



ENIGMA-polttoainekoodin WHITE4- ja NFI- lämmönjohtavuusmallien vertailu SPACE-ohjelmalla

Kirjoittaja: Joonas Kättö

Luottamuksellisuus: Julkinen

Raportin nimi ENIGMA-polttoainekoodin WHITE4- ja NFI-lämmönjohtavuusmallien vertailu SPACE-ohjelmalla		
Asiakkaan nimi, yhteyshenkilö ja yhteystiedot VYR	Asiakkaan viite 13/2011 SAF	
Projektin nimi Polttoaineen laaja-alainen mallinnus	Projektin numero/lyhytnimi PALAMA 73500	
Raportin laatija(t) Joonas Kättö	Sivujen/liitesivujen lukumäärä 25/12	
Avainsanat SPACE, ENIGMA, WHITE4, NFI, MATLAB	Raportin numero VTT-R-05921-11	
Tiivistelmä <p>Tämä raportti käsittelee kesän 2011 aikana kehitettyä SPACE-tietokoneohjelmaa (Simulation Performance Analysis Code for ENIGMA), jolla voidaan verrata ENIGMA-polttoainekoodin WHITE4- ja NFI-lämmönjohtavuusmalleja. WHITE4 on ENIGMA:ssa oletusasetuksena käytetty malli, kun taas NFI on vasta myöhemmin lisätty ENIGMA:an vaihtoehtoisena mallina. Lämmönjohtavuusmallien vertailussa on toistaiseksi keskitytty siihen, miten mallit vaikuttavat polttoainesauvan keskilinjan lämpötiloihin ja fissiokaasujen vapautumiseen.</p> <p>SPACE-ohjelman vertailutulosten analysoimiseksi kehitettiin myös kahdeksan MATLAB-ohjelmaa. Ne käyttävät syötteenään SPACE:n tulostamia tiedostoja ja piirtävät vertailun tuloksesta kuvaajia.</p> <p>SPACE-ohjelman testaus osoitti, että ohjelma toimii tarkoituksenmukaisella tavalla lämmönjohtavuusmalleja vertailtaessa. Tämän tutkimuksen osalta lämmönjohtavuusmallien paremmuudesta ei kuitenkaan voi vielä antaa luotettavia tuloksia, sillä polttoainesauvojen mittausdataa oli käytössä vain vähäinen määrä.</p>		
Luottamuksellisuus	Julkinen	
Espoo 29.8.2011 Laatija	Tarkastaja	Hyväksyjä
Joonas Kättö, tutkimusharjoittelija	Ville Tulkki, tutkija	Timo Vanttola, teknologiapäällikkö
VTT:n yhteystiedot PL 1000, 02044 VTT		
Jakelu (asiakkaat ja VTT) SAFIR 2014 / TR3 VTT Arkisto		
<p style="text-align: center;"><i>VTT:n nimen käyttäminen mainonnassa tai tämän raportin osittainen julkaiseminen on sallittu vain VTT:ltä saadun kirjallisen luvan perusteella.</i></p>		

Sisällysluettelo

Käytetyt lyhenteet.....	<u>3</u>
1 Johdanto.....	<u>4</u>
2 Vertailtavat lämmönjohtavuusmallit	<u>4</u>
2.1 WHITE4	<u>5</u>
2.2 NFI	<u>5</u>
3 SPACE	<u>6</u>
3.1 Ohjelman käyttäminen	<u>7</u>
3.1.1 Alkuasetukset.....	<u>7</u>
3.1.2 Input-tiedostojen antaminen.....	<u>7</u>
3.1.3 Mittausdatan antaminen.....	<u>8</u>
3.1.4 Muut ohjelmalle syötettävät tiedot.....	<u>9</u>
3.1.5 Ohjelman ajaminen	<u>10</u>
3.2 Ohjelman rakenne ja toiminta	<u>10</u>
3.2.1 Pääohjelma	<u>10</u>
3.2.2 Aliohjelmat	<u>11</u>
3.3 Vertailutulosten analysointi MATLAB -ohjelmilla	<u>14</u>
3.3.1 t_temptime.m	<u>15</u>
3.3.2 t_nfiwhite4.m.....	<u>16</u>
3.3.3 t_simmeas.m.....	<u>17</u>
3.3.4 t_all.m	<u>18</u>
3.3.5 f_fgrbu.m.....	<u>19</u>
3.3.6 f_nfiwhite4.m.....	<u>20</u>
3.3.7 f_allnfiwhite4.m	<u>21</u>
3.3.8 f_allsimmeas.m	<u>22</u>
4 Tulokset.....	<u>23</u>
5 Yhteenvedo ja johtopäätökset	<u>24</u>
Lähdeviitteet	<u>25</u>
Liitteet.....	Error! Bookmark not defined.

Käytetyt lyhenteet

BPC	ENIGMA:n lämmönjohtavuusmalli
ENIGMA	Polttoainekoodi
NFI	ENIGMA:n lämmönjohtavuusmalli
SL82	ENIGMA:n lämmönjohtavuusmalli
SPACE	Simulation Performance Analysis Code for ENIGMA
VTT	Teknologian tutkimuskeskus VTT
WHITE3	ENIGMA:n lämmönjohtavuusmalli
WHITE4	ENIGMA:n lämmönjohtavuusmalli

1 Johdanto

ENIGMA on VTT:llä käytössä oleva Fortran77-ohjelmointikielellä kirjoitettu ohjelma, jolla voidaan mallintaa polttoainesauvan käyttäytymistä ydinreaktorissa normaalitilassa. ENIGMA:n nykyistä versiota v. 5.9b on käytetty VTT:llä 1990-luvun alusta lähtien, jonka jälkeen siihen on tehty lukuisia muutoksia (Tulkki 2010). Eräs muutoksista on uuden vaihtoehdoisen NFI-lämmönjohtavuusmallin lisääminen ENIGMA:an aikaisempien mallien rinnalle. Tämän mallin tarkoituksena on muun muassa ottaa huomioon gadoliniumin osuus polttoaineessa.

Tämän raportin tarkoituksena on esittää VTT:llä kesän 2011 aikana kehitetty alusta, nimeltään Simulation Performance Analysis Code for ENIGMA (SPACE), jolla voidaan verrata ENIGMA-polttoainekoodin WHITE4- ja NFI-lämmönjohtavuusmalleja. WHITE4-lämmönjohtavuusmallia käytetään ENIGMA:ssa oletusasetuksena, kun taas NFI-lämmönjohtavuusmalli on lisätty ENIGMA:an vuonna 2009 vaihtoehdoisena mallina (Klecka 2009).

Pääpaino edellä mainittujen lämmönjohtavuusmallien vertailussa on toistaiseksi se, miten ne vaikuttavat polttoainesauvan keskilinjan lämpötiloihin ja vapautuneiden fissiokaasujen määrään. Tulevaisuudessa ohjelmaa on mahdollista kehittää siten, että sillä voidaan vertailla lämmönjohtavuusmallien vaikutusta muihinkin suureisiin.

Tässä raportissa esitetään ensin vertailtavat lämmönjohtavuusmallit luvussa 2. Luvussa 3 perehdytään SPACE:n käyttämiseen, toimintaan ja rakenteeseen. Luvussa esitellään myös MATLAB-ohjelmia, joilla SPACE:n tuloksia voidaan analysoida. Luvussa 4 esitetään lämmönjohtavuusmallien vertailun tulokset, ja lopuksi luvussa 5 on yhteenveto.

2 Vertailtavat lämmönjohtavuusmallit

Lämmönjohtavuusmallien tarkoituksena on ennustaa mahdollisimman hyvin polttoainesauvan radiaalinen lämmönjohtavuus, joka vaikuttaa suoraan polttoaineen lämpötilaan. Polttoainesauvan lämpötila taas vaikuttaa moniin muihin ominaisuuksiin ja ilmiöihin, kuten kaasuraon kaasun lämpötilaan, fissiokaasujen vapautumiseen, polttoaineen jännitykseen, virumiseen ja muodonmuutokseen, O/M-suhteeseen ja polttoaineen tiheyteen (Mohr et al. 1976, ks. Patterson 2010). Nämä ominaisuudet ja ilmiöt taas vaikuttavat toisiinsa ja jälleen moniin muihin polttoaineen ominaisuuksiin ja polttoaineessa tapahtuviin ilmiöihin. On siis tärkeää, että polttoaineen mallintamisessa käytetty lämmönjohtavuusmalli pitää mahdollisimman tarkasti paikkansa.

Tätä kirjoittaessa ENIGMA:ssa on valittavana viisi eri lämmönjohtavuusmallia, jotka ovat SL82, BPC, WHITE3, WHITE4 ja NFI. Näistä malleista NFI on uusin. Lämmönjohtavuusmalleja on useita erilaisia, koska tietämys lämmönjohtavuuden mallintamisesta on kasvanut ajan mittaan, jolloin on kehitetty uusia ja parempia malleja korvaamaan vanhoja.

2.1 WHITE4

WHITE4-lämmönjohtavuusmallia käytetään ENIGMA:ssa oletusasetuksena. Siinä polttoaineen lämmönjohtavuus (kW/m/K) saadaan kaavasta (Kilgour 1992)

$$K_f = K_{ftd}((1 - P_s)^{KF(6)} - (1 - P_L)^{KF(7)}), \quad (1)$$

jossa

$$K_{ftd} = \frac{1}{KF1B + KF(2) * T} + 0,1165 \exp\left(-\frac{11594}{T}\right), \quad (2)$$

ja

$$KF1B = KF(1)(1 + KF(8) * BUG * F_M). \quad (3)$$

Kaavoissa (1), (2) ja (3) BUG on paikallinen palama (GWd/tUO₂), F_M on polttoainematriisiin jäävien kaasuatomien osuus, P_s on mikrohuokoisuuden osuus sekä kaasukuplahuokoisuus, P_L on pysyvän huokoisuuden osuus ja T on lämpötila Kelvin-asteina.

Oletusarvona WHITE4-lämmönjohtavuusmallissa $KF(1) = 37,5$; $KF(2) = 0,2165$; $KF(6) = 2,5$; $KF(7) = 1,0$ ja $KF(8) = 0,118$, jotka ovat käyttäjän antamia parametreja.

2.2 NFI

NFI-lämmönjohtavuusmalli on lisätty ENIGMA:an vuonna 2009 vaihtoehtoisena mallina alkuperäisille malleille. Mallin tarkoituksena on muun muassa ottaa huomioon gadoliniumin osuus polttoaineessa. (Klecka 2009)

NFI-lämmönjohtavuusmallissa lämmönjohtavuus (W/m/K) saadaan kaavasta

$$K_f = \frac{1}{a + b * T + Gd + f(BU) + (1 - 0,9 \exp(-0,04BU)) * g(BU) * h(T)} + \frac{c}{T^2} * \exp\left(\frac{-d}{T}\right), \quad (4)$$

kun polttoainepellettien tiheys on noin 95 % teoreettisesta tiheydestä.

Kaavan (4) parametrit ja funktiot:

T on lämpötila Kelvineinä

BU on palama (MWd/kg_{HM})

$Q = 6380$

$a = 0,0452$

$b = 2,46 * 10^{-4}$

$c = 3,5 * 10^9$

$d = 16361$

$Gd = 1,1599GD_{frac}$

GD_{frac} = gadolinian osuus polttoaineen painosta

$f(BU) = 0,00187BU$,

$g(BU) = 0,038BU^{0,28}$

$$h(T) = \frac{1}{1 + 396 \exp\left(\frac{-Q}{T}\right)}$$

Kleckan (2009) mukaan GD_{frac} olisi gadoliniumin osuus polttoaineen painosta, mutta todellisuudessa tämä luku on siis Gd_2O_3 :n, eli gadolinian, osuus polttoaineen painosta (Berna et al. 1997).

3 SPACE

SPACE on Perl-ohjelmointikielellä kehitetty alusta ENIGMA:ssa käytettävien WHITE4- ja NFI-lämmönjohtavuusmallien vertailuun. Ohjelma saa syötteenään samanlaisia input-tiedostoja kuin ENIGMA, minkä jälkeen ohjelma muokkaa kustakin input-tiedostosta kaksi eri versiota. Toinen versio sisältää WHITE4- ja toinen NFI-lämmönjohtavuusmallin. Tämän jälkeen muokatut input-tiedostot ajetaan ENIGMA:lla.

ENIGMA:n tulostamista output-tiedostoista ohjelma hakee oleellisen datan, kuten polttoainesauvan keskilinjan lämpötilan, ja tulostaa tämän simulaatiodatan omaan tiedostoonsa. Tähän tiedostoon tulostetaan myös polttoainesauvasta mitatut arvot. Näin kutakin input-tiedostoa kohden saadaan sekä WHITE4- että NFI-lämmönjohtavuusmalleilla simuloitua arvoja, joita on helppo verrata mitattuihin arvoihin.

Polttoainesauvasta saadut mittaustulokset voidaan jakaa kahteen ryhmään. Jos polttoainesauvaa on säteilytetty vain tehoreaktorissa, mittausdataa on saatavilla vain säteilytyksen jälkeiseltä ajanhetkeltä. Tällaisesta säteilytyksestä käytetään termiä perussäteilytys. Jos sauvaa taas on säteilytetty myös kooreaktorissa, monenlaista mittausdataa on usein saatavilla usealta ajanhetkeltä. Näistä mittauseroista johtuen SPACE käsittelee kooreaktorissa säteilytettyjä sauvoja erillään perussäteilytetyistä sauvoista.

Mikäli polttoainesauvaa on säteilytetty kooreaktorissa, jolloin mittausdataa on saatavilla usealta ajanhetkeltä, ohjelma tekee input-tiedostoa kohden kaksi tulostiedostoa, joissa toisessa on WHITE4- ja toisessa NFI-lämmönjohtavuusmallilla simuloitua tulokset. Näissä tulostiedostoissa verrataan simuloitua arvoa mitattuun arvoon kullakin mitatulla ajanhetkellä. Polttoaineen keskilinjan lämpötilan ja fissiokaasujen vapautumisen osalta lasketaan simuloitua arvon suhteellinen virhe, eli simuloitua ja mitatun arvon erotuksen itseisarvo, joka jaetaan mitatulla arvolla. Näistä luvuista lasketaan vielä keskiarvo, joka osoittaa kuinka kaukana simulaatitulos on antama arvo on mitatusta arvosta.

Näiden tulostiedostojen lisäksi ohjelma tulostaa yhden tiedoston, johon on koottu edellä mainituista tulostiedostoista polttoaineen keskilinjan lämpötilan vertailudata tiivistettyyn muotoon. Lisäksi tulostetaan yksi tiedosto, johon on koottu edellä mainituista tulostiedostoista fissiokaasun vapautumista koskeva vertailudata.

Jos polttoainesauvaa ei ole säteilytetty kooreaktorissa ja sauvasta on saatavilla perussäteilytyksen mittausdataa vain säteilytyksen jälkeiseltä ajanhetkeltä, ohjelma tekee kutakin lämmönjohtavuusmallia kohden tiedoston, jossa verrataan

tällaisten polttoainesauvojen osalta viimeisen ajanhetken simuloitua arvoa mitattuun arvoon. Toistaiseksi vertailtavat arvot ovat vapautuneiden fissiokaasujen määrät. Vertailu tapahtuu jälleen laskemalla simuloidun arvon suhteellinen virhe. Myös näistä luvuista lasketaan lopuksi keskiarvo, joka kertoo kuinka hyvin lämmönjohtavuusmalli pitää paikkansa.

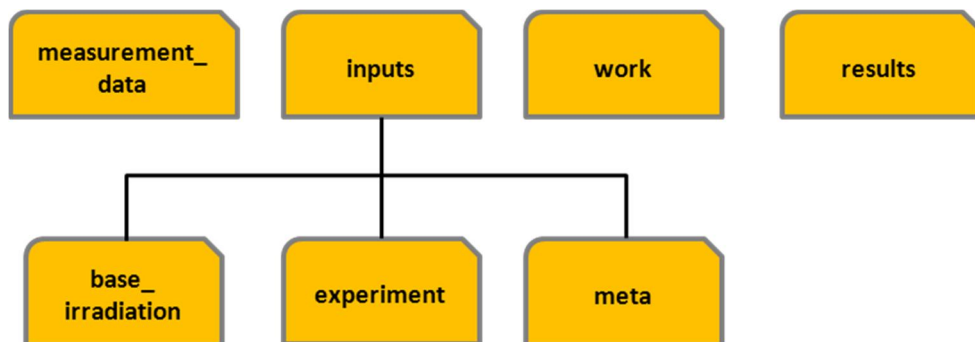
Ohjelma vaatii toimiakseen ENIGMA-polttoainekoodin. Vertailutulosten analysoimiseksi myös MATLAB tulee olla asennettuna.

3.1 Ohjelman käyttäminen

SPACE-ohjelma on kehitetty ja testattu VTT:n Ahjo-nimisessä Linux-klusterissa, ja se on suunniteltu käytettäväksi Linux-ympäristössä. Kaikki kommunikointi ohjelman kanssa tapahtuu tekstitiedostojen välityksellä, eli ohjelma saa tarvitsemansa informaation erilaisten listojen avulla. Myös ohjelman antamat vertailutulokset ovat tekstitiedostoja. Seuraavassa käydään läpi askeleet, jotka on suoritettava ohjelman ajamiseksi.

3.1.1 Alkuasetukset

Ohjelma vaatii toimiakseen hakemistorakenteen, joka on esitetty kuvassa 1. Ohjelma ajetaan siis kansiota, jossa sijaitsevat kansiot nimeltään `measurement_data`, `inputs`, `work` ja `results`. `Inputs`-kansion sisällä ovat vielä kansiot `base_irradiation`, `experiment` ja `meta`. Ohjelma saa kaiken tarvitsemansa tiedon sille annettujen tiedostojen muodossa, eikä se siten kysy käyttäjältä mitään.



Kuva 1. Hakemistorakenne

3.1.2 Input-tiedostojen antaminen

Ohjelmalle annetaan polttoainetta kuvaavat input-tiedostot useimmiten kahdessa osassa. `Base_irradiation`-kansioon sijoitetaan input-tiedoston perussäteilytysosa, joka kuvaa tehoreaktorissa tapahtunutta säteilytystä. `Experiment`-kansioon taas sijoitetaan input-tiedoston koetilanneosa, joka kuvaa koereaktorissa tapahtunutta säteilytystä. Toisin sanoen ohjelmalle syötettävät input-tiedostot ovat usein niin sanottuja restart-ajoja. Input-tiedostojen muokkaamisesta restart-ajoiksi voi lukea ENIGMA-polttoainekoodin käyttöoppaasta (Kilgour 1992). Esimerkki ohjelmalle syötettävistä input-tiedostoista on esitetty liitteessä 1. Mikäli jollakin input-tiedostolla ei ole restart-osaa `experiment`-kansiossa, ohjelma huomauttaa tästä ja

käsittelee tiedoston perussäteilytystiedostona. Tällöin ohjelma vertaa simuloituja arvoja mitattuihin arvoihin vain säteilytyksen viimeiseltä ajanhetkeltä.

ENIGMA:lle ja SPACE:lle syötetyt input-tiedostot sisältävät aina otsikko-osion, flag input-osion, keyword input-osion sekä säteilytyshistoriaosion. Jotta ohjelma toimisi oikein, input-tiedostossa on flag input-osiolla aina oltava otsikko ”flags” ja keyword input-osiolla otsikko ”keywords”. Jos nämä otsikot puuttuvat input-tiedostosta, ohjelma antaa virheilmoituksen ja sen suoritus keskeytyy.

Input-tiedostoja syötettäessä on myös hyvä tarkistaa, ettei keywords-osiossa polttoaineen huokoisuuden arvo (fuel porosity) ole eksponenttimuodossa. Jos huokoisuuden arvo on eksponenttimuodossa, SPACE laskee polttoaineen tiheyden väärin, mikä vääristää NFI-lämmönjohtavuusmallin antamia tuloksia. Ohjelma kuitenkin huomauttaa, jos huokoisuuden arvo on unohtunut eksponenttimuotoon.

3.1.3 Mittausdatan antaminen

Koesauvasta saadut mittaustulokset annetaan ohjelmalle tiedostoissa, jotka sijaitsevat measurement_data-kansiossa. Kutakin suuretta vastaava data annetaan omassa tiedostossaan siten, että yhdellä rivillä on yksi arvo. Tiedostot nimetään siten, että tiedostonimen perusosa on sama kuin vastaavan input-tiedoston nimen perusosa. Tiedostonimen päätte määrytyy tiedoston sisältämän datan mukaan. Taulukossa 1 on esitetty mittaustulostiedostojen nimeäminen, tiedoston datan yksikkö ja se, käsitelläänkö suuretta ajan funktiona. Jos suuretta ei käsitellä ajan funktiona, mittaustulostiedostoon sijoitetaan vain yksi lukuarvo.

Taulukko 1. Mittaustulostiedoston nimeäminen ja käytettävä yksikkö.

tiedoston sisältämä data	tiedoston päätte	yksikkö	ajan funktio
aika	.t	h	on
lämpötila	.temp	°C	on
lineaariteho	.lhr	kW/m	on
vapautuneet fissiokaasut	.fgr	%	ei ole
palama	.bu	MWd/tU	ei ole

Jos esimerkiksi ohjelmalle syötettävä input-tiedosto on nimeltään nimi.inp, niin mittaustulokset syötetään tiedostoissa nimi.t, nimi.temp, nimi.lhr, nimi.fgr ja nimi.bu. Koereaktorissa säteilytetylle polttoainesauvalle, eli sauvalle jolla on input-tiedoston restart-osa, voidaan antaa tiedostot nimi.t, nimi.temp, nimi.lhr ja nimi.fgr. Näistä pakollinen tiedosto ohjelmalle on tässä tapauksessa ainoastaan ajat sisältävä .t-päätteinen tiedosto. Jos polttoainesauvaa on vain perussäteilytetty jolloin restart-osaa ei ole, ohjelma voi hyödyntää ainoastaan vapautuneiden fissiokaasujen ja palaman mittaustulostietoja, jotka annetaan tiedostoon yhtenä lukuarvona.

Mittaustulostiedosto saa sisältää tekstiä ennen mittaustulostietoja, mutta tekstiä sisältävä rivi ei saa alkaa numerolla. Mittausdatan edessä ei myöskään saa olla tyhjiä

merkkejä. Esimerkkejä ohjelmalle syötettävistä mittaustulostiedostoista on liitteessä 2.

Ohjelma käsittelee kooreaktorista saatujen mittaustulosten tulostiedostoja siten, että esimerkiksi lämpötilatiedoston ensimmäinen rivi vastaa lämpötilaa ajanhetkellä, joka on aikatieoston ensimmäisellä rivillä. Vastaavasti esimerkiksi lineaaritehon kolmas rivi vastaa lineaaritehoa ajanhetkellä, joka on aikatieoston kolmannella rivillä. Näistä poiketen vapautuneista fissiokaasuista voi antaa ohjelmalle toistaiseksi vain yhden mittaustuloksen. Tämä arvo vastaa vapautuneita fissiokaasuja viimeisellä mitatulla ajanhetkellä.

Ohjelmalle syötettävä mittausdata on harvoin valmiiksi ohjelman tarvitsemassa muodossa – eli kukin suure omassa tiedostossaan. Tämän takia on SPACE-ohjelman käyttämisen helpottamiseksi kehitetty skripti `make_measdata.pl`. Skripti saa syötteenään useita suureita sisältävän mittaustiedoston, ja tekee tämän tiedoston avulla ohjelman tarvitsemat mittaustulostiedostot oikeassa muodossa oikeilla tiedostonimillä. Se neuvoo käyttäjäänsä ja kysyy käyttäjältä kaiken oleellisen tiedon, kuten muokattavan mittaustulostiedoston sisältämät suureet ja sarakkeiden määrät. Ohjelma `make_measdata.pl` käynnistetään tiedostosta, jossa on myös muokattava mittausdata. Unix-ympäristössä ohjelma käynnistetään esimerkiksi komennolla

```
perl make_measdata.pl
```

mikäli ollaan samassa hakemistossa kuin `make_measdata.pl`.

3.1.4 Muut ohjelmalle syötettävät tiedot

Input-tiedostojen ja mittausdatan lisäksi ohjelma tarvitsee tiedon siitä, missä kohdassa polttoainesauvaa lämpömittari on sijainnut mittaushetkellä. Toisin sanoen ohjelma tarvitsee tiedon siitä, mistä `_rest.z*`-päätteisestä output-tiedostosta ohjelma etsii tarvitsemansa datan. Tätä varten meta-kansioon sijoitetaan tiedosto nimeltä `z_files`, joka sisältää tiedot siitä, mikä `_rest.z*`-tiedosto avataan mihinkin input-tiedostoon liittyen. Jos ohjelmaan esimerkiksi syötetään tiedostot `nimi.inp` ja `joku.inp`, ja tiedetään että vastaavissa kokeissa lämpömittarit ovat sijainneet viidennessä ja kahdeksannessa noodissa, kirjoitetaan tiedostoon `z_files` seuraavanlaiset rivit:

```
nimi.inp    z5
joku.inp    z8
```

Näin ohjelma osaa avata oikean output-tiedoston. Tyhjien merkkien määrällä ei ole merkitystä. Jos tiedostosta `z_files` ei löydy input-tiedostoa vastaavaa output-tiedoston päätettä (esim. `z5`), ohjelma varoittaa tästä ja jatkaa ohjelman suoritusta. Tällöin ohjelma ei tee lainkaan kooreaktorissa tapahtuvan säteilytyksen vertailutulostiedostoja, koska se ei voi avata oikeaa output-tiedostoa.

3.1.5 Ohjelman ajaminen

Kun tarvittava hakemistorakenne on tehty ja hakemistot sisältävät kaikki tarvittavat tiedostot, ohjelma voidaan ajaa. Jos Unix-ympäristössä ollaan siinä hakemistossa missä ohjelmakin on, voidaan ohjelma käynnistää esimerkiksi käskyllä

```
perl space.pl
```

Ohjelman suoritus aika riippuu ohjelmalle syötettyjen input-tiedostojen määrästä. Jos input-tiedostojen perussäteilytysosia on esimerkiksi viisi kappaletta, ENIGMA ajetaan kaksikymmentä kertaa, mikäli kaikille input-tiedostoille löytyy vastaava restart-tiedosto. Tällöin ohjelman suoritus kestää normaalisti noin viisi minuuttia tiedostojen koosta riippuen.

Kun ohjelman suoritus on valmis, results-kansioon ilmestyy kutakin input-tiedostoa vastaavat tulostiedostot eri lämmönjohtavuusmalleista, mikäli polttoainesauvaa on säteilytetty kooreaktorissa. Tulostiedostojen nimen perusosan perässä on joko pääte `_white4.res` tai `_nfi.res` lämmönjohtavuusmallista riippuen. Siten esimerkiksi input-tiedostoa `nimi.inp` vastaavat tulostiedostot ovat `nimi_white4.res` ja `nimi_nfi.res`. Liitteessä 3 on esimerkki eräästä tulostiedostosta.

Näiden tulostiedostojen lisäksi ohjelma tulostaa results-kansioon yhden `expirr_Tcent`-nimisen tiedoston, jossa on kootusti ja tiivistetysti polttoaineen keskilinjan lämpötilaa koskeva vertailudata kaikista kooreaktorissa säteilytettyjen sauvojen tulostiedostoista, joista kyseinen data löytyy. Näistä luvuista on laskettu vielä keskiarvo, joka kertoo kuinka hyvin lämmönjohtavuusmalli pitää paikkansa polttoaineen keskilinjan lämpötilan osalta. Vastaavanlainen tiedosto tulostetaan myös vapautuneiden fissiokaasujen osalta. Tämän tiedoston nimi on `expirr_FGR`. Liitteessä 4 on esitetty esimerkki `expirr_Tcent`-tiedostosta, ja liitteessä 5 `expirr_FGR`-tiedostosta. Nämä tiedostot tulostetaan siis vain kooreaktorissa säteilytettyjen sauvojen osalta.

Perussäteilytystapausten osalta, eli niiden input-tiedostojen osalta joilla ei ole restart-osaa, tulostetaan `baseirr_white4-` ja `baseirr_nfi-` nimiset tiedostot. Näissä tiedostoissa verrataan mitattuja vapautuneita fissiokaasuja simuloituihin vastaaviin. Esimerkki tällaisista tiedostoista on liitteissä 6 ja 7.

3.2 Ohjelman rakenne ja toiminta

3.2.1 Pääohjelma

SPACE:n pääohjelma on esitetty kuvassa 2. Muuttuja `$file` saa arvokseen vuorotellen jokaisen input-tiedoston nimen, joten ensimmäinen for-looppi käy läpi jokaisen input-tiedoston. Jälkimmäinen for-looppi käydään läpi kahteen kertaan kunkin input-tiedoston osalta. Ensimmäisellä kerralla looppia käsittelee input-tiedoston WHITE4-lämmönjohtavuusmallin mukaisena ja toisella kierroksella NFI-mallin mukaisena.

```

@ps_files = &list_cases;
for $file (@ps_files) {
  for ($i = 1; $i <= 2; $i++) {
    $histogram = &histogram($file);
    $fuel_density = &count_fuel_density($file);
    if ($i == 1) { &make_white4($file);}
    else {&make_nfi($file, $fuel_density);}
    $rest_file = &find_restart_case($file);
    $z = &run_enigma($file, $rest_file);
    &find_measurement_data($file);
    if ($z && $rest_file) {
      &make_time_data_files($file, $z);
      &count_simulated_values($file, $z, $histogram);
      &experiment_irradiation_table($file, $z, $i);
    }
    if (! $rest_file) {
      &base_irradiation_table($file, $z);
    }
    chdir "work"; unlink glob "*"; chdir "..";
  }
}
&baseirr_last_rows;
&expirr_summary;

```

Kuva 2. SPACE:n pääohjelma.

3.2.2 Aliohjelmat

&list_cases

Ohjelma ottaa kansiota base_irradiation kaikki .inp-päätteiset tiedostonimet ja tallentaa ne listaan @ps_files.

&histogram(\$file)

Ohjelma saa muuttujakseen vuorollaan jokaisen input-tiedoston nimen, ja avaa kyseisen tiedoston. Mikäli tiedostosta löytyy teksti ”history type flag = histogram”, ohjelma palauttaa arvon tosi.

&count_fuel_density(\$file)

Ohjelma etsii kustakin input-tiedostosta polttoaineen huokoisuuden arvon (fuel porosity), ja laskee tämän arvon avulla polttoaineen tiheyden (fuel density) kaavalalla

$$fuel\ density = 1 - fuel\ porosity \quad (5)$$

ja palauttaa tämän arvon.

&make_white4(\$file)

Ohjelma muokkaa kustakin input-tiedostosta WHITE4-lämmönjohtavuusmallin sisältämän tiedoston. Se käy tiedoston läpi ja poistaa siitä rivin, jolla lukee "fuel conductivity flag". Ohjelma tulostaa tiedoston work-kansioon.

&make_nfi(\$file, \$fuel_density)

Ohjelma saa muuttujakseen vuorollaan kunkin tiedoston nimen ja polttoaineen tiheyden. Ohjelma tulostaa input-tiedostoon flags-tekstin alle " fuel conductivity flag = nfi" ja keywords-tekstin alle " fuel density\n\$fuel_density", missä \$fuel_density on polttoaineen tiheyden arvo. Mikäli "flags" tai "keywords"-tekstit puuttuvat input-tiedostosta, ohjelman suoritus keskeytyy ja ohjelma antaa virheilmoituksen. Muokattu input-tiedosto tulostetaan work-kansioon.

&find_restart_case(\$file)

Ohjelma hakee experiment-kansiosta kutakin input-tiedostoa vastaavan restart-tiedoston, ja tulostaa tämän tiedoston work-kansioon. Mikäli restart-tiedostoa ei löydy, ohjelma tulostaa varoituksen ja jatkaa suoritusta käsitellen tiedoston perussäteilytystiedostona. Ohjelma palauttaa arvonaan restart-tiedoston nimen.

&run_enigma(\$file, \$rest_file)

Ohjelma saa muuttujanaan käsiteltävän input-tiedoston nimen sekä tätä vastaavan restart-tiedoston nimen. Ohjelma etsii meta-kansion z_files-tiedostosta käsiteltävää input-tiedostoa vastaavan output-tiedoston z-alkuisen päätteän, ja palauttaa tämän päätteän. Ohjelma antaa ENIGMA:lle sekä input-tiedoston perussäteilytysosan että restart-osan ja ajaa ENIGMA:n molemmilla tiedostoilla, mikäli molemmat tiedostot löytyvät.

&find_measurement_data(\$file)

Ohjelma etsii measurement_data-kansiosta kutakin input-tiedostoa vastaavat mittaustulostiedostot. Ohjelma palauttaa arvon tosi löytyvien mittaustulostiedostojen osalta.

&make_time_data_files(\$file, \$z)

Ohjelma tulostaa simuloidun ja koemittauksen ajat omiin tiedostoihinsa work-kansioon. Ohjelma avaa ensin input tiedostoa \$file vastaavan perussäteilytysajon z-päätteisen tiedoston ja tallentaa tiedoston viimeisen ajanhetken muuttujaan \$t0. Tämän jälkeen ohjelma avaa saman input-tiedoston restart-ajon z-päätteisen output-tiedoston, vähentää kustakin ajanhetkestä ajan \$t0, ja tulostaa ajat work kansioon tiedostoon s_time. Koemittauksen ajat tallennetaan tiedostoon m_time.

&count_simulated_values(\$file, \$z, \$histogram)

Ohjelma avaa ensin kutakin input-tiedostoa vastaavan restart-ajon z-päätteisen output-tiedoston, ja tulostaa kunkin käsiteltävän suureen arvot work kansioon tiedostoon \$s_aputiedosto, missä \$s_aputiedosto:n arvo määräytyy sen mukaan

mitä suuretta ollaan käsittelemässä. Tämän jälkeen simuloitut ajat, mitatut ajat ja simuloitut suureet tallennetaan omiin listamuuttujiinsa.

Mikäli muuttuja \$histogram sisältää arvon nolla, eli tapausta ei käsitellä histogram-tapauksena, jokainen simuloitu suureen arvo linearisoidaan kutakin mitattua ajanhetkeä vastaavaksi. Esimerkiksi mittausajankohtaa vastaava simuloitu lämpötila saadaan siten kaavasta

$$T_x = \frac{(t_m - t_{s1})}{(t_{s2} - t_{s1})} (T_{s2} - T_{s1}) + T_{s1}, \quad (6)$$

jossa T_x on koemittauksen ajankohtaa vastaava simuloitu lämpötila, t_{s1} on simulaation ajanhetki n , t_{s2} on simulaation ajanhetki $n + 1$, t_m on koemittauksen ajanhetki lähellä arvoja t_{s1} ja t_{s2} , T_{s1} on simuloitua ajanhetkeä t_{s1} vastaava lämpötila ja T_{s2} simuloitua ajanhetkeä t_{s2} vastaava lämpötila.

Mikäli muuttujan \$histogram arvo on 1, eli tapaus käsitellään histogram-tapauksena, linearisointia ei tehdä muiden paitsi palaman osalta. Tällöin koemittauksen ajankohtaa vastaava simuloitu suure on yhtä suuri kuin lähintä suurempaa ajanhetkeä vastaava simuloitu suureen arvo.

Ohjelma tulostaa mitattua ajanhetkeä vastaavat simuloitut suureet work-kansioon \$I_aputiedosto-tiedostoon. \$I_aputiedosto:n arvo riippuu käsiteltävästä suureesta.

&experiment_irradiation_table(\$file, \$z, \$i)

Ohjelma tulostaa kutakin restart-osuuden sisältämää input-tiedostoa kohden WHITE4- ja NFI-lämmönjohtavuusmalleilla saadut vertailutaulukot. Taulukkoon tulostetaan mitattu aika, simuloitu palama, simuloitu ja mitattu lineaariteho, simuloitu ja mitattu polttoainesauvan keskilinjan lämpötila, simuloitun lämpötilan suhteellinen virhe, simuloitut ja mitatut vapautuneet fissiokaasut, sekä simuloitujen vapautuneiden fissiokaasujen suhteellinen virhe. Suhteellisista virheistä lasketaan vielä keskiarvot. Mikäli jotakin dataa ei ole saatavissa, kyseisen ajanhetken kohdalle tulostetaan teksti "nan". Taulukko tallennetaan results-kansioon .res-päätteisenä tiedostona. Esimerkki tällaisesta tiedostosta on liitteessä 3.

&base_irradiation_table(\$file, \$z)

Ohjelma tekee taulukon, jossa verrataan perussäteilytysajon simulaatiodataa mitattuun dataan. Ohjelma käy läpi vain ne tapaukset, joilla ei ole restart-osaa. Kustakin tällaisesta tapauksesta ohjelma tulostaa simuloitun ja mitatun palaman, simuloitut ja mitatut vapautuneet fissiokaasut, sekä simuloitujen vapautuneiden fissiokaasujen suhteellinen virhe. Tällainen taulukko tulostetaan sekä WHITE4-että NFI-lämmönjohtavuusmallien osalta. Ohjelman tulostamat tiedostot ovat nimeltään baseirr_white4 ja baseirr_nfi. Mikäli kaikilla input-tiedostoilla on restart-osa, näitä tiedostoja ei tulosteta. Ohjelma &baseirr_last_rows tulostaa edellä mainittujen taulukoiden kaksi viimeistä riviä.

&baseirr_last_rows

Ohjelma avaa baseirr_white4- ja baseirr_nfi-tiedostot ja etsii näistä tiedostoista sarakkeen ”FGR_err”. Ohjelma laskee tässä sarakkeessa olevien lukujen keskiarvon, ja tulostaa sen tiedoston viimeiselle riville. Tämä luku kertoo, kuinka hyvin lämmönjohtavuusmalli pitää paikkansa vapautuneiden fysiokaasujen osalta perussäteilytystapauksissa. Esimerkki baseirr-tiedostoista on liitteissä 6 ja 7.

&expirr_summary

Ohjelma etsii jokaisesta .res-päätteisestä tulostiedostosta rivin ”Mean value of Tc_err” ja tulostaa tällä rivillä olevan arvon tiedostoon expirr_Tcent kansioon results. Mikäli kyseisellä rivillä on jossakin .res-päätteisessä tulostiedostossa lukuarvon sijasta teksti ”NaN”, tämä tiedosto jätetään huomiotta. Tämän jälkeen löydettyistä arvoista lasketaan keskiarvo.

Vastaavalla tavalla kuin edellä, ohjelma etsii jokaisesta .res-päätteisestä tiedostosta rivin ”Mean value of FGR_err” ja tulostaa tällä rivillä olevan arvon tiedostoon expirr_FGR. Tiedosto expirr_FGR on samanlainen kuin expirr_Tcent, mutta polttoaineen keskilinjan lämpötilan sijasta käsiteltävänä suurena ovat vapautuneet fysiokaasut.

Tiedostot expirr_Tcent ja expirr_FGR jätetään luomatta, mikäli lämpötila- tai fysiokaasudataa ei ole saatavilla. Liitteissä 4 ja 5 on esimerkki ohjelman tulostamasta tiedostosta.

3.3 Vertailutulosten analysointi MATLAB -ohjelmilla

SPACE-ohjelman tulosten analysointiin voidaan käyttää tätä varten kehitettyjä MATLAB-ohjelmia, jotka esittävät graafisesti WHITE4- ja NFI-lämmönjohtavuusmallien vaikutukset vertailtaviin suureisiin. Nämä MATLAB-ohjelmat ovat nimeltään t_temptime.m, t_nfiwhite4.m, t_simmeas.m, t_all.m, f_fgrbu.m, f_nfiwhite4.m, f_allnfiwhite4.m ja f_allsimmeas.m.

MATLAB-koodien nimen alkukirjain viittaa siihen, mitä suuretta funktiolla voidaan tarkastella. Jos funktion nimen alussa on kirjain t, funktio piirtää kuvaajan, joka havainnollistaa lämmönjohtavuusmallin vaikutusta polttoaineen keskilinjan lämpötilaan. Jos funktion nimen alussa taas on kirjain f, funktio piirtää kuvaajan, joka havainnollistaa lämmönjohtavuusmallin vaikutusta vapautuneisiin fysiokaasuihin.

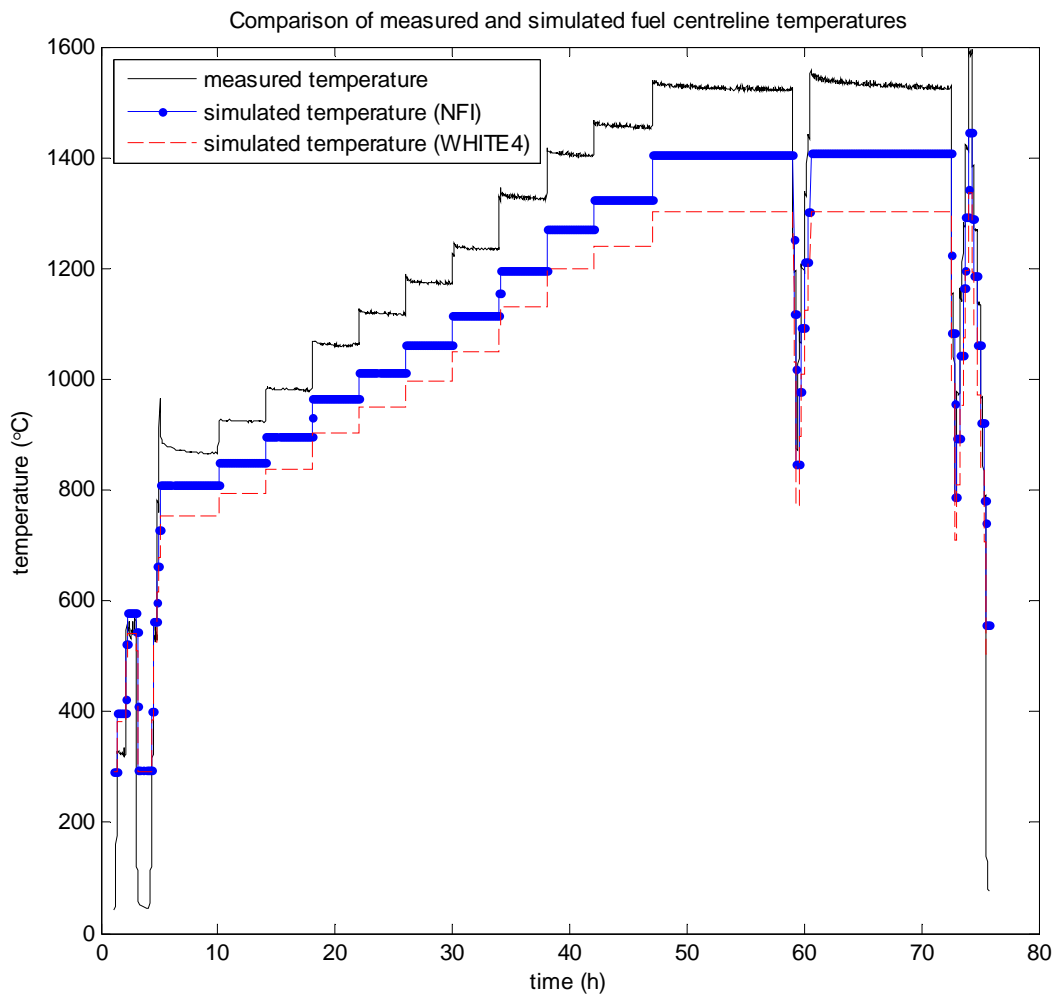
MATLAB-ohjelmien käyttämiseksi tiedostot baseirr_white4 ja baseirr_nfi, sekä kaikki .res-päätteiset tiedostot on siirrettävä MATLAB:in työhakemistoon.

3.3.1 t_temptime.m

Ohjelma piirtää ajan funktiona polttoaineen keskilinjasta mitatun lämpötilan sekä WHITE4- ja NFI-lämmönjohtavuusmalleilla simuloidut polttoaineen keskilinjan lämpötilat. Ohjelma käynnistetään MATLABissa komennolla

```
t_temptime('nimi')
```

missä 'nimi' on analysoitavien tulostiedostojen nimen perusosa. Tässä tapauksessa ohjelma t_temptime.m käsittelee tiedostot nimi_white4.res ja nimi_nfi.res, mikäli tämän nimiset tiedostot olisivat MATLAB:in työhakemistossa. Esimerkki ohjelman tulostamasta kuvaajasta on kuvassa 3.



Kuva 3. Esimerkki ohjelman t_temptime.m tulostamasta kuvasta.

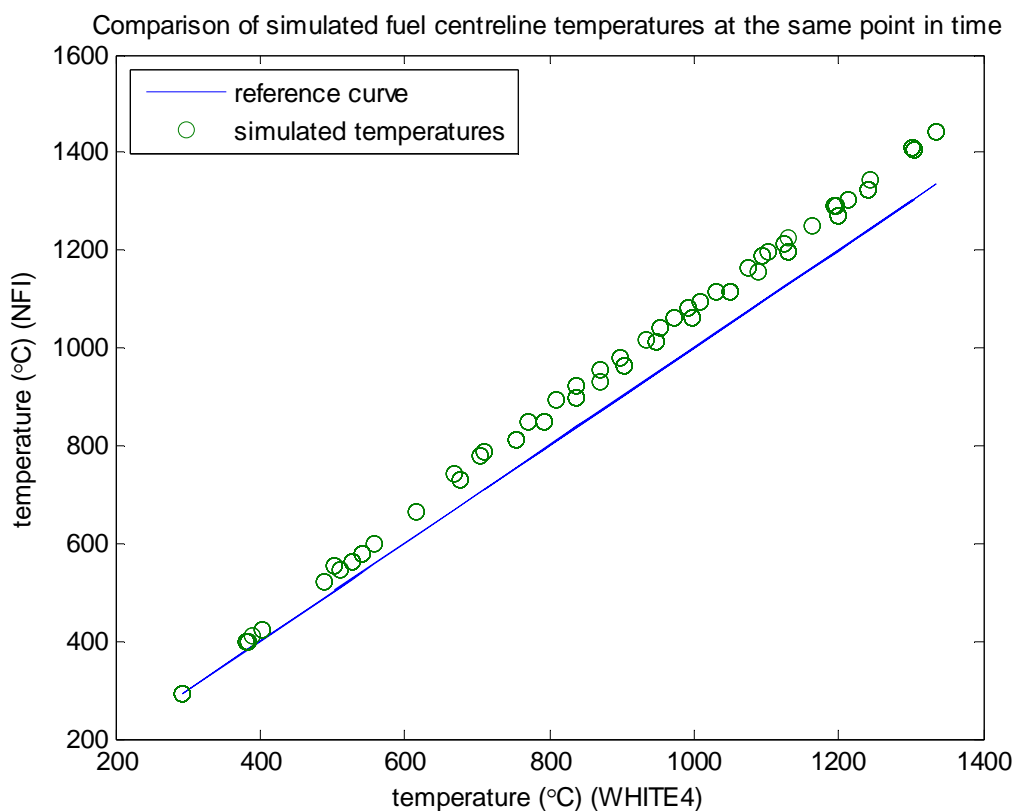
Kuvasta 3 nähdään, että tämän tapauksen osalta NFI-lämmönjohtavuusmalli antaa paremman arvion polttoaineen keskilinjan lämpötilalle kuin WHITE4-lämmönjohtavuusmalli. Tosin molemmat mallit antavat polttoaineen keskilinjan lämpötilalle liian alhaisen arvon. Ohjelman t_temptime.m koodi on liitteessä 8.

3.3.2 t_nfiwhite4.m

Ohjelma piirtää kuvan, joka vertaa NFI-lämmönjohtavuusmallin antamaa polttoaineen keskilinjan lämpötilaa WHITE4-mallin antamaan lämpötilaan samalla ajanhetkellä. Ohjelma käynnistetään MATLABissa kirjoittamalla

```
t_nfiwhite4('nimi')
```

missä 'nimi' on analysoitavien tulostiedostojen nimen perusosa. Tässä tapauksessa ohjelma t_nfiwhite4.m käsittelee tiedostot nimi_white4.res ja nimi_nfi.res, mikäli tämän nimiset tiedostot olisivat MATLABin työhakemistossa. Esimerkki ohjelman tulostamasta kuvaajasta on kuvassa 4.



Kuva 4. Esimerkki ohjelman t_nfiwhite4.m tulostamasta kuvasta.

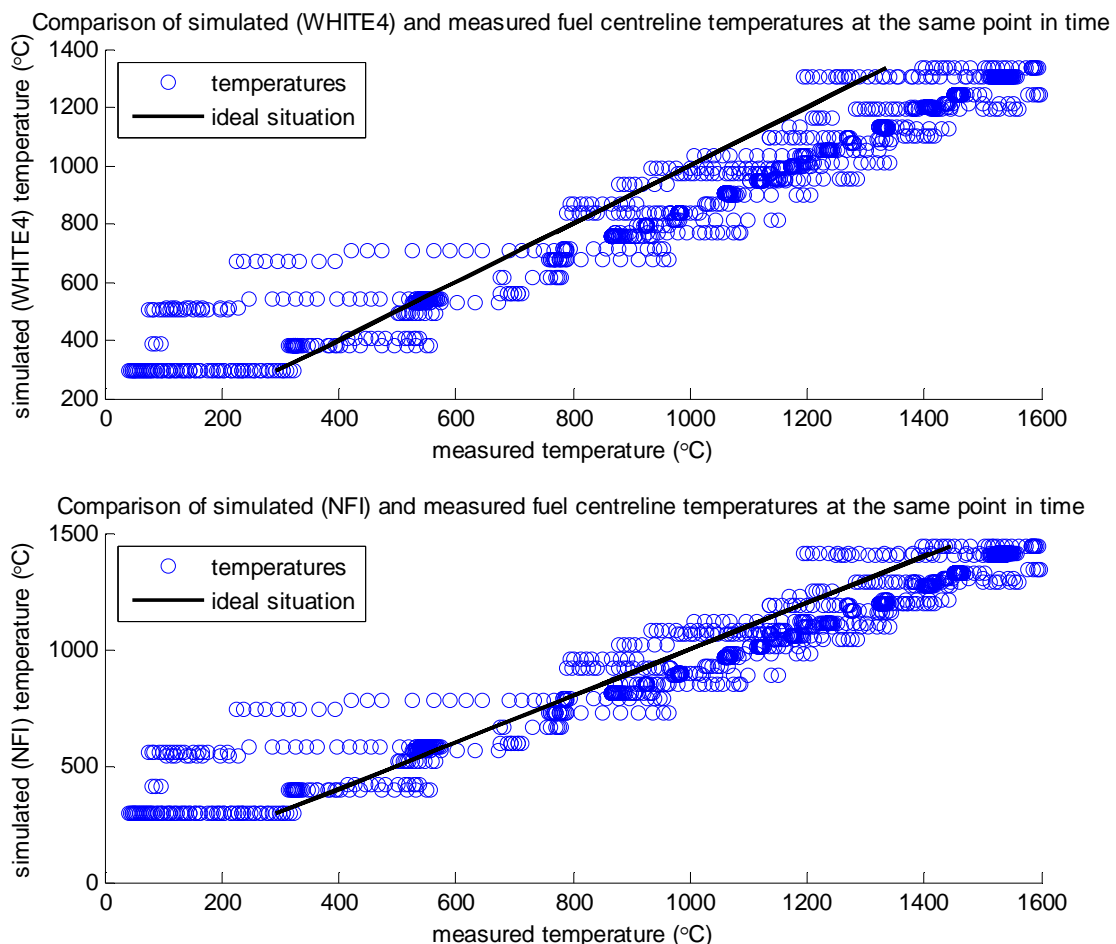
Kuvasta 4 voidaan lukea, että kyseisessä tapauksessa NFI-lämmönjohtavuusmallilla saadut polttoaineen keskilinjan lämpötilan arvot ovat jokaisella ajanhetkellä suurempia kuin WHITE4-mallin antamat arvot. Tämän havaitsemista helpottaa kuvaan piirretty suora sininen viiva, jolla lämpötilat olisivat yhtä suuret. Ohjelman t_nfiwhite4.m koodi on liitteessä 9.

3.3.3 t_simmeas.m

Ohjelma t_simmeas.m piirtää kaksi kuvaa. Ensimmäinen kuva esittää WHITE4-lämmönjohtavuusmallilla simuloidun polttoaineen keskilinjan lämpötilan koesauvasta mitatun lämpötilan funktiona. Toinen kuva esittää vastaavasti NFI-lämmönjohtavuusmallilla simuloidun polttoaineen keskilinjan lämpötilan koesauvasta mitatun lämpötilan funktiona. Ohjelma käynnistetään MATLABissa käskyllä

```
t_simmeas('nimi')
```

missä 'nimi' on analysoitavien tulostiedostojen nimen perusosa. Tässä tapauksessa ohjelma t_simmeas.m käsittelee tiedostot nimi_white4.res ja nimi_nfi.res, mikäli tämän nimiset tiedostot olisivat MATLABin työhakemistossa. Esimerkki ohjelman tulostamasta kuvaajasta on kuvassa 5.



Kuva 5. Esimerkki ohjelman t_simmeas.m piirtämästä kuvasta.

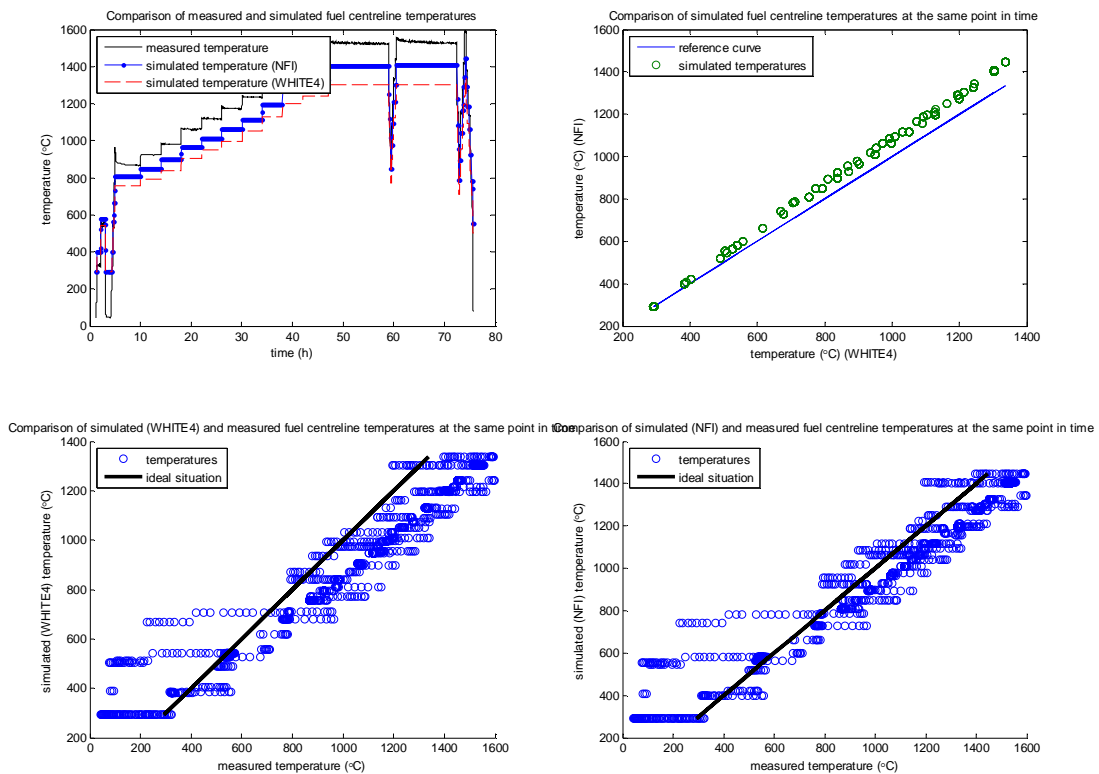
Kuvasta 5 voidaan lukea, että kyseisessä tapauksessa NFI-lämmönjohtavuusmalli antaa tarkemman tuloksen polttoaineen keskilinjan lämpötilalle. Tämä nähdään siitä, että NFI-mallin mittauspisteet ovat keskimäärin lähempänä mustaa viivaa, joka kuvaa ideaalista tilannetta. Ideaalisessa tilanteessa simuloidut lämpötilat ovat yhtä suuret kuin mitatut lämpötilat. Ohjelman t_simmeas.m koodi on liitteessä 10.

3.3.4 t_all.m

Ohjelma t_all.m tulostaa kollaasin ohjelmien t_temptime.m, t_nfiwhite4.m ja t_simmeas.m tulostamista kuvista. Ohjelma käynnistetään MATLABissa komennolla

```
t_all('nimi')
```

missä 'nimi' on analysoitavien tulostiedostojen nimen perusosa. Tässä tapauksessa ohjelma t_all.m käsittelee tiedostot nimi_white4.res ja nimi_nfi.res, mikäli tämän nimiset tiedostot olisivat MATLAB:in työhakemistossa. Esimerkki ohjelman tulostamasta kuvaajasta on kuvassa 6. Ohjelman koodi on liitteessä 11.



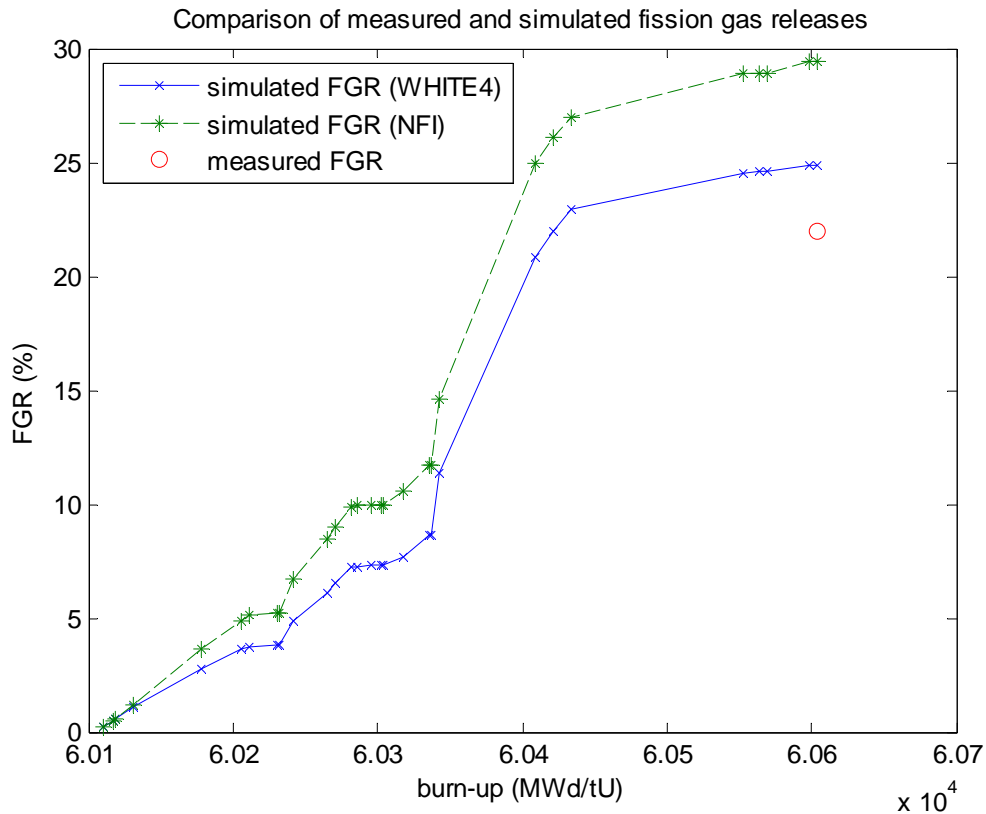
Kuva 6. Esimerkki ohjelman t_all.m tulostamasta kuvasta.

3.3.5 f_fgrbu.m

Ohjelma piirtää kuvaajan, jossa on molemmilla lämmönjohtavuusmalleilla saadut arvot vapautuneille fissiokaasuille palaman funktiona. Tähän kuvaajaan on piirretty myös mitattu arvo vapautuneille fissiokaasuille. Kuvaajassa tarkastellaan kerrallaan yhden polttoainesauvan tuloksia. Ohjelma käynnistetään MATLAB:issa käskyllä

```
f_fgrbu('nimi')
```

missä 'nimi' on analysoitavien tulostiedostojen nimen perusosa. Tässä tapauksessa ohjelma f_fgrbu.m käsittelee tiedostot nimi_white4.res ja nimi_nfi.res, mikäli tämän nimiset tiedostot olisivat MATLABin työhakemistossa. Esimerkki ohjelman tulostamasta kuvaajasta on kuvassa 7.



Kuva 7. Esimerkki ohjelman f_fgrbu.m tulostamasta kuvasta.

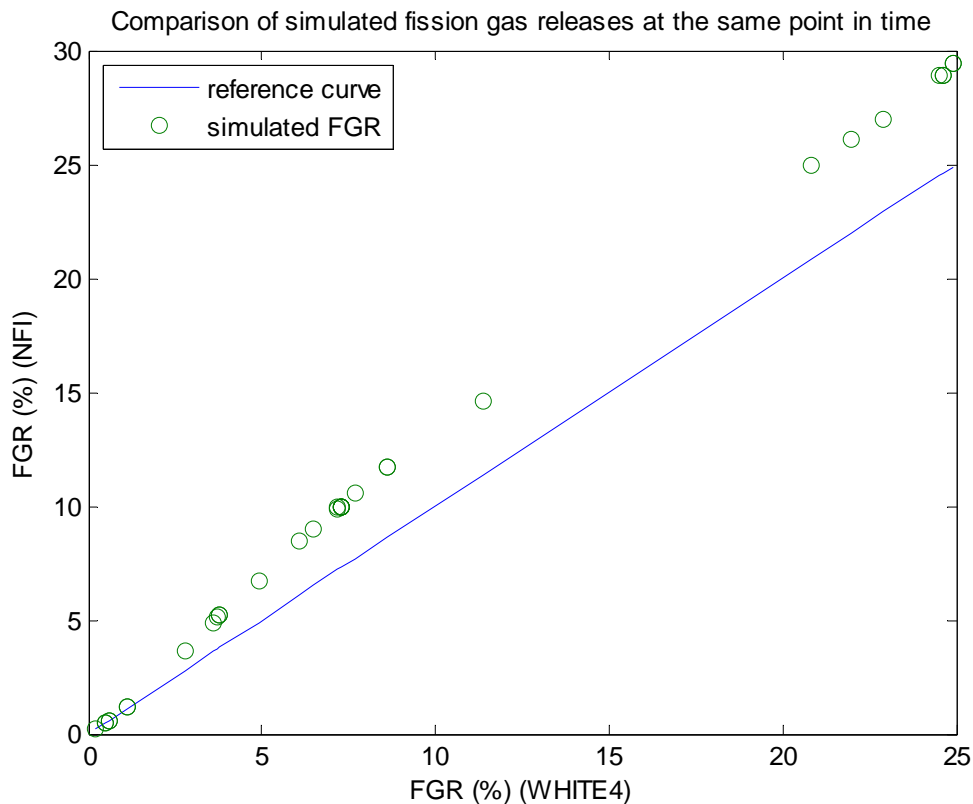
Kuva 7 on osittain kuvitteellinen, mutta jos data olisi oikeaa, kuvasta nähtäisiin, että tämän tapauksen osalta WHITE4-lämmönjohtavuusmalli antaa parempia tuloksia vapautuneille fissiokaasuille kuin NFI-lämmönjohtavuusmalli. Tämä johtuu siitä, että WHITE4-lämmönjohtavuusmallin viimeinen simuloitu arvo on lähempänä mitattua arvoa kuin NFI-lämmönjohtavuusmallin. Ohjelman f_fgrbu.m koodi on liitteessä 12.

3.3.6 f_nfiwhite4.m

Ohjelma piirtää kuvaajan, jossa verrataan WHITE4-lämmönjohtavuusmallilla simuloituja vapautuneiden fissiokaasujen arvoja NFI-mallilla simuloituihin arvoihin kullakin ajanhetkellä. Kuvaajaan on piirretty myös referenssikäyrä, jolla simuloidut arvot olisivat yhtä suuret. Kuvaajassa tarkastellaan kerrallaan yhden polttoainesauvan tuloksia. Ohjelma käynnistetään MATLAB:issa käskyllä

```
f_nfiwhite4('nimi')
```

missä 'nimi' on analysoitavien tulostiedostojen nimen perusosa. Tässä tapauksessa ohjelma f_nfiwhite4.m käsittelee tiedostot nimi_white4.res ja nimi_nfi.res, mikäli tämän nimiset tiedostot olisivat MATLABin työhakemistossa. Esimerkki ohjelman tulostamasta kuvaajasta on kuvassa 8.



Kuva 8. Esimerkki ohjelman f_nfiwhite4.m tulostamasta kuvasta.

Kuvasta 8 voidaan lukea, että kyseisen polttoainesauvan tapauksessa NFI-lämmönjohtavuusmallilla saadut vapautuneiden fissiokaasujen arvot ovat jokaisella ajanhetkellä suurempia kuin WHITE4-mallin antamat arvot. Tämän havaitsemista helpottaa kuvaan piirretty suora sininen viiva, jolla arvot olisivat yhtä suuret. Ohjelman f_nfiwhite4.m koodi on liitteessä 13.

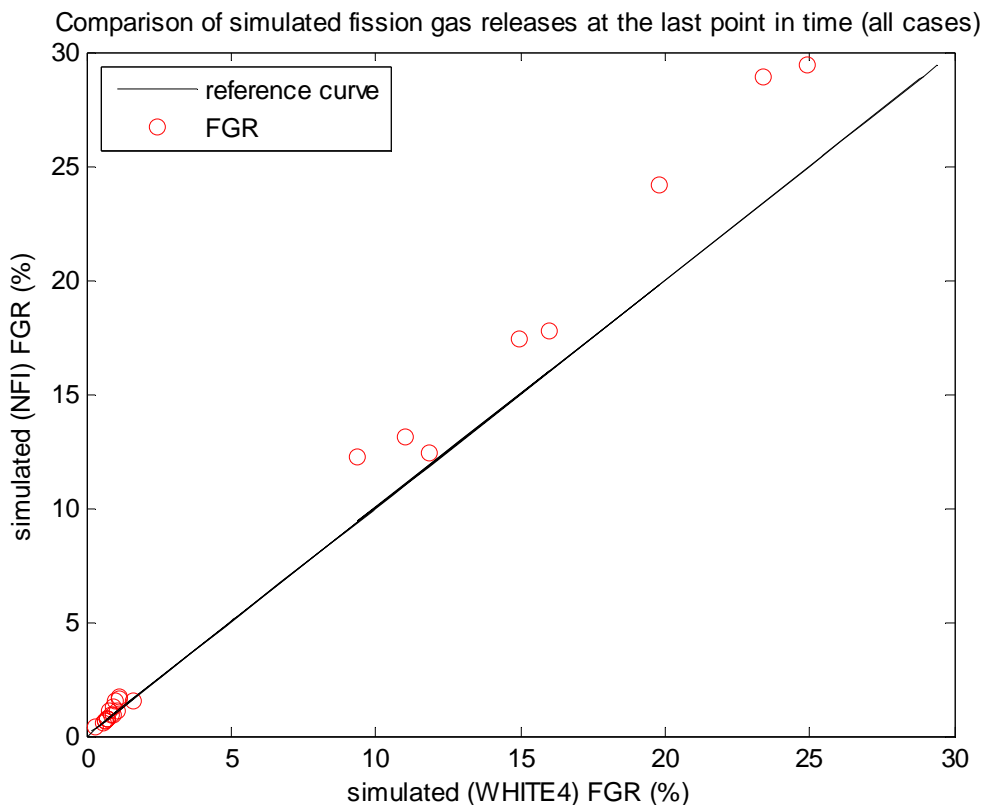
3.3.7 f_allnfiwhite4.m

Ohjelma piirtää kuvaajan, jossa verrataan molempien lämmönjohtavuusmallien antamia vapautuneiden fissiokaasujen määriä kunkin ajon viimeisellä ajanhetkellä. Toisin kuin ohjelma f_nfiwhite4, ohjelma f_allnfiwhite4 näyttää samassa kuvaajassa useasta polttoainesauvasta saadut vertailupisteet.

Ohjelma etsii simuloidun fissiokaasudatan tiedostoista baseirr_white4 ja baseirr_nfi, sekä kaikista .res-päätteisistä tiedostoista, jotka on siirrettävä MATLAB:in työhakemistoon ennen ohjelman käynnistämistä. MATLAB:issa ohjelma käynnistetään komennolla

```
f_allnfiwhite4.
```

Esimerkki ohjelman tulostamasta kuvaajasta on kuvassa 9.



Kuva 9. Esimerkki ohjelman *f_allnfiwhite4.m* tulostamasta kuvaajasta.

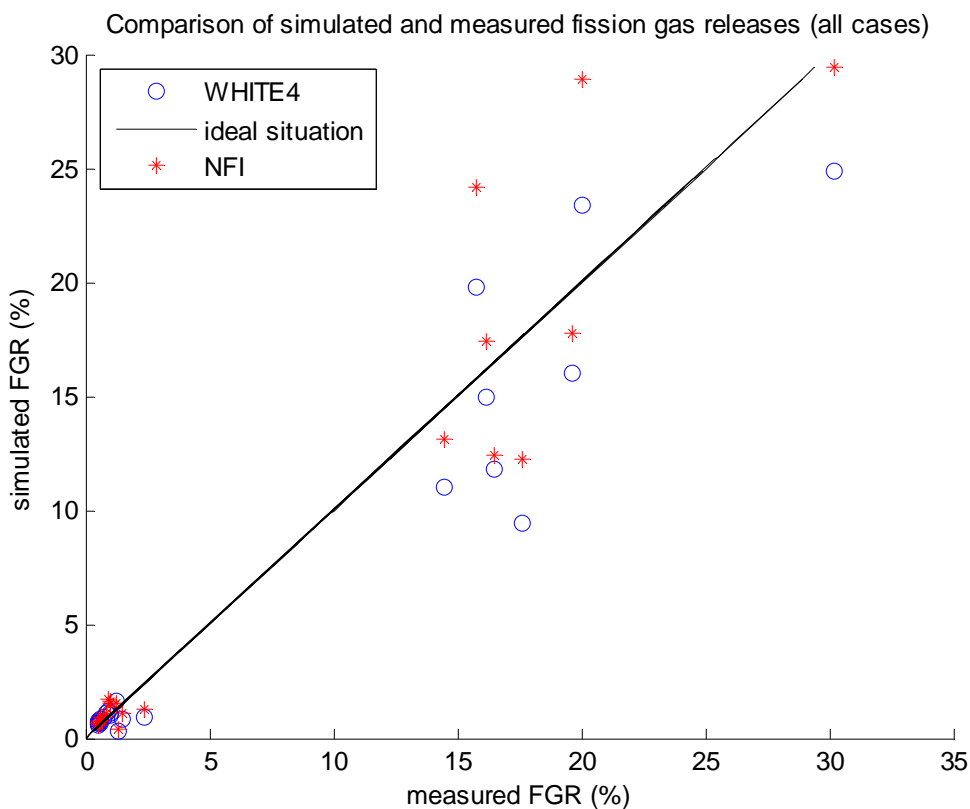
Kuvasta 9 nähdään, että NFI-lämmönjohtavuusmallilla saadut vapautuneiden fissiokaasujen arvot ovat miltei jokaisen tarkastellun polttoainesauvan osalta suurempia kuin WHITE4-mallilla saadut arvot. Tämän havaitsemista helpottaa kuvaan piirretty suora musta viiva, jolla arvot olisivat yhtä suuret. Ohjelman *f_allnfiwhite4.m* koodi on liitteessä 14.

3.3.8 f_allsimmeas.m

Ohjelma piirtää kuvaajan, jossa verrataan samanaikaisesti usean polttoainesauvan osalta mitattuja ja simuloituja vapautuneita fissiokaasuja. Ohjelma etsii simuloitun fissiokaasudatan tiedostoista baseirr_white4 ja baseirr_nfi, sekä kaikista .res-päätteisistä tiedostoista, jotka on siirrettävä MATLAB:in työhakemistoon ennen ohjelman käynnistämistä. MATLAB:issa ohjelma käynnistetään komennolla

```
f_allsimmeas.
```

Esimerkki ohjelman tulostamasta kuvaajasta on kuvassa 10.



Kuva 10. Esimerkki ohjelman `f_allsimmeas.m` tulostamasta kuvaajasta.

Kuvaa 10 tarkasti tutkimalla voidaan havaita, että kyseisen otoksen osalta WHITE4-lämmönjohtavuusmalli antaa hieman parempia arvoja vapautuneiden fissiokaasujen määrälle kuin NFI-lämmönjohtavuusmalli. Mitä lähempänä mittauspiste on ideal situation-viivaa, sitä paremmin malli pitää paikkansa. Mittauspisteparit, jotka saavat saman arvon measured FGR-akselilla, ovat saman polttoainesauvan eri lämmönjohtavuusmalleilla saatuja mittauspisteitä. Ohjelman `f_allsimmeas.m` koodi on liitteessä 15.

4 Tulokset

SPACE-ohjelmalla on mahdollista selvittää, kumpi ENIGMA:n vertailtavista lämmönjohtavuusmalleista antaa parempia tuloksia polttoaineen keskilinjan lämpötiloille ja vapautuneiden fysiokaasujen määrälle. Tämän vertailun tekemiseksi on kuitenkin oltava riittävä määrä mittausdataa eri polttoainesauvoista.

Toistaiseksi polttoaineen keskilinjan lämpötilaa on tutkittu vain kahden polttoainesauvan osalta. Lämmönjohtavuusmallien vertailu näiden sauvojen osalta on esitetty liitteessä 4. Liitteen 4 taulukosta voidaan lukea, että NFI-lämmönjohtavuusmalli antaa polttoainesauvalle keskimäärin lähempänä mitattua arvoa olevan keskilinjan lämpötilan kuin WHITE4-malli. Tästä ei voida kuitenkaan tehdä vielä mitään johtopäätöksiä lämmönjohtavuusmallien paremmuudesta, sillä otos on liian pieni. Kun polttoaineen keskilinjan lämpötilan mittausdataa saadaan lisää, lämmönjohtavuusmallien vertailu SPACE-ohjelmalla onnistuu.

Fysiokaasujen vapautumista tutkittiin 22 polttoainesauvan osalta. Liitteessä 6 on esitetty WHITE4-lämmönjohtavuusmallin antamat tulokset vapautuneiden fysiokaasujen määrälle perussäteilytysajojen osalta. Vastaava taulukko NFI-lämmönjohtavuusmallille on liitteessä 7. Taulukoista 6 ja 7 nähdään, että vapautuneiden fysiokaasujen suhteellisen virheen keskiarvo on pienempi WHITE4-lämmönjohtavuusmallilla kuin NFI-mallilla. WHITE4-mallin suhteellisen virheen keskiarvo kyseisen otoksen osalta on 0,3008, kun se on NFI-mallilla laskettuna 0,3532. Tätä vertailua on havainnollistettu myös kuvassa 10.

Tämän otoksen osalta WHITE4-lämmönjohtavuusmalli toimii paremmin vapautuneita fysiokaasuja tarkasteltaessa kuin NFI-malli. Tämä tulos oli odotettavissa, sillä fysiokaasujen vapautuminen on ENIGMA:ssa kalibroitu WHITE4-mallilla (Knuutila ja Pietarinen 2006). Koska NFI-malli antaa korkeampia lämpötiloja polttoaineen keskilinjalle, myös fysiokaasuja syntyy tällöin enemmän. Eri mallien suhteellisen virheen keskiarvot ovat kuitenkin melko lähellä toisiaan, joten näin pienellä otoksella ei vielä voida luotettavasti sanoa, kumpi lämmönjohtavuusmalli toimii paremmin vapautuneiden fysiokaasujen osalta. Luotettavien tulosten saamiseksi olisi tulevaisuudessa käsiteltävä lisää dataa myös vapautuneista fysiokaasuista.

5 Yhteenveto ja johtopäätökset

VTT:llä on kesän 2011 aikana kehitetty SPACE-niminen ohjelma, jolla voidaan verrata ENIGMA-polttoainekoodin kahta eri lämmönjohtavuusmallia. Vertailtavat mallit ovat ENIGMA:ssa oletusasetuksena oleva WHITE4-malli, sekä myöhemmin ENIGMA:an lisätty NFI-malli. NFI-mallin tarkoituksena on muun muassa ottaa huomioon gadoliniumin osuus polttoaineessa. Toistaiseksi SPACE-ohjelmalla voidaan verrata lämmönjohtavuusmallien paremmuutta polttoaineen keskilinjan lämpötilojen kannalta, sekä vapautuneiden fissiokaasujen määrän kannalta.

SPACE-ohjelma saa syötteenään samanlaisia input-tiedostoja kuin ENIGMA. Näistä input-tiedostoista ohjelma tekee molemmat lämmönjohtavuusmallit sisältävät input-tiedostot ja ajaa ne ENIGMA:lla. Tämän jälkeen ohjelma käsittelee ENIGMA:n tulostamia output-tiedostoja, etsii niistä kiinnostavan datan, ja tulostaa tämän datan tulostiedostoihin, jotka sisältävät myös koemittauksista saadun datan. Näin saadut simulaatiotulokset ovat helposti vertailtavissa koemittausten tulosten kanssa.

Vertailutulosten analysoimiseksi kehitettiin kesän 2011 aikana myös kahdeksan MATLAB-ohjelmaa, joilla voidaan havainnollistaa lämmönjohtavuusmallien vaikutusta polttoaineen keskilinjan lämpötiloihin ja vapautuneiden fissiokaasujen määriin. Kaikki MATLAB-ohjelmat piirtävät lämmönjohtavuusmallien vertailutuloksista kuvaajan. Tulevaisuudessa ohjelmien `f_allnfiwhite4.m` ja `f_allsimmeas.m` piirtämiä kuvaajia voisi kehittää siten, että alhaiset fissiokaasujen vapautumismäärät tulisivat kuvaajassa paremmin esille. Tämän voisi toteuttaa esimerkiksi muokkaamalla akseleita alkupäästä epäsymmetrisiksi.

Luotettavan vertailun tekemiseksi on oltava riittävä määrä mittausdataa eri polttoainesauvoista, jotta saadaan tarpeeksi suuri otos lämmönjohtavuusmallien paremmuuden vertailuun. Koska tämän tutkimuksen osalta mittausdataa oli saatavilla rajallinen määrä, lämmönjohtavuusmallien paremmuudesta ei vielä voi antaa luotettavaa vastausta. Kun tulevaisuudessa mittausdataa on enemmän saatavilla, lämmönjohtavuusmallien luotettavampi vertailu SPACE-ohjelmalla onnistuu.

Tulevaisuudessa ohjelmaa voitaneen laajentaa siten, että sillä voidaan vertailla muitakin lämmönjohtavuusmalleja kuin WHITE4- ja NFI-malleja. Ohjelmaa voidaan myös kehittää siten, että lämmönjohtavuusmallien vaikutusten tarkastelua kohdistetaan muihinkin suureisiin kuin polttoaineen keskilinjan lämpötiloihin ja vapautuneiden fissiokaasujen määrään.

Lähdeviitteet

Berna, G. et al. 1997. FRAPCON-3: A Computer Code for the Calculation of Steady-State, Thermal-Mechanical Behavior of Oxide Fuel Rods for High Burnup. PNNL, Richland, Washington. NUREG/CR-6534, Volume 2, PNNL-11513.

Kilgour, W. 1992. The ENIGMA Fuel Performance Code, Users Guide, Version 5.8d. TD/NS/REP/0034, Berkeley Nuclear Laboratories. 36s.

Klecka, L. 2009. An Enhanced Radial Power Profile Model for the ENIGMA Code. Tutkimusraportti VTT-R-05452-09. Espoo, Teknologian tutkimuskeskus VTT. 24s.

Knuutila, A. ja Pietarinen, K. 2006. ReCalibration of the ENIGMA Fission Gas Release Model: Part 2. Tutkimusraportti VTT-R-11655-06. Espoo, Teknologian tutkimuskeskus VTT. 21s.

Patterson, C. 2010. IZNA10 Special Topic Report: Processes going on in Nonfailed Rod during Normal Operation. Volume 1. Ruotsi, A.N.T International.

Tulkki, V. 2010. ENIGMA Fuel Performance Code – 2010 Status Review. Tutkimusraportti VTT-R-09938-10. Espoo, Teknologian tutkimuskeskus VTT. 78s.