

**Weiterentwicklung
moderner Verfahren
im Bereich
Abbrandberechnung**



Gesellschaft für Anlagen-
und Reaktorsicherheit
(GRS) gGmbH

Weiterentwicklung moderner Verfahren im Bereich Abbrandberechnung

Matthias Behler
Friederike Bostelmann
Volker Hannstein
Matthias Küntzel
Fabian Sommer
Winfried Zwermann

September 2018

Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrunde liegende F&E-Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie (BMWi) unter dem Kennzeichen RS1542 durchgeführt.

Die Arbeiten wurden von der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH durchgeführt. 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 - 528
ISBN 978-3-947685-13-4

Deskriptoren

Abbrand, MOTIVE, Nachbestrahlungsanalyseproben, Nukleare Daten, Unsicherheitsanalyse

Kurzfassung

Der vorliegende Bericht dokumentiert die im Vorhaben RS1542 „Weiterentwicklung moderner Verfahren im Bereich Abbrandberechnung“ durchgeführten Arbeiten und erreichten Forschungs- und Entwicklungsziele. Das übergeordnete Ziel des Vorhabens war die Weiterentwicklung des GRS-eigenen Programms zur Abbrandberechnung MOTIVE und dessen Validierung anhand der Nachrechnung von Nachbestrahlungsanalyseproben. Weiterhin wurden vertiefte Untersuchungen im Bereich der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse für Abbrandberechnungen insbesondere für Systeme mit schnellem Neutronenspektrum durchgeführt.

Im Rahmen dieser Arbeiten wurde eine Auswahl der in der Datenbank SFCOMPO 2.0 der OECD/NEA gesammelten frei verfügbaren radiochemischen Analyseproben aus kommerziellen Druckwasser- und Siedewasserreaktoren mit MOTIVE nachgerechnet. Zur Validierung von MOTIVE wurden die hierbei erzielten Ergebnisse der insgesamt 74 nachgerechneten Analyseproben eingehend analysiert und ausgewertet. In MOTIVE wurden verschiedene Maßnahmen umgesetzt, um Möglichkeiten zur unabhängigen Überprüfung der Rechenergebnisse bereitzustellen. Hierzu zählen die Anbindung eines alternativen Programms zu Neutronenflussberechnung und die Bereitstellung zusätzlicher Wirkungsquerschnittsbibliotheken auf Basis unterschiedlicher Evaluationen. Die Kopplung zwischen Neutronentransport und Nuklidinventarberechnung wurde durch die Integration verschiedener sogenannter Predictor-Corrector-Verfahren verbessert. Zusätzlich erfolgten verschiedene Funktionserweiterungen im Programm insbesondere bei der Berechnung von Materialeigenschaften wie der Moderatordichte und Brennstofftemperatur.

Im Bereich der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse wurden systematische Untersuchungen für zwei unterschiedliche Brennelementtypen im Bereich der Systeme mit schnellem Neutronenspektrum durchgeführt. Außerdem erfolgten Untersuchungen zum Einfluss von Korrelationen in den Unsicherheiten der Spaltproduktausbeuten auf das Ergebnis von Abbrandberechnungen und eine Analyse der Eignung der TENDL-Bibliothek für die Abbrandberechnung. Im Rahmen des “Coordinated Research Project (CRP) on High Temperature Gas-Cooled Reactor (HTGR) Uncertainty Analysis in Modeling (UAM)” der IAEA wurden Neutronentransportrechnungen und zugehörige Unsicherheitsanalysen für verschiedene Typen von HTR-Reaktorkonzepten durchgeführt.

Abstract

The present report documents the work performed in the reactor safety research project RS1542 „Further Development of Modern Methods in the Field of Burn-up Calculation“, and reports on the research and development goals reached. The general aim of this project was the further development of the burn-up code MOTIVE and its validation by means of a check against radiochemical assay data. Moreover, investigations in the domain of uncertainty and sensitivity analysis for burn-up calculations particularly for systems with fast neutron spectrum were performed.

Within this work, MOTIVE models for a selection of openly available post irradiation experiments (PIE) taken from the SFCOMPO 2.0 database of OECD/NEA were developed. The results of the calculation of 74 of these models were compared with the corresponding experimental data with the purpose of validating MOTIVE. Several measures were implemented in MOTIVE to allow for an independent verification of calculation results within the code. This includes the coupling of an additional neutron transport code and the provision of additional cross-section libraries based on different data evaluations. The coupling between neutronics and nuclide inventory calculation was improved by implementing different types of so-called predictor/corrector methods. Additionally, a number of additional features have been implemented in the code, including methods for calculating material properties, e. g. the calculation of moderator density or fuel temperature.

In the field of uncertainty and sensitivity analysis, systematic investigations of two fuel element types for fast spectrum reactors have been performed. Moreover, an analysis of the influence of the correlations in the uncertainties of fission yields on the results of burn-up calculations and an investigation of the usability of the TENDL cross-section library for burn-up calculations have been conducted. In the frame of the “Coordinated Research Project (CRP) on High Temperature Gas-Cooled Reactor (HTGR) Uncertainty Analysis in Modelling (UAM)” of IAEA, neutron transport calculations and uncertainty analyses for different types of HTR concepts have been performed.

Inhaltsverzeichnis

	Kurzfassung	I
	Abstract	II
1	Einleitung	1
2	Zielsetzung	3
2.1	Gesamtziel.....	3
2.2	Verifizierung des Abbrandprogrammsystems MOTIVE	3
2.3	Weiterentwicklung der GRS-eigenen Methoden zur Abbrandberechnung	3
2.3.1	Weiterentwicklung der Abbrandmethoden.....	4
2.3.2	Weiterentwicklung bezüglich nuklearer Daten.....	4
2.4	Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen und Nukleare Daten.....	5
3	AP1: Verifizierung des Abbrandprogrammsystems MOTIVE	7
3.1	Nachrechnung von Nachbestrahlungsanalyseproben	7
3.2	Vergleich mit Rechenbenchmarks	10
4	AP2: Weiterentwicklung der GRS-eigenen Methoden zur Abbrandberechnung	21
4.1	AP2.1: Weiterentwicklung MOTIVE/VENTINA	21
4.1.1	Predictor-Corrector Verfahren.....	22
4.1.2	Anbindung des Monte Carlo-Programms OpenMC	28
4.1.3	Berechnung der Moderatordichte.....	31
4.1.4	Brennstofftemperaturberechnung	32
4.1.5	Materialaustausch-Funktion	33
4.1.6	Erweiterungen und Verbesserungen an VENTINA.....	34
4.2	AP2.2: Weiterentwicklung der nuklearen Datenbasis.....	35
4.2.1	Wirkungsquerschnittsbibliotheken für die Monte-Carlo Codes	35

4.2.2	Multigruppen-Bibliotheken für MOTIVE.....	37
4.2.3	Weiterentwicklung ENDF2Graph	38
4.2.4	Erweiterung der Zerfallsdaten-Bibliotheken.....	40
5	AP3: Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen und Nukleare Daten	43
5.1	AP 3.1: Unsicherheitsanalyse bezüglich abbrandspezifischer Daten	43
5.2	AP 3.2: HTR-CRP-Benchmark der IAEA.....	46
5.2.1	VHTRC Experiment	47
5.2.2	Rechenprogramme und -modelle.....	48
5.2.3	Ergebnisse.....	50
5.2.4	MHTGR	56
5.3	AP 3.3: Systematische Unsicherheitsanalysen für Abbrandrechnungen bei schnellen Reaktorsystemen	72
5.4	AP 3.4: Evaluierung der TENDL-Bibliothek.....	77
6	Zusammenfassung	81
	Literaturverzeichnis.....	85
	Abbildungsverzeichnis.....	91
	Tabellenverzeichnis.....	95

1 Einleitung

Bei der sicherheitstechnischen Bewertung des Einsatzes von Brennelementen in Kernkraftwerken, sowohl während des Leistungsbetriebs als auch bei der anschließenden Lagerung im Lagerbecken oder Zwischenlager, kommt der genauen rechnerischen Bestimmung der Abbrand-abhängigen Eigenschaften eine wesentliche Bedeutung zu. Mit Hilfe geeigneter Werkzeuge können für diese Bewertung belastbare Aussagen über die Reaktivitätsbilanz, die Nuklidinventare und die Nachzerfallsleistung bestrahlter Brennelemente getroffen werden.

Auch mit der in der 13. Novelle des Atomgesetzes beschlossenen schrittweisen Stilllegung aller Kernkraftwerke (KKW) in Deutschland bis zum Jahr 2022 ist für die bis dahin in Betrieb befindlichen KKW die Einhaltung höchster Sicherheitsansprüche gemäß dem fortschreitenden Stand von Wissenschaft und Technik zu gewährleisten. Dies erfordert die kontinuierliche Weiterentwicklung der dazu benötigten Werkzeuge. Darüber hinaus werden in den europäischen Nachbarländern auch über einen längeren Zeitraum als in Deutschland Leichtwasserreaktoren (LWR) betrieben, die sich in der neutronenphysikalischen Auslegung und der Beladung teilweise von den jetzt sich im Einsatz befindlichen Anlagen unterscheiden. Weiterhin ist damit zu rechnen, dass dort langfristig auch andere Reaktortypen entwickelt und in Betrieb genommen werden. Für eine sicherheitstechnische Bewertung dieser Anlagen ist es ebenfalls notwendig, geeignete Methoden bereitzustellen und ständig zu verbessern.

Um die genannten Anforderungen erfüllen zu können, ist die GRS bestrebt, die vorhandenen Methoden zur Reaktivitäts- und Nuklidinventarbestimmung stetig weiterzuentwickeln und an neue Reaktortypen anzupassen. Hierzu dient u. a. das in der GRS entwickelte Programm MOTIVE, das im Vorhaben RS1513 als Ergebnis umfangreicher Modernisierungsmaßnahmen aus dem bisher in der GRS verwendeten Abbrandprogrammingsystem KENOREST hervorgegangen ist. Die in MOTIVE enthaltenen modularen Schnittstellen für die Kopplung eines Programms zur Neutronenflussberechnung und eines Inventarberechnungsprogramms zu einem 3D-Abbrandssystem ermöglichen es, moderne Methoden in die Abbrandberechnung einfließen zu lassen und die GRS-eigenen Methoden auf dem Stand von Wissenschaft und Technik zu halten. Mit dem in Zusammenarbeit mit EPFL/PSI entwickelten Inventarcode VENTINA steht außerdem ein alternatives Rechenwerkzeug zur Bestimmung des Nuklidvektors bestrahlter Brennelemente zur Verfügung, das über aktuelle Lösungsverfahren für die Abbrand-

gleichungen verfügt. Es findet bereits Anwendung im Abbrandprogramm MOTIVE und im GRS-Kernsimulator KMACS /AUR 18/.

Ein weiterer wesentlicher Aspekt bei der sicherheitstechnischen Beurteilung ist die Berücksichtigung von Unsicherheiten. Hierzu entwickelt die GRS verschiedene Werkzeuge zur Unsicherheitsanalyse, mit deren Hilfe u. a. auch Abbrandrechnungen hinsichtlich der eingehenden Unsicherheiten untersucht werden können. Zur Betrachtung von Unsicherheiten in neutronenphysikalischen Parametern steht das Programm XSUSA /ZWE 10/ zur Verfügung, wohingegen Unsicherheiten in technischen Parametern mit dem Programm SUnCISTT /BEH 14b/ analysiert werden können.

2 Zielsetzung

2.1 Gesamtziel

Übergeordnetes Ziel des Vorhabens war die Weiterentwicklung des Abbrandprogrammsystems MOTIVE und dessen Validierung anhand der Nachrechnung von Nachbestrahlungsanalyseproben. Daneben waren Untersuchungen im Bereich der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse bei Abbrandberechnungen insbesondere für schnelle Systeme vorgesehen. Die dazu im Vorhaben vorgesehenen Einzelzielsetzungen werden in den folgenden Abschnitten näher erläutert.

2.2 Verifizierung des Abbrandprogrammsystems MOTIVE

Für das bisherige System KENOREST verfügt die GRS über eine umfangreiche Datenbasis von Nachrechnungen von Nachbestrahlungsanalyseproben, die zur Validierung des Programms herangezogen werden können. Diese basiert auf der Datenbank SFCOMPO /MIC 17/ der OECD/NEA Working Party on Nuclear Criticality Safety, bei der alle öffentlich verfügbaren Nachbestrahlungsanalysedaten gesammelt und hinsichtlich ihrer Eignung für die Codevalidierung geprüft und bewertet werden. Die Datenbasis wird laufend erweitert, sobald neue experimentelle Daten veröffentlicht werden.

Ziel des Vorhabens war diesbezüglich eine im Umfang mindestens vergleichbare Anzahl an Validierungsrechnungen durchzuführen und diese gegebenenfalls um die Nachrechnung zusätzlicher aktueller Nachbestrahlungsanalyseproben zu ergänzen. Zusätzlich war ein Vergleich von MOTIVE mit anderen Programmen anhand von Rechenbenchmarks vorgesehen. Die zu diesem Arbeitspaket durchgeführten Arbeiten und erzielten Ergebnisse sind in Abschnitt 3 beschrieben.

2.3 Weiterentwicklung der GRS-eigenen Methoden zur Abbrandberechnung

Um den aktuellen Entwicklungen des Standes von Wissenschaft und Technik Rechnung zu tragen und um die Anwendungsmöglichkeiten erweitern zu können waren im Vorhaben eine Reihe von Arbeiten geplant, die in den folgenden beiden Abschnitten näher erläutert werden.

2.3.1 Weiterentwicklung der Abbrandmethoden

Die Bereitstellung der Programme MOTIVE und VENTINA erleichtert es, moderne Verfahren und aktuelle Entwicklungen im Bereich der Abbrandberechnung aufzugreifen und zu integrieren. Ziel der Entwicklung war außerdem, eine Austauschbarkeit der angekoppelten Komponenten zu ermöglichen. Aus sicherheitstechnischer Perspektive ist dies wichtig um diversitäre Verfahren zur Verfügung zu haben, um eventuelle systematische Fehler einzelner Programme auszuschließen bzw. aufzudecken. Zur Demonstration dieser Möglichkeiten und um eine von den Programmen des SCALE-Pakets unabhängige Rechenmethode bereitzustellen, sollte daher ein zweites Flussberechnungsprogramm neben KENO-VI an MOTIVE angekoppelt werden.

Weiterhin war eine Verbesserung der Kopplung zwischen Neutronenfluss- und Nuklidinventarberechnung vorgesehen. Hierzu sollten verschiedene sogenannte Predictor-Corrector Verfahren implementiert werden, die möglichst ohne eine deutliche Erhöhung der Rechenzeit auskommen sollten. Die bereits im Programm KENOREST bestehenden Optionen zur Berechnung der Brennstofftemperatur und der Moderatorichte auf Basis der Eingabedaten Druck und Temperatur sowie der Brennstoffleistung sollten auf das neue System übertragen werden. Dabei sollte eine Modernisierung und Erweiterung der zugrundeliegenden Methoden umgesetzt werden. Schließlich war eine Reihe weiterer Maßnahmen zur erweiterten Anwendbarkeit und zur Vereinfachung der Bedienung von MOTIVE geplant. Die hierzu durchgeführten Arbeiten und erzielten Ergebnisse sind in Abschnitt 4.1 dargestellt.

2.3.2 Weiterentwicklung bezüglich nuklearer Daten

Bei der Abbrandberechnung werden für verschiedene Aufgaben umfangreiche nukleare Daten benötigt. Während der Transportrechnung werden auf der Basis von Neutronenwirkungsquerschnittsdaten und des damit berechneten Neutronenflusses effektive Eingruppen-Wirkungsquerschnitte für die anschließende Inventarberechnung bestimmt. Für diese werden außerdem Zerfallsdaten, Spaltproduktausbeuten und die Übergangspfade zwischen Start- und Zielnucliden mit ihren entsprechenden Verzweigungsverhältnissen verwendet. Im Kontext von MOTIVE werden diese Daten mit dem Werkzeug ENDF2Graph aus der ENDF/B-Bibliothek ausgelesen und für VENTINA bereitgestellt, während die für die Transportrechnung mit KENO-VI benötigten Punktquerschnittsdaten mit dem ab der Version 6.2 in SCALE verfügbaren Programmpaket

AMPX-6 prozessiert werden müssen. Damit zukünftig eine konsistente Datenbasis für die Abbrandrechnung verwendet werden kann, sollte die gesamte Vorprozessierung im Rahmen eines Skripts automatisiert werden. Um die Genauigkeit der Inventarberechnungen zu erhöhen und außerdem die Anwendungsmöglichkeiten von VENTINA zu erweitern sollte die Anzahl der berücksichtigten Reaktionskanäle erweitert und zusätzlich die notwendigen Daten zur Auswertung der Energiespektren eingelesen werden. Dazu sollte eine Erweiterung des Werkzeugs ENDF2Graph zum Einlesen dieser Daten und eine entsprechende Ergänzung in VENTINA für die zusätzlichen Reaktionskanäle erfolgen. Dies sollte unter anderem die Berechnung der Nachzerfallsleistung und von Quelltermen für nachgeschaltete Abschirmungsrechnungen ermöglichen. Zusätzlich war das Einlesen und Verwenden verschiedener zusätzlicher Datenevaluationen wie JEFF, JENDL und TENDL in MOTIVE zur Steigerung der Flexibilität und der Diversität bei der Abbrandberechnung vorgesehen. Die zugehörigen Arbeiten und Ergebnisse sind in Abschnitt 4.2 beschrieben.

2.4 Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen und Nukleare Daten

Für die nukleare Berechnungskette ist es von großer Wichtigkeit, Wirkungsquerschnittsbibliotheken in möglichst hoher Qualität bereitzustellen. Im Rahmen des Vorhabens sind dabei die für die Abbrandberechnungen benötigten nuklearen Daten von besonderer Relevanz. Neben den Neutronen-Wirkungsquerschnitten sind dies Spaltausbeuten und Zerfallsdaten. Im Rahmen des Vorgängervorhabens RS1513 wurde die Unsicherheitsanalyse von Zerfallsdaten und Spaltausbeuten, d. h. das Sampling auf Basis der entsprechenden Unsicherheitsdaten und die Modifikation der Daten in den ORIGEN-Bibliotheken, in XSUSA implementiert. Dabei wurde auch die Möglichkeit vorgesehen, eventuelle Korrelationen innerhalb der Unsicherheiten von Zerfallsdaten und Spaltausbeuten zu berücksichtigen; diese sind jedoch aktuell in den evaluierten Datenfiles in ENDF-Struktur nicht verfügbar. Da angekündigt war, dass in der Version 6.2 des Programmsystems SCALE Kovarianzmatrizen (einschließlich Korrelationen) für die Spaltausbeuten enthalten sein würden, sollten diese, sobald verfügbar, in das XSUSA-System integriert werden. Darüber hinaus war eine Untersuchung des Einflusses dieser Korrelationen auf die Unsicherheiten im Multiplikationsfaktor und in den Nuklidinventaren anhand einer repräsentativen Beispielrechnung vorgesehen.

Im Gegensatz zu nuklearen Daten zur Simulation von Leichtwasserreaktor-(LWR)-Anlagen, deren Unsicherheiten teilweise durch eine erhebliche Betriebserfahrung aus-

geglichen werden können, fehlt diese Möglichkeit bei alternativen Reaktorkonzepten ganz oder zum großen Teil. Dies betrifft unmittelbar die Aussagesicherheit für neue Reaktorkonzepte mit härteren Neutronenspektren. Ebenso liegt nur sehr geringe Betriebserfahrung für gasgekühlte Hochtemperaturreaktoren vor. Mittels Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen kann die Aussagesicherheit von Simulationen quantifiziert werden. Eine systematische Unsicherheitsanalyse bezüglich der Abbrandberechnung für Systeme mit schnellem Neutronenspektrum sollte im Rahmen der Plattform Uncertainty Analysis in Modeling of Sodium Fast Reactors (UAM-SFR) der Working Party on Scientific Issues of Reactor Systems (WPRS) der OECD/NEA erfolgen. Weiterhin war die Teilnahme an dem im Rahmen der IAEA "Coordinated Research Project (CRP) on High Temperature Gas-Cooled Reactor (HTGR) Uncertainty Analysis in Modeling (UAM)" definierten Benchmark geplant. Hierbei sollten umfangreiche Analysen an Modellen verschiedener HTGR-Konzepte, sowohl für prismatische Anordnungen, als auch für solche vom Kugelhaufen-Typ, durchgeführt werden.

Die TENDL-Bibliothek wird im Unterschied zu den etablierten Bibliotheken mit dem TALYS Code auf der Basis grundlegender Kern- und Reaktionsmodelle sowie experimenteller Daten erzeugt. Durch diese Methode können im Vergleich zu ENDF/B und JEFF umfassendere Wirkungsquerschnittsdatensätze, Winkel- /Energieverteilungen und Kovarianzdaten für eine größere Anzahl von Reaktionskanälen und Isotopen reproduzierbar und automatisiert erzeugt werden. Mit dem Werkzeug ENDF2Graph sollten die ENDF-formatierten Dateien der jeweils aktuellen TENDL Bibliothek gelesen und zur Verwendung mit dem Programmsystem MOTIVE/VENTINA prozessiert werden. Anhand von Abbrandrechnungen mit den verschiedenen Bibliotheken sollte untersucht werden, ob durch die größere Anzahl an Übergangspfaden (Pfad zwischen Start- und Zielnuclid) und an Isotopen in der TENDL Bibliothek genauere Ergebnisse bei Abbrandrechnungen im Vergleich zur Verwendung von ENDF/B und JEFF erreicht werden kann.

Die beschriebenen Arbeiten und dazu erzielten Ergebnisse sind in Abschnitt 5 näher beschrieben.

3 AP1: Verifizierung des Abbrandprogrammsystems MOTIVE

3.1 Nachrechnung von Nachbestrahlungsanalyseproben

Zur Validierung der Ergebnisse eines Simulationsprogramms sind, soweit möglich, Vergleiche mit experimentellen Daten erforderlich. Für den Fall des im vorliegenden Vorhaben entwickelten Abbrandprogramms MOTIVE sind die primären Ergebnisdaten die Nuklidinventare des bestrahlten Brennstoffs. Zur Überprüfung dieser Ergebnisdaten können radiochemischen Analysen von Proben bestrahlter Brennelemente aus kommerziellen Leichtwasserreaktoren herangezogen werden. Mit der Datenbank SFCOMPO 2.0 der OECD/NEA /MIC 17/ steht eine umfangreiche Sammlung frei verfügbarer Proben zur Verfügung. Sie stellt neben den jeweiligen experimentellen Ergebnissen eine aufbereitete Darstellung der für eine Nachrechnung notwendigen Eingabedaten zur Verfügung und verfügt über Verknüpfungen zur jeweiligen Originalliteratur. Ziel des Vorhabens war, eine Auswahl von Eingabedatensätzen zur Nachrechnung dieser Nachbestrahlungsanalyseproben zu erstellen, die vom Umfang her mindestens vergleichbar mit der bereits für das Vorgängerprogramm bestehenden Datenbasis ist. Die Eingabedaten wurden verwendet, um mit der aktuellen Version von MOTIVE und unter Verwendung der Wirkungsquerschnittsdaten ENDF/B-VII.1 Validierungsrechnungen durchzuführen und die Ergebnisse mit den experimentellen Daten zu vergleichen und auszuwerten. Die entsprechenden Arbeiten sind ausführlich in einem separaten Bericht /BEH 18/ dokumentiert. Daher erfolgt hier nur eine kurze Zusammenfassung der wesentlichen Ergebnisse.

Insgesamt wurden im Rahmen des Vorhabens 74 Proben aus neun Reaktoren nachgerechnet. Die Proben stammen mehrheitlich von UO_2 -Brennelementen aus Druckwasserreaktoren. Nachgerechnet wurden zudem zwei Proben eines MOX-Brennelements. Mit den 15 Proben der beiden Brennelemente SF98 und SF99 aus Fukushima Daini-2 wurden auch Siedewasserreaktorproben nachgerechnet. Die Anfangsanreicherung der verschiedenen Brennelemente lag im Bereich zwischen 1,69 und 4,66 Gew.-% ^{235}U . Die Probenabbrände umfassten einen Bereich von 7,2 bis 58,9 GWd/tSM. Eine Aufstellung der nachgerechneten Proben findet sich in Tab. 3.1.

Tab. 3.1 Liste der im Rahmen des Berichts untersuchten Nachbestrahlungsanalyseproben

Reaktor	Typ	Brennstoff	Anreicherung [wt%]	Anzahl Stäbe	Anzahl Proben	Abbrand [GWd/tHM]
Beznau – 1	PWR	MOX	5.5 (Pu)	1	2	39.6 - 58.9
Calvert Cliffs - 1	PWR	UO ₂	2.45, 2.72, 3.04	3	9	18.7 - 46.5
Fukushima Daini - 2	BWR	UO ₂	3.4, 3.91	2	15	7.2 – 44.0
Gösgen	PWR	UO ₂	3.5, 4.1	2	3	21.8 - 38.9
GKN - 2	PWR	UO ₂	3.8	1	1	54.0
Ohi - 1	PWR	UO ₂	3.2	1	1	52.4
Ohi - 2	PWR	UO ₂	1.69, 3.2	3	5	21.5 - 38.5
Takahama - 3	PWR	UO ₂	2.63, 4.11	3	14	14.3 - 47.3
Three Mile Island - 1	PWR	UO ₂	4.01, 4.66	5	24	22.8 - 55.7
			Summe	21	74	

Ein Überblick über die erzielten Ergebnisse ist in Abb. 3.1 für eine Auswahl an nachgerechneten Nukliden gezeigt. Hierfür wurde zunächst für alle Einzelproben die Abweichung zwischen Rechnung und Experiment in der Form C/E-1 berechnet, wobei C für die berechnete Nuklidkonzentration und E für die experimentell bestimmte Nuklidkonzentration steht. Anschließend wurde für jedes Nuklid individuell der Mittelwert und die Standardabweichung über alle Einzelproben bestimmt. Der mittlere C/E-1-Wert gibt dabei die mittlere Abweichung zwischen Rechnung und Experiment an. Die Standardabweichung ist ein Maß für die Streubreite der Einzelwerte. Größere Abweichungen im Mittelwert weisen auf einen systematischen Fehler des Rechenprogramms oder auch der Messung hin. Ein Beispiel für letzteren Effekt ist der positive C/E-1-Wert bei metallischen Spaltprodukten, der auf einem zu kleinen Messwert aufgrund von Ausfällungseffekten in der Spaltproduktlösung bei der Messung beruht. Eine große Streubreite bzw. große Standardabweichung deutet auf große statistische Fehler hin. Dies kann einerseits auf großen Messunsicherheiten v. a. bei niedrigen Absolutwerten beruhen, daneben sind Streuungen in den Rechenergebnissen aufgrund von Unsicherheiten in den Eingabedaten denkbar.

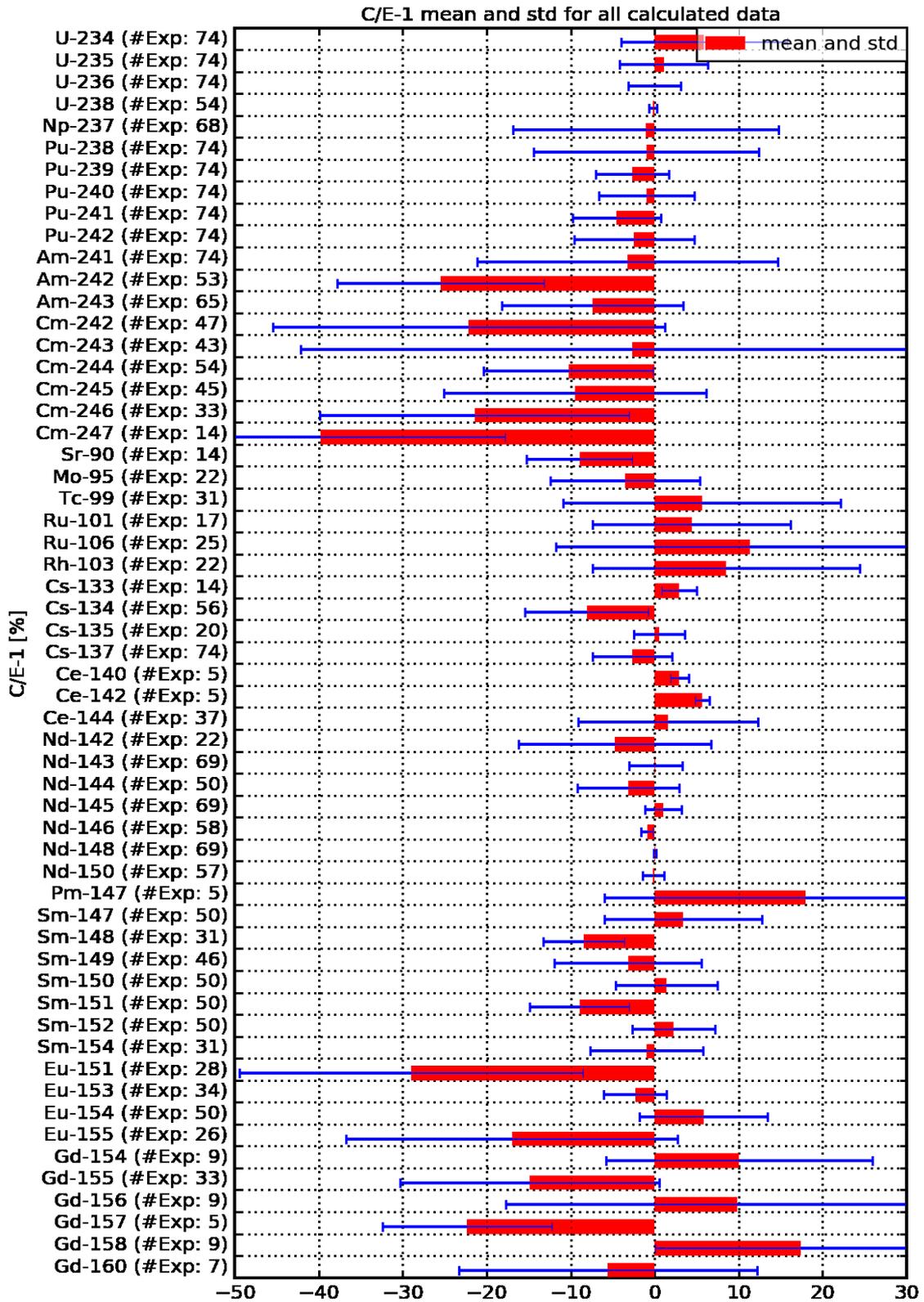


Abb. 3.1 Darstellung der über alle nachgerechneten Proben gemittelten Abweichungen zwischen Rechnung (C) und Experiment (E) als C/E-1 in Prozent.

Die Fehlerbalken geben die bei der Mittelung bestimmte Standardabweichung wieder

Wie in /BEH 18/ diskutiert, konnte mit MOTIVE insbesondere hinsichtlich der Aktinoiden eine Verbesserung der Übereinstimmung zwischen Rechnung und Experiment gegenüber entsprechenden Ergebnissen mit KENOREST /BEH 14/ erzielt werden. Dies unter anderem auf die Verwendung aktueller Wirkungsquerschnittsdaten zurückzuführen. Hinsichtlich der Spaltprodukte sind die Ergebnisse von MOTIVE und KENOREST vergleichbar. Ebenso lässt sich feststellen, dass die Qualität der Übereinstimmung zwischen Rechnung und Experiment vergleichbar zu anderen veröffentlichten Ergebnissen mit dem SCALE-Paket sind /ILA 12/.

3.2 Vergleich mit Rechenbenchmarks

Neben der Nachrechnung von experimentellen Daten bieten Rechenbenchmarks, bei denen verschiedene Simulationsprogramme anhand der Ergebnisse der Berechnung von detailliert beschriebenen Aufgabenstellungen verglichen werden, eine weitere Möglichkeit der Verifikation eines Simulationsprogramms. Im Rahmen des von der GRS jährlich veranstalteten „AAA-Workshops“ ist ein solcher Rechenbenchmark für jeweils ein Druckwasserreaktor-(DWR)-Brennelement und ein Siedewasserreaktor-(SWR)-Brennelement durchgeführt worden /AUR 15/. Diese beiden Benchmarkaufgaben wurden genutzt um für den aktuellen Entwicklungsstand die mit MOTIVE erzielten Ergebnisse mit denen anderer Programme zu vergleichen. Die genaue Aufgabenspezifikation ist in /AUR 15/ beschrieben. An dieser Stelle wird daher nur eine Übersicht über die Aufgabenstellung gegeben.

Bei dem DWR-Brennelement handelt es sich um eine 18x18-24-Anordnung mit homogener Anfangsanreicherung von 4,0 Gewichtsprozent ²³⁵U. Das Brennelement sollte mit einer spezifischen Leistung von 37,085 W/gHM ohne zwischenzeitliche Abkling Schritte bis zu einem Zielabbrand von 50 GWd/tHM bestrahlt und das brennelementgemittelte Inventar bestimmt werden. Für die Rechnung mit MOTIVE wurde hierzu ein Modell mit einer einzelnen Materialsorte definiert, so dass bereits während der Rechnung ein gemittelttes Inventar und gemittelte Spektraldaten verwendet wurden. Im Rahmen früherer Untersuchungen konnte gezeigt werden, dass dies gegenüber einer stabweisen Modellierung und Mittelung der Ergebnisse nur zu sehr geringen Abweichungen führt.

Das SWR-Brennelement besteht aus einer 8x8-Anordnung mit einem zentralen runden Wasserkanal, der den Bereich von 2x2 Brennstäben. Es enthält eine heterogene

Brennstoffanordnung mit vier verschiedenen Anfangsanreicherungen von 2,3 bis 4,9 Gewichtsprozent ^{235}U sowie Stäben mit abbrennbarem Absorber mit einer Anfangsanreicherung von 3 wt% ^{235}U und 4,5 wt% Gadoliniumanteil. Dieses Brennelement sollte mit einer spezifischen Leistung von 25,6 W/gHM bis zu einem Zielabbrand von 40 GWd/tHM abgebrannt werden, ebenfalls ohne zwischenzeitliche Abklingschritte. Der Dampfblasengehalt des Moderators innerhalb des Wasserkastens soll dabei 40 % betragen. Zu vergleichen ist das über die vier Eckstäbe gemittelte Nuklidinventar sowie der Verlauf des Multiplikationsfaktors über dem Abbrand.

Die Vergleichsrechnungen mit MOTIVE wurden mit der Version v0.6.3 durchgeführt. Hierbei handelt es sich um den aktuellen Stand der Entwicklung zum Ende des Vorhabens. Es wurden Rechnungen mit den Wirkungsquerschnittsbibliotheken ENDF/B-VII, ENDF/B-VII.1 und ENDF/B-VIII durchgeführt, um zwischen Effekten der Rechenmethode und der Wirkungsquerschnittsbibliothek differenzieren zu können. Zum Vergleich mit anderen Rechenprogrammen wurde eine Untermenge der eingereichten Ergebnisse ausgewählt. Dies sind im Einzelnen das Programm Serpent /LEP 15/ in den Versionen 1.1.18 und 2.1.9 jeweils mit ENDF/B-VII Daten in kontinuierlicher Energiedarstellung, die TRITON-Sequenz aus dem SCALE-Paket /OAK 12/ mit einer ENDF/B-VII Multigruppenbibliothek, das Programm HELIOS-1.11 der Firma Studsvik mit einer an LWR-Systeme angepassten ENDF/B-VI Bibliothek, und schließlich KENOEST mit der standardmäßigen JEF-2.2-basierten Wirkungsquerschnittsbibliothek sowie mit einer auf ENDF/B-VII-Daten aktualisierten Bibliothek.

DWR Brennelement

In Abb. 3.2 ist der Verlauf des Multiplikationsfaktors k_{eff} über dem Abbrand gezeigt. Man sieht, dass alle Programme sehr ähnliche Ergebnisse liefern. Dies ist in Abb. 3.3 noch einmal verdeutlicht, in der die Ergebnisse in der Form der Abweichung vom Mittelwert von k_{eff} dargestellt sind. Abgesehen von den beiden KENOEST-Lösungen, die sich deutlich von allen anderen unterscheiden, liegen alle Ergebnisse in einem schmalen Band von etwa 600 pcm, das sich auch zu höheren Abbränden nur unwesentlich aufweitet. Die drei mit MOTIVE berechneten k_{eff} -Verläufe liegen dicht bei den übrigen Lösungen, wobei zu höheren Abbränden hin etwas höhere Reaktivitäten berechnet werden. Während die Lösungen zu ENDF/B-VII und ENDF/B-VII.1 nahezu identisch sind, weist das Ergebnis mit ENDF/B-VIII-Daten zu Beginn des Abbrands eine um etwa 200 pcm geringere Reaktivität auf. Diese Diskrepanz wächst zu höheren Abbränden hin leicht an.

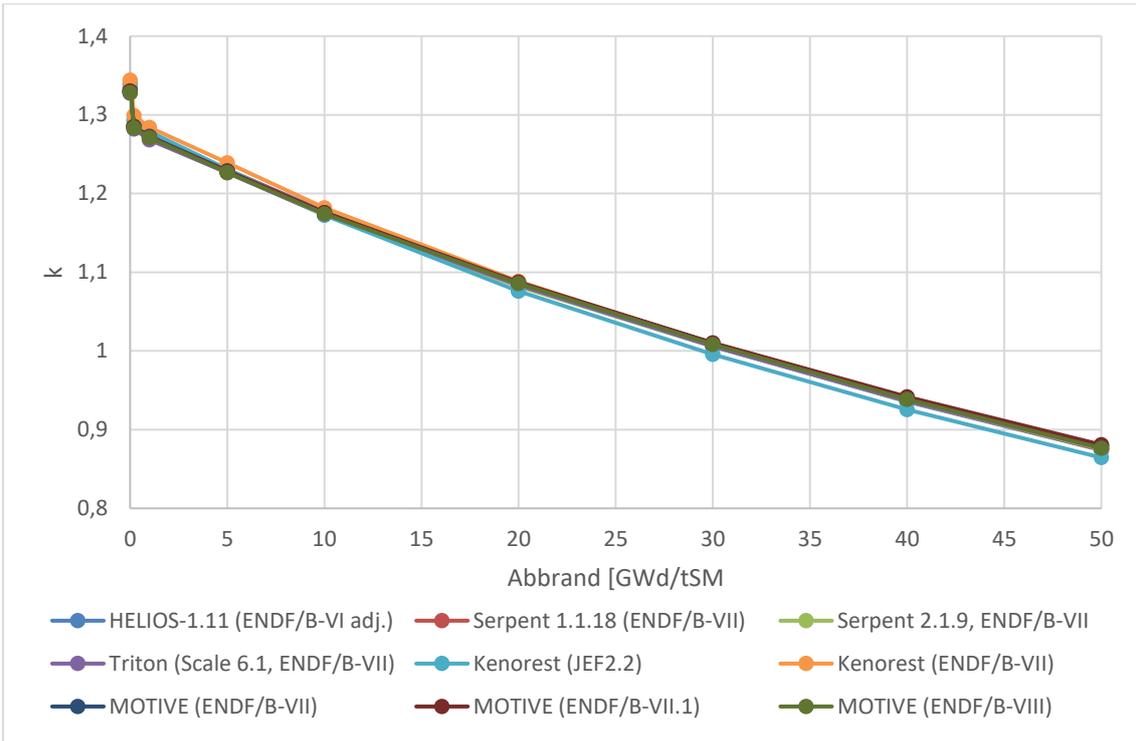


Abb. 3.2 GRS Rechenbenchmark, DWR Brennelement. Verlauf des Multiplikationsfaktors über dem Abbrand

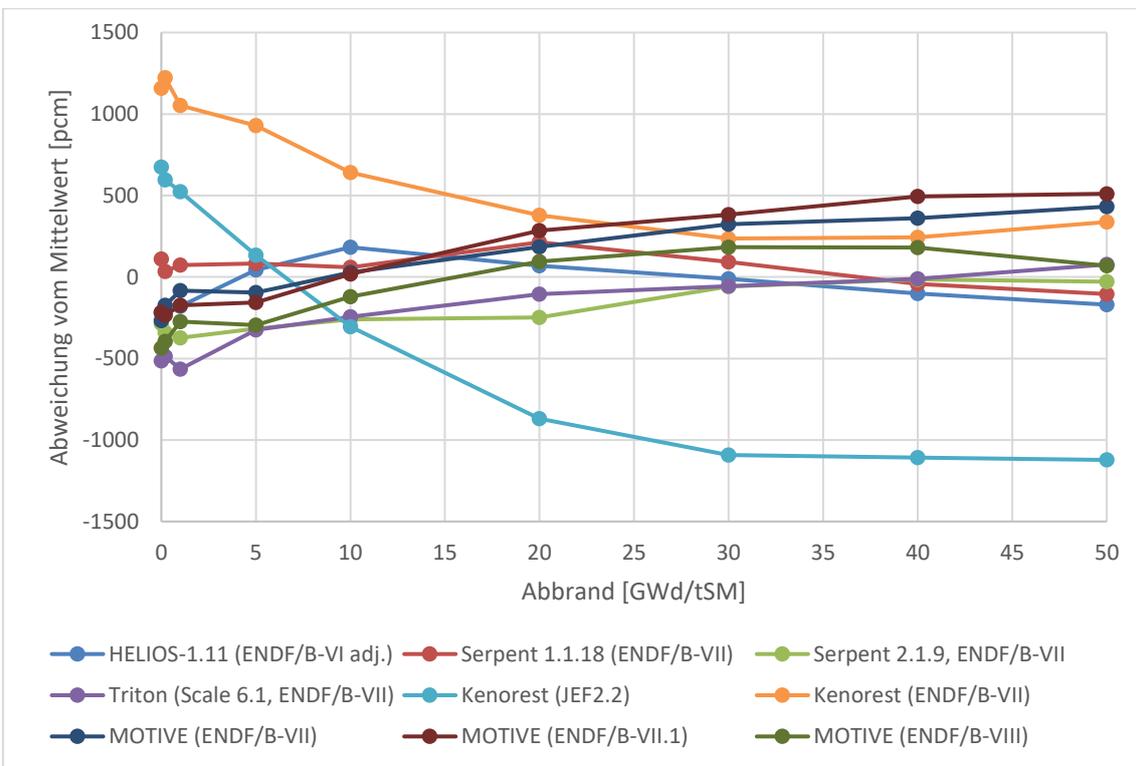


Abb. 3.3 GRS Rechenbenchmark, DWR Brennelement. Abweichungen der Multiplikationsfaktoren vom Mittelwert

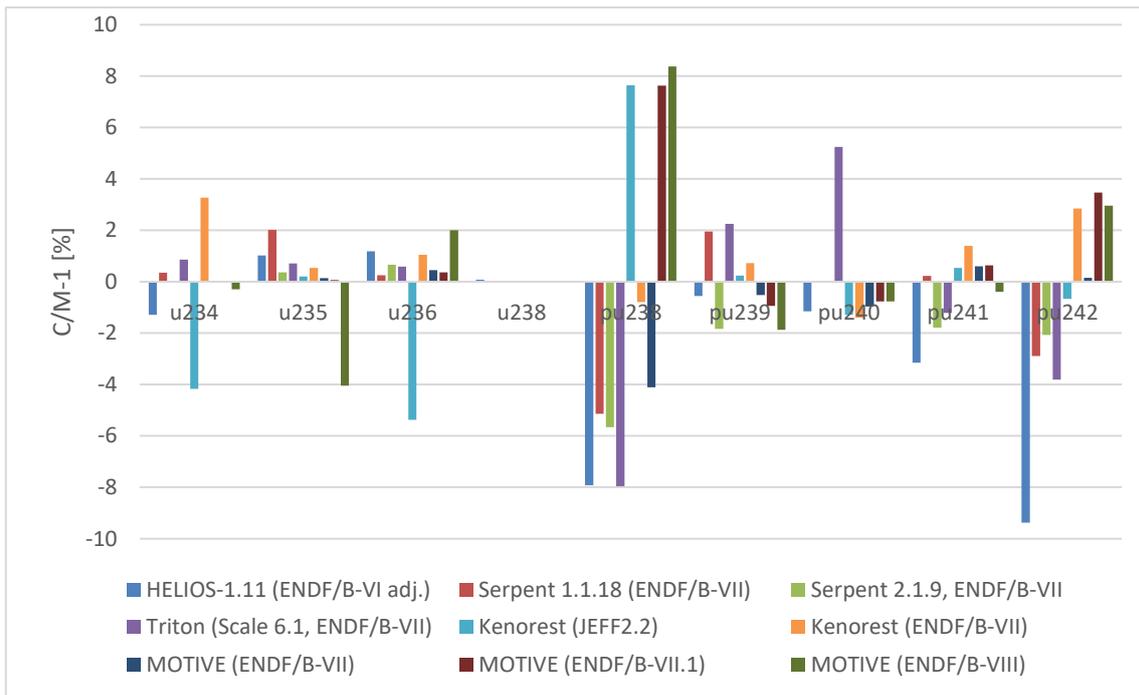


Abb. 3.4 GRS Rechenbenchmark, DWR Brennelement. Nuklidinventare Uran und Plutonium

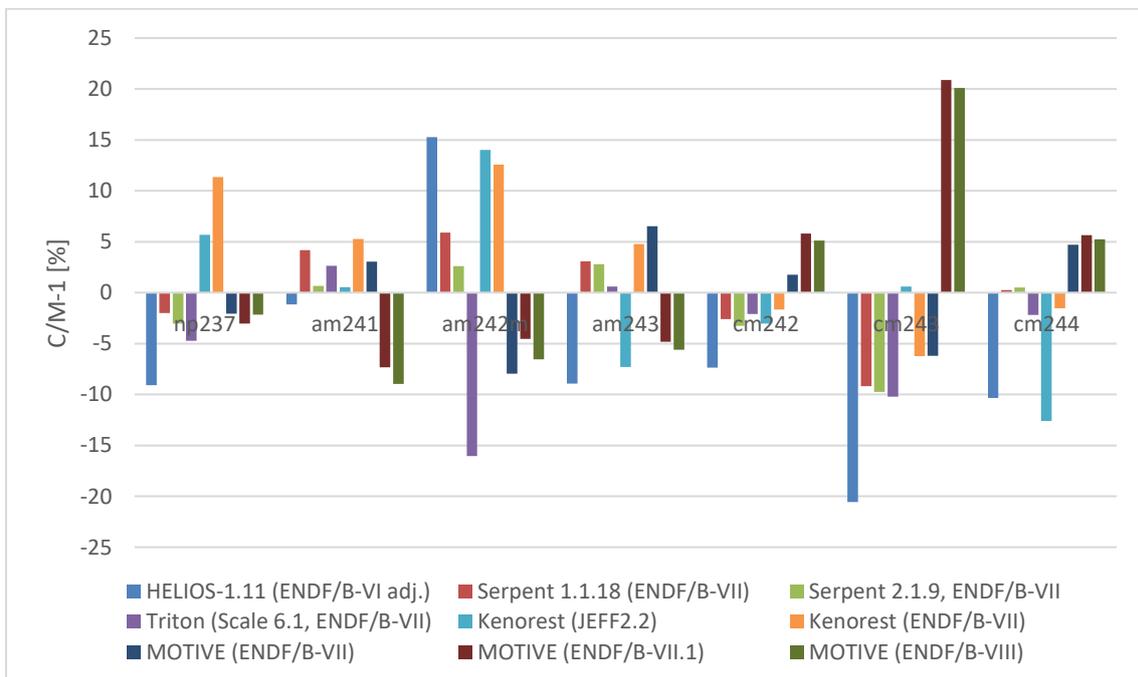


Abb. 3.5 GRS Rechenbenchmark, DWR Brennelement. Nuklidinventare höhere Aktinoide

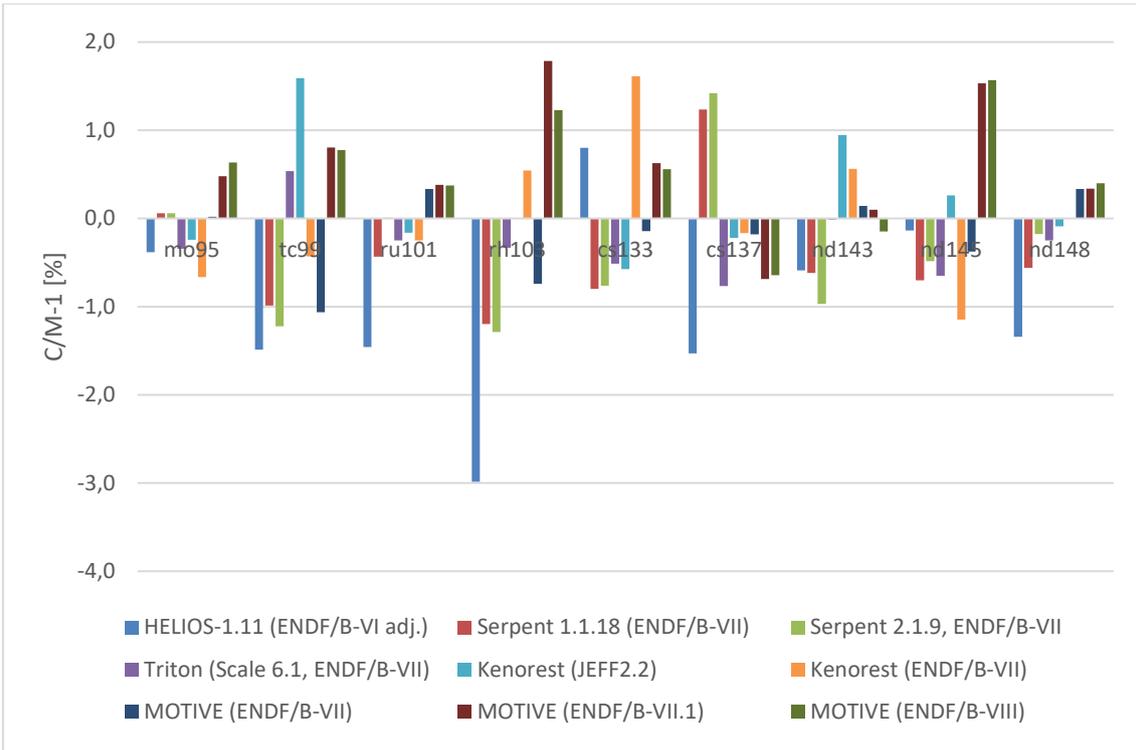


Abb. 3.6 GRS Rechenbenchmark, DWR Brennelement. Nuklidinventare Spaltprodukte

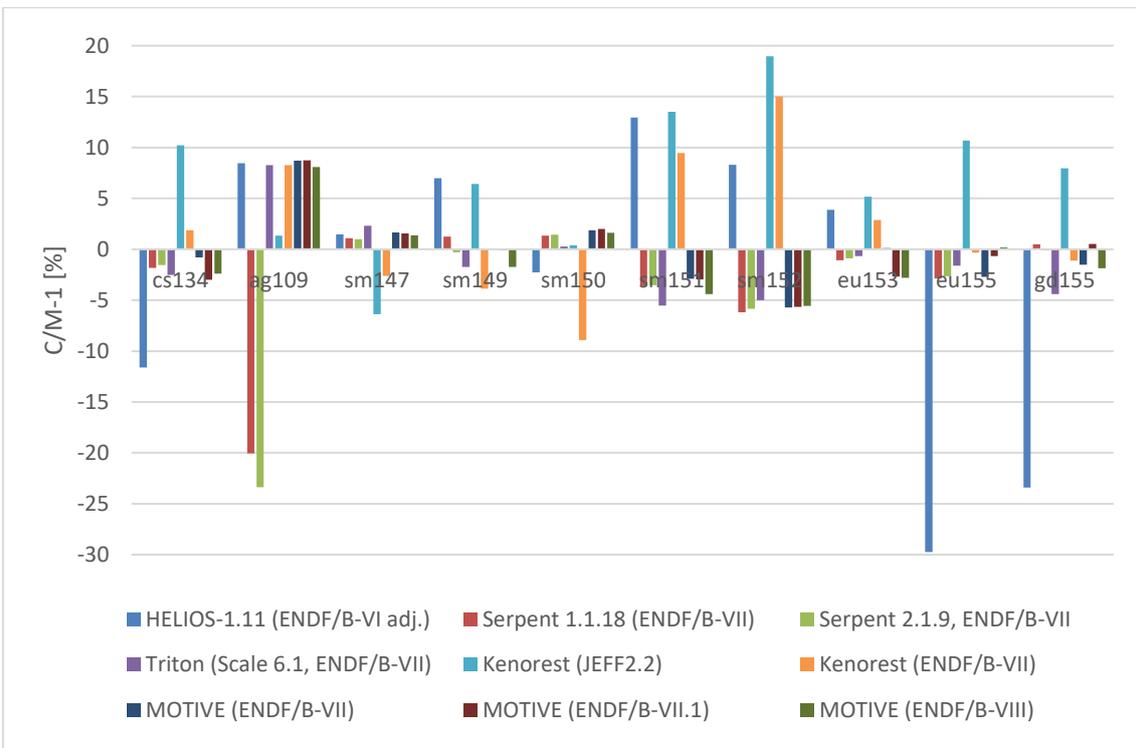


Abb. 3.7 GRS Rechenbenchmark, DWR Brennelement. Nuklidinventare Spaltprodukte (Fortsetzung)

Die Ergebnisse zu den Nuklidinventaren sind in Abb. 3.4 und Abb. 3.5 für die Aktinoiden sowie in Abb. 3.6 und Abb. 3.7 für die Spaltprodukte gezeigt. Die mit MOTIVE berechneten Ergebnisse bewegen sich dabei im Allgemeinen im Rahmen der Streubreiten der Ergebnisse der anderen Programme. Die Ergebnisse zeigen dabei häufig ein ähnliches Verhalten wie das auf ähnlichen Konzepten beruhende Programm SERPENT. Auffällig ist, dass die mit den ENDF/B-VII.1- und ENDF/B-VIII-Daten erzeugten Ergebnisse in einigen Fällen von der Lösung mit ENDF/B-VII abweichen. Hier spielen offensichtlich geänderte Wirkungsquerschnittsdaten eine Rolle. Erwähnenswert ist vor allem auch das von allen anderen Lösungen deutlich abweichende Ergebnis für ^{235}U , das mit den ENDF/B-VIII-Daten berechnet wurde. Der hier auftretende Unterschied von mindestens 4 % ist überraschend und benötigt eine nähere Untersuchung. Da die ENDF/B-VIII-Bibliothek erst kurz vor Vorhabensende bereitgestellt werden konnte, steht eine solche Untersuchung noch aus. Ein Problem bei der Bereitstellung der Bibliothek ist nicht auszuschließen, da die Veröffentlichung der ENDF/B-VIII-Daten mit einer Änderung im ENDF-Datenformat einhergegangen ist und die Programme zum Prozessieren der Daten noch nicht vollständig angepasst waren. Der Grund für den Unterschied bei ^{235}U muss dabei nicht unbedingt in den Daten des Nuklids selbst begründet liegen, sondern kann auch von anderen Nukliden herrühren, die einen wesentlichen Beitrag zum Neutronenspektrum und zur Reaktivität liefern.

In Fällen, bei denen die Nuklidkonzentration der MOTIVE-Rechnungen wesentlich von den anderen Ergebnissen abweicht, muss dies nicht zwingend bedeuten, dass diese Ergebnisse schlechter sind. So konnte zum Beispiel für die Curium-Isotope eine Verbesserung der Nachrechnung von Nachbestrahlungsanalyseproben gegenüber KENOEST nachgewiesen werden.

SWR Brennelement

Wie in Abb. 3.8 und Abb. 3.9 dargestellt sind die Unterschiede in den k_{eff} -Verläufen der einzelnen Abbrandprogramme deutlich größer als bei der Aufgabe für das DWR-Brennelement. Dies liegt hauptsächlich am Ausbrand der abbrennbaren Absorber innerhalb der ersten 15 GWd/tSM. Da schon eine geringe Änderung in der Gadoliniumkonzentration zu vergleichsweise großen Änderungen in der Reaktivität führt, tritt hier ein unterschiedliches Verhalten der verschiedenen Programme deutlicher zu Tage. Auffällig ist auch das von der Mehrheit der Programme abweichende Verhalten der beiden KENOEST-Lösungen im Bereich höherer Abbrände, d. h. nach dem Gadolini-

umausbrand. Dies könnte auf einen Effekt des Dampfblasengehalts zurückzuführen sein.

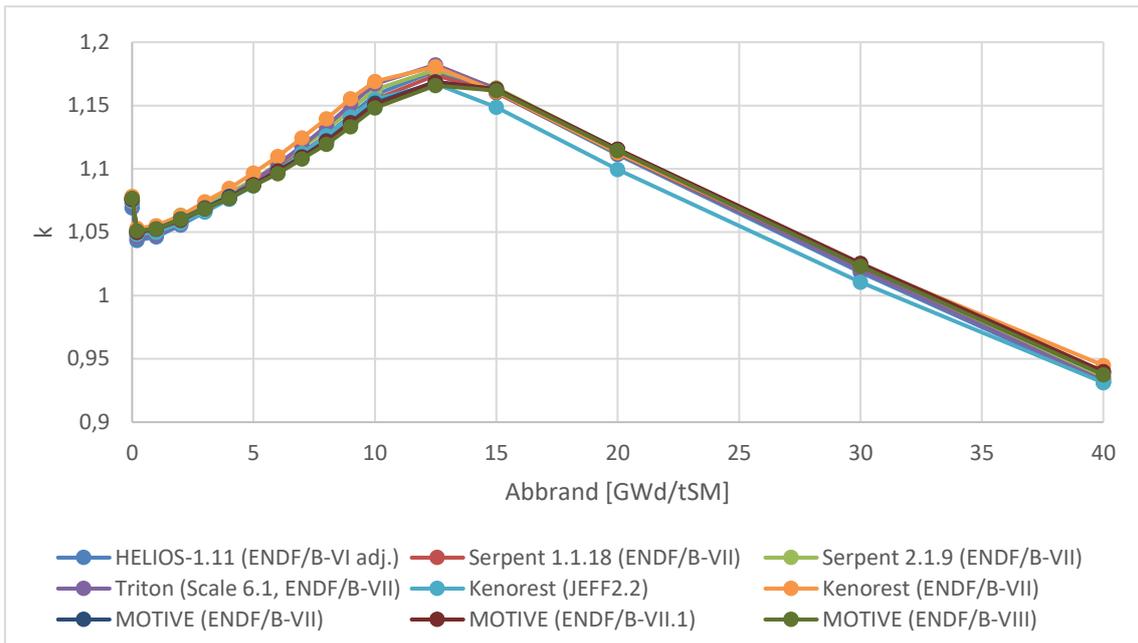


Abb. 3.8 GRS Rechenbenchmark, SWR Brennelement. Verlauf des Multiplikationsfaktors über dem Abbrand

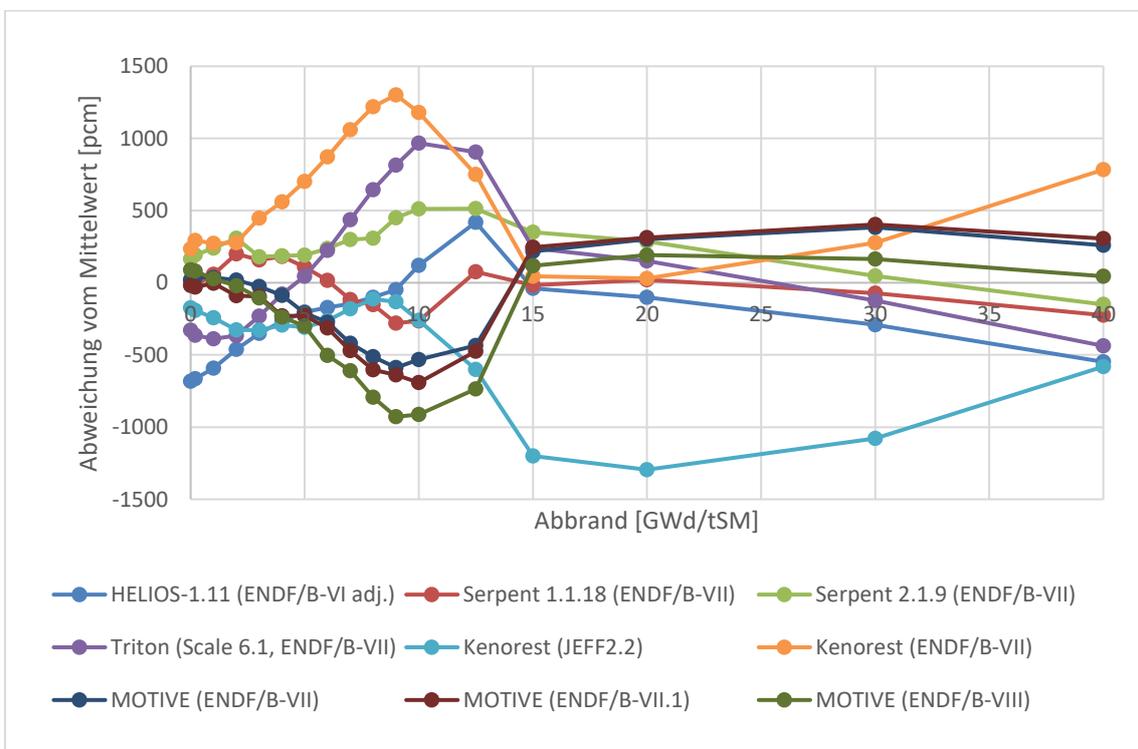


Abb. 3.9 GRS Rechenbenchmark, SWR Brennelement. Abweichungen der Multiplikationsfaktoren vom Mittelwert

Die Ergebnisse der Rechnungen mit MOTIVE liegen im Bereich der übrigen Resultate. Allerdings ist im Bereich um den Gadolinium-Peak eine gegenüber den anderen Ergebnissen um etwa 1000 pcm niedrigere Reaktivität zu beobachten. Für höhere Abbrände, d. h. nach dem Gadoliniumausbrand, liegen die mit MOTIVE berechneten Ergebnisse im oberen Bereich des aus den verschiedenen Lösungen gebildeten Reaktivitätsbands. Das Verhalten in diesem Bereich ist vergleichbar zu der Situation beim DWR-Brennelement. Ebenso wie bei den Rechnungen zum DWR-Brennelement zeigen die Lösungen zu den ENDF/B-VII- und ENDF/B-VII.1-Daten nahezu identische Reaktivitätsverläufe, während die Reaktivitätswerte für die ENDF/B-VIII-Lösung um etwa 250 pcm niedriger liegt. Da andere Effekte ausgeschlossen werden können, handelt es sich hierbei um einen reinen Bibliothekseffekt.

Die mit MOTIVE berechneten Ergebnisse zu den Nuklidinventaren für die Aufgabenstellung zum SWR-Brennelement zeigen ein zu den DWR-Ergebnissen vergleichbares Verhalten. Der Vergleich mit den Ergebnissen der anderen Codes ist in Abb. 3.10 und Abb. 3.11 für die Aktinoiden sowie in Abb. 3.12 und Abb. 3.13 für die Spaltprodukte gezeigt. Auffällig gegenüber der Situation beim DWR-Brennelement ist, dass alle MOTIVE-Ergebnisse für ^{235}U um mindestens 4 % von den Ergebnissen der anderen Codes abweichen. Hier treten unter Umständen Unterschiede im Neutronenspektrum aufgrund der komplexeren geometrischen Situation und des von Null verschiedenen Dampfblasengehalts zu Tage. Bei ^{239}Pu sind solche Unterschiede allerdings nicht zu beobachten. Eine wesentliche Rolle dürfte auch die beim SWR-Brennelement stärker zu Tage tretenden Unterschiede in der Berechnung des Abbrands spielen, die sich an der größeren Streubreite der ^{148}Nd Konzentration ablesen lässt. Diese liegt bei etwa 3 % gegenüber etwa 1,5 % beim DWR Brennelement. Die ^{148}Nd -Konzentration stellt ein Maß für die Gesamtanzahl an Spaltungen während des Abbrands dar. Der um etwa 1 % über dem Mittelwert liegende Gehalt an ^{148}Nd bei den MOTIVE Rechnungen spiegelt sich direkt in der geringeren ^{235}U -Konzentration wieder. Grundsätzlich spielen zwei mögliche Effekte für die angesprochene Streubreite eine Rolle. Zum einen kann bei gleichem Brennelementabbrand eine unterschiedlich berechnete Verteilung der Leistungen der einzelnen Stäbe zu Unterschieden beim stabweisen Abbrand führen, zum anderen spielt bei den gadoliniumhaltigen Brennstäben der Neutroneneinfang eine größere Rolle bei der Entwicklung der thermischen Leistung des Brennelements. Der Beitrag des Neutroneneinfangs wird allerdings von den verschiedenen Programmen bei der Leistungsermittlung auf unterschiedliche Art und Weise berücksichtigt. Insgesamt liegen mit MOTIVE erzielte Ergebnisse im Bereich der übrigen Daten, so das

aufgrund der Rechenbenchmarks zusätzliches Vertrauen in die Qualität der Berechnungen gewonnen werden konnte.

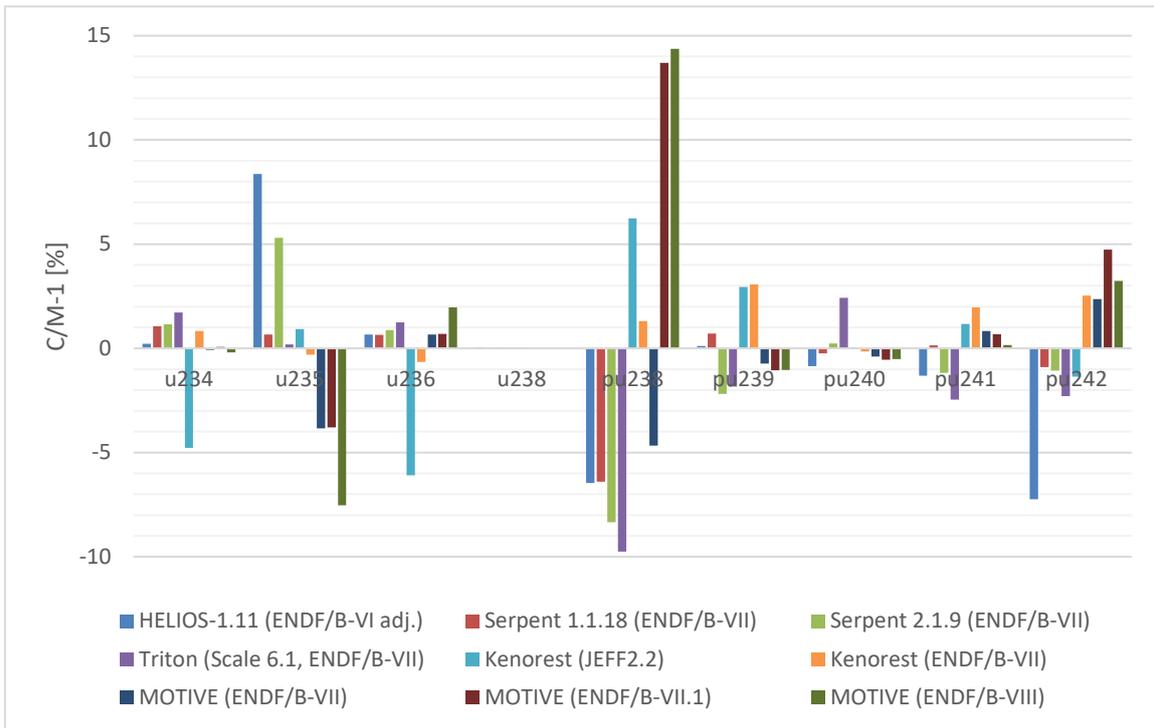


Abb. 3.10 GRS Rechenbenchmark, SWR Brennelement. Nuklidinventare Uran und Plutonium

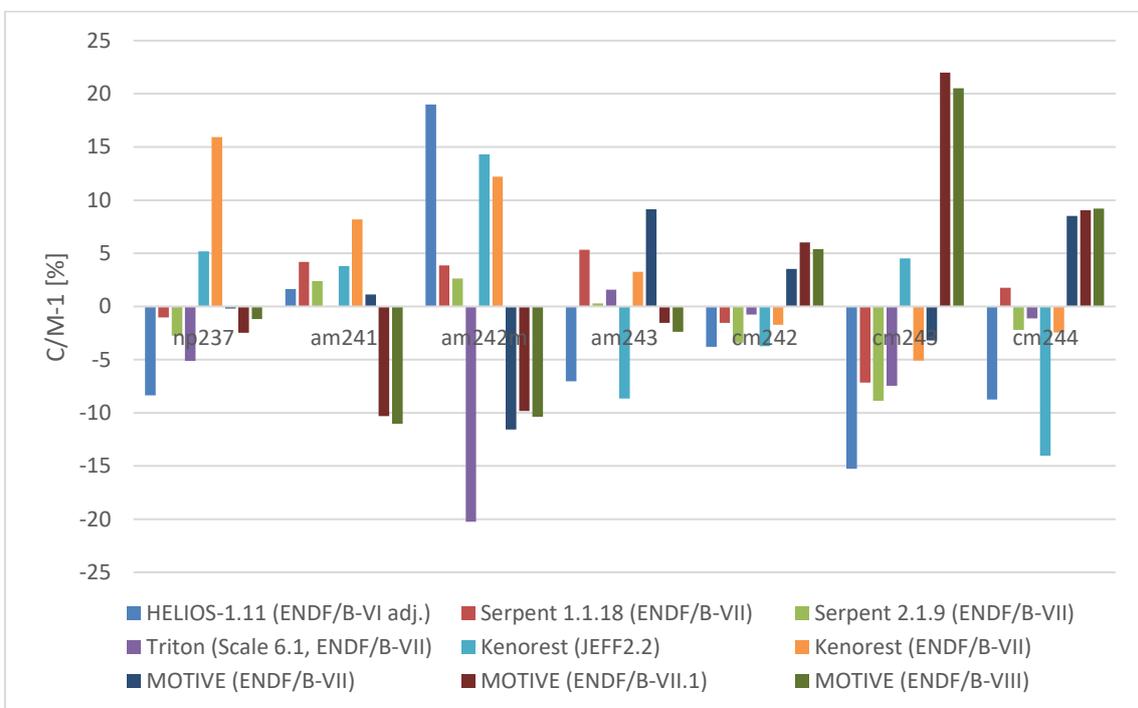


Abb. 3.11 GRS Rechenbenchmark, SWR Brennelement. Nuklidinventare höhere Aktinoide

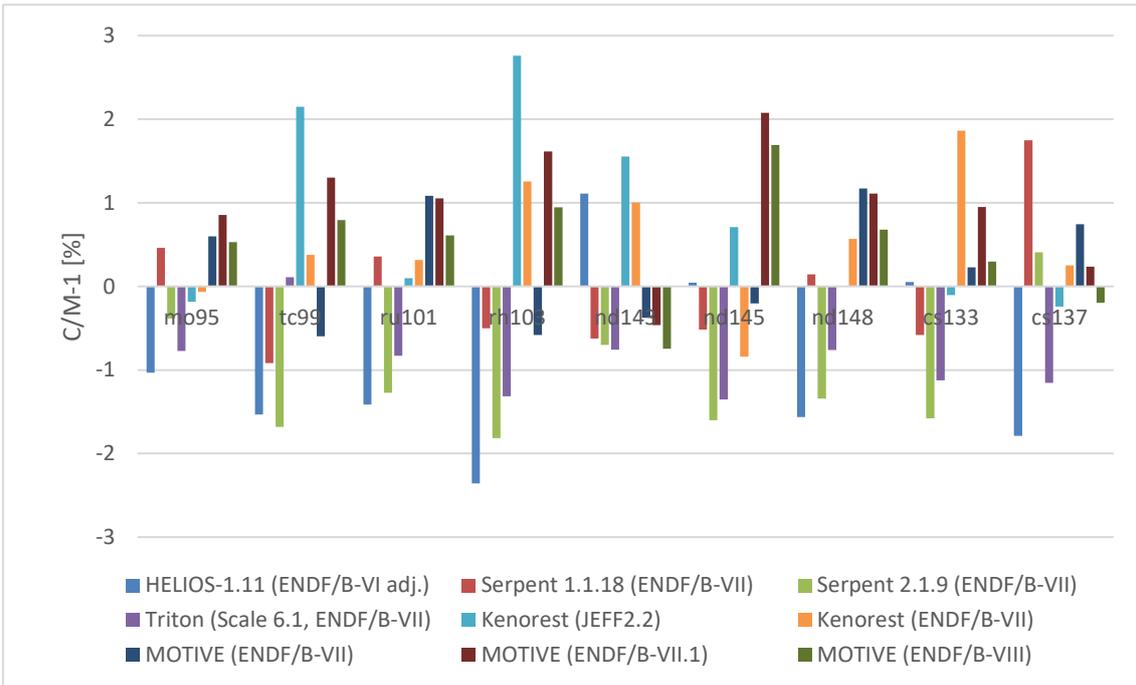


Abb. 3.12 GRS Rechenbenchmark, SWR Brennelement. Nuklidinventare Spaltprodukte

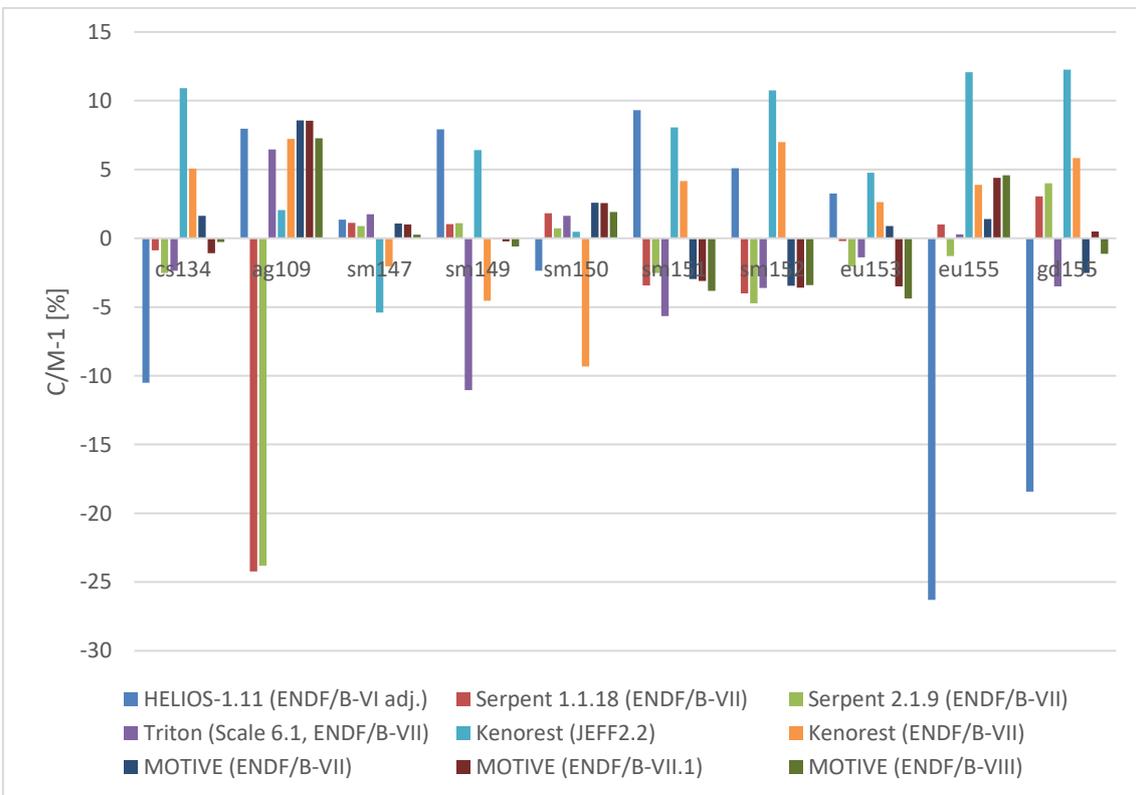


Abb. 3.13 GRS Rechenbenchmark, SWR Brennelement. Nuklidinventare Spaltprodukte (Fortsetzung)

4 AP2: Weiterentwicklung der GRS-eigenen Methoden zur Abbrandberechnung

Im Rahmen des vorliegenden Vorhabens wurden umfangreiche Entwicklungsarbeiten am Programmsystem MOTIVE und dem zugehörigen Nuklidinventarberechnungsprogramm VENTINA durchgeführt. Diese lassen sich im Wesentlichen in zwei Bereiche unterteilen, über die im Folgenden separat berichtet wird. Die Entwicklungsarbeit am Programm selbst, d.h. an der Programmstruktur und der Funktionalität des Programms, wird in Abschnitt 4.1 dargestellt. Für die Berechnungen werden in verschiedenen Teilbereichen des Programms nukleare Datenbibliotheken benötigt. Die Verbesserung und Erweiterung dieser Bibliotheken und der zu ihrer Bereitstellung benötigten Programme und Skripte wird in Abschnitt 4.2 beschrieben.

4.1 AP2.1: Weiterentwicklung MOTIVE/VENTINA

Im Rahmen des Vorhabens wurde das Programmsystem MOTIVE/VENTINA um einige Funktionalitäten ergänzt, die das Einsatzspektrum des Programms erweitern, die Qualität der Ergebnisse verbessern, und den Bedienungskomfort erhöhen. Diese werden im Folgenden einzeln dargestellt.

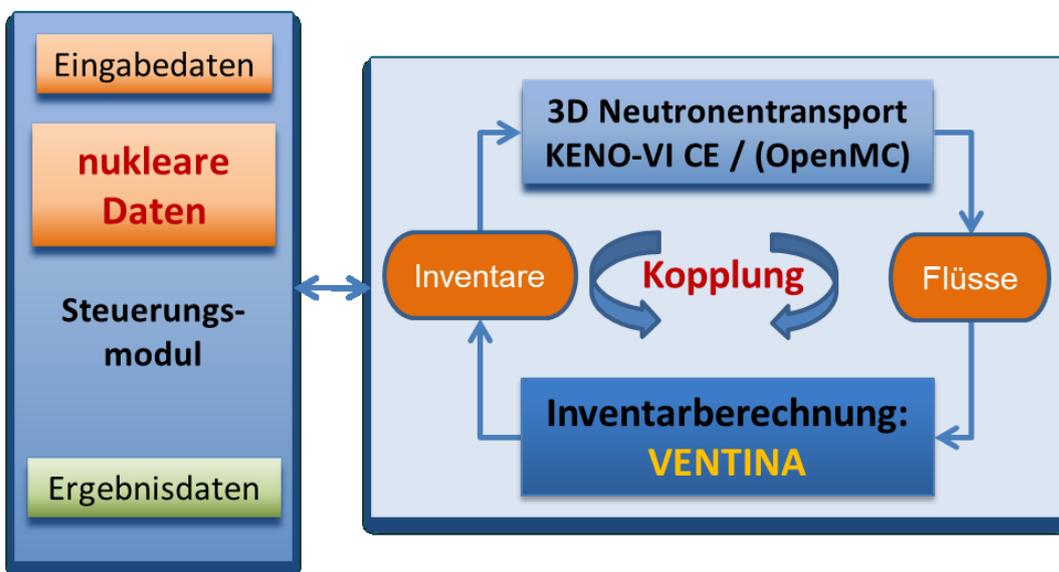


Abb. 4.1 Schematische Darstellung des Programmablaufs von MOTIVE

4.1.1 Predictor-Corrector Verfahren

Der grundlegende Programmablauf von MOTIVE ist in Abb. 3.1 dargestellt. Standardmäßig erfolgt die Kopplung iterativ. Zunächst wird für einen Zeitschritt mit Hilfe des gekoppelten Monte Carlo Programms der Neutronenfluss berechnet. Mit diesem werden die Reaktionsraten für die Nuklidinventarberechnung bestimmt und damit die zeitliche Entwicklung des Nuklidinventars bis zum nächsten Zeitschritt berechnet. Über dieses aktualisierte Inventar wird dann der Neutronenfluss zum nächsten Zeitschritt bestimmt. Bei dieser Art der Kopplung wird von der Näherung ausgegangen, dass sich die Spektralverhältnisse während des Zeitschritts nicht ändern. Die Zeitschritte dürfen daher nicht zu lang gewählt werden, um den dadurch verursachten Fehler nicht zu groß werden zu lassen. In der Literatur werden daher einige Verfahren beschrieben, die Korrekturen für diesen Fehler ermöglichen, sogenannte Predictor-Corrector-Verfahren. Eine umfangreiche Beschreibung solcher Verfahren findet sich in /ISO 15a/, /ISO 15b/, /ISO 11a/ und /ISO 11b/. Für die Implementierung in MOTIVE wurden drei Verfahren ausgewählt, die einerseits eine effiziente Verbesserung der Kopplung versprechen, andererseits mit einem möglichst geringen zusätzlichen Rechenaufwand einhergehen. Diese Verfahren werden in den folgenden Absätzen im Einzelnen beschrieben. Zum Verständnis der Algorithmen-Beschreibung und der zugehörigen graphischen Darstellungen sind einige Definitionen zu beachten: Es wird jeweils ein Abbrandschritt beschrieben dessen Beginn mit T_0 und dessen Ende mit T_1 bezeichnet werden soll. In den Ablaufschemata bezeichnet N_i das Nuklidinventar zum Zeitschritt T_i , F_i ist ein Neutronenflussberechnungsschritt zum Zeitpunkt T_i und D_i stellt einen Nuklidinventarberechnungsschritt zum Zeitpunkt T_i dar.

Standard-Verfahren

Die hier als Standard-Verfahren bezeichnete Predictor-Corrector-Methode wird in /ISO 15a/ auch als CE/BE-Verfahren bezeichnet (für „constant extrapolation/backwards extrapolation“). Es ist schematisch in dargestellt und umfasst für einen einzelnen Abbrandschritt die folgenden Schritte:

1. Der Neutronenfluss ϕ_0 wird mit dem Nuklidinventar zum Zeitpunkt T_0 berechnet.
2. Mit diesem Neutronenfluss werden die Reaktionsraten für die Nuklidinventarberechnung bestimmt und die Zeitentwicklung des Inventars bis zum Zeitpunkt T_1 berechnet.

3. Mit dem neuen Nuklidinventar wird eine weitere Flussberechnung durchgeführt.
4. Aus dem so bestimmten Fluss ϕ_1 werden erneut Reaktionsraten bestimmt.
5. Mit diesen wird die Inventarberechnung von T_0 bis T_1 wiederholt.
6. Als finales Nuklidinventar zum Zeitpunkt T_1 wird der Mittelwert aus beiden Berechnungen verwendet.
7. Das gemittelte Inventar und der Fluss ϕ_0 dienen als Startwerte für den nächsten Abbrandschritt.

Zu beachten ist, dass bei der hier implementierten Version dieses Verfahrens jeweils nur eine Flussberechnung pro Zeitschritt durchgeführt werden muss. Es werden also keine zusätzlichen, rechenintensiven Flussberechnungsschritte benötigt. In einer Variante dieses Verfahrens kann nach der Mittelung des Nuklidinventars vor dem Beginn des nächsten Zeitschritts eine erneute Flussberechnung durchgeführt werden. Dies ist insofern präziser, als dass die Flussberechnung mit dem finalen Nuklidinventar und nicht mit dem der Predictor-Rechnung gemacht wird. Allerdings wird der Genauigkeitsgewinn durch einen überproportional großen Mehraufwand bezahlt. Da die Gesamtrechendauer im Wesentlichen von der Dauer der Flussberechnung bestimmt wird, wird in dieser Variante der Rechenaufwand nahezu verdoppelt.

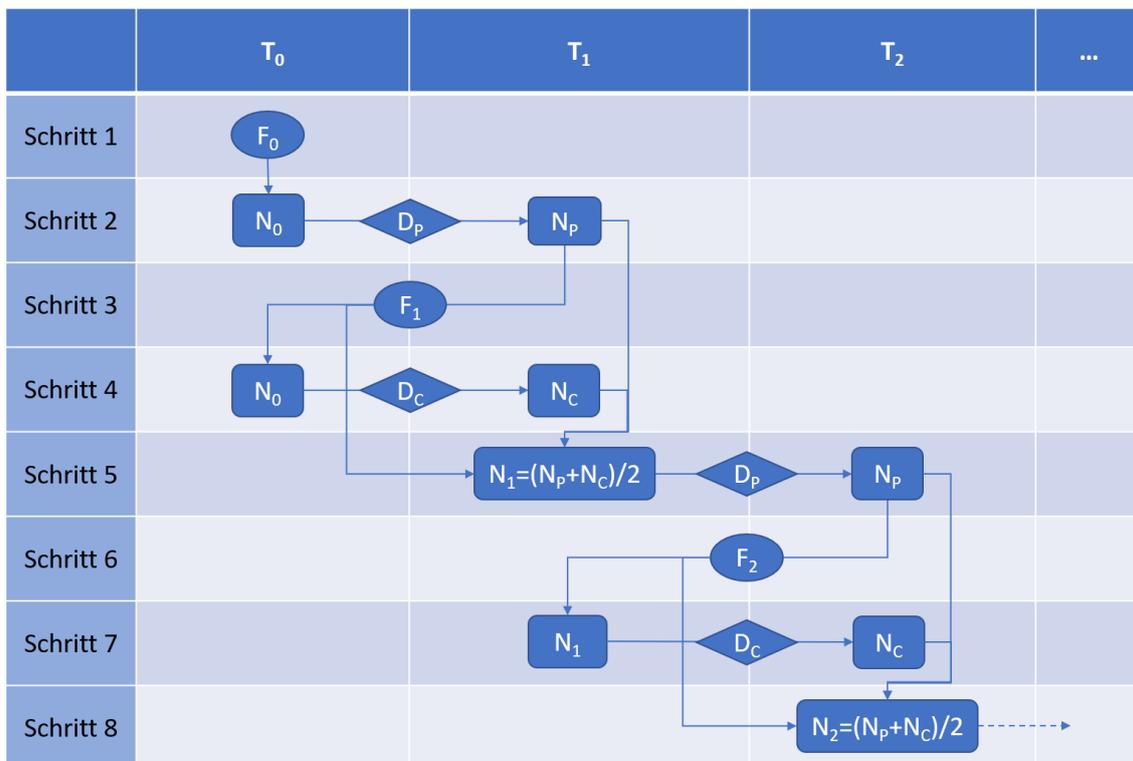


Abb. 4.2 Graphische Darstellung des Standard-Predictor-Corrector-Verfahrens

Zwischenwertmethode

Bei der zweiten implementierten Methode, der sog. Zwischenwertmethode, wird die Flussberechnung jeweils zum halben Zeitschritt durchgeführt, so dass die Nuklidinventarberechnung in linearer Näherung mit dem mittleren Neutronenfluss dieses Zeitschrittes erfolgt. Eine analoge Methode ist beispielsweise in der TRITON-Sequenz des SCALE-Pakets implementiert [REA 17]. Im Detail funktioniert dieses Verfahren folgendermaßen:

0. Initialisierungsschritt (nur zu Beginn der Rechnung): Mit dem Anfangsinventar wird eine Neutronenflussberechnung zum Zeitpunkt T_0 durchgeführt.
1. Aus dem Neutronenfluss werden die Reaktionsraten für die Nuklidinventarberechnung bestimmt.
2. Die Entwicklung des Nuklidinventars erfolgt mit diesen Reaktionsraten bis zum Zeitpunkt $T_{1/2} = (T_0 + T_1)/2$.
3. Mit dem neuen Nuklidinventar wird erneut eine Flussberechnung durchgeführt.
4. Mit dem neu berechneten Fluss werden erneut Reaktionsraten bestimmt und mit diesen die Nuklidinventarberechnung wiederholt, dieses Mal bis zum Zeitpunkt T_1 .
5. Die Nuklidinventarberechnung wird mit den gleichen Reaktionsraten fortgesetzt bis zur Zeit $T_{3/2} = (T_1 + T_2)/2$, und das Verfahren kann danach bei Schritt 3 fortgesetzt werden.

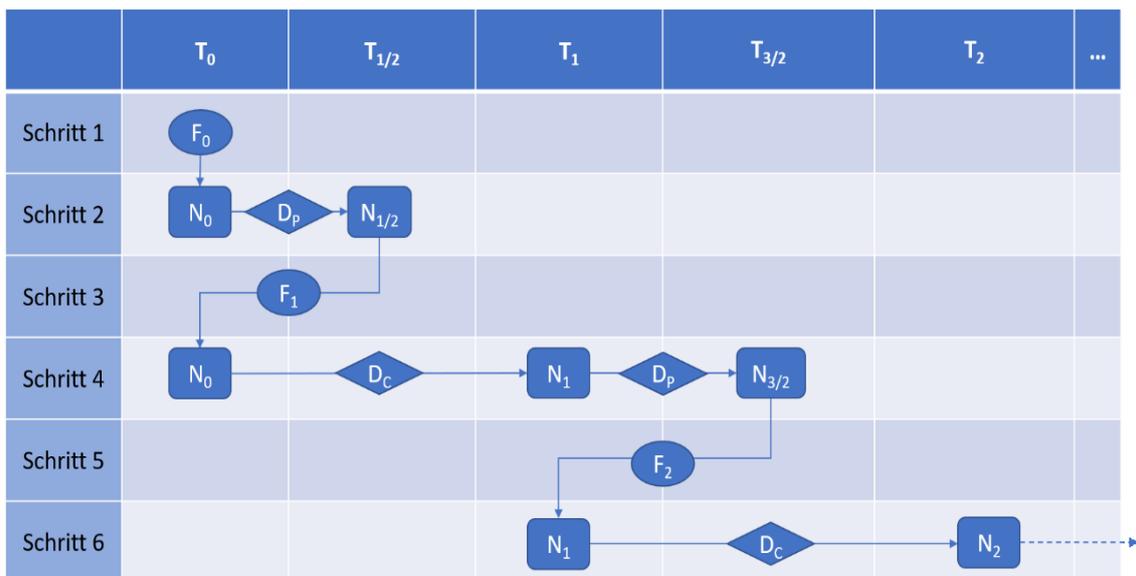


Abb. 4.3 Graphische Darstellung des Zwischenschritt-Verfahrens

Wie beim Standardverfahren entspricht auch hier die Zahl der Flussberechnungen der Berechnung ohne Predictor-Corrector. Es entsteht also ebenfalls nur sehr geringer zusätzlicher Rechenaufwand in Form von zusätzlichen Inventarberechnungen.

Lineare Extrapolation

Bei der Methode der linearen Extrapolation werden die Reaktionsraten zweier vorangegangener Zeitschritte verwendet, um für den folgenden Zeitschritt Reaktionsraten zu extrapolieren, mit denen dann die Nuklidinventarberechnung erfolgt. In Einzelschritten dargestellt funktioniert der Algorithmus folgendermaßen:

0. Initialisierungsschritte: Zunächst müssen zwei Zeitschritte T_0 und T_1 konventionell, d. h. ohne Predictor-Corrector gerechnet werden.
1. Für den nächsten Zeitschritt werden die für die beiden vorhergehenden Zeitschritte berechneten Reaktionsraten verwendet, um neue Reaktionsraten bis zur Zeit T_2 zu extrapolieren. Dabei können beliebig viele Zwischenschritte verwendet werden.
2. Die Berechnung des Nuklidinventars läuft dann folgendermaßen:
 - a. Es werden Zwischenschritte t_1, \dots, t_n gebildet.
 - b. Die Nuklidinventarberechnung erfolgt dann von Schritt T_1 bis t_1 mit den zum Zeitpunkt T_1 berechneten Reaktionsraten.
 - c. Die Nuklidinventarberechnung von t_1 bis t_2 erfolgt mit den für t_1 extrapolierten Reaktionsraten.
 - d. Die Nuklidinventarberechnung von t_2 bis t_3 erfolgt mit den für t_3 extrapolierten Reaktionsraten.
 - e. Dies wird fortgesetzt bis T_2 erreicht ist.
3. Mit dem für T_2 berechneten Inventar erfolgt eine neue Flussberechnung und die Rechnung wird mit Schritt 1 fortgesetzt und solange iteriert bis der Zielabbrand erreicht ist.

Da der erste Zeitschritt bei der Abbrandrechnung im Allgemeinen ein Initialisierungsschritt ist, bei dem sich unter anderem die Xenon-Konzentration auf ihren Gleichgewichtswert einstellt, ist diese Methode so implementiert, dass erst nach dem dritten Schritt mit der Extrapolation begonnen wird. Wie bei den vorhergehenden Methoden ergibt sich auch hier wieder keine signifikante Erhöhung der Rechenzeit, da ebenfalls keine zusätzlichen Neutronenflussberechnungen benötigt werden. Solange die Änderungen in den spektralen Verhältnissen im Wesentlichen linear bleiben, hat diese Me-

thode den Vorteil, dass ein längerer Abbrandschritt in kürzere Inventarberechnungsschritte eingeteilt werden kann, bei denen jeweils die Reaktionsraten aktualisiert werden, ohne dass zusätzliche Neutronenflussberechnungen notwendig werden. Wenn sich die Änderung der Reaktionsraten über den Abbrand nichtlinear verhält, wie dies beispielsweise bei Brennelementen mit abbrennbaren Absorbern der Fall ist, kann das Verfahren versagen und deutlich schlechtere Ergebnisse liefern als die konventionelle Rechnung.

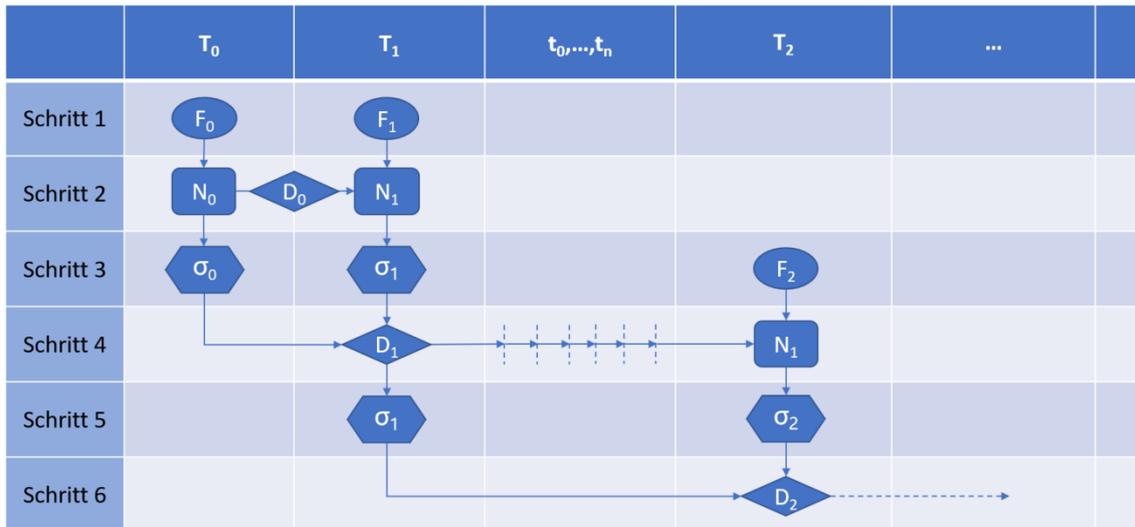


Abb. 4.4 Graphische Darstellung der linearen Extrapolationsmethode

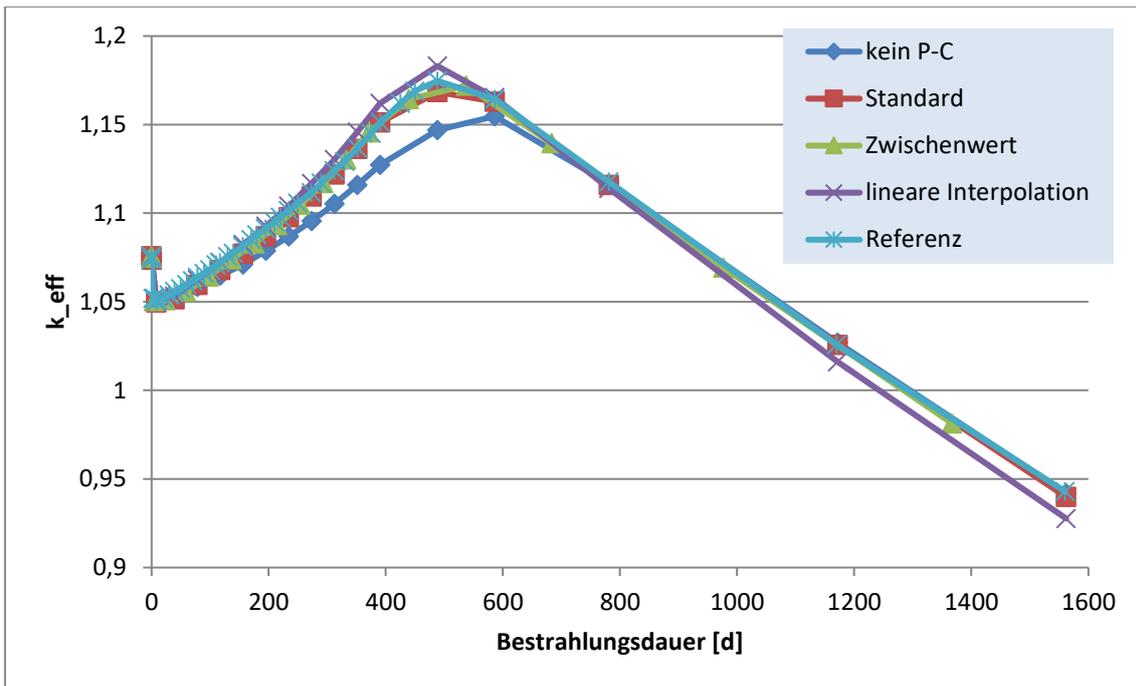


Abb. 4.5 Verlauf des Multiplikationsfaktors über die Bestrahlungsdauer für das SWR Brennelement aus dem GRS Rechenbenchmark und die verschiedenen Kopplungsalgorithmen

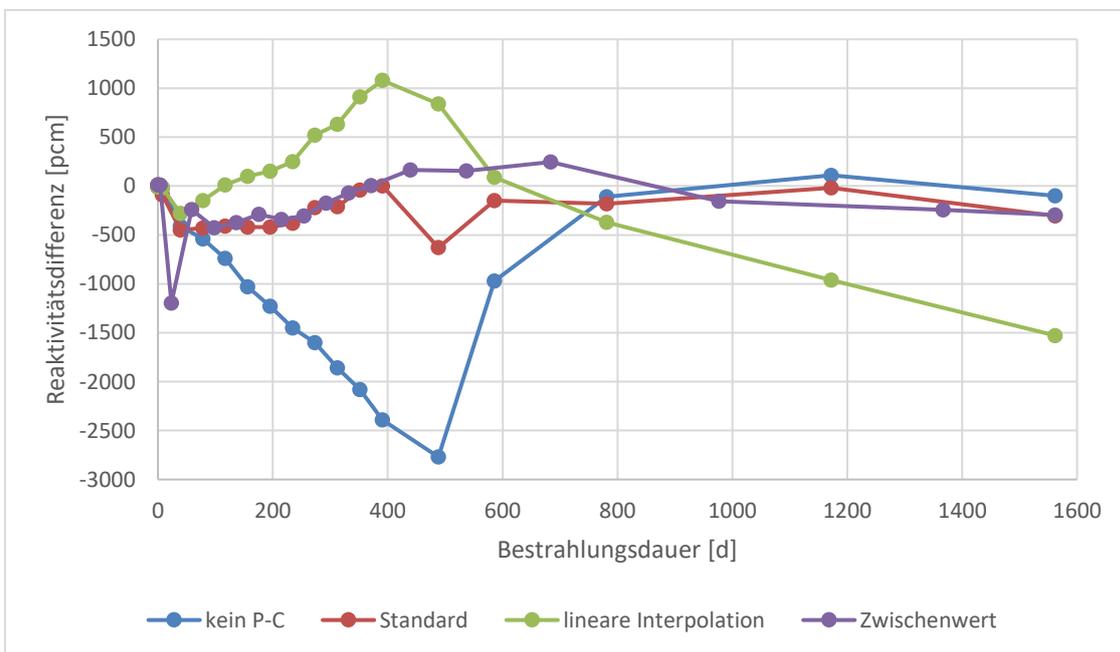


Abb. 4.6 Reaktivitätsdifferenz der verschiedenen Berechnungsmethoden im Vergleich zur Referenzrechnung

Zu Testzwecken wurde das in Abschnitt 3.1 beschriebene SWR Brennelementmodell verwendet, um das Potential der verschiedenen Verfahren zu illustrieren. Hierzu wurde

zunächst eine Referenzrechnung mit sehr feinen Zeitschritten durchgeführt. Anschließend wurde je eine Rechnung ohne Predictor-Corrector und mit den drei beschriebenen Predictor-Corrector-Verfahren durchgeführt und mit der Referenzrechnung verglichen. In Abb. 4.5 ist der Verlauf des Multiplikationsfaktors über die Bestrahlungsdauer gezeigt. Man sieht, dass die konventionelle Rechnung zu einer deutlich zu flachen Kurve führt, also das Gadolinium zu langsam ausbrennt. Mit dem Standard-Predictor-Corrector-Verfahren wird hingegen die Referenzrechnung sehr gut getroffen, trotz der deutlich größeren Zeitschritte. Gleiches gilt auch für das Zwischenwertverfahren. Das lineare Extrapolationsverfahren überschätzt den Multiplikationsfaktor zunächst, um ihn dann nach Überschreiten des Maximums der Kurve tendenziell zu niedrig auszurechnen. Dieses Verhalten ist auf die Nichtlinearität des betrachteten Problems zurückzuführen. Aufgrund der Ergebnisse dieser und weiterer Testrechnungen wurde die hier als Standardverfahren bezeichnete Methode durchgängig für alle weiteren Rechnungen verwendet. Dies gilt auch für die in Kapitel 3 beschriebenen Validierungsrechnungen.

4.1.2 Anbindung des Monte Carlo-Programms OpenMC

Das Programmsystem MOTIVE wurde von vorneherein so ausgelegt und strukturiert, dass eine Anbindung zusätzlicher oder alternativer externer Programme einfach und ohne großen Programmieraufwand möglich ist. Dies dient einerseits dem Zweck, eine gewisse Unabhängigkeit von einzelnen externen Modulen zu erreichen, und um andererseits die Möglichkeit zu einer Verifizierung der Ergebnisse der externen Module zu erhalten. Daher war ein Ziel des vorliegenden Vorhabens, ein zweites Programm zur Berechnung des Neutronenflusses in den Programmablauf einzubinden. Die Wahl fiel dabei auf das ursprünglich am MIT entwickelte Open Source Programm OpenMC [ROM 13]. Es handelt sich dabei um ein in erster Linie auf Kritikalitätsrechnungen spezialisiertes Monte Carlo Programm. Es ermöglicht die Berechnung dreidimensionaler durch Flächen zweiter Ordnung begrenzter Geometrien. Das Programm zeichnet sich durch moderne Programmiermethoden und eine gute Anwendbarkeit bei hochparallelisierten Rechnungen aus. Es wird von einer Gruppe von Programmierern verschiedener vorwiegend US-amerikanischer Universitäten und Forschungseinrichtungen weiterentwickelt. Die wenig restriktive MIT-Lizenz, unter der das Programm veröffentlicht ist, ermöglicht eine problemlose Verwendung des Programms.

Die Anbindung des Programms erfolgte analog zur Anbindung des Programms KENO-VI über das automatisierte Schreiben von Eingabedateien, eine Ansteuerung des Pro-

gramms innerhalb von MOTIVE und das Auslesen der Ergebnisdaten. Hierzu wurden entsprechende Schreibe- und Leseroutinen geschrieben. Die ausgelesenen Ergebnisdaten, im Wesentlichen der Neutronenfluss in den relevanten Materialien, der Multiplikationsfaktor und die zugehörigen Unsicherheiten, werden in die bereits vorhandenen Datenstrukturen geschrieben, so dass der übrige Programmablauf identisch zu dem bei Verwendung von KENO-VI ist. Die Ansteuerung des jeweiligen Neutronenflussberechnungsprogramms erfolgt über einen Parameter in der Eingabedatei („flux_solver“). Dadurch kann der gleiche Eingabedatensatz mit beiden Flusslösern verwendet werden. Es muss lediglich der genannte Eingabeparameter angepasst werden.

OpenMC unterliegt einer kontinuierlichen Weiterentwicklung, so dass in regelmäßigen Abständen neue Versionen veröffentlicht werden. Diese enthalten teilweise auch Änderungen an für die Kopplung mit MOTIVE relevanten Größen wie zum Beispiel dem Ausgabedatenformat und dem Format der Wirkungsquerschnittsdaten.

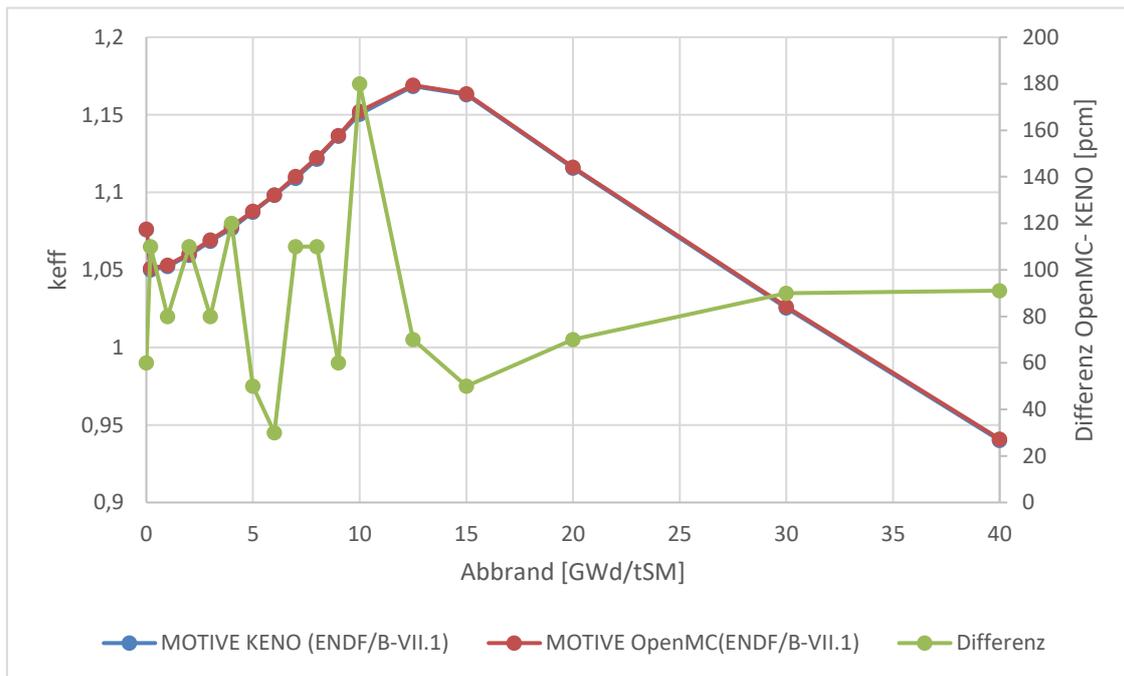


Abb. 4.7 Vergleich des k_{eff} -Verlaufs über den Abbrand für MOTIVE-Rechnungen mit KENO und OpenMC

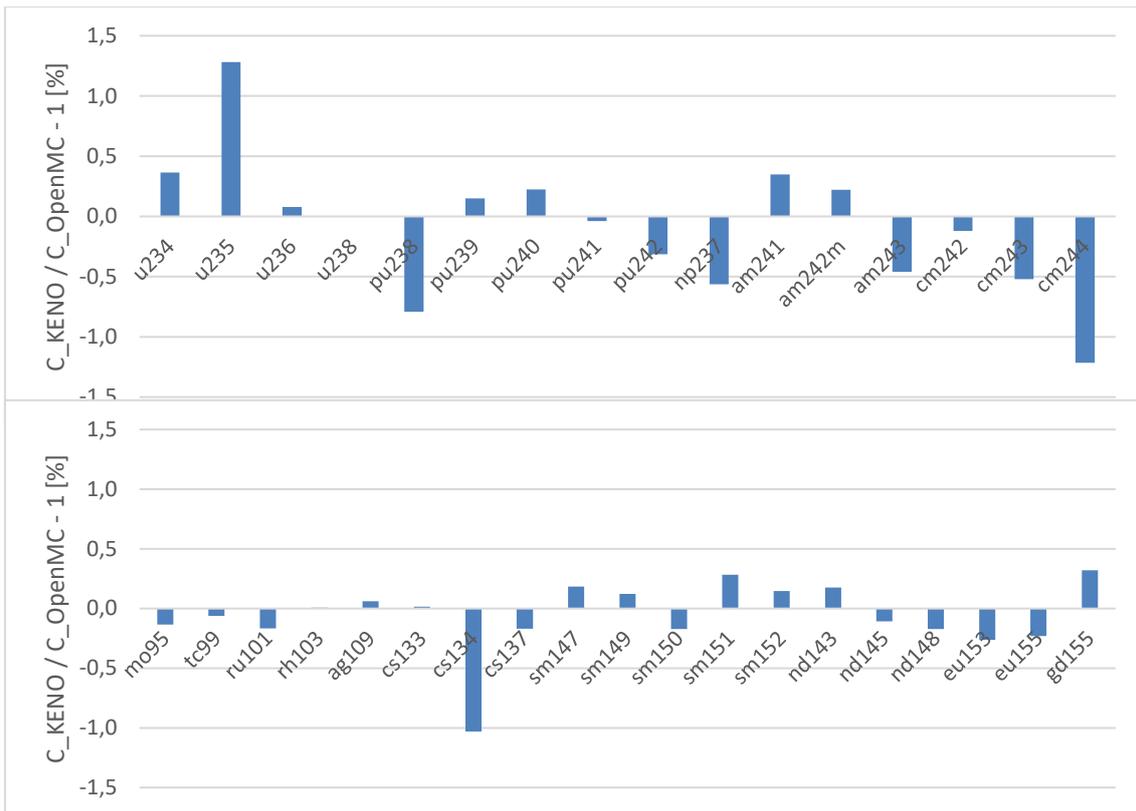


Abb. 4.8 Differenz der Nuklidinventare für MOTIVE-Rechnungen mit den Programmen KENO und OpenMC

Dies führt dazu, dass entsprechende Änderungen an MOTIVE notwendig werden, um die jeweils aktuelle Version anzubinden. Bei Erstellung der Kopplung wurde OpenMC in der Version 0.7.1 verwendet. Aktuell ist die Version 0.9.0 angebunden.

Zur Verifikation der Kopplung wurden eine Reihe von Testrechnungen durchgeführt. Als Beispiel ist in Abb. 4.7 der Verlauf der k_{eff} -Werte und deren Differenz über dem Abbrand für das oben beschriebene SWR Benchmarkmodell gezeigt. Die starken Schwankungen in der Differenz der beiden Ergebnisse bis zum Gadoliniumausbrand sind vermutlich mit statistischen Variationen zu erklären. In Abb. 4.8 sind die zugehörigen Differenzen der Nuklidkonzentrationen gezeigt. Die Unterschiede liegen in einem Bereich, der für zwei unterschiedliche Neutronenflussberechnungsprogramme zu erwarten ist.

4.1.3 Berechnung der Moderatorordichte

Das Vorgängerprogramm KENOREST verfügt über die Möglichkeit einer internen Moderatorordichte-Berechnung. Diese Funktion stellt eine wesentliche Erleichterung bei der Erstellung von Eingabedateien für Abbrandrechnungen, da die Definition der Nuklidichten entfällt und lediglich Druck, Temperatur und gegebenenfalls der Dampfblasengehalt angegeben werden muss. Daher sollte diese Funktion in MOTIVE übernommen werden. Die Berechnungsroutinen wurden dabei einer Aktualisierung unterzogen. Hierzu wurden die in /WAG 08/ angegebenen Zustandsgleichungen für Wasser und Wasserdampf in einer Routine in MOTIVE implementiert und in den Programmablauf integriert. Das sich ergebende Phasendiagramm dieser Implementierung ist in Abb. 4.9 dargestellt.

Wie beschrieben kann in MOTIVE der Moderator für Leichtwasserreaktor-Brennelemente über die Angabe von Druck, Temperatur, Borkonzentration und Dampfblasengehalt definiert werden. Die zugehörige nuklidweise Materialzusammensetzung wird dann intern ausgerechnet. Zur Bearbeitung von Benchmarkaufgaben, bei denen häufig eine Materialzusammensetzung vorgegeben ist, kann das Moderatormaterial im Gegensatz zu KENOREST auch nuklidweise definiert werden.

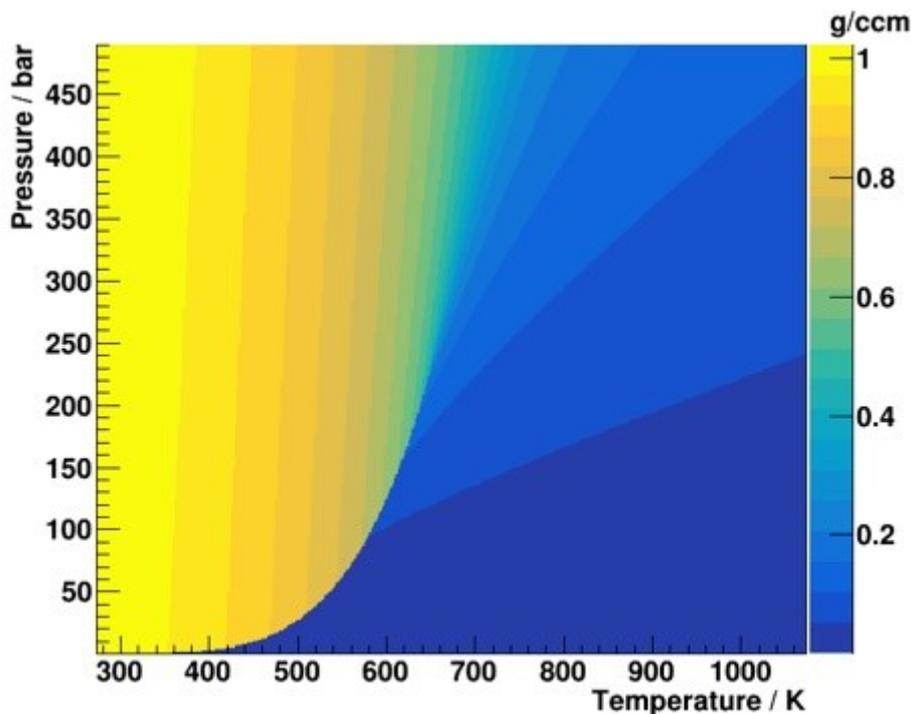


Abb. 4.9 Phasendiagramm für Wasser gemäß dem implementierten Modell

4.1.4 Brennstofftemperaturberechnung

Das Temperaturverhalten des Brennstoffs während des Abbrands ist bei vielen Anwendungen und Aufgabenstellungen nur in unzureichendem Maß bekannt. Die Möglichkeit, die Brennstofftemperatur während des Abbrands innerhalb des Programmablaufs zu bestimmen und anzupassen ist daher eine nützliche Erweiterung, die die Aussagefähigkeit des Programms erhöht.

Zur Berechnung der Brennstofftemperatur wurden zwei verschiedene Ansätze verfolgt. Zum einen wurde ein iteratives Lösungsverfahren zur Lösung der Wärmetransportgleichung implementiert. Dieses Verfahren ist vergleichbar mit dem Ansatz, der in dem Programm zur Berechnung des Brennstoffverhaltens FRAPCON /GEE 14/ implementiert ist. Zusätzlich wurde eine analytische Näherung implementiert, die in /KUD 10/ beschrieben ist. Für die Temperaturberechnung werden die radialen geometrischen Abmessungen der Stabzelle benötigt, sowie die Wärmeleistung des Brennstoffpellets und die Moderatortemperatur.

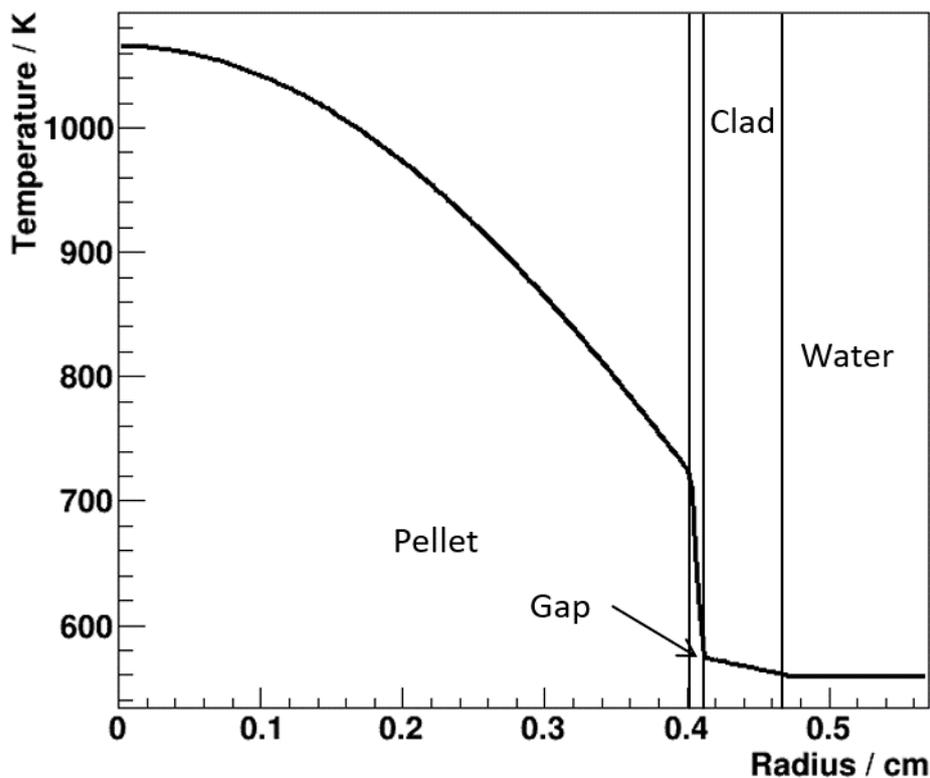


Abb. 4.10 Radialer Temperaturverlauf einer Beispiel-Stabzelle berechnet mit dem Modul zur Brennstofftemperaturberechnung

Da innerhalb von MOTIVE die Brennstableistung für jedes definierte Brennstoffmaterial in jedem Abbrandschritt einzeln berechnet wird, kann so auch stabweise für jeden Abbrandschritt die Brennstofftemperatur berechnet werden. Über die Doppler-Verbreiterung bewirkt diese eine direkte Rückkopplung auf die neutronenphysikalischen Eigenschaften des simulierten Brennelements.

Zu beachten ist, dass es sich bei dem beschriebenen Modell nicht um eine vollständige Kopplung mit einem Thermohydraulikprogramm handelt. Im Gegensatz zu einem solchen sind die nötigen Parameter wie die Brennelementleistung und die Moderator-temperatur fest von außen vorgegebene Größen, die vorab anderweitig bestimmt wurden.

4.1.5 Materialaustausch-Funktion

In vielen Anwendungsfällen, insbesondere auch bei der Nachrechnung von Nachbestrahlungsanalyseproben, kommt es vor, dass sich während des Abbrands geometrische Änderung ergeben. Beispiele hierfür sind das Ein- und Ausfahren von Steuerstäben oder der Austausch einzelner Stäbe eines Brennelements zwischen zwei Zyklen.

Daher wurde in MOTIVE eine Funktion implementiert, die einen solchen Materialaustausch ermöglicht. Bei der Implementierung wurde darauf geachtet, einen möglichst allgemeinen Ansatz hierfür zu wählen, um möglichst viele denkbare Situationen abzudecken. Es können daher beliebige Materialien innerhalb der definierten Geometrie ausgetauscht werden, also nicht nur Brennstoffmaterialien sondern auch Strukturmaterialien oder der Moderator. In der Eingabedatei ist hierzu an der entsprechenden Stelle ein Platzhalter statt der normalen Materialdefinition zu verwenden. Die Definition des Materialaustauschs erfolgt dann über eine Definition in der Eingabedatei im Block `power_history` der folgenden Art:

```
material_swap mat1
    0 absorber 10 moderator
end
```

Im vorliegenden Beispiel, bei dem das Ausfahren eines Steuerstabs simuliert wird, ist `mat1` der Platzhalter; in der mittleren Zeile des Beispiels wird definiert, zu welchem Zeitschritt welches Material eingesetzt wird. Im vorliegenden Fall wird zum Zeitschritt 0 das Material `absorber` eingesetzt. Dieses wird im Zeitschritt 10 durch das Material

moderator ersetzt. Beide Materialien müssen im Materialdefinitionsblock definiert sein, solange sie nicht wie im Fall des Moderators bereits intern definiert werden.

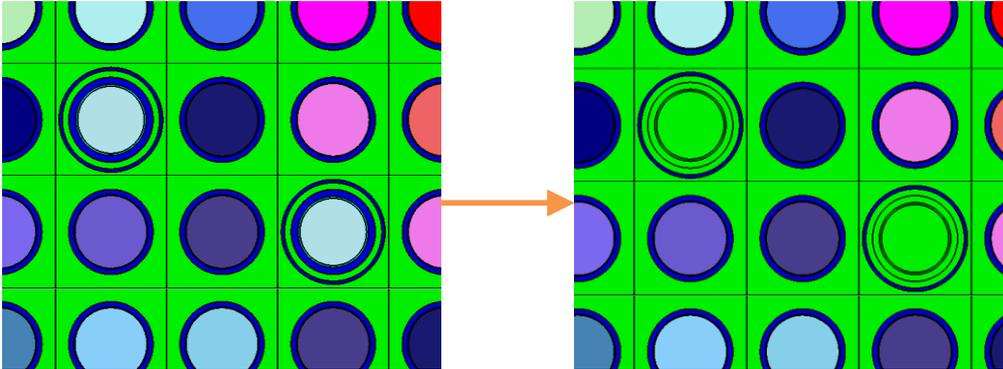


Abb. 4.11 Darstellung eines Brennelementausschnitts mit Steuerstabführungsrohr vor und nach Ausfahren des Steuerstabs

In Abb. 4.11 ist die Auswirkung eines Materialtauschs im KENO-Modell anhand des Beispiels des Ausfahrens eines Steuerstabs gezeigt.

4.1.6 Erweiterungen und Verbesserungen an VENTINA

Aufgrund des ursprünglichen Anwendungsspektrums im Bereich der Reaktorphysik war das Nuklidinventarberechnungsprogramm VENTINA zunächst auf die wichtigsten Neutronenreaktionskanäle beschränkt, nämlich Spaltung, Neutroneneinfang ((n, γ) -Reaktion) und die $(n, 2n)$ -Reaktion. Für eine universellere Einsetzbarkeit von VENTINA, zum Beispiel auch für Aktivierungsrechnungen, ist jedoch ein möglichst umfassender Satz an verwendbaren Reaktionen notwendig. Als erster Schritt in diese Richtung wurden zusätzlich die Reaktionskanäle $(n, 3n)$, $(n, 4n)$, (n, α) und $(n, 2\alpha)$ in VENTINA implementiert. Zusätzlich wurde die Erfassung von α -Partikeln beim Alpha-Zerfall und bei den Reaktionen (n, α) und $(n, 2\alpha)$ ergänzt. Dies ist insbesondere für die Erfassung der Spaltgasbildung während des Abbrands wichtig. Aufgrund der Methode mit der innerhalb von VENTINA die Transmutations-Matrix – die Matrix, mit der alle Übergänge von einem Nuklid zu einem anderen und den zugehörigen Raten erfasst werden – aufgestellt wird, ist es aktuell nicht möglich Reaktionskanäle zu berücksichtigen, die den gleichen Reaktionspfad (d. h. gleiches Start- und Zielnuklid) besitzen wie ein Zerfallskanal. Ein Beispiel hierfür ist die (n, p) -Reaktion, die den gleichen Pfad wie der β^+ -Zerfall besitzt. Um diesen Umstand zu ändern sind künftig weitere, umfangreiche Anpassungen am VENTINA-Quellcode notwendig, die den gegebenen Rahmen des aktuellen Vorhabens übersteigen.

Neben den genannten Erweiterungen wurde außerdem die Ausgabe von VENTINA um die materialweise Angabe der in VENTINA berechneten Leistung und des im Zeitschritt erzielten Abbrands erweitert. Dies ermöglicht in MOTIVE die zeitschrittweise Angabe der Stableistungen und der stabweisen Abbrände und ermöglicht das in Abschnitt 4.1.4 beschriebene Leistungsfeedback für die Brennstofftemperaturberechnung.

4.2 AP2.2: Weiterentwicklung der nuklearen Datenbasis

Innerhalb von MOTIVE werden an verschiedenen Stellen im Programmablauf nukleare Datenbibliotheken benötigt. Dies sind die hochaufgelösten Multigruppenwirkungsquerschnittsdaten für die Kondensation der Reaktionsraten für die Nuklidinventarberechnung, die Zerfallsdaten, Verzweigungsverhältnisse und Spaltproduktausbeuten für VENTINA und die Wirkungsquerschnittsbibliotheken mit kontinuierlichem Energiespektrum („Continuous Energy“, CE) für die Monte Carlo-Programme zur Neutronenflussberechnung. Weiterhin werden Halbwertszeiten und Zerfallsenergien und -spektren für die Berechnung abgeleiteter Ergebnisgrößen in MOTIVE benötigt.

Die Bereitstellung und Pflege dieser Daten erfordert teilweise erheblichen Aufwand und entsprechendes Know-how. Die Qualität der mit MOTIVE berechneten Ergebnisse hängt dabei entscheidend von der Qualität der zugrundeliegenden Daten ab. In den folgenden Abschnitten werden Arbeiten beschrieben, die im Rahmen des Vorhabens durchgeführt wurden, um die für MOTIVE bereitgestellten Bibliotheken und die dafür benötigten Software-Werkzeuge weiterzuentwickeln und zu verbessern.

4.2.1 Wirkungsquerschnittsbibliotheken für die Monte-Carlo Codes

Die kontinuierlichen Wirkungsquerschnittsdaten (CE-Bibliotheken) für die angekoppelten Monte Carlo-Programme KENO-VI und OpenMC werden grundsätzlich mit den jeweiligen Installationen mitgeliefert, oder es werden Werkzeuge bereitgestellt, die eine Prozessierung entsprechender Bibliotheken ermöglichen. Die für im Zusammenhang mit diesen Bibliotheken durchgeführten Arbeiten werden in den nächsten beiden Unterabschnitten vorgestellt.

AMPX-Daten für KENO-VI

Das Programm KENO-VI benötigt für die zugehörigen Wirkungsquerschnitte das SCALE-eigene Datenformat AMPX. Das SCALE-Paket stellt direkt verwendbare Biblio-

theiken zur Verfügung. Allerdings ist dies auf die amerikanische ENDF/B-Evaluation beschränkt. Mit dem aktuell an MOTIVE angekoppelten System SCALE 6.2.2 werden zwei CE-Bibliotheken bereitgestellt, die auf ENDF/B-VII bzw. ENDF/B-VII.1-Daten beruhen.

Mit Veröffentlichung von SCALE 6.2 wurde mit dem SCALE-PAKET erstmalig auch das AMPX-Paket /WIA 16/ ausgeliefert, das die Prozessierung von AMPX-Bibliotheken aus ENDF-formatierten Datenevaluationen ermöglicht. Seitdem ist es möglich, auch Daten aus anderen Evaluationen als ENDF/B für eine Rechnung mit KENO-VI und dadurch auch mit MOTIVE durchzuführen. Für die Benutzung mit MOTIVE wurden zunächst AMPX-CE-Bibliotheken aus der europäischen JEFF3.2 Evaluation und der japanischen JENDL4.0 Evaluation erzeugt und erfolgreich getestet. Weiterhin wurden Bibliotheken zu den TENDL-Evaluationen bearbeitet (siehe Abschnitt 5.4). Zu Beginn des Jahres 2018 wurden von die beiden neuen Evaluationen ENDF/B-VIII und JEFF3.3 veröffentlicht. Auch diese neuen Bibliotheken wurden daraufhin mit dem AMPX-Paket prozessiert. Allerdings ergaben sich hierbei verschiedene Schwierigkeiten, da mit der Veröffentlichung von ENDF/B-VIII einige Änderungen am ENDF-Format vorgenommen wurden, die in der bei der GRS vorhandenen Version des AMPX-Pakets noch keine Berücksichtigung gefunden haben. Während für die ENDF/B-VIII-Daten letztlich eine verwendbare Bibliothek erstellt werden konnte, ergaben sich für die JEFF3.3-Daten noch einige Probleme, die bis zum Abschluss des Vorhabens noch nicht zufriedenstellend gelöst werden konnten.

Wirkungsquerschnittsdaten für OpenMC

Das Programm OpenMC verwendete in der zunächst angebundenen Version 0.7.1 das von anderen Monte Carlo-Programmen bekannte ACE-Datenformat. Mit Version 0.8.0 wurde dies umgestellt auf ein eigenes Datenformat, dass auf dem weit verbreiteten Dateiformat HDF5 /HDF 11/ beruht. Mit der Installation von OpenMC wird dabei ein Werkzeug mitgeliefert, das die Konvertierung von ACE-Daten auf dieses native Format ermöglicht. Somit sind lassen sich beliebige Bibliotheken im ACE-Format auch für OpenMC verwenden.

OpenMC selbst liefert keine eigenen Bibliotheken mit, stellt aber einige Mittel bereit um eigene Bibliotheken zu erstellen. Grundsätzlich ist es damit möglich, CE-Bibliotheken im ACE-Format aus einer Evaluation im ENDF-Format mithilfe des Programms NJOY /MAC 17/ zu erstellen. Dieses Programm steht in der GRS zu Verfügung. Die Erzeu-

gung einer solchen Bibliothek ist allerdings mit einigem Aufwand verbunden. Da bereits für KENO-VI entsprechende zusätzliche AMPX-Bibliotheken erzeugt wurden, wurde darauf verzichtet zusätzliche ACE-Bibliotheken bereitzustellen, und es wurde auf bereits vorhandene ACE-Bibliotheken zurückgegriffen. Diese wurden mit den von OpenMC bereitgestellten Werkzeugen in das native Datenformat konvertiert. Somit stehen für die MOTIVE-Rechnung mit OpenMC derzeit die Bibliotheken ENDF/B-VII, ENDF/B-VII.1, JEFF3.1.2 und JEFF3.2 zur Verfügung.

4.2.2 Multigruppen-Bibliotheken für MOTIVE

Für die Erstellung der in MOTIVE benötigten Multigruppen-Bibliotheken wurde bereits im Vorgängervorhaben ein Python-basiertes Werkzeug erstellt. Dieses Werkzeug steuert das Programm NJOY zur Erzeugung von Multigruppen Daten aus den ENDF-formatierten Daten einer Wirkungsquerschnittsbibliothek an, liest die Ergebnisdaten aus und schreibt daraus eine Bibliothek im HDF5-Format, die von MOTIVE gelesen werden kann. Dieses Werkzeug wurde verwendet, um entsprechend der für die Monte Carlo Codes verfügbaren Bibliotheken Multigruppen Daten aus den Bibliotheken ENDF/B-VII, ENDF/B-VII.1, ENDF/B-VIII, JEFF3.2, JEFF3.3 und JENDL4.0 zur Verfügung zu stellen. Für die Verarbeitung der neuesten Evaluationen wurde dabei auf die Version NJOY2016.39 zurückgegriffen die bereits die in Abschnitt 4.2.1 angesprochenen Änderungen am ENDF-Format berücksichtigt. Im Unterschied zu vorhergehenden Versionen steht NJOY2016 unter der sog. BSD-Lizenz, einer Open Source Softwarelizenz, und kann von der Hosting-Plattform Github heruntergeladen werden.

Im Rahmen der Arbeiten wurden darüber hinaus einige Verbesserungen am verwendeten Multigruppen-Format durchgeführt, die zu einem geringeren Speicherbedarf führen.

Zusätzlich zu der Erstellung der Multigruppen-Bibliotheken wird das Werkzeug auch für die Bereitstellung von Verzweigungsverhältnissen, d. h. die jeweiligen relativen Anteile mit denen der Grundzustand oder ein metastabiler Zustand eines Zielnuklids erreicht werden, für Neutronenreaktionen verwendet. Hierzu werden zum einen die Informationen aus File 3 und File 9 der ENDF-Daten kombiniert oder direkt die energieabhängigen Daten aus File 10 verwendet. Diese werden mit NJOY unter Verwendung eines typischen LWR-Neutronenspektrums zu Eingruppendaten kondensiert und ins Verhältnis gesetzt. Die sich ergebenden Verzweigungsverhältnisse werden in eine Datei im sog. Yaml-Format zur weiteren Verwendung in ENDF2Graph (vgl. Kap. 4.2.3) abgespeichert. Da je nach ENDF-Filenummer (MF) der Anregungszustand eines Nuklids entwe-

der über die Nummer des metastabilen Niveaus oder die Nummer des Anregungszustands identifiziert wird, für die Anwendung in MOTIVE aber nur die Nummer des metastabilen Niveaus relevant ist, muss teilweise eine neue Nummerierung der Zustände vorgenommen werden. Dabei hat sich die entsprechende Routine in NJOY als fehlerbehaftet herausgestellt, so dass eine Korrektur im Quellcode vorgenommen werden musste um konsistente Ergebnisse zu erzielen.

4.2.3 Weiterentwicklung ENDF2Graph

ENDF2Graph ist ein in Python geschriebenes Werkzeug, das ENDF-Datenbanken einlesen und transformieren kann. Ursprünglich zur Verwendung im Kernsimulator „KMACS“ der GRS konzipiert, wurde das Programm in diesem Projekt erweitert um auch als Präprozessor für MOTIVE zu dienen.

ENDF2Graph berechnet kumulative, normierte Ausbeuten („yields“) der Produkte von Spaltreaktionen, wobei Nuklide, die nicht in der vom Benutzer getroffenen Auswahl vorkommen, konsistent behandelt werden. Außerdem erzeugt das Programm Aufstellungen der nuklearen Eigenschaften und Reaktionskanäle der betrachteten Kerne.

4.2.3.1 Erweiterungen

Zur Verwendung mit MOTIVE wurde ein neuer Unterbefehl in ENDF2Graph eingeführt, dessen Produkt eine Datei im HDF5-Format mit an die Bedürfnisse von MOTIVE angepassten Inhalten ist. Dafür war die Erweiterung der gelesenen Daten um zusätzliche Reaktionskanäle nötig, insbesondere die Neutronenreaktionen (n, α) , $(n, 2n)$ und $(n, 3n)$. Außerdem liest und speichert ENDF2Graph in der erweiterten Form auch die spektralen Informationen über die Energieverteilung in Zerfallsreaktionen und weist die Energiebeiträge von leichten und schnellen Partikeln und elektromagnetischer Strahlung separat aus. Zu jedem Wert wird, soweit verfügbar auch seine Unsicherheit vermerkt.

Neben den von der sog. „Cross Section Evaluation Working Group“ (CSEWG) bereitgestellten ENDF/B-Daten können auf der Basis des neuen ENDF-Parsers auch andere Evaluationen wie z. B. JEFF eingelesen werden. Bei der Entwicklung wurde deutlich, dass nicht alle Evaluationen den ENDF-Standard korrekt implementieren, weswegen das Einlesen eine gewisse Fehlertoleranz erfordert. Neben der Verwendung von ENDF-formatierten Datenbanken hatte der Benutzer zu Vergleichszwecken schon bis-

her die Option, auch auf Daten des Programmpakets SCALE zurückzugreifen. Allerdings beschränkte sich das auf eine Untermenge der Zerfallsdaten. In der aktuellen Version werden auch Informationen zu Spaltreaktionen extrahiert.

Auf der Suche nach der Quelle von unerwarteten Produktausbeuten in Abbrandrechnungen fiel auf, dass viele metastabile Nuklide in ENDF-Datenbanken existieren, für die keine Informationen zur Halbwertszeit hinterlegt sind, und für die ENDF2Graph deshalb bis dato keine Zerfallsreaktionen in den Grundzustand angelegt hatte. Aus diesem Anlass wurde eine Option eingeführt, die automatisch einen instantanen Übergang in den Grundzustand der entsprechenden Nuklide im Zerfallsgraphen einfügt.

Die Abbildung zwischen angeregten und isomeren Zuständen ist in Teilen der ENDF-Dokumentation nicht immer klar. Deswegen stellte sich die Frage, wie man mit Datenbankeinträgen umgeht, für die entweder nur der Anregungszustand oder aber der isomere Zustand vermerkt sind. Die bisherige Interpretation in ENDF2Graph identifizierte die beiden Ordnungszahlen mangels weiterer Information teilweise miteinander, was sich aber in den meisten Fällen als nicht korrekt erwies. Deshalb wurde dieser Aspekt des Programms überarbeitet und durch eine plausiblere Annahme ersetzt.

4.2.3.2 Technische Maßnahmen

Um die beschriebenen Arbeiten sinnvoll durchführen zu können, wurde der bisher stark auf die in KMACS benötigten Werte zugeschnittene Parser von ENDF2Graph durch Routinen ersetzt, welche die im ENDF-Standard vorkommenden Datenstrukturen generisch einlesen können. Das Programmdesign beinhaltet Validierungsmechanismen, die weitgehend verhindern sollen, dass durch nicht standardkonforme Strukturen und Inkonsistenzen in den vorliegenden Daten oder auch durch Fehler im Anwendungscode Werte inkorrekt eingelesen werden. Der Benutzer kann zwischen mehreren Stufen eines Programmprotokoll-Systems ("logging") wählen, das über Probleme oder Besonderheiten in den verschiedenen Lese- und Verarbeitungsschritten informiert.

Die Einführung eines neuen Unterkommandos erforderte eine weitergehende Modularisierung des Codes sowie eine Verallgemeinerung und bessere Parametrisierung von Algorithmen. Die Berechnung der Reaktionsausbeuten wurde beschleunigt. Um nicht für jede Variante eines Unterbefehls alle Validierungsschritte beim Einlesen der ENDF-Datenbank wiederholt durchführen zu müssen, bietet ENDF2Graph nun die Möglichkeit einer Zwischenspeicherung im JSON-Format.

Zur Vermeidung von zunächst unbemerkten Programmierfehlern wurde begonnen, Integrations- und Komponententests zu schreiben, die vor jedem Eintrag in das Versionskontrollsystem semi-automatisiert ausgeführt und ausgewertet werden. Das absehbare Auslaufen der Unterstützung für die Version 2.7 der verwendeten Programmiersprache Python machte es erforderlich, den Code auch mit Python3 kompatibel zu machen. ENDF2Graph ist für eine Übergangsphase mit beiden Entwicklungszweigen kompatibel.

Anwenderfehler werden, wenn möglich, schon beim Programmaufruf abgefangen. Dazu trägt die Umstellung des Kommandozeilenparsers auf das Python-Paket "Click" bei, das durch bessere Fehlermeldungen auch bedeutend zur Benutzerfreundlichkeit beiträgt. Der Benutzer kann außerdem aufgrund der verbesserten Trennung von Daten und Code auch ohne Modifikation der Programmquellen eigene Informationen und Parameter in das Programm einschleusen. So lassen sich über Eingabedateien z. B. eigene Nuklidlisten und mittlere Spaltenergien vorgegeben und ggf. sogar Modifikationen der eingelesenen ENDF-Daten vornehmen.

Zur Reproduzierbarkeit einmal erzeugter Datensätze schreibt ENDF2Graph in alle Ausgabedateien die verwendeten Programmparameter und die automatisch ausgelesenen ENDF-Evaluationen und Datenbankversionen.

4.2.4 Erweiterung der Zerfallsdaten-Bibliotheken

Das Inventarberechnungsprogramm VENTINA benötigt neben den problemspezifischen Daten, die über die Eingabedateien festgelegt werden, eine Reihe von problemunabhängigen Daten, die in zwei begleitenden Dateien abgelegt sind. Eine davon enthält die Spaltproduktausbeuten bei der Spaltung verschiedener spaltbarer Nuklide, die zweite Datei enthält Zerfallskonstanten, weitere Daten zu Nuklideigenschaften sowie Informationen zu möglichen Zerfalls- und Reaktionskanälen und den zugehörigen Verzweungsverhältnissen, falls für ein Zielnuklid nicht nur der Grundzustand sondern auch ein oder mehrere metastabile Zustände erreicht werden können. Diese Daten werden mit dem Programm ENDF2Graph bereitgestellt, das im vorangegangenen Kapitel beschrieben wurde. Die dort beschriebenen Verbesserungen und Erweiterungen haben unmittelbar zu einer Verbesserung der Konsistenz und Qualität der erzeugten Datensätze beigetragen: Die Anzahl der berücksichtigten Reaktionskanäle konnte entsprechend der Erweiterungen an VENTINA (siehe Abschnitt 4.1.6) um die Kanäle $(n, 3n)$, $(n, 4n)$, (n, α) und $(n, 2\alpha)$ ergänzt werden. Es wurden Datensätze für alle Wir-

kungsquerschnittsevaluationen erstellt, zu denen auch Bibliotheken für die Monte Carlo-Programme existieren. Dabei umfassen die erzeugten Dateien alle Nuklide zu denen Zerfallsinformationen in der jeweiligen Evaluation vorliegen. Im Fall von ENDF/B-VII.1 sind dies 3820 Nuklide.

Wie im vorhergehenden Abschnitt beschrieben wurde in ENDF2Graph ein neuer Ausgabepfad ergänzt, der eine Datei im HDF5 Format schreibt, in der grundlegende Daten zu allen Nukliden sowie zusätzliche Informationen zu thermisch verwertbaren Zerfallsenergien und zu Energiespektren der Zerfallsprodukte enthalten sind. Diese Daten können mit MOTIVE eingelesen werden und ermöglichen dort einerseits die Berechnung der Nachzerfallsleistung von bestrahlten Brennelementen und andererseits die Bestimmung von Quelltermen für anschließende Abschirmungsrechnungen.

Als ein Beispiel für entsprechende Rechnungen ist in das Ergebnis der Berechnung der Nachzerfallsleistung eines generischen DWR-Brennelements in 18x18-Geometrie mit einem Abbrand von 40 GWd/tSM gezeigt. Die Berechnung erfolgte unter Verwendung von KENO-VI als Flussberechnungsprogramm und mit den Datenbibliotheken ENDF/B-VII, ENDF/B-VII.1, ENDF/B-VIII und JEFF3.2. Zum Vergleich sind mit dem Programm OREST berechnete Ergebnisse gezeigt, welches bisher in GRS als Standardwerkzeug für Nachzerfallsleistung verwendet wird. Wie zu erkennen ist werden mit MOTIVE größtenteils geringfügig niedrigere Werte berechnet als mit OREST. Für kurze Zeiten liegen die Abweichungen im Bereich 2 – 3 % und werden zu längeren Zeiten hin kleiner. Bei der MOTIVE-Rechnung mit JEFF3.2-Daten gibt es einen Zeitraum für den sich bis zu 1 % höhere Werte als mit OREST ergeben.

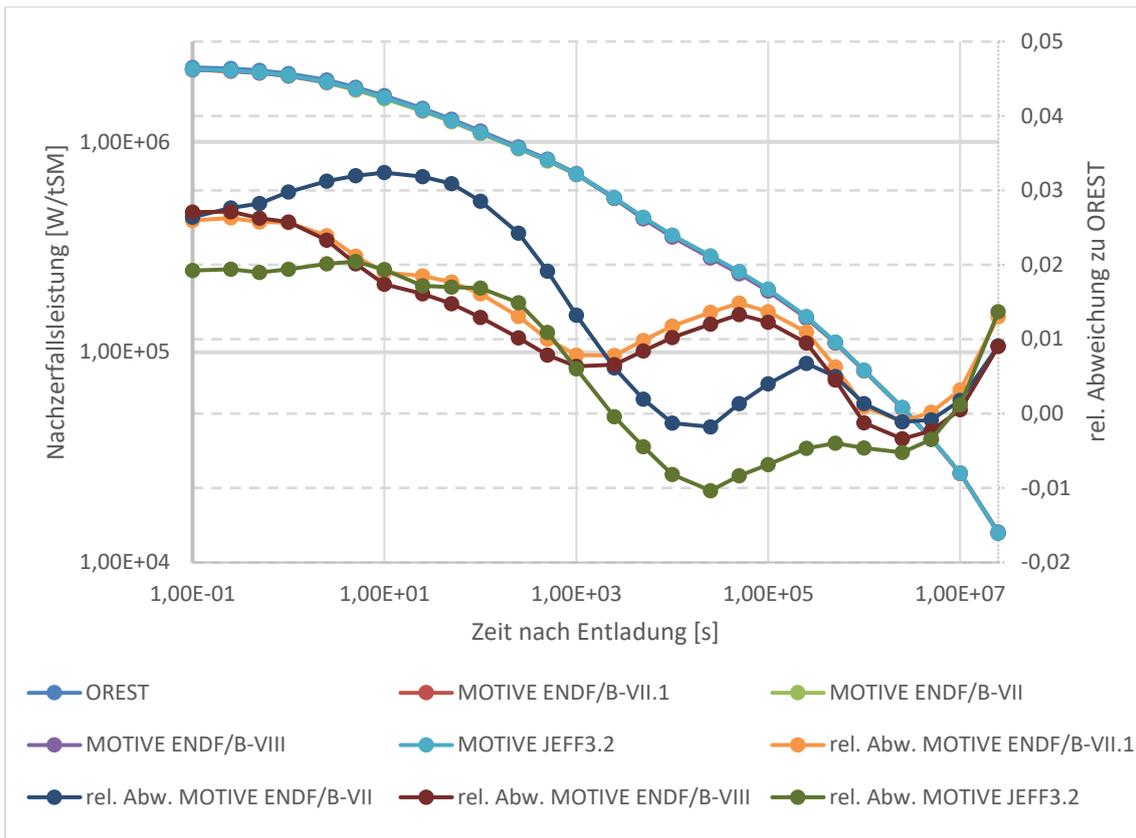


Abb. 4.12 Zeitlicher Verlauf der Nachzerfallsleistung für ein DWR-Brennelement mit 40 GWd/tSM Abbrand

Gezeigt sind Ergebnisse von OREST sowie MOTIVE mit verschiedenen Datenbibliotheken. Auf der Sekundärachse sind die relativen Abweichungen zur OREST-Rechnung gezeigt.

5 AP3: Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen und Nukleare Daten

5.1 AP 3.1: Unsicherheitsanalyse bezüglich abbrandspezifischer Daten

Im Rahmen des früheren Vorhabens RS1513 wurde die Unsicherheitsanalyse von Zerfallsdaten und Spaltausbeuten, d. h. das Sampling auf Basis der entsprechenden Unsicherheitsdaten und die Modifikation der Daten in den ORIGEN-Bibliotheken, in XSUSA implementiert. Dabei wurde auch die Möglichkeit vorgesehen, eventuelle Korrelationen innerhalb der Unsicherheiten von Zerfallsdaten und Spaltausbeuten zu berücksichtigen; diese sind jedoch gegenwärtig in den evaluierten Datenfiles in ENDF-Struktur nicht verfügbar.

Da ursprünglich erwartet worden war, dass in der Version 6.2 des Programmsystems SCALE Kovarianzmatrizen (einschließlich Korrelationen) für die Spaltausbeuten enthalten sein würden, war geplant diese bei Verfügbarkeit in das XSUSA-System zu integrieren. Nach der Veröffentlichung von SCALE 6.2 hat sich allerdings herausgestellt, dass die Korrelationen in den Spaltausbeuten in SCALE nicht in Form von Kovarianzmatrizen vorliegen, sondern als bereits gesampelte Datensätze. Diese lassen sich nicht ohne Weiteres zur Verwendung in XSUSA verarbeiten. Allerdings wurde das SCALE-Werkzeug zur Sample-basierten Unsicherheitsanalyse SAMPLER in die GRS-eigene Programmlandschaft integriert, so dass nun eine Methode zur Verfügung steht, um den Einfluss der Spaltausbeutenkorrelationen auf die Ergebnisse von Abbrandrechnungen zu untersuchen. Auf eine Integration der Korrelationen in den Spaltausbeuten in XSUSA wurde daher verzichtet.

Anhand einer Abbrandrechnung für eine LWR-Stabzelle wurden die drei Varianten von Unsicherheitsanalysen miteinander verglichen, um den Einfluss der Berücksichtigung der Korrelationen in den Spaltausbeuten bei der Unsicherheitsanalyse näher zu untersuchen. Dabei kamen die beiden Sequenzen XSUSA und SAMPLER jeweils mit und Berücksichtigung von Unsicherheiten in den Zerfallsdaten und Spaltausbeuten zum Einsatz. Bei den Varianten mit Berücksichtigung der Unsicherheiten in den genannten Daten enthält wie beschrieben XSUSA keine Korrelationen in den Spaltproduktausbeuten, während diese Informationen in SAMPLER vorhanden sind. Die Spezifikation der Stabzelle basiert auf der TMI-1 PWR Einheitszellenkonfiguration des OECD/NEA Uncertainty Analysis in Modelling (UAM) Benchmarks, Aufgabe I-1b /IVA 13/. Der Pelletdurchmesser beträgt 9,391 mm, der Innendurchmesser des Hüllrohrs ist 9,582 mm und der Außendurchmesser 10,928 mm. Die Gitterperiode der Einheitszelle beträgt 14,427 mm. Beim Brennstoff handelt es sich um UO₂ mit einer Anfangsanreicherung von 4,85 wt% ²³⁵U und einer Massendichte von 10,283 g/cm³.

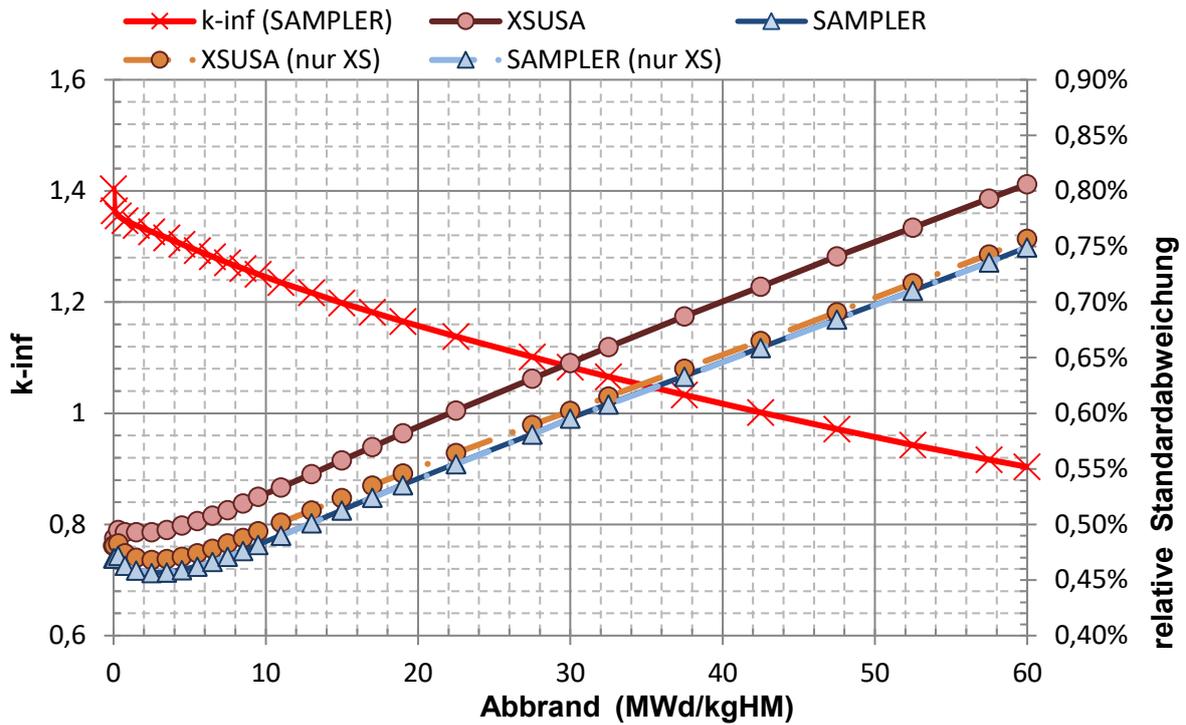


Abb. 5.1 Verlauf des Multiplikationsfaktors k_{inf} über dem Abbrand und zugehörige Unsicherheiten

Berechnet mit XSUSA und SAMPLER jeweils mit und ohne Berücksichtigung der Unsicherheiten in den Zerfallsdaten und Spaltausbeuten

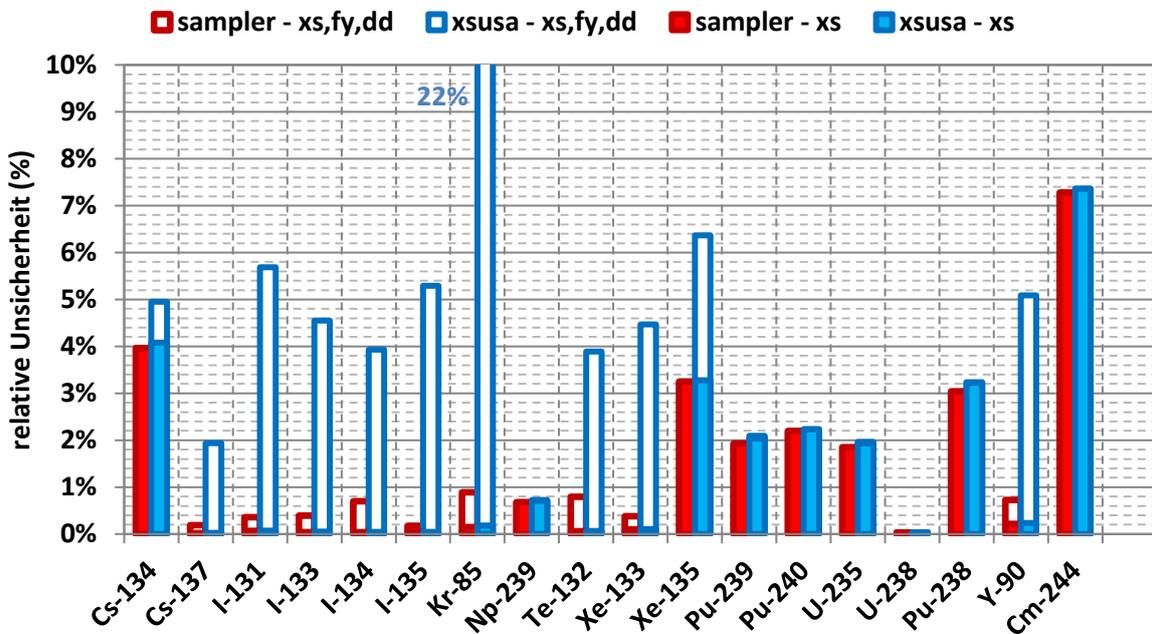


Abb. 5.2 Unsicherheiten im Nuklidinventar berechnet mit XSUSA und SAMPLER

Mit und ohne Berücksichtigung der Unsicherheiten in den Zerfallsdaten und Spaltproduktausbeuten

Der Zwischenraum zwischen Hüllrohr und Brennstoff ist mit Helium gefüllt und das Cladding besteht aus Zircaloy-4 mit einer Dichte von $6,55 \text{ g/cm}^3$. Die Moderatorichte beträgt $748,4 \text{ kg/m}^3$. Bezüglich der Betriebsparameter wurden die folgenden Temperaturen verwendet: 900 K für den Brennstoff, 600 K für das Hüllrohr und 562 K für den Moderator. Die Stabzelle wurde mit einer Leistungsdichte von $33,58 \text{ W/gU}$ bis zu einem Abbrand von 60 GWd/tSM bestrahlt.

Die Ergebnisse dieser Untersuchungen sind in Abb. 5.1 und Abb. 5.2 gezeigt. Bei der Betrachtung der Unsicherheit des Multiplikationsfaktors k_{inf} in Abb. 5.1 fällt zunächst auf, dass diese mit für alle Rechnungen nach einem kurzen Absinken zu Beginn des Abbrands mit zunehmendem Abbrand ansteigt. Die beiden SAMPLER-Rechnungen verhalten sich dabei nahezu identisch. Während die XSUSA-Rechnung ohne Berücksichtigung der Unsicherheiten in den Spaltproduktausbeuten und den Zerfallsdaten im Rahmen der Sampling-bedingten Unsicherheiten mit den SAMPLER Rechnungen übereinstimmt, ist die von XSUSA mit Berücksichtigung der entsprechenden Unsicherheiten berechnete Unsicherheit in k_{inf} um etwa 0,05 % größer. Dies kann auf die in dieser bei dieser Rechnung auftretenden größeren Unsicherheiten im Nuklidinventar zurückgeführt werden. Wie in Abb. 5.1 illustriert ist, führt die XSUSA-Rechnung mit Unsicherheiten in den Zerfallsdaten und Spaltproduktausbeuten zu deutlich erhöhten Unsicherheiten in den Konzentrationen einiger Spaltprodukte, während sich aus der SAMPLER-Rechnung mit zusätzlicher Berücksichtigung der Korrelationen in den Spaltausbeuten eine deutlich kleinere Vergrößerung ergibt. Wie zu erwarten ist, ist der Beitrag der Spaltausbeutenunsicherheiten in den Ergebnissen für die Aktinoiden vernachlässigbar, da hier nur sekundäre Effekte auftreten können.

Insgesamt lässt sich feststellen, dass die XSUSA-Rechnung ohne Berücksichtigung der Unsicherheiten in Zerfallsdaten und Spaltausbeuten vielfach nur sehr wenig von den Ergebnissen der SAMPLER-Rechnung mit Berücksichtigung aller Effekte abweicht und insofern in vielen Anwendungsfällen eine gute Näherung darstellt. Eine Einbeziehung der Unsicherheiten in den Spaltausbeuten ohne gleichzeitige Berücksichtigung der zugehörigen Korrelationen führt dagegen zu einer deutlichen Überschätzung der Unsicherheiten in den Spaltproduktkonzentrationen. Falls eine genaue Berechnung der Unsicherheiten für die Spaltprodukte benötigt wird, kann auf die SAMPLER-Sequenz zurückgegriffen werden.

5.2 AP 3.2: HTR-CRP-Benchmark der IAEA

Das IAEA "Coordinated Research Project (CRP) on High Temperature Gas-Cooled Reactor (HTGR) Uncertainty Analysis in Modeling (UAM)" wurde im Jahr 2013 gestartet, um Eingabeunsicherheiten in Berechnungen von HTGR durch die gesamte Rechenkette zu Ausgabeunsicherheiten zu propagieren /REI 14/, /STR 15b/. Das CRP folgt dabei dem Ansatz des OECD/NEA UAM Projekts, in welchem Unsicherheiten in Leichtwasserreaktoren untersucht werden /IVA 13/. Herausforderungen bei der Modellierung und Simulation von HTGR Systemen sind unter anderem die Brennstoffpartikel, welche in einer Graphitmatrix zufällig angeordnet sind, sowie die große Menge an Graphit im Reaktor und die hohen Betriebstemperaturen.

Innerhalb des CRP werden zwei HTGR Designs untersucht: Das prismatische HTGR Design, für welches ein Modell basierend auf dem 350 MW General Atomics Modular High Temperature Gas-cooled Reactor (MHTGR) Konzept /ORT 13/ gewählt wurde, und ein Kugelhaufenreaktor, für welchen ein Modell ähnlich des 250 MW HTR-PM (INET, China) gewählt wurde. Für beide Designs wurden diverse Phasen mit verschiedenen Aufgaben definiert, welche bei Modellen einfacher Stabzellen und Brennelementen beginnen und bis zu gekoppelten Ganzkernrechnungen führen.

Im Rahmen des Projekts RS1542 hat die GRS Ergebnisse für die Reaktorphysik-Rechnungen für Phase I des prismatischen Designs zum CRP beigetragen. Neben den Berechnungen der spezifizierten Aufgaben basierend auf dem MHTGR Design wurden Berechnungen des VHTRC Experiments beigetragen, welches das Validierungsexperiment für eine der Aufgaben in Phase I darstellt. Die GRS hat sich bei ihren Analysen darauf konzentriert, die Auswirkungen der Unsicherheiten in den nuklearen Daten auf geforderte Ausgabegrößen zu untersuchen. Dabei wurde insbesondere das in der GRS entwickelte Unsicherheitsanalyse-Werkzeug XSUSA /BOS 15/ verwendet, sowie diverse Module des am ORNL entwickelten SCALE Codepakets /SCA 16/.

5.2.1 VHTRC Experiment

Berechnungen des japanischen „Very High Temperature Reactor Critical Assembly“ (VHTRC) Experiments dienen der Validierung der MHTGR-350 Brennelement- bzw. Superzellenrechnungen. Kritikalitätsmessungen dieser prismatischen Anordnung, in welcher auch die Unsicherheiten dieser Messungen festgestellt wurden, sind im OECD/NEA International Handbook of Evaluated Reactor Physics Benchmark Experiments (IRPhEP) /NEA 13/ enthalten. Für eine ausführliche Darstellung der erzielten Ergebnisse, wird auf die zugehörige Veröffentlichung der GRS /BOS 17/ hingewiesen.

Das Experiment

Eine detaillierte Beschreibung des VHTRC Experiments ist im IRPhEP Handbook /NEA 13/ zu finden. Der VHTRC ist eine Graphit-moderierte thermische kritische Anordnung, welche sich aus Graphitblöcken zusammensetzt, in denen die Brennstäbe enthalten sind (siehe Abb. 5.3). Ein Brennstab ist ein Stapel aus zwanzig ringförmigen Brennstoffpellets, welche von einem Graphitzylinder umgeben werden. Die Brennstoffpellets wiederum bestehen aus Brennstoffpartikeln, welche bei einer Packungsdichte von 30 % gleichmäßig in einer Graphitmatrix verteilt sind. Die Brennstoffpartikel sind sogenannte BISO Partikel, in denen zwei Kohlenstoffschichten einen Kern aus 2 % oder 4 % angereicherterem Urndioxid umgeben. Die ganze Anordnung kann bis zu 200 °C aufgeheizt werden, um den Effekt der Temperatur auf den Neutronenmultiplikationsfaktor k_{eff} zu untersuchen. Insgesamt wurden drei verschiedene Beladungsschemata bei insgesamt sieben verschiedenen Temperaturen untersucht.

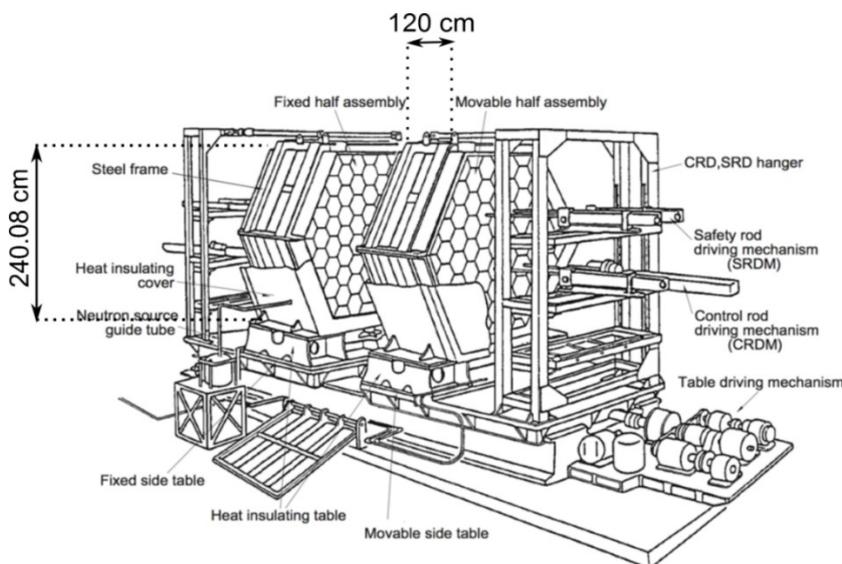


Abb. 5.3 Aufbau des VHTRC Experiments (aus /NEA 13/)

5.2.2 Rechenprogramme und -modelle

Kritikalitätsrechnungen

Als Basis für folgende Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen wurden nominale Kritikalitätsrechnungen mit den Monte Carlo Programmen SCALE/KENO-VI /SCA 16/, /OAK 12/ und Serpent 2 /LEP 15/ durchgeführt. Ein Überblick über die verwendeten Programme und Daten befindet sich in Tab. 5.1. Die Angabe „CE“ bezieht sich auf Daten in kontinuierlicher Energiedarstellung, wohingegen sich die Bezeichnungen „238g“ und „252g“ auf Daten in der entsprechenden Multigruppendarstellung beziehen.

Für die Nutzung von CE-Daten müssen die Brennstoffpartikel in der Graphitmatrix explizit modelliert werden. Dazu wurden die Partikel in einem regelmäßigen Gitter angeordnet (siehe Abb. 5.5). Bei Serpent konnten die Partikel zudem zufällig in der Matrix verteilt werden, da Serpent eine Eingabedatei mit expliziten Partikelkoordinaten einlesen kann /LEP 15/ (siehe Abb. 5.4). Für die Multigruppen-Rechnungen mit KENO-VI wurden problemabhängige Wirkungsquerschnitte für die Neutronentransportrechnung in einer Abschirmungsrechnung ermittelt, welche die Doppelheterogenität der Partikel in der Graphitmatrix des Brennstabs und die Anordnung der Brennstäbe in den Graphitblöcken berücksichtigt.

Kritikalitätsrechnungen dieses Experiments wurden bereits in /BOS 16/ veröffentlicht. Für die aktuelle Studie wurden die Modelle nochmals überarbeitet, um das Modell genauer nach den Spezifikationen zu erstellen und frühere Vereinfachungen zu reduzieren. Außerdem konnte für diese Rechnungen nun die Release-Version von SCALE 6.2 /SCA 16/ verwendet werden (im Unterschied zur vorher verwendeten Beta4-Version).

Tab. 5.1 Übersicht über die verwendeten Programme und Daten für die Kritikalitätsrechnungen

Programm	ENDF/B-VII.0 Daten	ENDF/B-VII.1 Daten
Serpent 2.1.26	CE (zufällige Partikelverteilung)	CE (zufällige Partikelverteilung)
Serpent 2.1.26	CE (regelmäßiges Gitter)	CE (regelmäßiges Gitter)
SCALE 6.1.2/KENO-VI	238g	-
SCALE 6.2/KENO-VI	238g	252g
SCALE 6.2/KENO-VI	CE (regelmäßiges Gitter)	CE (regelmäßiges Gitter)

Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen

Ein Überblick über die verwendeten Programme und Bibliotheken für die Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen (U/S) wird in Tab. 5.2 gegeben.

Das GRS Programmpaket XSUSA (Cross Section Uncertainty and Sensitivity Analysis) /BOS 15/ wurde verwendet, um die Auswirkung der Unsicherheiten in den nuklearen Daten auf die Multiplikationsfaktoren zu ermitteln. Auf Basis des sogenannten Random Sampling Verfahrens wurden bei einem Stichprobenumfang von 1000 die Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren ermittelt. Außerdem wurden durch eine Sensitivitätsanalyse die für die Ergebnisunsicherheit wichtigen Nuklidreaktionen ermittelt. XSUSA wurde in Kombination mit KENO-VI aus SCALE 6.1.2 /OAK 12/ im Multigruppenmodus verwendet. Zusätzlich zu XSUSA wurde auch SAMPLER aus SCALE 6.2 angewendet /WIL 13/, in welchem der gleiche Ansatz wie in XSUSA implementiert ist. Im Gegensatz zu XSUSA werden bei SAMPLER die Wirkungsquerschnitte bereits vor der Abschirmungsrechnung variiert.

Zusätzlich zum Random Sampling wurde TSUNAMI aus SCALE 6.2 für Berechnungen auf Basis von Störungstheorie verwendet. Seit der letzten SCALE-Version können CE-Daten für Unsicherheitsanalysen mit TSUNAMI verwendet werden /PER 16/. Das verwendete Modell entspricht daher dem KENO-VI Modell für CE-Rechnungen, d. h. der Modellierung der Brennstoffpartikel im regelmäßigen Gitter.

Tab. 5.2 Überblick über die verwendeten Programme und Daten für die Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen (U/S)

U/S Methode	U/S Programm	Transportcode	ENDF/B-VII.0 Daten	ENDF/B-VII.1 Daten
Random sampling	SCALE 6.2/ SAMPLER	SCALE 6.2/ KENO-VI	238g xs data, 44g cov. data	252g xs data, 56g cov. data
Perturbation theory	SCALE 6.2/ TSUNAMI	SCALE 6.2/ KENO-VI	CE xs, 44g cov. data	CE xs, 56g cov. data

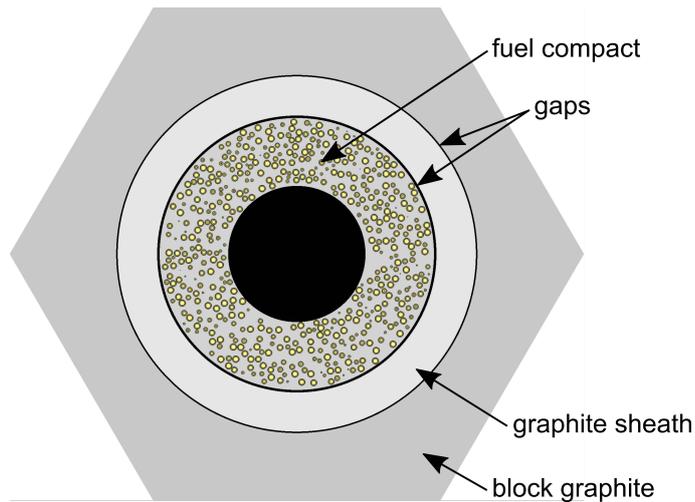


Abb. 5.4 Querschnitt einer Brennstabzelle, in der die Brennstoffpartikel zufällig in der Graphitmatrix verteilt sind (Serpent Modell)

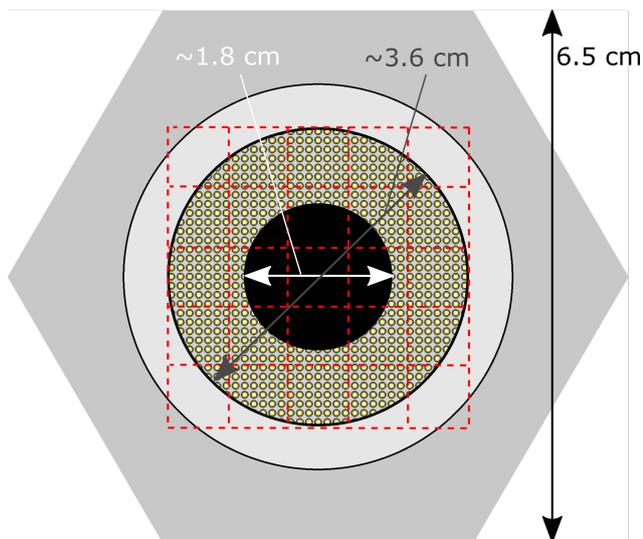


Abb. 5.5 Querschnitt einer Brennstabzelle, in der die Brennstoffpartikel in einem regelmäßigen Gitter angeordnet sind (Serpent und KENO-VI CE Modell)

5.2.3 Ergebnisse

Die ermittelten Multiplikationsfaktoren und ihre Unsicherheiten wurden für alle VHTRC Anordnungen als Funktion der Temperatur verglichen. Die Ergebnisse der Kritikalitätsrechnungen sind in Abb. 5.6 und Abb. 5.7 abgebildet und die der Unsicherheitsanalysen in Abb. 5.8 und Abb. 5.9 bzw. Tab. 5.3.

Kritikalitätsrechnungen

Die Serpent-Ergebnisse mit dem Modell der zufällig verteilten Brennstoffpartikel werden als Referenz für die Kritikalitätsrechnungen angesehen, da dieses Modell unter den verwendeten Modellen als dasjenige angesehen wird, das am nächsten zur Realität liegen dürfte.

Die Ergebnisse der Serpent-Rechnungen mit dem regelmäßigen Gitter aus Brennstoffpartikeln zeigen einen nur geringen Reaktivitätsunterschied von unter 100 pcm zu den Referenzrechnungen. Dabei sollte beachtet werden, dass das Brennstoffpartikel-Gitter so gewählt wurde, dass die Brennstoffmasse möglichst nah an der Brennstoffmasse im Referenzmodell liegt. Ändert man den Gitterabstand um lediglich 1 %, ändert sich die Reaktivität bereits um bis 500 pcm.

Die CE-Rechnungen von Serpent und KENO-VI mit gleichen Modellen (Brennstoffgitter) zeigen lediglich kleine Unterschiede von weniger als 100 pcm und werden damit als gut übereinstimmend bewertet. Die KENO-VI Multigruppenrechnungen zeigen Unterschiede bis zu 200 pcm zur Referenz, wobei bereits Unterschiede zwischen den KENO-VI Rechnungen mit SCALE 6.1.2 und SCALE 6.2 von bis zu 200 pcm aufgrund der modernisierten Abschirmungsrechnung der Wirkungsquerschnitte auftreten.

Wie bereits öfter gezeigt wurde /BOS 16/, /GOT 11/, /DIE 13/ ergeben sich große Unterschiede von bis zu 1200 pcm zwischen Rechnungen mit den Datenbibliotheken ENDF/B-VII.0 und ENDF/B-VII.1. Diese Unterschiede können fast ausschließlich durch eine Änderung im Neutroneneinfangquerschnitt von Graphit erklärt werden. Die Ergebnisse basierend auf ENDF/B-VII.0-Daten übertreffen die experimentellen Werte je nach Anordnung um 600 – 1000 pcm, wohingegen die Ergebnisse basierend auf ENDF/B-VII.1-Daten deutlich geringere Unterschiede von 270 – 570 pcm erzielen. Für einige Anordnungen liegen die ENDF/B-VII.1-Ergebnisse innerhalb der experimentellen Fehlerbalken.

Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse

Die ermittelten Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren betragen etwa 0,58 % bei Verwendung der ENDF/B-VII.0-Unsicherheitsdaten und etwa 0,66 % bei Verwendung der ENDF/B-VII.1-Daten. Dabei zeigen XSUSA, SAMPLER und TSUNAMI im Wesentlichen konsistente Ergebnisse. Die Modellierung der Brennstoffpartikel oder die Verwendung von Multigruppenmodellen im Vergleich zu CE-Daten ist für die Unsicherheitsanalyse unwesentlich.

Die Sensitivitätsanalyse mit XSUSA, SAMPLER und TSUNAMI ergibt in allen Fällen, dass der Hauptbeitrag zur Multiplikationsfaktorunsicherheit von der Neutronenmultiplizität von ^{235}U stammt. Außerdem tragen die Unsicherheiten der elastischen Streuung und des Einfangsquerschnitts von Graphit wesentlich zur Unsicherheit bei.

Unter Berücksichtigung der Unsicherheiten durch die nuklearen Daten zeigen die Ergebnisse der ENDF/B-VII.1-Rechnungen gute Übereinstimmung mit den experimentellen Werten. Die ENDF/B-VII.0-Rechnungen zeigen in einigen Fällen mit den experimentellen Fehlerbalken überlappende Unsicherheitsintervalle.

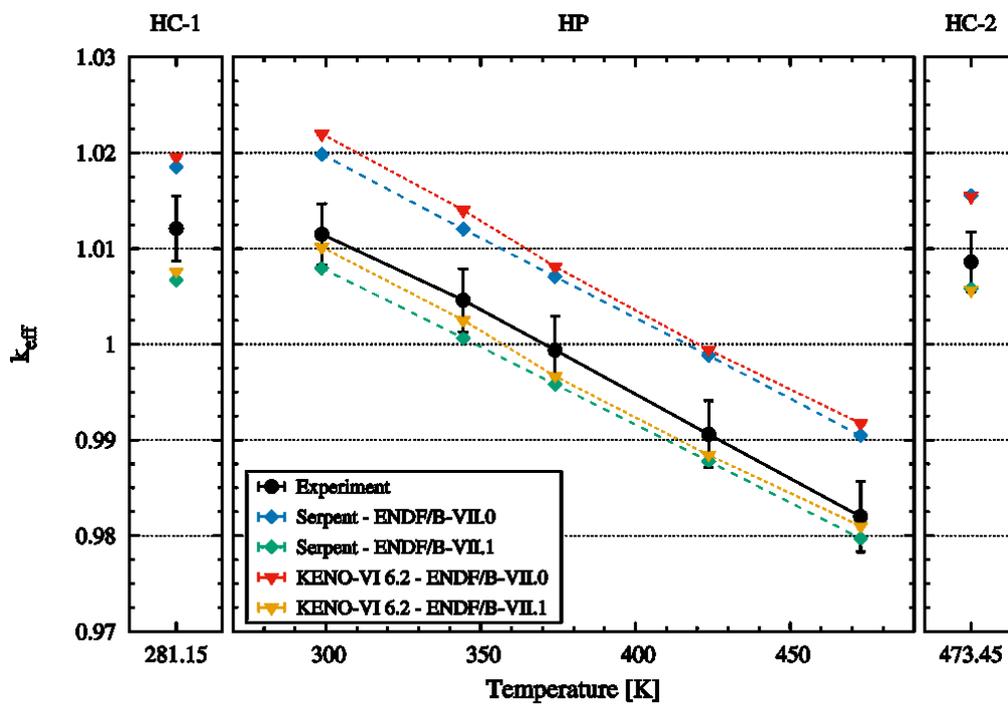


Abb. 5.6 Vergleich der SCALE/KENO-VI CE und Serpent CE Ergebnisse der VHTRC Multiplikationsfaktoren

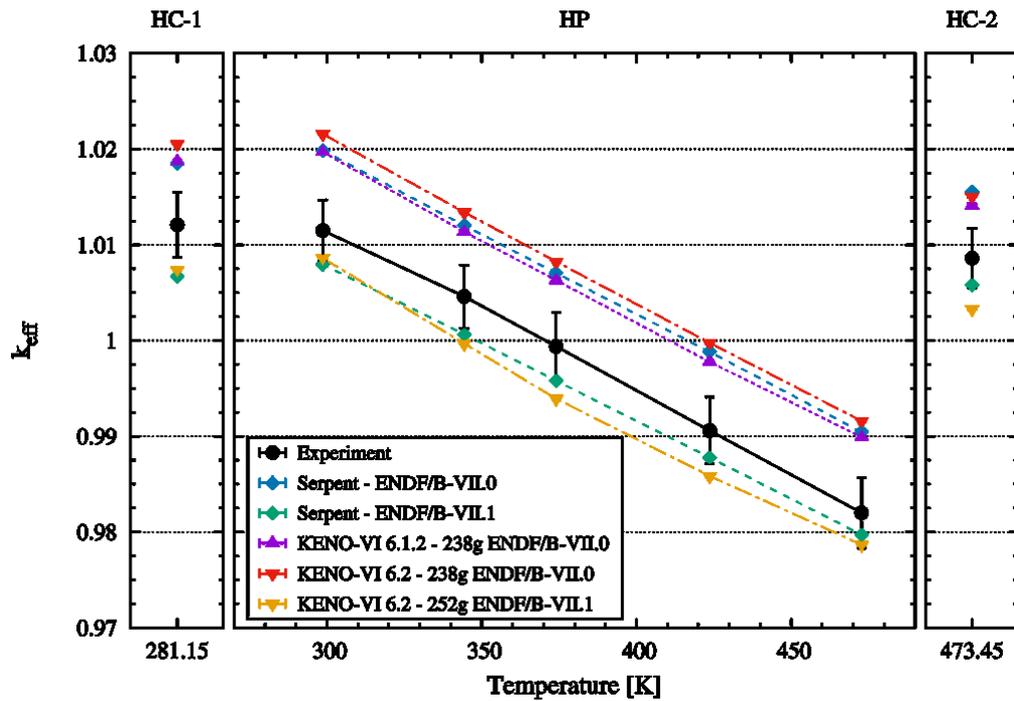


Abb. 5.7 Vergleich der SCALE/KENO-VI MG und Serpent CE Ergebnisse der VHTRC Multiplikationsfaktoren

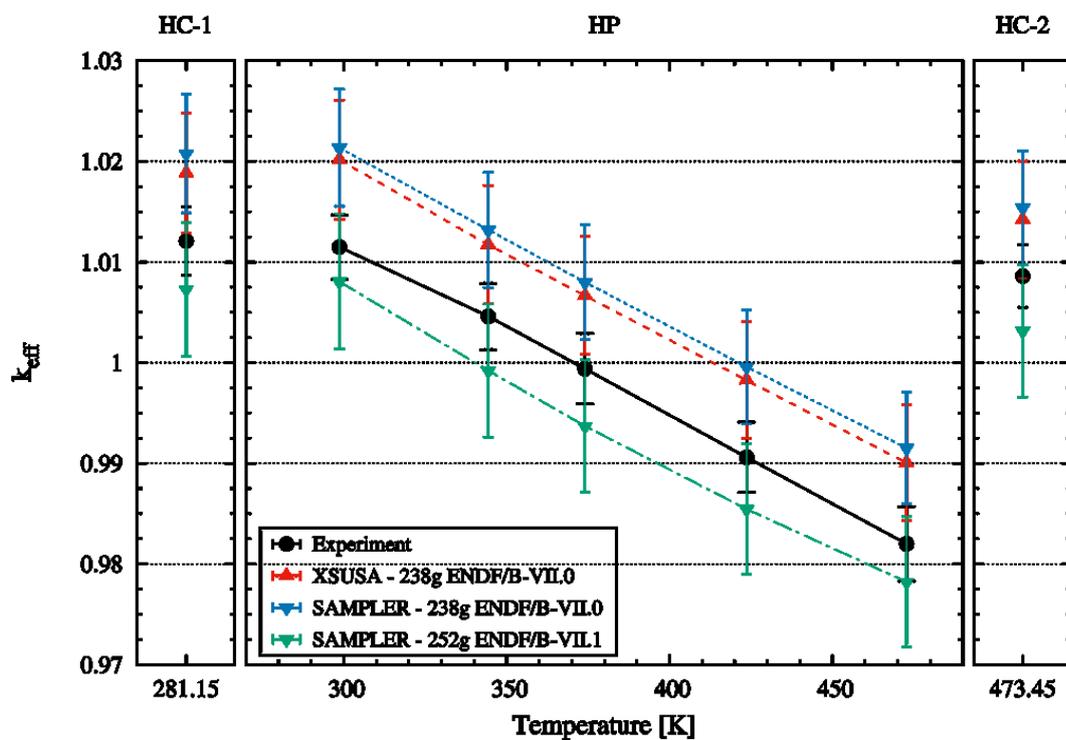


Abb. 5.8 Vergleich der mit XSUSA und SAMPLER ermittelten Unsicherheiten der VHTRC Multiplikationsfaktoren

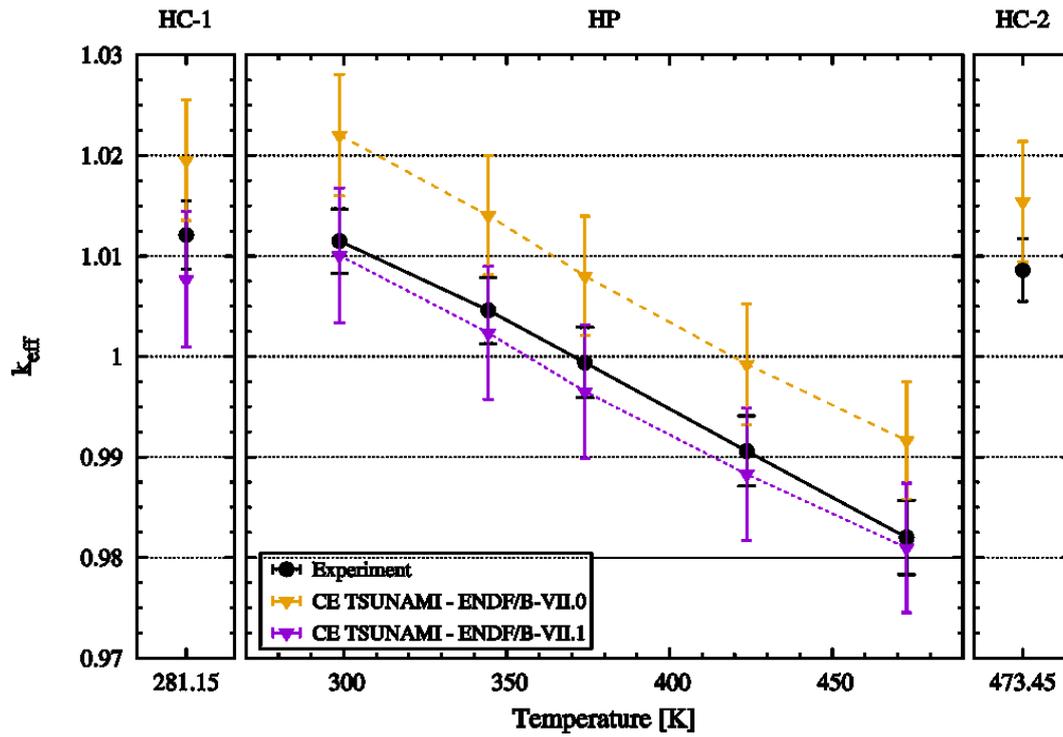


Abb. 5.9 Vergleich der mit CE TSUNAMI ermittelten Unsicherheiten der VHTRC Multiplikationsfaktoren

Tab. 5.3 Ergebnisse der Unsicherheitsanalyse der VHTRC-Multiplikationsfaktoren

Die statistische Monte Carlo Unsicherheit der TSUNAMI Ergebnisse und die 95 % Konfidenzintervalle der XSUSA und SAMPLER Ergebnisse sind in Klammern gegeben

		ENDF/B-VII.0				ENDF/B-VII.1							
		Experiment		XSUSA		SAMPLER		CE TSUNAMI		SAMPLER		CE TSUNAMI	
Core	T [K]	k _{eff}	σ	mean k _{eff}	σ _{ND}	mean k _{eff}	σ _{ND}	k _{eff}	σ _{ND}	mean k _{eff}	σ _{ND}	k _{eff}	σ _{ND}
HC-1	281.15	1.01210	0.3359%	1.01884(37)	0.583(27)%	1.02079(36)	0.576(27)%	1.01954(5)	0.5873(3)%	1.00730(41)	0.661(31)%	1.00768(5)	0.6694(2)%
HP	298.65	1.01150	0.3164%	1.02016(37)	0.582(27)%	1.02136(36)	0.569(27)%	1.02204(5)	0.5918(3)%	1.00805(41)	0.664(31)%	1.01007(5)	0.6643(2)%
	344.35	1.00460	0.3285%	1.01172(36)	0.582(27)%	1.01319(36)	0.566(27)%	1.01405(5)	0.5845(3)%	0.99922(41)	0.662(31)%	1.00236(5)	0.6589(2)%
	374.05	0.99940	0.3502%	1.00667(36)	0.582(27)%	1.00799(35)	0.565(27)%	1.00802(5)	0.5911(3)%	0.99369(41)	0.662(31)%	0.99653(5)	0.6670(2)%
	423.65	0.99060	0.3533%	0.99826(36)	0.582(27)%	0.99959(35)	0.563(27)%	0.99925(5)	0.6027(3)%	0.98545(40)	0.661(31)%	0.98830(5)	0.6625(2)%
	472.75	0.98200	0.3768%	0.99006(36)	0.581(27)%	0.99153(35)	0.563(27)%	0.99165(5)	0.5909(3)%	0.97822(40)	0.661(31)%	0.98097(5)	0.6560(2)%
HC-2	473.45	1.00860	0.3074%	1.01421(36)	0.576(27)%	1.01540(35)	0.555(27)%	1.01542(5)	0.5884(3)%	1.00315(41)	0.653(31)%	-	-

5.2.4 MHTGR

Im Rahmen des CRP hat die GRS Berechnungen der Aufgaben aus Phase I der Spezifikationen des prismatischen HTGR Designs /STR 15b/ durchgeführt. Die Nominalrechnungen zu den Unsicherheitsanalysen wurden bereits durchgeführt und im Rahmen eines INL-Berichts (Idaho National Laboratory) den Teilnehmern des Benchmarks zur Verfügung gestellt /STR 15a/. Im Folgenden werden die Modelle für Phase I kurz vorgestellt und danach einige Ergebnisse der Unsicherheitsanalysen gezeigt.

Modelle und verwendete Programme

Exercise I-1 der prismatischen Definitionen beschreibt eine MHTGR Brennstabzelle (siehe Abb. 5.10), in der Brennstoffpartikel in einer Graphitmatrix verteilt sind, welche sich in einem hexagonalen Graphitblock befindet. Für Exercise I-1a wurde der Brennstoff mit der Graphitmatrix Volumen-homogenisiert, und in Exercise I-1b sollten die Teilnehmer die Verteilung der Brennstoffpartikel gemäß den Möglichkeiten des eingesetzten Programms berücksichtigen. Wie auch beim VHTRC Experiment ist dies beispielsweise durch ein regelmäßiges Brennstoffpartikelgitter im Falle von CE-Rechnungen oder durch eine passende Abschirmungsrechnung im Falle von Multigruppen-Rechnungen möglich. Exercise I-1c und d entsprechen bezüglich der Brennstoffmodellierung Exercise I-1a und b. Allerdings wurde das hexagonale Modell durch eine dreieckige Brennstabzelle ersetzt, in der das Moderator-zu-Brennstoff-Verhältnis vergrößert wurde, um näher an dem entsprechenden des MHTGR-Brennelements zu liegen (siehe Abb. 5.11).

Exercise I-2a/b beschreibt ein MHTGR Brennelement, welches sich aus Brennstabzellen, Zellen mit Heliumkanälen und Zellen mit ausschließlich Graphit zusammensetzt (siehe Abb. 5.12). In Exercise I-2a befindet sich frischer Brennstoff in den Brennstabzellen und es befinden sich Absorber in den sechs Ecken des Brennelements. Im Brennelement für Exercise I-2b befindet sich abgebrannter Brennstoff und die Absorberzellen wurden durch reine Graphitzellen ersetzt.

Exercise I-2c besteht aus einer MHTGR-Super-Zelle, in der sich in der Mitte ein Brennelement mit frischem Brennstoff befindet, und welches auf der einen Seite von einer homogenen Mischung aus abgebrannten Brennelementen und auf der anderen Seite durch Graphitblöcke umgeben wird (siehe Abb. 5.13).

Als Eingabeunsicherheiten für die Rechnungen hat die GRS die Unsicherheiten der nuklearen Daten berücksichtigt. Für jedes Modell waren der Multiplikationsfaktor und verschiedene Eingruppen-Wirkungsquerschnitte inklusive ihrer Unsicherheiten zum Vergleich gefordert.

Die GRS hat Berechnungen mit XSUSA in Kombination mit dem deterministischen Neutronentransportcode NEWT aus SCALE 6.1.2 /OAK 12/ und ENDF/B-VII.0 Multi-gruppen-Wirkungsquerschnitten und Unsicherheiten durchgeführt. Zudem wurden soweit möglich zusätzlich Berechnungen mit TSUNAMI durchgeführt. Zusammen mit dem INL wurden außerdem Rechnungen mit SAMPLER aus SCALE 6.2 /REA 17/ zum Benchmark beigetragen.

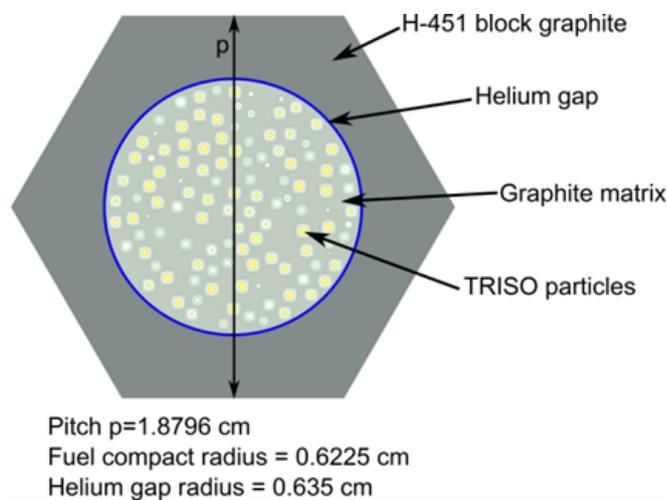


Abb. 5.10 Hexagonale MHTGR Brennstabzelle

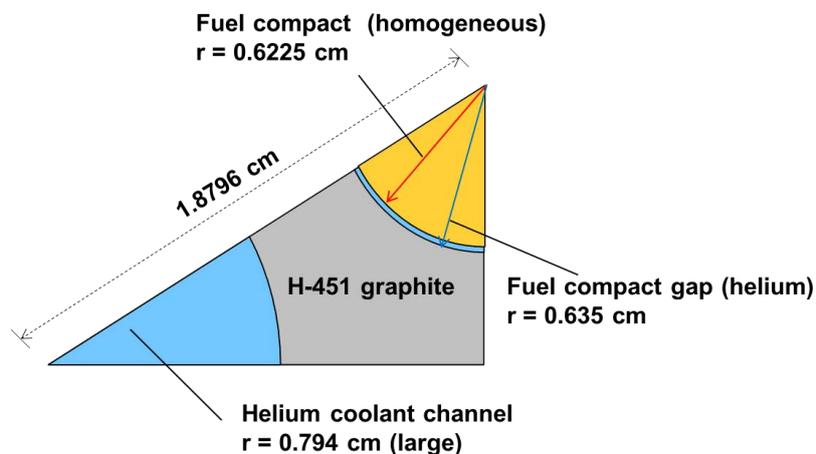


Abb. 5.11 Dreieckige MHTGR Brennstabzelle /STR 15b/

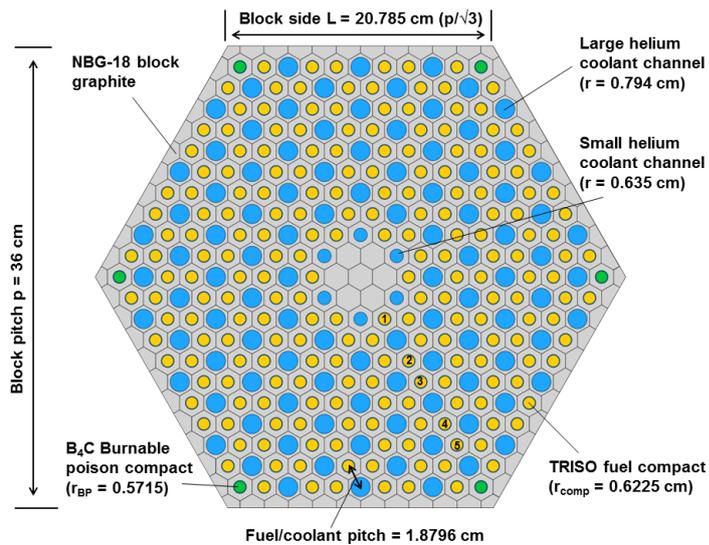


Abb. 5.12 MHTGR Brennelement /STR 15b/

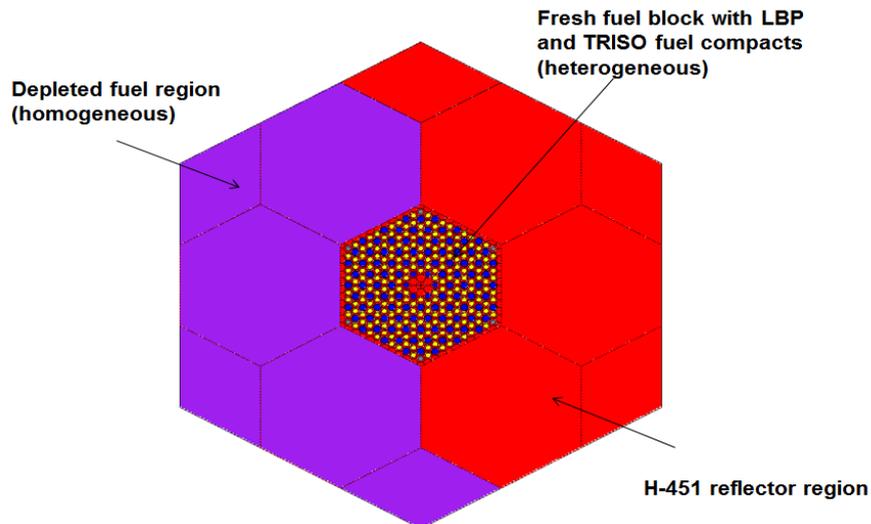


Abb. 5.13 MHTGR Super-Zelle /STR 15b/

Ergebnisse

Die Ergebnisse aller Teilnehmer für Phase I wurden in einem INL-Bericht zusammengefasst, an welchem die GRS mitgearbeitet hat /STR 17/. In diesem Bericht ist erkennbar, dass unter Berücksichtigung der richtigen Datenbibliotheken die GRS-Ergebnisse mit den Ergebnissen der anderen Teilnehmer gute Übereinstimmung zeigen. Eine Auswahl an GRS-Ergebnissen wird im Folgenden präsentiert.

In Abb. 5.14 bis Abb. 5.18 sind die XSUSA und SAMPLER Ergebnisse und soweit möglich TSUNAMI Ergebnisse abgebildet. Hierbei handelt es sich um die ermittelten

Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren k und der Ein-Gruppen-Wirkungsquerschnitte für diverse Nuklidreaktionen. Die XSUSA und SAMPLER Ergebnisse werden unter Berücksichtigung des begrenzten Stichprobenumfangs von 1000 und einer damit einhergehenden begrenzten Konfidenz der Ergebnisse als übereinstimmend bewertet. Im Falle von Exercise I-1a konnten entsprechende TSUNAMI-Ergebnisse hinzugefügt werden, welche mit und ohne implizite Effekte ermittelt wurden (entsprechend den Ansätzen von SAMPLER und XSUSA). Die Abweichungen zwischen diesen Ergebnissen sind zu vernachlässigen. Lediglich beim Neutroneneinfang von U-238 wird – wie erwartet – ein kleinerer Unterschied zwischen den ermittelten Unsicherheiten beobachtet.

Für die Brennstabzellen ist der Neutroneneinfang in U-238 Hauptverursacher der Eigenwertunsicherheit. Für das frische Brennelement kann diese Unsicherheit vor allem durch die Neutronenmultiplizität (nu_{bar}) von ^{235}U erklärt werden und für das abgebrannte Brennelement wird diese Unsicherheit vor allem durch nu_{bar} von ^{239}Pu verursacht. Bei der Superzelle wiederum trägt der Neutroneneinfang von ^{238}U gefolgt von nu_{bar} von ^{239}Pu und ^{235}U den Hauptbeitrag zur Multiplikationsfaktorunsicherheit bei.

In Abb. 5.19 und Abb. 5.20 werden für Exercise I-2a und b, d. h. für das frische und das abgebrannte Brennelement, die Unsicherheiten von SAMPLER mit Unsicherheiten aus ENDF/B-VII.0- und ENDF/B-VII.1-Daten miteinander verglichen. Insbesondere beim angebrannten Brennelement wird der große Einfluss der Unsicherheiten auf die Ergebnisse deutlich: Da die Unsicherheit von ^{239}Pu nu_{bar} , dem Hauptbeitrag zu der Eigenwert-Unsicherheit, in den ENDF/B-VII.1-Daten im Vergleich zu den ENDF/B-VII.0-Daten reduziert wurde, ist die entsprechende Unsicherheit des Eigenwert-Unsicherheit reduziert. Beim frischen Brennelement gibt es einen gegenteiligen Effekt: Die Unsicherheit von nu_{bar} von ^{235}U hat in ENDF/B-VII.1 zugenommen, sodass die Eigenwert-Unsicherheit leicht vergrößert ist.

Bei den Vergleichen der Ergebnisse der Unsicherheitsanalyse mit verschiedenen Methoden und Daten wurde insbesondere deutlich, dass die größten Effekte auf die Unsicherheiten einerseits auf der Seite des Programmanwenders liegen und andererseits auf der verwendeten Bibliothek für die Unsicherheiten der nuklearen Daten. Zwischen Teilnehmern, die dasselbe Programm und dieselben Daten genutzt haben, wurden zwischenzeitlich deutliche Unterschiede einiger Ergebnisgrößen aufgrund verschieden gewählter Parameter für die Simulation beobachtet. Diese konnten durch den Vergleich der Eingabedaten schnell erklärt und berichtigt werden. Auf der anderen Seite wurden

die oben beschriebenen deutlichen Unterschiede aufgrund der verschiedenen Bibliotheken beobachtet. Viele Teilnehmer, wie auch die GRS, nutzen für ihre Analysen die SCALE 6.1 oder SCALE 6.2 Daten, welche hauptsächlich entsprechend auf ENDF/B-VII.0 und ENDF/B-VII.1-Daten basieren. Da in diesen SCALE-Bibliotheken auch weitere Daten aufgenommen wurden bzw. insbesondere für einige Nuklide neuere vorläufige ENDF-Daten berücksichtigt wurden, kommt es bereits zu deutlichen Unterschieden, wenn die auf diesen Daten basierenden Rechnungen mit Rechnungen auf Basis der „reinen“ ENDF-Daten verglichen werden. Andere Effekte, die von der Methodik der Unsicherheitsanalyse oder der Anwendung von MG- oder CE-Daten stammen, treten angesichts dieser Unterschiede in den Hintergrund.

Parameter	Bedeutung
k	Multiplikationsfaktor
fuel_mic_n_gam_235U	Brennstoff, mikroskopischer Einfangquerschnitt für U-235
fuel_mic_n_gam_238U	Brennstoff, mikroskopischer Einfangquerschnitt für U-238
fuel_mic_fiss_235U	Brennstoff, mikroskopischer Spaltquerschnitt für U-235
fuel_nu_bar_235U	Brennstoff, mittlere Anzahl von Neutronen pro Spaltung für U-235
matrix_mic_elastic_12C	Graphitmatrix, mikroskopischer elastischer Streuquerschnitt für C-12
block_mic_elastic_12C	Graphitblock, mikroskopischer elastischer Streuquerschnitt für C-12

Tab. 5.4 Erläuterungen zu den Parametern in den folgenden Abbildungen

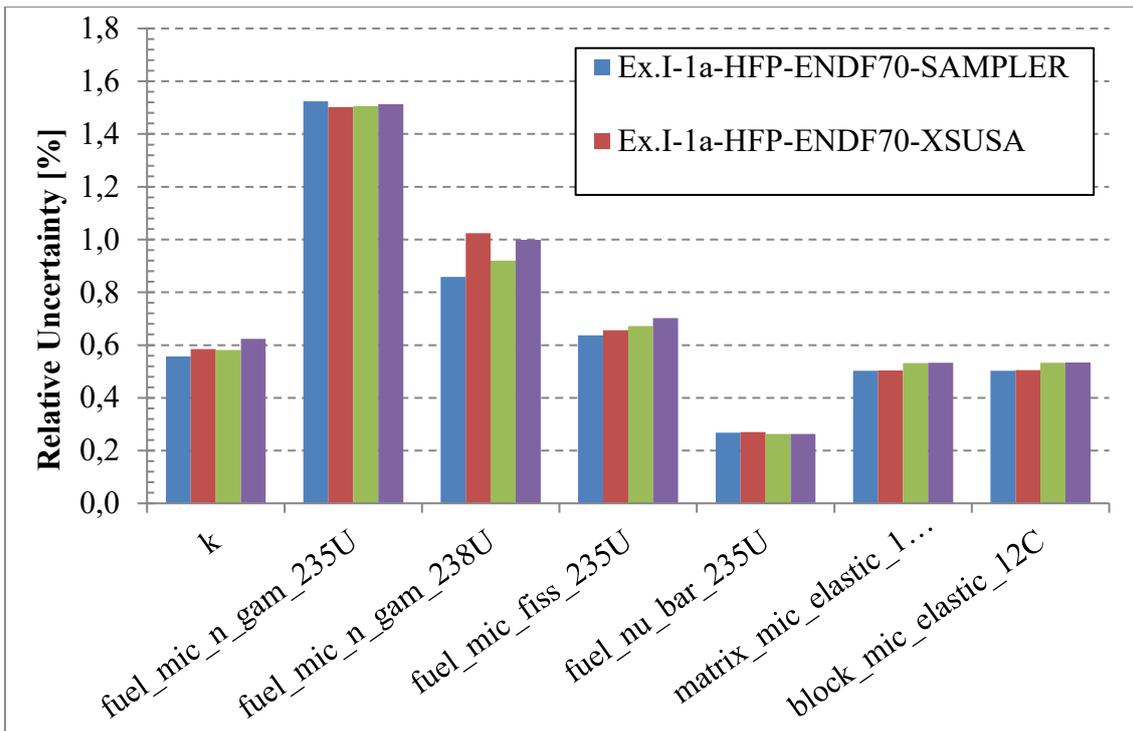


Abb. 5.14 Unsicherheiten für Exercise I-1a (Hot Full Power) basierend auf ENDF/B-VII.0 Daten

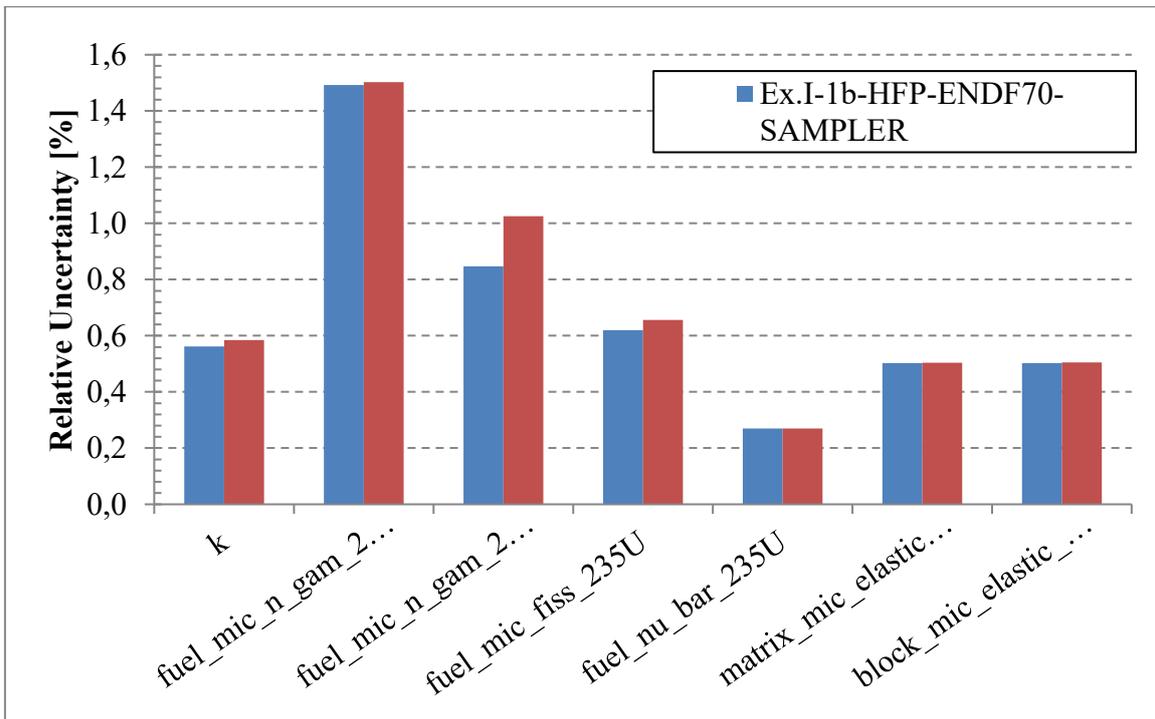


Abb. 5.15 Unsicherheiten für Exercise I-1b (Hot Full Power) basierend auf ENDF/B-VII.0 Daten

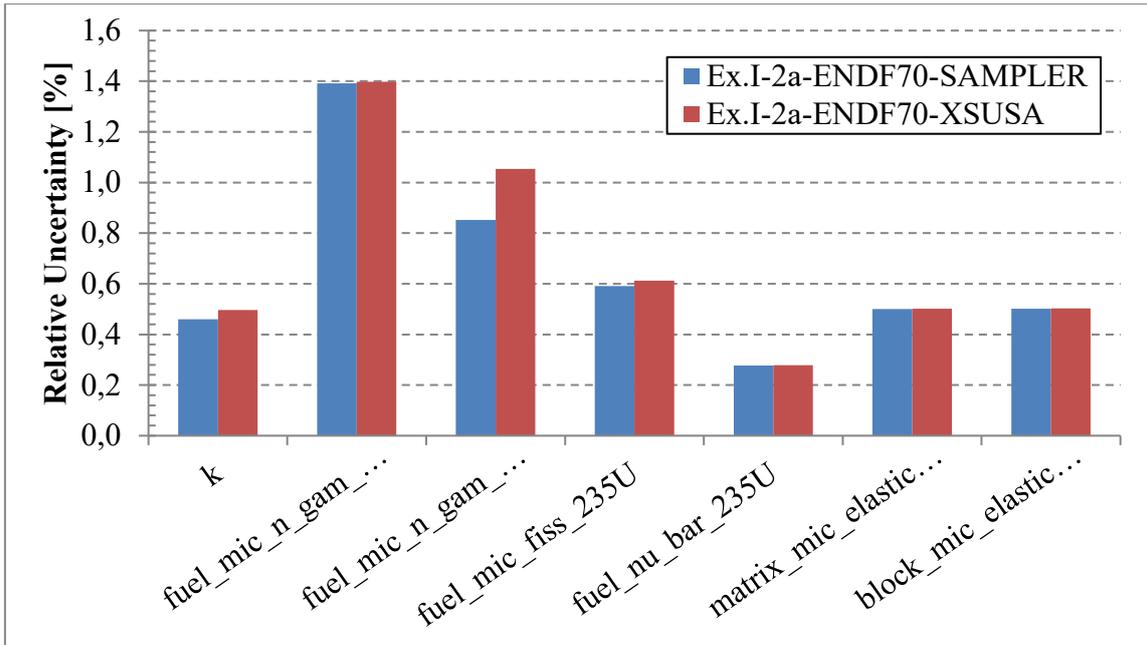


Abb. 5.16 Unsicherheiten für Exercise I-2a basierend auf ENDF/B-VII.0 Daten

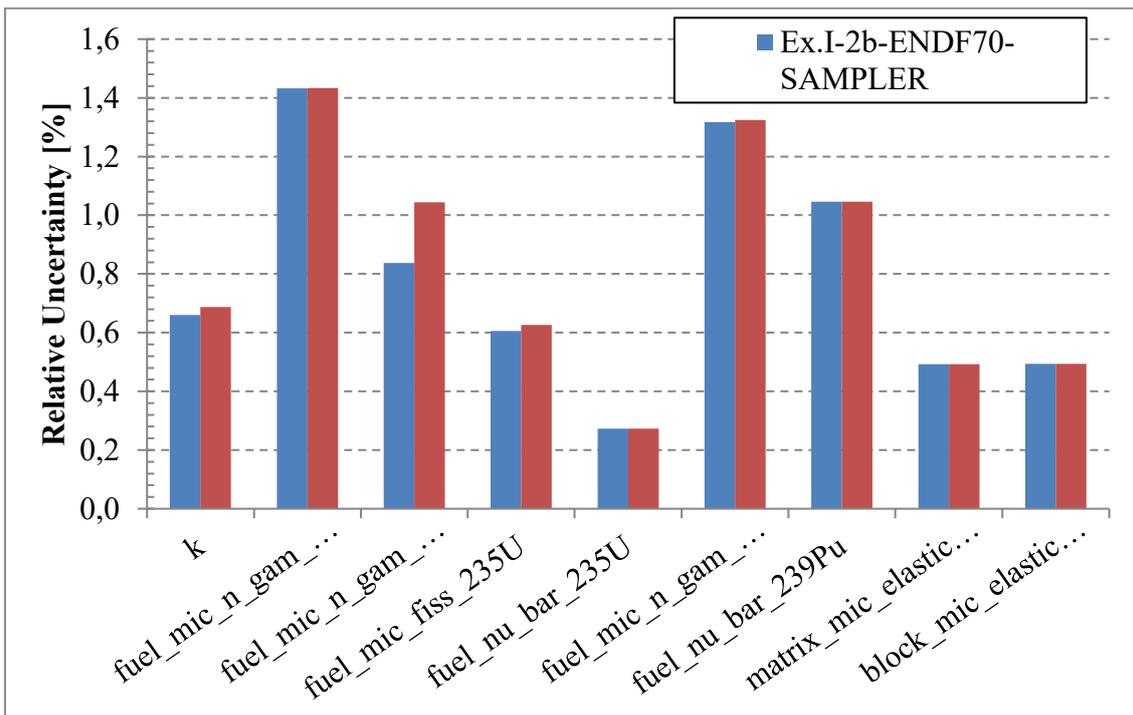


Abb. 5.17 Unsicherheiten für Exercise I-2b basierend auf ENDF/B-VII.0 Daten

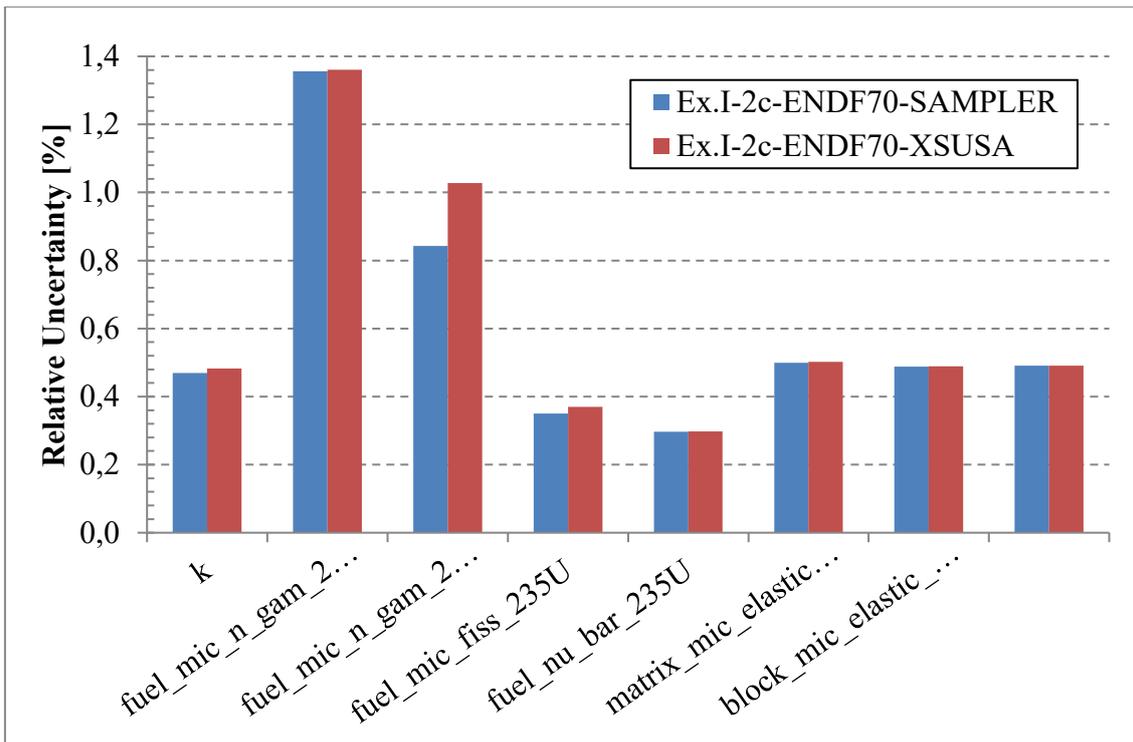


Abb. 5.18 Unsicherheiten für Exercise I-2c basierend auf ENDF/B-VII.0 Daten

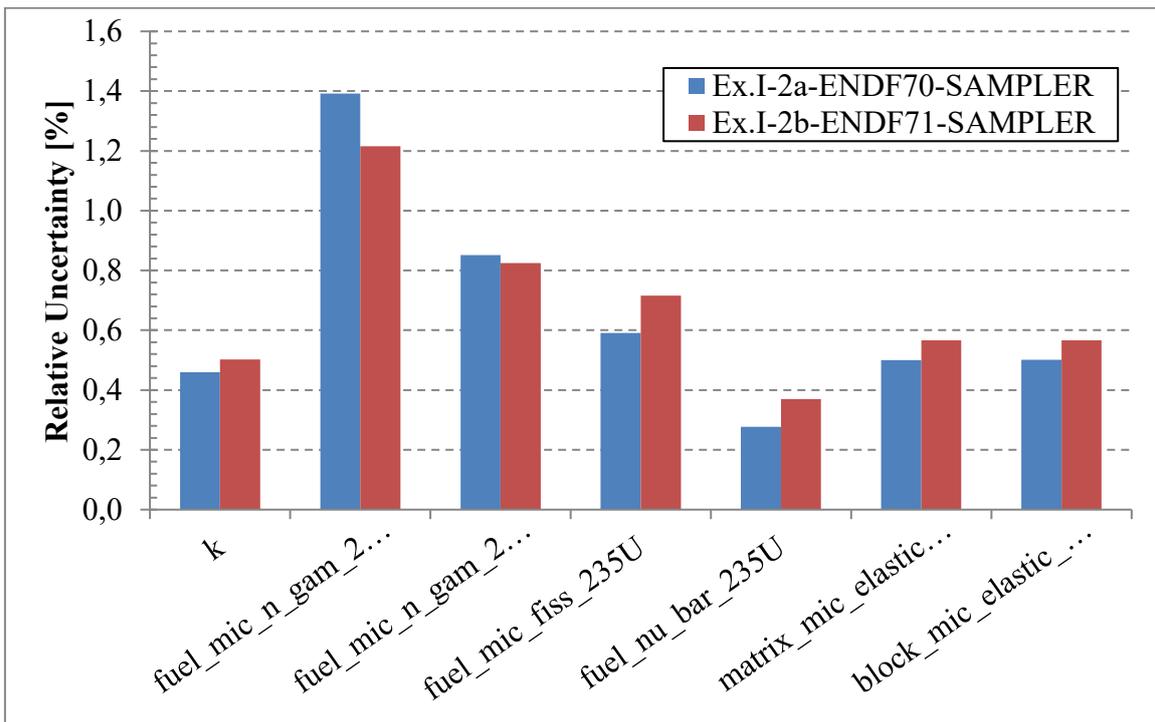


Abb. 5.19 Unsicherheiten für Exercise I-2a ermittelt mit SAMPLER – Vergleich zwischen ENDF/B-VII.0 und ENDF/B-VII.1 Ergebnissen

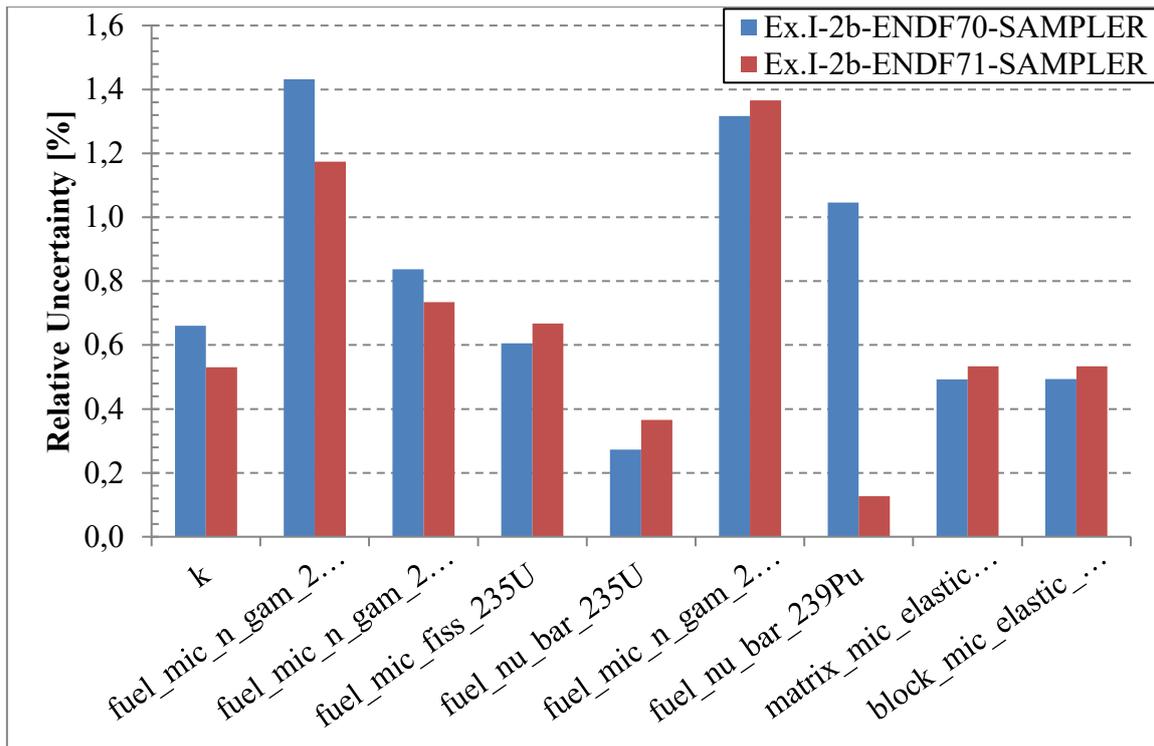


Abb. 5.20 Unsicherheiten für Exercise I-2b ermittelt mit SAMPLER – Vergleich zwischen ENDF/B-VII.0 und ENDF/B-VII.1 Ergebnissen

Wie bereits erwähnt wurden die Exercises I-1c und I-1d (s. Abb. 5.11) definiert, um mit einem einfachen Modell die Geometrie des MHTGR-Brennelements (s. Abb. 5.12) näherungsweise beschreiben zu können. Die periodische Fortsetzung der dreieckigen Brennstabzelle entspricht genau dem hexagonalen Gitter des MHTGR-Brennelements, das abwechselnd aus Zellen mit Brennstäben und Zellen mit Helium-Kühlkanälen aufgebaut ist. Dass die Berücksichtigung der Kühlkanäle in der Tat eine wichtige Rolle spielt, ist aus Abb. 5.21 ersichtlich, in der die Neutronenfluss-Spektren verglichen werden, die aus den Anordnungen von Exercise I-1b (ohne Kühlkanäle) und Exercise I-1d (mit Kühlkanälen) berechnet wurden. Die Berechnungen wurden für den heißen Zustand mit NEWT unter Verwendung der auf ENDF/B-VII.1-Daten basierenden Wirkungsquerschnittsbibliothek mit 252 Energiegruppen durchgeführt. Die Berücksichtigung der Kühlkanal-Zellen und damit dem darin enthaltenen Graphit führt zu einer Erhöhung des Moderator/Brennstoff-Verhältnisses und folglich zu einem deutlich thermischeren Spektrum.

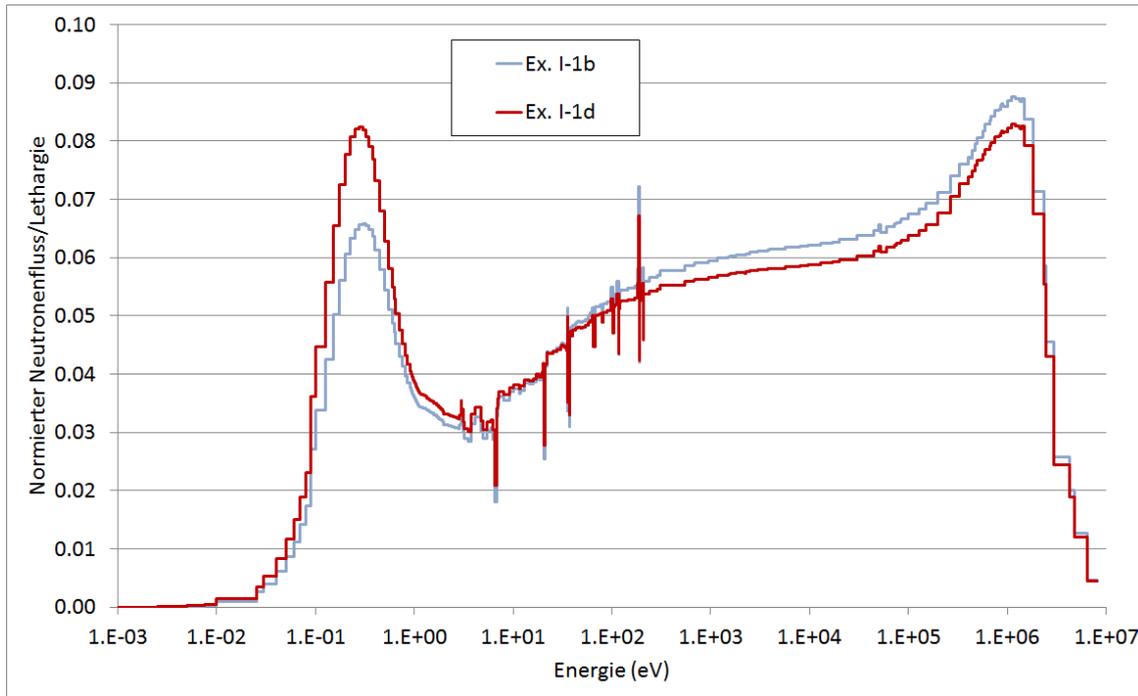


Abb. 5.21 Neutronenfluss-Spektrum für den heißen Zustand aus Exercise I-1b (ohne Kühlkanäle) und Exercise I-1d (mit Kühlkanälen)

Im Folgenden wird ein Überblick über die von der GRS durchgeführten Kritikalitätsrechnungen und Unsicherheitsanalysen gegeben. Die Ergebnisse wurden beim Benchmark eingereicht und sind im Bericht zu Phase I des prismatischen Designs /STR 17/ enthalten. Leider haben die anderen Benchmark-Teilnehmer zu diesen Aufgaben praktisch keine Analysen durchgeführt, so dass hier keine Vergleiche möglich sind. Da XSUSA zum Zeitpunkt der Durchführung der Analysen noch auf SCALE 6.1 beschränkt war, wurden die Ergebnisse mit dieser SCALE-Version erzeugt. Da auch beabsichtigt war, bei den Analysen den Einfluss unterschiedlicher Datenbibliotheken zu ermitteln, wurden die auf ENDF/B-VII.1 basierenden Wirkungsquerschnitte mit 252 Energiegruppen sowie die zugehörigen Kovarianzdaten mit 56 Energiegruppen aus SCALE 6.2 in ein mit SCALE 6.1 verwendbares Format umgewandelt.

In Tab. 5.5 werden zunächst die mit NEWT berechneten Nominalwerte für alle geforderten Ergebnisgrößen verglichen. Dabei werden folgende Bezeichnungen verwendet:

Tab. 5.5 Multiplikationsfaktoren und Ein-Gruppen-Wirkungsquerschnitte für die prismatischen HTR-Anordnungen I-1c und I-1d aus NEWT

		Ex. I-1c		Ex. I-1d	
		ENDF/B-VII.0	ENDF/B-VII.1	ENDF/B-VII.0	ENDF/B-VII.1
kalt	k	1,36501	1,36300	1,41961	1,41812
	fuel_mic_n_gam_235U	11,0751	11,0651	11,2216	11,2129
	fuel_mic_n_gam_238U	3,78327	3,78713	3,36617	3,36515
	fuel_mic_fiss_235U	40,7649	40,7206	41,8029	41,7681
	fuel_nu_bar_235U	2,43729	2,43728	2,43727	2,43727
	block_mic_elastic_12C	4,26843	4,27045	4,27281	4,27501
	matrix_mic_elastic_12C	4,27769	4,27975	4,28374	4,28588
heiß	k	1,24018	1,23792	1,30303	1,30029
	fuel_mic_n_gam_235U	10,4009	10,3926	10,5923	10,5808
	fuel_mic_n_gam_238U	4,58015	4,55172	4,07726	4,05234
	fuel_mic_fiss_235U	36,8209	36,5768	37,9981	37,7266
	fuel_nu_bar_235U	2,43735	2,43735	2,43733	2,43733
	block_mic_elastic_12C	4,27752	4,27927	4,28445	4,28599
	matrix_mic_elastic_12C	4,28693	4,28866	4,29522	4,29689

Dabei ergeben sich erwartungsgemäß große Unterschiede in den Multiplikationsfaktoren für das Modell mit Volumen-homogenisiertem Brennstoff (I-1c) und demjenigen, bei dem die doppelte Heterogenität in der Resonanzselbstabschirmungsberechnung explizit berücksichtigt wurde (I-1d). Der Einfluss der Verwendung der beiden verschiedenen Wirkungsquerschnittsbibliotheken ist bei allen Ergebnisgrößen gering.

Unsicherheitsanalysen für alle Ergebnisgrößen wurden mit XSUSA für beide Anordnungen I-1c und I-1d für den kalten und heißen Zustand durchgeführt. Da die resultierenden Unsicherheiten in allen Fällen sehr ähnlich sind, sind sie in Abb. 5.22 nur für den kalten Zustand von Anordnung I-1d dargestellt. Die Unsicherheitsanalysen wurden mit einer Stichprobengröße von 1000 durchgeführt, so dass das relative 95%-Konfidenzintervall der Unsicherheiten etwa $\pm 4.5\%$ beträgt. Die Unsicherheiten sind in einem Bereich, der zu denen von spektral vergleichbaren LWR-Anordnungen mit UO_2 ähnlich ist. Es ergibt sich auch, dass es wenig Unterschied ausmacht, ob man die Kovarianzdaten mit 44 Energiegruppen aus SCALE 6.1 oder mit 56 Energiegruppen aus SCALE 6.2 zugrunde legt.

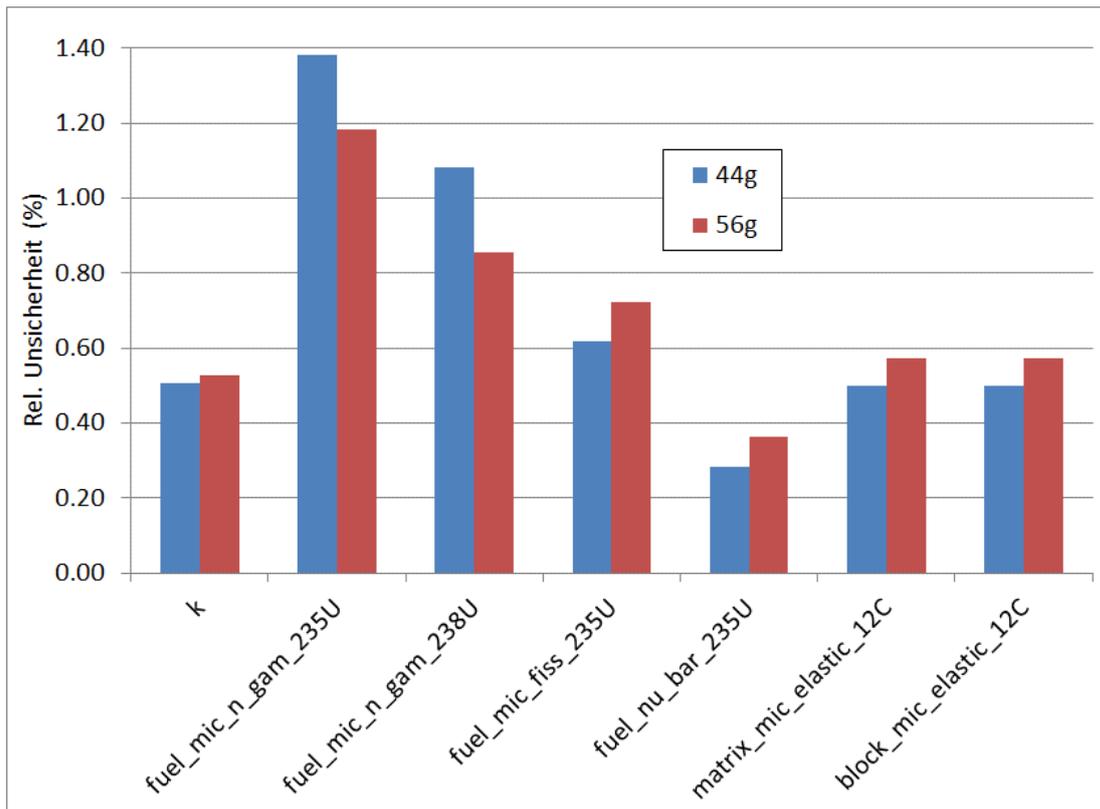


Abb. 5.22 Relative Unsicherheiten (1σ) im Multiplikationsfaktor und den Ein-Gruppen-Wirkungsquerschnitten für die prismatische HTR-Anordnung I-1d (kalt) aus XSUSA/SCALE

Bei Verwendung der XSUSA-Methodik werden die Variationen der Wirkungsquerschnitte nach der Resonanzselbstabschirmungsrechnung angewandt, also sogenannte implizite Effekte, die sich durch die Propagation der Unsicherheiten durch die Resonanzselbstabschirmungsrechnung ergeben, vernachlässigt. Für LWR-Systeme und Systeme mit schnellem Spektrum hat sich gezeigt, dass dadurch keine substantiellen Fehler eingeführt werden. Um diese Effekte für HTR-Systeme zu überprüfen, wurden mit TSUNAMI entsprechende Berechnungen für die Anordnung I-1c durchgeführt. Die resultierenden Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren werden in Abb. 5.23 verglichen. Dabei sind zum einen die expliziten Unsicherheiten, bei denen die impliziten Effekte nicht berücksichtigt sind, zum anderen die totalen Unsicherheiten, die die impliziten Anteile enthalten, dargestellt. Unterschiede sind vor allem bei der Verwendung der 44-Gruppen-Kovarianzdaten und der 238-Gruppen-ENDF/B-VII.0-Wirkungsquerschnitte zu beobachten. Diese rühren vor allem von einer größeren Energieauflösung des ^{238}U -(n, γ)-Einfangquerschnitts im Resonanzbereich im Vergleich zu den 252-Gruppen-ENDF/B-VII.1-Daten her. In Abb. 5.24 sind die Hauptbeiträge zur Unsicherheit aus den 44/238-Gruppen-Daten ohne und mit impliziten Effekten aus

einer TSUNAMI-Sensitivitätsanalyse verglichen. Insgesamt lässt sich feststellen, dass die Vernachlässigung impliziter Effekte zu keinen großen Abweichungen führt, es aber zur weiteren Verbesserung der der Aussagesicherheit wünschenswert ist, diese zu berücksichtigen. Es ist geplant, im Vorhaben RS1564 eine entsprechende Methodik in XSUSA zu implementieren.

Kugelhaufen-Anordnung PBR-250

Zum Benchmark für HTR mit Kugelhaufen-Design /REI 13/ wurden von der GRS Kritikalitätsberechnungen und Unsicherheitsanalysen zu den Aufgaben I-1 und I-2 („local neutronics“) durchgeführt. Bei Exercise I-1 handelt es sich eine von Helium umgebene Brennstoffkugel (siehe Abb. 5.25) mit unterschiedlichen Isotopenzusammensetzungen, die frischen Brennstoff (I-1a) und solchen mit mittlerem Abbrand (I-1b) repräsentieren. Bei Exercise I-2 wird angenommen, dass die Schüttung aus Brennstoff mit mittlerem Abbrand und Brennstoff in einem der Zustände mit mittlerem Abbrand (I-2a), mit hohem Abbrand (I-2b) oder frisch (I-2c) besteht. Dies kann durch das in Abb. 5.26 skizzierte Modell beschrieben werden.

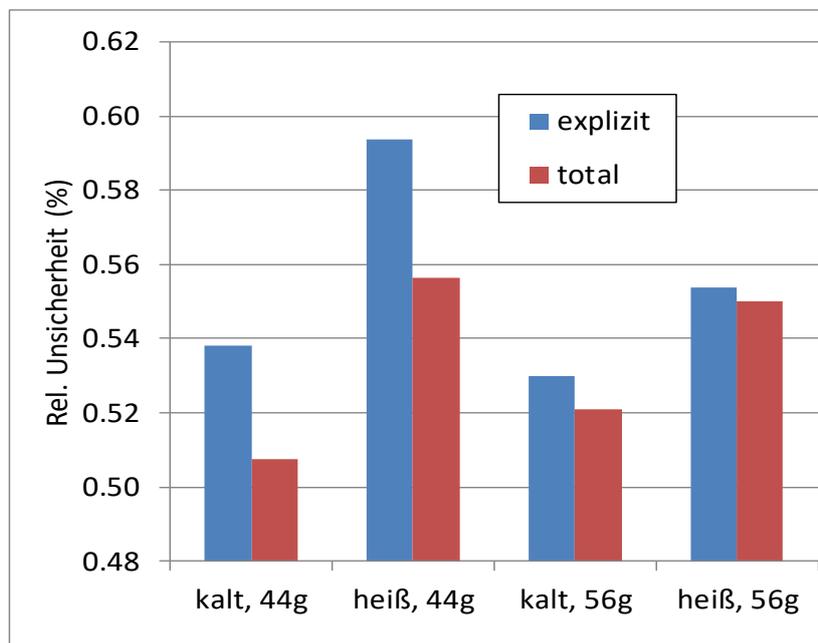


Abb. 5.23 Relative Unsicherheiten (1σ) im Multiplikationsfaktor für die prismatische HTR-Anordnung I-1c

Jeweils ohne (explizit) und mit (total) implizitem Anteil aus TSUNAMI

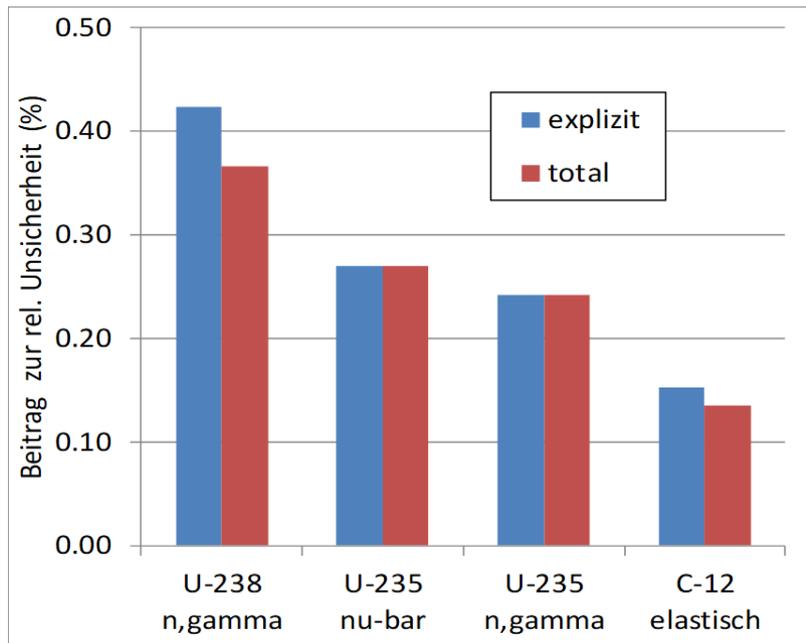


Abb. 5.24 Hauptbeiträge zu den Unsicherheiten im Multiplikationsfaktor für die prismatische HTR-Anordnung I-1c

Jeweils ohne (explizit) und mit (total) implizitem Anteil aus TSUNAMI

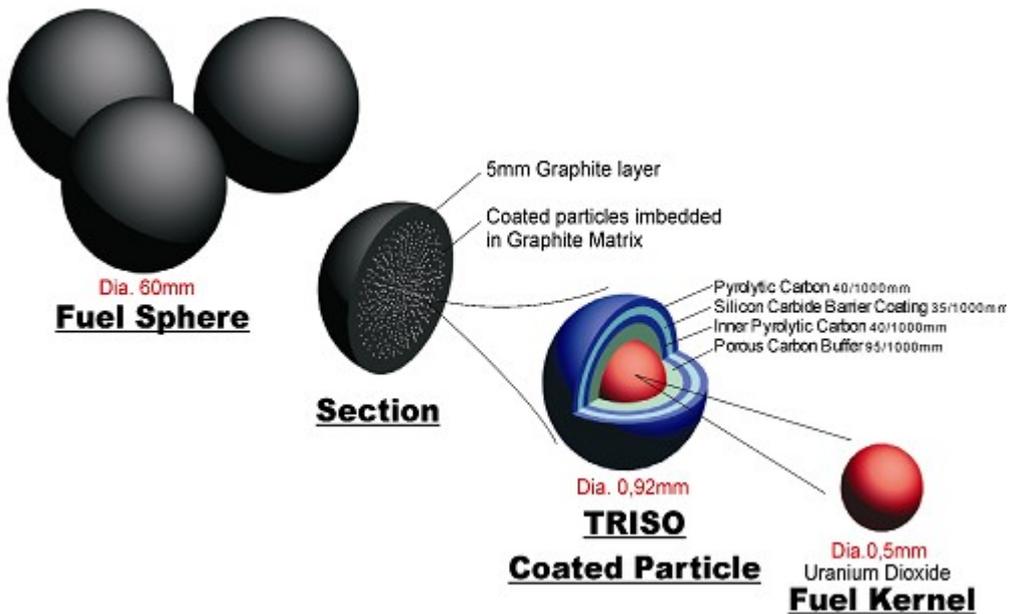


Abb. 5.25 HTR-Brennstoff vom Kugelhaufen-Typ (aus /REI 13/)

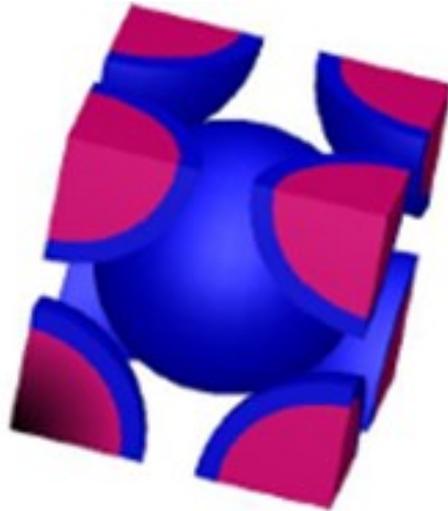


Abb. 5.26 HTR-Brennstoff vom Kugelhaufen-Typ mit zwei unterschiedlichen Isotopenzusammensetzungen für die Kugeln in der Mitte und an den Ecken

Während die Anordnungen aus Exercise I-1 mit einem eindimensionalen deterministischen Transportprogramm beschrieben werden können, ist das für die Anordnungen aus Exercise I-2 nicht möglich. Dementsprechend wurden der 1D-Transportcode XSDRN (I-1) und der Monte-Carlo-Code KENO-V.a (I-2), beide aus dem SCALE-Programmsystem, eingesetzt. Allerdings hat sich herausgestellt, dass die Ergebnisse für die Multiplikationsfaktoren bei Verwendung von SCALE 6.1 deutliche Abweichungen zu entsprechenden Ergebnissen aus Monte-Carlo-Berechnungen mit Daten in kontinuierlicher Energiedarstellung aufweisen; daher wurde für diese Anordnungen SCALE 6.2 herangezogen, was zu einer wesentlich verbesserten Übereinstimmung führt. Für die Unsicherheitsanalysen mussten entsprechend die Ablaufsequenzen so angepasst werden, dass XSUSA auch mit SCALE 6.2 ausgeführt werden kann. Für Anordnungen ohne doppelte Heterogenität, wie Leichtwasserreaktoren oder Systeme mit schnellem Neutronenspektrum, war dies im Vorhaben RS1536 /ZWE 18/ realisiert worden. Für Systeme mit doppelter Heterogenität war dazu nochmals erheblicher Anpassungsaufwand erforderlich.

Im Folgenden sind die Ergebnisse der Kritikalitätsrechnungen und Unsicherheitsanalysen mit XSUSA/SCALE dargestellt. Es wurde wieder eine Stichprobengröße von 1000 verwendet, so dass auch hier das relative 95%-Konfidenzintervall der Unsicherheiten etwa $\pm 4.5\%$ beträgt. Als Wirkungsquerschnitte wurde die 252-Gruppen-ENDF/B-VII.1-Bibliothek verwendet; Ergebnisse anderer HTR-CRP-Teilnehmer haben gezeigt, dass die Verwendung 238-Gruppen-ENDF/B-VII.0-Bibliothek deutliche Abweichungen ergibt. Zunächst wurden zur Validierung des Verfahrens Vergleiche mit Monte-Carlo-

Ergebnissen anderer HTR-CRP-Teilnehmer durchgeführt. Die Übereinstimmung sowohl für die Nominalwerte als auch für die Unsicherheiten war in allen Fällen sehr zufriedenstellend.

Da die HTR-CRP-Ergebnisse noch nicht für die Öffentlichkeit freigegeben sind, können hier vorerst keine quantitativen Vergleichsergebnisse gezeigt werden. In Abb. 5.27 sind die Ergebnisse für den Multiplikationsfaktor und die relativen Unsicherheiten für eine der Anordnungen ohne Werteangaben dargestellt; die Ergebnisse von XSUSA/SCALE und TSUNAMI-CE, bei dem der Monte-Carlo-Code KENO mit Wirkungsquerschnitten in kontinuierlicher Energiedarstellung verwendet wird, sind in ausgezeichneter Übereinstimmung.

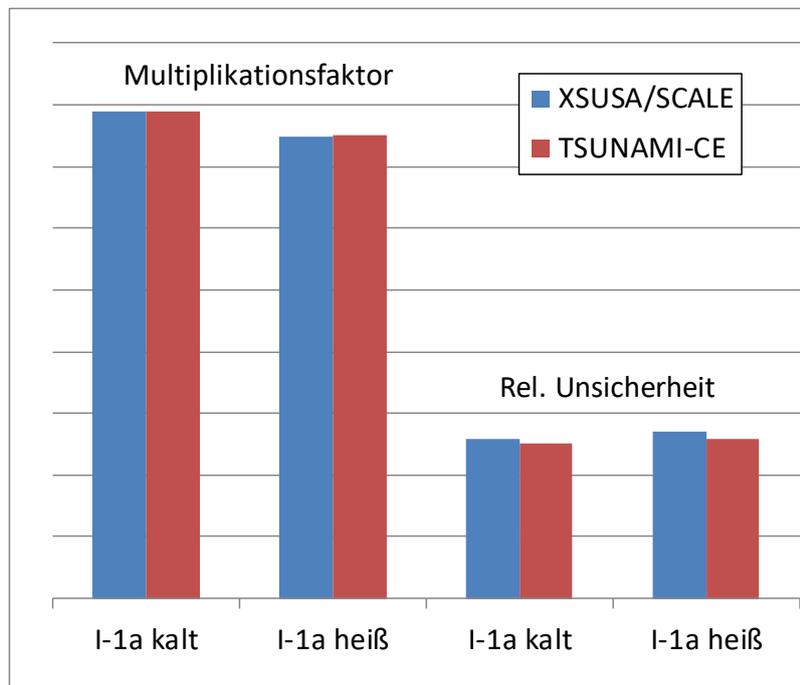


Abb. 5.27 Multiplikationsfaktoren und relative Unsicherheiten (1σ) für die Kugelhaufen-HTR-Anordnung I-1a (kalt) aus XSUSA/SCALE

Weitere Ergebnisse der Kritikalitätsberechnungen und Unsicherheitsanalysen mit XSUSA/SCALE sind in Tab. 5.6 zusammengefasst. Auch hier zeigt sich, dass die Unsicherheiten in einem Bereich liegen, der sich bereits früher für vergleichbare LWR-Anordnungen mit UO_2 und MOX ergeben hat. Die beiden Anordnungen I-1b und I-2a unterscheiden sich lediglich durch die unterschiedliche Darstellung derselben Geometrie; daher sind auch die Ergebnisse nahezu identisch.

Tab. 5.6 Multiplikationsfaktoren und relative Unsicherheiten (1σ) für die Kugelhaufen-HTR-Anordnungen aus XSUSA/SCALE

	Ex. I-1b, kalt	Ex. I-1b, heiß	Ex. I-2a, kalt	Ex. I-2b, kalt	Ex. I-2c, kalt
Multiplikationsfaktor	1,10539	1,07025	1,10520	1,00971	1,36919
Rel. Unsicherheit (1σ)	0,543 %	0,539 %	0,542 %	0,563 %	0,505 %

5.3 AP 3.3: Systematische Unsicherheitsanalysen für Abbrandrechnungen bei schnellen Reaktorsystemen

Im Rahmen des Vorhabens RS1536 /ZWE 18/ wurde eine Plattform für systematische Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen für Systeme mit schnellem Neutronenspektrum geschaffen, deren Schwerpunkte Kritikalitätsberechnungen für Stabzellen, Brennelemente und Ganzkernanordnungen sind. Im Folgenden werden die Arbeiten beschrieben, die zur Erweiterung auf Abbrandberechnungen durchgeführt wurden. Dazu wurden die beiden Brennelemente herangezogen, die in der UAM-SFR-Spezifikation /BOS 18/ beschrieben sind. Es handelt sich um Brennelemente mit oxydischem (MOX3600) bzw. metallischem (MET1000) Brennstoff (vgl. Abb. 5.28 und Abb. 5.29), deren Designs für zukünftige GEN-IV-Reaktoren in Betracht gezogen werden.

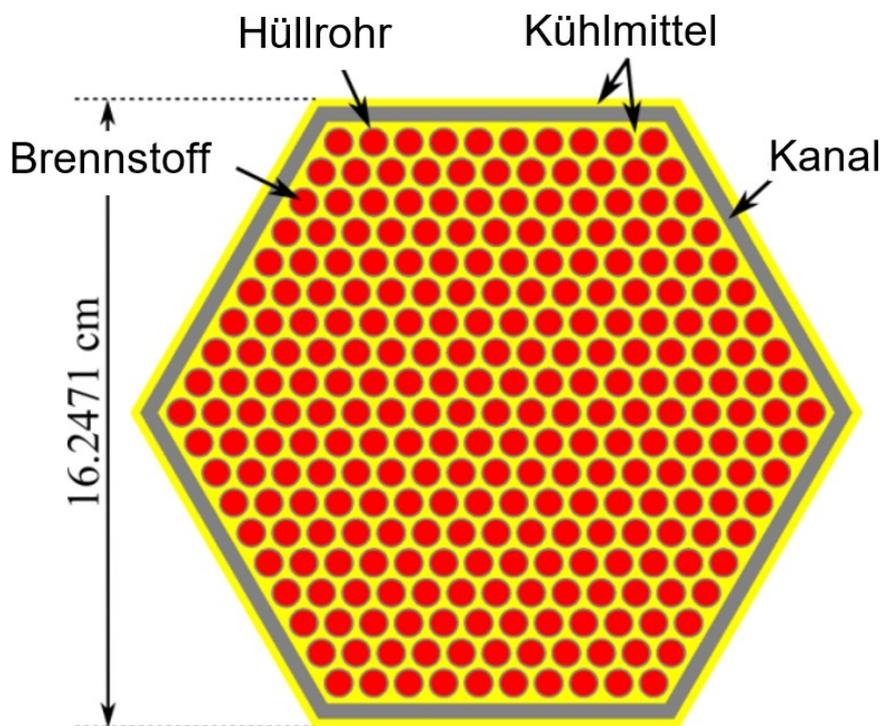


Abb. 5.28 MOX3600-Brennelement mit oxydischem Brennstoff

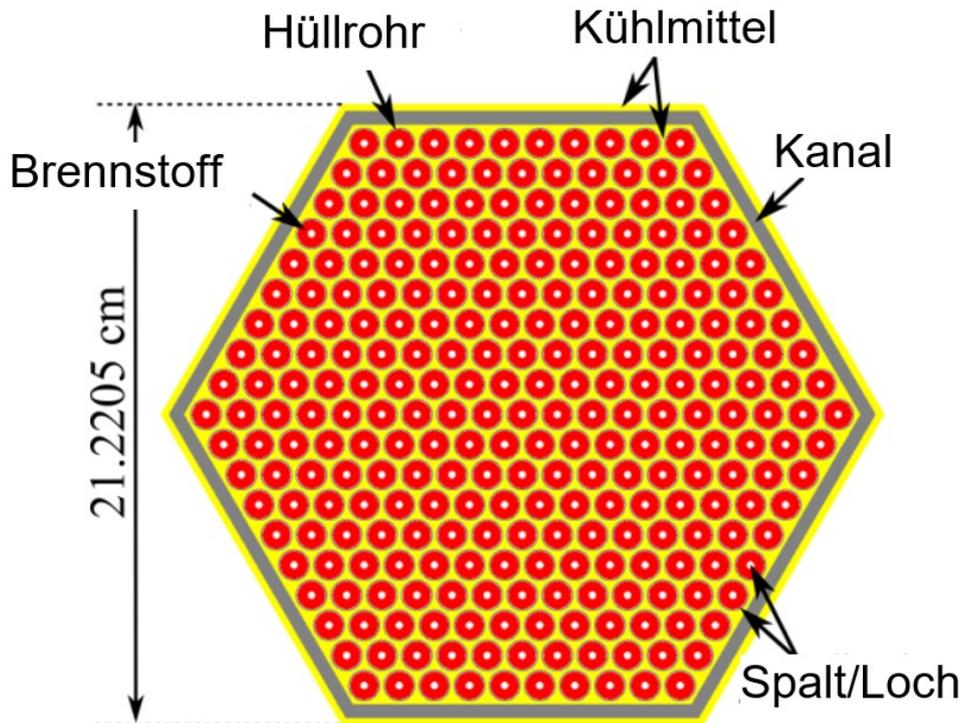


Abb. 5.29 MAT1000-Brennelement mit metallischem Brennstoff

Für die Abbrandberechnungen wurde die TRITON-Sequenz mit NEWT als deterministischem Neutronentransportprogramm aus SCALE 6.1 verwendet. Dies war erforderlich, da zur Durchführung der Unsicherheitsanalysen XSUSA verwendet wird, das bisher für Abbrandberechnungen noch nicht mit SCALE 6.2 genutzt werden kann. Deshalb konnten auch noch nicht die im Vorhaben RS1536 für schnelle Systeme erzeugten Wirkungsquerschnitts- und Kovarianzbibliotheken herangezogen werden. Es wurden daher die in SCALE 6.1 verfügbaren Bibliotheken verwendet, die für thermische Systeme optimiert sind. Die Ergebnisse sind deshalb als vorläufig anzusehen.

Die Abbrandberechnungen wurden jeweils für einen typischen Zyklus durchgeführt. Dabei wurde bei dem Brennelement mit oxidischem Brennstoff eine spezifische Leistung von 50,4 MW/tHM (tHM: Tonne Schwermetall) und eine Zykluslänge von 410 Tagen angenommen, bei dem Brennelement mit metallischem Brennstoff sind es 75,38 MW/tHM und 328,5 Tage. Der Zyklus wurde dabei in zehn Abbrandschritte gleicher Länge eingeteilt; diese grobe Einteilung ist dadurch gerechtfertigt, dass sich im Vergleich zu LWR-Systemen die Nuklidichten mit fortschreitendem Abbrand nur langsam verändern. Dies wird in Abb. 5.30 deutlich, in der der Verlauf von Aktinoidendichten während der Abbrandzeit dargestellt ist.

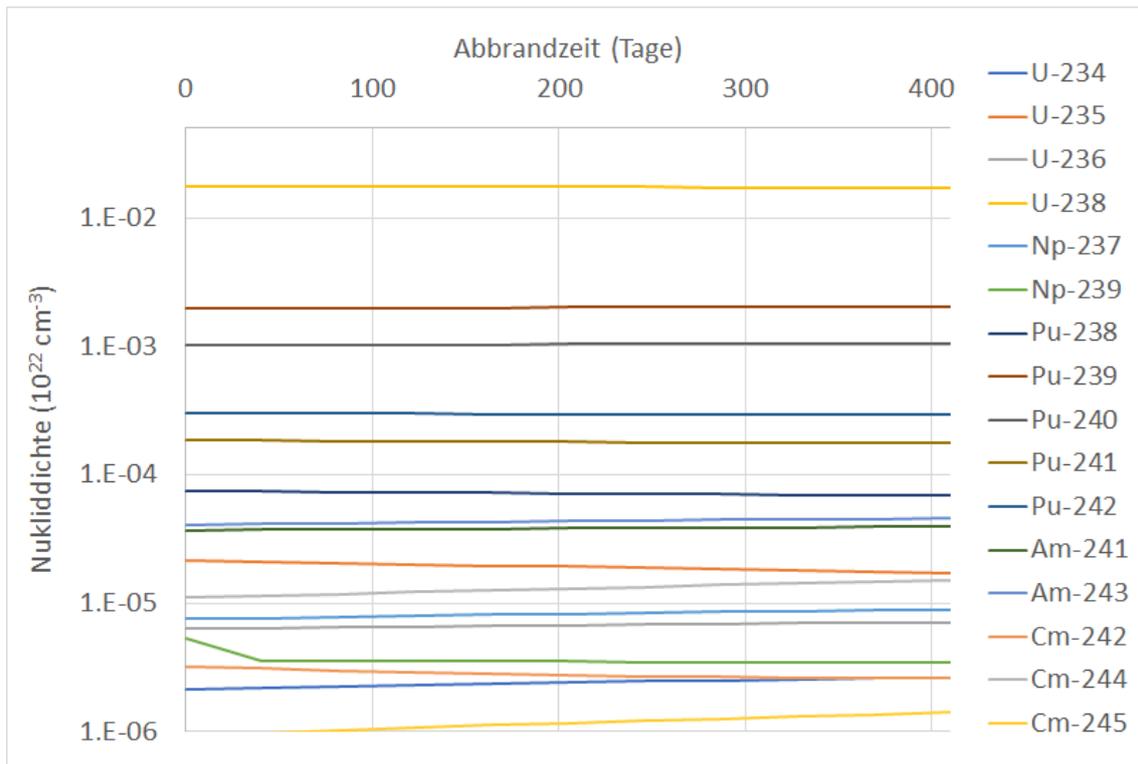


Abb. 5.30 Nukliddichten im Verlauf des Abbrands für das MOX3600-Brennelement

Unsicherheiten bezüglich nuklearer Daten wurden für Multiplikationsfaktoren, Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte und Nuklidinventare ausgewertet. Für die Wirkungsquerschnitte wurde eine für Berechnungen schneller natriumgekühlter Systeme typische Struktur mit vier Energiegruppen gewählt, die in /BOS 18/ spezifiziert ist. Allgemein ist zu beobachten, dass sich sowohl die Nominalwerte für diese Parameter selbst als auch die zugehörigen Unsicherheiten im Verlauf des Abbrands nur geringfügig ändern.

Die Ergebnisse für die Multiplikationsfaktoren der beiden Brennelemente sowie für die jeweiligen Unsicherheiten sind in Abb. 5.31 dargestellt. Entsprechend sind in Abb. 5.32 und Abb. 5.33 nur die relativen Unsicherheiten des Multiplikationsfaktors und der Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte des MOX3600- und des MET1000-Brennelements zu Zyklusbeginn und -ende dargestellt. Die Wirkungsquerschnitte folgen der Nomenklatur σ_{tot} = totaler Wirkungsquerschnitt, σ_{sabs} = Absorptionswirkungsquerschnitt, ν_{sp} = Spaltwirkungsquerschnitt * mittlere Anzahl von Neutronen pro Spaltung. Die Ziffern bezeichnen die Energiegruppen. Die Ähnlichkeit der Werte zu Zyklusbeginn und -ende ist deutlich sichtbar. Die Wirkungsquerschnitte besitzen Unsicherheiten, deren Größe mit denen von LWR-Anordnungen vergleichbar ist; die Unsicherheiten des Multiplikationsfaktors sind deutlich höher.

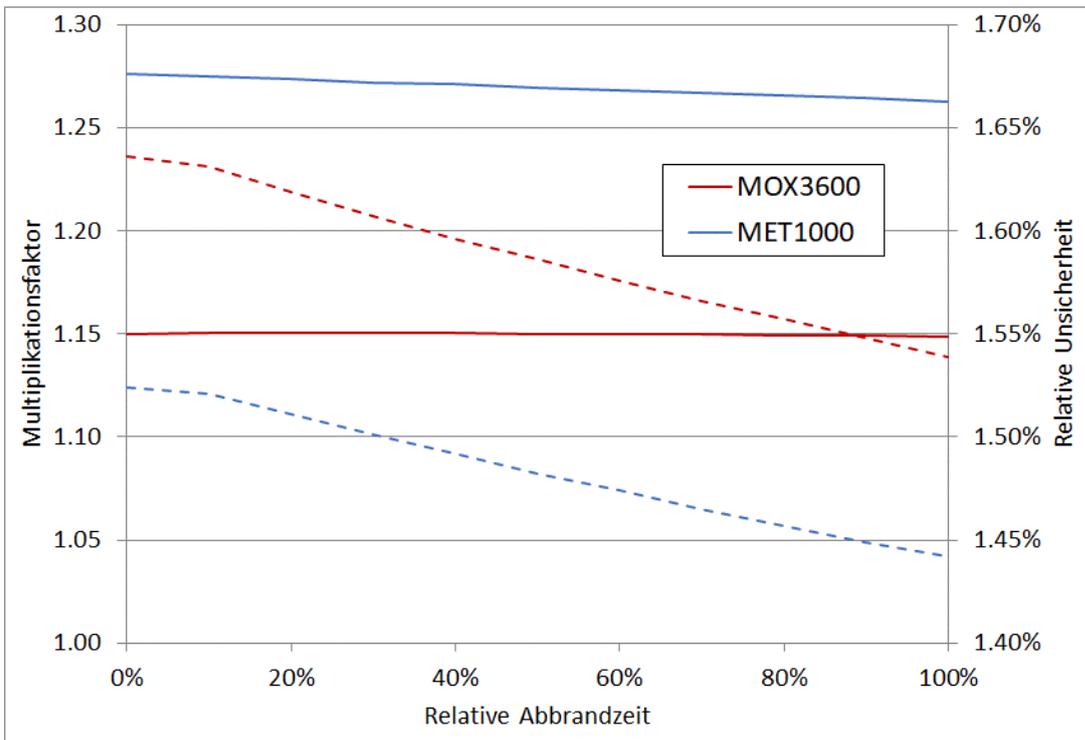


Abb. 5.31 Multiplikationsfaktoren (durchgezogene Linien) der SFR-Brennelemente und relative Unsicherheiten (gestrichelte Linien) im Verlauf eines Abbrandzyklus

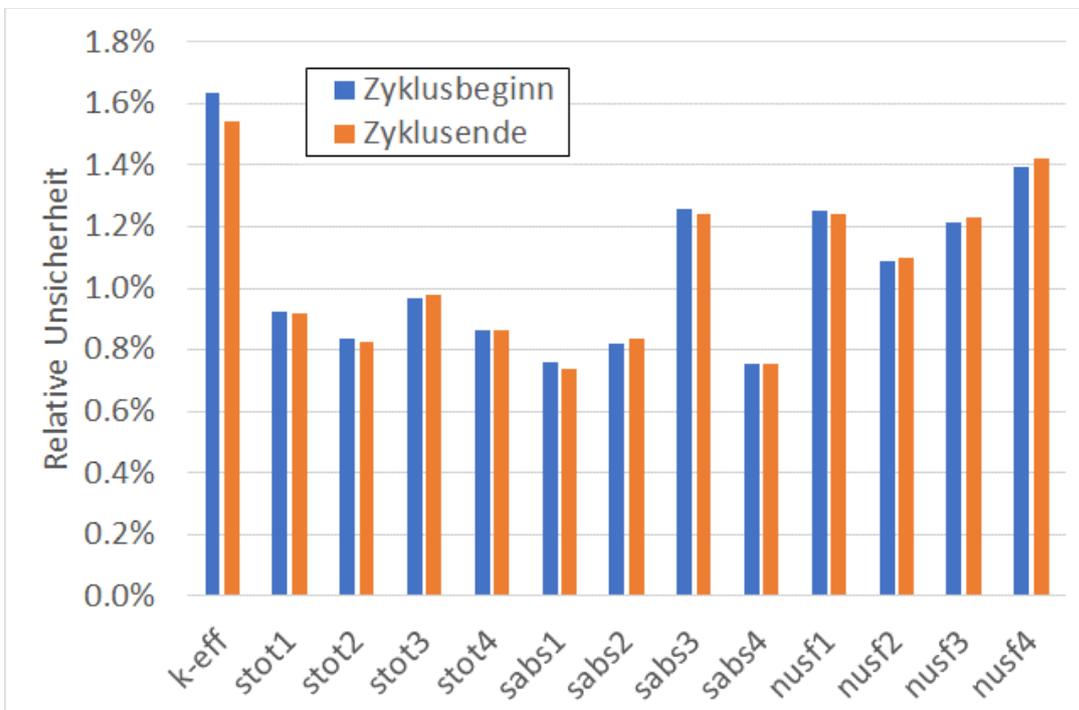


Abb. 5.32 Relative Unsicherheiten des Multiplikationsfaktors und der Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte des MOX3600-Brennelements

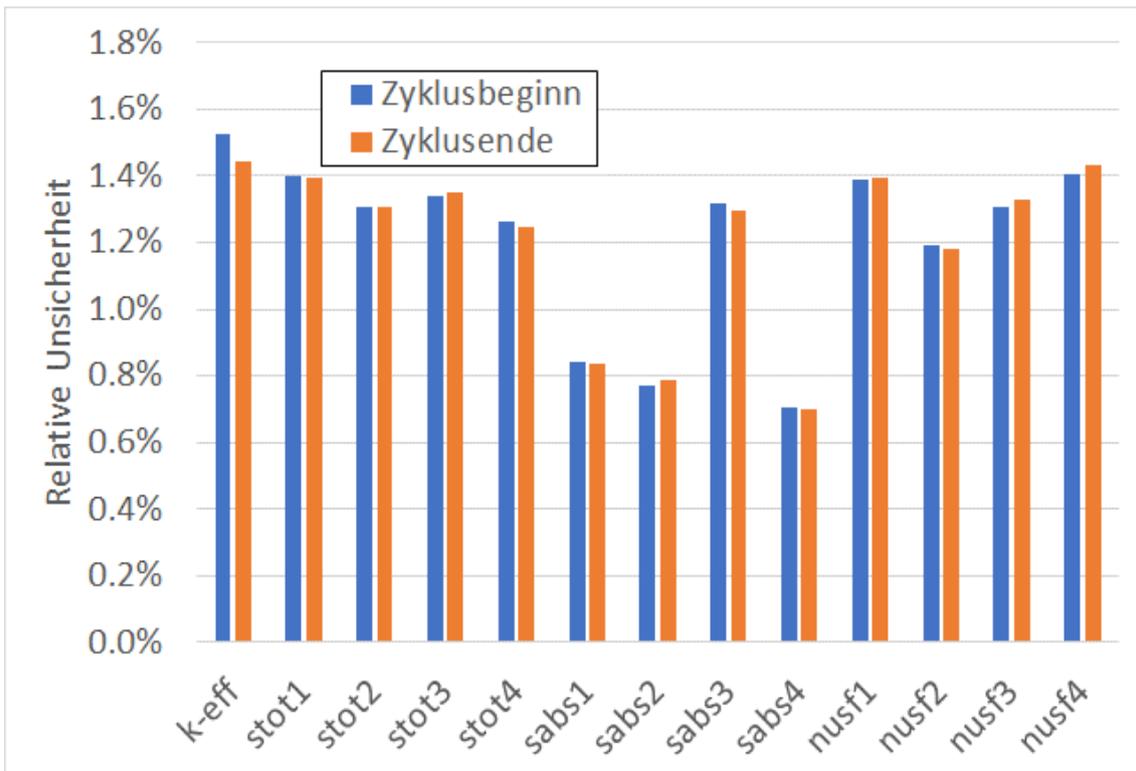


Abb. 5.33 Relative Unsicherheiten des Multiplikationsfaktors und der Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte des MET1000-Brennelements

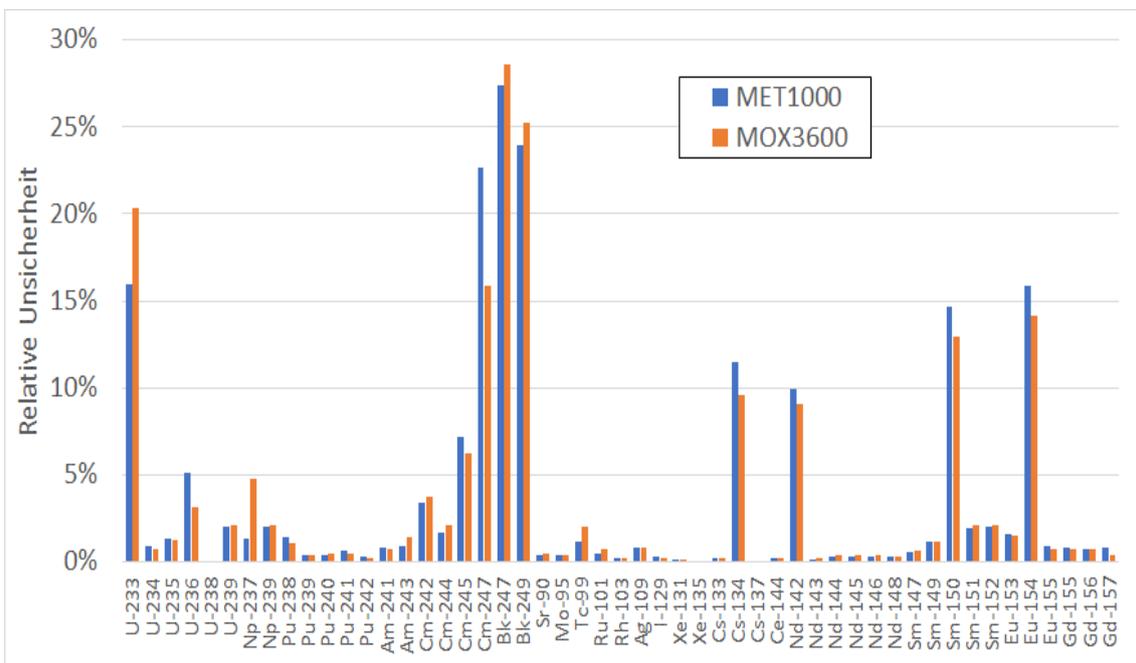


Abb. 5.34 Relative Unsicherheiten der Nuklidinventare der SFR-Brennelemente am Zyklusende

Die Unsicherheiten der Nuklidinventare sind für die beiden Brennelemente am Ende des Abbrandzyklus in Abb. 5.34 gegeben. Die sich ergebenden Unsicherheiten bewegen sich für die Aktinoiden im Bereich der Werte, die man für LWR-Systeme erhält. Die Unsicherheiten bei den Spaltprodukten sind größtenteils im Bereich $< 1\%$. Etwas größere Unsicherheiten sind für die Samarium-Nuklide zu verzeichnen. Deutlich erhöhte Unsicherheiten ergeben sich bei den betrachteten Nukliden ^{134}Cs , ^{142}Nd , ^{150}Sm und ^{154}Eu . Für diese sind die Unsicherheiten größer als bei LWR-Systemen. Um die Ursache hierfür näher zu ergründen ist eine vertiefte Analyse der zugehörigen Sensitivitäten notwendig.

5.4 AP 3.4: Evaluierung der TENDL-Bibliothek

Die TENDL-Wirkungsquerschnittsbibliothek /KON 12/ wird im Unterschied zu den etablierten Bibliotheken mit dem TALYS Code auf der Basis grundlegender Kern- und Reaktionsmodelle sowie experimenteller Daten erzeugt. Durch diese Methode können im Vergleich zu ENDF/B und JEFF umfassendere Wirkungsquerschnittsdatensätze, Winkel-/Energieverteilungen und Kovarianzdaten für eine größere Anzahl von Reaktionskanälen und Isotopen reproduzierbar und automatisiert erzeugt werden. Der mit der TENDL-Bibliothek verfolgte zukunftsweisende Ansatz spielt auch bei den Bemühungen um eine vereinheitlichte Datenbibliothek eine wichtige Rolle. Andererseits unterliegt der Datensatz nicht dem aufwendigen Evaluierungsprozess, der für die traditionellen Datenevaluationen zur Anwendung kommt. Insofern stellt sich die Frage, ob die TENDL-Bibliothek für den Einsatz bei Abbrandrechnungen bereits geeignet ist und wie sich Einsatz auf die Rechenergebnisse auswirkt.

Daher wurde für das vorliegende Arbeitspaket geplant, mindestens eine Version der TENDL-Bibliothek für die Nutzung mit MOTIVE zu prozessieren und anhand von Vergleichsrechnungen eine Evaluierung vorzunehmen. Hierzu ist zunächst anzumerken, dass die TENDL-Bibliothek ausschließlich Neutronenwirkungsquerschnittsdaten enthält. Für die Benutzung in einer Abbrandrechnung sind also Zerfallsdaten, Spaltausbeuten und thermische Streudaten aus anderen Quellen zu ergänzen. Für die vorliegenden Arbeiten wurde zunächst die TENDL-2015 Bibliothek eingesetzt und um JEFF3.2 Daten ergänzt. Die Prozessierung der Multigruppdaten und der Zerfallsdaten erfolgte problemlos. Bei der Erstellung der AMPX-Bibliothek für KENO-VI traten jedoch einige Schwierigkeiten auf. Bei ^{239}Pu und einigen anderen Aktinoiden, insbesondere den Curium-Nukliden, traten Probleme bei der Verarbeitung der Streudaten auf,

die zu Fehlermeldungen und Abstürzen von KENO-VI führten. Eine diesbezügliche Rücksprache mit dem SCALE Support ergab starke Hinweise darauf, dass diese Probleme bereits in den TENDL-Dateien zu suchen und nicht auf Fehler bei der Prozessierung mit dem AMPX-Paket zurückzuführen sind. Als Workaround für dieses Problem wurden die Daten zu den auffälligen Nukliden durch Daten der ENDF/B-VII.1 Daten ersetzt. Weiterhin wurden die Nuklide ^{13}C , ^{14}C , ^{15}C aus der Bibliothek entfernt, die ebenfalls Probleme verursachten.

Mit der so modifizierten TENDL-2015 AMPX-Bibliothek konnten dann Rechnungen mit MOTIVE durchgeführt werden. Die Ergebnisse wurden mit den Ergebnissen von Rechnungen mit anderen Bibliotheken verglichen.

In Abb. 5.35 ist ein solcher Vergleich anhand der Nachbestrahlungsanalysenprobe SF98-5 aus Fukushima Daini-2 gezeigt. In der Graphik ist zusätzlich auch der Vergleich der Ergebnisse verschiedener anderer Bibliotheken gezeigt. Dargestellt ist jeweils die relative Abweichung zwischen Rechnung (C) und Experiment (E) in der Form $C/E-1$ in Prozent. Die Ergebnisse zeigen allgemein, dass einerseits für viele wichtige Nuklide weitgehende Übereinstimmung zwischen den Evaluationen besteht, andererseits aber auch, dass bei einigen schwierig zu berechnenden Nukliden durchaus eine größere Diskrepanz zwischen den Ergebnissen verschiedener Evaluationen bestehen kann. Die Möglichkeit auf einfache Weise zwischen verschiedenen Bibliotheken zu Wechseln stellt somit ein nützliches Merkmal dar, um Bibliothekseffekte bei der Abbrandberechnung näher zu untersuchen. Dies gilt insbesondere auch in Hinblick darauf, dass es international verstärkt Bemühungen gibt, die Nachrechnung von Nachbestrahlungsanalyseproben zur Evaluation von Datenbibliotheken einzusetzen (siehe z. B. /GAU 17/).

Bezüglich der TENDL-2015 Bibliothek fallen Unterschiede zu den anderen Bibliotheken insbesondere für einige Americium-Nuklide und für Samarium und Europium ins Auge. Auch bei den Curium-Nuklide sind Abweichungen von den anderen Bibliotheken zu erkennen. Insgesamt liegen die Abweichungen von den experimentellen Werten im Rahmen der Ergebnisse der anderen Evaluationen. Bei der Interpretation der Daten ist zu beachten, dass zwar die Flussberechnung mit den AMPX-Daten erfolgte, bei denen für einige Nuklide die TENDL-Daten durch JEFF3.2-Daten ersetzt wurden, die Reaktionsraten jedoch ansonsten aus der separat erstellten Multigruppenbibliothek erzeugt werden, die wiederum ausschließlich auf TENDL-Daten beruht.

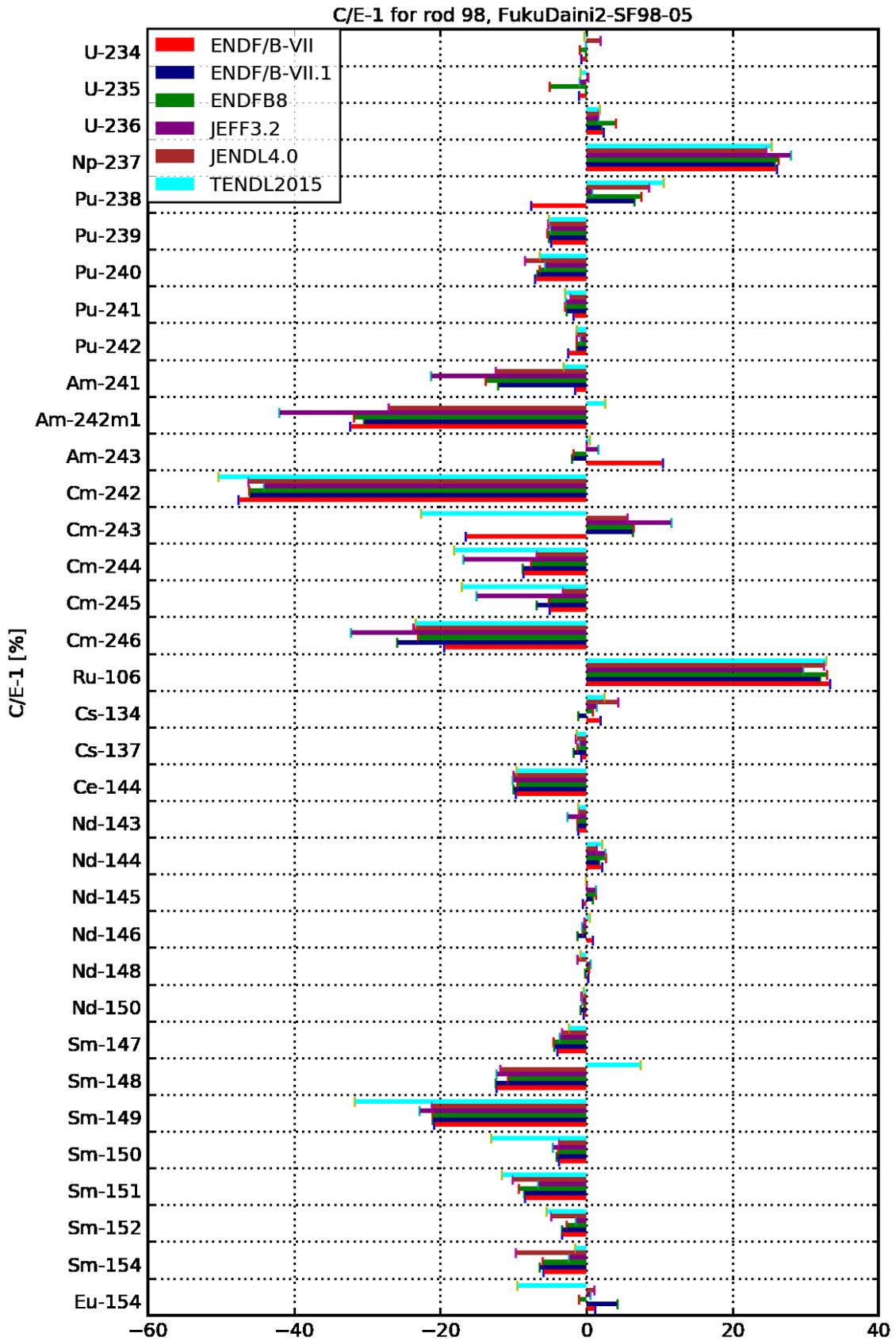


Abb. 5.35 Vergleich der Nachrechnung der Probe SF98-5 aus Fukushima Daini-2 mit MOTIVE unter Verwendung unterschiedlicher Bibliotheken

Insgesamt ergibt sich für die TENDL-2015 das folgende Bild: Die Erzeugung der notwendigen Bibliotheksdaten für MOTIVE ist mit gewissen Problemen hinsichtlich der Bereitstellung der Daten für die Flussberechnung behaftet. Hier konnte letztlich kein vollständig konsistenter Datensatz bereitgestellt werden in der Hinsicht, dass einzelne Daten anderer Evaluationen hinzugefügt werden mussten. Die Testrechnungen zeigten für den untersuchten Nuklidsatz keine offensichtlichen Vor- oder Nachteile. Im Sinne der oben beschriebenen Vergleichsmöglichkeiten erweitert die Bibliothek allerdings das Spektrum der verfügbaren Daten und ist insofern von einiger Nützlichkeit. Ihr volles Potential dürfte die Bibliothek allerdings erst bei Aktivierungsrechnungen aufzeigen, wo die große Anzahl an vorhandenen Datensätzen und Reaktionskanälen von Vorteil sein sollte. Die Untersuchung dieses Bereichs liegt allerdings außerhalb des Umfangs der vorliegenden Untersuchung.

Ende 2017 wurde die aktualisierte Version TENDL-2017 veröffentlicht. Daher wurde auch versucht, aus dieser Bibliothek einen aktualisierten Datensatz für MOTIVE zu erzeugen. Im Unterschied zu TENDL-2015 enthält die Bibliothek für wichtige Nuklide Datensätze, die von ENDF/B-VIII übernommen wurden. Dies sind im Einzelnen die Nuklide $^1,2,3\text{H}$, $^3,4\text{He}$, $^6,7\text{Li}$, $^{10,11}\text{B}$, ^9Be , $^{12,13}\text{C}$, $^{14,15}\text{N}$, $^{16,17}\text{O}$, ^{19}F , ^{232}Th , $^{233,235,238}\text{U}$ und ^{239}Pu . Die Erzeugung der AMPX-Bibliothek verlief zunächst scheinbar problemlos. Allerdings wiesen KENO-VI-Rechnungen mit dieser Bibliothek deutlich zu hohe Multiplikationsfaktoren auf. Auch werden in der Ausgabedatei von KENO-VI Fehlermeldungen ausgegeben, die auf Rundungsfehler bei der Berechnung von Streu-Wirkungsquerschnitten hindeuten. Der Fehler konnte bis Abschluss des Vorhabens nicht behoben werden, so dass keine Rechenergebnisse für die TENDL-2017 Bibliothek vorliegen.

6 Zusammenfassung

Der vorliegende Bericht gibt die Ergebnisse des BMWi-Forschungsvorhabens RS1542 wieder. Ziel der Arbeiten war die Erweiterung und Verbesserung der Funktionalitäten des Abbrandprogramms MOTIVE sowie der zugrundeliegenden nuklearen Datenbasis. Weiterhin war der Aufbau einer möglichst umfangreichen Datenbasis an Nachrechnungen von Nachbestrahlungsanalyseproben geplant, mit dem Ziel der Validierung von MOTIVE. Darüber hinaus waren eine Reihe von Arbeiten im Bereich der Unsicherheitsanalyse von Abbrandberechnungen geplant.

Innerhalb von MOTIVE konnte durch die Implementierung von verschiedenen Predictor-Corrector-Verfahren die Kopplung zwischen Neutronenflussberechnung und Nuklidinventarberechnung verbessert werden, was es ermöglicht durch größere Zeitschritte bei der Rechnung eine Verkürzung der Rechenzeit bei gleichzeitiger Beibehaltung der Rechengenauigkeit zu erreichen. Mehrere umgesetzte Maßnahmen dienen der Diversifizierung der eingesetzten Methoden. Durch die zusätzliche Anbindung des Monte Carlo Programms OpenMC wird eine Auswahl zwischen zwei unabhängigen Verfahren zur Neutronenflussberechnung ermöglicht. Die Erweiterung und Verbesserung der Werkzeuge zur Prozessierung der für MOTIVE benötigten nuklearen Datenbibliotheken ermöglicht es nun, konsistente Datensätze zu verschiedenen aktuellen Wirkungsquerschnittsdatenevaluationen bereit zu stellen und so den Einfluss der verschiedenen Bibliotheken auf das Rechenergebnis quantitativ zu untersuchen. Die Integration von eigenständigen Berechnungsmodulen für die Brennstofftemperatur und die Moderator-dichte verbessert die Anwendbarkeit des Programms für verschieden Fragestellungen und bietet zusätzlich das Potential die zukünftige Ergebnisgenauigkeit von MOTIVE weiter zu verbessern.

Durch die Nachrechnung einer großen Anzahl von Nachbestrahlungsanalyseproben wurde die Grundlage für die Validierung von MOTIVE hinsichtlich des berechneten Nuklidinventars geschaffen. Die so erstellte Datenbasis an Eingabe- und Ergebnisdatensätzen ist bereits umfangreicher als für das Vorgängersystem KENOEST. Die Ergebnisdaten wurden hinsichtlich der Abweichungen zwischen Rechnung und Experiment ausgewertet und statistisch analysiert. Zusätzlich wurden Untersuchungen zu möglichen Abbrand-abhängigen Trends in den Differenzen zwischen Rechnung und Experiment durchgeführt.

Im Bereich der Unsicherheitsanalyse wurden Untersuchungen zum Einfluss der Korrelationen in den Unsicherheiten in den Spaltproduktausbeuten auf die Unsicherheiten im Multiplikationsfaktor und dem Nuklidinventar durchgeführt. Hierzu erfolgte ein Vergleich zwischen dem GRS-eigenen Programm XSUSA und der SAMPLER-Sequenz aus dem SCALE-Paket. Es konnte gezeigt werden, dass die Vernachlässigung dieser Korrelationen zu einer deutlichen Überschätzung der Ergebnisunsicherheiten führt. Dahingegen ist die komplette Vernachlässigung der Unsicherheiten für die Spaltausbeuten im Allgemeinen eine gute Näherung und führt insbesondere für den Multiplikationsfaktor nur zu einem sehr geringen Fehler.

Im Rahmen der UAM-SFR Plattform zur Unsicherheitsanalyse von Systemen mit schnellem Neutronenspektrum wurden systematische Unsicherheitsanalysen im Bereich der Abbrandberechnung für je ein Brennelement mit oxydischem bzw. metallischem Brennstoff durchgeführt und ausgewertet. Dabei zeigte sich, dass die sich ergebende Unsicherheit des Multiplikationsfaktors deutlich größer als bei LWR-Systemen ist, während die Unsicherheiten im Nuklidinventar im Wesentlichen im Bereich der für LWR-Systeme beobachteten Unsicherheiten liegen. Die Aussagekraft der Ergebnisse ist diesbezüglich insofern noch eingeschränkt, dass die Analysen mit der mit SCALE 6.1 mitgelieferten auf LWR-Systeme optimierten 238-Gruppen Bibliothek durchgeführt werden mussten, da die Abbrandsequenz von XSUSA aktuell auf SCALE 6.1 beschränkt ist. Eine Bibliothek mit auf schnelle Systeme optimierter Multigruppenstruktur liegt nur für SCALE 6.2 vor. Aufgrund einiger Umstellungen in der Struktur der Abbrandsequenzen in SCALE erfordert eine Übertragung der XSUSA-Verfahren auf SCALE 6.2 einen größeren Aufwand, der den Rahmen des vorliegenden Vorhabens übersteigt.

Im Rahmen des IAEA "Coordinated Research Project (CRP) on High Temperature Gas-Cooled Reactor (HTGR) Uncertainty Analysis in Modeling (UAM)" wurden für verschiedene Anordnungen Kritikalitätsrechnungen und zugehörige Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen durchgeführt. Die erzielten Ergebnisse wurden zum Benchmark eingereicht und stimmen im Wesentlichen mit den Ergebnissen der anderen Benchmark-Teilnehmer überein. Insofern liefert die Teilnahme am Benchmark einen Beitrag zur Qualifikation der GRS-eigenen Methoden zur Unsicherheitsanalyse für HTR-Systeme. Die beobachteten Unsicherheiten liegen von der Größe her im Bereich der für LWR-Systeme bekannten Unsicherheiten. Weiterhin konnte an geeigneten Beispielen

len auch die Konsistenz zwischen der stochastischen und der störungstheoretischen Methode zur Unsicherheitsberechnung gezeigt werden.

Literaturverzeichnis

- /AUR 15/ Aures, A., Behler, M., Bostelmann, F., Gallner, L., Hannstein, V., Kilger, R., Sommer, F., Stuke, M., Velkov, K., Zilly, M., Zwermann, W.: Weiterentwicklung und Qualifizierung der GRS-Abbrandverfahren unter Einbeziehung schneller Spektren, Abschlussbericht. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-386, 181 S., ISBN 978-3-944161-67-9: Garching b. München, 2015.
- /AUR 18/ Aures, A., Bousquet, J., Küntzel, M., Zilly, M.: Weiterentwicklung und Validierung des GRS-Kernsimulators für DWR, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-499, ISBN 978-3-946607-84-7, 2018.
- /BEH 14/ Behler, M., Hannstein, V., Kilger, R., Moser, F.-E., Pfeiffer, A., Stuke, M.: Quantifizierung der Rechengenauigkeit von Codesystemen zum Abbrandkredit durch Experimentnachrechnungen. GRS-336, 196 S., Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Köln, 2014.
- /BEH 14b/ M. Behler, M. Bock, F. Rowold, M. Stuke, "SUnCISTT – A Generic Code Interface for Uncertainty and Sensitivity Analysis", Probabilistic Safety Assessment and Management PSAM 12, Juni 2014, Honolulu, Hawaii.
- /BEH 18/ M. Behler, V. Hannstein, F. Sommer, „Nachrechnung radiochemischer Analyseproben mit dem Abbrandprogramm MOTIVE“, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-529, ISBN 978-3-947685-14-1, 2018.
- /BOS 15/ F. Bostelmann, W. Zwermann, B. Krzykacz-Hausmann, L. Gallner, A. Aures, K. Velkov, "Sampling-based Nuclear Data Uncertainty Analysis in Criticality and Depletion Calculations", Proceedings of the ANS MC2015, Nashville, TN, USA, April 19-23, 2015.

- /BOS 16/ F. Bostelmann, H. R. Hammer, J. Ortensi, G. Strydom, K. Velkov, W. Zwermann, "Criticality calculations of the Very High Temperature Reactor Critical Assembly benchmark with Serpent and SCALE/KENO-VI", *Annals of Nuclear Energy*, Vol. 90, pp. 343–352. URL <http://dx.doi.org/10.1016/j.anucene.2015.12.008> (2016).
- /BOS 17/ F. Bostelmann, G. Strydom, "Nuclear data uncertainty and sensitivity analysis of the VHTRC benchmark using SCALE", *Annals of Nuclear Energy*, Vol. 110, pp. 317-329, 2017.
- /BOS 18/ F. Bostelmann, W. Zwermann, K. Velkov, I. Trivedi, K. Ivanov, A. Pautz, Benchmark for Uncertainty Analysis in Modelling (UAM) for Design, Operation and Safety Analysis of SFRs – Definition of Sub-Exercises, OECD/NEA 2018.
- /DIE 13/ C. J. Diez, A. Stankovskiy, E. Malambu, G. Zerovnik, P. Schillebeeckx, G. Van den Eynde, J. Heyse, O. Cabellos, "Review of the $^{nat}\text{C}(n,\gamma)$ cross section and criticality calculations of the graphite moderated reactor BR1", *Annals of Nuclear Energy*, 60, pp. 210–217, 2013.
- /GAU 17/ Gauld, I. C., Williams, M. L., Michel-Sendis, F., MARTINEZ, J. S.: Integral Nuclear Data Validation Using Experimental Spent Nuclear Fuel Compositions. In: American Nuclear Society (ANS): International Conference on Mathematics & Computational Methods Applied to Nuclear Science & Engineering. M&C 2017, Jeju, Korea, April 16-20, 2017.
- /GEE 14/ Geelhood, K., Luscher, W. G.: FRAPCON-3.5: A Computer Code for the Calculation of Steady-State, Thermal-Mechanical Behavior of Oxide Fuel Rods for High Burnup. Hrsg.: U.S. NRC, Pacific Northwest National Laboratory, NUREG/CR-7022, 161 S., October 2014.
- /GOT 11/ M. Goto, et al., "Impact of revised thermal neutron capture cross section of carbon stored in JENDL-4.0 on HTTR criticality calculation", *Journal of Nuclear Science and Technology*, Vol. 48, No. 7, pp. 965-969, 2011.
- /HDF 11/ HDF Group: HDF5 Reference Manual. Version Release 1.8.8, The HDF Group, 2011.

- /ILA 12/ Ilas, G., Gauld, I. C., Radulescu, G.: Validation of new depletion capabilities and ENDF/B-VII data libraries in SCALE. *Annals of Nuclear Energy*, Bd. 46, S. 43–55, DOI 10.1016/j.anucene.2012.03.012, 2012.
- /ISO 11a/ Isotalo, A. E., Aarnio, P. A.: Substep methods for burnup calculations with Bateman solutions. *Annals of Nuclear Energy*, Bd. 38, Nr. 11, S. 2509 - 2514, DOI 10.1016/j.anucene.2011.07.012, 2011.
- /ISO 11b/ Isotalo, A. E., Aarnio, P. A.: Higher order methods for burnup calculations with Bateman solutions. *Annals of Nuclear Energy*, Bd. 38, Nr. 9, S. 1987 – 1995, DOI 10.1016/j.anucene.2011.04.022, 2011.
- /ISO 15a/ Isotalo, A., Sahlberg, V.: Comparison of Neutronics-Depletion Coupling Schemes for Burnup Calculations. *Nuclear Science and Engineering*, Bd. 179, Nr. 4, DOI 10.13182/NSE14-35, 2015.
- /ISO 15b/ Isotalo, A.: Comparison of Neutronics-Depletion Coupling Schemes for Burnup Calculations—Continued Study. *Nuclear Science and Engineering*, Bd. 180, Nr. 3, DOI 10.13182/NSE14-92, 2015.
- /IVA 13/ K. Ivanov, et al., “Benchmark for Uncertainty Analysis in Modeling (UAM) For Design, Operation and Safety Analysis of LWRs. Volume I: Specification and Support Data for the Neutronics Cases (Phase I)”, OECD Nuclear Energy Agency, NEA/NSC/DOC(2013)7, May 2013.
- /KON 12/ Koning, A. J., Rochman, D.: Modern Nuclear Data Evaluation with the TALYS Code System. *Nuclear Data Sheets*, Bd. 113, Nr. 12, S. 2841 – 2934, DOI 10.1016/j.nds.2012.11.002, 2012.
- /KUD 10/ Kudryashov, N. A., Khlunov, A. V., Chmykhov, M. A.: Thermal regimes of high burn-up nuclear fuel rod. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, Bd. 15, Nr. 5, S. 1240–1252, DOI 10.1016/j.cnsns.2009.05.063, 2010.
- /LEP 07/ J. Leppänen, “Development of a New Monte Carlo Reactor Physics Code”, PhD Thesis, Helsinki University of Technology, 2007.

- /LEP 15/ Leppänen, J., Pusa, M., Viitanen, T., Valtavirta, V., Kaltiaisenaho, T.: The Serpent Monte Carlo code, Status, development and applications in 2013. *Annals of Nuclear Energy*, Bd. 82, S. 142–150, DOI 10.1016/j.anucene.2014.08.024, 2015.
- /MAC 17/ Macfarlane, R., Muir, D. W., Boicourt, R. M., Kahler, I. C., Conlin, J. L.: The NJOY Nuclear Data Processing System, Version 2012. 812 S., DOI 10.2172/1338791, 2017.
- /MIC 17/ Michel-Sendis, F., Gauld, I. C., MARTINEZ, J. S., Alejano, C., Bossant, M., Boulanger, D., Cabellos, O., Chrapciak, V., Conde, J., Fast, I., Gren, M., Govers, K., Gysemans, M., Hannstein, V., et al.: SFCOMPO-2.0, An OECD NEA database of spent nuclear fuel isotopic assays, reactor design specifications, and operating data. *Annals of Nuclear Energy*, Bd. 110, S. 779 – 788, DOI 10.1016/j.anucene.2017.07.022, 2017.
- /NEA 13/ NEA, “International Handbook of Evaluated Reactor Physics Benchmark Experiments”, NEA/NSC/DOC, NEA No. 7140, 2013.
- /OAK 12/ Oak Ridge National Laboratory (ORNL): SCALE: A Comprehensive Modeling and Simulation Suite for Nuclear Safety Analysis and Design, ORNL/TM-2005/39. Version Version 6.1.2: Oak Ridge National Laboratory, Tennessee, 2012.
- /ORT 13/ J. Ortensi, et al., “Prismatic Coupled Neutronics/Thermal Fluids Transient Benchmark of the MHTGR-350 MW Core Design: Benchmark Definition”, NEA/NSC/DOC, 2013.
- /PER 16/ C. M. Perfetti, B. T. Rearden, W. R. Martin, “SCALE Continuous-Energy Eigenvalue Sensitivity Coefficient Calculations”, *Nuclear Science and Engineering*, 182/3, pp. 332–353, 2016.
- /REA 17/ Rearden, B. T., Jessee, M. A. (Hrsg.): SCALE Code System. Oak Ridge National Laboratory (ORNL), ORNL/TM-2005/39, Version 6.2.2, 2747 S.: Oak Ridge, Tennessee, Februar 2017. Available from Radiation Safety Information Computational Center as CCC-834.

- /REI 13/ F. Reitsma, HTGR Reactor Physics, Thermal-hydraulics and Depletion Uncertainty Analysis - PBR 250MW Benchmark Definition, Draft Revision 2, IAEA 2013.
- /REI 14/ F. Reitsma, et al., "The IAEA Coordinated Research Program on HTGR Uncertainty Analysis: Phase I Status and Initial Results", Proceedings of HTR 2014, Weihai, China, 2014.
- /ROM 13/ Romano, P. K., Forget, B.: The OpenMC Monte Carlo particle transport code. *Annals of Nuclear Energy*, Bd. 51, S. 274 – 281, DOI 10.1016/j.anucene.2012.06.040, 2013.
- /SCA 16/ B.T. Rearden and M.A. Jessee, Eds., SCALE Code System, ORNL/TM-2005/39, Version 6.2.1, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee (2016). Available from Radiation Safety Information Computational Center as CCC-834.
- /STR 15a/ G. Strydom, et al. „Results for Phase I of the IAEA Coordinated Research Program on HTGR Uncertainties”, INL/EXT-14-32944, Revision 2, August 2015.
- /STR 15b/ G. Strydom, F. Bostelmann „IAEA Coordinated Research Project on HTGR Physics, Thermal-Hydraulics, and Depletion Uncertainty Analysis – Prismatic HTGR Benchmark Definition: Phase I”, INL/EXT-14-34868, Revision 1, September 2015.
- /STR 17/ G. Strydom, F. Bostelmann, “IAEA Coordinated Research Project on HTGR Uncertainties in Modeling: Comparison of Phase I Nominal, Uncertainty and Sensitivity Results”, INL/LTD-16-40699, Rev. 1, December 2017.

- /WAG 08/ Wagner, W., Kretzschmar, H.-J.: International Steam Tables, Properties of Water and Steam Based on the Industrial Formulation IAPWS-IF97. ISBN 9783540214199, DOI 10.1007/978-3-540-74234-0, Springer-Verlag Berlin Heidelberg: Berlin, Heidelberg, 2008.
- /WIA 16/ Wiarda, D., Dunn, M. E., Greene, N. M., Williams, M. L., Celik, C., Petrie, L. M.: AMPX-6: A Modular Code System for Processing ENDF/B. Oak Ridge National Laboratory (ORNL), ORNL/TM-2016/43, 256 S., April 2016.
- /WIL 13/ M. L. Williams, G. Ilas, M. A. Jessee, B. T. Rearden, D. Wiarda, W. Zwermann, L. Gallner, M. Klein, B. Krzykacz-Hausmann, and A. Pautz, "A Statistical Sampling Method for Uncertainty Analysis with SCALE and XSUSA," Nuclear Technology, 183, pp. 515 – 526, 2013.
- /ZWE 10/ 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 18/ W. Zwermann, A. Aures, F. Bostelmann, J. Bousquet, R. Kilger, B. Krzykacz-Hausmann, I. Pasichnyk, Y. Périn, F. Sommer, M. Stuke, K. Velkov, M. Zilly, Weiterentwicklung moderner Verfahren zu Neutronentransport und Unsicherheitsanalysen für Kernberechnungen - Abschlussbericht, GRS-498, ISBN 978-3-946607-83-0 (2018).

Abbildungsverzeichnis

Abb. 3.1	Darstellung der über alle nachgerechneten Proben gemittelten Abweichungen zwischen Rechnung (C) und Experiment (E) als C/E-1 in Prozent.	9
Abb. 3.2	GRS Rechenbenchmark, DWR Brennelement. Verlauf des Multiplikationsfaktors über dem Abbrand	12
Abb. 3.3	GRS Rechenbenchmark, DWR Brennelement. Abweichungen der Multiplikationsfaktoren vom Mittelwert.....	12
Abb. 3.4	GRS Rechenbenchmark, DWR Brennelement. Nuklidinventare Uran und Plutonium.....	13
Abb. 3.5	GRS Rechenbenchmark, DWR Brennelement. Nuklidinventare höhere Aktinoide.....	13
Abb. 3.6	GRS Rechenbenchmark, DWR Brennelement. Nuklidinventare Spaltprodukte	14
Abb. 3.7	GRS Rechenbenchmark, DWR Brennelement. Nuklidinventare Spaltprodukte (Fortsetzung)	14
Abb. 3.8	GRS Rechenbenchmark, SWR Brennelement. Verlauf des Multiplikationsfaktors über dem Abbrand	16
Abb. 3.9	GRS Rechenbenchmark, SWR Brennelement. Abweichungen der Multiplikationsfaktoren vom Mittelwert.....	16
Abb. 3.10	GRS Rechenbenchmark, SWR Brennelement. Nuklidinventare Uran und Plutonium.....	18
Abb. 3.11	GRS Rechenbenchmark, SWR Brennelement. Nuklidinventare höhere Aktinoide.....	18
Abb. 3.12	GRS Rechenbenchmark, SWR Brennelement. Nuklidinventare Spaltprodukte	19
Abb. 3.13	GRS Rechenbenchmark, SWR Brennelement. Nuklidinventare Spaltprodukte (Fortsetzung)	19
Abb. 4.1	Schematische Darstellung des Programmablaufs von MOTIVE.....	21
Abb. 4.2	Graphische Darstellung des Standard-Predictor-Corrector-Verfahrens.....	23
Abb. 4.3	Graphische Darstellung des Zwischenschritt-Verfahrens.....	24
Abb. 4.4	Graphische Darstellung der linearen Extrapolationsmethode.....	26

Abb. 4.5	Verlauf des Multiplikationsfaktors über die Bestrahlungszeit für das SWR Brennelement aus dem GRS Rechenbenchmark und die verschiedenen Kopplungsalgorithmen	27
Abb. 4.6	Reaktivitätsdifferenz der verschiedenen Berechnungsmethoden im Vergleich zur Referenzrechnung.....	27
Abb. 4.7	Vergleich des k_{eff} -Verlaufs über den Abbrand für MOTIVE-Rechnungen mit KENO und OpenMC.....	29
Abb. 4.8	Differenz der Nuklidinventare für MOTIVE-Rechnungen mit den Programmen KENO und OpenMC	30
Abb. 4.9	Phasendiagramm für Wasser gemäß dem implementierten Modell	31
Abb. 4.10	Radialer Temperaturverlauf einer Beispiel-Stabzelle berechnet mit dem Modul zur Brennstofftemperaturberechnung	32
Abb. 4.11	Darstellung eines Brennelementausschnitts mit Steuerstabführungsrohr vor und nach Ausfahren des Steuerstabs	34
Abb. 4.12	Zeitlicher Verlauf der Nachzerfallsleistung für ein DWR-Brennelement mit 40 GWd/tSM Abbrand	42
Abb. 5.1	Verlauf des Multiplikationsfaktors k_{inf} über dem Abbrand und zugehörige Unsicherheiten	44
Abb. 5.2	Unsicherheiten im Nuklidinventar berechnet mit XSUSA und SAMPLER	44
Abb. 5.3	Aufbau des VHTRC Experiments (aus /NEA 13/).....	47
Abb. 5.4	Querschnitt einer Brennstabzelle, in der die Brennstoffpartikel zufällig in der Graphit-matrix verteilt sind (Serpent Modell)	50
Abb. 5.5	Querschnitt einer Brennstabzelle, in der die Brennstoffpartikel in einem regelmäßigen Gitter angeordnet sind (Serpent und KENO-VI CE Modell).....	50
Abb. 5.6	Vergleich der SCALE/KENO-VI CE und Serpent CE Ergebnisse der VHTRC Multiplikationsfaktoren	52
Abb. 5.7	Vergleich der SCALE/KENO-VI MG und Serpent CE Ergebnisse der VHTRC Multiplikationsfaktoren	53
Abb. 5.8	Vergleich der mit XSUSA und SAMPLER ermittelten Unsicherheiten der VHTRC Multiplikationsfaktoren	53
Abb. 5.9	Vergleich der mit CE TSUNAMI ermittelten Unsicherheiten der VHTRC Multiplikationsfaktoren	54

Abb. 5.10	Hexagonale MHTGR Brennstabzelle	57
Abb. 5.11	Dreieckige MHTGR Brennstabzelle /STR 15b/	57
Abb. 5.12	MHTGR Brennelement /STR 15b/	58
Abb. 5.13	MHTGR Super-Zelle /STR 15b/	58
Abb. 5.14	Unsicherheiten für Exercise I-1a (Hot Full Power) basierend auf ENDF/B-VII.0 Daten	61
Abb. 5.15	Unsicherheiten für Exercise I-1b (Hot Full Power) basierend auf ENDF/B-VII.0 Daten	61
Abb. 5.16	Unsicherheiten für Exercise I-2a basierend auf ENDF/B-VII.0 Daten	62
Abb. 5.17	Unsicherheiten für Exercise I-2b basierend auf ENDF/B-VII.0 Daten	62
Abb. 5.18	Unsicherheiten für Exercise I-2c basierend auf ENDF/B-VII.0 Daten	63
Abb. 5.19	Unsicherheiten für Exercise I-2a ermittelt mit SAMPLER – Vergleich zwischen ENDF/B-VII.0 und ENDF/B-VII.1 Ergebnissen.....	63
Abb. 5.20	Unsicherheiten für Exercise I-2b ermittelt mit SAMPLER – Vergleich zwischen ENDF/B-VII.0 und ENDF/B-VII.1 Ergebnissen.....	64
Abb. 5.21	Neutronenfluss-Spektrum für den heißen Zustand aus Exercise I-1b (ohne Kühlkanäle) und Exercise I-1d (mit Kühlkanälen).....	65
Abb. 5.22	Relative Unsicherheiten (1σ) im Multiplikationsfaktor und den Ein- Gruppen-Wirkungsquerschnitten für die prismatische HTR- Anordnung I-1d (kalt) aus XSUSA/SCALE	67
Abb. 5.23	Relative Unsicherheiten (1σ) im Multiplikationsfaktor für die prismatische HTR-Anordnung I-1c.....	68
Abb. 5.24	Hauptbeiträge zu den Unsicherheiten im Multiplikationsfaktor für die prismatische HTR-Anordnung I-1c.....	69
Abb. 5.25	HTR-Brennstoff vom Kugelhaufen-Typ (aus /REI 13/)	69
Abb. 5.26	HTR-Brennstoff vom Kugelhaufen-Typ mit zwei unterschiedlichen Isotopenzusammensetzungen für die Kugeln in der Mitte und an den Ecken	70
Abb. 5.27	Multiplikationsfaktoren und relative Unsicherheiten (1σ) für die Kugelhaufen-HTR-Anordnung I-1a (kalt) aus XSUSA/SCALE.....	71
Abb. 5.28	MOX3600-Brennelement mit oxydischem Brennstoff.....	72
Abb. 5.29	MAT1000-Brennelement mit metallischem Brennstoff	73

Abb. 5.30	Nukliddichten im Verlauf des Abbrands für das MOX3600-Brennelement	74
Abb. 5.31	Multiplikationsfaktoren (durchgezogene Linien) der SFR-Brennelemente und relative Unsicherheiten (gestrichelte Linien) im Verlauf eines Abbrandzyklus	75
Abb. 5.32	Relative Unsicherheiten des Multiplikationsfaktors und der Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte des MOX3600-Brennelements.....	75
Abb. 5.33	Relative Unsicherheiten des Multiplikationsfaktors und der Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte des MET1000-Brennelements	76
Abb. 5.34	Relative Unsicherheiten der Nuklidinventare der SFR-Brennelemente am Zyklusende	76
Abb. 5.35	Vergleich der Nachrechnung der Probe SF98-5 aus Fukushima Daini-2 mit MOTIVE unter Verwendung unterschiedlicher Bibliotheken	79

Tabellenverzeichnis

Tab. 3.1	Liste der im Rahmen des Berichts untersuchten Nachbestrahlungsanalyseproben.....	8
Tab. 5.1	Übersicht über die verwendeten Programme und Daten für die Kritikalitätsrechnungen.....	48
Tab. 5.2	Überblick über die verwendeten Programme und Daten für die Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen (U/S).....	49
Tab. 5.3	Ergebnisse der Unsicherheitsanalyse der VHTRC-Multiplikationsfaktoren.	55
Tab. 5.4	Erläuterungen zu den Parametern in den folgenden Abbildungen	60
Tab. 5.5	Multiplikationsfaktoren und Ein-Gruppen-Wirkungsquerschnitte für die prismatischen HTR-Anordnungen I-1c und I-1d aus NEWT	66
Tab. 5.6	Multiplikationsfaktoren und relative Unsicherheiten (1σ) für die Kugelhaufen-HTR-Anordnungen aus XSUSA/SCALE.	72

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

Schwertnergasse 1
50667 Köln
Telefon +49 221 2068-0
Telefax +49 221 2068-888

Boltzmannstraße 14
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