

Rooster-mf User's Guide

Part-I: Input Manual

November 2024

Paul Scherrer Institute
Scientific Computing, Theory and Data
Laboratory for Simulation and Modelling
Advanced Nuclear Systems Group

PAUL SCHERRER INSTITUT



Contents

0. INTRODUCTION	4
1. XTIME.....	5
1.1 DESCRIPTIONS OF INPUT VARIABLES	5
1.2 INPUT EXAMPLES	5
2. XSOLV	6
2.1 DESCRIPTION OF INPUT VARIABLES	6
2.2 INPUT EXAMPLES	6
3. XPIPE	7
3.1 DESCRIPTION OF INPUT VARIABLES	7
3.2 INPUT EXAMPLES	7
4. XJUNC.....	8
4.1 DESCRIPTION OF INPUT VARIABLES	8
4.2 INPUT EXAMPLES	8
5. XCORE.....	9
5.1 DESCRIPTION OF INPUT VARIABLES	9
5.2 INPUT EXAMPLES	9
6. XFUEL.....	10
6.1 DESCRIPTION OF INPUT VARIABLES	10
6.2 INPUT EXAMPLES	10
6.2.1 <i>Single-layer fuel model</i>	10
6.2.2 <i>Multi-layer fuel model</i>	10
7. XCLAD.....	11
7.1 DESCRIPTION OF INPUT VARIABLES	11
7.2 INPUT EXAMPLES	11
8. XFROD.....	12
8.1 DESCRIPTION OF INPUT VARIABLES	12
8.2 INPUT EXAMPLES	12
9. XTHBC	13
9.1 DESCRIPTION OF INPUT VARIABLES	13
9.2 INPUT EXAMPLES	13
10. XHSTR	14
10.1 DESCRIPTION OF INPUT VARIABLES	14
10.2 INPUT EXAMPLES	14
11. XSGNL	15
11.1 DESCRIPTION OF INPUT VARIABLES	15
11.2 INPUT EXAMPLES	15

0. INTRODUCTION

The Rooster-mf code is under active development at PSI as an Open-Source code framework for simulation of Gen-IV Liquid Metal Fast Breeding Reactor system behaviour utilizing Fortran 95/2003 language, which supports parallel acceleration approach and object-oriented programming characteristics.

The input file for Rooster-mf code is arranged in a NAMELIST style. In this format, the input variables/arrays are divided into classes that correspond to different NAMELISTs, each class is distinguished by a different NAMELIST name. Within each NAMELIST, the input variables can be freely ordered, and between the NAMELISTs the comments can be arbitrarily typed since they are simply ignored.

The NAMELIST classes of the input stream of Rooster-mf code currently includes:

&XTIME: variables relative to calculation time/time-step control /
&XSOLV: flags for problem type, variables for settings of ode solver /
&XPIPE: variables for defining & setting fluid pipe object /
&XJUNC: variables for defining & setting fluid junction object /
&XCORE: variables for defining & setting core neutronics parameters /
&XFUEL: variables for defining & setting fuel pellet object /
&XCLAD: variables for defining & setting cladding object /
&XFROD: variables for defining & setting fuel-rod object /
&XTHBC: variables for defining & setting thermal boundary object /
&XHSTR: variables for defining & setting heat structure object /
&XSGNL: variables for defining & setting signal object /

The purpose of this document is to provide the users with necessary information about developing and editing input file before executing Rooster-mf code.

1. XTIME

XTIME 卡片包含算例的起止物理时间、结果输出时间步长、求解器的时间步长等控制变量，该卡片的设置对于计算效率和收敛性有明显影响。该卡片仅需输入一次，当 input 文件中出现多个 XTIME 卡时，程序仅读取最先出现的卡片数据。

1.1 Descriptions of input variables

Variable	Type	Default	Description
tstart	real(c_double)	0.d+00	计算起始物理时间 (s)。
tend	real(c_double)	1.d+02	计算结束物理时间 (s)。
dtout	real(c_double)	1.d+01	计算结果输出间隔 (s)。
dtini	real(c_double)	1.d-08	ODE 求解器初始时间步长 (s)。
dtmin	real(c_double)	1.d-08	ODE 求解器最小时间步长 (s)。
dtmax	real(c_double)	1.d-01	ODE 求解器最大时间步长 (s)。

1.2 Input examples

缺省

2. XSOLV

XSOLV 卡片包含和计算模块调用、求解器选取/设置相关的控制变量。该卡片仅需输入一次，当 input 文件中出现多个 XSOLV 卡时，程序仅读取最先出现的卡片数据。

2.1 Description of input variables

Variable	Type	Default	Description
solver	character(len=20), dimension(nsolv)	'end'	包含'fluid'表示需求解流体动力学问题； 包含'htstr'表示需求解热构件问题； 包含'fuelrod'表示需求解燃料棒问题； 包含'pointcore'表示需求解点堆中子学问题。
nomp	integer(c_int)	1	OMP 并行区域线程数。
rt	real(c_double)	1.d-04	ODE 求解器的相对误差。
at	real(c_double), dimension(4)	1.d-06	ODE 求解器的绝对误差，其中： at(1)限制外部接管质流量求解的绝对误差 (kg/s)； at(2)限制自由液位高度求解的绝对误差 (m)； at(3)限制流体焓求解的绝对误差 (J/kg)； at(4)限制固体结构温度求解的绝对误差 (K)。
maxnef	integer(c_int)	7	The maximum number of error test failures allowed on one step.
maxcor	integer(c_int)	3	The maximum number of nonlinear solver iterations permitted per step.
mxsteps	integer(c_int)	1000000	The maximum number of steps to be taken by the solver in its attempt to reach the next output time.
solopt	integer(c_int)	1	用于选择 ODE 线性求解器的控制变量，其中： =1 表示调用 SUNLinSol_Dense(), Dense direct linear solver； =2 表示调用 SUNLinSol_PCG(), Preconditioned conjugate gradient iterative solver； =3 表示调用 SUNLinSol_SPBCGS(), Scaled-preconditioned BiCGStab iterative solver； =4 表示调用 SUNLinSol_SPGMR(), Scaled-preconditioned FGMRES iterative solver； =5 表示调用 SUNLinSol_SPGMR(), Scaled-preconditioned GMRES iterative solver； =6 表示调用 SUNLinSol_SPTFQMR(), Scaled-preconditioned TFQMR iterative solver。

2.2 Input examples

缺省

3. XPIPE

XPIPE 卡片包含在流体模块中构造 Pipe（管道）对象所需的相关变量，每个 Pipe 对应一张 XPIPE 卡片。

3.1 Description of input variables

Variable	Type	Default	Description
id	character(len=20)	-	Pipe 对象名称。
mat	character(len=20)	-	Pipe 中流体材料名称。
cate	character(len=20)	-	Pipe 种类名称，分为： ='round' 表示圆管； ='brods' 表示六边形光棒束通道； ='wrods' 表示六边形带绕丝棒束通道； ='freelevel' 表示自由液面； ='fill' 表示进口温度+质量流量边界节点，该型 Pipe 只能与一根 jun-flow 型接管的起点相连； ='break' 表示出口压力边界节点。
dhyd	real(c_double)	-	Pipe 的水力直径 (m)。
len	real(c_double)	-	Pipe 的总长度 (m)。
dir	real(c_double)	-	Pipe 轴线方向与水平夹角 θ 的正弦值 $\sin \theta$ ，表征 Pipe 的朝向，取 1.d0 表示竖直向上，取 -1.d0 为竖直向下 (-)。
areaz	real(c_double)	-	Pipe 的流通面积 (m ²)。
p2d	real(c_double)	-	棒束节距与棒径之比(P/D)，只有 'brods' 和 'wrods' 型 Pipe 需要 (-)。
sb2st	real(c_double)	-	棒束湿周与总湿周之比(S_b/S_t)，只有 'brods' 和 'wrods' 型 Pipe 需要 (-)。
nz	integer(c_int)	-	对 Pipe 划分的控制体数量，'freelevel'，'fill' 和 'break' 型 Pipe 的 nz 恒为 1，无需设置；其余类型 Pipe 的设置需满足 $nz \geq 2$ (-)。
tmp0	real(c_double)	-	Pipe 中流体初始温度 (K)。
p0	real(c_double)	-	Pipe 中流体初始压力 (Pa)。
sigid	character(len=20)	-	与 Pipe 相关信号名，只有 'fill' 型 Pipe 需要，用于控制其流体温度。

3.2 Input examples

缺省

4. XJUNC

XJUNC 卡片包含在流体模块中构造 Junc（接管）对象所需的相关变量，每个 Junc 对应一张 XJUNC 卡片。

4.1 Description of input variables

Variable	Type	Default	Description
cate	character(len=20)	-	Junc 种类，分为： ='jun-norm'表示普通接管； ='jun-head'表示含驱动压头的接管，该接管的驱动压头通过信号控制，质量流量通过 ODE 求解器求得； ='jun-flow'表示质量流量通过信号控制的接管。
pid_f	character(len=20)	-	与 Junc 起点相连的 Pipe 名称。
pid_t	character(len=20)	-	与 Junc 终点相连的 Pipe 名称。
sigid	character(len=20)	-	与 Junc 相关信号名，只有 'jun-head'型和 'jun-flow'型接管需要，分别用于控制其驱动压头和质量流量。
kfac	real(c_double)	0.d0	Junc 接管的局部阻力系数，所引起的压降为： $\Delta p_k = kfac \cdot \rho \bar{u} \bar{u} $

4.2 Input examples

缺省

5. XCORE

XCORE 卡片包含堆芯动力学计算所需的相关变量。该卡片仅需输入一次，当 input 文件中出现多个 XCORE 卡时，程序仅读取最先出现的卡片数据。

5.1 Description of input variables

Variable	Type	Default	Description
power0	real(c_double)	-	堆芯初始总功率 (W)。
lambda	real(c_double)	-	衰变常数，开启点堆中子动力学模型后需要 (s^{-1})。
beta	real(c_double)	-	缓发中子份额，开启点堆中子动力学模型后需要 (-)。
life	real(c_double)	-	瞬发中子寿命，开启点堆中子动力学模型后需要 (s)。

5.2 Input examples

缺省

6. XFUEL

XFUEL 卡片包含在固体结构模块中构造 Fuel（燃料芯块）对象所需的相关变量，Fuel 对象是 Fuelrod（燃料棒）对象的成员，每个 Fuel 对应一张 XFUEL 卡片。对于由单一材料制成的芯块(single-layer fuel model)以及径向上由多层不同材料构成的芯块(multi-layer fuel model)分别有各自的一套输入。

6.1 Description of input variables

Variable	Type	Default	Description
Shared input variables			
id	character(len=20)	-	Fuel 对象名称。
nlyr	integer(c_int)	-	Fuel 芯块的径向层数，其中： =1 表示其为 single-layer fuel model; ≥2 表示其为 multi-layer fuel model。
isfu	logical, dimension(maxnlyr)	.FALSE.	isfu(i)记录径向第 i 层芯块材料是否为发热体，参与堆芯总功率的分配，有.TRUE.和.FALSE.两种输入。
tmp0	real(c_double)	-	Fuel 芯块初始温度 (K)。
Unique input variables for single-layer fuel model			
mat	character(len=20)	-	Fuel 芯块材料名称。
ri	real(c_double)	-	Fuel 芯块中心孔半径 (m)。
ro	real(c_double)	-	Fuel 芯块外半径 (m)。
nr	integer(c_int)	-	Fuel 芯块节点数量 (-)。
Unique input variables for multi-layer fuel model			
mats	character(len=20), dimension(maxnlyr)	-	Fuel 芯块各层材料名称，只读取 1:nlyr 位输入。
ris	real(c_double), dimension(maxnlyr)	-	Fuel 芯块内各层界面径向位置，只读取 1:nlyr+1 位输入，其中第 1 位为芯块中心孔半径，第 nlyr+1 位为芯块外半径 (m)。
nrs	integer(c_int), dimension(maxnlyr)	-	Fuel 芯块各层节点数量，只读取 1:nlyr 位输入 (-)。

6.2 Input examples

6.2.1 Single-layer fuel model

6.2.2 Multi-layer fuel model

7. XCLAD

XCLAD 卡片包含在固体结构模块中构造 Clad（燃料包壳）对象所需的相关变量，Clad 对象是 Fuelrod（燃料棒）对象的成员，每个 Clad 对应一张 XCLAD 卡片。

7.1 Description of input variables

Variable	Type	Default	Description
id	character(len=20)	-	Clad 对象名称。
mat	character(len=20)	-	Clad 材料名称。
ri	real(c_double)	-	Clad 的内半径 (m)。
ro	real(c_double)	-	Clad 的外半径 (m)。
nr	integer(c_int)	-	Clad 的节点数量 (m)。
tmp0	real(c_double)	-	Clad 的初始温度 (K)。

7.2 Input examples

8. XFROD

XFROD 卡片包含在固体结构模块中组装 Fuelrod（燃料棒）对象所需的相关变量，每个 Fuelrod 对应一张 XFROD 卡片。

8.1 Description of input variables

Variable	Type	Default	Description
id	character(len=20)	-	Fuelrod 对象名称。
fid	character(len=20)	-	Fuel 芯块的 id。
hgap	real(c_double)	-	气隙的表面传热系数 ($\text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$)。
cid	character(len=20)	-	Clad 包壳的 id。
pid	character(len=20)	-	与该 Fuelrod 对象耦合的 Pipe 的 id。
pnode	integer(c_int)	-	与该 Fuelrod 对象耦合的 Pipe 的节点序号 (-)。
mltpl	integer(c_int)	-	该型 Fuelrod 的根数 (-)。
kr	real(c_double)	-	该 Fuelrod 的径向功率因子 (-)。
kz	real(c_double)	-	该 Fuelrod 的轴向功率因子 (-)。

8.2 Input examples

9. XTHBC

XTHBC 卡片包含在固体结构模块中构造 Thermbc（热边界）对象所需的相关变量，Thermbc 对象是 Htstr（热构件）对象的成员，每个 Thermbc 对应一张 XTHBC 卡片。

9.1 Description of input variables

Variable	Type	Default	Description
id	character(len=20)	-	Thermbc 对象名称。
cate	character(len=20)	-	Thermbc 对象类型，其中： ='temperature' 表示温度边界条件（第一类边界）； ='heatflux' 表示热流密度边界条件（第二类边界）； ='convective' 表示对流边界条件（第三类边界）； ='coupling' 表示流固耦合边界条件。
bcval	real(c_double), dimension(2)	-	Thermbc 边界值，其中： 当 cate='temperature' 时，读取 bcval(1) 的值作为边界温度； 当 cate='heatflux' 时，读取 bcval(1) 的值作为边界热流密度； 当 cate='convective' 时，读取 bcval(1) 的值作为对流换热系数，bcval(2) 的值作为对流流体温度； 当 cate='coupling' 时，bcval 的值无意义，赋 0.d0。
pid	character(len=20)	-	与该 Thermbc 对象耦合的 Pipe 的 id，当 cate 为 'coupling' 时才读取。
pnode	integer(c_int)	-	与该 Thermbc 对象耦合的 Pipe 的节点序号，当 cate 为 'coupling' 时才读取。(-)。

9.2 Input examples

缺省

10. XHSTR

XHSTR 卡片包含在固体结构模块中组装 Htstr（热构件）对象所需的相关变量，每个 Htstr 对应一张 XHSTR 卡片。对于由单一材料构成的热构件(single-layer heat structure model)以及径向上由多层不同材料构成的热构件(multi-layer heat structure model)分别有各自的一套输入。

10.1 Description of input variables

Variable	Type	Default	Description
Shared input variables			
id	character(len=20)	-	Htstr 对象名称。
nlyr	integer(c_int)	-	Htstr 对象的径向层数，其中： =1 表示其为 single-layer heat structure model; ≥2 表示其为 multi-layer heat structure model。
tmp0	real(c_double)	-	Htstr 材料初始温度 (K)。
mltpl	integer(c_int)	-	该 Htstr 的数量 (-)。
bcl	character(len=20)	-	左侧 Thermbc 热边界的 id。
bcr	character(len=20)	-	右侧 Thermbc 热边界的 id。
Unique input variables for single-layer heat structure model			
mat	character(len=20)	-	Htstr 结构材料名称。
ri	real(c_double)	-	Htstr 结构的内半径 (m)。
ro	real(c_double)	-	Htstr 结构的外半径 (m)。
nr	integer(c_int)	-	Htstr 结构的节点数量 (-)。
Unique input variables for multi-layer heat structure model			
mats	character(len=20), dimension(maxnlyr)	-	Htstr 结构各层材料名称，只读取 1:nlyr 位输入。
ris	real(c_double), dimension(maxnlyr)	-	Htstr 结构各层界面径向位置，只读取 1:nlyr+1 位输入，其中第 1 位为 Htstr 结构内半径，第 nlyr+1 位为 Htstr 结构外半径 (m)。
nrs	integer(c_int), dimension(maxnlyr)	-	Htstr 结构各层节点数量，只读取 1:nlyr 位输入 (-)。

10.2 Input examples

缺省

11.XSGNL

XSGNL 卡片包含创建 Signal（信号）对象所需的变量，每个 Signal 对应一张 XSGNL 卡片。其中 id 为'dtprint'和'corepow'的信号有固定用途，分别用于控制输出计算结果的时间步长和堆芯相对功率。

11.1 Description of input variables

Variable	Type	Default	Description
id	character(len=20)	-	Signal 对象名称。
cate	character(len=20)	-	Signal 对象种类，其中： ='constant'表示常量信号； ='lookup'表示时间表格信号。
sgnval	real(c_double)	-	信号值，当 cate='constant'时读取。
sgntab	real(c_double), dimension(2,maxtab)	-	时间-信号值表格，当 cate='lookup'时读取，其中： sgntab(1,:)为时间序列； sgntab(2,:)为信号值序列。

11.2 Input examples

缺省