



---

Gesellschaft für Reaktorsicherheit (GRS) mbH

## GRS-Bericht

# Entwicklung eines Rechenprogramms zur Lösung der Neutronik-Gleichungen eines mehrdimensionalen HTR-Kernmodells

Anselm Schaefer

**GRS-14 (Februar 1979)**



---

Gesellschaft für Reaktorsicherheit (GRS) mbH

GRS-Bericht

Entwicklung eines Rechenprogramms zur  
Lösung der Neutronik-Gleichungen eines  
mehrdimensionalen HTR-Kernmodells

A. Schaefer

## Kurzfassung

Als erster Schritt zur Entwicklung eines dreidimensionalen HTR-Kernmodells wurde auf der Basis des QUABOX-Grobgridverfahrens der Code MULTIPOL zur effizienten Lösung der mehrdimensionalen, stationären Multigruppen-Diffusionsgleichung erstellt.

Im folgenden werden die benutzten Approximations- und Iterationsmethoden dargestellt. Rechenergebnisse für verschiedene mehrdimensionale Multigruppenprobleme, darunter der THTR, werden ausgewertet. Es ergibt sich ein lineares Ansteigen der Rechenzeit mit der Anzahl der Energiegruppen. Bei dreidimensionalen Diffusionsrechnungen gestattet das Grobgridverfahren gegenüber konventionellen Finite-Differenzen-Methoden eine Verringerung des Rechenaufwandes um einen Faktor 30, so daß auch für große HTR-Kerne dreidimensionale Vollkernrechnungen möglich werden.

## Abstract

A new code for efficient solution of the multidimensional stationary multi-group-diffusion equation, to be used within a HTGR-code model, is presented.

The approximation and iteration methods are described. Spatial approximation is based on the QUABOX-coarse-mesh method, but iteration methods are different from QUABOX to give linear dependence of computation time on the number of energy groups. Results for various multidimensional multi-group problems, among them the THTR pebble bed reactor are analyzed. It is shown, that computational labor for a 3D-case is reduced by about a factor 30 in comparison with conventional finite-difference-methods. Thus 3D-full-core calculations appear to be feasible for large HTGR's.

I N H A L T

	Seite
1. Einleitung . . . . .	1
2. Beschreibung der verwendeten Methoden . . . . .	2
2.1 Die Ortsdiskretisierung . . . . .	2
2.2 Die äußeren Iterationen . . . . .	4
2.3 Die inneren Iterationen . . . . .	6
3. Ergebnisse . . . . .	7
3.1 Testrechnungen . . . . .	7
3.2 Benchmark-Rechnungen . . . . .	8
4. Programmeigenschaften . . . . .	11
5. Diskussion . . . . .	11
6. Literatur . . . . .	13
7. Bilder . . . . .	14
8. Tabellen . . . . .	63
9. Verteiler . . . . .	67

FORMELZEICHEN

b	Parameter der Tschebyscheff-Extrapolation
$D_g$	Diffusionskonstante in Energiegruppe g
$F_{gg'}$	beschreibt den durch Kernspaltung bewirkten Transfer von Neutronen aus Energiegruppe g' in Energiegruppe g
G	Anzahl der Energiegruppen
$h_0$	kleinste Maschenweite des Diskretisierungsgitters
K	Dominanzverhältnis
$\tilde{K}$	Konvergenzrate
N	Anzahl der Boxen im Diskretisierungsgitter
p	Dimension des Ortsraumes
$P_{gl}$	Polynom für Flußentwicklung in Energiegruppe und Box l
$Q_g$	Quellterm in Energiegruppe g
$S_{gg'}$	makroskopischer Wirkungsquerschnitt für Streuung aus Energiegruppe g' in Energiegruppe g bzw. negativer Removalquerschnitt für $g' = g$
$T_t$	Tschebyscheffsches Polynom
V	Betrachteter Bereich des p-dimensionalen Ortsraumes
$V_l$	l-te der insgesamt N Boxen des Diskretisierungsgitters
$\vec{x}$	Koordinatenvektor des Ortspunktes
$\vec{x}_l$	Koordinatenvektor des Mittelpunktes der l-ten Box
$\Delta_g$	Differenzenäquivalent des Differentialoperators $\nabla D_g \nabla$
$\lambda$	Eigenwert allgemein
$\lambda_1, \lambda_2$	größter ( $k_{eff}$ ) bzw. zweitgrößter Eigenwert
$\Phi_g$	Neutronenfluß in Energiegruppe g
$\Sigma_g^{rem}$	mittlerer Removalquerschnitt in Energiegruppe g
$\tau$	Zeitschritt für ADI-Schema
m	Index zur Numerierung der inneren Iterationsschritte
n	Index zur Numerierung der äußeren Iterationsschritte
t	Index zur Numerierung der äußeren Iterationsschritte innerhalb eines Zyklus der Tschebyscheff-Extrapolation
-	einfache Unterstreichung bezeichnet aus der Diskretisierung von Ortsfunktionen resultierende Vektoren der Dimension N. Beispiel: $\underline{\Phi}_g = (\Phi_g(\vec{x}_1), \Phi_g(\vec{x}_2), \dots, \Phi_g(\vec{x}_N))^T$
=	zweifache Unterstreichung bezeichnet aus der Diskretisierung von Ortsfunktionen oder Operatoren resultierende N x N-Matrizen

## 1. EINLEITUNG

Grundvoraussetzung für die Simulation der im Kern eines Leistungsreaktors ablaufenden Vorgänge ist die Berechnung des stationären bzw. instationären Neutronenflusses. Im Falle thermischer, graphitmoderierter Hochtemperaturreaktoren ist die bei Leichtwasserreaktoren übliche Zweigruppen-Diffusionsnäherung dazu nicht ausreichend. Es ist vielmehr eine Beschreibung in vier oder mehr Energiegruppen erforderlich /1/. Andererseits sind, ähnlich wie bei Leichtwasserreaktoren, die Kerne großer gasgekühlter Hochtemperaturreaktoren räumlich stark entkoppelt, so daß eine genaue Darstellung der neutronenphysikalischen Prozesse nur bei expliziter Berücksichtigung von zwei oder drei Raumdimensionen möglich ist. Das sich ergebende Problem, die Approximation der mehrdimensionalen Multigruppendiffusionsgleichung in im Vergleich zur charakteristischen Diffusionslänge großen Raumgebieten, kann mit hinreichender Genauigkeit und vertretbarem Aufwand nur durch Einsatz von Grobgitterverfahren gelöst werden /1/.

Der Code QUABOX /2,3/ gestattet eine sehr effiziente Auflösung der Zweigruppen-Diffusionsgleichung in kartesischer Geometrie. Allerdings steigt der numerische Aufwand bei der dort zur Lösung der diskretisierten Gleichungen verwendeten Blockfaktorisierungsmethode stark überproportional mit der Anzahl der Energiegruppen an, so daß diese für einen typischen Multigruppen-code nicht geeignet ist. Der neu entwickelte Code MULTIPOL (Multigruppen-Polynomapproximation) verwendet daher von QUABOX lediglich das Grobgitterverfahren zur räumlichen Approximation der Gruppenflüsse mit Hilfe lokaler, quadratischer Polynome (Q-Approximation), während die Auflösung der diskretisierten Gleichungen in der Weise erfolgt, daß die Rechenzeiten in etwa proportional zur Zahl der Energiegruppen sind. Die derzeit fertiggestellte Grundversion von MULTIPOL gestattet die Lösung der stationären Multigruppen-Diffusionsgleichung ohne Aufwärtsstreuung in bis zu drei Raumdimensionen in kartesischer und Zylindergeometrie. Für Vergleichszwecke ist neben der Q-Approximation für Grobgitterrechnungen auch eine Approximation nach der Methode der Finiten Differenzen (FD) möglich.

## 2. BESCHREIBUNG DER VERWENDETEN METHODEN

### 2.1 Die Ortsdiskretisierung

Die stationäre Neutronendiffusionsgleichung in G Energiegruppen

$$-\nabla D_g(\vec{x}) \nabla \phi_g(\vec{x}) - \sum_{1 \leq g' \leq g} S_{gg'}(\vec{x}) \phi_{g'}(\vec{x}) = \frac{1}{\lambda} \sum_{g'=1}^G F_{gg'}(\vec{x}) \phi_{g'}(\vec{x})$$

$$g = 1, 2, \dots, G \quad (1)$$

wird nach der Boxintegrationsmethode diskretisiert. Dazu wird der betrachtete Raumbereich V in eine Anzahl achsenparalleler Parallelepipede  $V_l$ ,  $l = 1, 2, \dots, N$  zerlegt. Die Mittelpunkte dieser auch Boxen genannten Teilbereiche werden mit  $\vec{x}_l$ ,  $l = 1, 2, \dots, N$  bezeichnet. Innerhalb einer jeden Box  $V_l$  werden die Gruppenflüsse  $\phi_g(\vec{x})$  als Polynom

$$\phi_g|_{V_l}(\vec{x}) = \phi_{gl} + P_{gl}(\vec{x} - \vec{x}_l),$$

$$P_{gl}(0) = 0 \quad (2)$$

dargestellt. Gleichung (1) wird mit diesem Ansatz über  $V_l$  integriert. In dem so erhaltenen diskretisierten Gleichungssystem kommen als Unbekannte neben den Werten  $\phi_{gl}$  der Flüsse in den Boxmittelpunkten  $\vec{x}_l$  auch die Koeffizienten der Polynome  $P_{gl}$  vor.

Die FD-Approximation erhält man, indem man  $P_{gl} = 0$  setzt und  $\nabla D_g \nabla$  durch den bekannten  $(2p+1)$ -Punkte-Differenzenoperator  $\Delta_g$  ersetzt (p ist die Zahl der Raumdimensionen). Das Gleichungssystem der nach der FD-Methode diskretisierten Diffusionsgleichung lautet dann

$$-\sum_l \Delta_{gll'} \phi_{gl'} - \sum_{1 \leq g' \leq g} S_{gg'l} \phi_{g'l} = \frac{1}{\lambda} \sum_{g'=1}^G F_{gg'l} \phi_{g'l}$$

$$l = 1, 2, \dots, N \quad g = 1, 2, \dots, G \quad (3)$$

Die einzigen nichtverschwindenden Elemente der Matrix  $\underline{\Delta}_g = (\Delta_{g1l},)$  sind in der Schreibweise mit dreidimensionalen ( $p=3$ ) Gitterindizes  $l = (i, j, k)$ :

$$\begin{aligned} &\Delta_{gijk} \quad ijk \\ &\Delta_{gijk} \quad i\pm 1, jk \\ &\Delta_{gijk} \quad i, j\pm 1, k \\ &\Delta_{gijk} \quad ij, k\pm 1 \end{aligned} \tag{4}$$

Bei der QUABOX-Methode werden die  $P_{g1}$  als quadratische Polynome angesetzt. Es wird gefordert, daß der Fluß  $\Phi_g(\vec{x})$  und die Normalkomponente des Stromes  $-D_g(\vec{x}) \nabla \Phi_g(\vec{x})$  in den Mittelpunkten der Trennflächen zwischen benachbarten Boxen stetig sind. Mit Hilfe dieser Stetigkeitsbedingungen lassen sich die Koeffizienten der Polynome  $P_{g1}$ ,  $l = 1, 2, \dots, N$  mit geringem numerischen Aufwand aus dem Vektor  $\Phi_g = (\Phi_{g1}), l = 1, 2, \dots, N$  des diskretisierten Gruppenflusses bestimmen. Daher läßt sich das durch Integration von (1) über die  $V_1$  erhaltene Gleichungssystem auch in diesem Fall in die Gestalt des Systems (3) bringen, wenn man zuläßt, daß die Matrizen  $\underline{\Delta}_g, \underline{S}_{gg'}, \underline{F}_{gg'}$  von den diskretisierten Flüssen abhängen, nämlich gemäß

$$\begin{aligned} \int_{V_1} d^3x F_{gg'}(\vec{x}) \Phi_g(\vec{x}) &= F_{gg'1}(\Phi_{g'}) \Phi_{g'1} \\ \int_{V_1} d^3x S_{gg'}(\vec{x}) \Phi_g(\vec{x}) &= S_{gg'1}(\Phi_{g'}) \Phi_{g'1} \\ \int_{V_1} d^3x \nabla D_g(\vec{x}) \nabla \Phi_g(\vec{x}) &= \sum_l \Delta_{g1l}(\Phi_{g'}) \Phi_{g1l} \end{aligned} \tag{5}$$

Anstelle der FD-Gleichungen (3) erhält man für die Q-Approximation somit das nichtlineare System

$$-\underline{\Delta}_g(\Phi_{g'}) \Phi_{g'} - \sum_{1 \leq g' \leq G} \underline{S}_{gg'}(\Phi_{g'}) \Phi_{g'} = \frac{1}{\lambda} \sum_{g'=1}^G \underline{F}_{gg'}(\Phi_{g'}) \Phi_{g'} \tag{6}$$

wobei Struktur und Besetzung der Matrizen in (3) und (6) übereinstimmen.

## 2.2 Die äußeren Iterationen

Die korrekte Vektoriteration für das Gleichungssystem (6) lautet

$$\begin{aligned}
 - \underline{\underline{\Delta}}_g^{(n)} \underline{\underline{\Phi}}_g^{(n)} &= \frac{1}{\lambda^{(n-1)}} \sum_{g'=1}^G \underline{\underline{F}}_{gg'}^{(n-1)} \underline{\underline{\Phi}}_{g'}^{(n-1)} + \sum_{1 \leq g' \leq g} \underline{\underline{S}}_{gg'}^{(n)} \underline{\underline{\Phi}}_{g'}^{(n)} \\
 g &= 1, 2, \dots, G; \quad n = 1, 2, 3, \dots
 \end{aligned} \tag{7}$$

mit

$$\begin{aligned}
 \underline{\underline{\Delta}}_g^{(n)} &= \underline{\underline{\Delta}}_g(\underline{\underline{\Phi}}_g^{(n)}) \\
 \underline{\underline{F}}_{gg'}^{(n)} &= \underline{\underline{F}}_{gg'}(\underline{\underline{\Phi}}_{g'}^{(n)}) \\
 \underline{\underline{S}}_{gg'}^{(n)} &= \underline{\underline{S}}_{gg'}(\underline{\underline{\Phi}}_{g'}^{(n)})
 \end{aligned} \tag{8}$$

Tatsächlich sind die Nichtlinearitäten jedoch so gering, daß man die beim n-ten Iterationsschritt unbekanntenen Matrizen  $\underline{\underline{\Delta}}_g^{(n)}$  und  $\underline{\underline{S}}_{gg'}^{(n)}$  in Gleichung (7) durch die bekannten  $\underline{\underline{\Delta}}_g^{(n-1)}$  und  $\underline{\underline{S}}_{gg'}^{(n-1)}$  ersetzen kann. Statt (7) wird also bei jedem äußeren Iterationsschritt das folgende Gleichungssystem gelöst:

$$- \underline{\underline{\Delta}}_g^{(n-1)} \underline{\underline{\Phi}}_g^{(n)} = \frac{1}{\lambda^{(n-1)}} \sum_{g'=1}^G \underline{\underline{F}}_{gg'}^{(n-1)} \underline{\underline{\Phi}}_{g'}^{(n-1)} + \sum_{1 \leq g' \leq g} \underline{\underline{S}}_{gg'}^{(n-1)} \underline{\underline{\Phi}}_{g'}^{(n)} \tag{9}$$

Der Mehraufwand bei Vektoriteration der Gleichungen der Q-Approximation gegenüber der Vektoriteration der FD-Gleichungen (3) besteht also in einer Neuberechnung der Matrizen  $\underline{\underline{\Delta}}$ ,  $\underline{\underline{S}}$ ,  $\underline{\underline{F}}$  bei jedem Iterationsschritt.

Zur Konvergenzbeschleunigung der äußeren Iterationen wird Tschebyscheff-Extrapolation durchgeführt:

$$\begin{aligned} \underline{\Psi}^{(0)} &= \underline{\Phi}^{(0)}, \quad \underline{\Psi}^{(1)} = \frac{\lambda}{b} \underline{\Phi}^{(1)} - \underline{\Phi}^{(0)} \\ \underline{\Psi}^{(n)} &= -\frac{2}{b} (\underline{\Delta} + \underline{S})^{-1} \underline{F} \underline{\Psi}^{(n-1)} - \underline{\Psi}^{(n-2)}, \quad n = 2, 3, \dots \end{aligned} \quad (10)$$

Optimale Konvergenzbeschleunigung erhält man bekanntlich mit  $b = |\lambda_2|$ , wobei  $\lambda_2$  der im Betrag zweitgrößte Eigenwert ist. Andererseits führt die Verletzung der Bedingung  $b \leq |\lambda_2|$  insbesondere wegen der Nichtlinearität der Gleichungen sofort zu instabilem Verhalten des Iterationsprozesses. Es wird daher eine zyklische Neubestimmung von  $b$  jeweils nach einer bestimmten Anzahl äußerer Iterationen durchgeführt, wobei sichergestellt wird, daß stets  $b \leq |\lambda_2|$  gilt, insofern dies für den Startwert von  $b$  der Fall ist. Dies geschieht durch Vergleich des theoretischen Dominanzverhältnisses nach einem Zyklus von  $t$  Iterationen

$$K_t = \frac{T_{t-1} \left(\frac{\lambda_2}{b}\right) T_{1-2} \left(\frac{\lambda_1}{b}\right)}{T_{t-2} \left(\frac{\lambda_2}{b}\right) T_{t-1} \left(\frac{\lambda_1}{b}\right)} \quad (11)$$

( $T_t$  sind Tschebyscheffsche Polynome) mit der numerisch bestimmten Konvergenzrate

$$\tilde{K}_t = \left( \max_{\substack{1 \leq l \leq N \\ 1 \leq g \leq G}} \left| \frac{\phi_{gl}^{(t-1)}}{\phi_{gl}^{(1-2)}} \right| \right)^{-1} \cdot \max_{\substack{1 \leq l \leq N \\ 1 \leq g \leq G}} \left| \frac{\phi_{gl}^{(t)}}{\phi_{gl}^{(t-1)}} - 1 \right| \quad (12)$$

Im Grenzfall großer Diskretisierungsgitter gilt nämlich  $\tilde{K}_t \leq K_t$  und  $\lim_{t \rightarrow \infty} |K_t - \tilde{K}_t| = 0$ .

Nach Beendigung eines Zyklus erhält man danach einen neuen Extrapolationsparameter  $b'$  aus dem alten Wert  $b$  durch Lösen der Gleichung

$$\frac{T_{t-1} \left(\frac{b'}{b}\right)}{T_{t-2} \left(\frac{b'}{b}\right)} = \tilde{K}_t \frac{T_{t-1} \left(\frac{\lambda}{b}\right)}{T_{1-2} \left(\frac{\lambda}{b}\right)} \quad (13)$$

### 2.3 Die inneren Iterationen

Jede äußere Iteration erfordert die Auflösung von  $G$  Gleichungssystemen

$$\underline{L}_g^{(n-1)} \underline{\Phi}_g^{(n)} = \underline{Q}_g^{(n-1)}, \quad g = 1, 2, \dots, G \quad (14)$$

mit

$$\underline{L}_g^{(n-1)} = - (\underline{\Delta}_g^{(n-1)} + \underline{S}_{gg}^{(n-1)}) \quad (15a)$$

$$\underline{Q}_g^{(n-1)} = \frac{1}{\lambda^{(n-1)}} \sum_{g'=1}^G \underline{F}_{gg'}^{(n-1)} \underline{\Phi}_{g'}^{(n-1)} + \sum_{1 \leq g' < g} \underline{S}_{gg'}^{(n-1)} \underline{\Phi}_{g'}^{(n)} \quad (15b)$$

Zur iterativen Auflösung der Gleichungen (14) wird das ADI-Schema /4/

$$\left(1 + \frac{\tau_g}{2} \underline{A}_g^1\right) \underline{U}_g^{m+\frac{1}{3}} = \left(1 - \frac{\tau_g}{2} \underline{A}_g^1\right) \underline{U}_g^m - \tau_g \underline{A}_g \underline{U}_g^m + \tau_g \underline{Q}_g^{(n-1)}$$

$$\left(1 + \frac{\tau_g}{2} \underline{A}_g^2\right) \underline{U}_g^{m+\frac{2}{3}} = \underline{U}_g^{m+\frac{1}{3}} + \frac{\tau_g}{2} \underline{A}_g^2 \underline{U}_g^m \quad (16)$$

$$\left(1 + \frac{\tau_g}{2} \underline{A}_g^3\right) \underline{U}_g^{m+1} = \underline{U}_g^{m+\frac{2}{3}} + \frac{\tau_g}{2} \underline{A}_g^3 \underline{U}_g^m$$

mit

$$\underline{\underline{A}}_g = \underline{\underline{A}}_g^1 + \underline{\underline{A}}_g^2 + \underline{\underline{A}}_g^3 = \underline{\underline{L}}_g^{(n-1)}, \quad \underline{\underline{U}}_g^0 = \underline{\underline{\Phi}}_g^{(n-1)}$$

benutzt.

Die Iterationsparameter werden gemäß

$$\tau_g = \frac{2}{\sqrt{\Sigma_g^{\text{rem}} \left( \Sigma_g^{\text{rem}} + \left( \frac{2}{h_0} \right)^2 D_g \right)}} \quad (17)$$

optimiert, wobei  $\Sigma_g^{\text{rem}}$ ,  $D_g$  der mittlere Removalquerschnitt resp. die mittlere Diffusionskonstante in Energiegruppe  $g$  bedeuten und  $h_0$  die kleinste Maschenweite des Diskretisierungsgitters ist.

### 3. ERGEBNISSE

#### 3.1 Testrechnungen

Zur Überprüfung der formalen Richtigkeit des Programmablaufs wurden zunächst verschiedene stationäre Rechnungen in zwei Energiegruppen und kartesischen Koordinaten durchgeführt und mit QUABOX-Resultaten verglichen. Die mit beiden Programmen erzielten Ergebnisse für  $k_{\text{eff}}$  und die Flußverläufe waren identisch, die Rechenzeiten für QUABOX und MULTIPOL etwa gleich.

Ferner wurden die Genauigkeiten der in MULTIPOL implementierten FD- und Q-Approximationen anhand zweier einfacher zweidimensionaler Problemstellungen miteinander verglichen. In beiden Fällen handelte es sich um Viergruppenprobleme, wobei die maximalen Fehler des Flusses jeweils in der vierten thermischen Energiegruppe auftraten. Die erste Anordnung (Bild 1) enthält zwei Materialzonen und stellt einen quadratischen Ausschnitt eines idealisierten Brennelementlagerbeckens dar. Die Kantenlänge des Quadrats beträgt 30 cm, die mittlere thermische Dif-

fusionslänge rund 33 cm, so daß eine genaue Approximation bereits mit der FD-Methode und einer groben Gittereinteilung erwartet werden kann. Die mit Maschenweiten von 1,1, 3,3 und 10 cm durchgeführten Rechnungen bestätigen dies im wesentlichen (Bild 2). Lediglich bei 10 cm Maschenweite liefert die FD-Approximation einen stark abweichenden Flußverlauf, was auf die im Vergleich zur Q-Methode schlechtere Wiedergabe der Randbedingungen ( $\frac{\partial \Phi}{\partial n} = 0$ ) zurückzuführen ist. Die Ergebnisse für die Eigenwerte  $k_{\text{eff}}$  zeigen die gleiche Tendenz: Lediglich der Wert der FD-Approximation mit 10 cm Maschenweite weicht stärker von denen der anderen Rechnungen ab (Tabelle 1). Beim zweiten Testproblem, dem OBLONG-Problem /5/ (Bild 3), spielt demgegenüber der Einfluß der Randbedingungen nur eine untergeordnete Rolle. Bei einer mittleren thermischen Diffusionslänge von 2,8 cm betragen die Kantenlängen des zugrunde gelegten Rechteckgebietes 60 bzw. 27 Diffusionslängen, so daß hier ein ernsthafter Vergleich zwischen den beiden Approximationsverfahren möglich ist. In Bild 4 sind die mit Maschenweiten von  $1 \frac{2}{3}$ , 5 und 15 cm berechneten Flußverläufe in der vierten Energiegruppe dargestellt. In Bild 5 ist der maximale relative Fehler, welcher im Reflektorpeak auftritt, in logarithmischem Maßstab gegen die Maschenweite aufgetragen. Es ergibt sich lineare Konvergenzordnung für die FD-, quadratische für die Q-Approximation. Eine geforderte Genauigkeit von 3 % wird demnach mit der Q-Methode schon bei Maschenweiten von 9 cm erreicht, während bei FD-Approximation hierzu 2,2 cm erforderlich sind.

### 3.2 Benchmark-Rechnungen

Eine Reihe realistischer Benchmark-Probleme in zwei und drei Raumdimensionen und vier oder mehr Energiegruppen wurde gerechnet. Um einen möglichst großen Überblick über Anwendungsbereich und Leistungsfähigkeit des Programms zu erhalten, wurden dabei sowohl schnelle wie auch thermische Anordnungen betrachtet: die Kernentwürfe Na-2 und SNR-300/Mk-Ia aus dem Bereich der Schnellen Natriumgekühlten Brüter sowie der Erstkern des THTR-300. Dabei sollte insbesondere beim THTR geklärt werden, ob und ge-

gebenenfalls unter welchen zusätzlichen Voraussetzungen dreidimensionale Vollkernrechnungen möglich sind. Die wichtigsten Ergebnisse, einschließlich der CPU-Rechenzeiten auf der IBM 360/91 des IPP-Garching und der jeweils bis zur Konvergenz benötigten Anzahl äußerer Iterationen, sind in Tabelle 2 zusammengestellt. Konvergenzkriterium war  $\Delta k_{\text{eff}}/k_{\text{eff}} \leq 10^{-4}$  für dreidimensionale und  $\leq 10^{-5}$  für zweidimensionale Probleme.

Für den Na-2 wurden zweidimensionale Rechnungen in r-z-Koordinaten und 8 Energiegruppen durchgeführt. Der mit Q-Approximation bei 5 cm Maschenweite berechnete Verlauf des Flusses und der Leistungsdichte längs ausgewählter Traversen ist in den Bildern 6 bis 23 dargestellt. Eine Erhöhung der Maschenweite in z-Richtung auf 10 cm ergab keine wesentlichen Änderungen von  $k_{\text{eff}}$  oder der Flußverteilung. Dagegen liegt der Eigenwert bei FD-Approximation und  $\Delta z = 10$  cm um 2 % zu hoch.

Die Ergebnisse für den Na-2 ließen vermuten, daß die Q-Approximation unter dem Gesichtspunkt der Genauigkeit größere Maschenweiten zuließe als von der geometrischen Anordnung der Materialzonen her möglich ist. Um die Genauigkeit bei größeren Maschenweiten abschätzen zu können, wurden im Fall des SNR-300/Mk-Ia und des THTR-300 zum Teil gegenüber dem tatsächlichen Aufbau leicht modifizierte Geometrien betrachtet.

Die solchermaßen vereinfachte Geometrie des Viertelkernes Mk-Ia ist in Bild 24 im senk- und waagerechten Querschnitt (Schnittlinie a - b) dargestellt. Die in Wirklichkeit hexagonalen Brennelemente wurden darin durch Prismen quadratischen Querschnitts (11 cm x 11 cm) ersetzt und räumlich leicht verschoben, so daß Maschenweiten von maximal 11 cm in x- und y-Richtung und 40 cm in z-Richtung möglich sind. Mit dieser Zonenanordnung wurden dreidimensionale Rechnungen in vier Energiegruppen für Maschenweiten von 11 x 11 x 20 und 5,5 x 5,5 x 10 cm durchgeführt. In den Bildern 25 bis 36 sind die Flußverläufe längs ausgewählter Traversen dargestellt. Bei Q-Approximation ergab die Halbierung der Maschenweiten lediglich eine geringfügige Änderung im Eigenwert von 0,2 %, während die entsprechende Änderung bei der FD-

Methode immerhin 1,5 % beträgt. Versuche, mit Q-Approximation und 40 cm Maschenweite in z-Richtung zu rechnen, schlugen fehl. Es ergaben sich negative Flußwerte und Divergenz der Iterationen.

Für den THTR-300 wurden zweidimensionale Rechnungen in r-z-Koordinaten und vier Energiegruppen durchgeführt. Bild 37 gibt die zugrunde gelegte Zonenstruktur wieder. Offensichtlich erschweren die Anordnung des Reflektorstabes (sein Durchmesser beträgt etwa 10 cm) und des Reflektors 2 sowie die Abschrägung des Bodenreflektors im unteren Bereich der Kugelschüttung die Verwendung großer Maschenweiten. In der angegebenen Geometrie wurde daher lediglich eine einzige Rechnung mit Q-Approximation und Maschenweiten von 10 cm in r- und 15 cm in z-Richtung durchgeführt. Für Grobmaschenrechnungen wurde der Reflektorstab mit dem umgebenden Reflektor 4 und Reflektor 2 mit Reflektor 3 volumenanteilmäßig homogenisiert, die schräge Trennlinie zwischen Bodenreflektor und Kugelschüttung durch eine Stufenfunktion ersetzt. Die Bilder 38 bis 45 geben die für die in dieser Weise vereinfachte Zonenstruktur mit der Q-Approximation bei 15 cm Maschenweite errechneten Flußverläufe längs ausgewählter Traversen wieder. Auf der das Flußmaximum in Gruppe 4 durchlaufenden Traverse  $z = 193,3$  cm wurden ausführliche Genauigkeitsvergleiche angestellt (Bild 54 und 55). Für die Q-Approximation ergibt sich bei Verdopplung der Maschenweite von 15 auf 30 cm eine maximale Flußänderung von 1,6 %. Geht man von der Q-Lösung mit 15 cm als Referenzlösung aus, so erhält man für die FD-Methode einen maximalen relativen Fehler von 2,6 % bei 15 cm und 6 % bei 30 cm Maschenweite. Da die mittlere Diffusionslänge in Energiegruppe 4 etwa 12 cm beträgt, läßt sich dies auch in der Weise formulieren, daß die Q-Approximation bei einer Maschenweite von 2,5 Diffusionslängen weniger als 2 % Fehler im Fluß erzeugt. Dies entspricht im wesentlichen den Ergebnissen beim OBLONG-Problem, wenn man den in Bild 5 gegebenen Zusammenhang auf die dort vorliegende Diffusionslänge von 2,8 cm bezieht.

#### 4. PROGRAMMEIGENSCHAFTEN

Als Konsequenz der zahlreichen Test- und Benchmark-Rechnungen ergibt sich für MULTIPOL ein Rechenzeitbedarf von etwa

$$0,25 \cdot 10^{-3} \gamma pGN \text{ sec (CPU IBM 360/91)}$$

pro äußere Iteration, wobei p die Zahl der Raumdimensionen, G die der Energiegruppen und N die der Raungitterpunkte bedeuten. Der Faktor  $\gamma$  ist 1 im Fall der FD- und 1,4 im Fall der Q-Approximation. Das Programm belegt als Phase knapp 20 000 Worte Kernspeicher und benötigt zusätzlich  $(4 \cdot G + 14,5) \cdot N$  Worte für variabel dimensionierte Felder, wobei der letztere Bedarf unter Verwendung einer rechenzeitintensiveren Version stark reduziert werden kann.

#### 5. DISKUSSION

Die Anwendung von MULTIPOL zeigt, daß die Q-Approximation der FD-Methode auch für die Lösung der Mehrgruppen-Diffusionsgleichung überlegen ist. Bei der Quantifizierung des Vorteils hat man jedoch auf die Genauigkeitsanforderungen zu achten, da die Konvergenzordnungen der beiden Verfahren unterschiedlich sind. Legt man z.B. eine angestrebte Genauigkeit im Flußverlauf von (lokal) drei bis fünf Prozent zugrunde, so kann man bei Q-Approximation drei- bis viermal größere Maschenweiten verwenden als bei der FD-Methode. Dabei kann angenommen werden, daß sich das in MULTIPOL benutzte FD-Verfahren nicht wesentlich von den in anderen Diffusionscodes implementierten unterscheidet.

Die FD-Version von MULTIPOL benötigt auf der IBM 360/91 pro Iterationsschritt etwa ebensoviel Rechenzeit wie der FD-Code CITATION. Dies bedeutet, daß MULTIPOL mit quadratischer Approximation bei einer lokalen Genauigkeit von drei bis fünf Prozent um etwa einen Faktor 30 im 3D-Fall bzw. einen Faktor 10 im 2D-Fall ökonomischer ist als CITATION. Darüber hinaus ergibt sich bei sehr großen Problemen ein weiterer Vorteil zugunsten

des Grobgitterverfahrens, da die Anzahl der notwendigen Iterationen mit der Zahl der Gitterpunkte ansteigt, letztere aber beim Grobgitterverfahren erheblich kleiner ist.

Teilweise scheint die Effizienz dieses Verfahrens dadurch in Frage gestellt, daß - wie dies bei den beschriebenen Benchmark-Problemen der Fall war - die nach der gewöhnlichen Homogenisierung verbleibenden Heterogenitäten kleinere Ausmaße haben als die zum Erreichen einer bestimmten Genauigkeit maximal mögliche Maschengröße im Diskretisierungsgitter. Hier ist jedoch zu bedenken, daß die Q-Approximation den Fluß nicht nur punktweise, wie die FD-Verfahren, sondern, genau wie die Finite-Elemente-Verfahren, als im ganzen Raumbereich definierte Funktion liefert. Aus diesem Grunde ist das Zusammenfallen von homogenisierten Zonen und den Maschen (Boxen) keineswegs notwendig. Vielmehr genügt es, die Wirkungsquerschnitte als Ortsfunktion innerhalb jeder Box zu kennen, um die in Gleichung (5) vorkommenden Integrale ausführen zu können.

Mit Hilfe der beim THTR-300 gewonnenen Erfahrungen läßt sich der Aufwand für dreidimensionale Vollkernrechnungen mit der Q-Version von MULTIPOL abschätzen. Legt man Maschenweiten von 30 cm, also einen maximalen lokalen Fehler der Flußverteilung von 2 % zugrunde, so sind bei einem Volumen des THTR-Cores von 127 m<sup>3</sup> rund 5 000 Raumgitterpunkte und pro äußere Iteration 7 sec CPU-Zeit (IBM 360/91) erforderlich. Begnügt man sich mit 5 % Genauigkeit, so könnten Maschenweiten von 50 cm verwendet und die Anzahl der Gitterpunkte auf 1 000 gesenkt werden. Voraussetzung für die Anwendung solch großer Maschen wäre allerdings die Implementierung des im letzten Absatz erwähnten Integrationsverfahrens zur Behandlung der Heterogenitäten innerhalb einer Masche.

6. LITERATUR

- /1/ Fröhlich, R.:  
Current Problems in Multidimensional Reactor Calculations  
in: Proceedings of the 1973 Conference Mathematical Models  
and Computational Techniques for Analysis of Nuclear Sys-  
tems"  
CONF-730414, VII 1-66 (1973)
- /2/ Birkhofer, A., und W. Werner:  
Efficiency of Various Methods for the Analysis of Space  
Time Kinetics  
Proc. of ANS Topical Meeting on Mathematical Models and  
Computational Techniques for Analysis of Nuclear Systems  
CONF-730414, IX 31-41 (1973)
- /3/ Birkhofer, A., S. Langenbuch und W. Werner:  
Coarse-Mesh Method for Space-Time-Kinetics  
Trans. Am. Nuc. Soc., 18, 153 (1974)
- /4/ Janenko, N.N.:  
Die Zwischenschrittmethode zur Lösung mehrdimensionaler  
Probleme der mathematischen Physik  
Lecture Notes in Mathematics, Vol. 91, Springer, Berlin  
(1969)
- /5/ Wight, A.L., K.F. Hansen und D.R. Ferguson:  
Application of Alternating-Direction Implicit Method to  
the Space-Dependent Kinetics Equations  
Nucl. Sci. Eng. 44, 239 (1971)

7. BILDER

- Bild 1: Geometrie des Lagerbeckenproblems
- Bild 2: Vergleich von Lösungen für den Fluß in Energiegruppe 4 längs Schnittlinie a - b beim Lagerbeckenproblem
- Bild 3: Geometrie des OBLONG-Problems
- Bild 4: Vergleich von Lösungen für den Fluß in Energiegruppe 4 längs Schnittlinie a - b beim OBLONG-Problem
- Bild 5: Maximaler relativer Fehler des Flusses in Energiegruppe 4 beim OBLONG-Problem in Abhängigkeit von der Maschenweite
- Bild 6: Fluß in Gruppe 1, Na-2, radiale Traversen
- Bild 7: Fluß in Gruppe 2, Na-2, radiale Traversen
- Bild 8: Fluß in Gruppe 3, Na-2, radiale Traversen
- Bild 9: Fluß in Gruppe 4, Na-2, radiale Traversen
- Bild 10: Fluß in Gruppe 5, Na-2, radiale Traversen
- Bild 11: Fluß in Gruppe 6, Na-2, radiale Traversen
- Bild 12: Fluß in Gruppe 7, Na-2, radiale Traversen
- Bild 13: Fluß in Gruppe 8, Na-2, radiale Traversen
- Bild 14: Leistungsdichte auf radialer Traverse, Na-2
- Bild 15: Fluß in Gruppe 1, Na-2, axiale Traversen
- Bild 16: Fluß in Gruppe 2, Na-2, axiale Traversen
- Bild 17: Fluß in Gruppe 3, Na-2, axiale Traversen
- Bild 18: Fluß in Gruppe 4, Na-2, axiale Traversen
- Bild 19: Fluß in Gruppe 5, Na-2, axiale Traversen
- Bild 20: Fluß in Gruppe 6, Na-2, axiale Traversen
- Bild 21: Fluß in Gruppe 7, Na-2, axiale Traversen
- Bild 22: Fluß in Gruppe 8, Na-2, axiale Traversen
- Bild 23: Leistungsdichte auf axialer Traverse, Na-2
- Bild 24: Vereinfachte Geometrie des Mk-Ia
- Bild 25: Fluß in Gruppe 1, Mk-Ia, x-Traversen

- Bild 26: Fluß in Gruppe 2, Mk-Ia, x-Traversen
- Bild 27: Fluß in Gruppe 3, Mk-Ia, x-Traversen
- Bild 28: Fluß in Gruppe 4, Mk-Ia, x-Traversen
- Bild 29: Fluß in Gruppe 1, Mk-Ia, y-Traversen
- Bild 30: Fluß in Gruppe 2, Mk-Ia, y-Traversen
- Bild 31: Fluß in Gruppe 3, Mk-Ia, y-Traversen
- Bild 32: Fluß in Gruppe 4, Mk-Ia, y-Traversen
- Bild 33: Fluß in Gruppe 1, Mk-Ia, z-Traversen
- Bild 34: Fluß in Gruppe 2, Mk-Ia, z-Traversen
- Bild 35: Fluß in Gruppe 3, Mk-Ia, z-Traversen
- Bild 36: Fluß in Gruppe 4, Mk-Ia, z-Traversen
- Bild 37: Zweidimensionale Zoneneinteilung des THTR-300
- Bild 38: Fluß in Gruppe 1, THTR-300, radiale Traversen
- Bild 39: Fluß in Gruppe 2, THTR-300, radiale Traversen
- Bild 40: Fluß in Gruppe 3, THTR-300, radiale Traversen
- Bild 41: Fluß in Gruppe 4, THTR-300, radiale Traversen
- Bild 42: Fluß in Gruppe 1, THTR-300, axiale Traversen
- Bild 43: Fluß in Gruppe 2, THTR-300, axiale Traversen
- Bild 44: Fluß in Gruppe 3, THTR-300, axiale Traversen
- Bild 45: Fluß in Gruppe 4, THTR-300, axiale Traversen
- Bild 46: THTR-300 in vereinfachter Geometrie, Fluß in Gruppe 4 längs der Traverse  $z = 193,3$  cm
- Bild 47: THTR-300 in vereinfachter Geometrie, Leistungsdichte längs der Traverse  $z = 193,3$  cm, berechnet mit 30 cm Maschenweite

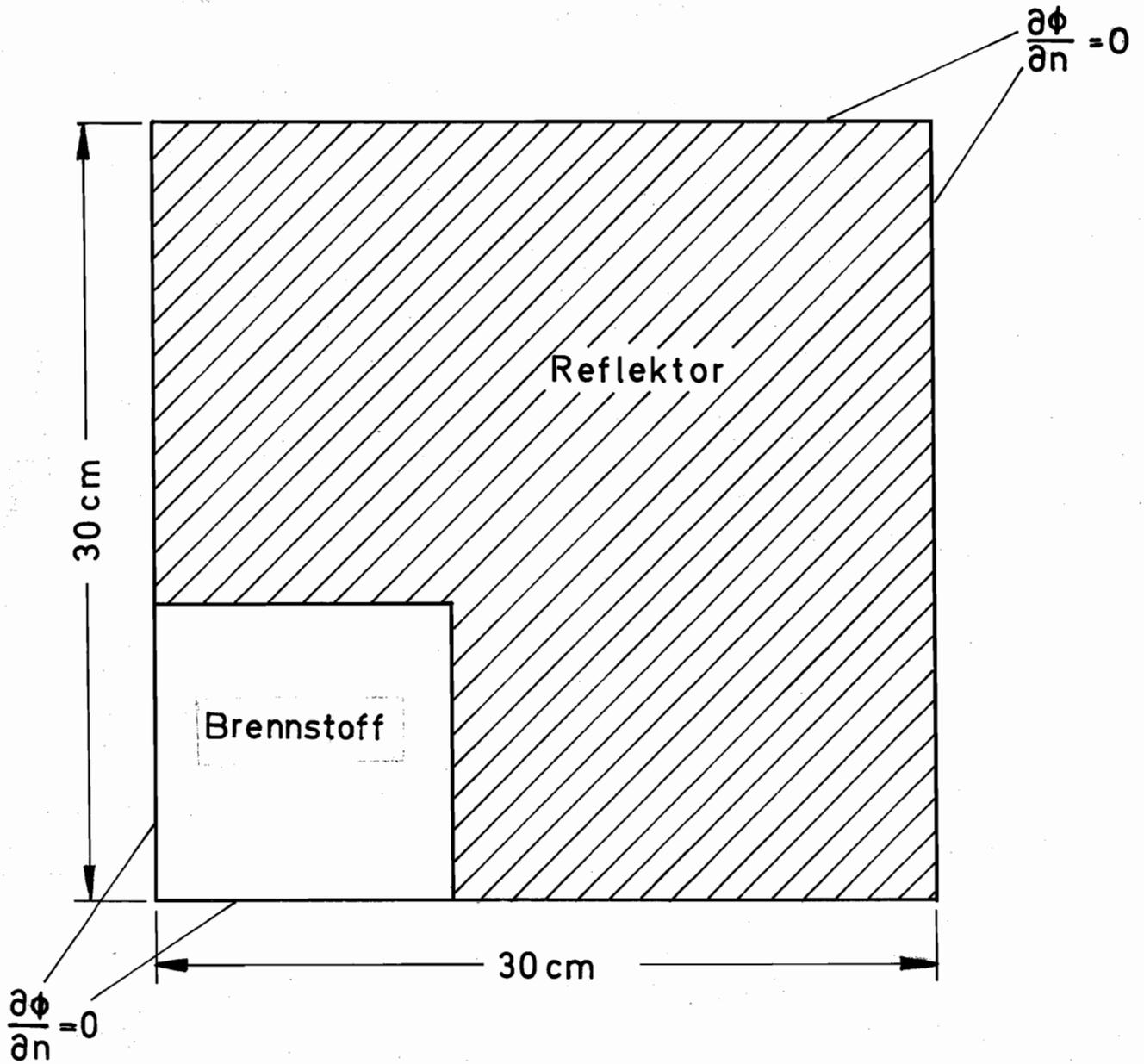


Bild 1: Geometrie des Lagerbeckenproblems

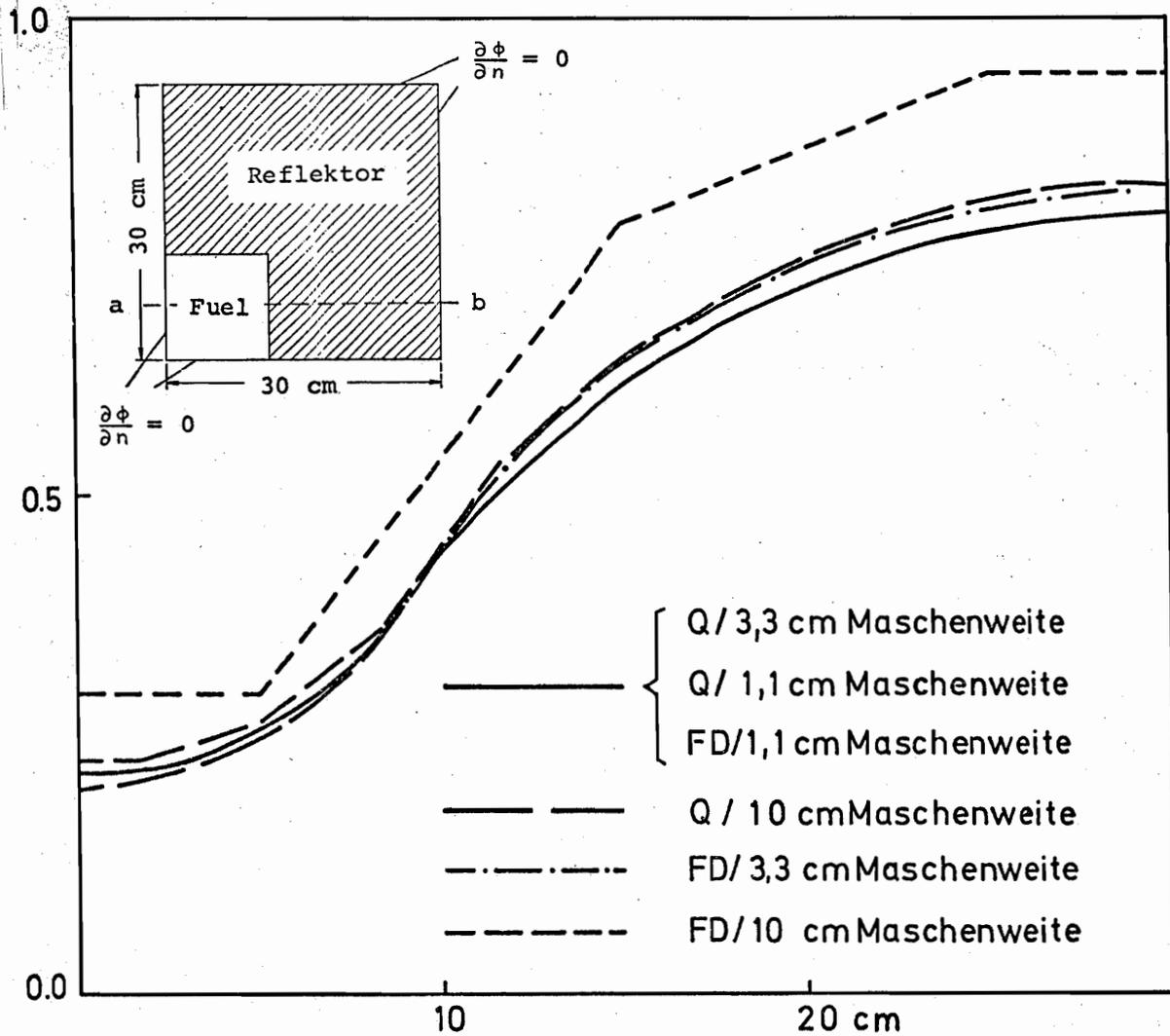


Bild 2: Vergleich von Lösungen für den Fluß in Energiegruppe 4 längs Schnittlinie a - b beim Lagerbeckenproblem

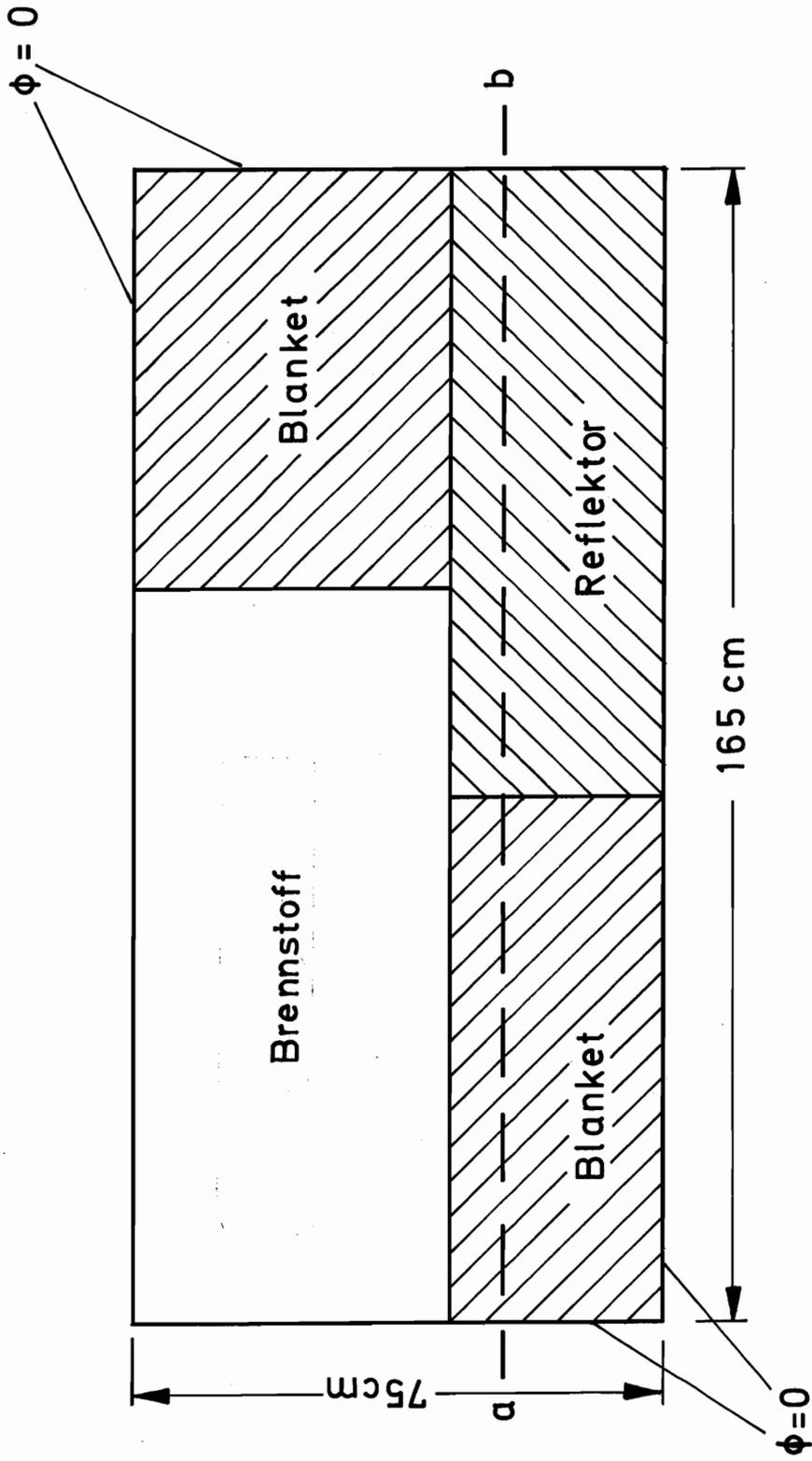


Bild 3: Geometrie des OBLONG-Problems

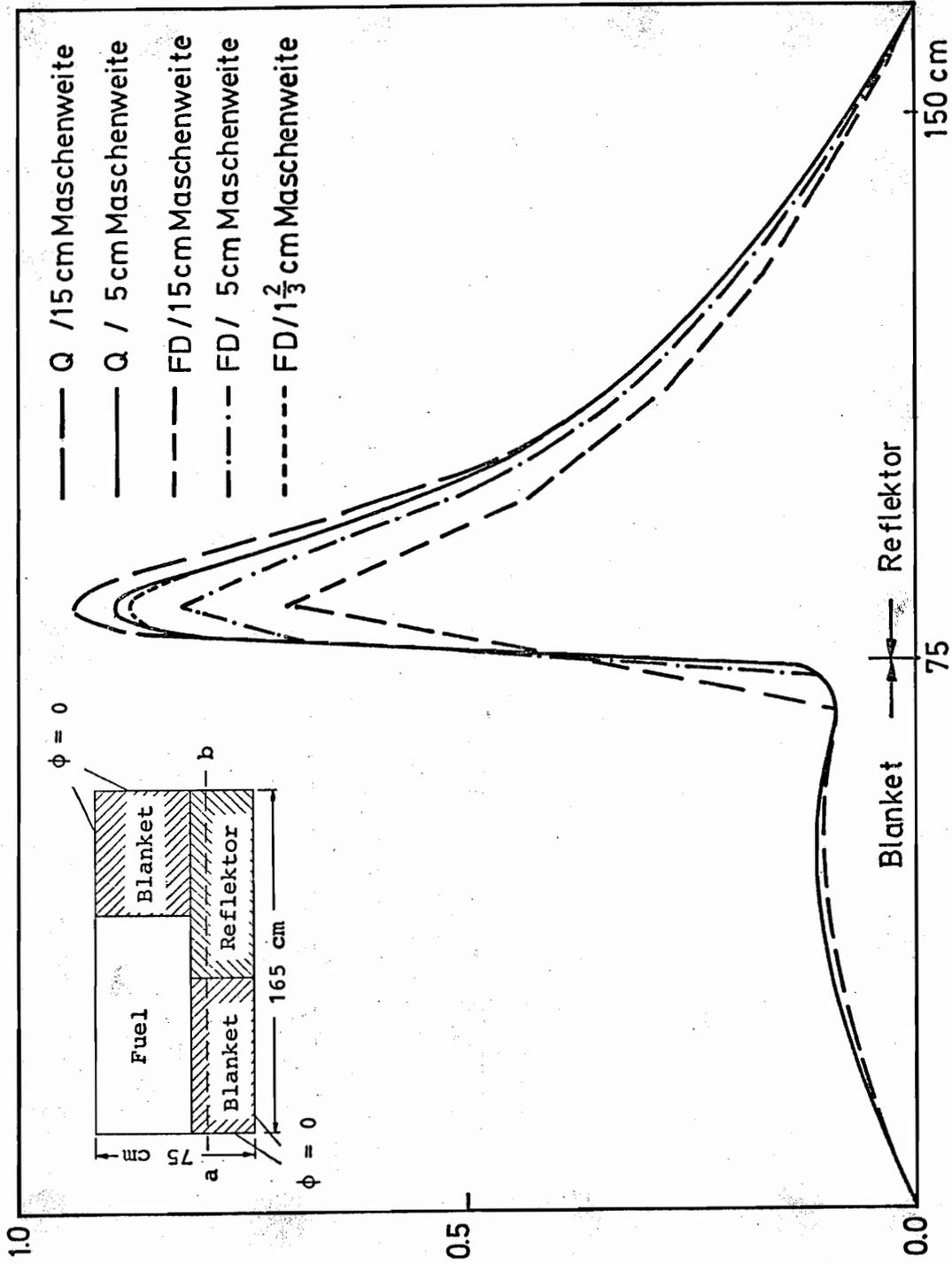


Bild 4: Vergleich von Lösungen für den Fluß in Energiegruppe 4 längs Schnittlinie a - b beim OBLONG-Problem

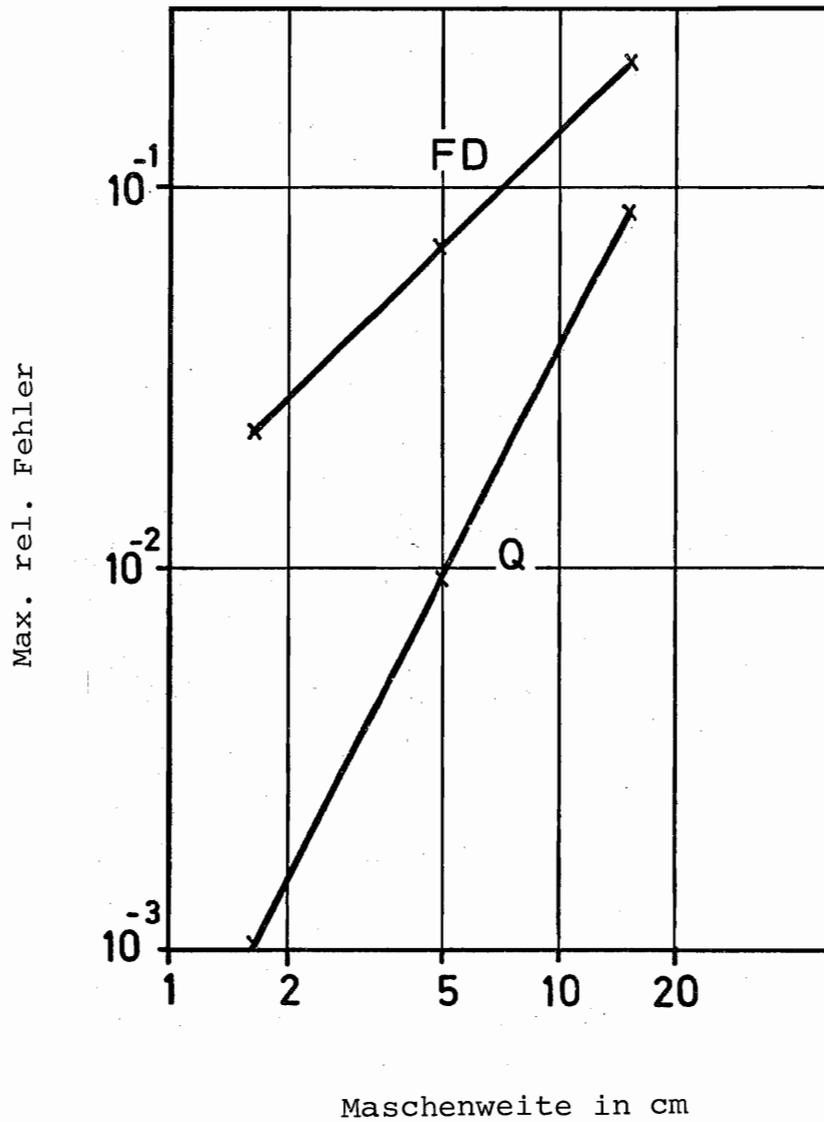


Bild 5: Maximaler relativer Fehler des Flusses in Energiegruppe 4 beim OBLONG-Problem in Abhängigkeit von der Maschenweite

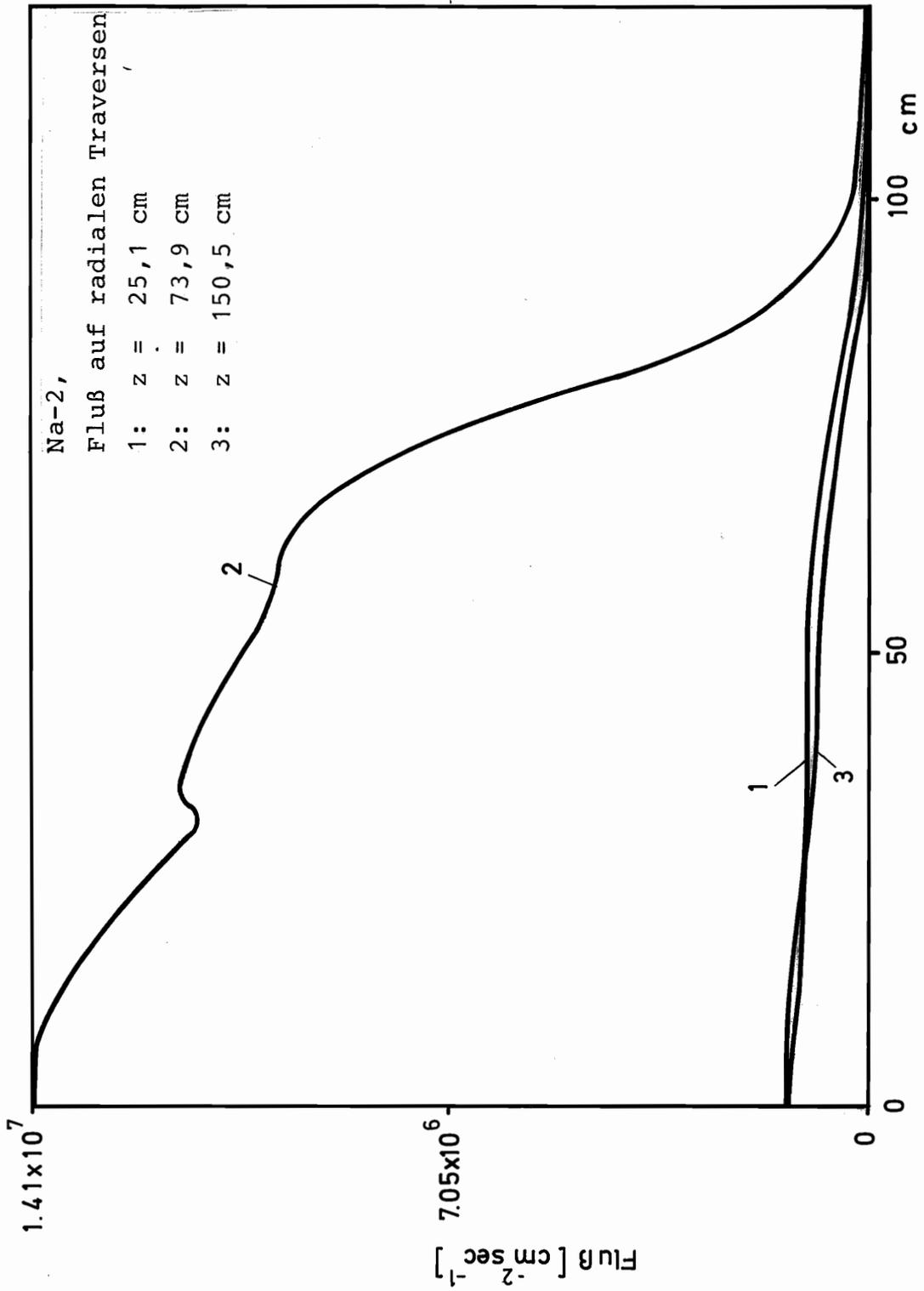


Bild 6: Fluß in Gruppe 1, Na-2, radiale Traversen

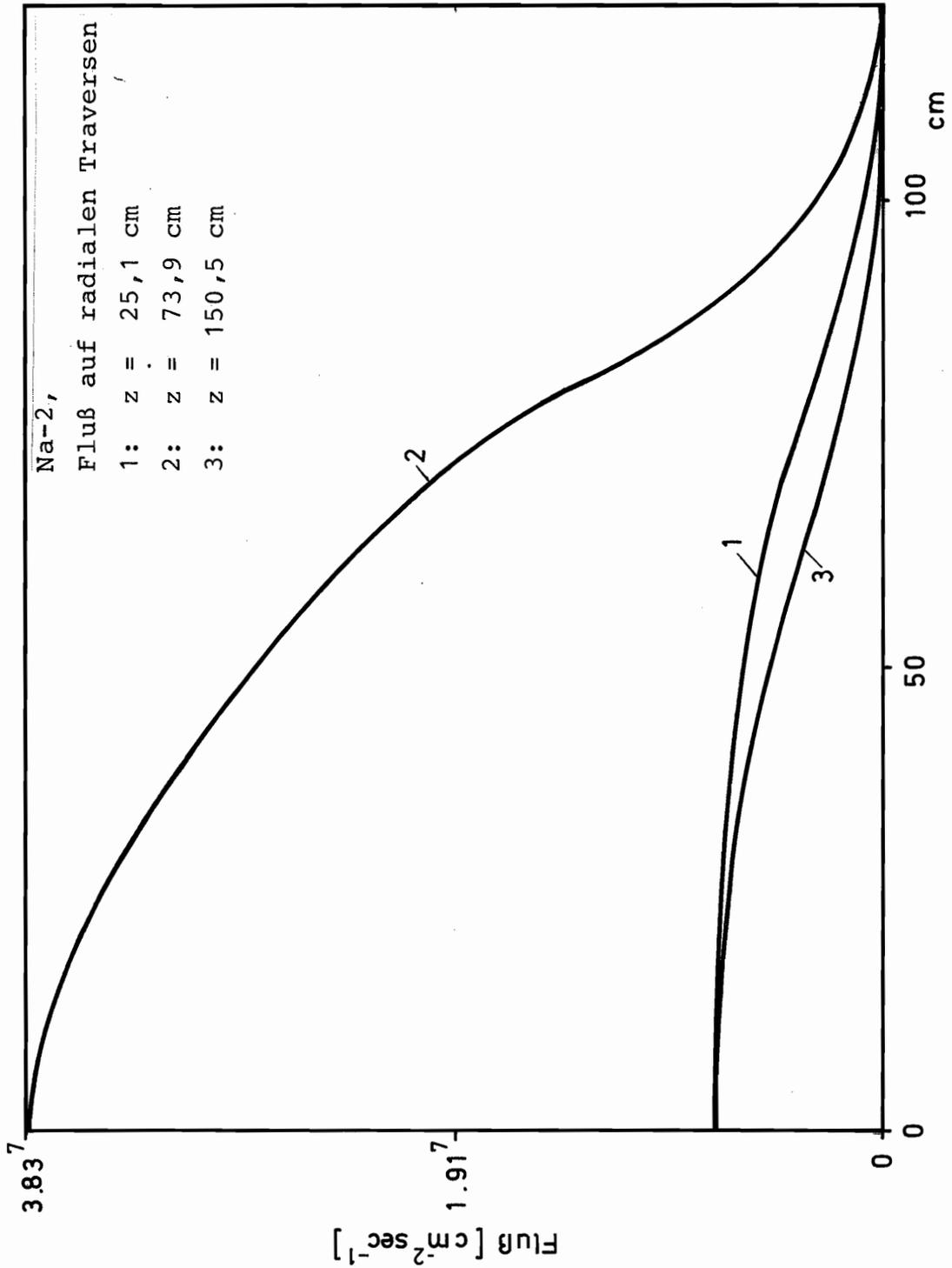


Bild 7: Fluß in Gruppe 2, Na-2, radiale Traversen

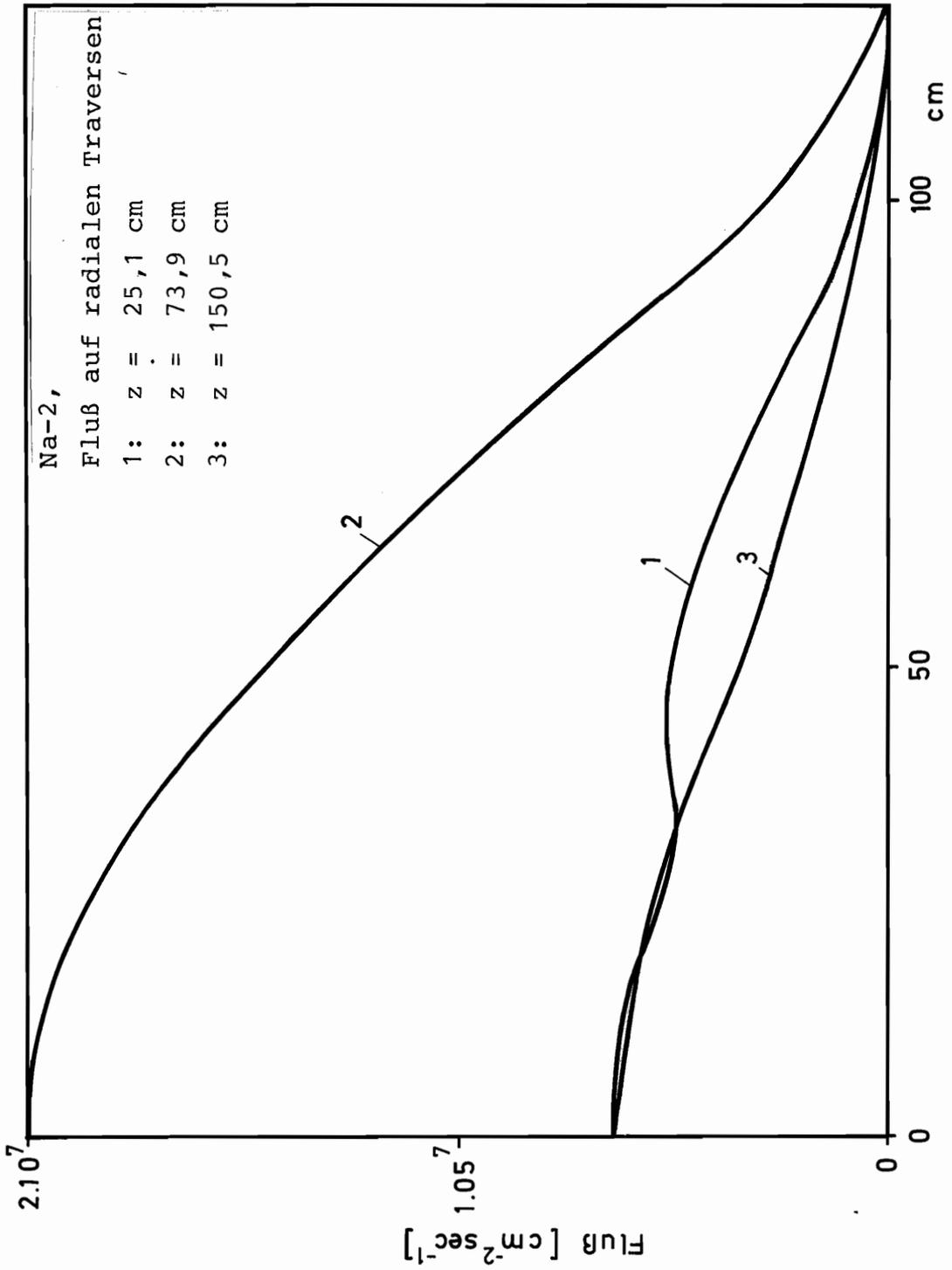


Bild 8: Fluß in Gruppe 3, Na-2, radiale Traversen

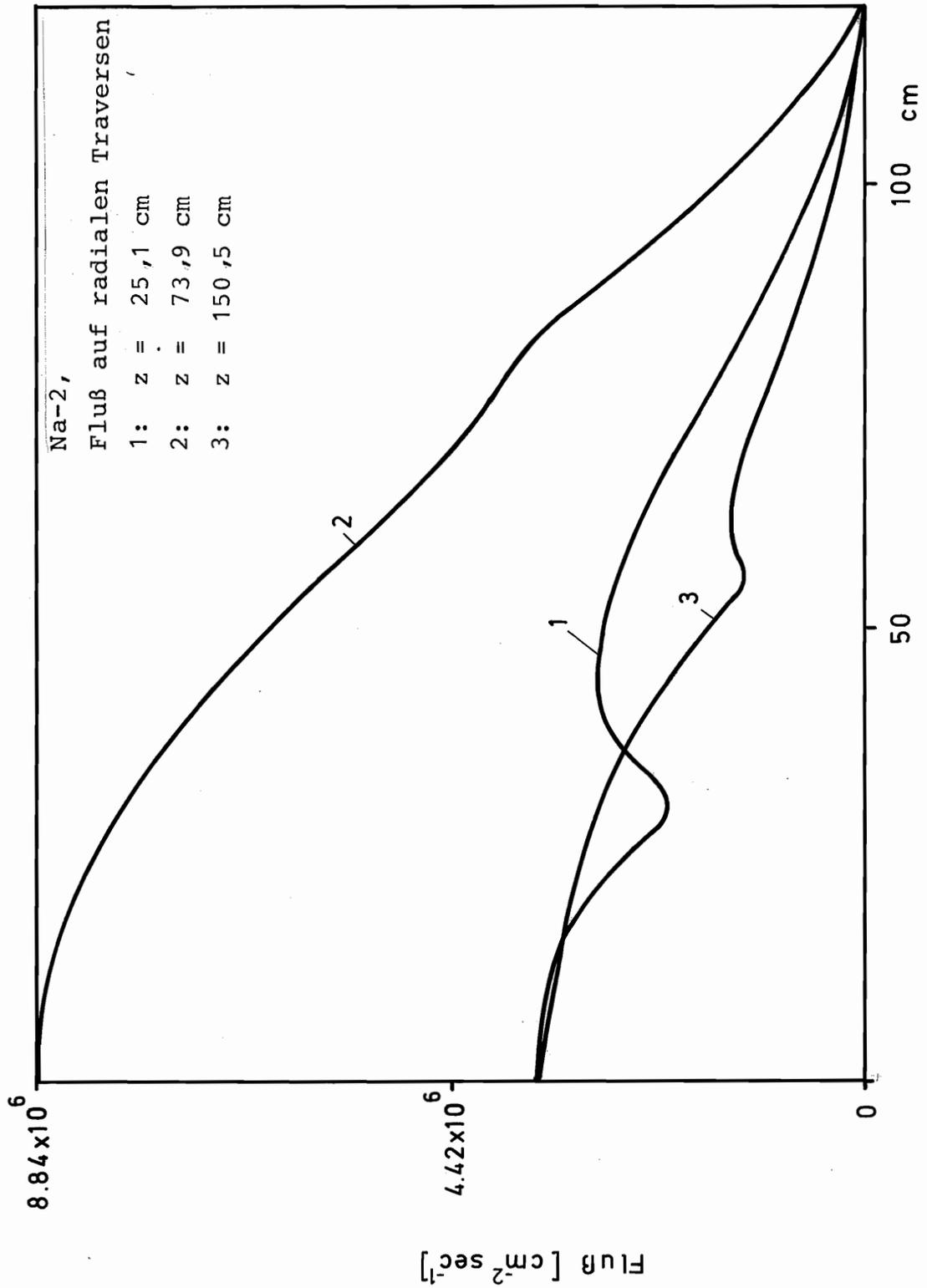


Bild 9: Fluß in Gruppe 4, Na-2, radiale Traversen

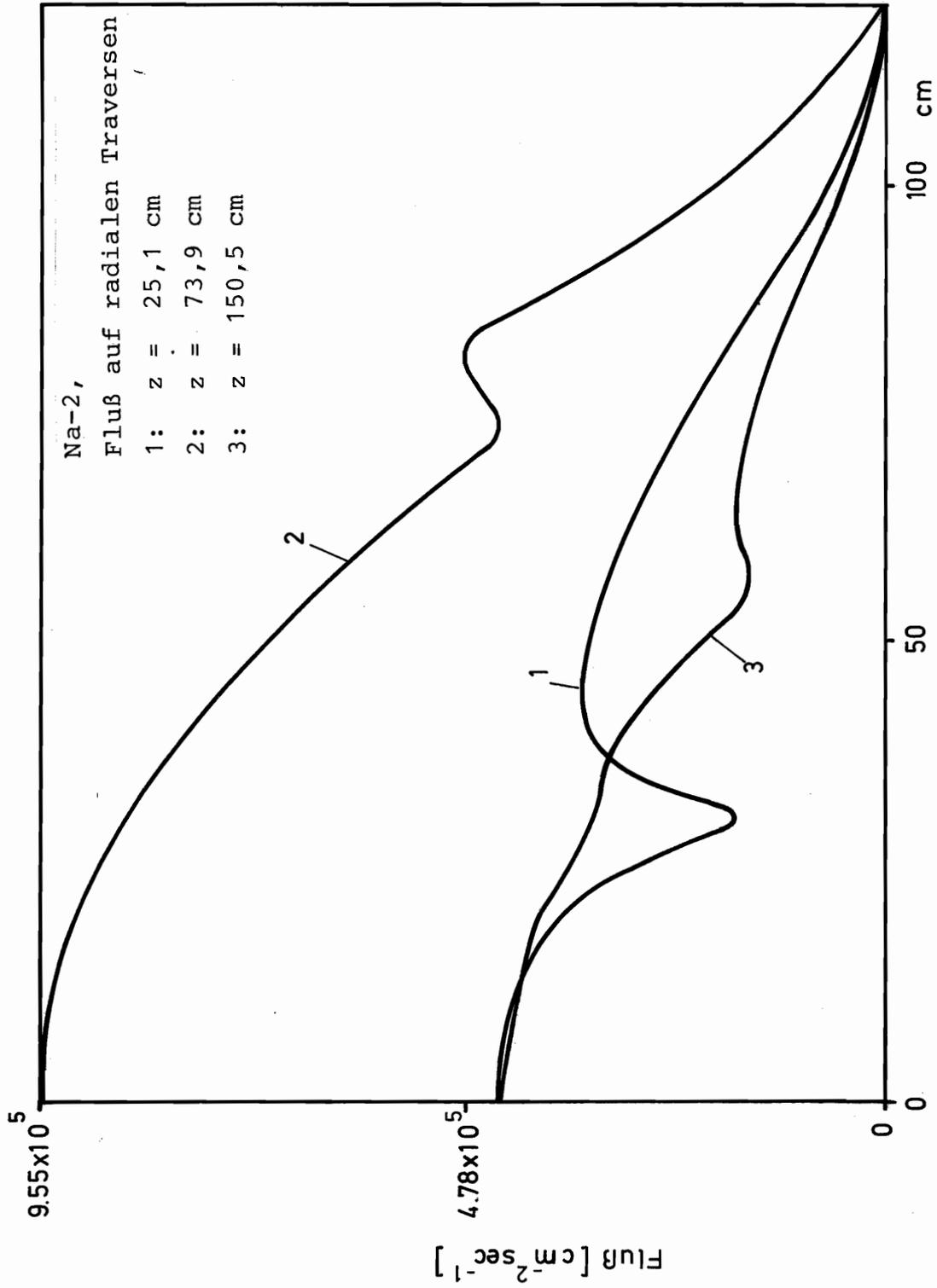


Bild 10: Fluß in Gruppe 5, Na-2, radiale Traversen

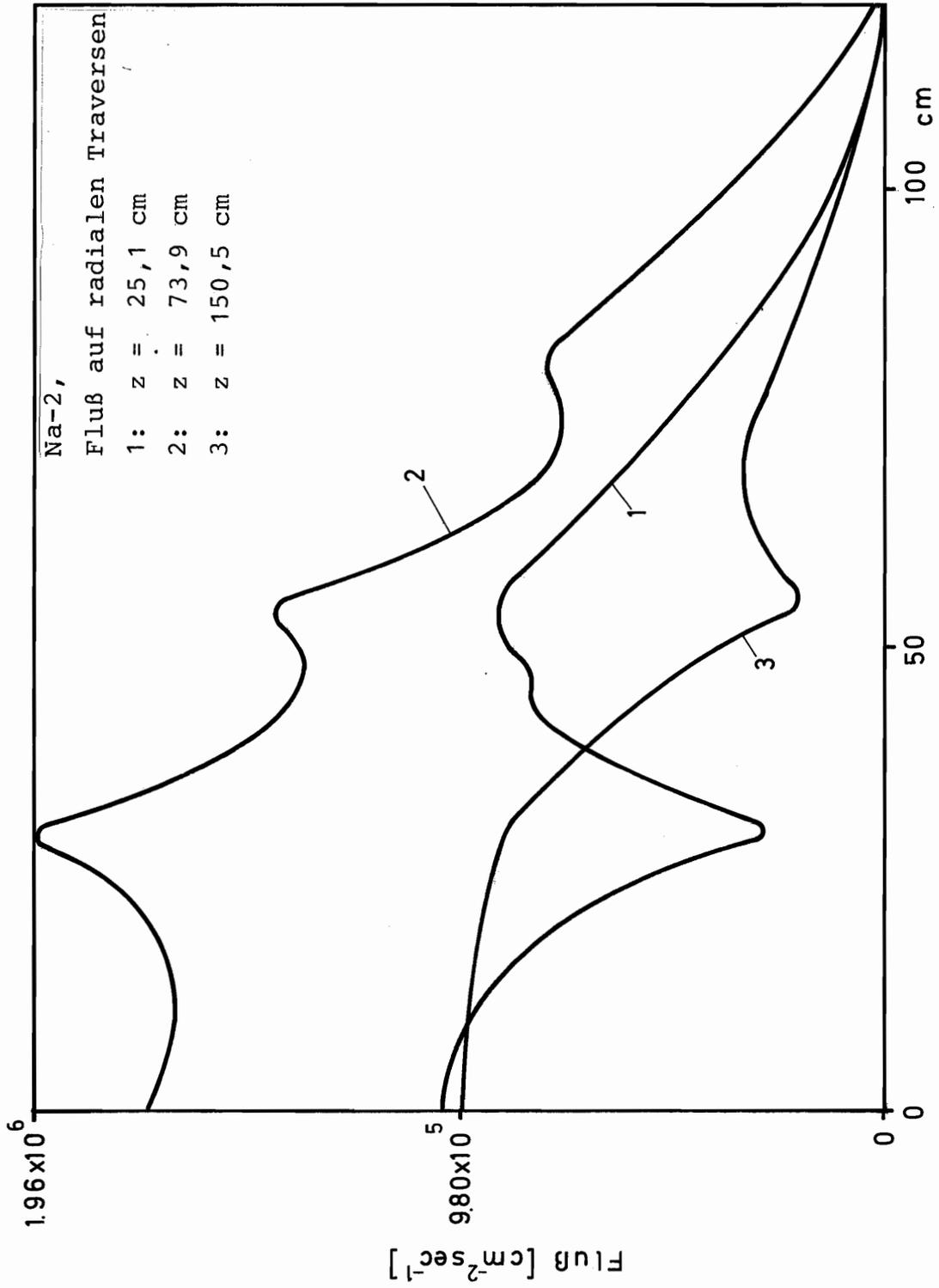


Bild 11: Fluß in Gruppe 6, Na-2, radiale Traversen

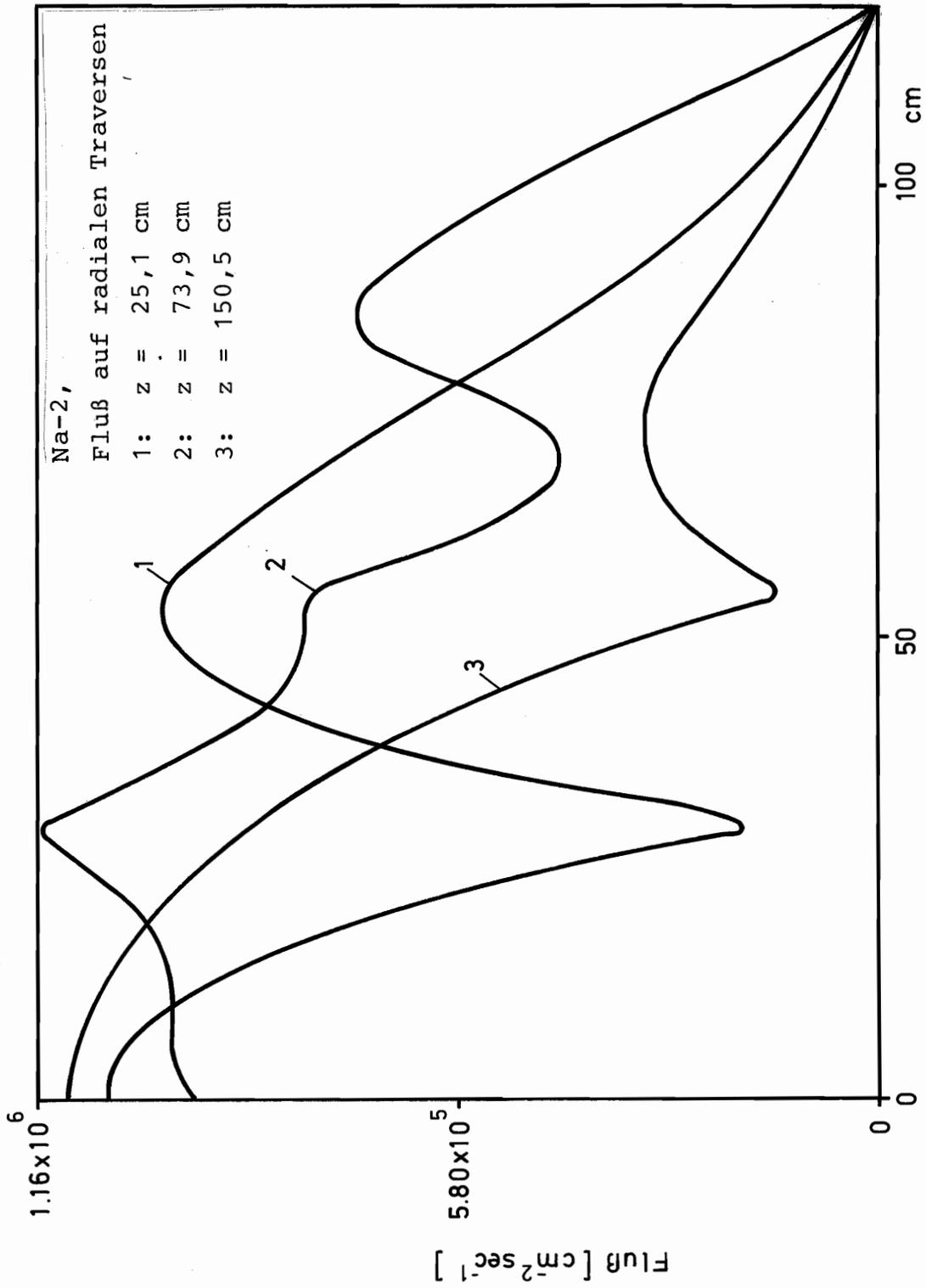


Bild 12: Fluß in Gruppe 7, Na-2, radiale Traversen

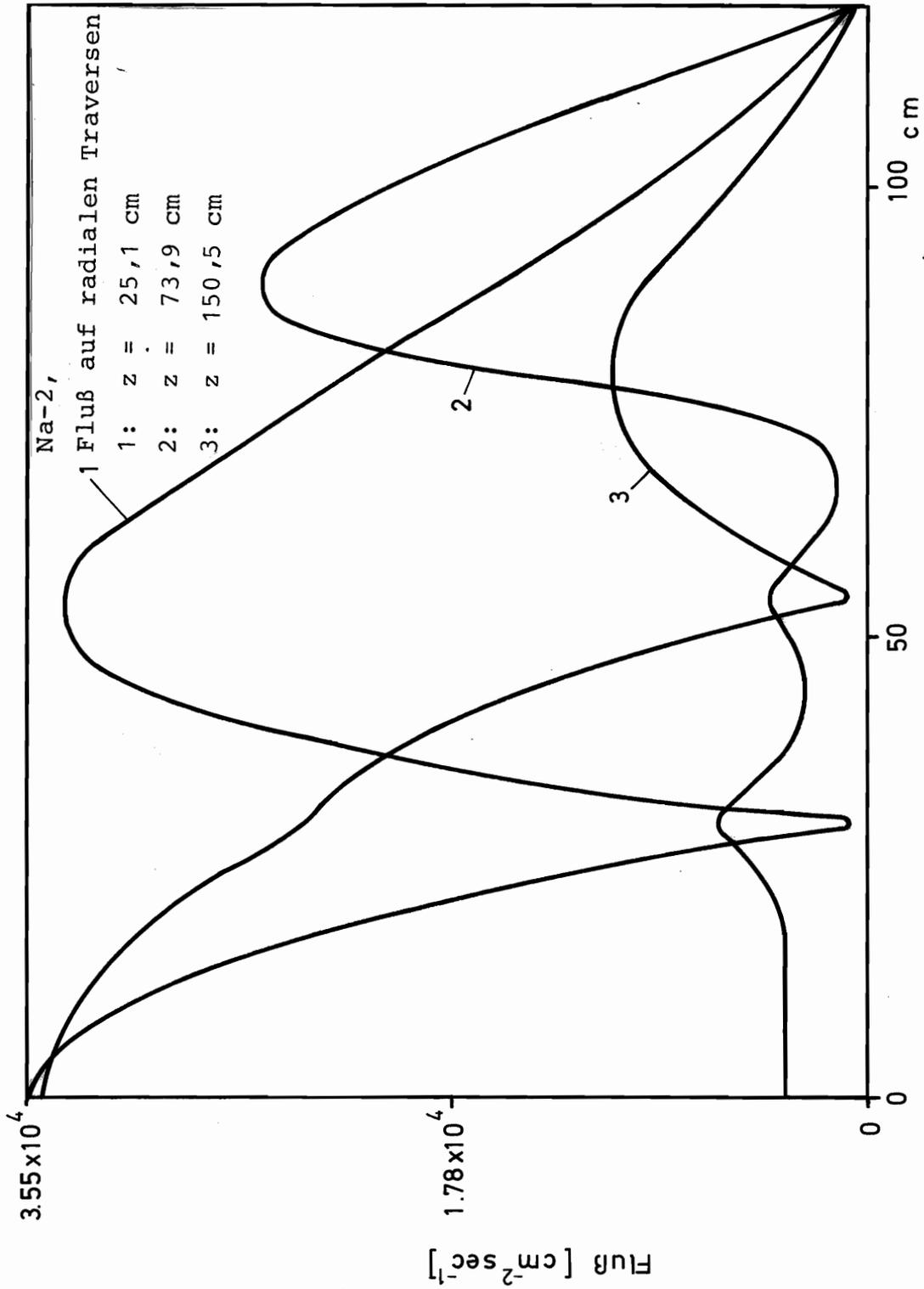


Bild 13: Fluß in Gruppe 8, Na-2, radiale Traversen

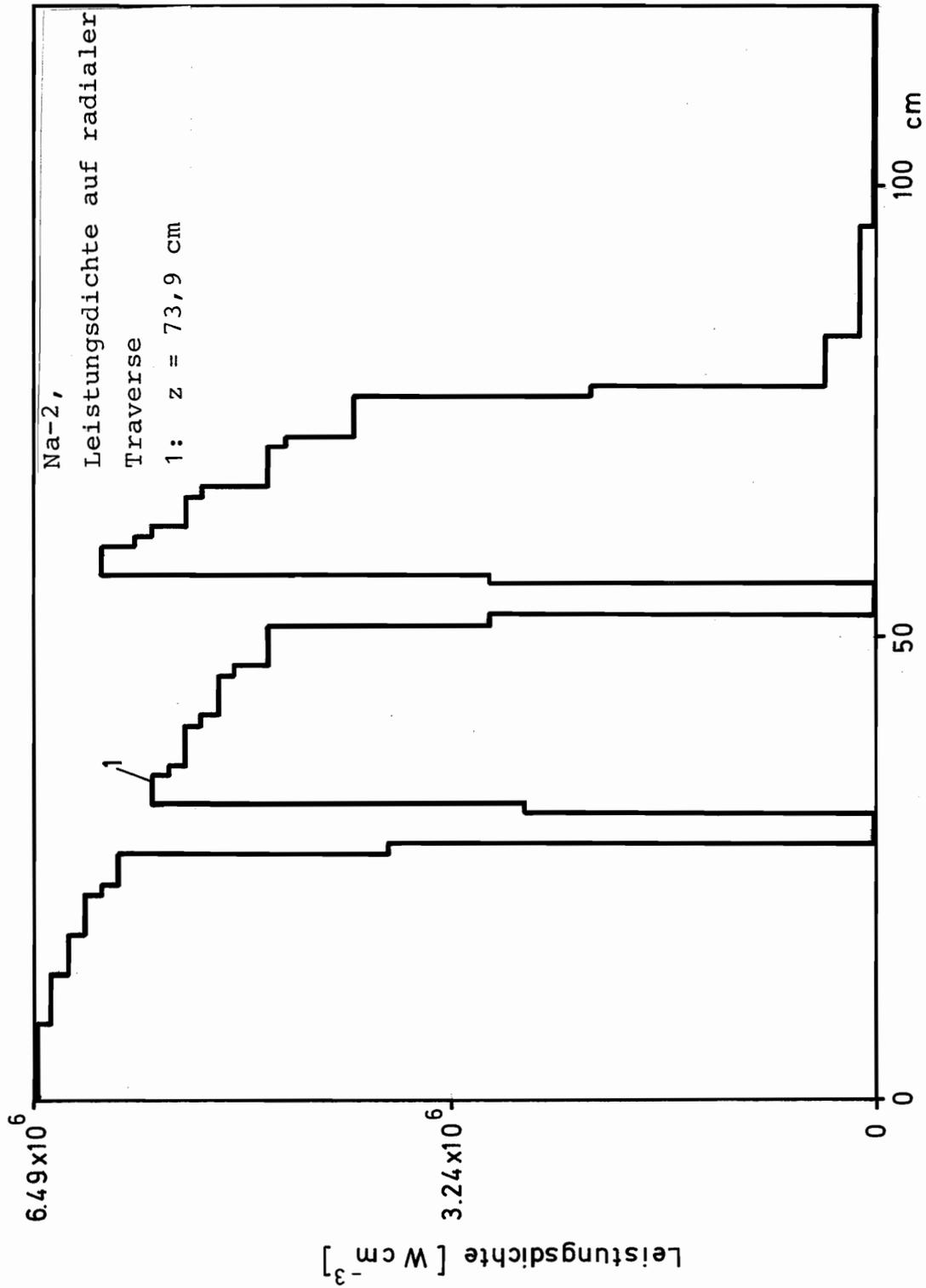


Bild 14: Leistungsdichte auf radialer Traverse, Na-2

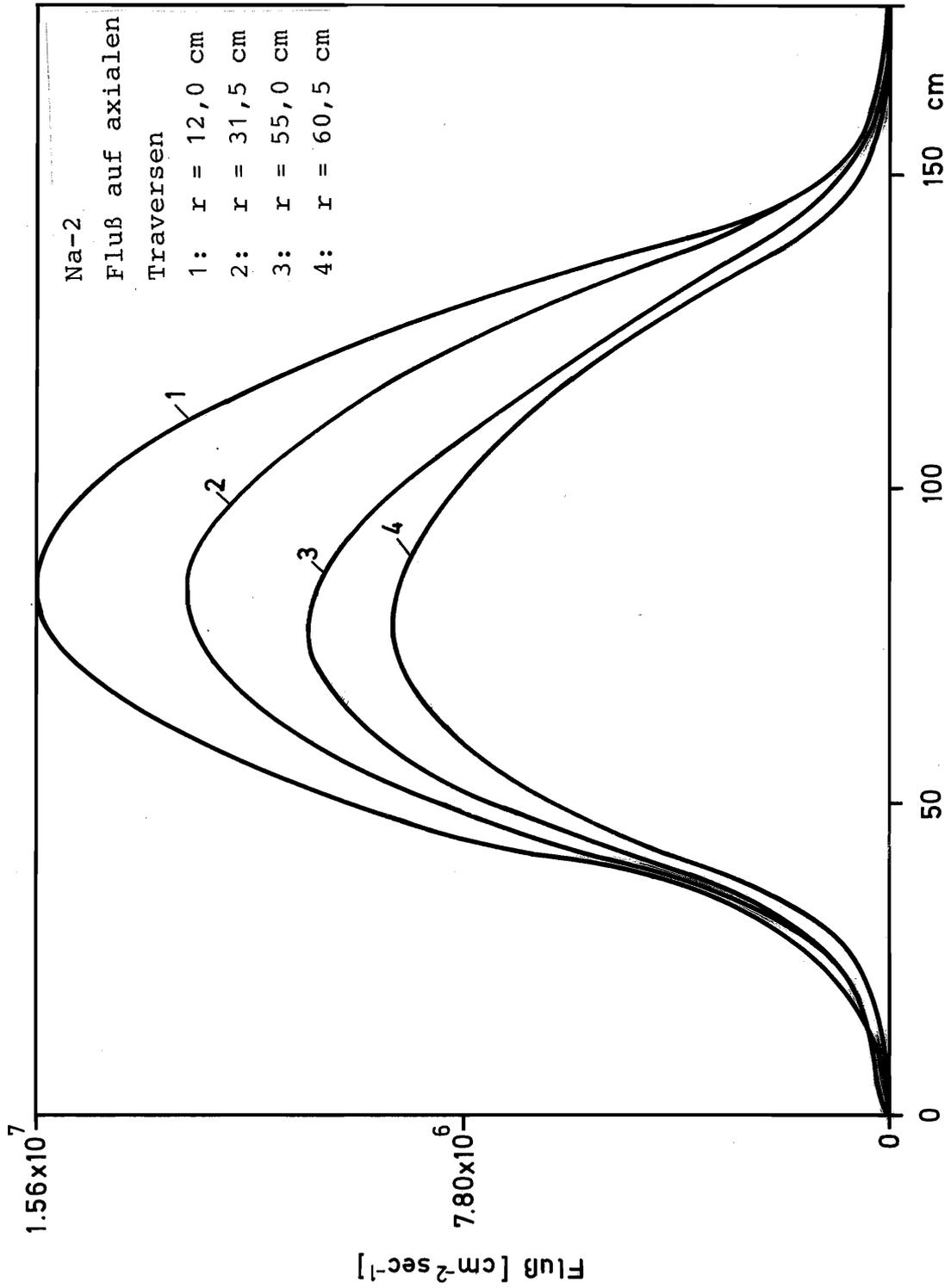


Bild 15: Fluß in Gruppe 1, Na-2, axiale Traversen

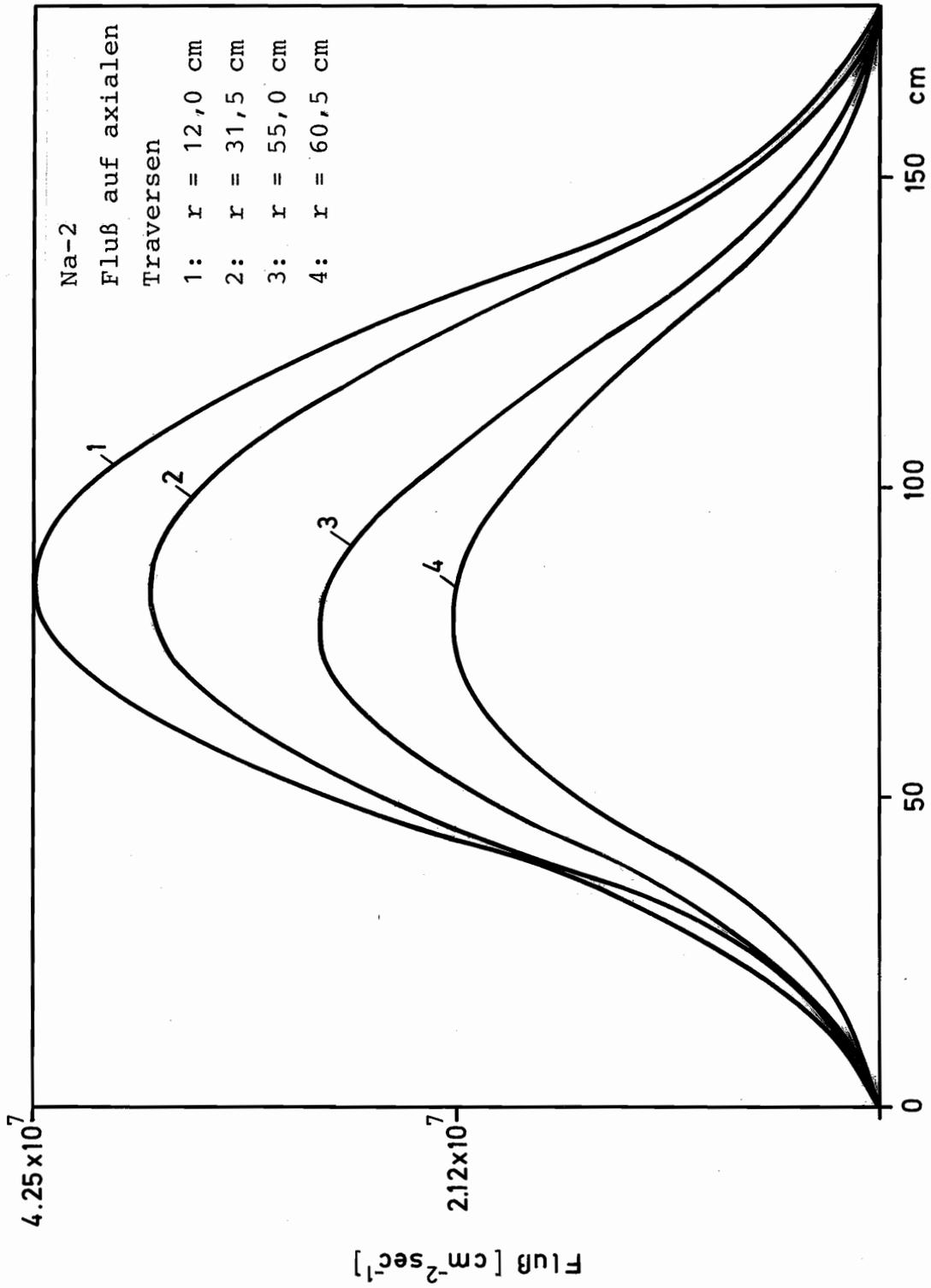


Bild 16: Fluß in Gruppe 2, Na-2, axiale Traversen

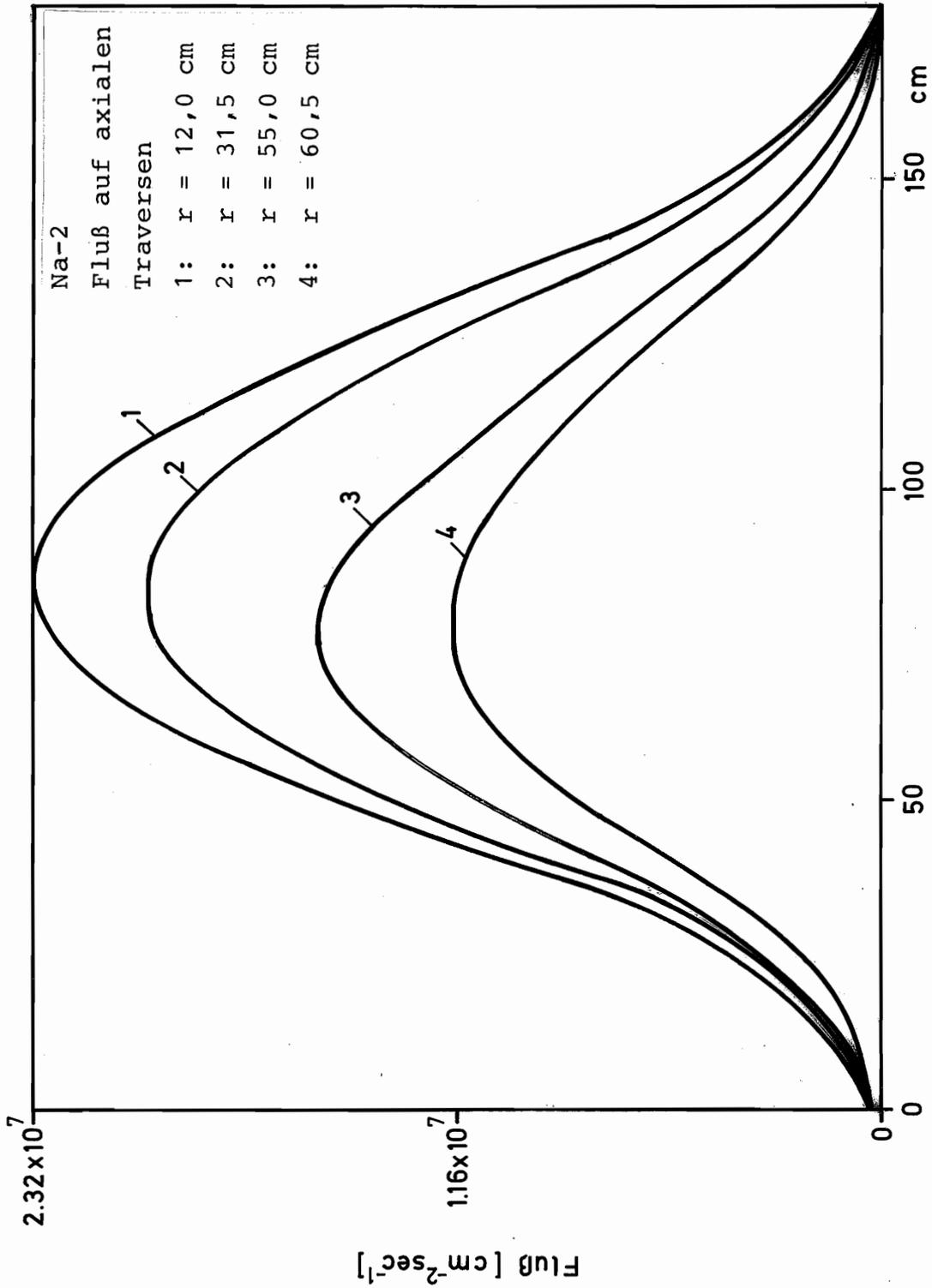


Bild 17: Fluß in Gruppe 3, Na-2, axiale Traversen

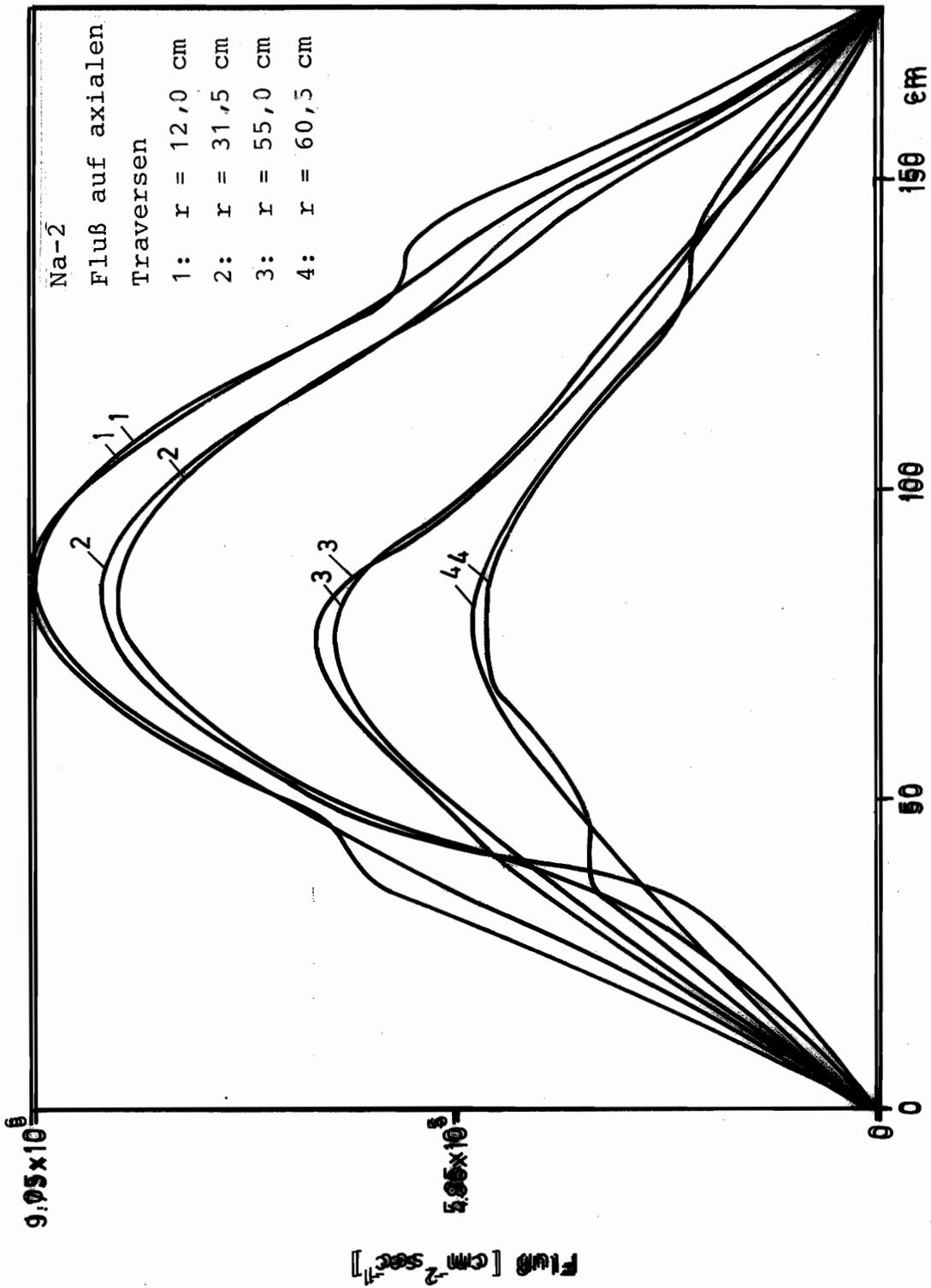


Bild 18: Fluß in Gruppe 4, Na-2, axiale Traversen

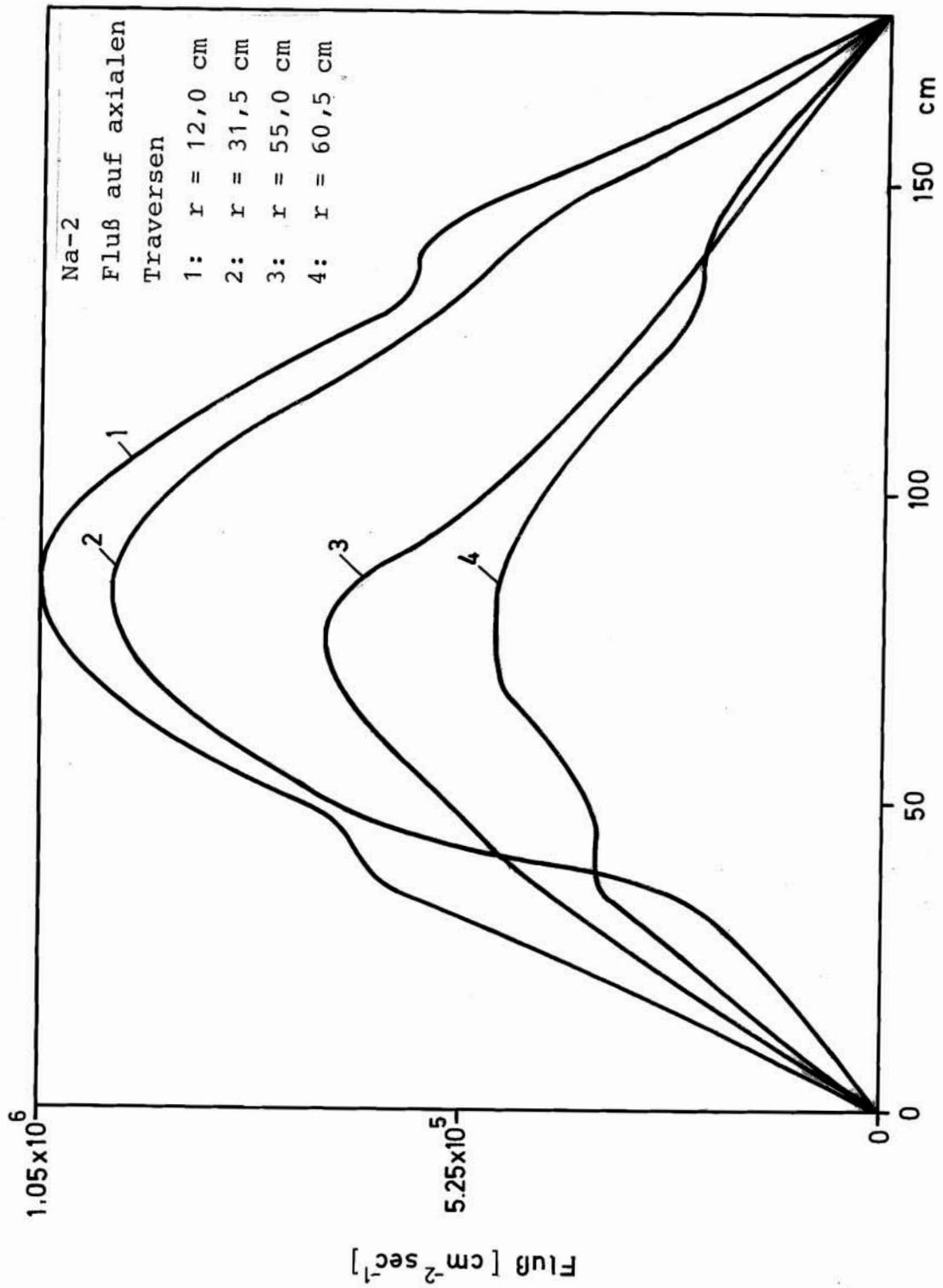


Bild 19: Fluß in Gruppe 5, Na-2, axiale Traversen

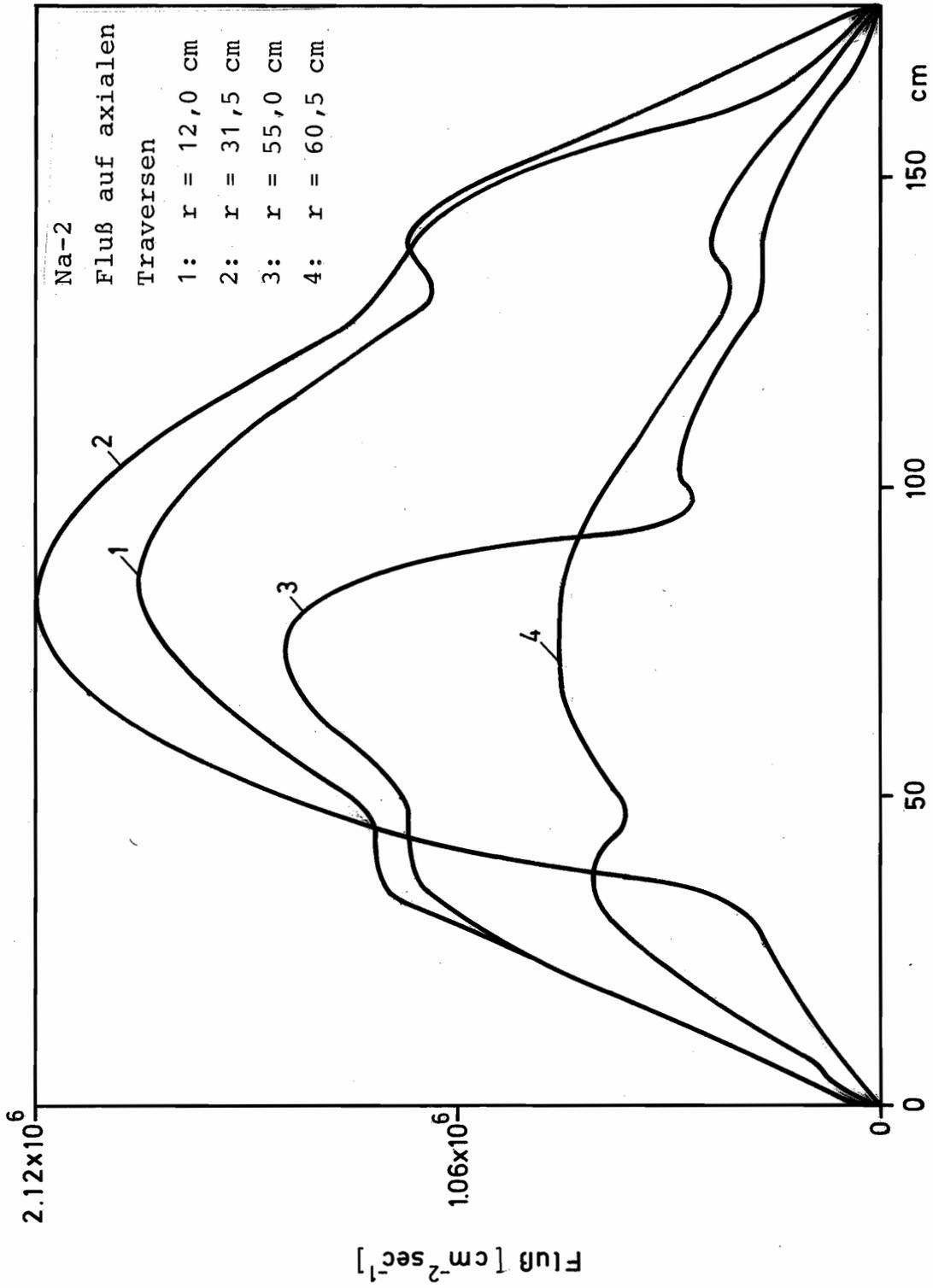


Bild 20: Fluß in Gruppe 6, Na-2, axiale Traversen

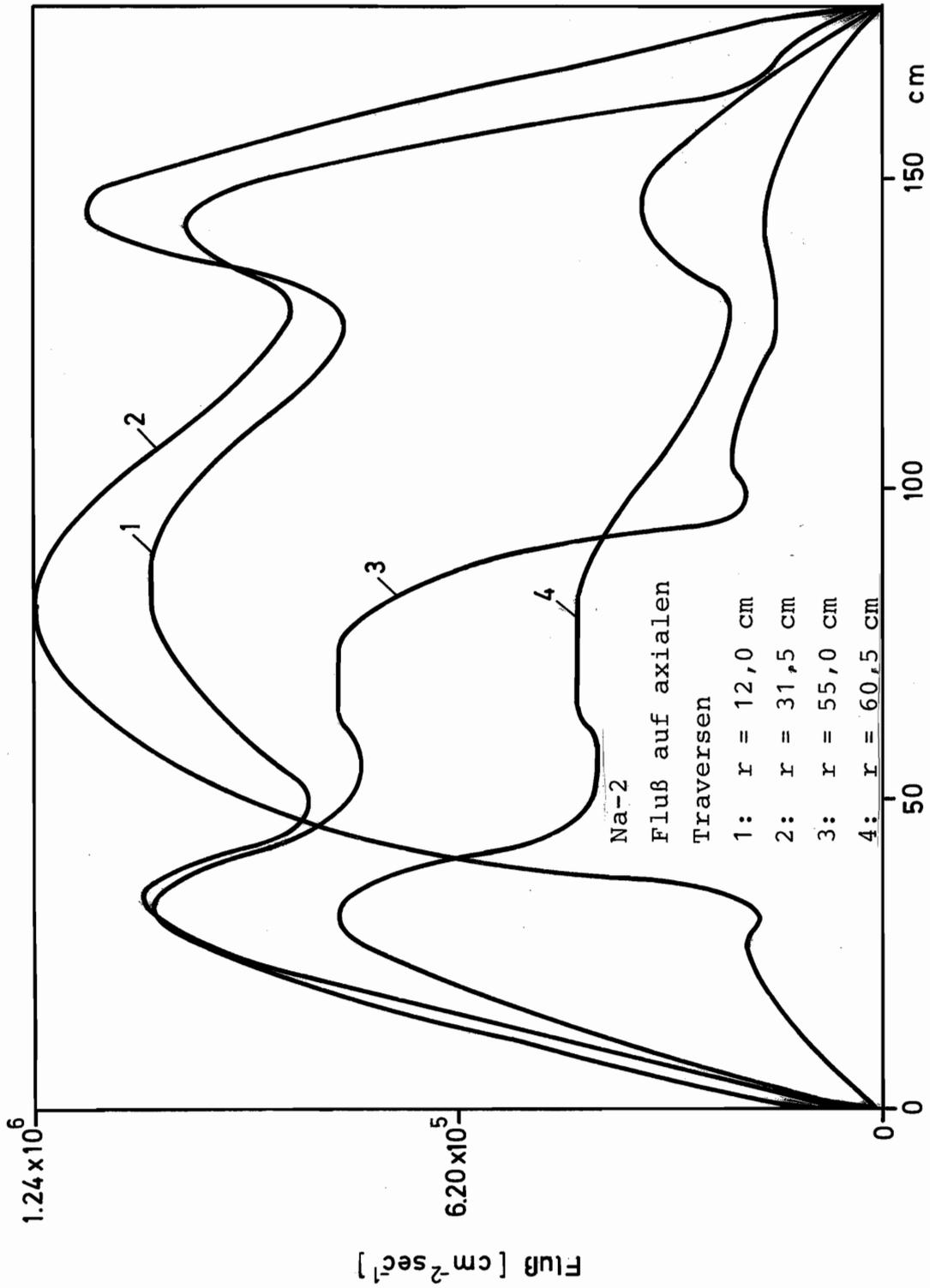


Bild 21: Fluß in Gruppe 7, Na-2, axiale Traversen

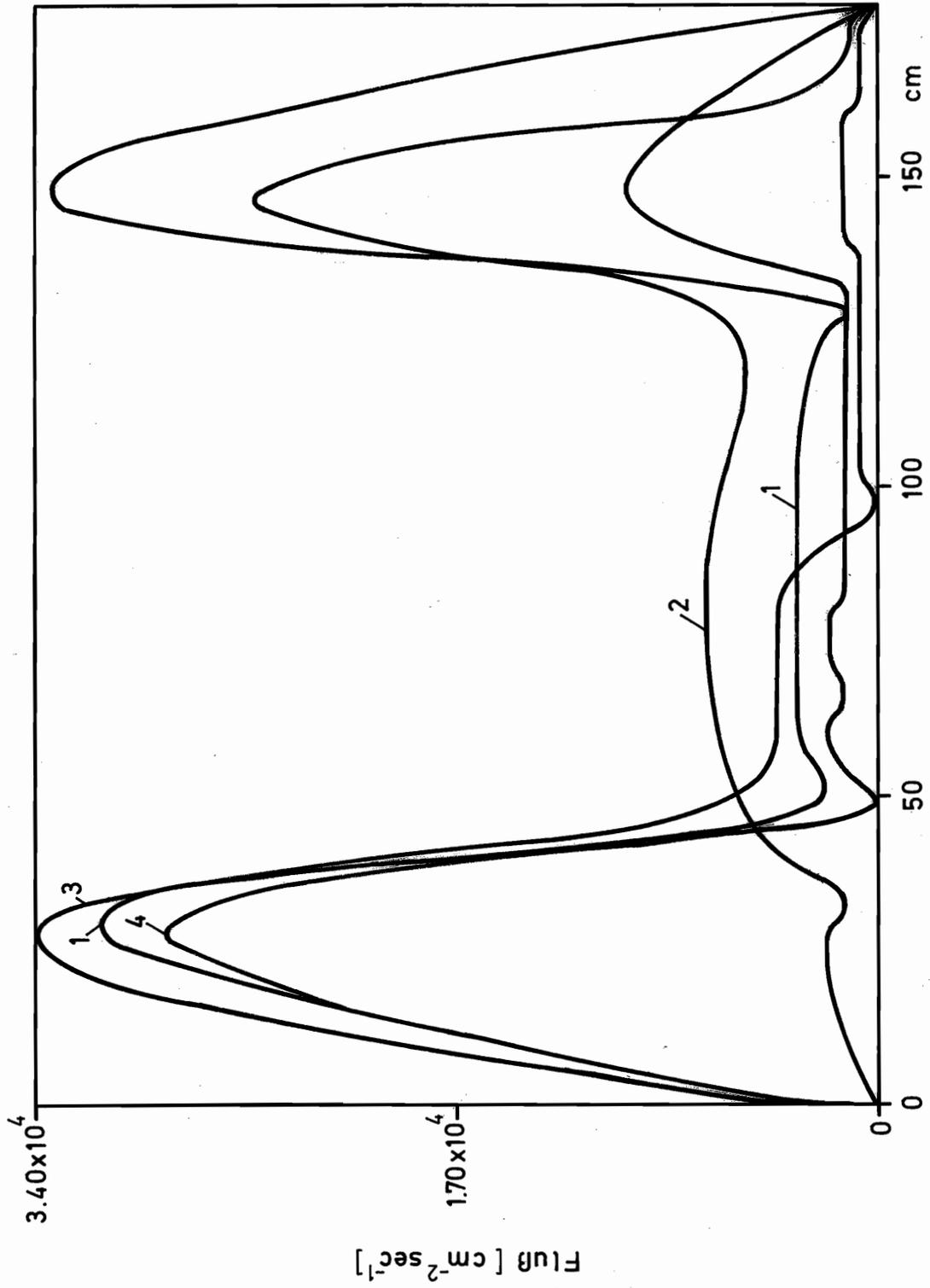


Bild 22: Fluß in Gruppe 8, Na-2, axiale Traversen

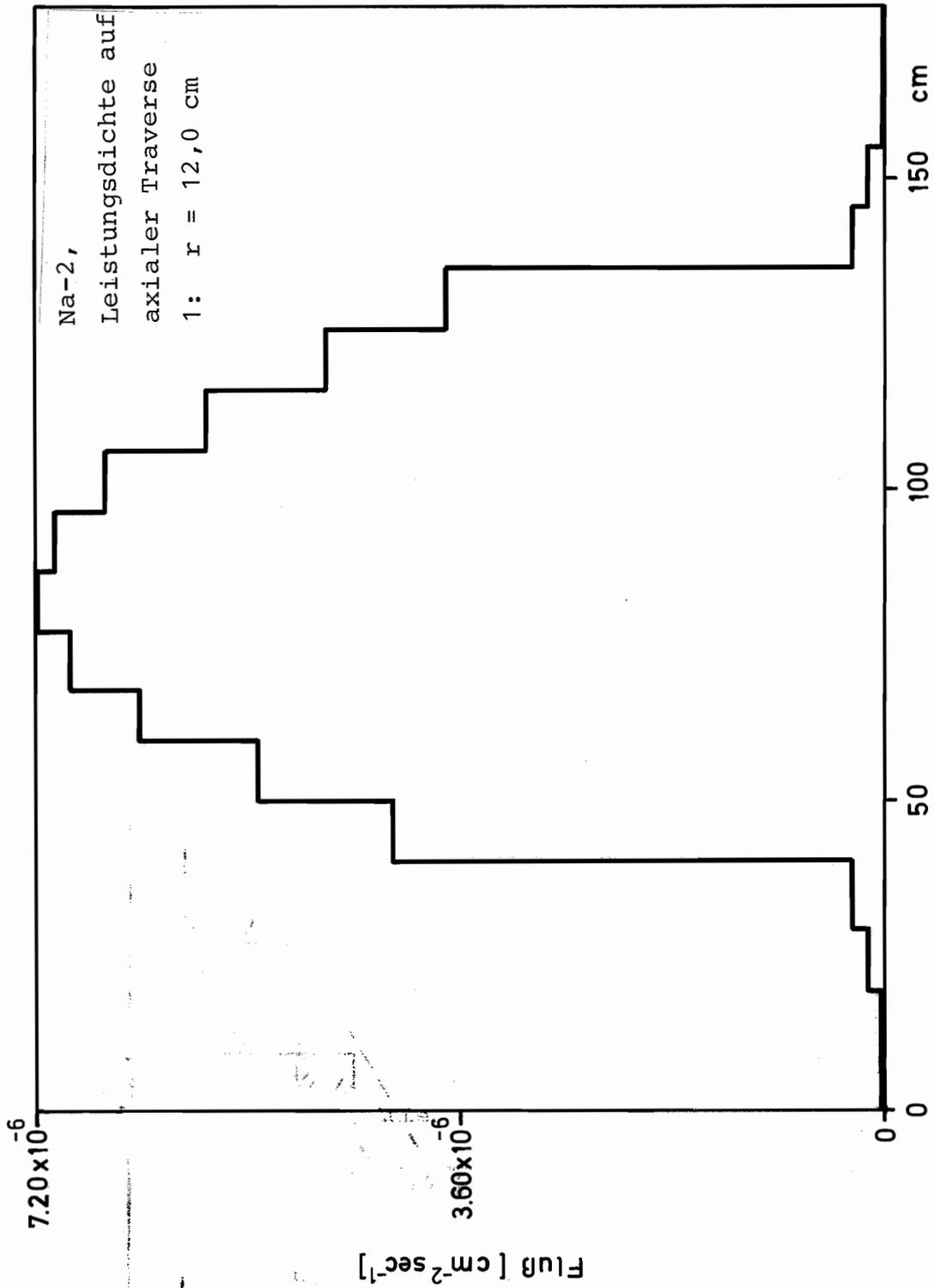


Bild 23: Leistungsdichte auf axialer Traverse, Na-2

- Na-2  
Fluß auf axialen  
Traversen
- 1: r = 12,0 cm
  - 2: r = 31,5 cm
  - 3: r = 55,0 cm
  - 4: r = 60,5 cm

Leistungsdichte auf axialer

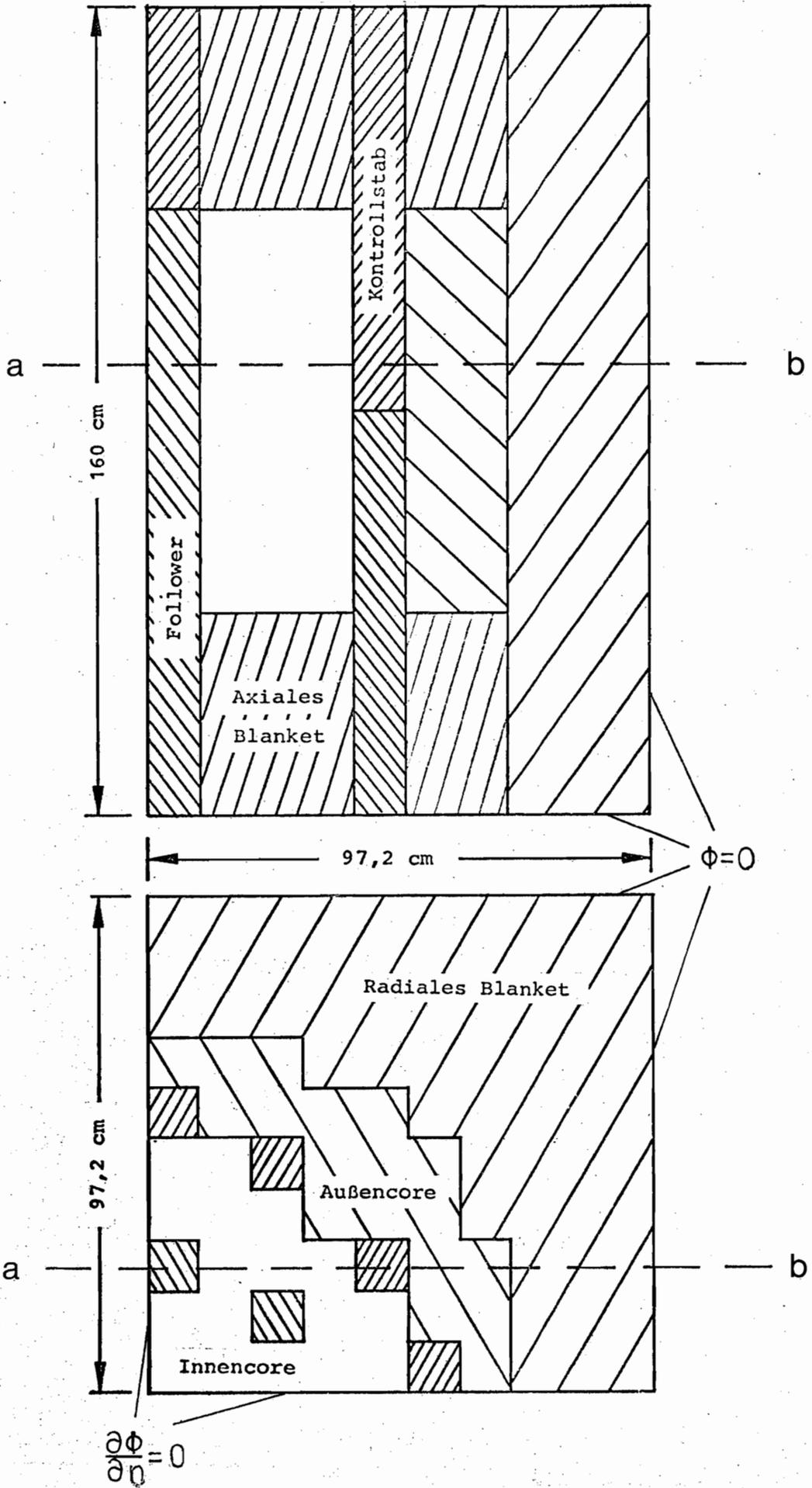


Bild 24: Vereinfachte Geometrie des Mk-Ia

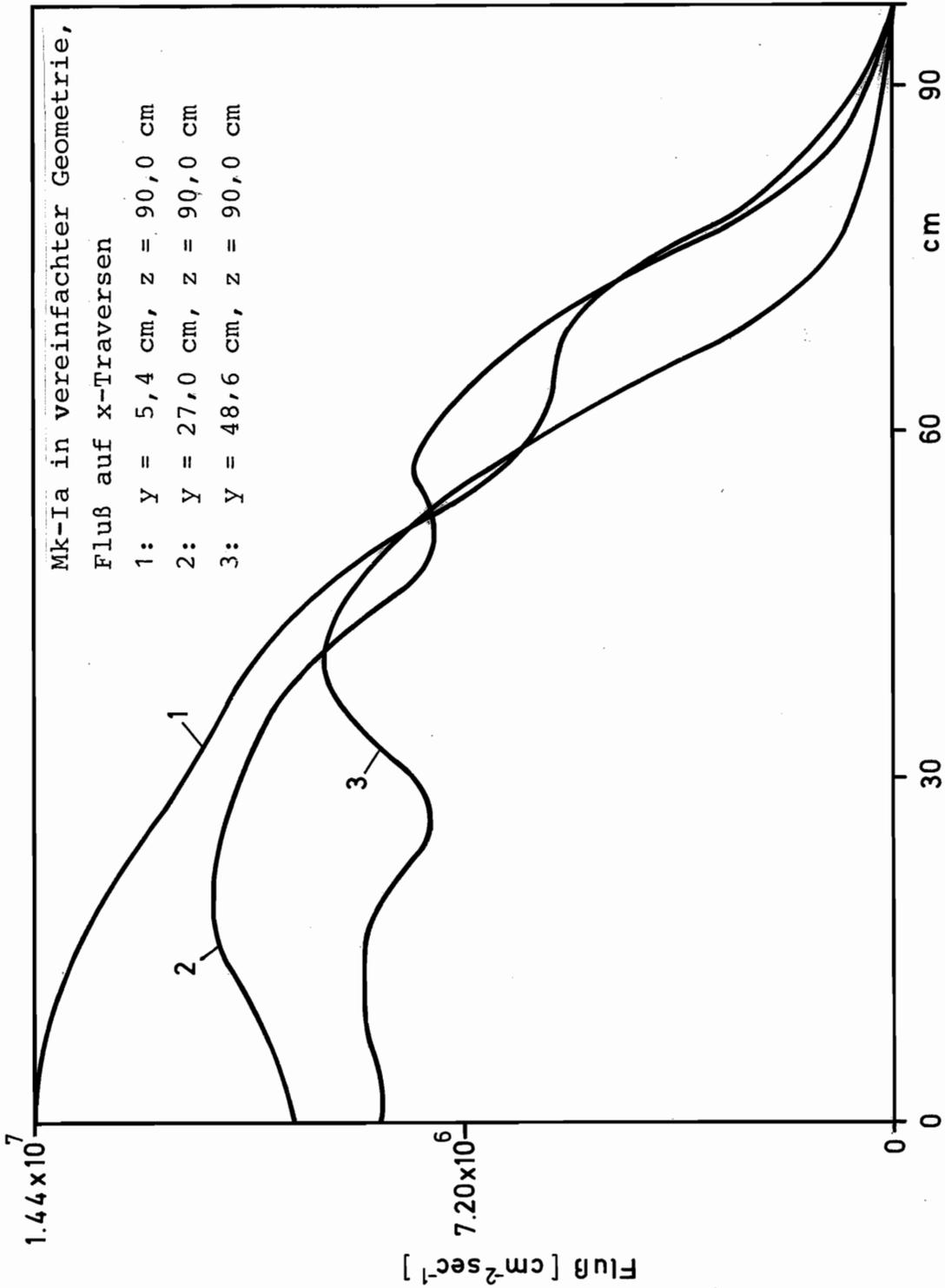


Bild 25: Fluß in Gruppe 1, Mk-Ia, x-Traversen

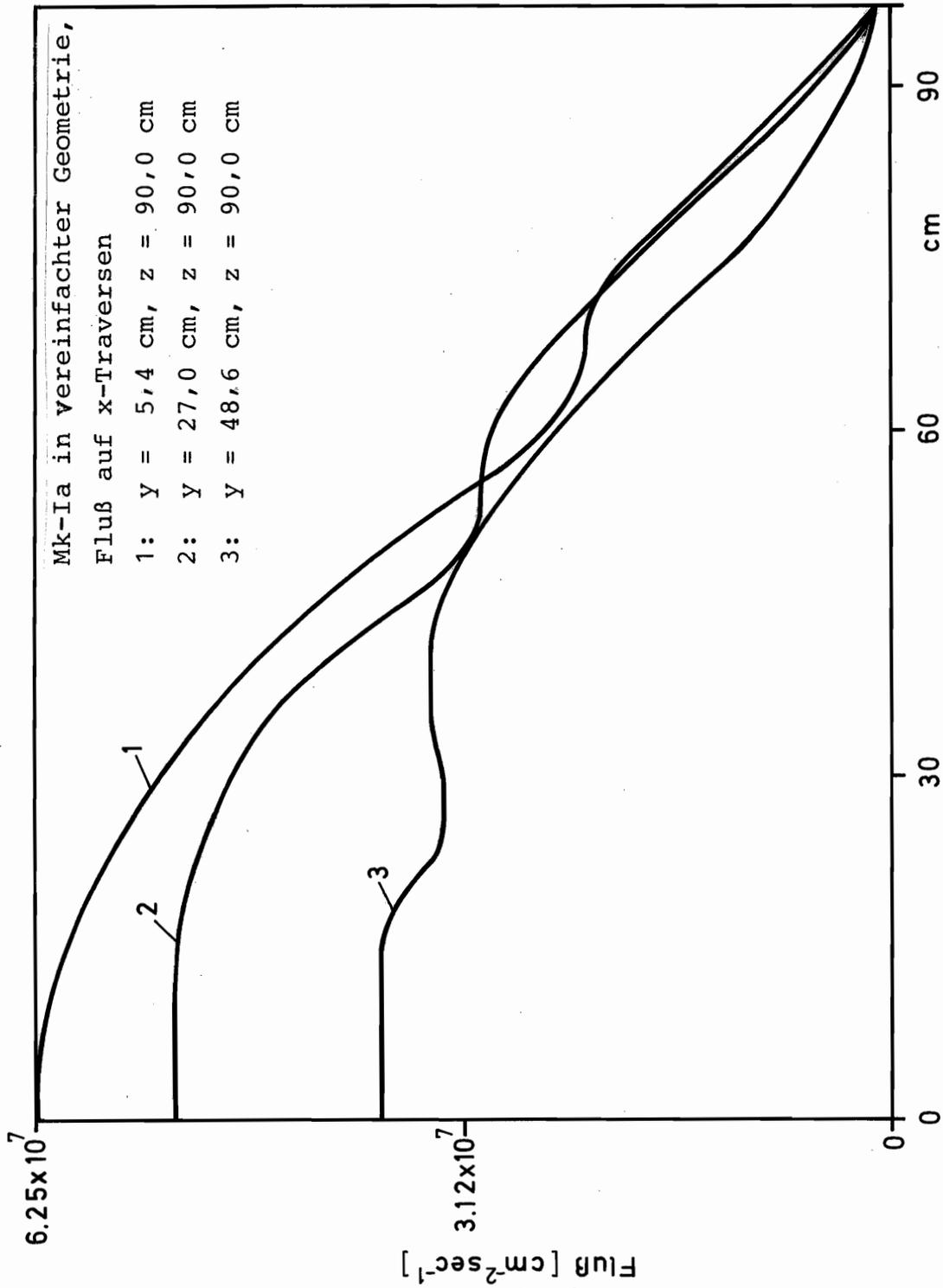


Bild 26: Fluß in Gruppe 2, Mk-Ia, x-Traversen

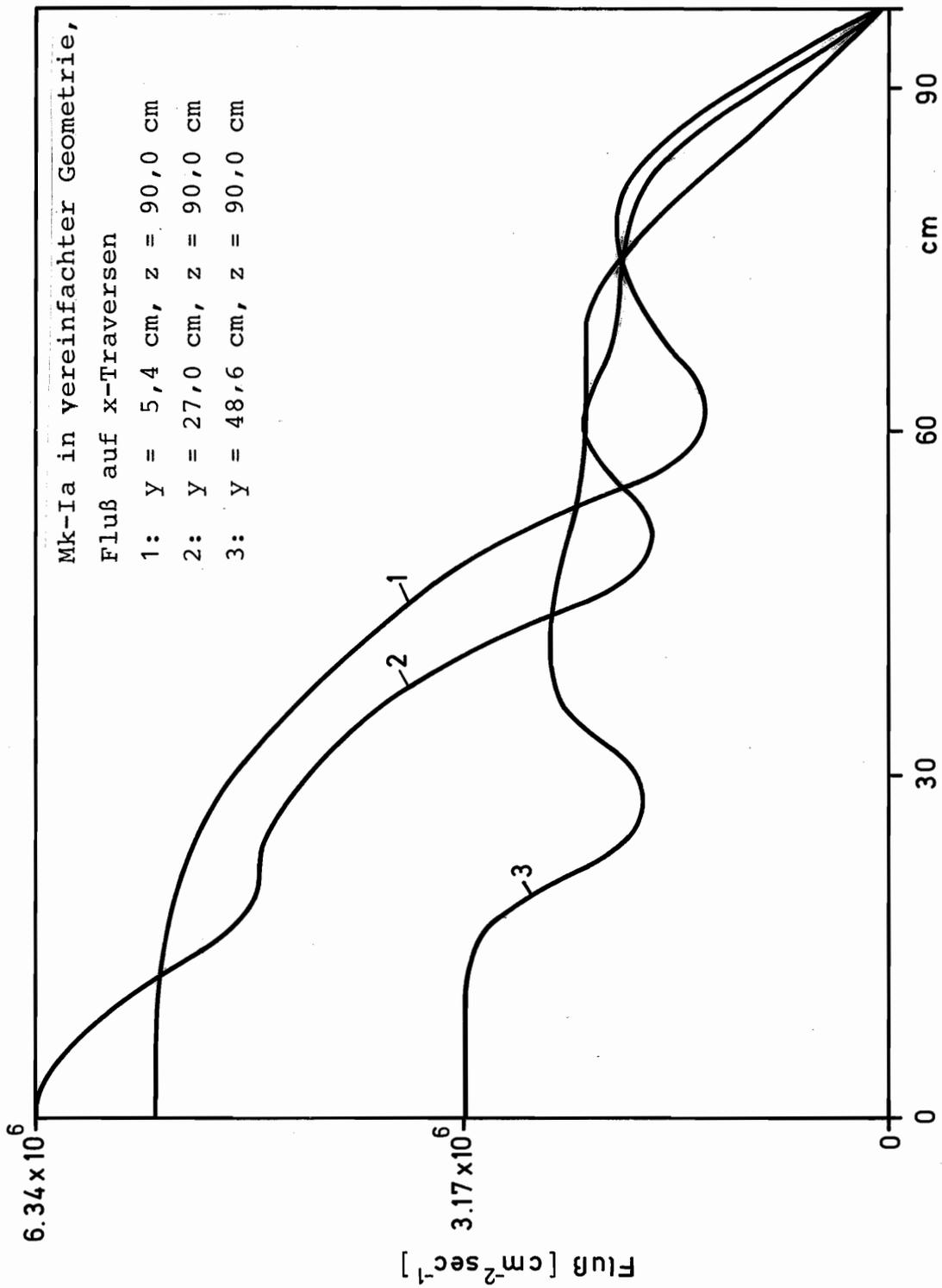


Bild 27: Fluß in Gruppe 3, Mk-Ia, x-Traversen

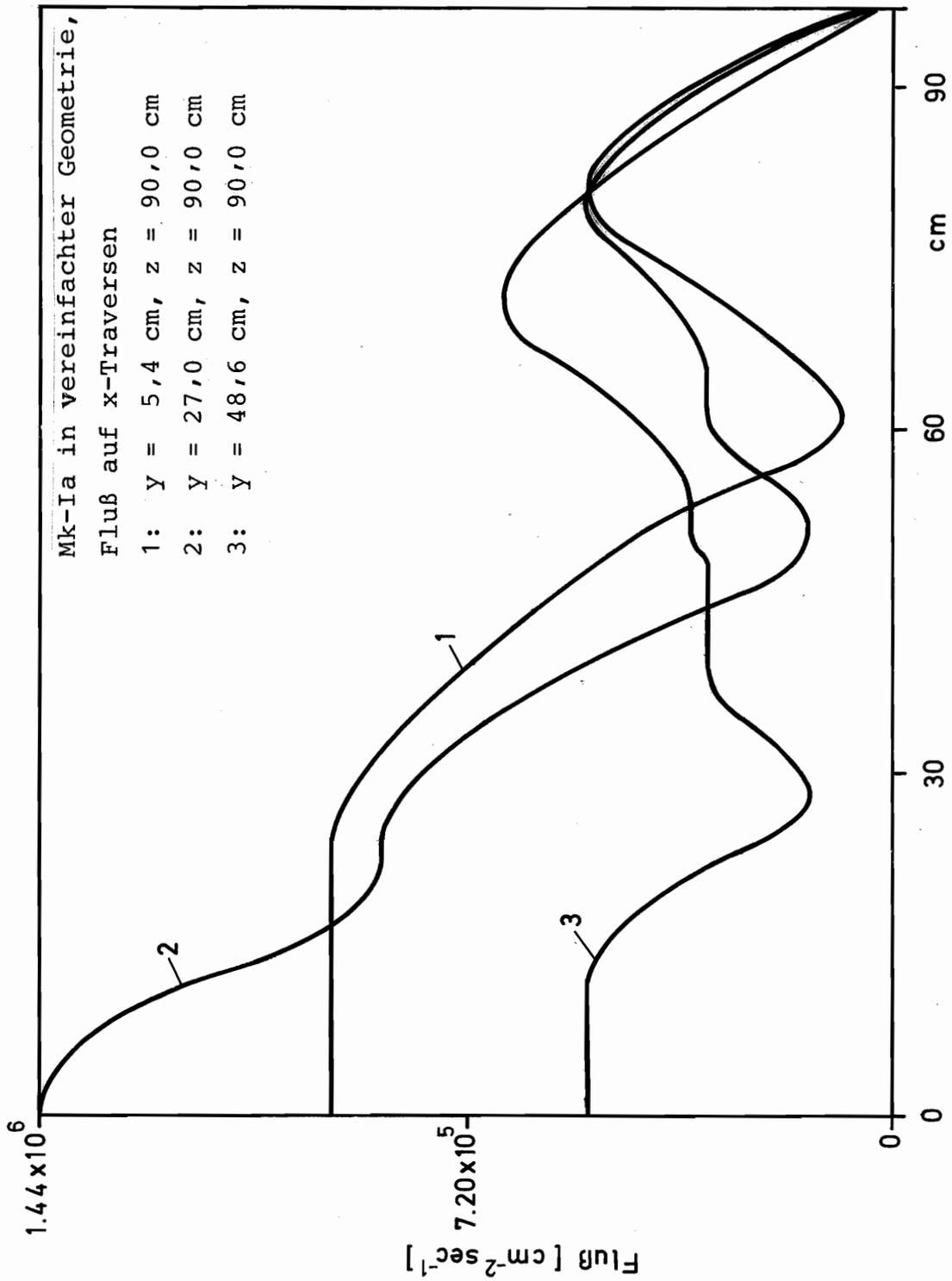


Bild 28: Fluß in Gruppe 4, Mk-Ia, x-Traversen

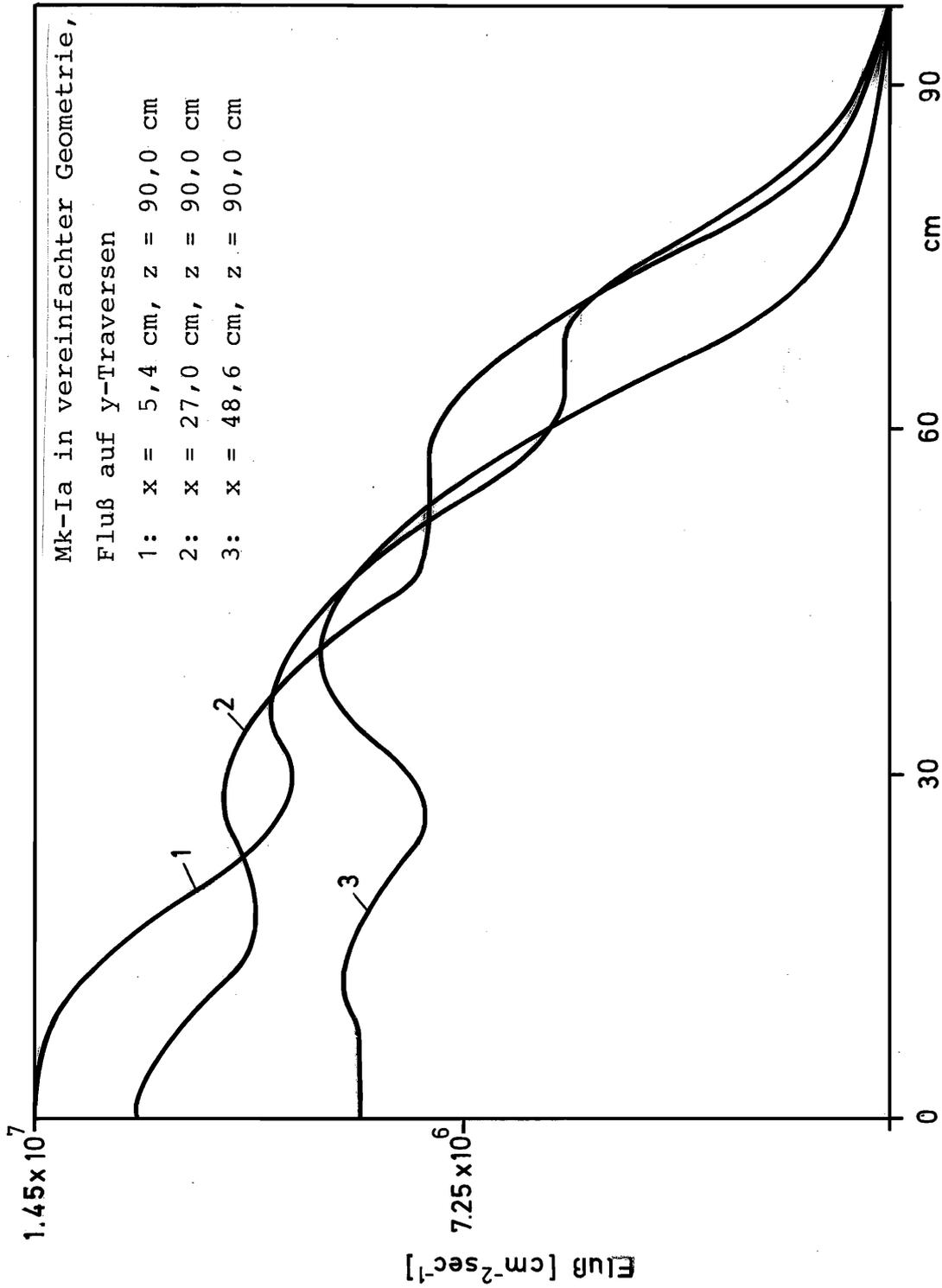


Bild 29: Fluß in Gruppe 1, Mk-Ia, y-Traversen

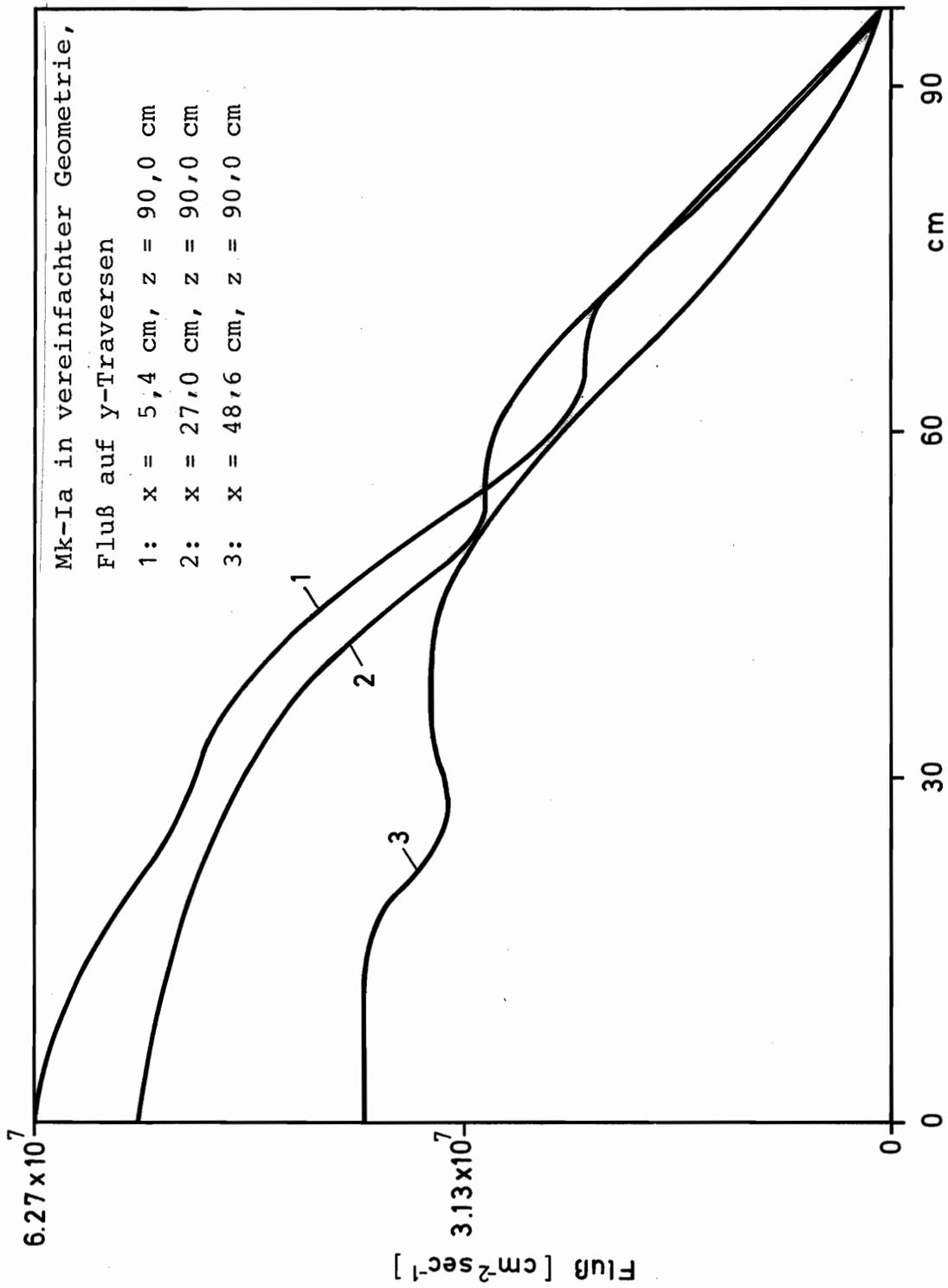


Bild 30: Fluß in Gruppe 2, Mk-Ia, y-Traversen

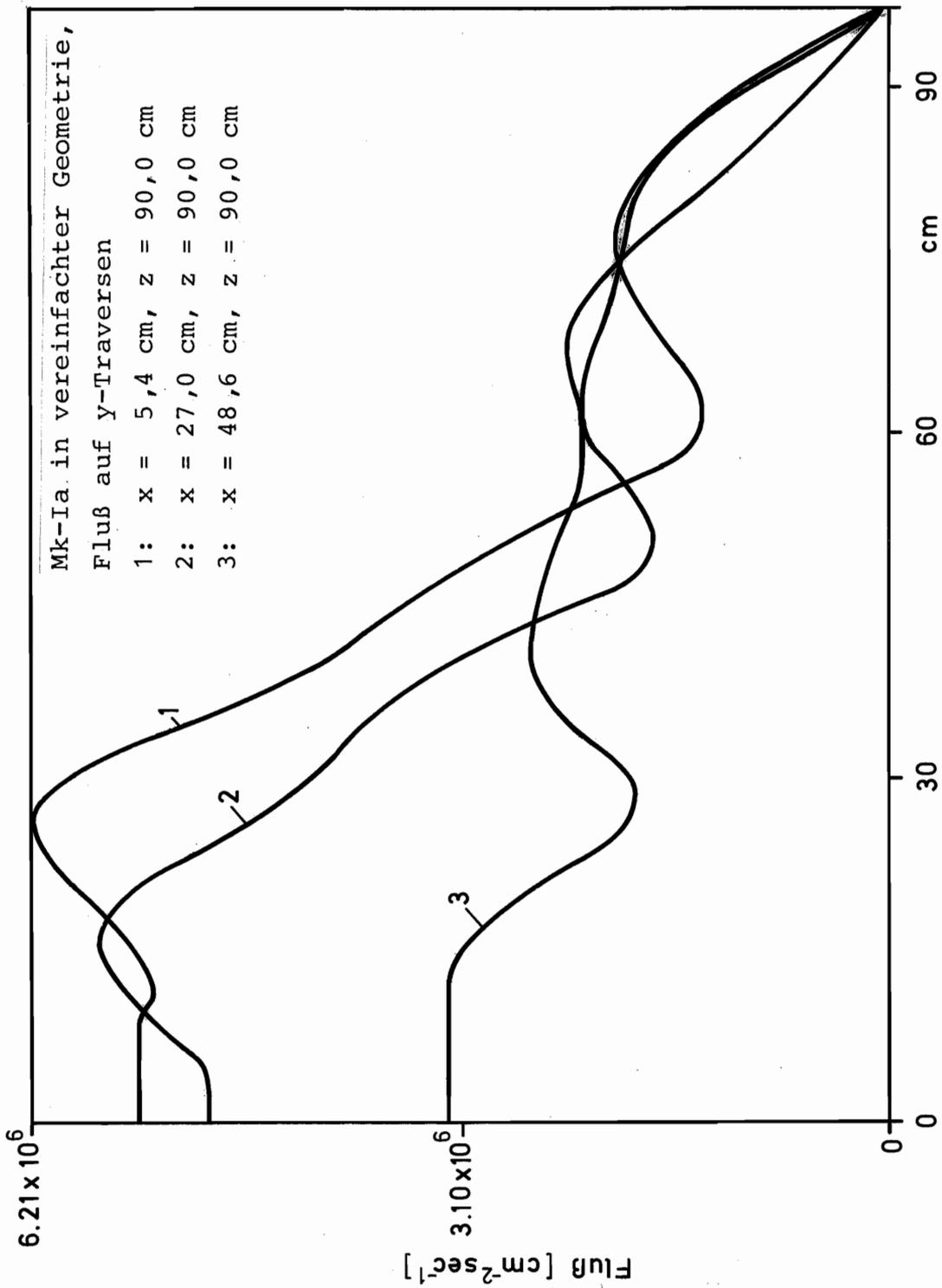


Bild 31: Fluß in Gruppe 3, Mk-Ia, y-Traversen

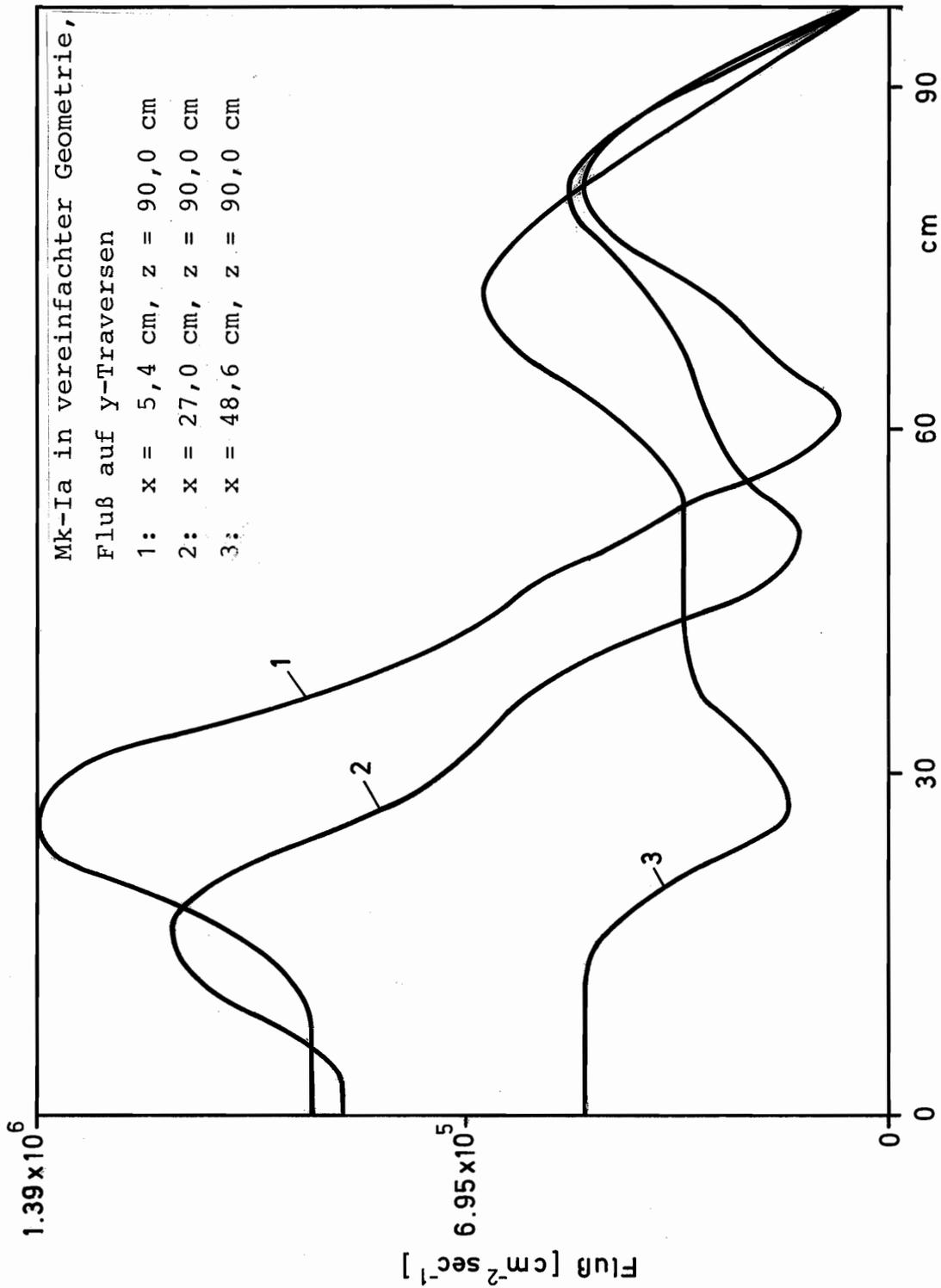


Bild 32: Fluß in Gruppe 4, Mk-Ia, y-Traversen

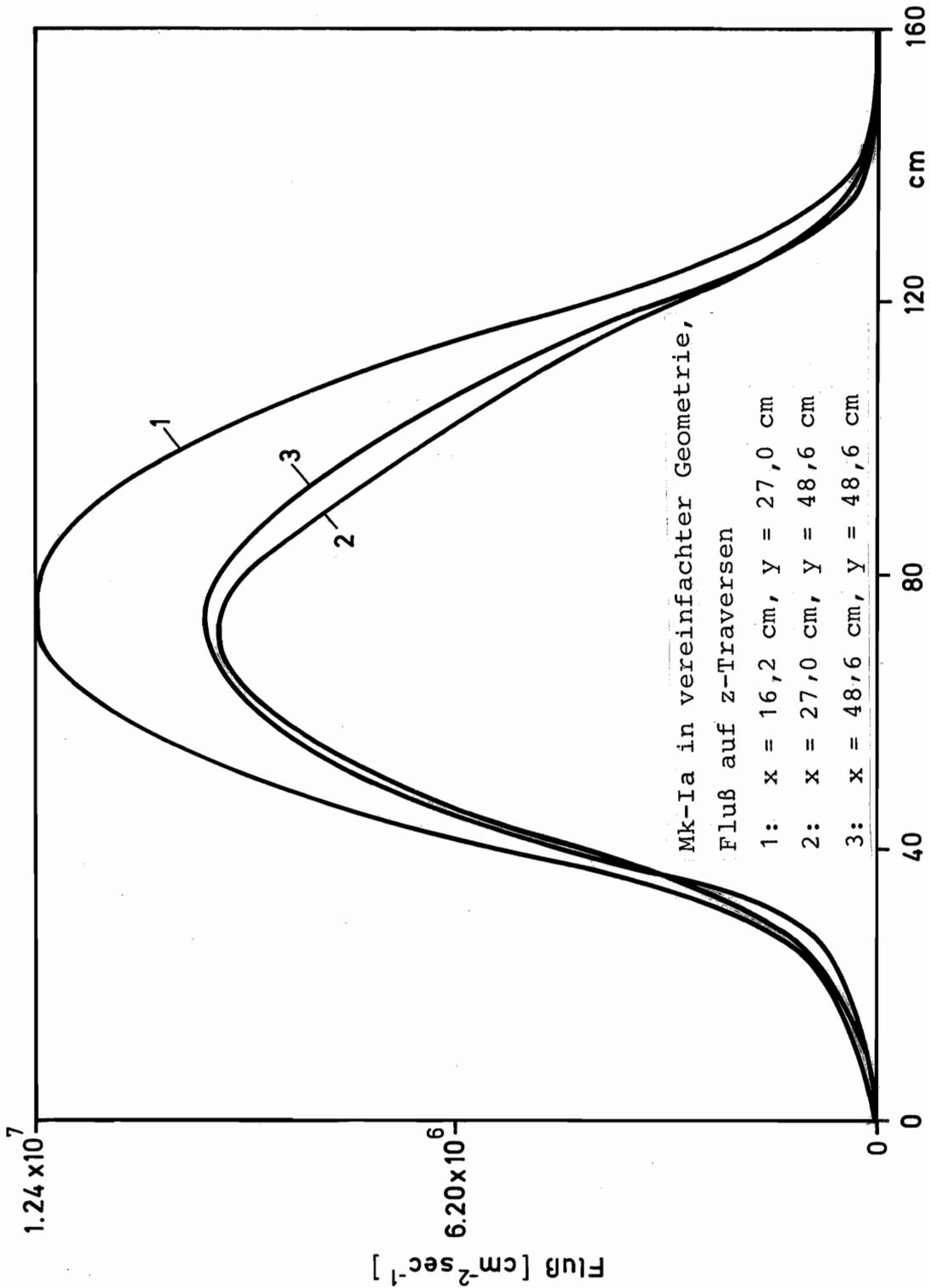


Bild 33: Fluß in Gruppe 1, Mk-Ia, z-Traversen

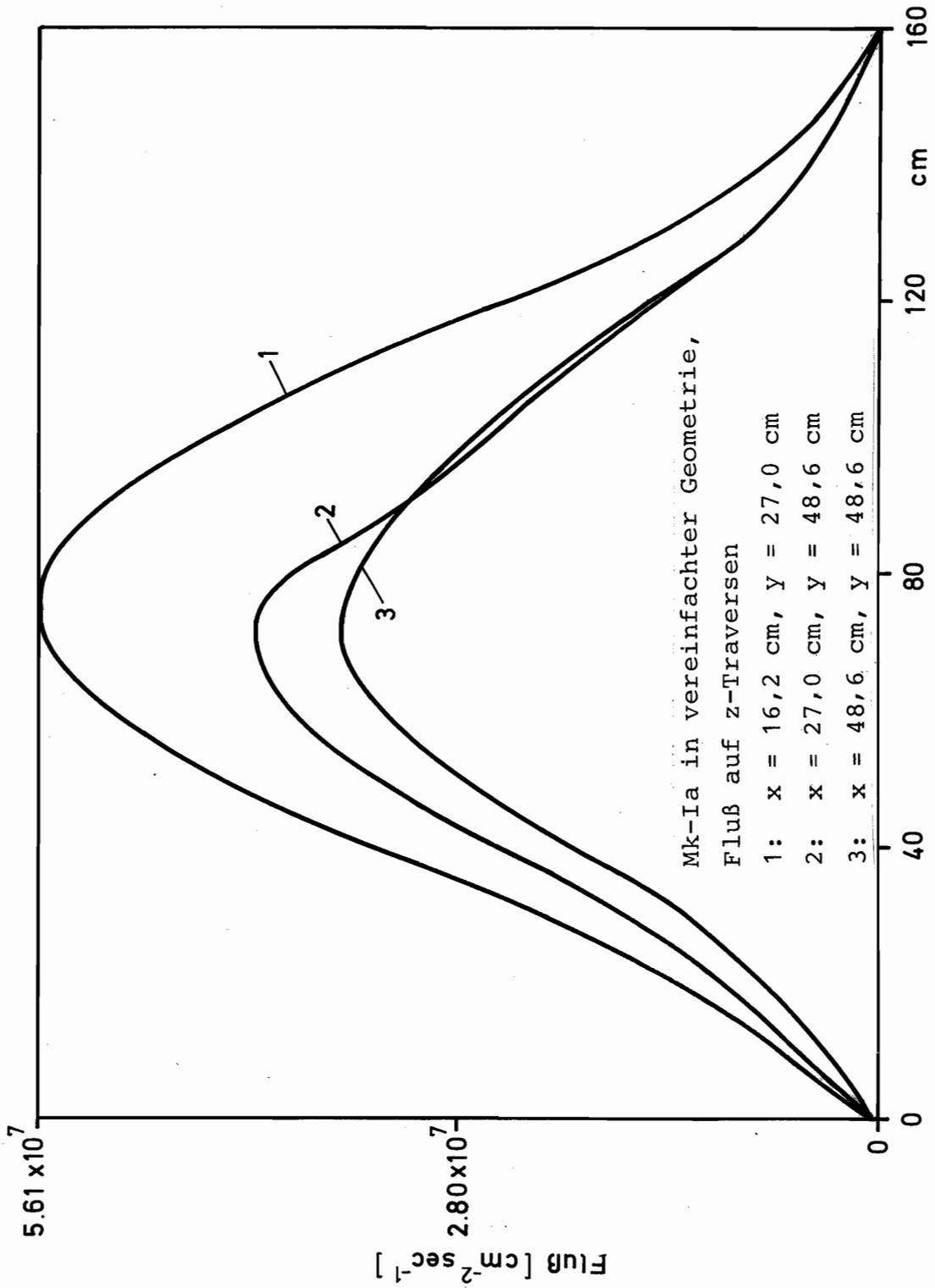


Bild 34: Fluß in Gruppe 2, Mk-Ia, z-Traversen

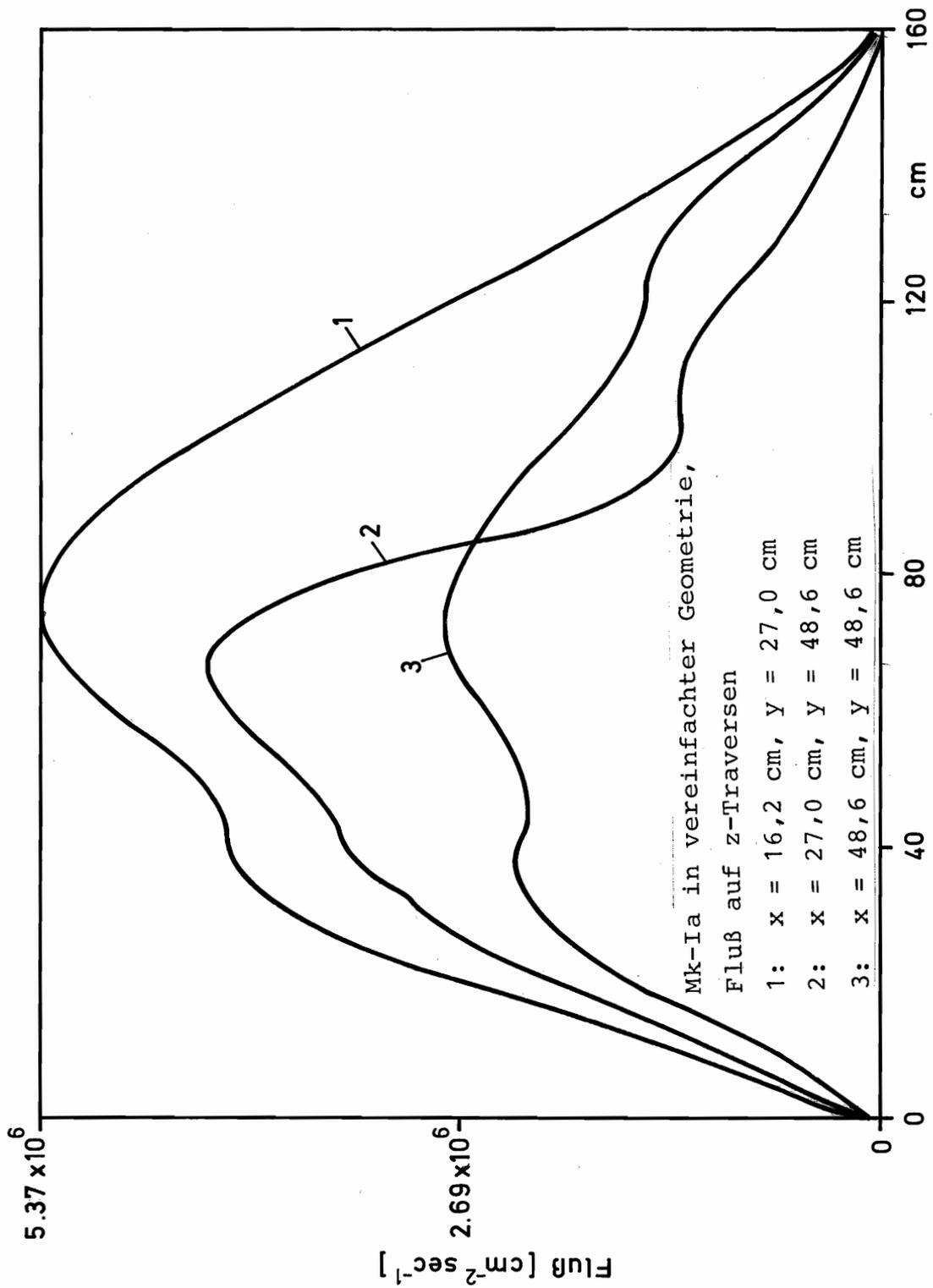


Bild 35: Fluß in Gruppe 3, Mk-Ia, z-Traversen

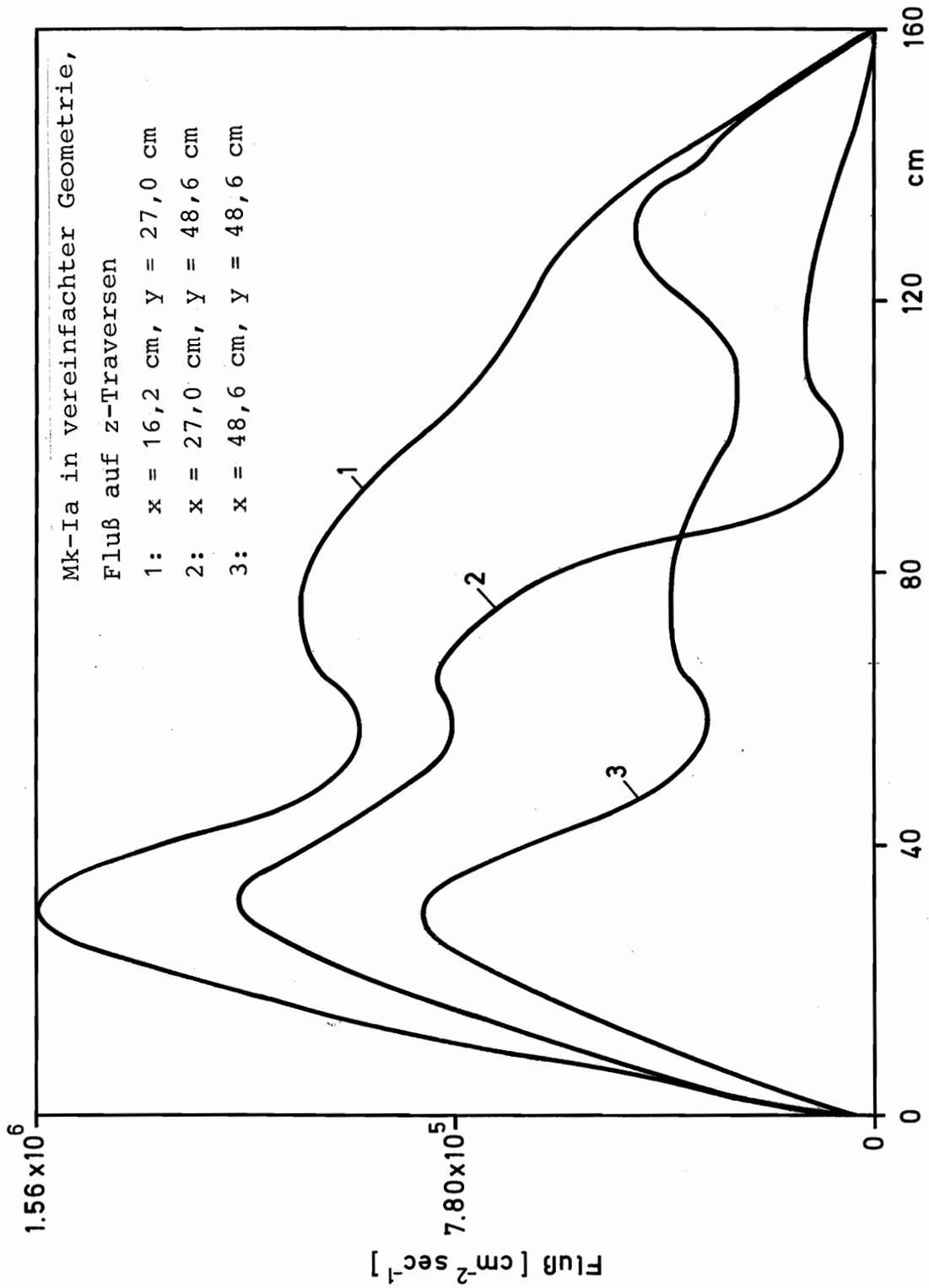


Bild 36: Fluß in Gruppe 4, Mk-Ia, z-Traversen

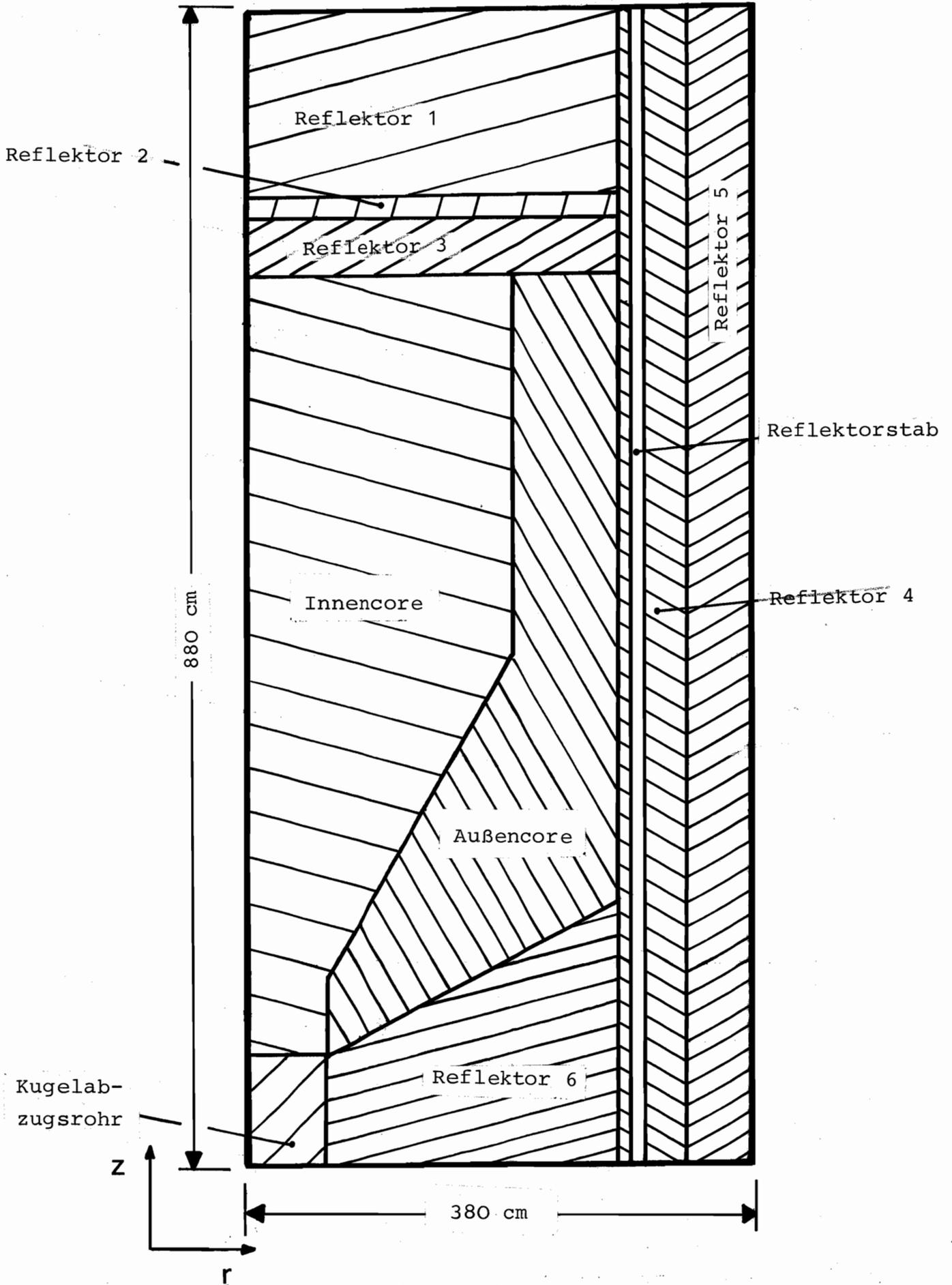


Bild 37: Zweidimensionale Zoneneinteilung des THTR-300

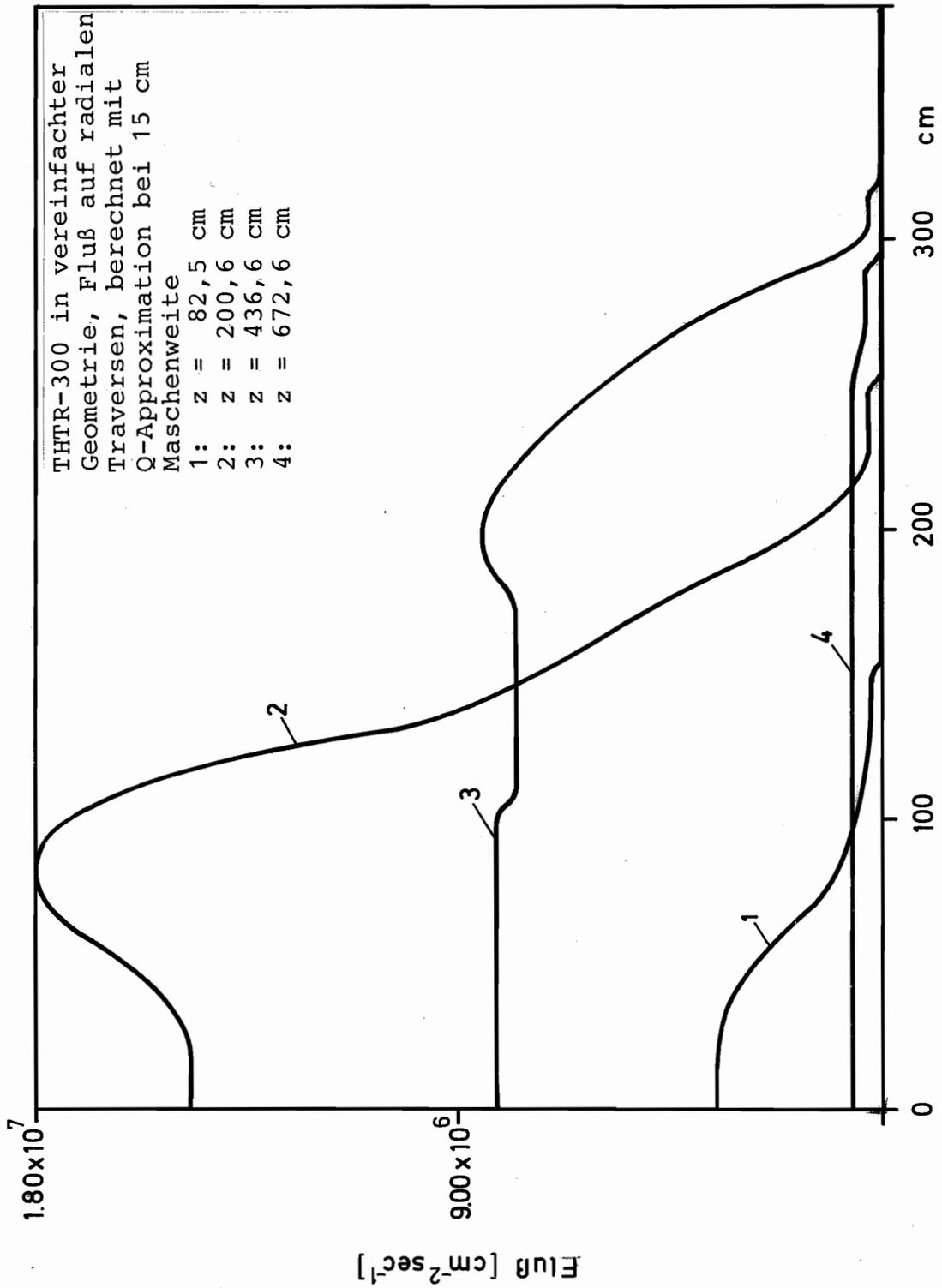


Bild 38: Fluß in Gruppe 1, THTR-300, radiale Traversen

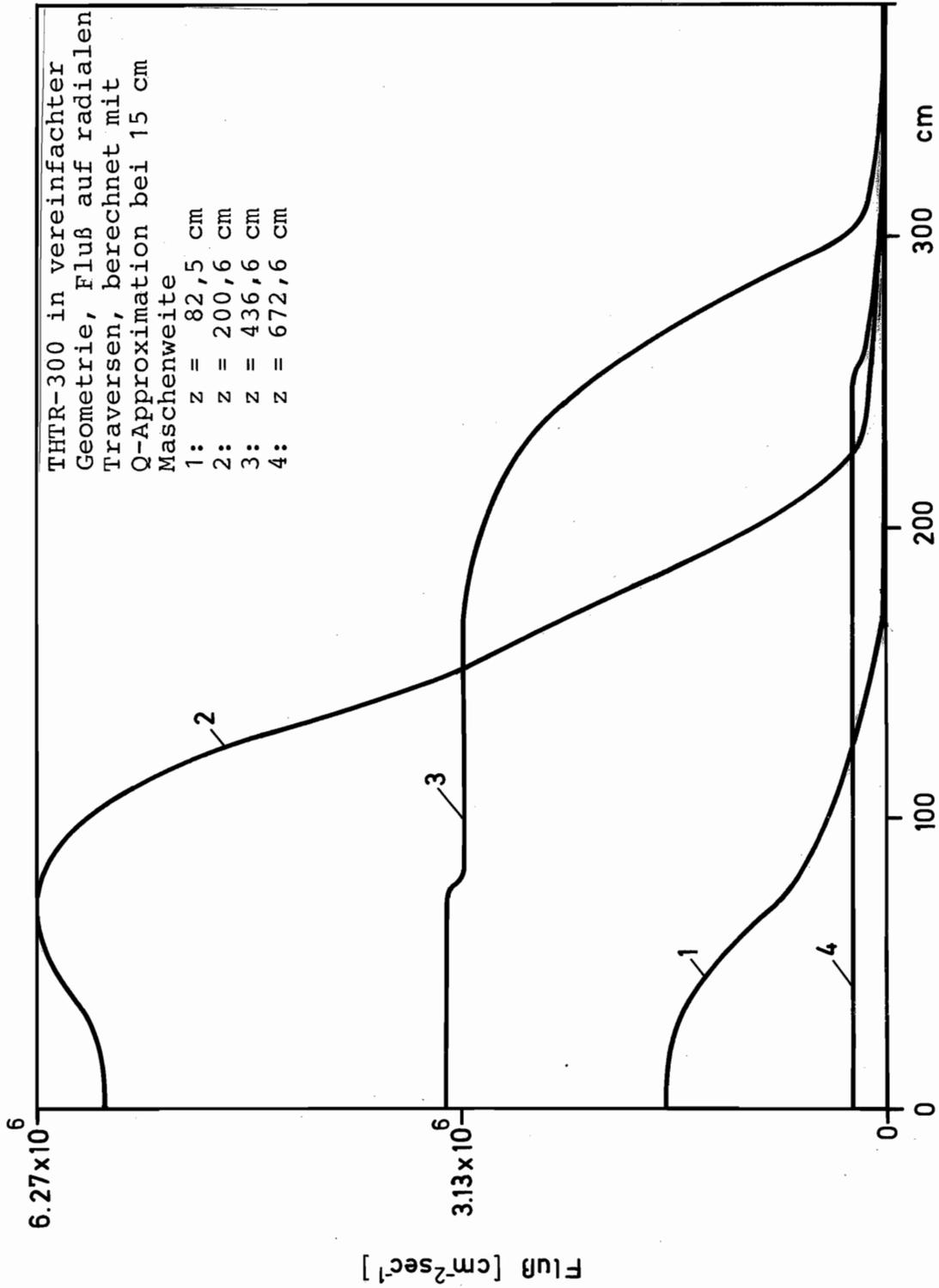


Bild 39: Fluß in Gruppe 2, THTR-300, radiale Traversen

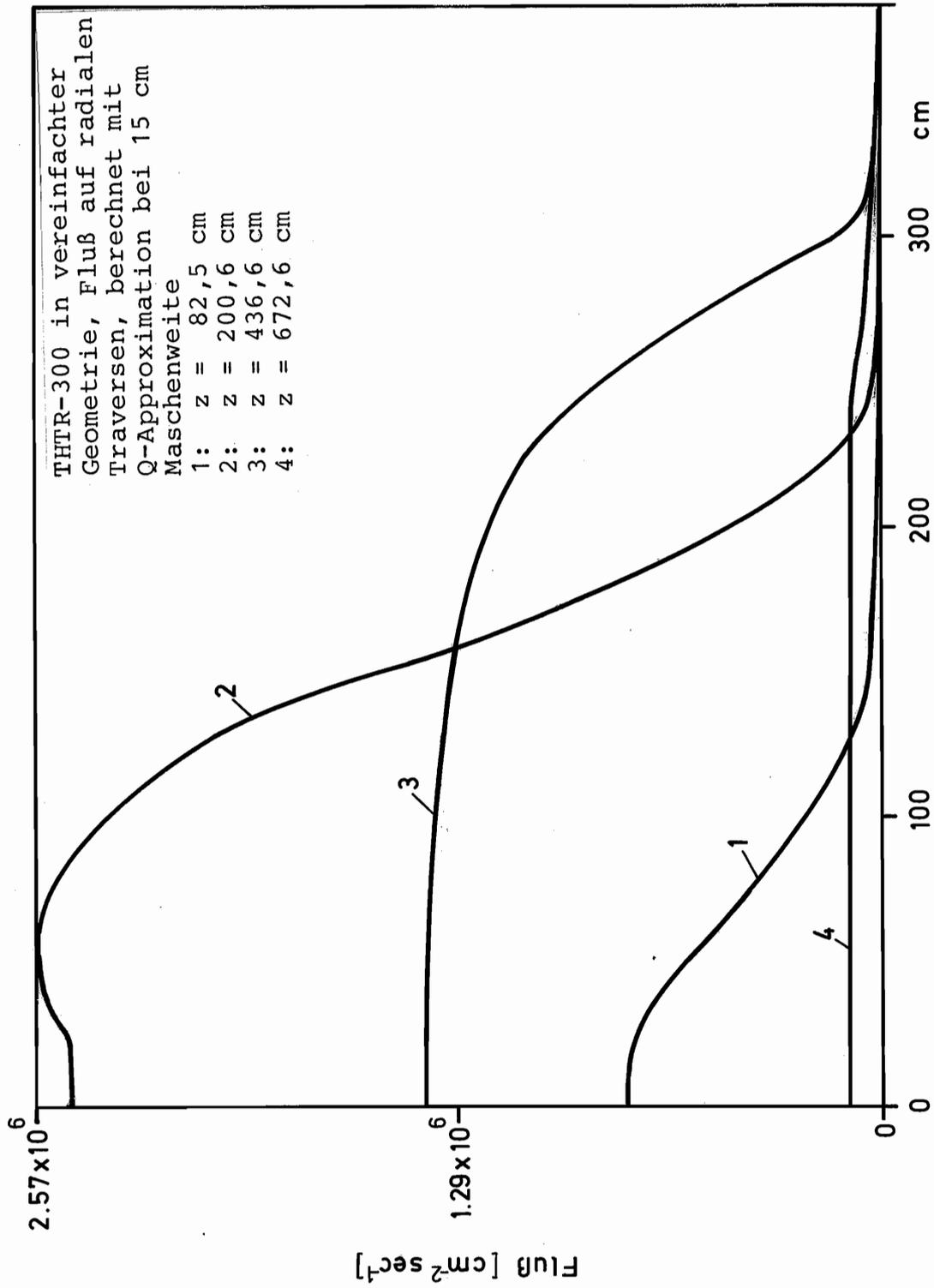


Bild 40: Fluß in Gruppe 3, THTR-300, radiale Traversen

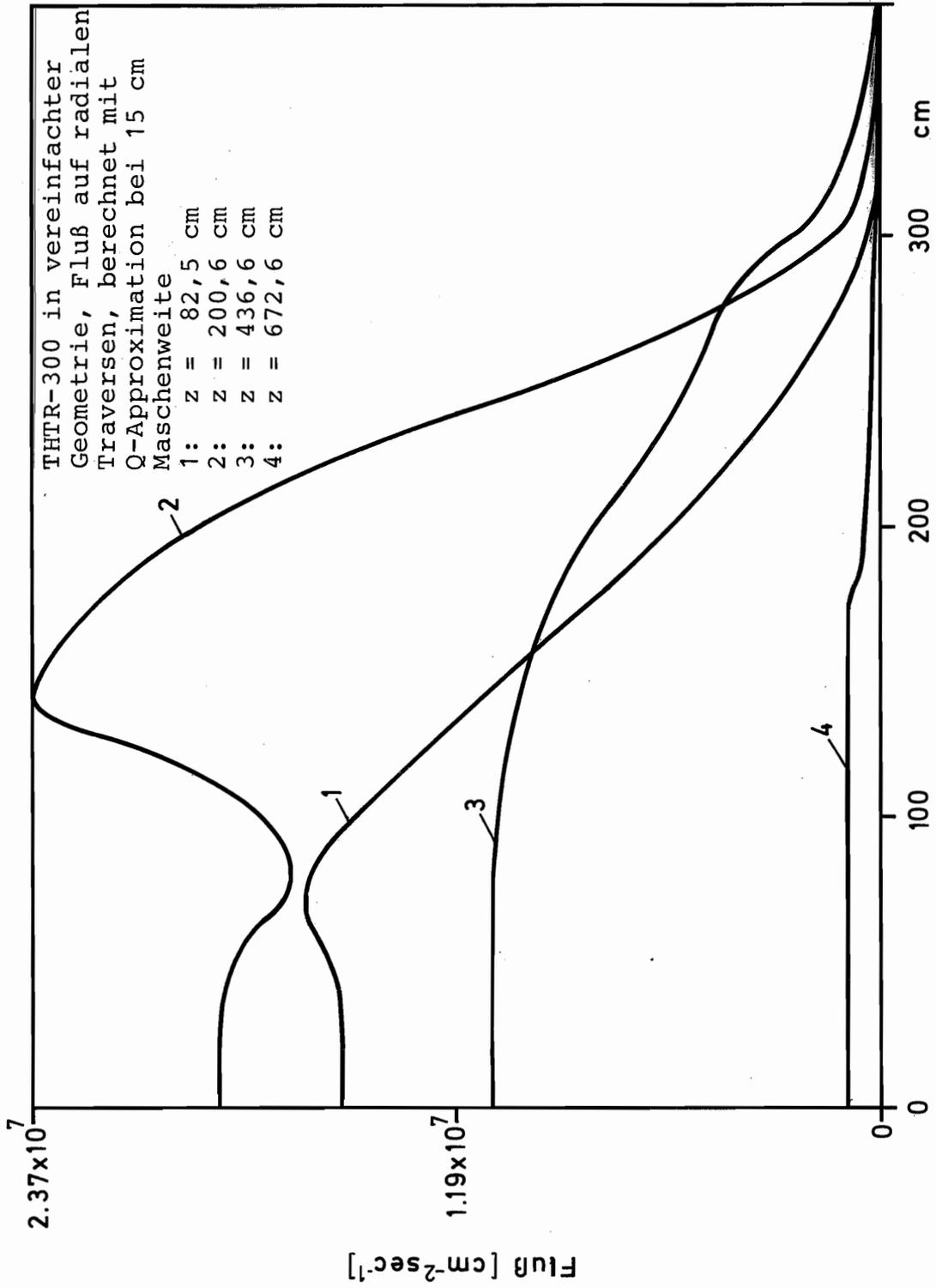


Bild 41: Fluß in Gruppe 4, THTR-300, radiale Traversen

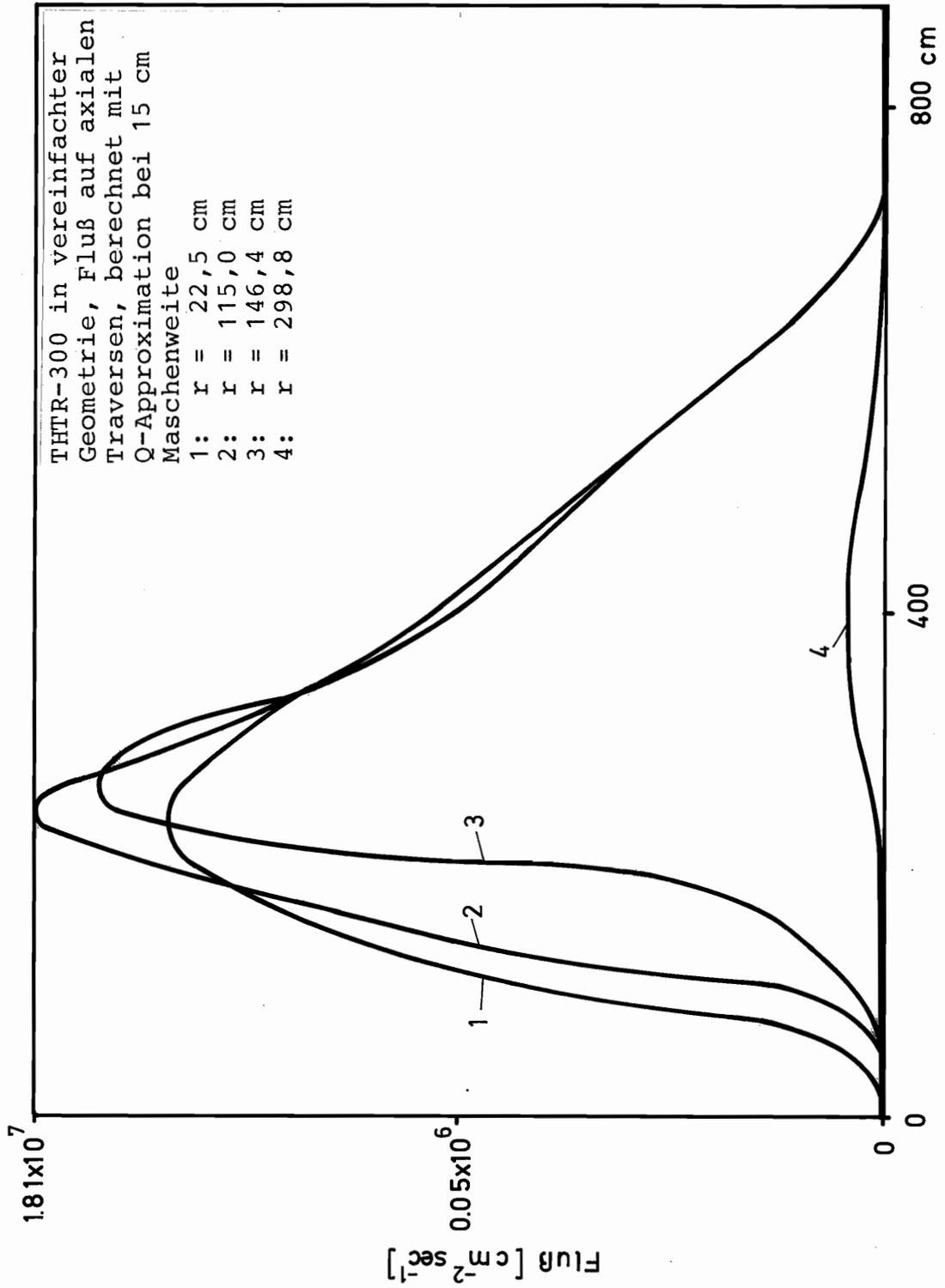


Bild 42: Fluß in Gruppe 1, THTR-300, axiale Traversen

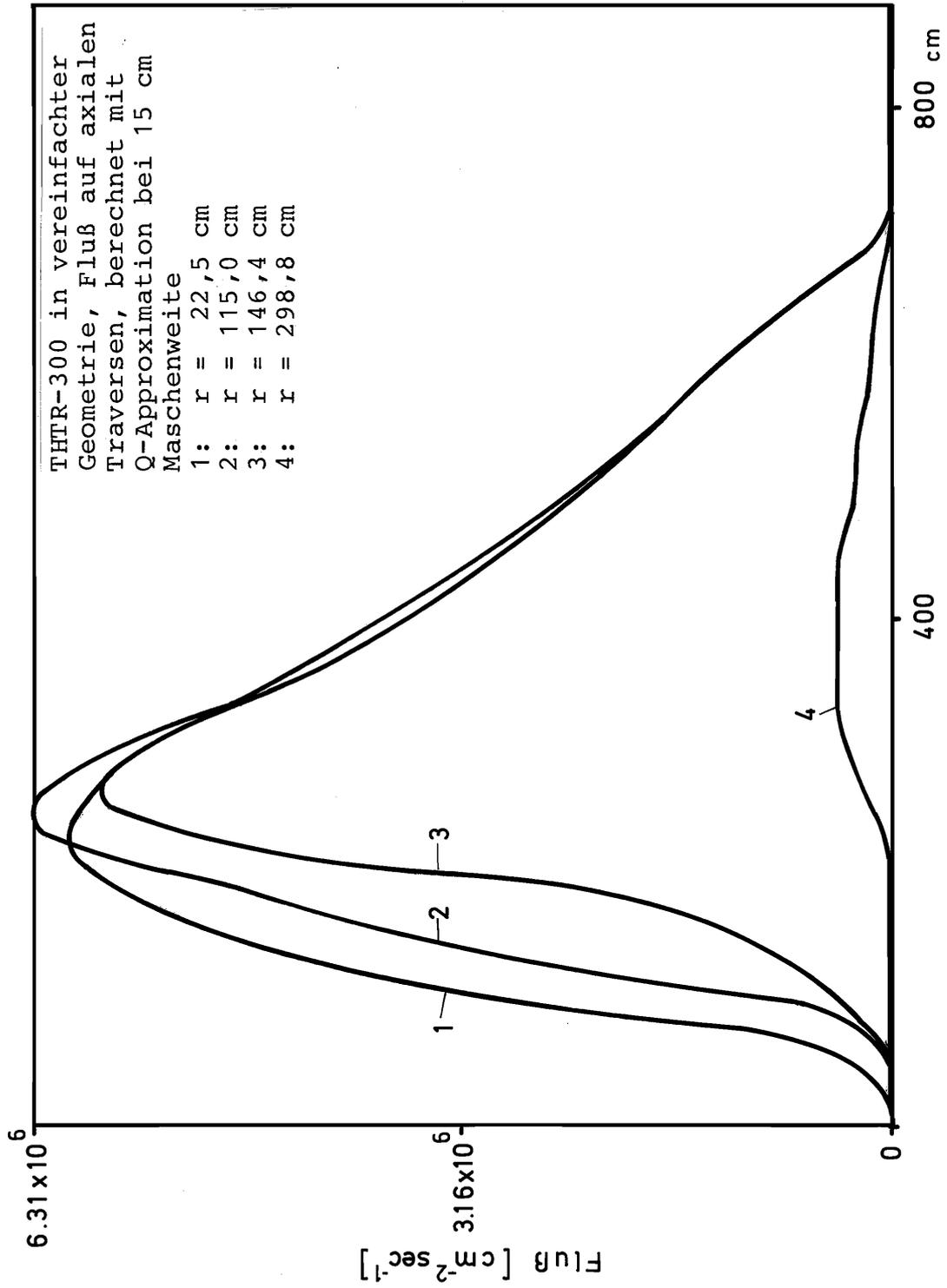


Bild 43: Fluß in Gruppe 2, THTR-300, axiale Traversen

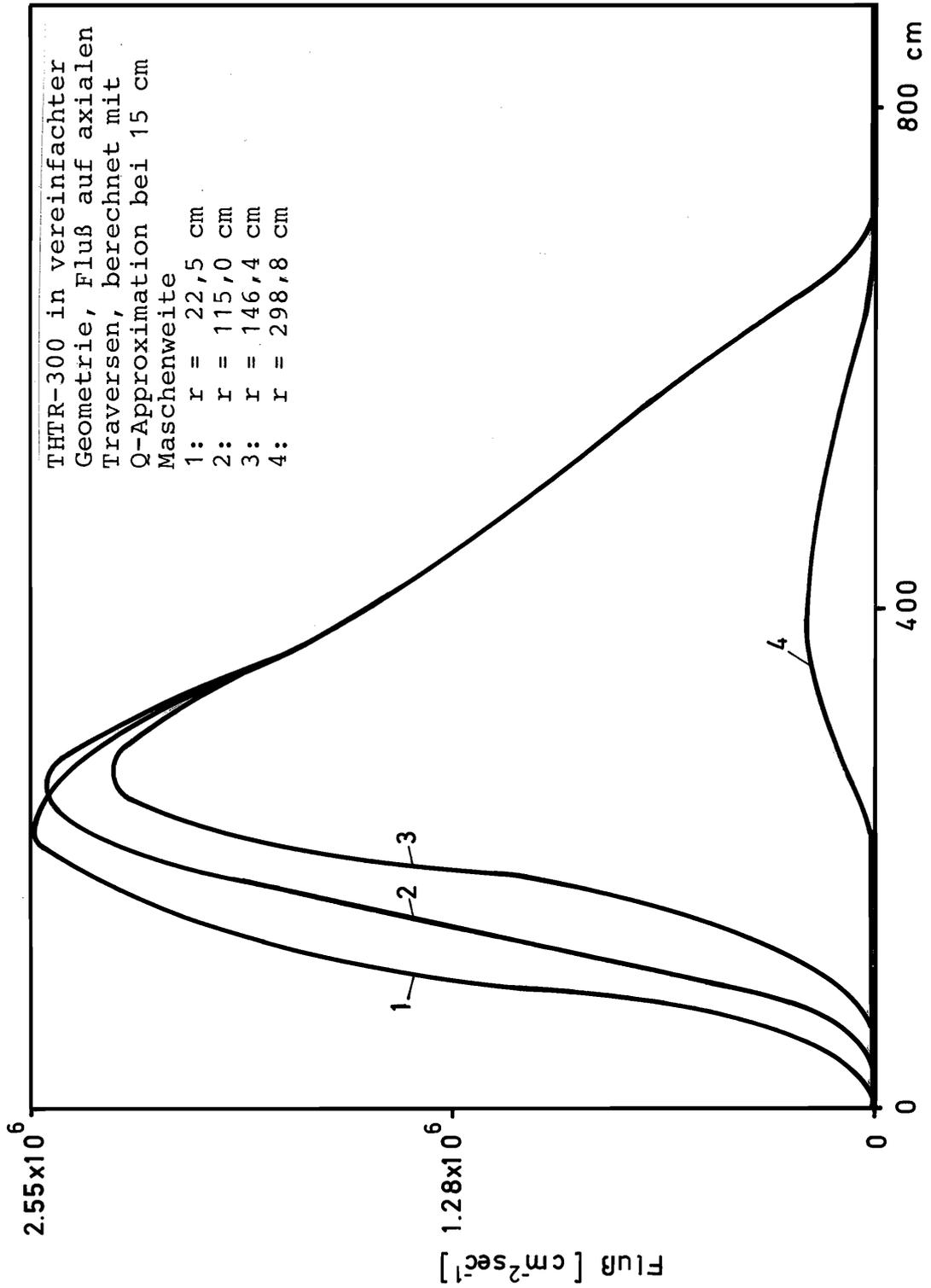


Bild 44: Fluß in Gruppe 3, THTR-300, axiale Traversen

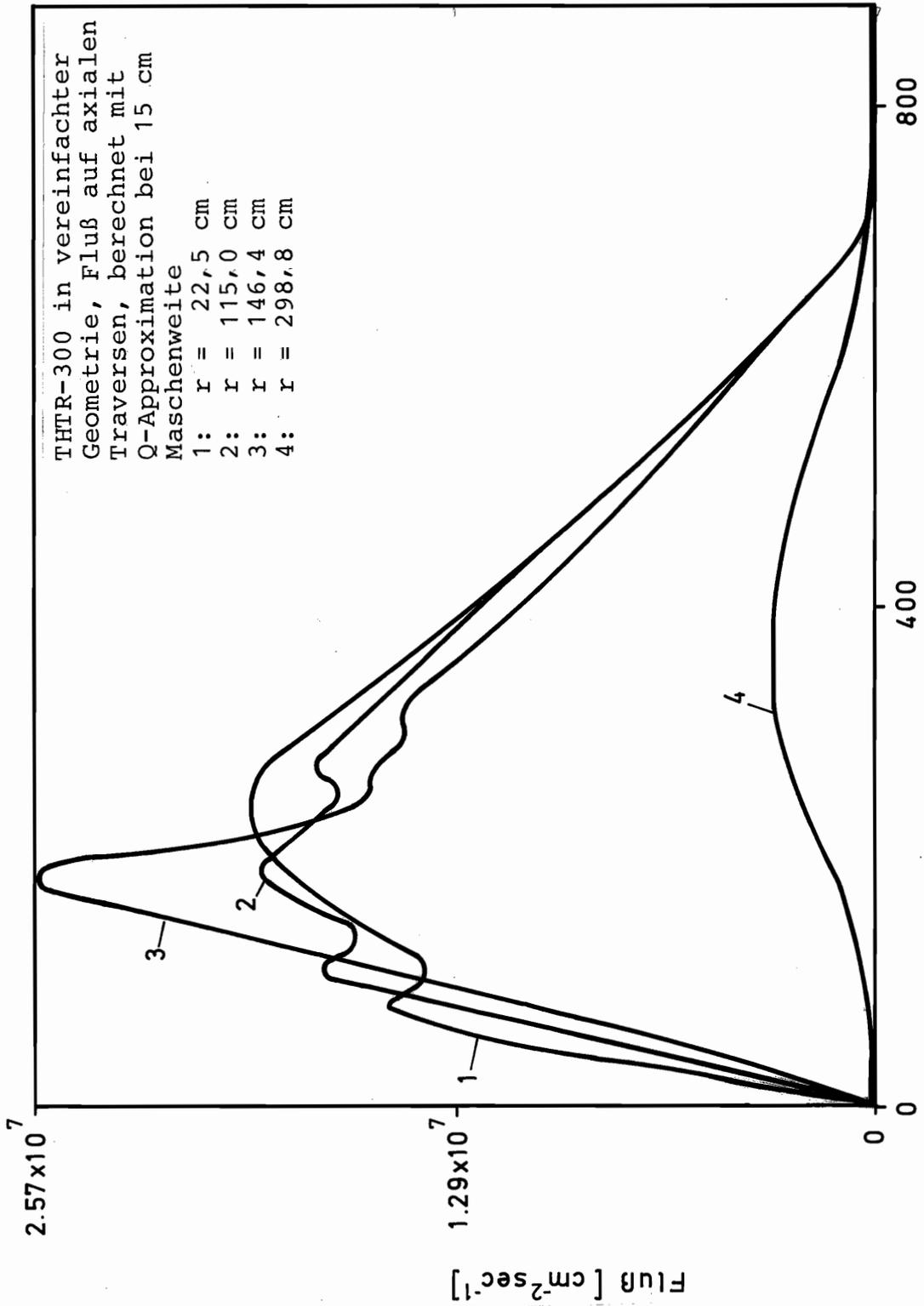


Bild 45: Fluß in Gruppe 4, THTR-300, axiale Traversen

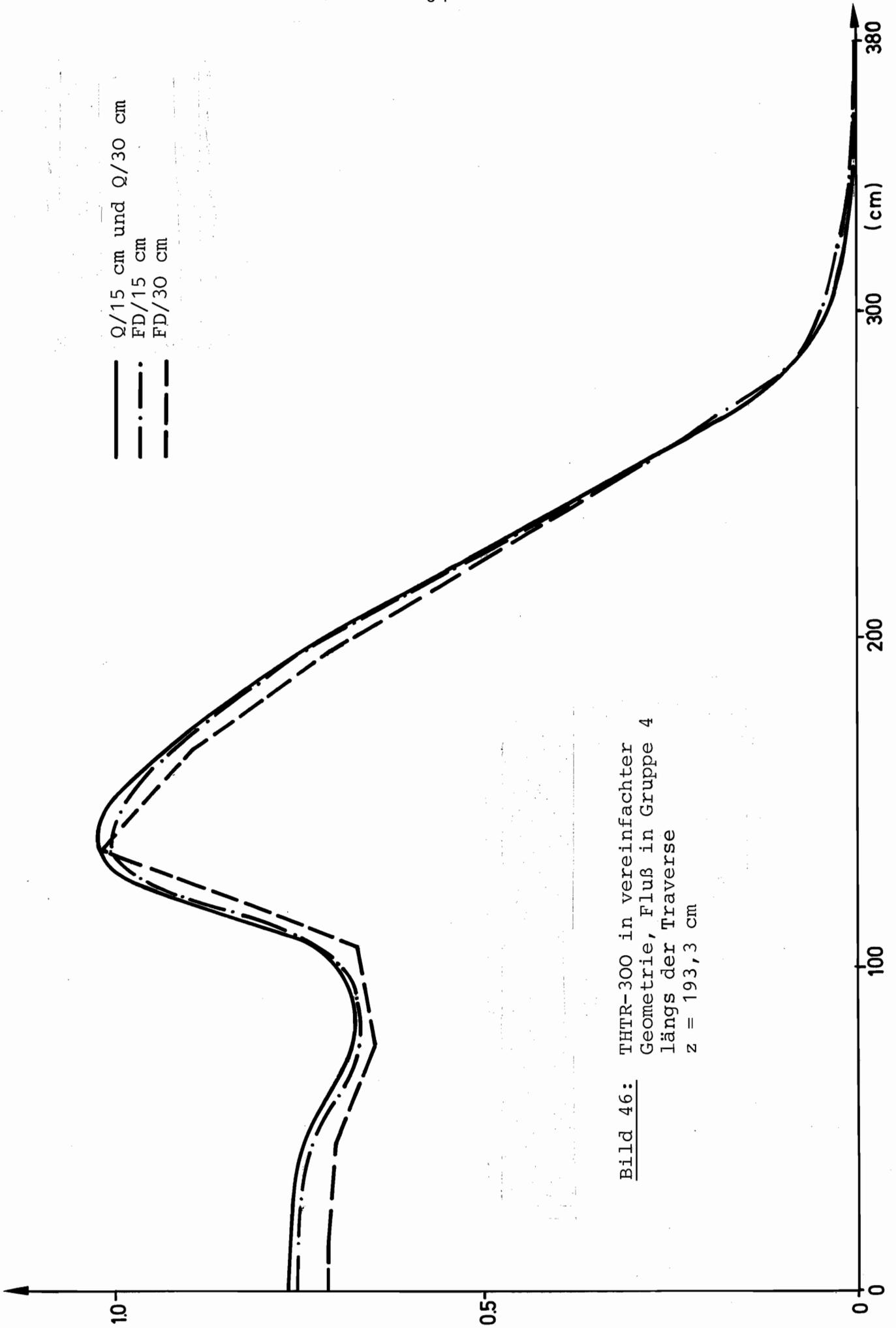


Bild 46: THTR-300 in vereinfachter Geometrie, Fluß in Gruppe 4 längs der Traverse  
z = 193,3 cm

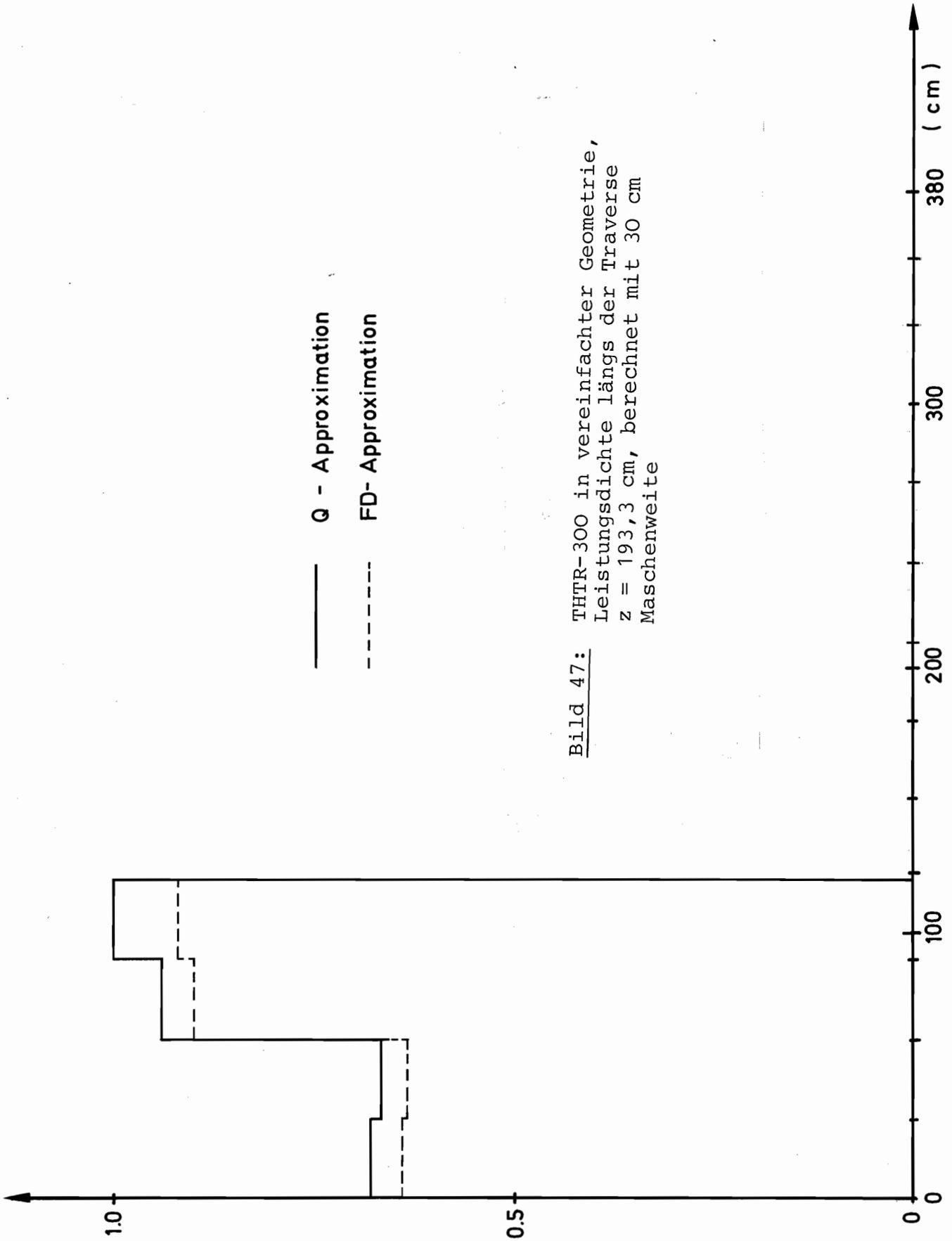


Bild 47: THTR-300 in vereinfachter Geometrie,  
Leistungsdichte längs der Traverse  
 $Z = 193,3$  cm, berechnet mit 30 cm  
Maschenweite

8. TABELLEN

Tab. 1: Eigenwerte beim Lagerbeckenproblem

Tab. 2: Ergebnisse der Benchmark-Rechnungen

Maschenweite	Approximation	Eigenwert
10,0 cm	Q	0,964
10,0 cm	FD	0,922
3,3 cm	Q	0,964
3,3 cm	FD	0,963
1,1 cm	Q	0,964
1,1 cm	FD	0,964

Tab. 1: Eigenwerte beim Lagerbeckenproblem

Problem	Geometrie	Gitterpunktzahl	Maschenweiten (cm)	Approximation	CPU-Zeit (sec)	Iterationen	Eigenwert
Mk-Ia*)	x-y-z	4 x 9 x 9 x 8 = 2 592	11 x 11 x 20	Q	34	10	0,933
Mk-Ia	x-y-z	4 x 9 x 9 x 8 = 2 592	11 x 11 x 20	FD	23	9	0,960
Mk-Ia	x-y-z	4 x 18 x 18 x 16 = 20 736	5,5 x 5,5 x 10	Q	250	11	0,935
Mk-Ia	x-y-z	4 x 18 x 18 x 16 = 20 736	5,5 x 5,5 x 10	FD	182	11	0,946
Na-2	r-z	8 x 25 x 36 = 7 200	5 x 5	Q	101	18	1,004
Na-2	r-z	8 x 25 x 36 = 7 200	5 x 5	FD	63	17	1,008
Na-2	r-z	8 x 25 x 18 = 3 600	5 x 10	Q	39	13	1,004
Na-2	r-z	8 x 25 x 18 = 3 600	5 x 10	FD	25	12	1,022
THTR-300	r-z	4 x 37 x 60 = 8 880	10 x 15	Q	120	19	0,976
THTR-300*)	r-z	4 x 13 x 30 = 1 560	30 x 30	Q	28	26	0,971
THTR-300	r-z	4 x 13 x 30 = 1 560	30 x 30	FD	20	26	0,971
THTR-300	r-z	4 x 26 x 60 = 6 240	15 x 15	Q	125	28	0,971
THTR-300	r-z	4 x 26 x 60 = 6 240	15 x 15	FD	97	27	0,971
*) Vereinfachte Geometrie							

Tab. 2: Ergebnisse der Benchmark-Rechnungen

