I.: "Critical Start-up Parameters of the WWER-440 Core Calculated by DYN3D Code", 3rd Symposium of AER, 27.09.-1.10.1993, Piešťany (Slowakei), Proceedings S. 105

Anhang A

Änderungen in den Eingabedatensätzen für die externe Kopplung

Entsprechend der Philosophie der externen Kopplung sind nur geringfügige Änderungen der Eingabedaten gegenüber den Rechnungen mit den einzelnen Programmen erforderlich. Die Strukturen der Eingabedatensätze (siehe /ATH93/ und /Gru93b/) bleiben dabei erhalten.

1. Erforderliche Änderungen in einem ATHLET-Datensatz, der eine Reaktor-anlage beschreibt

Da bei der externen Kopplung das gesamte Core von DYN3D statt von ATHLET modelliert wird, müssen alle das Core betreffende Objekte aus dem Datensatz entfernt werden. Stattdessen müssen die Schnittstellen des Kühlkreislaufes zum Core durch FILLS modelliert und die Datenübergabe organisiert werden. Die Anzahl der FILLS hängt von der jeweils gewünschten Modellierung der Vermischung im unteren Plenum ab. Im einfachsten Fall, der homogenen Vermischung im unteren Plenum, genügt jeweils ein FILL am Coreein- und am Coreaustritt. Will man das in DYN3D enthaltene Vermischungsmodell für das untere Plenum nutzen, können bis zu 6 Schleifen getrennt an den Coreeintritt herangeführt werden und die jeweiligen Parameter über bis zu 6 einzelne FILLS übergeben werden. Bei der Kreislauf- und Schnittstellenmodellierung ist auf Übereinstimmung der Differenz der geodätischen Höhen der FILLS und der im DYN3D-Eingangsdatensatz definierten Höhe des Cores (einschließlich Fuß- und Kopf der Brennelemente) zu achten.

Der Datenaustausch wird über das GCSM-Modul realisiert. Am Ende des Eingabeblocks für das GCSM-Modul können spezifische Eingangsdaten für die GCSM-Library Modelle angegeben werden. Dort sind unter dem Controlword "DYN3D" die Zeitkonstante für den Tiefpaßfilter (TAU, empfohlen 2.0 s), die Anzahl der Schleifen (NROFLOOPS), der Druck am Coreein- (PRESIN) und -austritt (PRESOUT), sowie die einzelnen Schleifenaustrittsenthalpien (ENTHIN(I)), die Borsäurekonzentrationen (BORIN(I)) und die relativen Schleifenmassenströme (MASSFL(I)), müssen nicht normiert sein) anzugeben. Diese Werte sollten als Prozeßsignale am Coreein- bzw. -austritt definiert und ggf. in einem GCSM-Block mit Anfangswerten belegt werden (siehe /ATH93/). Sie bilden die Randbedingungen für die DYN3D-Rechnung. Im folgenden wird ein Beispiel für den Eingabeblock für des GCSM-Library Modell DYN3D im Fall einer Einfach- und einer Fünffachschleife die einzeln bis an den Coreeintritt geführt werden, um das Vermischungsmodell nutzen zu können, gegeben:

```
@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@
C----- DYN3D
@
@   TAU       NROFLOOPS
    2.0       6
@   PRESIN   PRESOUT
    PIN       POUT
@   ENTHIN(I) BORIN(I) MASSFL(I)
```

ENT1	BOR1	GJLOOP1
ENT5	BOR5	GJLOOP5

@.

Die Datenübergabe von DYN3D an ATHLET erfolgt in einem GCSM-Block durch Definition der GCSM-Signale für die mittleren Massenströme am Coreein- und -austritt sowie der Enthalpie am Coreaustritt. Dabei wird der Controller LIBRARY mit den Optionen IOPT=-20 (Austrittsenthalpie), IOPT=-21 (mittlere Massenstrom am Coreeintritt) und IOPT=-22 (Massenstrom am Coreeintritt) genutzt. Über die Option IOPT=-23 kann die nukleare Reaktorleistung an den GCSM-Modul übergeben werden, um z.B. Maßnahmen der Reaktorsteuerung oder Schnellabschaltungen im GCSM-Modul simulieren zu können. Bei der Definition dieser GCSM-Signale ist darauf zu achten, daß die Option IOPT=-20 immer zuerst aufgerufen wird. Diese Werte dienen dann als Randbedingungen für ATHLET und müssen für die FILLS, welche die Schnittstelle beschreiben, angegeben werden. Der Parameter ICB im Kopf der GCSM-Blocks muß 1 gesetzt werden (Tandem-Kopplung). Das folgende Beispiel zeigt die Definition der entsprechenden Signale:

```

@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@
---- CORCOPP @ KOPPLUNG
@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@@
@
@ IPRI   ICB   INTEK  DTMAX
   0     1     1     -1.0
@
S---- OUTLET ENTHALPY
      ENTHOUT LIBRARY - - - -
      -20     1.0    0.  0.  0.  0.
S---- OUTLET MASSFLOW
      FLOWOUT LIBRARY - - - -
      -21     1.0    0.  0.  0.  0.
S---- INLET MASSFLOW
      FLOWIN  LIBRARY - - - -
      -22     1.0    0.  0.  0.  0.
S---- REACTOR POWER
      POWER  LIBRARY - - - -
      -23     1.0    0.  0.  0.  0.
@

```

2. Erforderliche Änderungen in den DYN3D-Eingabedatensätzen für die Thermohydraulik und die Neutronenkinetik

Da einige Randbedingungen nun vom ATHLET-Anlagenmodell vorgegeben werden, entfallen diese in den Eingabedaten. Im einzelnen betrifft das folgende Parameter (vgl. /Gru93b/):

a) im Thermohydraulikdatensatz:

- der Steuerparameter NST3,
- der Druck am Coreaustritt (P),
- die Druckdifferenz über das Core (DP),
- die Parameter (TFR0) bzw. (FR) für vorgegebene Coremassenströme,
- die Eintrittstemperaturen für die Kühlkanäle (HME),
- die Eintrittsborsäurekonzentrationen für die Kühlkanäle (CBOR),
- die Anzahl der Schleifen (NSL),
- die Schleifenparameter Massenstromanteil (RMS), Schleifentemperatur (TS) und Schleifenborsäurekonzentration (BS),

b) im Neutronenkinetikdatensatz:

- die Endzeit der transienten Rechnung (TE),
- alle mit der Vorgabe thermohydraulischer Störungen zusammenhängenden Parameter (MDAT, MSL, TP, TEDAT, PDAT, DDAT, BDAT).

Weiterhin wurde der Parameter TCTH im Neutronenkinetikdatensatz durch die Parameter TCTHA, TCTHE und DTTCTH ersetzt. Mit TCTH konnte eine Zeit vorgegeben werden, bis zu der sich die thermohydraulische Zeitschrittweite nicht erhöht. Da der Transientenbeginn bei dem gekoppelten Programm im allgemeinen nicht mehr bei $T=0$ liegt, kann nun eine Zeitschrittweitenbegrenzung für einen beliebigen Zeitbereich vorgegeben werden. Die Parameter haben dabei folgende Bedeutung:

TCTHA - Anfangszeit für die Begrenzung der maximalen Zeitschrittweite auf DTTCTH

TCTHE - Endzeit für die Begrenzung der maximalen Zeitschrittweite auf DTTCTH

DTTCTH - maximale Zeitschrittweite im Zeitraum TCTHA bis TCTHE.

Anhang B

Neutron Kinetics Data (CW NEUKIN3D)

Attention! The data have to be written on the first 72 position of records!

Data with a new record number have to begin at a new row.

Additional records for description of the data must begin with '@' character!

Record	Item	Comment
1	KW	Keyword STATIC (K---- STATIC)
2	STR	Text string: Any characters for problem identification
3		Pseudo keyword WQLIBRARY (---- WQLIBRARY)
4	ILIB	Identifier for WQ-Library ILIB = 0: cross section library is contained in the ATHLET input data ILIB = 1: external WQ-Library
5	SCON	Text string: CONTROL OF CALCULATION
6	ITIM	Dummy integer
	IOINP	IOINP = 1: Output of input data without coefficients of parametrization of macroscopic cross sections IOINP > 1: Output of all input data IOINP = 0: Input data are not printed
	IH1	IH1 > 0: If the user has insight into details of code, some arrays will be printed to search errors of the input data IH1 = 0: No auxiliary output
	IH2	IH2 > 0: The table of outer iterations is printed in order to illustrate the convergence IH2 = 0: Output of the last iteration IH2 > 1: Listing of actual cross section of each node
	IH3	IH3 > 0: The addresses of partial currents at the outer boundary of the sector are printed IH3 = 0: No output of addresses

Record	Item	Comment
	IH4	At the end of the iterations several distributions are printed IH4 > 0: Output of neutron fluxes (normalized to a max. value of 9999.9) IH4 > 1, IH4 ≠ 4: The incoming partial currents are printed IH4 = 3 or IH4 > 0: Outgoing partial currents are printed IH4 = 5 Output of normalized power distributions in DYN3D nodes to the ATHLET-Plotfile
	IH5	IH5 > 0: The power peaking factors all nodes and fuel elements are printed
7	SDI	Text string: DIMENSIONS OF ARRAYS
8	ISYM	ISYM can assume the values 30, 60, 120, 181, 182 and 360 with reference to 30°-reflectional 60- and 120°-rotational, 2 types 180°-reflectional symmetry (vertical and horizontal reflection respectively) and whole core(see page B 14)
	NJMAX	Max. number of horizontal rows of the sector
	NIMAX	Max. number of columns of sector with references to 60° coordinate system $NIMAX = \max_J IRIGHT(J) - \min_J ILEFT(J) + 1$ (J=JMIN,...,JMAX)
	NCAS	Number of hexagonal assemblies of the sector
	NZ	Number of slices in z-direction

Record	Item	Comment
	NOBOU	Number of outer faces of the hexagonal assemblies in radial direction
	NOSYMS	Number of faces of the hexagonal assemblies at the symmetry boundaries of the sector
	NOMAS	Number of different cross section sets
	NOBT	Number of different boundary conditions at the outer boundaries
9	SR	Text string: MATERIAL MAP
10	JMIN	J-co-ordinate of the lowest row of the sector
	JMAX	J-co-ordinate of uppermost row
11	ILEFT(J)	I-co-ordinates of the left hexagons (J=JMIN,...,JMAX)
12	IRIGHT(J)	I-co-ordinates of the right hexagons (J=JMIN,...,JMAX)
	The co-ordinates of the central assembly are (I,J)=(0,0)!	
13	INDC	<p>INDC = -1: The identifiers of a given slice are read</p> <p>INDC = 0: The identifiers IMAT(I) describing the set of neutron group constants for the given slice are the same as for the previous slice</p> <p>INDC=NC, $1 \leq NC \leq NCAS$</p> <p>NC identifiers of the given slice are different from those of the previous slice</p>

Record	Item	Comment
14	IMAT(I,J)	IF INDC = -1, then IMAT(I) in the order I=ILEFT(J),...,IRIGHT(J). A new record of type 12 for each J (J=JMIN,...,JMAX). IMAT(I) ≤ 10000
14	I J KMAT	IF INDC > 0, then NC=INDC records of type 14 with the horizontal co-ordinate I, the vertical co-ordinate J and the identifier of the cross section set KMAT are read
<p>The records of type 13 followed by the records of type 14 with reference to INDC are repeated NZ-times with begin at the lower end of reactor.</p>		
15	SV	Text string: GEOMETRICAL PARAMETERS
16	SW	distance between opposite faces of the hexagons in cm
17	AN(IZ)	thickness of slices in cm for IZ=1,...,NZ
18	SIT	Text string: CONTROL OF ITERATION
19	EPSBES	Truncation error of Bessel functions (recommended value 0.00002)
	EPSK	Truncation error of eigenvalue k_{eff} (recommended value 0.000001)
	EPSF	Truncation error of fission source (recommended value 0.000002)
	EPSMAT	dummy real variable
	EPSDS	dummy real variable
	EPS12	dummy real variable

Record	Item	Comment
20	EKEFF	Initial value of k_{eff}
21	ITOUMA	Maximal number of outer iterations
	ITINMA	Number of inner iterations
	ITSCH	Order of Chebyshev-polynom used for acceleration (recommended values $3 \leq \text{ITSCH} \leq 7$). No acceleration in the case $\text{ITSCH} = 0$ (the option is suitable, if the run is interrupted during the neutron flux calculation)
22	IOPT	Order of the expansion of the nodal neutron fluxes in z-direction (IOPT = 2 or 4)
23	S	Text string: BOUNDARY RELATIONS
24	ALF 11 ALF 21 ALF 22	Albedo coefficients α_{11} , α_{21} , α_{22} NOBT records of type 22
25	IND	If NOBT > 0, for each slice beginning at the lower end of reactor the identifiers of boundary conditions for each outer boundary of the hexagonal plane are entered, i. e. IND = -1 Input of the identifiers IND = 0 The same identifiers as the previous slice are used
26	IBR(I)	If NOBT > 1 and IND = -1, the identifiers for all outer boundaries of hexagons are entered. The order of boundaries can be seen in Appendix. ($1 \leq \text{IBR}(I) \leq \text{NOBT}$, $1 \leq I \leq \text{NOBOU}$)

Record	Item	Comment
27	IREFU(I)	If NOBT > 1, the identifiers of boundary conditions at the lower end of reactor are given in the order of assemblies. The fuel elements in a hexagonal plane are numbered in rows from left to right beginning from lowest row. (1 ≤ IREFU(I) ≤ NOBT, I=1,...,NCAS)
28	IREFO(I)	Similar for the upper end of reactor
29	SR	Text string: MACROSCOPIC CROSS SECTIONS
30	DF(I) SIR(I) FNF(I) SFF(I) DT(I) SIA(I) FNT(I) SFT(I) TF(I)	If ILIB = 0, input of the macroscopic cross sections in the order D_1 (cm), Σ_r (cm^{-1}), $\nu\Sigma_{f1}$ (cm^{-1}), Σ_{f1} (MWs $10^{-13}/\text{cm}$), D_2 (cm), Σ_a , $\nu\Sigma_{f2}$ (cm^{-1}), Σ_{f2} (MWs $10^{-13}/\text{cm}$), Σ_s (cm^{-1}) These cross sections are transferred for all NOMAS sets. The units of fission cross sections are important for calculation of equilibrium Xe and Sm concentration and absolute neutron fluxes.
30	IDENT(I)	If ILIB > 0, the NOMAS sets are contained in the file LUNR1 = 9 and the array IDENT(I) are the numbers of the sets on the file LUNR1 used for the calculation. (I=1,...,NOMAS)
31	SPOW	Text string: TOTAL POWER
32	TOTPOW	Total thermal power of the reactor in MW
33	SESS	Text string: DATA FOR FEEDBACK
34	IBOR	IBOR=0 no feedback coefficients for boron IBOR≥1 feedback coefficients for boron
	ITPOIS	ITPOIS = 0 no poison Xe and Sm ITPOIS > 0 Xe and Sm equilibrium distribution of the static state are considered.

Record	Item	Comment
35	SFCO	Text string: FEEDBACK COEFFICIENTS
The following records 36-42 are entered only, if ILIB = 0		
36	RTMO(I)	Coefficients describing the dependence of cross sections from the coolant temperature for the group constants of the 1 st set (same order as the group constants itself (I=1,...,9))
37	RTM1(I)	linear coefficients of the dependence on the coolant density (same order as RTMO).
38	RTM2(I)	quadratic coefficients of the dependence on the coolant density (same order as RTMO)
39	RTB(I)	coefficients of the dependence on the fuel temperature (same order as RTMO)
40	RCB1(I)	If IBOR > 0, input of the linear coefficients of dependence on the boron acid concentration (same order as RTMO)
41	RCB2(I)	If IBOR > 0, input of the quadratic coefficients of dependence on the boron acid concentration (same order as RTMO)
After entering the records 36-41 for the 1 st set of group constants the input is repeated for the others of the NOMAS group sets.		
42	TMO	Reference temperature of the moderator feedback in °C
	DENSO	Reference density of the moderator feedback in kg/m ³
	CBO	If IBOR > 0 input of the reference value of boron acid concentration in g/kg H ₂ O

Record	Item	Comment
<p>If ILIB > 0, then the feedback coefficients are transferred from the file LUNR1 = 8. Instead of records 36-42, the following record(s) 36 is read.</p>		
36	IDENT(I)	The order of sets of feedback parameters on the file LUNR1 is read (generally it will be the same array as in record 30, I=1,...,NOMAS).
<p>The following records 44-45 are entered only in the case IPTOIS≠0</p>		
43	STR	Text string: XENON CROSS SECTIONS
44	SIGXE(I)	Cross sections of XE (in barn) for I=1,...,NOMAS
45	NZCB, NZCE	NZCB No. of the lowest slice of fuel and NZCE No. of the uppermost slice (different from 1 and NZ, if axial reflector zones are not considered in the thermohydraulic model; the thermohydraulic variables of first and last fuel slice are used for the cross section calculation in the axial reflectors).
46	NHYCHA	Number of fuel elements of given sector with separate fuel rod or thermo fluid object
	NHOT	Number of hot rods

Record	Item	Comment
47	IHYCHA(I) I=1,NCAS	Number of coolant channels belonging to fuel element I (order of input analogous to IMAT(I), see Record 12) Input only if NHYCHA≠NCAS
48	PW	Pseudo keyword RODDEF (--- RODDEF)
For each coolant channel from I =1 to NHYCHA one record 49 is read.		
49	NN CHA(I)	Number of different rods belonging to the core range Name of ATHLET-Rod belonging to the core sector NN. If no rod is present (for example in reflector) CHA(I) is the name of a thermofluidobject.
If NHOT>0 then the record 50 is read for each hot rod		
50	CHA(I) HOTF(I) CHA(J)	Name of hot rod of ATHLET-model (I = NHYCHA + 1, NHYCHA + NHOT) Hot channel factor Name of the reference rod (1 ≥ J ≤ NHYCHA)
51	SSEST	Text string: END OF DATA FOR STATONARY CALCULATION

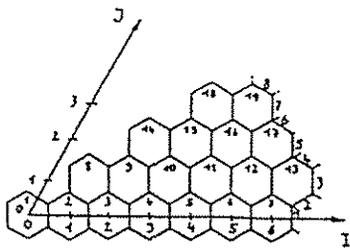
Record	Item	Comment
52	KW	Keyword TRANSIENT (K---- TRANSIENT)
53	SI	Text string: DATA FOR TRANSIENT CALCULATION
54	SC	Text String: TIME STEP CONTROL
55	TE	Dummy real variable
	DTNK	Initial time step of neutron kinetics (in s)
	DTNKMI	minimal time step of neutron kinetics (in s)
	DTNKMA	maximal time step of neutron kinetics (in s)
	TCKIN	The initial time step of neutron kinetics isn't increased until time TCKIN (in s)
56	EPSF	Truncation error of flux iteration (recommended value 1.5E-6)
57	ITOUA	Maximal number of outer iterations
	ITOUMI	Maximal number of inner iterations
	ITSCH	Order of Chebyshev acceleration (recommended values 3,4,5,6,7)
58	EPDOMM	Criteria using the change of mean value Ω of exponential transformation for time step control (recommended value 0.025)
	EPDOMR	Criteria using the maximal differences of Ω - distribution for time step control (recommended value 0.025)
	EPOM	Criteria using the mean value Ω for time step control (recommended value 0.025)

Record	Item	Comment
59	ITOUHA	If the number of outer iterations $ITOU > ITOUHA$, the time step of neutron kinetics is halved (recommended value 120)
	ITOUDB	If the number of outer iterations $ITOU < ITOUDB$, doubling the step of neutron kinetics (recommended value 40)
60	SM	Text string: CONTROL ROD MOTION
61	NOTP	Number of time points, at which the material of some nodes is replaced completely by other material during the control rod movement.
	NOW	Number of different sets of polynomial coefficients for flux weighting in the case of partial in nodes inserted control rods
62	TIMP(I)	Time points for material replacement ($I=1,\dots,NOTP$)
	NOPN(I)	Number of nodes, in which the material at the time TIMP(I) is replaced completely ($I=1,\dots,NOTP$)
63	I	Horizontal co-ordinate of one of these nodes in the hexagonal plane (concerning the sector of calculation).
	J	Corresponding vertical componente (60° co-ordinates) (concerning the sector of calculation).
	K	Number of the vertical slice (from bottom)
	ITYP	Type of the new material. If the control rod moves down, ITYP obtains a negative sign.
	IWEI	If $NOW > 0$ the type of weighting is entered.

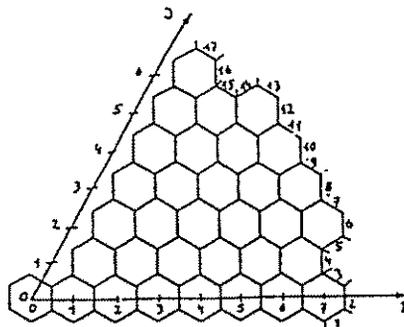
Record 63 must be given NOPN(I) times.
Records 62 with records 63 are given NOTP times.

Record	Item	Comment
64	SD	Text string: DELAYED NEUTRONS
65	NODN	Number of groups for precursors of delayed neutrons
	NOBET	Number of different sets of β_{eff} values
66	RLAM(I)	Decay constants in s^{-1} of precursors ($I=1,2,..,NODN$)
67	BETAF(I)	β_{eff} values of fast fissions ($I=1,2,..,NODN$) of the first set
68	BETAT(I)	β_{eff} values of thermal fissions ($I=1,2,..,NODN$) of the first set
<p>Records 66 and 67 are entered for all NOBET sets. If NOBET > 1 then the identifiers of sets are read for all nodes.</p>		
69	INDC	<p>INDC = -1: The identifiers of a given slice are read INDC = 0: The identifiers INDBE(I) describing the set of β_{eff} values for the given slice are the same as for the previous slice INDC=NC, $1 \leq NC \leq NCAS$ NC identifiers of the given slice are different from those of the previous slice</p>
70	INDBE(I)	<p>IF INDC = -1, then INDBE(I) in the order $I=ILEFT(J),...,IRIGHT(J)$. A new record of type 70 for each J ($J=JMIN,..,JMAX$).</p>
70	I J KMAT	<p>IF INDC > 0, then NC=INDC records of type 70 with the horizontal co-ordinate I, the vertical co-ordinate J and the identifier of the β_{eff} values set KMAT are read</p>
71	RLIFE	Mean neutron lifetime of core in s (used for approximate evaluation of reactivity)
72	BE- TAFF(I)	Effective values β_{eff} of core (used also for evaluation of reactivity)

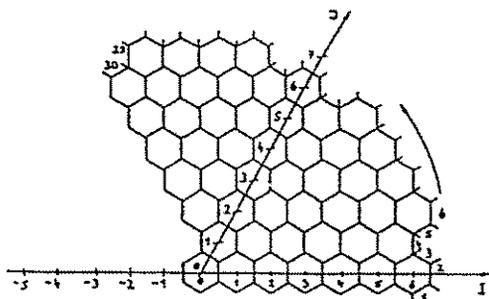
Record	Item	Comment
73	SV	Text string: NEUTRON VELOCITIES
74	NOVET	Number of sets of different neutron velocities
75	VEF	Velocity of fast neutrons of the first set
	VET	Velocity of the thermal neutrons of the first set
<p>Record 75 is entered for all NOVET sets. If NOVET > 1 then the identifiers of sets are read for all nodes.</p>		
76	INDC	INDC = -1: The identifiers of a given slice are read INDC = 0: The identifiers INDVE(I) describing the set of neutron velocities for the given slice are the same as for the previous slice INDC=NC, $1 \leq NC \leq NCAS$ NC identifiers of the given slice are different from those of the previous slice
77	INDVE(I)	IF INDC = -1, then INDBE(I) in the order I=ILEFT(J),...,IRIGHT(J). A new record of type 77 for each J (J=JMIN,...,JMAX).
77	I J KMAT	IF INDC > 0, then NC=INDC records of type 77 with the horizontal co-ordinate I, the vertical co-ordinate J and the identifier of the β_{eff} values set KMAT are read
78	SE	Text string: FINE



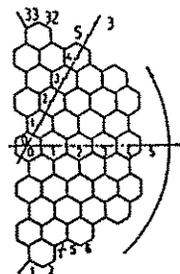
30° reflectional symmetry:
 ISYM = 30 NJMAX = 4 NIMAX = 7
 NCAS = 19 NZ = 10 NOBOU = 8
 NOSYMS = 28 NOMAS = 4 NOBT = 3
 JMIN = 0 JMAX = 3
 ILEFT(J) = 0 1 2 3
 IRIGT(J) = 6 6 5 4



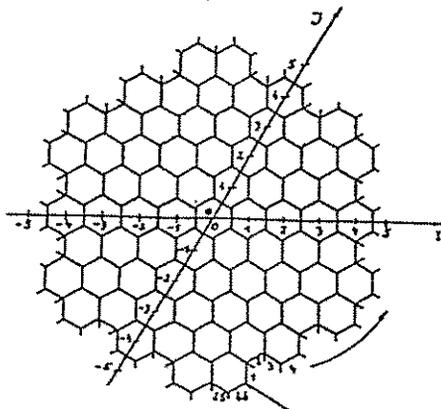
60° rotational symmetry:
 ISYM = 60 NJMAX = 7 NIMAX = 8
 NCAS = 33 NZ = 10 NOBOU = 17
 NOSYMS = 30 NOMAS = 4 NOBT = 3
 JMIN = 0 JMAX = 6
 ILEFT(J) = 0 1 1 1 1 1 1
 IRIGT(J) = 7 6 6 5 4 3 1



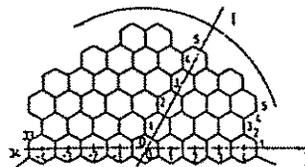
120° rotational symmetry:
 ISYM = 120 NJMAX = 8 NIMAX = 12
 NCAS = 51 NZ = 10 NOBOU = 30
 NOSYMS = 25 NOMAS = 4 NOBT = 3
 JMIN = 0 JMAX = 7
 ILEFT(J) = 0 0 -1 -2 -3 -4 -5 -5
 IRIGT(J) = 6 5 5 4 3 2 0 -2



180° reflectional symmetry of type 1:
 ISYM = 181 NJMAX = 11 NIMAX = 8
 NCAS = 39 NZ = 10 NOBOU = 33
 NOSYMS = 21 NOMAS = 4 NOBT = 3
 JMIN = -5 JMAX = 5
 ILEFT(J) = 3 2 2 1 1 0 0 -1 -1 -2 -2
 IRIGT(J) = 3 4 5 5 4 4 3 3 2 0 -2



360° whole core:
 ISYM = 360 NJMAX = 11 NIMAX = 11
 NCAS = 73 NZ = 10 NOBOU = 66
 NOSYMS = 0 NOMAS = 4 NOBT = 3
 JMIN = -5 JMAX = 5
 ILEFT(J) = 2 0 -2 -3 -3 -4 -4 -5 -5 -4 -3
 IRIGT(J) = 3 4 5 5 4 4 3 3 2 0 -2



180° reflectional symmetry of type 2:
 ISYM = 182 NJMAX = 6 NIMAX = 10
 NCAS = 41 NZ = 10 NOBOU = 34
 NOSYMS = 18 NOMAS = 4 NOBT = 3
 JMIN = 0 JMAX = 5
 ILEFT(J) = -4 -4 -5 -5 -4 -3
 IRIGT(J) = 4 3 3 2 0 -2

```

@ #####@
C----- NEUKIN3D
@ #####@
@ -----@
K----- STATIC
@ -----
@ VVER-440 BOC
@ INITIAL STATE: K6 HALF INSERTED
@ BORON CONCENTRATION: 1223.81 ppm (7.0 G/KG)
@ 30 DEGRE SIMULATION
@ NUCLEAR CROSS SECTIONS FROM MAGRU LIBRARY
@ -----
WVER-440,30 DEG,ROD DROP,STAT. CALCULATION,WITHOUT FEEDB.
----- WQLIBRARY
@ ILIB
  1
DATA HEXDYN
CONTROL OF CALCULATION
@ ITIM IOINP IH1 IH2 IH3 IH4 IH5
  -1  2  0  0  0  1  2
DIMENSIONS OF ARRAYS
@ ISYM NJMAX NIMAX NCAS NZ NOBOU NOSYMS NOMAS NOBT
  30   6  10  37  10  12  44  14  26
MATERIAL MAP
@ JMIN JMAX
  0   5
@ ILEFT(J)
  0   1   2   3   4   5
@ IRIGHT(J)
  9   9   8   7   7   6
@ INDC
  -1
@ IMAT(I)
  2   1   2   2   1   1   2   2   3   2
  2   1   2   2   2   1   1   3   3
  2   1   1   2   2   3   3
  2   1   1   1   3
  2   2   3   3
  2   3
@ INDC
  0
@ INDC
  0
@ INDC
  0
@ INDC
  0
@ INDC
  2
@ I   J   KMAT
  0   0   13
@ I   J   KMAT
  6   0   13
@ INDC
  0
@ INDC
  0
@ INDC
  0
@ INDC
  0

```

GEOMETRICAL PARAMETERS

```
@ SW
  14.7
@ AN(IZ)
  24.4 24.4 24.4 24.4 24.4 24.4
  24.4 24.4 24.4 24.4
```

CONTROL OF ITERATION

```
@ EPSBES EPSK EPSF EPSMAT EPSDS EPS12
  .00002 .0000001 .0000001 .02 .2 .02
@ EKEFF
  1.0
```

@ITOUA ITINMA ITSCH

```
  250 3 5
@ IOPT
  4
```

BOUNDARY RELATIONS

```
@ ALF11 ALF12 ALF22
  .5178 0.0 1.0547
  .5331 0.0 1.1779
  .3811 0.0 1.0717
  .5186 0.0 1.1675
  .4565 0.0 1.1263
  .5255 0.0 1.1711
  .5201 0.0 1.1686
  .5936 0.0 1.2136
  .3854 0.0 1.0713
  .4860 0.0 1.1530
  .4735 0.0 1.1359
  .4642 0.0 1.1347
  .5034 0.0 1.1572
  .4507 0.0 1.1214
  .5245 0.0 1.1733
  .3865 0.0 1.0718
  .5777 0.0 1.2068
  .5525 0.0 1.1913
  .5002 0.0 1.1562
  .4740 0.0 1.1375
  .4899 0.0 1.1526
  .3839 0.0 1.0732
  .5760 0.0 1.2001
  .475 0.0 .98
  .62 0.0 1.23
  .03148 0.0 0.03148
```

```
@ IND
  -1
```

@ IBR(I)

```
  1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12
@ IND
  0
```

```

@ IND
0
@ IND
0
@IREFU(I)
24 24 24 24 24 24 24 24 24 24 24 24 24 24
24 24 24 24 24 24 24 24 24 24 24 24 24 24
24 24 24 24 24 24 24 24 24 24
@IREFO(I)
24 24 24 24 24 24 24 24 24 24 24 24 24 24
24 24 24 24 24 24 24 24 24 24 24 24 24 24
24 24 24 24 24 24 24 24 24
MACROSCOPIC CROSS SECTIONS
@ IDENT(I)
1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14
TOTAL POWER
@ TOTPOW
1375. .0
DATA FOR FEEDBACK
@ IBOR ITPOIS
1 0
FEEDBACK COEFFICIENTS
@ IDENT(I)
1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14
@ NZCB NZCE
1 10
@ NHYCHA NHOT
5 0
@ FEEDBACK MAP
@ IHYCHA(I)
5 3 2 2 3 3 5 1 1 3
2 3 2 2 2 3 3 1 4
2 3 3 2 2 1 3
2 3 3 3 3
2 2 2 4
3 4
-----
@ CHAN NO OF LIST OF OBJECTS (ROD OR TFO)
@ NO OBJECTS
1 'ROD1'
1 'ROD2'
1 'ROD3'
1 'ROD4'
1 'ROD5'
@ HOT RODS
@ ROD HOT CORRESPONDING
@ NAME FACTOR ROD
@'ROD6' 1.5 'ROD1'
END OF DATA FOR STATIONARY CALCULATION
@
K----- TRANSIENT
DATA FOR TRANSIENT CALCULATION
TIME STEP CONTROL
@ TE DTNK DTNKMI DTNKMA TCKIN
2000. .005 1.E-8 10.0 0.0
@ EPSF
.0000001
@ITOUA ITOUMI ITSCH
500 4 7
@ EPDOMM EPDOMR EPOM
.01 .01 .25

```

@ITOUHA ITOUDB

250 40

CONTROL ROD MOTION

@DIE STOERUNG

@ NOTP NOW

6 0

```
@      TIMP(I)  NOPN(I)
      500.0      2
@  I    J    K  ITYP
  0    0    5    2    1
  6    0    5    2    1
@      TIMP(I)  NOPN(I)
      500.02     2
@  I    J    K  ITYP
  0    0    6    2    1
  6    0    6    2    1
@      TIMP(I)  NOPN(I)
      500.04     2
@  I    J    K  ITYP
  0    0    7    2    1
  6    0    7    2    1
@      TIMP(I)  NOPN(I)
      500.06     2
@  I    J    K  ITYP
  0    0    8    2    1
  6    0    8    2    1
@      TIMP(I)  NOPN(I)
      500.08     2
@  I    J    K  ITYP
  0    0    9    2    1
  6    0    9    2    1
@      TIMP(I)  NOPN(I)
      500.1      2
@  I    J    K  ITYP
  0    0   10    2    1
  6    0   10    2    1
```

DELAYED NEUTRONS

@ NODN NOBET

6 1

```
@      RLAM(I)
      .0124      .0305      .111      .301      1.13      3.0
@      BETAF(I)
      .00021731 .001499      .0013887 .0028653 .000964 .00034199
      .00021731 .001499      .0013887 .0028653 .000964 .00034199
@      RLIFE
      5.00000E-05
@      BETAFF(I)
      .00021731 .001499      .0013887 .0028653 .000964 .00034199
```

NEUTRON VELOCITIES

@ NOVET

5

```
@      VEF      VET
      1.463E07  3.880E05
      1.582E07  3.920E05
      1.546E07  3.960E05
      1.669E07  4.010E05
      1.568E07  3.990E05
```

```

@ INDC
-1
@ INDVE(I)
  2  1  2  2  1  1  2  2  3  2
  2  1  2  2  2  1  1  3  3
  2  1  1  2  2  3  3
  2  1  1  1  3
  2  2  3  3
  2  3

```

```

@ INDC
0

```

```

FINE

```

```

@ -----@

```

Anhang C

Additional Input Data to Burnup Version of DYN3D:

To be added at the end of stationary part of input data (kin.dat).

**Attention! The data have to be written on the first 72 positions of records!
Data with a new record number have to begin at a new row.
Additional records (comments) must begin with '\$' character!**

Record	Item	Comment
1	IBRNDISTR	Presence of initial burnup distribution = 0: Calculation for fresh core > 0: Using burnup distribution from file brn.dat
	IBRNCAL	= 0: Only stationary calculation, no burnup calculation > 0: Burnup calculation starting from given distribution
	NSHUFF	Number of fuel shuffle operations prior to calculation
	ISAM	Handling of samarium concentration: = 0: Equilibrium = 1: Sm concentration calculated and written to file sam.dat = 2: (Sm + Pm) concentration calculated and written to sam.dat = 3: Sm concentration not calculated but read from sam.dat
2	BRNINT	Burnup calculation time step interval width (days) Input of shuffle scheme, only in the case NSHUFF>0:
3	INUMB	Number of shuffle operation
	MATNEW	Type of material (enrichment) of introduced fresh fuel element
	ICHANGE(I)	Positions (numbers) of fuel elements shuffled in the actual shuffle operation (corresponding to fuel element numbers in Fig. 5.3.1) I = 1: Position of fuel element replaced by a fresh one consisting of material MATNEW I = 2: New position of fuel element originally located in place ICHANGE(1)

Record	Item	Comment
3 (Cont.)		<p>$I = N$: New position of fuel element originally located in place $ICHANGE(N-1)$</p> <p>$I_{max} = 9$ In case $ICHANGE(I) = -1$ the actual shuffle operation is terminated, and the last fuel element from position $ICHANGE(I-1)$ is taken out of the core.</p> <p>Records of type 3 have to be read in NSHUFF times: one record for each shuffle operation</p>
4	NGROUP	<p>Number of control rod groups, $NGROUP < 11$</p> <p>Group definitions:</p>
5	IGROUP	<p>Number of group ($IGROUP = 1 \dots NGROUP$)</p>
	NUMBFE(I)	<p>Numbers of fuel elements belonging to group IGROUP, i. e. radial positions of the group's control rods; $I_{max} = 15$; in case $NUMBFE(I) = -1$ the rod position input is terminated, no further rod position of the actual group will follow</p> <p>Records of type 5 have to be read in NGROUP times: one record for each control rod group</p>
6	RODPEL	<p>Length of steel pellet part in fuel follower of control element (cm)</p>
	RODCPL	<p>Length of intermediate part (coupler) of control element (cm)</p> <p>Controlling RESTART Option:</p>
7	BNTIME	<p>= 0.: No restart (normal calculation) > 0.: Restarting former burnup calculation which was terminated at the reactor operation time of BNTIME (days); i. e. the calculation will be continued from this time.</p>

Record	Item	Comment
8	RPTIME TOTPOW HEIRD(I)	<p>Describing operational history:</p> <p>Time (cycle operation days) of changing (axial) control rod position and/or total power; the first record of type 8 is valid for the time interval [0 ... RPTIME] days</p> <p>Total thermal power (MW) valid up to RPTIME</p> <p>Positions of the control rod groups valid up to RPTIME; positions have to be given in the order of group numbers: I = 1 ... NGROUP</p> <p>A record of type 8 has to be created for all times, in which at least one operational parameter is changed, the unchanged parameters have also to be included in the record.</p> <p>The series of records 8 is terminated by a negative value of RPTIME; the last positive RPTIME marks the end-of-cycle time or might be an otherwise interesting time, at which the burnup calculation will be terminated</p>

Example of additional input data for DYN3D burnup version:

```

$ BURNUP CALCULATION DATA:
$
$ IBRNDSTR=0: DYN3D CALCULATION FOR FRESH CORE
$ IBRNDSTR>0: DYN3D CALCULATION USING BURNUP DISTRIBUTION GIVEN IN
$           FILE brn.dat
$ IBRNCAL=0: NO BURNUP CALCULATION
$ IBRNCAL>0: BURNUP CALCULATION WITH TIME STEP INTERVAL BRNINT (DAYS)
$
$ NSHUFF: NUMBER OF FUEL SHUFFLING OPERATIONS PRIOR TO BURNUP CALCULATION
$
$ ISAM : HANDLING OF SAMARIUM CONCENTRATION
$ ISAM=0: EQUILIBRIUM
$ ISAM=1: SM CONCENTRATION CALCULATED AND WRITTEN TO _sam.dat
$ ISAM=2: (SM+PM) CONCENTRATION CALCULATED AND WRITTEN TO _sam.dat
$ ISAM=3: SM CONCENTRATION NOT CALCULATED BUT READ FROM _sam.dat
$
$ IBRNDSTR, IBRNCAL, NSHUFF, ISAM:
$   1       1       20       0
$ BRNINT:
$   10.0
$ FUEL ELEMENT SHUFFLE SCHEME:
$ INUMB NEW FUEL SHUFFLING, FUEL ELEMENT NUMBERS ICHANGE(I):
$ | MATNEW      1    2    3    3    4    5    6    7    8    9 <-- I
$ |-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
1 | 2          1   -1
2 | 2          4  56  -1
3 | 2          7  36  -1
4 | 2          12 -1
5 | 3          19 60  -1
6 | 3          20 28  15  -1
7 | 2          23  -1
8 | 2          26  -1
9 | 3          29  9   3  -1
10| 3          37 25  -1
11| 2          42  -1
12| 3          45 44  17  14  -1
13| 2          48  -1
14| 3          52 43  -1
15| 3          58 50  -1
16| 3          62 40  -1
17| 3          63 57 54  31  -1
18| 3          65 18  -1
19| 3          66 51  8   -1
20| 3          69 61 39  -1
$
$ CONTROL ROD GROUP DEFINITION:
$ NUMBER OF GROUPS (MAX. 10):
$ NGROUP
$   6
$ GR.NR. | NUMBERS OF THE FUEL ELEMENTS RELATED TO GROUP NUMBER IGROUP
$ (IGROUP HAS TO BE GIVEN LINE AFTER LINE IN STRONG ORDER: 1,2,3,...)
$ IGROUP | NUMBFE -----> (MAX. 15 ROD POSITIONS PER GROUP)
$   1    10  -1
$   2    33  -1
$   3    36  -1
$   4    56  -1
$   5     4  -1
$   6     1   7  -1
$
$ CONTROL ROD PROPERTIES:
$ RODPEL - LENGTH OF STEEL PELLETT PART (CM)
$ RODCPL - LENGTH OF COUPLER (CM)
$   RODPEL   RODCPL
$   10.      30.
$
$ CASE OF RESTART:
$ BNTIME=LAST BNTIME IN _lst.dat
$ NO RESTART:
$ BNTIME=0.
$   0.
$ REMEMBER TO DO BEFORE RESTARTING:
$ * cp _kin.dat _kin.dat.start
$ * cp _lst.dat _lst.dat.start
$ * cp BRN.TEMP _brn.dat
$ * cp BRN.TEMP _brn.dat.restart
$ * COPY NEW MATERIAL MAP (AFTER RESHUFFLING) FROM _lst.dat TO THIS _kin.dat
$ * NSHUFF=0 IN THIS _kin.dat, NO SHUFFLE SCHEME
$ * SET ABOVE BNTIME=LAST BNTIME IN _lst.dat
$ * REDUCE OPERATIONAL HISTORY TABLE (BELOW) ACCORDING TO BNTIME
$ * IMPROVE ITERATION CRITERIA OR CALCULATION ACCURACY (ITIN,-r8, ...) OR

```

\$ OTHERWISE REMOVE THE CAUSE OF IRREGULARLY TERMINATING THE BURNUP CALCULATION
 \$
 \$ DESCRIBING OPERATIONAL HISTORY:
 \$
 \$ RPTIME: "ROD POSITON TIME": TIME [EFF. DAYS] UNTIL WHICH THE GIVEN
 \$ ROD POSITIONS AND TOTAL POWER WILL BE USED.
 \$ THE LAST GIVEN POSITIVE VALUE OF RPTIME INDICATES THE ENDING
 \$ TIME OF BURNUP CALCULATION
 \$ HEIRD(IGROUP): "HEIGHT OF ROD": POSITION (HEIGHT) [CM] OF THE BOUNDARY
 \$ BETWEEN COUPLER AND STEEL PELLETT PART FOR GIVEN CONTROL ROD
 \$ GROUP (NUMBER IGROUP).
 \$ GROUP WILL STAY IN THIS POSITION UNTIL A NEW VALUE HEIRD
 \$ WILL BE GIVEN AT A LATER RPTIME
 \$
 \$ VALUES "HEIRD" FOR ALL GROUPS WITH RPTIME.GE.0 HAVE TO BE
 \$ GIVEN HERE, EVEN IN THE CASE OF NO ROD INSERTION (STEEL PELLETT PART
 \$ INSERTION (E. G. RODPEL=10 CM) IS TREATED INTERNALLY)
 \$
 \$ RPTIME TOTPOW HEIRD(IGROUP): POSITIONS (IN CM) OF GROUPS (MAX. 10)
 \$
 \$ (EFF.D.) (MW) 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10
 280. 1375.000 250. 250. 250. 250. 250. 190.
 290. 1375.000 250. 250. 250. 250. 250. 225.
 306.2 1375.000 250. 250. 250. 250. 250. 250.
 \$ ONE RECORD CONTAINING A NEGATIVE VALUE RPTIME HAS TO BE GIVEN IN ANY CASE
 \$ TO INDICATE THAT NO MORE RECORDS DESCRIBING OPERATIONAL HISTORY ARE EXPECTED:
 -10.