

**Entwicklung und
Einsatz von Neutronen-
transportmethoden und
Unsicherheitsanalysen
für Reaktorkern-
berechnungen**

Entwicklung und Einsatz von Neutronen- transportmethoden und Unsicherheitsanalysen für Reaktorkern- berechnungen

Abschlussbericht

Winfried Zwermann
Alexander Aures
Wolfgang Bernnat
Jérémy Bousquet
Lucia Gallner
Nicole Guilliard
Bernard Krzykacz-Hausmann
Matthias Küntzel
Janis Lapins
Ihor Pasichnyk
Yann Perin
Kiril Velkov
Matias Zilly

Februar 2015

Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrunde liegende F&E-Vorhaben RS1503 wurde im Auftrag des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie (BMWi) durchgeführt.

Die Arbeiten wurden von der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH ausgeführt. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Auftragnehmer.

Der Bericht gibt die Auffassung und Meinung des Auftragnehmers wieder und muss nicht mit der Meinung des Auftraggebers übereinstimmen.

GRS - 382
ISBN 978-3-944161-63-1

Deskriptoren

Gekoppelte Codes, Kernverhalten, Monte-Carlo, Neutronentransport, nukleare Daten, Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse

Kurzfassung

Der vorliegende Bericht dokumentiert die im RS-Forschungsvorhaben RS1503 „Entwicklung und Einsatz von Neutronentransportmethoden und Unsicherheitsanalysen für Reaktorkernberechnungen“ erreichten Forschungs- und Entwicklungsziele. Das übergeordnete Ziel des Projekts ist die Entwicklung, Validierung und Anwendung von Neutronentransportmethoden und Unsicherheitsanalysen für Reaktorkernberechnungen. Diese Rechenmethoden sollen im Wesentlichen für Fragestellungen, die sich mit dem Kernverhalten von Leichtwasserreaktoren und innovativen Reaktorkonzepten beschäftigen, eingesetzt werden. Dazu beitragende Einzelzielsetzungen sind die Weiterentwicklung, Validierung und Anwendung von deterministischen und stochastischen Rechenprogrammen, und von Methoden zu Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen, sowie die Erprobung künstlicher neuronaler Netze, zur Bereitstellung einer vollständigen nuklearen Rechenkette. Diese umfasst das Prozessieren von nuklearen Basisdaten, die Erzeugung von Multigruppen-Daten für Diffusions- und Transportcodes, die Erzeugung von Referenzlösungen für stationäre Zustände mit Monte-Carlo-Codes, die Durchführung von gekoppelten 3D-Ganzkernanalysen in Diffusionsnäherung und auch mit anderen deterministischen Methoden und Monte-Carlo-Transportprogrammen, sowie Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen mit dem Ziel der Propagation von Unsicherheiten durch die gesamte Berechnungskette von der Brennelement-Spektral- und Abbrandberechnung bis zur gekoppelten Transientenanalyse. Diese Rechenkette soll für Leichtwasserreaktoren, aber auch für innovative Reaktorkonzepte einsetzbar sein und muss daher entsprechend umfassend an Benchmarks und kritischen Experimenten validiert werden.

Abstract

This report documents the research and development goals reached within the reactor safety research project RS1503 “Development and Application of Neutron Transport Methods and Uncertainty Analyses for Reactor Core Calculations”. The superordinate goal of the project is the development, validation, and application of neutron transport methods and uncertainty analyses for reactor core calculations. These calculation methods will mainly be applied to problems related to the core behaviour of light water reactors and innovative reactor concepts. The contributions of this project towards achieving this goal are the further development, validation, and application of deterministic and stochastic calculation programmes and of methods for uncertainty and sensitivity analyses, as well as the assessment of artificial neural networks, for providing a complete nuclear calculation chain. This comprises processing nuclear basis data, creating multi-group data for diffusion and transport codes, obtaining reference solutions for stationary states with Monte Carlo codes, performing coupled 3D full core analyses in diffusion approximation and with other deterministic and also Monte Carlo transport codes, and implementing uncertainty and sensitivity analyses with the aim of propagating uncertainties through the whole calculation chain from fuel assembly, spectral and depletion calculations to coupled transient analyses. This calculation chain shall be applicable to light water reactors and also to innovative reactor concepts, and therefore has to be extensively validated with the help of benchmarks and critical experiments.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Zielsetzung.....	5
3	AP1: Weiterentwicklung, Validierung und Anwendung von deterministischen Berechnungsmethoden.....	7
3.1	Integration von nTRACER in das GRS-Programmsystem.....	7
3.2	Implementierung einer generischen Datenbank für Wirkungsquerschnitte und Ausgabedaten.....	17
3.3	Optimierung des Neutronendiffusionsprogramms QUABOX/CUBBOX	21
3.4	Weiterentwicklung und Anwendung der SPH-Methode mit QUABOX/CUBBOX	28
3.5	Rechenbenchmark mit IRSN	33
3.6	Anwendung von DYN3D für schnelle Anordnungen.....	39
4	AP2: Weiterentwicklung, Validierung und Anwendung von Monte- Carlo-Berechnungsmethoden.....	45
4.1	Weiterentwicklung und Validierung des Monte-Carlo-Programms MCNP für hohe Ortsauflösung	45
4.2	Verwendung der Monte-Carlo-Methode für Transientenberechnungen....	88
4.3	Erstellung von nuklearen Daten	92
5	AP3: Weiterentwicklung, Validierung und Anwendung von Methoden zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse.....	101
5.1	Ergebnisse zum UAM-LWR-Benchmark Phase 1	101
5.2	Unsicherheitsanalysen für eine Kerntransientenberechnung	104
5.3	Kovarianzdaten für die Multiplizität verzögerter Neutronen	109
5.4	Die „schnelle GRS-Methode“	113
5.5	Die XSUSA-Benchmark-Suite.....	120
5.6	Unsicherheitsanalysen für gasgekühlte Hochtemperaturreaktoren	129

6	AP4: Einsatz künstlicher neuronaler Netze zur Berechnung lokaler Parameter im Reaktorkern	137
6.1	Theoretischer Überblick.....	137
6.2	Modellierung von nuklearen Daten mit Feed-Forward-Netzwerken.....	139
6.3	Diskussion	149
7	Arbeiten zum EU-Projekt NURESAFE	151
7.1	Codeintegration und -Kopplung	151
7.2	SWR-ATWS-Simulation mit Unsicherheitsanalyse.....	153
8	Zusammenfassung	159
	Literaturverzeichnis	163
	Abbildungsverzeichnis	171
	Tabellenverzeichnis	181
Anhänge		
A	Technische Notizen	183
B	Veröffentlichungen	183
C	NURESAFE-Berichte	187

1 Einleitung

Die Weiterentwicklung, Validierung und Anwendung von deterministischen und stochastischen Rechenprogrammen, und von Methoden zu Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen, sowie die Erprobung künstlicher neuronaler Netze, zur Bereitstellung einer vollständigen nuklearen Rechenkette sind Hauptgegenstand des Reaktorsicherheitsforschungsvorhabens RS1503 der GRS. Der vorliegende Bericht dokumentiert die durchgeführten Arbeiten.

In Deutschland werden zur Stromerzeugung aus Kernenergie Leichtwasserreaktoren betrieben. Für diesen Reaktortyp haben sich zur Simulation von stationären und zeitabhängigen Kernzuständen reaktorphysikalische Rechenmethoden etabliert, die simultan den Neutronentransport, die Thermofluiddynamik und das thermische Verhalten der Brennstäbe beschreiben. Dies wird normalerweise mit gekoppelten Rechenprogrammen, die den Neutronentransport dreidimensional in Diffusionsnäherung und die Thermofluiddynamik des Kühlmittels mit einer auf der Lösung der Erhaltungsgleichungen für Masse, Energie und Impuls basierenden Berechnung der ein- und mehrphasigen Kühlmittelzustände beschreiben, durchgeführt.

Zur Lösung der Neutronendiffusionsgleichungen werden meist nodale Verfahren verwendet, mit denen eine hohe Genauigkeit für die Berechnung der Neutronenflüsse und der Leistung in den Volumenelementen des Rechengitters möglich ist. Diese Volumenelemente sind meist vertikale Abschnitte von Brennelementen, über die die in Wirklichkeit stark ortsabhängigen Materialeigenschaften gemittelt werden. Zusätzlich zu dieser räumlichen Homogenisierung wird die Energieabhängigkeit der nuklearen Daten auf wenige, oft nur zwei Energiegruppen reduziert. Diese im Orts- und Energieraum stark vereinfachten Parameter werden gewöhnlich in ein- oder zweidimensionalen Vorausrechnungen, in denen die tatsächliche Umgebung der Brennelemente im Reaktor nur näherungsweise berücksichtigt werden kann, vorab bestimmt. Unter der Annahme, dass sich die Eigenschaften benachbarter Brennelemente nicht stark unterscheiden, ist zur Beschreibung des Neutronentransports die Diffusionsnäherung gerechtfertigt. Mit dieser Methodik können auf moderner Rechner-Hardware stationäre Reaktorzustände und Kerntransienten problemlos beschrieben werden.

Mit fortlaufender Optimierung der Beladestrategien, MOX-Einsatz und Erhöhung der Brennstoffanreicherung und des Brennelement-Abbrands, sowie insbesondere beim

Betrieb mit teilweise eingefahrenen Absorberelementen werden die Reaktorkerne zunehmend heterogener; dadurch sind die Voraussetzungen zur Anwendung der Diffusionsnäherung immer weniger erfüllt. Von besonderer Bedeutung ist die genaue Berechnung der Brennstab-Leistungsverteilungen, die für die sicherheitstechnische Bewertung maßgebend ist.

Die immense Rechenleistung heutiger Computer ermöglicht Reaktorberechnungen in vertretbarer Rechenzeit unter Fallenlassen der Diffusionsnäherung auf wesentlich feineren Orts- und Energiegittern. So wird typischerweise die räumliche Homogenisierung anstatt über axiale Brennelementabschnitte über Abschnitte von Brennstabzellen durchgeführt, und anstelle der für nodale Verfahren typischen zwei Energiegruppen werden Daten mit mehr Energiegruppen (typischerweise zehn oder mehr) verwendet. Nötig ist der Einsatz solcher Verfahren z. B. für die Berechnung von Forschungsreaktoren, die einerseits wesentlich kompakter, andererseits i. A. wesentlich heterogener als Leichtwasser-Leistungsreaktoren sind. Hier hat die GRS bereits in den Vorgängervorhaben RS1128, RS1160 und RS1183 die zeitabhängigen Multigruppen-Neutronentransportcodes DORT-TD /PAU 03a/ und TORT-TD /SEU 04/ entwickelt und für stabweise 3D-Analysen mit Berücksichtigung der thermohydraulischen Rückwirkungseffekte aus ATHLET-Modellkomponenten eingesetzt /SEU 08/. Diese beiden Codes verwenden die sog. Methode der Diskreten Ordinaten. Näherungen bestehen hier im Wesentlichen in der Abbildung der tatsächlichen Energieabhängigkeit der nuklearen Daten auf eine begrenzte Anzahl von Energiegruppen, sowie die Abbildung der räumlichen Materialverteilung auf reguläre Geometrie; gegenwärtig sind in DORT-TD und TORT-TD kartesische und Zylindergeometrie implementiert.

Zur Validierung deterministischer Berechnungsmethoden werden häufig, neben der Nachrechnung von Experimenten, Referenzberechnungen für stationäre Zustände mit Monte-Carlo-Programmen herangezogen. Diese benötigen praktisch keine Vereinfachung in der räumlichen Beschreibung der Kernanordnungen; ebenso entfällt die Notwendigkeit, die kontinuierliche Energieabhängigkeit der nuklearen Daten auf Gruppen zu reduzieren. Während die Berechnung von Anordnungen mit einer begrenzten Anzahl von Materialien bei vorgegebenen thermodynamischen Bedingungen, wie kritische Experimente oder Reaktoren im leistungslosen Betrieb, mit der Monte-Carlo-Methode bereits Standard ist, wird in letzter Zeit verstärkt dazu übergegangen, stationäre Leistungszustände durch Kopplung von Monte-Carlo-Programmen, häufig dem Code MCNP /PEL 13/, mit Thermofluidynamik-Codes zu bestimmen /PUE 09, SAN 09/. Da-

zu muss die betrachtete Anordnung in eine äußerst große Anzahl von Zonen mit unterschiedlichen thermodynamischen Parametern aufgeteilt werden; dies wird mit MCNP erst durch Modifikationen in der Verwaltung der Daten handhabbar. Die Durchführbarkeit solcher Analysen wurde in einer Kooperation zwischen dem Institut für Kernenergetik und Energiesysteme (IKE) der Universität Stuttgart und GRS demonstriert /BER 10/. Gegenwärtig werden Monte-Carlo-Kritikalitätsberechnungen praktisch ausschließlich für stationäre Zustände angewandt, wobei Untersuchungen über die Durchführbarkeit von Transientenberechnungen bereits angestellt werden /SJE 10/.

Bei dem kontinuierlichen Bestreben, Ungenauigkeiten in den Rechenmethoden, die durch Näherungsmethoden eingeführt werden, zu reduzieren, kommt gleichzeitig der Bestimmung von Unsicherheiten, die auf der unvollständigen Kenntnis von Eingangsparametern beruhen, höchste Bedeutung zu. Hinsichtlich Unsicherheiten in den thermodynamischen Parametern werden in der GRS seit langem Analysen in gekoppelten Neutronendiffusions-/Thermofluidynamikrechnungen mit der Sampling-basierten GRS-Methode, die im Code SUSA /KRZ 94/ implementiert ist, durchgeführt.

Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen bezüglich Unsicherheiten in den nuklearen Basisdaten wird international zunehmend Beachtung geschenkt. Die Bedeutung von Unterschieden in den nuklearen Daten für die Ergebnisse von Leistungsverteilungen in Reaktorberechnungen wurde von der GRS anhand eines internationalen Rechenbenchmarks /KOZ 06/ demonstriert /LAN 09/. Um den Einfluss von Unsicherheiten in den nuklearen Daten auf die Ergebnisse von Kernberechnungen systematisch zu quantifizieren, beteiligt sich die GRS intensiv an internationalen Benchmarks zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse /NEA 07, UAC 08/. Eine besondere Herausforderung besteht darin, die Propagation solcher Unsicherheiten durch die mehrstufige nukleare Rechenkette aus Spektral- und Abbrandrechnungen, Erzeugung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten und stationären oder transienten gekoppelten Kernberechnungen korrekt nachzuvollziehen, wie es im UAM-LWR-Benchmark angestrebt wird. Da die Sampling-basierte Vorgehensweise den einzigen bereits gangbaren Weg darstellt, dieses Ziel zu erreichen, nimmt die GRS hier durch ihr eigens zu diesem Zweck entwickeltes Programm XSUSA /ZWE 09/ eine herausragende Stellung ein. Dazu ist allerdings für die Kerntransientenanalysen in dreidimensionaler Geometrie, auch auf Multiprozessorsystemen, weiterhin der Einsatz von schnelllaufenden Programmen erforderlich; hierzu hat sich in der GRS der Diffusionscode QUABOX/CUBBOX bewährt /LAN 77a, LAN 77b, QC 78/.

Zusätzlich zur Weiterentwicklung und Anwendung etablierter Rechenverfahren zur Beschreibung des Neutronentransports, die in deterministischen und Monte-Carlo-Rechenprogrammen implementiert sind, sowie der Bestimmung von Ergebnisunsicherheiten, die auf Fertigungstoleranzen, unvollständige Kenntnis thermodynamischer Parameter und Unsicherheiten in den nuklearen Basisdaten zurückzuführen sind, ist die GRS auch bestrebt, die Anwendbarkeit innovativer Methoden zu untersuchen. Hier besteht bereits Erfahrung mit dem Einsatz von künstlichen neuronalen Netzen, die nun auch spezifisch für Untersuchungen zum Kernverhalten angewendet werden soll. Schließlich wird besonderer Wert auf die Zusammenarbeit mit nationalen und internationalen Kooperationspartnern gelegt, die teilweise im Vorgängerprojekt bereits begonnen oder geplant wurden, sowie auf den Einsatz der entwickelten Methoden auf Reaktorkonzepte, die über die Hauptanwendung für Leichtwasserreaktoren hinausgehen.

2 Zielsetzung

Die in der Einleitung dargelegten grundlegenden Fragestellungen zur Beschreibung des Kernverhaltens unter Einsatz von deterministischen und stochastischen Neutronentransportmethoden für LWR und innovative Reaktorkonzepte, sowie die Methoden für begleitende Unsicherheitsanalysen bzw. über etablierte Rechenverfahren hinausgehende Methoden werden in diesem Abschnitt durch die Formulierung von Einzelzielsetzungen für das Forschungsvorhaben RS1503 konkretisiert.

Dieses umfasst die Prozessierung von nuklearen Basisdaten, die Erzeugung von Multigruppen-Daten für Diffusions- und Transportcodes, die Erzeugung von Referenzlösungen für stationäre Zustände mit Monte-Carlo-Codes, die Durchführung von gekoppelten 3D-Ganzkernanalysen in Diffusionsnäherung bzw. mit deterministischen und Monte-Carlo-Transportprogrammen, sowie Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen mit dem Ziel der Propagation von Unsicherheiten durch die gesamte Berechnungskette von der Brennelement-Spektral- und Abbrandberechnung bis zur gekoppelten Transientenanalyse. Diese Rechenkette soll für Leichtwasserreaktoren, aber auch für innovative Reaktorkonzepte einsetzbar sein und muss daher entsprechend umfassend an Benchmarks und kritischen Experimenten validiert werden. Daraus ergeben sich folgende Einzelzielsetzungen.

- Methodische Weiterentwicklung, Validierung und Anwendung von deterministischen Berechnungsmethoden: Optimierung des GRS-Codes QUABOX/CUBOX (Diffusion) bzgl. der Rechengenauigkeit, der Ausführungsgeschwindigkeit, des Einsatzbereiches und der Benutzerfreundlichkeit sowie Vergleich von Ergebnissen für gekoppelte stationäre Analysen mit entsprechenden Monte-Carlo-Ergebnissen. Die ursprünglich vorgesehene Anpassung des GRS-Codes TORT-TD für Hexagonalgeometrie wird vorerst zurückgestellt. Stattdessen beteiligt sich die GRS am EU-Projekt „Nuclear Reactor Safety Simulation Platform (NURESAFE)“, dessen Ziele die Entwicklung und Ausführung von Simulationsketten zur Analyse von ATWS-Transienten in Siedewasserreaktoren einschließlich der Quantifizierung von Ergebnisunsicherheiten sind. Die Mitarbeit der GRS erfolgt in den Arbeitspaketen „Testumgebung für integrierte Kopplung und Unsicherheits- und Sensitivitätsmethoden“ und „SWR-ATWS mit Unsicherheitsquantifizierung“. Um dennoch in Zukunft Reaktorkernanalysen auch für Systeme jenseits von LWR-Kernanordnungen durchführen zu können (haupt-

sächlich mit hexagonaler Geometrie), wurden die Codes DYN3D /GRU 00/ und nTRACER /SNU 09/ in das nukleare Berechnungssystem der GRS aufgenommen.

- Methodische Weiterentwicklung, Validierung und Anwendung von Monte-Carlo-Berechnungsmethoden: Weiterentwicklung der Kopplung von Monte-Carlo-Neutronentransport- und thermofluidodynamischen Codes, Entwicklung von Methoden für zeitabhängige Berechnungen mit der Monte-Carlo-Methode, Erzeugung und Validierung von nuklearen Referenzdaten, Teilnahme an entsprechenden internationalen Benchmarks.
- Methodische Weiterentwicklung, Validierung und Anwendung von Methoden zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse: Vervollständigung des Programms XSUSA zur Unsicherheitsanalyse mit nuklearen Daten, Erweiterung auf kinetische Parameter, Unsicherheitsanalysen für Kerntransientenberechnungen, Propagation der Unsicherheiten durch die vollständige nukleare Berechnungskette (Spektral-/Abbrandberechnungen, Wirkungsquerschnittserzeugung, gekoppelte stationäre und zeitabhängige Kernberechnungen), Kombination von Unsicherheiten in nuklearen Daten und technologischen Parametern, Teilnahme an entsprechenden internationalen Benchmarks. Dieses Arbeitspaket wurde ebenfalls bzgl. der Beteiligung am Arbeitspaket „SWR-ATWS mit Unsicherheitsquantifizierung“ des EU-Projekts NURESAFE erweitert.
- Einsatz künstlicher neuronaler Netze zur Berechnung lokaler Parameter im Reaktorkern: Entwicklung von Lösungen mit neuronalen Netzen für lokale Parameter im Reaktorkern bei unterschiedlichen Betriebszuständen aus vorgegebenen Ausgangsparametern.

Die folgenden Kapitel beschreiben die durchgeführten Arbeiten zu diesen Arbeitspaketen.

3 AP1: Weiterentwicklung, Validierung und Anwendung von deterministischen Berechnungsmethoden

Der folgende Abschnitt beschreibt die durchgeführten Arbeiten am nuklearen Programmsystem der GRS bezüglich deterministischer Rechenmethoden. Dies sind die Integration des direkten Ganzkern-Transport-Codes nTRACER, die Erstellung einer generischen Datenbank für Wirkungsquerschnitte und Ausgabedaten, Optimierungsarbeiten am GRS-Neutronendifusionsprogramm QUABOX/CUBBOX, die Fortsetzung von Arbeiten zur SPH-Methode, die Durchführung eines Rechenbenchmarks mit IRSN, und die Anwendung des nodalen Codes DYN3D für schnelle Anordnungen.

3.1 Integration von nTRACER in das GRS-Programmsystem

Zur Durchführung von deterministischen stationären und transienten Reaktorberechnungen ohne die Notwendigkeit der räumlichen Homogenisierung von Teilbereichen des Reaktors (üblicherweise Brennelementen oder Stabzellen) wurde das Rechenprogramm nTRACER /SNU 09/ in das nukleare Programmsystem der GRS aufgenommen. Dabei handelt es sich um eine Entwicklung des Department of Nuclear Engineering der Universität Seoul, die auf den Konzepten des federführend vom Korean Atomic Energy Research Institute (KAERI) geschaffenen Codes DeCART beruht. Wie dieser verwendet nTRACER für die Berechnung der Neutronenfluss- und Leistungsverteilung in radialer Richtung die Planare Methode der Charakteristiken (Planar MOC), während zur Beschleunigung der Konvergenz und zur Kopplung an die axiale Dimension die Coarse-Mesh-Finite-Difference-(CMFD)-Methode benutzt wird. Bei der MOC können Multigruppen-Wirkungsquerschnittsbibliotheken ohne Homogenisierung über Stabzellen verwendet werden, weshalb nTRACER auch ein direkter Ganzkern-Transport-Code genannt wird. Der nTRACER-Code befindet sich noch in Entwicklung, daher sei zur Referenz bzgl. Theorie und Methodik auf die Dokumentation von DeCART verwiesen /ANL 05/.

Stand-Alone-nTRACER-Berechnungen ohne thermohydraulische Rückwirkungen

Als erster Anwendungsfall wurde das C5G7-Benchmark /NEA 03/ in drei Dimensionen und bei stationären, unkontrollierten Bedingungen mit nTRACER nachgerechnet; die Ergebnisse wurden mit einer MCNP-Referenzlösung (Monte Carlo) und Ergebnissen

des GRS-Codes TORT-TD (deterministisch, diskrete Ordinaten) nachgerechnet. Im C5G7-Benchmark wird eine 2x2-Brennelemente-Anordnung mit für Leichtwasserreaktoren typischen UO₂ und MOX-Brennelementen betrachtet. UO₂ und MOX Brennelemente sind schachbrettartig angeordnet und sowohl radial wie auch axial von Reflektor (Moderator) umgeben. Das Brennelement-Layout ist in Abb. 3.1 dargestellt. Untersucht wurden der effektive Multiplikationsfaktor für die Anordnung sowie die axial gemittelte StableLeistungsverteilung.

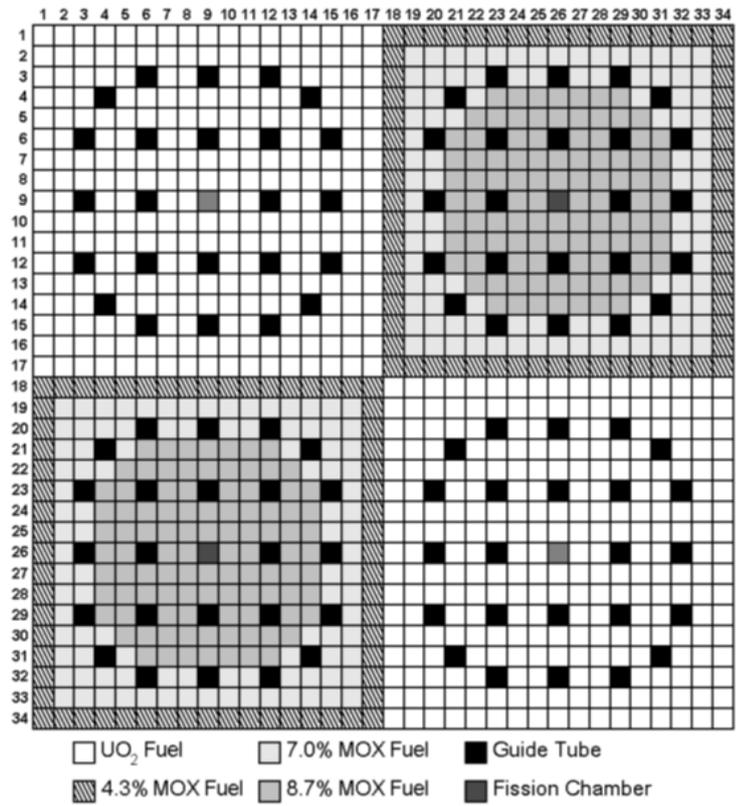


Abb. 3.1 Brennelement-Layout des C5G7-Benchmarks

Tab. 3.1 Rechenergebnisse für das C5G7-Benchmark

	MCNP	nTRACER	TORT-TD
k-eff	1.14308	1.14344	1.14092
Abweichung zu MCNP:			
k-eff	-	0.00036	-0.00216
Stableistung (max.)	-	1.085 %	1.489 %
Stableistung (1 σ)	-	0.340 %	0.448 %

Die mit den drei Programmen berechneten Multiplikationsfaktoren sind in Tab. 3.1 dargestellt, ebenso wie die Abweichungen der deterministischen Lösungen zur Monte-Carlo-Referenzlösung. Mit nTRACER ergibt sich eine ausgezeichnete Übereinstimmung mit der MCNP-Referenzlösung.

Trotz der hohen Rechengenauigkeit ist die Laufzeit von nTRACER gering. Mit den gewählten Eingabeparametern benötigt die Rechnung auf einem Linux-Cluster mit 3-GHz-CPU's zwischen 6½ min (1 Prozessor) und 102 s (8 Prozessoren auf 1 Rechenknoten). Die deutliche Rechenzeiteinsparung wird durch die hohe Parallelisierbarkeit der planaren MOC erreicht. Zum Vergleich benötigt die entsprechende TORT-TD-Rechnung mehrere Tage Rechenzeit.

2.201	2.204	2.214	2.226	2.229	2.230	2.187	2.149	2.119	2.056	2.000	1.948	1.855	1.754	1.632	1.483	1.282	1.317	1.065	0.940	0.867	0.814	0.770	0.715	0.665	0.622	0.571	0.526	0.485	0.439	0.399	0.378	0.410	0.599
2.204	2.215	2.240	2.277	2.304	2.370	2.257	2.216	2.247	2.121	2.063	2.070	1.919	1.795	1.653	1.491	1.280	1.298	1.347	1.175	1.098	1.052	1.046	0.923	0.854	0.841	0.736	0.675	0.658	0.568	0.506	0.471	0.517	0.591
2.214	2.240	2.314	2.441	2.468	0.000	2.381	2.331	0.000	2.233	2.175	0.000	2.057	1.927	1.711	1.511	1.285	1.293	1.326	1.183	1.177	1.120	0.000	0.952	0.871	0.000	0.756	0.690	0.000	0.607	0.543	0.476	0.509	0.587
2.226	2.277	2.441	0.000	2.496	2.451	2.296	2.246	2.287	2.150	2.098	2.140	2.076	0.000	1.810	1.539	1.293	1.295	1.338	1.265	0.000	1.113	1.129	0.961	0.884	0.877	0.762	0.701	0.704	0.589	0.000	0.513	0.514	0.587
2.229	2.304	2.468	2.496	2.404	2.425	2.281	2.233	2.274	2.138	2.085	2.119	2.002	1.970	1.829	1.560	1.296	1.297	1.364	1.290	1.183	1.149	1.086	0.933	0.859	0.855	0.741	0.681	0.679	0.613	0.538	0.518	0.524	0.587
2.230	2.370	0.000	2.451	2.425	0.000	2.344	2.299	0.000	2.202	2.144	0.000	2.024	1.935	0.000	1.609	1.300	1.298	1.427	0.000	1.281	1.146	0.000	0.986	0.904	0.000	0.787	0.715	0.000	0.621	0.577	0.000	0.550	0.587
2.187	2.257	2.380	2.296	2.281	2.344	2.218	2.178	2.221	2.087	2.031	2.052	1.904	1.815	1.765	1.531	1.276	1.277	1.339	1.225	1.151	1.043	1.039	0.903	0.836	0.835	0.723	0.662	0.655	0.563	0.523	0.489	0.516	0.580
2.149	2.216	2.331	2.246	2.233	2.298	2.178	2.140	2.183	2.051	1.996	2.015	1.867	1.778	1.732	1.507	1.257	1.258	1.318	1.201	1.127	1.023	1.020	0.890	0.825	0.823	0.714	0.654	0.645	0.555	0.514	0.480	0.510	0.575
2.119	2.247	0.000	2.287	2.274	0.000	2.221	2.183	0.000	2.094	2.036	0.000	1.906	1.813	0.000	1.536	1.245	1.244	1.365	0.000	1.190	1.076	0.000	0.945	0.870	0.000	0.759	0.690	0.000	0.590	0.541	0.000	0.532	0.571
2.056	2.121	2.233	2.150	2.138	2.202	2.087	2.051	2.094	1.968	1.916	1.936	1.794	1.710	1.668	1.452	1.212	1.214	1.275	1.165	1.093	0.993	0.993	0.866	0.804	0.804	0.697	0.639	0.631	0.542	0.503	0.471	0.499	0.563
2.000	2.063	2.175	2.098	2.085	2.144	2.031	1.996	2.036	1.916	1.866	1.887	1.754	1.674	1.631	1.419	1.185	1.188	1.249	1.144	1.078	0.980	0.977	0.852	0.791	0.791	0.686	0.630	0.623	0.537	0.500	0.467	0.494	0.556
1.948	2.070	0.000	2.140	2.119	0.000	2.052	2.015	0.000	1.936	1.887	0.000	1.787	1.713	0.000	1.434	1.163	1.166	1.287	0.000	1.163	1.045	0.000	0.906	0.834	0.000	0.730	0.665	0.000	0.580	0.540	0.000	0.516	0.551
1.855	1.919	2.057	2.076	2.002	2.024	1.904	1.868	1.906	1.794	1.754	1.787	1.692	1.670	1.560	1.337	1.116	1.123	1.191	1.136	1.042	1.019	0.971	0.836	0.774	0.774	0.673	0.620	0.621	0.561	0.493	0.477	0.483	0.540
1.754	1.795	1.927	0.000	1.970	1.935	1.815	1.778	1.813	1.710	1.674	1.713	1.670	0.000	1.474	1.261	1.067	1.080	1.130	1.081	0.000	0.963	0.982	0.842	0.779	0.776	0.678	0.626	0.631	0.530	0.000	0.465	0.466	0.531
1.632	1.653	1.711	1.810	1.829	0.000	1.765	1.732	0.000	1.668	1.631	0.000	1.560	1.474	1.318	1.174	1.013	1.038	1.087	0.989	0.998	0.959	0.000	0.826	0.762	0.000	0.669	0.614	0.000	0.545	0.489	0.430	0.459	0.527
1.483	1.491	1.511	1.539	1.560	1.609	1.531	1.507	1.536	1.452	1.419	1.434	1.337	1.261	1.174	1.079	0.953	1.007	1.094	0.988	0.945	0.918	0.923	0.823	0.769	0.761	0.672	0.620	0.606	0.528	0.472	0.440	0.478	0.535
1.282	1.280	1.285	1.293	1.297	1.300	1.276	1.257	1.245	1.212	1.185	1.163	1.116	1.068	1.013	0.953	0.878	1.015	0.910	0.856	0.820	0.788	0.757	0.712	0.669	0.631	0.585	0.542	0.504	0.459	0.420	0.397	0.420	0.575
1.317	1.298	1.293	1.295	1.297	1.298	1.277	1.258	1.244	1.214	1.188	1.166	1.123	1.080	1.038	1.007	1.015	0.795	0.789	0.771	0.750	0.725	0.699	0.659	0.621	0.587	0.544	0.505	0.470	0.428	0.394	0.373	0.389	0.500
1.065	1.347	1.326	1.338	1.364	1.427	1.339	1.318	1.364	1.275	1.249	1.288	1.191	1.130	1.087	1.094	0.910	0.789	0.825	0.830	0.825	0.810	0.806	0.739	0.696	0.678	0.612	0.568	0.545	0.485	0.441	0.413	0.423	0.525
0.940	1.175	1.183	1.265	1.290	0.000	1.226	1.201	0.000	1.165	1.144	0.000	1.136	1.081	0.989	0.988	0.856	0.771	0.830	0.863	0.897	0.884	0.000	0.798	0.751	0.000	0.662	0.614	0.000	0.534	0.487	0.439	0.437	0.531
0.867	1.098	1.177	0.000	1.183	1.281	1.151	1.127	1.190	1.093	1.078	1.163	1.042	0.000	0.998	0.945	0.820	0.750	0.825	0.897	0.000	0.888	0.848	0.767	0.721	0.706	0.636	0.593	0.578	0.538	0.000	0.463	0.442	0.528
0.814	1.052	1.120	1.113	1.149	1.146	1.043	1.023	1.076	0.993	0.980	1.045	1.019	0.963	0.959	0.918	0.788	0.725	0.810	0.884	0.889	0.838	0.822	0.748	0.705	0.690	0.623	0.580	0.564	0.512	0.491	0.461	0.440	0.517
0.770	1.046	0.000	1.129	1.086	0.000	1.039	1.020	0.000	0.993	0.977	0.000	0.971	0.983	0.000	0.923	0.757	0.699	0.806	0.000	0.848	0.822	0.000	0.750	0.708	0.000	0.627	0.583	0.000	0.507	0.471	0.000	0.442	0.503
0.715	0.923	0.952	0.961	0.933	0.986	0.903	0.890	0.945	0.866	0.852	0.906	0.836	0.842	0.826	0.823	0.712	0.659	0.739	0.798	0.767	0.748	0.750	0.688	0.651	0.640	0.577	0.537	0.520	0.464	0.430	0.423	0.410	0.481
0.665	0.854	0.871	0.884	0.859	0.904	0.836	0.825	0.870	0.804	0.791	0.834	0.774	0.779	0.762	0.769	0.669	0.621	0.696	0.751	0.721	0.705	0.708	0.651	0.618	0.607	0.549	0.511	0.494	0.440	0.407	0.401	0.390	0.458
0.622	0.841	0.000	0.877	0.855	0.000	0.835	0.823	0.000	0.804	0.791	0.000	0.774	0.776	0.000	0.761	0.631	0.587	0.678	0.000	0.706	0.690	0.000	0.640	0.607	0.000	0.540	0.502	0.000	0.434	0.400	0.000	0.382	0.436
0.571	0.736	0.757	0.762	0.741	0.787	0.723	0.714	0.759	0.697	0.686	0.730	0.673	0.678	0.669	0.672	0.585	0.544	0.612	0.662	0.636	0.623	0.627	0.577	0.549	0.540	0.488	0.455	0.441	0.392	0.363	0.359	0.348	0.409
0.526	0.675	0.690	0.701	0.681	0.715	0.662	0.654	0.690	0.639	0.630	0.666	0.620	0.626	0.614	0.620	0.542	0.505	0.568	0.615	0.593	0.580	0.583	0.537	0.511	0.502	0.455	0.424	0.411	0.367	0.340	0.335	0.325	0.382
0.485	0.658	0.000	0.704	0.679	0.000	0.655	0.645	0.000	0.631	0.623	0.000	0.621	0.631	0.000	0.606	0.504	0.470	0.545	0.000	0.578	0.564	0.000	0.520	0.494	0.000	0.441	0.411	0.000	0.358	0.332	0.000	0.313	0.356
0.439	0.568	0.607	0.589	0.613	0.621	0.563	0.555	0.590	0.542	0.537	0.580	0.561	0.530	0.545	0.528	0.459	0.428	0.485	0.534	0.538	0.512	0.507	0.464	0.440	0.434	0.392	0.367	0.358	0.325	0.311	0.294	0.280	0.326
0.399	0.506	0.543	0.000	0.538	0.577	0.523	0.514	0.541	0.503	0.500	0.540	0.493	0.000	0.489	0.472	0.420	0.394	0.441	0.487	0.000	0.491	0.471	0.430	0.407	0.400	0.363	0.340	0.332	0.311	0.000	0.268	0.254	0.298
0.378	0.471	0.476	0.513	0.518	0.000	0.489	0.480	0.000	0.471	0.467	0.000	0.477	0.465	0.430	0.440	0.397	0.373	0.413	0.439	0.463	0.461	0.000	0.423	0.401	0.000	0.359	0.335	0.000	0.294	0.268	0.240	0.234	0.275
0.410	0.517	0.509	0.514	0.524	0.550	0.516	0.510	0.532	0.499	0.494	0.516	0.483	0.466	0.459	0.478	0.420	0.389	0.423	0.437	0.442	0.440	0.442	0.410	0.390	0.382	0.348	0.325	0.313	0.280	0.254	0.234	0.230	0.264
0.599	0.591	0.587	0.587	0.587	0.587	0.580	0.575	0.571	0.563	0.556	0.551	0.541	0.531	0.527	0.535	0.575	0.500	0.526	0.531	0.528	0.518	0.503	0.481	0.459	0.436	0.409	0.382	0.356	0.326	0.298	0.275	0.264	0.284

Abb. 3.2 Axial gemittelte Stableistungverteilung aus nTRACER für das C5G7-Benchmark

Die mit nTRACER berechnete axial gemittelte relative Stabileistungverteilung ist in Abb. 3.2 dargestellt. Zur Verdeutlichung der Qualität der Lösung finden sich die relativen prozentuellen Abweichungen zum MCNP-Referenzergebnis in Abb. 3.3 sowie für den Maximalwert und einen aus der Standardabweichung gebildeten repräsentativen Wert in Tab. 3.1. Auch hier ergibt sich wieder eine ausgezeichnete Übereinstimmung der nTRACER-Lösung mit der MCNP-Referenzlösung.

0.136	0.065	0.126	0.201	0.233	0.347	0.362	0.294	0.298	0.235	0.290	0.179	0.282	0.113	0.047	0.312	-0.466	-0.251	0.469	0.453	-0.628	-0.712	-0.853	-0.543	-0.739	-0.655	-0.777	-0.966	0.673	0.840	-0.666	-0.891	-0.893	-0.268
0.065	0.136	0.143	0.364	0.477	0.374	0.569	0.510	0.331	0.450	0.424	0.367	0.353	0.151	-0.121	-0.240	-0.468	-0.250	-0.327	-0.321	-0.291	-0.468	-0.450	-0.192	-0.190	-0.420	-0.264	-0.474	-0.702	-0.647	-0.921	-1.000	-0.527	-0.285
0.122	0.139	0.388	0.391	0.467	0.000	0.518	0.383	0.000	0.308	0.375	0.000	0.392	0.295	0.283	-0.189	-0.289	-0.186	-0.203	-0.052	-0.035	-0.153	0.000	-0.494	-0.432	0.000	-0.719	-0.569	0.000	-0.835	-0.602	-0.544	-0.407	-0.181
0.196	0.364	0.395	0.000	0.580	0.505	0.521	0.504	0.425	0.549	0.574	0.494	0.465	0.000	0.168	0.014	-0.454	-0.126	-0.054	-0.123	0.000	0.022	-0.128	-0.150	-0.345	-0.335	-0.465	-0.165	-0.471	-0.631	0.000	-0.587	-0.204	0.057
0.229	0.473	0.472	0.584	0.656	0.534	0.675	0.687	0.457	0.652	0.590	0.583	0.721	0.463	0.273	0.075	-0.235	-0.186	-0.129	-0.106	-0.135	0.309	-0.024	-0.198	-0.136	-0.338	-0.330	-0.372	-0.345	-0.208	-0.295	-0.402	0.081	0.114
0.347	0.374	0.000	0.501	0.534	0.000	0.390	0.578	0.000	0.456	0.267	0.000	0.507	0.263	0.000	0.131	-0.224	-0.108	0.133	0.000	-0.182	0.026	0.000	-0.196	-0.364	0.000	-0.512	-0.658	0.000	-0.195	-0.307	0.000	-0.248	-0.062
0.362	0.569	0.510	0.521	0.680	0.386	0.567	0.596	0.389	0.548	0.464	0.357	0.612	0.458	0.299	0.194	-0.018	-0.034	0.016	-0.090	-0.033	-0.090	-0.058	-0.294	-0.120	-0.471	-0.358	-0.292	-0.371	-0.223	-0.515	-0.424	0.135	-0.061
0.294	0.514	0.383	0.504	0.687	0.574	0.591	0.512	0.334	0.444	0.508	0.326	0.632	0.512	0.160	0.248	-0.073	-0.169	0.197	-0.274	-0.044	-0.228	0.020	-0.095	-0.395	-0.368	-0.442	-0.495	-0.389	-0.010	-0.277	-0.326	-0.069	-0.208
0.293	0.331	0.000	0.425	0.457	0.000	0.393	0.334	0.000	0.064	0.301	0.000	0.238	0.140	0.000	-0.028	-0.125	0.022	-0.037	0.000	-0.371	-0.169	0.000	-0.522	-0.578	0.000	-0.907	-0.644	0.000	-0.309	-0.484	0.000	-0.180	-0.260
0.230	0.450	0.317	0.549	0.657	0.456	0.548	0.444	0.069	0.311	0.359	0.385	0.500	0.293	0.159	0.208	-0.207	-0.097	0.170	-0.310	-0.015	0.079	-0.204	-0.208	-0.448	-0.569	-0.644	-0.576	-0.645	-0.102	-0.468	-0.445	-0.138	-0.157
0.290	0.424	0.375	0.570	0.595	0.267	0.464	0.508	0.306	0.359	0.409	0.336	0.390	0.408	0.285	0.165	-0.171	-0.076	0.158	-0.154	0.007	0.052	-0.300	-0.268	-0.195	-0.366	-0.550	-0.537	-0.536	-0.455	-0.370	-0.447	0.162	0.102
0.179	0.362	0.000	0.494	0.583	0.000	0.352	0.326	0.000	0.390	0.331	0.000	0.453	0.200	0.000	0.092	-0.086	-0.139	-0.167	0.000	-0.069	0.125	0.000	-0.404	-0.349	0.000	-0.614	-0.574	0.000	-0.137	-0.470	0.000	-0.305	-0.057
0.282	0.353	0.392	0.470	0.726	0.507	0.612	0.638	0.233	0.506	0.390	0.453	0.526	0.278	0.184	-0.004	-0.257	-0.050	-0.158	-0.199	-0.157	0.263	-0.097	0.174	-0.144	-0.325	-0.292	-0.215	-0.686	-0.356	-0.348	-0.513	-0.609	-0.158
0.113	0.151	0.295	0.000	0.463	0.263	0.458	0.512	0.140	0.293	0.408	0.205	0.272	0.000	0.143	-0.129	-0.356	-0.221	-0.278	-0.339	0.000	-0.109	-0.302	-0.098	-0.300	-0.412	-0.174	-0.357	-0.359	-0.623	0.000	-0.674	-0.287	-0.064
0.047	-0.121	0.283	0.173	0.267	0.000	0.304	0.154	0.000	0.165	0.285	0.000	0.184	0.136	0.100	-0.394	-0.547	-0.296	-0.462	-0.409	-0.187	-0.384	0.000	-0.336	-0.436	0.000	-0.460	-0.279	0.000	-0.491	-0.735	-0.207	-0.416	-0.146
-0.319	-0.240	-0.189	0.014	0.081	0.131	0.194	0.248	-0.028	0.208	0.165	0.099	-0.004	-0.129	-0.394	-0.499	-0.651	-0.473	-0.317	-0.401	-0.413	-0.327	-0.571	-0.167	-0.058	-0.356	-0.259	0.047	-0.304	-0.275	-0.646	-0.665	-0.692	-0.318
-0.458	-0.460	-0.274	-0.446	-0.228	-0.216	-0.010	-0.066	-0.117	-0.199	-0.162	-0.069	-0.248	-0.346	-0.537	-0.640	-0.539	-0.354	-0.546	-0.538	-0.469	-0.477	-0.479	-0.460	-0.502	-0.415	-0.333	-0.368	-0.481	-0.554	-0.706	-0.554	-0.672	-0.326
-0.251	-0.257	-0.193	-0.133	-0.186	-0.108	-0.042	-0.177	0.014	-0.097	-0.084	-0.139	-0.059	-0.221	-0.296	-0.473	-0.364	-0.748	-0.665	-0.613	-0.571	-0.643	-0.569	-0.468	-0.525	-0.566	-0.491	-0.465	-0.600	-1.085	-1.075	-0.897	-0.639	-0.268
-0.469	-0.327	-0.203	-0.061	-0.122	0.140	0.009	0.190	-0.045	0.170	0.166	-0.160	-0.167	-0.287	-0.471	-0.317	-0.546	-0.665	-0.780	-0.512	-0.456	-0.258	-0.416	-0.401	-0.333	-0.255	-0.136	0.012	-0.549	-0.412	-0.466	-0.646	-0.459	-0.315
-0.442	-0.329	-0.052	-0.123	-0.106	0.000	-0.082	-0.274	0.000	-0.319	-0.154	0.000	-0.190	-0.348	-0.409	-0.391	-0.538	-0.626	-0.512	-0.437	-0.394	-0.242	0.000	-0.164	-0.311	0.000	-0.059	-0.081	0.000	-0.167	-0.074	0.033	-0.392	-0.096
-0.639	-0.291	-0.035	0.000	-0.135	-0.174	-0.033	-0.044	-0.371	-0.006	0.007	-0.069	-0.157	0.000	-0.197	-0.413	-0.481	-0.571	-0.456	-0.394	0.000	0.096	0.010	0.095	-0.092	-0.133	0.015	0.083	-0.406	-0.004	0.000	-0.117	-0.082	-0.189
-0.712	-0.468	-0.153	0.022	0.309	0.026	-0.090	-0.228	-0.179	0.079	0.052	0.134	0.253	-0.103	-0.384	-0.327	-0.489	-0.643	-0.258	-0.230	0.096	0.410	0.052	0.075	-0.067	-0.079	-0.075	0.257	-0.141	0.043	0.285	0.407	-0.111	-0.076
-0.853	-0.450	0.000	-0.128	-0.024	0.000	-0.048	0.029	0.000	-0.204	-0.300	0.000	-0.097	-0.282	0.000	-0.561	-0.466	-0.555	-0.404	0.000	0.010	0.052	0.000	0.016	-0.104	0.000	-0.113	0.026	0.000	0.171	-0.076	0.000	0.026	-0.167
-0.543	-0.192	-0.505	-0.139	-0.188	-0.206	-0.294	-0.084	-0.532	-0.208	-0.268	-0.404	0.162	-0.098	-0.336	-0.167	-0.460	-0.468	-0.401	-0.164	0.095	0.075	0.016	0.018	0.015	-0.405	-0.331	0.014	0.082	0.319	0.064	-0.286	0.010	0.326
-0.739	-0.178	-0.432	-0.345	-0.136	-0.364	-0.120	-0.395	-0.578	-0.448	-0.195	-0.337	-0.144	-0.300	-0.423	-0.058	-0.516	-0.525	-0.333	-0.311	-0.092	-0.067	-0.118	0.015	-0.012	-0.338	-0.260	-0.201	0.070	0.129	0.065	-0.254	-0.001	0.230
-0.655	-0.420	0.000	-0.335	-0.338	0.000	-0.459	-0.368	0.000	-0.569	-0.366	0.000	-0.325	-0.412	0.000	-0.356	-0.431	-0.566	-0.255	0.000	-0.133	-0.079	0.000	-0.405	-0.338	0.000	-0.231	-0.163	0.000	-0.003	-0.312	0.000	0.063	0.007
-0.777	-0.264	-0.705	-0.465	-0.317	-0.512	-0.344	-0.428	-0.894	-0.644	-0.550	-0.614	-0.292	-0.174	-0.460	-0.259	-0.333	-0.509	-0.136	-0.044	0.015	-0.075	-0.113	-0.331	-0.260	-0.231	-0.184	-0.035	-0.153	-0.038	-0.019	0.045	0.009	0.181
-0.966	-0.474	-0.555	-0.165	-0.372	-0.644	-0.292	-0.495	-0.644	-0.576	-0.537	-0.559	-0.215	-0.357	-0.279	0.047	-0.368	-0.465	0.029	-0.065	0.083	0.274	0.026	0.014	-0.201	-0.163	-0.035	-0.108	-0.085	0.127	-0.038	-0.250	0.134	0.430
-0.673	-0.702	0.000	-0.471	-0.345	0.000	-0.371	-0.389	0.000	-0.629	-0.552	0.000	-0.686	-0.359	0.000	-0.304	-0.481	-0.600	-0.549	0.000	-0.406	-0.141	0.000	0.082	0.070	0.000	-0.153	-0.085	0.000	0.080	-0.263	0.000	0.007	0.205
-0.840	-0.647	-0.835	-0.631	-0.192	-0.195	-0.205	-0.010	-0.309	-0.102	-0.437	-0.137	-0.356	-0.623	-0.472	0.275	-0.554	-1.085	-0.412	-0.167	0.014	0.043	0.171	0.319	0.129	-0.003	-0.038	0.127	0.080	0.300	0.085	0.004	0.134	0.078
-0.666	-0.921	-0.602	0.000	-0.295	-0.307	-0.515	-0.277	-0.484	-0.468	-0.370	-0.452	-0.368	0.000	-0.715	-0.625	-0.729	-1.075	-0.466	-0.054	0.000	0.285	-0.076	0.064	0.065	-0.312	-0.019	-0.038	-0.263	0.085	0.000	-0.128	0.073	0.119
-0.891	-1.000	-0.544	-0.587	-0.402	0.000	-0.424	-0.326	0.000	-0.424	-0.447	0.000	-0.513	-0.695	-0.207	-0.643	-0.554	-0.897	-0.646	0.033	-0.117	0.407	0.000	-0.286	-0.254	0.000	0.045	-0.250	0.000	-0.030	-0.128	0.091	0.142	0.230
-0.893	-0.527	-0.407	-0.204	0.100	-0.266	0.135	-0.089	-0.180	-0.138	0.162	-0.324	-0.603	-0.309	-0.416	-0.692	-0.695	-0.639	-0.459	-0.392	-0.082	-0.111	0.026	0.010	-0.001	0.063	0.009	0.134	0.007	0.134	0.073	0.142	-0.463	-0.021
-0.268	-0.285	-0.164	0.057	0.131	-0.079	-0.044	-0.208	-0.243	-0.157	0.138	-0.075	-0.139	-0.064	-0.146	-0.299	-0.326	-0.248	-0.296	-0.077	-0.170	-0.056	-0.167	0.326	0.252	0.030	0.181	0.430	0.205	0.078	0.119	0.230	-0.021	0.262

Abb. 3.3 Relative Abweichung in % der axial gemittelten Stabileistungverteilung aus nTRACER zur MCNP-Referenzlösung für das C5G7-Benchmark

nTRACER-Berechnungen mit thermohydraulischen Rückwirkungen

Für eine weitere Evaluierung der Möglichkeiten von nTRACER wurde eine Nachrechnung des Volllast-Falls (Exercise b) des sogenannten Purdue-Benchmarks /KOZ 06/ durchgeführt. Anders als bei dem zuvor betrachteten C5G7-Benchmark wird hier nicht ein Referenz-Wirkungsquerschnittssatz zugrunde gelegt, sondern die Wirkungsquerschnittserzeugung ist Teil der zu betrachtenden Rechenkette. Hierbei ist auch das thermohydraulische Feedback, d. h. die Rückwirkung der Leistungserzeugung auf die Temperaturverteilung und Moderatorordichte, zu berücksichtigen sowie die kritische Bor-konzentration zu bestimmen. Die nTRACER-internen Programmmodule, die diese Aufgaben lösen, betrachten jeden Brennstab und den umgebenden Moderator individuell, d. h. Querströmungen zwischen den einzelnen Brennstab-Kanälen oder Brennelementen werden nicht mit berücksichtigt.

	1	2	3	4	5	6	7	8
A	U 4.2% (CR-D) 35.0	U 4.2%	U 4.2% (CR-A) 22.5	U 4.5%	U 4.5% (CR-SD) 37.5	M 4.3%	U 4.5% (CR-C) 0.15	U 4.2%
B	U 4.2%	U 4.2%	U 4.5%	M 4.0%	U 4.2%	U 4.2% (CR-SB) 32.5	M 4.0%	U 4.5%
C	U 4.2% (CR-A) 22.5	U 4.5%	U 4.2% (CR-C) 22.5	U 4.2%	U 4.2%	M 4.3%	U 4.5% (CR-B) 0.15	M 4.3%
D	U 4.5%	M 4.0%	U 4.2%	M 4.0%	U 4.2%	U 4.5% (CR-SC) 20.0	M 4.3%	U 4.5%
E	U 4.5% (CR-SD) 37.5	U 4.2%	U 4.2%	U 4.2%	U 4.2% (CR-D) 37.5	U 4.5%	U 4.2% (CR-SA) 17.5	
F	M 4.3%	U 4.2% (CR-SB) 32.5	M 4.3%	U 4.5% (CR-SC) 20.0	U 4.5%	M 4.3%	U 4.5%	
G	U 4.5% (CR-C) 0.15	M 4.0%	U 4.5% (CR-B) 0.15	M 4.3%	U 4.2% (CR-SA) 17.5	U 4.5%	Assembly Type CR Position Burnup [GWd/t]	
H	U 4.2%	U 4.5%	M 4.3%	U 4.5%			UOX assembly MOX assembly	

Abb. 3.4 Kernbeladung (1/4-Kern) im Purdue-Benchmark

Im Purdue-Benchmark wird ein Gleichgewichtszyklus eines DWR mit ca. 30 % MOX und 70 % UOX-Brennelementen betrachtet. Die Kernbeladung zeigt Abb. 3.4. Bei Zyklusbeginn und Volllast (3565 MW thermisch) wurden mit nTRACER das axiale Leistungsprofil (Abb. 3.5) und das radiale Leistungsprofil (Abb. 3.6) ermittelt. Zum Vergleich wurden Ergebnisse einer MCNP-ATHLET-Rechnung (siehe Abschnitt 4.1) herangezogen. Die Ergebnisse sind sehr zufriedenstellend. Im axialen Leistungsprofil beträgt die maximale relative Abweichung zwischen nTRACER und MCNP-ATHLET ca. 4 % bei der relativen axialen Längenkoordinate 0.2. Zum Vergleich betragen im Fall Nulllast

heiß, d. h. bei konstanter Temperatur und Moderatorichte im Kern, die maximalen Abweichungen im axialen Leistungsprofil zwischen den Benchmark-Teilnehmern ebenfalls etwa 4 % /KOZ 06/.

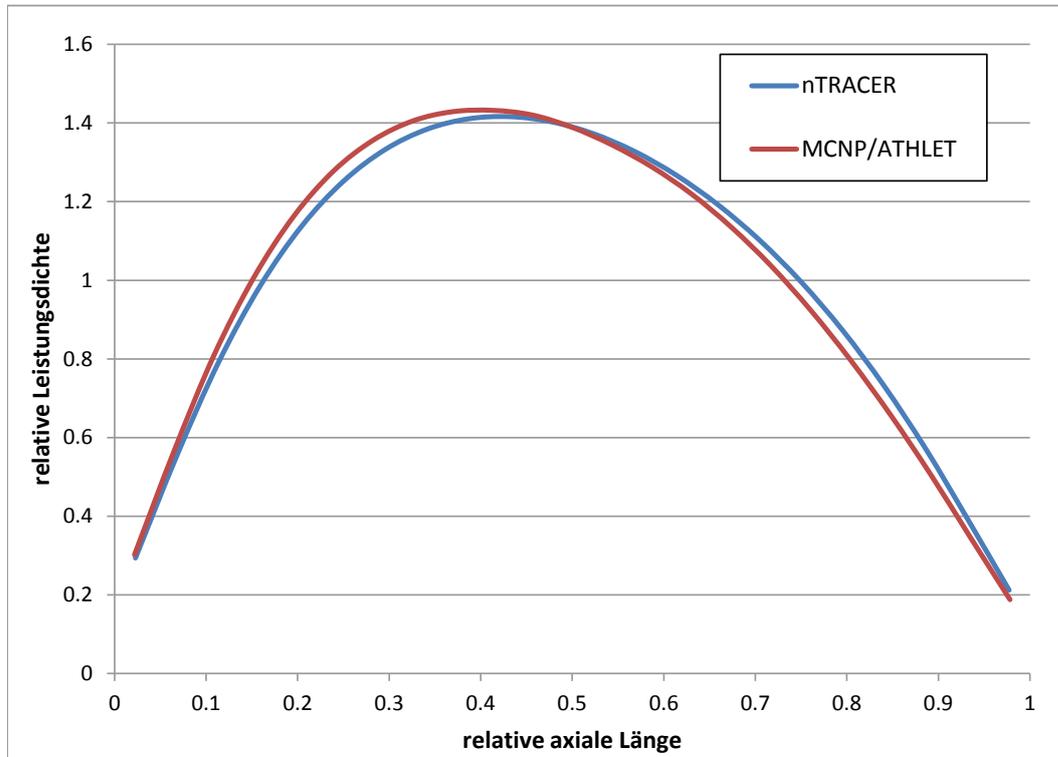


Abb. 3.5 Axiales Leistungsprofil von nTRACER und MCNPATHLET im Purdue-Benchmark

Bei der radialen Leistungsverteilung beträgt die maximale relative Abweichung zwischen nTRACER und MCNP-ATHLET ca. 3 %, siehe Abb. 3.7. Differenzen in dieser Größenordnung sind durchaus zu erwarten, da den Rechnungen unterschiedliche nukleare Daten, einerseits ENDF-B/VII (nTRACER), andererseits JEFF-3.1 (MCNP) zugrunde liegen. Die Differenzen liegen ebenfalls innerhalb der Bandbreite aus systematischen Unsicherheitsanalysen, siehe Abb. 5.6.

	1	2	3	4	5	6	7	8
A	1.13	1.42	1.22	1.39	1.02	1.11	1.10	0.48
B	1.42	1.30	1.10	1.21	1.31	0.96	1.10	0.57
C	1.22	1.10	1.19	1.35	1.21	1.18	1.09	0.47
D	1.39	1.21	1.35	1.06	1.29	1.17	0.99	0.40
E	1.02	1.31	1.21	1.29	0.92	1.11	0.64	
F	1.11	0.96	1.18	1.17	1.11	0.84	0.32	
G	1.10	1.10	1.09	0.99	0.64	0.32		
H	0.48	0.57	0.47	0.40				

Abb. 3.6 Relative Brennelementleistungen aus nTRACER. Rot: BE mit der höchsten Leistung, grün: BE mit der geringsten Leistung

	1	2	3	4	5	6	7	8
A	3.04%	2.53%	2.45%	0.84%	0.79%	-0.39%	-1.09%	-0.40%
B	2.53%	3.00%	2.74%	0.95%	0.10%	-0.37%	-1.55%	-0.30%
C	2.46%	2.74%	2.01%	0.55%	0.06%	-1.17%	-1.62%	-0.77%
D	0.84%	0.95%	0.55%	0.70%	-0.50%	-1.03%	-1.69%	0.09%
E	0.79%	0.10%	0.06%	-0.50%	-0.81%	-1.21%	-0.67%	
F	-0.38%	-0.37%	-1.17%	-1.03%	-1.21%	-1.73%	0.30%	
G	-1.08%	-1.54%	-1.62%	-1.69%	-0.67%	0.30%		
H	-0.38%	-0.30%	-0.75%	0.09%				

Abb. 3.7 Relative Abweichung in den Brennelement-Leistungen zwischen nTRACER und MCNP-ATHLET. Rot: größte positive Abweichungen, grün: größte negative Abweichungen

Die Abweichungen in positiver Richtung liegen jedoch hauptsächlich in Kernmitte, während die negativen in Richtung Kernrand zu beobachten sind. Die systematische Überschätzung der Leistung durch nTRACER in der Kernmitte bei gleichzeitiger Unterschätzung am Kernrand ist ein für nTRACER in der Version, die in der GRS verfügbar ist, bekanntes Phänomen. Die Ursache ist, dass die mikroskopischen Transport-Wirkungsquerschnitte in der inkonsistenten, sogenannten Outscatter-Näherung berechnet wurden. Speziell für leichte Elemente wird in einer neuen nTRACER-Version stattdessen die Inscatter-Näherung verwendet. Dies führte bei Kernberechnungen an der Seoul National University zu besserer Übereinstimmung der radialen Leistungsverteilung mit Messdaten.

Sobald die entsprechende neue Version der nTRACER-Multigruppen-Wirkungsquerschnitts-Bibliothek in der GRS verfügbar ist, kann die Rechnung erneut durchgeführt

werden, um zu ermitteln, ob diese systematische Verschiebung der Leistung in Richtung Kernmitte dadurch reduziert wird.

Zusätzlich zur internen Möglichkeit von nTRACER, mit einem Thermohydraulik-Modul gekoppelte Berechnungen durchzuführen, wurde in Zusammenarbeit mit SNU nTRACER mit dem Unterkanalcode CTF gekoppelt. Die sogenannte interne Kopplungsmethode wurde angewendet, wobei nTRACER CTF als dynamische Bibliothek aufruft. Der CTF-Datensatz wird automatisch erzeugt durch den Aufruf des CTF-Präprozessors mit den benötigten Daten aus dem nTRACER-Datensatz. Die Konvertierung von Kühlmittel-zentrierten Werten aus dem CTF-Modell zu Brennstab-zentrierten Werten für nTRACER wird automatisch in der generischen CTF-Kopplungsschnittstelle durchgeführt. Moderatorichte, Moderatortemperatur, Brennstofftemperatur und Borkonzentration werden von CTF an nTRACER übergeben. nTRACER liefert CTF die stabweise Leistungsverteilung. Die Arbeiten wurden erfolgreich abgeschlossen; damit steht diese Kopplung generisch für alle Geometrien zur Verfügung. Die Ergebnisse werden detailliert in einer Technischen Notiz, siehe Anhang A4, beschrieben.

Kopplung der XSUSA-Methode mit nTRACER

Der Benchmark-Fall C5G7-unrodded /NEA 05/, siehe oben, wurde auch als Anwendungsfall für eine Unsicherheitsanalyse der Ergebnisdaten von nTRACER bzgl. der Unsicherheiten in den nuklearen Daten ausgewählt.

Ziel der Analyse war neben der Quantifizierung der Ergebnisunsicherheiten an sich die Demonstration, dass sich die Sampling-basierte Methodik XSUSA, welche von der GRS bereits in vielen Analysen eingesetzt wurde, auch auf nTRACER anwenden lässt.

In XSUSA werden ausgehend von den Unsicherheiten der nuklearen Daten, welche sich aus der experimentell verwendeten Methode sowie zugehörigen Modellannahmen ergeben, sowie deren Korrelationen Sätze von Wirkungsquerschnitten gebildet. Jeder dieser Sätze wird dann einer neutronenphysikalischen Rechnung zugrunde gelegt. Deren Ergebnisse lassen sich dann statistisch analysieren und erlauben Rückschlüsse auf die Sensitivität der Ergebnisdaten auf Unsicherheiten in den Eingangsparametern. Für weitere Details der Methodik siehe /ZWE 10a/.

In nTRACER gibt es neben der Verwendung der internen 190- oder 47-Gruppen Wirkungsquerschnittsdaten auch die Möglichkeit, makroskopische Multigruppen-

Parameter (im vorliegenden Fall sieben Energiegruppen) extern als ASCII-Datei vorzugeben. Für den hier beschriebenen XSUSA-Anwendungsfall wurde auf diese Möglichkeit zurückgegriffen, da sich die so vorgegebenen 7-Gruppen-Wirkungsquerschnitte auch in anderen Codes einsetzen lassen und also eine Validierung der Methodik durch Code-zu-Code-Vergleich ermöglichen.

Für den hier betrachteten Fall wurden mit 1000 Stichproben der nuklearen Daten und der in einem Vorgänger-Benchmark /NEA 96/ gegebenen Materialzusammensetzung der im C5G7-Benchmark eingesetzten Brennelemente mittels dem Transportcode NEWT des SCALE-6.1-Pakets 1000 Sätze von 7-Gruppen-Wirkungsquerschnitten für die Brennstäbe, die Hüllrohre und die Moderator-Region des MOX und des UOX-Brennelements erzeugt. Diese wurden anschließend für 1000 nTRACER-Läufe verwendet, deren Resultate statistisch ausgewertet wurden. Zum Vergleich wurden dieselben 1000 Wirkungsquerschnittssätze auch in den Monte-Carlo-Code KENO Va des SCALE-Pakets eingesetzt.

Tab. 3.2 Rechenergebnisse für das C5G7-Benchmark

	$k_{\text{eff}}^{\text{nom}}$	$k_{\text{eff}}^{\text{nom}} - \langle k_{\text{eff}} \rangle$	σ	σ/k_{eff}
nTRACER	1.14333	-9±17pcm	554pcm	0.48 %
KENO	1.14518	-7±17pcm	554pcm	0.48 %

Tab. 3.2 zeigt die berechneten Multiplikationsfaktoren für den Nominalfall, die Differenz zum Mittelwert der aus den variierten Rechnungen inklusive der Unsicherheit des Mittelwerts, die Standardabweichung der Einzelwerte und die relative Standardabweichung.

Tab. 3.3 Quadrierte multiple Korrelationskoeffizienten (R^2) für den Multiplikationsfaktor des C5G7-Benchmarks

	nTRACER	KENO
U-238 (n,γ)	0.317	0.315
Pu-239 v-quer	0.231	0.235
U-238 elastische Streuung	0.196	0.190
U-235 v-quer	0.135	0.136
U-235 (n,γ)	0.124	0.123

Man erkennt, dass sich, bedingt durch die unterschiedliche Methodik der Rechnung, zwar die absoluten Werte für den Multiplikationsfaktor unterscheiden zwischen den beiden betrachteten Codes, die Streuung der Ergebnisse aber gleich ist. Ein Blick auf die Korrelation der Einzelergebnisse der je 1000 Rechnungen untermauert dies. Die keff-Werte der nTRACER-Einzelrechnungen weisen mit denen der KENO-Rechnungen einen Korrelationskoeffizienten von 99.9 % auf.

Auch die Sensitivität der Ergebnisse bezüglich der Variation der einzelnen nuklearen Eingangsparameter kann statistisch untersucht werden. Der quadrierte multiple Korrelationskoeffizient R^2 bietet ein Maß dafür, welcher relative Anteil der Ergebnisunsicherheit von der Unsicherheit einer Gruppe von Eingangsparametern stammt. In Tab. 3.3 sind die fünf Eingangsgrößen mit den größten Beiträgen zur Unsicherheit des Multiplikationsfaktors aufgelistet. Die Ergebnisse unterscheiden sich nur unwesentlich zwischen nTRACER und KENO.

Weiterhin werden die Unsicherheiten in der Stableistungsverteilung betrachtet. Für die 1000 variierten Rechnungen wurde die Spaltreaktionsrate in den Brennstäben der ersten Zeile (x,1) untersucht. Diese enthält im Nominalfall einige der höchsten und niedrigsten Spaltraten (vgl. Abb. 3.2).

Tab. 3.4 Maximale, mediane und minimale relative Standardabweichung und zugehörige Mittelwerte für die stabweise Spaltrate im C5G7-Benchmark.

	$\max(\sigma/\langle r \rangle)$	Position	$\langle r \rangle$ an Position
nTRACER	2.51 %	34	0.5958
KENO	2.49 %	34	0.5948
	$\text{median}(\sigma/\langle r \rangle)$	Position	$\langle r \rangle$ an Position
nTRACER	1.57 %	27	0.5760
KENO	1.55 %	27	0.5800
	$\min(\sigma/\langle r \rangle)$	Position	$\langle r \rangle$ at Position
nTRACER	0.313 %	19	1.0422
KENO	0.331 %	19	1.0437

Die Positionen der höchsten, medianen und niedrigsten relativen Standardabweichung in der Spaltrate sind in Tab. 3.4 aufgeführt. Man erkennt, dass die größte relative Unsicherheit in der Spaltrate an der Grenze zwischen MOX-Brennelement und radialem Reflektor liegt. Dort beträgt die Standardabweichung ca. 2.5 %. Das bedeutet, dass beispielsweise die relative Stableistung an der Position (34,1), wenn man die Unsi-

cherheiten in den nuklearen Daten als korrekt quantifiziert voraussetzt, mit einer Wahrscheinlichkeit von 67 % im Intervall [0.581; 0.611] liegt.

Wie für den Multiplikationsfaktor sind auch die Einzelergebnisse in den Spaltraten zwischen den beiden Codes nahezu perfekt korreliert. Der Korrelationskoeffizient liegt bei über 99.99 %.

3.2 Implementierung einer generischen Datenbank für Wirkungsquerschnitte und Ausgabedaten

Daten, die von einem Computerprogramm in einem bestimmten Format ausgegeben werden, sollen in praktikabler Weise als Eingabedaten in einem für ein anderes Programm benötigten anderen Format zur Weiterverarbeitung der Daten oder zu deren Visualisierung bereitgestellt werden.



Abb. 3.8 Datenübergabe von Spektralcodes an Transportcodes ohne und mit generischer Datenbank

Einer der in der GRS wichtigsten Anwendungsfälle ist hierbei die Bereitstellung einer generischen Wirkungsquerschnittsbibliothek. Der Vorteil einer generischen Datenbank im Zusammenspiel von Spektralcode und Transportcode wird anhand von Abb. 3.8 leicht ersichtlich. Sollen beispielsweise mit n Spektralcodes Wirkungsquerschnitte für die Verwendung mit m Transportcodes bereitgestellt werden, so wird durch die Verwendung einer generischen Datenbank die Anzahl der notwendigen Schnittstellen von $n \times m$ auf $n + m$ reduziert. So wird auch die Verwendung eines neuen Codes in der Rechenkette erleichtert. Soll etwa ein neuer Spektralcode genutzt werden, so genügt eine einzige Schnittstelle, um ihn in Zusammenarbeit mit einer Vielzahl von Transportcodes zu verwenden.

Für die Anwendung als Bindeglied zwischen Spektralcode und Flusslöser wurde im Berichtszeitraum eine Datenbank im HDF5-Format erprobt. Dieses hierarchische Daten-

format ist in Industrie und Forschung weitverbreitet, kann plattformunabhängig eingesetzt werden und von verschiedenen Programmiersprachen wie Python, C++ oder Fortran aus gelesen bzw. geschrieben werden.

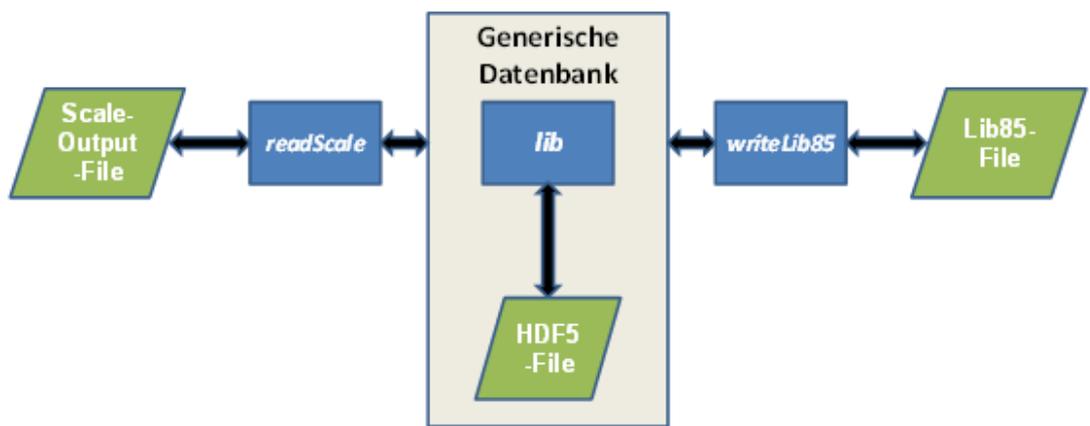


Abb. 3.9 Derzeit implementierte Verwendung der generischen Datenbank im HDF5-Format

Das Bild zeigt den HDFView-Viewer. Links ist eine hierarchische Baumstruktur von Materialien zu sehen, darunter '19M_' mit Untergruppen wie 'adf', 'flux', 'k-inf', 'pinType0', 'pinType1', 'pinType2', 'product_kappa_xs_fission', 'product_nu_xs_fission', 'xe_density', 'xs_absorption_xe_micro', 'xs_fission', 'xs_scatter_matrix_p_0', 'xs_scatter_matrix_p_0_upsc', 'xs_total_minus_xs_scatter' und 'xs_transport'. Rechts ist eine Tabelle mit dem Titel 'Table' geöffnet, die zwei Spalten mit den Werten 0 und 1 enthält. Die Tabelle zeigt die Wirkungsquerschnitte für verschiedene Reaktionen (0 bis 22).

	0	1
0	0.00263243	0.0999817
1	0.00262614	0.098845
2	0.00261888	0.0982088
3	0.00260826	0.0973799
4	0.00259387	0.0963316
5	0.00257915	0.095301
6	0.00256418	0.0942803
7	0.00254898	0.0932679
8	0.00253355	0.0922634
9	0.00251793	0.0912668
10	0.00250211	0.0902784
11	0.00248613	0.0892984
12	0.00246998	0.0883261
13	0.00245369	0.0873622
14	0.00243727	0.0864065
15	0.00242072	0.0854592
16	0.00240407	0.0845202
17	0.00237921	0.0831401
18	0.00234568	0.0813248
19	0.00231173	0.0795363
20	0.00227766	0.0777843
21	0.00224356	0.0760696
22	0.00218564	0.0732334

Abb. 3.10 Darstellung des Auszugs aus der generischen Datenbank, die die Wirkungsquerschnitte enthält, mittels HDFView.

Eingesetzt wurde die Datenbank bisher wie folgt. Mit dem Modul NEWT des SCALE-Programmpakets werden Wirkungsquerschnitte erzeugt (z. B. auch im Zusammenhang

mit Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen), welche in der SCALE-Ausgabedatei in spezifischem ASCII-Format vorliegen. Aus der SCALE-Ausgabedatei werden mit einem eigens entwickelten Python-Programm *readScale* die Wirkungsquerschnitte und weitere Daten ausgelesen. Diese Daten werden in Form eines Python-Dictionary an das Modul *lib* übergeben, welches die Lese- und Schreibroutinen für die HDF5-Datei enthält. Für die Anwendung der Wirkungsquerschnittsdaten mit dem GRS-Diffusionscode QUABOX/CUBBOX wurde ein weiteres Python-Programm *writeLib85* erstellt, welches mit einer Leseroutine von *lib* die Daten aus dem HDF5-File entnimmt und in das QUABOX/CUBBOX-Wirkungsquerschnittsdatenformat Lib85 übersetzt. Dieser Ablauf ist in Abb. 3.9 skizziert. Dabei sind die Datenformate in grün und die Computerprogramme in blau dargestellt.

Eine Anzeige der in der HDF5-Datei gespeicherten Daten (von bis zu 3 Dimensionen) ist z. B. mit dem Programm HDFView möglich, siehe Abb. 3.10. Die generische Datenbank ist wegen ihrer hierarchischen Struktur leicht erweiterbar und für die Ablage von Ausgabedaten des Flusslösers in einem weiteren Ordner sowie die Anbindung von weiteren Spektralcodes bzw. Flusslösern geeignet.

Im hierarchischen Datenformat sind die Daten gruppiert in Ordnern mit optionalen Unterordnern ähnlich der Baumstruktur eines Computer-Dateisystems. Dies ermöglicht die übersichtliche Ablage der Daten verschiedener Szenarien in einer einzigen Datei. Beispielsweise enthält in der genannten generischen Datenbank der oberste Ordner *materials* die Unterordner verschiedener benannter Brennelemente, die jeweils Unterordner für die verschiedenen erforderlichen Daten wie die makroskopischen Wirkungsquerschnitte umfassen. Die einzelnen Wirkungsquerschnitte sind dann als Vektoren bzw. Matrizen oder höherdimensionale Matrizen von Fließkommazahlen mit wählbarer Stellenzahl abgelegt. Vektoren können beispielsweise die Abhängigkeit eines Wirkungsquerschnitts von der Neutronenenergiegruppe widerspiegeln, in Matrixform wären dann Streuwirkungsquerschnitte dargestellt, während höherdimensionale Matrizen weitere Abhängigkeiten der Wirkungsquerschnitte etwa vom Abbrand oder thermohydraulischen Rückwirkungsparametern enthalten.

Das Python-Modul, das die HDF5-Datenbank ansteuert, umfasst auch die Funktionen zum Lesen und Schreiben von Ergebnisdaten, wie sie etwa bei einer Reaktorkernrechnung mit einem nodalen Code wie QUABOX/CUBBOX-ATHLET benötigt werden bzw. entstehen. So enthält das Modul die Funktion `getCycleData()`, mit der der aktuelle Kernzustand, beschrieben durch Abbrand-, Temperatur- und Moderatorichteverteilung

sowie Borkonzentration ausgelesen werden kann, und die Funktion `writeCycleData()`, mit der dieselben Daten geschrieben werden können.

Bisher zum Einsatz kam die generische Datenbank als Schnittstelle zwischen QUABOX/CUBBOX-ATHLET und dem Abbrandcode VENTINA, welcher im Rahmen des Forschungsvorhabens RS1513 entwickelt wird. In dieser Kombination werden Zyklusrechnungen möglich, d. h. eine Neutronenflussverteilung aus QUABOX/CUBBOX wird der Ausgangspunkt für eine Abbrandrechnung mit VENTINA. Diese liefert die neue Abbrandverteilung für die nächste Flusslösung usw.

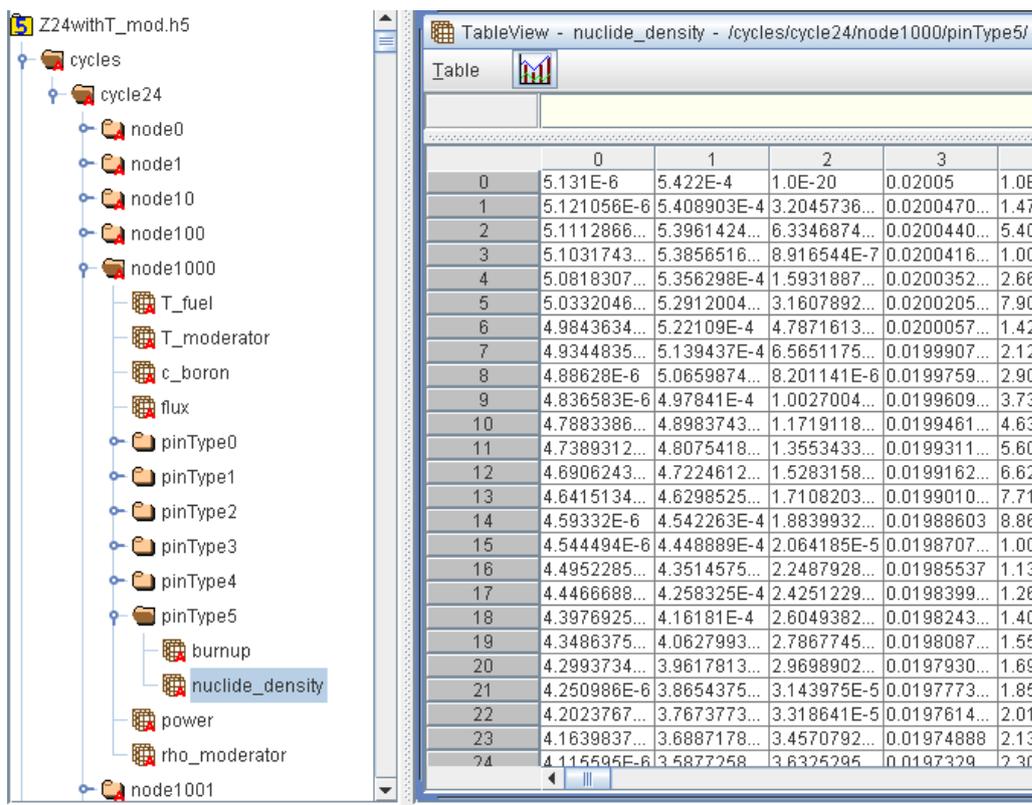


Abb. 3.11 Darstellung des Ergebnisteils der generischen Datenbank mittels HDF-View.

In Abb. 3.11 ist die Struktur der Ergebnisdaten in der generischen Datenbank ersichtlich. Für jeden Node des Reaktorkerns sind Einträge zur Brennstoff- und Moderator-temperatur, zur Borkonzentration, zum Neutronenfluss, der Leistung und der Moderatordichte vorgesehen. Zusätzlich gibt es für jeden Node die Möglichkeit, verschiedene Pintypen (entsprechend den verschiedenartigen Brennstäben eines Brennelements) zu definieren, für die dann jeweils der Abbrand und für eine Auswahl von Nukliden die jeweiligen Nuklidkonzentrationen gespeichert werden können. Jeder Eintrag kann in Ab-

hängigkeit vom Zykluszeitpunkt, d. h. den Volllasttagen seit Zyklusbeginn befüllt werden.

3.3 Optimierung des Neutronendifusionsprogramms QUABOX/CUBBOX

Der Einsatz des 3D-Kernmodells für Simulationen mit QUABOX/CUBBOX (Q/C) erfordert in jedem Fall die Bereitstellung von nuklearen Daten. Die nuklearen Daten umfassen die Diffusionskonstanten und Wirkungsquerschnitte aus den Neutronendifusionsgleichungen für zwei Energiegruppen oder zusätzliche Parameter wie mikroskopische Absorptionsquerschnitte des Xenons und Absorptionsquerschnitte des Bors. Für realistische Anwendungsprobleme werden diese Daten für die einzelnen Brennelementtypen in Abbrandrechnungen mit Brennelementauslegungsprogrammen bestimmt. Hierbei werden für jeden Brennelementtyp umfangreiche Wertetabellen berechnet, welche die Abhängigkeit der nuklearen Daten von den Zustandsgrößen enthalten. Die Zustandsgrößen und ihr Wertebereich werden zum Teil abhängig von der Problemstellung gewählt. Im Allgemeinen sind es für DWR-Bedingungen der Abbrand, die Brennstofftemperatur, die Kühlmitteltemperatur oder -dichte sowie Borkonzentration und Xenonkonzentration. Für SWR-Bedingungen sind es der Abbrand, die Brennstofftemperatur, die momentane Kühlmitteldichte und die historische Kühlmitteldichte sowie die Xenon-Konzentration. Diese nuklearen Daten werden für das steuerstafreie Brennelement und das durch einen eingefahrenen Steuerstab kontrollierte Brennelement berechnet. Zur weiteren Nutzung dieser Daten in der Kernberechnung können diese Funktionswerte durch Näherungsfunktionen und die Bestimmung geeigneter Approximationskoeffizienten approximiert werden oder direkt durch Interpolation der Funktionstabellen ausgewertet werden. Beide Darstellungsformen und Verarbeitungsweisen können im Rahmen der Wirkungsquerschnittsbibliotheken, wie sie in Q/C implementiert sind, genutzt werden.

Beschleunigung der Lösungsalgorithmen in QUABOX/CUBBOX

Aus Sicht des Lösungsverfahrens im 3D-Kernmodell Q/C müssen vor Beginn der Lösung der Neutronendifusionsgleichungen alle notwendigen nuklearen Daten berechnet werden. Dies erfolgt durch den Aufruf des Unterprogramms CROGEN, das zur allgemeinen Bereitstellung der nuklearen Daten dient. Einfache Abhängigkeiten der nuklearen Daten können direkt in der Eingabe angegeben werden, üblicherweise erfolgt jedoch die Bereitstellung in Form der Wirkungsquerschnittsbibliothek (WQ-Bibliothek),

dann erfolgt die weitere Verarbeitung im Unterprogramm CROLRA. In diesem Modul werden alle Zustandsgrößen zur Verfügung gestellt, so dass für jedes Volumenelement des Rechengitters die aktuellen Werte der nuklearen Daten berechnet werden können. Abhängig von der Anzahl der Zustandsgrößen erfolgt die Berechnung selbst durch Aufruf des Unterprogramms LINT3D oder LINT4D, in dem alle Funktionen zur Interpolation in Tabellen zusammengefasst sind.

Function - Caller Function Tree	CPU Time:Self
⊕ CROLRA	98.8%
⊕ LINT4D	0.6%
⊕ CUKOMR	0.2%
⊕ for __acquire_lun	0.1%
⊕ for __release_lun	0.0%
⊕ ZSTEP	0.0%
⊕ YSTEP	0.0%
⊕ HLFXMR	0.0%
⊕ HLFYMR	0.0%
⊕ XSTEP	0.0%
⊕ LDAFMR	0.0%
⊕ HLFZMR	0.0%
⊕ QMP4MR	0.0%

Abb. 3.12 Hotspotanalyse des nichtoptimierten Q/C-Codes

Bei der Anwendung der sehr detaillierten WQ-Bibliothek verlangsamt sich die Q/C Simulation drastisch. Um das Laufzeitverhalten von Software zu analysieren, verwendet man sogenannte Profiler. Intel® VTune™ Amplifier XE ist ein leistungsstarkes Tool zur Performance-Analyse, das man auch zur Hotspotanalyse benutzen kann. Die WQ-Bibliothek mit 13 Brennelementtypen und vier Zustandsgrößen (Abbrand, Brennstofftemperatur, Borkonzentration und Kühlmitteldichte) hat insgesamt 127050 Zeilen. Abb. 3.12 zeigt das Ergebnis der Hotspotanalyse, wo man eindeutig sehen kann, dass die meiste CPU-Zeit in der Routine CROLRA verbraucht wird. Intel VTune Amplifier XE ist auch in der Lage die individuellen Statement-Zeilen zu analysieren. Abb. 3.13 zeigt die aufwendigste Schleife in der CROLRA-Routine. Die Zeile 290 verbraucht 74 % der CPU-Zeit und die Schleife selbst verursacht einen zusätzlichen CPU-Aufwand in Höhe von 24.2 % der gesamten CPU-Zeit. In den Arrays IIXS und RRXS sind die Indizes und alle Werte aus der WQ-Bibliothek dynamisch gespeichert. Beide Arrays haben 2 Dimensionen: Der erste Index bezeichnet den BE-Typ und der zweite Index nummeriert alle WQ-Werte für einen bestimmten BE-Typ. Für den betrachteten Fall sind die Dimensionen der Arrays IIXS und RRXS stark verschieden. Die erste Dimension hat nur 13 Elemente, während die zweite Dimension ca. 10^5 Elemente besitzt. In FORTRAN

sind alle Arrays spaltenweise abgelegt, d. h. die Komponenten des FORTRAN-Arrays in Abb. 3.14 stehen somit aufeinanderfolgend im Hauptspeicher des Rechners.

288	DO I50 = IEND+1, IEND + IIXS(KKEY, J+6)	0.0%
289	MM= MM+1	0.0%
290	TB(ISUM+MM) = RRXS(KKEY, I50)	74.0%
291	ENDDO	24.2%

Abb. 3.13 CROLRA-Codeabschnitt mit dem gefundenen Hotspot

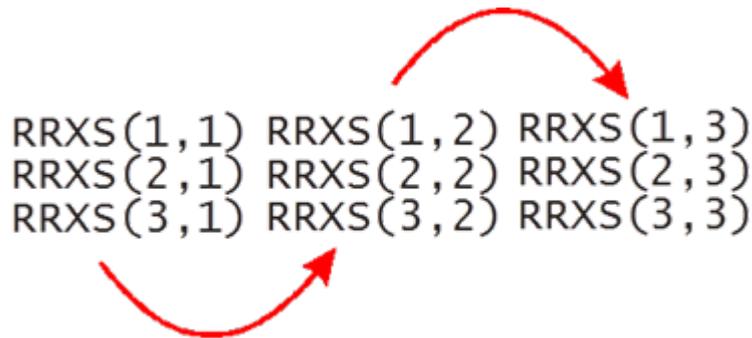


Abb. 3.14 Belegung der Speicherplätze bei den Komponenten des Fortran-Arrays

Bei einem Speicherzugriff auf die $RRXS(KKEY, I50+1)$ muss für den Zeiger, der auf den Inhalt des auszulesenden Datenfeldes zeigen soll, relativ zu dem Speicherplatzes des $RRXS(KKEY, I50)$ gelten:

$$\text{Zeilendimension} * \text{Anzahl der Byte pro Datentyp} = 13 * 8 \text{ Byte} = 104 \text{ Byte} \quad (3.1)$$

Werden unmittelbar aufeinanderfolgende Speicherstellen eines Datenfeldes ausgelesen, so vermeidet man die Cache-Fehlzugriffe; dies erspart CPU-Zeit während der Pagezugriffe.

Demzufolge ist der erste Schritt zur Optimierung des Codes das Umtauschen der Dimensionen in den Arrays IIXS und RRXS, nämlich

$$IIXS(KKEY, I50) \rightarrow IIXS(I50, KKEY) \quad (3.2)$$

$$RRXS(KKEY, I50) \rightarrow RRXS(I50, KKEY) \quad (3.3)$$

Der optimierte CROLRA-Code benötigt jetzt 8 % weniger CPU-Zeit, wie in Abb. 3.15 gezeigt. Zusätzlich verringert sich die gesamte CPU-Zeit um den Faktor 7, d. h. nach der ersten Optimierung beträgt die CPU-Zeit 204 Sekunden anstatt 1400 Sekunden mit der unveränderten CROLRA-Routine.

Function - Caller Function Tree	CPU Time:Self
+ CROLRA	90.7%
+ LINT4D	4.5%
+ CUKOMR	1.7%
+ for __acquire_jun	0.6%
+ for __release_jun	0.3%

Abb. 3.15 Hotspotanalyse nach der ersten Optimierung

Weiterhin führt die CROLRA-Routine in derselben Zeile 290 (Abb. 3.13) eine Copy-Operation aus. Dabei muss das Runtime-System die einzelnen Datenelemente in den verwalteten Speicherraum kopieren. Diese zusätzlichen Datenverschiebungen wirken sich bei großen Arrays negativ auf die Leistung aus. Um sogenanntes „aliasing“ zu vermeiden, kann man in diesem Fall Zeiger (oder Referenzen) verwenden.

Das neue Modul QC_HEADER enthält eine Deklaration des Arrays PRXS von Zeigern des Typs `ptr_to_arr`. Zusätzlich wird die Routine LINT4D modifiziert und nimmt als Input-Variablen die Zeiger `tp1` und `tp2` an:

```

MODULE QC_HEADER
C   define pointers to each XS array of fuel elements
  TYPE ptr_to_arr
    REAL(8), DIMENSION(:), POINTER :: arr
  END TYPE

  TYPE(ptr_to_arr), DIMENSION(:), ALLOCATABLE :: PRXS
  INTEGER, DIMENSION(:, :), ALLOCATABLE :: IIXS

C   maximum number of records for particular xs table parameter
  INTEGER maxNRec

C   # number of table values for each fuel type
  INTEGER xs_table_val
  PARAMETER (xs_table_val = 13)

  interface lint4dmod
    subroutine lint4dmod(it, tp1, tp2, x, f)
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      dimension x(4),xt(4),it(4),nt(4),iopt(4),xt1(4)
      real(8), dimension(:), pointer :: tp1, tp2
    end subroutine
  end interface

END MODULE

```

Das Array PRXS wird in der Routine COCTR1 dynamisch allokiert und mit den Werten aus der WQ-Bibliothek belegt:

```

SUBROUTINE COCTR1

  USE QC_HEADER

C   temporary array for PRXS
  Real (8), Dimension (:), Allocatable :: TRXS
  <skip>

  if(allocated(PRXS)) then
    deallocate (PRXS)
  endif
  allocate (PRXS (NCOMPC))

CV   DO IJK = 1,11  or by full = 13
  DO IJK = 1, NCOMPC
    <skip>
C   read 13 XS table values -full library
    DO J=1,xs_table_val
C   <skip>
C   allocate memory for PRXS
      If (J .EQ. 1) Then
        allocate (PRXS (IJK) %arr (IEND + nRec*xs_table_val))
        do ind = 1, size (TRXS)
          PRXS (IJK) %arr (ind) = TRXS (ind)
        enddo
        deallocate (TRXS)
      Endif

C   XS table values
      READ (303, '(5E13.6)') (PRXS (IJK) %arr (M), M= (IEND+1),
&                               (IEND + nRec))
      IEND = IEND + IIXS (IJK, J+6)
    ENDDO
    <skip>
  ENDDO
End module

```

Schließlich verwendet die modifizierte CROLRA-Routine die Zeiger auf Abschnitte des Arrays PRXS:

```

C   pointer to the XS table of fuel type KKEY
  pa => PRXS (KKEY) %arr (:)
  <skip>
  tp1 => pa (1:ISUM)
  <skip>
  tp2 => pa (IEND+1:IEND+IIXS (KKEY, J+6))
  <skip>
  CALL LINT4DMOD (IT, tp1, tp2, X, FF)

```

Die Einführung von intelligenten Zeiger-Objekten erlaubt eine weitere deutliche Beschleunigung der CPU-Rechenzeit um den zusätzlichen Faktor 20. Die Hotspotanalyse des optimierten QUABOX-CUBBOX Code zeigt, dass die CROLRA-Routine deutlich nach unten rutscht (Abb. 3.16).

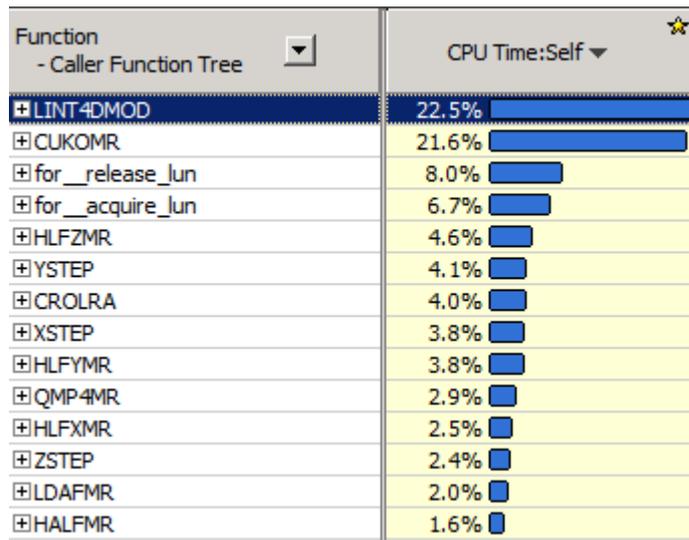


Abb. 3.16 Hotspotanalyse des optimierten Q/C-Codes

Als Ergebnis der Optimierungen ist die CPU-Gesamtzeit für die Ausführung von QUABOX/CUBBOX für den untersuchten Anwendungsfall um den Faktor 140 reduziert worden.

Erweiterung der Zyklus-Abbrandberechnungen für borfreie Kerne

In QUABOX/CUBBOX besteht bereit die Möglichkeit, Zyklus-Abbrandberechnungen durchzuführen. Im Eingabedatensatz wird eine Anfangsabbrandverteilung vorgegeben. Eine Reihe von stationären Rechnungen wird für einzelne Zeitpunkte durchgeführt. Der Abbrand wird mit der berechneten Leistungsverteilung aufintegriert und die neue Abbrandverteilung wird für die nächste stationäre Rechnung benutzt. Der Anwender kann die Anzahl von Abbrandsschritten (=stationäre Rechnung) und die Schrittlänge im Eingabedatensatz steuern. Zyklus-Abbrandberechnungen waren bislang nur für zwei Kritikalitätsabgleichsoptionen möglich, nämlich Eigenwertsuche und Suche der kritischen Borkonzentration.

In Reaktoren, die ohne Borsäure gesteuert werden, wird die Leistungsverteilung, d. h. die Abbrandverteilung, stark von der Steuerabstellung beeinflusst. Deswegen wurde der Zyklus-Abbrand-Modus von QUABOX/CUBBOX für die Kritikalitätsabgleichsoption der kritischen Steuerabstellung erweitert. Diese Entwicklung kann z. B. für Siedewasserreaktoren und kleine modulare Reaktoren angewendet werden. Die französische Firma DCNS hat QUABOX/CUBBOX für Zyklusrechnungen für kleine modulare Reak-

toren benutzt. Die Ergebnisse sind zufriedenstellend und werden in /ING 15/ in ICAPP2015 präsentiert werden.

Implementierung seitlicher Diskontinuitätsfaktoren

Die Genauigkeit der Fluss- beziehungsweise Leistungsdichteberechnung mit nodalen Verfahren hängt nicht nur vom mathematischen Ansatz (Entwicklungsfunktionen innerhalb des Knotens) und der physikalischen Näherung (Diffusion oder Transport, zwei oder mehr Energiegruppen) ab, sondern wird auch durch den Fehler bei der Homogenisierung der neutronenphysikalischen Eigenschaften über die Knoten, bei der Erstellung der Wirkungsquerschnittsbibliotheken, mitbestimmt. Eine Möglichkeit der Korrektur dieses Homogenisierungsfehlers ist die Anwendung sogenannter Diskontinuitätsfaktoren. Im Rahmen der verallgemeinerten Äquivalenztheorie (Generalized Equivalence Theory, GET) ist es möglich, sowohl volumenintegrierte Reaktionsraten als auch die Neutronenströme durch die Oberfläche des Volumens (Randbedingungen) zu erhalten, indem die Forderung nach Stetigkeit des volumenhomogenisierten Flusses an der Oberfläche aufgegeben und die Unstetigkeit durch Brennelement-Diskontinuitätsfaktoren (Assembly Discontinuity Factors, ADF) ausgedrückt wird. In QUABOX/CUBBOX wurden bisher solche ADF direkt in den Wirkungsquerschnittsbibliotheken berücksichtigt. In heterogenen Brennelementkonfigurationen mit abbrennbaren Absorberstäben und dem MOX-Brennstoff zeigt die Anwendung von ADF eine deutliche Verbesserung der Genauigkeit der Ergebnisse /PAS 10/. Der Vorteil einer solchen Vorgehensweise ist, dass der Quellcode des QUABOX/CUBBOX unverändert bleibt. Die benötigten Änderungen betreffen nur die Wirkungsquerschnitte selbst. Allerdings funktioniert diese vereinfachte Methode nur dann, wenn die ADF nicht sehr stark von der Orientierung der Brennelementenseiten abhängig sind. In den meisten Druckwasserreaktor-Modellen wird aus diesem Grund mit einem ADF gearbeitet, um die Neutronenströme zwischen benachbarten Knoten zu beschreiben.

Andererseits verursachen in einem Siedewasserreaktor die Steuerstäbe, die zwischen den Brennelementen in den Kern eingefahren werden können, eine Unsymmetrie des homogenisierten Gebietes, das aus dem Brennelement mit anteiligen Wasserspalt oder Absorber besteht. Demzufolge mussten für jedes Brennelement in jeder Energiegruppe mindestens zwei verschiedene ADF berücksichtigt werden. Aus diesem Grund wurde im Rahmen des Vorhabens die seitliche ADF-Implementierung im QUABOX/CUBBOX-Code vorgenommen. Grundlage dafür ist die Darstellung des homogenisierten Neutronenflusses innerhalb eines Volumenelementes als Polynomfunk-

tion, welche an den Trennflächen zu den benachbarten Volumenelementen nicht notwendigerweise stetig ist. Die Implementierung in QUABOX/CUBBOX erfordert eine Modifizierung der ortsdiskretisierten Gleichungen in der lokalen Polynomapproximation. Diese wurde sowohl für die quadratische Lagrangeinterpolation als auch für kubische und spezielle Polynominterpolation 6. Grades vorgenommen. In QUABOX/CUBBOX sind die ADFs vollständig in das Wirkungsquerschnitts-Interpolationsverfahren integriert. Die ADFs können für jeden Brennstofftyp in den Wirkungsquerschnittsbibliotheken in Abhängigkeit von Abbrand und thermohydraulischen Parametern spezifiziert werden. Eine detailliertere Beschreibung wird als Kapitel der QUABOX/CUBBOX-Dokumentation veröffentlicht.

3.4 Weiterentwicklung und Anwendung der SPH-Methode mit QUABOX/CUBBOX

Um eine konsistente Homogenisierung von Wirkungsquerschnitten auf Stabzellbasis zu erreichen, wurde die Entwicklung und Anwendung der sog. „Superhomogenization“-Methode (SPH) im Zusammenspiel mit dem Diffusionscode QUABOX/CUBBOX und dem Transportcode NEWT weitergeführt. Nachdem die bisherigen Ergebnisse für die berechneten 2D-Anordnungen vielversprechend waren (siehe hierzu auch Anhang B8), wurde damit begonnen die Methodik für die dritte Dimension (z-Achse) zu erweitern.



Abb. 3.17 3D-Modell des C5G7-Benchmarks für QUABOX/CUBBOX

Weiterhin wurden die berechneten 2D-Kerne noch detaillierter im QUABOX/CUBBOX-Modell abgebildet. Dazu wurde der ca. 1.5 mm breite Wasserspalt, welcher sich zwischen zwei Brennelementen befindet, modelliert. Hierzu wurden verschiedene Ansätze zur Nodalisierung in den NEWT- und QUABOX/CUBBOX-Modellen erprobt.

Die Anwendung der mittels der SPH-Methode erzeugten Wirkungsquerschnitte auf ein 3D-Modell wurde zuerst an der 3D-Version des C5G7-Benchmarks durchgeführt. Dazu wurde ein QUABOX/CUBBOX-Modell eines Viertelkerns (einschließlich Reflektor) detailliert mit über 50000 Rechenknoten erstellt. In Abb. 3.17 sind die unterschiedlichen Materialzonen dargestellt, links ein horizontaler, rechts ein vertikaler Schnitt durch die Anordnung. Reflektierende Randbedingungen sind als graue Balken angedeutet.

Die Wirkungsquerschnitte für die einzelnen Brennelemente und den Reflektor wurden aus dem 2D-Modell übernommen. Die ersten Ergebnisse zeigen, dass QUABOX-/CUBBOX in der Lage ist diese detaillierte Darstellung des Kerns zu berechnen. Die mittleren und maximalen relativen Abweichungen in der Stableistung zur Monte-Carlo-Referenzrechnung sind in Tab. 3.5 dargestellt.

Tab. 3.5 Mittlere und maximale relative Stableistung Abweichungen zwischen QUABOX/CUBBOX und die Monte-Carlo-Referenzrechnung

Ebene	Mittlere Abweichung (%)	Maximale Abweichung (%)
Z=1	2.14	10.05
Z=2	2.15	10.17
Z=3	2.24	10.08
Z=4	2.47	11.03
Z=5	3.17	13.03
Z=6	11.96	23.29

Die Ergebnisse für die Leistungsverteilung in den Ebenen Z=1 bis Z=5 sind zwar deutlich, allerdings wird die maximale relative Abweichung immer dort beobachtet, wo die Leistung am geringsten ist. In der Ebene Z=6 ist die Leistungsverteilung noch nicht zufriedenstellend; hier sind die mittlere und maximale Abweichung deutlich größer als in den anderen Ebenen. Außerdem können große Abweichungen in Brennstäben mit hoher Leistung auftreten. Dieses Ergebnis ist insbesondere auf die einfache Modellierung des axialen Reflektors zurückzuführen.

Eine erste Verbesserung ist durch Erstellung unterschiedlicher Reflektormodelle für die axiale und die radiale Richtung zu erwarten. Eine weitere Verbesserungsmöglichkeit

besteht darin, den Reflektor in unterschiedliche Ebenen aufzuteilen und für jede Ebene eigene Wirkungsquerschnitte zu erzeugen.

Für das detaillierte 2D-Modell (inkl. Wasserspalt) gibt es zwei Modellierungsstrategien für NEWT und QUABOX/CUBBOX. Im ersten Modell sind die äußeren Brennstabzellen größer (1.335 cm breit statt 1.26 cm). Im zweiten Modell wird das Volumen des Wasserspalts auf alle Brennstabzellen gleichmäßig verteilt. In diesem Fall ist jeder Zellabstand 1.2688 cm.

Tab. 3.6 Vergleich von mit KENO und QUABOX/CUBBOX mit SPH berechneten Leistungsverteilungen in zwei Brennelementtypen

KENO – Q/C	Relative Abweichung (%)	UO2 Brennelement	MOX Brennelement
Modell 1	Mittlere Abweichung	2.22	2.94
	Maximale Abweichung	10.26	12.16
Modell 2	Mittlere Abweichung	0.67	1.22
	Maximale Abweichung	1.96	3.43

Es stellt sich heraus (siehe Tab. 3.6), dass das Modell mit Rechenknoten mit gleichen Abständen die besten Rechenergebnisse liefert. Dies ist auf den Lösungsalgorithmus von QUABOX/CUBBOX zurückzuführen. Allerdings sind die Abweichungen zu den Monte-Carlo-Referenzergebnissen etwa doppelt so groß wie ohne die Modellierung des Wasserspalts, wenn der ganze zweidimensionale C5G7-Kern simuliert wird. Dies könnte zum einen an den zugrunde liegenden NEWT-Modellen liegen. Zum anderen muss überprüft werden, ob die im Programm implementierte verallgemeinerte Selen-gut-Normierung für die geänderte Geometrie richtig anwendbar ist.

Zunächst wurde die pin-by-pin-SPH-Methode unter Verwendung des Monte-Carlo-Transportcodes SERPENT /LEP 12/ implementiert (siehe Anhang A3). Mit diesem Rechensystem wurde die Wirksamkeit der SPH-Methode für 2D- sowie 3D-Simulationen getestet und ihre Tauglichkeit für verschiedene (u. a. thermodynamische) Bedingungen überprüft. Die Monte-Carlo-Referenzergebnisse wurden ebenfalls mit SERPENT erzeugt.

Tab. 3.7 Mittlere und maximale relative Stabeistung Abweichungen zwischen QUABOX/CUBBOX und die Monte-Carlo-Referenzrechnung

Rechenmethode	Mittlere Abweichung (%)	Maximale Abweichung (%)
QC ohne Korrektur	1.54	4.0
QC mit SPH-Korrektur	1.32	3.5
QC mit RDF-Korrektur	1.25	4.6
QC mit SPH- und RDF-Korrektur	1.01	4.1
QC mit GS-Korrektur	1.58	5.9
QC mit SPH- und GS-Korrektur	1.42	5.8
QC mit GS- und RDF-Korrektur	1.04	4.0
QC mit SPH-, GS- und RDF-Korrektur	0.84	3.9

Zusätzlich zur SPH-Methode sind weitere Korrekturen anwendbar. Beim Zusammenfügen von unterschiedlichen Brennelementen ergibt sich an deren Grenzen eine Unstetigkeitsstelle zwischen den homogenisierten Flüssen im jeweiligen Brennelement („Assembly Discontinuity“). Durch die Generalized-Selengut-Korrektur (GS-Korrektur) wird der Fluss so angepasst, dass die Stabeistungverteilung an der Brennelementgrenze mit hoher Genauigkeit simuliert wird. An den Grenzflächen zwischen dem Reflektor und den Brennelementen ergeben sich wieder Unstetigkeitsstellen im Fluss, was letztendlich zu großen Fehler in der äußersten Stabreihe der aktiven Zone führt. Man löst dieses Problem analog zur GS-Korrektur durch Reflektor-Diskontinuitätsfaktoren (RDF).

Der Einfluss jeder Korrektur auf die Abweichung der relativen Brennstabeistung vom Referenzergebnis für den 2D-Fall wird in Tab. 3.7 dargestellt. Diese Ergebnisse zeigen, dass die Methode erfolgreich implementiert wurde.

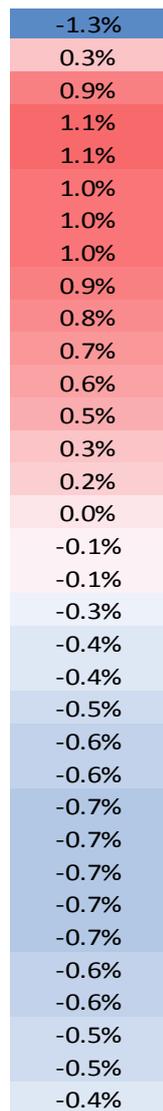


Abb. 3.18 Mittlere Relative Abweichung in jeder axialen Ebene im 3D-Modell

Für das 3D-Modell wurde insbesondere ein axialer Reflektor erzeugt. Die Ergebnisse zeigen keine deutliche Verbesserung im Vergleich mit den mit SCALE erhaltenen Leistungsverteilungen. Eine erhöhte Genauigkeit kann erreicht werden, wenn die axiale Nodalisierung von QUABOX/CUBBOX verfeinert wird. Statt 6 axialer Ebenen wurden 34 benutzt. Die Mittlere Relative Abweichung in jeder Ebene ist in Abb. 3.18 dargestellt. Die höchste Abweichung wird immer dort beobachtet (sowohl im 2D- als auch im 3D-Modell), wo mehrere unterschiedliche Materialien benachbart sind, nämlich im Eckstab eines Brennelementes neben dem Reflektor.

Um die Abhängigkeit der SPH-Faktoren von Temperatur, Moderatorichte, Borkonzentration zu bestimmen, wurde ein Vollast-Zustand des C5G7-Benchmarks simuliert. Diese Rechnungen zeigen, dass die SPH-Faktoren (und weitere Korrekturen) abhängig

vom thermohydraulischen Zustand sind. Für gekoppelte Simulationen sollte daher für jeden thermohydraulischen Zustand der Wirkungsquerschnittsbibliothek die SPH-Methode individuell angewendet werden.

3.5 Rechenbenchmark mit IRSN

Im Rahmen einer Zusammenarbeit mit dem IRSN (Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire), wird ein Benchmark durchgeführt. Ziel dieses Benchmarks ist ein Vergleich der verschiedenen Schritte der Berechnungskette von Leistungsverteilungen für Druckwasserreaktoren von GRS und IRSN.

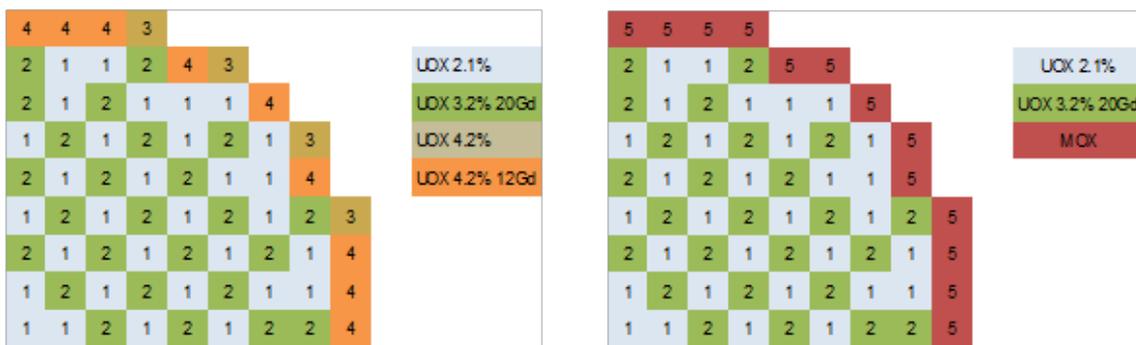


Abb. 3.19 Generische EPR-basierte Kernbeladungen aus dem UAM-LWR- Benchmark mit UOX und UOX/MOX

Die Wirkungsquerschnitte für zwei generische EPR-basierte Kernbeladungen aus dem UAM-LWR-Benchmark wurden mit den jeweiligen Spektralcodes erzeugt. Der UOX-Kern besteht aus vier Brennelementtypen, die sich in der U-235-Anreicherung und durch den Einsatz von Gd_2O_3 -Brennstäben unterscheiden. Der MOX-Kern ist aus drei verschiedenen Brennelementtypen zusammengesetzt, nämlich zwei Uran-Brennelementen mit und ohne Gadolinium-Brennstäbe und einem MOX-Brennelement, welches aus drei verschiedenen Brennstabtypen mit verschiedenen Plutoniumgehalten besteht. Weiterhin wurden der Vollast-Zustand und die thermo-hydraulischen Bedingungen als homogen über den Reaktorkern angenommen. Die beiden Kernbeladungen mit UOX und UOX/MOX sind in Abb. 3.19 dargestellt.

Ein direkter Vergleich der Wirkungsquerschnitte wurde durchgeführt. Zunächst wurden die Wirkungsquerschnitte in einem Diffusionscode benutzt um die Kern-Leistungsverteilung zu berechnen. Schließlich wurden die berechneten Leistungsverteilungen verglichen.

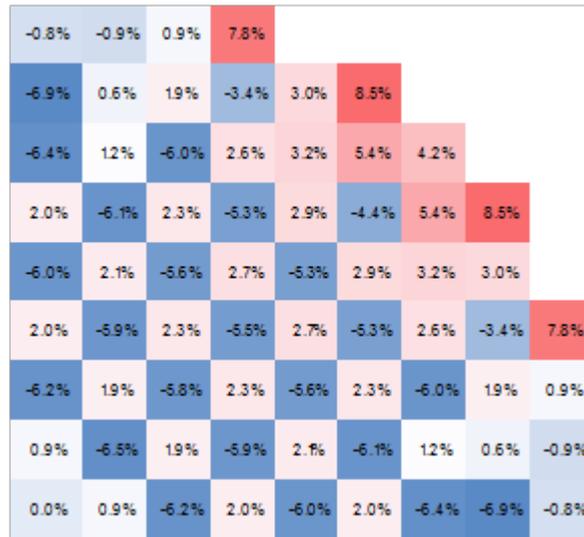


Abb. 3.20 Vergleich der mit CRONOS und QUABOX/CUBBOX berechneten Leistungsverteilungen des EPR-UOX-Kerns

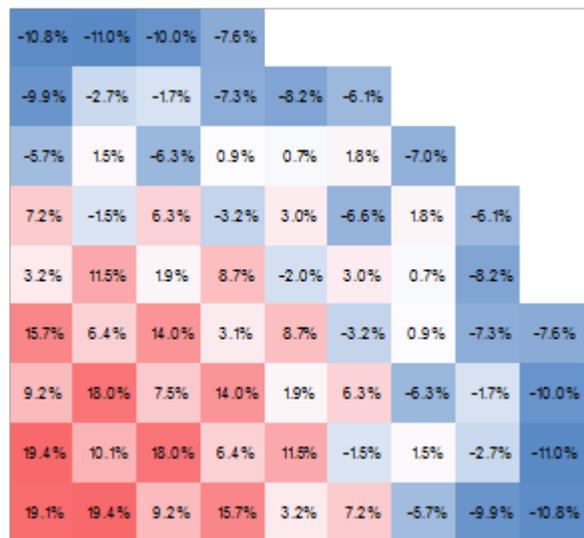


Abb. 3.21 Vergleich der mit CRONOS und QUABOX/CUBBOX berechneten Leistungsverteilungen des EPR-UOX/MOX-Kerns

Von der GRS wurde der Spektralcode TRITON aus dem SCALE-6.1-System verwendet. Auf der IRSN-Seite wurden die Codes APOLLO2 und DRAGON benutzt. Die verwendeten nuklearen Daten sind ENDF/B-VII mit TRITON und JEF-2.2 mit APOLLO2. Die Kern-Leistungsverteilungen wurden von GRS und IRSN mit QUABOX/CUBBOX (Q/C) beziehungsweise CRONOS berechnet. Der Vergleich der Leistungsverteilungen für den UOX-Kern ist in Abb. 3.20 dargestellt, für den UOX/MOX-Kern in Abb. 3.21.

Der Vergleich der Leistungsverteilungen für die UOX-Kernbeladung zeigt eine gute Übereinstimmung; größere Abweichungen sind bei den Leistungsverteilungen der MOX/UOX-Kernbeladung zu beobachten.

Der Vergleich der Wirkungsquerschnitte für jeden Brennelementtyp zeigt systematische Abweichungen. So sind etwa die Werte für $\kappa\Sigma_f$ (Energie x Spaltwirkungsquerschnitt) bei APOLLO2 immer größer als bei NEWT. Die Abweichung der thermischen $\kappa\Sigma_f$ ist ca. doppelt so groß in den UOX-Brennelementen mit Gadolinium (+4 %) und im MOX-Brennelement (>5 %) als in den UOX-Brennelementen ohne Gadolinium (+2 %). Generell sind die Abweichungen in den UOX-Brennelementen mit Gadolinium und im MOX-Brennelement größer als in den UOX-Brennelementen ohne Gadolinium. Als mögliche Ursachen für die Abweichungen in den Leistungsverteilungen kommen auch die Reflektor-Wirkungsquerschnitte in Frage.

Nach dieser ersten Phase wurde bei IRSN eine neue Strategie gewählt: Anstatt APOLLO/CRONOS wird die DRAGON/DONJON-Rechenkette angewendet. Außerdem wird der Diffusionscode PARCS, der sowohl bei der GRS als auch bei IRSN verfügbar ist, für die Simulationen verwendet; dabei werden auch mit NEWT und DRAGON erzeugte Wirkungsquerschnitte benutzt.

Die Vorgehensweise und Ergebnisse dieser Studie wurden in einem gemeinsamen Artikel /PER 15/ von GRS und IRSN dargelegt und auf der EUROSAFE-Konferenz 2013 mit einem Vortrag und einem Poster vorgestellt.

Der Fokus lag dabei auf zwei verschiedenen Arten von Unsicherheiten: die Unsicherheiten in den nuklearen Daten und die Unsicherheiten, die durch Näherungen in der Modellierung, insbesondere der Modellierung des Reflektors, einen Einfluss auf die integralen Endergebnisse haben. In der Regel werden solche Unsicherheiten durch Vergleich mit Neutronenflussmessungen bestimmt, jedoch sind solche Messungen für neue Reaktorkonzepte wie GEN-III nicht verfügbar.

Als Erstes wurde der Einfluss der nuklearen Datenbibliotheken ENDF/B-VII.0, JEF-2.2 und JEFF-3.1.1 auf die resultierende Leistungsverteilung des UOX-Kerns untersucht. Hierzu wurden mit dem Gittercode DRAGON jeweils homogenisierte, makroskopische Wirkungsquerschnitte auf der Basis der verschiedenen Datenbibliotheken erzeugt und mit dem Kernsimulator DONJON die Leistungsverteilung ermittelt. Zwischen ENDF/B-VII.0 und JEFF-2.2 ergibt sich eine maximale Abweichung in der radialen Leistungsver-

teilung von 8 %; zwischen ENDF/B-VII.0 und JEFF-3.1.1 sind es 3 %. Die Abnahme erklärt sich durch die zunehmende Konvergenz einzelner Nuklidevaluationen in den verschiedenen Datenbibliotheken. Unter Anwendung von XSUSA, NEWT und QUABOX/CUBBOX wurde die Fehlerfortpflanzung der Unsicherheiten in den nuklearen Daten auf die Leistungsverteilung des UOX- und des MOX-Kerns untersucht. Hierzu wurden 300 variierte, makroskopische 2-Gruppen-Wirkungsquerschnittsbibliotheken erzeugt, die jeweils zur Berechnung der Leistungsverteilung mit QUABOX/CUBBOX eingesetzt wurden. Bei beiden Reaktorkernen sind die resultierenden Unsicherheiten in der Leistungsverteilung in Ringen über den Reaktorkern verteilt. Das Maximum liegt im Zentrum der Reaktorkerne, 5.3 % beim UOX Kern und 13 % beim MOX Kern. Die geringsten Unsicherheiten liegen ringförmig zwischen Zentrum und dem äußeren Rand der Reaktorkerne. Eine weitere Analyse hat gezeigt, dass beim Austausch des deterministischen Codes NEWT gegen den Monte-Carlo-Code KENO gleiche Werte für die Unsicherheiten ermittelt werden und somit die Ergebnisse der Unsicherheitsanalyse unabhängig von der verwendeten Neutronentransportmethode sind.

Als Nächstes wurde der Einfluss verschiedener Gittercodes untersucht. Hierzu wurden homogenisierte, makroskopische Wirkungsquerschnitte sowohl mit NEWT als auch mit DONJON erzeugt und als Basis im Kernsimulator DRAGON benutzt. Zwischen den ermittelten Leistungsverteilungen ergibt sich eine maximale Abweichung von 2 % (siehe Abb. 3.22). Dieses Ergebnis zeigt, dass bei der Bestimmung der Leistungsverteilung die Unsicherheiten der nuklearen Daten die Unsicherheiten in den Methoden der Wirkungsquerschnittserzeugung deutlich überwiegen.

In einem weiteren Schritt wurden die verschiedenen Kernsimulatoren miteinander verglichen. Hierzu wurden zuerst Wirkungsquerschnittsbibliotheken mit NEWT für den UOX-Kern ermittelt und anschließend Leistungsverteilungen sowohl mit PARCS als auch mit QUABOX/CUBBOX berechnet. Mit der ANM-Methode von PARCS ergibt sich eine maximale Abweichung von 3 % zwischen den beiden Kernsimulatoren. Wählt man bei PARCS die NEM-Methode, reduziert sich die maximale Abweichung auf 1 %. Bei Anwendung der mit DRAGON ermittelten Wirkungsquerschnittsbibliotheken ergibt sich eine maximale Abweichung zwischen PARCS (NEM-Methode) und DONJON von 1.5 %.

den UOX-Kern 3 % (siehe Abb. 3.23 links). Die gleiche Abweichung wurde auch zwischen KENO und PARCS (mit makroskopischen Wirkungsquerschnitten von NEWT) ermittelt. Zwischen KENO und DRAGON/DONJON beträgt die maximale Abweichung 7.8 % (siehe Abb. 3.23 rechts). Im Fall des MOX-Kerns ergeben sich durch die heterogene Neutronenflussverteilung aufgrund des MOX-Brennstoffs geringfügig größere Abweichungen zwischen QUABOX/CUBBOX und KENO, und auch PARCS und KENO. Insgesamt führt somit die Benutzung verschiedener Kernsimulatoren nur zu geringen Abweichungen in der Leistungsverteilung. Die größere Abweichung zwischen KENO und DRAGON/DONJON ist höchstwahrscheinlich auf die Reflektormodellierung zurückzuführen, da im Fall der QUABOX/CUBBOX Rechnung eine Optimierung der Reflektorwirkungsquerschnitte anhand einer KENO Simulation vorausgegangen ist. Dies wurde bei der Ermittlung der Reflektorwirkungsquerschnitte für DRAGON/DONJON nicht unternommen.



Abb. 3.24 Abweichungen zwischen QUABOX/CUBBOX und KENO für den UOX-Kern im gestörten Kernzustand

Als letzte Untersuchung wurde eine vorläufige Analyse hinsichtlich des Verhaltens der Reflektorwirkungsquerschnitte bei einem hypothetisch gestörten Kernzustand durchgeführt. Hierzu wurde in einem Viertel des UOX-Reaktorkerns die Brennstofftemperatur von 900K auf 600K vermindert und mit diesen Bedingungen eine neue Monte-Carlo-Referenzrechnung mit KENO durchgeführt. Für die deterministischen Rechnungen wurde auf dieselben Programme und auf dieselben Reflektorwirkungsquerschnitte wie

in den vorherigen Untersuchungen zurückgegriffen. Die Abweichungen zu dem KENO-Referenzergebnis, die bereits vorher für den ungestörten Kernzustand ermittelt wurden, erhöhen sich für den gestörten Kernzustand um folgende Beträge: 1 % bei QUABOX/CUBBOX, 2 % bei PARCS und 1 % bei DONJON (siehe Abb. 3.24).

Als Fazit dieser Untersuchungen hat sich ergeben, dass verschiedene, numerische Methoden zu geringen Abweichungen in der Ermittlung der Leistungsverteilung führen und im Vergleich dazu, die Unsicherheiten der nuklearen Daten einen größeren Einfluss auf die Unsicherheit von integralen Größen wie die Leistungsverteilung haben. Ferner hat sich gezeigt, dass sich bei einer Unsicherheitsanalyse hinsichtlich nuklearer Daten für den MOX Kern größere Unsicherheitsbeträge im Vergleich zum UOX Kern ergeben. Darüber hinaus zeigt die Modellierung des Reflektors ebenfalls einen Einfluss auf die Leistungsverteilung.

3.6 Anwendung von DYN3D für schnelle Anordnungen

Zur Beschreibung schneller Systeme sind häufig Rechenprogramme erforderlich, die die Fähigkeit besitzen, Anordnungen in hexagonaler Geometrie zu beschreiben. In der GRS steht dazu der am HZDR entwickelte Code DYN3D /GRU 00/ zur Verfügung, der von Anfang an auch für hexagonale Geometrie entwickelt wurde. DYN3D geht über den Ansatz der Diffusionsnäherung mit zwei Energiegruppen hinaus; der Code besitzt die Fähigkeit, Multigruppen-Wirkungsquerschnitte zu verwenden und löst die Neutronentransportgleichung näherungsweise mit der SP3-Methode, die der SN-Methode in der Qualität nahe kommt. DYN3D wurde bislang vornehmlich, was hexagonale Geometrie betrifft, für LWR-Systeme verwendet. Im Rahmen des Vorhabens RS1503 wurde es in die nukleare Berechnungskette der GRS integriert.

Zum Einsatz von DYN3D für schnelle Systeme wurde, mit Unterstützung durch SECNRS, die russische Anlage BFS ("Big Physical Facility") herangezogen /NEA 14, IAE 10/. Diese ist ein 1:1-Modell des natriumgekühlten Leistungsreaktors BN-600. Der Kern besteht im Wesentlichen aus drei Brennstoffzonen, bezeichnet mit „Innerer Kern“ (LEZ), „Mittlerer Kern“ (MEZ) und „Äußerer Kern“ (HEZ), die UO₂-Brennstoff mit unterschiedlichen Anreicherungen enthalten. Der Kern ist von radialen und axialen Zonen, den sog. „Blankets“, aus abgereichertem Uranoxid umgeben. Daneben wurde ein 120°-Sektor des radialen Blankets außerhalb des Kerns durch Edelstahl ersetzt ist, hinter dem sich eine B₄C-Zone befindet. Zwischen den MEZ- und HEZ-Zonen befindet

sich ein ringförmiger Bereich aus MOX-Brennstoff (MOX). Die Kernanordnung ist in Abb. 3.25 dargestellt.

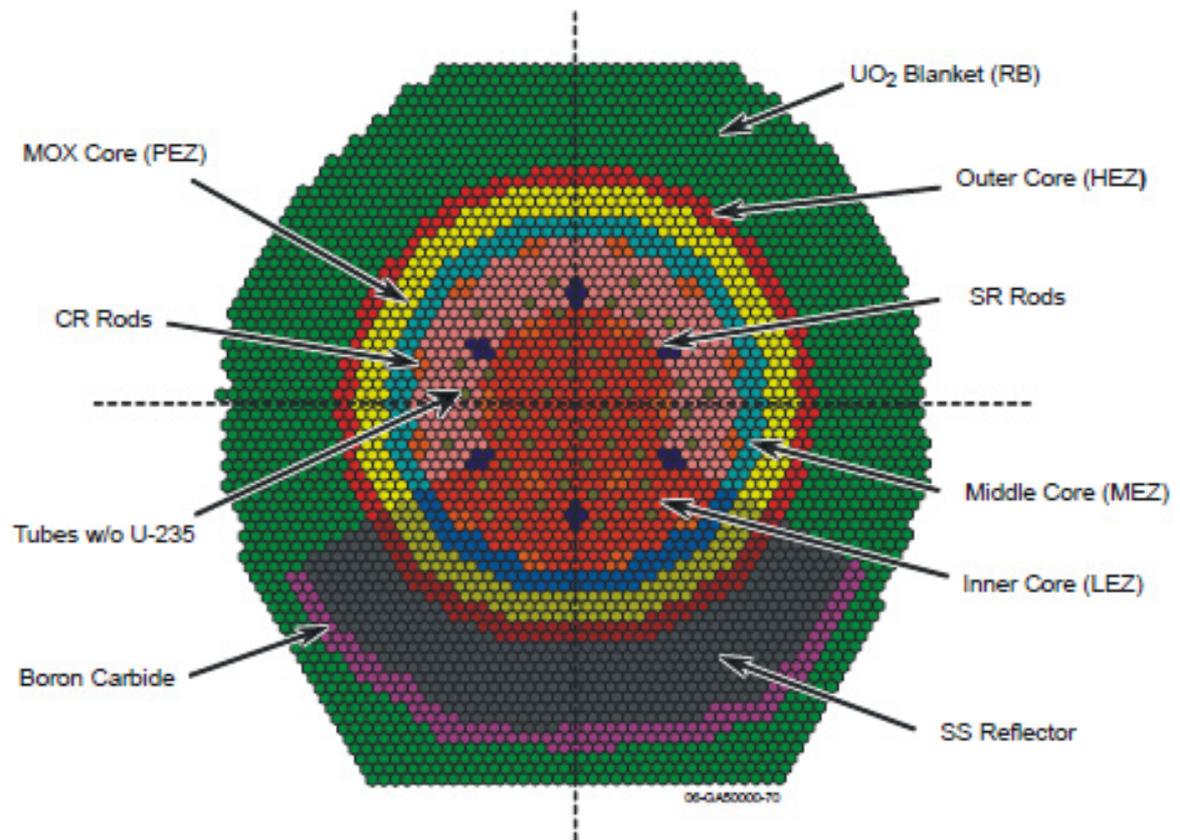


Abb. 3.25 BFS-Kernanordnung

Alle Brennstoff-Baugruppen im BFS-62-Kern bestehen jeweils aus einer Matrix aus vertikalen Stahlrohren oder -Stäben, siehe Abb. 3.26. Die Rohre sind in einem hexagonalen Gitter mit einer Weite (Mittelpunkt zu Mittelpunkt) von 5.1 cm angeordnet. Jedes Rohr einer Standardzelle ist mit Pellets aus Brennstoff und Strukturmaterial mit 4.7 cm Durchmesser gefüllt. Zur Beschreibung mit DYN3D wird jedes Brennelement als flächengleiches homogenisiertes Sechseck modelliert; dies ist in Abb. 3.27 skizziert.

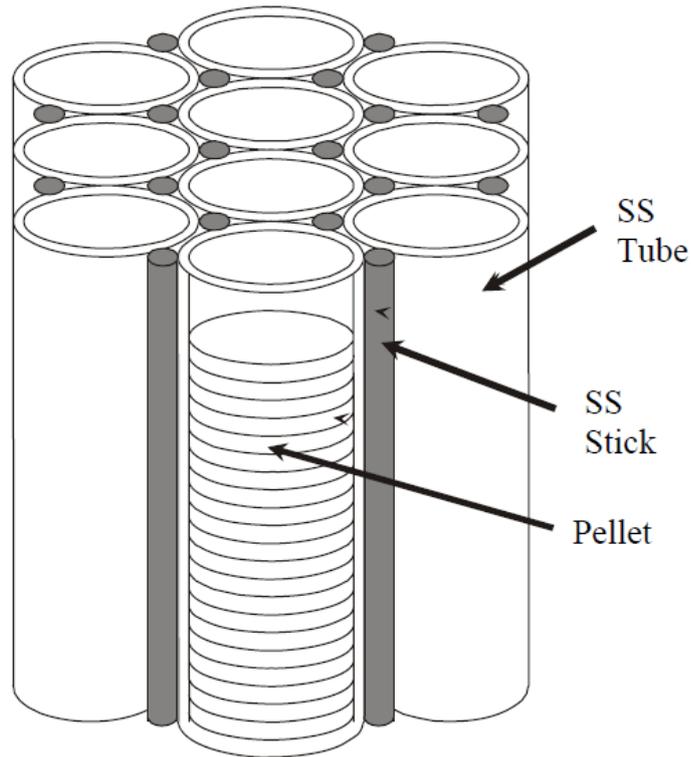


Abb. 3.26 BFS-Brennelemente (Detail)

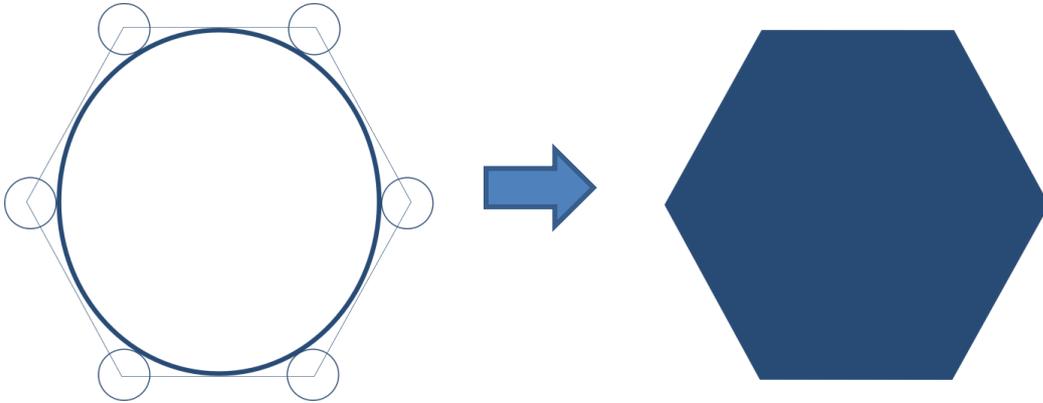


Abb. 3.27 Homogenisierung der BFS-Brennelemente

Die axialen Abschnitte der unterschiedlichen Elemente sind in Abb. 3.28 dargestellt. Die regulären Brennelemente (LEZ, HEZ, MEZ, MOX) bestehen neben dem Brennstoff-Abschnitt aus vier weiteren Abschnitten mit Strukturmaterial. Die Blankets, Stahlreflektoren und B_4C -Abschirmstäbe haben nur einen durchgehenden Abschnitt. Die Steuer- und Abschaltstäbe besitzen neben dem Absorber-Abschnitt drei weitere Abschnitte aus Strukturmaterial.

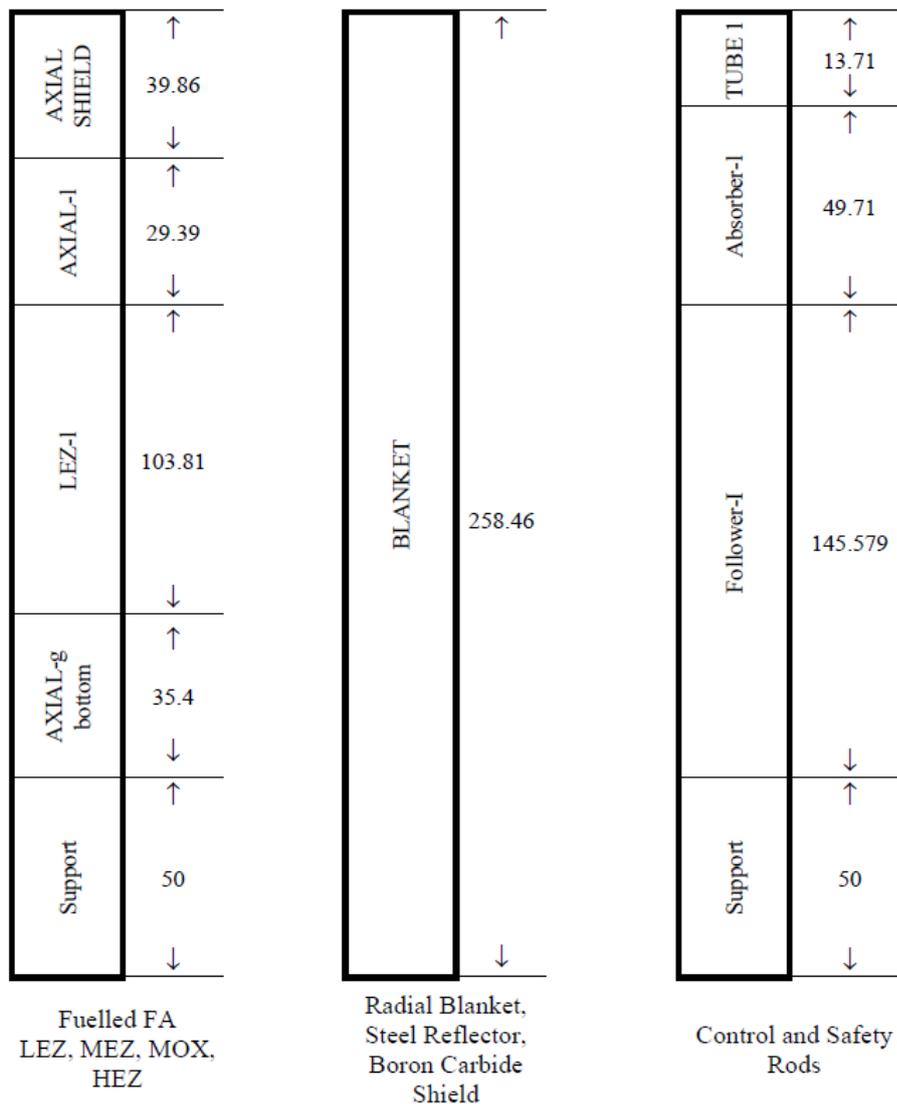


Abb. 3.28 Axiale Zusammensetzung der BFS-Brennelemente

Zunächst wurde ein Modell der BFS-Anordnung für den Monte-Carlo-Code SERPENT erstellt. Die Berechnungen wurden mit ENDF/B-VII-Daten mit kontinuierlicher Energie durchgeführt. Das SERPENT-Ergebnis für den Multiplikationsfaktor ist 0.99394 ± 0.00004 ; dies liegt etwas über dem Benchmark-Wert von 0.9887 ± 0.0030 /IAE 10/, ist aber innerhalb von zwei Standardabweichungen des Benchmark-Werts mit diesem verträglich.

Mit SERPENT ist es auch möglich, Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte für nodale Codes zu erzeugen. Dies wurde für die unterschiedlichen Elemente des BFS-Kerns durchgeführt; damit kann der Kern mit DYN3D modelliert werden. Diejenigen Elemente, die spaltbares Material enthalten, können zur Wirkungsquerschnittserzeugung mit SERPENT als hexagonale Anordnungen im unendlichen Gitter dargestellt werden.

Elemente ohne spaltbares Material wurden als von Brennstoff umgebene hexagonale Anordnungen mit reflektierenden Randbedingungen modelliert, wie in Abb. 3.29 skizziert.



Abb. 3.29 Axiale Zusammensetzung der BFS-Brennelemente

Diese Wirkungsquerschnitte wurden in zwei verschiedenen Energiegruppen-Strukturen erzeugt, die sich durch Reduktion der ECCO/ERANOS-Struktur mit 33 Gruppen ergeben. Die Ergebnisse sind, im Vergleich zum Benchmark-Wert und zum SERPENT-Referenzergebnis, in Abb. 3.30 dargestellt.

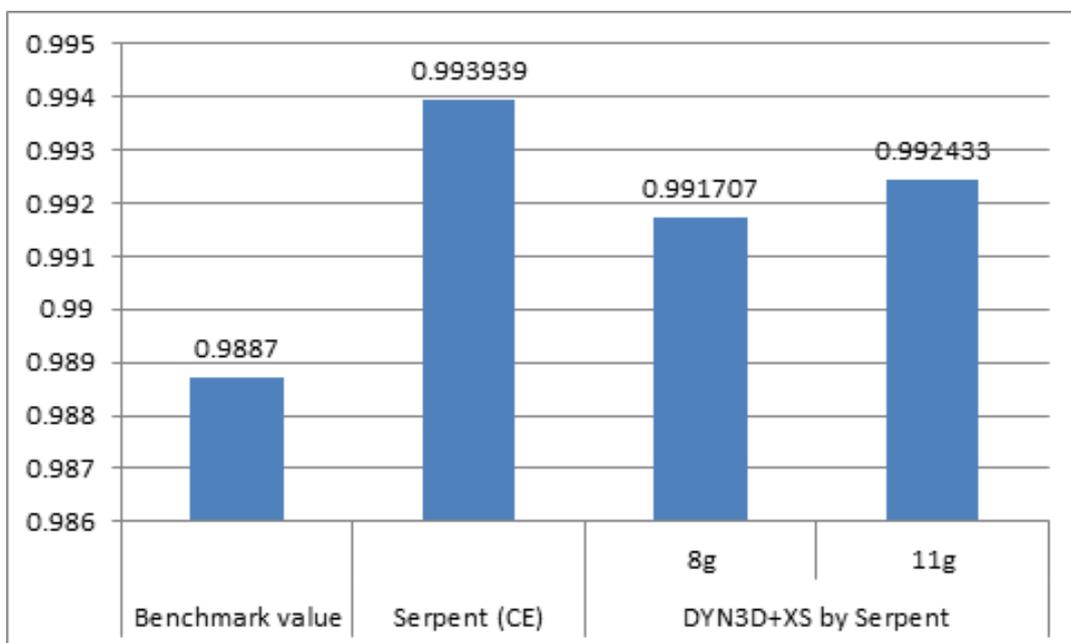


Abb. 3.30 Multiplikationsfaktoren der BFS-Kernanordnungen

Mit DYN3D erhält man sehr gute Übereinstimmung mit der SERPENT-Referenzlösung mit Abweichungen von ca. 200 pcm. Auch die Übereinstimmung mit dem Benchmark-Wert ist sehr zufriedenstellend; mit der 8-Gruppen-Bibliothek beträgt die Differenz nur eine Standardabweichung des Benchmark-Wertes.

4 AP2: Weiterentwicklung, Validierung und Anwendung von Monte-Carlo-Berechnungsmethoden

Der folgende Abschnitt beschreibt die durchgeführten Arbeiten am nuklearen Programmsystem der GRS bezüglich Monte-Carlo-Berechnungsmethoden. Dies sind Arbeiten am Monte-Carlo-Programms MCNP für hohe Ortsauflösung, insbesondere für die Durchführung von gekoppelten Berechnungen mit einem Thermohydraulik-Code, sowie die eigene Erstellung von nuklearen Datenbibliotheken mit dem Programmsystem NJOY. Er enthält auch Erkenntnisse aus Recherchen bzgl. Methoden zur Beschreibung transienter Vorgänge in Reaktoraranordnungen.

4.1 Weiterentwicklung und Validierung des Monte-Carlo-Programms MCNP für hohe Ortsauflösung

Ein Verfahren, mit welchem reaktorphysikalische Aufgabenstellungen sehr genau berechnet werden können, ist das Monte-Carlo-Verfahren, das die Energieabhängigkeit der Neutronenwirkungsquerschnitte kontinuierlich repräsentiert und insbesondere die räumliche Verteilung der Reaktormaterialien sehr detailliert beschreiben kann. Die Leistungsfähigkeit der Methode wurde bereits vielfach demonstriert und stellt somit auch eine Referenzmethode zur Verifikation von Auslegungs-Programmen und zur Interpretation von Experimenten und Benchmarks mit frischem und abgebranntem Brennstoff und einen wichtigen Baustein der reaktorphysikalischen Rechenmethoden dar.

Das vom Los Alamos National Labor (USA) entwickelte Programm MCNP /PEL 13/ ist derzeit das flexibelste und meist angewandte Monte Carlo Programm für Teilchen- und Strahlentransport im Bereich der Reaktorphysik. Insbesondere können Brennstabgitter von Forschungs- und Leistungsreaktoren geometrisch mit Hilfe von sog. „Repeated Structures“ detailliert dargestellt werden. Für gleichartige Materialverteilungen im Gitter lässt sich ein Reaktorkern damit mit relativ geringem Aufwand detailliert darstellen. Die Realität ist allerdings eine sehr heterogene Verteilung der Brennstoff- und Moderator-materialien und deren Temperaturen. Die Darstellung einer heterogenen Materialverteilung für einen ganzen Reaktorkern (Brennstabweise) ist mit MCNP trotz der „Repeated Structures“ sehr aufwendig und überschreitet u. U. interne feste Speichergrenzen wie z. B. die maximal zulässige Anzahl von geometrischen Zellen. Aus diesem Grund wur-

de das Programm MCNP dahingehend erweitert, dass detaillierte Teilchendichte- und Temperaturverteilungen auch für hohe Ortsauflösung effizient berücksichtigt werden können. Dadurch sollen insbesondere Anordnungen mit regulären Gittern (rechteckig, hexagonal) mit Hilfe der in MCNP vorgesehenen „Repeated Structures“ geometrisch für homogene Materialverteilung beschrieben, die reale Material- und Temperaturspezifikation soll jedoch über interne Funktionen berücksichtigt werden. Damit kann z. B. die brennstabweise Beschreibung eines vollständigen Reaktorkernes mit detaillierter Materialspezifikation (durch Abbrand und Thermodynamik) realisiert werden. Dazu sind einige Änderungen im Programmcode erforderlich, mit welchen die im MCNP-Input eingegebenen homogenen Material- und Temperaturverteilungen durch heterogene ersetzt werden. Ferner war es erforderlich, zur effizienten Berechnung von brennstabweisen Reaktionsraten und Leistungsverteilungen, eine generell anwendbare sogenannte „User Tally“-Routine zu programmieren.

Die durchgeführten Erweiterungen wurden durch detaillierte Tests und Vergleiche mit dem Standardverfahren (mit vereinfachter Problemstellung) validiert. Insbesondere wurde die Berücksichtigung der Temperaturabhängigkeit der Doppler-Verbreiterung und der Streuung thermischer Neutronen mittels verschiedener Verfahren getestet.

Für die Erweiterungen wurde die aktuelle Programmversion von MCNP aus dem Package: MCNP6.1 /PEL 13/ zugrunde gelegt. MCNP6 ist eine Zusammenfassung der bisher getrennt entwickelten Versionen MCNP5 und MCNPX.

Erweiterung von MCNP bezüglich hoher Ortsauflösung

Eine hohe Ortsauflösung wird erreicht, wenn z. B. der Reaktorkern stabweise dargestellt wird. In Abb. 4.1 wird dies illustriert. Der Reaktorkern ist ein Druckwasserreaktor mit 17x17 Brennstäben je Brennelement, davon 24 Positionen für Steuerstäbe und einer zentral gelegenen Instrumentierungsposition. Das Beispiel zeigt zusätzlich ein Brennelement mit 5 verschiedenen Brennstabtypen. Obwohl das Brennelement 264 Brennstäbe aufweist, müssen nur 5 verschiedene Zellen definiert werden, mit welchen über eine sog. „fill“-Anweisung ein BE komplett beschrieben werden kann. Das Beispiel zeigt eine 2D-Darstellung, bei realistischen 3D-Anordnungen muss jeder Brennstab ggf. noch in vertikaler Richtung aufgeteilt werden, um axiale Temperatur- und Materialverteilungen zu berücksichtigen.

Eine homogene Verteilung der Materialien und ggf. Brennstoff- und Moderatortemperaturen im Brennelement liegt nur bei einem frischen Kern (BOL) und Nulllast vor. Für alle anderen Zustände sind diese Verteilungen heterogen. Um dies über die MCNP-Standard-Input-Anweisungen zu realisieren, müssten für jeden Brennstab jedes Brennelements für alle vertikalen Schichten Zellen mit dem entsprechenden Material und der entsprechenden Temperatur definiert werden. Für das obige Beispiel würde dies bedeuten, dass 191000 Zellen mit unterschiedlichem Material definiert werden müssten (bei 15 vertikalen Schichten). Als Alternative dazu wurden mittels spezieller Programm-Modifikationen bei MCNP6 die Materialzusammensetzung und die Temperatur intern während der Simulation des Partikelwegs durch die heterogenen Geometriezonen für die Berechnung der makroskopischen Querschnitte und der Bestimmung der Kernreaktion am jeweiligen Ort der Kollision des Partikels mit einem Targetnuklid, sozusagen „on the fly“, zugewiesen. Die Identifikation des Gitterelements am Ort der Kollision liefert dabei MCNP. Bei mehrfach geschichteten Gittern (Brennstabgitter, Brennelementgitter, ...) kann die Adresse für den infrage kommenden Brennstabs aus den Level-Informationen, die MCNP in dem Datensatz pbl %i bzw. pbl %r bereitstellt: (c_i < c_j [j_x j_y j_z] < c_k < c_l [l_x l_y l_z] ...) ermittelt werden. Dabei wird die Materialzusammensetzung des Inputs für die homogene Verteilung durch die aktuelle für den identifizierten Brennstab (allgemeiner für die identifizierte Zone) ersetzt (siehe Abb. 4.2). Dasselbe wird ggf. für die Temperatur durchgeführt.

Die entscheidenden Variablen zur Beschreibung von Materialzusammensetzung und Temperatur sind mat(icl) (beschreibt relative Nuklid-Anteile fme(...)), rho(icl) (beschreibt totale Anzahl von Nukliden (je b-cm) im Material) und tmp(icl) (beschreibt Temperatur in MeV). Die Zell-Variable icl ist bei MCNP6 identisch mit pbl %i %icl. Die Zahl und die Reihenfolge der Nuklide für das ersetzte und das Ersatzmaterial müssen allerdings identisch sein. Die zu ersetzenden Daten (Materialzusammensetzung, Dichte, Temperatur) werden in geeigneter Reihenfolge auf eine problemspezifischen Datei bereitgestellt und entsprechend der bei der Kollision identifizierten Adresse übertragen.

Berücksichtigung der Brennstoff- und Moderatortemperaturen

Die Wirkungsquerschnitte zur Beschreibung der verschiedenen Kernreaktionen sind abhängig von der Relativgeschwindigkeit (Energie) zwischen Partikel (Neutron) und Target-Nuklid. Da bei Temperaturen > 0 K die Target-Nuklide bewegt sind, spielt die Temperatur für die Simulation von Kernreaktionen eine wichtige Rolle. Insbesondere sind Resonanzreaktionen davon betroffen sowie die Streuung thermischer Neutronen.

Die bisherige Vorgehensweise für die Berücksichtigung der Temperatur war die Voraberstellung von gemittelten Querschnittssätzen für bestimmte Target-Temperaturen.

Da solche Querschnittssätze z. T. mehrere MegaByte Daten enthalten, ist die Anzahl solcher Target-Temperaturen begrenzt. Um dennoch Querschnitte für die aktuellen Temperaturen am Kollisionsort einzusetzen, bietet sich eine Interpolation an. Hierbei wird die Temperaturabhängigkeit der Resonanz- und Streuquerschnitte über eine $T^{-1/2}$ -Interpolation aus jeweils 2 Datensätzen für definierte Temperaturen entsprechend der vorgegebenen Temperatur berücksichtigt. Zur effektiven Berücksichtigung der Temperaturabhängigkeit der Resonanzquerschnitte (auch für den unaufgelösten Resonanzbereich) und der Streugesetze für thermische Neutronen wurden durch Vergleich von Parametern, die mit für die Temperatur direkt berechneten Daten und durch Temperaturinterpolation berechneten umfangreiche Untersuchungen durchgeführt, siehe Abb. 4.3.

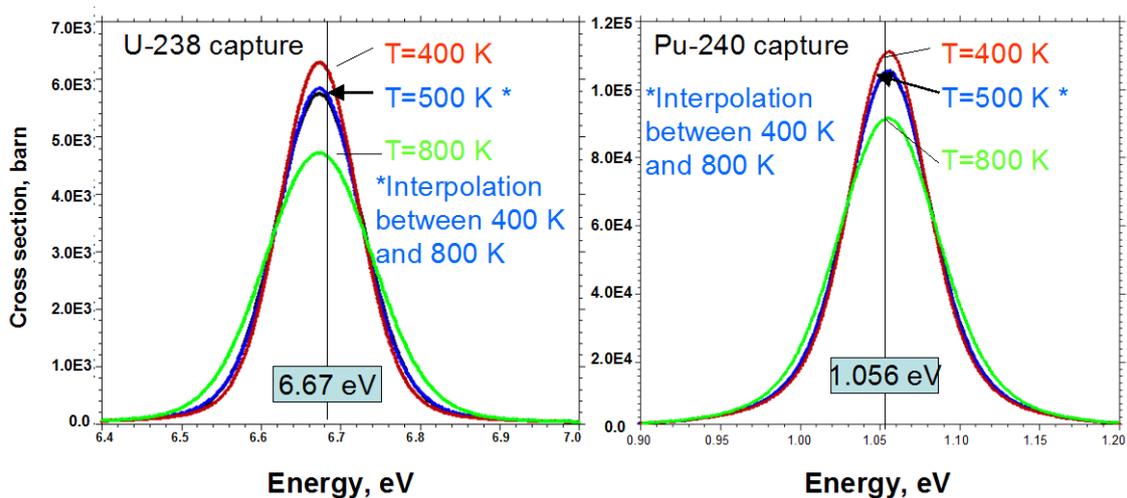


Abb. 4.3 Vergleich von temperaturverbreiterten Resonanzquerschnitten für U-238 und Pu-240, berechnet direkt für 500K und interpoliert zwischen 400 und 800K

Eine weitere Möglichkeit zur Berücksichtigung der Target-Bewegung ist die über eine Verteilungsfunktion (Maxwell-Verteilung) bestimmte zufällige Target-Geschwindigkeit relativ zum Teilchen („on the fly“) /BRO 12/. Die aktuelle Version von MCNP6 kann die Temperaturabhängigkeit der Resonanzwirkungsquerschnitte mittels eines Polynom-Fits (Fit_OTF) /PEL 13/ darstellen. Hierbei werden die Wirkungsquerschnitte für einen bestimmten Temperaturbereich vorab auf ein einheitliches Energie-Stützstellennetz interpoliert und anschließend für jeden Energiepunkt als Funktion der Temperatur mittels Polynom dargestellt. Die Querschnitte werden dann während des Neutronenflugs (on

the fly) beim Eintritt in eine unterschiedliche Zelle auf die entsprechende Zelltemperatur mittels der Polynome berechnet. Auch bei Anwendung dieser Methode kann die Temperatur über eine interne Funktion dargestellt werden; sie muss nicht mit der Zelltemperatur des Inputs übereinstimmen.

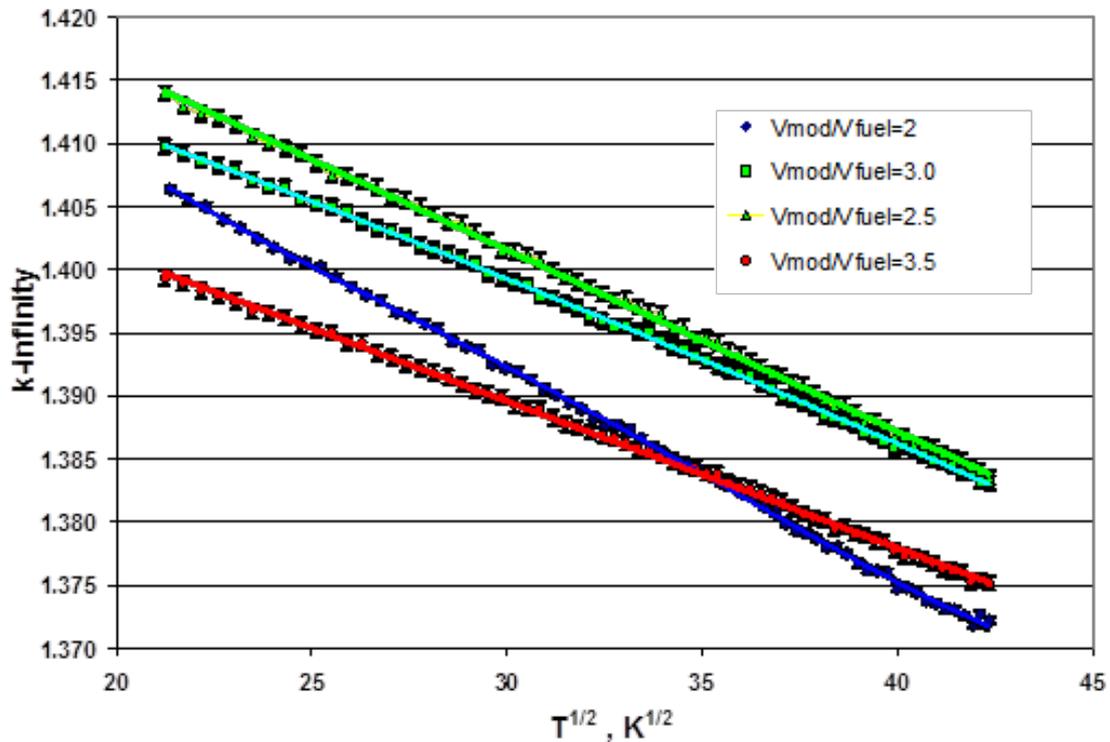


Abb. 4.4 Unendlicher Multiplikationsfaktor als Funktion von $T^{1/2}$ für eine LWR-Zelle mit unterschiedlichen Moderator/Brennstoff-Verhältnissen: Punkte für welche Querschnitte direkt berechnet wurden und interpolierte Punkte

In Abb. 4.4 wird die Wirkungsweise des Interpolationsverfahrens an Hand von Zellrechnungen für einen LWR-Brennstab dargestellt. Die Abbildung zeigt für verschiedene Moderator/Brennstoff-Volumen-Verhältnisse k_{∞} über $T^{1/2}$. Die Punkte in den Abbildungen zeigen, dass der Verlauf des unendlichen Multiplikationsfaktors über $T^{1/2}$ praktisch linear ist. Der gesamte Temperaturbereich ist zwischen 300 K und 1800 K, mit den Gittertemperaturen 300 K, 400 K, 500 K, ..., 1000 K, 1200 K, 1500 K, 1800 K. Die dazwischen liegenden Punkte sind interpoliert.

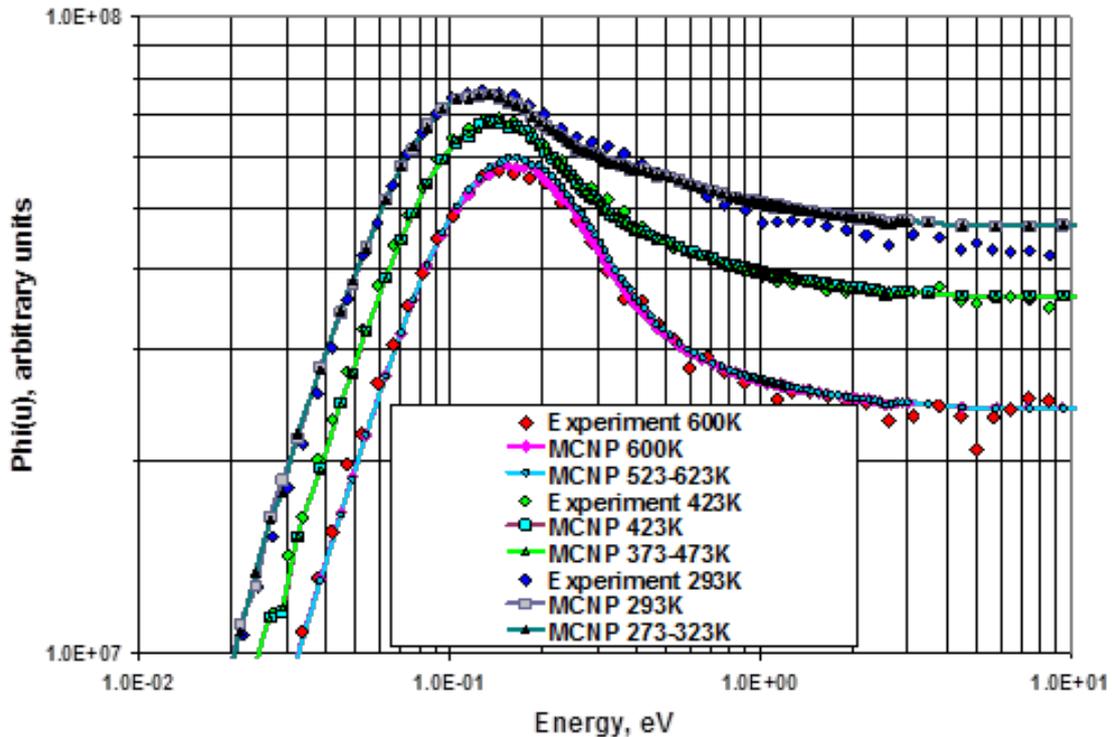


Abb. 4.5 Vergleich von gemessenen und berechneten Neutronenflussverläufen in mit GdCl_3 vergiftetem H_2O für die Temperaturen 393K, 423K und 600K (direkt erstellt und interpoliert)

Die Darstellung der Neutronenstreuung für gebundene Atome (z. B. H in H_2O oder C in Graphit) als Funktion der Temperatur ist über Polynomfits nicht möglich, da die Streugesetzdaten (sog $S(\alpha, \beta)$ -Tabellen) teilweise Singularitäten aufweisen. Da nicht beliebig viele einzelne Temperaturdatensätze vorab berechnet werden können, ist eine Interpolation wie auch bei den Resonanzdaten angebracht. In Abb. 4.5 werden berechnete Spektren in mit GdCl_3 vergiftetem H_2O dargestellt, verglichen mit gemessenen Spektren /YOU 64/. Berechnet und gemessen wurden die Spektren für 300 K, 423 K und 600 K. Für die Berechnung wurden zunächst die Datensätze (H in H_2O) für diese Temperaturen verwendet. Dann aber auch Datensätze für 273 K – 323 K, 373 K – 473 K und 523 K – 623 K, die zur Interpolation auf 300 K, 423 K und 600 K verwendet wurden. Aus dem Vergleich von Messung und Rechnung ist kein signifikanter Unterschied zwischen den Rechnungen mit direkten und interpolierten Daten festzustellen. In Abb. 4.6 ist zusätzlich noch der totale Streuquerschnitt von H in H_2O für die Temperaturen 323 K und 573 K dargestellt, und zwar für die direkt für diese Temperaturen erstellten Datensätze und für interpolierte Datensätze. Diese Abbildung zeigt, dass die

Interpolation der Datensätze nur zu sehr geringen Unterschieden führt und für die Anwendungen im LWR-Bereich hinreichend genau ist.

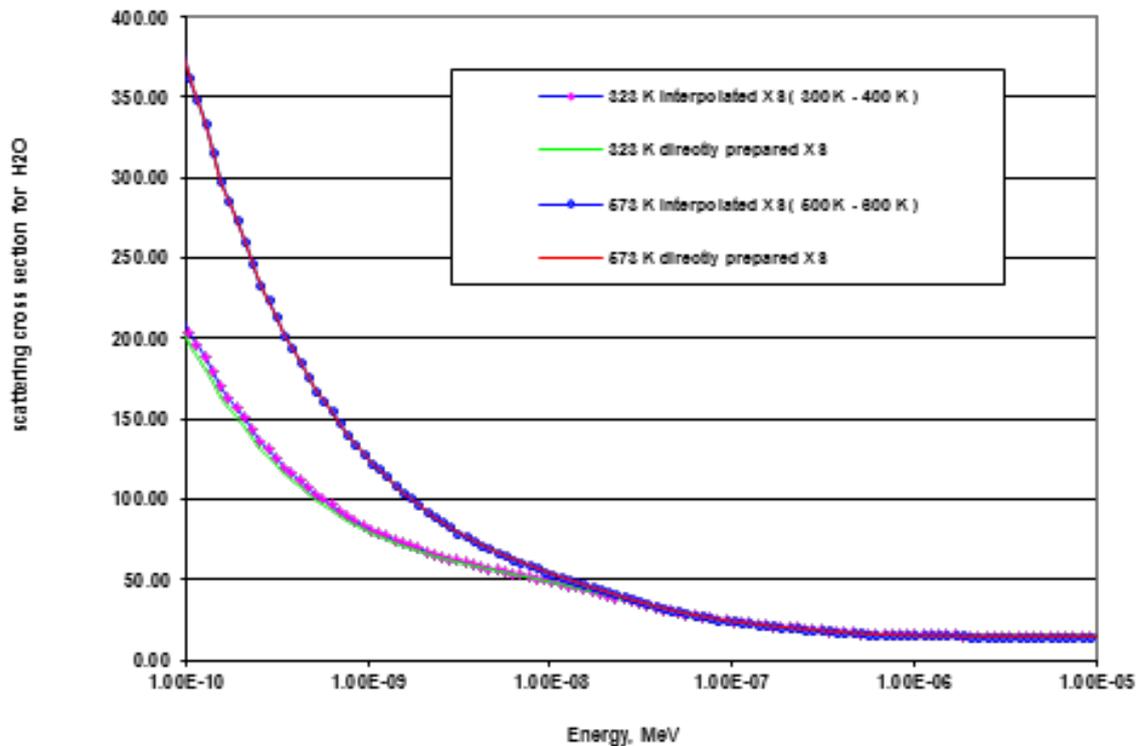


Abb. 4.6 Totaler Streuquerschnitt für H in H₂O für 323 K und 573 K (direkt erstellt und interpoliert)

Die Zuverlässigkeit der internen Zuordnung der Temperaturen über die interne Funktion, sowie die Anwendbarkeit der Interpolation von Resonanzdaten bzw. der Polynome mittels OTF-FIT wird durch Abb. 4.7 demonstriert. Für eine Graphitkugel mit verschiedenen Temperaturzonen von 300 K bis 1800 K wurden die Temperaturen über den Standard-Input bzw. die interne Funktion vorgegeben. Die Abbildung zeigt sehr gute Übereinstimmung der Spektren für alle Temperaturen für beide Methoden.

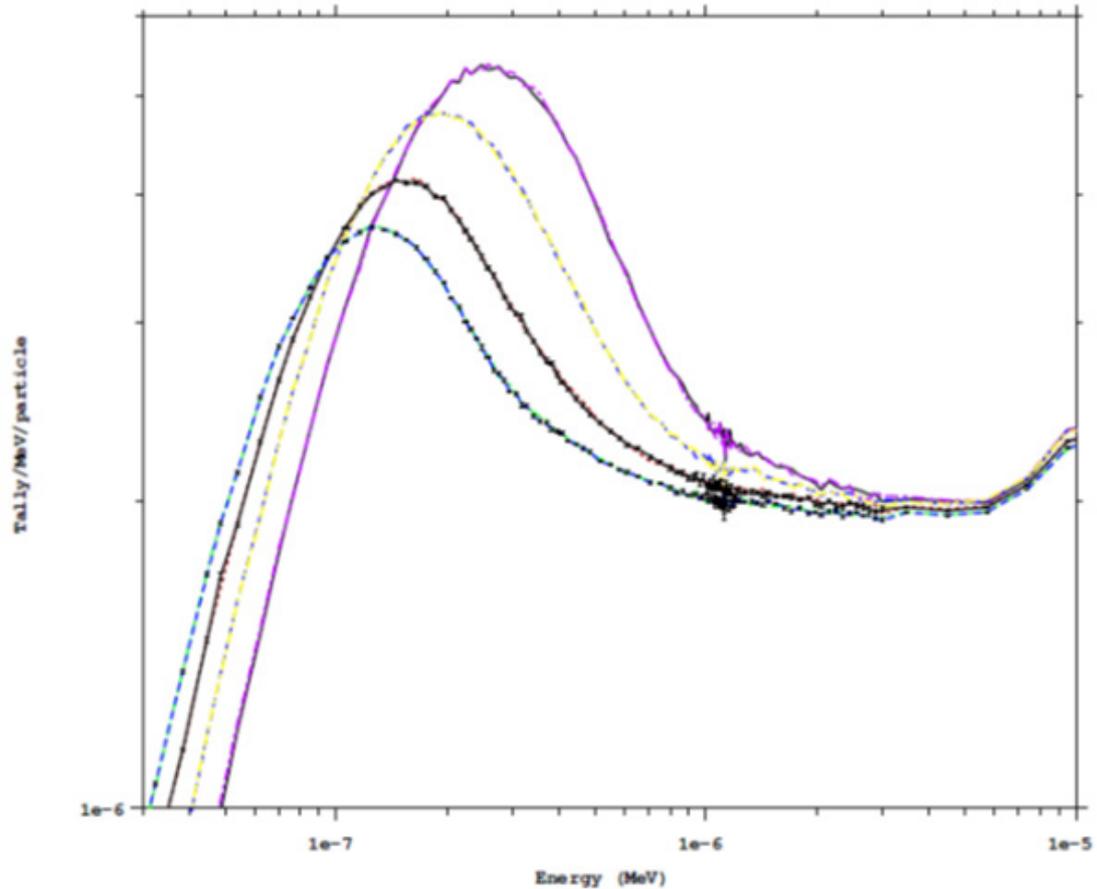


Abb. 4.7 Neutronenspektren in Graphit für verschiedene Temperaturen: Interpolation der thermischen $S(\alpha,\beta)$ -Daten und kontinuierlichen Resonanzdaten bzw. Polynomfit (OTF) für die kontinuierlichen Resonanzdaten

Validierungstests und Anwendungen

Umfangreiche Untersuchungen wurden durchgeführt, um die Funktionsfähigkeit der neu eingeführten internen Funktionen zu überprüfen. Als Beispiel ist in Abb. 4.8 die Berechnung eines 2x2-BE-Clusters mit DWR-Brennelementen (die Spezifikation wurde dem Purdue-DWR-Benchmark /KOZ 06/ entnommen) ausgeführt mit MCNP und dem Standard-Input, sowie ausgeführt mittels der internen Funktionen. In Abb. 4.12 ist der relative Unterschied bezüglich der axial gemittelten Leistungsverteilung dargestellt. Die stabweisen Leistungen unterscheiden sich lediglich im Rahmen des (hier sehr kleinen) statistischen Fehlers. Mittels der internen Funktionen wurde für quadratische und hexagonale Brennstab- und Brennelementgitter eine Reihe von Beispielen berechnet. Konkret wurden Beispiele für quadratische und hexagonale DWR-Gitter (Purdue- bzw. WWER-Benchmark), für ein hexagonales SFR (Natriumgekühlter Schneller Reaktor)-

Benchmark und für hexagonale Gitter experimenteller Anordnungen (TRX-1 bis TRX-4) mit z. T. unterschiedlichen Gitterweiten erstellt und berechnet.

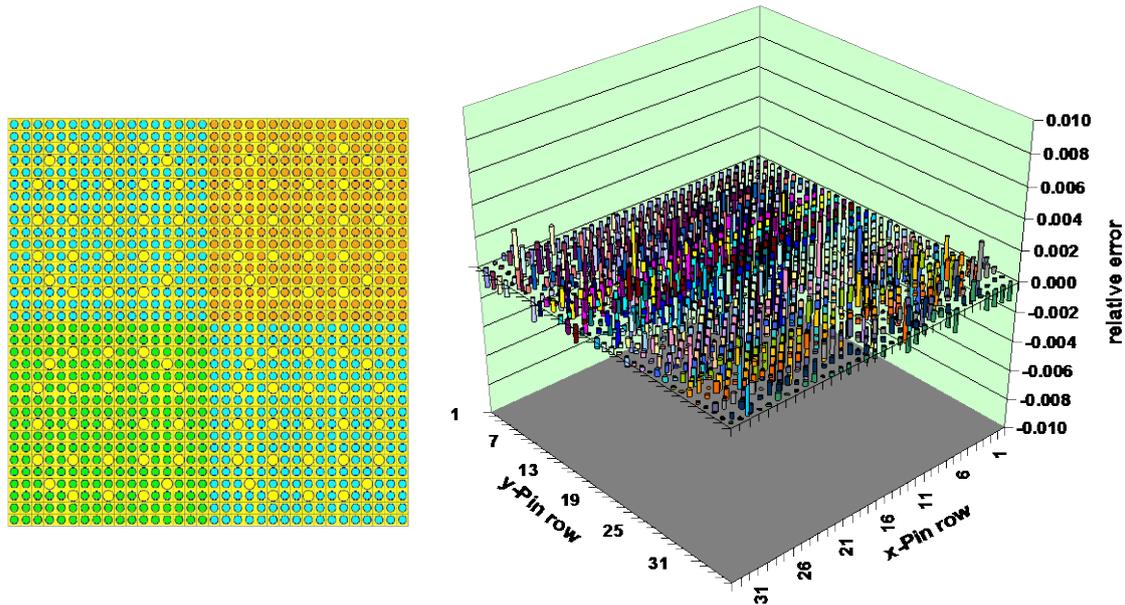


Abb. 4.8 Relativer Unterschied bezüglich der Leistungsverteilung, berechnet mit Standard-Input und mittels interner Funktion für ein 2x2-BE-Cluster

Für quadratische und hexagonale Brennstabgitter konnte gezeigt werden, dass die Material-, Temperatur- und Zelldichtespezifikation über eine interne Funktion dargestellt werden kann. Vergleiche von Leistungsdichte-Ergebnissen für die angegebenen Anordnungen, berechnet mit dem Standard-Input und mit dem Input mittels interner Funktionen, zeigten Übereinstimmung im Rahmen des statistischen Fehlers ($< 0.1\%$). Für hexagonale Gitter wie z. B. bei schnellen Reaktoren oder bei den VVER-Reaktoren, ist die Zahl der Brennstäbe je Reihe unterschiedlich, d. h. nicht alle Positionen des hexagonalen Gitters sind mit Brennstäben besetzt. Dasselbe gilt, wenn Symmetrieeigenschaften berücksichtigt werden. Um eine große Zahl von nicht besetzten Positionen in der Ergebnis-Datei (und der Eingabe-Datei) zu vermeiden, kann eine Zuordnungsliste erstellt werden, welche nur die besetzten Positionen berücksichtigt. Damit kann der Speicherbedarf erheblich reduziert werden.

Das DWR-MOX/ UO_2 -Kerntransientenbenchmark („Purdue-Benchmark“)

Weitere Anwendungen bestehen in der Kopplung von MCNP mit dem Thermohydraulik-Code ATHLET /LER 98/, zunächst am Beispiel des für den beim Purdue-Benchmark /KOZ 06/ spezifizierten DWR. Die berechnete Kernkonfiguration ist aus Abb. 4.9 er-

sichtlich. In dieser Abbildung sind auch die Spezifikationen für UOX- und MOX-Brennelemente dargestellt.

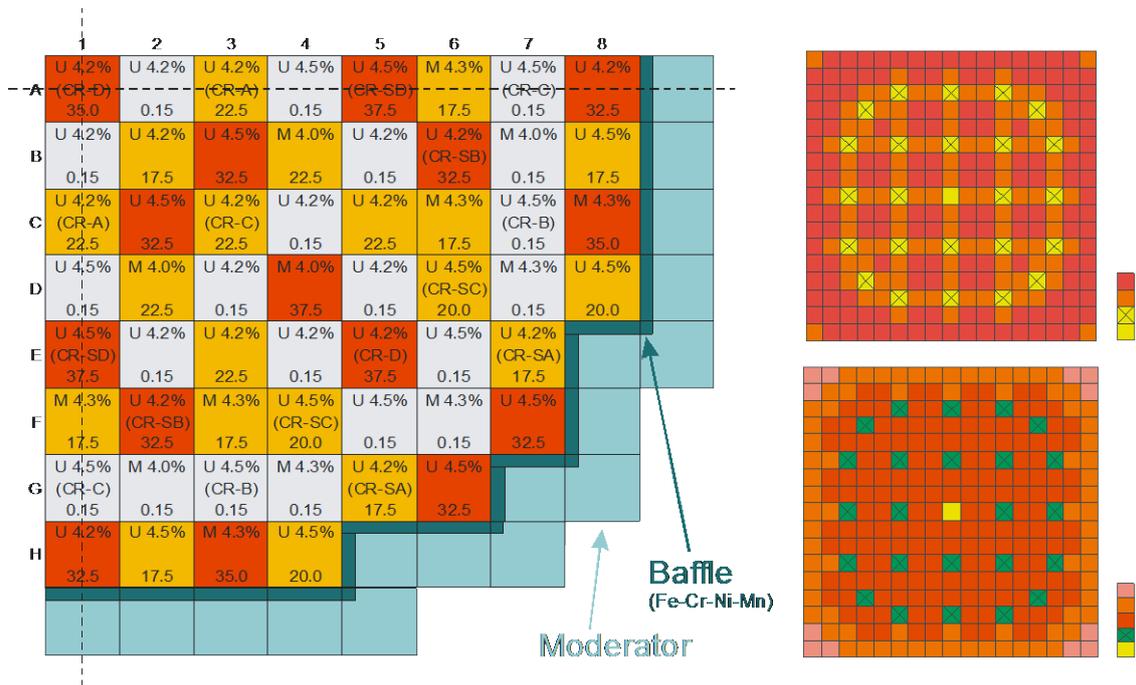


Abb. 4.9 Kernkonfiguration und BE-Spezifikation des Purdue-Benchmarks

Die Berechnung dieser Anordnung wurde aus Symmetriegründen für einen Viertelkern durchgeführt. Es wurde die stationäre Leistungs- und Temperaturverteilung bei Vollast berechnet. Bis zum Erreichen der Konvergenz wurden abwechselnd MCNP und ATHLET ausgeführt, wobei mit einer geschätzten Anfangstemperaturverteilung begonnen wurde. Die Leistungsverteilung wurde von MCNP mittels eines speziellen „Tallies“ berechnet und über ein Interface an ATHLET übergeben. Die von ATHLET berechneten Brennstoff- und Moderatortemperaturverteilungen sowie die Moderatordichteverteilung wurden über ein zweites Interface an MCNP übergeben. Diese Daten wurden nicht über den Standard-MCNP-Input, sondern an die für MCNP entwickelten internen Funktionen übergeben.

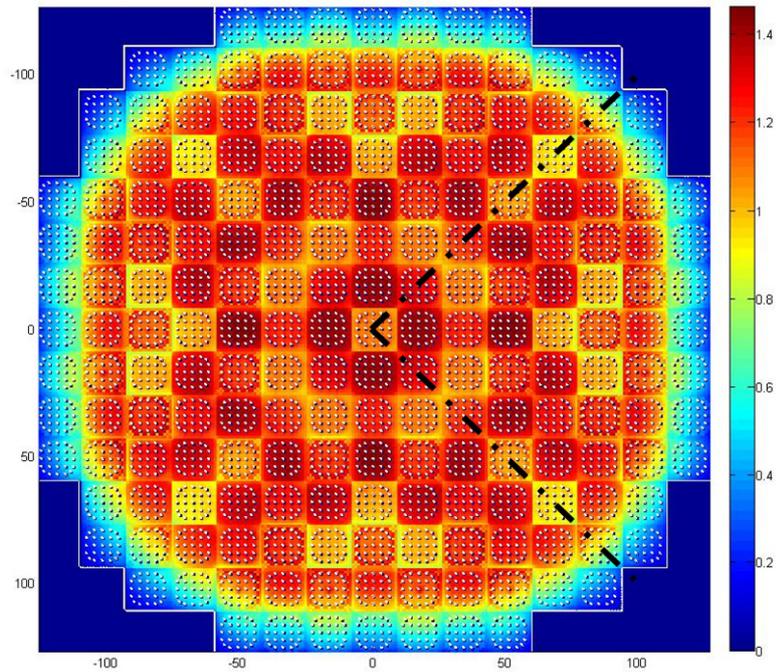


Abb. 4.10 Axial gemittelte Brennelementleistungen für das Purdue-Benchmark, berechnet mit MCNP

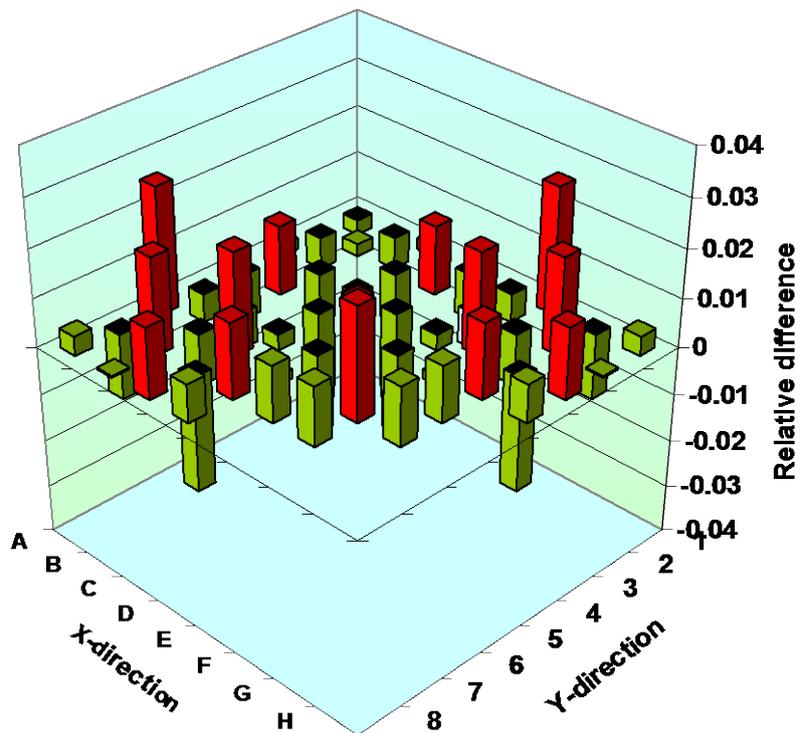


Abb. 4.11 Relative Unterschiede der Brennelementleistungen für das Purdue-Benchmark: QUABOX/CUBBOX-ATHLET und MCNP-ATHLET

Ausgewählte Ergebnisse aus diesen Berechnungen sind in Abb. 4.10 und Abb. 4.11 dargestellt. Abb. 4.10 zeigt die axial gemittelte relative Leistungsverteilung (stabweise). Abb. 4.11 zeigt einen Vergleich der mit MCNP/ATHLET berechneten Brennelementleistungen mit entsprechenden Leistungen, die mit QUABOX/CUBBOX-ATHLET /LAN 04/ berechnet wurden. Obwohl die beiden Methoden und die dabei eingesetzten Wirkungsquerschnitte unterschiedlich waren, sind die Unterschiede in den BE-Leistungen relativ gering. Dasselbe gilt auch für die stabweisen Leistungsverteilungen für ausgewählte Brennelemente im Vergleich der Ergebnisse aus gekoppelten Neutronentransport-/Thermohydraulik-Berechnungen mit MCNP-ATHLET und PARCS-TRACE /DOW 02/, siehe Abb. 4.12.

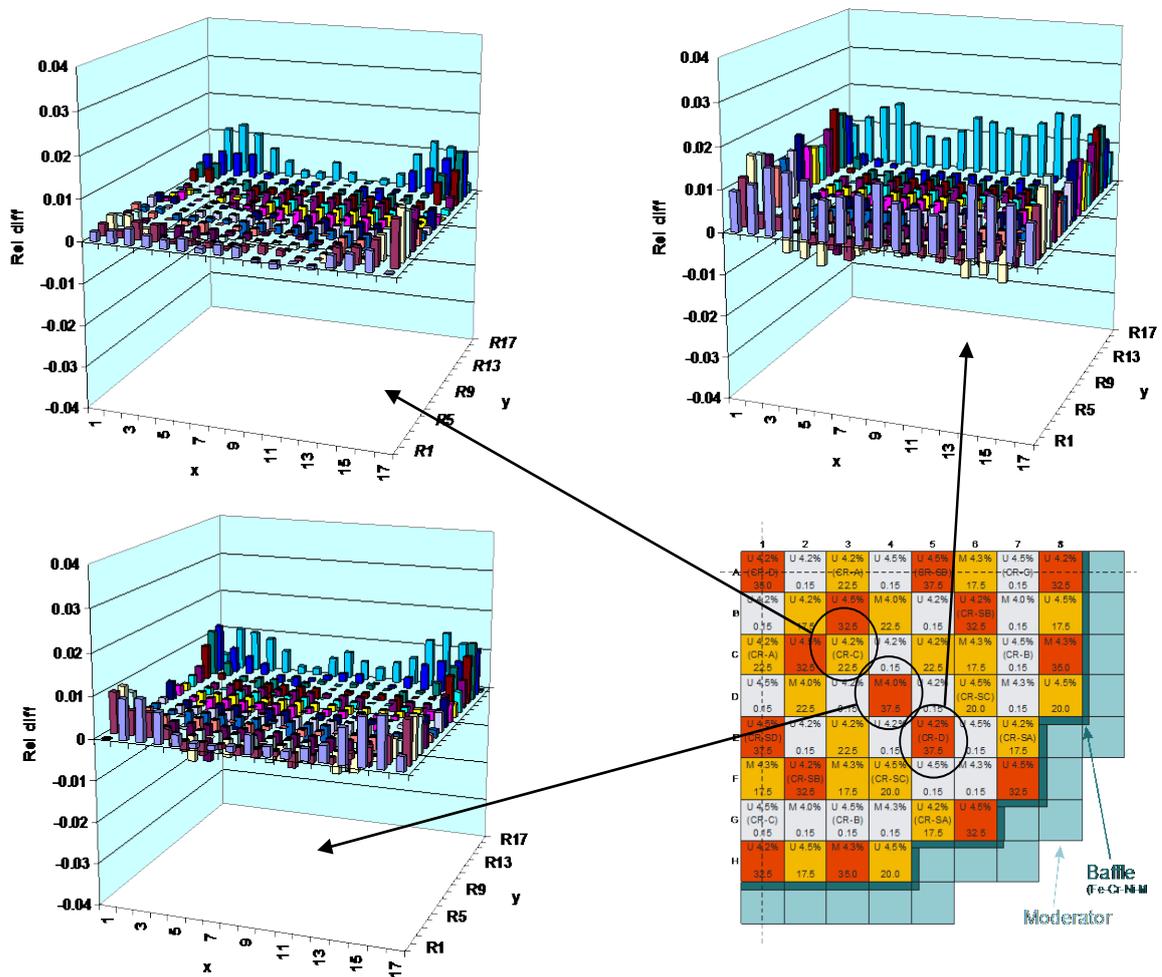


Abb. 4.12 Vergleich der axial gemittelten Brennstableistungen für das UOX/MOX DWR-(Purdue) Benchmark, berechnet mit MCNP-ATHLET und PARCS-TRACE für ausgewählte Brennelemente

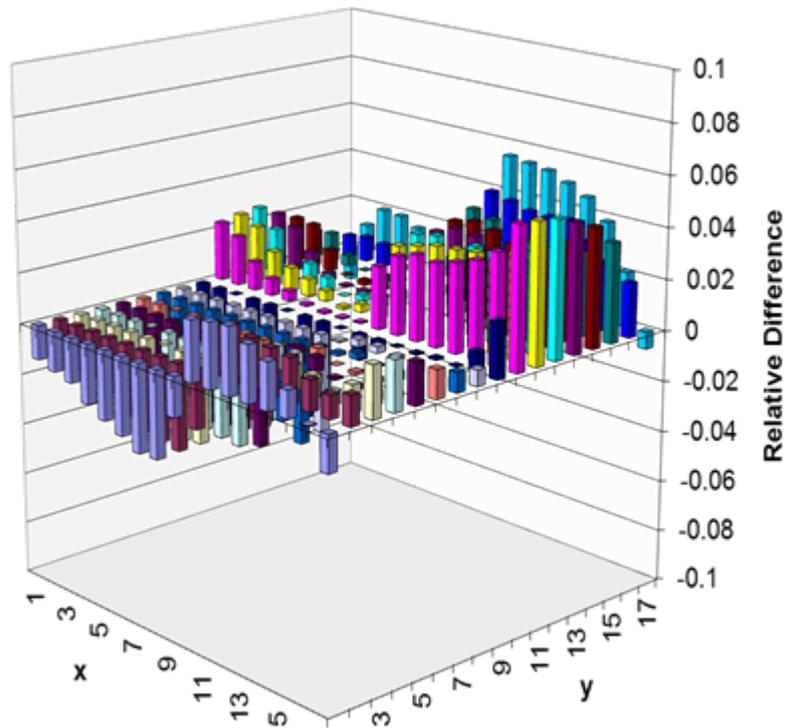


Abb. 4.13 Relativer Unterschied in der brennstabweisen (axial gemittelten) Leistung, berechnet mit CORETRAN und MCNP-ATHLET für das Brennelement C8 des Purdue-Benchmarks

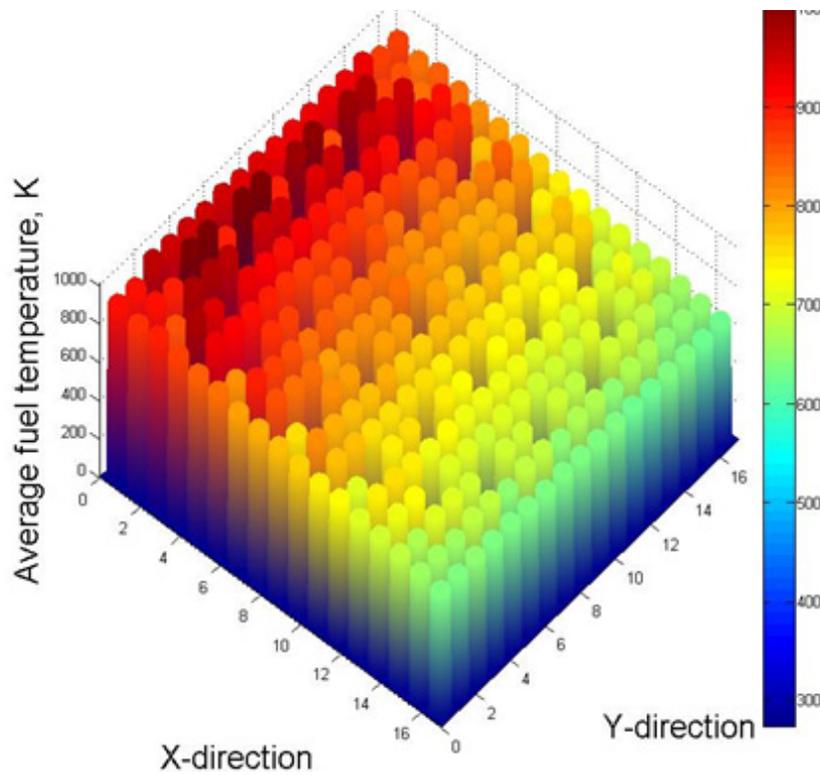


Abb. 4.14 Axial gemittelte Brennstabtemperaturen im Brennelement C8 des Purdue-Benchmarks

Um Vergleichbarkeit mit den deterministischen Neutronentransportprogrammen zu haben, die für das Benchmark eingesetzt worden sind, wurden die Brennstabtemperaturen und Moderatordaten jeweils nur Brennelementweise gemittelt berechnet. Zur Demonstration der Leistungsfähigkeit des gekoppelten Verfahrens wurde die Berechnung zusätzlich noch für die Brennelemente C8 bzw. H3 brennstabweise durchgeführt, d. h. die Brennstab- und Moderatortemperaturen (bzw. -dichten) wurden für alle Brennstäbe des 17x17-Brennelements detailliert mit ATHLET berechnet und bei MCNP berücksichtigt. Die Unterschiede der Brennstableistungen im Brennelement C8 gegenüber dem Programm CORETRAN /EIS 00/ sind aus Abb. 4.13 ersichtlich. Die (axial gemittelte) radiale Brennstabtemperaturverteilung zeigt Abb. 4.14.

Kopplung von Thermohydraulik mit MCNP6

Die Kopplung zwischen Neutronentransport und Thermohydraulik kann mittels eines Interfaces zwischen MCNP6 und dem Thermohydraulikprogramm realisiert werden. Als Thermohydraulikprogramme wurden der Systemcode ATHLET für flüssiges Kühlmittel (LWR und SFR) und ATTICA-3D /HOS 08/ oder THERMIX /PET 83/ für gasförmiges Kühlmittel (HTR) angewandt.

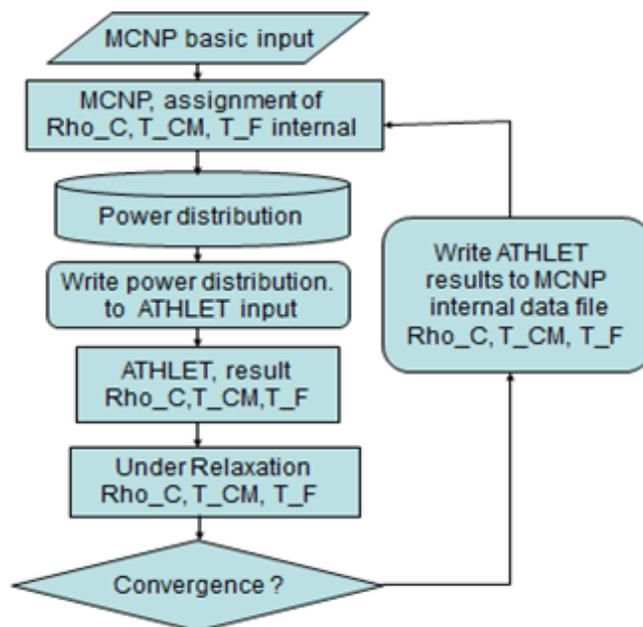


Abb. 4.15 Ablaufdiagramm zur MCNP6-ATHLET-Kopplung

Für den Transfer der brennelement- oder brennstabweisen Leistungsverteilungen, die mit MCNP6 berechnet wurden, zum Thermohydraulikprogramm und zum Transfer der

Thermohydraulikergebnisse zu MCNP6 (stabweise axiale Brennelementtemperaturen und stab- oder brennelementweise Moderatortemperaturen und -dichten) wurde ein Interface entwickelt. Dieser Transfer geschieht im Fall der Thermohydraulikprogramm-MCNP-Kopplung über die interne Funktion, so dass der Input von MCNP für den nächsten Iterationsschritt nicht geändert werden muss. Ein Ablaufdiagramm des gekoppelten Systems ist am Beispiel von ATHLET in Abb. 4.15 dargestellt.

Das Interface besteht im Wesentlichen aus zwei Teilen: der erste Teil übernimmt die Leistungsverteilung aus dem MCNP6-Tally (das sog. F7-Tally enthält Leistungsverteilungen) und erstellt für alle in ATHLET spezifizierten repräsentativen Kanäle die relative axiale Leistungsverteilung und die dazugehörige auf die thermische Gesamtleistung normierte Kanal-Leistung. Diese Information wird anschließend in den ATHLET Input im entsprechenden Format eingefügt. Der zweite Teil des Interfaces übernimmt die Thermohydraulik-Daten von ATHLET und präpariert die Interface-Datei für MCNP6. Ähnliche Interfaces existieren auch für die Kopplung von ATTICA-3D oder THERMIX mit MCNP6. Abhängig vom Problem, kann es erforderlich sein, eine Über- oder Unter-Relaxation vorzunehmen, um die Konvergenz zu beschleunigen oder überhaupt zu erreichen. Diese Relaxation wird im vorliegenden Fall auf die Thermohydraulik-Ergebnisse angewandt: auf die Kühlmitteldichte ρ_C (bei flüssigem Kühlmittel), auf die Kühlmittel oder Moderator Temperatur T_{CM} und auf die Brennstofftemperatur T_F :

$$\rho_m^i = \omega * \rho_a^{i-1} + (1 - \omega) * \rho_m^{i-1} \quad (4.1)$$

$$T_{Cm}^i = \omega * T_{Ca}^{i-1} + (1 - \omega) * T_{Cm}^{i-1} \quad (4.2)$$

$$T_{Fm}^i = \omega * T_{Fa}^{i-1} + (1 - \omega) * T_{Fm}^{i-1} \quad (4.3)$$

ρ_m^i ist dabei die Kühlmitteldichte für den nächsten Iterationsschritt, ρ_a^{i-1} ist die Kühlmitteldichte berechnet durch ATHLET für den Schritt i-1 ($i > 1$) und ρ_m^{i-1} die Kühlmitteldichte des Schritts i-1. Ähnliche Bezeichnungen sind für die Kühlmittel- oder Moderator-temperatur $T_{C...}^i$ und die Brennstofftemperatur $T_{F...}^i$. ω ist der Relaxationsfaktor.

Berücksichtigung der Brennstofftemperaturen

Weiter oben wurden die prinzipiellen Möglichkeiten zur Berücksichtigung der Brennstofftemperaturen bei den Resonanzwirkungsquerschnitten dargestellt. Bei MCNP6 gibt es danach die Möglichkeit des Polynomfits (OTF) oder der Interpolation (das sog.

Stochastic Mixing). Bei der Anwendung des Polynomfits wird für ein bestimmtes Nuklid der Referenzdatensatz (für irgendeine Temperatur) sowie der Polynomdatensatz angegeben. Da der Polynomdatensatz ggf. bis zu 17 Polynomkoeffizienten für jeden Energiepunkt haben kann, sind diese Datensätze sehr groß, u. U. mehrere MB. Bei sehr vielen unterschiedlichen Nukliden kann dies zu Speicherplatzproblemen führen, es ist daher ggf. zu entscheiden welche wichtigen Nuklide mit OTF behandelt werden sollten. Die aktuellen Temperaturen für die Polynomauswertung kann über die interne Funktion beliebig detailliert berücksichtigt werden. Bei der Anwendung des „Stochastic Mixing“ wird für jedes Nuklid zwischen zwei Datensätzen interpoliert. Dabei sollte der Unterschied zwischen der aktuellen Temperatur und den Temperaturen, für welche diese Datensätze erstellt wurden, nicht zu groß sein. Für jedes Nuklid, das interpoliert werden soll, müssen entsprechend dem MCNP-Inputformat folgende Angaben bei der Materialspezifikation gemacht werden:

M_i : Materialspezifikation des Materials i , z.B. für Nuklid 92238 (U-238)

... 92238.03c $w_1 \cdot N(\text{U-238})$ 92238.04c $(1-w_1) \cdot N(\text{U-238})$...

Mit 03c ... Datensatz für $T_1 = 300$ K, 04c für $T_2 = 400$ K (Beispiel für JEFF3.1.2)

Lineare Interpolation:

$w_1 = (T_2 - T) / (T_2 - T_1)$, T ist die aktuelle Temperatur zwischen T_1 und T_2

$T^{1/2}$ -Interpolation:

$$w_1 = (T_2^{1/2} - T^{1/2}) / (T_2^{1/2} - T_1^{1/2})$$

Es kann immer nur zwischen zwei Datensätzen interpoliert werden. Dies bedeutet, dass bei großer Temperaturvariation eines bestimmten Materials entweder dasselbe Material für mehrere Temperaturbereiche spezifiziert werden muss, oder dass für jedes Nuklid einer Materialspezifikation mehrere Temperaturdatensätze mit entsprechenden Gewichten angegeben werden müssen:

... 92238.03c $w_1 \cdot N(\text{U-238})$ 92238.04c $w_2 \cdot N(\text{U-238})$ 92238.05c $w_3 \cdot N(\text{U-238})$...

Mit $\sum w_i = 1.0$, wobei jeweils nur die w_i von Null verschieden sind, bei welchen die aktuelle Temperatur T zwischen T_i und T_{i+1} liegt. Bei Anwendung der internen Funktion für die Temperaturspezifikation können diese Gewichtungsfaktoren w_i praktisch „On The

Fly“ angewandt werden, d. h. ihre Angabe im MCNP-Input ist ohne Bedeutung, allerdings muss die Bedingung $\sum w_i = 1.0$ eingehalten werden.

Sowohl die Bereitstellung von MCNP-Input-Materialspezifikationen für Temperaturbereiche (jeweils 2 Temperaturen) als auch für mehrere Temperaturen macht die MCNP-Eingabe komplizierter und erfordert mehr Rechenzeit, da bei der Berechnung der Querschnitte für ein bestimmtes Material für jedes Nuklid welches bezüglich der Temperatur interpoliert werden soll, 2 oder mehr Datensätze berücksichtigt werden müssen. Eine Abhilfe dazu ist eine stochastische Methode, bei welcher für jedes Material eine komplette Spezifikation für jeden Temperaturbereich (bei MCNP) eingegeben wird. Entsprechend der Gewichte w_i wird bei Anwendung der internen Funktion der Datensatz T_i oder T_{i+1} per Zufallszahl ausgewählt. Der Vorteil dabei ist, dass bei der Berechnung der Querschnitte für dieses Material jedes Nuklid nur einmal vorkommt.

Der MCNP-Input kann mit Hilfe der internen Funktionen erheblich vereinfacht werden, wenn z. B. für alle Brennstoffmaterialien die gleiche Nuklidanzahl und -Reihenfolge spezifiziert wird. Die relativen Nukliddichten für alle Materialspezifikationen können dann auch über die interne Funktion spezifiziert werden, so dass im MCNP Input für jedes Nuklid der Querschnittsdatsatz für eine bestimmte Temperatur nur einmal aufgeführt werden muss.

Dasselbe was für Resonanznuklide gilt, gilt auch für die thermischen Streugesetzdaten $S(\alpha,\beta)$. Hier ist allerdings zu beachten, dass für jeden Datensatz für eine bestimmte Temperatur ein dazugehöriger kontinuierlicher Datensatz zugeordnet werden muss. Am Beispiel von H in H_2O gilt dann folgendes:

M_i : Spezifikation für Material i (H in H_2O)
1001.xxc W_1 1009.xxc W_2

...

MT_i : $S(\alpha,\beta)$ für Material i
h2o-1.01t h2o-2.02t

w_1 und w_2 sind Gewichte ($w_2 = 1-w_1$) entsprechend der aktuellen Temperatur T zwischen T_1 und T_2 . xxc ist der Index des kontinuierlichen Datensatzes für Wasserstoff (H). 1001.xxc ist der entsprechende Referenzdatensatz. 1009.xxc ist identisch mit 1001.xxc, hat jedoch einen anderen Referenz-ZA-Wert: 1009. Dieser Referenz-ZA-

Wert muss bei allen Temperaturen der Library h2o-2 enthalten sein. Die Library mit der Bezeichnung h2o-1 enthält den Referenz-ZA-Wert 1001.

Anwendungen mit internen Funktionen

Die interne Funktion kann für folgende Problemstellungen angewandt werden:

- Temperaturzuordnung für Brennstoffzonen mittels OTF Polynomfit
- Temperaturzuordnung für Brennstoffzonen mittels „Stochastic Mixing“
- Temperaturzuordnung für Moderatorzonen mittels „Stochastic Mixing“
- Zuordnung der Brennstoffkompositionen
- Zuordnung der Kühlmitteldichten
- Materialzuordnungen (Material /Zelle)
- Tally-Funktionen (z. B. brennstabweise Leistungsverteilung)

Damit ist eine hohe Flexibilität und Effektivität bei der Bearbeitung komplexer Probleme mit einer sehr hohen Ortsauflösung gegeben.

Benchmark für hexagonale DWR-Gitter

Das VVER-1000-Benchmark /TER 09/ repräsentiert einen DWR mit hexagonalem Brennstabgitter. Der Reaktorkern enthält 163 hexagonale Brennelemente mit 5 unterschiedlichen U-235-Anreicherungen, teilweise mit Gadolinium als abbrennbarem Gift. Für dieses Benchmark, das als transientes Benchmark definiert ist, wurde die stationäre Ausgangssituation mit MCNP6/ATHLET berechnet. Die Kernzusammensetzung wird durch Abb. 4.16 beschrieben. Die Zusammensetzung eines der 5 unterschiedlichen Brennelementtypen ist aus der Abb. 4.17 ersichtlich. Der Zustand des Reaktorkerns wurde definiert für einen Erstkern mit einem Abbrand von 128.5 Vollasttagen. Dabei wurde für alle 28 Brennelemente in einem 60°-Segment eine axiale Abbrandverteilung für 10 Zonen vorgegeben. Die Benchmark-Definition enthielt auch makroskopische Gruppenquerschnitte, allerdings keine Nuklidzusammensetzungen für die Brennstoffzonen. Da MCNP auf kontinuierlichen mikroskopischen Wirkungsquerschnitten basiert, mussten die Nukliddichten für alle 28x10 Abbrandzonen berechnet werden. Dies wurde realisiert durch Brennelement-Abbrandrechnungen zunächst für die fünf verschiedenen Brennelementtypen. Da nach 108 Vollasttagen das Brennelement auf der

Position 07/32 (siehe Abb. 4.16) gegen ein Element mit 1.3 % U-235 Anreicherung ausgetauscht wurde, musste für dieses Element ebenfalls eine Abbrandrechnung für die verbleibenden Volllasttage durchgeführt werden.

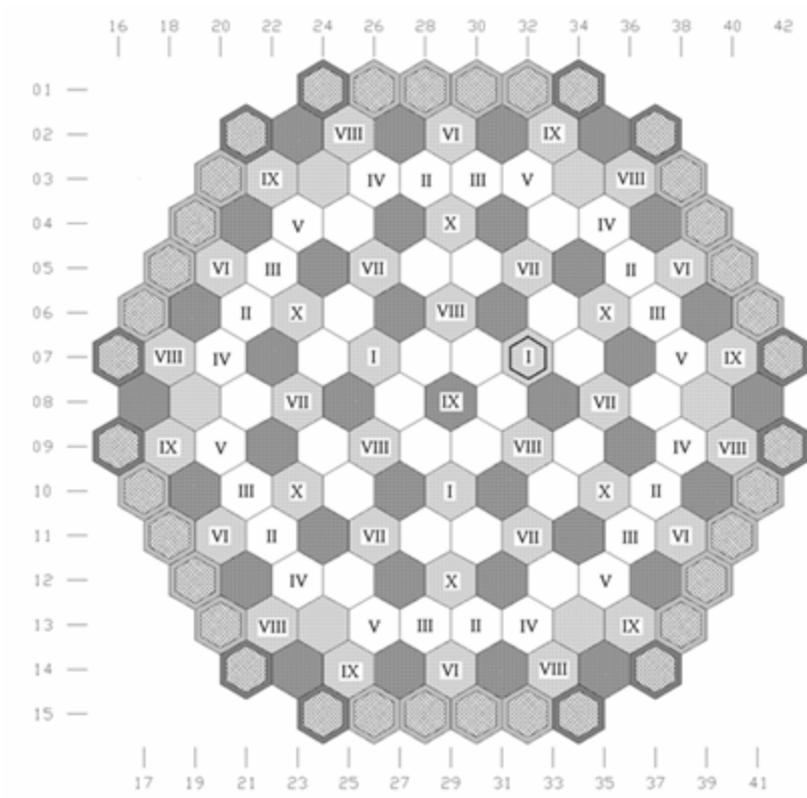


Abb. 4.16 Kernausslegung des VVER-1000-Benchmarks

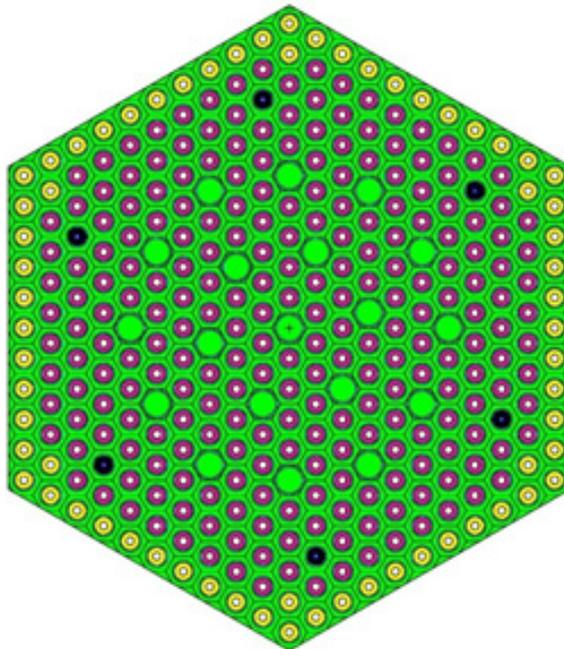


Abb. 4.17 Brennelement des VVER-1000 mit 3.9 % mittlerer U-235-Anreicherung und 6 Gd-Stäben

Für diese Abbrandberechnungen wurde MCNP6 mit dem IKE-Programm ABBRAND /WOH 72/ gekoppelt. Das Abbrandmodell berücksichtigt 22 Aktinide und 85 Spaltprodukte. Entsprechend der Symmetrie der verschiedenen Brennelementtypen (60°- oder 120°-Symmetrie) wurden abbrandabhängige Nuklidichten für 52 oder 105 Brennstäbe für die 28x10 Abbrandzonen nach 128.5 Vollasttagen berechnet. Die Gd-Brennstäbe wurden zusätzlich noch in 8 radiale Zonen unterteilt, um die radiale Flussverteilung im Gd-Brennstab zu berücksichtigen. Der Reaktorkern war axial und radial umgeben von einem Reflektor, siehe Abb. 4.18. Die stationäre Reaktorberechnung wurde mit brennstabweiser (52 oder 105 Brennstäbe je Brennelement) Berücksichtigung der abbrandbedingten Brennstoffzusammensetzung als Ganzkernmodell durchgeführt. Symmetrie konnte wegen des ersetzten Brennelements nicht berücksichtigt werden. Die Zuordnung der vorab berechneten Nuklidzusammensetzungen zu den einzelnen axialen Abschnitten der Brennstäbe im Ganzkernmodell wurde über eine speziell für hexagonale Gitter entwickelte interne Funktion realisiert. Mit dieser Funktion wurde auch die Brennstofftemperatur, Moderatortemperatur und -dichte zugeordnet. Zur Berechnung der brennstabweisen Leistungsverteilung (für 10 axiale Zonen) wurde für MCNP6 eine spezielle User-Tallyx-Routine programmiert. Die Gesamtzahl von Leistungswerten in der 3D-Verteilung war ca. 500000.

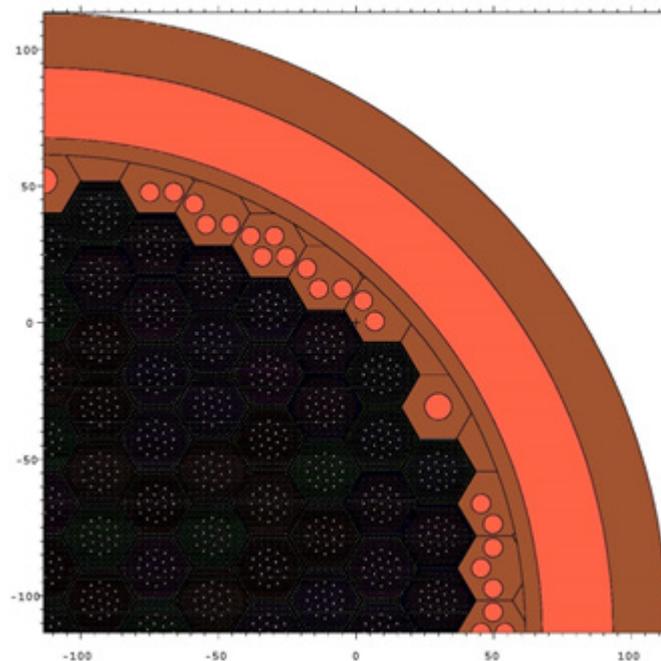


Abb. 4.18 Kern und Radialreflektor des WWR-1000

Analog zum Purdue-Benchmark wurde die Neutronentransportrechnung für das Ganzkernmodell mit ATHLET gekoppelt. Für die 163 Brennelemente wurde jeweils ein re-

präsentativer Kanal berücksichtigt. Die axiale Leistungsverteilung und die mittlere Stableistung wurden von MCNP6 übernommen. Die axial gemittelte totale Neutronenflussverteilung des stationären Vollastzustands nach 128.5 Vollasttagen zeigt Abb. 4.19. Die Flussverteilung ist etwas unsymmetrisch, da das Brennelement an Position 7/32 ausgewechselt wurde. Die dadurch bedingte Störung in der Leistungsverteilung zeigt sich auch in Abb. 4.20 in welcher die axial gemittelte relative Leistungsverteilung brennelementweise angegeben ist. In dieser Abbildung ist auch die Abweichung der mit MCNP/ATHLET berechneten Werte gegenüber der in der Benchmark Definition angegebenen (berechneten) Werte eingetragen. Die Position des ausgewechselten Brennelements auf der Position 7/32 ist in dieser Abbildung eingekreist. Die Abb. 4.20 zeigt relativ große Abweichungen der berechneten Leistungsverteilung gegenüber der im Benchmark angegebenen Leistungsverteilung, insbesondere am Reflektorrand und in der Umgebung des ausgewechselten Brennelements. In Anbetracht der relativ geringen Information bezüglich der Leistungsgeschichte und der Näherung, dass die Xe-135-Dichten aus der Brennelement-Abbrandrechnung stammen, ist die Übereinstimmung mit der vom Benchmark-Autor angegebenen Leistungverteilung zufriedenstellend.

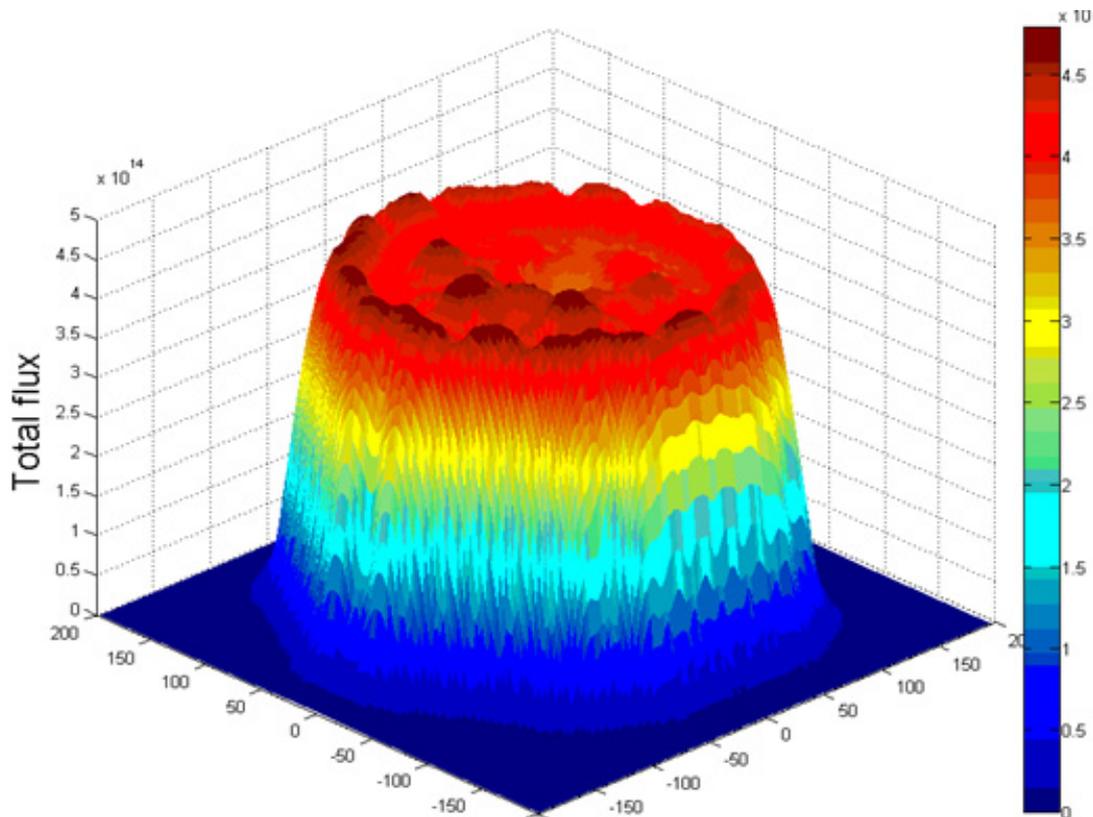


Abb. 4.19 Axial gemittelte totale Flussverteilung im VVER-1000 bei Vollast nach 128.5 Vollasttagen Betrieb

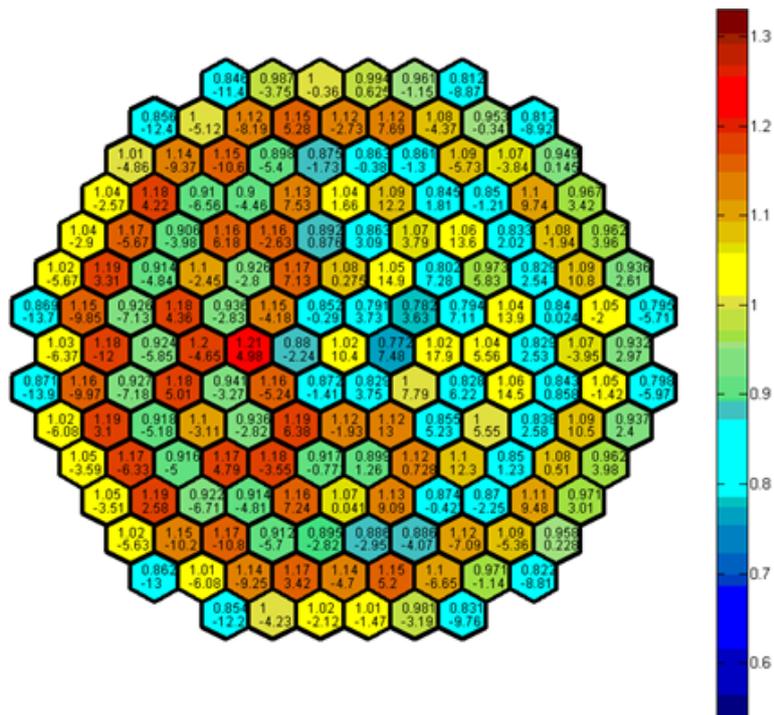


Abb. 4.20 Axial gemittelte relative Leistungsverteilung für den Anfangszustand des Benchmarks nach 128.5 Vollasttagen: relative Leistung (oben), Abweichung in % zum Benchmark-Wert (unten)

Detaillierte Leistungsberechnung für einen DWR-Kern

Hoogenboom /HOO 09/ spezifizierte ein DWR-Kernmodell mit einer relativ feinen radialen und axialen Ortsauflösung, ein sog. „Monte Carlo Performance Benchmark“. Das Modell sah keine detaillierte Abbrand oder Temperaturverteilung vor, so dass eine Kopplung zu einem Thermohydraulikprogramm nicht erforderlich war. Für den MCNP6-Input mussten wegen dieser Vereinfachungen keine besonderen Aufwendungen gemacht werden. Der Einsatz von internen Funktionen war ebenfalls nicht erforderlich. Die einzige Herausforderung war, die Leistungsverteilung in feiner Ortsauflösung effizient zu berechnen. Es wurde daher eine Tally-Routine programmiert, welche die Leistungsverteilung brennstabweise in beliebiger Axialauflösung mit einem sog. F7-Tally effizient ermöglichte. Für das Benchmark wurde eine Vollkernrechnung (360°) durchgeführt. Die Rechnung wurde allerdings gegenüber der von Hoogenboom vorgeschlagenen axialen Diskretisierung etwas vereinfacht durchgeführt. Der Grund ist, dass das Rechenmodell für einen Reaktorkern bei Vollast unrealistisch ist und die dafür erforderliche Rechenzeit erheblich. Ebenso wurde nicht für alle Ortspunkte der von Hoogenboom vorgeschlagene statistische Fehler erreicht. Das komplette Rechenmodell besteht aus 241 Brennelementen mit 17x17-25 Brennstäben, 24 Steuerstäben und ei-

nem Instrumentierungskanal. Die Brennstabanordnung geht aus Abb. 4.21 hervor. Abb. 4.22 zeigt die axial gemittelte brennstabweise radiale relative Leistungsverteilung.

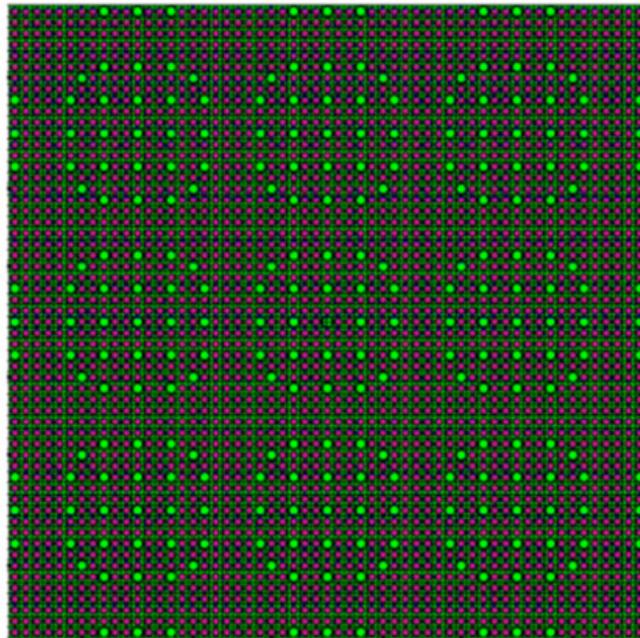


Abb. 4.21 Brennstabanordnung beim Monte Carlo Performance Benchmark

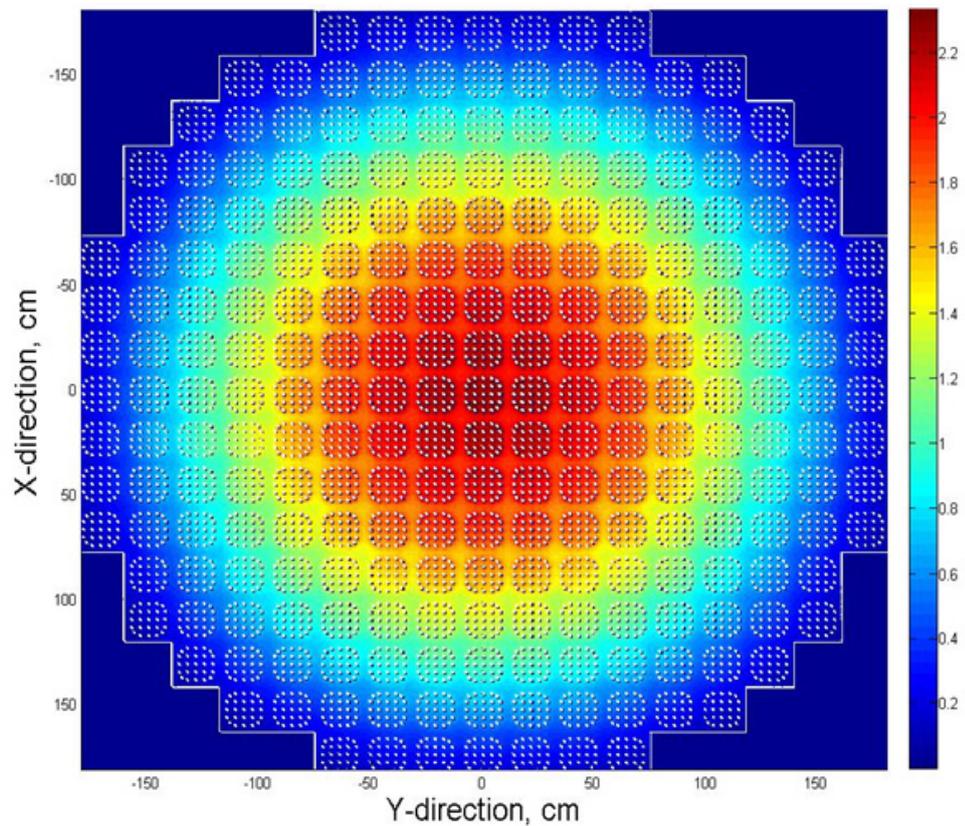


Abb. 4.22 Axial gemittelte Leistungsverteilung für das Monte Carlo Performance Benchmark

Die Abb. 4.23 zeigt die axiale Leistungsverteilung in der X-Z Mittelebene. Da die Ortsauflösung brennstabweise war, sind nur die axialen Verteilungen in den Brennstäben sichtbar, für die Bereiche des umgebenden Moderators sind die Leistungen Null. Da die untere und obere Kernhälfte bei diesem Benchmark unterschiedlich definiert wurden, ist der axiale Verlauf nicht rein kosinusförmig. Obwohl nicht für alle Tally-Bins die geforderte Genauigkeit von 1 % erreicht wurde, zeigen Abb. 4.22 und Abb. 4.23, dass die Ergebnisse der Ganzkernrechnung bereits gute Symmetrie aufweisen. Für die Berechnung des Benchmarks wurden 45.000 Generationen je 450.000 Neutronen simuliert. Die Berechnung erfolgte auf einer CRAY XC 40 mit 72 Prozessoren.

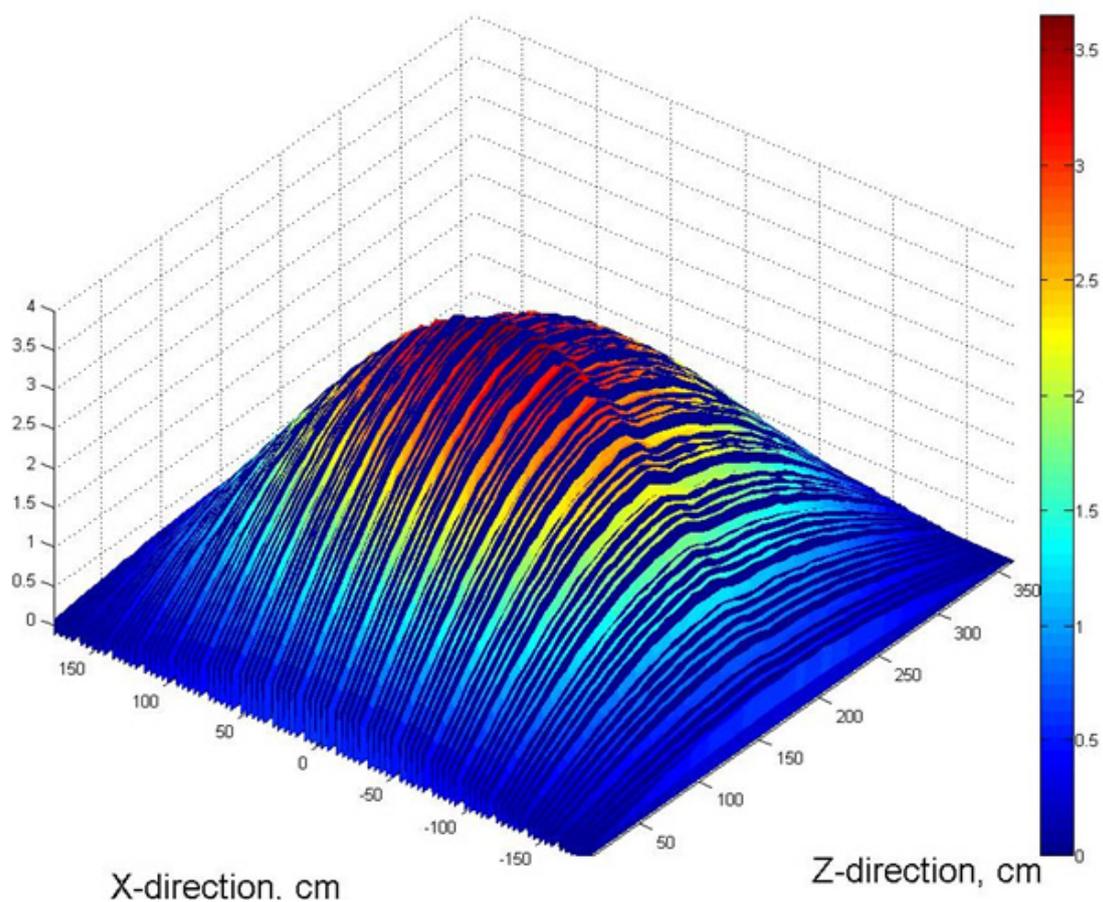


Abb. 4.23 Axiale relative Leistungsverteilung (Mittlebene X-Z) beim Monte Carlo Performance Benchmark

Anwendung der internen Funktion auf Multigruppen Daten

Die normale Anwendung von MCNP6 ist mit kontinuierlich definierten Wirkungsquerschnitten. Es gibt aber auch Problemstellungen, bei welchen Multigruppen Daten von Vorteil sind, z. B. falls adjungierte Flüsse berechnet werden sollen oder bei Unsicher-

heits- und Sensitivitätsanalysen auf der Basis von Kovarianz-Gruppensdaten /GAL 11/. Um zu überprüfen, ob die interne Funktion für die Materialzuordnung auch bei Multigruppensdaten angewandt werden kann, wurden zunächst einfache Tests durchgeführt. Diese Tests waren erfolgreich, d. h. die Ergebnisse mit oder ohne interne Funktion zur Materialzuordnung waren identisch. Um die Methodik an einem komplexeren Problem zu testen, wurde eine Ganzkernrechnung für ein VVER-1000 Modell (hexagonales Gitter) ausgewählt. Das Modell folgt der Spezifikation eines internationalen OECD/NEA-Benchmarks /NEA 05/ für die Zustände Volllast und Nulllast heiß. Die Multigruppensdaten wurden mit dem Programmsystem SCALE /SCA 09/ für 44 Energiegruppen erstellt. Für die Multigruppenversion wurde die Kernbeladung sowohl über den MCNP6-Input als auch über die interne Funktion spezifiziert. Die Ergebnisse dieser Berechnungen waren praktisch identisch, d. h. ebenso wie für die kontinuierlichen Daten können auch Multigruppensdaten über die interne Funktion unabhängig vom MCNP6-Input zugeordnet werden.

Tab. 4.1 Multigruppen-Wirkungsquerschnitte für VVER-1000 für unterschiedliche Brennstoff- und Moderatortemperaturen

XS ID	Brennstofftemperatur (K)	Moderatortemperatur (K)
m40	575	560
m41	575	580
m42	575	600
m43	900	560
m44	900	580
m45	900	600
m46	1300	560
m47	1300	580
m48	1300	600
m49	1027	580

Die Daten wurden für verschiedene Brennstoff- und Moderatortemperaturen erstellt, siehe Tab. 4.1. Mit den in dieser Tabelle angegebenen Querschnittssätzen (für jede Temperatur-Kombination jeweils für 26 verschiedenen Brennelemente) wurden Berechnungen für Volllast heiß mit dem Datensatz m49 (Tab. 4.1) und Nulllast heiß mit dem Datensatz m41 durchgeführt. Zusätzlich wurde jedoch auch mit Hilfe der internen Funktion der Volllast bzw. Nulllast-Zustand durch Interpolation (Stochastic Mixing) zwi-

schen den Datensätzen m44 und m47 bzw. m40 und m42 durchgeführt. Die Ergebnisse zeigten, dass die Interpolation auch bei Multigruppenpendaten zu vergleichbaren Werten im Multiplikationsfaktor und der Leistungsverteilung wie bei den Rechnungen mit den „korrekten“ Datensätzen m49 bzw. m41 führt, siehe Tab. 4.2.

Tab. 4.2 Multiplikationsfaktor für Nulllast heiß (HZP) und Vollast (HFP) für Multi-
gruppen und kontinuierliche Querschnitte

XS ID	Multigruppen Temperatur über WQ	Multigruppen Stochastic Mixing	Kontinuierliche Daten
HZP	1.05049	1.05047	1.04157
HFP	1.03572	1.03559	1.03937
HFP (ATHLET)		1.03562	

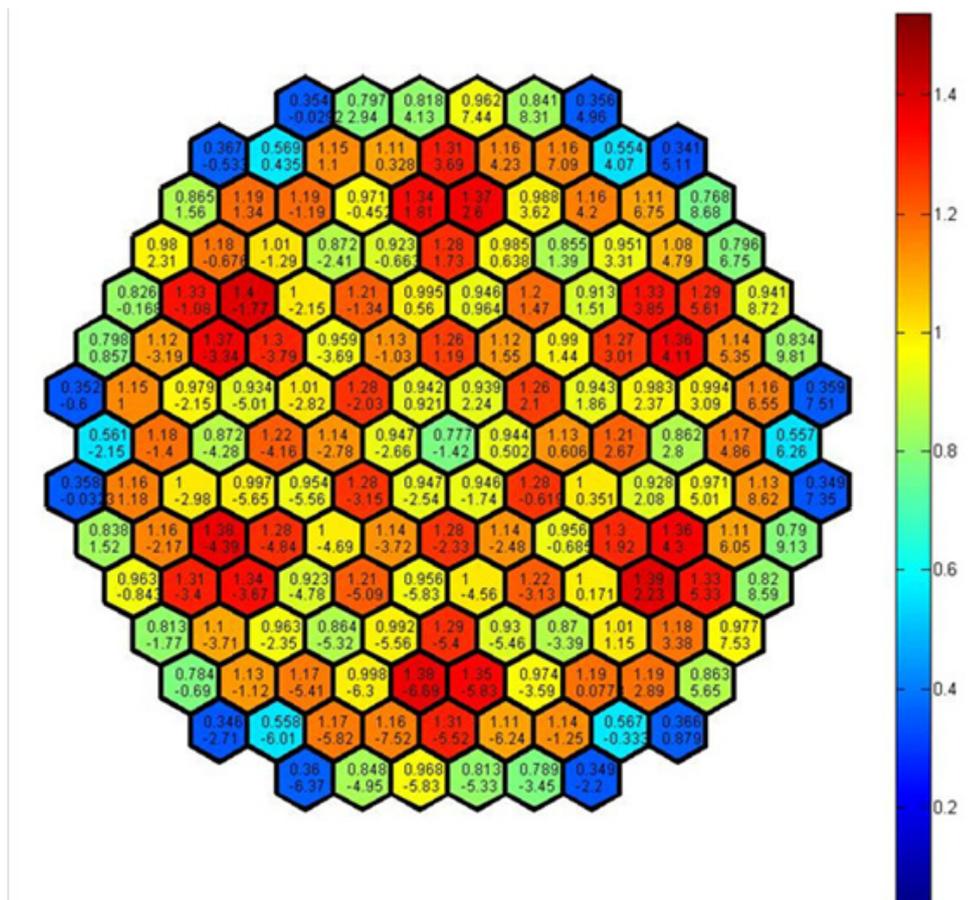


Abb. 4.24 Axial gemittelte relative Leistungsverteilung beim VVER-1000-Benchmark, HFP: MCNP6 mit kontinuierlichen Daten (oben), relativer Unterschied in % zu Multigruppenpendaten (unten).

ten BE-Leistungen bei konstanten und variablen Temperaturen bis zu ca. 10 % abweichen.

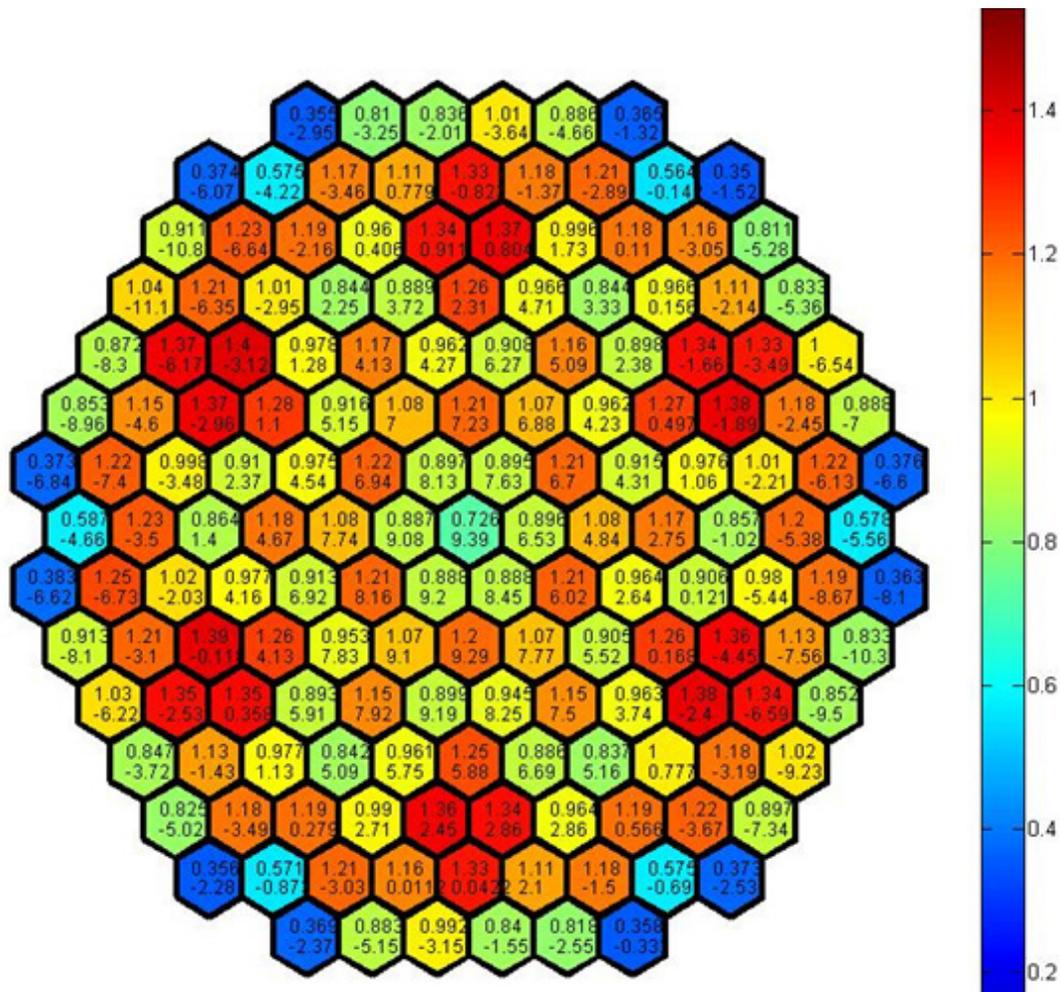


Abb. 4.26 Axial gemittelte relative Leistungsverteilung beim VVER-1000-Benchmark, HFP: MCNP6 mit Multigruppendaten, konstante Temperatur (oben), relativer Unterschied in % zu MCNP6/Multigruppendaten-ATHLET-Kopplung (unten)

Die Berechnungen haben gezeigt, dass für Ganzkernrechnungen mit dem Monte-Carlo-Verfahren für eine relativ symmetrische Beladung nur dann symmetrische Ergebnisse erzielt werden, wenn eine genügende Anzahl von Neutronen/Generation und genügend von der Quellverteilung unabhängige Generationen simuliert werden. Die Abb. 4.27 zeigt für das hier beschriebene VVER-1000 Benchmark die thermische Flussverteilung (axial gemittelt) aus einer entsprechend aufwändig durgeführten Berechnung. Die Flussverteilung wurde mit Hilfe eines sog. Mesh-Tallies mit sehr feiner Ortsauflösung durchgeführt.

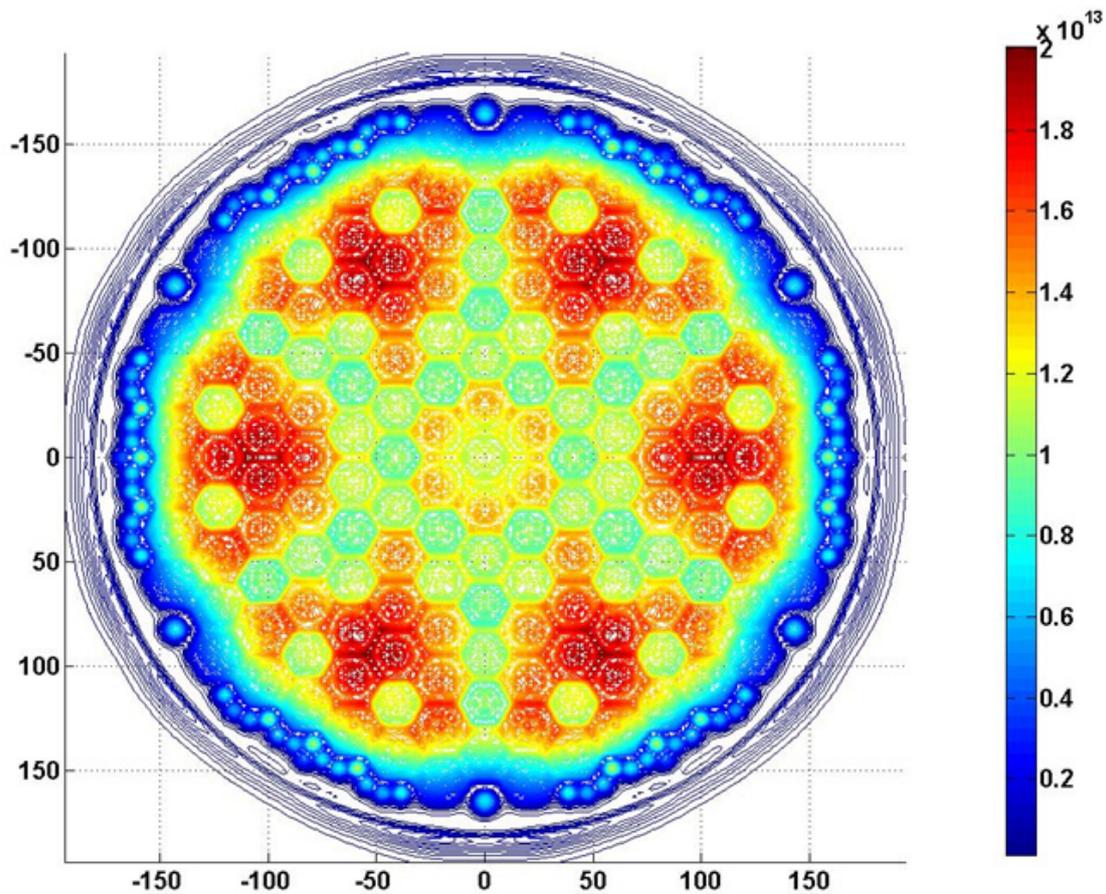


Abb. 4.27 Thermische Flussverteilung für das VVER-1000-Benchmark, berechnet mit MCNP6 und kontinuierlichen Daten

Gekoppelte MCNP6/ATHLET-Rechnungen für einen Siedewasserreaktor

Für einen SWR-Kern ist die Kopplung mit einem Thermohydraulikprogramm besonders wichtig, da durch die unterschiedlichen Dampfgehalte lokal starke Moderationsunterschiede bestehen. Als Beispiel wurde ein SWR-Kern deutscher Bauart mit 1300 MWel ausgewählt, und zwar der Erstkern ohne Abbrand und Xe-frei /BER 03/. Für die Thermohydraulik wurde ATHLET eingesetzt und $\frac{1}{4}$ Kern mit 210 Brennelementkanälen modelliert. Die Kopplung von MCNP6 und ATHLET wurde analog zu den DWR-Beispielen durchgeführt. Das MCNP6-Modell selbst berücksichtigte einen Ganzkern, allerdings mit einer speziellen Tally-Routine Berechnung der brennelementweisen axialen Leistungsverteilung. Bei diesem Tally wurde jedoch die $\frac{1}{4}$ -Kernsymmetrie berücksichtigt. Die vor ATHLET berechneten thermohydraulischen Parameter Kühlmitteldichte, Kühlmitteltemperatur und Brennstofftemperatur wurden über die beschriebene interne Funktion mittels eines Interfaces an MCNP übergeben. Die Abhängigkeit der Resonanzquerschnitte wurde dabei mit hoher Ortsauflösung (die axiale Abhängigkeit der Brennstoff-

temperatur brennelementweise über ein Polynom) über die OTF („On The Fly“)-Version berücksichtigt. Da die Kühlmitteltemperatur beim SWR nicht sehr stark variiert (maximal Siedetemperatur), wurde auf die Interpolation der Streuquerschnitte von H in H₂O in den S(α,β)-Daten verzichtet. Da keine Vorgaben für die Steuerstabstellungen beim Anfahren des Erstkerns verfügbar waren, wurden alle Steuerstäbe 100 cm in die untere Kernhälfte eingefahren. Dies ist eine willkürliche Annahme, die z. T. zu relativ hohen radialen und axialen Leistungsformfaktoren führt. Aus diesem Grund wurde, um die Brennstofftemperaturen zu begrenzen, die Rechnung nur mit Teillast durchgeführt. Beim Vorliegen von detaillierten Informationen über Kernbeladung und Steuerstabstellungen können diese Rechnungen mit demselben Modell (bis auf die Stabstellungen) durchgeführt werden. Gegebenenfalls können abbrandabhängige Brennstoffzusammensetzungen über das Interface an MCNP6 übergeben werden.

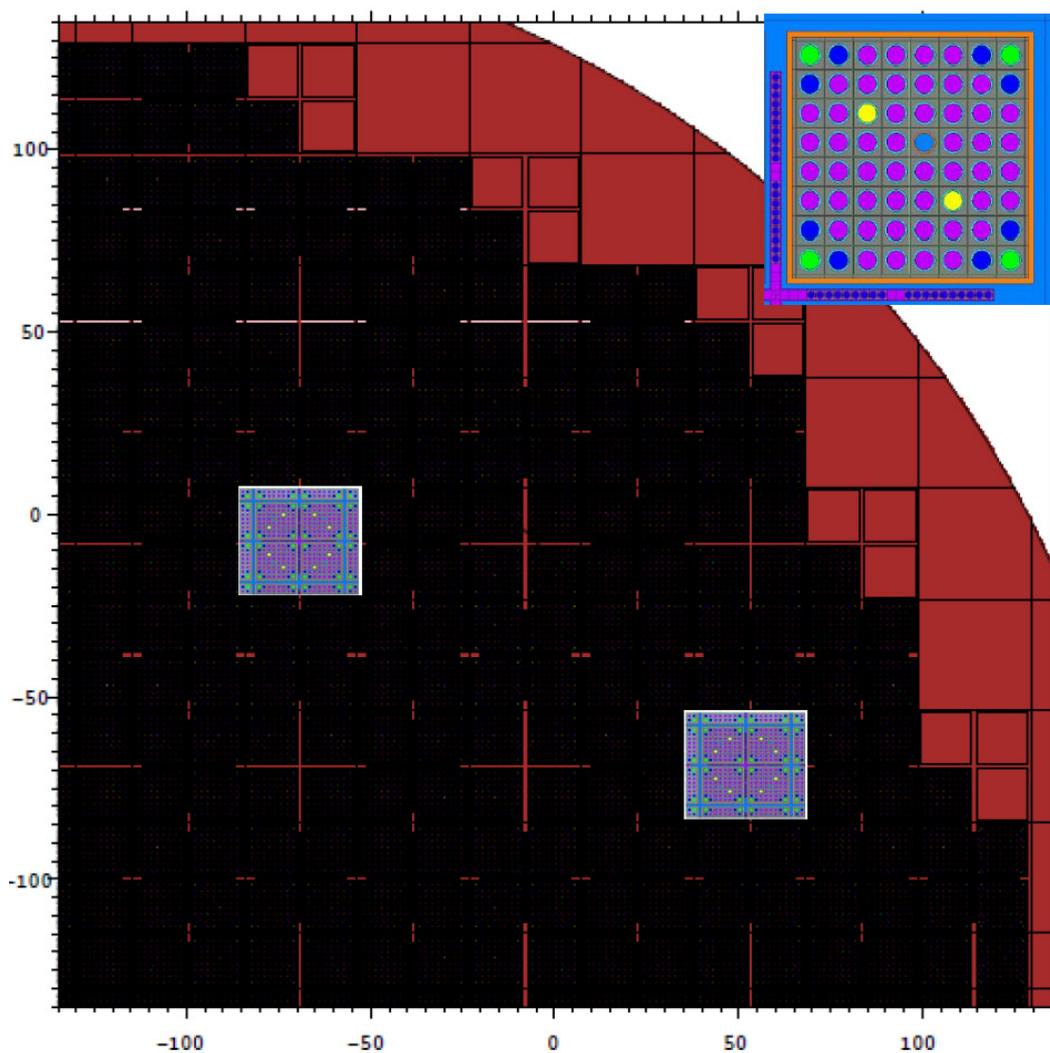


Abb. 4.28 Viertelkern-Modell eines SWR

Die Abb. 4.28 zeigt den radialen Aufbau des MCNP6-Modells. Wegen der Verkleinerung der Abbildung sind die einzelnen Brennstäbe nicht sichtbar. Deshalb sind in dieser Abbildung an 2 Stellen jeweils 2x2 Brennelemente mit einem Steuerelement ange deutet. In der rechten oberen Ecke noch etwas vergrößert ein Brennelement mit dem zugehörigen Steuerelement. Daraus ist ersichtlich dass das Brennelement 8x8 Brennstäbe enthält, 2 davon enthalten das abbrennbare Gift Gadolinium. Eine Brennstabpo sition ist durch einen sog. Wasserstab ersetzt (zur Moderationsverbesserung).

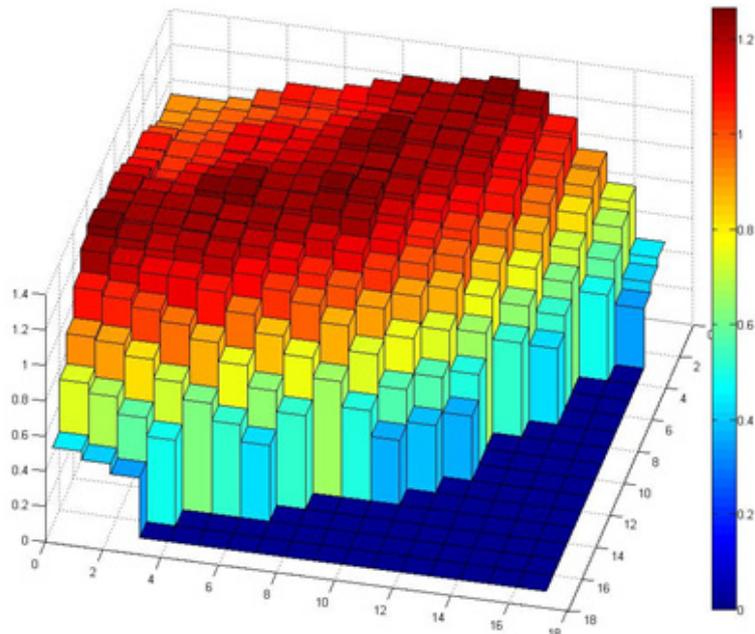


Abb. 4.29 Axial gemittelte Leistungsverteilung in einem SWR-Erstkern

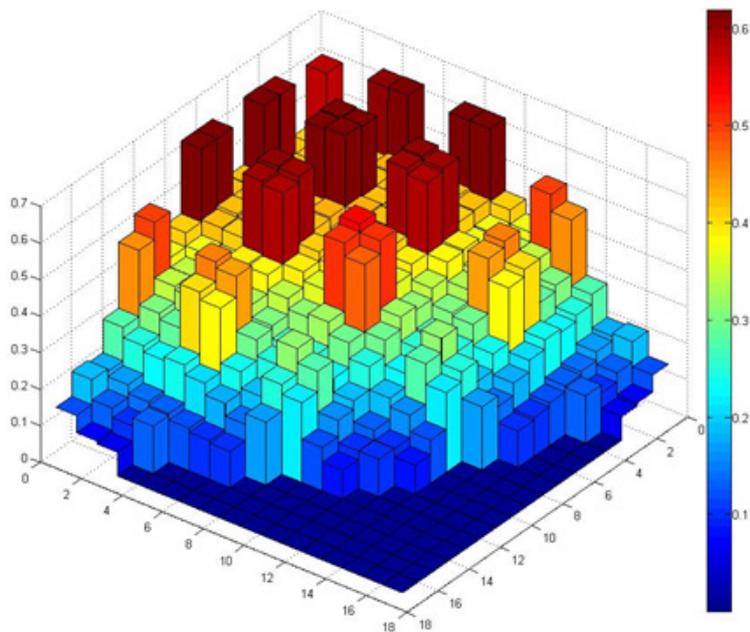


Abb. 4.30 Leistungsverteilung im unteren Bereich eines SWR-Erstkerns

Nach mehreren MCNP6/ATHLET-Iterationen ergaben sich folgende Leistungsverteilungen: In Abb. 4.29 ist die axial gemittelte relative Leistungsverteilung dargestellt; sie zeigt deutlich den Einfluss des höheren Dampfgehalts in den Bereichen höherer Leistung. Die Abb. 4.30 zeigt die relative Leistungsverteilung im unteren Kernbereich, wobei die Leistungsspitzen bei den nicht kontrollierten Brennelementen liegen. Die Abb. 4.31 zeigt die relative Leistungsverteilung im mittleren axialen Bereich oberhalb der Steuerelemente, die Abb. 4.32 die Leistungsverteilung im oberen Kernbereich mit den höchsten Dampfgehalten.

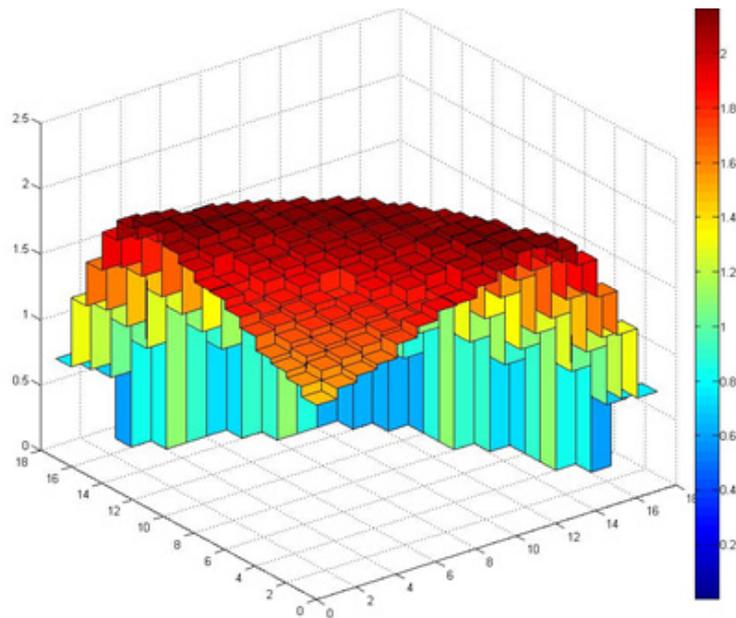


Abb. 4.31 Leistungsverteilung im mittleren Bereich eines SWR-Erstkerns

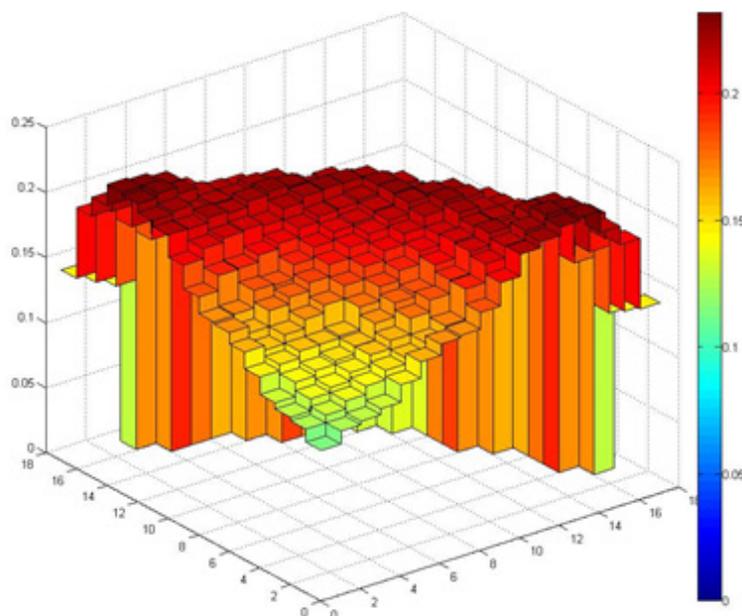


Abb. 4.32 Leistungsverteilung im oberen Bereich eines SWR-Erstkerns

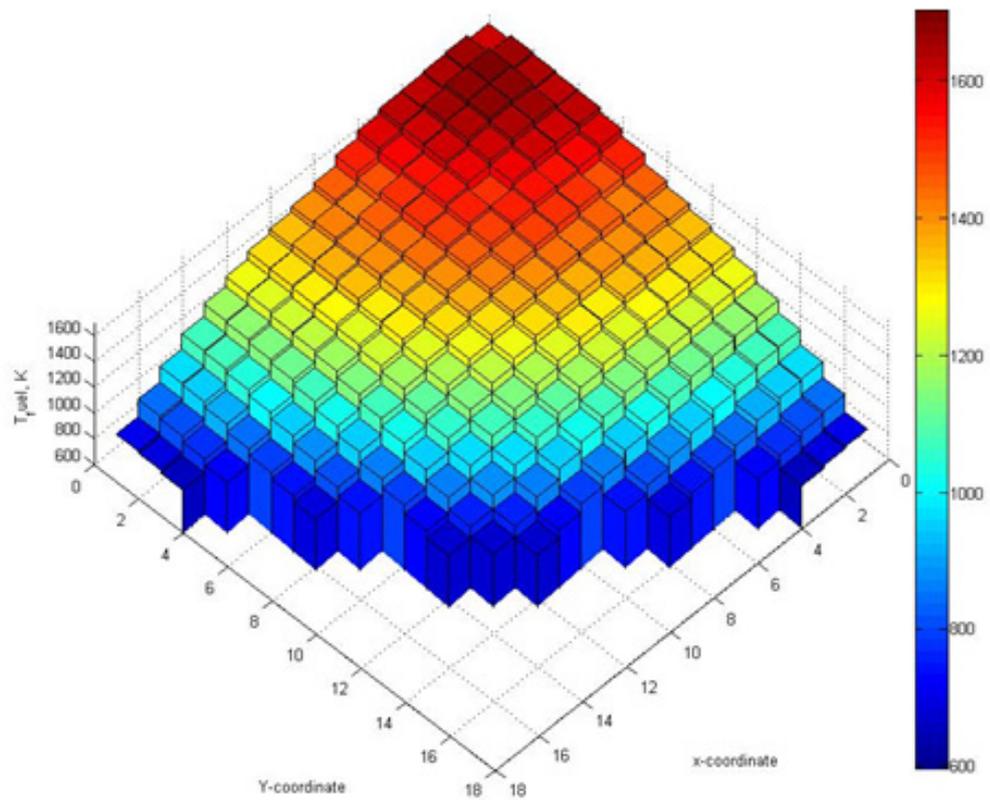


Abb. 4.33 Brennstofftemperatur im axialen Maximum eines SWR-Erstkerns

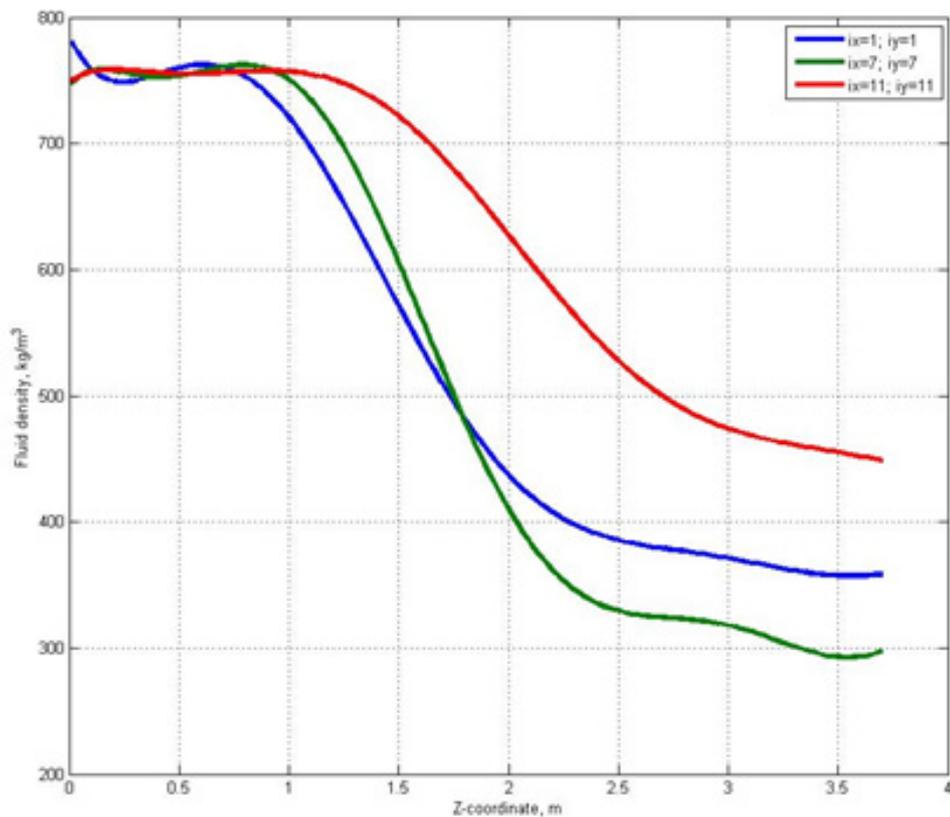


Abb. 4.34 Axiale Verteilung der Kühlmitteldichte in 3 ausgewählten Brennelementen auf der Diagonale: Zentrum, 7. Reihe, 11. Reihe

Die Verteilung der Brennstofftemperaturen im Bereich des axialen Maximums zeigt Abb. 4.33. Die Verteilung der axialen Kühlmitteldichte in 3 ausgewählten Brennelementen auf diagonalen Positionen (zentrale Position (1), Position 7 und 11) zeigt Abb. 4.34. Die radiale Verteilung der Kühlmitteldichte am Kernaustritt zeigt Abb. 4.35.

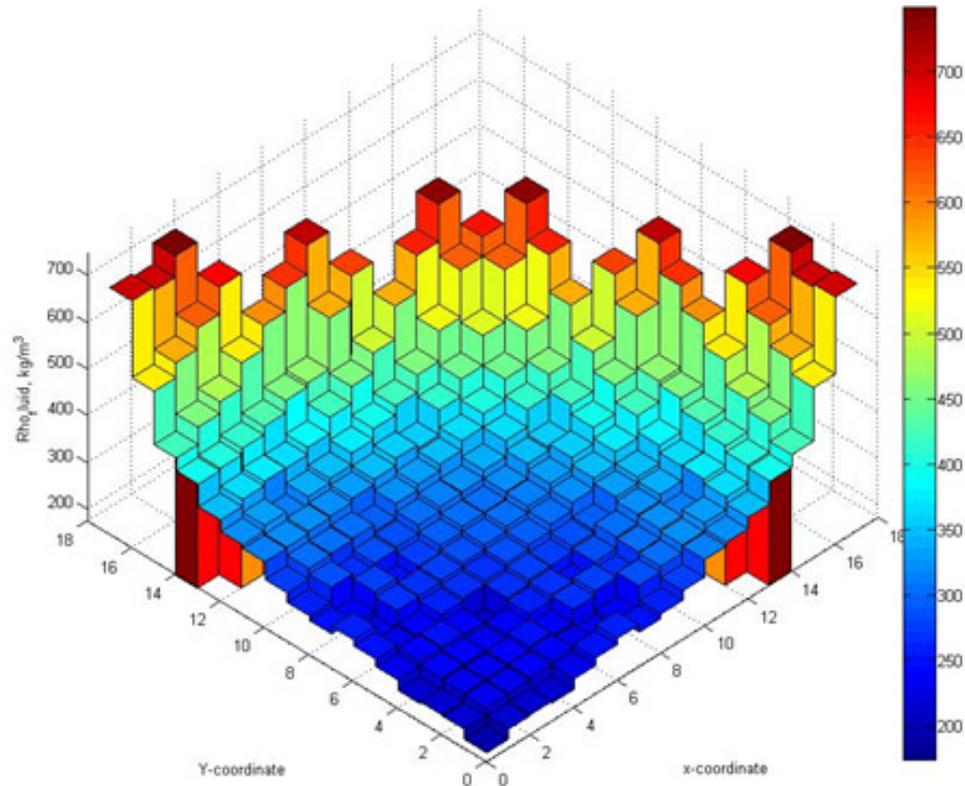


Abb. 4.35 Kühlmitteldichte am Kernaustritt eines SWR-Erstkerns

Obwohl das Kernmodell nicht realistischen Betriebsbedingungen entspricht, konnte gezeigt werden, dass gekoppelte MCNP6/ATHLET-Rechnungen auch für SWR mit stark variierenden Dampfgehalten möglich sind. Allerdings sollte die Iteration sorgfältig, ggf. unter Verwendung von Unterrelaxationsfaktoren und Xenon-Gleichgewichtsdichten durchgeführt werden.

Gekoppelte MCNP6/ATHLET-Rechnungen für einen natriumgekühlten schnellen Reaktor (SFR)

Unter den sogenannten innovativen Reaktortypen der Generation IV sind auch natriumgekühlte schnelle Reaktoren aufgeführt, für welche bereits umfangreiche Analysen vorliegen und aktuell von der OECD/NEA Benchmarks durchgeführt werden /BLA 12, STA 12/. Im Rahmen dieser Benchmarks wurden verschiedene Kernkonfigurationen mit mittlerer ($1000 \text{ MW}_{\text{th}}$) und hoher Leistung ($3600 \text{ MW}_{\text{th}}$) spezifiziert. Daraus wurden

ein Kern mittlerer Leistung mit metallischem Brennstoff und ein Kern hoher Leistung mit oxydischem Brennstoff ausgewählt. Der Aufbau des Kerns mit metallischem Brennstoff ist in Abb. 4.36 dargestellt. Die genaue Spezifikation findet sich in /BLA 12/. Für den Kern mit metallischem Brennstoff genügte es, aus Symmetriegründen ein 30° Segment zu modellieren (siehe Abb. 4.37).

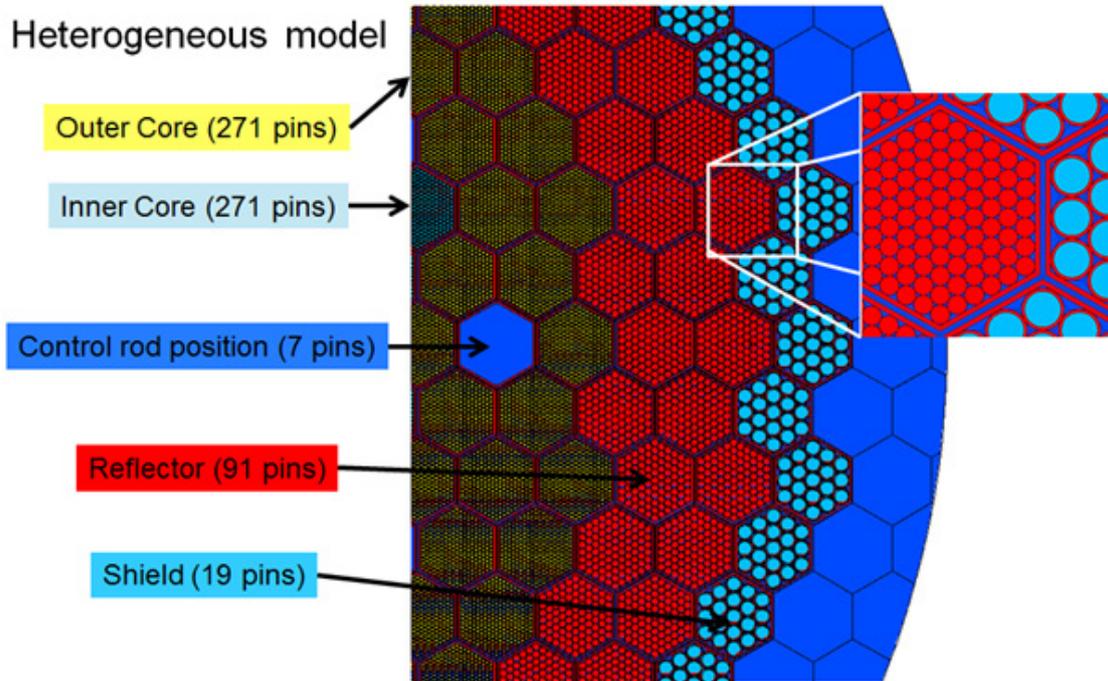


Abb. 4.36 SFR-1000-Reaktor mit metallischem Brennstoff

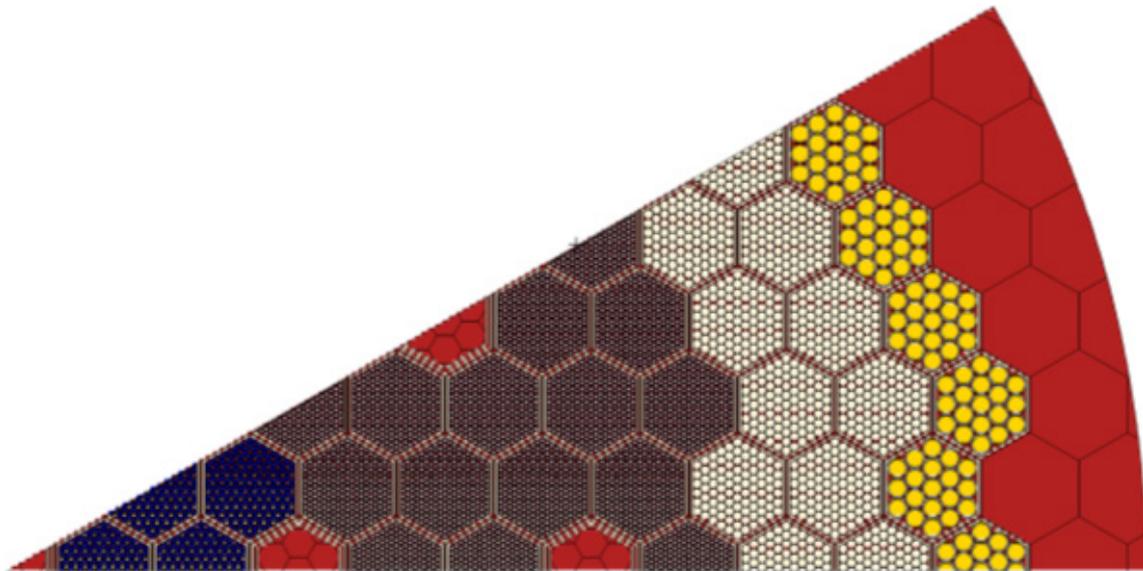


Abb. 4.37 30°-Segment des SFR-1000-Reaktors mit metallischem Brennstoff

Wie aus den Abbildungen hervorgeht, besteht der Kern aus einer inneren und äußeren Brennstoffzone, einem Reflektor und einem Schild. Für dieses Modell wurden mit der

Standard-Eingabe und mittels der internen Funktionen die Nuklidzusammensetzungen der Brennstäbe an MCNP übergeben. Die Ergebnisse (Multiplikationsfaktor, Fluss- und Leistungsverteilungen) aus diesen Vergleichen unterschieden nur im Rahmen des sehr kleinen statistischen Fehlers.

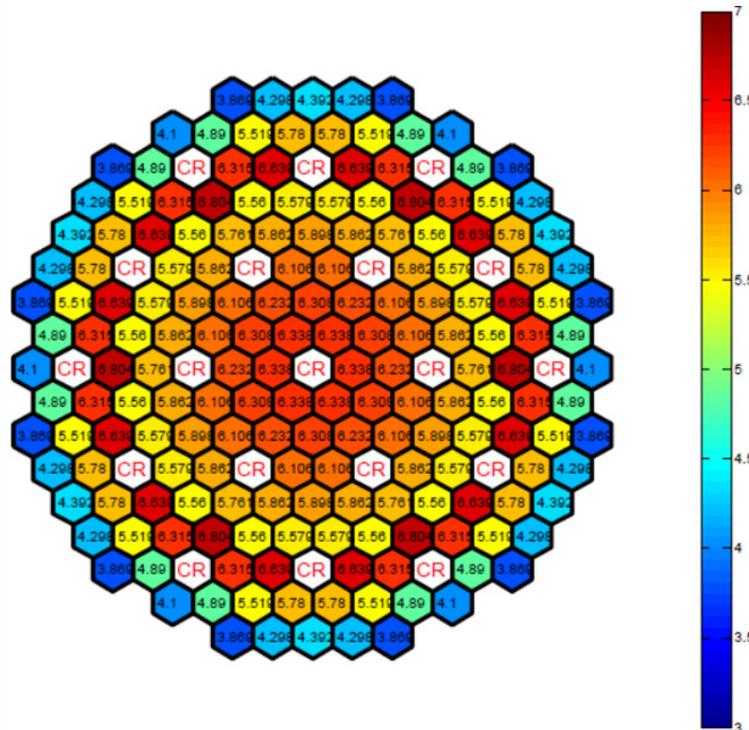


Abb. 4.38 Leistungsverteilung beim SFR-1000 mit metallischem Brennstoff: MCNP6-Ergebnis mit interner Funktion zur Materialspezifikation

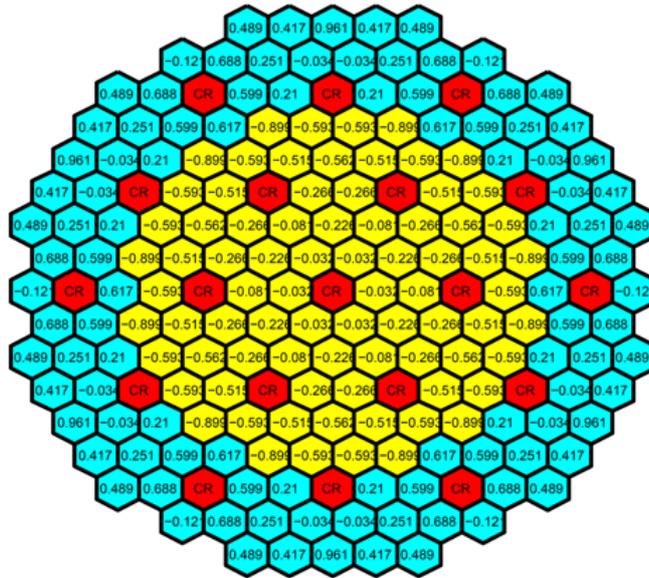


Abb. 4.39 Vergleich der Leistungsverteilungen (Unterschiede in %) beim SFR-1000-Kern mit metallischem Brennstoff: MCNP mit interner Funktion zur Materialspezifikation und deterministische Methode

Die berechnete Leistungsverteilung am Zyklusbeginn (BOC) ist aus der Abb. 4.38 ersichtlich. Ein Vergleich der Leistungsverteilungen, berechnet mit MCNP (mit interner Funktionen und speziellem Tally) und einer deterministischen Methode /PON 10/ zeigt Abb. 4.39. Die maximalen relativen Abweichungen liegen dabei bei ca. 1 %.

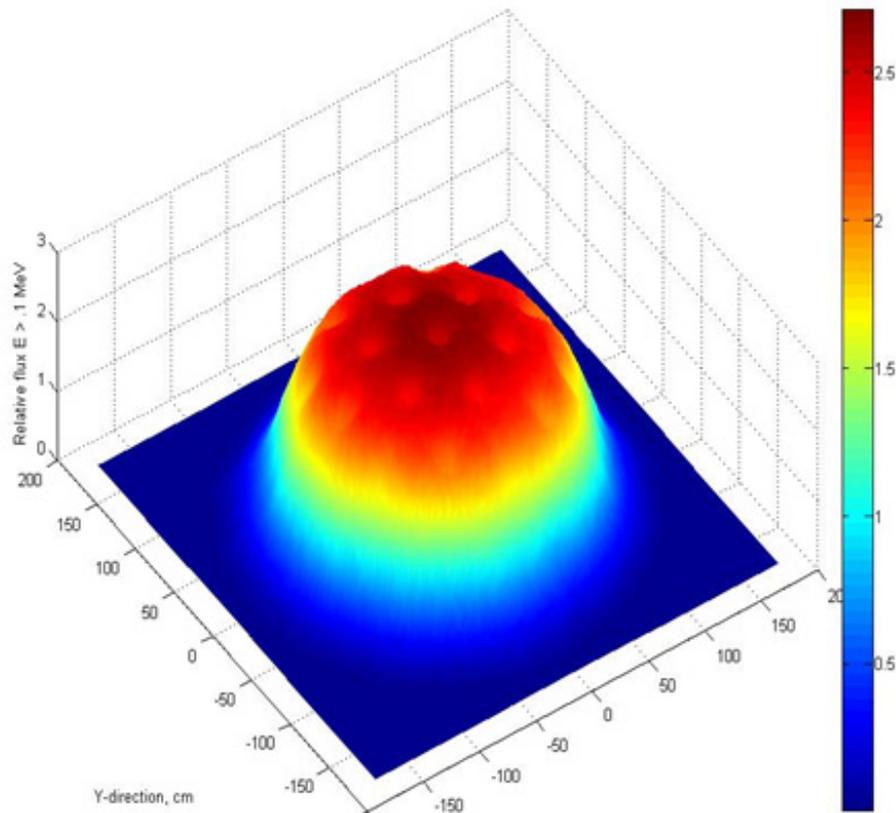


Abb. 4.40 Relative Flussverteilung für $E > 1\text{ MeV}$ beim SFR-1000 mit metallischem Brennstoff

Eine Übersicht über die relative Verteilung des Neutronenflusses für den SFR-1000 mit metallischem Brennstoff für Energien $> 1\text{ MeV}$ zeigt Abb. 4.40. Für das 30° -Segment dieses Kerns wurden brennstabweise Abbrandrechnungen durchgeführt, beginnend mit dem Gleichgewichtszyklus BOC. Die Zykluslänge war 300 Tage. Die abbrandabhängigen Nukliddichten wurden über die interne Funktion mittels eines Interfaces übergeben. Als Abbrandprogramm wurde das Programm ABBRAND /WOH 72/ verwendet. Die Leistungsverteilungen am Zyklusende EOC stimmten ähnlich gut überein mit den deterministischen Benchmark-Lösungen wie bei BOC. Detailliertere Ergebnisse sind auch in /KIM 12/ dokumentiert.

Für den SFR-Kern mit 3600 MWth und oxydischem Brennstoff wurden ebenfalls Benchmarkrechnungen durchgeführt. Die Spezifikation ist wieder /BLA 12/ entnommen, detaillierte Ergebnisse sind in /BUI 14/ und /GUI 14/ dokumentiert. Die Modellierung dieses Kerns war im Prinzip vergleichbar mit der Modellierung des SWR-1000 Kerns. Allerdings ist nur eine 120° -Symmetrie vorhanden. Der prinzipielle Kernaufbau geht aus Abb. 4.41 hervor. Im Gegensatz zur Modellierung des SWR-1000-Kerns wurde allerdings die Temperaturabhängigkeit der Resonanzquerschnitte über das OTF-

Verfahren berücksichtigt. Da hier der unaufgelöste Resonanzbereich nicht mit erfasst wird, wurde untersucht, inwiefern das OTF-Verfahren bzw. das Verfahren mit Stochastic Mixing zur Berücksichtigung der Temperaturabhängigkeit der Resonanzquerschnitte verwendet werden kann. Deshalb wurden für die konstante Brennstofftemperatur von 1300 °C Rechnungen mit den beiden Verfahren und einem Datensatz für diese Temperatur durchgeführt. Die Ergebnisse sind in Abb. 4.42 dargestellt.

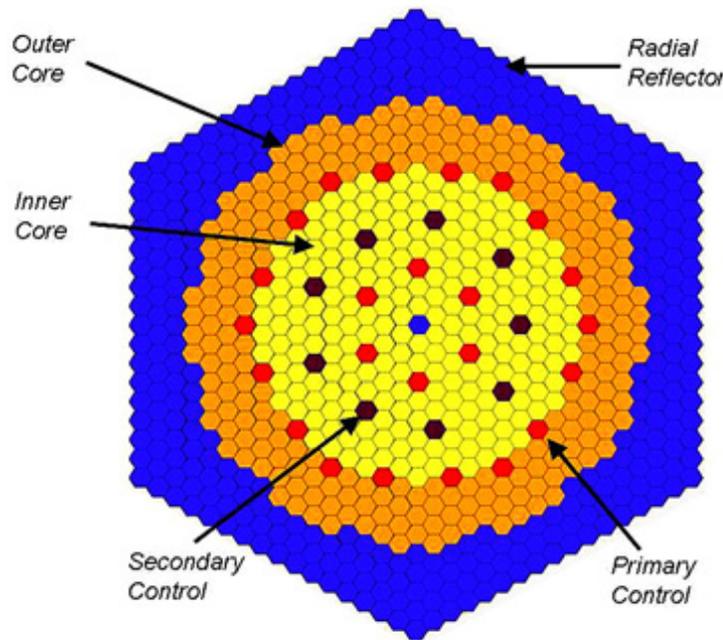


Abb. 4.41 Benchmark Konfiguration eines SWR mit 3600 MWth

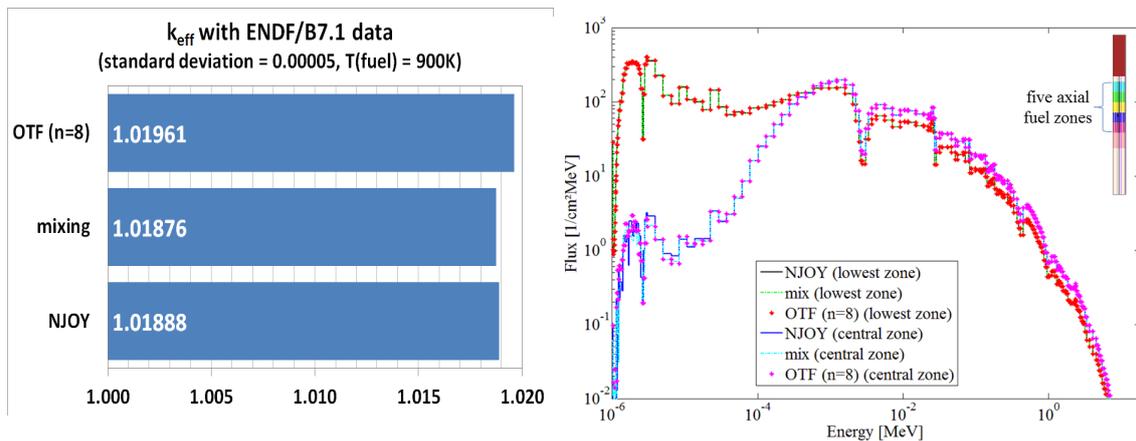


Abb. 4.42 k_{eff} und Spektren bei OTF, Stochastic Mixing und Verwendung von direkt für die Brennstofftemperatur berechneten Querschnitten

Die Abbildung zeigt, dass die Unterschiede zwischen den verschiedenen Verfahren marginal sind und daher für diese Problemstellung ohne großen Fehler angewandt werden können.

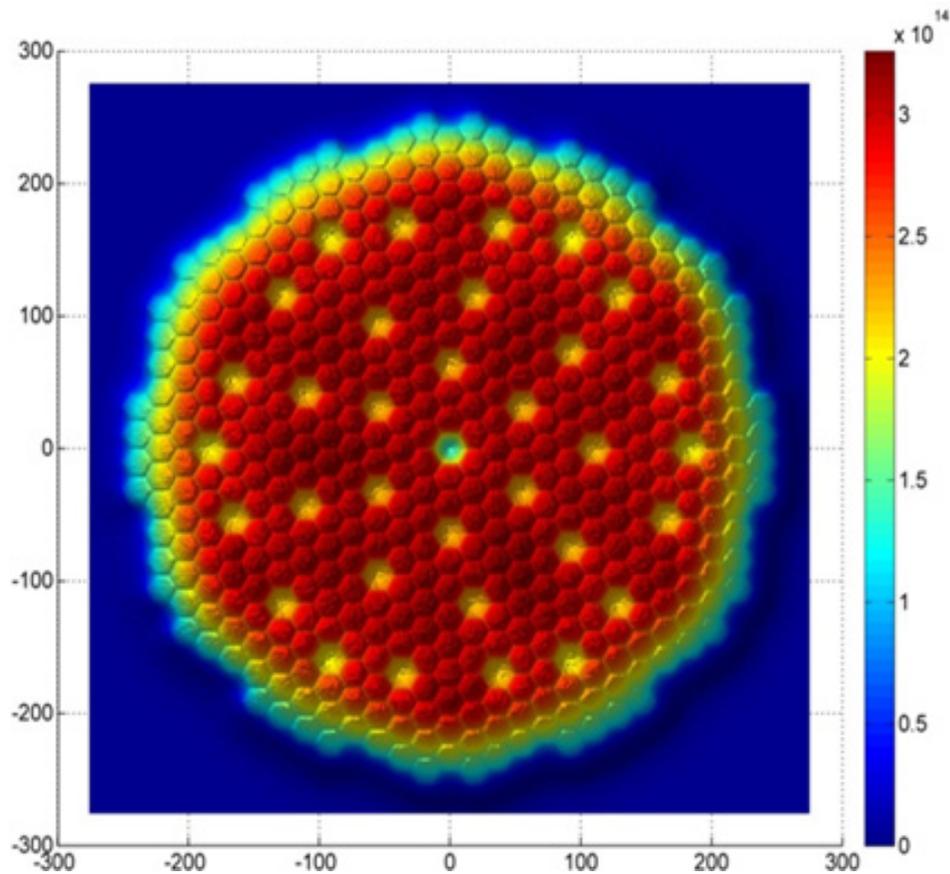


Abb. 4.43 BOC-Verteilung des Neutronenflusses für $E > 1$ MeV beim SFR-3600 Kern mit oxydischem Brennstoff

Für dieses Benchmark waren die Temperaturen von Kühlmittel und Brennstoff konstant vorgegeben. Die entsprechenden Berechnungen der Leistungs- und Flussverteilung wurden wie auch beim SFR-1000-Kern durchgeführt, ebenso die Abbrandrechnung zum Erreichen des EOC-Zustands. Eine Darstellung der Flussverteilung schneller Neutronen ($E > 1$ MeV) zeigt Abb. 4.43. Um den Einfluss der Temperaturverteilung auf die Leistungsverteilung und die weiteren Parameter zu untersuchen, wurden noch gekoppelte MCNP6/ATHLET Rechnungen durchgeführt, wobei die neueren Features von ATHLET-3.0a bezüglich Natrium als Kühlmittel verwendet wurden. Die gekoppelten Neutronentransport-/Thermohydraulikrechnungen mit MCNP6 und ATHLET wurden analog zu den LWR-Rechnungen durchgeführt.

Abb. 4.44 zeigt die axial gemittelte Leistungsverteilung, basierend auf den ATHLET-Thermohydraulikdaten. Abb. 4.45 zeigt die zentrale Brennstofftemperatur und Abb. 4.46 die zentrale Kühlmitteltemperatur. Die Brennstofftemperaturen, die mit ATHLET berechnet wurden, liegen deutlich unterhalb der in der Benchmarkspezifikation festgelegten konstanten Temperatur von 1300°C . Da keine Informationen über das

Zustandekommen dieses Werts vorliegen, kann davon ausgegangen werden, dass voraussichtlich andere thermophysikalische Daten bei der Berechnung verwendet wurden, oder dass diese Temperatur willkürlich festgelegt wurde.

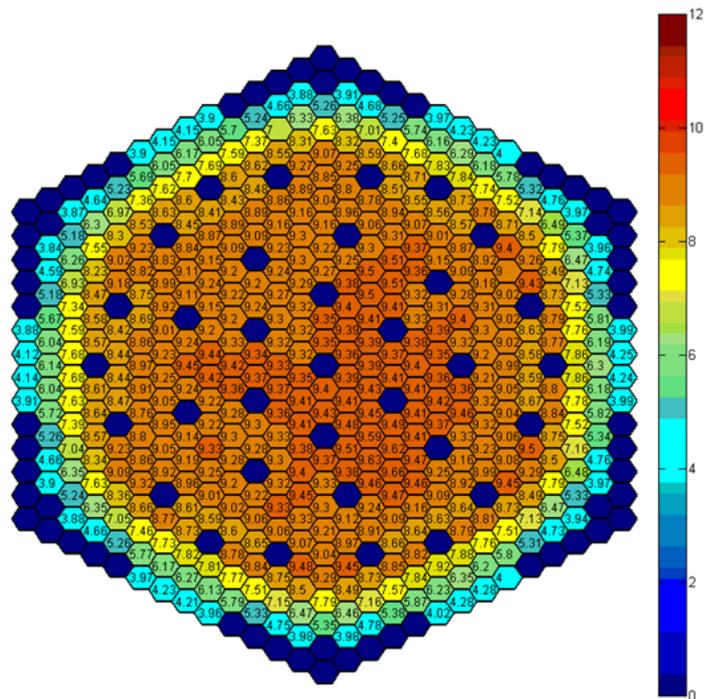


Abb. 4.44 BOC-Leistungverteilung SFR-3600-Reaktor

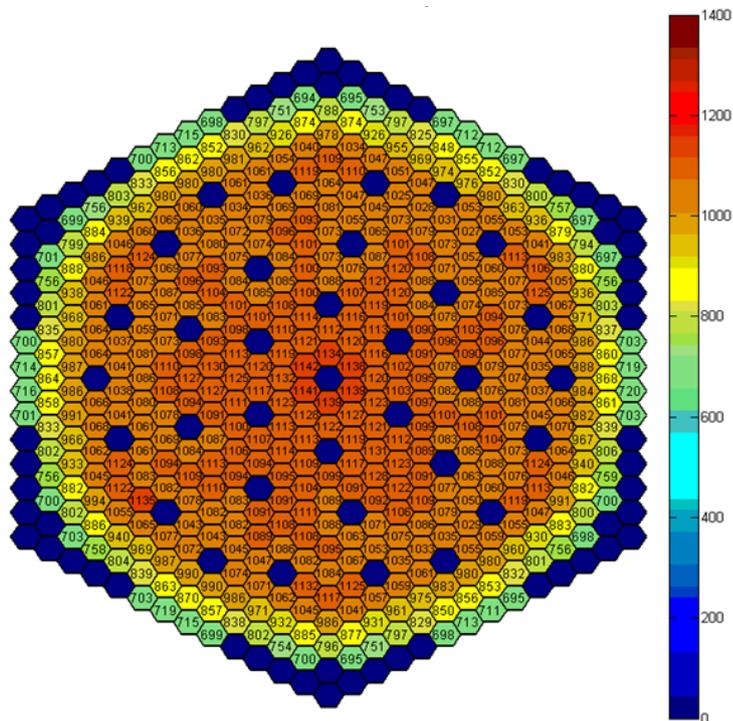


Abb. 4.45 Zentrale BOC-Brennstofftemperaturen beim SFR-3600-Reaktor

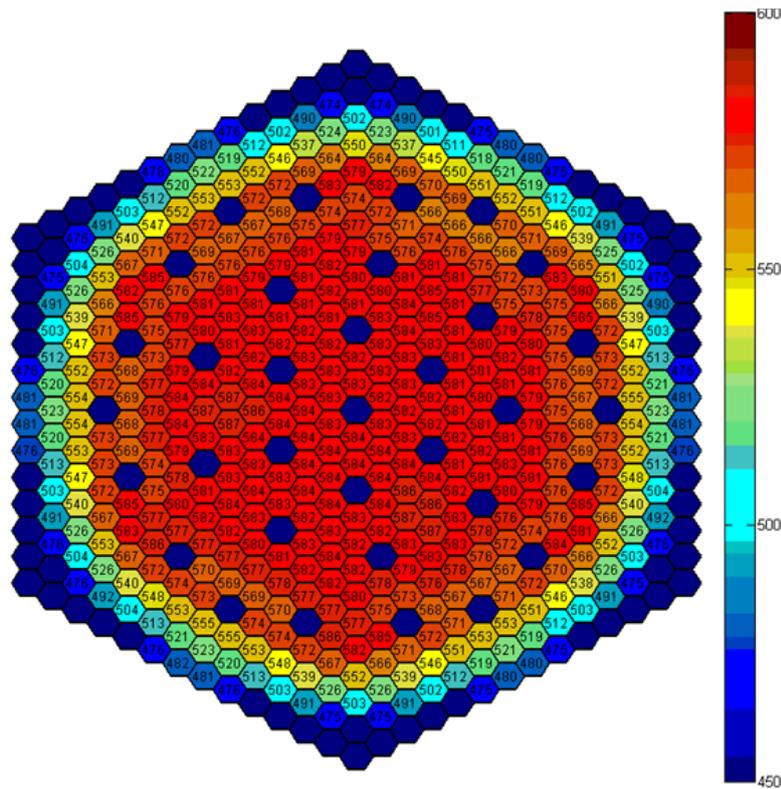


Abb. 4.46 Zentrale BOC-Kühlmitteltemperaturen BOC SFR-3600-Reaktor

Die Modifikationen an MCNP, die durchgeführt wurden, ermöglichen einen erweiterten Einsatz von MCNP6, insbesondere bei hoher Ortsauflösung mit quadratischen oder hexagonalen Gittern. Die bisher durchgeführten Tests zeigten korrekte Ergebnisse. Über die eingeführten internen Funktionen können detaillierte Nuklidichte- und Temperaturverteilungen für Brennstoff, Moderator und Strukturmaterialien definiert werden, insbesondere bei Nutzung der „Repeated Structures“ für die Gitterdefinition. Ferner kann die Temperaturinterpolation über die internen Funktionen vorgenommen werden, ohne dass der Standard Input geändert werden muss. Die Einführung der sog. OTF-Methode für die Berücksichtigung der Temperaturabhängigkeit der Resonanzquerschnitte hat sich als zweckmäßig und hinreichend genau erwiesen, so dass diese Methode alternativ zur Methode des Stochastic Mixing angewandt werden kann. Die Methode kann sowohl bei den kontinuierlichen Wirkungsquerschnitten als auch bei Multigruppensdaten eingesetzt werden (Multigruppensdaten aber nur mit Stochastic Mixing).

Gekoppelte Rechnungen mit einem Thermohydraulikprogramm sind möglich, wie die vorgestellten Beispiele zeigen; allerdings kann es von Nachteil sein, wenn die Neutronentransportrechnung auf Massiv-Parallelrechnern durchgeführt wird, die Thermohydraulikrechnung aber nicht auf Parallelrechnern läuft. Je nach verfügbarer Hardware

sollte hier jeweils eine optimale Lösung gefunden werden. Ferner sollten noch die Iterationsstrategien Neutronentransport/Thermohydraulik optimiert werden. Für realistische Rechnungen bei Vollast oder Teillastzuständen sollte für thermische Reaktoren noch eine optimale Strategie zur Berechnung des Xe-135-Gleichgewichts entwickelt werden.

4.2 Verwendung der Monte-Carlo-Methode für Transientenberechnungen

Zur Sicherheitsbewertung von Reaktorkernen gehört unter anderem die Betrachtung von transienten Vorgängen sowohl während des Normalbetriebs als auch bei Störfallszenarien. Anhand der Modellierung solcher dynamischen Vorgänge durch Kopplung von Neutronentransport- und Thermohydraulikprogrammen, lässt sich zum Beispiel der Verlauf der Brennstofftemperatur während der Transiente ermitteln. Mit dieser Information lassen sich dann Reaktivitätsrückwirkungen durch die Dopplerverbreiterung des Brennstoffs modellieren und Vorhersagen über eventuelle Brennstabschäden treffen.

Für die Simulation des zeitabhängigen Neutronentransports werden in der Regel deterministische oder hybride Methoden eingesetzt. Viele Methoden wenden dabei eine Faktorisierung des Neutronenflusses in eine Amplituden- und eine Formfunktion an. Die Amplitudenfunktion beschreibt dabei das Zeitverhalten des Neutronenflusses, während die Formfunktion nur geringfügig mit der Zeit variiert und dabei vom Ort, der Energie und der Richtung abhängig ist. Zur Bestimmung der zeitabhängigen Amplitudenfunktion müssen jedoch die kinetischen Parameter der Konfiguration ermittelt werden. Diese sind jedoch auch zeitabhängig und es sind verschiedene Definitionen und Verfahren zur ihrer Ermittlung publiziert. Die Formfunktion kann durch einen Neutronentransportcode, der mit der Diskrete-Ordinaten oder Monte-Carlo Methode arbeitet, für einen stationären Zustand berechnet werden. Generell lassen sich die Faktorisierungsverfahren für kinetische Probleme gut einsetzen, bei denen hauptsächlich die Amplitude des Neutronenflusses variiert. Ändert sich jedoch das Profil des Neutronenflusses während der Transiente stark und weichen die Quellverteilungen der prompten und der verzögerten Neutronen voneinander ab, müssen andere Verfahren angewendet werden. Neben den Faktorisierungsverfahren existieren noch die direkten, deterministischen Methoden zur Analyse von Transienten. Diese Verfahren arbeiten mit Energiegruppen und der Diskretisierung von Volumina und Winkeln. Bei großen, dreidimensionalen Systemen ist der Rechenaufwand jedoch meistens nicht mehr praktika-

bel. In diesem Fall werden Grobgitterverfahren oder nodale Methoden eingesetzt, die zwar mit einem vertretbaren Rechenaufwand auskommen, jedoch Näherungen einführen.

Neben den deterministischen Verfahren, wurden in den letzten Jahren auch die stochastischen Verfahren zur Analyse von Transienten weiterentwickelt. Als Basis dient hierbei die Monte-Carlo-Methode zur Berechnung des Neutronentransports für stationäre Zustände. Die Vorteile der Monte Carlo Methode sind unter anderem, dass kontinuierliche Wirkungsquerschnittsdaten benutzt werden können und dass es möglich ist, beliebig komplexe Geometrien zu modellieren. Da bei der stationären Monte-Carlo-Methode bereits Neutronenhistorien simuliert werden, ist vom Prinzip her die Erweiterung zur Berücksichtigung der Zeitabhängigkeit möglich. Generell müssen dazu die folgenden Konzepte eingeführt werden: Die Zeitpunkte, an denen Neutronen Reaktionen widerfahren, müssen aufgezeichnet werden. Weiterhin muss die Neutronenpopulation immer wieder skaliert werden, da eine zeitabhängige Monte Carlo Simulation über eine „Fixed Source“-Rechnung realisiert werden kann und die Neutronenpopulation bei einem Multiplikationsfaktor ungleich eins entweder zu klein oder zu groß wird. Des Weiteren muss die Emission der verzögerten Neutronen nun unter Berücksichtigung des Zerfalls der Mutterkerne modelliert werden.

Legrady und Hoogenboom haben Methoden zu zeitabhängigen Monte-Carlo-Neutronentransportrechnungen entwickelt, bei denen auch die verzögerten Neutronen modelliert wurden. Erste Simulationen wurden für eine monoenergetische, homogene Konfiguration im Jahr 2011 durchgeführt. Danach folgte die Implementierung der Methoden für die zeitabhängige Simulation in eine spezielle Version des Monte-Carlo-Codes durch Sjenitzer und Hoogenboom. Die Implementierung wurde zuerst an verschiedenen kinetischen Problemen getestet, zuletzt folgten dann dynamische Simulationen zur Abbildung eines Steuerstabauswurfs aus einem Mini-Kern durch die Kopplung des erweiterten TRIPOLI4-Codes mit einem Unterkanalcode zur Beschreibung der Thermohydraulik.

Zu den Erweiterungen des TRIPOLI4-Codes gehört, dass die Monte-Carlo-Simulation als eine „Fixed Source“-Rechnung durchgeführt wird und die Problemzeit in Zeitintervalle unterteilt ist. In diesen Zeitintervallen werden die interessierenden Größen detektiert und es sind Änderungen am Modell, wie das Verfahren eines Steuerstabs, möglich. Als Ausgangszustand für die „Fixed Source“-Rechnung wird vorher eine Kriticali-

tätsrechnung durchgeführt, anhand derer die stationäre Verteilung der Neutronen und Mutterkerne ermittelt wird.

Weiterhin wurden die Methoden für die Simulation der verzögerten Neutronen angepasst, da diese das Zeitverhalten des Systems während einer Transiente maßgeblich beeinflussen. Ihre Emission ist durch den Zerfall der Mutterkerne bestimmt und deren Lebensdauer liegt im Bereich von 10^{-2} bis 10^2 s. Das Auftreten von prompten Neutronen kann dagegen als Kette beschrieben werden, an deren Ende im Durchschnitt ein Mutterkern entsteht. Bei einer Lebensdauer der prompten Neutronen von 10^{-4} s, beträgt die mittlere Lebensdauer einer Kette von prompten Neutronen für eine kritische Konfiguration aus U-235 ca. 10^{-2} s. In einer Monte Carlo Simulation sind nun zwischen der Entstehung und des Zerfalls des Mutterkerns keine Neutronen im System vorhanden und es entsteht somit keine Leistung. In diesen Zeitintervallen ist daher die Varianz der Ergebnisgrößen deutlich erhöht. Bei einem realen System mittelt sich dieser Effekt aus, da die Anzahl der unabhängigen Neutronen und Mutterkerne deutlich größer ist. Um dieses Problem bei einer zeitabhängigen Monte-Carlo-Simulation zu lösen, werden die Mutterkerne künstlich gezwungen in jedem Zeitschritt zu zerfallen, damit in jedem Zeitschritt Ergebnisgrößen detektiert werden können und die Varianz gering bleibt. Damit die Monte-Carlo-Simulation nicht durch den gezwungenen Zerfall verfälscht wird, wird das statistische Gewicht der verzögerten Neutronen und der Mutterkerne angepasst. Durch den gezwungenen Zerfall der Mutterkerne und der damit eingeführten Reduzierung ihres statistischen Gewichts, steigt ihre Anzahl während der Simulation jedoch kontinuierlich an. Um ihre Population dennoch zu kontrollieren, wird anhand des statistischen Gewichts des entstehenden, verzögerten Neutrons das statistische Gewicht des Mutterkerns vermindert.

Weitere Details zu den Studien von Legrady, Sjenitzer und Hoogenboom sind unter anderem in den folgenden Veröffentlichungen zu finden:

- D. Legrady, J.E. Hoogenboom, Scouting the feasibility of Monte Carlo reactor dynamics simulations, International Conference on the Physics of Reactors, Interlaken, Switzerland, September 14–19, 2008
- B.L. Sjenitzer, J.E. Hoogenboom, Dynamic Monte Carlo Method for Nuclear Reactor Kinetics Calculations, Nuclear Science and Engineering, 175, 94–107 (2013)

- B.L. Sjenitzer, J.E. Hoogenboom, J.J. Escalante, V. Sanchez Espinoza, Coupling of dynamic Monte Carlo with thermal-hydraulic feedback, *Annals of Nuclear Energy*, 76, 27–39 (2015)

Betzler simuliert das zeitliche Verhalten einer nuklearen Anordnung unter Berücksichtigung der verzögerten Neutronen mit der Transition-Rate-Matrix-Methode. Die Transition Rate Matrix (TRM) ist der Operator des adjungierten alpha-Eigenwert-Problems und wird in seinen Arbeiten über die Monte-Carlo-Methode bestimmt. Die einzelnen Matrixelemente werden dabei während der Neutronentransportrechnung durch sog. Tallies für die Detektion bestimmter Reaktionsraten ermittelt. Im Anschluss an die Neutronentransportrechnung können aus der TRM die alpha-Eigenwerte und Eigenfunktionen berechnet werden. In früheren Studien war dies entweder nur mit Monte-Carlo-Methoden möglich, die eine Lösung durch Iteration zwischen dem k- und dem alpha-Eigenwert durchgeführt haben oder mit deterministischen Transportprogrammen. Bei diesen Verfahren konnten jedoch immer nur der fundamentale und nur wenig alpha-Eigenwerte von höherer Ordnung bestimmt werden. Anhand der Methode von Betzler können nun auch viele alpha-Eigenwerte und Eigenfunktionen höherer Ordnung bestimmt werden, mit denen anschließend über eine Entwicklung in den Eigenfunktionen die räumliche Variation des Neutronenflusses in kurzen Transienten simuliert werden kann. Die alpha-Eigenwerte und Eigenfunktionen lassen sich dabei in die zwei Kategorien - prompt und verzögert - einteilen. Die verzögerten Eigenwerte ähneln in ihrer Größe den Zerfallskonstanten der Mutterkerne. Im Vergleich dazu sind die prompten Eigenwerte größer, da Wechselwirkungen von Neutronen deutlich schneller ablaufen. Die Transition Rate Matrix Methode ist in einer speziellen Version des Monte-Carlo-Codes OpenMC implementiert worden und für die Simulation von unterkritischen und beinahe-kritischen Benchmark-Anordnungen angewendet worden.

Weitere Details zu den Studien von Betzler sind unter anderem in den folgenden Veröffentlichungen zu finden:

- B.R. Betzler, B.C. Kiedrowski, F.B. Brown, W.R. Martin, Calculating Infinite-Medium Alpha-Eigenvalue Spectra with a Transition Rate Matrix Method, M&C 2013, Sun Valley, Idaho, USA, May 5–9, 2013
- B.R. Betzler, Calculating Alpha Eigenvalues and Eigenfunctions with a Markov Transition Rate Matrix Monte Carlo Method, PhD Thesis, University of Michigan, 2014

Als konkreter Vorbereitungsschritt für die Entwicklung eines Hybridverfahrens zur Beschreibung transienter Vorgänge mit Hilfe der Monte-Carlo-Methode im geplanten Anschlussvorhaben RS1536 wurden gekoppelte Neutronentransport-/Thermohydraulik-Berechnungen für den Kern des Purdue-Benchmarks mit den Programmen QUABOX/CUBBOX und ATHLET durchgeführt. Mit Hilfe von Schnittstellenprogrammen, die im Rahmen der Arbeiten zur MCNP/ATHLET-Kopplung (siehe Abschnitt 4.1) entwickelt wurden, wurden die von ATHLET ermittelten thermodynamischen Parameter in ein Format überführt, mit dem für die spezifischen thermohydraulischen Zustände für bestimmte Zeitpunkte hochaufgelöste MCNP-Berechnungen mit der erweiterten MCNP-Version durchgeführt wurden. Damit können z. B. Stableistungsverteilungen bestimmt werden, die sonst nur mit Stableistungs-Rekonstruktionsverfahren aus der QUABOX/CUBBOX-Brennelement-Leistungsverteilung indirekt näherungsweise berechnet werden müssten.

4.3 Erstellung von nuklearen Daten

Mit dem nuklearen Datenverarbeitungssystem NJOY 99 wurden Wirkungsquerschnitte kontinuierlicher Energie bei unterschiedlichen Temperaturen erzeugt; die Temperaturgitterweite beträgt ein Grad Kelvin. Zur Automatisierung der Wirkungsquerschnittserzeugung wurde ein Skript erstellt, das die NJOY-Eingabedaten erzeugt, die NJOY-Rechenläufe ausführt und die entsprechenden Ausgabedaten, die für die MCNP5-Berechnungen benötigt werden, extrahiert. Zusätzlich wurde eine entsprechende Reihe von Wirkungsquerschnittsbibliotheken bei gleichen Temperaturen erzeugt, jedoch wurde dazu eine Interpolationsmethode verwendet. Die Interpolation wurde mit der Quadratwurzel der Temperatur durchgeführt. Schließlich wurden mehrere MCNP5-Berechnungen bei verschiedenen Temperaturen mit den unterschiedlich erzeugten Wirkungsquerschnittsbibliotheken (direkt mit NJOY erzeugt bzw. interpoliert) durchgeführt. Dazu wurde ein Brennstab-Zell-Modell des SWR Peach Bottom 2 (PB-2) verwendet.

In Tab. 4.3 werden die Ergebnisse für die PB-2-Stabzelle bei unterschiedlichen Temperaturen verglichen. Die Wirkungsquerschnittsvariation mit der Temperatur wurde dabei für U-238 durchgeführt. Dabei ergeben sich Unterschiede zwischen den Ergebnissen mit den beiden Berechnungsmethoden (Wirkungsquerschnitte direkt bei der jeweiligen Temperatur mit NJOY erzeugt bzw. interpoliert), die kleiner sind als zwei Standardabweichungen aus der statistischen Unsicherheit der Monte-Carlo-Rechnungen. Es gibt

also keine Hinweise, dass die Temperaturinterpolation nicht ausreichend genaue Ergebnisse liefern würde, siehe auch Abb. 4.3

Tab. 4.3 MCNP-Ergebnisse für eine Stabzelle des SWR Peach Bottom 2, mit direkt erzeugten und temperaturinterpolierten Daten

Temperatur (°C)	k-inf (direkt)	k-inf (interpoliert)	Differenz
301	1.36974+/-0.00033	1.37019+/-0.00033	0.00045
302	1.36939+/-0.00032	1.37001+/-0.00033	0.00062
303	1.36940+/-0.00033	1.36975+/-0.00033	0.00035

Tab. 4.4 MCNP-Ergebnisse für die VENUS-7-Anordnungen mit ENDF/B-VII- und JEFF-3.1.1-Daten: Multiplikationsfaktoren und effektiver Anteil verzögerter Neutronen

Configuration Nr.	MCNP5 ENDF/B-VII		MCNP5 JEFF-3.1.1	
	k-eff	β -eff (pcm)	k-eff	β -eff (pcm)
7a	0.99469	658	0.99449	676
7b	0.99623		0.99595	
7b subst. 3/1	0.99535		0.99514	
7b subst. 4/0	0.99743		0.99727	
7c	0.99578		0.99557	
7d	0.99593		0.99577	
7d subst. 2/2.7	0.99527		0.99515	
7/1a	0.99576	671	0.99558	684
7/1b	0.99699		0.99694	
7/1c	0.99637		0.99630	
7/3	0.99630	701	0.99621	721

Zur Validierung der erstellten JEFF-3.1.1-Bibliothek /SAN 09a/ im ACE-Format für MCNP wurden alle Anordnungen aus der Serie von VENUS7-Experimenten /ZWE 08/ nochmals mit erhöhter statistischer Genauigkeit sowohl auf herkömmliche Art wie auch im prompten Modus (d. h. ohne Berücksichtigung der verzögerten Neutronen) nachgerechnet und die Ergebnisse mit denen aus ENDF/B-VII-Daten /HER 11/ verglichen. Die Ergebnisse sind in Tab. 4.4 zusammengestellt.

Zur Ermittlung des effektiven verzögerten Neutronenanteils wurde die „prompt k ratio“-Methode /BRE 97/ verwendet, die in Abschnitt 5 näher beschrieben wird. Die Berechnungen wurden alle mit 10^9 Neutronenschicksalen durchgeführt; die resultierende statistische Unsicherheit ist 0.00002 im Multiplikationsfaktor und 3 pcm im effektiven verzögerten Neutronenanteil. Für alle Anordnungen aus der Serie von VENUS7-Experimenten ergibt sich ausgezeichnete Übereinstimmung im Multiplikationsfaktor zwischen den Ergebnissen mit JEFF-3.1.1- und ENDF/B-VII-Daten. Etwas größere Abweichungen zeigen sich bei der Ermittlung des Anteils von verzögerten Neutronen, der zwar auf die Kritikalität keinen Einfluss hat, aber für das dynamische Verhalten eines Systems mit Spaltmaterial eine wesentliche Rolle spielt. Dies legt die Durchführung von systematischen Unsicherheitsanalysen für β -eff bezüglich der nuklearen Daten nahe. Derartige Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen werden in Abschnitt 5 beschrieben.

Für die zukünftige Verarbeitung von nuklearen Datenbibliotheken wurde das Programmsystem NJOY 2012 /MAC 12/, das vom Los Alamos National Laboratory entwickelt wird, erprobt. Hierzu wurde das Programm mit dem Intel Fortran Compiler auf dem Linux System kompiliert und auf die aktuell verfügbare Version 2012.8 aktualisiert.

Zur Anwendung von Monte-Carlo Neutronentransportprogrammen, wie zum Beispiel MCNP und SERPENT, müssen zuerst nukleare Basisdaten im ENDF-Format zu kontinuierlichen Wirkungsquerschnittsdaten im ACE (A Compact ENDF) Format verarbeitet werden. Dazu wurde eine Eingabesequenz erstellt, welche nacheinander die einzelnen NJOY-Module MODER, RECONR, BROADR, HEATR, GASPR, THERMR, PURR, ACER und VIEWR mit den entsprechenden Parametern aufruft. Die Module haben folgende Funktionen:

- MODER: Überführung der Basisdaten vom Textformat in binäre Form.
- RECONR: Rekonstruktion der Daten kontinuierlicher Energie im Resonanzbereich aus den Resonanzparametern.

- BROADR: Erzeugung Doppler-verbreiterter Daten für bestimmte Temperaturen.
- HEATR: Erzeugung von Wirkungsquerschnitten kontinuierlicher Energie für Spaltwärmeerzeugung.
- GASPR: Erzeugung von Wirkungsquerschnitten kontinuierlicher Energie für Spaltgaserzeugung.
- THERMR: Erzeugung von Wirkungsquerschnitten kontinuierlicher Energie im thermischen Energiebereich.
- PURR: Erzeugung von Wahrscheinlichkeitstabellen im nicht-aufgelösten Resonanzbereich.
- ACER: Überführung der so entstandenen Daten in das ACE-Format.
- VIEWR: Erzeugung von graphischen Darstellungen der Wirkungsquerschnitte.

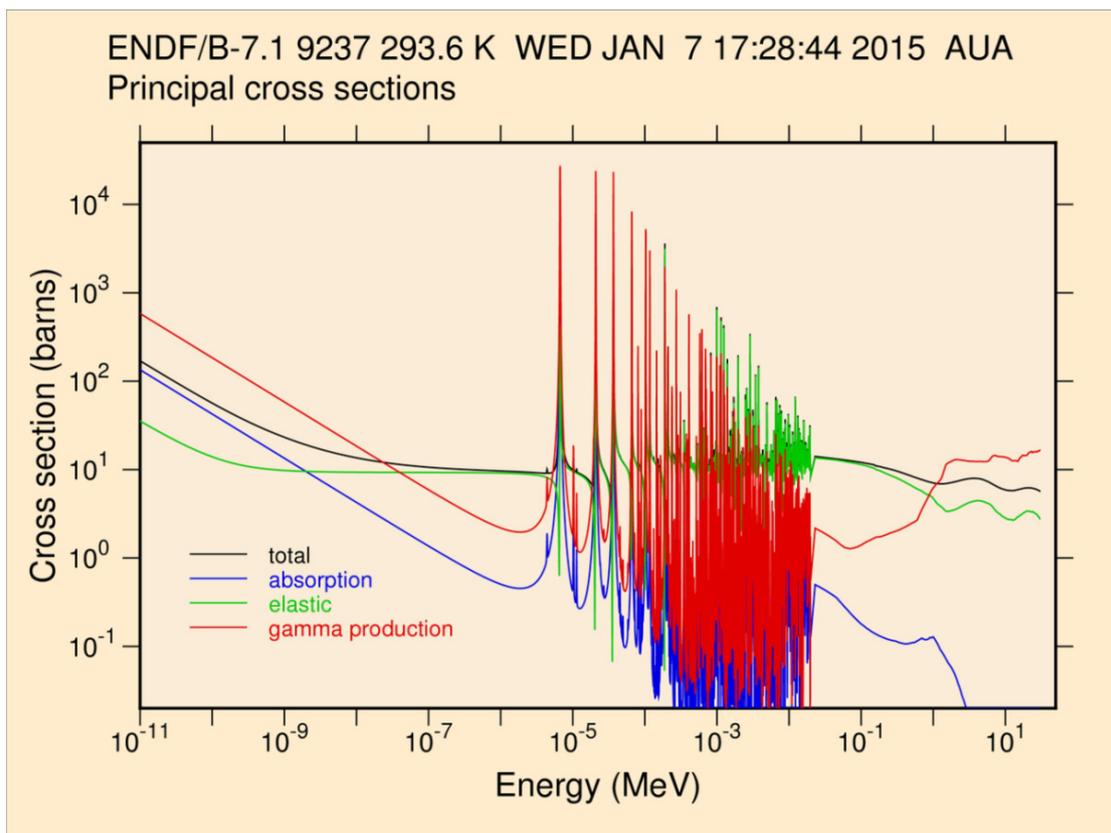


Abb. 4.47 ENDF/B-VII.1-Wirkungsquerschnitte als Funktion der Neutronenenergie für U-238

Für die Dopplerverbreiterung wurde zur Validierung der Datenbibliotheken an kritischen Experimenten eine Temperatur von 293.6 Kelvin (Raumtemperatur) gewählt; Zur Be-

schreibung von Reaktoren in Betriebszuständen wurden auch Daten bei höheren Temperaturen erzeugt. Anschließend wurden per Skript die Nuklide der Datenbibliotheken ENDF/B-VII.0, ENDF/B-VII.1 und JEFF-3.2 zu ACE-Datensätzen verarbeitet. Dabei sind für sämtliche Reaktionskanäle mit dem Modul VIEWR Graphen der kontinuierlichen Wirkungsquerschnittsdaten erzeugt worden. Diese Graphen wurden anschließend zur visuellen Kontrolle der Daten genutzt. Abb. 4.47 und Abb. 4.48 sind mit VIEWR erzeugte graphische Darstellungen aus den ENDF/B-VII.1-Daten prozessierter Wirkungsquerschnitte von Uran-238 und Plutonium-239.

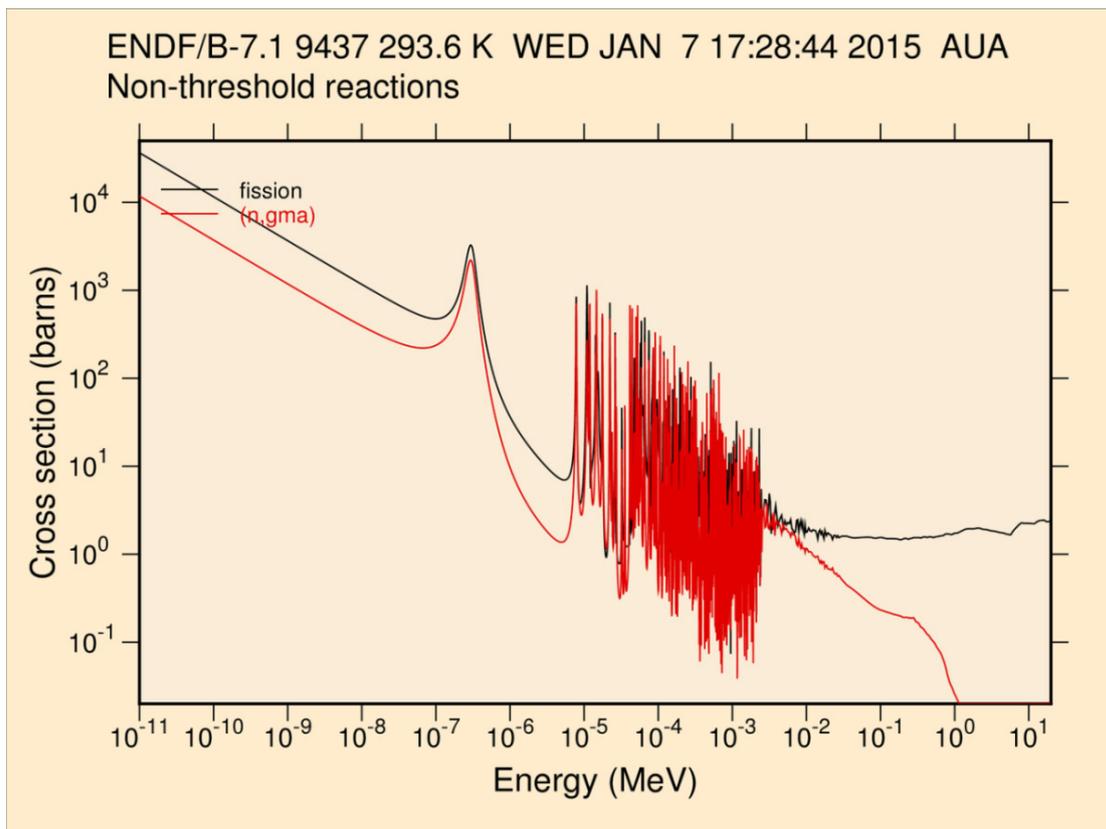


Abb. 4.48 ENDF/B-VII.1-Wirkungsquerschnitte als Funktion der Neutronenenergie für Pu-239

Zur weiteren Überprüfung der selbst erstellten Datenbibliotheken wurden Neutronentransportrechnungen von 41 kritischen Experimenten mit MCNP5 durchgeführt. Die MCNP5-Modelle der Experimente wurden anhand der Beschreibungen im International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments (ICSBEP) /NEA 13/ erstellt. Die Experimente wurden so ausgewählt, dass eine möglichst breite Vielfalt von kritischen Anordnungen abdecken. Sie bestehen aus Konfigurationen mit U-233, Plutonium oder leicht-, mittel- oder hochangereichertem U-235. Weiterhin sind die Konfigurationen entweder durch ein thermisches, epithermisches oder schnelles Energies-

pektrum charakterisiert und der Brennstoff liegt in Form einer Metallverbindung, einer Mischung oder einer Lösung vor. Für die Daten der thermischen Streuung wurde bei den ENDF/B Bibliotheken auf die bereits bei MCNP5 mitgelieferten thermischen Streudaten zurückgegriffen und im Fall von JEFF-3.2 auf die Daten der JEFF-3.1.2 Bibliothek. Für die Neutronentransportrechnungen wurde bei MCNP5 die Anzahl der Neutronenhistorien entsprechend groß gewählt ($2.5 \times 10^6 - 1.0 \times 10^7$), um eine vernachlässigbare statistische Unsicherheit im Vergleich zur experimentellen Unsicherheit zu erreichen. Zum weiteren Vergleich wurden die gleichen Neutronentransportrechnungen mit JEFF-3.2-Daten durchgeführt, die von der OECD/NEA bereits als ACE Daten zur Verfügung gestellt werden und mit NJOY 99 prozessiert wurden.

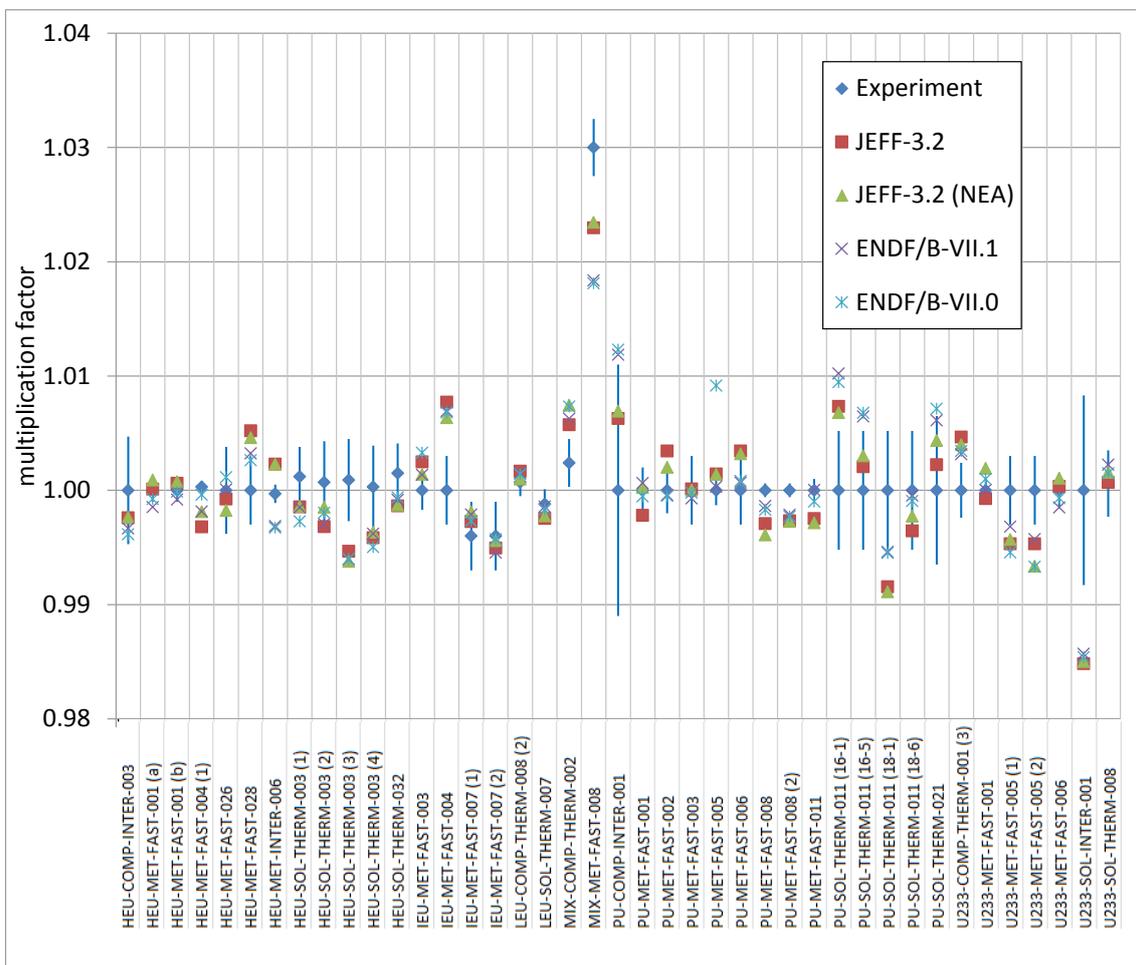


Abb. 4.49 Vergleich von experimentellen und berechneten Multiplikationsfaktoren von kritischen Experimenten

In Abb. 4.49 sind für die verschiedenen Experimente der experimentelle Multiplikationsfaktor und die entsprechende Standardabweichung angegeben. Die Bezeichnung der Experimente folgt der Nomenklatur des ICSBEP-Handbuchs: Der erste Teil bezeichnet

den Spaltstoff (HEU/IEU/LEU: hoch/mittel/niedrig angereichertes Uran, PU: Plutonium, MIX: Uran/Plutonium-Gemisch, U233: Uran-233), der zweite Teil die Art des Materials (MET: metallisch, SOL: Lösung, COMP: zusammengesetzt), und der dritte Teil charakterisiert das Spektrum (FAST: schnell, INTER: intermediär, THERM: thermisch); die Zahlen dienen zur Identifizierung der Einträge im Handbuch. Weiterhin enthält Abb. 4.49 die mit den verschiedenen Datenbibliotheken ermittelten Multiplikationsfaktoren. Im Fall der selbst erstellten JEFF-3.2-Daten liegen die Multiplikationsfaktoren von 16 Experimenten innerhalb einer Standardabweichung und bei der Benutzung der von der OECD/NEA bereitgestellten JEFF-3.2-Daten befinden sich die Multiplikationsfaktoren von 18 Experimenten innerhalb einer Standardabweichung. Unter Anwendung der ENDF/B-VII.0-liegen die Multiplikationsfaktoren von 25 Experimenten innerhalb einer Standardabweichung und bei ENDF/B-VII.1 sind es 28. Anhand der Ergebnisse der durchgeführten Neutronentransportrechnungen mit den verschiedenen Datenbibliotheken konnte gezeigt werden, dass die erste Erprobung von NJOY 2012 zufriedenstellend ist. Jedoch soll in Zukunft detaillierter untersucht werden, mit welchen Änderungen in der Verarbeitung der nuklearen Datenbibliotheken, zum Beispiel die Wahl der NJOY Module und ihre Parameter, geringere Differenzen zwischen den berechneten und experimentellen Multiplikationsfaktoren erreicht werden kann, insbesondere bei den Experimenten, bei denen die Multiplikationsfaktoren außerhalb von 3 Standardabweichungen liegen.

Um in Zukunft Kovarianzdaten eigenständig ins Multigruppenformat verarbeiten und für Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen nutzen zu können, wurde eine entsprechende Eingabesequenz für NJOY 2012 erstellt, die die entsprechenden Module für die Verarbeitung von Kovarianzen für die totale und prompte Spaltneutronenausbeute als auch für die Kovarianzen von Wirkungsquerschnittsdaten aufruft. Die Verarbeitung der Kovarianzen erfolgt dabei immer in ein gewähltes Energiegruppenformat. Für einen ersten Test wurde die 44-er Energiegruppenstruktur aus dem SCALE-Programmpaket verwendet. Per Skript wurden dann alle ENDF-formatierten Datensätze der Isotope der JEFF-3.2 Bibliothek auf ihre enthaltenen Kovarianzdaten überprüft und anhand der gewonnenen Informationen die NJOY-Eingabedatei jeweils für jedes Isotop automatisch angepasst und NJOY anschließend ausgeführt. Als Ergebnis lieferte NJOY für die gewählten Daten Kovarianzmatrizen und die Standardabweichungen in der gewählten Energiegruppenstruktur. Weiterhin erzeugen die Module COVR und VIEWR Darstellungen, in denen zum einen die Verläufe der Wirkungsquerschnittsdaten und ihre relative Standardabweichungen über die Energie aufgetragen sind und zum anderen die

zu den Wirkungsquerschnittsdaten entsprechenden Korrelationsmatrizen. Abb. 4.50 zeigt für Th-232 den Verlauf der totalen Spaltneutronenausbeute, die relative Standardabweichung und die Korrelationen der Energiegruppen anhand einer Korrelationsmatrix.

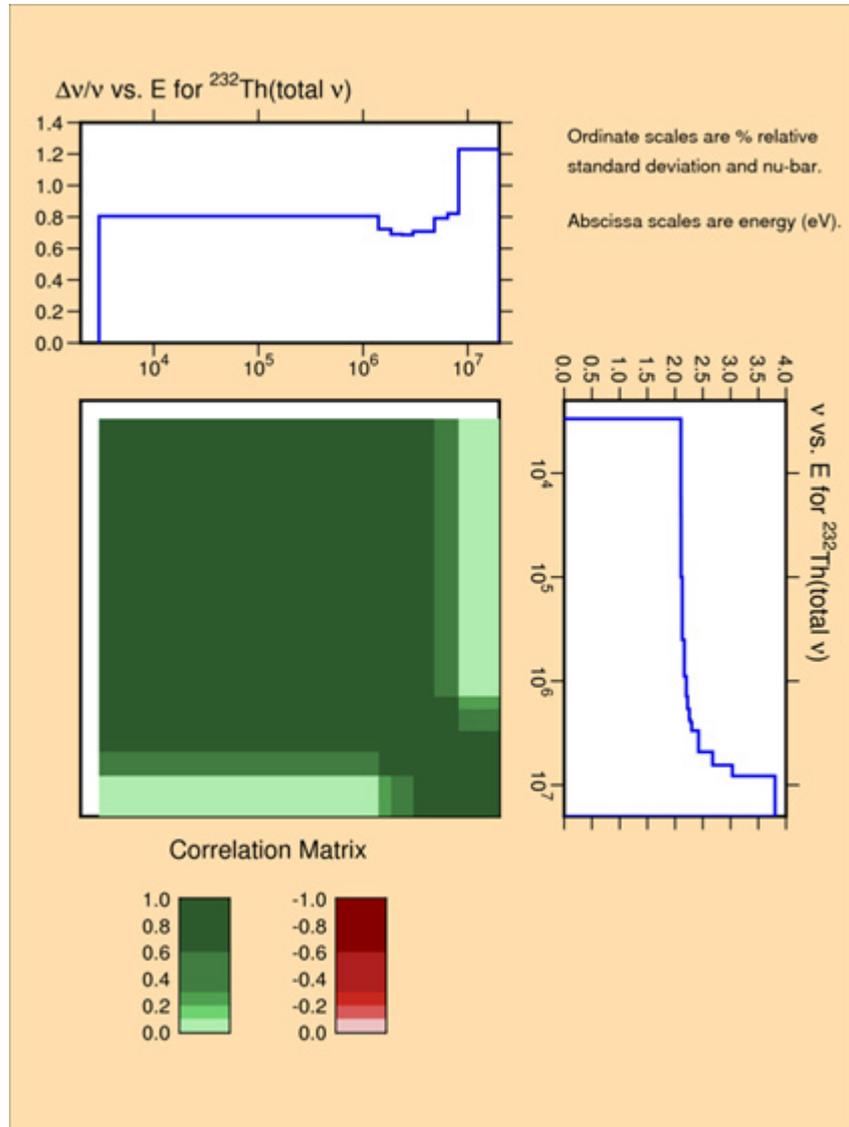


Abb. 4.50 Verlauf der totalen Spaltneutronenausbeute für Th-232 und deren relativer Standardabweichung, sowie die Korrelationsmatrix

5 AP3: Weiterentwicklung, Validierung und Anwendung von Methoden zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse

Der folgende Abschnitt beschreibt die durchgeführten Arbeiten am nuklearen Programmsystem der GRS bezüglich Methoden zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse. Dies sind Arbeiten zum UAM-LWR-Benchmark Phase 1, die Durchführung von Unsicherheitsanalysen für eine gekoppelte Kerntransientenberechnung, die Erstellung von Kovarianzdaten für die Multiplizität verzögerter Neutronen und deren Anwendung für Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen in Bezug auf den effektiven verzögerten Neutronenanteil in kritischen Anordnungen, die Entwicklung einer Methode zur höchst-effizienten Durchführung von Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse bei der Verwendung von Monte Carlo-Codes zur Simulation des Neutronentransports („schnelle GRS-Methode“), den Aufbau einer Benchmark-Suite zur Validierung der XSUSA-Methode, sowie die Erweiterung der XSUSA-Methode zur Anwendung für gasgekühlte Hochtemperaturreaktoren.

5.1 Ergebnisse zum UAM-LWR-Benchmark Phase 1

Die GRS beteiligt sich mit dem Programmsystem XSUSA zur Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalyse bezüglich nuklearer Daten am „BENCHMARK FOR UNCERTAINTY ANALYSIS IN MODELING (UAM) FOR DESIGN, OPERATION AND SAFETY ANALYSIS OF LWRs“ /NEA 07/. Die jetzt nahezu abgeschlossene Phase 1 beschreibt die einzelnen Schritte der „Stand-Alone“-Neutronentransportberechnungen, von der Spektralberechnung für Stabzellen bis zur stationären Kernsimulation ohne thermohydraulische Rückwirkungen. Die GRS hat zu allen Teilen des Benchmarks Rechenergebnisse eingereicht.

Für das UAM-LWR-Benchmark Phase I liegt damit ein nahezu vollständiger Satz von Ergebnissen aus Unsicherheitsanalysen mit XSUSA und den entsprechenden Neutronentransportprogrammen für die einzelnen Teile (NEWT für Exercise 1 - Zellberechnungen und Exercise 2 - Gitterberechnungen, KENO und QUABOX/CUBBOX für Exercise 3 - Kernberechnungen) vor: Zell- und Gitterberechnungen für die Reaktoren Three Mile Island 1, Peach Bottom 2, Kozloduy 6, zwei EPR-Kerne mit Uran- und MOX-Beladung, sowie die kritische Anordnung KRITZ 2, Kernberechnungen für Three Mile Island 1 und die EPR-Kerne.

Die Ergebnisse werden vom Benchmark-Team ausgewertet und mit den Lösungen anderer Benchmark-Teilnehmer verglichen. Diese Auswertung ist noch nicht abgeschlossen. Damit lassen sich auch noch keine endgültigen Schlüsse aus den Vergleichen der unterschiedlichen Ergebnisse ziehen. Jedoch lässt sich bereits feststellen, dass für die Unsicherheiten von Multiplikationsfaktoren, die auch mit Störungstheorie erster Ordnung, wie sie im Programm TSUNAMI aus dem SCALE-System /SCA 09/ implementiert ist, in allen Fällen sehr gute Übereinstimmung erzielt wird; dies wird auch immer wieder durch Vergleiche mit eigenen TSUNAMI-Berechnungen sichergestellt, siehe z. B. /ZWE 10a, ZWE 10b, ZWE 11/.

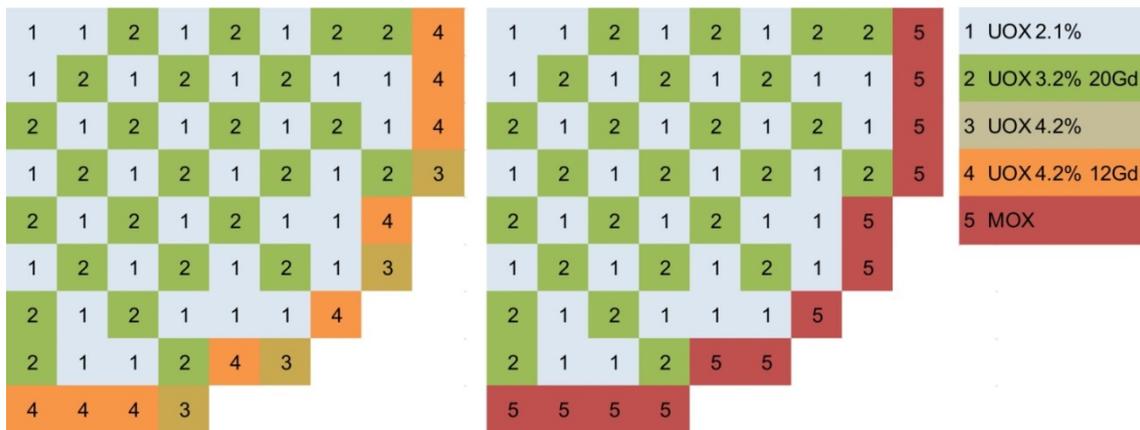


Abb. 5.1 Kernbelastungen der UOX- und UOX/MOX-Kerne der Generation III auf EPR-Basis

Tab. 5.1 Mittelwerte und Unsicherheiten (1σ) der Leistungsverteilungen der UOX- und UOX/MOX-Kerne der Generation III, berechnet mit XSUSA-QUABOX/CUBBOX

k_{eff}	Mittelwert	Unsicherheit
UOX	1.00292	0.00513
MOX/UOX	1.00063	0.00488

Die vollständigen Ergebnisse zum Benchmark liegen in einer Technischen Notiz vor, siehe Anhang A. Besonders interessant sind die Ergebnisse von Ganzkernberechnungen für zwei repräsentative Reaktorkerne der Generation III (ein Uran-Kern und ein Uran/MOX-Kern auf EPR-Basis), siehe auch Anhang B7. Zur Berechnung der Brennelement-Wirkungsquerschnitte wurde das SCALE-Programm NEWT verwendet, für die Ganzkern-Leistungsverteilungen QUABOX/CUBBOX. Die beiden Kernanordnungen sind in Abb. 5.1 dargestellt, die Ergebnisse für die Multiplikationsfaktoren und deren

Unsicherheiten in Tab. 5.1, für die Leistungsverteilungen in Abb. 5.2 und für die entsprechenden Unsicherheiten in den Brennelement-Leistungen in Abb. 5.3.

0.87	0.80	0.74	0.78	0.80	0.89	0.93	0.98	1.02	1.05	0.96	0.88	0.90	0.91	0.99	1.03	1.08	1.14
0.80	0.75	0.76	0.77	0.83	0.88	1.01	1.11	1.08	0.96	0.90	0.90	0.88	0.93	0.97	1.10	1.19	1.16
0.74	0.76	0.76	0.81	0.85	0.94	1.01	1.13	1.13	0.88	0.90	0.88	0.91	0.92	1.00	1.04	1.13	1.08
0.78	0.77	0.81	0.83	0.93	1.00	1.14	1.06	1.11	0.90	0.88	0.91	0.91	0.97	1.01	1.10	0.95	0.81
0.80	0.83	0.85	0.93	0.98	1.14	1.29	1.31		0.91	0.93	0.92	0.97	0.99	1.09	1.15	1.10	
0.89	0.88	0.94	1.00	1.14	1.14	1.23	1.28		0.99	0.97	1.00	1.01	1.09	1.04	1.02	0.85	
0.93	1.01	1.01	1.14	1.29	1.23	1.06			1.03	1.10	1.04	1.10	1.15	1.02	0.91		
0.98	1.11	1.13	1.06	1.31	1.28		UOX		1.08	1.19	1.13	0.95	1.10	0.85		MOX/UOX	
1.02	1.08	1.13	1.11						1.14	1.16	1.08	0.81					

Abb. 5.2 Mittelwerte der Leistungsverteilungen der UO₂- und UO₂/MOX-Kerne der Generation III, berechnet mit XSUSA-QUABOX/CUBBOX

5.3%	5.3%	5.0%	4.3%	3.2%	1.9%	0.7%	0.8%	1.8%	13%	13%	11%	9.5%	6.7%	3.3%	0.7%	5.2%	9.4%
5.3%	5.3%	4.9%	4.1%	3.0%	1.8%	0.3%	1.1%	2.0%	13%	12%	11%	9.1%	6.5%	3.1%	0.9%	5.2%	9.3%
5.0%	4.9%	4.4%	3.5%	2.5%	1.2%	0.1%	1.5%	2.5%	11%	11%	10%	8.2%	5.7%	2.6%	1%	5.1%	9.1%
4.2%	4.1%	3.5%	2.7%	1.6%	0.4%	1.0%	1.9%	2.8%	9.5%	9.1%	8.2%	6.6%	4.3%	1.5%	1.8%	5.3%	8.8%
3.2%	3.0%	2.5%	1.6%	0.6%	0.7%	2.0%	2.8%		6.7%	6.5%	5.7%	4.3%	2.5%	0.5%	3.0%	6.5%	
1.9%	1.8%	1.2%	0.4%	0.7%	1.5%	2.6%	3.4%		3.3%	3.1%	2.6%	1.5%	0.5%	1.9%	4.4%	7.1%	
0.7%	0.3%	0.1%	1.0%	2.0%	2.6%	2.7%			0.7%	0.9%	1%	1.8%	3.0%	4.4%	6.2%		
0.8%	1.1%	1.5%	1.9%	2.8%	3.4%		UOX		5.2%	5.2%	5.2%	5.3%	6.5%	7.1%		MOX	
1.8%	2.0%	2.5%	2.8%						9.4%	9.3%	9.1%	8.8%					

Abb. 5.3 Unsicherheiten der Leistungsverteilungen der UO₂- und UO₂/MOX-Kerne der Generation III, berechnet mit XSUSA-QUABOX/CUBBOX

Während die Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren in der Größenordnung von 0.5 % liegen, wie es bei LWR-Stabgitter-Systemen mit vorwiegend Uran-Brennstoff bei Verwendung der SCALE-Kovarianzdaten zu erwarten ist, weisen die Leistungsverteilungen erheblich größere Unsicherheiten auf. Bei dem Uran/MOX-Kern erreicht die Unsicherheit der radialen Leistungsverteilung am Kernrand nahezu 10 %, im Kernzentrum noch deutlich höhere Werte. Dies ist mit noch nicht veröffentlichten CEA-Ergebnissen, die auf dem UAM-7-Workshop vorgestellt wurden, qualitativ konsistent.

Ähnliche Beobachtungen für andere LWR-Kerne sind auch in Anhang B1 und B11 beschrieben.

Ebenfalls von großem Interesse ist die Nachrechnung von Anordnungen, für die Messergebnisse zur Verfügung stehen, und die Ermittlung der entsprechenden Unsicherheiten. Dazu sind im UAM-LWR-Benchmark die KRITZ-2-Experimente /NEA 14/ vorgesehen. Es zeigt sich, dass die Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren, die auf Unsicherheiten in den nuklearen Daten zurückzuführen sind, die Messunsicherheiten deutlich übersteigen. Bei den Stableistungen in einzelnen Brennstäben dominieren jedoch die Messunsicherheiten. Dies ist in Abb. 5.4 für eine der LEU-Anordnungen aus der KRITZ-2-Serie dargestellt. Die Punkte mit den Fehlerblaken stellen die Messungen und deren Unsicherheiten dar, die rote Linie mit den gestrichelten Kurven die entsprechenden Ergebnisse der Berechnungen mit deren Bandbreiten aufgrund der Unsicherheiten in den nuklearen Daten. Die Ergebnisse sind zusammen mit weiteren kritischen Anordnungen in Abschnitt 5.5 zusammengefasst.

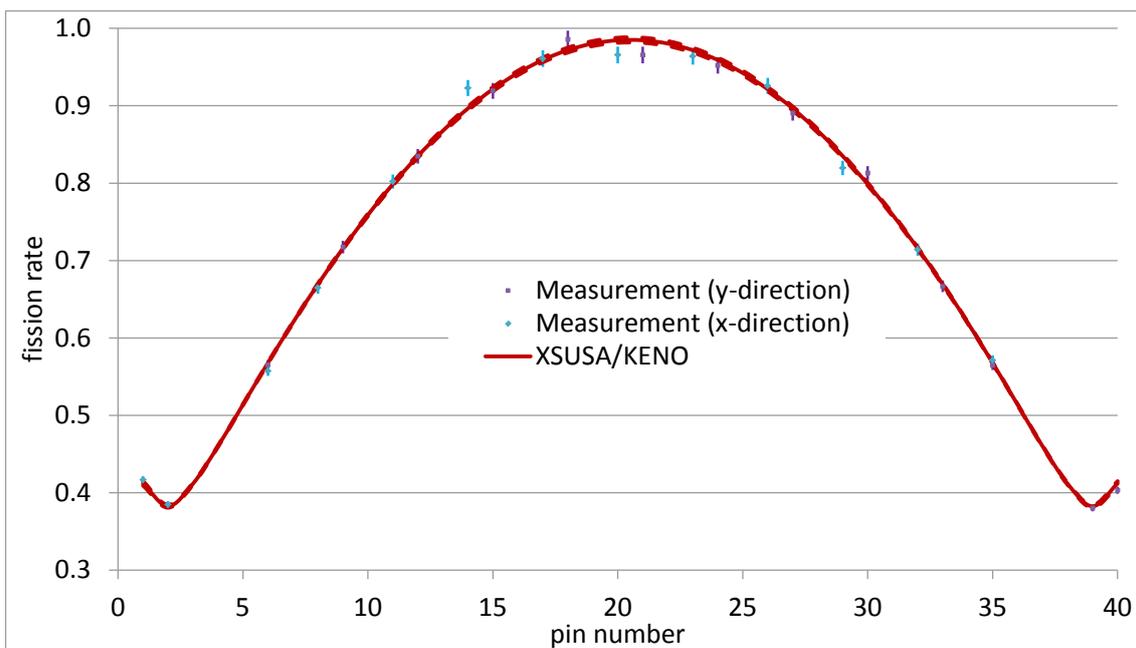


Abb. 5.4 Unsicherheiten der Stableistungen in der KRITZ-2:13-Anordnung

5.2 Unsicherheitsanalysen für eine Kerntransientenberechnung

Nach der derzeitigen Praxis sind zur Auslegung und Sicherheitsanalyse von Kernkraftwerken konservativen Annahmen und Modelle erforderlich, um die Erfüllung der Akzeptanzkriterien zu bestätigen. In den letzten Jahren ist ein neuer Trend zu beobach-

ten, nämlich der Übergang von konservativen Analysen zu Best-Estimate-Berechnungen in Kombination mit der Durchführung von Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen („Best Estimate Plus Uncertainty“-BEPU). Best-Estimate-Analysen für eine große Klasse von Transienten und Sicherheitsanalysen erfordern die Anwendung von gekoppelten Neutronentransport-/Thermohydraulik-Codes. Ein Fernziel des OECD-Benchmarks „Uncertainty Analysis in Modeling“ (UAM) ist es, die Konfidenzintervalle von Ergebnissen von Simulationen und Analysen des Reaktorverhaltens zu untersuchen. Eines der diskutierten Referenz-Szenarien für den UAM-Benchmark ist ein Reaktivitätsstörfall (RIA) in einem Druckwasserreaktor.

Für einen ersten Einsatz der XSUSA-Methode zur Abschätzung der Unsicherheiten in einer Kerntransientenberechnung (siehe auch Anhang B6) wurde das „Pressurized Water Reactor MOX/ UO_2 Core Transient Benchmark“ /KOZ 06/ herangezogen, das in der GRS als eines der Standard-Benchmarks zum Neutronentransport verwendet wird. Das Benchmark besteht aus mehreren Teilen stationärer und transienter Kernberechnungen; für die Ergebnisse stationärer Berechnungen wurden bereits Unsicherheitsanalysen mit XSUSA durchgeführt /ZWE 10a/.

Ein Überblick über die gesamte Berechnungskette ist in Abb. 5.5 gegeben. Wie üblich werden dazu in Spektralberechnungen für die einzelnen Stabzellen eines Brennelements und anschließenden Brennelementberechnungen mit einem zweidimensionalen Transportcode (hier NEWT) Wirkungsquerschnitte in zwei Energiegruppen sowie kinetische Parameter aller Brennelemente der Kernanordnung erzeugt. Dies geschieht auf einem grobmaschigen Gitter für die relevanten Parameter (Brennstofftemperatur, Kühlmitteldichte, Borkonzentration). Die Wirkungsquerschnitte und kinetischen Parameter bei den während der Kernsimulation benötigten Parameterwerten werden dann durch Interpolation zwischen den Stützstellen ermittelt. Die Transientenberechnungen werden mit den Wirkungsquerschnitten, die sich durch Variation der nuklearen Daten ergeben, immer wieder ausgeführt.

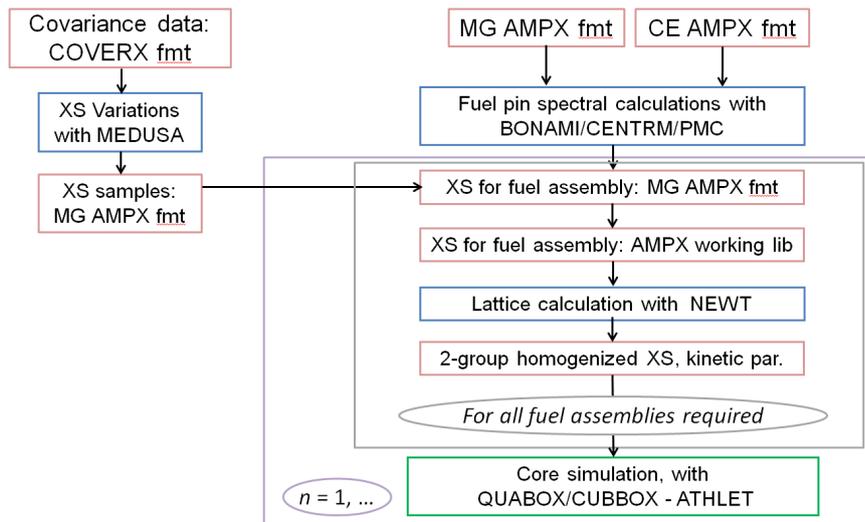


Abb. 5.5 Berechnungskette für Unsicherheitsanalysen mit XSUSA für Kerntransientenberechnungen

Abb. 5.6 zeigt die Unsicherheiten in der radialen Leistungsverteilung in der stationären Kernanordnung, ermittelt in einer Referenz-Monte-Carlo-Berechnung mit KENO, und Abb. 5.7 die entsprechenden Ergebnisse einer nodalen Diffusionsrechnung mit QUABOX/CUBBOX (QC) /KLE 11/, für die vorab wie oben beschrieben nodale Zwei-Gruppen-Daten erzeugt wurden. Die Übereinstimmung ist ausgezeichnet; Dies verdeutlicht, dass die Unsicherheiten mit der Sampling-basierten XSUSA-Methode korrekt auch durch eine mehrstufige Berechnungskette propagiert werden.

	1	2	3	4	5	6	7	8
A	4.75%	4.55%	3.13%	2.03%	0.71%	2.42%	3.11%	3.53%
B	4.55%	3.93%	2.76%	1.46%	0.69%	1.95%	3.69%	3.67%
C	3.13%	2.76%	2.32%	1.85%	0.49%	1.92%	2.77%	3.65%
D	2.03%	1.46%	1.85%	1.21%	0.94%	1.11%	2.88%	3.17%
E	0.71%	0.69%	0.49%	0.94%	0.64%	1.10%	1.67%	
F	2.42%	1.95%	1.92%	1.11%	1.10%	1.70%	1.53%	
G	3.11%	3.69%	2.77%	2.88%	1.67%	1.53%		
H	3.53%	3.67%	3.65%	3.17%				

Abb. 5.6 Unsicherheiten für die radiale Leistungsverteilung in einem DWR-Kern aus XSUSA/KENO

	1	2	3	4	5	6	7	8
A	4.79%	4.57%	3.20%	2.11%	0.89%	2.38%	3.10%	3.48%
B	4.57%	3.95%	2.83%	1.53%	0.79%	1.95%	3.71%	3.69%
C	3.20%	2.83%	2.43%	1.92%	0.51%	1.94%	2.84%	3.66%
D	2.11%	1.53%	1.92%	1.27%	0.94%	1.27%	3.07%	3.26%
E	0.89%	0.79%	0.51%	0.94%	0.67%	1.34%	1.81%	
F	2.38%	1.95%	1.94%	1.27%	1.34%	2.02%	1.60%	
G	3.10%	3.71%	2.84%	3.07%	1.81%	1.60%		
H	3.48%	3.69%	3.66%	3.26%				

Abb. 5.7 Unsicherheiten für die radiale Leistungsverteilung in einem DWR-Kern aus XSUSA/QUABOX/CUBBOX

Abb. 3.4 zeigt die Kernanordnung für die spezifizierte Transiente: alle Regelstäbe (CR-A, CR-B, CR-C, CR-D) sind vollständig eingefahren, alle Abschaltstäbe (CR-SA, CR-SB, CR-SC, CR-SD) sind ausgefahren, die Position des Brennelements, in dem der Steuerstabauswurf stattfindet, ist durch einen Kreis markiert. Es ist darauf hinzuweisen, dass die nicht dargestellten drei Viertelkerne dieselbe Brennelement- und Steuerstabanordnung besitzen, der Steuerstabauswurf aber auf das dargestellte Kernviertel beschränkt ist, so dass bei der Transientenberechnung keine Symmetrien ausgenutzt werden können.

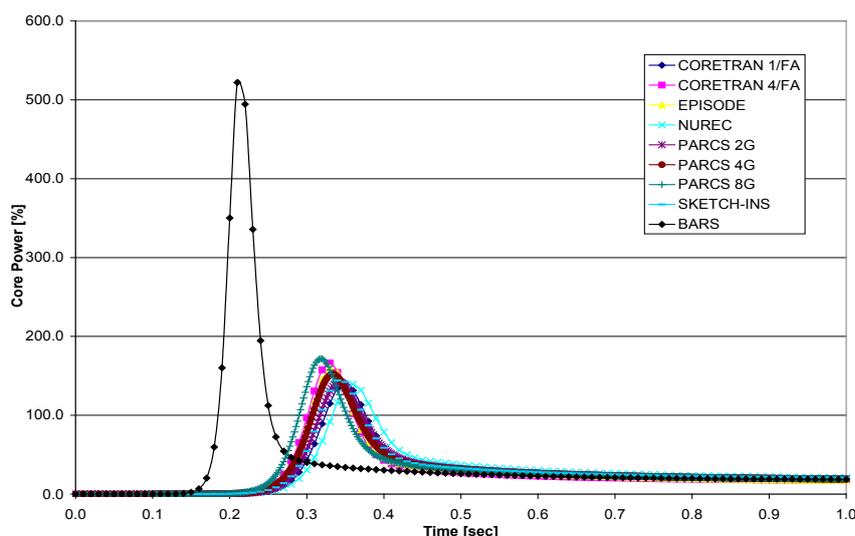


Abb. 5.8 Gesamtleistung bei einer Steuerstabauswurf-Transiente aus unterschiedlichen Rechenprogrammen

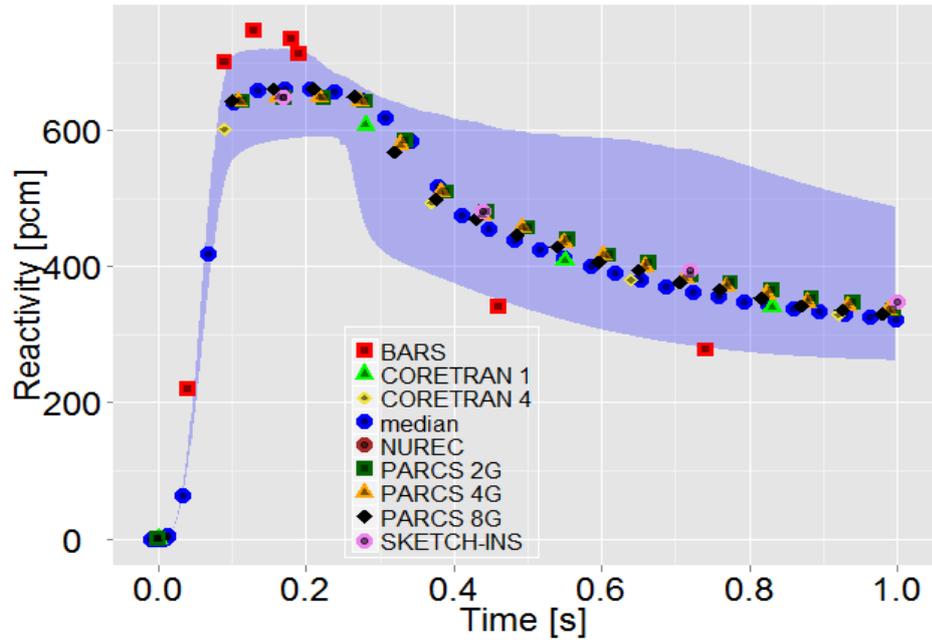


Abb. 5.9 Reaktivität und deren Unsicherheit für eine Steuerstabauswurf-Transiente

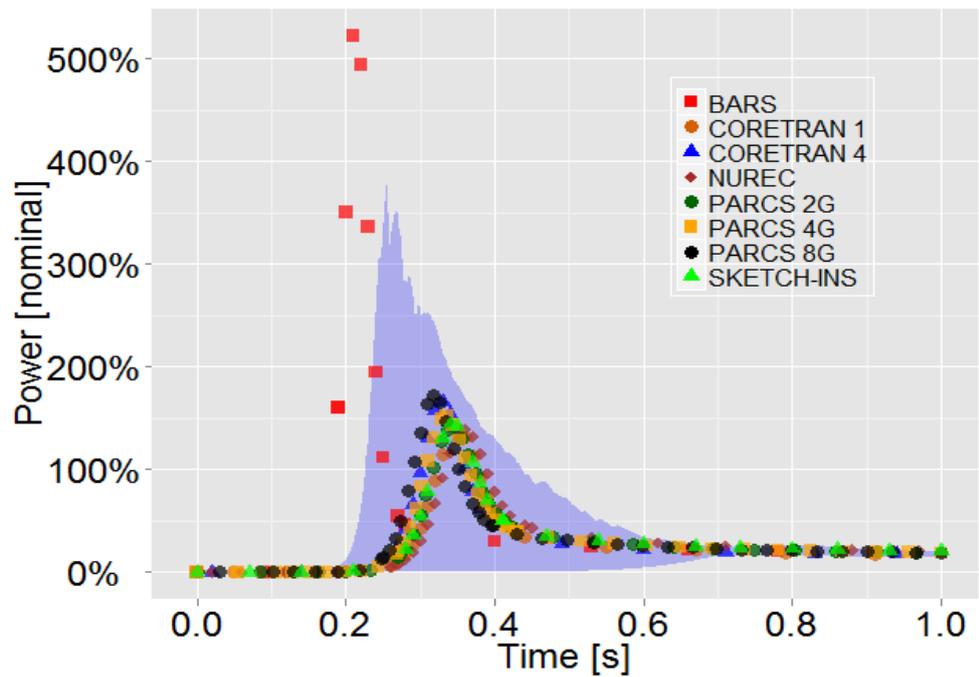


Abb. 5.10 Gesamtleistung und deren Unsicherheit für eine Steuerstabauswurf-Transiente

Abb. 5.9 und Abb. 5.10 zeigen die wesentlichen Ergebnisse der Unsicherheitsanalysen bzgl. nuklearer Daten mit XSUSA, im Vergleich mit den Ergebnissen der ursprünglichen Benchmark-Beiträge. Die blaue Fläche in Abb. 5.9 skizziert das Unsicherheitsband der durch die Transiente zugefügten Reaktivität. Am Maximum bei ca. 0.15 sec

ergibt sich ein relativ moderater Bereich von etwa 650 +/- 70 pcm. Der jeweilige Wert ist jedoch entscheidend dafür, ob das System prompt oder nur verzögert überkritisch wird. Dementsprechend deutlich ist die Unsicherheit in der Gesamtleistung im Verlauf der Transiente, Abb. 5.10: der Leistungsanstieg variiert zwischen einem praktisch vernachlässigbaren Wert und ca. 350 % der Nominal-Reaktorleistung.

Die oben beschriebenen Analysen wurden mit insgesamt 100 Variationen der nuklearen Daten durchgeführt. Dies ist zwar ausreichend, um die Unsicherheit zuverlässig zu ermitteln, für eine Sensitivitätsanalyse, d. h. zur Ermittlung der Hauptbeiträge zu dieser Unsicherheit, sind deutlich mehr Variationen nötig.

5.3 Kovarianzdaten für die Multiplizität verzögerter Neutronen

Der effektive verzögerte Neutronenanteil β -eff ist ein wesentlicher Parameter der Reaktorsicherheit; er beeinflusst sowohl die Ergebnisse von Berechnungen von Steuerstabreaktivitäten als auch Transientenanalysen, und spielt damit eine wichtige Rolle bei der Analyse von Reaktivitätsstörfällen. Die Genauigkeit von β -eff sollte daher genau ermittelt und bewertet werden. Das Interesse an der Berechnung kinetischer Parameter und der Fortpflanzung der entsprechenden Unsicherheiten wurde innerhalb des Projekts „Uncertainty Analysis in Modelling“ (UAM) der OECD/NEA betont.

Für die Berechnung des effektiven verzögerten Neutronenanteils spielt die Multiplizität der verzögerten Neutronen ν_{delayed} eine wesentliche Rolle. Deshalb ist zu erwarten, dass für die Unsicherheit von β -eff auch die Unsicherheit in der Multiplizität der verzögerten Neutronen einen wesentlichen Beitrag liefert. Das Problem hierbei ist, dass die normalerweise mit XSUSA verwendeten Kovarianzdaten aus dem Programmsystem SCALE 6 keine Daten für ν_{delayed} enthalten. Eine Überprüfung der wichtigsten evaluierten nuklearen Datenbibliotheken JEFF-3.1, ENDF/B-VII und JENDL-4.0 hat ergeben, dass nur JENDL-4.0 einen umfangreichen Satz von Unsicherheitsdaten für ν_{delayed} für die wichtigsten Aktiniden beinhaltet.

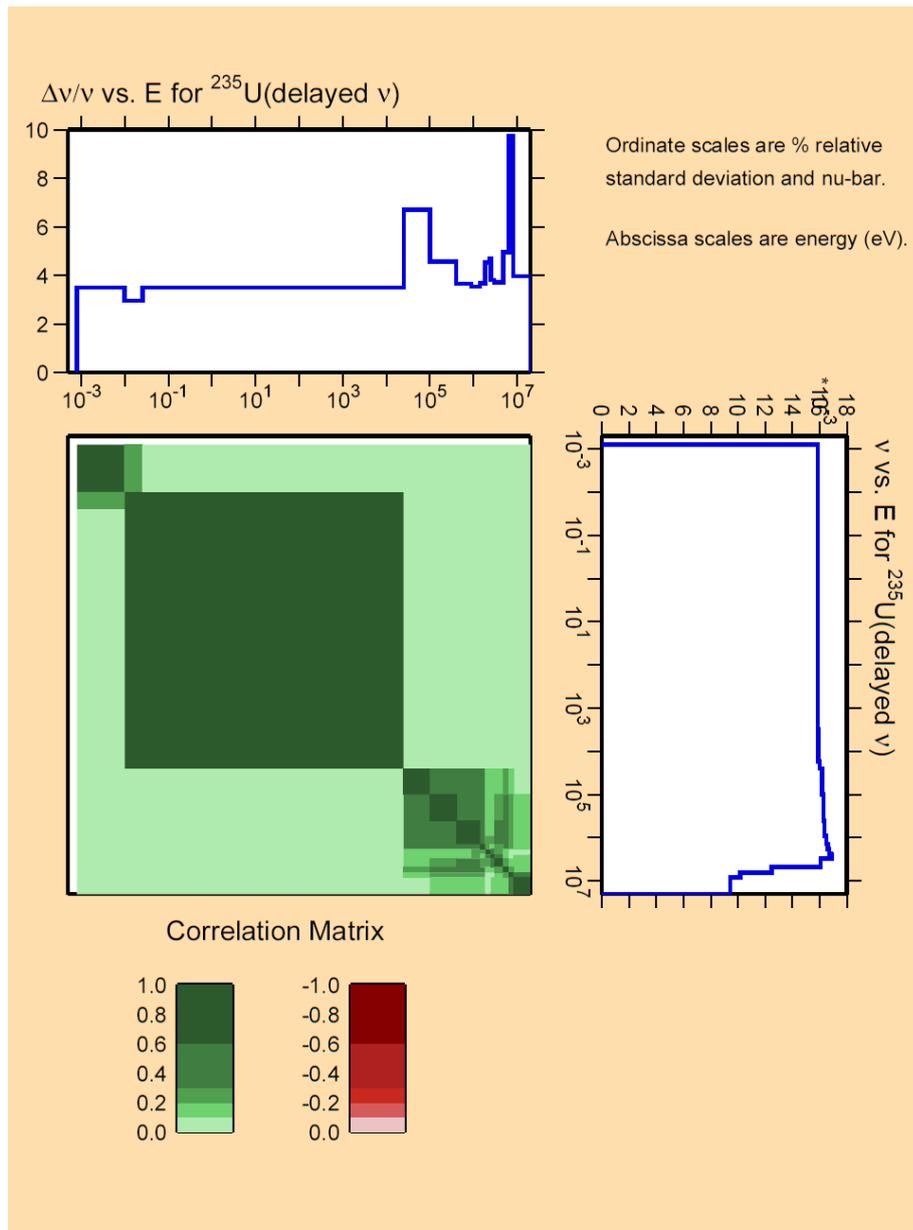


Abb. 5.11 Unsicherheit und Korrelationsmatrix der Multiplizität der verzögerten Neutronen von U-235 aus den JENDL-4.0-Daten

Zur Erzeugung von Kovarianzmatrizen für die Multiplizität der verzögerten Neutronen in der 44-Gruppen-Struktur, in der auch die SCALE-Kovarianzmatrizen vorliegen, wurde das Programmsystem NJOY 99 verwendet. Die derart erstellten Daten liegen schließlich im BOXER-Format vor, das mit den Programmen aus dem SCALE-System, und auch mit XSUSA, nicht direkt nutzbar ist. Deshalb war es nötig ein Hilfsmodul zu erstellen, mit dem die Kovarianzmatrizen im mit SCALE und XSUSA kompatiblen COVERX-Format erzeugt werden. Zur Überprüfung der Berechnungskette wurden die Daten

ebenfalls mit dem Code PUFF-IV /WIA 06/, der Stand-Alone-Version eines entsprechenden Moduls des AMPX-Systems /GRE 01/, prozessiert.

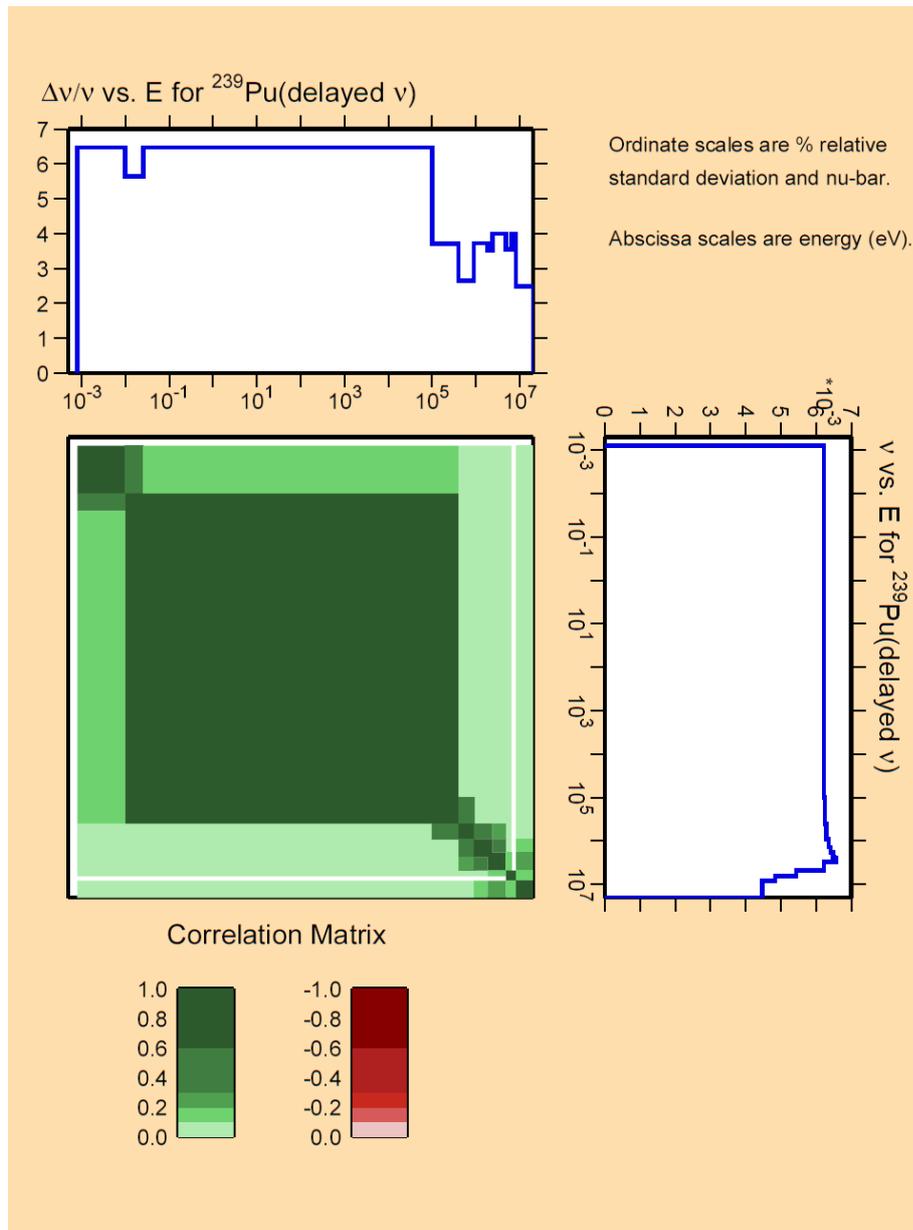


Abb. 5.12 Unsicherheit und Korrelationsmatrix der Multiplizität der verzögerten Neutronen von Pu-239 aus den JENDL-4.0-Daten

Abb. 5.11 und Abb. 5.12 zeigen die prozessierten Daten für U-235 und Pu-239 in der üblichen Darstellung mit Nominalwerten (rechts), relativen Standardabweichungen (oben) und Korrelationsmatrix zwischen den Daten bei den verschiedenen Energiegruppen. Für die relativen Standardabweichungen sind Werte von 4 % – 10 % zu beobachten; diese legen nahe, dass der Einfluss auf die Unsicherheiten im effektiven verzögerten Neutronenanteil nicht zu vernachlässigen ist.

Für die entsprechenden Unsicherheitsanalysen müssen zunächst für die betrachteten Anordnungen die Nominalwerte des effektiven verzögerten Neutronenanteils β -eff bestimmt werden. Dazu eignet sich am besten die „prompt k ratio“-Methode /BRE 97/. Dabei müssen für dieselbe Anordnung zwei Kritikalitätsrechnungen durchgeführt werden, die eine auf gewöhnliche Art unter Berücksichtigung aller Spaltneutronen, die andere nur mit prompten Spaltneutronen, d. h. unter Vernachlässigung der verzögerten Neutronen. Der effektive verzögerte Neutronenanteil ergibt sich dann in sehr guter Näherung als β -eff = $1 - k_p/k$; dabei ist k der herkömmliche, k_p der prompte Multiplikationsfaktor. Leider bieten normalerweise Spektral- und Multigruppen-Transportcodes keine Möglichkeit, programmintern nur prompte Neutronen zu berücksichtigen. Deshalb war es erforderlich, SCALE-Module zur Handhabung von Daten im AMPX-Format derart zu erweitern, dass es möglich ist, die totalen Neutronenmultiplizitäten durch die der verzögerten Neutronen zu ersetzen.

Zur Anwendung wurden drei kritische Anordnungen herangezogen: JEZEBEL (eine Kugel aus Pu-239), TOPSY (eine Kugel aus U-235 mit einem Reflektor aus Natururan) und POPSY (eine Kugel aus Pu-239 mit einem Reflektor aus Natururan). Die Beschreibungen der Anordnungen sind im „International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments“ /NEA 11/ zu finden. Die jeweiligen Unsicherheiten sind in Tab. 5.2, Tab. 5.3 und Tab. 5.4 angegeben. Dabei bedeuten (n,n') inelastische Streuung, (n,f) Spaltung, (n,γ) Einfang, sowie ν_{del} und ν_{pmt} die Multiplizitäten verzögerter und prompter Neutronen. Zum Vergleich wurden störungstheoretische Ergebnisse herangezogen. Da TSUNAMI in der gegenwärtigen Version verzögerte Neutronen nicht explizit berücksichtigen kann, wurde dazu, in einer Zusammenarbeit mit dem Institut Jožef Stefan in Ljubljana, das Programm SUSD3D /KOD 11/ verwendet, siehe auch Anhang B12. Dabei wurden mit XSUSA „One-at-a-time“-Variationen durchgeführt; es wurden also nicht nur alle Reaktionen gleichzeitig variiert, sondern auch individuell.

Wie erwartet liefert die Unsicherheit in der Multiplizität der verzögerten Neutronen in allen Fällen einen wesentlichen Beitrag zur Ergebnisunsicherheit. Überraschenderweise liefert für POPSY die Unsicherheit in der inelastischen Streuung am Reflektormaterial U-238 den Hauptbeitrag. Allgemein sind die Ergebnisse von SUSD3D und XSUSA in guter Übereinstimmung. Ein deutlicherer Unterschied zeigt sich bei der inelastischen Streuung an U-238 für die POPSY-Anordnung. Hier ist die Unsicherheit im Wirkungsquerschnitt erheblich (bis zu 30 %), was zur Folge hat, dass störungstheoretische Ansätze ihren Gültigkeitsbereich verlassen.

Tab. 5.2 Unsicherheiten (1σ) im effektiven verzögerten Neutronenanteil bei der kritischen Anordnung JEZEBEL

	(n,n')	(n,f)	ν_{del}	ν_{pmt}
SUSD3D	0.25	0.26	2.13	1.76
XSUSA	0.26		2.37	1.80

Tab. 5.3 Unsicherheiten (1σ) im effektiven verzögerten Neutronenanteil bei der kritischen Anordnung TOPSY

		(n,n')	(n,f)	(n, γ)	ν_{del}	ν_{pmt}
SUSD3D	U-235	0.09	0.08	1.01	2.41	0.14
	U-238	0.88	0.02	0.02	0.51	0.16
XSUSA	U-235			1.02	2.40	
	U-238	1.17			0.58	

Tab. 5.4 Unsicherheiten (1σ) im effektiven verzögerten Neutronenanteil bei der kritischen Anordnung POPY

		(n,n')	(n,f)	(n, γ)	ν_{del}	ν_{pmt}
SUSD3D	U-238	3.24	0.18	0.065	1.21	0.11
	Pu-239	0.65	0.28	0.151	1.36	1.40
XSUSA	U-238	4.18			1.39	
	Pu-239	0.72			1.38	1.40

5.4 Die „schnelle GRS-Methode“

Sampling-basierte Methoden zur Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalyse werden sowohl mit deterministischen als auch mit Monte-Carlo-Transportprogrammen angewendet. Wenn ein Monte-Carlo-Programm zur direkten Simulation des Neutronentransport verwendet wird, wird dabei eine zusätzliche Unsicherheitsquelle eingeführt, die sich aus der endlichen Anzahl von Neutronenschicksalen ergibt, die im Verlauf der Monte-Carlo-Simulation ausgewertet werden („aleatorische Unsicherheit“). Diese kommt noch zu der Unsicherheit hinzu, die durch eine unvollständige Kenntnis von Eingabeparamen-

tern, hier der nuklearen Daten, zustande kommt („epistemische Unsicherheit“). Deshalb wählt man, falls ein Monte-Carlo-Code zur Lösung des Transportproblems eingesetzt wird, normalerweise für jede Rechnung mit variierten nuklearen Daten die Anzahl der Neutronenschicksale so groß, dass die aleatorische Sampling-Unsicherheit vernachlässigbar klein wird, und die beobachtete Sampling-Unsicherheit der Ergebnisse praktisch ausschließlich auf die epistemische Unsicherheit durch die Variation der nuklearen Daten zurückgeführt werden kann. Das bedeutet, dass für jeden Rechenlauf mit variierten nuklearen Daten dieselbe hohe Anzahl von Neutronenschicksalen verwendet wird wie für die Referenzrechnung. Die Rechenzeiten werden offenbar bei dieser Vorgehensweise enorm hoch, wenn man es mit vielen variierten Datensätzen zu tun hat.

Im Folgenden wird eine Methode vorgestellt, mit der es möglich ist, die Rechenzeit deutlich zu verringern. Dabei wird gezeigt, dass es in vielen Anwendungsfällen nicht nötig ist, die gesamte Serie von Rechenläufen mit hoher statistischer Genauigkeit durchzuführen. In der Tat ist es möglich, zuverlässige Ergebnisse für die epistemische Unsicherheit mit einer wesentlich reduzierten Anzahl von Neutronenschicksalen in jedem Rechenlauf zu erhalten; dabei kann unter günstigen Umständen die Gesamtzahl von Neutronenschicksalen für die komplette Serie aller Rechenläufe von derselben Größenordnung sein wie für einen einzigen Rechenlauf mit hoher Genauigkeit, d. h. mit geringer aleatorischer Unsicherheit.

Dabei wird folgendermaßen vorgegangen:

Es werden zwei Serien von Rechenläufen durchgeführt.

1. Serie: gewöhnliches zweidimensionales aleatorisches/epistemisches verschachteltes Sampling:

- Äußere (epistemische) Schleife: Sample von der Größe N_e bzgl. der nuklearen Daten.
- Innere (aleatorische) Schleife: Monte-Carlo-Transportsimulation mit reduzierter Sample-Größe N_a .

2. Serie: zusätzliches zweidimensionales aleatorisches/epistemisches verschachteltes Sampling:

- Äußere (epistemische) Schleife: Sample von der Größe N_e bzgl. der nuklearen Daten, identisch zum Sample der ersten Serie.
- Innere (aleatorische) Schleife: neue Monte-Carlo-Transportsimulation mit reduzierter Sample-Größe N_a mit Variationen, die statistisch unabhängig von denen der ersten Serie sind.

Schließlich wird die Sample-Kovarianz dieses zweidimensionalen Samples gebildet. Diese stellt näherungsweise die Varianz der Verteilung dar, die dem epistemischen Anteil der Sampling-Unsicherheit entspricht, nachdem der Einfluss des aleatorischen Anteils eliminiert wurde.

Die Genauigkeit der Ergebnisse mit dieser Methode hängt invers vom relativen Beitrag der aleatorischen Sampling-Unsicherheit ab. Die Genauigkeit kann also nötigenfalls erhöht werden, indem die aleatorische Sample-Größe, also die Anzahl der Neutronenschicksale je Rechenlauf erhöht wird. Andererseits wird bei gleichbleibender aleatorischer Sample-Größe die Genauigkeit auch durch eine Erhöhung der epistemischen Sample-Größe, also durch mehr Rechenläufe, zunehmen.

Die Anwendung der Methode wird anhand des EG-UACSA-Benchmarks Phase II /NEU 10/ demonstriert. Dabei handelt es sich um eine zweidimensionale Darstellung eines unendlichen Gitters von Brennelementen, die ein Brennelementlager simuliert. Die Brennelemente bestehen aus 17×17 Stabzellen, auf 25 Positionen sind Instrumentierungs- oder Steuerstabführungsrohre. Der Brennstoff ist frisches UO_2 mit einer U-235-Anreicherung von 4 %. Unterkritikalität wird durch Borstahl erreicht, der die Brennstabgitter umschließt.

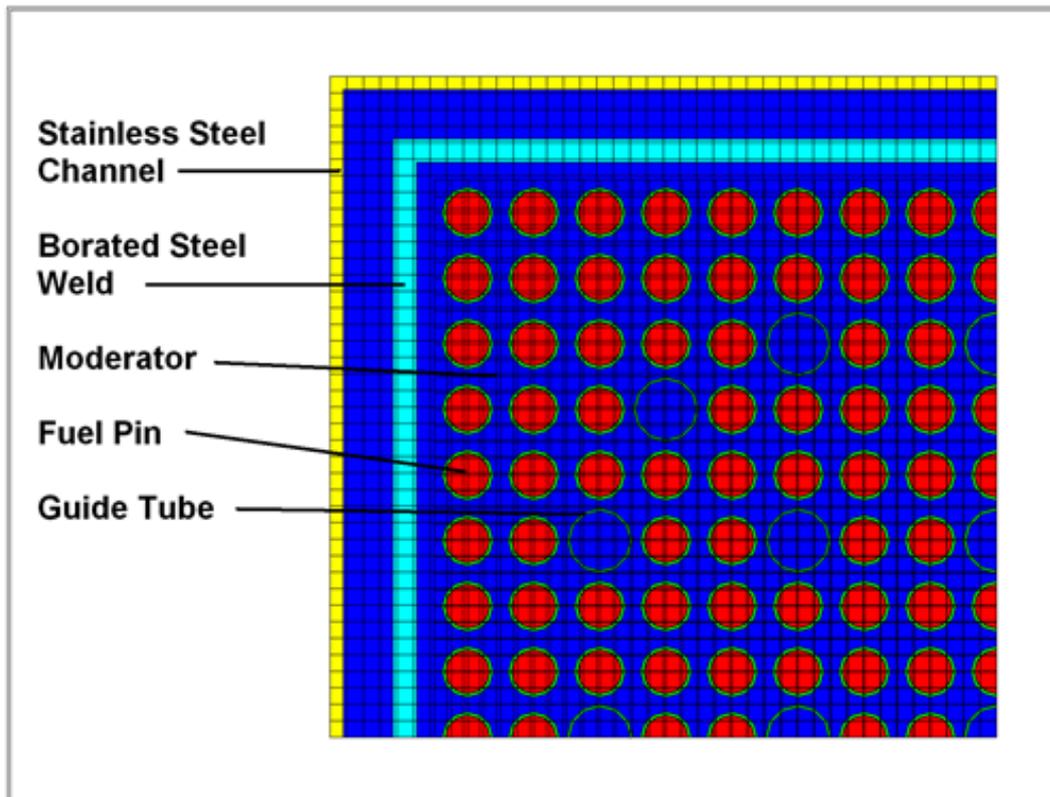


Abb. 5.13 NEWT-Modell für die Anordnung des EG-UACSA-Benchmarks Phase II

Tab. 5.5 Multiplikationsfaktoren des EG-UACSA-Benchmarks Phase II und deren relative Unsicherheiten (1σ) aus XSUSA mit einer Sample-Größe von 1000

	k	$\Delta k/k$ (%)	CPU-Zeit pro Lauf
NEWT (Ref.)	0.99212		
KENO (Ref.)	0.99293		
XSUSA/NEWT	0.99226	0.424	25 min
XSUSA/KENO (1000 lange Läufe)	0.99308	0.418	25 min
XSUSA/KENO (1000 kurze Läufe)	0.99306	0.544	5 sec
XSUSA/KENO (2 x 1000 kurze Läufe)	0.99305	0.411	5 sec (x2)

Die deterministischen Berechnungen wurden mit dem 2-d Transportcode NEWT durchgeführt, die Monte-Carlo-Berechnungen mit KENO. Abb. 5.13 stellt das NEWT-Modell dar, die Modellierung mit KENO ist entsprechend. Aus Symmetriegründen reicht

es aus, ein Viertel der Anordnung zu beschreiben. Die Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen mit XSUSA wurden mit einer Sample-Größe von 1000 durchgeführt.

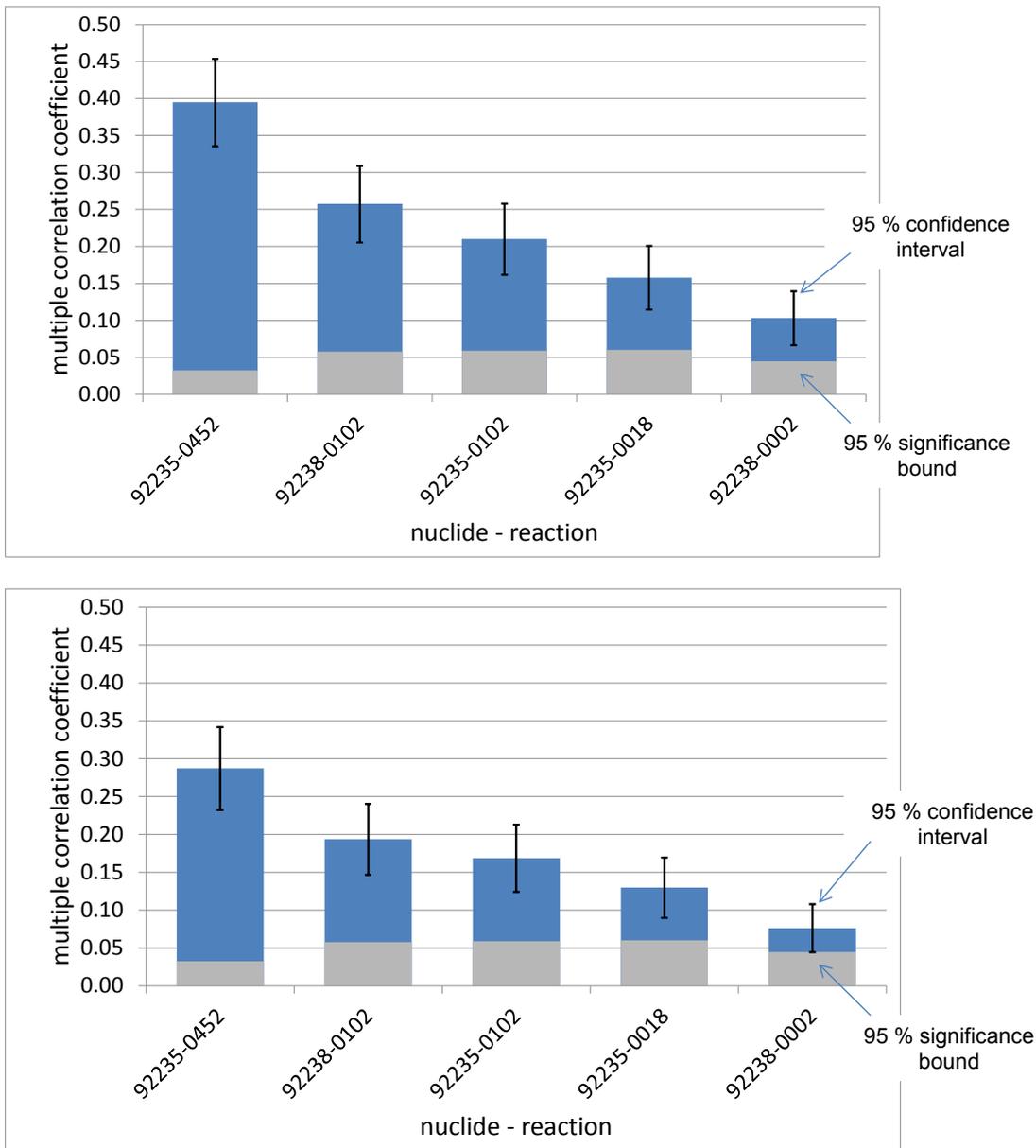


Abb. 5.14 Sensitivitätsergebnisse für das EG-UACSA-Benchmark Phase II. Quadrierte multiple Korrelationskoeffizienten (R^2) aus 1000 langen KENO-Rechenläufen (oben) und nach der „schnellen GRS-Methode“ (unten)

Die wesentlichen Ergebnisse für die Unsicherheit des Multiplikationsfaktors sind in Tab. 5.5 zusammengefasst. Sowohl die deterministische Berechnung mit NEWT als auch die Monte-Carlo-Berechnung mit KENO benötigen pro Rechenlauf ca. 25 Minuten; die KENO-Rechnung wurde mit 50×10^6 Neutronenschicksalen durchgeführt. Bei 1000 Rechenläufen entspricht dies einer Gesamtrechenzeit von ca. 17 Tagen. Bei der

Monte-Carlo-Rechnung kann diese Rechenzeit gemäß der oben beschriebenen Methode drastisch reduziert werden. Verwendet man nur noch 50×10^3 Neutronenschicksale, reduziert sich die Rechenzeit pro Rechenlauf auf ca. 5 Sekunden. (Die Rechenzeit skaliert nicht mit der Anzahl der Neutronenschicksale, da für sehr geringe Anzahlen die Rechenzeit durch Lese- und Schreiboperationen etc. deutlich mitbeeinflusst wird.) Die resultierende Unsicherheit liegt deutlich über der tatsächlichen epistemischen Unsicherheit, da nun die aleatorische Unsicherheit einen deutlichen Beitrag zur Gesamtunsicherheit leistet. Führt man nun eine weitere Serie von kurzen Rechenläufen durch, erhält man durch Kovarianzbildung eine ausgezeichnete Abschätzung für die epistemische Unsicherheit. Die gesamte Rechenzeit hat sich dadurch auf ca. 3 Stunden reduziert, also gegenüber der ursprünglichen Rechenzeit von 17 Tagen um mehr als einen Faktor 100.

Mit der „schnellen GRS-Methode“ ist es nicht nur möglich, bei Unsicherheitsanalysen mit Monte-Carlo-Transportrechnungen die Unsicherheit mit einem geringen Aufwand an CPU-Zeit sehr gut abzuschätzen, siehe auch Anhang B5 und B9. und B13. Ähnliches gilt für die Sensitivitätsanalyse, d. h. die Bestimmung der Hauptbeiträge zur Ergebnisunsicherheit. In einer Zusammenarbeit mit dem NRG, Petten wurde eine ähnliche Methode unter der Bezeichnung „fast TMC“ in das Programmsystem TMC („Total Monte Carlo“)/KON 08/ integriert, siehe auch Anhang B13.

In Abb. 5.14 sind als Sensitivitätsindikatoren die „quadrierten multiplen Korrelationskoeffizienten (R^2)“ für das EG-UACSA-Benchmark Phase II dargestellt. Dabei sind nur Beiträge berücksichtigt, die tatsächlich statistisch signifikant sind, d. h. die oberhalb der 95 %-Signifikanzgrenze liegen. Ein Vergleich der Ergebnisse aus einer herkömmlichen Rechenserie mit 1000 langen KENO-Rechenläufen und gemäß der „schnellen GRS-Methode“, d. h. mit zwei Serien mit je 1000 kurzen Rechenläufen liefert dieselbe Reihenfolge der Beiträge. Lediglich die quantitativen Werte der Sensitivitätsindikatoren sind bei der „schnellen GRS-Methode“ niedriger, was auf den Anteil der aleatorischen Unsicherheit zurückzuführen ist.

Die „schnelle GRS-Methode“ lässt sich nicht nur zur Ermittlung der Unsicherheit des Multiplikationsfaktors anwenden, sondern auch für beliebige lokale Größen. Allerdings ist dabei zu bedenken, dass die aleatorischen Unsicherheiten umso größer werden, je kleiner der Bereich ist, für den eine Ergebnisgröße ausgewertet wird. Handelt es sich dabei um Größen mit kleiner epistemischer Unsicherheit, kann die „schnelle GRS-Methode“ an ihre Grenzen stoßen. Im Folgenden wird die Anwendung der Methode für

eine Serie von lokalen Größen, nämlich die Brennelement-Leistungen für den Kern des Pressurized Water Reactor MOX/ UO_2 Core Transient Benchmark („Purdue-Benchmark“). Die Unsicherheiten aus einer herkömmlichen Serie von Monte-Carlo-Rechnungen wurden schon früher in Abb. 5.6 dargestellt. Zusätzlich wurden diese mit der „schnellen GRS-Methode“ bestimmt, wobei die ursprünglichen 10^9 Neutronenschicksale pro Rechenlauf auf 2×10^6 reduziert wurden; Damit dauert eine einzelne Rechnung nur noch ca. zwei Minuten, im Vergleich zu ca. 12 Stunden für die herkömmliche Serie. Die Ergebnisse sind in Abb. 5.15 dargestellt. Dabei werden die Ergebnisse für die Leistungen der Brennelemente einer horizontalen Reihe verglichen. Die acht Werte sind mit p1, ..., p8 bezeichnet; zusätzlich ist die Unsicherheit für den Multiplikationsfaktor in zehnfacher Vergrößerung angegeben. Die Werte nach der herkömmlichen Methode, die mit „long runs“ bezeichnet sind, haben praktisch vernachlässigbare aleatorische Unsicherheiten und stellen ausschließlich die Unsicherheiten begl. der nuklearen Daten dar. Bei drastischer Verminderung der Anzahl von Neutronenschicksalen kommt für die Brennelement-Leistungen ein deutlicher Anteil an aleatorischer Unsicherheit hinzu („short runs“), der sich wiederum durch die Anwendung der „schnellen GRS-Methode“ nahezu eliminieren lässt.

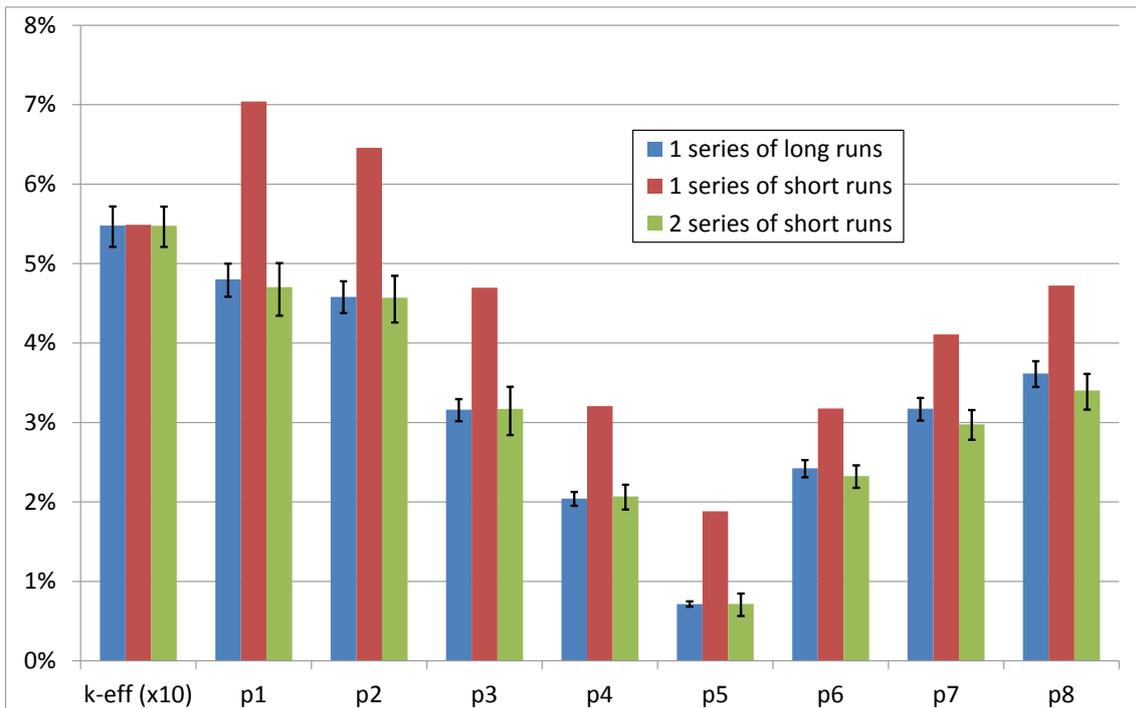


Abb. 5.15 Unsicherheiten für den Multiplikationsfaktor und die Brennelement-Leistungen des Purdue-Benchmarks mit verschiedenen Methoden

Mit der drastischen Reduktion der Rechenzeit ist ein gewisser Verlust an Genauigkeit in den Standardabweichungen verbunden. Zur Quantifizierung der statistischen Genauigkeit für die Ergebnisse der „schnellen GRS-Methode“ durch Bestimmung von Konfidenzintervallen wurde das Programm COLICO (COntidence LImits for COvariance and correlation) erstellt. Dabei kommt die sog. Bootstrapmethode zur Anwendung. Bei dieser werden weitere Stichproben auf der Basis der bereits vorhandenen Daten generiert und in geeigneter Weise statistisch ausgewertet. Verteilungsannahmen sind nicht erforderlich. Dieses Programm wurde auf die Ergebnisgrößen des Purdue-Benchmarks angewandt. In Abb. 5.15 sind die 95 %-Konfidenzintervalle als Fehlerbalken eingetragen. Ohne aleatorische Unsicherheiten sind diese Intervalle ca. $[-4.5 \%, +4.5 \%]$ relativ zur Ergebnisgröße. Bei der Anwendung der „schnellen GRS-Methode“ vergrößern sie sich in Abhängigkeit vom Anteil der aleatorischen Unsicherheit. Für das Brennelement mit dem größten Beitrag der aleatorischen zur Gesamtunsicherheit (p_5 in Abb. 5.15) ergibt sich ein 95 %-Konfidenzintervall von ca. $[-21 \%, +18 \%]$.

5.5 Die XSUSA-Benchmark-Suite

Die Validierung der XSUSA-Methode für Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen bzgl. nuklearer Daten wurde durch die Erstellung einer Benchmark-Suite von Anordnungen, in denen zusätzlich zu den Multiplikationsfaktoren Messdaten für andere relevante Größen (Reaktivitätswerte, Stableistungsverteilungen) verfügbar sind, erweitert. Diese Benchmark-Suite besteht aus den kritischen Experimenten KRITZ-2, VENUS-PVS-1 und -2, VENUS-PRP-7 und -9, und ANS-B&W. Vergleiche wurden mit dem Code TSUNAMI aus dem SCALE-System durchgeführt. Die Benchmarks sind im Einzelnen:

- (1) die meisten Anordnungen der VENUS-PRP-7-Serie, die im Rahmen des “Plutonium Recycle Program” bei SCK/CEN in Mol, Belgien, mit niedrig angereichertem Uran ($\sim 4.0 \%$ U-235) and MOX (hauptsächlich $\sim 3.0 \%$ U-235, $\sim 1.0 \%$ Pu-fiss) durchgeführt wurden;
- (2) die meisten Anordnungen der VENUS-PRP-9-Serie aus demselben Messprogramm mit demselben Brennstoff wie für VENUS-7;
- (3) die Experimente VENUS-PVS-1 und -2, die später mit niedrig angereichertem Uran ($\sim 4.0 \%$ und 3.3% U-235) und MOX ($\sim 2.0 \%$ U-235, $\sim 2.7 \%$ Pu-fiss) durchgeführt wurden;

- (4) alle frei verfügbaren Anordnungen der KRITZ-2-Serie, die bei Studsvik, Schweden, mit niedrig angereicherterem Uran (2:1 und 2:13, 1.86 % U-235) und MOX (2:19, ~1.4 % Pu-fiss) durchgeführt wurden;
- (5) zwei Beladungen aus einer Serie von Experimenten mit niedrig angereicherterem Uran (~2.5 % U-235), die im Forschungszentrum von Babcock and Wilcox (B&W) in Lynchburg, USA, durchgeführt wurden.

Die B&W-Serie ist als LEU-COMP-THERM-008 im ICSBEP-Handbuch /NEA 13/ dokumentiert, die KRITZ-2-Experimente als KRITZ-LWR-RESR-001, KRITZ-LWR-RESR-002 und KRITZ-LWR-RESR-003, die VENUS-7- und VENUS-9-Serien als VENUS-PWR-EXP-004 und VENUS-PWR-EXP-005], und das VENUS-1-Experiment als Entwurf VENUS-PWR-EXP-001 im IRPhEP-Handbuch /NEA 14/. VENUS-2 ist noch nicht in diesen Handbüchern verfügbar, aber ist in einem Bericht zu einem entsprechenden OECD/NEA-Benchmark dokumentiert /NEA 03/.

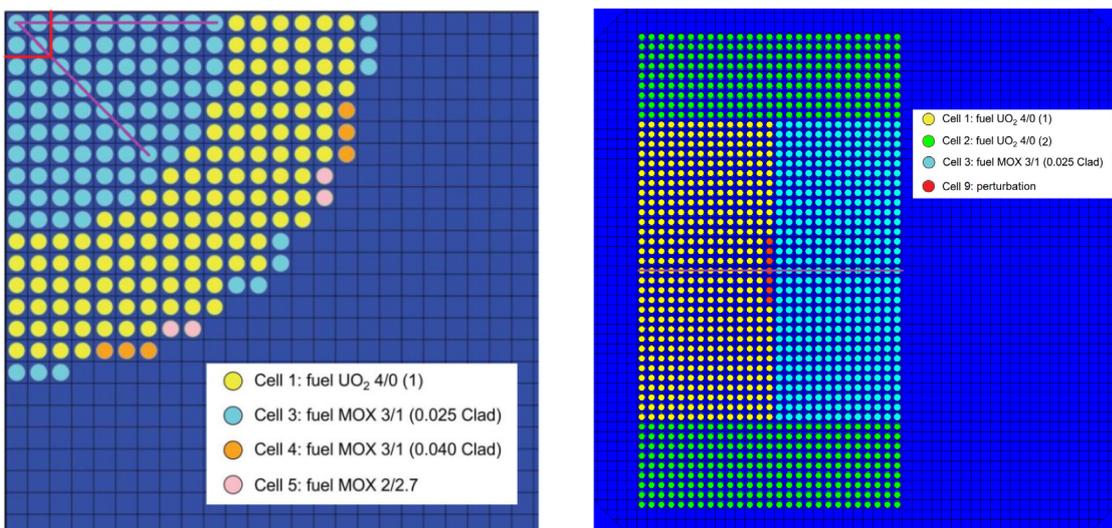


Abb. 5.16 Kern des VENUS-PRP-7-Benchmarks (links, 1/4-Kern-Darstellung) und des VENUS-PRP-9-Benchmarks (rechts)

Der VENUS-7b Kern ist schematisch in Abb. 5.16(links) dargestellt. In dieser Konfiguration wurden Brennstoffsubstitutionsmessungen durchgeführt, d. h. in einer Zone von 4x4 Brennstäben im Zentrum des Kerns wurden die regulären MOX-Brennstäbe durch UO₂-Brennstäbe oder MOX-Brennstäbe mit einer anderen Hüllrohrdicke ersetzt (Details finden sich in Anhang B18). In einer leicht veränderten Konfiguration, Venus-7/1b, wurden stabweise Spaltraten in zwei Reihen von Brennstäben in der MOX-Zone des Kerns gemessen. Die Zone für die Brennstabsubstitution (rotes Feld) und die Stabreihen mit den gemessenen Spaltraten (violette Linien) sind in Abb. 5.16 (links) skizziert.

In den VENUS-9-Experimenten mit im Wesentlichen identischem UO_2 - und MOX-Brennstoff wie in VENUS-7 wurden Stableistungente entlang einer Traverse durch den Kern gemessen, der aus rechteckigen UO_2 - und MOX-Zonen besteht. Die Konfigurationen 9/1 besitzen jeweils eine Heterogenität aus einer Reihe von mehreren Stäben zwischen den Brennstoffzonen. In Abb. 5.16 (rechts) ist die Konfiguration 9/1 mit sieben B_4C -Stäben als Heterogenität dargestellt.

Im VENUS-PVS-2-Kern, der in Abb. 5.17 dargestellt ist, ist die gemessene Spaltratenverteilung für ein Achtel des Kerns vorhanden. Die Messungen wurden nicht an allen Brennstäben direkt durchgeführt; Spaltraten für Brennstäbe, die nicht gemessen wurden, wurden durch Interpolation der benachbarten Werte erhalten. Dies führt zu größeren Unsicherheiten für die interpolierten Spaltraten im Vergleich zu den direkt gemessenen. Der kreuzförmige Kern besteht aus zwei UO_2 -Zonen unterschiedlicher Anreicherung und einer äußeren MOX-Zone. In VENUS-PVS-1 ist der MOX-Brennstoff durch UO_2 ersetzt (4 % U-235); Darüber hinaus gibt es einen kleinen Unterschied in den Positionen der Pyrex-Absorberstäbe im zentralen Teil des Kerns.

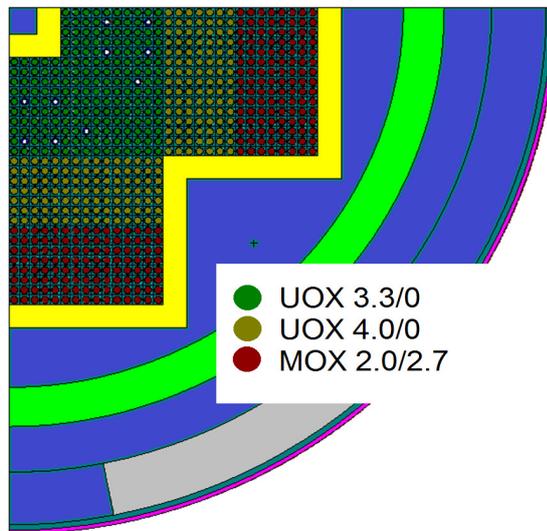


Abb. 5.17 Kern des VENUS-PVS-2-Benchmarks ($\frac{1}{4}$ -Kern-Darstellung)

Die KRITZ-2-Kerne sind regelmäßige Gitter aus identischen UO_2 - oder MOX-Brennstäben ohne Heterogenität in boriiertem Wasser; wegen der Einfachheit der horizontalen Anordnung wird auf graphische Darstellungen verzichtet. Spaltratenmessungen wurden in zwei Stabreihen, eine in y-Richtung, die andere in x-Richtung durch die Kernmitte durchgeführt.

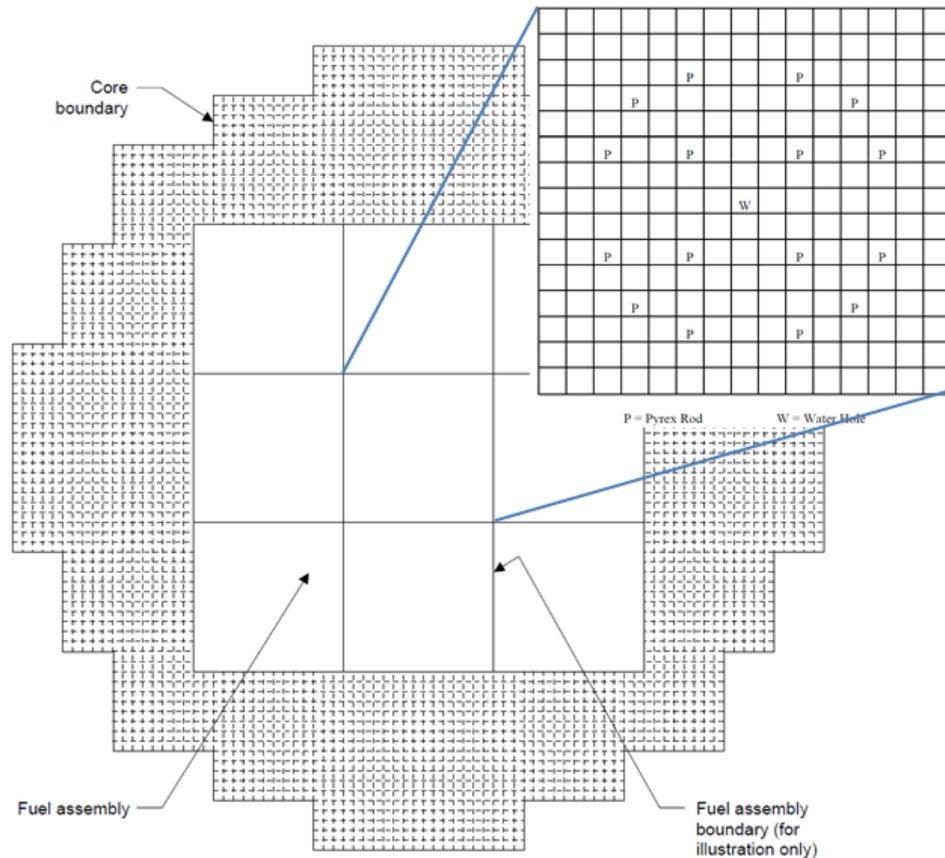


Abb. 5.18 Kern des B&W-Benchmarks (Beladung 8 mit Pyrex-Absorberstäben)

Abb. 5.18 zeigt den Aufbau des B&W-Benchmark-Kerns. Hier befinden sich 3x3 identische Brennelemente (in der Abbildung Beladung 8 mit Pyrex-Absorberstäben) in einer Treiberzone mit identischen Brennstäben Pins. Die Spaltratenverteilung wurde nur in dem zentralen Brennelement gemessen. In einer anderen Konfiguration (bezeichnet als Beladung 2), für die Unsicherheitsanalysen durchgeführt wurden, sind die Pyrex-Stäbe durch Wasserlöcher ersetzt. Darüber hinaus unterscheiden sich die verschiedenen Konfigurationen der B&W-Benchmarks durch die Borkonzentration im Moderator.

In allen Fällen wurde als Neutronentransportcode zur Simulation der Anordnungen KENO-Va aus SCALE-6.1 mit den Standardmodulen zur Resonanzselbstabschirmung, BONAMI und CENTRM, eingesetzt. KENO-Va wurde einerseits im Rahmen von TSUNAMI-3D verwendet, um die Unsicherheiten mittels Störungstheorie erster Ordnung zu bestimmen, andererseits im Rahmen von XSUSA zur Bestimmung der entsprechenden Größen aus zufällig variierten nuklearen Daten. Für alle Berechnungen wurde eine Wirkungsquerschnittsbibliothek auf der Basis von ENDF/B-VII mit 238 Energiegruppen verwendet, zusammen mit einer 44-Gruppen-Kovarianzdaten-Bibliothek, beide aus dem SCALE-6.1-System. Die Monte-Carlo-Rechnungen wurden

mit jeweils 200 Millionen aktive Neutronenschicksalen durchgeführt. Jede XSUSA-Serie bestand aus 1000 Rechenläufen. In Tab. 5.6 sind die Ergebnisse für die integralen Werte angegeben, für Erwartungswerte sowie deren Unsicherheiten. Die experimentellen Unsicherheiten enthalten die Messfehler sowie Unsicherheiten in den technologischen Parametern wie geometrische Größen oder Materialzusammensetzungen. Zu VENUS-PVS-1 sind keine experimentellen Informationen über den Multiplikationsfaktor verfügbar. Zu VENUS-PRP-9 wurde die experimentelle Unsicherheit bzgl. aller technologischen Parameter nicht im Bericht VENUS-PWR-EXP-005 ausgewertet; da die Komponenten nahezu identisch mit denen in VENUS-PRP-7 sind, wurden die Unsicherheiten aus der zugehörigen Evaluierung VENUS-PWR-EXP-004 übernommen. Die Unsicherheiten bzgl. der nuklearen Daten mit TSUNAMI-3D und XSUSA sind in sehr guter Übereinstimmung. Bei fast allen Anordnungen (VENUS-PRP-7, VENUS-PRP-9, KRITZ-2, B&W) werden die experimentellen Werte der Multiplikationsfaktoren durch die Berechnungen deutlich unterschätzt (um etwa 300 bis 1000 pcm). Diese Tendenz war auch in allen früheren Ergebnissen mit verschiedenen Codes und Daten beobachtet worden. Wenn man die Unsicherheiten bzgl. der nuklearen Daten berücksichtigt, sind die Werte auf dem 2σ -Niveau kompatibel. Insgesamt ist die Unsicherheit bzgl. der nuklearen Daten der dominierende Beitrag zur Unsicherheit bei der Berechnung der Multiplikationsfaktoren der untersuchten kritischen Anordnungen.

Ein weiteres Ziel bei der Erstellung der Benchmark-Suite war es, die Unsicherheiten in den Reaktionsraten infolge der Unsicherheiten in den nuklearen Daten zu bestimmen im Vergleich zu Messfehlern und Abweichungen zwischen gemessenen und berechneten Werten. Abb. 5.19 zeigt die Ergebnisse für die Spaltraten in den Brennstabreihen der VENUS-PRP-7-Anordnung in Abb. 5.16 (links). Hier und in allen folgenden Abbildungen stellen die durchgezogenen roten Linien die Referenzergebnisse dar, während die gestrichelten Linien das 1σ -Band der Berechnungsergebnisse bzgl. der Unsicherheiten in den nuklearen Daten repräsentieren. Die Fehlerbalken der Messwerte bezeichnen die experimentelle 1σ -Unsicherheit. Die Übereinstimmung zwischen Experiment und Berechnung ist zufriedenstellend, insbesondere wenn die Unsicherheiten bzgl. der nuklearen Daten berücksichtigt werden. Es ist auch ersichtlich, dass im Gegensatz zum Multiplikationsfaktor die experimentelle Unsicherheit wesentlich höher ist als die Unsicherheit der berechneten Werte bzgl. der nuklearen Daten.

Tab. 5.6 Experimentelle und berechnete Multiplikationsfaktoren und deren Unsicherheiten

	Benchmark value	Benchmark uncert.	Calc. value	TSUNAMI uncert. (%)	XSUSA uncert. (%)
VENUS-7b	1.00117	0.163 %	0.99353	0.635	0.647
VENUS-7b (subst. MOX)	1.00059	0.163 %	0.99284	0.636	0.645
VENUS-7b (subst. UO2)	1.00211	0.163 %	0.99485	0.632	0.644
VENUS-7d	1.00105	0.163 %	0.99339	0.634	0.646
VENUS-7d (subst. MOX)	1.00013	0.163 %	0.99278	0.635	0.647
VENUS-7/1b	1.00089	0.163 %	0.99457	0.626	0.639
VENUS-7/3	0.99830	0.163 %	0.99390	0.621	0.630
VENUS-9/1	1.0	(0.163 %)	0.99503	0.623	0.635
VENUS-9/1 (Al plate)	1.0	(0.163 %)	0.99387	0.622	0.634
VENUS-9/1 (B ₄ C pins)	1.0	(0.163 %)	0.99393	0.591	0.599
VENUS-9/1 (H ₂ O pins)	1.0	(0.163 %)	0.99377	0.625	0.637
VENUS-1	-	-	0.99911	0.552	0.540
VENUS-2	1.0	-	1.00165	0.528	0.518
KRITZ-2:1 (cold)	1.0025	0.20 %	0.99563	0.582	0.580
KRITZ-2:1 (hot)	1.0024	0.28 %	0.99235	0.593	0.588
KRITZ-2:13 (cold)	1.0013	0.22 %	0.99814	0.538	0.536
KRITZ-2:13 (hot)	1.0019	0.21 %	0.99546	0.568	0.565
KRITZ-2:19 (cold)	1.0077	0.30 %	1.00132	1.175	1.158
KRITZ-2:19 (hot)	1.0055	0.27 %	0.99838	1.173	1.156
B&W Loading 2	1.0007	0.12 %	0.99688	0.461	0.450
B&W Loading 8	1.0007	0.12 %	0.99589	0.464	0.455

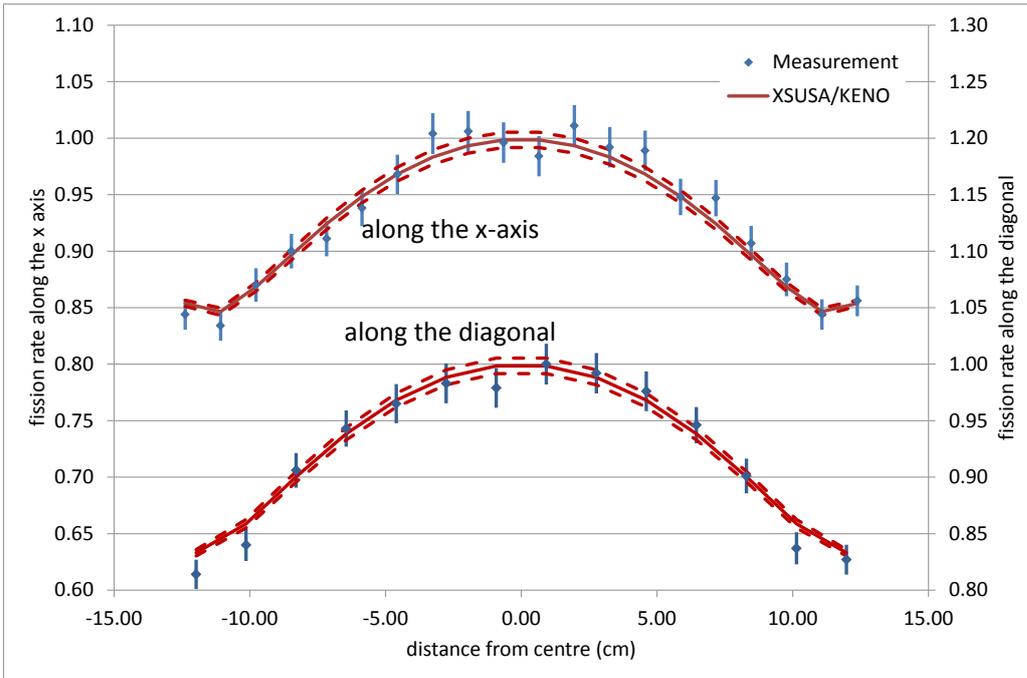


Abb. 5.19 Berechnete und gemessene Spaltratenverteilungen für die VENUS-PRP-7-Anordnung.

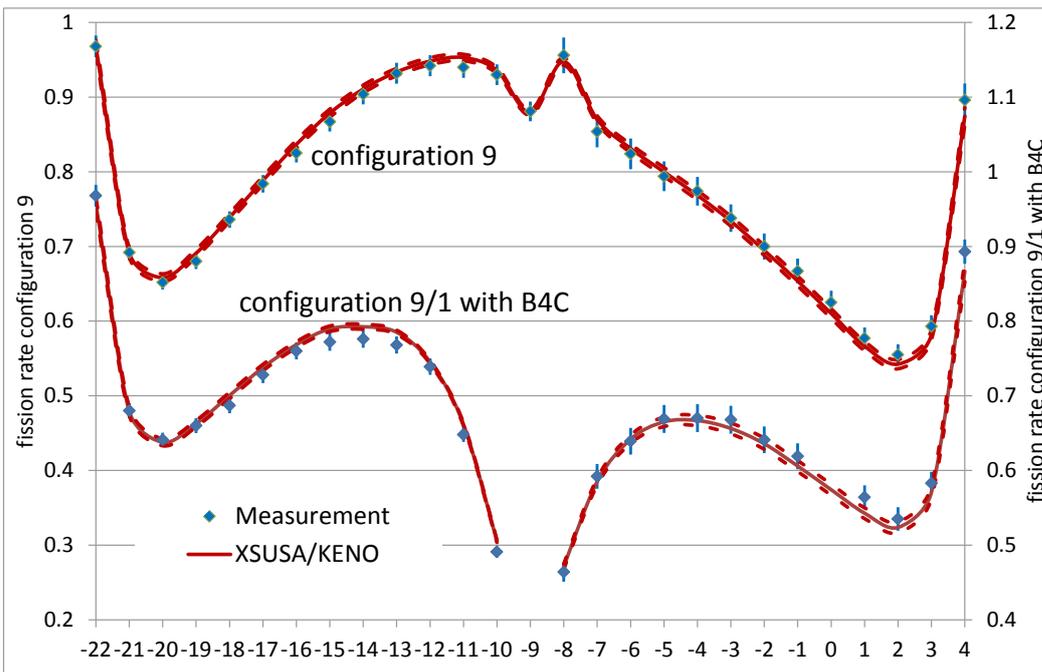


Abb. 5.20 Berechnete und gemessene Spaltratenverteilungen für zwei VENUS-PRP-9-Anordnungen.

Die Situation für die VENUS-PRP-9/1-Anordnungen ist ähnlich. Abb. 5.20 zeigt die Spaltraten durch den Kern in einer Reihe von Brennstäben durch die violette Linie in

Abb. 5.16 (rechts) für die ungestörte Anordnung und diejenige mit einer Reihe von B₄C-Stäben.

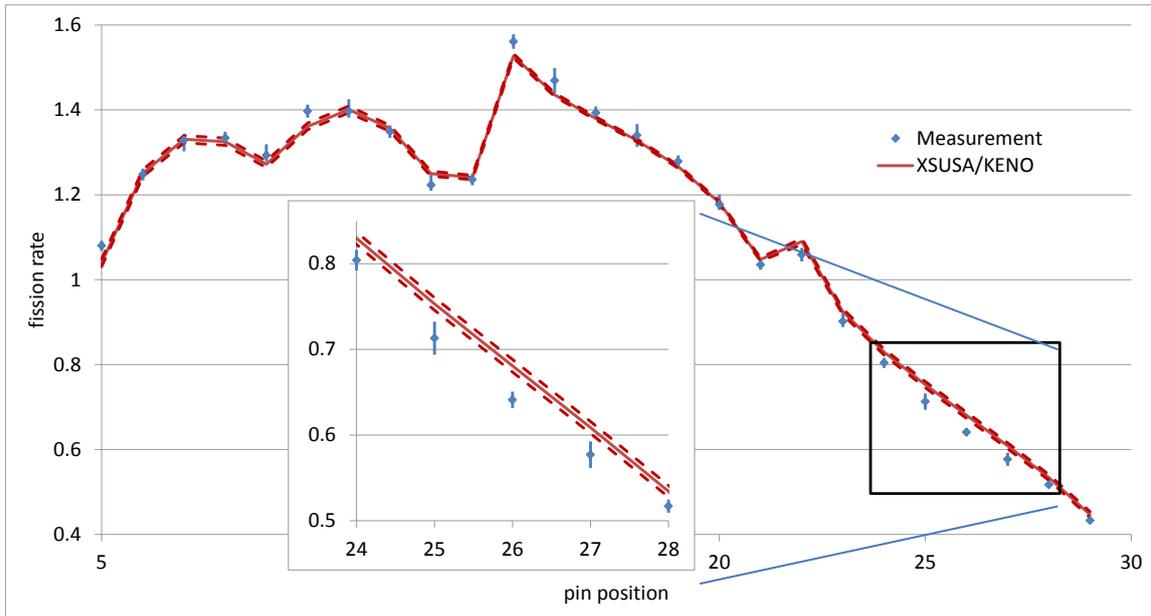


Abb. 5.21 Berechnete und gemessene Spaltratenverteilungen für die VENUS-PVS-2-Anordnung

Für VENUS-PVS-2 wurde der horizontalen Mittellinie für die Analyse gewählt. Die Ergebnisse sind in Abb. 5.21 dargestellt; ähneln qualitativ denen für die VENUS-PRP-Anordnungen, mit einer Ausnahme: In der MOX-Brennstoffzone gibt es eine systematische Abweichung dergestalt, dass die Berechnungsergebnisse die Messwerte um ungefähr 5 % überschätzen, was auch früher in allen Benchmark-Beiträgen beobachtet worden war /NEA 03/. Der Grund dafür ist bis jetzt nicht klar; obwohl die Unsicherheiten bzgl. der nuklearen Daten in diesem Bereich relativ groß sind (ca. 1 %), können sie die viel größeren Diskrepanzen zwischen berechneten und gemessenen Werten nicht erklären.

In den KRITZ-2-Anordnungen haben die Unsicherheiten in den nuklearen Daten keinen signifikanten Einfluss auf den mittleren Teil des Kerns. Erst am Kernrand, insbesondere an den Ecken, verursachen sie Unsicherheiten in der Spaltratenverteilung in der Größenordnung von 1 %. Die Übereinstimmung zwischen berechneten und gemessenen Werten ist insgesamt zufriedenstellend; die Unterschiede scheinen stochastischer Natur sein, wahrscheinlich aufgrund von Unregelmäßigkeiten in den Brennstäben, die in den abgeschätzten experimentellen Unsicherheiten nicht berücksichtigt wurden. Die

Ergebnisse für die KRITZ-2-Anordnungen bilden auch einen Beitrag zum UAM-LWR-Benchmark; die Spaltratenverteilung für KRITZ-2:13 ist in Abb. 5.4 dargestellt.

Schließlich wurden die Stableistungsverteilungen in den B&W-Benchmarks analysiert. Es stellt sich heraus, dass die Unsicherheiten bzgl. nuklearer Daten sehr gering sind, mit 1σ -Werten bis zu 0.15 %, und damit praktisch nicht zur Gesamtunsicherheit beitragen. Es bestehen jedoch ziemlich hohe Abweichungen zwischen berechneten und gemessenen Werten an einigen Stabpositionen; die Standardabweichung beträgt 1.7 %. Man erkennt, dass die besonders hohen Werte nicht durch die angegebenen Messunsicherheiten erklärt werden können. Im Auswertungsbericht im ICSBEP-Handbuch /NEA 13/ heißt es für die Stableistungsverteilungen: "...standard deviations obtained from two or more measurements". Da diese Werte keiner systematischen Unsicherheitsanalyse unterzogen wurden, sind sie entsprechend als weniger zuverlässig einzustufen.

Ein detaillierter Bericht zur Auswertung der B&W- und KRITZ-2-Benchmarks ist als Technische Notiz verfügbar, siehe Anhang A.

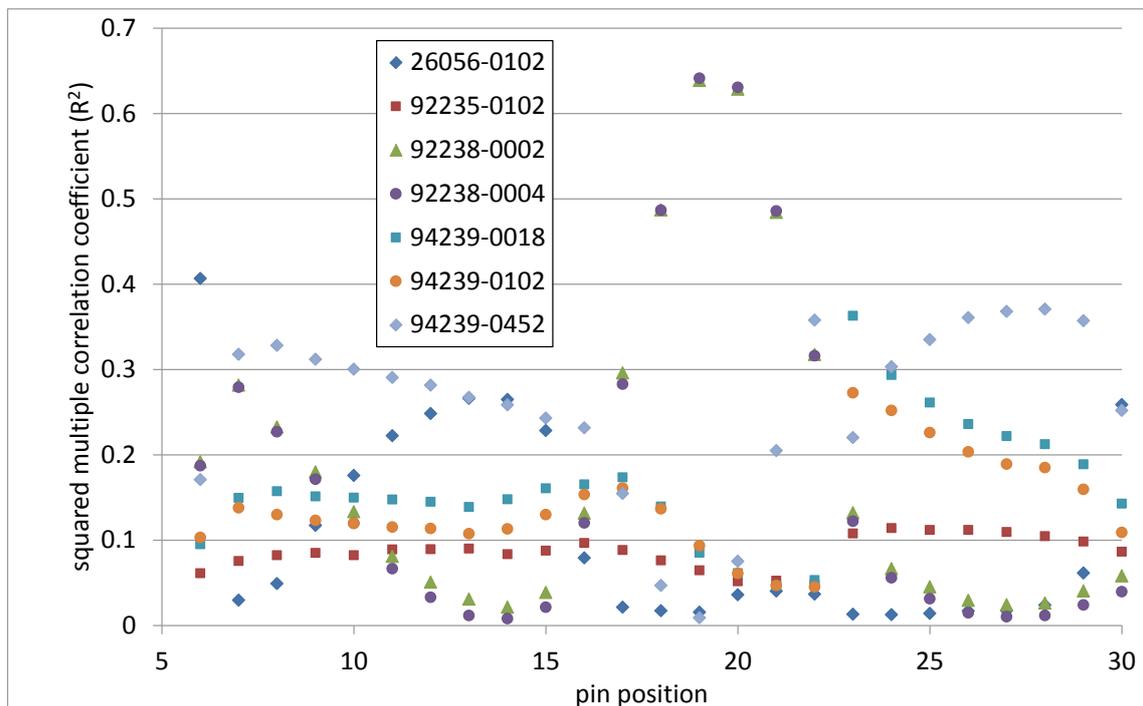


Abb. 5.22 Gruppensensitivitäten der Spaltraten in der VENUS-PVS-2-Anordnung bezüglich individueller Reaktionen

Mit XSUSA wurden auch Sensitivitätsanalysen für die Spaltratenverteilungen durchgeführt. Im Folgenden werden die Ergebnisse für die Spaltraten der VENUS-PVS-2-

Anordnung aus Abb. 5.21 beschrieben. Abb. 5.22 zeigt die Ergebnisse einer Gruppensensitivitätsanalyse; dabei sind die Werte für alle Energien individueller Reaktionskanäle zu Gruppen zusammengefasst. Als Sensitivitätsmaß wird der quadrierte multiple Korrelationskoeffizient R^2 verwendet. Es ist zu erkennen, dass am inneren und am äußeren Kernrand, also in unmittelbarer Nähe zu den Stahlwänden der Absorptionsquerschnitt von Fe-56 den größten Beitrag liefert. Im mittleren Kernbereich spielen die Streudaten von U-238 die größte Rolle.

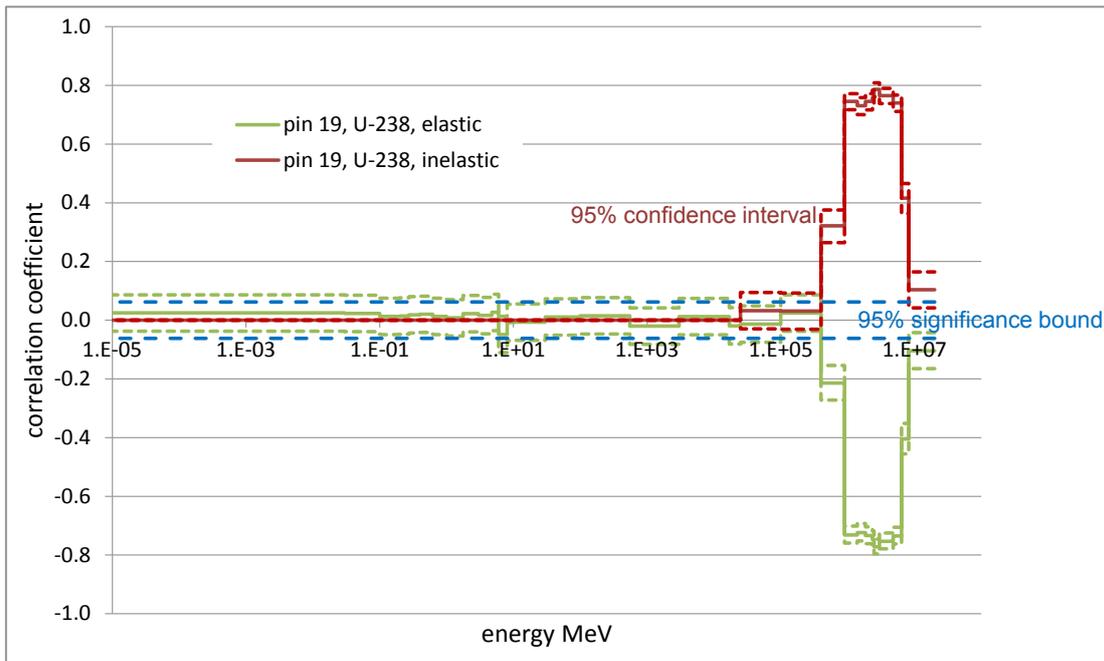


Abb. 5.23 Sensitivitäten der Spaltraten in einem Brennstab der VENUS-PVS-2-Anordnung bezüglich der Streudaten von U-238

Durch Bestimmung der energieabhängigen Korrelationskoeffizienten kann noch der Energiebereich ermittelt werden, der den Hauptbeitrag liefert. Dies für die elastische und inelastische Streuung von U-238 in Abb. 5.23 dargestellt, und zwar für den Brennstab, bei dem der Beitrag der Streudaten am höchsten ist. Nennenswerte Beiträge kommen nur aus dem schnellen Energiebereich > 500 keV; die Beiträge bei niedrigeren Energien sind statistisch nicht signifikant.

5.6 Unsicherheitsanalysen für gasgekühlte Hochtemperaturreaktoren

Im Jahr 2012 wurde das „IAEA Coordinated Research Program on the High-Temperature Gas cooled Reactor UAM“ (HTR-CRP) begonnen. Dieses Forschungsprogramm versteht sich als Fortsetzung der bisherigen internationalen Aktivitäten bei

IAEA und OECD/NEA zur Verifikation und Validierung (V & V) der verfügbaren Analysemittel zur Simulation von gasgekühlten Hochtemperaturreaktoren („High Temperature Gas-Cooled Reactors“ – HTGR) für Auslegung und Sicherheitsbewertungen.

Derzeit gibt es zwei HTGR-Typen: den Kugelhaufentyp (**Pebble Bed Reactor**“ - PBR) und die prismatischen Typ (**Prismatic Modular Reactor** - PMR). In beiden Typen befindet sich das Schwermetall (normalerweise UO_2) im Zentrum vierlagig beschichteter Partikel befindet. Diese Partikel sind in einer Graphitmatrix verteilt, die entweder kugelförmig (PBR) oder zylindrisch (PMR) in einer hexagonalen Anordnung in einem Graphitblock ist. Daher muss in den Spektralrechnungen beachtet werden, dass sich der Brennstoff jeweils in einer doppelt heterogenen Anordnung befindet; die erste Heterogenität bildet das Gitter von beschichteten Partikeln in der Graphitmatrix, die zweite das Gitter von Kugeln oder Zylindern.

In Rahmen des Forschungsvorhabens RS1503 wurden Methoden zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse bei für HTGR-Berechnungen entwickelt. Neutronentransportrechnungen beruhen im Wesentlichen auf der Qualität der zugrunde liegenden nuklearen Daten. Obwohl ständig durch Verbesserung der Datenbasis die Aussagegenauigkeit erhöht wird, spielen verbleibenden Unsicherheiten eine nicht zu vernachlässigende Rolle bei Kernberechnungen. Eine systematische Auswertung der resultierenden Ergebnisunsicherheiten ist umso wichtiger für Reaktoren, für die wenig oder gar keine Betriebserfahrung vorliegt. HTGRs fallen in diese Kategorie.

Die XSUSA-Methodologie, die in erster Linie für Systeme mit einfacher Heterogenität (wie Stabgitter bei LWR oder schnellen Reaktoren, Behälter mit Spaltmaterial enthaltenden Flüssigkeiten, etc.) entwickelt worden war, wurde für HTGR-Systeme mit doppelter Heterogenität angepasst. Die Berechnungskette weist hierbei die Besonderheit auf, dass sie in zwei Durchgängen für die beiden Heterogenitäten durchgeführt werden muss. Die Berechnungskette für Kritikalitätsrechnungen ist in Abb. 5.24 skizziert.

Für Systeme mit einfacher Heterogenität ist sichergestellt, dass durch die Variation der nuklearen Daten nach der Spektralrechnung, wie sie in XSUSA implementiert ist (siehe Abb. 5.24 unten) also durch die Vernachlässigung sogenannter impliziter Effekte, keine relevanten Abweichungen entstehen. Dies wurde in einer Vielzahl von Vergleichen mit TSUNAMI-Ergebnissen überprüft; ein Teil der Ergebnisse ist in Tab. 5.6 zusammengestellt. Ebenfalls wurden erste Vergleiche mit SAMPLER aus der Beta-Version von SCALE 6.2 angestellt, das die Variation der Daten vor der Spektralrechnung implemen-

tiert (siehe Abb. 5.24 oben); es ergaben sich keine Hinweise auf Abweichungen. Für Systeme mit doppelter Heterogenität liefern die Vergleiche zwischen XSUSA und SAMPLER nicht vernachlässigbare Abweichungen. Hier liegen die mit SAMPLER ermittelten Unsicherheiten systematisch unter denen aus XSUSA. Dies ist jedoch kaum auf implizite Effekte zurückzuführen, da diese die Gesamtunsicherheiten eher vergrößern würden. Gegenwärtig ist davon auszugehen, dass HTGR-Systeme in SAMPLER noch nicht ganz korrekt beschrieben werden.

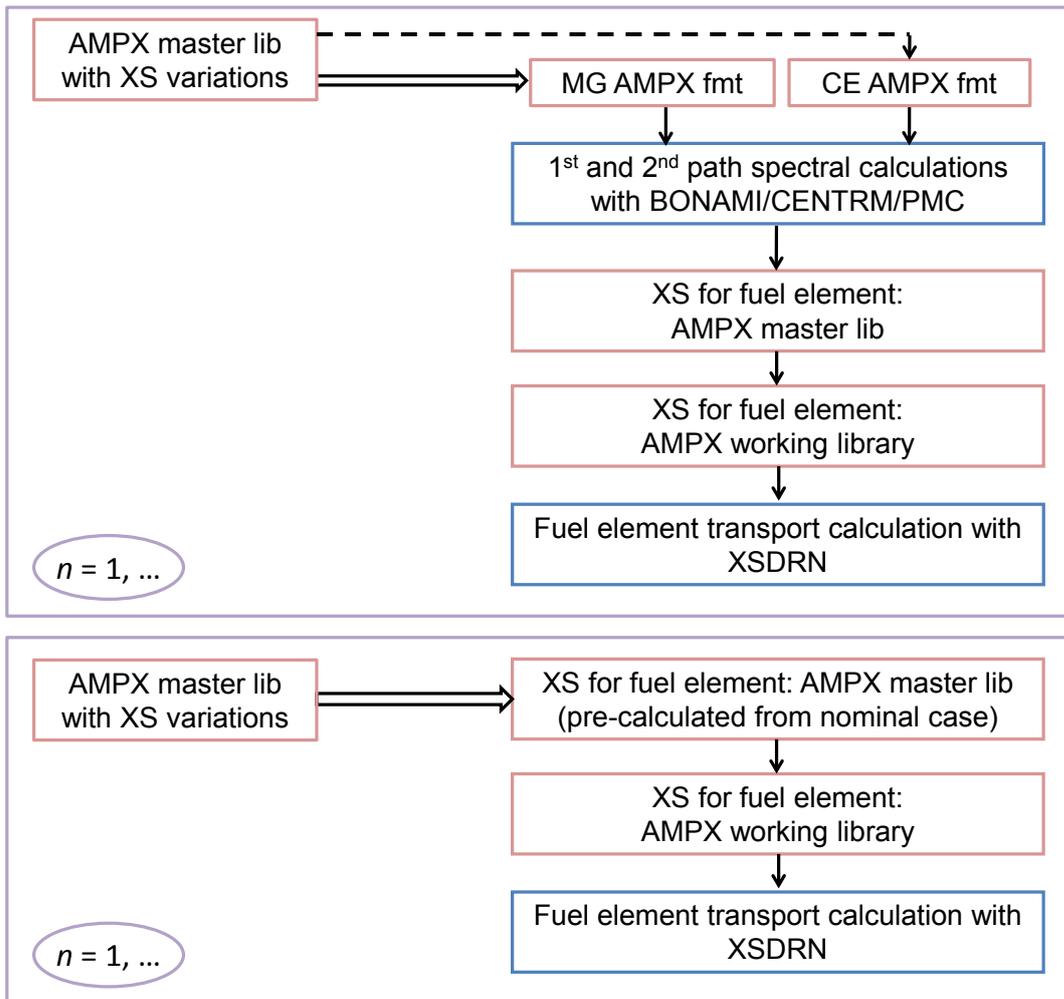


Abb. 5.24 HTGR-Kritikalitätsberechnungskette mit Unsicherheitsanalysen. Oben: Variation der Daten vor den Spektralrechnungen (SAMPLER); unten: nach den Spektralrechnungen (XSUSA)

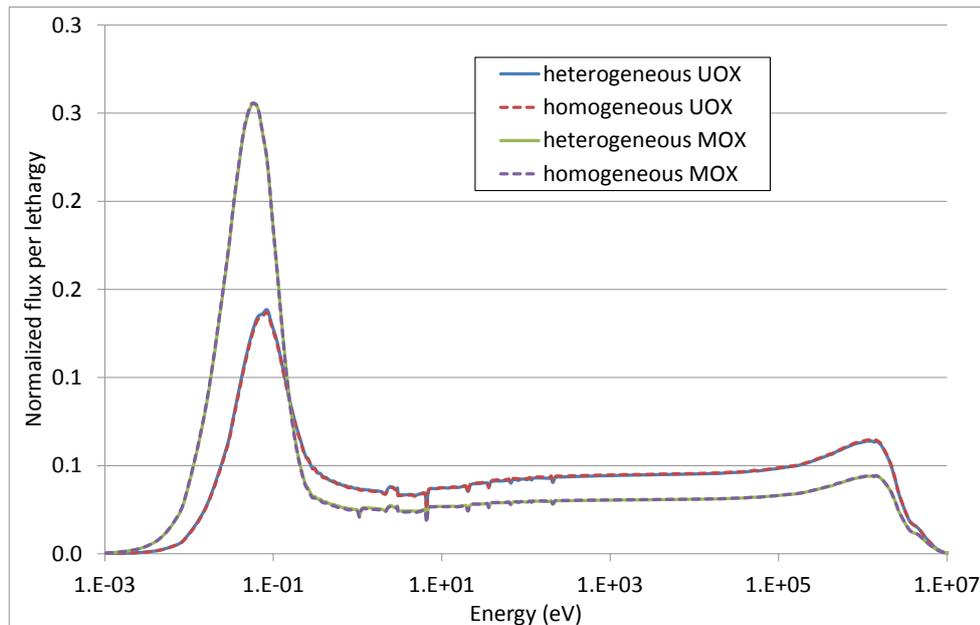


Abb. 5.25 HTGR-Kugelhaufen-Flussspektren mit heterogenem und äquivalentem homogenem Brennstoff

Ein direkter Vergleich mit TSUNAMI-Ergebnissen ist nicht möglich, da Systeme mit doppelter Heterogenität nicht in TSUNAMI implementiert sind. Daher wurde, nur zum Zweck des Vergleichs mit TSUNAMI, das doppelt heterogene System auf ein spektral nahezu äquivalentes System mit einfacher Heterogenität abgebildet, das aus einer homogenen Mischung der beschichteten Partikel mit der Graphitmatrix besteht. Bei einer solchen Volumenhomogenisierung unterscheidet sich das Spektrum signifikant von dem des heterogenen Systems; dies kann jedoch z. B. durch die Einführung einer effektiven U-238-Dichte behoben werden. Ein geeigneter Wert ist die Reduktion der U-238-Dichte auf ca. 70 % des Nominalwerts. Damit erhält man sehr gute spektrale Übereinstimmung. Dies wurde für Brennelemente vom Kugelhaufentyp mit UO_2 - und MOX-Brennstoff durchgeführt; letzterer repräsentiert abgebrannten Brennstoff mit einem hohen Anteil von aufgebautem Plutonium. Die entsprechenden Vergleiche sind in Abb. 5.25.

In Tab. 5.7 werden die Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren aus Berechnungen mit dem tatsächlichen heterogenen Brennstoff und dem äquivalenten homogenen Brennstoff verglichen. Es zeigt sich, dass sowohl für das UO_2 - als auch das MOX-System die mit XSUSA/XSDRN berechneten Unsicherheiten sehr gut übereinstimmen; darüber hinaus sind die Unsicherheiten aus XSUSA/XSDRN und TSUNAMI für den homogenen Brennstoff in guter Übereinstimmung.

Tab. 5.7 Unsicherheiten in den Multiplikationsfaktoren in einer HTGR-Kugelhaufen-Anordnung mit heterogenem und äquivalentem homogenem Brennstoff

	Unsicherheit UO₂	Unsicherheit MOX
Heterogener Brennstoff, XSUSA/XSDRN	0.49 %	0.99 %
Homogener Brennstoff, XSUSA/XSDRN	0.48 %	0.98 %
Homogener Brennstoff TSUNAMI	0.47 %	0.98 %

Zur weiteren Überprüfung wurden Rechenfälle aus dem HTR-CRP-Benchmark herangezogen. Dort werden für Vergleichszwecke sowohl PBR- als auch PMR-Anordnungen mit homogenem Brennstoff definiert. Hier wurden folgende Fälle aus der Benchmark-Spezifikation /IAE 14/ zum Vergleich zwischen XSUSA und TSUNAMI ausgewählt:

- (1) PBR – frischer Brennstoff – heiß;
- (2) PBR – abgebrannter Brennstoff („batch 113, pass 15“ in /IAE 14/) – heiß;
- (3) PMR – frischer Brennstoff – kalt;
- (4) PMR – frischer Brennstoff – heiß.

Die Ergebnisse sind in Tab. 5.8 zusammengestellt. Auch hier zeigt sich in allen Fällen sehr gute Übereinstimmung zwischen XSUSA/XSDRN und TSUNAMI. Die Ergebnisse aus Tab. 5.7 und Tab. 5.8 stellen zwar keine strenge Validierung der XSUSA-Methode für HTGR-Brennstoff dar, aber sie zeigen, dass es kein Anzeichen dafür gibt, dass die Variation der Wirkungsquerschnitte nach der Spektralrechnung zu deutlichen Ungenauigkeiten führt. Das bedeutet, dass implizite Effekte auch hier nicht relevant sind.

Tab. 5.8 Unsicherheiten in den Multiplikationsfaktoren für Anordnungen des HTR-CRP-Benchmarks mit homogenem Brennstoff

	TSUNAMI	XSUSA/XSDRN
PBR, frischer Brennstoff - heiß	0.54 %	0.56 %
PBR, abgebrannter Brennstoff - heiß	0.85 %	0.84 %
PMR, frischer Brennstoff - kalt	0.54 %	0.56 %
PMR, frischer Brennstoff - heiß	0.57 %	0.59 %

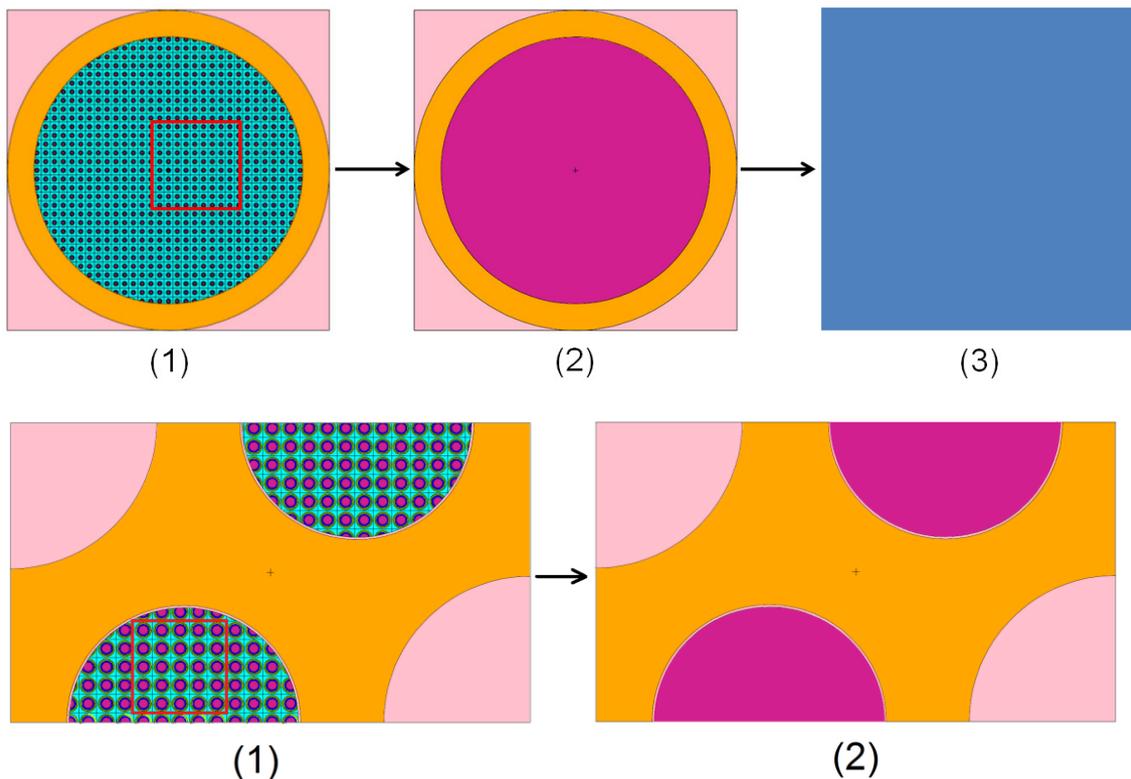


Abb. 5.26 Berechnungsmodelle für HTGR-Brennstoff vom Kugelhaufentyp (oben) und vom prismatischen Typ (unten)

Zur Simulation von HTR-Kernanordnungen mit deterministischen Transport- oder Diffusionsprogrammen ist es erforderlich, homogenisierte Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte zu erzeugen. Dies wird im SCALE-System mit dem Transportcode NEWT bewerkstelligt. Für ein Gitter von Brennstoffkugeln kann NEWT allerdings nicht direkt verwendet werden, da es auf 2-dimensionale ebene Geometrie beschränkt und nicht für sphärische Koordinaten geeignet ist. Daher wird die folgende Vorgehensweise gewählt. (a) Mit vorgegebenem Nuklidinventar wird eine eindimensionale XSDRN-Rechnung für die Kugeln in einem unendlichen Gitter durchgeführt. In dieser Berechnung wird ein Satz von Wirkungsquerschnitten für ein Material, homogenisiert über die Kugel und das umgebende Gas, erzeugt. (b) Mit diesen homogenisierten Daten wird anschließend eine 2-dimensionale NEWT-Rechnung (effektiv für eine unendliche homogenen Medium) durchgeführt, um die Wirkungsquerschnitte auf die gewünschte Gruppenstruktur zu reduzieren und um die kinetischen Parameter zu bestimmen. Für prismatischen Brennstoff ist das Verfahren etwas unterschiedlich. Hier reicht es aus, mit einem vorgegebenen Nuklidinventar direkt eine zweidimensionale NEWT-Rechnung für ein unendliches Gitter von prismatischen Brennstoff und Kühlmittelekanälen durchzuführen. In dieser Berechnung werden Wirkungsquerschnitte gleich-

zeitig homogenisiert und auf die gewünschte Weniggruppenstruktur reduziert. Die beiden Verfahren sind in Abb. 5.26 skizziert.

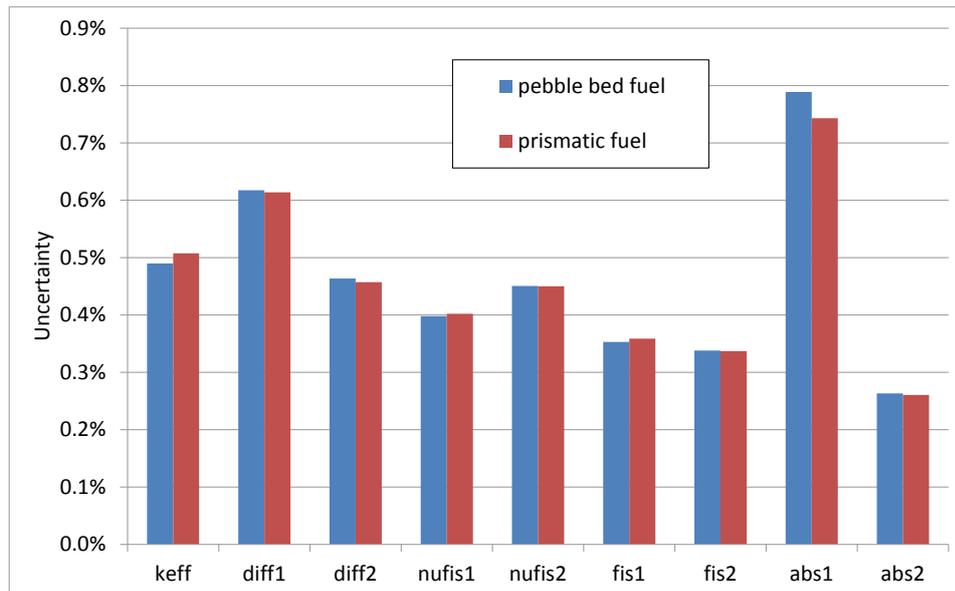


Abb. 5.27 Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren und Zwei-Gruppen-Wirkungsquerschnitte.

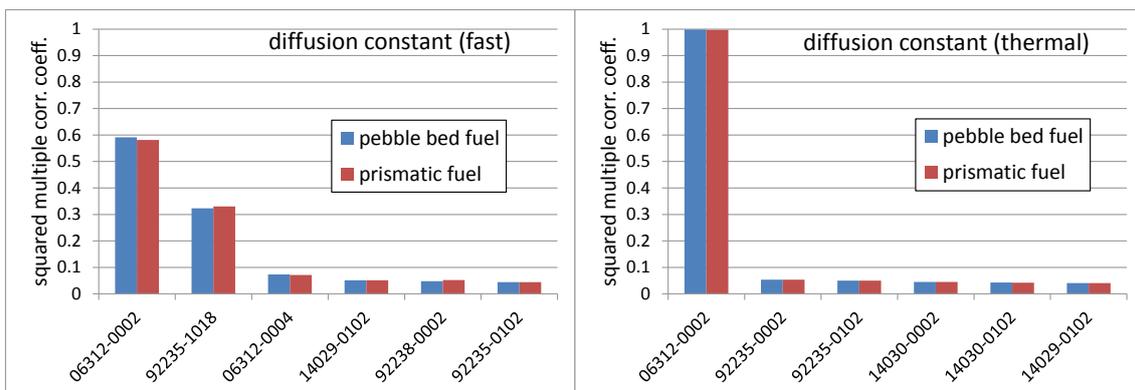


Abb. 5.28 Quadrierter multipler Korrelationskoeffizient für die Diffusionskonstanten.

Damit lassen sich Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte für Hochtemperaturreaktoren sowohl vom Kugelhaufen- als auch vom prismatischen Typ mit der TRITON-Sequenz aus SCALE erzeugen; dieses Verfahren kann auch auf Abbrandberechnungen erweitert werden. Die Unsicherheiten in den Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten lassen sich mit XSUSA ermitteln; es können aber auch Unsicherheiten für die Ergebnisse stationärer und transientser Ganzkernberechnungen, die mit diesen Wirkungsquerschnitten durchgeführt werden, bestimmt werden. In Abb. 5.27 sind die Unsicherheiten für die Multiplikationsfaktoren und Zwei-Gruppen-Wirkungsquerschnitte für Brennelemente beider Typen im frischen Zustand gegeben (Notation: keff = Multiplikationsfaktor,

diff = Diffusionskonstante, ν_{fis} = Anzahl von Neutronen pro Spaltung x Spaltquerschnitt, σ_{fis} = Spaltquerschnitt, σ_{abs} = Absorptionsquerschnitt, 1 = schnelle Gruppe, 2 = thermische Gruppe).

Die Hauptbeiträge zu den Unsicherheiten können mittels einer Gruppensensitivitätsanalyse bestimmt werden. Ein Beispiel gibt Abb. 5.28, wo die quadrierten multiplen Korrelationskoeffizienten für die schnelle und die thermische Diffusionskonstante dargestellt sind. Die Unsicherheit der thermischen Diffusionskonstante wird praktisch nur durch die elastische Streuung des Graphits (06312 – 0002) beeinflusst, bei der Unsicherheit der schnellen Diffusionskonstante spielt zusätzlich das Spaltspektrum von U-235 (92235 – 1018) eine Rolle. Alle anderen Beiträge sind statistisch nicht signifikant.

6 AP4: Einsatz künstlicher neuronaler Netze zur Berechnung lokaler Parameter im Reaktorkern

Der folgende Abschnitt beschreibt die durchgeführten Arbeiten bezüglich der Erprobung der Anwendbarkeit neuronaler Netze für Fragestellungen bei der Reaktorkernsimulation.

Künstliche neuronale Netzwerke (KNN) /BIS 96/ wurden im Hinblick auf ihre Einsatzmöglichkeit im Bereich der Verarbeitung von nuklearen Daten untersucht. Speziell soll in diesem Arbeitspunkt die explizite, tabellarische Speicherung von hochdimensionalen Wirkungsquerschnittsdaten und deren lineare Interpolation an Zwischenstellen, wie z. B. im Neutronenkinetik-Programm QUABOX/CUBBOX /QC 78/ praktiziert, durch kontinuierliche, analytische Modelle ersetzt werden. Davon verspricht man sich bei Wirkungsquerschnittsbibliotheken mit wenigen Stützstellen, also Kombinationen von Werten der diskretisierten freien Variablen wie z. B. Brennstofftemperatur oder Borkonzentration, an denen Werte vorliegen, ein verbessertes Interpolationsergebnis und insbesondere bei hoch abgetasteten Daten eine Speicherplatzersparnis durch die kodierte Darstellung. Außerdem möchte die GRS anhand dieses Anwendungsbeispiels generell ihr Know-How auf dem Gebiet künstlicher neuronaler Netze erweitern und die Eignung dieser Technik für weitere Fragestellungen aus der Reaktorsicherheitsforschung überprüfen.

6.1 Theoretischer Überblick

Funktionsprinzip

Das Arbeitsgebiet der künstlichen neuronalen Netzwerke ist ein Kind der theoretischen Hirnforschung, weswegen viele Begriffe biologisch inspiriert sind. Allgemein besteht ein künstliches neuronales Netzwerk aus einer Menge von Neuronen, die Rechenoperationen ausführen, und den sie verknüpfende Verbindungen, den Synapsen. Die sich daraus ergebende Topologie des Netzwerks kann höhere Strukturen aufweisen. Häufig sind die Neuronen z. B. in Schichten angeordnet. Zu einem KNN gehören weiterhin die Möglichkeit, eine bestimmte Untermenge von Neuronen mit Eingabewerten zu versehen, die Vorgabe einer dynamischen Gleichung, welche die Reaktion des Netzwerks auf die Eingabewerte festlegt und eine Lernregel, die versucht den inneren Zustand

des Netzwerks auf eine vorgegebene Aufgabe hin zu optimieren. Der Zustand ist zu- meist allein über die Menge der mit den Synapsen assoziierten Gewichte bestimmt, kann aber auch teilweise in Neuronen eigenen Parametern kodiert sein z. B. in „radial basis function (RBF) networks“. Die synaptischen Verbindungen sind zwar in der Regel gerichtet, es existieren aber auch rekurrente Netzwerke, in deren Dynamik Rückkopp- lungen entstehen. Als Ausgabe dienen die Zustände einer Untermenge aller Neuronen.

Die Dynamik des Netzwerks setzt sich zusammen aus den individuellen Antworten der Neuronen auf die durch die Synapsen gewichteten Ausgabewerte ihrer Nachbarn. Die individuelle Form der Reaktion ist variabel und wird als Aktivierungsfunktion („activation function“, „transfer function“) eines konkreten Neurons bezeichnet. In Anlehnung an „in- tegrate and fire“-Modelle biologischer Nervenzellen approximieren nichtlineare Aktivie- rungsfunktionen häufig ein diskretes Zwei-Zustandsmodell (McCulloch-Pitts- Neuronen), z. B. mit der logistischen Funktion $(1+e^{-x})^{-1}$ oder durch $\tanh(x)$. Für die Dy- namik sind verschiedene gleichzeitige oder auch verzögerte Aktualisierungsregeln möglich.

Ein neuronales Netzwerk wird vor seiner Anwendung trainiert, d. h. es lernt seine Aus- gabe anhand von diskreten Datenpunkten anzupassen. Die zu diesem Zweck verwen- deten Algorithmen fallen in der Mehrzahl der Anwendungen in folgende Unterklassen:

1. **Überwachtes Lernen** („supervised learning“): Durch Präsentation von Zielwer- ten minimiert die Lernregel eine Fehlerfunktion, welche die Abweichung der zu einem Eingabewert berechneten Ausgabe vom gewünschten Wert bestraft.
2. **Nicht-überwachtes Lernen** („unsupervised learning“): Das Netzwerk wird dazu gebracht, allein anhand der Eingabe eine einfachere Repräsentation der Daten zu suchen. Die daraus resultierenden Modelle teilen die Eingabedaten z. B. in nicht vorgegebene Gruppen ein („clustering“) oder liefern dimensionsreduzierte Darstellungen.

Wichtig ist auch, in welcher Abfolge dem Netzwerk während des Trainingsvorgangs die Daten präsentiert werden. Hier unterscheidet man zwischen sequentielltem bzw. konti- nuierlichem und „batch“-Lernen, je nachdem ob die internen Netzwerkparameter nach der Präsentation eines einzelnen oder aller Beispiele (bzw. einer Untermenge: „mini batch“) aktualisiert werden.

Eigenschaften und Anwendungsgebiete

Künstliche neuronale Netze modellieren multidimensionale komplexe und manchmal auch zeitabhängige Systeme anhand einer endlichen Menge von Beispieldaten mit hintereinandergeschalteten, generischen Grundfunktionen. Ihre Anwendung setzt im Prinzip keine weiteren theoretischen Kenntnisse der Systeme voraus. Das gefundene Modell ist aber zunächst einmal nur eine implizite Repräsentation („black box“), die a priori keinen Erkenntnisgewinn bezüglich der den Daten zugrundeliegenden Gesetzmäßigkeiten liefert. Die mathematische Grundlage für den Erfolg der Methode bildet ein Approximationstheorem von Kolmogorov /KOL91/.

Die nichtlineare Funktion, die ein trainiertes neuronales Netzwerk bereitstellt, kann zum einen innerhalb des gelernten Gebiets als analytische Approximation der Daten benutzt (Regression) und zum Beispiel zur Interpolation an nicht gemessenen Stützstellen, aber auch für Optimierungsprobleme eingesetzt werden. Andererseits lässt sich das Netzwerk für Klassifizierungsaufgaben auch darauf hin trainieren, dass es eine Diskriminante modelliert, anhand derer z. B. Bilder in vorgegebene Kategorien eingeordnet oder Sprachsignale erkannt werden.

Ein Vorteil von neuronalen Netzen gegenüber der Regressionsanalyse mit anderen generischen Funktionen wie Polynomen besteht darin, dass die freien Parameter, die synaptischen Gewichte, nichtlinear in die Ausgleichsfunktion eingehen und dadurch ihre zur Beschreibung benötigte Anzahl nicht exponentiell mit der Problemdimension wächst.

Neuronale Netzwerke finden außerdem Anwendung in der automatischen Ableitung von Merkmalen („feature extraction“) für die Mustererkennung durch Dimensionsreduktion (siehe „autoencoder networks“) oder Clusteranalysen. Methoden zur Dimensionsreduktion werden auch in der digitalen Signalverarbeitung z. B. zur Quellentrennung benutzt.

6.2 Modellierung von nuklearen Daten mit Feed-Forward-Netzwerken

Ausgangspunkt der Modellierung sind Datenbibliotheken für das Neutronenkinetik-Programm QUABOX/CUBBOX, die räumlich homogenisierte nukleare Daten in Abhängigkeit von Brennstofftemperatur, Moderatorichte, Abbrand und Borkonzentration ta-

bellieren. Im Folgenden bezeichnet der Begriff „Material“ einen benannten Satz dieser berechneten nuklearen Daten, der eine spezielle Nuklidzusammensetzung und -verteilung in einer bestimmten Geometrie charakterisiert. Die funktionale Abhängigkeit der physikalischen Größen, also z. B. des Spaltquerschnitts, wird für jedes Material mit einem eigenen neuronalen Netzwerk approximiert, das fünf Eingangsneuronen für vier freie Variablen und einen Schwellenwert, sowie ein Ausgabeneuron besitzt. Weil die Eigenschaften der Reflektormaterialien nur von der Borkonzentration und der Moderatordichte abhängen, benötigten sie eine entsprechend kleinere Eingabeschicht und können als niedrigdimensionale Testsysteme dienen.

Üblicherweise verwendet man für Regressionsprobleme „feed-forward“-Netzwerke. Speziell kommt an dieser Stelle ein „multi-layer perceptron“ (MLP) zum Einsatz.

Das Multi-Layer-Perceptron

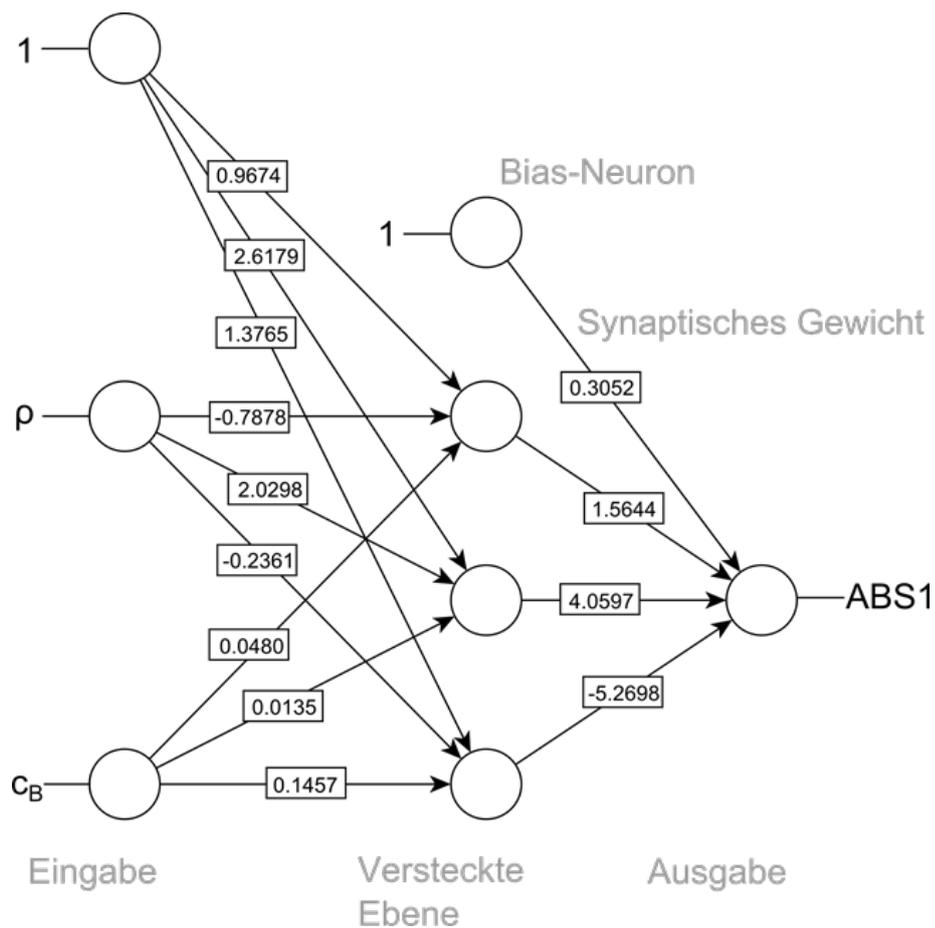


Abb. 6.1 Trainiertes Feed-Forward-Netzwerk mit einer versteckten Schicht für den absoluten Wirkungsquerschnitt eines Reflektormaterials

Ein MLP besteht als Feed-Forward-Netzwerk aus einer Menge von in Reihe geschalteten Neuronenschichten (siehe Abb. 6.1). Die Neuronen innerhalb einer Schicht sind dabei nicht miteinander verbunden, sie verfügen aber im Normalfall über Ein- bzw. Ausgabeverknüpfungen mit jeweils allen Elementen der vorhergehenden bzw. nachfolgenden Ebene. In dieser Architektur kommen keine Rückkopplungen vor.

Die erste Schicht fungiert als Eingabeschnittstelle. Die Aktivierungswerte ihrer Neuronen entsprechen den von außen vorgegebenen Daten. Diese Reize werden weitergeleitet und dadurch die Mitglieder der nächste Neuronengruppe, die man als (erste) versteckte Schicht bezeichnet, ihrerseits zur Aktivierung angeregt. Ein MLP hat eine oder mehrere solcher versteckten Ebenen. Ihren Einfluss kann man sich anhand von Bilderkennungsproblemen deutlich machen: dabei strebt man an, dass der Eingabedatenraum durch jede Verarbeitungsstufe in eine höhere Abstraktionsebene überführt wird und sich die Klassifikationsmerkmale von lokalen (z. B. Kanten) zu räumlich immer komplexeren, globaleren Mustern (z. B. Gesichter) zusammensetzen. Die letzte Schicht eines Feed-Forward-Netzwerks beinhaltet die Ausgabeneuronen mit deren Aktivierung die Dynamik endet.

Das i -te Neuron einer Nicht-Eingabe-Schicht bildet zur Berechnung seines Aktivierungswertes die gewichtete Summe der Signale $\mathbf{x} = \{x_j\}$ der N_i Neuronen aus der vorangegangenen Schicht, mit denen es synaptisch verbunden ist, wendet darauf eine nichtlineare Aktivierungsfunktion σ an und reicht das Ergebnis $y_i(\mathbf{x})$ unidirektional an die nächste Ebene weiter:

$$y_i(\mathbf{x}) = \sigma \left(\sum_j^{N_i} w_{ij} x_j + \theta_j \right) \quad (6.1)$$

Dabei symbolisieren die Koeffizienten w_{ij} die synaptischen Gewichte, und θ_j Schwellenwerte („bias“), die auch als weitere Gewichte für zusätzliche Neuronen mit konstanter Eingabe angesehen werden können. Bis auf die Ausgabeschicht verfügt jede Neuronengruppe über ein solches Bias-Neuron. Es ist für die Lokalisierung der Aktivierung des Neurons in seinem Eingaberaum unbedingt erforderlich. In MLP-Netzwerken haben die Aktivierungsfunktionen σ in den versteckten Schichten eine sigmoidale Form, bei RBF-Netzwerken ist es dagegen eine Gauß-Funktion. Für die Neuronen der Ausgabe-Ebene wählt man bei Regressionsproblemen eine lineare Abhängigkeit von den Eingaben.

Der Lernvorgang

Weil bei einem Regressionsproblem alle Daten gleichzeitig vorliegen und keine Datenpunkte ausgezeichnet sind, ist es sinnvoll, überwacht Batch-Lernen einzusetzen und alle Trainingsbeispiele gleichzeitig zu verarbeiten. Als zu minimierende Fehlerfunktion verwendet man üblicherweise die (mittlere) Summe der quadratischen Abweichungen („sum of squared errors“, SSE bzw. „mean squared error“, MSE) der Modellwerte von den nuklearen Trainingsdaten. Damit liegt ein klassisches nichtlineares Optimierungsproblem vor, das mit bekannten Algorithmen numerisch behandelt werden kann.

Das Lösen eines nichtlinearen Optimierungsproblems ist unter Umständen sehr zeit- aufwendig. In der Literatur findet man ein alternatives, vereinfachtes Lernverfahren, das von mehreren Forschern parallel entwickelt worden ist, sowohl unter dem Namen „algebraic learning“ /FER02/ als auch unter „extreme learning machine“. Sein Prinzip beruht auf der Idee, den langwierigen nichtlinearen Optimierungsprozess durch das Lösen einer algebraischen Gleichung zu ersetzen. Dazu werden zunächst in einem Feed-Forward-Netzwerk mit einer versteckten Neuronen-Ebene die Gewichte zwischen Eingabeschicht und versteckter Schicht stochastisch initialisiert. Weil die Aktivierungsfunktion in Regressionsnetzwerken linear von den Gewichten der Verbindungen zwischen der versteckten Neuronenschicht und der Ausgabeschicht abhängt, ergibt sich aus den Beziehungen zwischen den vorgegebenen Ein- und Ausgabewerten ein lineares Gleichungssystem in den noch unbekannt, nicht initialisierten Gewichten. Wenn es mehr Datenpunkte als unbekannte Parameter gibt, kann das dann überbestimmte Gleichungssystem im dem Sinne optimal gelöst werden, als dass es eine eindeutige Lösung gibt, die den quadratischen Fehler minimiert. Dazu bildet man, z. B. mit Hilfe einer Singulärwertzerlegung, das sogenannte Moore-Penrose-Inverse (Pseudo-Inverse) der Gewichtsmatrix (Systemmatrix) und multipliziert diese Matrix mit dem Ausgabevektor. Weil bei dem Verfahren nur die Verbindung zur Ausgabeschicht optimiert wird, ist das Ergebnis noch stärker von der Initialisierung abhängig, als bei der nichtlinearen Optimierung. Durch den reduzierten Aufwand für den Trainingsprozess kann man aber die Anzahl der Neustarts erhöhen.

Praktische Fragen

Bei der Konstruktion eines neuronalen Datenmodells stellt sich zunächst die Frage nach den Anzahlen der verwendeten versteckten Neuronen und der sie enthaltenden Schichten. Es gibt leider keine allgemein gültigen theoretischen Aussagen über die

Werte dieser auch als Hyperparameter bezeichneten architektonischen Variablen. Einleuchtend ist, dass die benötigte Flexibilität des Modells, sich an die Daten anzupassen mit der schwierig zu quantifizierenden Komplexität der unbekannt, wahren Funktion, welche die unter Umständen verrauschten Daten beschreibt, ansteigen muss.

Heuristische Argumente und Modellsysteme liefern zwar Anhaltspunkte für die Größe des neuronalen Netzwerks, man ist aber in der praktischen Anwendung gezwungen, den Raum der Hyperparameter in gewissen Grenzen methodisch nach geeigneten Werten abzusuchen. Für Regressionsprobleme werden in der Regel höchstens zwei versteckte Schichten verwendet. Bei Fragestellungen aus dem Bereich der Mustererkennung erhofft man sich aufgrund von Forschungen zur Struktur der Großhirnrinde bessere Ergebnisse von einer tieferen Staffelung („deep learning“ /HIN06/). Solche Netzwerke sind allerdings nur schwierig zur Konvergenz zu bringen. Erst in den letzten Jahren hat man in dieser Richtung Fortschritte durch verbesserte Initialisierungsalgorithmen erzielt.

Die Anzahl der synaptischen Gewichte eines Netzwerks bestimmt sein Potential, sich an vorgegebene Daten anzupassen und diese zu approximieren. Gleichzeitig bewirkt eine zu hohe Zahl von freien Parametern eine Überanpassung und damit den Verlust der Verallgemeinerungsfähigkeit, also der Qualität der Vorhersage (hier: Interpolation) von Werten bei der Präsentation von nicht gelernten Eingabedaten. Diesen Umstand bezeichnet man auch als „bias-variance“-Dilemma. Zur Sicherstellung der Vorhersagekraft von neuronalen Netzwerken kommen unterschiedliche Techniken zum Einsatz:

- in Anwendung des heuristischen „lex parsimoniae“ („Occam’s razor“): Auswahl des Modells mit der geringsten Anzahl von freien Parametern, das die Daten in einem vorgegebenen Fehlerrahmen erklärt.
- Regularisierung, d. h. Hinzufügen von Termen zur Fehlerfunktion aufgrund von Vorwissen über Eigenschaften wie z. B. die Glattheit der zu approximierenden Funktion.
- Kreuzvalidierung („cross validation“).

Bei der Kreuzvalidierung werden die Trainingsdaten (unter Umständen mehrfach) in eine Lern- und eine Validierungsuntermenge aufgeteilt. Während des Trainingsvorgangs sieht das Netzwerk also nur die Daten aus der Lernmenge, der eigentliche Lernerfolg wird dahingegen entweder online oder nach Beendigung des Algorithmus

anhand der Abweichung der Resultate des Modells von den Validierungsdaten bewertet.

Unabhängig vom Bias-Variance-Dilemma setzen die Anzahl und damit zusammenhängend die Qualität der verfügbaren Trainingsdaten, also ihre Repräsentativität, der Approximation mit neuronalen Netzen Grenzen. In diesem Zusammenhang ist es wichtig zu erwähnen, dass es nur sinnvoll ist, Werte im Inneren des durch die Daten vorgegebenen Definitionsbereichs vorhersagen zu lassen. Im erweiterten Sinne zur Datenqualität gehört insbesondere bei verrauschten Werten auch das Größenverhältnis zwischen der Anzahl der freien Parameter und der Menge an Trainingsbeispielen. Problematisch ist die Tatsache, dass mit wachsender Dimensionalität die Menge der benötigten Abtaststellen exponentiell anwächst, was als „curse of dimensionality“ in die Literatur eingegangen ist. Wenn das Problem es zulässt, versucht man deshalb vor der Regressionsanalyse, eine Dimensionsreduktion durchzuführen. Weitere Probleme können sich aus den Trainingsdaten ergeben, wenn bestimmte Bereiche des Definitionsraums dichter abgetastet wurden als andere, da der Optimierungsalgorithmus alle Datenpunkte gleich behandelt und unter Umständen eine große Abweichung in einem Gebiet mit wenig Datenpunkten von einer guten Übereinstimmung im besser bekannten Gebiet bei der Wahl eines intensiven Fehlermaßes wie MSE überdeckt wird.

Die Formulierung des Lernprozesses als nichtlineares Optimierungsproblem weist auf weitere Schwierigkeiten beim Training von neuronalen Netzwerken hin. Insbesondere ist das Resultat eines lokalen Minimierungsalgorithmus aufgrund der typischerweise vielen lokalen Minima der Fehlerfunktion von den Anfangswerten der freien Parameter abhängig. Dem versucht man einerseits durch Vermeidung von a-priori ungünstigen Initialisierungsbereichen und durch den wiederholten Neustart des Lernalgorithmus mit neu initialisierten Anfangswerten zu begegnen.

Technische Umsetzung

Bei der Softwareumgebung fiel die Wahl auf die Programmiersprache Python in Kombination mit den Programmbibliotheken NeuroLab /NEU 90/ (neuronale Netzwerke) und SciPy /SCI 15/ (Numerik, insbesondere Optimierungsalgorithmen). Durch die Verwendung quelloffener Codes hat man die Möglichkeit, Einblick in die eingesetzten Algorithmen zu bekommen und diese bei Bedarf abzuändern. Um die Ergebnisse der Regression über den numerischen SSE-Wert hinaus auch visuell verifizieren zu können, wurde ein Darstellungsprogramm, `plotLib85` entwickelt, mit dem sich zweidimensio-

nale Unterräume der diskreten nuklearen Datenpunkte gemeinsam mit den Ausgaben von neuronalen Modellen darstellen und interaktiv vergleichen lassen (Abb. 6.2).

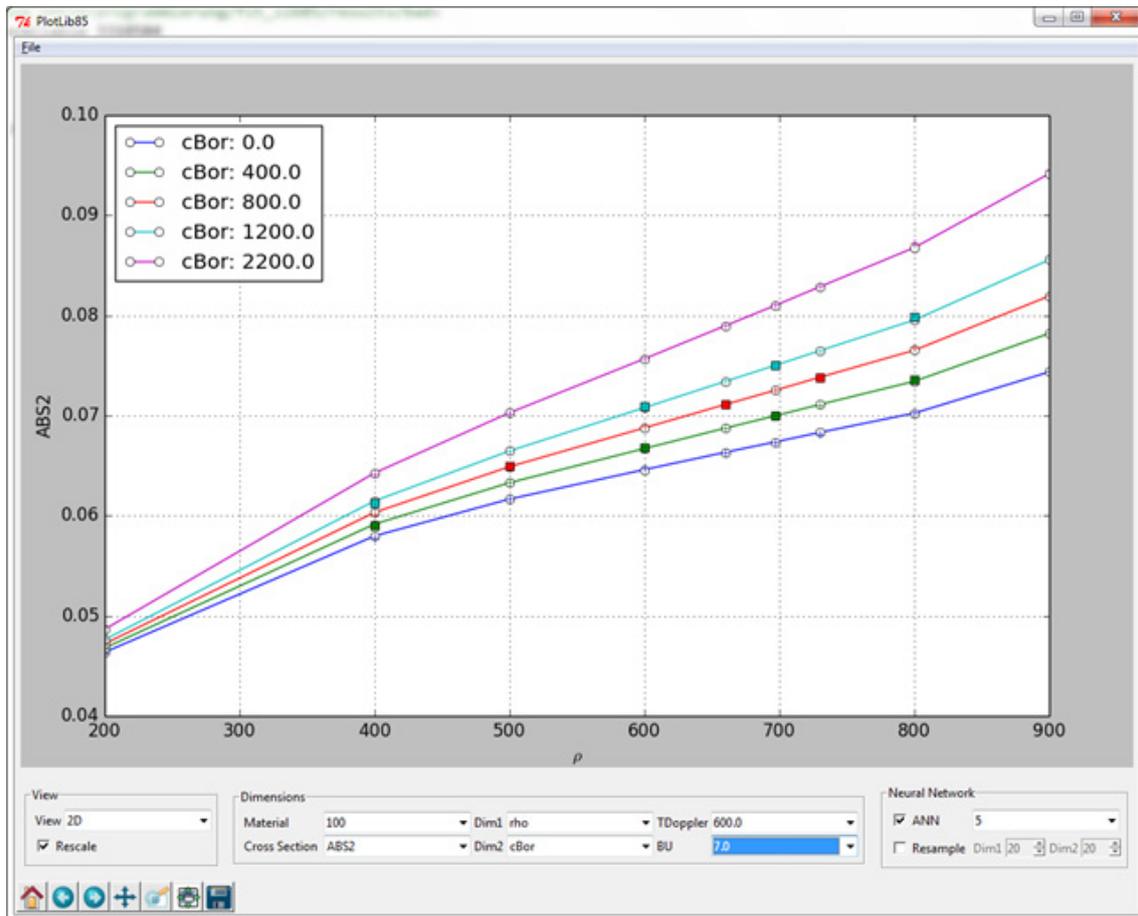


Abb. 6.2 Gleichzeitige Darstellung von nuklearen Daten und ihrer Approximation durch künstliche neuronale Netzwerke mit *plotLib85*

Zum Ausschluss von Dominanzeffekten unter den Eingabegrößen und zur Verbesserung der Konvergenz wurden sowohl Ein- als auch Ausgabe der Trainingsdaten auf das Intervall $[-1,1]$ reskaliert. Wir verwendeten ein stochastisches Initialisierungsverfahren von Bengio und Glorot /GLO 10/ zur Generierung von Anfangswerten der synaptischen Gewichte für den Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno-Algorithmus (BFGS), der die SSE-Zielfunktion minimierte. Die Aktivierungsfunktion der versteckten Neuronen hatte dabei die Form $\tanh(x)$.

Um die Generalisierungsfähigkeit der Netzwerke zu gewährleisten, wurde die einfachste Form von Kreuzvalidierung („holdout“) verwendet. Die dazu programmierten Funktionen erlauben die regelmäßige oder stochastische Stichprobenziehung der Validierungsdaten, wobei die Randpunkte ausgenommen bleiben, um das Definitionsgebiet

zu erhalten. Aus dem manuell abgesuchten Raum der Hyperparameter wählten wir jeweils das Modell mit den wenigsten synaptischen Gewichten.

Ergebnisse: 2D-Daten - Vergleich mit linearer und kubischer Interpolation

Für ein Reflektorwirkungsquerschnittsmaterial mit nur zweidimensionaler Definitionsmenge trainierten wir ein MLP mit einer versteckten Ebene und insgesamt 13 synaptischen Gewichten (siehe Abb. 6.1) und verglichen seine Ausgabe auf der Validierungsmenge mit den Ergebnissen von linearer und kubischer Interpolation. Wie aus Abb. 6.3 deutlich wird, gibt das neuronale Netzwerk die gelernten Daten zufriedenstellend wieder und seine Vorhersagen für die Validierungsdaten sind von ähnlicher Qualität. Im Vergleich mit den Resultaten der anderen beiden Interpolationsformen in Abb. 6.4 liefert das KNN insbesondere in stark nichtlinearen Regionen deutlich bessere und ansonsten vergleichbare Ergebnisse. Statt durch die tabellierten 36 Datenpunkte kann der untersuchte Wirkungsquerschnitt also auch durch die 13 Gewichte des neuronalen Netzwerks approximativ beschrieben werden.

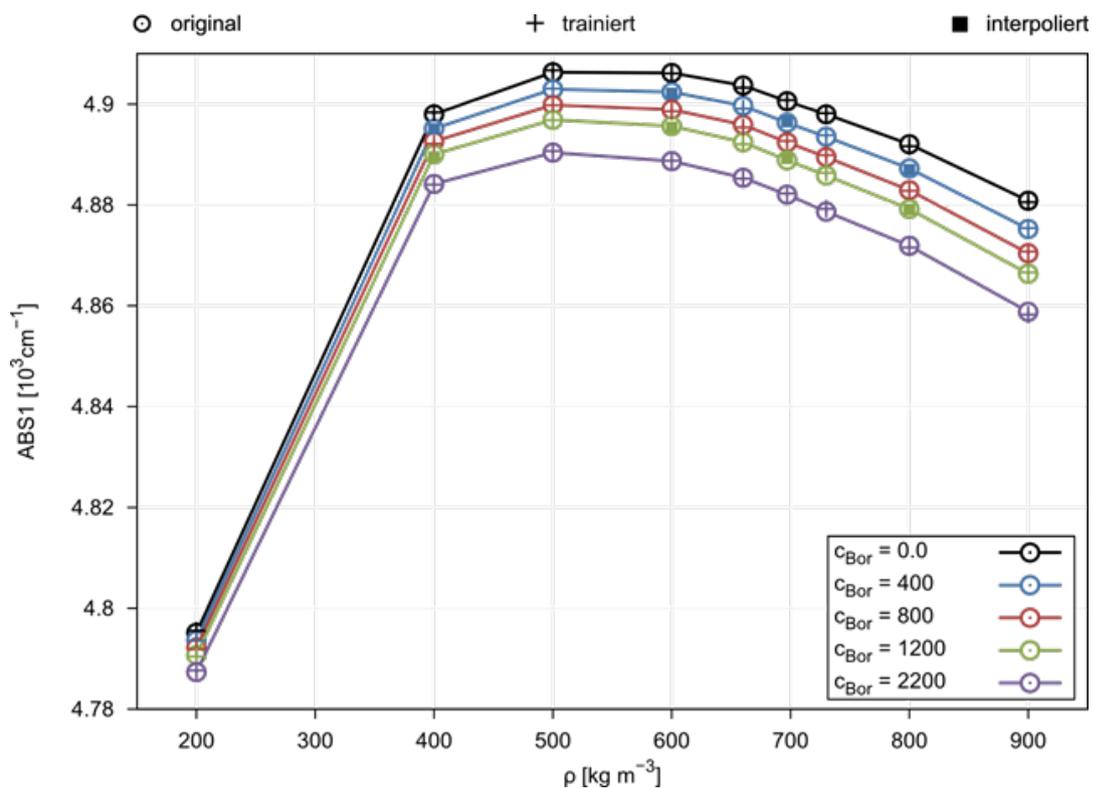


Abb. 6.3 Vergleich des neuronalen Modells aus Abbildung 1 mit Trainings- und Validierungsdaten

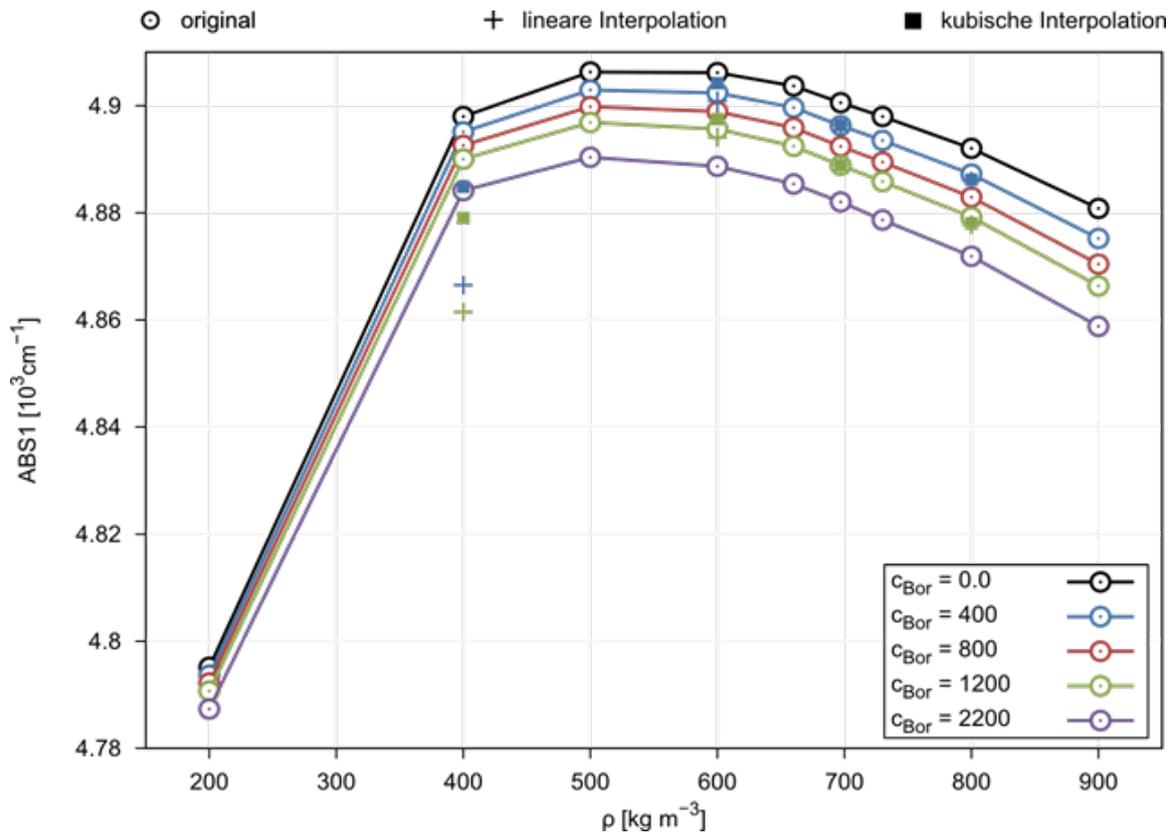


Abb. 6.4 Ergebnisse von linearer und kubischer Interpolation

Ergebnisse: 4-D-Daten

Die typische Lernzeit für ein neuronales Modell eines vierdimensionalen Datensatzes der nuklearen Datenbibliothek lag bei den gewählten Parametern (und unter den gegebenen Randbedingungen, wie verwendete Hard- und Software) im Bereich mehrerer Tage bis zu einer Woche. Die Anzahl der versteckten Neuronen, die Schwellen für den akzeptierten mittleren quadratischen Fehler und die maximale Anzahl von Iteration des Optimierungsalgorithmus wurden von Hand eingestellt, die Neu-Starts mit veränderten Anfangsbedingungen dagegen automatisiert angestoßen.

Der Regressionsprozess war wegen der unbekannt, benötigten Modellkomplexität und der vielen nicht konvergierenden Rechnungen sehr langwierig. Jedes Netzwerk, bei dem die Fehlerfunktion unter den vorgegebenen Zielwert fiel, musste nach dem Training noch anhand der Validierungsdaten seine Generalisierungsfähigkeit unter Beweis stellen.

Ein Beispiel für mit einem neuronalen Netzwerk modellierte vierdimensionale, nukleare Daten, die mittlere Energie pro Spaltung, ist in Abb. 6.5 und Abb. 6.6 dargestellt. Das

Modell kodiert dabei die insgesamt 8100 Datenpunkte mit 31 Gewichten; in der versteckten Ebene befanden sich also fünf Neuronen. Es wird deutlich, dass die Variabilität von κ_{fiss} auf den gezeigten Unterräumen verschieden stark ausgeprägt ist, weswegen der Modellfehler zwar überall eine ähnliche Größenordnung hat, aber auf dem $c_{\text{Bor}}, T_{\text{Doppler}}$ -Unterraum unverhältnismäßig groß erscheint. Sollten die zu modellierenden Daten für nachgelagerte Rechnungen wichtige Strukturen auf verschiedenen Skalen enthalten, würde das neuronale Modell diese unter Umständen nicht gut abbilden. Eine ungleichmäßige Wichtung des Lernfehlers über die Eingabemenge lässt sich im Prinzip in den Trainingsalgorithmus einbauen. Solche Gewichte müssten aber als Vorwissen von außen bereitgestellt werden.

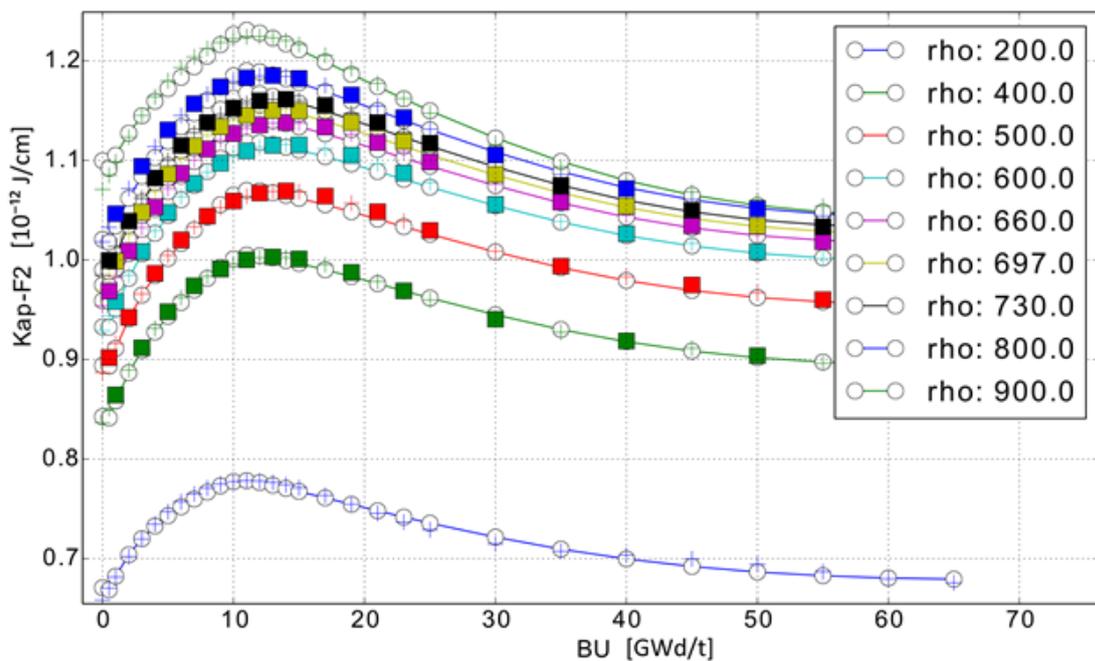


Abb. 6.5 Neuronales Modell der mittleren Energie pro Spaltungsreaktion κ_{fiss} : Abhängigkeit von Abbrand und Moderatordichte

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass der Versuch, die Abhängigkeit aller nuklearen Variablen in der Wirkungsquerschnittsbibliothek zu modellieren, qualitativ weitgehend richtige Modelle hervorbrachte, es allerdings schwierig ist, die Trainings- und Vorhersagefehler unter eine vorgegebene Schwelle zu drücken. Wegen dieser teils unbefriedigenden Qualität der Netzwerke und des hohen zeitlichen Aufwands konnte die Datenbibliothek bis Projektende nicht vollständig modelliert werden. Deswegen war ein Vergleich der Auswirkungen der Approximation mit neuronalen Netzwerken mit der

linearen Interpolation in QUABOX/CUBBOX auf Basis einer Neutronenkinetikrechnung nicht möglich.

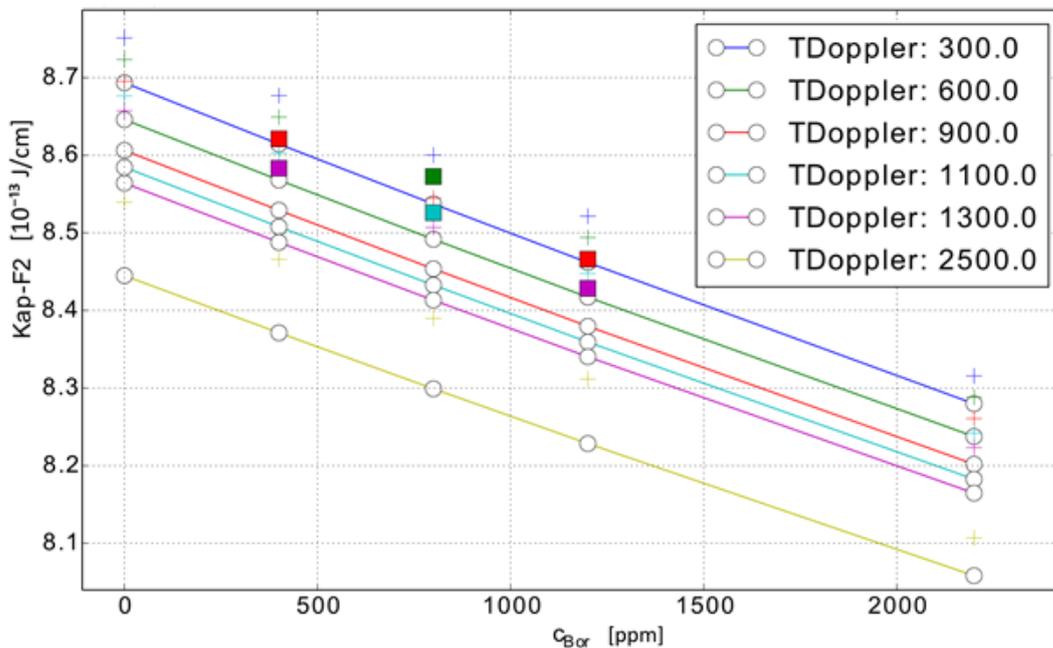


Abb. 6.6 Neuronales Modell der mittleren Energie pro Spaltungsreaktion κ_{fiss} : Abhängigkeit von Borkonzentration und Brennstofftemperatur

Alternativer Lernalgorithmus

Der Versuch, die Lernzeit des Netzwerks durch „algebraic training“ bei erhöhter Anzahl von Neustarts zu reduzieren schlug fehl, da die resultierenden Modelle von geringer Qualität waren. Außerdem verschlingt diese Lernvariante unter Umständen sehr viel Speicher, da die aufzustellende Systemmatrix mit der Anzahl der Trainingsdaten skaliert. Auch als Präkonditionierer für das konventionelle nichtlineare Optimierungsverfahren konnte „algebraic training“ nicht überzeugen: weder ließen sich damit Trainingszeiten reduzieren noch die Ergebnisse verbessern.

6.3 Diskussion

Obwohl das Prinzip zumindest auf den ersten Blick konzeptionell einfach erscheint, lässt der hohe zeitliche und manuelle Aufwand bei der Approximation nuklearer Daten mit neuronalen Netzen den Nutzen der Methode für den vorliegenden Anwendungsfall fraglich erscheinen, da mit weniger menschlichem Zeiteinsatz zusätzliche homogeni-

sierte nukleare Daten zur Verbesserung der linearen Interpolation berechnet werden könnten. Auf der anderen Seite ist die Datenreduktion mit einem erfolgreich trainierten Modell erheblich. Auch die Verfügbarkeit einer globalen analytischen Darstellung der nuklearen Größen ist ein nicht zu unterschätzender Vorteil.

Leider ist es nicht möglich, allein durch eine längere Rechenzeit ein Modell so anzupassen, dass der Vorhersagefehler unter eine beliebige vorgegebene Schranke fällt. Das liegt zum einen daran, dass nicht jedes Modell von seiner Komplexität her imstande ist, die Daten vollständig abzubilden, und zum anderen an der Existenz lokaler Minima der Energiefunktion, die den Optimierungsalgorithmus in bestimmten Untermen- gen des Parameterraums einsperren können und damit auch die automatisierte Bestimmung der Hyperparameter erschweren. Auf der anderen Seite sorgt das Bias-Variance-Dilemma dafür, dass die Modellkomplexität kein Parameter ist, der die Ergebnisse auf Kosten längerer Rechenzeit beliebig verbessert, da ab einem bestimmten Punkt die Generalisierungsfähigkeit leidet. Die Kombination von einer größeren Anzahl von versteckten Neuronen mit Regularisierungstermen ist nur scheinbar ein einfacher Ausweg, da hierdurch weitere vom Benutzer zu treffende Annahmen und einzustellende Parameter eingeführt werden.

Im aktuellen Projekt konnte nur ein kleiner Teil des weitläufigen Arbeitsgebiets der neuronalen Netze beleuchtet werden. Zu wichtigen Aspekten, wie dem sinnvollen Einsatz von Regularisierung, verbesserten Initialisierungsstrategien, algorithmischen Problemen, die sich aus der Verarbeitung größerer Datensätze ergeben und weiteren Anwendungsgebieten wurde nur durch Literaturstudium Erfahrung gesammelt. So werden künstliche neuronale Netze z. B. mit einigem Erfolg in der Bild- und Spracherkennung eingesetzt, worauf auch das Hauptaugenmerk der Forschung liegt, selbst wenn die theoretischen Hintergründe vieler Konstruktions- und Trainingsrezepte nur in unbefriedigenden Maße verstanden sind.

Insgesamt lässt sich konstatieren, dass die Abhängigkeit der Ergebnisse von der Datenqualität bei der Modellierung einer a priori unbekanntes hochdimensionalen Funktion, die mangelnde unmittelbare Kontrollmöglichkeit über die Qualität des gewünschten Modells und die fehleranfälligen manuellen Benutzereingriffe künstliche neuronale Netzwerke zu einem Werkzeug machen, das viel Erfahrung, insbesondere auch mit den zu approximierenden Daten, voraussetzt.

7 Arbeiten zum EU-Projekt NURESAFE

Innerhalb des siebten EU-Rahmenprogramms wird das Projekt „Nuclear Reactor Safety Simulation Platform (NURESAFE)“ durchgeführt, welches nach den Ereignissen in Fukushima verstärkt Aspekte der Sicherheit von Kernkraftwerken im Auslegungsbe- reich beinhaltet und den Anwendern verschiedene Rechenprogramme unter der NURESIM-Plattform bereitstellt. Die Beteiligung am Projekt wird von der EU gefördert und erfordert eine Kofinanzierung von ca. 50 % aus Nicht-EU-Mitteln. Die GRS sieht eine Beteiligung am Vorhaben als wesentlichen Erkenntnisgewinn für die Reaktorsicherheitsforschung in Deutschland und beteiligt sich daher an den Arbeitspaketen „Testumgebung für integrierte Kopplung und Unsicherheits- und Sensitivitätsmethoden“ und „SWR-ATWS mit Unsicherheitsquantifizierung“. Ziele sind die Entwicklung und Ausführung von Simulationsketten zur Analyse von ATWS-Transienten in Siedewasserreaktoren einschließlich der Quantifizierung von Ergebnisunsicherheiten. Dazu werden Rechenprogramme der NURESIM-Plattform verwendet. In diesem Projekt arbeitet die GRS mit deutschen (HZDR, KIT) sowie internationalen Partner (CEA, IRSN, KTH, UPM, PSI) zusammen. Der folgende Abschnitt beschreibt die bislang durchgeführten Arbeiten; die Arbeiten sollen im Rahmen des geplanten Anschlussvorhabens fortgesetzt werden und werden erst Ende 2015 fertiggestellt.

7.1 Codeintegration und -Kopplung

Im Rahmen des NURESAFE-Arbeitspakets "Testumgebung für integrierte Kopplung und Unsicherheits- und Sensitivitätsmethoden" werden die von der GRS angewendeten Codes ATHLET und CTF auf der NURESIM-Plattform implementiert. Außerdem werden diese Codes miteinander sowie mit DYN3D durch die NURESIM-Plattform gekoppelt.

Die Integration der Codes ATHLET und CTF auf der NURESIM-Plattform wurden erfolgreich abgeschlossen. Dazu wurde die sogenannte 'ICoCo'-Schnittstelle als Basis angewendet. Dabei wird eine Reihe von Subroutinen definiert, von denen jede eine dedizierte Funktion enthält wie etwa Initialisierung der Codes, Bestimmung der Zeitschritt-länge, Durchführung des Zeitschritts, usw.

Zwei verschiedene "Meshings" des Kerns werden erzeugt: (1) 3D-Meshing für die Kopplung mit DYN3D. Auf diesem Meshing können TH-Verteilungen (Moderatordichte,

Moderatortemperatur, Brennstofftemperatur, Borkonzentration) aus ATHLET (bzw. CTF) und die Leistung aus DYN3D ausgetauscht werden. (2) 2D-Meshing des Kerneintritts und -austritts. Auf diesem Meshing werden die TH-Randbedingungen aus ATHLET an CTF übergeben. Diese Meshings können für rechteckige sowie hexagonale Geometrien erzeugt werden.

Auf der NURESIM-Plattform ist es möglich die Codes graphisch zu koppeln (siehe Abb. 7.1. Allerdings ist diese Lösung aufwendig und manchmal unübersichtlich. Deshalb ist es für den Anwender empfehlenswert, Python-Skripte zu nutzen.

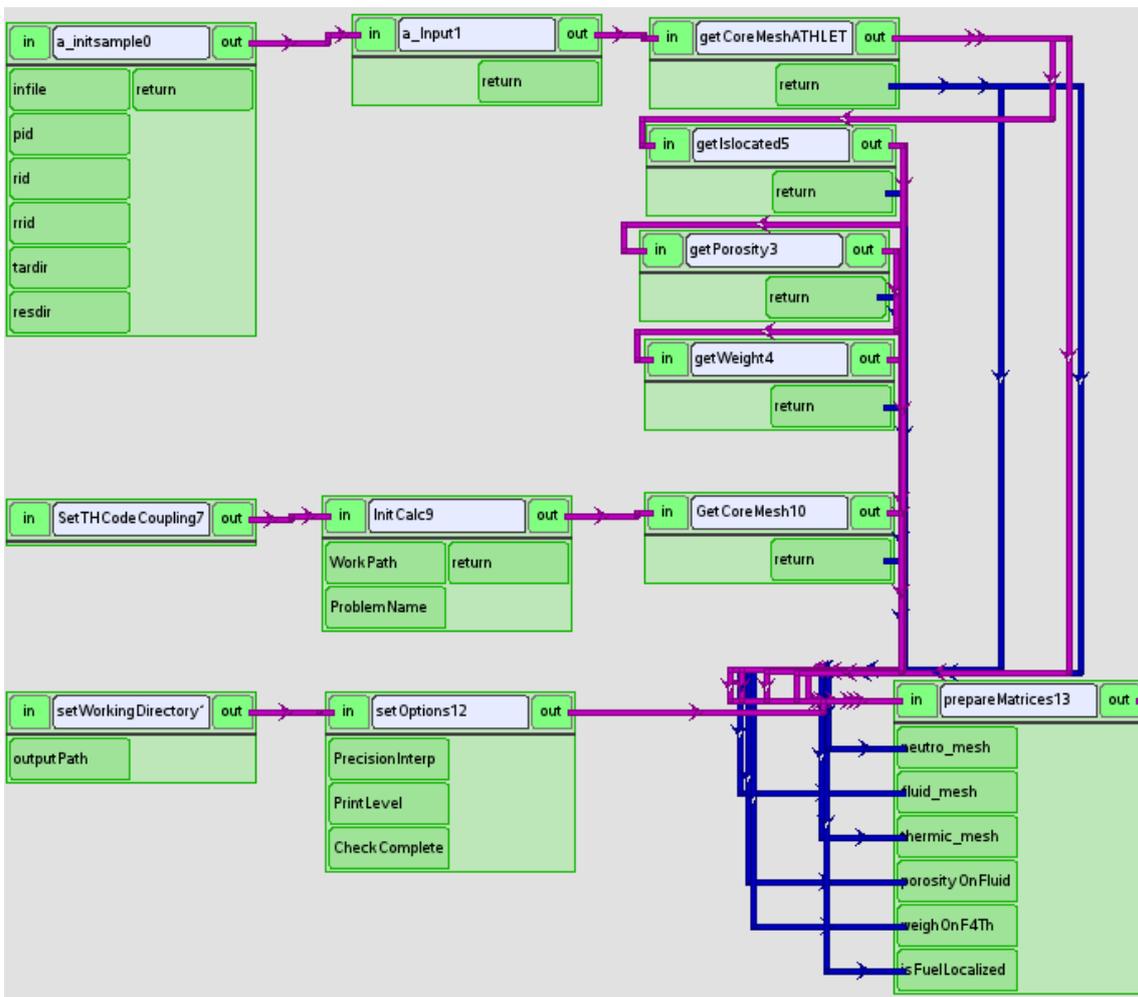


Abb. 7.1 Graphische Kopplungs Oberfläche in NURESIM

Diese Kopplungen wurden u. a. an einem Minikern getestet. Dieser Kern enthält eine 3x3-MOX/UOX-Brennelementanordnung, umgeben von Reflektor, (siehe Abb. 7.2). An diesem Modell wurden Kühlmitteltemperaturschwankungen am Kerneintritt und Steuerstabauswurf simuliert. Auf der NURESIM-Plattform ist es auch möglich den Kern in einer dreidimensionalen Darstellung zu visualisieren (siehe Abb. 7.3).

REFL	REFL	REFL	REFL	REFL
REFL	MOX	MOX	MOX	REFL
REFL	MOX	UOX	MOX	REFL
REFL	MOX	MOX	MOX	REFL
REFL	REFL	REFL	REFL	REFL

Abb. 7.2 Kernbeladung des Minikerns

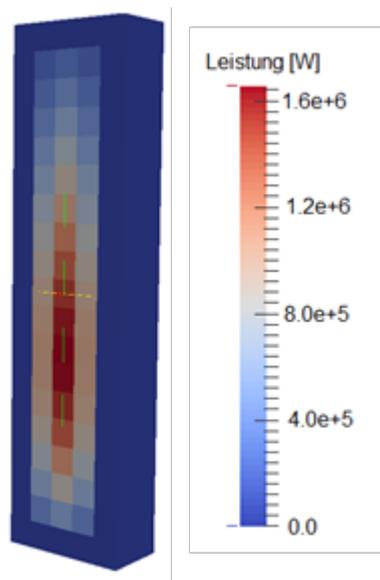


Abb. 7.3 Leistungsverteilung aus einer stationären Rechnung für den Minikern

Zwei technische Berichte /PER14a/ und /PER14b/ beschreiben die Implementierung und die Kopplung der Codes auf der NURESIM-Plattform, siehe auch Anhang C1 und C2.

7.2 SWR-ATWS-Simulation mit Unsicherheitsanalyse

Im Rahmen des NURESIM-Arbeitspakets „BWR ATWS Uncertainty Quantification“ wird eine ATWS-Analyse für den Siedewasserreaktor Oskarshamn-2 in Schweden im Rahmen eines OECD/NEA-Benchmarks bzgl. eines Unstabilitätsereignisses durchgeführt.

Das Oskarshamn-2-SWR-Modell entspricht den vorgegebenen Anlagenspezifikationen. Das gesamte System (siehe Abb. 7.4) besteht aus einem 6-Kanal-Kern mit Bypass, ei-

nem oberen und einem unteren Plenum, einer Rezirkulationsschleife mit Pumpen, einem Downcomer, einem idealisierten Separator, der Dampfkuppel sowie einer Dampfleitung. Eine stationäre Steuerung wird mittels eines allgemeinen Kontrollsystems (GCSM) durchgeführt. Eine zweite Version mit einem Kanal für jeweils zwei Brennelemente (222 Kernkanäle) wurde ebenfalls entwickelt.

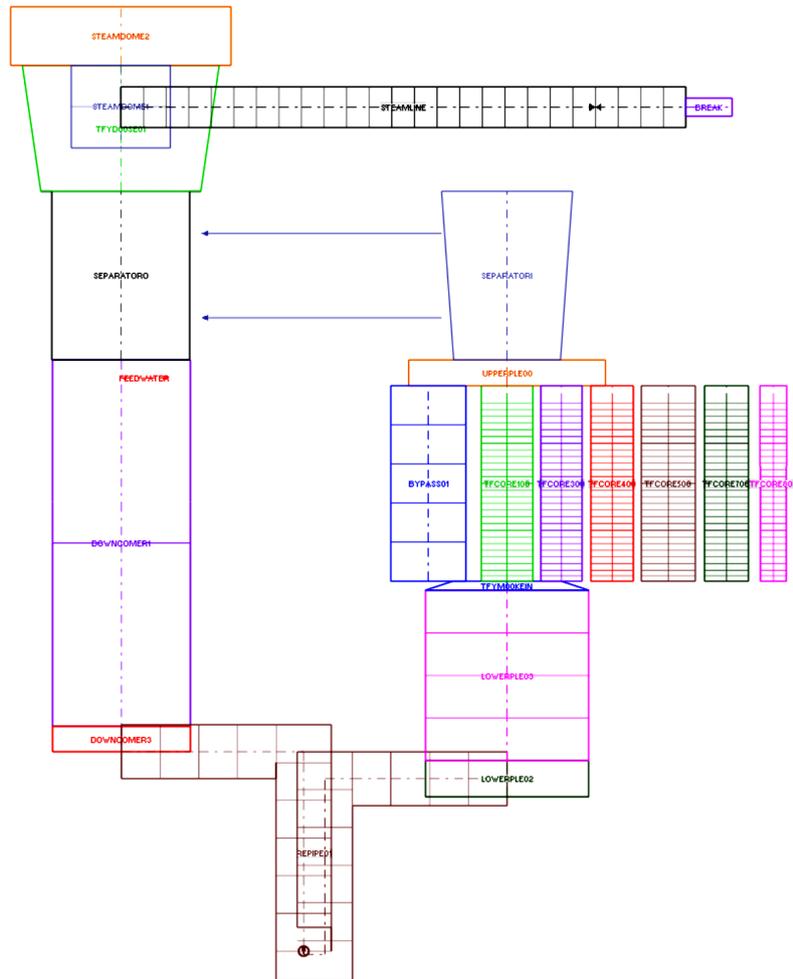


Abb. 7.4 Nodalisation des ATHLET-Modells für Oskarshamn-2

Dieses Modell wurde mit dem Neutronen-Diffusionscode PARCS gekoppelt und anhand des originalen Unstabilitätsereignis überprüft. Die Ergebnisse zeigen gute Übereinstimmung mit den Messdaten und den anderen Simulationscodes (siehe Abb. 7.5 und Tab. 7.1).

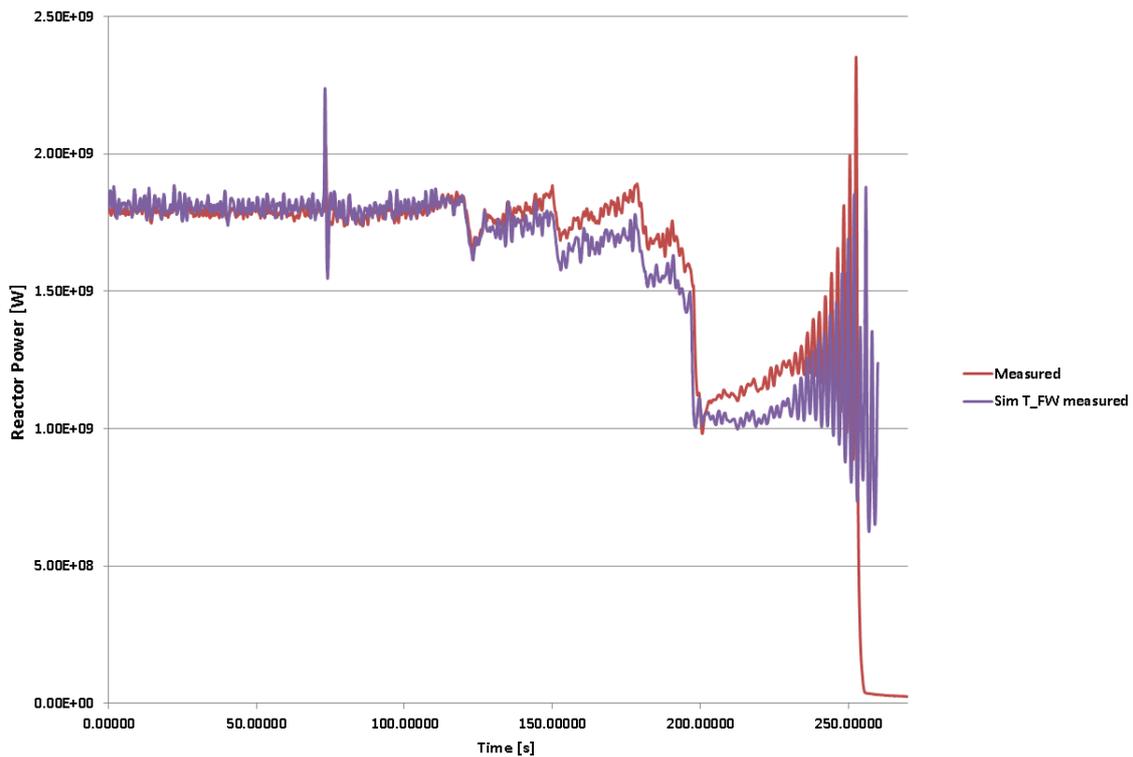


Abb. 7.5 Leistungsverhalten während des-Oskarshamn-2-Instabilitätsereignisses

Tab. 7.1 Steady-State-Ergebnisse für Oskarshamn-2

Betriebsparameter	Messung	Referenzrechnung	ATHLET/PARCS
Reaktorleistung [MW]	1798.6	1802.0	1801.9
Dampfkuppel-Druck [MPa]	6.93	7.000	6.9227
Kerneinlass-Druck [MPa]		7.1162	7.0897
Kernauslass-Druck [MPa]		7.0141	6.9523
Druckverlust [kPa]		102.0	137.4
Speisewasser-Temperatur [K]	457.65	456.62	457.76
Kerneinlass-Temperatur [K]	547.30	543.57	542.93
Dampf-Temperatur [K]		558.48	559.21
Gesamter Kerndurchsatz [kg/s]	5474	5515.90	5447.18
Durchsatz (aktiver Kern) [kg/s]		4800.40	4888.7
Dampfdurchsatz [kg/s]	900	903.10	904.52

Zuletzt wurde ein thermohydraulisches Kernmodell für den Unterkanalcode CTF erstellt. In diesem Modell wird jedes der 444 Brennelemente explizit modelliert. Die Kanalgeometrie und die Druckverlust-Koeffizienten sind durch die Spezifikation vorgegeben. Am Kerneintritt wird eine homogene Temperaturverteilung als Randbedingung verwendet. Der Wert wird der Spezifikation entnommen. Die Massenstromverteilung wird mit CTF unter Berücksichtigung des freien Strömungsquerschnitts und der Druckverluste in den Unterkanälen berechnet.

Das aktuelle Modell hat die folgenden Einschränkungen:

- Der Bypass-Kanal und die Wasserkanäle in den Brennelement-Bündeln sind nicht explizit modelliert.
- Nur der aktive Teil des Kerns wird modelliert. Für die Kopplung mit einem Neutronenkermodell werden zusätzlich Modelle für den unteren und den oberen Reflektor benötigt.

Die Ergebnisse für die axialen Druck- und Dampfblasenverteilungen, die mit dem so entwickelten Modell erhalten wurden, sind in Abb. 7.6 und Abb. 7.7 dargestellt. Die Ergebnisse sind stimmen mit dem erwarteten thermohydraulischen Verhalten einer SWR-Anlage überein.

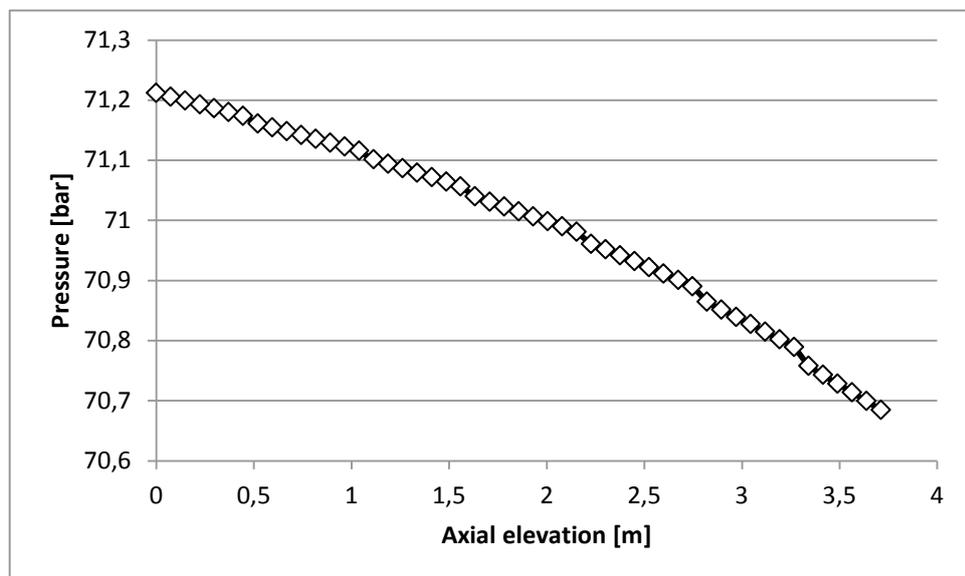


Abb. 7.6 Axiale Druckverteilung aus dem CTF-Modell für Oskarshamn-2

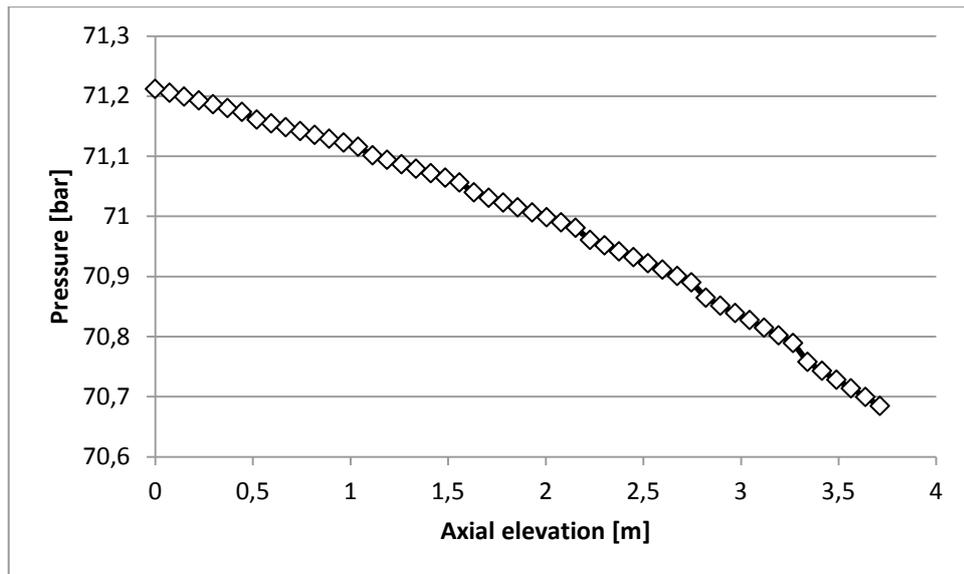


Abb. 7.7 Axiale Dampfblasenverteilung aus dem CTF-Modell für Oskarshamn-2

Im Lauf des Jahres 2015 wird die ATWS-Simulation mit ATHLET-DYN3D auf der NURESIM-Plattform erweitert. Zusätzlich werden Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen durchgeführt.

8 Zusammenfassung

Der vorliegende Bericht beschreibt die durchgeführten Arbeiten und deren Ergebnisse zum BMWi-Forschungsvorhaben RS1503 „Entwicklung und Einsatz von Neutronentransportmethoden und Unsicherheitsanalysen für Reaktorkernberechnungen“. Die Arbeiten dienen dem Ziel der Weiterentwicklung, Validierung und Anwendung von deterministischen und stochastischen Rechenprogrammen, und von Methoden zu Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen, sowie der Erprobung künstlicher neuronaler Netze, zur Bereitstellung einer vollständigen nuklearen Rechenkette.

Bezüglich deterministischer Rechenmethoden wurde das Programm nTRACER, das den Neutronentransport mittels der Methode der Charakteristiken beschreibt, in das nukleare Programmsystem der GRS integriert. Die bisher durchgeführten Berechnungen zeigen sehr gute Übereinstimmung mit Monte-Carlo-Referenzlösungen. Insbesondere ist es nun möglich, gekoppelte Neutronentransport-/Thermohydraulik-Berechnungen mit nTRACER/CTF durchzuführen, als auch Unsicherheitsanalysen mit XSUSA/nTRACER. Hinsichtlich einer effizienten und codeübergreifend vereinheitlichten Datenbank für Wirkungsquerschnitte und Ausgabedaten wurde ein plattformunabhängiges Programm FILEREADER entwickelt, welches mittels der TRITON-Sequenz erzeugte Wirkungsquerschnittsdaten aus dem SCALE-eigenen ASCII-Format in das weitverbreitete hierarchische HDF5-Datenformat überführt. Diese Datenbank kann auch Ergebnisdaten aus Anwendungsrechnungen aufnehmen. Die so erzeugte Datenbank ist leicht erweiterbar und für die Aufnahme zusätzlicher Daten in der Zukunft geeignet. Der für die Berechnung von Kerntransienten, insbesondere auch im Rahmen von Unsicherheitsanalysen, nach wie vor benötigte Diffusionscode QUABOX/CUBBOX wurde einer substantiellen Modernisierung unterzogen. Durch eine Verbesserung der in QUABOX/CUBBOX verwendeten Prozeduren wurde für Testfälle die benötigte CPU-Zeit um mehr als zwei Größenordnungen reduziert. Daneben wurde QUABOX/CUBBOX um die Fähigkeit der Beschreibung borfreier Kerne sowie der Verwendung richtungsabhängiger Brennelement-Diskontinuitätsfaktoren erweitert. Zur konsistenten Homogenisierung von Wirkungsquerschnitten auf Stabzellbasis wurde die Entwicklung und Anwendung der sog. „Superhomogenization“-Methode (SPH) für den Diffusionscode QUABOX/CUBBOX und die Transportcodes NEWT und SERPENT implementiert. Im Rahmen eines Rechenbenchmarks mit IRSN wurden Ganzkernberechnungen durchgeführt. Dabei hat sich ergeben, dass verschiedene numerische Methoden zu geringen Abweichungen in der Ermittlung der Leistungsverteilung führen und

die Unterschiede in den nuklearen Daten einen größeren Einfluss auf die Unsicherheit von integralen Größen wie die Leistungsverteilung haben. Darüber hinaus zeigt die Modellierung des Reflektors ebenfalls einen Einfluss auf die Leistungsverteilung. Das nodale Diffusionsprogramm DYN3D mit Transporterweiterungen wurde in die GRS-Rechenkette integriert und steht nun auch für Simulationen schneller, flüssigmetallgekühlter Reaktoren zur Verfügung. Damit ist vorerst die eigene Entwicklung eines Transportcodes für hexagonale Geometrie nicht nötig.

Bezüglich der Monte-Carlo-Rechenmethoden wurde das Programm MCNP6 dahingehend erweitert, dass detaillierte Teilchendichte- und Temperaturverteilungen für hohe Ortsauflösung effizient berücksichtigt werden können. Dadurch werden insbesondere Anordnungen mit regulären Gittern (rechteckig, hexagonal) mit Hilfe der in MCNP vorgesehenen "Repeated Structures" geometrisch beschrieben, die Material- und Temperaturspezifikation jedoch über interne Funktionen berücksichtigt. Über die eingeführten internen Funktionen können detaillierte Nukliddichte- und Temperaturverteilungen für Brennstoff, Moderator und Strukturmaterialien definiert werden. Alle durchgeführten Modifikationen an MCNP wurden durch Testrechnungen an einer Reihe von Systemen mit Rechtecks- und hexagonaler Geometrie überprüft; diese zeigten korrekte Ergebnisse. Ferner kann die Temperaturinterpolation über die internen Funktionen vorgenommen werden, ohne dass der Standard-Input geändert werden muss. Darüber hinaus ist es nun möglich, die Dopplerverbreiterung der Resonanz-Wirkungsquerschnitte für beliebige Temperaturen während der MCNP-Rechnung („On the Fly“) durchzuführen. MCNP-Berechnungen mit JEFF-3.1.1- und ENDF/B-VII-Daten für alle Anordnungen aus der Serie von VENUS7-Experimenten liefern ausgezeichnete Übereinstimmung im Multiplikationsfaktor. Etwas größere Abweichungen zeigen sich bei der Ermittlung des Anteils von verzögerten Neutronen, der zwar auf die Kritikalität keinen Einfluss hat, aber für das dynamische Verhalten eines Systems mit Spaltmaterial eine wesentliche Rolle spielt. Vorbereitend für eine zukünftige Beschreibung von Kerntransienten mit der Monte-Carlo-Methode wurden gekoppelte Diffusions-/Thermofluidynamik-Rechnungen durchgeführt werden, wobei für ausgewählte Zeitschritte aus der Verteilung der thermodynamischen Parameter eine Monte-Carlo-Neutronenflussverteilung bestimmt wurde. Ebenfalls wurden Ansätze zur direkten Beschreibung von Transienten mit der Monte-Carlo-Methode untersucht. Für die Verarbeitung evaluierter nuklearer Daten wurde das Programmsystem NJOY-2012 in die Berechnungskette aufgenommen und an unterschiedlichen Datenbibliotheken erprobt.

Bezüglich der Methoden zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse wurden die Arbeiten zum UAM-LWR-Benchmark Phase I (Neutronenphysik) vervollständigt. Die Ergebnisse wurden beim UAM-6-Workshop 2012 vorgestellt und dem Benchmark-Team übergeben. Damit liegt ein nahezu vollständiger Satz von Ergebnissen aus Unsicherheitsanalysen mit XSUSA und den entsprechenden Neutronentransportprogrammen für die einzelnen Teile vor: Zell- und Gitterberechnungen für die Reaktoren Three Mile Island 1, Peach Bottom 2, Kozloduy 6, zwei EPR-Kerne mit Uran- und MOX-Beladung, sowie die kritische Anordnung KRITZ 2, Kernberechnungen für Three Mile Island 1 und generische EPR-Kerne. Die stationären Unsicherheitsanalysen von Ganzkernanordnungen des "PWR MOX/ UO_2 Core Transient Benchmark" wurden auf den Fall "Steuerstabauswurf-Transiente" erweitert. Die Ergebnisse der Unsicherheitsanalysen zeigen erheblichen Einfluss der nuklearen Kovarianzdaten auf Ergebnisgrößen wie den Zeitverlauf der Reaktorleistung. Auf der Basis von JENDL-4 wurden in Ergänzung zu den SCALE-Kovarianzmatrizen Unsicherheitsdaten für die pro Spaltung erzeugte Anzahl von verzögerten Neutronen erstellt. Mit den so ergänzten Unsicherheitsdaten wurden Berechnungen durchgeführt, um den Einfluss der Unsicherheit der nuklearen Daten auf den effektiven verzögerten Neutronenanteil zu ermitteln. Dabei spielt die Unsicherheit in der pro Spaltung erzeugten Anzahl von verzögerten Neutronen eine wesentliche Rolle. Vergleiche mit störungstheoretischen Analysen zeigen sehr gute Übereinstimmung. Für die Verwendung mit Monte-Carlo-Codes zur direkten Simulation des Neutronentransports wurde eine Methode entwickelt, bei der Unsicherheitsanalysen mit XSUSA bei gleichzeitiger Berücksichtigung aleatorischer und epistemischer Unsicherheiten durchgeführt werden können („schnelle GRS-Methode“). Die Anwendung dieser Methode mit Kritikalitätsberechnungen liefert Ergebnisse, die mit den Ergebnissen nach der herkömmlichen Methode konsistent sind, bei erheblichen Rechenzeiteinsparungen. Die Validierung der XSUSA-Methode für Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen bzgl. nuklearer Daten wurde durch die Erstellung einer Benchmark-Suite von Anordnungen, in denen zusätzlich zu den Multiplikationsfaktoren Messdaten für andere relevante Größen (Reaktivitätswerte, Stableistungsverteilungen) verfügbar sind, erweitert. Für integrale Ergebnisgrößen (Multiplikationsfaktoren, Reaktivitätswerte) ist hervorragende Übereinstimmung zwischen XSUSA und TSUNAMI-3D zu beobachten. Die XSUSA-Methodologie wurde für HTGR-Systeme mit doppelter Heterogenität angepasst. Die Berechnungskette weist hierbei die Besonderheit auf, dass sie in zwei Durchgängen für die beiden Heterogenitäten durchgeführt werden muss.

Künstliche neuronale Netze wurden zur Interpolation von diskreten nuklearen Wirkungsquerschnittsdaten eingesetzt. An einem zweidimensionalen Testproblem zeigten sich die Vorteile dieser Methode gegenüber der Interpolation mit Polynomen erster und dritter Ordnung in stark nichtlinearen Bereichen der zu approximierenden Funktion. Für höherdimensionale Probleme ist festzustellen, dass die Abhängigkeit der Ergebnisse von der Datenqualität bei der Modellierung einer a priori unbekanntes hochdimensionalen Funktion, die mangelnde, unmittelbare Kontrollmöglichkeit über die Qualität des gewünschten Modells und die fehleranfälligen manuellen Benutzereingriffe künstliche neuronale Netzwerke zu einem Werkzeug machen, das viel Erfahrung, insbesondere auch mit den zu approximierenden Daten voraussetzt.

Die GRS beteiligt sich an den Arbeitspaketen „Testumgebung für integrierte Kopplung und Unsicherheits- und Sensitivitätsmethoden“ und „SWR-ATWS mit Unsicherheitsquantifizierung“ am Projekt „Nuclear Reactor Safety Simulation Platform (NURESAFE)“, das innerhalb des siebten EU-Rahmenprogramms durchgeführt wird. Im Rahmen des Arbeitspakets "Testumgebung für integrierte Kopplung und Unsicherheits- und Sensitivitätsmethoden" wurden die von der GRS angewendeten Codes ATHLET und CTF auf der NURESIM-Plattform erfolgreich implementiert. Im Rahmen des Arbeitspakets „SWR-ATWS mit Unsicherheitsquantifizierung“ wurde ein Modell für den Reaktor Oskarshamn-2 mit PARCS als Neutronen-Diffusionscode entwickelt und anhand des originalen Unstabilitätsereignisses überprüft. Die Ergebnisse zeigen gute Übereinstimmung mit den Messdaten. Die Arbeiten zu NURSAFE sind noch nicht abgeschlossen und werden bis Ende 2015 durch eine ATWS-Simulation mit ATHLET-DYN3D auf der NURESIM-Plattform sowie entsprechende Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen erweitert.

Literaturverzeichnis

- /ANL 05/ Argonne National Laboratory, Korea Atomic Energy Research Institute, Purdue University, Seoul National University, The Numerical Nuclear Reactor for High Fidelity Integrated Simulation of Neutronic, Thermal-Hydraulic and Thermo-Mechanical Phenomena, (2005)
- /BER 03/ W. Bernnat, S. Langenbuch, W. Zwermann, Monte Carlo Large Scale Reactor Physics Calculations, Supercomputing in Nuclear Applications SNA 2003, Paris, France (2003)
- /BER 10/ W. Bernnat, M. Mattes, A. Pautz, W. Zwermann, Monte Carlo Applications with Consideration of Detailed Material Composition and Temperature Distributions in LWR and HTR, SNA+MC 2010, Tokyo, Oct. 18-21 (2010)
- /BIS 96/ C.M. Bishop, Neural Networks for Pattern Recognition, Oxford University Press, (1996)
- /BLA 12/ D. Blanchet, L. Buiron, N. Stauff, T.-K. Kim, T. Taiwo, AEN – WPRS Sodium Fast Reactor Core Definitions, <http://www.oecd-neo.org/science/wprs/sfr-taskforce/WPRS-AEN-SFR-Cores-V1.2.pdf>
- /BRE 97/ M. M. Bretscher, Evaluation of Reactor Kinetics Parameters Without the Need for Perturbation Codes, Proc. Int. Meeting on Reduced Enrichment for Research & Test Reactors, Jackson Hole, Wyoming. USA, (1997)
- /BRO 12/ F.B. Brown, W.-R. Martin, G. Yesilyurt, S. Wilderman, Progress with On-The-Fly neutron Doppler Broadening in MCNP, Trans. Am. Nuc. Soc. 106 (2012)
- /BLA 12/ D. Blanchet, L. Buiron, N. Stauff, T.K. Kim, T. Taiwo, AEN – WPRS Sodium Fast Reactor Core Definitions, <http://www.oecd-neo.org/science/wprs/sfr-taskforce/WPRS-AEN-SFR-Cores-V1.2.pdf>
- /BUI 14/ L. Buiron et al., Evaluation of Large 3600M Wth Sodium-cooled Fast Reactor Neutronic OECD Benchmarks, PHYSOR 2014, Kyoto, Japan (2014)

- /C5G7 03/ Benchmark on Deterministic Transport Calculations Without Spatial Homogenisation - A 2-D/3-D MOX Fuel Assembly Benchmark, OECD, Paris, (2003)
- /DOW 02/ T. Downar, et al., PARCS: Purdue Advanced Reactor Core Simulator, PHYSOR 2002, Oct. 7 – 10, Seoul, Korea (2002)
- /EIS 00/ L. D. Eisenhart et al., CORETRAN-01: A Three-Dimensional Program for Reactor Core Physics and Thermal-Hydraulic Analysis Volume 1: Theory and Numerical Analysis, Computer Simulation and Analysis Report, WO-3574, Revision 3 (2000)
- /GAL 11/ L. Gallner, M. Klein, B. Krzykacz-Hausmann, A. Pautz, W. Zwermann, Sampling Based Nuclear Data Uncertainty Analysis in Reactor Calculations, ANS Annual Meeting 2011, Hollywood, FL, USA (2011)
- /GLO 10/ X. Glorot, Y. Bengio, Understanding the Difficulty of Training Deep Feed-forward Neural Networks, JMLR W&CP: Proceedings of the Thirteenth International Conference on Artificial Intelligence and Statistics; 249-256 (2010)
- /GRE 01/ N.M. Greene, M.E. Dunn, The AMPX-2000 Operating System for Producing Continuous Energy and Multi-Group Cross Sections from Basic Data Libraries Using the ENDF/B-6 Formats, International Conference on Nuclear Data for Science and Technology (ND2001), Tsukuba, Japan (2001)
- /GRU 00/ U. Grundmann, U. Rohde, S. Mittag, DYN3D – Three Dimensional Core Model for Steady-State and Transient Analysis of Thermal Reactors, ANS Int. Topical Meeting on Advances in Reactor Physics, PHYSOR 2000, Pittsburgh, USA, May 7-11 (2000)
- /GUI 14/N. Guilliard, W. Bernnat, J. Starflinger, I. Pasichnyk, W. Zwermann, Monte Carlo Neutronics Analysis of Sodium-Cooled Fast Reactor Benchmark with OTF Temperature and Burnup Treatment, PHYSOR 2014, Kyoto, Japan (2014)

- /HER 11/ M. Herman, Development of ENDF/B-VII.1 and Its Covariance Components, Journal of the Korean Physical Society, 59, pp.1034–1039 (2011)
- /HOO 09/ J. E. Hoogenboom, W. R. Martin, A Proposal for a Benchmark to Monitor the Performance of Detailed Monte Carlo Calculation of Power Densities in a Full Size Reactor Core, M&C 2009, Saratoga Springs, New York (2009)
- /HOS 08/ K. Hossain, M. Buck, N. Ben Said, W. Bernnat, G. Lohnert, Development of a fast 3D thermal-hydraulic tool for design and safety studies for HTRS, Nuclear Engineering and Design 238, S. 2976 – 2984 (2008)
- /IAE 10/ IAEA, BN-600 Hybrid Core Benchmark Analyses, IAEA-TECDOC-1623 (2010)
- /IAE 14/ HTGR Reactor Physics, Thermal-hydraulics and Depletion Uncertainty Analysis - Prismatic HTR benchmark Definition: Phase I, Draft Rev. 2 and HTGR Reactor Physics, Thermal-hydraulics and Depletion Uncertainty Analysis - PBR 250MW Benchmark Definition, Draft Revision 2. IAEA (2014), <https://www.oecd-neo.org/science/wprs/egrs/tb/UAM/index.html>
- /ING 15/ JJ. Ingremeau, M. Cordiez, Flexblue Core Design: Optimisation of Fuel Poisoning for a Soluble Boron Free Core with Full or Half Core Refuelling, ICAPP 2015, Nizza, Frankreich (2015)
- /KIM 12/ T.-K. Kim, B. Feng, N. Stauff, and T. Taiwo, Numerical Results for 1000 MWth Sodium-cooled Fast Reactor Benchmark, Progress Meeting of SFR Benchmark Task Force, OECD/NEA-WPRS, Chicago, USA (2012)
- /KLE 11/ M. Klein, L. Gallner, B. Krzykacz-Hausmann, A. Pautz, W. Zwermann, Influence of Nuclear Data Uncertainties on Reactor Core Calculations. Kerntechnik 76(2011)03, S. 174-178
- /KOD 11/ I. Kodeli, The SUS3D Code for Cross-Section Sensitivity and Uncertainty Analysis – Recent Development, Trans. Am. Nucl. Soc., 104, S.791-793 (2011)

- /KOL 91/ V.A. Kolmogorov, On the Representation of Continuous Functions of Several Variables as Superpositions of Continuous Functions of one Variable and Addition, In: V.M. Tikhomirov: Selected Works of A. N. Kolmogorov; Mathematics and Its Applications; 383-387; Springer (1991)
- /KON 08/ J. Koning, D. Rochman, Towards Sustainable Nuclear Energy: Putting Nuclear Physics to Work, Annals of Nucl. Energy, 35, pp.2024-2030 (2008).
- /KOZ 06/ T. Kozlowski, T. J. Downar, Pressurised Water Reactor MOX/UO₂ Core Transient Benchmark, Final Report, December 2006, NEA/NSC/DOC(2006)
- /KRZ 94/ B. Krzykacz, E. Hofer, M. Kloos, A Software System for Probabilistic Uncertainty and Sensitivity Analysis of Results from Computer Models, International Conference on Probabilistic Safety Assessment and Management (PSAM-II), San Diego (1994)
- /LAN 04/ S. Langenbuch, K.-D. Schmidt, K. Velkov, Analysis of OECD/NRC Turbine Trip Benchmark by the Coupled-Code System ATHLET-QUABOX/CUBBOX, Nucl. Sci. Eng. 148, pp. 270-280 (2004)
- /LAN 09/ S. Langenbuch, A. Pautz, W. Zwermann, W. Bernnat, M. Mattes, Influence of Nuclear Data Evaluations on Full Scale Reactor Core Calculations, M&C 2009, Saratoga Springs, New York, May 3-7, (2009)
- /LEP 12/ J. Leppänen, Serpent - a Continuous-energy Monte Carlo Reactor Physics Burnup Calculation Code, VTT Technical Research Centre of Finland (2012)
- /LER 98/ G. Lerchl, H. Austregesilo, ATHLET Mod 1.2 Cycle A, User's Manual, Rev. 1, GRS-P-1/Vol. 1 (1998)
- /MAC 12/ R.E. MacFarlane, D.W. Muir, R.M. Boicourt, A.C. Kahler, The NJOY Nuclear Data Processing System, Version 2012, Los Alamos Report LA-UR-12-27079 (2013)

- /NEA 03/ Benchmark on the Three-dimensional VENUS-2 MOX Core Measurements – Final Report, NEA/NSC/DOC(2005)17
- /NEA 05/ VVER-1000 MOX Core Computational Benchmark – Specification and Results, NEA/NSC/DOC(2007)4
- /NEA 07/ OECD Benchmark for Uncertainty Analysis in Best-Estimate Modeling (UAM) for Design, Operation and Safety Analysis of LWRs, NEA/NSC/DOC(2007)4
- /NEA 13/ International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments, OECD/NEA, NEA/NSC/DOC(95)03, Paris (2013)
- /NEA 14/ International Handbook of Evaluated Reactor Physics Benchmark Experiments, OECD/NEA, NEA/NSC/DOC(2006)1, Paris (2014)
- /NEU 90/ Python Software Foundation, Neurolab,
<https://pypi.python.org/pypi/neurolab> © 1990-2014
- /NEU 10/ J. C. Neuber, Proposal for an UACSA benchmark study on the reactivity impacts of manufacturing tolerances of parameters characterizing a fuel assembly configuration, <http://www.oecd-nea.org/science/wpncs/UACSA/>
- /PAS 10/ I. Pasichnyk, M. Klein, A. Pautz, K. Velkov, W. Zwermann, Modeling of Highly Heterogeneous LWR Reactor Cores with Advanced Options of the QUABOX/CUBBOX Core Simulator, Jahrestagung Kerntechnik 2010, Berlin (2010)
- /PAU 03a/ A. Pautz, A. Birkhofer, DORT-TD: A Transient Neutron Transport Code with Fully Implicit Time Integration, Nucl. Sci. Eng. Vol. 145, pp. 299-319, (2003)
- /PEL 13/ D.B. Pelowitz (Hrsg.), MCNP6 User's Manual Version 1.0, Los Alamos Report LA-CP-13-00634, Rev. 0 (2013)
- /PER 14a/ Y. Périn, Description of the ATHLET API, NURESAFE-Bericht D11.15 (2014)

- /PER 14b/ Y. Périn, Description of the CTF API, NURES SAFE-Bericht D11.15 (2014)
- /PER 15/ Y. Périn, A. Aures, V. Salino, Challenge of PWR new core design simulation: a focus on uncertainties due to nuclear data and reflector modelling, Progress in Nuclear Energy, 2015, im Druck.
- /PET 83/ K. Petersen, Zur Sicherheitskonzeption des Hochtemperaturreaktors mit natürlicher Wärmeableitung aus dem Kern im Störfall, KFA Jülich Jül-1872, (1983)
- /PON 10/ A. Ponomarev, C.H.M. Broeders, R. Dagan, M. Becker, Evaluation of Neutron Physics Parameters and Reactivity Coefficients for Sodium Cooled Fast Reactors, ICAPP '10. San Diego, CA, USA, (2010)
- /PUE 09/ F. Puente Espel, M. Avramova, K. Ivanov, High Accuracy Modeling for Advanced Nuclear Reactor Core Designs Using Monte Carlo Based Coupled Calculations, M&C 2009, Saratoga Springs, New York, May 3-7, (2009)
- /QC 78/ QUABOX/CUBBOX, Version 02: Ein Grobgitterverfahren zur Lösung von Neutronendiffusionsgleichungen, Programmbeschreibung, GRS-A-160 (1978)
- /SAN 09/ V. Sanchez, A. Al-Hamry, Development OF A Coupling Scheme between MCNP and COBRA-TF for the Prediction of the Pin Power of a PWR Fuel Assembly, M&C 2009, Saratoga Springs, New York, May 3-7, (2009)
- /SAN 09a/ A. Santamarina et al., The JEFF-3.1.1 Nuclear Data Library, JEFF Report 22, ISBN 978-92-64-99074-6, (2009)
- /SCA 09/ SCALE: A Modular Code System for Performing Standardized Computer Analyses for Licensing, Version 6, ORNL/TM-2005/39, (2009)
- /SCI 15/ SciPy Developers, Scientific Computing Tools for Python, <http://www.scipy.org> © 2015
- /SEU 04/ A. Seubert, S. Langenbuch, W. Zwermann, Entwicklung des zeitabhängigen 3D-SN-Neutronen-Transportcodes TORT-TD, GRS-A-3237, (2004)

- /SEU 08/ A. Seubert, K. Velkov, S. Langenbuch, The Time-Dependent 3D Discrete Ordinates Code TORT-TD with Thermal-Hydraulic Feedback by ATHLET Models, PHYSOR 2008, September 14-19, Interlaken, Switzerland, (2008)
- /SJE 10/ B. L. Sjenitzer, J. E. Hoogenboom, A Monte Carlo Method for Calculation on the Dynamic Behaviour of Nuclear Reactors, SNA+MC 2010, Tokyo, Oct. 18-21, (2010)
- /SNU 09/ Seoul National University, Department of Nuclear Engineering, nTRACER Homepage: <http://neutron.snu.ac.kr/research02-1.html>
- /STA 12/ N.E. Stauff et al., Evaluation of Medium 1000 MWth Sodium-cooled Fast Reactor Neutronic OECD Benchmarks, Proceedings for PHYSOR 2014, Kyoto, Japan (2014)
- /TER 09/ A. Tereshonok et al., Description of a Transient Caused by the Switching-Off of One of the Four Operating MCP at Nominal Reactor Power at NPP Kalinin Unit 3, Final Draft, NEA/NSC/DOC(2009)
- /UAC 08/ Expert Group on Uncertainty Analyses for Criticality Safety Assessment, <http://www.oecd-nea.org/science/wpncs/UACSA>
- /WIA 06/ D. Wiarda, M.E. Dunn, PUFF-IV: A Code for Processing ENDF Uncertainty Data into Multigroup Covariance Matrices, ORNL/TM-2006/147/R1, (2006)
- /WOH 72/ H. Wohland, R. Rühle, Abbrand, ein Modul für Abbrandberechnungen in RSYST, IKE-Bericht 4-10, IKE, Universität Stuttgart (1972)
- /YOU 64/ J.C. Young, D. Huffmann, Experimental and Theoretical Neutron Spectra, General Dynamics Corp., San Diego, Calif. General Atomic Div. USA, GA-5319 (1964)
- /ZUE 13/ E. Zuev, Neurolab Homepage: <https://code.google.com/p/neurolab/>
- /ZWE 08/ W. Zwermann, S. Langenbuch, B.-C. Na, E. Sartori, U.-K. Wehmann, Summary of the Results of the VENUS-7 Benchmark, PHYSOR 2008, September 14-19, Interlaken, Switzerland, (2008)

- /ZWE 09/ W. Zwermann, B. Krzykacz-Hausmann, L. Gallner, A. Pautz, Influence of Nuclear Covariance Data on Reactor Core Calculations, WONDER 2009, Sep. 29 – Oct. 2, Cadarache (2009)
- /ZWE 10a/ W. Zwermann, B. Krzykacz-Hausmann, L. Gallner, A. Pautz, Uncertainty Analyses with Nuclear Covariance Data in Reactor Core Calculations, Jahrestagung Kerntechnik 2010, May 04-06, Berlin, (2010)
- /ZWE 10b/ W. Zwermann, B. Krzykacz-Hausmann, L. Gallner, A. Pautz, M. Mattes, Uncertainty Analyses with Nuclear Covariance Data in Reactor Core Calculations. Int. Conf. Nuclear Data for Science and Technology ND 2010, Jeju, Korea (2010)
- /ZWE 11/ W. Zwermann, L. Gallner, M. Klein, B. Krzykacz-Hausmann, A. Pautz, D. Wiarda, M. L. Williams, M. A. Jessee, B. T. Rearden, Nuclear Data Uncertainty Analysis for a Fuel Assembly Criticality Benchmark. Intl. Conf. on Nuclear Criticality (ICNC) 2011, Edinburgh (2011)

Abbildungsverzeichnis

Abb. 3.1	Brennelement-Layout des C5G7-Benchmarks.....	8
Abb. 3.2	Axial gemittelte Stableistungsverteilung aus nTRACER für das C5G7-Benchmark.....	9
Abb. 3.3	Relative Abweichung in % der axial gemittelten Stableistungsverteilung aus nTRACER zur MCNP-Referenzlösung für das C5G7-Benchmark	10
Abb. 3.4	Kernbeladung (1/4-Kern) im Purdue-Benchmark	11
Abb. 3.5	Axiales Leistungsprofil von nTRACER und MCNPATHLET im Purdue-Benchmark.....	12
Abb. 3.6	Relative Brennelementleistungen aus nTRACER. Rot: BE mit der höchsten Leistung, grün: BE mit der geringsten Leistung	13
Abb. 3.7	Relative Abweichung in den Brennelement-Leistungen zwischen nTRACER. Und MCNP-ATHLET Rot: größte positive Abweichungen, grün: größte negative Abweichungen.....	13
Abb. 3.8	Datenübergabe von Spektralcodes an Transportcodes ohne und mit generischer Datenbank.....	17
Abb. 3.9	Derzeit implementierte Verwendung der generischen Datenbank im HDF5-Format.....	18
Abb. 3.10	Darstellung des Auszugs aus der generischen Datenbank, die die Wirkungsquerschnitte enthält, mittels HDFView.....	18
Abb. 3.11	Darstellung des Ergebnisteils der generischen Datenbank mittels HDFView.	20
Abb. 3.12	Hotspotanalyse des nichtoptimierten Q/C-Codes.....	22

Abb. 3.13	CROLRA-Codeabschnitt mit dem gefundenen Hotspot	23
Abb. 3.14	Belegung der Speicherplätze bei den Komponenten des Fortran- Arrays	23
Abb. 3.15	Hotspotanalyse nach der ersten Optimierung	24
Abb. 3.16	Hotspotanalyse des optimierten Q/C-Codes	26
Abb. 3.17	3D-Modell des C5G7-Benchmarks für QUABOX/CUBBOX	28
Abb. 3.18	Mittlere Relative Abweichung in jeder axialen Ebene im 3D-Modell	32
Abb. 3.19	Generische EPR-basierte Kernbeladungen aus dem UAM-LWR- Benchmark mit UOX und UOX/MOX.....	33
Abb. 3.20	Vergleich der mit CRONOS und QUABOX/CUBBOX berechneten Leistungsverteilungen des EPR-UOX-Kerns.....	34
Abb. 3.21	Vergleich der mit CRONOS und QUABOX/CUBBOX berechneten Leistungsverteilungen des EPR-UOX/MOX-Kerns.....	34
Abb. 3.22	Vergleich der mit CRONOS und QUABOX/CUBBOX berechneten Leistungsverteilungen des EPR-UOX/MOX-Kerns.....	37
Abb. 3.23	Abweichungen für den UOX-Kern zwischen QUABOX/CUBBOX und KENO (links) und zwischen DONJON und KENO (rechts).....	37
Abb. 3.24	Abweichungen zwischen QUABOX/CUBBOX und KENO für den UOX-Kern im gestörten Kernzustand.....	38
Abb. 3.25	BFS-Kernanordnung	40
Abb. 3.26	BFS-Brennelemente (Detail).....	41
Abb. 3.27	Homogenisierung der BFS-Brennelemente.....	41
Abb. 3.28	Axiale Zusammensetzung der BFS-Brennelemente.....	42

Abb. 3.29	Axiale Zusammensetzung der BFS-Brennelemente.....	43
Abb. 3.30	Multiplikationsfaktoren der BFS-Kernanordnungen	43
Abb. 4.1	MCNP-Modell eines DWR- Reaktorkerns (1/4-Kern-Darstellung) basierend auf "Repeated Structures": Eingabebeispiel für ein MOX- Brennelement mit unterschiedlichen Pu-fiss-Gehalten und WABA- Absorberstäben	47
Abb. 4.2	Interne Funktion zur Zuweisung der Materialspezifikation und Temperatur für ein Gitter-Element (Stabzelle).....	47
Abb. 4.3	Vergleich von temperaturverbreiterten Resonanzquerschnitten für U- 238 und Pu-240, berechnet direkt für 500K und interpoliert zwischen 400 und 800K	49
Abb. 4.4	Unendlicher Multiplikationsfaktor als Funktion von $T^{1/2}$ für eine LWR- Zelle mit unterschiedlichen Moderator/Brennstoff-Verhältnissen: Punkte für welche Querschnitte direkt berechnet wurden und interpolierte Punkte.....	50
Abb. 4.5	Vergleich von gemessenen und berechneten Spektren in mit $GdCl_3$ vergiftetem H_2O für die Temperaturen 393K, 423K und 600K (direkt erstellt und interpoliert)	51
Abb. 4.6	Totaler Streuquerschnitt für H in H_2O für 323K und 573K (direkt erstellt und interpoliert)	52
Abb. 4.7	Neutronenspektren in Graphit für verschiedene Temperaturen: Interpolation der thermischen $S(\alpha,\beta)$ -Daten und kontinuierlichen Resonanzdaten bzw. Polynomfit (OTF) für die kontinuierlichen Resonanzdaten	53
Abb. 4.8	Relativer Unterschied bezüglich der Leistungsverteilung, berechnet mit Standard-Input und mittels interner Funktion für ein 2x2-BE- Cluster	54

Abb. 4.9	Kernkonfiguration und BE-Spezifikation des Purdue-Benchmarks	55
Abb. 4.10	Axial gemittelte Brennelementleistungen für das Purdue-Benchmark, berechnet mit MCNP	56
Abb. 4.11	Relative Unterschiede der Brennelementleistungen für das Purdue- Benchmark: QUABOX/CUBBOX-ATHLET und MCNP-ATHLET	56
Abb. 4.12	Vergleich der axial gemittelten Brennstableistungen für das UOX/MOX DWR-(Purdue) Benchmark, berechnet mit MCNP- ATHLET und PARCS-TRACE für ausgewählte Brennelemente.....	57
Abb. 4.13	Relativer Unterschied in der brennstabweisen (axial gemittelten) Leistung, berechnet mit CORETRAN und MCNP-ATHLET für das Brennelement C8 des Purdue-Benchmarks	58
Abb. 4.14	Axial gemittelte Brennstabtemperaturen im Brennelement C8 des Purdue-Benchmarks	58
Abb. 4.15	Ablaufdiagramm zur MCNP6-ATHLET-Kopplung.....	59
Abb. 4.16	Kernauslegung des VVER-1000-Benchmarks	64
Abb. 4.17	Brennelement des VVER-1000 mit 3.9 % mittlerer U-235- Anreicherung und 6 Gd-Stäben	64
Abb. 4.18	Kern und Radialreflektor des WWR-1000	65
Abb. 4.19	Axial gemittelte totale Flussverteilung im VVER-1000 bei Vollast nach 128.5 Volllasttagen Betrieb	66
Abb. 4.20	Axial gemittelte relative Leistungsverteilung für den Anfangszustand des Benchmarks nach 128.5 Volllasttagen: relative Leistung (oben), Abweichung in % zum Benchmark-Wert (unten).....	67
Abb. 4.21	Brennstabanordnung beim Monte Carlo Performance Benchmark	68

Abb. 4.22	Axial gemittelte Leistungsverteilung für das Monte Carlo Performance Benchmark	68
Abb. 4.23	Axiale relative Leistungsverteilung (Mittalebene X-Z) beim Monte Carlo Performance Benchmark.....	69
Abb. 4.24	Axial gemittelte relative Leistungsverteilung beim VVER-1000-Benchmark, HFP: MCNP6 mit kontinuierlichen Daten (oben), relativer Unterschied in % zu Multigruppen Daten (unten).	71
Abb. 4.25	Axial gemittelte relative Leistungsverteilung beim VVER-1000-Benchmark, HZP: MCNP6 mit kontinuierlichen Daten (oben), relativer Unterschied in % zu Multigruppen Daten (unten)	72
Abb. 4.26	Axial gemittelte relative Leistungsverteilung beim VVER-1000-Benchmark, HFP: MCNP6 mit Multigruppen Daten, konstante Temperatur (oben), relativer Unterschied in % zu MCNP6/Multigruppen Daten-ATHLET-Kopplung (unten).....	73
Abb. 4.27	Thermische Flussverteilung für das VVER-1000-Benchmark, berechnet mit MCNP6 und kontinuierlichen Daten.....	74
Abb. 4.28	Viertelkern-Modell eines SWR	75
Abb. 4.29	Axial gemittelte Leistungsverteilung in einem SWR-Erstkern	76
Abb. 4.30	Leistungsverteilung im unteren Bereich eines SWR-Erstkerns.....	76
Abb. 4.31	Leistungsverteilung im mittleren Bereich eines SWR-Erstkerns	77
Abb. 4.32	Leistungsverteilung im oberen Bereich eines SWR-Erstkerns	77
Abb. 4.33	Brennstofftemperatur im axialen Maximum eines SWR-Erstkerns	78
Abb. 4.34	Axiale Verteilung der Kühlmitteldichte in 3 ausgewählten Brennelementen auf der Diagonale: Zentrum, 7. Reihe, 11. Reihe	78
Abb. 4.35	Kühlmitteldichte am Kernaustritt eines SWR-Erstkerns.....	79

Abb. 4.36	SFR-1000-Reaktor mit metallischem Brennstoff	80
Abb. 4.37	30°-Segment des SFR-1000-Reaktors mit metallischem Brennstoff	80
Abb. 4.38	Leistungsverteilung beim SFR-1000 mit metallischem Brennstoff: MCNP6-Ergebnis mit interner Funktion zur Materialspezifikation	81
Abb. 4.39	Vergleich der Leistungsverteilungen (Unterschiede in %) beim SFR- 1000-Kern mit metallischem Brennstoff: MCNP mit interner Funktion zur Materialspezifikation und deterministische Methode	82
Abb. 4.40	Relative Flussverteilung für $E > 1\text{MeV}$ beim SFR-1000 mit metallischem Brennstoff.....	83
Abb. 4.41	Benchmark Konfiguration eines SWR mit 3600 MWth	84
Abb. 4.42	k-eff und Spektren bei OTF, Stochastic Mixing und Verwendung von direkt für die Brennstofftemperatur berechneten Querschnitten	84
Abb. 4.43	BOC-Verteilung des Neutronenflusses für $E > 1\text{MEV}$ beim SFR- 3600 Kern mit oxydischem Brennstoff.....	85
Abb. 4.44	BOC-Leistungsverteilung SFR-3600-Reaktor	86
Abb. 4.45	Zentrale BOC-Brennstofftemperaturen beim SFR-3600-Reaktor	86
Abb. 4.46	Zentrale BOC-Kühlmitteltemperaturen BOC SFR-3600-Reaktor	87
Abb. 4.47	ENDF/B-VII.1-Wirkungsquerschnitte als Funktion der Neutronenenergie für U-238	95
Abb. 4.48	ENDF/B-VII.1-Wirkungsquerschnitte als Funktion der Neutronenenergie für Pu-239.....	96
Abb. 4.49	Vergleich von experimentellen und berechneten Multiplikationsfaktoren von kritischen Experimenten	97

Abb. 4.50	Verlauf der totalen Spaltneutronenausbeute für Th-232 und deren relativer Standardabweichung, sowie die Korrelationsmatrix	99
Abb. 5.1	Kernbeladungen der UO ₂ - und UO ₂ /MOX-Kerne der Generation III auf EPR-Basis	102
Abb. 5.2	Mittelwerte der Leistungsverteilungen der UO ₂ - und UO ₂ /MOX-Kerne der Generation III, berechnet mit XSUSA-QUABOX/CUBBOX....	103
Abb. 5.3	Unsicherheiten der Leistungsverteilungen der UO ₂ - und UO ₂ /MOX-Kerne der Generation III, berechnet mit XSUSA-QUABOX/CUBBOX....	103
Abb. 5.4	Unsicherheiten der Stableistungen in der KRITZ-2:13-Anordnung.....	104
Abb. 5.5	Berechnungskette für Unsicherheitsanalysen mit XSUSA für Kerntransientenberechnungen.....	106
Abb. 5.6	Unsicherheiten für die radiale Leistungsverteilung in einem DWR-Kern aus XSUSA/KENO	106
Abb. 5.7	Unsicherheiten für die radiale Leistungsverteilung in einem DWR-Kern aus XSUSA/KENO	107
Abb. 5.8	Gesamtleistung bei einer Steuerstabauswurf-Transiente aus unterschiedlichen Rechenprogrammen.....	107
Abb. 5.9	Reaktivität und deren Unsicherheit für eine Steuerstabauswurf-Transiente.....	108
Abb. 5.10	Gesamtleistung und deren Unsicherheit für eine Steuerstabauswurf-Transiente.....	108
Abb. 5.11	Unsicherheit und Korrelationsmatrix der Multiplizität der verzögerten Neutronen von U-235 aus den JENDL-4.0-Daten	110
Abb. 5.12	Unsicherheit und Korrelationsmatrix der Multiplizität der verzögerten Neutronen von Pu-239 aus den JENDL-4.0-Daten	111

Abb. 5.13	NEWT-Modell für die Anordnung des EG-UACSA-Benchmarks Phase II	116
Abb. 5.14	Sensitivitätsergebnisse für das EG-UACSA-Benchmark Phase II. Quadrierte multiple Korrelationskoeffizienten (R^2) aus 1000 langen KENO-Rechenläufen (oben) und nach der „schnellen GRS-Methode“ (unten)	117
Abb. 5.15	Unsicherheiten für den Multiplikationsfaktor und die Brennelement- Leistungen des Purdue-Benchmarks mit verschiedenen Methoden	119
Abb. 5.16	Kern des VENUS-PRP-7-Benchmarks (links, $\frac{1}{4}$ -Kern-Darstellung) und des VENUS-PRP-9-Benchmarks (rechts)	121
Abb. 5.17	Kern des VENUS-PVS-2-Benchmarks ($\frac{1}{4}$ -Kern-Darstellung)	122
Abb. 5.18	Kern des B&W-Benchmarks (Beladung 8 mit Pyrex-Absorberstäben) ...	123
Abb. 5.19	Berechnete und gemessene Spaltratenverteilungen für die VENUS- PRP-7-Anordnung.	126
Abb. 5.20	Berechnete und gemessene Spaltratenverteilungen für zwei VENUS- PRP-9-Anordnungen.	126
Abb. 5.21	Berechnete und gemessene Spaltratenverteilungen für die VENUS- PVS-2-Anordnung.....	127
Abb. 5.22	Gruppensensitivitäten der Spaltraten in der VENUS-PVS-2- Anordnung bezüglich individueller Reaktionen.....	128
Abb. 5.23	Sensitivitäten der Spaltraten in einem Brennstab der VENUS-PVS-2- Anordnung bezüglich der Streudaten von U-238.....	129
Abb. 5.24	HTGR-Kritikalitätsberechnungskette mit Unsicherheitsanalysen. Oben: Variation der Daten vor den Spektralrechnungen (SAMPLER); unten: nach den Spektralrechnungen (XSUSA)	131

Abb. 5.25	HTGR-Kugelhaufen-Flussspektren mit heterogenem und äquivalentem homogenem Brennstoff.....	132
Abb. 5.26	Berechnungsmodelle für HTGR-Brennstoff vom Kugelhaufentyp (oben) und vom prismatischen Typ (unten).....	134
Abb. 5.27	Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren und Zwei-Gruppen-Wirkungsquerschnitte.	135
Abb. 5.28	Quadrierter multipler Korrelationskoeffizient für die Diffusionskonstanten.	135
Abb. 6.1	Trainiertes Feed-Forward-Netzwerk mit einer versteckten Schicht für den absoluten Wirkungsquerschnitt eines Reflektormaterials	140
Abb. 6.2	Gleichzeitige Darstellung von nuklearen Daten und ihrer Approximation durch künstliche neuronale Netzwerke mit <i>plotLib85</i>	145
Abb. 6.3	Vergleich des neuronalen Modells aus Abbildung 1 mit Trainings- und Validierungsdaten	146
Abb. 6.4	Ergebnisse von linearer und kubischer Interpolation.....	147
Abb. 6.5	Neuronales Modell der mittleren Energie pro Spaltungsreaktion κ_{fiss} : Abhängigkeit von Abbrand und Moderatorichte.....	148
Abb. 6.6	Neuronales Modell der mittleren Energie pro Spaltungsreaktion κ_{fiss} : Abhängigkeit von Borkonzentration und Brennstofftemperatur.....	149
Abb. 7.1	Graphische Kopplungsoberfläche in NURESIM	152
Abb. 7.2	Kernbeladung des Minikerns	153
Abb. 7.3	Leistungsverteilung aus einer stationären Rechnung für den Minikern...	153
Abb. 7.4	Nodalisierung des ATHLET-Modells für Oskarshamn-2.....	154

Abb. 7.5	Leistungsverhalten während des-Oskarshamn-2-Instabilitätsereignisses.....	155
Abb. 7.6	Axiale Druckverteilung aus dem CTF-Modell für Oskarshamn-2.....	156
Abb. 7.7	Axiale Dampfblasenverteilung aus dem CTF-Modell für Oskarshamn-2	157

Tabellenverzeichnis

Tab. 3.1	Rechenergebnisse für das C5G7-Benchmark.....	8
Tab. 3.2	Rechenergebnisse für das C5G7-Benchmark.....	15
Tab. 3.3	Quadrierte multiple Korrelationskoeffizienten (R^2) für den Multiplikationsfaktor des C5G7-Benchmarks.....	15
Tab. 3.4	Maximale, mediane und minimale relative Standardabweichung und zugehörige Mittelwerte für die stabweise Spaltrate im C5G7- Benchmark.	16
Tab. 3.5	Mittlere und maximale relative Stabileistung Abweichungen zwischen QUABOX/CUBBOX und die Monte-Carlo-Referenzrechnung	29
Tab. 3.6	Vergleich von mit KENO und QUABOX/CUBBOX mit SPH berechneten Leistungsverteilungen in zwei Brennelementtypen	30
Tab. 3.7	Mittlere und maximale relative Stabileistung Abweichungen zwischen QUABOX/CUBBOX und die Monte-Carlo-Referenzrechnung	31
Tab. 4.1	Multigruppen-Wirkungsquerschnitte für VVERR-1000 für unterschiedliche Brennstoff- und Moderatortemperaturen.....	70
Tab. 4.2	Multiplikationsfaktor für Nulllast heiß (HZP) und Vollast (HFP) für Multigruppen und kontinuierliche Querschnitte	71
Tab. 4.3	MCNP-Ergebnisse für eine Stabzelle des SWR Peach Bottom 2, mit direkt erzeugten und temperaturinterpolierten Daten	93
Tab. 4.4	MCNP-Ergebnisse für die VENUS-7-Anordnungen mit ENDF/B-VII- und JEFF-3.1.1-Daten: Multiplikationsfaktoren und effektiver Anteil verzögerter Neutronen.....	93

Tab. 5.1	Mittelwerte und Unsicherheiten (1σ) der Leistungsverteilungen der UO_2 - und UO_2/MOX -Kerne der Generation III, berechnet mit XSUSA-QUABOX/CUBBOX	102
Tab. 5.2	Unsicherheiten (1σ) im effektiven verzögerten Neutronenanteil bei der kritischen Anordnung JEZEBEL.....	113
Tab. 5.3	Unsicherheiten (1σ) im effektiven verzögerten Neutronenanteil bei der kritischen Anordnung TOPSY	113
Tab. 5.4	Unsicherheiten (1σ) im effektiven verzögerten Neutronenanteil bei der kritischen Anordnung POPSY	113
Tab. 5.5	Multiplikationsfaktoren des EG-UACSA-Benchmarks Phase II und deren relative Unsicherheiten (1σ) aus XSUSA mit einer Sample-Größe von 1000.....	116
Tab. 5.6	Experimentelle und berechnete Multiplikationsfaktoren und deren Unsicherheiten.....	125
Tab. 5.7	Unsicherheiten in den Multiplikationsfaktoren in einer HTGR-Kugelhaufen-Anordnung mit heterogenem und äquivalentem homogenem Brennstoff.....	133
Tab. 5.8	Unsicherheiten in den Multiplikationsfaktoren für Anordnungen des HTR-CRP-Benchmarks mit homogenem Brennstoff	133
Tab. 7.1	Steady-State-Ergebnisse für Oskarshamn-2.....	155

Anhänge

Die nachfolgend aufgeführten Anhänge des vorliegenden Berichts enthalten teilweise urheberrechtlich geschütztes Material oder Informationen, die als vertraulich eingestuft wurden und werden deshalb nicht veröffentlicht. Eine Weitergabe einzelner Anhänge an Dritte kann nur nach Prüfung des Einzelfalls und ausdrücklicher Zustimmung der jeweils zuständigen Stellen bzw. Rechteinhaber erfolgen.

A Technische Notizen

- A.1 L. Gallner, M. Klein, W. Zwermann: Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen mit XSUSA zum BENCHMARK FOR UNCERTAINTY ANALYSIS IN MODELING (UAM) FOR DESIGN, OPERATION AND SAFETY ANALYSIS OF LWRs (Phase 1)
- A.2 M. Clemente, W. Zwermann, Auswertung reaktorphysikalischer Experimente mit dem Programm KENO Va
- A.3 P. Natzkin, Implementierung der SPH-Methode
- A.4 J. Lee, Y. Perin, K. Velkov, M. Zilly, H.G. Joo, Coupling the COBRA-TF Subchannel Thermo-hydraulic Analysis Code with the nTRACER Direct Whole Core Calculation Code

B Veröffentlichungen

- B.1 L. Gallner, M. Klein, B. Krzykacz-Hausmann, A. Pautz, K. Velkov, W. Zwermann, Sampling Based Nuclear Data Uncertainty Analysis in Mixed LWR Calculations, IAEA Technical Meeting on Fuel Design and Licensing of Mixed Cores for Water Cooled Reactors, Wien, 12.-14.12.2011
- B.2 W. Bernnat, M. Buck, M. Mattes, W. Zwermann, I. Pasichnyk, K. Velkov, Coupled Monte Carlo Neutronics and Thermal Hydraulics for Power Reactors, PHYSOR, Knoxville, TN, USA, 15.-20.04.2012

- B.3 A. Yankov, M. Klein, M. A. Jessee, W. Zwermann, K. Velkov, A. Pautz, B. Collins, T. Downar, Comparison of XSUSA and TWO-STEP Approaches for Full-Core Uncertainty Quantification, PHYSOR, Knoxville, TN, USA, 15.-20.04.2012
- B.4 M. Williams, D. Wiarda, H. Smith, M. A. Jessee, B. T. Rearden, W. Zwermann, M. Klein, A. Pautz, B. Krzykacz-Hausmann, L. Gallner, Development of a Statistical Sampling Method for Uncertainty Analysis with Scale, PHYSOR, Knoxville, TN, USA, 15.-20.04.2012
- B.5 W. Zwermann, B. Krzykacz-Hausmann, L. Gallner, M. Klein, A. Pautz, K. Velkov, Aleatoric and Epistemic Uncertainties in Sampling Based Nuclear Data Uncertainty and Sensitivity Analyses, PHYSOR, Knoxville, TN, USA, 15.-20.04.2012
- B.6 I. Pasichnyk, M. Klein, K. Velkov, W. Zwermann, A. Pautz, Nuclear Data Uncertainties by the PWR MOX/UO₂ Core Rod Ejection Benchmark, PHYSOR, Knoxville, TN, USA, 15.-20.04.2012
- B.7 M. Klein, L. Gallner, B. Krzykacz-Hausmann, A. Pautz, K. Velkov, W. Zwermann, Interaction of Loading Pattern and Nuclear Data Uncertainties in Reactor Core Calculations, PHYSOR, Knoxville, TN, USA, 15.-20.04.2012
- B.8 E. Lemarchand, M. Klein, I. Pasichnyk, K. Velkov, W. Zwermann, Pin-by-Pin Calculations with QUABOX/CUBBOX using the Super Homogenization Method, Jahrestagung Kerntechnik 2012, Stuttgart, 22.-24.05.2012
- B.9 L. Gallner, M. Klein, B. Krzykacz-Hausmann, A. Pautz, K. Velkov, W. Zwermann, Application of XSUSA with Aleatoric and Epistemic Uncertainties, Jahrestagung Kerntechnik 2012, Stuttgart, 22.-24.05.2012
- B.10 A. Yankov, B. Collins, M. Klein, M.A. Jessee, W. Zwermann, K. Velkov, A. Pautz, T. Downar, A Two-Step Approach to Uncertainty Quantification of Core Simulators, Science and Technology of Nuclear Installations, Volume 2012, (2012), Article ID 767096

- B.11 W. Zwermann, L. Gallner, M. Klein, B. Krzykacz-Hausmann, I. Pasichnyk, A. Pautz, K. Velkov, Status of XSUSA for Sampling Based Nuclear Data Uncertainty and Sensitivity Analysis, EPJ Web of Conferences 42, 03003 (2013)
- B.12 I. Pasichnyk, K. Velkov, W. Zwermann, Influence of Nuclear Data Uncertainties on a Rod Ejection Transient, Jahrestagung Kerntechnik 2013, Berlin
- B.13 I. Pasichnyk, Y. Perin, K. Velkov, Quantitative Uncertainty and Sensitivity Analysis of a PWR Control Rod Ejection Accident, International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science & Engineering (M&C 2013), Sun Valley, Idaho, USA
- B.14 I. Pasichnyk, M. Klein, K. Velkov, W. Zwermann, A. Pautz, Effects of Nuclear Data Uncertainties on the NEA/OECD PWR MOX/UO₂ Core Rod Ejection Benchmark, Nuclear Technology 183, 464 - 472 (2013)
- B.15 M. L. Williams, G. Ilas, M. A. Jessee, B. T. Rearden, D. Wiarda, W. Zwermann, L. Gallner, M. Klein, B. Krzykacz-Hausmann, A. Pautz, A Statistical Sampling Method for Uncertainty Analysis with SCALE and XSUSA, Nuclear Technology 183, 515 - 526 (2013)
- B.16 W. Bernnat, M. Mattes, N. Guilliard, J. Lapins, W. Zwermann, I. Pasichnyk, K. Velkov, Monte Carlo Neutronics and Thermal Hydraulics Analysis of Reactor Cores with Multilevel Grids, Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications and Monte Carlo 2013 (SNA + MC 2013), Paris, Okt. 2013
- B.17 Y. Périn, A. Aures, V. Salino, Challenge of PWR new core design simulation: a focus on uncertainties due to nuclear data and reflector modelling, EUROSAFE 2013, Köln, Nov. 2013
- B.18 W. Zwermann, L. Leenders, Experimental Study of the VENUS Configuration No. 7, International Handbook of Evaluated Reactor Physics Benchmark Experiments, March 2014 Edition, available on DVD-ROM, NEA/NSC/DOC(2006)1

- B.19 A. Aures, K. Velkov, W. Zwermann, P. Rouxelin, K. Ivanov, J. Lapins, W. Bernnat, Sampling-Based Uncertainty and Sensitivity Analysis for a HTGR Benchmark, Jahrestagung Kerntechnik 2014, Frankfurt, Mai 2014
- B.20 W. Zwermann, F.-P. Weiß, M. Clemente, K. Velkov, Evaluation of Reactor Physics Experiments with Respect to Nuclear Data Uncertainties, Jahrestagung Kerntechnik 2014, Frankfurt, Mai 2014
- B.21 I. Kodeli, W. Zwermann, Evaluation of Uncertainties in β_{eff} by Means of Deterministic and Monte Carlo Methods, Nuclear Data Sheets 118 (2014) 370-373
- B.22 D. Rochman, S.C. van der Marck, A.J. Koning, H. Sjöstrand, W. Zwermann, Uncertainty Propagation with Fast Monte Carlo Techniques, Nuclear Data Sheets 118 (2014) 367-369
- B.23 D. Rochman, W. Zwermann, S.C. van der Marck, A.J. Koning, H. Sjöstrand, P. Helgesson, B. Krzykacz-Hausmann, Efficient Use of Monte Carlo: Uncertainty Propagation, Nuclear Science and Engineering 177 (2014) 337-349
- B.24 A. Aures, K. Velkov, W. Zwermann, P. Rouxelin, K. Ivanov, J. Lapins, W. Bernnat, Uncertainty and Sensitivity Analysis for an OECD/NEA HTGR Benchmark with XSUSA, PHYSOR 2014, Kyoto, Japan
- B.25 W. Zwermann, F.-P. Weiß, M. Clemente, A. Aures, K. Velkov, Criticality and Reactor Physics Benchmark Experiments: Influence of Nuclear Data Uncertainties, PHYSOR 2014, Kyoto, Japan
- B.26 N. Guilliard, W. Bernnat, J. Starflinger, W. Zwermann, I. Pasichnyk, Monte Carlo Neutronics Analysis of Sodium-Cooled Fast Reactor Benchmark with the OTF Temperature and Burnup Treatment, PHYSOR 2014, Kyoto, Japan
- B.27 L. Leenders, U. Wehmann, C. Grove, K. Hesketh, W. Zwermann, IRPhE Evaluation of VENUS 9 and 7 Experiments, Nuclear Science and Engineering, 178 (2014) 509–523

C NURESAFE-Berichte

- C.1 Y. Périn, Description of the ATHLET API, NURESAFE-Bericht D11.15 (2014)
- C.2 Y. Périn, Description of the CTF API, NURESAFE-Bericht D11.16 (2014)

**Gesellschaft für Anlagen-
und Reaktorsicherheit
(GRS) gGmbH**

Schwertnergasse 1
50667 Köln

Telefon +49 221 2068-0

Telefax +49 221 2068-888

Forschungszentrum

85748 Garching b. München

Telefon +49 89 32004-0

Telefax +49 89 32004-300

Kurfürstendamm 200

10719 Berlin

Telefon +49 30 88589-0

Telefax +49 30 88589-111

Theodor-Heuss-Straße 4

38122 Braunschweig

Telefon +49 531 8012-0

Telefax +49 531 8012-200

www.grs.de

ISBN 978-3-944161-63-1