

# Primärbericht

Kurzbeschreibung des KAPROS-Moduls  
BURNUP  
zur numerischen Lösung der Abbrandgleichungen

E.Stein, E.Wiegner, C.Broeders

01 • 0 5 • 0 7 P 8 1 D

Oktober 82

PSB - Ber. IV 356

Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik

INR- 1225  
KAPROS-79

PWA- 63/82

**Bitte beachten Sie:** dieser Primärbericht enthält Informationen von vorläufigem Charakter und ist in erster Linie zur aktuellen internen Unterrichtung zwischen den Instituten und den externen Zusammenarbeitspartnern des Kernforschungszentrums Karlsruhe bestimmt. Eine Weitergabe des Berichts oder seines Inhalts durch Dritte bedarf der Zustimmung der Abt. Patente und Lizenzen des KfK.

**Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH**

### Zusammenfassung.

Der Modul BURNUP löst numerisch das Gleichungssystem, welches ( null-dimensional ) die Produktion und den Abbau von Nukliden durch radioaktiven Zerfall und durch Neutronenreaktionen beschreibt. Die Anzahl der Nuklide ist nicht im Programm festgelegt, sondern wird durch externe Bibliotheken bestimmt. Normalerweise werden Bibliotheken mit etwa 1200 Nukliden benutzt. Eingabe und Ausgabe der Teilchendichten erfolgt in einer auch von anderen Programmen benutzten Standardstruktur. Die zum Programm gehörenden mikroskopischen Eingruppenquerschnitte, welche nur in beschränktem Maße problemabhängig sind, können für alle gewünschten Nuklide durch reaktorspezifische Querschnitte ersetzt werden. Die Eingabe dieser Querschnitte erfolgt ebenso wie die Eingabe der Teilchendichten in einer Standardstruktur, die auch in anderen KAPROS-Modulen benutzt wird. Der Modul BURNUP kommt in verschiedenen Prozeduren, welche null- bis drei-dimensionale Abbrandrechnungen durchführen, zum Einsatz.

### Abstract.

Short description of the KAPROS-module BURNUP for the numerical solution of the generation and depletion equations.

The module BURNUP solves numerically the system of equations, which describes ( zerodimensional ) the production and the reduction of nuclides due to radioactive decay and due to neutronic reactions. The number of nuclides is not fixed in the program. It will be determined by external libraries. Normally libraries with about 1200 nuclides will be used. Input and output of the nuclide densities is done in a structure, which is also used by other programs. The microscopic onegroup-cross-sections belonging to the program, which are problem dependent in a limited way only, can be replaced by reactor-specific cross-sections for all desired nuclides. Input of these cross-sections is done just as the input of the nuclide densities in a standard structure also used in other KAPROS modules. The module BURNUP is running in various procedures which perform zero- until three-dimensional burnup calculations.

Inhaltsverzeichnis

Kurzbeschreibung des KAPROS-Moduls BURNUP

	Seite
1. Modulname.....	1
2. Name der Autoren.....	1
3. Aufrufparameter.....	1
4. Zweck des Moduls.....	1
5. Lösungsmethode.....	2
5.1 Lösung der Abbrandgleichungen und Aufbau der Übergangsmatrix A..	2
5.2 Übergabe der Teilchenzahldichten in MISCH-Struktur.....	3
5.3.1 Ausgabe der Teilchenzahldichten in MISCH-Struktur.....	6
5.3.2 Ausgabe aller Teilchenzahldichten in dem Datenblock BURNUP DENSITIES.....	7
5.4 Eingabe der effektiven mikroskopischen Eingruppenquerschnitte...8	
5.4.1 Übernahme der Querschnitte aus dem SIGMN-Block für leichte Elemente.....	13
5.4.2 Übernahme der Querschnitte aus dem SIGMN-Block für Aktiniden...13	
5.4.3 Übernahme der Querschnitte aus dem SIGMN-Block für Spaltprodukte.....	13
6. Einschränkung der Komplexität des Problems.....	19
7. Typische Laufzeiten.....	19
8. Besondere Anwendungsmöglichkeiten.....	19
9. Benutzte Hilfsprogramme.....	19
10. Hardware-Anforderungen des Programms.....	19
11. Beschreibung der Eingabe.....	22
11.1 Eingabeblock DBN=INPUT BURNUP,IND=iparm.....	22
11.2 Eingabeblock DBN=FLUXIN,IND=iparm.....	27
12. Übersicht über die vom Modul erzeugten Datenblöcke.....	28
12.1 DBN=MIXTOUT,IND=1,2,...,MZ.....	28
12.2 DBN=BURNUP DENSITIES,IND=1.....	28
12.3 DBN=BURNUPHILFSFELD1,IND=1, DBN=BURNUPHILFSFELD2,IND=1 und DBN=BURNUPHILFSFELD3,IND=1.....	28
13. Übersicht über die vom Modul gelesenen Datenblöcke.....	28
13.1 DBN=INPUT BURNUP,IND=iparm.....	28
13.2 DBN=FLUXIN,IND=iparm.....	28
13.3 DBN=SIGMN1,IND=1.....	28

	Seite
13.4 DBN=MISCH,IND=1,2,...,MZ.....	29
13.5 DBN=BURNUP DENSITIES,IND=1.....	29
14. Übersicht über die vom Modul geänderten Datenblöcke.....	29
15. Fehlernachrichten des Moduls.....	29
16. Beispiel für den Aufruf und eine Eingabe des Programms.....	29
17. Erläuterung der Ausgabe des Moduls.....	33
17.1 Erläuterung der Standardausgabe des Moduls.....	33
17.2 Erläuterung der Ausgabe bei Angabe des Schlüsselworts 'CNTR'...41	41
17.3 Erläuterung der Ausgabe bei Angabe des Schlüsselworts 'NUDA'...41	41
17.4 Erläuterung der Ausgabe bei Angabe des Schlüsselworts 'PRMT'...42	42
17.5 Erläuterung der Ausgabe bei Angabe des Schlüsselworts 'PRIS'...44	44
17.6 Erläuterung der Ausgabe bei Angabe des Schlüsselworts 'FPWS'...44	44
18. Referenzen.....	45
19. Datenblockspezifikationen für die vom Modul erzeugten Blöcke...47	47
19.1 DBN=BURNUP DENSITIES,IND=1.....	47
19.2 DBN=MIXTOUT,IND=1,2,...,MZ.....	47
 Anhang 1: Beschreibung der vom Programm gelösten Abbrandgleichungen..48	 48
 Anhang 2: Kurzbeschreibung des Prüfmoduls PBURNI.....53	 53
 Anhang 3: Kurzbeschreibung des Prüfmoduls PBURNF.....55	 55
 Anhang 4: Kurzbeschreibung des KAPROS-Moduls ORFORD zum Sortieren der Nuklide auf den ORIGEN-Bibliotheken nach steigenden Atomgewichten.....57	  57

1. Modulname:

BURNUP

Version 02.04 vom 1.6.1982 in FORTRAN IV.

2. Name der Autoren:

E. Stein, INR, 415

E. Wiegner, INR, 658

C. Broeders, INR, 487

3. Aufrufparameter:

Das Programm verwendet den ersten der fünf in KAPROS möglichen Aufrufparameter als Index in den Blocknamen DBN=INPUT BURNUP ( siehe Abschnitt 11.1 dieser Beschreibung ), DBN=FLUXIN ( siehe Abschnitt 11.2 ) und DBN=MISCH ( siehe Abschnitt 13.4 ).

Der Aufrufparameter wird gleich dem Wert von iparm gesetzt, falls der Modul mit

\*GO SM=BURNUP,MPARM=iparm

aufgerufen wurde. Fehlt MPARM in der \*GO-Karte, so wird der Index in den drei Datenblocknamen gleich 1 gesetzt. Dies erfolgt auch, wenn iparm einen Wert kleiner oder gleich Null hat.

4. Zweck des Moduls:

Numerische Lösung der Eingruppen-Abbrandgleichungen  $\frac{dN}{dt} = A * N$  mit  $N$ =Teilchenzahldichtevektor und  $A$ =Übergangsmatrix.  $A$  enthält die Koeffizienten für die Produktion und für den Abbau der Teilchenzahldichten. Sowohl Produktion als auch Abbau der Nuklide erfolgen über radioaktiven Zerfall und über Neutronenreaktionen. Im Anhang 1 ist der Aufbau der Übergangsmatrix mit den darin enthaltenen Koeffizienten näher beschrieben. Die Teilchenzahldichten werden dem Modul in einer MISCH-Struktur, die eine auch in anderen Programmen ( z.B. in GRUCAL (<3> ) benutzte Standardstruktur ist, übergeben. Auch die neuen Teilchenzahldichten zur Zeit  $t+\Delta(t)$  werden in dieser Struktur ausgegeben. Die in den Abbrandgleichungen ( s. Anhang 1 ) benötigten mikroskopischen effektiven Eingruppenquerschnitte können dem Modul für alle Nuklide in einer SIGMN-Struktur (<4>), die auch eine Standard-Struktur ist, zugeführt werden. Diese problemabhängigen Eingruppen-Querschnitte ersetzen die vom Programm aus eigenen ( in Dateien gespeicherten ) Daten berechneten Eingruppenquerschnitte

( siehe Abschnitt 5.4 ), die nur beschränkt problemabhängig sind. Der Modul BURNUP wird zur Zeit meistens innerhalb von Prozeduren angewandt, z.B. bei nulldimensionalen Abbrandrechnungen in BURNOD (<5>), bei zweidimensionalen Abbrandrechnungen in DXBURN (<14>) und bei dreidimensionalen Abbrandrechnungen in BURN3D (<16>). Diese Prozeduren sind für die neutronenphysikalische Berechnung von Reaktoren mit schnellen Spektren konzipiert, da bei der Berechnung der Zonenquerschnitte von homogenisierten Reaktorzonen ausgegangen wird. ( Dabei wird der Modul GRUCAL (<3>) bzw. Modifikationen davon ( siehe <16> ) angewandt. ) Der hier beschriebene Modul BURNUP kann aber auf Reaktoren mit beliebigen Spektren angewandt werden, z.B. auch auf Thermische Reaktoren. Man muß nur dafür sorgen, daß im SIGMN-Block geeignete Eingruppen-Querschnitte angeliefert werden. Das bedeutet, daß in den oben erwähnten Prozeduren der Modul GRUCAL entweder durch ein Programm zu ersetzen ist, das geeignete, außerhalb der Prozeduren berechnete und abgespeicherte, Eingruppen-Querschnitte zur Verfügung stellt - eine Methode ähnlich der in KORIGEN (<2>) angewandten - oder aber durch einen Zellcode zu ersetzen bzw. zu einem Zellcode zu ergänzen ist. ( Man muß auch noch beachten, daß sich die vom Programm aus eigenen Daten berechneten Eingruppenquerschnitte in Abhängigkeit von dem in der Programmeingabe auswählbaren Ausgangsdatensatz auf verschiedene Neutronenflußdichten beziehen. Näheres dazu ist in Abschnitt 5.4 bzw. in Abschnitt 11.1 unter dem Schlüsselwort 'REAC' zu finden. )

#### 5. Lösungsmethode:

Zunächst wird in diesem Abschnitt auf die numerische Lösung der Abbrandgleichungen und den Aufbau der Übergangsmatrix eingegangen werden. Daran schließt sich dann eine Beschreibung der Ein- und Ausgabe der Teilchenzahldichten sowie eine Beschreibung der Eingabe der Eingruppenquerschnitte an.

##### 5.1 Lösung der Abbrandgleichungen und Aufbau der Übergangsmatrix A:

Die Methode zur numerischen Lösung der Abbrandgleichungen ist die gleiche wie in dem Oak Ridge Code ORIGEN (<1>), da der Modul BURNUP ebenso wie auch das Programm KORIGEN (<2>) aus diesem Code entstanden ist. Die zur Lösung des homogenen gewöhnlichen Differentialgleichungssystems erster Ordnung  $\frac{dN}{dt} = A * N$  benutzten Subroutinen sind nahezu unverändert aus ORIGEN in BURNUP übernommen worden. ( Eine detaillierte Beschreibung der Abbrandgleichungen findet man

im Anhang 1 dieses Berichtes. ) Größere Änderungen bis hin zur Neuprogrammierung von Subroutinen wurden in denjenigen Programmteilen vorgenommen, welche die Übergangsmatrix A aufbauen. Diese Matrix wird aus den Daten dreier Bibliotheken, die im folgenden ORIGEN-Bibliotheken genannt werden, aufgebaut. Die erste enthält Zerfalls- und Neutronenreaktions-Daten für leichte Elemente, die zweite Daten für Aktiniden und die dritte Daten für Spaltprodukte. Dabei sind die Neutronenreaktionsdaten ( Querschnitte und Yields bei den Spaltprodukten ) jeweils für 4 verschiedene Reaktortypen gespeichert. ( Die 4 Reaktortypen sind in Abschnitt 11.1 unter der Beschreibung der Eingabe für das Schlüsselwort 'REAC' aufgelistet. ) Die erste Bibliothek ( leichte Elemente ) enthält zur Zeit Daten für 253 Nuklide, die zweite ( Aktiniden ) zur Zeit Daten für 101 Nuklide und die dritte ( Spaltprodukte ) zur Zeit Daten für 821 Nuklide. Das ergibt insgesamt Daten für 1175 Nuklide. Die Anordnung der Nuklide auf einer ORIGEN-Bibliothek erfolgt nach einem der beiden folgenden Prinzipien:

- (a) Die Nuklide sind nach steigender Kernladungszahl sortiert und bei gleicher Kernladungszahl nach steigender Massenzahl.
- (b) Die Nuklide sind nach steigender Massenzahl sortiert und bei gleicher Massenzahl nach steigender Kernladungszahl.

Indem wir uns auf Bibliotheken vom Typ (b) beschränken, d.h. Bibliotheken vom Typ (a) mit dem Programm ORFORD, das im Anhang 4 beschrieben ist, umsortieren, ist es uns durch eine Programmänderung gelungen, im Vergleich zu dem in ORIGEN angewandten Verfahren eine wesentliche Rechenzeiterparnis beim Aufbau der Übergangsmatrix A zu erzielen ( Von vorher 5 Sekunden CPU-Zeit jetzt herunter auf weit weniger als 1 Sekunde CPU-Zeit bei einer Gesamtzeit - mit Lösung der Abbrandgleichungen - von etwa 10 Sekunden ).

Eine weitere Änderung haben wir in den Programmteilen vorgenommen, welche aus den auf den ORIGEN-Bibliotheken gespeicherten Daten Eingruppenquerschnitte berechnen. Diese Änderung, mit der die einfache Verwendung von problemabhängigen Eingruppenquerschnitten ermöglicht wird, ist in Abschnitt 5.4 näher beschrieben.

#### 5.2 Übergabe der Teilchenzahldichten in MISCH-Struktur:

Der Modul BURNUP erwartet die Teilchenzahldichten in der auch vom Modul GRUCAL (<3>) benutzten MISCH-Struktur, die in Abschnitt 19.2 dieser Kurzbeschreibung erläutert wird. Die MISCH-Struktur ist in unserem im Aufbau befindlichem Programmsystem für Untersuchungen

zum nuklearen Brennstoffkreislauf ( siehe <16> ) das Standard-Interface zur Weitergabe von Teilchenzahldichten.

Von den in dem Datenblock MISCH enthaltenen Materialnamen werden in BURNUP nur die ersten fünf Zeichen interpretiert. Die ersten beiden Zeichen enthalten dabei - von Ausnahmen, von denen eine weiter unten aufgeführt wird, abgesehen - das Symbol des chemischen Elementes. Die nächsten drei Stellen sind bei Elementen mit Leerzeichen ( z.B. PU\_\_ ; wobei " " für ein Leerzeichen steht ) bzw. bei Isotopen der Elemente mit der Massenzahl ( z.B. AM241 ) gefüllt. Bei einem metastabilen Isotop werden nur die beiden letzten Stellen der Massenzahl des zugehörigen Elements als drittes und viertes Zeichen übernommen. An der 5. Stelle steht bei einem metastabilen Isotop der Buchstabe M ( z.B. AM41M ). Zu den schon oben erwähnten Ausnahmen von den bisher aufgeführten Regeln zählt z.B. der Name SPP\_9, der für eine Mischung von Pseudospaltproduktpaaren steht. In den ORIGEN-Bibliotheken sind die Daten für Zerfalls- und Neutronen-Reaktionen nicht für Elemente, sondern nur für die Isotope der Elemente gespeichert. Die Namen, unter denen die Daten zu finden sind, bestehen dabei aus 5 bzw. 6 Ziffern. Die ersten beiden Ziffern bei 6-stelligen Zahlen geben ( bzw. die erste Ziffer bei 5-stelligen Zahlen gibt ) dabei die Kernladungszahl des Nuklids an. ( Der Ausdruck Nuklid statt Isotop wird hier immer gebraucht, wenn nicht von den Isotopen eines bestimmten Elementes die Rede ist. ) Die nächsten drei Stellen enthalten dann die Massenzahl. Die nächste Stelle kann entweder den Wert 0 oder 1 haben. Die Ziffer Null bedeutet dabei den Grundzustand und die Ziffer 1 einen isomeren Zustand des Nuklids. Beispiele für Namen sind 922350 für  $^{235}\text{U}$  im Grundzustand und 952411 für das metastabile  $^{241}\text{Am}$ . Zur Zuordnung der in dem MISCH-Block angelieferten Teilchenzahldichten zu den Nukliden in den ORIGEN-Bibliotheken werden die folgenden Regeln verwendet:

- Steht im MISCH-Block der Name eines Isotops, so wird die Teilchenzahldichte dem entsprechenden Nuklid in der ORIGEN-Bibliothek zugeordnet. Sind keine Daten für das Nuklid in den ORIGEN-Bibliotheken vorhanden, so bleibt die Teilchenzahldichte unberücksichtigt, wobei jedoch im Programm eine entsprechende Warnung ausgegeben wird. Enthalten zwei oder drei der ORIGEN-Bibliotheken Daten für das gleiche Nuklid, so wird die Teilchenzahldichte nur dem Nuklid derjenigen ORIGEN-Bibliothek



zugeordnet, die von dem Programm zuerst behandelt wird. Die Bibliotheken werden dabei vom Programm in der Reihenfolge leichte Elemente, Aktiniden, Spaltprodukte beim Aufbau der Übergangsmatrix A abgearbeitet.

- Steht im MISCH-Block der Name eines Elementes, so wird die Teilchenzahldichte dem am häufigsten vorkommenden Isotop des Elementes zugeordnet. Danach wird wie oben verfahren. Einen Ausdruck der Zuordnung der Elemente zu dem jeweiligen häufigsten Isotop erhält man durch Angabe des Schlüsselwortes 'PRIS' im Eingabedatenblock DBN=INPUT\_BURNUP ( siehe 11.1 ). Im übrigen liefert der Modul BURNUP im Ausdruck eine Übersicht der Zuordnung Teilchenzahldichten und Nuklide in den ORIGEN-Bibliotheken.

Neben der Zuweisung der Teilchenzahldichte des Elementes an die des am häufigsten vorkommenden Isotopes des Elementes erfolgt auch eine Ersetzung der Querschnitte ( s. 5.4 ) des am häufigsten vorkommenden Isotopes durch die Querschnitte des Elementes, vorausgesetzt daß im SIGMN-Block ( effektive ) mikroskopische Eingruppenquerschnitte vorhanden waren. Welche Auswirkungen dieses Vorgehen - Zuweisung der Teilchenzahldichte und Ersetzung der Querschnitte - auf die Ergebnisse haben kann, sollte man sich im Einzelfall immer überlegen. Falls möglich, ist es sicher immer günstiger, Teilchenzahldichten für Isotope im MISCH-Block anzugeben.

- Steht im MISCH-Block z.B. der Name SPP\_9, so wird wie bei nicht in den ORIGEN-Bibliotheken vorhandenen Nukliden verfahren: die Teilchenzahldichte bleibt unberücksichtigt. ( Die Angabe des Namens ist jedoch nicht ohne Sinn. Siehe dazu den nächsten Abschnitt 5.3.1. )

Wenn im MISCH-Block der Name eines Isotopes mehrfach auftaucht, bzw. wenn im MISCH-Block der Name eines Elementes und des zugehörigen am häufigsten vorkommenden Isotopes steht, so hat man für ein Nuklid mehrere Teilchenzahlangaben. In diesem Fall wird immer die zuerst gefundene Teilchenzahldichte verwendet.

Das Programm GRUCAL prüft, ob in dem ihm zugeführten MISCH-Block nur solche Namen stehen, die auch auf der benutzten GRUBA-Bibliothek zu finden sind. Beim ersten Auftreten eines anderen Namen wird unter Ausgabe von Fehlermeldungen der ganze KAPROS-Lauf abgebrochen. Wenn man erreichen will, daß GRUCAL bzw. der KAPROS-Lauf in diesem Fall

unter Nichtberücksichtigung des entsprechenden Materials weiterläuft, so muß man in der GRUCAL-Eingabe hinter dem Schlüsselwort 'MISCH' das Schlüsselwort 'NOTGRMAT' angeben (siehe dazu das in Abschnitt 16. gelistete Eingabebeispiel).

### 5.3.1 Ausgabe der Teilchenzahldichten in MISCH-Struktur:

Die Ausgabe der Teilchenzahldichten zu den Zeitpunkten  $t+n*\Delta(t)$  mit  $n=1,2,\dots,MZ$  erfolgt in der gleichen Struktur, in der die Teilchenzahldichten zum Zeitpunkt  $t$  eingegeben worden sind: in MISCH-Struktur. Die Ausgabe-Datenblöcke  $DBN=MIXTOUT, IND=1,2,\dots,MZ$  (siehe 12.1; MZ steht für die Anzahl der bei einem Aufruf von BURNUP gerechneten Zeitschritte. MZ kann maximal den Wert 10 annehmen.) enthalten die gleichen Materialnamen wie der Eingabe-Block  $DBN=MISCH, IND=iparm$  (siehe 13.4). Das bedeutet, daß man alle Materialien, für die man Teilchenzahldichten zu den Zeitpunkten  $t+n*\Delta(t)$  haben möchte, im Eingabedatenblock angeben muß. Sind diese Materialien am Anfang nicht vorhanden, so ist die Teilchenzahldichte im Eingabe-Datenblock auf einen kleinen positiven Wert z.B.  $1.0E-20$  zu setzen.

Die Angabe des Materialnamens im Eingabe-MISCH-Block genügt jedoch allein noch nicht, um die abgebrannte Teilchenzahldichte in den Ausgabe-MISCH-Blöcken erscheinen zu lassen. Zusätzlich muß noch mindestens eine der folgenden drei Bedingungen erfüllt sein.

- (1) Die Kernladungszahl des Materials ist größer oder gleich 90.
- (2) Der Materialname stimmt mit dem unter der Variablen NFISP abgespeicherten überein (siehe Abschnitt 11.1 Schlüsselwort 'NAMS').
- (3) Es handelt sich um eines der Elemente Li, B, Cd, Eu, Gd und Hf, wenn das Schlüsselwort 'BUTB' in dem Eingabe-Datenblock INPUT\_BURNUP (siehe Abschnitt 11.1) nicht angegeben wurde. Bei Angabe dieses Schlüsselwortes werden statt der obigen Elemente die hinter dem Schlüsselwort angegebenen genommen.

Die Teilchenzahldichte für das Kühlmittel, dessen Namen in der Variablen COOLNT (siehe Abschnitt 11.1 Schlüsselwort 'NAMS') gespeichert ist, wird unverändert aus dem Eingabe-MISCH-Block übernommen.

Die in den MIXTOUT-Datenblöcken weitergegebenen Teilchenzahldichten für die abbrennbaren Materialien werden nach den folgenden Regeln bestimmt:

- (1) Ist das Material ein Isotop eines Elementes, so werden alle

aus den drei ORIGEN-Bibliotheken stammenden Nuklide durchsucht und bei jedem Auftreten des Nuklides die Teilchenzahldichte aufsummiert. ( Normalerweise tritt ein Nuklid nur in einer der drei ORIGEN-Bibliotheken auf. Es gibt jedoch einige Nuklide, die mehrmals auftreten. ) Die aufsummierte Teilchenzahldichte wird in die MIXTOUT-Datenblöcke geschrieben.

- (2) Ist das Material ein Element, so werden die aus den drei ORIGEN-Bibliotheken stammenden Nuklide nach den Isotopen dieses Elementes durchsucht. Alle gefundenen Teilchenzahldichten werden wieder aufsummiert und im MIXTOUT-Datenblock ausgegeben. Wenn sowohl der Elementname als auch ein Isotopname dieses Elementes als abbrennbar gekennzeichnet sind, so wird die Teilchenzahldichte für das Isotop sowohl unter dem Isotopnamen, als auch anteilmäßig unter dem Elementnamen weitergegeben.
- (3) Ist der Materialname gleich dem in der Variablen NFISP (siehe 11.1) gespeicherten Namen für das Pseudospaltprodukt ( z.B. SPP\_9 ), so werden alle Teilchenzahldichten der Spaltprodukte - das sind alle Nuklide der dritten ORIGEN-Bibliothek - aufsummiert. Diese Zahl wird dann halbiert bevor sie in den MIXTOUT-Datenblock geschrieben wird. Dies ist notwendig, da die auf den GRUBA-Bibliotheken stehenden Querschnitte für das Pseudospaltprodukt Werte für Spaltproduktpaare ( b.z.w. Werte für die pro Spaltung im Mittel entstehenden Spaltprodukte ) enthalten. Ist die Teilchenzahldichte für ein Spaltprodukt bereits bei (1) berücksichtigt worden, so wird die Teilchenzahldichte hier nicht mehr berücksichtigt. Dies gilt jedoch nicht, wenn die Teilchenzahldichte nur bei einem Element nach (2) berücksichtigt wurde.

Diese drei Regeln werden deutlicher, wenn man dazu die in der Ausgabe des Programms unter der Überschrift "DENSITIES IN MIXTOUT DATA BLOCKS" gelistete Tabelle betrachtet. Diese Tabelle ist auch in Abschnitt 17.1 ( Erläuterung der Standardausgabe des Moduls ) näher beschrieben.

### 5.3.2 Ausgabe aller Teilchenzahldichten in dem Datenblock

#### BURNUP DENSITIES:

Neben der Ausgabe der Teilchenzahldichten in den in 5.3.1 beschriebenen Datenblöcken DBN=MIXTOUT erfolgt noch eine Ausgabe in dem Datenblock DBN=BURNUP DENSITIES. Dieser Datenblock enthält

die neuen Teilchenzahldichten aller Nuklide, d.h. nicht nur der im MISCH-Block weitergegebenen. Dadurch werden alle Teilchenzahldichten von Zeitschritt zu Zeitschritt weitergegeben. Die Struktur dieses Blockes mit dem Datenblocknamen DBN=BURNUP DENSITIES,IND=1 ist in Abschnitt 19.1 dieses Berichtes beschrieben. Findet der Modul BURNUP diesen Datenblock in der KAPROS-Lifeline (<6> und <7>), so werden statt der Teilchenzahldichten aus dem Datenblock DBN=MISCH,IND=iparm diejenigen aus dem Datenblock DBN=BURNUP DENSITIES,IND=1 genommen. Enthält letzterer Daten für mehrere Zeitschritte, so werden die des letzten Zeitschrittes genommen. Werden beim neuen Starten des Moduls BURNUP Nuklide, für welche Daten in DBN=BURNUP DENSITIES,IND=1 vorhanden sind, nicht mehr gefunden ( möglich durch Wechseln des Reaktortyps ), so werden Warnungen ausgegeben. Die Zahl der Mischungen in dem gelesenen Datenblock DBN=BURNUP DENSITIES muß mit der Zahl der Mischungen in dem aktuellen Datenblock DBN=MISCH,IND=iparm übereinstimmen.

Der Modul kann in einem Aufruf bis zu 10 Zeitschritte rechnen ( siehe Abschnitt 11.2 ). Dabei werden aber für den zweiten und die folgenden Zeitschritte die auch schon im ersten Zeitschritt benutzten Eingruppenquerschnitte verwendet. D.h. Änderungen des Spektrums z.B. durch Abbrand werden innerhalb eines BURNUP-Aufrufes nicht berücksichtigt.

#### 5.4 Eingabe der effektiven mikroskopischen Eingruppenquerschnitte:

Das Programm berechnet aus den in den ORIGEN-Bibliotheken abgespeicherten Daten unter Verwendung der im Eingabedatenblock spezifizierbaren Faktoren THERM, RES und FAST ( s. 11.1 Schlüsselwort 'REAC' ) die in den Abbrandgleichungen ( siehe Anhang 1 ) benötigten Eingruppen-Querschnitte. Dabei hat man die Auswahl zwischen vier mit Neutronen-Spektren von verschiedenen Reaktortypen gewichteten Datensätzen ( siehe auch 11.1 Schlüsselwort 'REAC' ). Für das HTGR- ( High Temperature Gas Reactor ), das LWR- ( Light Water Reactor ) und das MSBR-Kondensationsspektrum ( Molten Salt Breeder Reactor ) stehen auf den Datensätzen auf die thermische Neutronenflußdichte bezogene Gruppen-Querschnitte für den thermischen Bereich, den Resonanzbereich sowie den schnellen Bereich. Für das LMFBR-Kondensationsspektrum ( Liquid Metal Fast Breeder Reactor ) enthalten die Datensätze auf die totale Neutronenflußdichte bezogene Eingruppenquerschnitte. Die Datensätze für alle

vier Spektren enthalten noch Faktoren, mit denen eine Aufspaltung der Querschnitte auf verschiedene Reaktionen durchgeführt wird ( siehe Abb. 1, 2 und 3 ). Wenn das Programm die Eingruppen-Querschnitte aus Daten rechnet, die mit dem LMFBR-Spektrum gewichtet sind, dann haben die Faktoren THERM, RES und FAST keine Bedeutung. Die stark vom Spektrum abhängigen Eingruppenquerschnitte können also nur bei Spektren, die ähnlich zu den bei den Bibliotheksdaten für HTGR-, LWR- oder MSBR-Reaktortypen zugrunde gelegten sind, in geringem Maße mit Hilfe der Faktoren THERM, RES und FAST an das aktuelle Spektrum angepasst werden. ( Näheres über die Definition der auf den ORIGEN-Bibliotheken gespeicherten Querschnitte sowie der Faktoren THERM, RES und FAST findet man in <1> und <2>. ) Die vom Programm aus abgespeicherten Daten berechneten Querschnitte können für alle Nuklide ersetzt werden. Dadurch wird es ermöglicht, für alle wichtigen Nuklide Eingruppenquerschnitte zu benutzen, welche mit dem für den berechneten Fall typischen Neutronenspektrum kondensiert wurden. Der Modul erwartet diese Querschnitte in der von vielen anderen Modulen auch benutzten SIGMN-Struktur ( siehe 13.3 bzw. <4> ). Die SIGMN-Struktur ist auch in unserem im Aufbau befindlichem Programmsystem für Untersuchungen zum nuklearen Brennstoffkreislauf ( siehe <16> ) das Standard-Interface zur Weitergabe von Querschnitten.

Da der Ersetzungsmechanismus der Querschnitte für die Nuklide der drei ORIGEN-Bibliotheken verschieden ist, wird im folgenden auf jede Bibliothek einzeln eingegangen werden. Die Bedeutung der in den folgenden Abschnitten 5.4.1, 5.4.2 und 5.4.3 in den Strukturdiagrammen benutzten Variablennamen und Symbole wird jedoch für alle drei Abschnitte gemeinsam erläutert.

Eine Lektüre bzw. ein Verständnis der folgenden drei Abschnitte 5.4.1, 5.4.2 und 5.4.3 und der Abbildungen 1, 2 und 3, sowie der folgenden Erläuterung der in den Strukturdiagrammen benutzten Variablennamen und Symbole, ist zur Benutzung des Moduls BURNUP nicht unbedingt notwendig, da BURNUP ein Protokoll über die erfolgte Querschnittersetzung ausgibt. Die Abschnitte 5.4.1, 5.4.2 und 5.4.3 sollen jedoch einerseits dem interessierten Benutzer zeigen, wie das Programm bei der sehr wichtigen Querschnittersetzung vorgeht, andererseits aber auch den Programmbetreuern als nachschlagbare Unterlagen bei eventuell notwendigen Programmänderungen dienen.

Übersicht der in den Abbildungen 1, 2 und 3 benutzten Variablen=namen und Symbole:

- (n, $\alpha$ ) Im Programm benutzter (n, $\alpha$ )-Querschnitt.
- (n,p) Im Programm benutzter (n,p)-Querschnitt.
- (n, $\gamma$ ) Im Programm benutzter (n, $\gamma$ )-Querschnitt (Grundzustand).
- (n, $\gamma^*$ ) Im Programm benutzter (n, $\gamma^*$ )-Querschnitt (isomere Zustände).
- (n,2n) Im Programm benutzter (n,2n)-Querschnitt (Grundzustand).
- (n,2n $^*$ ) Im Programm benutzter (n,2n $^*$ )-Querschnitt (isomere Zustände).
- (n,3n) Im Programm benutzter (n,3n)-Querschnitt.
- (n,f) Im Programm benutzter Spalt-Querschnitt.
- (n,#) $^*$  Multiplikation eines Querschnittes mit den folgenden Termen.  
# ist dabei einer der obigen Typen.
- F .FALSE. Ausgang bei logischen Abfragen.
- FAST Eingelesener Wert. ( Siehe 11.1 bzw. <1> und <2> . )
- FFNA Wird - multipliziert mit dem von der ORIGEN-Bibliothek gelesenen Wert SIGMEV - zur Berechnung des (n, $\alpha$ )-Querschnittes benutzt. Wert von ORIGEN-Bibliothek. ( siehe <1> ).
- FFNP Wird - multipliziert mit dem von der ORIGEN-Bibliothek gelesenen Wert SIGMEV - zur Berechnung des (n,p)-Querschnittes benutzt. Wert von ORIGEN-Bibliothek. ( siehe <1> ).
- FINA Wird - multipliziert mit dem von der ORIGEN-Bibliothek gelesenen Wert RITH - zur Berechnung des (n, $\alpha$ )-Querschnittes benutzt. Wert von ORIGEN-Bibliothek. ( siehe <1> ).
- FINP Wird - multipliziert mit dem von der ORIGEN-Bibliothek gelesenen Wert RITH - zur Berechnung des (n,p)-Querschnittes benutzt. Wert von ORIGEN-Bibliothek. ( siehe <1> ).
- FNA Wird - multipliziert mit dem von der ORIGEN-Bibliothek gelesenen Wert SIGTH - zur Berechnung des (n, $\alpha$ )-Querschnittes benutzt. Wert von ORIGEN-Bibliothek. ( siehe <1> ).
- FNP Wird - multipliziert mit dem von der ORIGEN-Bibliothek gelesenen Wert SIGTH - zur Berechnung des (n,p)-Querschnittes benutzt. Wert von ORIGEN-Bibliothek. ( siehe <1> ).
- FNG1 Relativer Anteil an der totalen (n, $\gamma$ )-Reaktion, die ein Produkt-Nuklid im isomeren Zustand erzeugt. Wert von ORIGEN-Bibliothek. ( Bedeutung siehe <1> )

- FN2N1 Relativer Anteil an der totalen (n,2n)-Reaktion, die ein Produkt-Nuklid im isomeren Zustand erzeugt. Wert von ORIGEN-Bibliothek. ( Bedeutung siehe <1> )
- j ja. Ausgang bei Bejahung der Aussage.
- L12 Marke. Strukturdiagramm wird auf der folgenden Seite fortgesetzt bzw. beginnt auf der vorhergehenden Seite.
- L15 Marke. Strukturdiagramm wird auf der folgenden Seite fortgesetzt bzw. beginnt auf der vorhergehenden Seite.
- MIBOMA Logische Variable. Hat den Wert .TRUE., wenn der Name des betreffenden Materials im MISCH-Block steht. Sonst hat sie den Wert .FALSE..
- n nein. Ausgang bei Verneinung der Aussage.
- NLIBE Reaktortyp. ( Siehe 11.1. )
- RES Eingelesener Wert. ( Siehe 11.1 bzw. <1> und <2>. )
- RIF Wert von ORIGEN-Bibliothek. ( Bedeutung siehe <1> )
- RING Wert von ORIGEN-Bibliothek. ( Bedeutung siehe <1> )
- RITH Beim ersten Auftreten Wert von ORIGEN-Bibliothek. (Bedeutung siehe <1> ). Bei späterem Auftreten berechneter Wert nach Formel in Strukturdiagramm.
- RV1 Kennziffer ( Integer Größe ) für Art der Zuweisung des (n, $\alpha$ )-Querschnittes.
- RV2 Kennziffer ( Integer Größe ) für Art der Zuweisung des (n,p)-Querschnittes.
- RV3 Kennziffer ( Integer Größe ) für Art der Zuweisung des (n, $\gamma$ )-Querschnittes ( Grundzustand ).
- RV4 Kennziffer ( Integer Größe ) für Art der Zuweisung des (n, $\gamma^*$ )-Querschnittes ( isomere Zustände ).
- RV5 Kennziffer ( Integer Größe ) für Art der Zuweisung des (n,2n)-Querschnittes ( Grundzustand ).
- RV6 Kennziffer ( Integer Größe ) für Art der Zuweisung des (n,2n $^*$ )-Querschnittes ( isomere Zustände ).
- RV7 Kennziffer ( Integer Größe ) für Art der Zuweisung des (n,3n)-Querschnittes.
- RV8 Kennziffer ( Integer Größe ) für Art der Zuweisung des Spalt-Querschnittes.
- SCAPT Einfang-Querschnitt aus dem SIGMN-Block. Normalerweise gleich  $(n,\gamma)_{total} + (n,\alpha) + (n,p)$ .
- SGALP (n, $\alpha$ )-Querschnitt aus dem SIGMN-Block.

- SGG Totaler (n,  $\bar{x}$ )-Querschnitt aus dem SIGMN-Block.
- SGGB (n,  $\bar{x}$ )-Querschnitt aus dem SIGMN-Block für den Übergang zum Grundzustand.
- SGGI (n,  $\bar{x}$ )-Querschnitt aus dem SIGMN-Block für den Übergang zu isomeren Zuständen.
- SGP (n, p)-Querschnitt aus dem SIGMN-Block.
- SFISS Spalt-Querschnitt aus dem SIGMN-Block.
- SIGF Beim ersten Auftreten Wert von ORIGEN-Bibliothek. (Bedeutung siehe <1> ). Bei späterem Auftreten berechneter Wert nach Formel in Strukturdiagramm.
- SIGFF Wert von ORIGEN-Bibliothek. ( Bedeutung siehe <1> )
- SIGMEV Beim ersten Auftreten Wert von ORIGEN-Bibliothek. (Bedeutung siehe <1> ). Bei späterem Auftreten berechneter Wert nach Formel in Strukturdiagramm.
- SIGNG Beim ersten Auftreten Wert von ORIGEN-Bibliothek. (Bedeutung siehe <1> ). Bei späterem Auftreten berechneter Wert nach Formel in Strukturdiagramm.
- SIGN2N Beim ersten Auftreten Wert von ORIGEN-Bibliothek. (Bedeutung siehe <1> ). Bei späterem Auftreten berechneter Wert nach Formel in Strukturdiagramm.
- SIGN3N Beim ersten Auftreten Wert von ORIGEN-Bibliothek. (Bedeutung siehe <1> ). Bei späterem Auftreten berechneter Wert nach Formel in Strukturdiagramm.
- SIGTH Beim ersten Auftreten Wert von ORIGEN-Bibliothek. (Bedeutung siehe <1> ). Bei späterem Auftreten berechneter Wert nach Formel in Strukturdiagramm.
- SN2NB (n, 2n)-Querschnitt aus dem SIGMN-Block für den Übergang zum Grundzustand.
- SN2N Totaler (n, 2n)-Querschnitt aus dem SIGMN-Block.
- SN3N Totaler (n, 3n)-Querschnitt aus dem SIGMN-Block.
- SN2NI (n, 2n)-Querschnitt aus dem SIGMN-Block für den Übergang zu isomeren Zuständen.
- T .TRUE. Ausgang bei logischen Abfragen.
- THERM Eingelesener Wert. ( Siehe 11.1 bzw. <1> und <2>. )
- W Marke. Ende des Programmteils, welcher durch das Struktur=diagramm dargestellt wird.



#### 5.4.1 Übernahme der Querschnitte aus dem SIGMN-Block für leichte

##### Elemente:

Das Programm benötigt die Eingruppenquerschnitte für die Reaktionen  $(n,\alpha)$ ,  $(n,p)$ ,  $(n,\gamma)$ ,  $(n,\gamma^*)$ ,  $(n,2n)$  und  $(n,2n^*)$ . Mit  $(n,\gamma)$  und  $(n,2n)$  sind die Übergänge zum Grundzustand gemeint, während  $(n,\gamma^*)$  und  $(n,2n^*)$  die Übergänge zu isomeren Zuständen bedeuten. In der folgenden Abbildung 1 ist in einem Strukturdiagramm dargestellt, wie die Werte in dem SIGMN-Block - bei Vorhandensein, d.h. wenn sie einen Wert ungleich Null haben - die von der ORIGIN-Bibliothek stammenden Werte ersetzen.

#### 5.4.2 Übernahme der Querschnitte aus dem SIGMN-Block für Aktiniden:

Das Programm berücksichtigte in seiner ursprünglichen Fassung nur die Reaktionen  $(n,\gamma)$ ,  $(n,\gamma^*)$ ,  $(n,2n)$ ,  $(n,2n^*)$ ,  $(n,3n)$  und  $(n,f)$ . Dabei sind wieder mit  $(n,\gamma)$  und  $(n,2n)$  die Übergänge zum Grundzustand und mit  $(n,\gamma^*)$  und  $(n,2n^*)$  die Übergänge zu isomeren Zuständen gemeint. Nur für die oben gelisteten sechs Reaktionen sind Daten auf den ORIGIN-Bibliotheken vorhanden. Wir haben das Programm so erweitert, daß auch, falls Daten im SIGMN-Block vorhanden sind,  $(n,\alpha)$ - und  $(n,p)$ -Übergänge behandelt werden können. In der folgenden Abbildung 2 ist in einem Strukturdiagramm dargestellt, wie die Werte in dem SIGMN-Block - bei Vorhandensein, d.h. wenn sie einen Wert ungleich Null haben - die von der ORIGIN-Bibliothek stammenden Werte ersetzen. Für die Querschnitte der Typen  $(n,\alpha)$  und  $(n,p)$  wird, falls sie nicht im SIGMN-Block zu finden sind, der Wert Null angenommen.

#### 5.4.3 Übernahme der Querschnitte aus dem SIGMN-Block für Spaltprodukte:

Das Programm berücksichtigte in seiner ursprünglichen Fassung nur die  $(n,\gamma)$ -Übergänge zum Grundzustand und zu isomeren Zuständen. Nur für diese beiden Reaktionen sind Daten auf den ORIGIN-Bibliotheken vorhanden. Wir haben das Programm so erweitert, daß auch, falls Daten im SIGMN-Block vorhanden sind,  $(n,\alpha)$ - und  $(n,p)$ -Übergänge behandelt werden können. In der folgenden Abbildung 3 ist in einem Strukturdiagramm dargestellt, wie die Werte in dem SIGMN-Block - bei Vorhandensein, d.h. wenn sie einen Wert ungleich Null haben - die von der ORIGIN-Bibliothek stammenden Werte ersetzen. Für die Querschnitte der Typen  $(n,\alpha)$  und  $(n,p)$  wird, falls sie nicht im SIGMN-Block zu finden sind, der Wert Null angenommen.

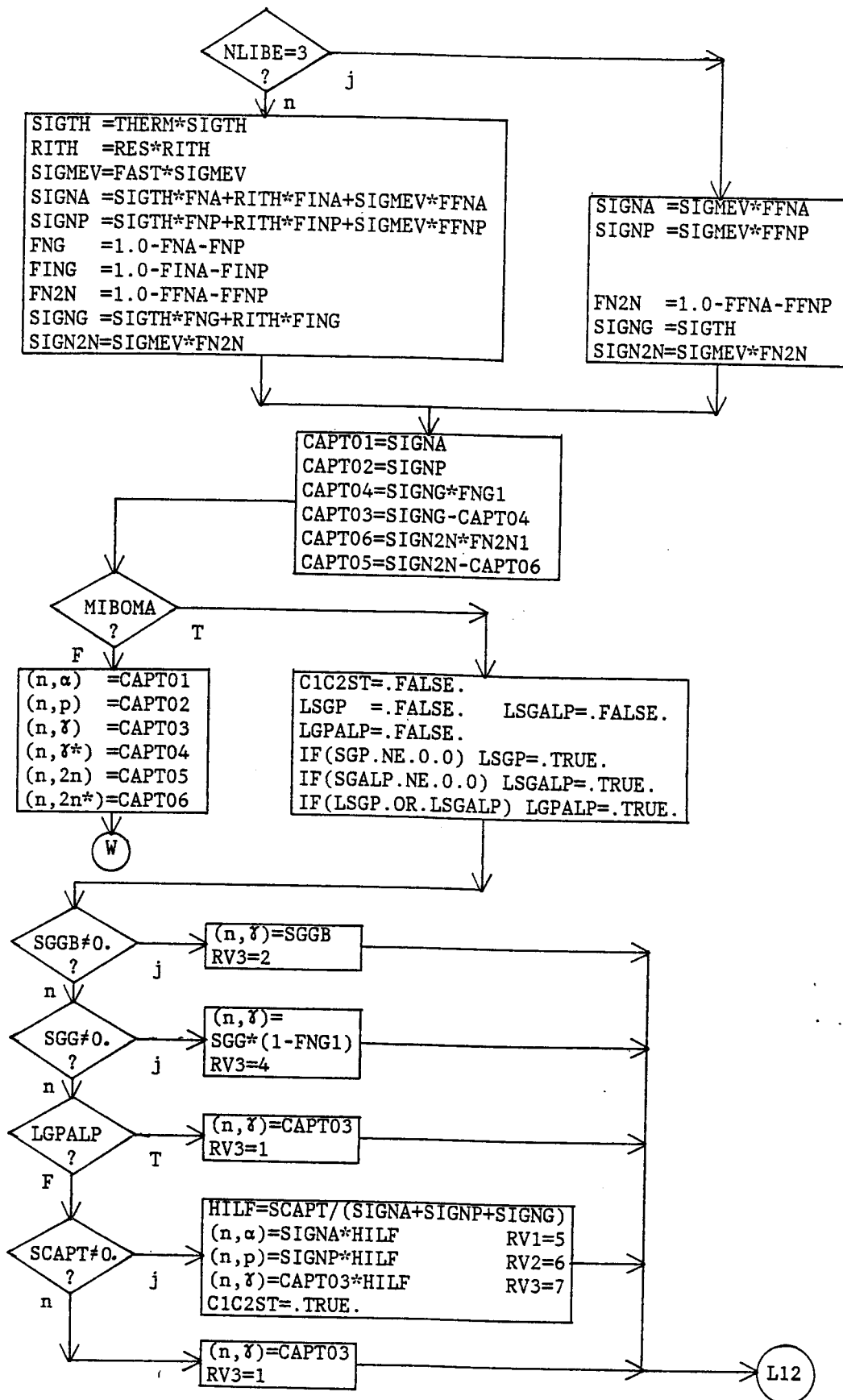


Abb. 1 ( Teil 1): Übernahme der Querschnitte aus dem SIGMN-Block für leichte Elemente.

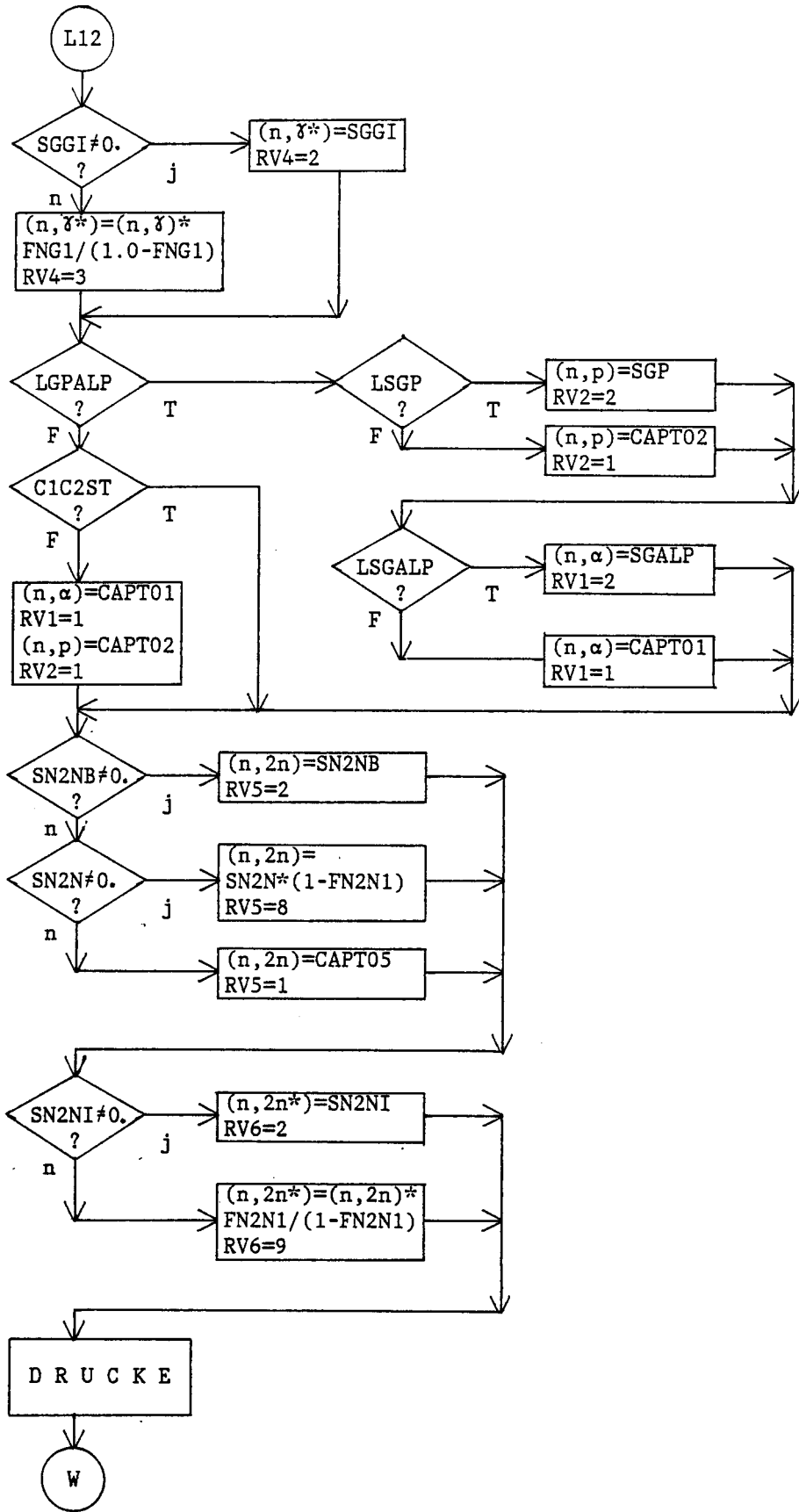


Abb. 1 ( Teil 2): Übernahme der Querschnitte aus dem SIGMN-Block für leichte Elemente.

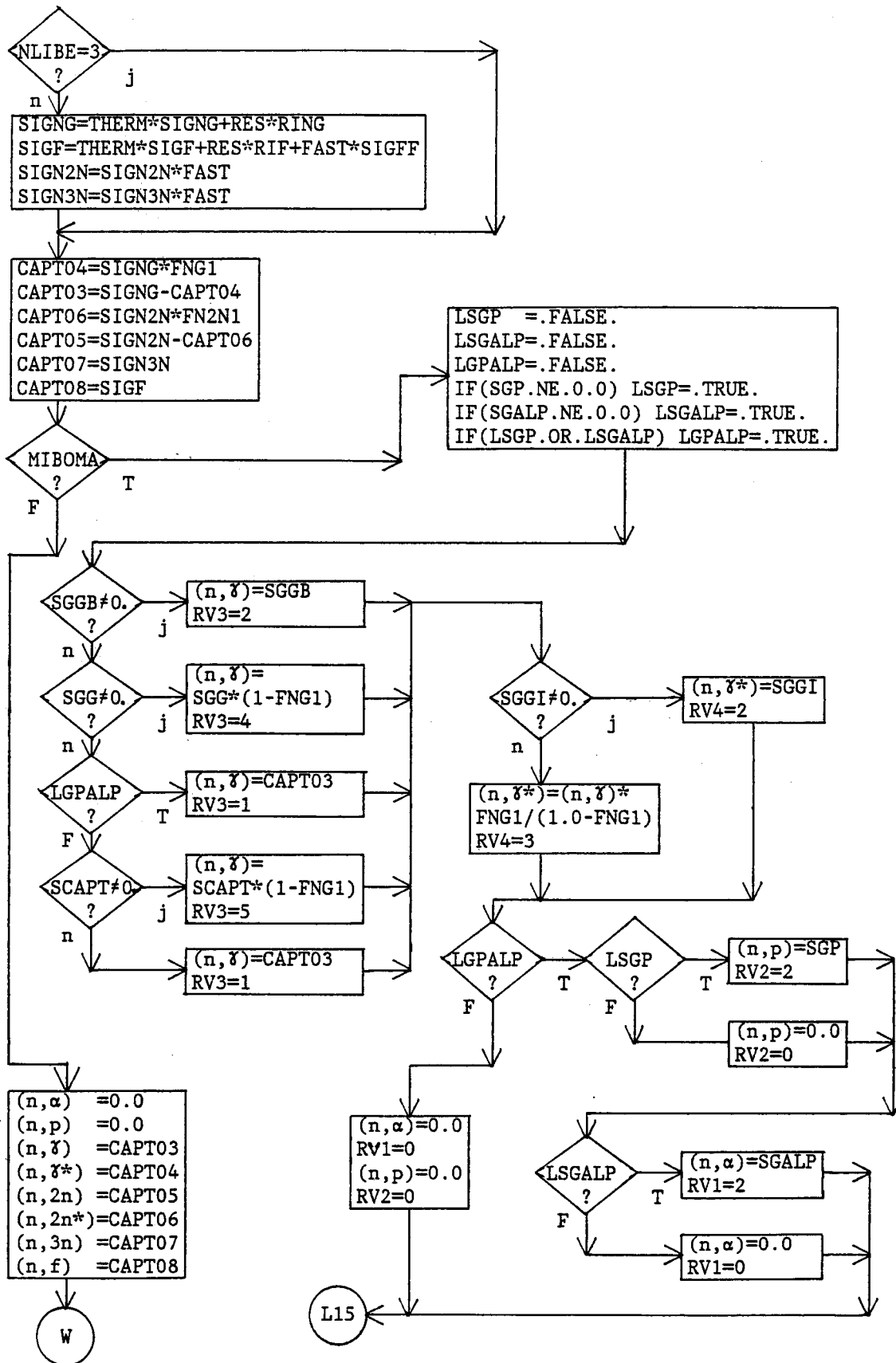


Abb. 2 ( Teil 1): Übernahme der Querschnitte aus dem SIGMN-Block für Aktiniden.

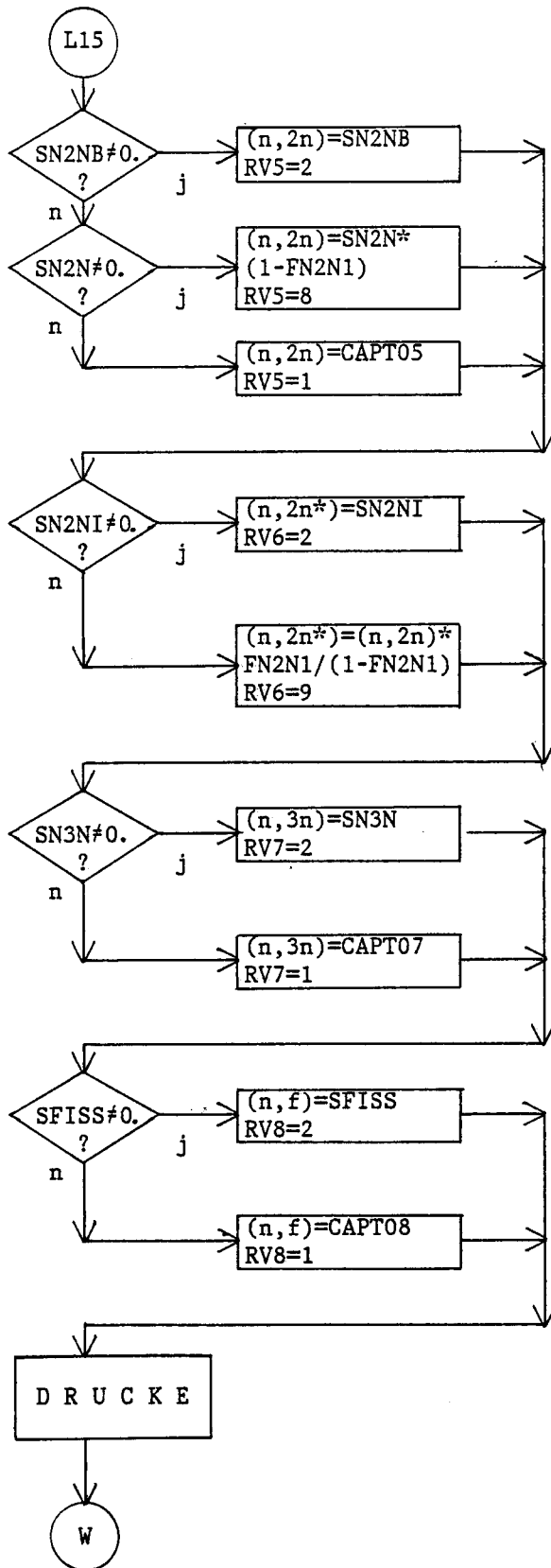


Abb. 2 ( Teil 2): Übernahme der Querschnitte aus dem SIGMN-Block für Aktiniden.

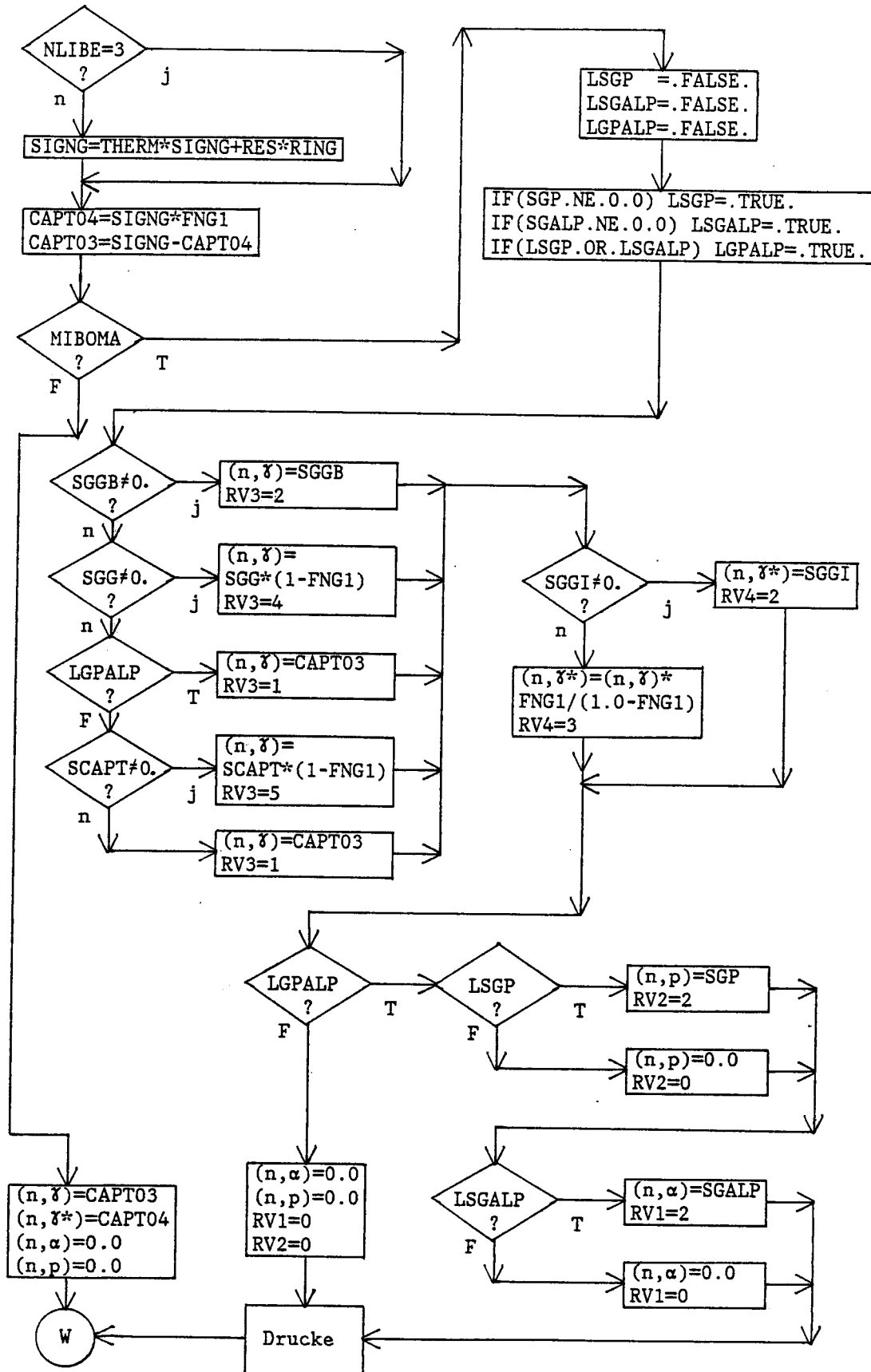


Abb. 3: Übernahme der Querschnitte aus dem SIGMN-Block für Spaltprodukte.

6. Einschränkung der Komplexität des Problems:

Keine.

7. Typische Laufzeiten:

Der Modul benötigt für einen Zeitschritt pro Mischung bei 1100 abbrennbaren Nukliden etwa 5 Sekunden CPU-Zeit auf der IBM 3033. Wenn man mehrere Zeitschritte in einem Aufruf rechnet ( Maximal 10 Zeitschritte sind pro Aufruf möglich. Es werden dann aber für jeden Zeitschritt die gleichen effektiven Eingruppenquerschnitte benutzt. ), so werden für den zweiten und alle folgenden etwa je 1.5 Sekunden benötigt.

8. Besondere Anwendungsmöglichkeiten:

Der Modul BURNUP wird in den Prozeduren BURNOD (<5>), DXBURN (<14>) und BURN3D (<17>) verwendet.

9. Benutzte Hilfsprogramme:

KSINIT - KAPROS Systemroutine (<6>,<7>)

CONVY - ASSEMBLER-Routine zur Umwandlung von Zahlen in maschinen=  
interner Darstellung in alphanumerische Darstellung und  
umgekehrt (<10>).

CONVZ - Platzsparende Zahlendarstellung (<9>).

ERRSET - Kontrolle von Fehlerausdrucken in FORTRAN (<11>).

WQRG mit den Entrys WQRGKS und WQSKAL - Verarbeiten von SIGMN-  
Blöcken (<13>).

10. Hardware-Anforderungen des Programms:

Im folgenden wird zuerst der Hauptspeicherbedarf des Moduls erläutert und daran anschließend die vom Modul benötigten externen Dateien gelistet.

Der Modul hat einen Hauptspeicherbedarf von etwa 500 kByte. Hinzu kommt noch in der internen Lifeline Platz für die verschiedenen Zeigerdatenblöcke. Dieser Platz ist von verschiedenen Faktoren abhängig, so daß einzelne Fälle unterschieden werden müssen. Auf der folgenden Seite sind für die einzelnen Fälle die Formeln für den Platzbedarf aufgeführt. Die darin benutzten Größen, werden im Anschluß an den sechsten - dies ist der letzte - Fall erläutert.

- Fall 1: Datenblock BURNUP DENSITIES n i c h t vorhanden.  
Datenblock INPUT BURNUP n i c h t vorhanden.  
Platzbedarf:  
 $LHF3+12*\text{ceil}(INUAKT/4)$  Byte
- Fall 2: Datenblock BURNUP DENSITIES vorhanden.  
Datenblock INPUT BURNUP n i c h t vorhanden.  
Platzbedarf:  
 $LHF3+\max(12*\text{ceil}(INUAKT/4),LDEN,$   
 $4*(\text{ceil}(INUAKT/4)+\text{ceil}(INUDEN/4)))$  Byte
- Fall 3: Datenblock BURNUP DENSITIES n i c h t vorhanden.  
Datenblock INPUT BURNUP vorhanden.  
Schlüsselwort 'BUTB' in INPUT BURNUP n i c h t gefunden.  
Platzbedarf:  
 $LHF3+\max(LINP,12*\text{ceil}(INUAKT/4))$  Byte
- Fall 4: Datenblock BURNUP DENSITIES n i c h t vorhanden.  
Datenblock INPUT BURNUP vorhanden.  
Schlüsselwort 'BUTB' in INPUT BURNUP gefunden.  
Platzbedarf:  
 $LHF3+LINP+12*\text{ceil}(INUAKT/4)$  Byte
- Fall 5: Datenblock BURNUP DENSITIES vorhanden.  
Datenblock INPUT BURNUP vorhanden.  
Schlüsselwort 'BUTB' in INPUT BURNUP n i c h t gefunden.  
Platzbedarf:  
 $LHF3+\max(12*\text{ceil}(INUAKT/4),LINP,LDEN,$   
 $4*(\text{ceil}(INUAKT/4)+\text{ceil}(INUDEN/4)))$  Byte
- Fall 6: Datenblock BURNUP DENSITIES vorhanden.  
Datenblock INPUT BURNUP vorhanden.  
Schlüsselwort 'BUTB' in INPUT BURNUP gefunden.  
Platzbedarf:  
 $LHF3+LINP+\max(12*\text{ceil}(INUAKT/4),LDEN,$   
 $4*(\text{ceil}(INUAKT/4)+\text{ceil}(INUDEN/4)))$  Byte



Erläuterung der in den obigen Formeln für den Platzbedarf verwendeten Größen:

ceil(a) = Kleinste ganze Zahl größer oder gleich a.  
LINP = Länge in Byte des Datenblocks INPUT BURNUP.  
LDEN = Länge in Byte des Datenblocks BURNUP DENSITIES (s. 19.1)  
= 7+INUDEN+NMISCH\*MZ\*INUDEN mit MZ=Zahl der Zeitschritte  
und NMISCH=Zahl der Mischungen.  
INUDEN = Zahl der Nuklide, für die in BURNUP DENSITIES Teilchen=  
zahldichten gespeichert sind.  
INUAKT = Zahl der Nuklide, für die beim aktuellen BURNUP-Aufruf  
Teilchenzahldichten berechnet werden.  
NMAT = Maximale Zahl von Materialien in einer Mischung.  
LHF3 = 4\*(6\*NMAT+4\*ceil(NMAT/2)+ceil(NMAT/4))

Um die auf den ORIGEN-Bibliotheken abgespeicherten Zerfallsdaten und Eingruppenwirkungsquerschnitte einlesen zu können, benötigt der Modul die folgenden Dateien unter den angegebenen DD-Namen:

```
//K.FT20F001 DD DISP=SHR,DSN=INR415.KORFI(NDLITE)  
//K.FT21F001 DD DISP=SHR,DSN=INR415.KORFI(NDACT)  
//K.FT22F001 DD DISP=SHR,DSN=INR415.KORFI(NDFPS)
```

Andere ORIGEN-Bibliotheken können in der Originalform nicht benutzt werden, da dort die Nuklide normalerweise nicht in der vom Programm benötigten Reihenfolge stehen. Es existiert jedoch ein KAPROS-Modul mit dem Namen ORFORD, welcher die von KORIGEN (<2>) üblicherweise benutzten Bibliotheken in die vom Programm benötigte Form umwandelt. ( Diese umgewandelten Bibliotheken können auch von KORIGEN benutzt werden. Es ergibt sich dadurch jedoch kein Vorteil bezüglich der Rechenzeit in KORIGEN. ) Die Beschreibung des Moduls ORFORD ist im Anhang 4 dieses Berichtes enthalten.

Will man die ORIGEN-Bibliotheken über andere FORTRAN-DD-Namen als FT20F001, FT21F001 und FT22F001 einlesen, so ist dies möglich durch Angabe des Schlüsselworts 'ORDT' in dem Datenblock INPUT BURNUP ( siehe Abschnitt 11.1 ).

### 11. Beschreibung der Eingabe:

Die Steuerung des Moduls BURNUP erfolgt durch die Datenblöcke DBN=FLUXIN,IND=iparm und DBN=INPUT BURNUP,IND=iparm ( iparm siehe Abschnitt 3. ). FLUXIN muß in der Eingabe vorhanden sein, während INPUT BURNUP fehlen kann. In diesem Fall werden die unter 11.1 aufgeführten Defaultwerte benutzt.

#### 11.1 Eingabeblock DBN=INPUT BURNUP,IND=iparm:

Durch Eingabe der weiter unten beschriebenen 10 Schlüsselwörter in diesem Datenblock erreicht man die Steuerung der Ausgabe des Programms, die Änderung der FORTRAN-Einheiten, unter denen die ORIGEN-Bibliotheken erwartet werden, die Veränderung von Abfrageschranken, die Veränderung der Namen von Kühlmittel und Pseudospaltprodukt, die Auswahl der auf den ORIGEN-Bibliotheken für vier Reaktortypen gespeicherten Eingruppen-Querschnittsätze und die Eingabe der Gewichte, die beim Aufsummieren der Teilchenzahldichten der Spaltprodukte benutzt werden. Weiter ist es möglich, die Namen von Elementen bzw. Isotopen anzugeben, deren abgebrannte Teilchenzahldichten statt der in Abschnitt 5.3.1 in Bedingung (3) aufgeführten (neben den in Bedingung (1) und (2) aufgeführten) in die MIXTOUT-Datenblöcke übernommen werden. Der Datenblock kann die Schlüsselwörter 'CNTR', 'NUDA', 'PRMT', 'PRIS', 'ORDT', 'CUTO', 'NAMS', 'REAC', 'FPWS' und 'BUTB' enthalten, denen zum Teil noch unmittelbar Zahlen folgen müssen ( siehe Beispiel in Abschnitt 16. ). Ist ein Schlüsselwort ohne nachfolgende Zahlen nicht vorhanden, so wird die weiter unten hinter dem Schlüsselwort beschriebene Aktion nicht ausgeführt. Ist ein Schlüsselwort mit nachfolgenden Zahlen nicht vorhanden, so werden die in Klammern angegebenen Defaultwerte nicht geändert. Die zugehörigen Zahlen müssen für jedes Schlüsselwort, falls dieses in der Eingabe aufgeführt wird, in der angegebenen Reihenfolge eingegeben werden. Die Reihenfolge der Schlüsselwörter selbst ist beliebig. Tauchen die gleichen Schlüsselwörter mit Zahlenwerten mehrfach in der Eingabe auf, so werden die Zahlenwerte benutzt, die dem ersten Auftauchen unmittelbar folgen.

Zur Prüfung der Eingabe ist der Modul PBURNI anzulaufen ( Beschreibung des Prüfmoduls PBURNI weiter hinten. )

Die Eingabe beginnt, wobei für iparm ein Zahlenwert einzusetzen ist, mit folgender KAPROS-Steuerkarte:

```
*KSIOX DBN=INPUT BURNUP,IND=iparm,TYP=CARD,PMN=PBURNI
```

Sie endet mit:

```
*$*$
```

Dazwischen können in beliebiger Reihenfolge, getrennt durch mindestens ein Leerzeichen, die folgenden Schlüsselwörter - falls vorgeschrieben mit folgenden Zahlenwerten - stehen. Die Hochkommas gehören zu dem jeweiligen Schlüsselwort.

Bei jedem der folgenden Schlüsselwörter wird das ausgeschriebene Wort, das uns bei der Bildung der Schlüsselwörter vorschwebte, über dem Schlüsselwort gesperrt gedruckt ausgegeben. Es wird dabei die englische und die deutsche Sprache gemischt benutzt.

Den Typ der einzugebenden Zahlen - INTEGER\*4 oder REAL\*4 - bzw. die Länge der einzugebenden Texte erkennt man aus den in den Klammern angegebenen Defaultwerte.

#### C o n t r o l

'CNTR'      Ausdruck der Datenblöcke FLUXIN,IND=iparm und MIXTOUT,IND=1,2,...,MZ ( MZ=Zahl der Zeitschritte pro BURNUP-Aufruf. Siehe Abschnitt 11.2. )

#### N u c l e a r   D a t a

'NUDA'      Ausdruck der Teilchenzahldichten aus dem MISCH-Block, der von den ORIGEN-Dateien eingelesenen Zerfalls- und Querschnittsdaten und der aus dem SIGMN-Block gelesenen Eingruppenquerschnitte, welche die Querschnitte aus den ORIGEN-Dateien ersetzen. Der Ausdruck erfolgt unter dem DD-Namen FT03F001, d.h. es muß eine DD-Karte mit  
//FT03F001 DD SYSOUT=A,DCB=\*.FT06F001  
vorhanden sein. Findet das Programm, wenn 'NUDA' (oder 'PRMT') angegeben wurde, unter FT03F001 eine schon bestehende Datei, so wird der KAPROS-Lauf, damit die Datei nicht zerstört wird, abgebrochen.

Print Matrix

'PRMT' Ausdruck der Übergangsmatrix A, sowie einer Zusammenstellung über die von jedem Nuklid durch Zerfall oder Neutronenreaktion erzeugten Nuklide. Der Ausdruck erfolgt auch hier unter FT03F001. Dabei gilt das schon bei dem Schlüsselwort 'NUDA' gesagte.

Print Isotopzuordnungstabelle

'PRIS' Ausgabe der Zuordnungstabelle zwischen Elementen und den zugehörigen am häufigsten vorkommenden Isotopen ( siehe Abschnitt 5.2 ).

ORIGEN Dateinummern

'ORDT' Änderung der FORTRAN-Nummern, unter denen die ORIGEN-Bibliotheken erwartet werden.

LORDT (20) Fortran-Nummer, unter der die ORIGEN-Daten für leichte Elemente erwartet werden. Die Daten für die Aktiniden werden unter LORDT+1 und die Daten für die Spaltprodukte unter LORDT+2 erwartet. Am Ende von Abschnitt 10 sind die benötigten DD-Karten für den Defaultwert von LORDT (20) aufgelistet.

Cutoff

'CUTO' Setzen der Abfrageschranke CUTOFF

CUTOFF (1.0E-7) Schranke für den Ausdruck von abgebrannten Teilchenzahldichten. Nuklide mit kleineren Teilchenzahldichten werden nicht ausgedruckt.

Names

'NAMS' Setzen der 8 Byte langen Textgrößen COOLNT und NFISP

COOLNT ('NA\_\_\_\_\_') Name des Kühlmittels

NFISP ('SPP\_9\_\_\_') Name des Pseudospaltproduktes

## Reactor Types

'REAC'      Setzen der Werte NLIBE, THERM, RES, FAST.

NLIBE (3)      Auswahl der auf den ORIGEN-Bibliotheken gespeicherten Daten zur Berechnung der Eingruppenquerschnitte.

1 = HTGR Kondensationsspektrum

(HTGR=High Temperature Gas Reactor)

2 = LWR Kondensationsspektrum

(LWR=Light Water Reactor)

3 = LMFBR Kondensationsspektrum

(LMFBR=Liquid Metal Fast Breeder Reactor)

4 = MSBR Kondensationsspektrum

(MSBR=Molten Salt Breeder Reactor)

THERM (1.0)      Verhältnis der Neutronenreaktionsrate eines  $1/v$ -Absorbers mit einer Maxwell-Boltzmann-Neutronen-Verteilung bei Energien der absoluten Temperatur  $T$  zur Neutronenreaktionsrate von 2200 m/s Neutronen.

$$\left( = \sqrt{\frac{\pi T_0}{4 T}}, T_0 = 293.16 \text{ K} \right).$$

RES (1.0)      Verhältnis des Resonanzflußdichte pro Lethargieeinheit zur totalen Neutronenflußdichte.

FAST (1.0)      1.45 multipliziert mit dem Verhältnis der schnellen Neutronenflußdichte zur totalen Neutronenflußdichte.

### Anmerkungen:

Die Faktoren THERM, RES und FAST werden vom Programm zur Berechnung der Eingruppenquerschnitte aus den in den Origen-Bibliotheken abgespeicherten Daten ( Dreigruppenquerschnitte für NLIBE=1,2,4; Eingruppenquerschnitte für NLIBE=3 ) benutzt.

THERM, RES und FAST sind nur von Bedeutung für NLIBE=1,2 und 4.

Im Falle von NLIBE=3 werden Formeln benutzt, die THERM, RES und FAST nicht enthalten ( siehe Abschnitt 5.4 ). Näheres über

THERM, RES und FAST ist in <1> bzw. <2> nachzulesen.

Wie schon in Abschnitt 5.4 ausgeführt wurde, ist nur in beschränktem Umfang eine Anpassung der Eingruppenquerschnitte mit Hilfe der Faktoren THERM, RES und FAST an das aktuelle Spektrum möglich. Man sollte deshalb für möglichst viele Nuklide konsistente Eingruppenquerschnitte über den SIGMN-Block eingeben.

### B u r n u p   T a b l e

'BUTB'      Eingabe der Namen der Elemente bzw. Isotope, deren Teilchenzahldichte nach dem Abbrand statt derjenigen von den Elementen Li, B, Cd, Eu, Gd und Hf in die MIXTOUT-Datenblöcke übernommen wird. ( Voraussetzung ist weiter, daß die Namen im Eingabe-MISCH-Block vorhanden sind. ) Natürlich werden auch noch die abgebrannten Teilchenzahldichten der Materialien mit einer Kernladungszahl größer oder gleich 90 übernommen ( siehe Abschnitt 5.3.1 ).

NUAB      Zahl der im folgenden aufgeführten Materialnamen.

Die folgende Eingabe wird NUAB-mal wiederholt.

MATNAM(I)    Materialname ( Isotop oder Element ) in Hochkomma eingeschlossen (z.B. 'FE\_56\_'). Die Zeichenkette muß eine Länge zwischen 5 und 8 Zeichen haben.

### F i s s i o n   P r o d u c t   W e i g h t s

'FPWS'      Eingabe der Gewichte, die beim Aufsummieren der Teilchenzahldichten der Spaltprodukte benutzt werden. ( Die Teilchenzahldichte des Pseudospaltproduktes ergibt sich durch Summation der mit 1.0 beziehungsweise den folgenden Größen gewichteten Teilchenzahldichten der Spaltprodukte und Division der Summe durch 2.0. Letzteres wird getan, da auf den GRUBA-Bibliotheken Querschnitte für Pseudospaltproduktpaare stehen. )

Mit Hilfe dieser Eingabe kann man z.B. die Teilchenzahldichten aller gasförmigen Spaltprodukte unter dem hinter 'NAMS' eingegebenen Namen für das Pseudospaltprodukt ( Defaultwert 'SPP\_9\_...' ) summiert ausgeben.

NUWS      Zahl der im folgenden aufgeführten Elementnamen-Gewicht-Kombinationen.

Die folgende Eingabe wird NUWS-mal wiederholt.

MATNAM(I)    Elementname in Hochkomma eingeschlossen (z.B. 'XE\_...'). Die Zeichenkette muß eine Länge zwischen 5 und 8 Zeichen haben. Das dritte und alle folgenden Zeichen müssen jedoch gleich dem Zwischenraumzeichen ( Blank ) sein.

( F o r t s e t z u n g    a u f   n ä c h s t e r   S e i t e )

FPWTS(I) (1.0) Beim Aufsummieren der Teilchenzahldichten der Isotope des Spaltprodukte-Elements MATNAM(I) benutztes Gewicht. FPWTS(I) muß zwischen 0.0 und 1.0 liegen. Bei Eingabe von negativen Werten wird es gleich 0.0, und bei Eingabe von Werten größer 1.0 wird es gleich 1.0 gesetzt.

### 11.2 Eingabeblock DBN=FLUXIN,IND=iparm:

Dieser Block enthält Informationen über Zeitschrittdauern und Neutronenflußdichten. Stimmt die im DBN=MISCH,IND=iparm stehende Zahl der Mischungen nicht mit der folgenden Zahl NMISCH überein, so erfolgt ein Programmabbruch.

NMISCH Zahl der Mischungen, für welche in diesem Block Daten aufgeführt werden.

MZ Gesamtzahl der in einem BURNUP-Aufruf zu rechnenden Zeitschritte. MZ darf höchstens den Wert 10 annehmen.

DT(i),i=1,MZ Zeitschrittlänge in der Einheit Tage. Bezugspunkt ist immer das Ende des vorhergehenden Zeitschrittes. Die insgesamt vergangene Zeit ergibt sich durch Addition der einzelnen Zeitschrittlängen. (Im Gegensatz zu dieser Eingabe erfolgt bei KORIGEN (<2>) die Eingabe der Zeiten immer bezogen auf den Anfang des ersten Zeitschrittes i=1. )

Die folgende Eingabe ( VOLI, FACTOR und FLUXI ) wird für jede Mischung ( d.h. NMISCH-mal ) wiederholt.

VOLI Volumen des Gebietes (in der Einheit  $\text{cm}^3$ ),  
welches die betrachtete Mischung enthält.

FACTOR(i),i=1,MZ Flußmultiplikator für jeden Zeitschritt.

FLUXI(i),i=1,MZ Flußintegral (in der Einheit Neutronen\*cm/s)  
für jeden Zeitschritt über das Gebiet,  
welches die betrachtete Mischung enthält.

- Die Größen FLUXI(i) und FACTOR(i) müssen so bemessen sein, daß  $\text{FLUXI}(i) \cdot \text{FACTOR}(i)$  das absolute, z.B. auf die gewünschte Leistung normierte, Flußintegral ergibt. Die Aufspaltung in die beiden Größen FACTOR und FLUXI hat historische Gründe. Mit FACTOR wird die zeitliche Veränderung und mit FLUXI die räumliche Veränderung des Neutronenflusses beschrieben.
- In BURNUP wird mit der Neutronenflußdichte gerechnet, d.h. mit  $\text{FACTOR}(i) \cdot \text{FLUX}(i) / \text{VOLI}$ .

12. Übersicht über die vom Modul erzeugten Datenblöcke:

Es wird der Datenblock  $DBN=MIXTOUT, IND=1, 2, \dots, MZ$  mit  $MZ=Zahl$  der Zeitschritte pro BURNUP-Aufruf und der Datenblock  $DBN=BURNUP DENSITIES, IND=1$  erzeugt. Die Struktur der  $DBN=MIXTOUT$  ist für alle  $MZ$  dieselbe. Die Zahl der Zeitschritte  $MZ$  wird dem Modul in dem Datenblock  $DBN=FLUXIN, IND=iparm$  übergeben.

12.1  $DBN=MIXTOUT, IND=1, 2, \dots, MZ$

Dieser Block hat die gleiche Struktur wie der von dem Programm gelesene  $DBN=MISCH$ . Er enthält auch die gleichen Nuklide wie der gelesene Block (siehe auch Abschnitt 5. ). Beschreibung der Struktur siehe Abschnitt 19.2.

12.2  $DBN=BURNUP DENSITIES, IND=1$

Dieser Block enthält die neuen Teilchenzahldichten für alle Nuklide, für alle Mischungen und alle Zeitschritte. Beschreibung der Struktur siehe Abschnitt 19.1. ( Siehe auch Abschnitt 13.5. )

12.3  $DBN=BURNUPHILFSFELD1, IND=1, DBN=BURNUPHILFSFELD2, IND=1$  und  $DBN=BURNUPHILFSFELD3, IND=1$

Diese Datenblöcke werden von BURNUP angelegt, nach Ablauf des Moduls jedoch wieder gelöscht.

13. Übersicht über die vom Modul gelesenen Datenblöcke:

Der im folgenden in 13.1 beschriebene Datenblock muß nur angeliefert werden, wenn die vom Programm benutzten Defaultwerte geändert werden sollen. Die in 13.2 bis 13.4 beschriebenen Datenblöcke sind unbedingt erforderlich. Der in 13.5 beschriebene Datenblock wird vom Programm nicht unbedingt erwartet. Ist er jedoch vorhanden, so werden statt der Teilchenzahldichten im MISCH-Block die in diesem Block abgespeicherten Teilchenzahldichten verarbeitet ( siehe 5. ).

13.1  $DBN=INPUT BURNUP, IND=iparm$

Beschreibung des Datenblockes siehe Abschnitt 11.1.

13.2  $DBN=FLUXIN, IND=iparm$

Beschreibung des Datenblockes siehe Abschnitt 11.2.

13.3  $DBN=SIGMN1, IND=1$

Dieser Block enthält mikroskopische mischungsabhängige Eingruppen-Querschnitte in SIGMN-Struktur ( siehe <4> ). Die Erzeugung dieses Blockes kann z.B. mit der KAPROS-Prozedur DIXCON (<12>) erfolgen.



13.4 DBN=MISCH,IND=1,2,...,MZ

Dieser Datenblock hat den gleichen Aufbau wie der vom Modul erzeugte Datenblock DBN=MIXTOUT, dessen Struktur in 19.2 beschrieben ist.

13.5 DBN=BURNUP DENSITIES,IND=1

Wenn dieser ( in einem vorausgegangenem BURNUP-Aufruf erzeugte ) Datenblock vorhanden ist, werden die darin abgespeicherten Teilchenzahldichten als Startwerte für die Abbrandrechnung verwendet. Ist er nicht vorhanden, dann werden die Teilchenzahldichten aus den MISCH-Blöcken ( siehe 13.4 ) benutzt. Die Struktur dieses Datenblockes wird in 19.1 beschrieben.

14. Übersicht über die vom Modul geänderten Datenblöcke:

Wenn der Datenblock DBN=BURNUP DENSITIES beim Aufruf von BURNUP vorhanden und mit Daten gefüllt war, so wird sein bisheriger Inhalt vom Programm mit den Ergebnissen der gerade durchgeführten Rechnung überschrieben.

15. Fehlernachrichten des Moduls:

Der Modul kann Warnungen produzieren, bei deren Auftreten der Benutzer entscheiden muß, ob diese für seine aktuelle Rechnung und Problemstellung bedeutsam sind. Bei Auftreten von Fehlern werden selbsterklärende Meldungen ausgegeben und der KAPROS-Lauf abgebrochen. Der Nachrichtencode wird auf den Wert 90 gesetzt.

16. Beispiel für den Aufruf und eine Eingabe des Programms:

Der Aufruf von BURNUP in einem Steuermodul könnte wie folgt lauten:

```
CALL KSEXEC('BURNUP ',6,0,
*          'INPUT BURNUP ', 'INPUT BURNUP ',
*          'SIGMN1      ', 'SIGMNO      ',
*          'MISCH      ', 'MISCH      ',
*          'FLUXIN      ', 'FLUXIN      ',
*          'MIXTOUT     ', 'MIXTOUT     ',
*          'BURNUP DENSITIES', 'BURNUP DENSITIES',IQ)
```

Dabei wurde angenommen, daß vor diesem Aufruf die zu ersetzenden Eingruppenquerschnitte in dem Datenblock SIGMNO bereitgestellt wurden, was z.B., wie auch in dem in der folgenden Tabelle gelisteten Beispiel aufgeführt, mit der Prozedur DIXCON (<12>)

geschehen kann. Die Datenblöcke INPUT BURNUP, MISCH und FLUXIN werden als Eingabe-Blöcke erwartet. Die von BURNUP erzeugten Datenblöcke MIXTOUT und BURNUP DENSITIES werden im Steuermodul auch unter diesen Namen verwendet.

Das in der folgenden Tabelle gelistete Beispiel enthält Eingabe-Karten und Job-Steuer-Karten. Die DD Karten für FT20F001, FT21F001 und FT22F001 stellen den Zugriff auf die ORIGEN-Bibliotheken dar, während unter FT03F001 die mit der Angabe des Schlüsselworts 'NUDA' gewünschte Ausgabe erscheint. Für den in der Prozedur DIXCON aufgerufenen Modul GRUCAL müssen keine DD-Karten angegeben werden, da Standard-Bibliotheken verwendet werden, die vom Modul GRUCAL dynamisch allokiert werden.

Durch die erste \*GO-Karte des Eingabe-Beispiels wird die Prozedur DIXCON (<12>) aufgerufen, die zuerst unter Verwendung von GRUCAL einen 26-Gruppen SIGMN-Block produziert, der auch mikroskopische Querschnitte für SCAPT und SFISS enthält. Dann werden - immer noch in DIXCON - mit nulldimensionalen Rechnungen (BUCITO <18>, DIFFO <19>) Spektren produziert, mit denen die 26-Gruppen Querschnitte auf 1 Gruppe kondensiert werden, sodaß man also einen SIGMN-Block mit mikroskopischen mischungsabhängigen Eingruppenquerschnitte erhält. ( In unserem Beispiel wird nur ein Spektrum produziert, da der MISCH-Block nur eine Mischung enthält. ) Die Prozedur DIXCON benutzt in dem Beispiel die Datenblöcke GRUCAL, INPUT DIXCON und MISCH und erzeugt den Datenblock SIGMNO. Durch das Schlüsselwort 'NOTGRMAT' in dem Datenblock GRUCAL wird dem Programm GRUCAL angezeigt, daß es bei Auftreten von Materialnamen im Datenblock MISCH, die keinem gültigen - bezogen auf den benutzten Gruppensatz - GRUBA- Namen entsprechen, nicht abrechnen soll, sondern unter Nichtberück= sichtigung der zugehörigen Teilchenzahldichte weiterrechnen soll. Der erzeugte SIGMN-Datenblock wird mit dem Modul RENDB (<8>) in SIGMN1 umbenannt. Danach wird dann BURNUP angelaufen, wobei durch MPARAM=1 die Verarbeitung der Datenblöcke MISCH, FLUXIN und INPUT BURNUP mit dem Index 1 verlangt wird.

Im Datenblock INPUT BURNUP, IND=1 wird durch 'NUDA' der Ausdruck einiger Daten spezifiziert ( siehe 11.1 ) und durch 'REAC' mit den nachfolgenden 4 Zahlen die Variablen NLIBE, THERM, RES und FAST ge= setzt. Der durch 'NUDA' gewünschte Ausdruck erfolgt, da die ent= sprechende DD-Karte für FT03F001 vorhanden ist. Die für THERM, RES und FAST angegebenen Werte werden für den eingegebenen Wert NLIBE=3

vom Programm nicht benutzt (siehe dazu auch 11.1). Durch das Schlüsselwort 'BUTB' mit den nachfolgenden Werten wird dem Programm angezeigt - neben den Teilchenzahldichten der Nuklide mit einer Kernladungszahl größer oder gleich 90 und der Pseudospaltproduktmischung SPP\_9 - die Teilchenzahldichten von FE\_\_\_ und O\_\_16 in den Ausgabe-Datenblock MIXTOUT zu übernehmen. Dies wird für alle aufgeführten Materialien, die im Eingabe-MISCH-Block vorhanden waren, auch durchgeführt. Durch das Schlüsselwort 'FPWS' in dem Datenblock INPUT BURNUP werden die Gewichte, welche beim Summieren der Teilchenzahldichten der Spaltprodukte für alle Terme den Wert 1.0 haben, neu gesetzt. Alle Teilchenzahldichten der Isotope der Elemente XE und KR sollen bei der Summation nicht berücksichtigt werden ('XE\_\_\_' 0.0 und 'KR\_\_\_' 0.0). Von den Teilchenzahldichten der Isotope des Elementes SR werden nur 40% berücksichtigt ('SR\_\_\_' 0.4).

In dem Datenblock FLUXIN, IND=1 bedeutet die erste 1 die Zahl der Mischungen. Die zweite 1 gefolgt durch 100.0 bedeutet, daß das Programm einen Zeitschritt mit der Länge 100 Tage rechnen soll. Daran schließen sich die Werte 2.0 3.0 5.1E+15 an. Sie bedeuten, daß das betrachtete Volumen die Größe von  $2.0 \text{ cm}^3$ , der Flußmultiplikator FACTOR den Wert 3.0 und das Flußintegral den Wert  $5.1E+15 \text{ Neutronen*cm*s}^{-1}$  hat. Das heißt, daß in BURNUP während der 100 Tage mit der Neutronenflußdichte  $7.65E+15 \text{ Neutronen*cm}^{-2}*s^{-1} = 3.0*5.1E+15/2.0 \text{ Neutronen*cm*s}^{-1}*cm^{-3}$  gerechnet wird. Für die in dem MISCH-Block angegebenen Nuklide werden mit Ausnahme der Materialien, für die keine Daten auf der benutzten GRUBA-Bibliothek vorhanden sind, mischungsabhängige, d.h. mit dem für den berechneten Fall typischen Spektrum kondensierte, Eingruppenquerschnitte benutzt. Die in dem MISCH-Block aufgeführten 7 Nuklide sind auch in dem Ausgabeblock MIXTOUT vorhanden. Dabei werden, mit Ausnahme der Teilchenzahldichte des Nuklides SI, die durch den Abbrand veränderten Teilchenzahldichten weitergegeben. Für SI wird die Teilchenzahldichte aus dem Eingabe-MISCH-Block genommen, da für Si  $Z < 90$  ist und dieses Material in der Eingabe auch nicht unter 'BUTB' aufgeführt wird. Das auf der folgenden Seite gelistete Eingabebeispiel ist in 'TSO909.KSJOB.CNTL(BURNUP)' abgespeichert. Es kann z.B. durch Aufruf der TSO-Kommando-Prozeduren INRPROC und nachfolgend KSSUB gestartet werden. Diese Kommando-Prozeduren sind im Rahmen des Aufbaus des KAPROS-Informationssystems KSINFO (<20>) entwickelt worden.

```
// J o b k a r t e   ( REGION=1024K )
// EXEC KSG
//K.FT20F001 DD DISP=SHR,DSN=INR415.KORFI(NDLITE)
//K.FT21F001 DD DISP=SHR,DSN=INR415.KORFI(NDACT)
//K.FT22F001 DD DISP=SHR,DSN=INR415.KORFI(NDFPS)
//K.FT03F001 DD SYSOUT=A,DCB=*.FT06F001
//K.SYSIN DD *
*KSIOX DBN=GRUCAL,TYP=CARD,PMN=PRGRUC
'GRUCAL '
'KFKINR ' ' ' ' '
'MISCH '
'NOTGRMAT'
'DATBLOCK'
'AUSWERT '
'ZUSATZ ' 2
'SFISS ' ' ' 1 0
'SCAPT ' ' ' 1 0
'GRUCEND '
*$$

*KSIOX DBN=INPUT DIXCON,TYP=CARD,PMN=PDXCON
'CNTR' 'PRGR' 'GRST' 1 'GRNR' 1
*$$

*KSIOX DBN=INPUT BURNUP,IND=1,TYP=CARD,PMN=PBURNI
'NUDA' 'REAC' 3 1.0 0.0 0.0
'BUTB' 2 'FE ' 'O 16 '
'FPWS' 3 'XE ' 0.0 'KR ' 0.0 'SR ' 0.4
*$$

*KSIOX DBN=FLUXIN,TYP=CARD,PMN=PBURNF,IND=1
1
1 100.0
2.0 3.0 5.1E+15
*$$

*KSIOX DBN=MISCH,TYP=CARD,PMN=PDXCON,IND=1
1
7 ' ' 'U 235 ' 'PU239 ' *$ MIXTURE 1
'U 235 ' 1500.0 5.0000E-05
'U 238 ' 1500.0 7.0000E-03
'PU239 ' 1500.0 1.5000E-03
'FE ' 1500.0 1.5000E-02
'SI ' 1500.0 1.5000E-02
'O 16 ' 1500.0 1.5000E-02
'SPP 9 ' 1500.0 1.0000E-11
*$$

*KSIOX DBN=INPUT RENAME,IND=1,TYP=CARD,PMN=PRREN
'SIGMNO ' 1 'SIGMN1 ' 1 0
*$$
*GO SM=DIXCON
*GO SM=RENDB,MPARM=1
*GO SM=BURNUP,MPARM=1
/*
//
```

Tabelle: Beispiel für den Aufruf des KAPROS-Moduls BURNUP.

17. Erläuterung der Ausgabe des Moduls:

Wenn man das Ziel anstrebt, daß die Druckausgabe eines Rechenprogramms ohne Zuhilfenahme von Beschreibungen verständlich sein sollte, so wird man im allgemeinen sehr umfangreiche Ausgaben erhalten, durch die man sich mühsam hindurcharbeiten muß, um die gewünschte Information zu finden. Die Autoren meinen deshalb, daß es günstiger ist, eine kompakte Ausgabe zu wählen, die dann allerdings in der Programmbeschreibung einiger Erläuterungen bedarf. Um diese Erläuterungen besser verstehen zu können, ist es sinnvoll den in Abschnitt 16. gelisteten Beispieljob mit Hilfe der am Ende dieses Abschnitts aufgeführten TSO-Kommando-Prozeduren zu starten, und den folgenden Text dann anhand der Ausgabe dieses Jobs durchzuarbeiten.

Im folgenden werden wir zuerst die Druckausgabe beschreiben, die der Modul ohne Angabe eines der Schlüsselwörter 'CNTR', 'NUDA', 'PRMT', 'PRIS' und 'FPWS' liefert. Daran schließt sich eine Erläuterung der durch Angabe der Schlüsselwörter zusätzlich produzierten Ausgabe an. Wenn in der Ausgabe Zeilen auftauchen, die hier nicht erläutert sind, so handelt es sich um Testausgabe, die nur für die Programmbetreuer von Bedeutung ist. Wenn die Erläuterungen nicht mehr ganz mit der erzeugten Ausgabe übereinstimmen, was voraussichtlich nur an ganz wenigen Stellen der Fall sein wird, so wurde die vom Modul erzeugte Ausgabe mit der Absicht der besseren Verständlichkeit verändert.

17.1 Erläuterung der Standardausgabe des Moduls.

Bei der Zahlendarstellung in der Druckausgabe des Moduls haben wir in einigen Fällen eine verkürzte, von der Routine CONVZ (<9>) erzeugte Darstellung gewählt, um möglichst viel Information in einer Druckzeile unterbringen zu können. In dieser Darstellung bedeutet z.B. .5264-5 die Zahl  $0.5265 \cdot 10^{-5}$  (0.5265E-05) und .387+3 die Zahl  $0.387 \cdot 10^3$  (0.387E+03).

Der Modul BURNUP beginnt seine Arbeit mit dem Ausdruck

```
*****  
* BEGIN OF MODULE BURNUP *  
*      VERSION nn.mm.      *  
*****
```

und endet mit dem Drucken der Meldung

```
*****  
* END OF MODULE BURNUP *  
*      VERSION nn.mm.      *  
*****
```

Dabei steht statt nn.mm. die aktuelle Versionsnummer. Als zweites druckt das Programm das Datum seiner letzten Änderung aus. Daran schließt sich ein Ausdruck der im Eingabedatenblock INPUT BURNUP gültigen Schlüsselwörter ( \*\* VALID KEYWORDS : ) an. Dann druckt das Programm die DD-Karten für die von BURNUP benötigten ORIGEN-Bibliotheken, woran sich die Namen von Kühlmittel und Pseudospalt=produkt anschließen. Diese beiden Materialien erfahren eine Sonderbehandlung bei der Ausgabe der Teilchenzahldichten in MISCH-Struktur (siehe 5.3.1). Weiter folgt im Ausdruck eine Tabelle der Nuklide, deren abgebrannte Teilchenzahldichten in die MIXTOUT-Blöcke übernommen werden. Bei Vorhandensein des Datenblocks INPUT BURNUP wird für jedes gefundene Schlüsselwort die Meldung

```
-----  
| KEYWORD 'nnnn' FOUND |  
-----
```

ausgegeben, wobei statt nnnn das Schlüsselwort steht.

An die Tabelle mit der Überschrift "TABLE OF NUCLIDES, FOR WHICH THE BURNED DENSITIES WILL BE INSERTED IN THE MIXTOUT-DATABLOCK" schließt sich dann der Ausdruck "CALCULATION FOR MIXTURE 1" an. Bei Vorhandensein von mehreren Mischungen beginnt der Ausdruck für jede weitere Mischung mit dieser Meldung, wobei statt der 1 die entsprechende Mischungsnummer steht.

Das Programm versucht, den im Eingabe-MISCH-Block stehenden Materialnamen die in den ORIGEN-Bibliotheken stehenden Nuklidnamen zuzuordnen. Falls dies nicht gelingt, z.B. für das Pseudospalt=produkt SPP\_9, wird eine Meldung ausgegeben. Eine Tabelle mit dieser Zuordnung wird vom Programm unter der Überschrift "TABLE OF USED START DENSITIES" ausgegeben. In dieser Tabelle werden den Materialnamen aus dem MISCH-BLOCK ("NUCLIDE NAME IN MISCH BLOCK") die zugeordneten Namen aus den ORIGEN-Bibliotheken ("NUCLIDE NAME TO WHICH DENSITY HAS BEEN ASSOCIATED") gegenübergestellt. Unter der Überschrift "DENSITY" wird die im MISCH-Block eingegebene Teilchenzahldichte gelistet.

Vor dieser Tabelle werden für jeden Zeitschritt ( in einem BURNUP-Aufruf können bis zu zehn Zeitschritte gerechnet werden, die dann allerdings alle den gleichen Eingruppenquerschnittssatz verwenden ) 5 Zeilen ausgegeben, deren erste mit dem Text "\*\* TIMESTEP" beginnt. Diese Zeilen enthalten die für die Mischung benutzten Größen aus dem FLUXIN-Block ( siehe 11.2 ). Dies ist z.B. die Zeitschrittlänge, oder das Volumen des Mischungsgebietes.

An die dann folgende, bereits beschriebene Tabelle "TABLE OF USED START DENSITIES" schließt sich dann, bei Vorhandensein eines SIGMN-Blocks mit Eingruppenquerschnitten, ein Protokoll über die Art der Verwendung dieser Querschnitte in der Abbrandrechnung an. Dieses Protokoll wird eingeleitet mit einer Erklärung der im Ausdruck benutzten Namen ( "EXPLANATION OF THE TERMS AND ABBREVIATIONS USED IN THE FOLLOWING TABLES AND IN THE TEXT UNDER THE TABLES" ). Dann folgen drei Tabellen, die von den Überschriften "USED CROSS SECTIONS FOR THE MATERIALS IN THE MISCH DATA BLOCK FOR LIGHT ELEMENTS", "USED CROSS SECTIONS FOR THE MATERIALS IN THE MISCH DATA BLOCK FOR ACTINIDES" und "USED CROSS SECTIONS FOR THE MATERIALS IN THE MISCH DATA BLOCK FOR FISSION PRODUCTS" angeführt werden. In diesen Tabellen steht für jedes Nuklid aus dem MISCH-Block, für das ein Querschnitt in dem SIGMN-Block vorhanden war, der von der ORIGEN-Bibliothek stammende Querschnitt ( Spaltenkopf "ORIGEN" ), der bei den Rechnungen benutzte Querschnitt ( Spaltenkopf "USED" ), sowie ein unter der Tabelle erklärter Schlüssel ( Spaltenkopf "S" ) für die Art der Berechnung des Querschnittes. War für kein Nuklid der betrachteten Mischung im MISCH-Block ein Querschnittswert im SIGMN-Block vorhanden, so wird bei den leichten Elementen der Text "FOR ALL LIGHT ELEMENTS THE CROSS SECTIONS FROM THE ORIGEN LIBRARIES HAVE BEEN USED" und für die Aktiniden und Spaltprodukte ein entsprechender Text ausgegeben. An diese Tabellen schließt sich für jeden Zeitschritt eine Zeile beginnend mit "TIMESTEP" an. Es wird die benutzte Neutronenflußdichte in der Einheit Neutronen\*cm<sup>-2</sup>\*s<sup>-1</sup> und die daraus berechnete Leistungsdichte in der Einheit MW/cm<sup>3</sup> ausgegeben. Nach dem Ausdrucken dieser Größen löst das Programm die Abbrandgleichungen und gibt die neuen Teilchenzahldichten, die größer sind als 1.0E-7 ( dieser Wert ist in INPUT BURNUP mit dem Schlüsselwort 'CUTO' überschreibbar ), unter der Überschrift "NEW DENSITIES IN UNITS OF NUMBER/CM\*\*3 CALCULATED BY THE KAPROS-VERSION OF ORIGEN" aus. An die Überschrift schließt sich eine Zeile beginnend mit dem Wort "POWER" an. Der Zahlenwert dahinter bedeutet eine mittlere Leistung, die nach der Formel

$$\text{POWER} = \sum_{m=1}^{MZ} P_m * \frac{DT_m}{T_{MZ}}$$

berechnet wird. Dabei ist MZ die Gesamtzahl der in einem Aufruf

von BURNUP, d.h. mit gleichen effektiven mikroskopischen Querschnitten, gerechneten Zeitschritte.  $P_m$  ist die Leistung im Zeitschritt  $m$ ,  $DT_m$  die Dauer des Zeitschritts  $m$  und  $T_{MZ}$  die Gesamtdauer der - bei einem BURNUP-Aufruf - betrachteten Zeitspanne, d.h. die Summe aller  $DT_m$  von  $m=1$  bis  $MZ$ .

Hinter "BURN" wird der Abbrand ausgegeben, der nach der Formel

$$BURN = \sum_{m=1}^{MZ} P_m * DT_m$$

berechnet wurde. Im Programm werden die Zeiten in der Einheit Tage in die Formel eingesetzt, so daß "BURN" die Dimension MWD hat. Sowohl die Größe "POWER" wie auch die Größe "BURN" beziehen sich auf das in der gleichen Zeile ausgedruckte Volumen in der Einheit  $cm^3$ .

In der nächsten Zeile wird hinter "FLUX" die mittlere Neutronenflußdichte ausgegeben, die ähnlich wie die mittlere Leistung nach der Formel

$$FLUX = \sum_{m=1}^{MZ} FL_m * \frac{DT_m}{T_{MZ}}$$

berechnet wird. In der Formel bedeutet  $FL_m$  die Neutronenflußdichte im Zeitschritt  $m$ .

An die bisher beschriebenen drei Zeilen, die auf jeder neuen Seite, welche die im nachfolgenden beschriebenen Daten enthält, wiederholt werden, schließt sich der Ausdruck der Teilchenzahldichten und einiger anderer Größen an. Die Überschriften der einzelnen Spalten werden im folgenden aufgeführt und die Bedeutung der in diesen Spalten ausgedruckten Zahlenwerte erläutert.

- NUCL numerischer Nuklidname in der Form, wie er auch in den ORIGEN-Bibliotheken steht.
- TOCAP In den Rechnungen benutzter mikroskopischer Eingruppen-Einfang-Querschnitt (total capture. Enthält alle Neutronenreaktionen einschließlich Spaltung) in der Einheit  $10^{-24} cm^2$ . (Wert von ORIGEN-Bibliothek bzw. effektiver Wert.)
- FISS In den Rechnungen benutzter mikroskopischer Eingruppen-Spalt-Querschnitt in der Einheit  $10^{-24} cm^2$ . (Wert von ORIGEN-Bibliothek bzw. effektiver Wert.)
- DIS Zerfallskonstante in der Einheit  $s^{-1}$ . (Stabile Nuklide werden in dieser Spalte durch den Wert 0.0 gekennzeichnet. Zahlenwert stammt von ORIGEN-Bibliothek.)



Q Totaler Betrag der Energie, die beim radioaktiven Zerfall als wiedererlangbare Wärme freigesetzt wird, in der Einheit MeV pro Zerfall. Nicht enthalten ist die Energie von Neutrinos, die beim Beta-Zerfall freigesetzt werden. ( Wert von ORIGEN-Bibliothek. )

NAMS Nuklidname in GRUBA-Konvention.

XZERO Teilchenzahldichte in der Einheit  $10^{24}$  Teilchen pro  $\text{cm}^3$  zum Zeitpunkt  $T=0.0$ .

XNEW Durch Abbrand entstandene Teilchenzahldichte zu dem jeweils angegebenen Zeitpunkt  $T=...$  in der Einheit Tage.

Wenn der Name SPP\_9 ( bzw. der hinter dem Schlüsselwort 'NAMS' im Eingabeblock INPUT BURNUP angegebene zweite Name) im MISCH-Block vorhanden war, so schließt sich an die beschriebene Tabelle noch eine Zeile an, die mit dem Text "FISSION-PRODUCTS" beginnt. Sie enthält die aufsummierten und durch 2 dividierten Teilchenzahldichten der Spaltprodukte zu den jeweils am Spaltenkopf angegebenen Zeitpunkten.

Auf der nächsten Seite beginnt dann eine Tabelle mit der Überschrift "DENSITIES IN MIXTOUT DATA BLOCK(S)". Sie enthält alle im MISCH-Block aufgeführten Materialien, deren alte Teilchenzahldichten, die neuen in den MIXTOUT-Blöcken übergebenen Teilchenzahldichten, sowie bei Elementen den Aufbau der Teilchenzahldichten aus den Teilchenzahldichten der Isotope. Bei mehreren Zeitschritten stehen die Daten für die einzelnen Zeitschritte untereinander. Ähnlich wie bei der Beschreibung der vorhergehenden Tabelle werden im folgenden die Überschriften der einzelnen Spalten aufgeführt und die Bedeutung der in diesen Spalten ausgedruckten Zahlenwerte erläutert.

NUCLIDE Name des Materials im MISCH-Block. Alle Materialien  
NAME im MISCH-Block - und nur diese - werden in die Ausgabe-MIXTOUT-Blöcke übernommen.

OLD DENSITY Eingabe-Teilchenzahldichte des Materials aus dem  
(MISCH) MISCH-Block in der Einheit  $10^{24}$  Teilchen pro  $\text{cm}^3$ .  
(Ob und für welches Nuklid diese Teilchenzahldichte als Startwert genommen wurde, ist aus der weiter oben beschriebenen Tabelle mit dem Titel "TABLE OF USED START DENSITIES." zu entnehmen.)

NEW DENSITY In den ( bzw. die ) MIXTOUT-Block ( -Blöcke )  
(MIXTOUT) geschriebene Teilchenzahldichte(n). Bei mehr als  
einem berechneten Zeitschritt stehen die Werte für  
die einzelnen Zeitpunkte untereinander.

BUILT UP OF NUCLIDES WITH DENSITIES UNDER THE NUCLIDE NAMES

Die hier aufgeführten Zahlenwerte lassen erkennen,  
aus welchen Teilen sich die in den MIXTOUT-Block ge=  
schriebene Teilchenzahldichte zusammensetzt.

- Wird die alte Teilchenzahldichte übernommen, so steht  
hier der Text "OLD DENSITY HAS BEEN TAKEN FOR ALL TIME  
STEPS". In diesem Fall steht auch in der Spalte "NEW  
DENSITY" nur ein Zahlenwert.
- Ist das Material ein Isotop eines Elementes, so steht  
hier als Spaltenüberschrift der Name dieses Isotops  
und darunter die Teilchenzahldichten für die einzel=  
nen Zeitschritte. Wenn der Isotopname in mehr als  
einer der drei ORIGEN-Bibliotheken vorhanden war, dann  
treten auch hier mehrere Spalten auf, die alle mit  
dem gleichen Isotopnamen überschrieben sind. Die  
darunter stehenden Teilchenzahldichten sind dann  
die Anteile aus den einzelnen Bibliotheken. In der  
Spalte "NEW DENSITY" steht in diesem Fall die Summe  
der einzelnen Teilchenzahldichten.
- Ist das Material ein Element, dann werden die einzel=  
nen Spalten von den Teilchenzahldichten der Isotope  
des Elements gebildet, aus denen die Teilchenzahl=  
dichte in "NEW DENSITY" zusammengesetzt ist. Ein  
mehrfaches Auftreten des gleichen Isotopnamens  
bedeutet auch hier wieder, daß das Nuklid in mehr  
als einer der drei ORIGEN-Bibliotheken vorhanden ist.
- Ist das Material SPP\_9, bzw. der in INPUT BURNUP  
hinter 'NAMS' an zweiter Stelle aufgeführte Name, so  
wird entweder der Text "ALL FISSION PRODUCTS HAVE  
BEEN SUMMED UP" oder aber die Nuklide ausgegeben,  
deren Teilchenzahldichten bei der Bildung der Summe  
nicht berücksichtigt wurden.

An die jetzt beschriebene Tabelle kann sich, beginnend auf einer neuen Seite, eine Tabelle mit der Überschrift "THE FOLLOWING NUCLIDES WITH DENSITIES GREATER THAN OR EQUAL TO 1.00000E-07 HAVE NOT BEEN INSERTED IN THE MIXTOUT DATA BLOCK(S)." anschließen. ( Dabei kann der Zahlenwert 1.00000E-07 in INPUT BURNUP überschrieben werden. ) In dieser Tabelle werden alle in den Rechnungen benutzten Nuklide der ORIGEN-Bibliotheken ausgegeben, deren berechnete Teilchenzahldichte in irgendeinem Zeitschritt größer als der in der Überschrift angegebene Wert war und die beim Aufbau des MIXTOUT-Blocks bzw. der MIXTOUT-Blöcke nicht berücksichtigt wurden. In der Tabelle wird durch eine der drei Überschriften "ORIGEN LIGHT ELEMENT LIBRARY", "ORIGEN ACTINIDE LIBRARY" oder "ORIGEN FISSION PRODUCT LIBRARY" angegeben, aus welcher Bibliothek das betreffende Nuklid stammt. Unter der Überschrift "NUCLIDE NAME" findet man den Nuklidnamen in GRUBA-Konvention, während unter "DENSITIES FOR DIFFERENT TIME STEPS" die Teilchenzahldichten nach den verschiedenen Zeitschritten in der Einheit  $10^{24}$  Teilchen pro  $\text{cm}^3$  ausgedruckt werden.

Auf einer neuen Seite kann noch eine weitere Tabelle ausgegeben werden, die mit "THE FOLLOWING NUCLIDES HAVE BEEN USED MORE THAN ONCE WHEN DENSITIES HAVE BEEN INSERTED IN THE MIXTOUT DATA BLOCK(S)." überschrieben ist. In dieser Tabelle werden, wie in der Überschrift angedeutet, die Namen der bei den Abbrandrechnungen benutzten Nuklide ausgegeben, deren Teilchenzahldichte mehr als einmal bei der Bildung des MIXTOUT-Datenblocks ( bzw. der MIXTOUT-Datenblöcke ) benutzt wurde. Der Ausdruck der Namen erfolgt auch hier nicht in der in den ORIGEN-Bibliotheken benutzten numerischen Form, sondern in GRUBA-Konvention. Weiter wird durch Überschriften wie "ORIGEN ACTINIDE LIBRARY" mitgeteilt, zu welcher der drei ORIGEN-Bibliotheken das Nuklid gehört.

Enthielt der benutzte MISCH-Block mehr als eine Mischung, so wird jetzt die Meldung "CALCULATION FOR MIXTURE 2" ausgegeben und dann, wie auf den vorhergehenden Seiten beschrieben, fortgefahren. Dies wird solange wiederholt, bis alle Mischungen abgearbeitet sind. Ist dies der Fall, so wird eine von dem Zeichen "\*" eingerahmte Zeile beginnend mit "SUMMED REGION VALUE=" ausgegeben. In dieser Zeile werden verschiedene summierte Werte ausgegeben. Hinter

"SUMMED REGION VALUE" steht das über alle Mischungen summierte Volumen, dessen Teilvolumina in dem Datenblock FLUXIN (siehe 11.2) eingegeben wurden. Hinter "SUMMED POWER" wird die über alle Mischungen summierte Leistung ausgegeben. Als letzte Zahl schließlich folgt hinter "SUMMED BURNUP" der über alle Mischungen summierte Abbrand. Wenn keine Fehler aufgetreten sind, beendet BURNUP seine Tätigkeit mit der von dem Zeichen "\*" umrahmten Meldung "END OF PROCEDURE BURNUP".

Um die ausgedruckte Leistung interpretieren zu können, muß man wissen, wie das Programm diese berechnet. Es wird für alle Aktiniden, mit Ausnahme der in der folgenden Liste aufgeführten, eine Energie von 200 MeV pro Spaltung angenommen. Für die 15 in der Tabelle aufgeführten Nuklide wird die Spaltenergie in der Einheit MeV pro Spaltung im Programm nach der Formel

$$\text{Spaltenergie} = E_{\text{fiss}} + (\text{Nue}-1.0)*5.5$$

berechnet, wobei die im Programm benutzten Zahlenwerte in der folgenden Tabelle zu finden sind.

NUKLID	$E_{\text{fiss}}$	Nue	
Th <sup>232</sup>	184.4	2.4	( In der neuesten Version von KORIGEN (<2>) sind inzwischen verbesserte Werte für $E_{\text{fiss}}$ und Nue eingebaut. Insbesondere wird dabei zwischen Werten für schnelle und thermische Spektren unterschieden. Diese Werte werden auch in BURNUP übernommen werden. )
U <sup>233</sup>	190.3	2.492	
U <sup>234</sup>	193.0	2.45	
U <sup>235</sup>	192.5	2.418	
U <sup>236</sup>	193.0	2.45	
U <sup>238</sup>	194.0	2.81	
Np <sup>237</sup>	200.0	2.5	
Pu <sup>238</sup>	200.0	2.55	
Pu <sup>239</sup>	198.6	2.871	
Pu <sup>240</sup>	195.0	2.9	
Pu <sup>241</sup>	200.5	2.972	
Pu <sup>242</sup>	200.0	3.0	
Am <sup>241</sup>	200.0	3.0	
Am <sup>243</sup>	200.0	3.0	
Cm <sup>244</sup>	200.0	3.0	

### 17.2 Erläuterung der Ausgabe bei Angabe des Schlüsselworts 'CNTR'.

Im Anschluß an die "TABLE OF NUCLIDES, FOR WHICH THE BURNED DENSITIES WILL BE INSERTED IN THE MIXTOUT-DATABLOCKS" erfolgt auf einer neuen Seite der Ausdruck des Datenblocks FLUXIN. Dabei wird jedes 4\*Byte-Wort zuerst mit dem Format 1PE12.4, dann mit dem Format I12 und zuletzt mit dem Format A4 ausgegeben. Die ausgedruckte Zahl hinter N= bedeutet die Zahl der 4\*Byte Worte in dem Datenblock. Vor dem Ausdruck von "CALCULATION FOR MIXTURE ..." kommt eine Zeile beginnend mit "\*\*\* NM= ". Die Zahl hinter "NM=" bedeutet die Anzahl der Mischungen und die Zahl hinter "NG=" die Zahl der Energiegruppen in dem benutzten SIGMN-Block.

Vor der Meldung "END OF PROCEDURE BURNUP" werden in der gleichen Art wie beim Ausdruck von FLUXIN der MIXTOUT-Datenblock bzw. die MIXTOUT-Datenblöcke ausgegeben.

### 17.3 Erläuterung der Ausgabe bei Angabe des Schlüsselworts 'NUDA'.

Die mit diesem Schlüsselwort angewählte Ausgabe erfolgt über die FORTRAN-Einheit 3. Sie wird nur erzeugt, wenn zusätzlich zu dem Schlüsselwort noch eine DD-Karte der Form

```
//K.FT03F001 DD SYSOUT=A,DCB=*.FT06F001
```

in den Job-Steuerkarten vorhanden ist. Findet das Programm unter dem DD-Namen FT03F001 eine vom Benutzer fälschlicherweise angegebene schon bestehende Datei ( DISP=OLD oder DISP=SHR ), so wird um eine Zerstörung zu verhindern, der KAPROS-JOB unter Ausgabe einer entsprechenden Fehlermeldung abgebrochen (<15>).

Die Ausgabe beginnt mit einem Protokoll über das Lesen der Daten aus dem SIGMN-Block. Zuerst werden die Meldungen "\* SEARCH FOR SIGMNO DATA FOR ccccccc mmmmmMIC" ausgegeben. Dabei steht statt cccccccc - mit Blanks auf den Stellen 5 bis 8 - einer der Querschnittstypnamen SCAPT, SFISS, SGALP, SGP, SGG, SGGB, SGGI, SN2N, SN2NB, SN2NI, SN3N und statt mmmmm der Name des Nuklids in GRUBA-Konvention. Diese Meldungen erfolgen für alle Materialien der gerade bearbeiteten Mischung im MISCH-Block. An diese Meldungen schließen sich immer zwei Zeilen beginnend mit "GSIG1,mmmmMIC" an, wobei statt mmmmm der Name des gerade bearbeiteten Nuklids steht. In diesen beiden Zeilen stehen die vom SIGMN-Block gelesenen Eingruppenquerschnittswerte für die schon oben aufgeführten Datentypen. Ein Wert von Null bedeutet entweder, daß für den betreffenden Querschnitt kein Wert im SIGMN-Block vorhanden war oder aber, daß der gelesene Querschnitt wirklich den Wert Null

hatte. ( Das Einführen der Querschnitte aus dem SIGMN-Block in die Abbrandrechnungen ist ausführlich in den Abschnitten 5.4.1, 5.4.2 und 5.4.3 beschrieben. ) An "GSIG1," schließt sich eine Zeile beginnend mit "I=" an. Vor dem Text "NAMEN=" steht die Nummer des Nuklids in der bearbeiteten Mischung des MISCH-Blocks. Hinter "NAMEN=" steht der Nuklidname wie er im MISCH-Block eingegeben wurde, während hinter "INUCL=" der zugehörige Name in ORIGEN-Konvention steht. Als letztes enthält diese Zeile hinter "XCOMPT=" die Teilchenzahldichte aus dem MISCH-Block. Für Nuklide, deren Name nicht in der ORIGEN-Konvention dargestellt werden kann ( z.B. SPP\_9 ), entfällt der Ausdruck der Zeilen "SEARCH..." und "GSIG1...". Die Zeile beginnend mit "I=" wird ausgegeben. Dabei steht dann aber hinter "INUCL=" der Zahlenwert 0.

An das Protokoll über das Lesen der Daten aus dem SIGMN-Block schließt sich, auf einer neuen Seite beginnend, der Ausdruck der von den ORIGEN-Bibliotheken gelesenen Daten an. Auf der ersten Seite, welche mit "NUCLEAR TRANSMUTATION DATA" überschrieben ist, werden die auf den nächsten Seiten benutzten Tabellenüberschriften erläutert (siehe dazu auch <1> und <2>). Auf den nächsten Seiten, überschrieben mit "LIST OF DATA READ FROM ORIGEN LIBRARIES", folgen dann die Daten selbst. Zuerst für leichte Elemente, Konstruktionsmaterialien und Aktivierungsprodukte, dann für Aktiniden und ihre Töchter und zuletzt für Spaltprodukte. In den Seitenüberschriften ist auch der Typ des Reaktors aufgeführt, dessen Querschnitte von den ORIGEN-Bibliotheken gelesen wurden (siehe 5.4).

#### 17.4 Erläuterung der Ausgabe bei Angabe des Schlüsselworts 'PRMT'.

Die mit diesem Schlüsselwort angewählte Ausgabe erfolgt über die FORTRAN-Einheit 3. Sie wird nur erzeugt, wenn zusätzlich zu dem Schlüsselwort noch eine DD-Karte der Form

```
//K.FT03F001 DD SYSOUT=A,DCB=*.FT06F001
```

in den Job-Steuerkarten vorhanden ist. Für fälschlicherweise unter FT03F001 angegebene schon bestehende Dateien, gilt auch hier das bereits am Anfang des Abschnitts 17.3 Gesagte.

Es wird die Übergangsmatrix A und eine Liste ausgegeben, welche für jedes Nuklid die produzierten Nuklide enthält.

Bei der Ausgabe der Übergangsmatrix steht in der ersten Zeile immer der Typ des Reaktors, z.B. L M F B R . Die nächste Zeile beginnt mit "TRANSITION MATRIX" gefolgt von "( LIGHT ELEMENTS,

MATERIALS OF CONSTRUCTION, AND ACTIVATION PRODUCTS )", oder "( ACTINIDES AND THEIR DAUGHTERS )", oder "( FISSION PRODUCTS )". Die nachfolgende Tabelle ist zweigeteilt. In der linken Hälfte stehen die produzierten Nuklide und einige zugehörige Daten. In der rechten Hälfte, welche mit "PRODUCING NUCLIDE AND REACTION WITH DECAY CONSTANT RESP. CROSS SECTION" überschrieben ist, stehen die produzierenden Nuklide sowie deren Daten. Im folgenden wird die Bedeutung der in der Tabelle benutzten Überschriften erläutert.

I            Programminterne Nummer des produzierten bzw. des produzierenden Nuklides.

NUCLIDE     Name des produzierten bzw. des produzierenden Nuklides in GRUBA-Konvention.

DIS(I)      Zerfallskonstante des produzierten Nuklides in der Einheit  $s^{-1}$ .

TOCAP(I)   Totaler Eingruppen-Einfangquerschnitt ( enthält alle im Programm betrachteten Neutronenreaktionen einschließlich Spaltung ) des produzierten Nuklides in der Einheit  $10^{-24} \text{ cm}^2$ .

FISS(I)     Eingruppen-Spaltquerschnitt des produzierten Nuklides in der Einheit  $10^{-24} \text{ cm}^2$ .

REAC.       Reaktion des produzierenden Nuklids, welche das produzierte Nuklid erzeugt.

Zerfallsreaktionen:

POS.        Emission eines Positrons.

POS.\*      Emission eines Positrons und Übergang zum isomeren Zustand.

ISOM.      Übergang vom isomeren Zustand in den Grundzustand.

A            Aussendung eines Alphateilchens bzw. Teilchen wurde durch Alphazerfall erzeugt.

NEG.        Emission eines Negatrons.

NEG.\*      Emission eines Negatrons und Übergang zum isomeren Zustand.

B,N         Aussendung eines verzögerten Neutrons.

SPFIS      Spontanspaltung.

Neutronenreaktionen:

N,A         Einfang eines Neutrons, Emission eines Alphateilchens bzw. Reaktion, welche das Teilchen erzeugte.

N,P	Einfang eines Neutrons, Emission eines Protons bzw. Reaktion, welche das Teilchen erzeugte.
N,G	Einfang eines Neutrons, Emission eines Gammas.
N,G*	Einfang eines Neutrons, Emission eines Gammas, Verbleib im isomeren Zustand.
N,2N	Einfang eines Neutrons, Emission von 2 Neutronen.
N,2N*	Einfang eines Neutrons, Emission von 2 Neutronen, Verbleib im isomeren Zustand.
N,3N	Einfang eines Neutrons, Emission von 3 Neutronen.
N,F	Neutroneneinfang mit Spaltung.
A(I,J)	Zerfallskonstante in der Einheit $s^{-1}$ für die betreffende Reaktion.

Die in der Übergangsmatrix ausgedruckten Daten werden nochmals in anderer Ordnung ausgegeben. Die Ausdrücke enthalten wieder in der ersten Zeile den Reaktortyp. In der zweiten Zeile jedoch steht der Text "PRODUCED NUCLIDES FOR ...", wobei auch hier nach den drei ORIGEN-Bibliotheken, wie auch schon beim Ausdruck der Übergangsmatrix, unterschieden wird. In dieser Tabelle stehen links die produzierenden Nuklide und rechts unter der Überschrift "PRODUCED NUCLIDES AND REACTIONS WITH DECAY CONSTANTS RESP. CROSS SECTIONS" alle die daraus produzierten Nuklide. Die Spaltenüberschriften wurden schon weiter oben erklärt.

#### 17.5 Erläuterung der Ausgabe bei Angabe des Schlüsselworts 'PRIS'.

Vor dem Text "CALCULATION FOR MIXTURE 1" wird eine Tabelle mit der Überschrift "TABLE OF ELEMENT NAMES WITH ASSOCIATED ISOTOPE NAMES TO WHICH DENSITIES IN THE MISCH-DATA-BLOCK WILL BE ASSIGNED IN THE PROGRAM:" ausgedruckt. Man findet darin die Isotopnamen (ISOTOPE), denen das Programm im MISCH-Block unter Elementnamen (ELEMENT) angelieferte Teilchenzahldichten zuordnet.

#### 17.6 Erläuterung der Ausgabe bei Angabe des Schlüsselworts 'FPWS'.

Die bei der Summierung der Teilchenzahldichten für die Spaltprodukte benutzten Gewichte werden ausgegeben. Das hinter dem Elementnamen gelistete Gewicht gilt für alle Isotope dieses Elementes. Aus formalen Gründen werden auch Gewichte für Nicht-Spaltprodukte wie z.B. Kohlenstoff ausgegeben. Diese haben bei der Summation der Teilchenzahldichten der Spaltprodukte und auch im sonstigen Programm keine Bedeutung.



18. Referenzen:

- <1> M. J. Bell  
ORIGEN - The ORNL Isotope Generation and Depletion Code.  
Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge Tennessee 37830  
ORNL-4628. UC-32-Mathematics and Computers. ( May 1973 )
  
- <2> U. Fischer, H.W. Wiese  
KORIGEN - Ein Programm zur Bestimmung des nuklearen Inventars  
von Reaktorbrennstoffen im Brennstoffkreislauf.  
KfK-Bericht Nr. 3014 ( in Vorbereitung )
  
- <3> D. Woll  
GRUCAL. Ein Programmsystem zur Berechnung makroskopischer  
Gruppenkonstanten.  
KfK-Bericht Nr. 2108 ( Juni 1975 )
  
- <4> H. Bachmann, D. Sanitz  
Definition, Speicherung und Verarbeitung makroskopischer  
Gruppenkonstanten in SIGMN-Struktur.  
INR406 ( September 1970 )
  
- <5> C. Broeders  
Kurzbeschreibung der KAPROS-Prozedur BURNOD für Abbrandrechnungen  
für Reaktormischungen in MISCH-Struktur.  
INR 1201, KAPROS 69,  
PSB Primärbericht 01.02.04P83G, PSB-Ber. IV 331 (August 1982)
  
- <6> H. Bachmann, S. Kleinheins  
Das Karlsruher Programmsystem KAPROS. Teil Ia.  
Kurzes KAPROS-Benutzerhandbuch.  
KfK-Bericht Nr. 2317 (August 1976)
  
- <7> G. Buckel, W. Höbel  
Das Karlsruher Programmsystem KAPROS. Teil I.  
Übersicht und Vereinbarungen. Einführung für Benutzer und  
Programmierer.  
KfK-Bericht Nr. 2253 (August 1976)
  
- <8> N. Moritz  
Kurzbeschreibung des KAPROS-Moduls RENDB zur Umbenennung von  
KAPROS-Datenblöcken und des zugehörigen Prüfmoduls PRREN.  
INR 942, KAPROS 42,  
Primärbericht 01.02.04P23F, PSB-Ber. IV 105. (August 1979)
  
- <9> R. Heger  
CONVZ - Umwandlung einer Real\*4-Zahl Z in eine komprimierte  
alphanumerische Darstellung mit möglichst vielen gültigen Stellen.  
INR 964, PWA 40/79,  
Primärbericht 04.01.10P10C. (September 1979 )
  
- <10> H. Blesene  
CONVY. Fortran-Unterprogramm für die IBM /360 zur Umwandlung von  
in maschineninterner bzw. in alphanumerischer Darstellung vorlie-  
genden Fest- und Gleitkommazahlen in alphanumerische bzw. maschi-  
neninterne Darstellung.  
(April 1971) Unveröffentlicht.

- <11> IBM OS FORTRAN IV (H Extended) Compiler Programmer's Guide.  
SC28-6852-1 (June 1972)
  
- <12> C. Broeders  
Kurzbeschreibung der erweiterten KAPROS-Prozedur DIXCON  
und des Prüfmoduls PDXCON.  
INR 809, KAPROS 28,  
PSB Primärbericht 01.02.04p03I, PSB-Ber. IV 16 (April 1978)
  
- <13> W. Höbel  
Kurzbeschreibung des Unterprogramms WQRG zur Verarbeitung von  
SIGMN-Strukturen in KAPROS-Moduln.  
INR 1126, KAPROS 57,  
PSB Primärbericht 01.02.04P63A, PSB-Ber. IV 254 (April 1981)
  
- <14> C. Broeders  
Kurzbeschreibung der KAPROS-Prozedur DXBURN  
PSB Primärbericht in Vorbereitung.
  
- <15> E. Stein  
DISP. Eine von FORTRAN aufrufbare ASSEMBLER-Routine zur Feststel-  
lung der Disposition einer Datei ( NEW, OLD, SHR ).  
Unveröffentlicht.
  
- <16> C.H.M. Broeders  
Überlegungen zur Gestaltung eines Programmsystems für Unter=  
suchungen zum nuklearen Brennstoffkreislauf.  
INR 1178,  
PSB Primärbericht 01.05.07P81B, PSB-Ber. 1569 (Mai 1982)
  
- <17> E. Stein  
BURN3D. Eine KAPROS-Prozedur zum dreidimensionalen Abbrand mit D3E.  
Primärbericht in Vorbereitung.
  
- <18> H. Bachmann, R. Kiesel, D. Woll  
Kurzbeschreibung des KAPROS-Moduls BUCITO zur Bucklingberechnung  
durch nulldimensionale Iteration  
INR 973, KAPROS 46,  
PSB Primärbericht 01.02.04p23J, PSB-Ber. 1370. (Oktober 1979)
  
- <19> H. Bachmann, R. Kiesel  
Kurzbeschreibung des KAPROS-Moduls DIFFO zur Berechnung der  
nulldimensionalen Multigruppen-Diffusionsgleichung und dessen  
Prüfmodul PRDIFO.  
INR 945, KAPROS 44,  
PSB Primärbericht 01.02.04p23H, PSB-Ber. IV 107. (Juni 1979)
  
- <20> D. Woll  
KAPROS Informationssystem KSINFO.  
Persönliche Mitteilung.

19. Datenblockspezifikationen für die vom Modul erzeugten Blöcke:

19.1 DBN=BURNUP DENSITIES,IND=1

NMISCH Anzahl der Mischungen, für welche Daten im Block vorhanden sind.

MZ Anzahl der Zeitschritte, für welche Daten im Block vorhanden sind.

ITOT Anzahl der Nuklide. ( ITOT = ILITE + IACT + IFP )

ILITE Anzahl der leichten Elemente.

IACT Anzahl der Aktiniden.

IFP Anzahl der Spaltprodukte.

NUCL ITOT Nuklidnamen in numerischer Darstellung.

Die folgenden Daten werden NMISCH-mal wiederholt.

TZ Teilchenzahldichten für alle ITOT Nuklide einer Mischung und alle MZ Zeitschritte in der Form  
( (TZ(I,J),I=1,ITOT),J=1,MZ)

19.2 DBN=MIXTOUT,IND=1,2,...,MZ

NMISCH Anzahl der Mischungen

Die folgenden Daten werden NMISCH-mal wiederholt.

NMATM Anzahl der Materialien in der Mischung

IDGSM Gruppensatzname ( 8 Zeichen in Hochkomma eingeschlossen ). Siehe auch <3>.

IDV Name des Materials, von dem der 1/V-Querschnitt übernommen wird. ( 8 Zeichen in Hochkomma eingeschlossen ). Siehe auch <3>.

IDCHI Name des Materials, von dem der CHI-Querschnitt übernommen wird. ( 8 Zeichen in Hochkomma eingeschlossen ). Siehe auch <3>.

Die folgenden Daten werden NMATM-mal wiederholt.

MATNAM Materialname auf der GRUBA-Bibliothek. ( 8 Zeichen in Hochkomma eingeschlossen ).

TEMP Temperatur in Kelvin.

TZ Teilchenzahldichte des Materials in der Einheit  $10^{24} \cdot \text{cm}^{-3}$ .

Anhang 1: Beschreibung der vom Programm gelösten Abbrandgleichungen.

Die folgenden Ausführungen beschreiben die in der gegenwärtigen Programmversion behandelten Zerfalls- und Neutronen-Reaktionen. Sie stützen sich auf die in <1> gegebene Darstellung, die auch zur ausführlichen Information empfohlen wird.

Beim Abbrand interessiert man sich für die zeitliche Veränderung der Atomdichte eines Nuklids  $n$ . Veränderungen erfolgen durch Abnahme und durch Zunahme.

Die Produktion eines Nuklids kann durch die folgenden Reaktionen erfolgen:

- (a) Zerfall anderer Nuklide
- (b) Neutroneneinfang ( wozu hier auch die  $(n,2n)$ - und die  $(n,3n)$ - Reaktion gerechnet wird ) anderer Nuklide
- (c) bei der ( eventuellen ) Spaltung entstehende Spaltprodukte

Die Abnahme der Teilchenzahldichte eines Nuklids kann durch die folgenden Reaktionen erfolgen:

- (a) Zerfall dieses Nuklids
- (b) Neutroneneinfang ( wozu auch hier die  $(n,2n)$ - und die  $(n,3n)$ - Reaktion gerechnet wird ) durch dieses Nuklid
- (c) (eventuelle) Spaltung dieses Nuklids

Wir betrachten nun einen Bereich mit den über diesen Bereich räumlich gemittelten Größen Teilchenzahldichten, Neutronenflußdichte und Querschnitten. Die Ortsabhängigkeit der Veränderung der Teilchenzahldichten wird durch Verwendung verschiedener Bereiche beschrieben. In jedem Bereich seien  $N$  Nuklide gegeben, wobei ein Nuklid im Grundzustand und dasselbe Nuklid im isomeren Zustand als zwei verschiedene Nuklide betrachtet werden. Sei nun  $X_n(t)$  die Teilchenzahldichte des Nuklids  $n$  zum Zeitpunkt  $t$ , so gilt für die zeitliche Veränderung der Teilchenzahldichte, wenn man die Querschnitte und die Neutronenflußdichte in dem betrachteten Zeitabschnitt als konstant annimmt, die folgende Gleichung:

$$\frac{dX_n(t)}{dt} = \sum_{\substack{j=1 \\ (j \neq n)}}^N l_{nj} \lambda_j X_j(t) \quad \text{Produktion des Nuklids } n \text{ durch Zerfall} \\ \text{der Nuklide } j=1,2,\dots,N \text{ (} j \neq n \text{)}$$

$$+ \phi \sum_{\substack{j=1 \\ (j \neq n)}}^N f_{nj} \sigma_j X_j(t) \quad \text{Produktion des Nuklids } n \text{ durch Neutronen=} \\ \text{einfang ( mit } (n,2n) \text{ und } (n,3n) \text{ )} \\ \text{der Nuklide } j=1,2,\dots,N \text{ (} j \neq n \text{)}$$

$$+ \phi \sum_{k=1}^5 Y_{nk} \sigma_k^f X_k(t) \quad \text{N u r f\"ur Spaltprodukte:} \\ \text{Produktion des Nuklids } n \text{ durch Spaltung} \\ \text{der Aktiniden } k=1,2,\dots,5 \text{ (vom Programm} \\ \text{behandelte Aktiniden siehe weiter hinten)}$$

$$- \lambda_n X_n(t) \quad \text{Abbau durch Zerfall}$$

$$- \phi \sigma_n X_n(t) \quad \text{Abbau des Nuklids } n \text{ durch Neutronen=} \\ \text{einfang ( mit } (n,2n) \text{ und } (n,3n) \text{ )}$$

$$- \phi \sigma_n^f X_n(t) \quad \text{N u r f\"ur Aktiniden:} \\ \text{Abbau des Nuklids } n \text{ durch Spaltung}$$

Die obige Gleichung gilt für jedes Nuklid  $n=1,2,\dots,N$ . Damit erhält man ein homogenes lineares Differentialgleichungssystem für  $X_n(t)$ , das sich in Vektorschreibweise als  $dX(t)/dt = A * X(t)$  formulieren läßt. Dabei ist  $X(t)$  der Teilchenzahldichtevektor und  $A$  eine die Zerfalls- und Produktions-Koeffizienten enthaltende Matrix.

Die in der obigen Gleichung benutzten Größen haben die im folgenden beschriebene Bedeutung:

$X_n(t)$  Teilchenzahldichte des Nuklids  $n$  ( z.B. über ein Raumelement gemittelt ). Dimension = Teilchen /  $cm^3$

$\lambda_j$  Radioaktive Zerfallskonstante des Nuklids  $j$ . Dimension = 1/s

$l_{nj}$  Bruchteil der bei einem bestimmten radioaktiven Zerfallsprozeß des Nuklids  $j$  gebildeten Nuklide, welcher zur Bildung des Nuklids  $n$  führt.  $l_{nj}$  multipliziert mit  $\lambda_j$  ergibt die Zerfallskonstante für einen bestimmten radioaktiven Zerfallsprozeß, z.B.  $\alpha$ -Zerfall oder  $\beta$ -Zerfall. Die möglichen Prozesse sind weiter unten aufgeführt.  $l_{nj}$  liegt zwischen 0 und 1.

- $\Phi$  Räumlich und zeitlich gemittelte Neutronenflußdichte.  
Dimension = Neutronen / (  $\text{cm}^2 * \text{s}$  )
- $\sigma_j$  Spektrum-gewichteter Eingruppen-Einfangquerschnitt des  
Nuklids i ( mit (n,2n) und (n,3n) ). Dimension =  $10^{-24} \text{cm}^2 = \text{barn}$ .
- $f_{nj}$  Bruchteil der beim Neutroneneinfang (mit (n,2n) und (n,3n))  
durch das Nuklid j gebildeten Nuklide, welcher zur Bildung des  
Nuklids n führt. Durch Multiplikation von  $f_{nj}$  mit dem  
Einfangquerschnitt ( mit (n,2n) und (n,3n) ) von Nuklid j  
erhält man den Teilquerschnitt für die entsprechende  
Neutronenreaktion, z.B. (n, $\alpha$ ) oder (n, $\gamma$ ).
- $\sigma_k^f$  Spektrum-gewichteter Eingruppen-Spaltquerschnitt des  
Nuklids k. Dimension =  $10^{-24} \text{cm}^2 = \text{barn}$ .
- $Y_{nk}$  Bei der Spaltung des Nuklids k entstehender Anteil von  
Nuklid n. Welche Aktiniden im Programm bei der Spaltung zur  
Produktion von Spaltprodukten führen, wird weiter hinten  
erläutert. Die Spaltproduktausbeuten ( Yields ) sind auf 2.0  
normiert, d.h. die Summe der  $Y_{nk}$  über alle  $n=1,2,\dots,N$  für  
ein bestimmtes k ergibt 2.0.

Das Programm behandelt die folgenden radioaktiven Zerfallsprozesse:

- Emission eines Positrons, wobei das erzeugte Nuklid im Grundzustand bzw. in einem isomeren Zustand verbleibt.
- Übergang vom isomeren Zustand in den Grundzustand.
- Emission eines Alphateilchens.  $\alpha$ -Zerfall.
- Emission eines Neutronens, wobei das erzeugte Nuklid im Grundzustand bzw. in einem isomeren Zustand verbleibt.  $\beta$ -Zerfall.
- Aussendung von verzögerten Neutronen ( Nur für Spaltprodukte )
- Spontanspaltung ( Nur für Aktiniden. Wird bei totaler Zerfalls=  
konstante berücksichtigt, jedoch werden im Programm keine  
Spontanspaltungsprodukte betrachtet. )

Die vom Programm behandelten Nuklide sind in drei Gruppen, die in der Beschreibung des Moduls BURNUP auch Bibliotheken genannt wurden, eingeteilt: leichte Elemente, Aktiniden und Spaltprodukte. Ein Nuklid einer Gruppe kann kein Nuklid einer anderen Gruppe produzieren, mit der einen Ausnahme, daß in der Gruppe der Aktiniden durch Spaltung die Spaltprodukte produziert werden können. Es gibt einige Nuklidtypen, die in mehr als einer Gruppe vorkommen, z.B. Tritium bei den leichten Elementen und bei den Spaltprodukten. Die Art der in der gegenwärtigen Programmversion behandelten Neutronenreaktionen ist davon abhängig, zu welcher der drei Gruppen das Nuklid gehört. Im folgenden wird deshalb bei jeder Reaktion - in { und } eingeschlossen - aufgeführt, bei welcher Gruppe sie betrachtet wird.

Das Programm behandelt die folgenden Neutronenreaktionen:

- (n, $\alpha$ )-Reaktion { leichte Elemente, Aktiniden, Spaltprodukte }
- (n,p)-Reaktion { leichte Elemente, Aktiniden, Spaltprodukte }
- (n, $\gamma$ )-Reaktion zum Grundzustand und zum isomeren Zustand.  
{ leichte Elemente, Aktiniden, Spaltprodukte }
- (n,2n)-Reaktion zum Grundzustand und zum isomeren Zustand.  
{ leichte Elemente, Aktiniden }
- (n,3n)-Reaktion { Aktiniden }
- Spaltung { Aktiniden }

Bei der Spaltung der Aktiniden wird die Bildung der Spaltprodukte nur für eine beschränkte Anzahl ( zur Zeit maximal 5 ) von Aktiniden im Programm behandelt, wobei die Auswahl auch noch von dem betrachteten Reaktortyp, der in der Programmeingabe durch den Wert von NLIBE festgelegt wird, ( NLIBE=1,2,3,4 siehe 11.1 Schlüsselwort 'REAC' ) abhängig ist. Die Spaltproduktausbeute (Yield), beschreibt den Anteil eines bestimmten Spaltproduktes, welches im Mittel bei der Spaltung eines Aktinids entsteht. Summiert man alle Anteile, welche bei der Spaltung eines Aktinids entstanden sind, so erhält man, da normalerweise eine Spaltung zu zwei Spaltprodukten führt, den Wert 2.0. Multipliziert man die einem gespaltenen Nuklid und einem Spaltprodukt zugeordnete Spaltproduktausbeute mit dem Spaltquerschnitt und der Neutronenflußdichte, so erhält man die Produktionsrate für das jeweilige Spaltprodukt. In der folgenden Tabelle sind für jeden Reaktortyp die im Programm bei der Produktion von Spaltprodukten berücksichtigten Aktiniden zusammen mit den benutzten Yield-Sätzen aufgeführt.

NLIBE Spaltprodukte produzierende Nuklide und im Programm benutzte Datensätze für die Spaltproduktausbeuten.

1	$^{233}\text{U}$	$^{235}\text{U}$	$^{232}\text{Th}$	$^{238}\text{U}$	$^{239}\text{Pu}$
	$^{233}\text{U-t}$	$^{235}\text{U-t}$	$^{232}\text{Th-f}$	$^{238}\text{U-f}$	$^{239}\text{Pu-t}$
2	$^{233}\text{U}$	$^{235}\text{U}$	$^{241}\text{Pu}$	$^{238}\text{U}$	$^{239}\text{Pu}$
	$^{233}\text{U-t}$	$^{235}\text{U-t}$	$^{239}\text{Pu-t}$	$^{238}\text{U-f}$	$^{239}\text{Pu-t}$
3	$^{241}\text{Pu}$	$^{235}\text{U}$	$^{240}\text{Pu}$	$^{238}\text{U}$	$^{239}\text{Pu}$
	$^{239}\text{Pu-f}$	$^{235}\text{U-f}$	$^{239}\text{Pu-f}$	$^{238}\text{U-f}$	$^{239}\text{Pu-f}$
4	$^{233}\text{U}$	$^{235}\text{U}$	$^{232}\text{Th}$	$^{238}\text{U}$	$^{239}\text{Pu}$
	$^{233}\text{U-t}$	$^{235}\text{U-t}$	$^{232}\text{Th-f}$	$^{238}\text{U-f}$	$^{239}\text{Pu-t}$

In der Tabelle bedeutet -t, daß die Spaltproduktausbeuten für die Spaltung mit thermischen und -f, daß die Spaltproduktausbeuten für die Spaltung mit schnellen Neutronen benutzt werden.

Für NLIBE=2 wird statt der Produktion der Spaltprodukte von  $^{232}\text{Th}$  die Produktion der Spaltprodukte von  $^{241}\text{Pu}$  berücksichtigt. Da jedoch für die Spaltung von  $^{241}\text{Pu}$  keine Yields auf den ORIGEN-Bibliotheken abgespeichert sind, wird im Programm stattdessen der Yield-Satz von  $^{239}\text{Pu-t}$  benutzt.

Für NLIBE=3 wird statt der Produktion der Spaltprodukte von  $^{233}\text{U}$  die Produktion der Spaltprodukte von  $^{241}\text{Pu}$ , und statt der Produktion der Spaltprodukte von  $^{232}\text{Th}$  die Produktion der Spaltprodukte von  $^{240}\text{Pu}$  berücksichtigt. Da jedoch auch für diese beiden Nuklide keine Yields auf den ORIGEN-Bibliotheken abgespeichert sind, wird im Programm für beide Aktiniden der Yield-Satz von  $^{239}\text{Pu-f}$  benutzt.



Anhang 2: Kurzbeschreibung des Prüfmoduls PBURNI.

1. Modulname:

PBURNI Version vom 15.2.1982 in FORTRAN IV.

2. Name des Autors:

E. Stein, INR, 415

3. Aufrufparameter:

Nicht benutzt.

4. Zweck des Moduls:

Prüfung des Datenblockes DBN=INPUT BURNUP

5. Lösungsmethode:

Für jedes der möglichen Schlüsselwörter wird geprüft, ob die Zahl der nachfolgenden Daten den festgelegten Wert hat, ob die numerischen Größen in einem bestimmten Bereich liegen und ob die Textgrößen unerlaubte Zeichen enthalten.

6. Einschränkung der Komplexität des Problems:

Es erfolgt keine Prüfung der Größen dieses Blockes auf Übereinstimmung mit Größen aus anderen Datenblöcken.

7. Typische Laufzeiten:

Weniger als 0.1 Sekunden auf der IBM/3033

8. Besondere Anwendungsmöglichkeiten:

Keine

9. Benutzte Hilfsprogramme:

KSINIT - KAPROS Systemroutine (<6>,<7>)

10. Hardware-Anforderungen des Programms:

Der Hauptspeicherbedarf des Prüfmoduls ist kleiner als 16 K-Byte. Hinzu kommt noch die Länge des geprüften Datenblocks INPUT BURNUP. Externe Dateien werden nicht benötigt.

11. Beschreibung der Eingabe:

Entfällt.

12. Beschreibung der durch den Modul erzeugten Datenblöcke:

Es werden keine Datenblöcke erzeugt.

13. Beschreibung der vom Modul gelesenen Datenblöcke:

Der Modul liest den Datenblock bzw. die Datenblöcke  
DBN=INPUT BURNUP, IND=iparm. Bei mehreren Datenblöcken INPUT BURNUP  
ist verkettet zu prüfen, d.h. es ist bei IND=1 bis IND=iparm-1 der  
Prüfmodulname PMN=KETT anzugeben, und erst für IND=iparm der Name  
PMN=PBURNI zu verwenden.

14. Beschreibung der vom Modul geänderten Datenblöcke:

Es werden keine Datenblöcke geändert.

15. Fehlernachrichten des Moduls:

Die Fehlernachrichten des Moduls sind selbsterklärend und werden  
unter der KAPROS-Ausgabeeinheit sowie teilweise unter der -Proto=  
kollereinheit ausgegeben.

16. Beispiel für den Aufruf und eine Eingabe des Programms:

Ein Beispiel für den Aufruf des Prüfmoduls findet man in Abschnitt  
16. der Kurzbeschreibung des Moduls BURNUP. Dort wird in dem  
gelisteten Eingabebeispiel, das in 'TSO909.KSJOB.CNTL(BURNUP)'  
abgespeichert ist, der Modul innerhalb der \*KSIOX DBN=INPUT BURNUP-  
Karte angesprochen. Eine über den Inhalt von INPUT BURNUP hinaus=  
gehende Eingabe hat das Programm nicht.

17. Erläuterung der Ausgabe des Moduls:

Der Modul erzeugt auf der KAPROS-Ausgabeeinheit die Meldungen  
"BEGIN OF MODULE PBURNI" und "END OF MODULE PBURNI". Dazwischen  
steht - falls keine Fehler in INPUT BURNUP entdeckt wurden -  
"\*\*\* NO ERRORS DETECTED IN BLOCK KSTEST                   IND= 1". Werden  
statt eines Blocks INPUT BURNUP mehrere Blöcke mit verschiedenen  
Indizes verkettet geprüft, so erscheint obige Meldung für jeden  
geprüften Block. Dabei läuft dann aber IND von 1 bis zur Anzahl  
der verketteten Blöcke.

18. Referenzen:

Liste der Referenzen siehe Abschnitt 18. der Kurzbeschreibung des  
Moduls BURNUP.

Anhang 3: Kurzbeschreibung des Prüfmoduls PBURNF.

1. Modulname:

PBURNF Version vom 31.3.1982 in FORTRAN IV.

2. Name des Autors:

E. Stein, INR, 415

3. Aufrufparameter:

Nicht benutzt.

4. Zweck des Moduls:

Prüfung des Datenblockes DBN=FLUXIN

5. Lösungsmethode:

Beschreibung nicht relevant.

6. Einschränkung der Komplexität des Problems:

Keine.

7. Typische Laufzeiten:

Weniger als 0.1 Sekunden auf der IBM 3033.

8. Besondere Anwendungsmöglichkeiten:

Keine.

9. Benutzte Hilfsprogramme:

KSINIT - KAPROS Systemroutine (<6>,<7>)

10. Hardware-Anforderungen des Programms:

Der Hauptspeicherbedarf des Prüfmoduls ist kleiner als 16 K-Byte.  
Hinzu kommt noch die Länge des geprüften Datenblocks FLUXIN. Externe  
Dateien werden nicht benötigt.

11. Beschreibung der Eingabe:

Entfällt.

12. Beschreibung der durch den Modul erzeugten Datenblöcke:

Der Modul erzeugt keine Datenblöcke.

13. Beschreibung der vom Modul gelesenen Datenblöcke:

Der Modul liest den Datenblock bzw. die Datenblöcke  
DBN=FLUXIN, IND=iparm. Bei mehreren Datenblöcken FLUXIN ist verkettet  
zu prüfen, d.h. es ist bei IND=1 bis IND=iparm-1 der Prüfmodulname  
PMN=KETT anzugeben, und erst für IND=iparm der Name PMN=PBURNF zu  
verwenden.

14. Beschreibung der vom Modul geänderten Datenblöcke:

Der Modul ändert keine Datenblöcke.

15. Fehlernachrichten des Moduls:

Die Fehlernachrichten des Moduls sind selbsterklärend und werden  
unter der KAPROS-Ausgabeeinheit sowie unter der -Protokolleinheit  
ausgegeben.

16. Beispiel für den Aufruf und eine Eingabe des Programms:

Ein Beispiel für den Aufruf des Prüfmoduls findet man in Abschnitt  
16. der Kurzbeschreibung des Moduls BURNUP. Dort wird in dem  
gelisteten Eingabebeispiel, das in 'TSO909.KSJOB.CNTL(BURNUP)'  
gespeichert ist, der Modul innerhalb der \*KSIOX DBN=FLUXIN-Karte  
angesprochen. Eine über den Inhalt von FLUXIN hinausgehende  
Eingabe hat das Programm nicht.

17. Erläuterung der Ausgabe des Moduls:

Der Modul erzeugt auf der KAPROS-Ausgabeeinheit die Meldungen  
"BEGIN OF MODULE PBURNF" und "END OF MODULE PBURNF". Dazwischen  
steht - falls keine Fehler in FLUXIN entdeckt wurden -  
"\*\*\* NO ERRORS DETECTED IN BLOCK KSTEST           IND= 1". Werden  
statt einem Block FLUXIN mehrere Blöcke mit verschiedenen Indizes  
verkettet geprüft, so erscheint obige Meldung für jeden geprüften  
Block. Dabei läuft dann aber IND von 1 bis zur Anzahl der verkette=  
ten Blöcke.

18. Referenzen:

Liste der Referenzen siehe Abschnitt 18. der Kurzbeschreibung des  
Moduls BURNUP.

Anhang 4:

Kurzbeschreibung des KAPROS-Moduls ORFORD zum Sortieren der Nuklide auf den ORIGEN-Bibliotheken nach steigenden Atomgewichten.

1. Modulname :

ORFORD 1.Version vom 15.6.81 in FORTRAN IV

2. Name des Autors :

E.Wiegner, INR, Tel.2416

3. Aufrufparameter :

Der Modul benutzt keinen der fünf möglichen Aufrufparameter und reagiert damit auch nicht auf den Parameter MPARAM auf der \*GO-Karte. Jedoch sollte der Parameter ML=1 angegeben werden, wodurch die KAPROS-Nachrichten ( eine große Anzahl durch viele Datenübertragungen ) unterdrückt werden. ( Das genaue Aussehen der \*GO-Karte ist dem Eingabebeispiel in Abschnitt 16. zu entnehmen. )

4. Zweck des Moduls :

Die Reihenfolge der Nuklide auf den Original ORIGEN-Bibliotheken, die auch von KORIGEN (<2>) benutzt werden, stimmt nicht immer mit derjenigen überein, welche vom Modul BURNUP erwartet wird. Deshalb müssen ausgehend von diesen Bibliotheken durch Umsortieren mit Hilfe des hier beschriebenen Moduls neue Dateien hergestellt werden, welche die Nuklide in der gewünschten Reihenfolge enthalten. Dabei werden die ORIGEN-Bibliotheken mit Zerfalls- und Neutronen-Daten behandelt. Zum Zeitpunkt der Erstellung dieses Berichtes waren die aktuellen Fassungen der ORIGEN-Bibliotheken mit Zerfalls- und Neutronendaten unter den folgenden Namen abgespeichert:

(a) INR909.ORFI(M3) ( leichte Elemente )

(b) INR909.ORFI(M4) ( Aktiniden )

(c) INR909.ORFI(M5) ( Spaltprodukte )

Das Umsortieren von anderen ORIGEN-Dateien des obigen Typs ist auch möglich, wenn das Ordnungsprinzip und der Umfang nicht zu sehr von den oben aufgeführten abweicht. Man sollte jedoch in diesem Fall die erzeugten umsoritierten Dateien einer genauen Inspektion unterziehen.

5. Lösungsmethode :

Die 3 ORIGEN-Bibliotheken INR909.ORFI(M3), INR909.ORFI(M4), INR909.ORFI(M5), die vom Modul ORFORD umsortiert werden, sind im allgemeinen nach folgenden Regeln aufgebaut :

1. nach aufsteigenden Kernladungszahlen
2. bei gleicher Kernladungszahl  
nach aufsteigenden Massenzahlen/Atomgewichten
3. bei gleicher Kernladungszahl und gleicher Massenzahl  
zunächst isomerer Zustand  
dann Grundzustand

Der Modul BURNUP erwartet dagegen ORIGEN-Bibliotheken, die nach folgenden Prinzipien geordnet sind :

1. nach aufsteigenden Massenzahlen/Atomgewichten
2. bei gleicher Massenzahl  
nach aufsteigenden Kernladungszahlen
3. bei gleicher Massenzahl und gleicher Kernladungszahl  
zunächst Grundzustand  
dann isomerer Zustand

Das Programm ORFORD sortiert nun die 3 ORIGEN-Bibliotheken INR909.ORFI(M3), INR909.ORFI(M4) und INR909.ORFI(M5) so um, daß sie anschließend unter den auf den DD-Karten angegebenen neuen Namen vom Modul BURNUP verwendet werden können.

In dem in Abschnitt 16. gelisteten Beispiel für den Aufruf von ORFORD wurden temporäre Dateien für die umsortierten Bibliotheken verwendet. Es existieren jedoch residente umsortierte Dateien unter den DSN-Namen INR415.KORFI(NDLITE), INR415.KORFI(NDACT) und INR415.KORFI(NDFPS).

6. Einschränkungen :

Um keine bestehenden Dateien ungewollt zu überschreiben, müssen die vom Modul erzeugten Dateien die Disposition New (DISP=NEW) haben.

7. Typische Laufzeiten :

70 sec CPU-Zeit auf der IBM 3033

8. Besondere Anwendungsmöglichkeiten :

keine

9. Benutzte Hilfsprogramme :

Das Assembler-Programm KSINIT (<6>,<7>).

10. Hardware-Anforderungen des Programms :

Wenn der Eingabeblock 'INPUT ORFORD \_\_\_\_' nicht angeliefert wird, benutzt das Programm folgende DD-Namen als Default-Werte für die ORIGIN-Bibliotheken :

FT20F001 für INR909.ORFI(M3) (SPACE: 7 TRKs auf der BAT00C)

FT21F001 für INR909.ORFI(M4) (SPACE: 3 TRKs auf der BAT00C)

FT22F001 für INR909.ORFI(M5) (SPACE: 21 TRKs auf der BAT00C)

FT30F001 für Ausgabedatei ORFI3

FT31F001 für Ausgabedatei ORFI4

FT32F001 für Ausgabedatei ORFI5

11. Beschreibung der Eingabe :

Der Eingabeblock 'INPUT ORFORD \_\_\_\_' muß nur angeliefert werden, wenn die Default-Werte der DD-Namen der ORIGIN-Bibliotheken überschrieben werden sollen.

Der Block INPUT ORFORD beginnt mit der Karte

\*KSIOX DBN=INPUT ORFORD,TYP=CARD,PMN=PRDUM

und endet mit der Karte

\*\$\*\$

Dazwischen stehen die im folgenden beschriebenen Werte.

IALT (20) gewünschte Referenznummer für INR909.ORFI(M3)  
( Referenznummer für INR909.ORFI(M4) : IALT+1  
Referenznummer für INR909.ORFI(M5) : IALT+2 )

INEU (30) gewünschte Referenznummer für Ausgabedatei ORFI3  
( Referenznummer für Ausgabedatei ORFI4 : INEU+1  
Referenznummer für Ausgabedatei ORFI5 : INEU+2 )

Die Zahlen in Klammer (20 und 30) bedeuten die Defaultwerte für IALT und INEU. Diese werden benutzt, wenn der Datenblock INPUT ORFORD nicht vorhanden ist.

Wie schon in Abschnitt 6. erwähnt, müssen die Dateien mit den Referenznummern INEU, INEU+1 und INEU+2 DISP=NEW haben. Wenn dies nicht der Fall ist, wird der KAPROS-Lauf unter Ausgabe von Fehlermeldungen abgebrochen. Damit wird ein ungewünschtes Überschreiben bestehender Dateien verhindert.

12. Vom Modul erzeugte Datenblöcke :

keine

13. Beschreibung der vom Modul gelesenen Datenblöcke :

Der Modul liest nur den in 11. beschriebenen Eingabedatenblock.

14. Beschreibung der vom Modul geänderten Datenblöcke :

keine

15. Fehlernachrichten des Moduls :

Der Modul erzeugt selbsterklärende Fehlernachrichten und setzt bei Job-Abbruch den Fehlercode auf den Wert 90.

16. Beispiel für den Aufruf und eine Eingabe des Programms :

In dem folgenden Beispiel werden aus den drei Dateien unter FT10F001, FT11F001 und FT12F001 ( Referenznummer IALT=10 ) die umsortierten Dateien unter FT20F001, FT21F001 und FT22F001 ( Referenznummer INEU=25 ) als temporäre Dateien erzeugt. Es existieren jedoch auch residente umsortierte Dateien ( siehe dazu die am Ende von Abschnitt 5. gemachte Bemerkung ).

```
//  J O B  K A R T E   ( REGION=1024K,TIME=2 )
//  EXEC KSG
//K.FT10F001 DD DISP=SHR,DSN=INR909.ORFI(M3)
//K.FT11F001 DD DISP=SHR,DSN=INR909.ORFI(M4)
//K.FT12F001 DD DISP=SHR,DSN=INR909.ORFI(M5)
//K.FT25F001 DD DSN=&&ORFI3,SPACE=(TRK,10),UNIT=SYSDA
// DCB=(RECFM=FB,BLKSIZE=3120,LRECL=80)
//K.FT26F001 DD DSN=&&ORFI4,SPACE=(TRK,10),UNIT=SYSDA
// DCB=(RECFM=FB,BLKSIZE=3120,LRECL=80)
//K.FT27F001 DD DSN=&&ORFI5,SPACE=(TRK,40),UNIT=SYSDA
// DCB=(RECFM=FB,BLKSIZE=3120,LRECL=80)
//K.SYSIN DD *
*KSIOX DBN=INPUT ORFORD,TYP=CARD,PMN=PRDUM
10 25
*$$
*GO SM=ORFORD,ML=1
//
```

17. Erläuterung der Ausgabe des Moduls :

nicht relevant

18. Referenzen :

Liste der Referenzen siehe Abschnitt 18. der Kurzbeschreibung des Moduls BURNUP.



Die Autoren bedanken sich bei Frau Dr. I. Broeders sowie bei den Herren Dr. R. Boehme, Dr. G. Buckel, Dr. E. Kiefhaber und Dr. H.W. Wiese für das sorgfältige Durchlesen dieses Berichtes, das zur Beseitigung einiger Fehler führte, sowie für die vielen nützlichen Verbesserungsvorschläge, welche sich sehr positiv auf den Inhalt und die Lesbarkeit des Berichtes ausgewirkt haben.