

Wissenschaftlicher Ergebnisbericht / Scientific Report 2003

Schwerpunkt / main research area
FE-Vorhaben / RD project
Institutsbeitrag / institute's contribution

Energie / Energy
E04 Nukleare Sicherheitsforschung
17204
Institut für Sicherheitsforschung und Reaktortechnik /
Inst. for Safety Research and Reactor Technology (ISR)
Prof. K. Kugeler k.kugeler@fz-juelich.de
Energy
Nuclear Safety Research
Safety Research for Nuclear Reactors
www.fz-juelich.de/scientific-report

Verantwortlich / in charge
HGF-Forschungsbereich / Research Field
HGF-Programm / Programme
HGF-Thema / Topic
Internet

Detaillergebnisse / Details

Inhaltsverzeichnis / Table of Contents

1	Entwicklungsarbeiten zu optimierten H ₂ -Rekombinatoren.....	2
2	HTR-Fuel-Data-Base	7
3	Erfahrungen mit dem Monte Carlo Programm MCNPX auf dem IBM Regatta-System „Jump“ am Beispiel von Rechnungen zum MUSE-4 Experiment	9

1 Entwicklungsarbeiten zu optimierten H₂-Rekombinatoren

E.-A. Reinecke, I.M. Tragsdorf, J. Böhm, P. Drinovac

1.1. Problemstellung

Zur Beherrschung unfallbedingter Wasserstofffreisetzungen werden Leichtwasserreaktoren in Deutschland sowie in zahlreichen europäischen Ländern mit katalytischen Rekombinatoren nachgerüstet. Diese Vorrichtungen rekombinieren Wasserstoff (H₂) mit Luftsauerstoff an katalytisch aktiven Flächen zu Wasserdampf unter Freisetzung von Wärme. Obwohl experimentelle und theoretische Untersuchungen die grundsätzliche Wirksamkeit dieser Sicherheitsmaßnahme bestätigt haben, bestehen weiterhin offene Fragen bezüglich der Rekombinationsleistung bei massiver H₂-Freisetzung sowie bezüglich der Betriebssicherheit. So ist der Einsatz katalytischer Rekombinatoren derzeit mit dem Risiko einer unbeabsichtigten Zündung des Gasgemischs nach Überhitzen der Katalysatorelemente infolge der exothermen Reaktion verbunden. Im Verlauf experimenteller Untersuchungen bei verschiedenen Institutionen (z.B. Battelle, CEA) wurden Gasentzündungen beobachtet. Zudem kann sich das Starten der Reaktion verzögern, so dass die Wirksamkeit der Gegenmaßnahme im frühen Stadium des Störfallszenarios in Frage gestellt ist.

1.2. Experimentelle Untersuchungen zu derzeitigen Rekombinatoren

Ein wichtiges Verbesserungspotential heutiger Rekombinatoren stellt die unzureichende Abfuhr der Reaktionswärme von den Katalysatorflächen dar, die zur Überhitzung der Substrate und nachfolgend zur Zündung des Gasgemischs führen kann. Der Prüfstand REKO-3 im Wasserstofflabor des ISR ermöglicht Experimente am Ausschnitt eines Plattenrekombinators. In diesen Experimenten wird erstmalig die Temperaturentwicklung auf der Katalysatoroberfläche detailliert gemessen und untersucht. Dabei ist auch eine genauere Untersuchung der Reaktionskinetik möglich.

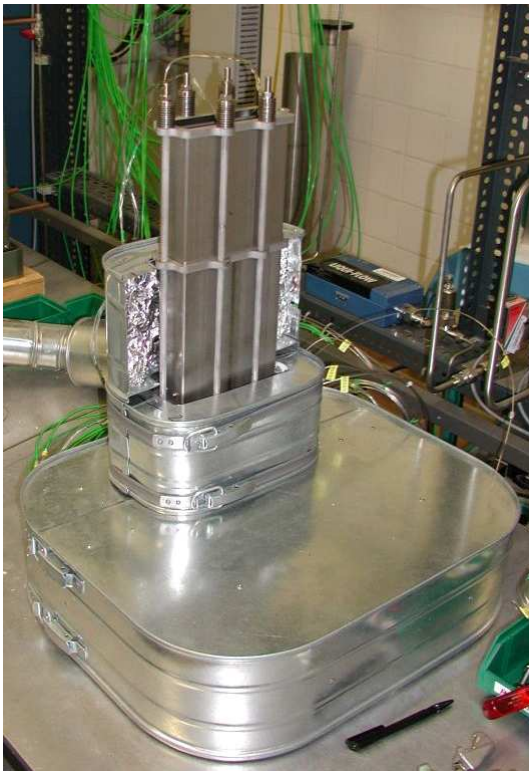


Abb. 1.1: Prüfstand REKO-3 mit zur Hälfte montierter Isolierung

In einem typischen Rekombinatordesign sind katalytisch beschichtete Edelstahlbleche parallel zueinander in einem vertikalen Strömungsschacht angeordnet. Folglich ist die mittels Wärmestrahlung von den Blechen abführbare Wärmemenge nur sehr gering. In neuesten Experimenten wurde die Anordnung vollbeschichteter Katalysatorbleche mit zusätzlichen unbeschichteten Blechen erweitert. Damit sollte untersucht werden, ob sich der Anteil der Wärmestrahlung an der Wärmeabgabe eines Rekombinators vergrößern lässt, wenn Strukturen in den Rekombinator eingebracht werden, die Strahlungswärme aufnehmen und dann über Konvektion an das Gas abgeben können.

In den Experimenten wurden sieben 1,5 mm dicke quadratische Edelstahlbleche mit einer Kantenlänge von 143 mm verwendet. Vier der Bleche sind beidseitig mit Aluminiumoxid (Al₂O₃) als Washcoat und Platin als Katalysator mit einer Belagungsdichte von 5 g/m² beschichtet. Die übrigen Bleche bleiben unbeschichtet.

Jeweils eines der beschichteten und der unbeschichteten Bleche ist mit zehn stirnseitig eingebrachten Bohrungen zur Aufnahme von Thermoelementen versehen. Diese Bohrungen haben einen Innendurchmesser von 0,6 mm, die Ni-CrNi-Thermoelemente einen Außendurchmesser von 0,5 mm. Die Bleche mit Thermoelementen sind in der Mitte des Kanals angeordnet (s. Abb. 1.2).

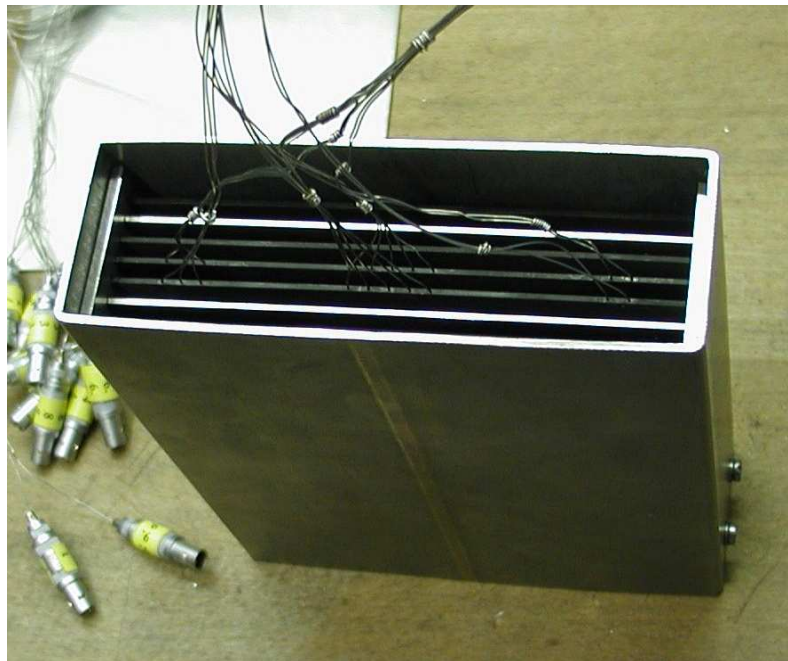


Abb.1.2:Anordnung der Proben im Kanal

Insbesondere im Bereich der Vorderkante bis zur Plattenmitte liegen die gemessenen Temperaturen für die Anordnung mit unbeschichteten Zwischenblechen (Messreihe K) deutlich niedriger als für die konventionelle Anordnung (Messreihe H), siehe Abb. 1.3, hier beispielhaft für

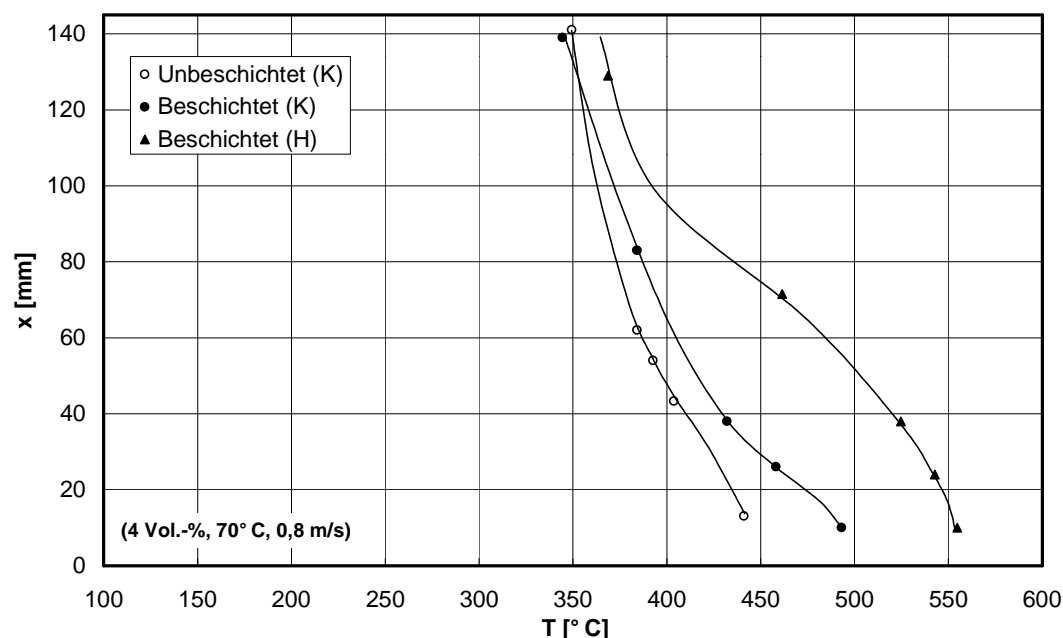


Abb. 1.3: Vergleich der gemessenen Temperaturverteilungen beider Messreihen bei 4 Vol.-% H₂, 70° C und 0,8 m/s

eine Wasserstoffkonzentration von 4 Vol.-%, eine Gaseintrittstemperatur von 70° C und eine Strömungsgeschwindigkeit von 0,8 m/s dargestellt. Die Temperaturen an der Hinterkante der Platten befinden sich hingegen auf einem ähnlichen Niveau. Damit wird deutlich, dass die Wärme auf den Katalysatorblechen in der

Anordnung mit zusätzlichen unbeschichteten Platten gleichmäßiger verteilt und besser abgeführt wird als bei der konventionellen Anordnung.

Als Folge der gleichmäßigeren Verteilung der Wärme auf den Katalysatorblechen sowie des nun ermöglichten Wärmeabtransports von den beschichteten Platten mittels Wärmestrahlung wird generell eine deutliche Reduzierung der Maximaltemperaturen erzielt, siehe Abbildung 1.4. Bei zunehmender H_2 -Konzentration ist zu erkennen, dass für die konventionelle Anordnung (H) bereits bei einer Konzentration von 4 Vol.-% eine Gemischzündung möglich ist. Die Zündtemperatur wird für ein H_2 /Luft-Gemisch je nach Literaturangabe zwischen 530°C und 585°C angegeben. Es ist zwar bekannt, dass die Zündtemperatur an katalytisch aktiven Oberflächen aufgrund der Brenngasabreicherung in der Grenzschicht höher liegen kann, diese Einschränkung ist jedoch aufgrund des unmittelbaren Kontaktes mit unbeschichteten Strukturen aus sicherheitstechnischer Sicht nicht oder nur eingeschränkt relevant.

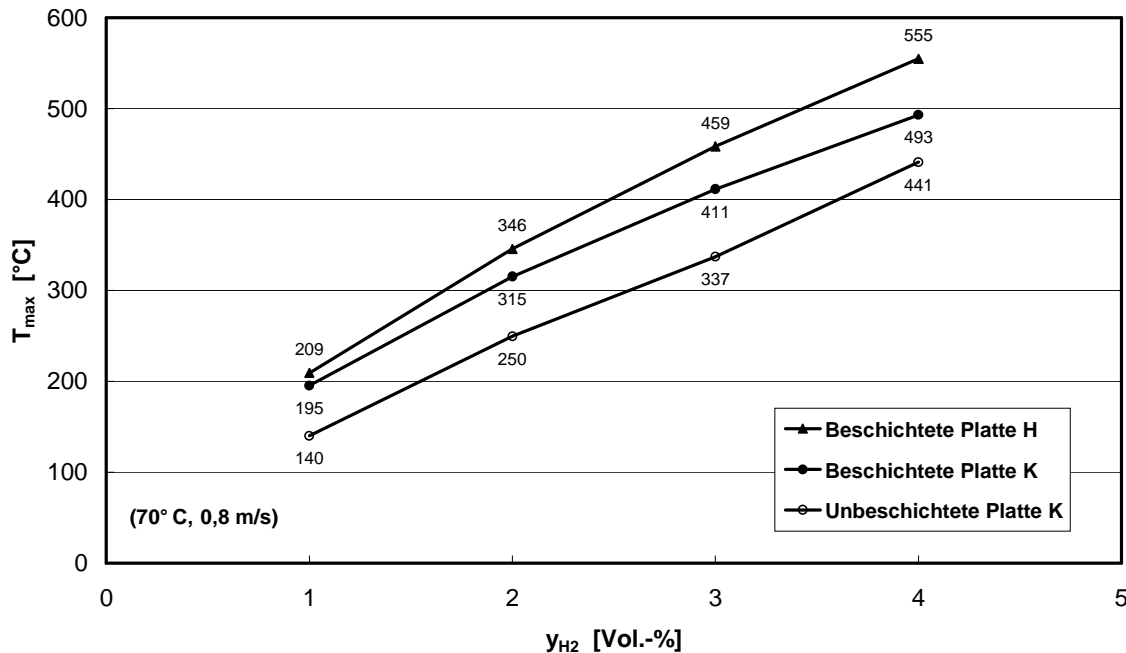


Abb. 1.4: Maximaltemperaturen in Abhängigkeit von der Wasserstoffkonzentration bei 70°C Gastemperatur und einer Strömungsgeschwindigkeit von $0,8\text{ m/s}$

Die Maximaltemperatur auf den beschichteten Platten wird im untersuchten Konzentrationsbereich um bis zu 70 K verringert. Da die Temperaturabsenkung mit zunehmendem Temperaturniveau infolge der zunehmenden Bedeutung der Wärmestrahlung größer wird, ist ein Betrieb auch bei höheren Wasserstoffkonzentrationen unterhalb der Zündtemperatur denkbar.

Zur optimierten Ausnutzung der Wärmeabfuhr mittels Wärmestrahlung wird eine Konfiguration vorgeschlagen, die die Möglichkeiten der Wärmeabfuhr mittels Wärmeleitung, Konvektion und Wärmestrahlung umfangreicher als bisher ausnutzt. Um eine Zündung des Wasserstoff/Luft-Gemischs sicher ausschließen zu können, könnte eine wirkungsvolle Temperaturabsenkung dabei durch den zusätzlichen Einsatz einer alternierenden Beschichtung erzielt werden. Weiterführende experimentelle Untersuchungen sind hierzu in Vorbereitung. Die gewonnenen Messdaten werden darüber hinaus im Rahmen der Entwicklung numerischer Modelle genutzt.

1.3. Untersuchungen zu neuen Rekombinatoren

Heutige Rekombinatoren entsprechen nur bedingt den sicherheitstechnischen Erfordernissen, da sie aufgrund unzureichender Abfuhr der freiwerdenden Reaktionswärme bauartbedingt zum Überhitzen neigen, so dass eine Zündung des Wasserstoff/Luft-Gemischs möglich ist. Die Entwicklung innovativer Rekombinatoren hat zum Ziel, die Umsetzung größerer Wasserstoffmengen zu ermöglichen, gleichzeitig aber die Überhitzung der Katalysatoren auszuschließen. Ein erfolgversprechender Ansatz, der hierzu im ISR verfolgt wird, sieht das Konzept eines modular aufgebauten Rekombinators vor, für dessen einzelne Katalysatorelemente eine Überhitzung unter allen Betriebsbedingungen ausgeschlossen werden kann (Abb. 1.5). Im Gegensatz zum Plattenrekombinator ist dabei die Reihenschaltung katalytisch beschichteter Edelstahlnetze vorgesehen, deren Aktivität durch Variation der Geometrie und der Katalysator-Belegungsmenge auf der Netzoberfläche den Erfordernissen angepasst werden kann. Ziel ist, die Aktivität des Katalysators lokal so weit zu reduzieren, dass die Reaktionswärme in hinreichendem Maße abgeführt werden kann. Derzeitige Rekombinatoren mit Washcoat-Katalysatoren besitzen keinen Mechanismus, der eine Temperaturbegrenzung bewirkt.

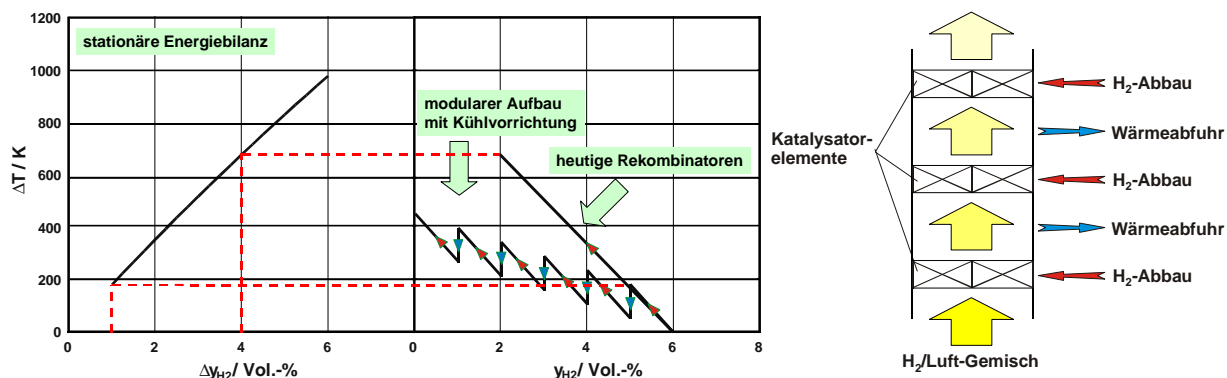


Abb. 1.5: Konzept eines modular aufgebauten Rekombinators

Umsatzleistung und thermisches Verhalten der Katalysatorproben werden im Versuchsstand REKO-1m im Wasserstofflabor des ISR experimentell untersucht (Abb. 1.6). Die Katalysatorproben werden in der Anlage mit einem konstanten H_2 /Luft-Gemisch unter definierten Bedingungen beaufschlagt. Das Abgas wird zur Ermittlung der Abbauleistung auf seine Zusammensetzung hin analysiert. Die Katalysatortemperaturen werden mittels Pyrometer berührungsfrei gemessen.

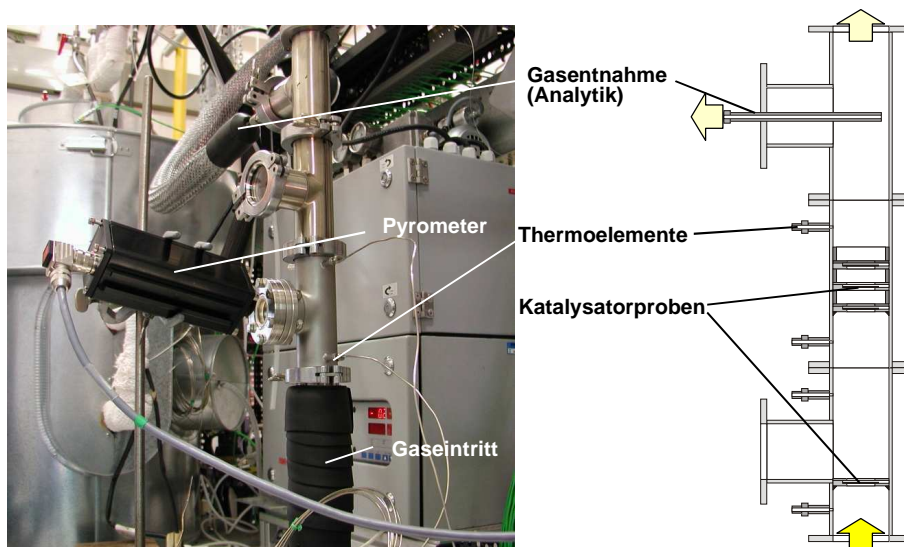


Abb. 1.6: Versuchsstand REKO-1m

Bisherige Ergebnisse demonstrieren die erfolgreiche Umsetzung dieses Ansatzes. Während für Washcoat-Beschichtungen die Umsatzrate linear mit der H_2 -Konzentration ansteigt, ist im Fall der alternativen galvanischen Beschichtung der Umsatz begrenzt, so dass auch bei zunehmender H_2 -Konzentration keine Steigerung der Abbauraten möglich ist. Auf diese Weise wird eine Begrenzung der Katalysatortemperaturen realisiert (Abb. 1.7).

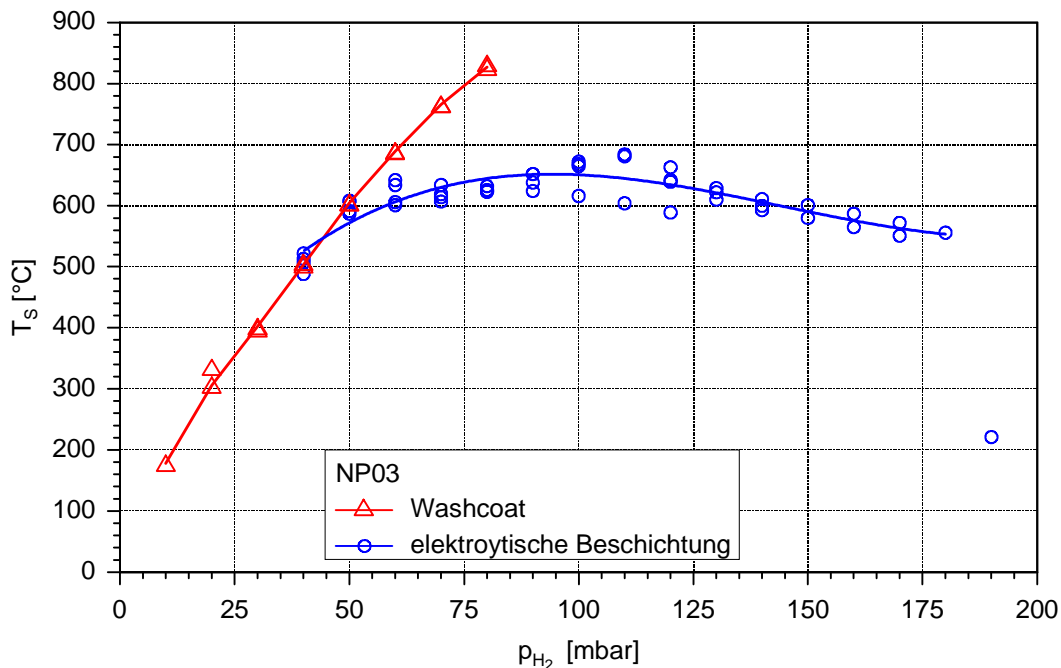


Abb. 1.7: Substrattemperatur für verschiedene Beschichtungsarten

Ziel einer im vergangenen Jahr abgeschlossenen Promotionsarbeit war daher, ein geeignetes Katalysatorsystem - bestehend aus Katalysator und Substrat - zu entwickeln und zu erproben, dessen einzelne Katalysatorelemente nur einen Teil des antransportierten Wasserstoffs umsetzen, so dass eine lokale Überhitzung ausgeschlossen wird. Es wurden Elemente erprobt, bei denen das Edelmetall direkt auf dem metallischen Träger aufgebracht wird.

Mit elektrolytisch abgeschiedenem Platin wurde ein geeigneter Katalysator ermittelt, der die Wasserstoffoxidation begünstigt und gut auf dem Substrat haftet. Palladium erwies sich ebenfalls als effektiv, schied aber aufgrund mangelnden Haftens auf dem Trägermaterial ebenso aus wie Rhodium, dessen katalytische Wirkung sich als unzureichend herausstellte.

Als Trägermaterialien wurden verschiedene temperaturfeste Stähle und eine Nickellegierung erprobt. Die Paarung aus Substratwerkstoff 1.4767 und Platin ließ reproduzierbare Umsatzraten und eine mehrmalige Reaktivierung zu. Ab einer Wasserstoffkonzentration von 8 Vol.-% kam es allerdings zu Gemischzündungen. Die temperaturfesten Stähle 1.4841 und 1.4767 wurden in weiteren Versuchen näher auf ihre Eignung als Trägerwerkstoff hin untersucht. Mit der Auftragung einer Unterschicht wurden die unterschiedlichen Einflüsse einzelner Stoffe auf die katalytischen Eigenschaften von Platin getestet. Die Substrate wurden mit verschiedenen Materialien (Nickel, Aluminiumoxid, Kupfer, Silber und Rhodium) überzogen, auf die dann Platin elektrolytisch abgeschieden wurde. Bei diesen Untersuchungen stellte sich heraus, dass Rhodium, Kupfer und Silber in Kombination mit den verwendeten Materialien Gifte für die katalytische Wasserstoffrekombination sind. Nickel behindert die Reaktion, wie sich schon aus den Untersuchungen mit nickelhaltigen Stählen erkennen ließ. Aluminiumoxid hingegen begünstigt die katalytische Rekombinationsreaktion.

In einer weiteren Testserie wurde der Einfluss der Belegungsmenge auf verschiedenen Netzgeometrien und Substraten untersucht. Bei den Werkstoffen 1.4841 und 1.4767 konnte durch eine Begrenzung der Katalysatormenge eine Zündung des Gasgemischs verhindert werden.

Aus den Untersuchungsergebnissen kann gefolgert werden, dass elektrolytisch beschichtete Katalysatornetze aufgrund der geringen Zahl der katalytisch aktiven Zentren eine Reduzierung des H_2 -Umsatzes bewirken, so dass eine Zündung des Gasgemischs infolge lokal geringerer Wärmefreisetzung vermieden wird. Die elektrolytische Beschichtung mit Platin ist thermisch beständig und haftet gut auf dem Substrat. Abplatzen des Katalysators, wie es bei Beschichtungen mit Washcoat der Fall ist, wurde nicht beobachtet.

Weitere Untersuchungen sind notwendig, um den Katalysator weiter zu optimieren. Die bisher durchgeführten Arbeiten bieten eine Übersicht über die zahlreichen verwendeten Materialien und Methoden zur Beschichtung. Vor- und Nachteile der Werkstoffe und Materialpaarungen sind im Hinblick auf Umsatzraten, katalytische Stabilität und Substrattemperaturen ausführlich beschrieben. Mit diesen Erkenntnissen lassen sich auch neue Materialien identifizieren.

Die weiterführenden Arbeiten befassen sich mit der Variation der Belegungsdichte und der Netzgeometrie, um ein genau definiertes Umsatzverhalten zu erzielen. Dazu gehört neben den experimentellen Untersuchungen auch die Modellierung der ablaufenden Prozesse.

2 HTR-Fuel-Data-Base

H. Werner

The **HTR Fuel Data Bank (HTR-Fuel-DB)** has been developed as a preliminary prototype Web-enabled database application for experimentally measured HTR fuel data within the FP5 - HTR-F project.

The **HTR Fuel-DB** offers intelligent user-guidance for data retrieval. Data output is shown in HTML tables, images and documents.

Because of data confidentiality only HTR-TN members and related HTR projects can register and have access to **HTR Fuel-DB** data.

The database contains source information for traceability, information about the fabrication, dimensions, etc. of the fuel elements and particles, irradiation and heating of the fuel elements and the tests performed on fuel elements and particles with or without irradiation and/or heating. Figure 2.1 shows the simplified entity relationship model of the database.

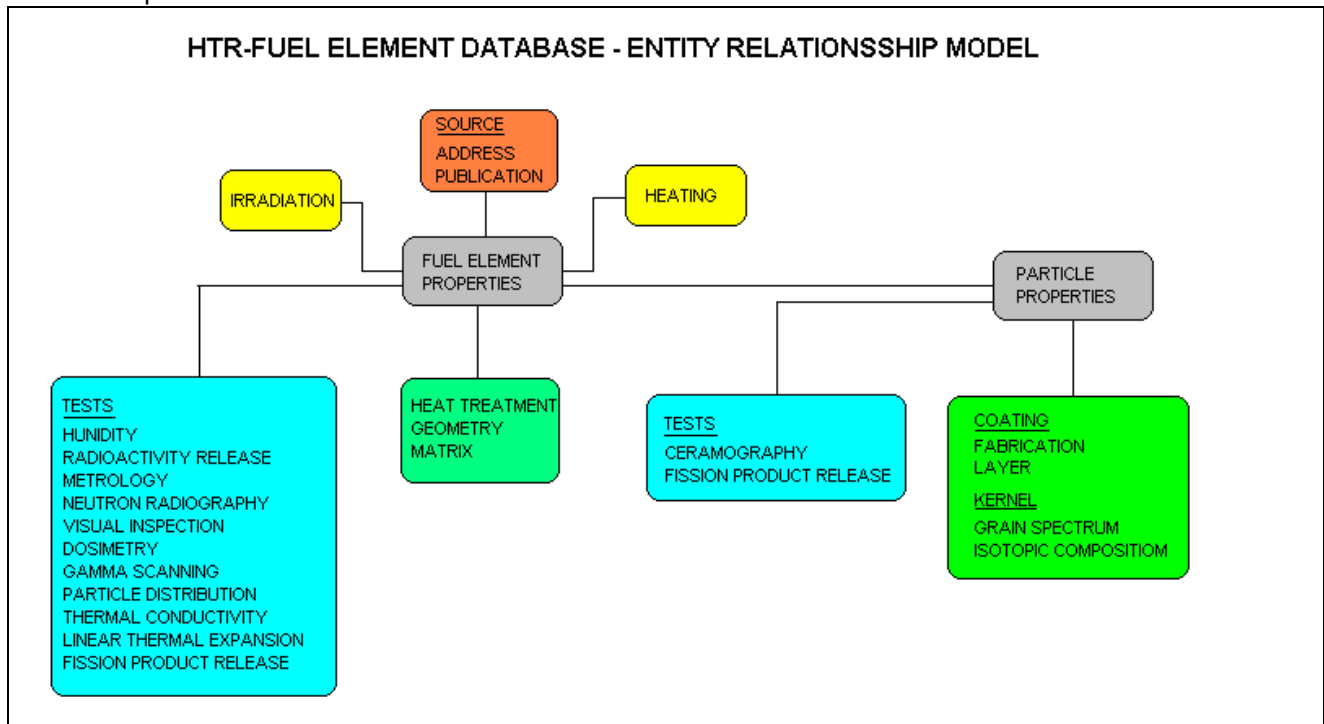


Figure 2.1: Simplified entity relationship model of **HTR-Fuel-DB**

The data retrieval part of the user-interface is Web-enabled. To access the **HTR-Fuel-DB** data and related documentation the user has to register on the JRC Petten Data Management & Dissemination Website **MATDB.JRC.NL**. The output is a small report on related information (see figure 2.2), which contains further links to source, matrix and particle.

Data entry is for the time being performed manually. HTR-Fuel data are sent to JRC Petten within pre-prepared EXCEL templates and then pasted into the database by using basic database administration tools. Related documents of the HTR-F project could be stored within the ODIN documentation site (see figure 2.3).

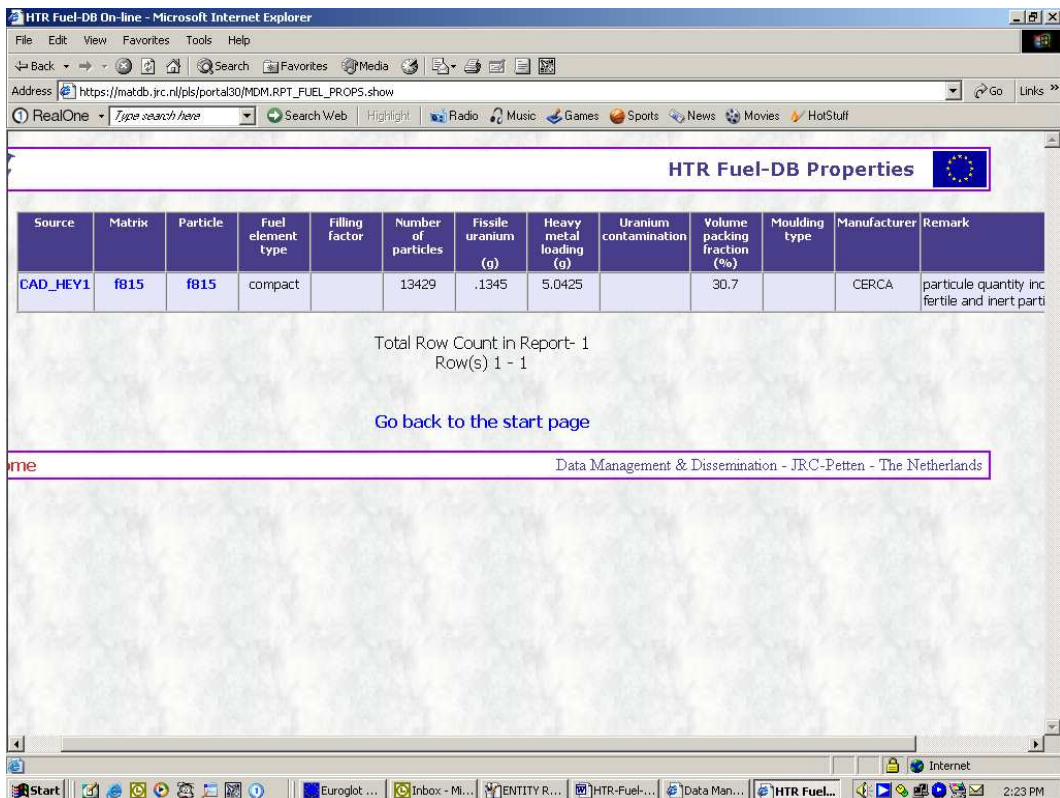


Figure 2.2: HTR-Fuel-DB report

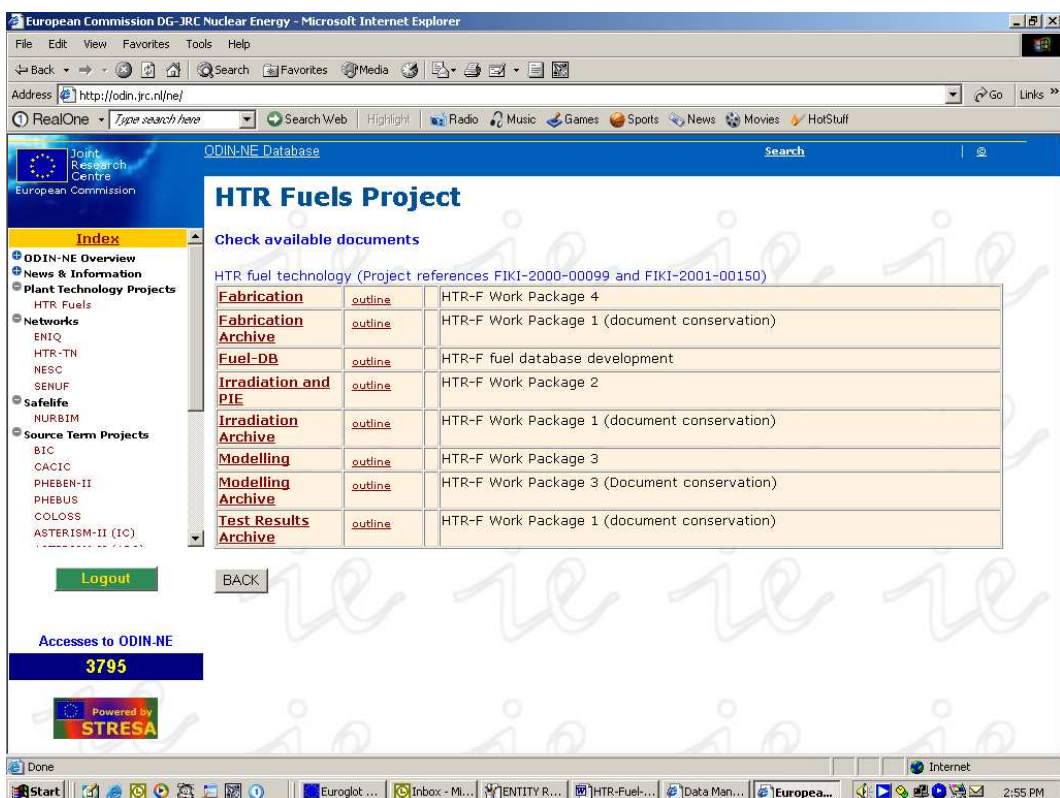


Figure 2.3: HTR-F related documentation

3 Erfahrungen mit dem Monte Carlo Programm MCNPX auf dem IBM Regatta-System „Jump“ am Beispiel von Rechnungen zum MUSE-4 Experiment

H. Brockmann, A. Kuhr

3.1. Einleitung

Ziel des MUSE-4 Experiment, welches an der MASURCA-Anlage im französischen Forschungszentrum Cadarache durchgeführt wird, ist es, die Raum-Zeit-Dynamik von beschleunigergetriebenen unterkritischen Reaktoranlagen zu untersuchen.

Begleitend werden hierzu theoretischen Analysen des MUSE-4 Experiments angestellt, um die Eignung bestehender Rechenverfahren und nuklearer Daten zu neutronenphysikalischen Berechnung derartiger System zu überprüfen.

Das Institut für Sicherheitsforschung und Reaktortechnik ist an den theoretischen Untersuchungen zum MUSE-4 Projekt beteiligt und setzt dabei unter anderem das Monte Carlo Transportprogramm MCNPX ein.

Die raum- und zeitabhängigen Dynamik-Rechnungen für MUSE-4 sind sehr rechenzeitaufwendig, wenn für ein vorgegebenes räumliches Maschennetz der zeitabhängige Neutronenfluß mit einer ausreichenden Genauigkeit berechnet werden soll.

Auf Grund seiner hohen CPU-Leistung und der großen Anzahl von CPUs bietet es sich an, die rechenzeitintensiven MUSE-4 Rechnungen auf dem neuen IBM p690 Cluster durchzuführen, der zur Zeit im Zentralinstitut für Angewandte Mathematik ausgebaut wird.

Im Folgenden wird über erste Erfahrungen mit dem Monte Carlo Programm MCNPX auf dem neuen IBM System berichtet. Es wird zunächst eine kurze Darstellung der Hardware des neuen Rechners gegeben. Anschließend wird erklärt, aus welchem Grund das IBM p690 Cluster eine ideale Plattform für die Durchführung der MCNPX Rechnungen zur Analyse des MUSE-4 Experiments darstellt.

Ferner werden neue Wege zur Darstellung der Ergebnisse aus den Monte Carlo Rechnungen aufgezeigt.

3.2. Hardware des IBM Regatta-Systems „Jump“

Bei dem neuen IBM Regatta System „Jump“ (Jülich Multi Prozessor) handelt es sich um ein massiv-paralleles Rechensystem. Es hat die Herstellerbezeichnung IBM p690 eServer Cluster 1600 und wird vom Institut für Angewandte Mathematik betrieben.



Abb. 3.1: Aussenansicht p690
(Quelle: ZAM/FZJ³⁾)

In der jetzigen Ausbaustufe besteht es aus sechs sogenannten Frames. Jeder dieser Frames verfügt über 32 Prozessoren der Power 4+ Architektur. Jeder Prozessor hat eine Taktrate von 1,7 GHz. Der Hauptspeicher eines Frames hat eine Größe von 64 GB und wird mit 567 MHz getaktet. Die Overall-Peakperformance dieses Clusters aus sechs Frames beträgt 1,3 TFlops (Flops: Floating-Point Operations per Second), die Performance eines Frames 218 Gigaflops.

In einer zukünftigen Ausbaustufe wird das Cluster aus 37 Frames bestehen und eine Peakperformance von 8 TFlops erreichen.

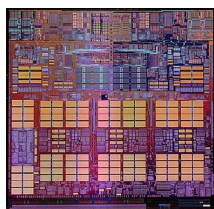


Abb. 3.2: Foto Prozessor
(Quelle: IBM)

Ein Power-4-Prozessor enthält zwei 64-bit Mikroprozessoren, die über einen sogenannten GX-Bus mit mehr als vier GByte/s miteinander kommunizieren.

Auf einer Fläche von etwa $13 \times 13 \times 0,6 \text{ cm}^3$ sind im Prozessor 35 Chips auf 101 Glaskeramik-Schichten mit 4226 I/O Pins und 1 km Draht verdrahtet.

Basiert auf IBMs Kupfer-Technologie besitzt das Modul insgesamt etwa 2,5 Milliarden Transistoren¹.) Jeder Power-4-Mikroprozessor hat acht unabhängige Ausführungseinheiten; zwei davon sind identische Floating-Point-Einheiten, die jeweils eine Multiply-And-Add-Operation pro Takt-Zyklus durchführen können. Hinzu kommen zwei Integer-Einheiten, zwei Load/Store-Einheiten und je eine Einheit für Verzweigungsoperationen und Bedingungsprüfung. Der Prozessor verwendet je 32 General-Purpose-Register und Floating-Point-Register².

Vier dieser Power-4-Processoren bilden ein MCM (Multi-Chip-Modul). Und wiederum vier MCM bilden die Rechenleistung eines Frames.

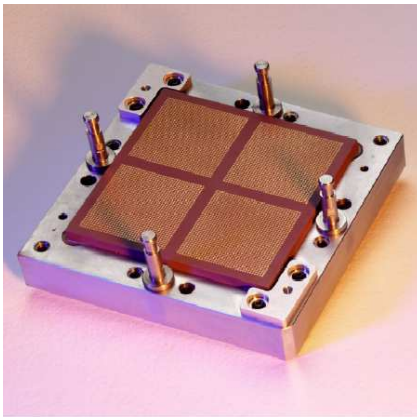


Abb. 3.3: Foto MCM (Quelle: ZAM/FZJ³)

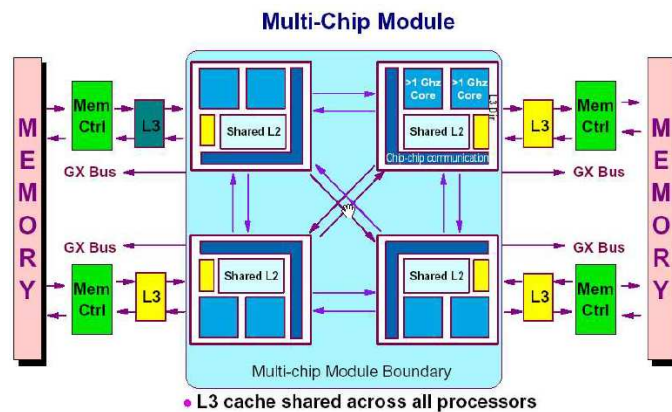


Abb. 3.4: Schemazeichnung MCM (Quelle: ZAM/FZJ³)

3.3. Software

Für die theoretische Analyse des MUSE-4 Experiments wurde das Monte Carlo Transportprogramm MCNPX eingesetzt, welches die lineare Transportgleichung mit Hilfe der Monte Carlo Methode löst. Dieses Programm weist zwei Eigenschaften auf, die es für die Berechnung des MUSE-4 Experiments besonders geeignet macht. Dies ist zum einen die Möglichkeit, das zu untersuchende Problem zu parallelisieren, d.h. das Ausgangsproblem wird in unabhängige Teilprobleme zerlegt, die auf eine im Prinzip beliebige Anzahl von Prozessoren verteilt werden können.

Als paralleles Kommunikationssystem verwendet MCNPX das Message Passing Interface (MPI). Hierbei wird die anstehende Rechenarbeit von einem sogenannten „Master“ an verschiedene „Slaves“ verteilt und von diesen abgearbeitet.

Die anstehende Rechenarbeit ist im Falle von MCNPX die Verfolgung einer vorgegebenen Anzahl von Teilchenschicksalen. Sind diese von den verschiedenen „Slaves“ abgearbeitet, sammelt der „Master“ die Ergebnisse der „Slaves“ ein und verteilt an diese neue Aufgaben, bis die Rechnung beendet ist.

Die zweite besondere Eigenschaft von MCNPX besteht in der Möglichkeit, sogenannte „mesh tallies“ zu verwenden. Diese erlauben es, ein dreidimensionales Maschennetz zu definieren, das unabhängig von der normalen Geometrieingabe ist und in dem der Teilchenfluß oder andere Größen abgeschätzt werden können. Im Falle der MUSE-4 Anordnung bietet es sich an, ein dreidimensionales Maschennetz in kartesischen Koordinaten zu verwenden, das die Anordnung der Brennelementstäbe in der MASCURA Anlage wiedergibt.

3.4. Modellierung des MUSE-4 Experiments mit dem Programm MCNPX

Die MASCURA Anlage besteht aus einer Anordnung von Stäben, welche die Form von vierseitigen Prismen, die die Abmessungen 10,6 cm x 10,6 cm x 164,12 cm besitzen. Im Falle des MUSE-4 Experiments ist die gesamte Anordnung aus 17 x 16 Stäben aufgebaut. Die Geometrie eines jeden dieser Stäbe, die verschiedene Materialien enthalten, wird mit Hilfe des Programms MCNPX modelliert. Unter anschließender Verwendung der „repeated structure“ Technik läßt sich das MUSE-4 Experiment darstellen. Die Abb. 3.5 zeigt Schnitte durch die so modellierte MUSE-4 Anordnung.

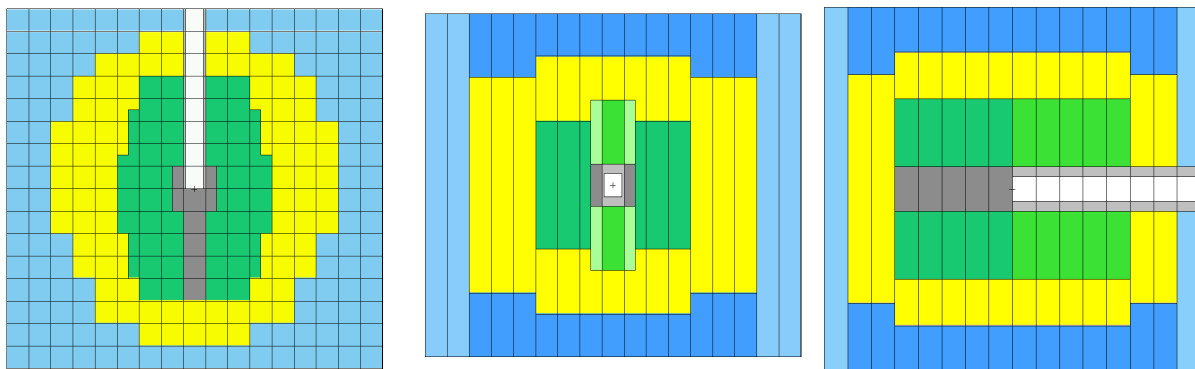


Abb. 3.5: xy-, xz- und yz-Schnitt durch die Mitte des MUSE-4 Modells

Der Kern in der Zentralzone (grün) besteht aus einem Uran/Plutonium MOX Brennstoff. Eine zentrale Pufferzone aus Blei (grau) dient dazu, das Spektrum der Quellneutronen dem einer Spallationsquelle anzupassen, wenn das Experiment mit einer äußeren Quelle betrieben wird. Der Kern wird von einem Reflektor (gelb) umgeben, der aus einer Mischung aus Natrium und Stahl besteht, welche das Kühlmittel bzw. das Strukturmaterial repräsentieren. Eine zusätzliche äußere Zone (blau), welche gänzlich aus Stahl besteht, dient als Neutronenabschirmung.

3.5. Rechnungen

In der Vergangenheit wurden bereits ähnliche Rechnungen mit dem Transportprogramm MCNP auf dem „ZAMpano“ (8 compute nodes mit je 4 Pentium III Xeon 550 MHz Prozessoren) gemacht. Bereits hier wurden schon gute Speedup-Faktoren erzielt. Jedoch kam dieses System für umfangreichere Produktionsläufe nicht in Frage, da die CPU-Leistung des Clusters zu gering war.

Die höhere CPU-Leistung eines Power-4-Prozessors ließ eine höhere Turnaroundzeit erwarten, die auch beobachtet wurde.

In einer charakteristischen MCNPX-Rechnung werden die Teilchenschicksale (z.B. von Neutronen) in einem Simulationsprozeß verfolgt. Bei Eigenwertrechnungen geschieht dieses in n Zyklen, in denen jeweils die Schicksale von m Teilchen berechnet werden, wobei n und m Eingabegrößen sind.

Eine frühere Testrechnung, bei der in 20 Zyklen jeweils 30.000 Teilchen verfolgt wurden, hat auf einem Cluster aus fünf Linux-Rechnern mit je einem Intel Pentium-4-Prozessor mit 2,4 GHz eine Turnaroundzeit von 37:32 Minuten ergeben. Auf fünf CPUs des „Jump“ betrug sie 13:25 Minuten.

Aus diesen Angaben erkennt man, daß nicht nur alleine die Taktrate eines Prozessors ausschlaggebend ist, sondern das auch die Architektur der CPU eine Rolle spielt. Denn die Taktrate eines Intel-Pentium-4-Prozessors war in diesem Test ja höher als die eines Power-4-Prozessors.

Weiterhin wurden Performancetests auf dem „Jump“ gemacht, um zu sehen, welche Teilchenzahl je Prozessor die beste Auslastung bietet.

Werden je CPU zu wenig Teilchenschicksale verfolgt, steigt nur der Kommunikationsaufwand zwischen den CPUs und bringt keinen wesentlichen Performancegewinn.

Zu beachten ist weiterhin, daß man durch die Parallelisierung keinen Gewinn bei der Rechenzeit erzielen kann. Abhängig von der Problemgröße ergibt sich diese. Denn die "Arbeit", die getan werden muß, ist ja die gleiche, unabhängig davon, von wievielen "Arbeitern" sie verrichtet wird.

„Gewinn“ kann man lediglich bei der Turnaroundzeit (auch wall clock genannt) erzielen, d.h., die Zeit, die man nach Start des Programmes bis zum Erhalt des Ergebnisses warten muß, verkürzt sich.

So betrug die wall clock bei Verwendung von vier Prozessoren des „Jump“ für ein Problem, bei dem in 10 Zyklen jeweils 60.000 Teilchenschicksale verfolgt wurden, 16:07 Minuten, wohingegen das gleiche Problem auf 30 Prozessoren des „Jump“ eine wall clock von 2:26 Minuten erforderte.

Für diese Testrechnungen wurde bewußt eine geringe (d.h. mathematisch gesehen noch nicht die optimale, um bezüglich der Statistik hinreichend genaue Ergebnisse zu erzielen) Anzahl an Zyklen gewählt, um mehr Tests in der gleichen Zeit durchführen zu können.

Bei den Rechnungen ist die verbrauchte Zeit in jedem Zyklus annähernd die gleiche, so daß sich die zu erwartende Turnaround-Zeit für eine größere Anzahl von Zyklen leicht durch Extrapolation berechnen läßt.

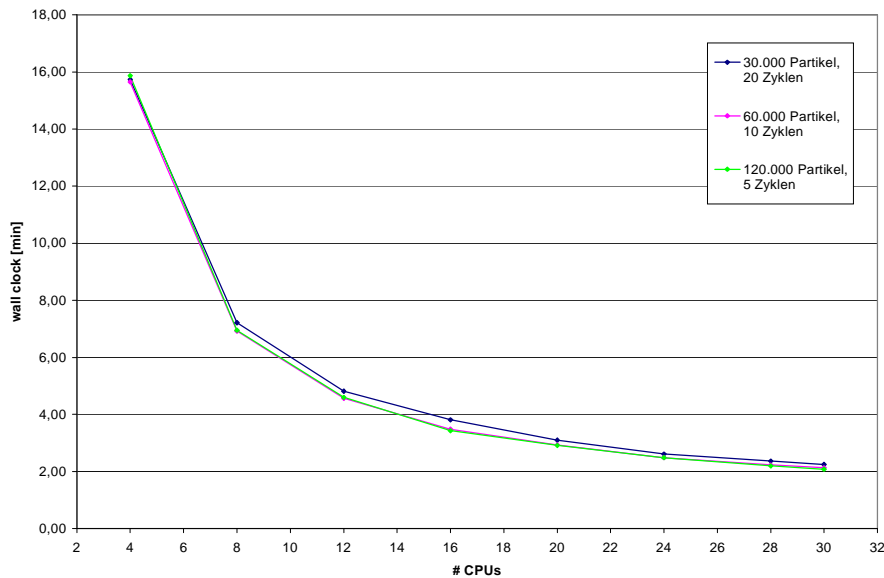


Abb. 3.6: Wallclock bei verschiedener CPU-Anzahl

In Abb. 3.6 ist die wall clock (Turnaroundzeit) gegenüber der Anzahl der verwendeten CPUs aufgetragen. Es wurden drei verschiedene Arten von Rechnungen durchgeführt, wobei die Gesamtzahl der verfolgten Teilchenschicksale konstant bleibt, diese aber auf unterschiedlich viele Zyklen verteilt werden. Dadurch ergibt sich eine unterschiedliche Teilchenzahl je Zyklus.

Wie in Abb. 3.5 zu sehen ist, werden nahezu optimale Speedup-Faktoren erreicht. Bei Verdopplung der CPU-Anzahl für eine Rechnung ist im Optimalfall eine Halbierung der Rechenzeit zu erwarten.

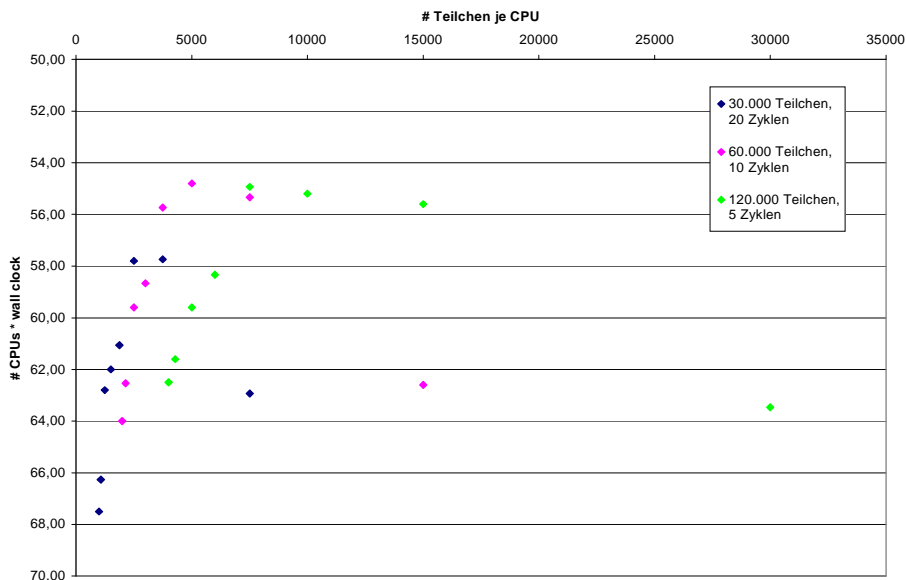


Abb. 3.7: Betrachtung der Teilchenzahl je CPU

In Abb. 3.7 ist auf der x-Achse die Teilchenzahl je CPU dargestellt, die in einem Zyklus verfolgt wurde. Auf der y-Achse ist die wall clock multipliziert mit der Anzahl der CPUs dargestellt.

Hierbei kann man den Einfluß erkennen, den die Mehrarbeit durch die Kommunikation der einzelnen Prozessoren untereinander ausmacht. Denn die eigentliche Rechenzeit, die zur Lösung eines Problems benötigt

wird, ist von der Anzahl der Prozessoren unabhängig. Doch da die wall clock mit der Anzahl der CPUs multipliziert wurde, kann man erkennen, daß wenn für jede CPU nur wenige Teilchen berechnet werden müssen, die Zeit schlechter wird. Man kann es so ausdrücken, daß die CPUs im Verhältnis zu wenig rechnen und zuviel kommunizieren.

Erst wenn pro CPU mehr Teilchen berechnet werden, wird die benötigte Zeit kürzer. Dieser Effekt ist aber nicht linear, denn irgendwann werden es zu viele Teilchen pro CPU und die benötigte Zeit wird wieder ansteigen.

Es läßt sich aber hierbei keine allgemeingültige optimale Teilchenzahl je CPU festlegen. Diese wird von Problemstellung zu Problemstellung unterschiedlich ausfallen. Daher ist es notwendig, daß man, bevor man mit Produktionsläufen zu einer bestimmten Fragestellung startet, vorher erst kürzere Kalibrierungsläufe durchführt, um die für die Aufgabenstellung optimale Anzahl von CPUs herauszufinden.

3.6. Post-Processing

Neben der Multiplikationskonstanten des Systems wurde mit dem Programm MCNPX der Neutronenfluß in jeder Zelle des dreidimensionalen Maschennetzes für vier Energiegruppen berechnet. Hierbei wird der Neutronenfluß in einer Zelle durch die Summe der Fluglängen in dieser Zelle abgeschätzt.

Zur Visualisierung der so erhaltenen Daten wurde die Software Advanced Visual System (AVS) eingesetzt. Diese Software bietet u.a. auch die Möglichkeit sogenannte UCD (Unstructured Cell Data)-Daten darzustellen. Diese Datenstruktur kommt der im Modell verwendeten sehr nahe und wurde aus diesem Grund für die Darstellung der MCNPX Daten verwendet.

Um den Input für das AVS automatisch aus dem Output des MCNPX zu generieren, wurde ein Programm entwickelt.

Im AVS werden die Strukturen durch Hexaeder abgebildet. Um gewisse Darstellungsmöglichkeiten des AVS nutzen zu können, wird je ein Wert an den Eckpunkten des Hexaeders benötigt. Da bei der Rechnung jedoch pro Zelle (entspricht dem Hexaeder) der Neutronenfluß berechnet wurde, wird der Wert der Zelle den acht Eckpunkten (Knoten) des Hexaeders zugewiesen. Bei den inneren Knoten „gehört“ ein Knoten jedoch zu mehreren Hexaedern, so daß sein Wert auf Basis der beteiligten Zellen dann interpoliert wird. Dadurch erhält man dann leicht „verschmierte“ Bilder.

Um jedoch auch die Zellstruktur darstellen zu können, die in der untersuchten MUSE-4 Anordnung Grundlage zur Berechnung war, wurde ein Programm entwickelt, das automatisch die inneren Knoten für die UCD-Struktur des AVS verdoppelt. So kann dann jedem Knoten auch der Wert „seiner“ Zelle zugewiesen werden.

Nachfolgend sind einige Bilder gegeben, die die Möglichkeiten der Visualisierungssoftware AVS zeigen sollen.

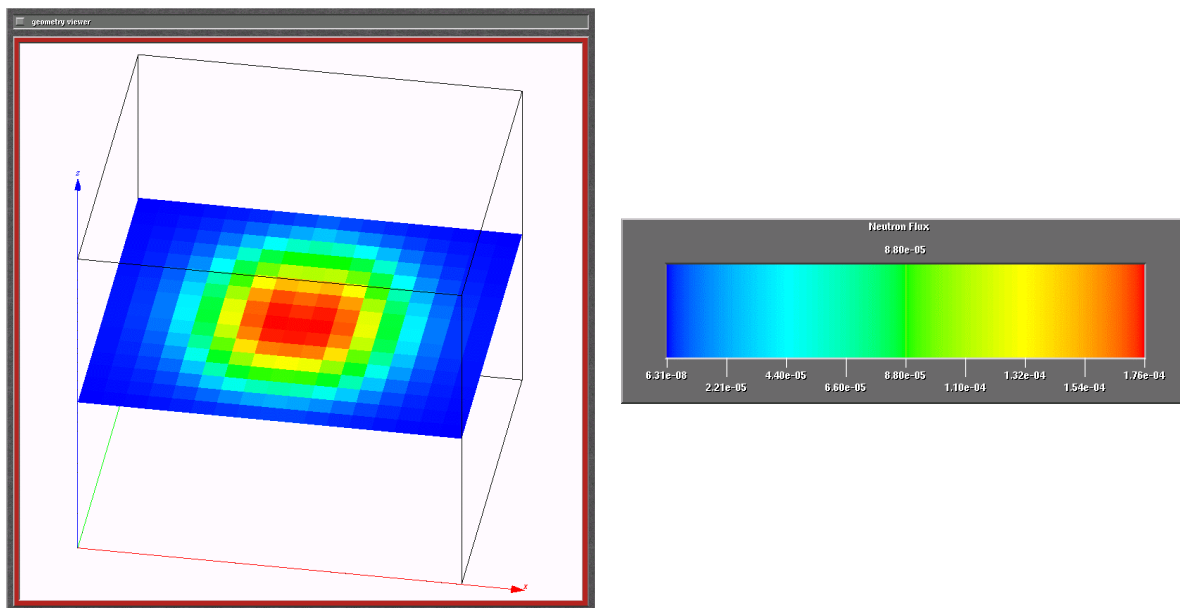


Abb. 3.8: Relativer Neutronenfluß im Energiebereich 0,1 bis 1 eV

Hierbei ist der relative Neutronenfluß dargestellt. Abb. 3.8 zeigt einen Schnitt durch die MUSE-4 Anordnung an der Position $z = 82,08$ cm, der auch in Abb. 3.5 links zu sehen ist. Man kann hier deutlich erkennen, daß der relative Neutronenfluß im Strahlrohr und im Core am größten ist.

In Abb. 3.9 sind jeweils ein senkrechter und ein waagerechter Schnitt durch die Anordnung dargestellt. Auf der linken Seite findet sich die Variante mit den verdoppelten inneren Knoten, auf der rechten Seite die Darstellung mit den interpolierten Knotenwerten.

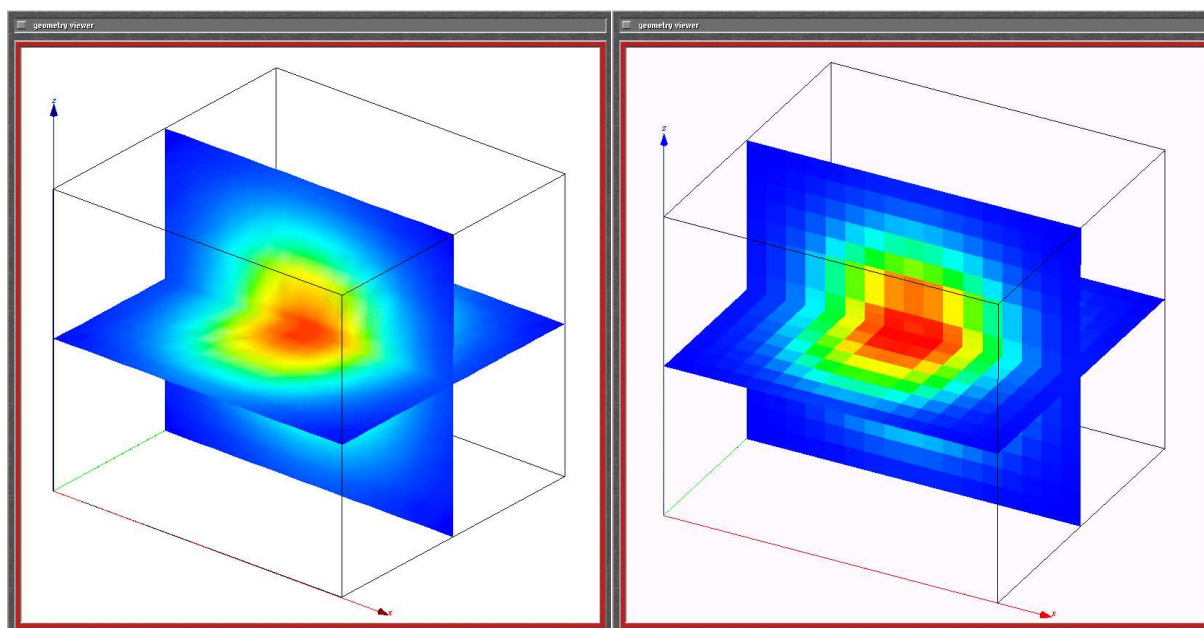


Abb. 3.9: Darstellungsvariante mit zwei Schnitten

Weiterhin bietet AVS die Möglichkeit, mit einer Ebene oder einem Würfel Teile der Anordnung „herauszuschneiden“, so daß auch innere Bereiche sichtbar werden, oder auch andersherum, daß nur der „herausgeschnittene“ Teil dargestellt wird. Diese beiden Darstellungsmöglichkeiten sind in Abb. 3.10 zu sehen.

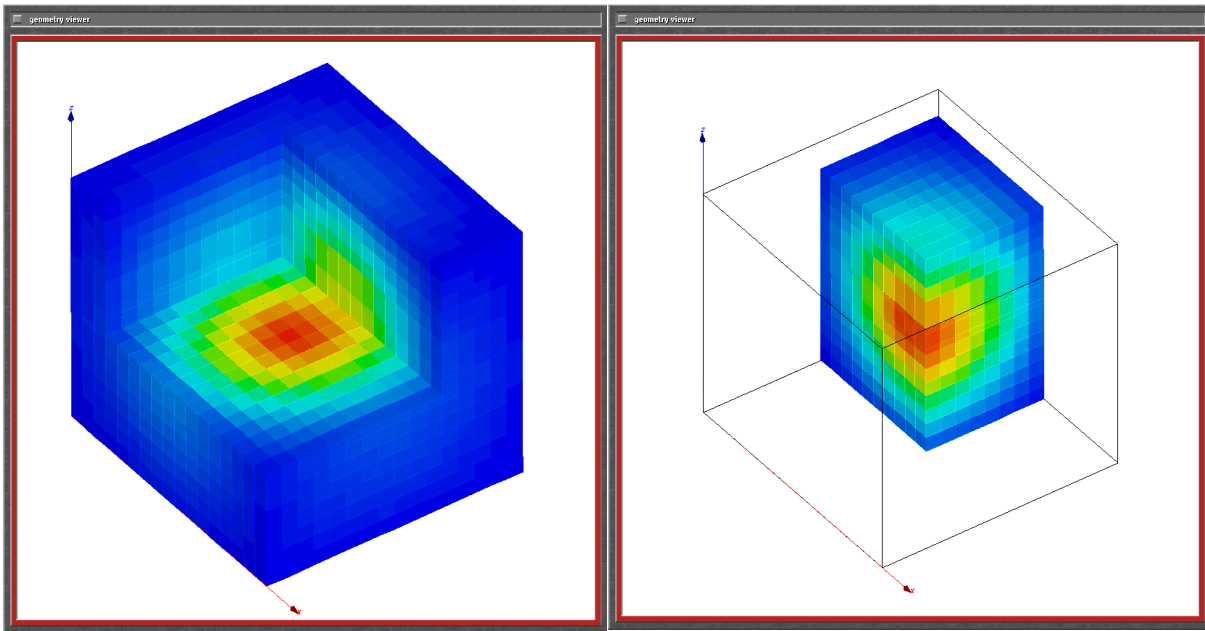


Abb. 3.10: Darstellungsvariante AVS-Crop

In obiger Darstellungsform wurde nicht die komplette Anordnung dargestellt, sondern nur ein Ausschnitt, der auf geometrischer Basis „konstruiert“ wurde. In einer weitere Visualisierungsvariante, die das AVS bietet, kann man solche Ausschnitte auch datenbasiert angeben. Es lassen sich so die Daten darstellen, die oberhalb eines gewählten Wertes liegen, oder wahlweise unterhalb, oder in einem Bereich zwischen zwei Werten (Abb. 3.11).

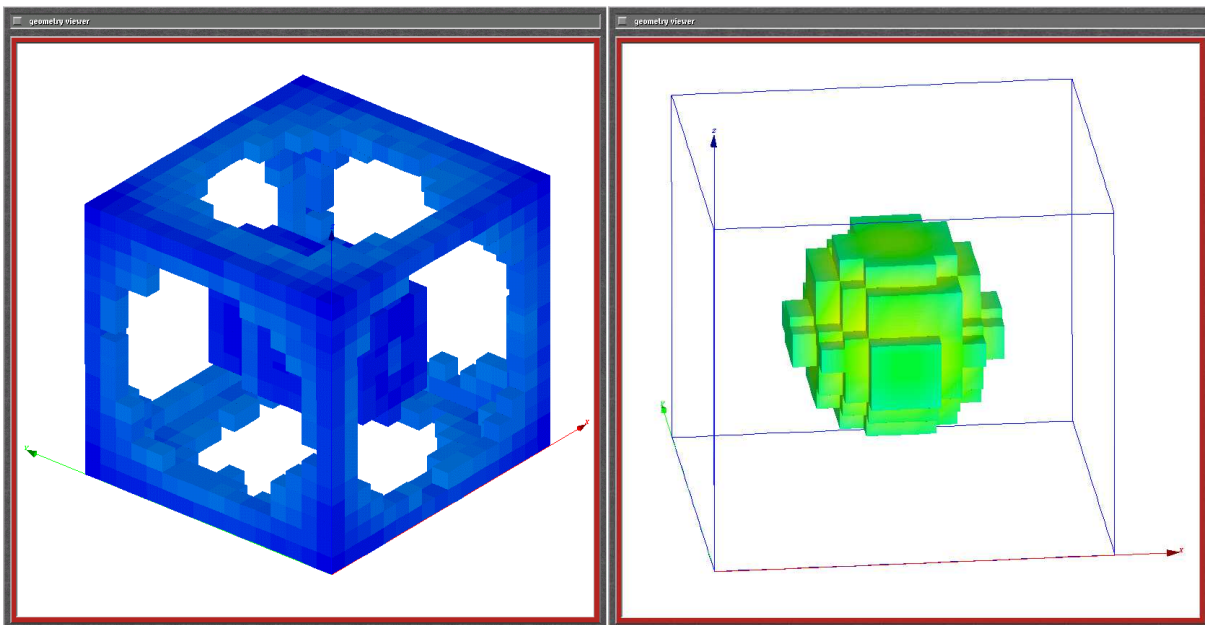


Abb. 3.11: Anwendung von AVS-Threshold

3.7. Zusammenfassung

Die bei diesen Untersuchungen gewonnenen Ergebnisse zeigen, daß man mit dem Programmsystem MCNPX auf dem massiv-parallelen Rechnersystem „Jump“ ein hervorragendes Werkzeug hat, um die rechenzeitintensiven raum- und zeitabhängigen Dynamikrechnungen für das MUSE-4 Experiment durchzuführen.

Der geplante Ausbau des „Jump“ auf noch mehr CPUs wird in Zukunft noch schnellere Turnaroundzeiten und somit einen größeren Durchsatz bei Produktionsläufen erwarten lassen.

Mit dem Post-Processingsystem AVS wird dem Benutzer ein Werkzeug zur Verfügung gestellt, mit dem in komplexen dreidimensionalen Geometrien Rechenergebnisse auf vielfältige und anschauliche Weise darstellen lassen.

3.8. Quellenangaben

1. http://www.rrzn.uni-hannover.de/Poster/hlrn_herz_06_02.pdf
2. http://www.gwdg.de/forschung/publikationen/gwdg-nr/GN0203/gn0203_04.html
3. U. Detert, W. Frings, „Jump, der Sprung auf 8 TFlops“, Vortrag ZAM/FZJ (2003)