

**Temperaturabhängigkeit  
des Neutronen-  
multiplikationsfaktors  $k_{\text{eff}}$   
für DWR-Brennelemente**

**GRS-Beitrag zum OECD-NEA  
Rechenbenchmark und  
weiterführende Rechnungen**

## Temperaturabhängigkeit des Neutronen- multiplikationsfaktors $k_{\text{eff}}$ für DWR-Brennelemente

GRS-Beitrag zum OECD-NEA  
Rechenbenchmark und  
weiterführende Rechnungen

Matthias Behler  
Volker Hannstein  
Fabian Sommer

Juli 2019

### **Anmerkung:**

Das diesem Bericht zugrunde liegende FE-Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und nukleare Sicherheit (BMU) unter dem Kennzeichen 4716E03350 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.

**Deskriptoren**

Druckwasserreaktoren, ENDF/B-VII.1, ENDF/B-VIII.0, Kritikalität, MCNP, nukleare Daten, OECD-NEA, OPENMC, Rechenbenchmark, SCALE, Temperatureffekt

## Kurzfassung

Seit kurzem sind nukleare Wirkungsquerschnitte zur Neutronenstreuung („Streudaten“) an in Eis gebundenem Wasserstoff und Sauerstoff frei zugänglich verfügbar, sodass nun, auch ohne diese Streudaten selbst erzeugen zu müssen, der Neutronenmultiplikationsfaktor für moderierte Spaltmaterialanordnungen bei Temperaturen unter 273 K adäquat berechnet werden kann. Um diesen Temperaturbereich näher zu untersuchen, wurde durch eine dedizierte Sub Group der Working Party on Nuclear Criticality Safety (WPNCS) der OECD Nuclear Energy Agency (NEA) ein Code-zu-Code-Vergleich zur Temperaturabhängigkeit des Neutronenmultiplikationsfaktors von DWR-Brennelementen initiiert, an dem auch die GRS teilnahm.

Zusätzlich zu den Analysen zum Benchmark wurden weitere Untersuchungen zur Temperaturabhängigkeit des Neutronenmultiplikationsfaktors vorgenommen, die über die eigentlichen Benchmark-Spezifikationen hinausgehen. Hierbei wurden die separaten Einflüsse der Temperaturabhängigkeiten der Moderatordichte, der Wirkungsquerschnitte und der nuklearen Streudaten auf den Neutronenmultiplikationsfaktor analysiert, die im Benchmark nur in ihrer Summe betrachtet werden.

Der vorliegende Bericht dokumentiert zum einen die Beiträge der GRS zu diesem Benchmark und diskutiert die seitens der GRS erzielten Ergebnisse. Zum anderen werden die weiterführenden Untersuchungen sowie die dabei ermittelten Resultate diskutiert.

## **Abstract**

Recently, nuclear neutron scattering cross section data for hydrogen and oxygen bound in ice have become freely available. Hence, the neutron multiplication factor of moderated systems containing fissile materials can be calculated adequately at temperatures below 273 K without the need to generate the nuclear scattering data oneself. In this context, a dedicated sub group of the Working Party on Nuclear Criticality Safety of the OECD Nuclear Energy Agency (NEA) initiated a code-to-code comparison on the temperature dependence of the neutron multiplication factor of PWR fuel assemblies, in which GRS participated.

In addition to the benchmark, further studies on the temperature dependence of the neutron multiplication factor have been performed, which go beyond the actual benchmark specifications. Here, the separate influences of the temperature dependencies of the moderator density, the cross sections and the nuclear scattering data on the neutron multiplication factor were analyzed, which are only considered in their sum in the benchmark.

This report describes the contributions of GRS to this benchmark and discusses the results achieved by GRS. Furthermore, the additional investigations as well as the obtained results are discussed.

# Inhaltsverzeichnis

|          |  |           |
|----------|--|-----------|
|          | <b>Kurzfassung</b> .....   | <b>I</b>  |
| <b>1</b> | <b>Einleitung</b> .....  | <b>5</b>  |
| <b>2</b> | <b>Benchmark-Spezifikationen</b> .....   | <b>7</b>  |
| 2.1      | Geometrische Spezifikation .....   | 7         |
| 2.2      | Brennstoffzusammensetzung.....   | 9         |
| 2.3      | Moderator- und Hüllrohrzusammensetzung .....   | 11        |
| 2.4      | Materialtemperaturen.....  | 11        |
| <b>3</b> | <b>Rechenmodelle</b> .....   | <b>13</b> |
| 3.1      | SCALE mit ENDF/B-VII.1.....  | 13        |
| 3.2      | SCALE mit ENDF/B-VIII.0.....   | 14        |
| 3.3      | MCNP 6.....  | 14        |
| 3.4      | OpenMC .....   | 16        |
| <b>4</b> | <b>Resultate</b> .....   | <b>19</b> |
| 4.1      | Benchmark-Resultate .....  | 19        |
| 4.2      | Effekte der verwendeten Näherungen.....  | 29        |
| 4.2.1    | Vernachlässigung der nuklearen Sauerstoff-Streudaten .....                                 | 29        |
| 4.2.2    | Einfluss durch Verwendung der nuklearen Streudaten zur<br>nächstliegenden Temperatur ..... | 30        |
| <b>5</b> | <b>Weiterführende Untersuchungen</b> .....   | <b>33</b> |
| <b>6</b> | <b>Zusammenfassung</b> .....   | <b>41</b> |
|          | <b>Literaturverzeichnis</b> .....  | <b>43</b> |
|          | <b>Abbildungsverzeichnis</b> .....   | <b>45</b> |
|          | <b>Tabellenverzeichnis</b> .....   | <b>47</b> |



# 1 Einleitung

In Kritikalitätsanalysen sind jeweils die bezüglich des Neutronenmultiplikationsfaktors  $k_{\text{eff}}$  ungünstigsten Spaltstoffkonfigurationen, also die Konfigurationen mit dem größten  $k_{\text{eff}}$ , für den Sicherheitsnachweis zu berücksichtigen. Ein Parameter, welcher  $k_{\text{eff}}$  beeinflusst, ist die Temperatur der Konfiguration, insbesondere die Temperatur des Brennstoffs und eventuell vorhandener moderierender Materialien. Dabei erfolgt die Beeinflussung des Neutronenmultiplikationsfaktors über die Temperaturabhängigkeit der Materialdichten, der Wirkungsquerschnitte und der nuklearen Streudaten. Dementsprechend ist für den Sicherheitsnachweis die für  $k_{\text{eff}}$  ungünstigste Temperatur im zu unterstellenden Temperaturbereich zu berücksichtigen, wobei sich der zu beachtende Temperaturbereich entweder aus regulatorischen Vorgaben oder aus den normalen Betriebsbedingungen oder glaubwürdiger Unfallszenarien ergibt. So geben z. B. die IAEA-Transportvorschriften SSR-6 /IAEA 18/ die Berücksichtigung von Temperaturen zwischen  $-40\text{ °C}$  bis  $+38\text{ °C}$  vor, sofern nationale Bestimmungen oder Aufsichtsbehörden keine anderslautenden Vorgaben machen. Dementsprechend ist die Temperaturabhängigkeit des Neutronenmultiplikationsfaktors ein internationales Arbeitsfeld, in welchem gerade in jüngster Vergangenheit der Temperaturbereich unter  $0\text{ °C}$  eine gewisse Beachtung findet. Bei Temperaturen unter dem Gefrierpunkt, also bei Eis, beeinflusst die veränderte Bindung des Wasserstoffs an den Sauerstoff (Ausbildung eines 3-dimensionalen Wasserstoff-Brückenbindung-Netzwerks zu jeweils 4 Nachbarn) die Stöße der Neutronen mit den Wasserstoffatomen. Die daraus resultierenden Effekte wurden bisher nur wenig beachtet. Allerdings wurden kürzlich nukleare Streudaten für in Eis gebundenen Wasserstoff und Sauerstoff bestimmt und in Wirkungsquerschnittsbibliotheken integriert (z. B. /BRO 18/) sowie ferner erste Analysen damit durchgeführt, z. B. /WAR 19/.

In diesem Zusammenhang wurde durch eine dedizierte Sub Group der Working Party on Nuclear Criticality Safety (WPNCs) der OECD Nuclear Energy Agency (NEA) ein Code-zu-Code-Vergleich zur Temperaturabhängigkeit des Neutronenmultiplikationsfaktors von DWR-Brennelementen initiiert /GAN 18/, um das Verhalten des Neutronenmultiplikationsfaktors bei Temperaturen unter  $0\text{ °C}$  näher zu untersuchen. An diesem Benchmark nahm auch die GRS teil. Die seitens der GRS im Rahmen dieses Benchmarks errechneten Ergebnisse sind zusammen mit den Benchmark-Spezifikationen im vorliegenden Bericht zusammengefasst und diskutiert (Kap. 2 bis Kap. 4). Zusätzlich wurden über die Benchmark-Anforderungen hinaus weitere Untersuchungen durchgeführt, um die separaten Einflüsse der Temperaturabhängigkeiten der Materialdichten,

Wirkungsquerschnitte und nuklearen Streudaten auf  $k_{\text{eff}}$  zu untersuchen, welche im Benchmark nur in der Summe betrachtet werden (Kap. 5).

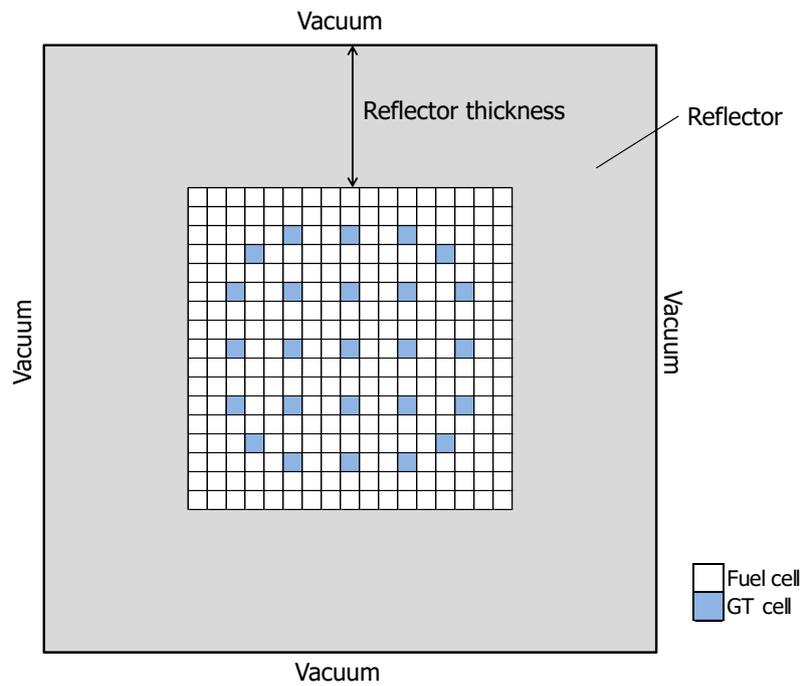
## 2 Benchmark-Spezifikationen

Für den OECD-NEA-Benchmark /GAN 18/ wurden zwei verschiedene geometrische Konfigurationen unter Verwendung eines typischen 17×17-DWR-Brennelements mit verschiedenen Abbränden bei unterschiedlichen Brennstab- und Moderatortemperaturen betrachtet. Die dabei im Einzelnen unterstellten Abmessungen, Materialzusammensetzungen und -temperaturen sind im Folgenden zusammengefasst.

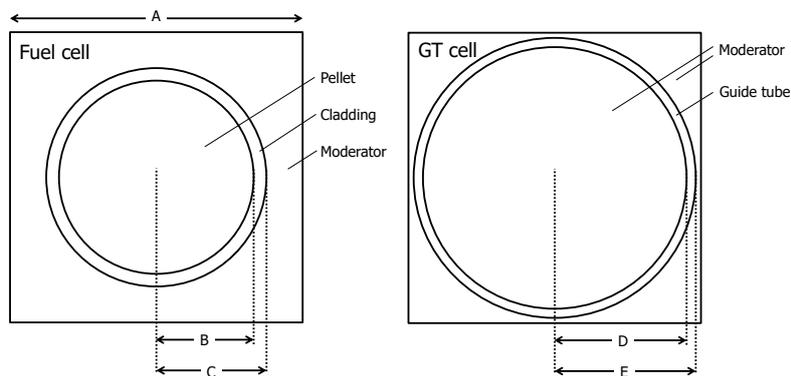
### 2.1 Geometrische Spezifikation

Im Benchmark werden zwei Brennelementkonstellationen vorgegeben: Eine dieser Konfigurationen mit der Bezeichnung „Single Unit“ besteht aus einem einzelnen Brennelement mit einem umgebenden Wasserreflektor. Eine schematische Darstellung dieser Konfiguration ist in Abb. 2.1 gegeben. Der Wasserreflektor ist in radialer Richtung mit Dicken von jeweils 100 cm vorgegeben. Die zweite Konfiguration mit der Bezeichnung „Infinite Array“ wird aus einem unendlichen Gitter identischer Brennelemente gebildet. Dazu wird dasselbe Brennelement wie in der Konfiguration „Single Unit“ genutzt, und dieses Brennelement ohne Wasserreflektor bzw. ohne zusätzlichen Wasserspalt durch reflektierende Randbedingungen zum unendlichen Gitter erweitert. In beiden Konstellationen wird in axialer Richtung ein unendlich ausgedehntes Modell ohne weitere Unterteilung unterstellt, d. h. die Modelle sind in axialer Richtung in beiden Fällen durch reflektierende Randbedingungen abgeschlossen.

Als zu untersuchendes Brennelement wird im Benchmark ein 17 × 17-DWR-Brennelement mit 25 Steuerstabführungsrohren vorgegeben, deren Anordnung in Abb. 2.1 wiedergegeben ist. Die Spezifikationen der Brennstäbe und Steuerstabführungsrohre sind in Abb. 2.2 bzw. in Tab. 2.1 zusammengestellt. Entsprechend dieser Angaben wird der Spalt zwischen Pellet und Hüllrohr für den Benchmark vernachlässigt.



**Abb. 2.1** Schematische Darstellung der Konfiguration „Single Unit“ mit Brennelement und Wasserreflektor /GAN 18/



**Abb. 2.2** Schematische Darstellung der Querschnitte der Brennstab- und Steuerstabführungsrohrreinheitszelle /GAN 18/

**Tab. 2.1** Geometrische Abmessungen der Brennstab- und Steuerstabführungsrohreinheitszelle /GAN 18/

| Parameter                   | Bemaßung in Abb. 2.2 | Wert  |
|-----------------------------|----------------------|-------|
| Brennstabmittenabstand [cm] | A                    | 1,265 |
| Brennstab:                  |                      |       |
| Pelletradius [cm]           | B                    | 0,412 |
| Hüllrohraußenradius [cm]    | C                    | 0,476 |
| Steuerstabführungsrohr:     |                      |       |
| Rohrinnenradius [cm]        | D                    | 0,570 |
| Rohr­außenradius [cm]       | E                    | 0,610 |

## 2.2 Brennstoffzusammensetzung

Die beiden oben beschriebenen geometrischen Konfigurationen werden im Benchmark mit jeweils drei verschiedenen Brennstoffzusammensetzungen untersucht: mit frischem Brennstoff sowie mit bestrahltem Brennstoff mit einem Abbrand von 30 GWd/t bzw. 45 GWd/t. Im Fall der beiden bestrahlten Brennstoffzusammensetzungen werden im Benchmark vorgegebene, typische Zusammensetzungen für die gewählten Abbrände unter Berücksichtigung der Nuklide (Aktinoide und Spaltprodukte), welche die Reaktivität des bestrahlten Brennstoffs dominieren, genutzt. Die Brennstoffzusammensetzungen sind im Benchmark nuklidweise mit Kernzahldichten vorgegeben und in Tab. 2.2 zusammengefasst.

**Tab. 2.2** Zusammensetzungen des frischen und bestrahlten Brennstoffs /GAN 18/

| Nuklid | Kernzahldichte [(barn cm) <sup>-1</sup> ] |                        |            |
|--------|---|------------------------|------------|
|        | Frischer Brennstoff                       | Bestrahlter Brennstoff |            |
|        |   | 30 GWd/t               | 45 GWd/t   |
| U-233  |   | 3,5590E-11             | 3,5120E-11 |
| U-234  |   | 6,3908E-08             | 1,0024E-07 |
| U-235  | 1,0468E-03                                | 4,4013E-04             | 2,5992E-04 |
| U-236  |   | 1,0735E-04             | 1,3269E-04 |
| U-238  | 2,1935E-02                                | 2,1492E-02             | 2,1227E-02 |
| Np-237 |   | 8,5259E-06             | 1,4257E-05 |
| Pu-238 |   | 2,2935E-06             | 6,2772E-06 |
| Pu-239 |   | 1,3530E-04             | 1,4480E-04 |
| Pu-240 |   | 3,9089E-05             | 5,6911E-05 |
| Pu-241 |   | 2,5945E-05             | 3,9099E-05 |
| Pu-242 |   | 5,9083E-06             | 1,5184E-05 |
| Am-241 |   | 6,2531E-07             | 1,1751E-06 |
| Am-243 |   | 8,4105E-07             | 3,2111E-06 |
| Mo-95  |   | 3,4410E-05             | 5,2295E-05 |
| Tc-99  |   | 4,1123E-05             | 5,8734E-05 |
| Ru-101 |   | 3,8223E-05             | 5,6898E-05 |
| Rh-103 |   | 2,1211E-05             | 2,9856E-05 |
| Ag-109 |   | 2,6601E-06             | 4,8499E-06 |
| Cs-133 |   | 4,3335E-05             | 6,0902E-05 |
| Sm-147 |   | 2,3798E-06             | 3,8097E-06 |
| Sm-149 |   | 1,1202E-07             | 1,0999E-07 |
| Sm-150 |   | 9,4144E-06             | 1,4649E-05 |
| Sm-151 |   | 4,8645E-07             | 5,6117E-07 |
| Sm-152 |   | 3,5278E-07             | 4,5354E-06 |
| Nd-143 |   | 3,1569E-05             | 4,1013E-05 |
| Nd-145 |   | 2,4498E-05             | 3,4106E-05 |
| Eu-153 |   | 3,3567E-06             | 5,6088E-06 |
| Gd-155 |   | 1,9812E-09             | 3,7644E-09 |
| O-16   | 4,5963E-02                                | 4,5960E-02             | 4,5960E-02 |

### 2.3 Moderator- und Hüllrohrzusammensetzung

Als Moderator wird Wasser bzw. Eis unterstellt. Gleiches gilt im Fall der Konfiguration „Single Unit“ für den Reflektor. Die Dichte des Moderators innerhalb der Brennstab- bzw. Steuerstabführungsrohreinheitszelle wird im Gegensatz zur Dichte anderer Materialien temperaturabhängig definiert. Vorgegebene Dichten und zugehörige Kernzahldichten in Abhängigkeit der zu betrachtenden Temperaturen sind in Tab. 2.3 zusammengestellt. Im Gegensatz dazu ist der 1 m dicke Reflektor der Konfiguration „Single Unit“ in allen Fällen mit der Dichte bei Raumtemperatur, also konstant mit  $0,998 \text{ g/cm}^3$ , zu modellieren, d. h. die Dichte des Reflektors ist unabhängig von der für das Brennelement und den Moderator im Brennelement gewählten Temperatur vorgegeben.

Für die Zusammensetzungen der Hüllrohre und Steuerstabführungsrohre wird jeweils reines Zirkonium in seiner natürlichen Isotopenzusammensetzung mit einer integralen Kernzahldichte von  $0,043108 \text{ (barn cm)}^{-1}$  unterstellt.

**Tab. 2.3** Temperatur und Dichte des Moderators /GAN 18/

| Aggregatzustand | Temperatur [K]   | Dichte [g/cm <sup>3</sup> ] | Kernzahldichte [(barn cm) <sup>-1</sup> ] |                 |
|-----------------|------------------|-----------------------------|---|-----------------|
|                 |                  |                             | <sup>1</sup> H                            | <sup>16</sup> O |
| Eis             | 233              | 0,9228                      | 6,17196E-02                               | 3,08598E-02     |
|                 | 253              | 0,9208                      | 6,15858E-02                               | 3,07929E-02     |
| Wasser          | 293 <sup>1</sup> | 0,998                       | 6,67492E-02                               | 3,33746E-02     |
|                 | 333              | 0,983                       | 6,57460E-02                               | 3,28730E-02     |
|                 | 588              | 0,694                       | 4,64168E-02                               | 2,32084E-02     |

<sup>1</sup> Die Werte für 293 K sind für den 1 m dicken Reflektor der Konfiguration „Single Unit“ zu verwenden.

### 2.4 Materialtemperaturen

Wesentlicher Untersuchungsgegenstand des Benchmarks ist der Einfluss der Temperaturabhängigkeit der Wirkungsquerschnitte und insbesondere der nuklearen Streudaten des Moderators auf den Neutronenmultiplikationsfaktor der vorgegebenen Konfigurationen. Dazu sind jeweils die beiden definierten geometrischen Konfigurationen („Single Unit“ und „Infinite Array“) mit den drei verschiedenen Brennstoffzusammensetzungen (frischer Brennstoff, 30 GWd/t Abbrand und 45 GWd/t Abbrand) bei fünf unterschiedlichen Temperaturen zu betrachten: 233 K, 253 K, 293 K, 333 K und 588 K. Dabei sind für den jeweiligen Brennstoff, die Hüllrohre und Steuerstabführungsrohre sowie den

Moderator in den Brennstab- und Steuerstabführungsrohreinheitszellen die entsprechende Temperatur zu unterstellen, d. h. für diese Materialien sind die Wirkungsquerschnitte und im Fall des Moderators zudem die Dichte sowie insbesondere die nuklearen Streudaten entsprechend der unterstellten Temperatur zu wählen. Für die nuklearen Streudaten ist dabei zwischen Eis und Wasser zu unterscheiden: Für die Temperaturen 233 K und 253 K sind die nuklearen Streudaten für Eis, ansonsten die für Wasser heranzuziehen. Lediglich der 1 m dicke Reflektor der Konfiguration „Single Unit“ wird konstant mit 293 K modelliert, d. h. für den Reflektor wird in allen Fällen unabhängig von der Temperatur des zentralen Brennelements die Dichte, die Wirkungsquerschnitte und die nuklearen Streudaten zur Temperatur von 293 K verwendet. Ebenso werden in allen Fällen Dichten und Abmessungen der Brennstoffe, Hüllrohre und Steuerstabführungsrohre unabhängig von der Temperatur mit den in Kap. 2.1 bis Kap. 2.3 gegebenen Werten modelliert.

### 3 Rechenmodelle

Der Benchmark wurde mit drei verschiedenen Rechencodes bzw. Softwarepaketen nachgerechnet: SCALE in der Version 6.2.2, OpenMC in der Version 0.9.0, und MCNP 6 in der Version 1.0. Bei den Rechnungen mit SCALE kam zum einen die mitgelieferte Wirkungsquerschnittsbibliothek ENDF/B-VII.1 ohne Modifizierungen zum Einsatz /REA 17/ (Kap. 3.1), zum anderen wurde eine mit dem AMPX-6 Paket aus den Originaldaten prozessierte ENDF/B-VIII.0 Bibliothek verwendet (Kap. 3.2). Die Modellierung des Benchmarks und eventuelle codespezifische Besonderheiten sind im Folgenden kurz beschrieben.

#### 3.1 SCALE mit ENDF/B-VII.1

Erste Berechnungen wurden mit der Sequenz CSAS5 basierend auf dem Monte Carlo-Transportcode KENO-Va des SCALE Softwarepakets in der Version 6.2.2 /REA 17/ des Oak Ridge National Laboratory (ORNL) durchgeführt. Diese Rechnungen wurden vorgenommen, um mit einem Standardprogramm, das durch den täglichen Umgang vertraut ist, Vergleichswerte für  $k_{\text{eff}}$  zu erhalten. Außerdem eignen sich diese Daten zur Abschätzung des Einflusses verschiedener Wirkungsquerschnittsdaten bei negativen Temperaturen auf  $k_{\text{eff}}$ .

Es wurden drei verschiedenen Wirkungsquerschnittsbibliotheken angewendet, die Bibliothek „v7.1-56n“ in 56 Energiegruppen-Darstellung, die Bibliothek „v7.1-252n“ in 252 Energiegruppen-Darstellung und die Bibliothek „ce\_v7.1\_endf“ in *continuous energy* Darstellung. Diese verwendeten und mit dem SCALE-Paket von ORNL bereitgestellte Wirkungsquerschnittsbibliotheken basieren auf der Bibliothek ENDF/B-VII.1, die allerdings nur begrenzt Daten zu Temperaturen unterhalb von 0 °C enthält.

Die Rechnungen wurden mit 20.000 Neutronen pro Generation und einer Unsicherheit (Abbruchkriterium) von  $\sigma_{k_{\text{eff}}} = 5,0 \times 10^{-4}$  durchgeführt. Da die thermischen Streudaten  $S_{\alpha,\beta}$  nicht für alle Benchmark-Temperaturen vorliegen, wurde mit dem Schlüsselwort „dbx=2“ eine entsprechende Korrektur verwendet, die zwischen den vorhandenen Temperaturen interpoliert.

### 3.2 SCALE mit ENDF/B-VIII.0

Wie bereits beschrieben, wurden mit der Datenevaluation ENDF/B-VIII.0 des National Nuclear Data Center (NNDC) des Brookhaven National Laboratory (BNL) erstmalig thermische Streudaten für Eis bereitgestellt /BRO 18/. Da die Veröffentlichung dieser Bibliothek erst nach der Veröffentlichung der letzten SCALE-Version erfolgte, ist diese noch nicht im Satz der standardmäßig in der Distribution mitgelieferten Bibliotheken enthalten. Um mit KENO-Va Rechnungen mit ENDF/B-VIII.0-Daten durchführen zu können, musste daher eine entsprechende Bibliothek im AMPX-Format erzeugt werden. Dies erfolgte mit dem seit SCALE 6.2 mitgelieferten AMPX-6 Paket /WIA 16/ zur Wirkungsquerschnittsprozessierung. Mit diesem wurde eine mit KENO-Va lesbare Bibliothek in kontinuierlicher Energiedarstellung (*continuous energy*, ce) erzeugt. Da bei ersten Testrechnungen Probleme mit den Streudaten für Wasserstoff in flüssigem Wasser bestanden, die bis zum Zeitpunkt der Einreichung nicht behoben werden konnten, wurden diese in der erzeugten Bibliothek durch die entsprechenden Daten aus der bestehenden ENDF/B-VII.1-Bibliothek ersetzt. Es sei an dieser Stelle auch noch einmal darauf hingewiesen, dass die für den Benchmark erzeugte Bibliothek nur einer begrenzten Anzahl von Testrechnungen unterzogen wurde und daher als experimentell gelten muss.

Die übrigen Simulationsparameter für die Rechnungen sowie die SCALE-Version (6.2.2) wurden im Sinne der Vergleichbarkeit von den SCALE-Rechnungen mit ENDF/B-VII.1-Daten übernommen.

### 3.3 MCNP 6

Für die Nachrechnung des Benchmarks wurde MCNP 6, Version 1.0 /PEL 13/ mit der Wirkungsquerschnittsbibliothek ENDF/B-VIII.0 /BRO 18/ vom BNL genutzt<sup>1</sup>. Dieses stellt nicht nur die Originalbibliothek im ENDF-Format zum Herunterladen bereit, sondern auch eine für die Rechnung mit MCNP geeignete Bibliothek im ACE-Format.

Diese vom BNL bereitgestellte Wirkungsquerschnittsbibliothek enthält Wirkungsquerschnittsdaten zu den Temperaturen 0,1 K, 250 K, 293,6 K, 600 K und darüber hinaus.

---

<sup>1</sup> MCNP 6.1 ist zwar nicht vollständig mit der Wirkungsquerschnittsbibliothek ENDF/B-VIII.0 kompatibel und es kann aufgrund von Rundungsfehlern zu vorzeitigen Rechenabbrüchen kommen, allerdings werden die bis zum Abbruch erzeugten Resultate nach Aussage vom Los Alamos National Laboratory (LANL) hierdurch nicht verfälscht.

Um für die verschiedenen Materialien die Wirkungsquerschnittsdaten zu den jeweils im Benchmark vorgegebenen Temperaturen  $T$  zu erhalten, wurden die Materialzusammensetzungen aus jeweils zwei Wirkungsquerschnittsbibliotheken „gemischt“, zum einen aus der Bibliothek zur nächstkleineren Temperatur als die Benchmark-Temperatur und zum anderen aus der Bibliothek mit der nächsthöheren Temperatur. Dazu wurden die Nuklide der einzelnen Materialzusammensetzungen im MCNP 6-Eingabedatensatz jeweils doppelt definiert, wobei eine Nukliddefinition auf die Bibliothek zur nächstkleineren Temperatur  $T_k$  und die zweite Nukliddefinition auf die Bibliothek zur nächsthöheren Temperatur  $T_h$  verwies. Die Kernzahldichten  $N_{T_k}$  bzw.  $N_{T_h}$  der beiden Nukliddefinitionen wurden dabei so gewählt, dass sich zum einen in der Summe die im Benchmark vorgegebene Kernzahldichte  $N$  des Nuklids und zum anderen bei linear gewichteter Mittelung der Temperaturen beider Bibliotheken im Verhältnis der Kernzahldichten  $N_{T_k}$  bzw.  $N_{T_h}$  die jeweilige im Benchmark vorgegebene Temperatur  $T$  ergibt, d. h.

$$T = (1 - v)T_k + vT_h \quad \text{und} \quad N = (1 - v)N_{T_k} + vN_{T_h} \quad (3.1)$$

Die sich daraus ergebenden Koeffizienten  $v$  sind in Tab. 3.1 für die jeweilige Benchmark-Temperatur aufgelistet. Eine Ausnahme bildet lediglich die Temperatur 293 K, bei der die direkt verfügbare Wirkungsquerschnittsbibliothek für 293,6 K verwendet wurde.

**Tab. 3.1** Mischungsverhältnisse der Wirkungsquerschnittsbibliotheken in den Materialdefinitionen

| Benchmark-Temperatur $T$ [K] | Nächst kleinere Bibliotheks-Temperatur [K] | Nächst höhere Bibliotheks-Temperatur [K] | Koeffizient $v$ |
|------------------------------|--|--|-----------------|
| 233                          | 0,1  | 250,0                                    | 0,93197         |
| 253                          | 250,0                                      | 293,6                                    | 0,06881         |
| 333                          | 293,6                                      | 600,0                                    | 0,12859         |
| 588                          | 293,6                                      | 600,0                                    | 0,96084         |

Für den Wasserstoff im Moderator wurden die dafür speziellen nuklearen Streudaten genutzt. Dagegen ist für den gegenüber Wasserstoff deutlich schwereren Sauerstoff im Moderator die Verwendung der Streudaten für freien Sauerstoff (Ideale Gas-Näherung) ausreichend /BRO 18/. Dieses gilt hier ebenso für den Sauerstoff in Eis (vergl. Kap. 4.2.1). Daher wurde abgesehen vom Wasserstoff im Moderator für alle weiteren Nuklide, also den Sauerstoff im Wasser bzw. Eis sowie für alle Nuklide der übrigen

Materialien, die standardmäßig in MCNP 6 verwendeten nuklidspezifischen nuklearen Streudaten in Idealer Gas-Näherung verwendet.

Die in der Wirkungsquerschnittsbibliothek des BNL enthaltenen nuklearen Streudaten für Wasserstoff in Wasser bzw. Eis liegen u. a. für die Temperaturen 233 K (Eis), 253 K (Eis), 294 K, 324 K, 350 K, 574 K und 600 K vor. Damit stehen für die Benchmark-Temperaturen 233 K, 253 K und 293 K entsprechende nuklearen Streudaten bei den (nahezu) identischen Temperaturen direkt zur Verfügung, sodass diese Wasserstoff-Streudaten für die jeweiligen Fälle genutzt wurden. Für die Benchmark-Temperaturen 333 K und 588 K stehen dagegen keine passenden nuklearen Streudaten für Wasserstoff in Wasser direkt zur Verfügung. Ein entsprechendes „Mischen“ von Streudaten verschiedener Temperaturen wie im Fall der Wirkungsquerschnitte wäre zwar prinzipiell möglich, erfordert aber einigen Aufwand, da die vorhandenen Streudaten durch den Anwender zunächst geeignet zu erweitern wären. Da dies den Rahmen dieser Arbeiten übersteigt, wurde hierauf verzichtet und für die beiden Benchmark-Temperaturen 333 K und 588 K dagegen die jeweiligen Wasserstoff-Streudaten zur nächstliegenden Temperatur, also 324 K bzw. 600 K, verwendet. Eine Abschätzung zum möglichen Fehler in  $k_{\text{eff}}$ , der durch die Verwendung der Streudaten zur jeweiligen nächstliegenden Temperatur entsteht, ist in Kap. 4.2.2 diskutiert.

Die Rechnungen wurden mit 50.000 Neutronen pro Generation mit einer Unsicherheit von  $\sigma_{k_{\text{eff}}} \leq 2,0 \times 10^{-4}$  durchgeführt. In Fällen, in denen es aufgrund der nicht vollständigen Kompatibilität der verwendeten MCNP 6 Version 1.0 mit der Bibliothek ENDF/B-VIII.0 zu vorzeitigen Rechenabbrüchen kam, wurden die Rechnungen mit geänderter Startzufallszahl wiederholt, um eine Unsicherheit von  $\sigma_{k_{\text{eff}}} \leq 2,0 \times 10^{-4}$  zu gewährleisten.

### **3.4 OpenMC**

Das Programm OpenMC /ROM 15/ ist ein Open Source Monte Carlo-Neutronentransportprogramm, das ursprünglich am MIT entwickelt wurde und aktuell von Entwicklern verschiedener hauptsächlich amerikanischer Forschungseinrichtungen weiterentwickelt wird. Für die vorliegenden Rechnungen wurde die Version 0.9.0 benutzt. OpenMC verwendet ein natives, auf dem HDF5-Datenformat basierendes Wirkungsquerschnittsformat. Das Programmpaket enthält zudem ein Python-Skript, mit dem Bibliotheken aus dem gängigeren ACE-Format in das native Format konvertiert werden können. Dieses wurde verwendet, um die mit MCNP verwendete ACE-Bibliothek für die Verwendung mit

OpenMC umzuwandeln. Die im vorherigen Abschnitt zu MCNP gemachten Aussagen gelten analog für die OpenMC-Rechnungen. Allerdings ermöglicht OpenMC die interne Interpolation von Wirkungsquerschnittsdaten zu verschiedenen Temperaturen, sodass diese nicht manuell durchgeführt werden muss. Diese Option wurde in den Rechnungen verwendet.

Die Rechnungen wurden mit 400.000 Neutronen pro Generation und einer Unsicherheit (Abbruchkriterium) von  $\sigma_{\text{keff}} = 2,0 \times 10^{-4}$  durchgeführt. Da das Abbruchkriterium in Intervallen jeweils nach einer festen Anzahl an Generationen (hier 50) wiederholt getestet wird, liegt die tatsächlich erreichte Unsicherheit in den Rechnungen bei etwas kleineren Werten.



## 4 Resultate

### 4.1 Benchmark-Resultate

Die mit SCALE 6.2.2, OpenMC 0.9.0, und MCNP 6 1.0 errechneten Neutronenmultiplikationsfaktoren  $k_{\text{eff}}$  für die verschiedenen Konfigurationen, Brennstoffzusammensetzungen und Temperaturen sind in Tab. 4.1 und Tab. 4.2 tabellarisch sowie in Abb. 4.1 und Abb. 4.2 grafisch zusammengestellt. Dabei zeigt sich insgesamt die zu erwartende Temperaturabhängigkeit des Neutronenmultiplikationsfaktors, bei der  $k_{\text{eff}}$  in erster Linie mit ansteigender Temperatur abnimmt. Eine Ausnahme bildet die Zustandsänderung des Moderators von Eis ( $T = 253 \text{ K}$ ) nach Wasser ( $T = 293 \text{ K}$ ), bei dem ein deutlicher Anstieg in  $k_{\text{eff}}$  zu beobachten ist. Da hier aber sowohl die nuklearen Streudaten wechseln wie auch die Moderatorichte einen deutlichen Sprung macht, lässt sich allein aus den Benchmark-Ergebnissen keine eindeutige Schlussfolgerung zur konkreten, quantitativen Ursache dieses Anstiegs in  $k_{\text{eff}}$  ziehen.

Zur besseren Vergleichbarkeit der Resultate sind zusätzlich die Differenzen  $\Delta k_{\text{eff}}$  der verschiedenen Ergebnisse  $k_{\text{eff,Code}}$  zu den MCNP 6-Ergebnissen  $k_{\text{eff,MCNP6}}$  als Referenz in Abb. 4.3 und Abb. 4.4 dargestellt, mit:

$$\Delta k_{\text{eff}} = k_{\text{eff,Code}} - k_{\text{eff,MCNP6}} \quad (4.1)$$

Um die Signifikanz dieser Differenzen beurteilen zu können, sind zusätzlich deren statistische Unsicherheiten  $\sigma(\Delta k_{\text{eff}})$  gemäß

$$\sigma(k_{\text{eff}}) = \sqrt{\sigma(k_{\text{eff,Code}})^2 + \sigma(k_{\text{eff,MCNP6}})^2} \quad (4.2)$$

wiedergegeben. Die MCNP 6-Resultate wurden hier für den Vergleich als Referenz gewählt, da für MCNP 6 alle benötigten Daten, insbesondere die nuklearen Streudaten für Eis, in direkt verwendbarer Form zur Verfügung stehen und somit diese Resultate alle relevanten Effekte berücksichtigen, die im Benchmark betrachtet werden sollten. Dagegen mussten für die Rechnungen mit SCALE und OpenMC erst geeignete Wirkungsquerschnittsbibliotheken mit nuklearen Streudaten für Eis erzeugt werden, welche im

vorliegenden Projekt nur bedingt getestet werden konnten. Davon abgesehen ist die Wahl der MCNP 6-Resultate als Referenz als willkürlich zu betrachten.

Beim Vergleich der Resultate sind zwei Gruppen zu erkennen: Zum einen die Gruppe der Rechnungen mit SCALE, OpenMC und MCNP 6 mit einer ENDF/B-VIII.0-basierten Wirkungsquerschnittsbibliothek und zum anderen die SCALE-Rechnungen mit einer ENDF/B-VII.1-basierten Wirkungsquerschnittsbibliothek. Durch die Verwendung verschiedener Wirkungsquerschnittsdaten sind gewisse Unterschiede in den Resultaten zu erwarten, zumal die ENDF/B-VII.1-Bibliotheken auch keine Streudaten für Eis enthalten, was beim Vergleich der beiden Gruppen miteinander zu berücksichtigen ist. Beim Vergleich der Rechnungen innerhalb einer Gruppe werden dann zwar (nahezu) dieselben Wirkungsquerschnittsdaten verwendet<sup>2</sup>, es sind aber Unterschiede aufgrund der Verwendung verschiedener Simulationscodes bzw. verschiedener Neutronenenergiegruppenstrukturen der Bibliotheken möglich.

Der konkrete Vergleich der errechneten Neutronenmultiplikationsfaktoren zeigt, dass bei Verwendung der Wirkungsquerschnittsbibliothek ENDF/B-VIII.0 alle drei verwendeten Transportcodes vergleichbare  $k_{\text{eff}}$ -Werte ermitteln (vergl. Datenpunkte „SCALE ENDF/B-VIII.0“ und „OpenMC ENDF/B-VIII.0“ in Abb. 4.3 und Abb. 4.4). Im Fall des einzelnen Brennelements („Single Unit“) liegen die Differenzen der mit SCALE und OpenMC errechneten Neutronenmultiplikationsfaktoren gegenüber den mit MCNP 6 ermittelten Resultaten innerhalb von  $\pm 120$  pcm. In vielen Fällen bewegen sich diese Differenzen sogar innerhalb von  $\pm 80$  pcm und liegen damit innerhalb der statistischen Unsicherheiten der Monte-Carlo-Rechnungen. Für das unendliche Brennelementgitter („infinite Array“) sind insgesamt etwas größere Differenzen zu beobachten. Hier liegt der Bereich, in dem sich die Differenzen zu den Resultaten der MCNP 6-Rechnungen bewegen, bei etwa  $\pm 200$  pcm. Auch hier zeigt sich, dass die Differenzen (d. h. ihr Betrag) in vielen Fällen weniger als 100 pcm betragen und damit ebenfalls innerhalb der statistischen Unsicherheiten der Monte-Carlo-Rechnungen liegen.

Bei der Betrachtung der  $k_{\text{eff}}$ -Werte fällt weiterhin auf, dass trotz der in den meisten Fällen vorliegenden Streuung der Differenzen innerhalb der statistischen Unsicherheiten MCNP 6 die Tendenz hat, bei hohen Temperaturen etwas größere

---

<sup>2</sup> Im Fall der SCALE-Rechnungen mit ENDF/B-VIII.0-Wirkungsquerschnitten werden die Streudaten für Wasserstoff in flüssigem Wasser aus ENDF/B-VII.1 verwendet (vergl. Kap. 3.2). Inwiefern sich diese nennenswert mit denen aus ENDF/B-VIII.0 unterscheiden, wurde nicht untersucht.

Neutronenmultiplikationsfaktoren als SCALE und OpenMC zu berechnen. Dieses Verhalten kann zumindest im Fall der Benchmark-Temperatur von 333 K auf die Verwendung der nuklearen Wasserstoff-Streudaten zur Temperatur von 324 K anstelle von 333 K im MCNP zurückgeführt werden (vergl. Kap. 4.2.2). Im Fall der Benchmark-Temperatur 588 K wird dagegen der Neutronenmultiplikationsfaktor durch die Verwendung der nuklearen Wasserstoff-Streudaten zur Temperatur von 600 K anstelle von 558 K in MCNP vor allem beim frischen Brennstoff unterschätzt, sodass bei korrekten nuklearen Daten bei der exakten Temperatur sogar noch etwas größere Differenzen zu erwarten sind (vergl. Kap. 4.2.2). Die bisherigen und weiteren qualitativen Aussagen ändern sich hierdurch aber nicht grundlegend. Dagegen ist eine solche Tendenz von MCNP bei den Benchmark-Temperaturen 253 K und 293 K so nicht zu erkennen. Eine genaue statistische Analyse zum Nachweis der Signifikanz dieser Tendenz wurde allerdings nicht durchgeführt. Für die Benchmark-Temperatur 233 K zeigt sich dagegen eine deutliche Tendenz von OpenMC, das jeweils größte  $k_{\text{eff}}$ , und von SCALE, das jeweils kleinste  $k_{\text{eff}}$  zu berechnen, wobei der Unterschied zwischen den jeweiligen Werten bis zu etwa 200 pcm (Konfiguration „Single Unit“) bzw. etwa 300 pcm (Konfiguration „Infinite Array“) beträgt. Die von MCNP 6 ermittelten Werte liegen dabei in der Regel etwa in der Mitte der Werte von SCALE und OpenMC. Insgesamt zeigt sich also, dass die Verwendung unterschiedlicher Transportcodes hier zu Differenzen in den errechneten Multiplikationsfaktoren in der Größenordnung von 100 pcm, bis maximal 300 pcm führt, was auch den Erfahrungen aus anderen Arbeiten entspricht. Somit können wesentliche Diskrepanzen in den Simulationen der hier berücksichtigten Temperaturabhängigkeiten der einzelnen Rechencodes ausgeschlossen werden. Eine Zuordnung der zu beobachtenden Differenzen in  $k_{\text{eff}}$ , insbesondere im Fall der Benchmark-Temperatur von 233 K, zu ggf. vorhandenen Unterschieden der einzelnen Rechencodes in den Simulationen der Temperaturabhängigkeiten der betrachteten Einflussgrößen ist mit den vorliegenden Benchmark-Resultaten allerdings nicht möglich.

Vergleicht man dagegen die mit SCALE und den verschiedenen ENDF/B-VII.1-basierten Bibliotheken errechneten Neutronenmultiplikationsfaktoren untereinander (vergl. Tab. 4.1 und Tab. 4.2), so weisen diese für das einzelne Brennelement („Single Unit“) Differenzen von bis zu ca. 250 pcm und für das unendliche Brennelementgitter („Infinite Array“) Differenzen bis zu etwa 350 pcm auf. Wie oben erwähnt sind diese Unterschiede offensichtlich durch die unterschiedlichen Parametrisierungen der Energieabhängigkeiten der Wirkungsquerschnitte gegeben. Damit sind die Unterschiede in  $k_{\text{eff}}$  der Rechnungen mit ENDF/B-VII.1 und verschiedenen Parametrisierungen der Energieabhängigkeit

untereinander größer als die Unterschiede, die die Rechnungen mit ENDF/B-VIII.0 und verschiedenen Transportcodes untereinander in  $k_{\text{eff}}$  aufweisen.

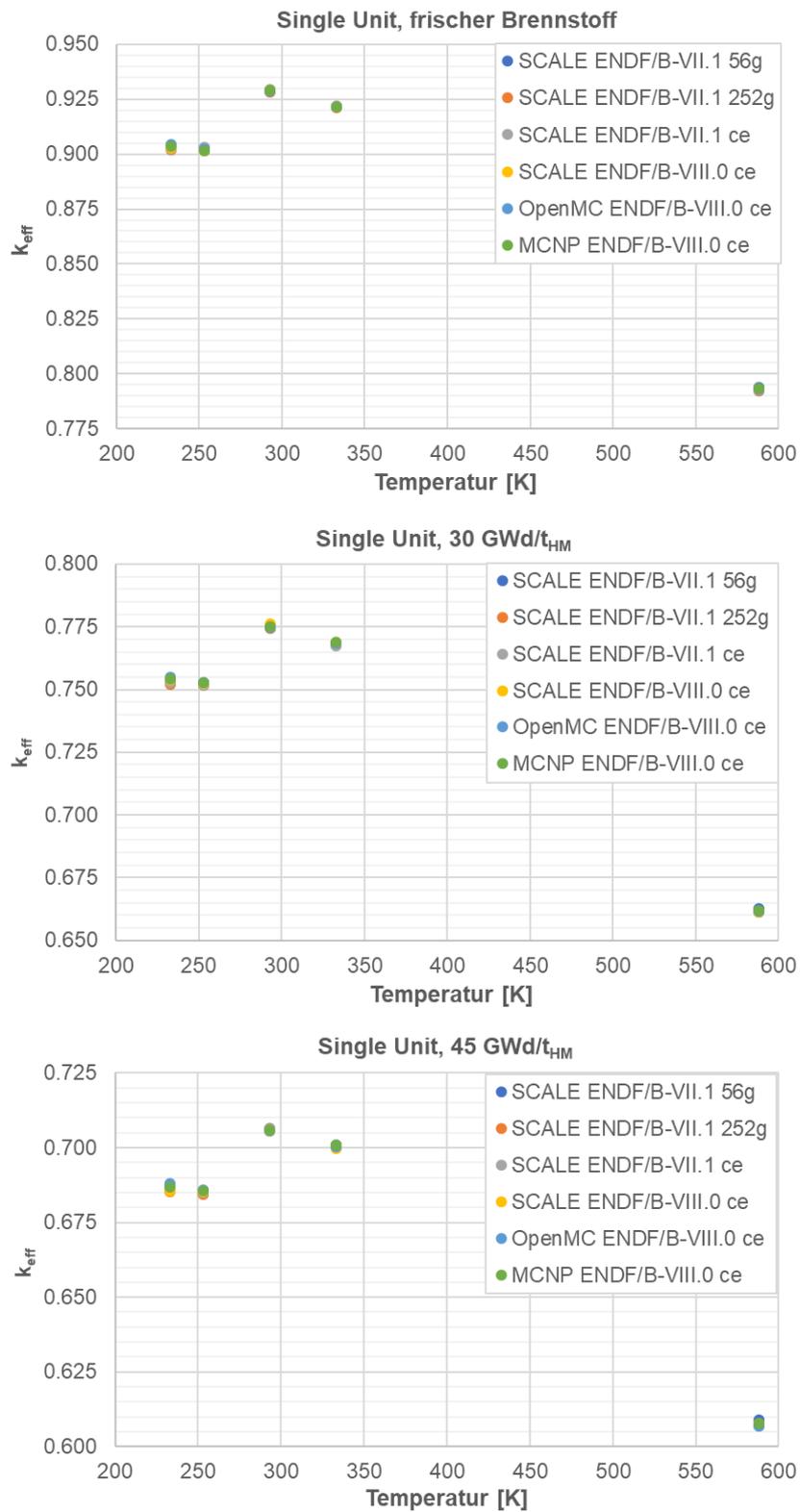
Zu den Resultaten der MCNP-Rechnungen mit der Bibliothek ENDF/B-VIII.0 zeigen die mit SCALE und den ENDF/B-VII.1-Bibliotheken errechneten Neutronenmultiplikationsfaktoren für das einzelne Brennelement („Single Unit“) Differenzen bis zu  $\pm 200$  pcm (vergl. Datenpunkte „SCALE ENDF/B-VII.1 56g/252g/ce“ in Abb. 4.3 und Abb. 4.4). Für die höheren Benchmark-Temperaturen 293 K, 333 K und 588 K sind diese Differenzen in der Regel geringer und liegen damit in vielen Fällen noch innerhalb der statistischen Unsicherheiten, wohingegen sie für die Temperaturen 233 K und 253 K nur noch bedingt mit den statistischen Unsicherheiten erklärbar sind. Zudem fallen die mit SCALE und ENDF/B-VII.1 errechneten Neutronenmultiplikationsfaktoren für die Fälle mit bestrahltem Brennstoff zumeist geringer als die mit MCNP 6 errechneten Werte aus. Für das unendliche Brennelementgitter liegen dagegen mit bis zu etwa  $\pm 550$  pcm deutlich größere Differenzen vor, die entsprechend in der Mehrzahl die statistischen Unsicherheiten erheblich übersteigen. Die Ursache hierfür dürfte im Wesentlichen in Unterschieden zwischen den Wirkungsquerschnitten der Bibliotheken ENDF/B-VII.1 und ENDF/B-VIII.0 bzw. wieder in den unterschiedlichen Darstellungen der Energieabhängigkeit der Wirkungsquerschnitte begründet sein. Zudem zeigen die mit SCALE und ENDF/B-VII.1 errechneten Resultate bei frischem Brennstoff und mit zunehmender Temperatur einige auffällig große  $k_{\text{eff}}$ -Werte, wohingegen sie bei bestrahltem Brennstoff und insbesondere mit abnehmender Temperatur vermehrt deutlich geringere  $k_{\text{eff}}$ -Werte als die übrigen Resultate aufweisen. Nimmt man die Resultate der SCALE-Rechnungen mit ENDF/B-VIII.0 hinzu, deutet sich hier eine gewisse Temperaturabhängigkeit in den Differenzen zwischen den SCALE- und MCNP-Resultaten an, die den Schluss nahelegt, dass eine oder ggf. mehrere Temperaturabhängigkeiten der betrachteten Einflussgrößen in beiden Rechen-codes unterschiedlich wiedergegeben werden. Eine konkrete Analyse hierzu wurde allerdings nicht durchgeführt, und die vorliegenden Benchmark-Resultate lassen hier keine weiteren Schlussfolgerungen zu.

**Tab. 4.1** Neutronenmultiplikationsfaktoren  $k_{eff}$  für die Konfiguration „Single Unit“ (eingereichte Resultate)

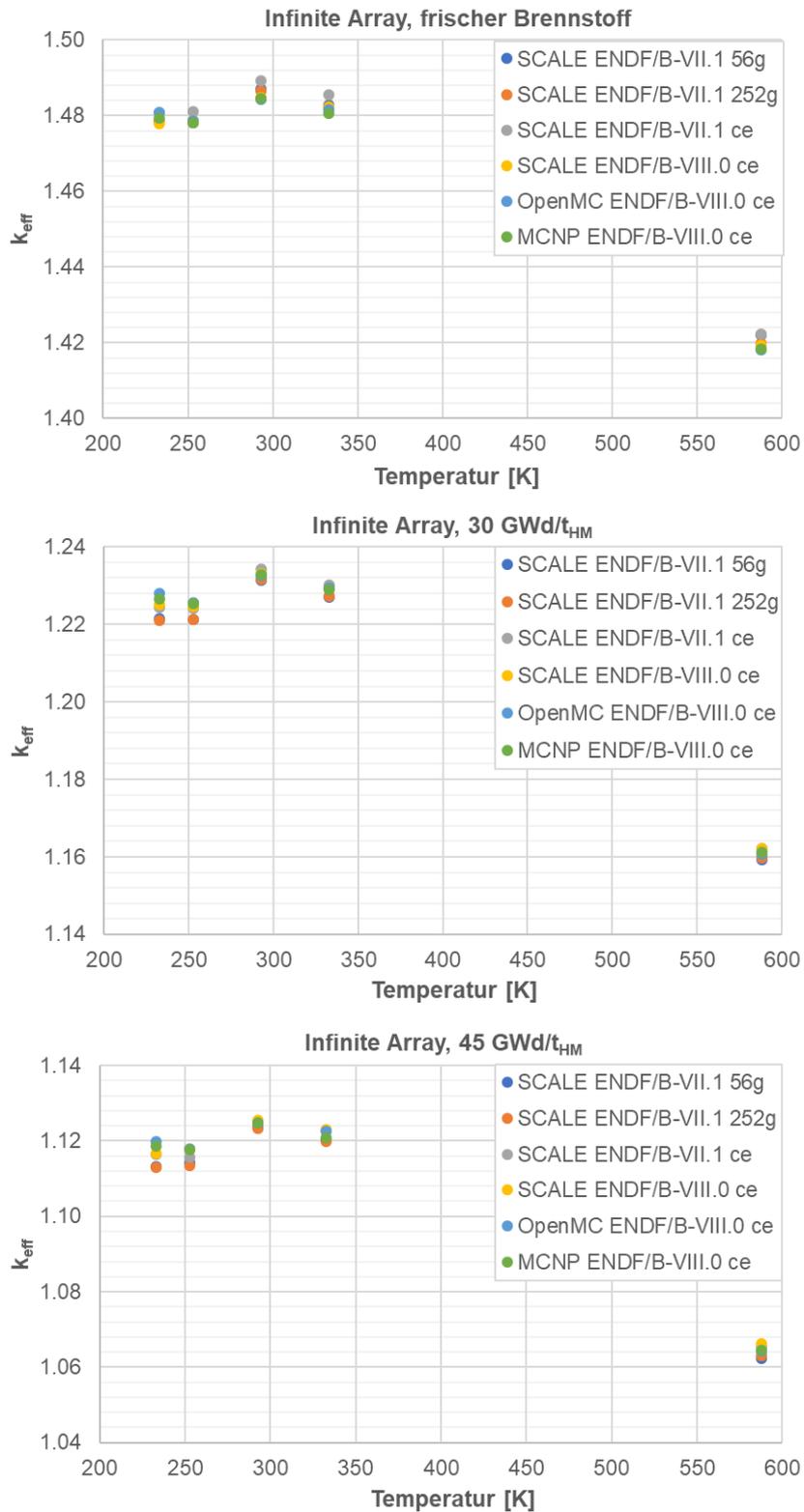
| Code,<br>Bibliothek,<br>Energiegruppen | $\sigma(k_{eff})$ | Brennstoff             | $k_{eff}$ in Abhängigkeit der Benchmark-Temperatur T |           |           |           |           |
|--|-------------------|------------------------|--|-----------|-----------|-----------|-----------|
|  |                   |                        | T = 233 K  | T = 253 K | T = 293 K | T = 333 K | T = 333 K |
| SCALE,<br>ENDF/B-VII.1,<br>56g         | 0,0005            | Frisch                 | 0,9033   | 0,9028    | 0,9289    | 0,9216    | 0,7940    |
|  |                   | 30 GWd/t <sub>HM</sub> | 0,7536   | 0,7526    | 0,7749    | 0,7681    | 0,6628    |
|  |                   | 45 GWd/t <sub>HM</sub> | 0,6871   | 0,6847    | 0,7064    | 0,7008    | 0,6090    |
| SCALE,<br>ENDF/B-VII.1,<br>252g        | 0,0005            | Frisch                 | 0,9019   | 0,9014    | 0,9281    | 0,9210    | 0,7921    |
|  |                   | 30 GWd/t <sub>HM</sub> | 0,7520   | 0,7515    | 0,7745    | 0,7679    | 0,6615    |
|  |                   | 45 GWd/t <sub>HM</sub> | 0,6853   | 0,6842    | 0,7059    | 0,7002    | 0,6073    |
| SCALE,<br>ENDF/B-VII.1,<br>ce          | 0,0005            | Frisch                 | 0,9024   | 0,9030    | 0,9294    | 0,9221    | 0,7925    |
|  |                   | 30 GWd/t <sub>HM</sub> | 0,7529   | 0,7516    | 0,7747    | 0,7674    | 0,6611    |
|  |                   | 45 GWd/t <sub>HM</sub> | 0,6858   | 0,6849    | 0,7055    | 0,7002    | 0,6072    |
| SCALE,<br>ENDF/B-VIII.0,<br>ce         | 0,0005            | Frisch                 | 0,9026   | 0,9014    | 0,9292    | 0,9215    | 0,7932    |
|  |                   | 30 GWd/t <sub>HM</sub> | 0,7539   | 0,7522    | 0,7760    | 0,7687    | 0,6613    |
|  |                   | 45 GWd/t <sub>HM</sub> | 0,6857   | 0,6854    | 0,7060    | 0,6996    | 0,6079    |
| OpenMC,<br>ENDF/B-VIII.0,<br>ce        | 0,0002            | Frisch                 | 0,9046   | 0,9022    | 0,9287    | 0,9214    | 0,7932    |
|  |                   | 30 GWd/t <sub>HM</sub> | 0,7550   | 0,7526    | 0,7747    | 0,7684    | 0,6615    |
|  |                   | 45 GWd/t <sub>HM</sub> | 0,6879   | 0,6859    | 0,7057    | 0,7004    | 0,6069    |
| MCNP 6,<br>ENDF/B-VIII.0,<br>ce        | 0,0002            | Frisch                 | 0,9035   | 0,9015    | 0,9291    | 0,9217    | 0,7935    |
|  |                   | 30 GWd/t <sub>HM</sub> | 0,7541   | 0,7526    | 0,7752    | 0,7688    | 0,6619    |
|  |                   | 45 GWd/t <sub>HM</sub> | 0,6869   | 0,6856    | 0,7059    | 0,7008    | 0,6077    |

**Tab. 4.2** Neutronenmultiplikationsfaktoren  $k_{eff}$  für die Konfiguration „Infinite Array“ (eingereichte Resultate)

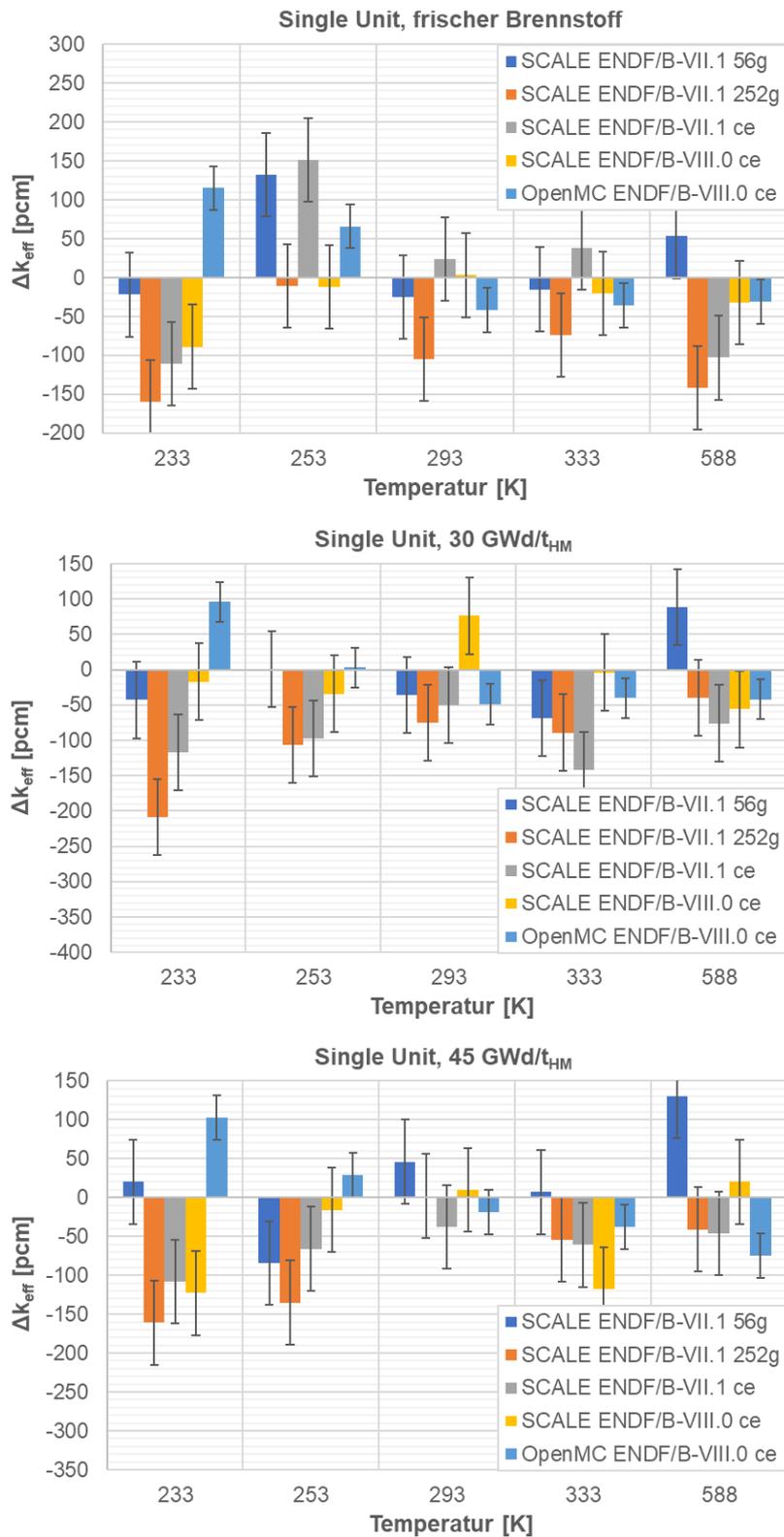
| Code,<br>Bibliothek,<br>Energiegruppen | $\sigma(k_{eff})$ | Brennstoff             | $k_{eff}$ in Abhängigkeit der Benchmark-Temperatur T |           |           |           |           |
|--|-------------------|------------------------|--|-----------|-----------|-----------|-----------|
|  |                   |                        | T = 233 K  | T = 253 K | T = 293 K | T = 333 K | T = 333 K |
| SCALE,<br>ENDF/B-VII.1,<br>56g         | 0,0005            | Frisch                 | 1,4783   | 1,4787    | 1,4870    | 1,4828    | 1,4222    |
|  |                   | 30 GWd/t <sub>HM</sub> | 1,2214   | 1,2213    | 1,2313    | 1,2270    | 1,1594    |
|  |                   | 45 GWd/t <sub>HM</sub> | 1,1131   | 1,1143    | 1,1235    | 1,1203    | 1,0623    |
| SCALE,<br>ENDF/B-VII.1,<br>252g        | 0,0005            | Frisch                 | 1,4785   | 1,4780    | 1,4866    | 1,4823    | 1,4199    |
|  |                   | 30 GWd/t <sub>HM</sub> | 1,2210   | 1,2212    | 1,2317    | 1,2273    | 1,1599    |
|  |                   | 45 GWd/t <sub>HM</sub> | 1,1130   | 1,1134    | 1,1234    | 1,1198    | 1,0629    |
| SCALE,<br>ENDF/B-VII.1,<br>ce          | 0,0005            | Frisch                 | 1,4807   | 1,4810    | 1,4892    | 1,4856    | 1,4223    |
|  |                   | 30 GWd/t <sub>HM</sub> | 1,2243   | 1,2242    | 1,2342    | 1,2302    | 1,1622    |
|  |                   | 45 GWd/t <sub>HM</sub> | 1,1165   | 1,1157    | 1,1251    | 1,1227    | 1,0654    |
| SCALE,<br>ENDF/B-VIII.0,<br>ce         | 0,0005            | Frisch                 | 1,4779   | 1,4787    | 1,4848    | 1,4823    | 1,4194    |
|  |                   | 30 GWd/t <sub>HM</sub> | 1,2252   | 1,2247    | 1,2331    | 1,2296    | 1,1621    |
|  |                   | 45 GWd/t <sub>HM</sub> | 1,1167   | 1,1179    | 1,1256    | 1,1229    | 1,0662    |
| OpenMC,<br>ENDF/B-VIII.0,<br>ce        | 0,0002            | Frisch                 | 1,4808   | 1,4787    | 1,4843    | 1,4816    | 1,4181    |
|  |                   | 30 GWd/t <sub>HM</sub> | 1,2280   | 1,2255    | 1,2325    | 1,2294    | 1,1606    |
|  |                   | 45 GWd/t <sub>HM</sub> | 1,1199   | 1,1178    | 1,1248    | 1,1226    | 1,0642    |
| MCNP 6<br>ENDF/B-VIII.0,<br>ce         | 0,0002            | Frisch                 | 1,4793   | 1,4782    | 1,4845    | 1,4807    | 1,4184    |
|  |                   | 30 GWd/t <sub>HM</sub> | 1,2265   | 1,2253    | 1,2329    | 1,2291    | 1,1612    |
|  |                   | 45 GWd/t <sub>HM</sub> | 1,1187   | 1,1177    | 1,1247    | 1,1208    | 1,0646    |



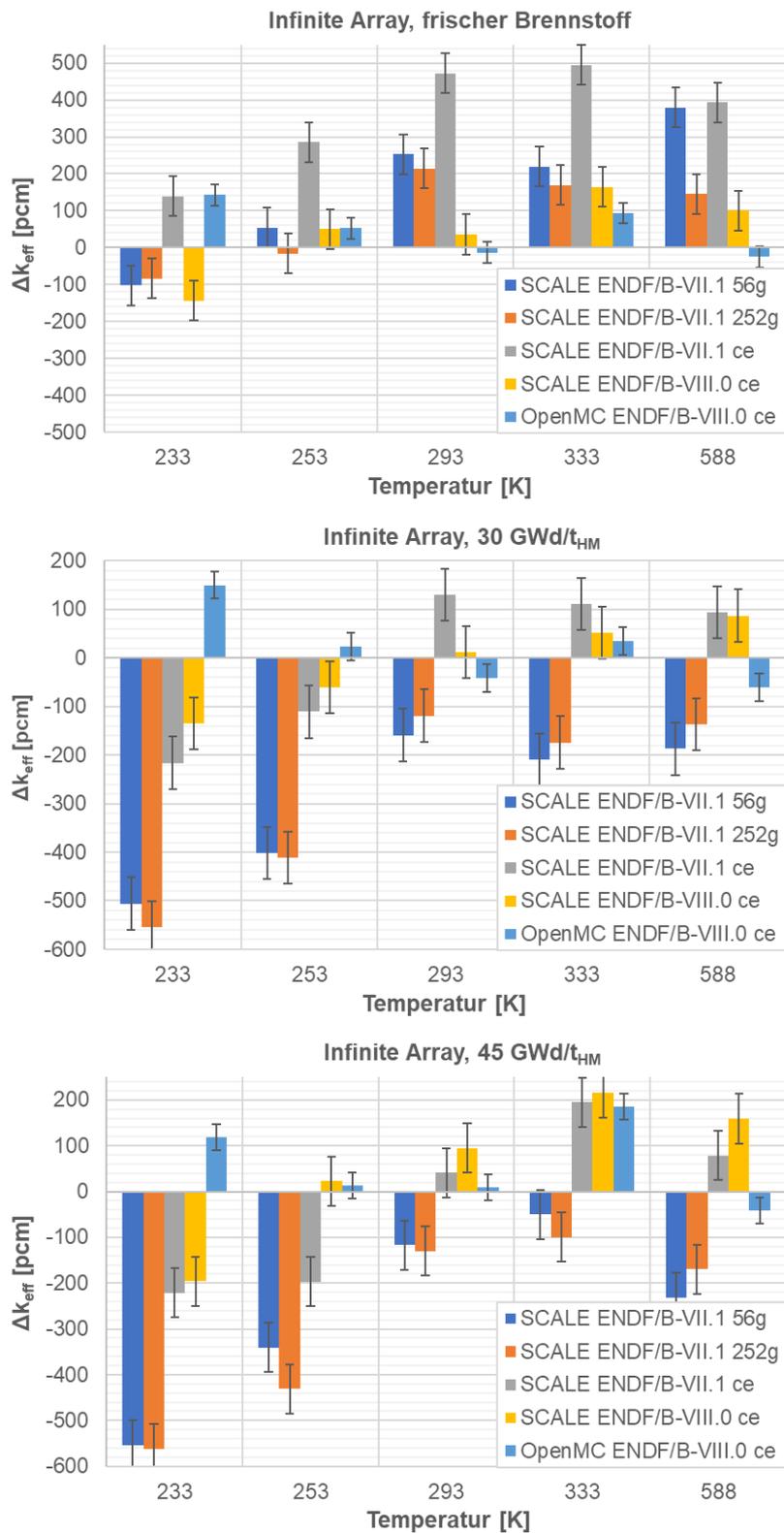
**Abb. 4.1** Grafische Darstellung der Neutronenmultiplikationsfaktoren  $k_{\text{eff}}$  für die Konfiguration „Single Unit“ (eingereichte Resultate)



**Abb. 4.2** Grafische Darstellung der Neutronenmultiplikationsfaktoren  $k_{\text{eff}}$  für die Konfiguration „Infinite Array“ (eingereichte Resultate)



**Abb. 4.3** Differenzen der errechneten Neutronenmultiplikationsfaktoren gegenüber den MCNP 6-Resultaten für die Konfiguration „Single Unit“



**Abb. 4.4** Differenzen der errechneten Neutronenmultiplikationsfaktoren gegenüber den MCNP 6-Resultaten für die Konfiguration „Infinite Array“

## 4.2 Effekte der verwendeten Näherungen

Für die Benchmark-Rechnungen wurden verschiedene Näherungen bzw. Vereinfachungen genutzt. Für einzelne Fälle wurden Tests durchgeführt, um die Einflüsse dieser Näherungen bzw. Vereinfachungen auf die berechneten Neutronenmultiplikationsfaktoren zu überprüfen. Die verschiedenen Tests werden im Folgenden diskutiert.

### 4.2.1 Vernachlässigung der nuklearen Sauerstoff-Streudaten

Für die korrekte Bestimmung des Neutronenmultiplikationsfaktors ist vor allem bei Beteiligung leichter Nuklide, also insbesondere Wasserstoff, die Berücksichtigung der nuklearen Streudaten dieser Nuklide für die jeweils vorliegenden chemischen Bindungen wichtig. Für beteiligte schwerere Nuklide hängt es dann von der jeweiligen Verbindung ab, inwiefern diese zu berücksichtigen ist. So ist es z. B. im Fall von Wasser ausreichend, für den Sauerstoff im Wassermolekül die nuklearen Streudaten für freien Sauerstoff zu verwenden /BRO 18/. Die gleiche Approximation wurde in den vorliegenden Benchmark-Rechnungen auch für Eis angenommen.

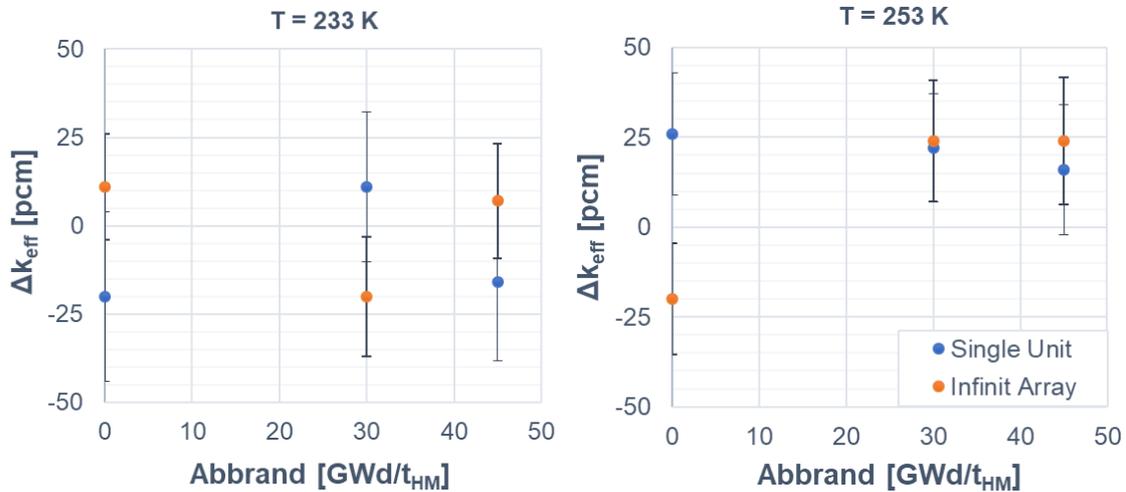
Die von BNL bereitgestellte Wirkungsquerschnittsbibliothek ENDF/B-VIII.0 enthält auch explizite nukleare Streudaten für Sauerstoff in Eis, sodass hiermit eine Überprüfung dieser Approximation möglich ist. Um also den Einfluss der Streudaten für Sauerstoff in Eis gegenüber den Streudaten für freien Sauerstoff auf  $k_{eff}$  quantitativ zu ermitteln, wurden alle Konfigurationen für die Benchmark-Temperaturen 233 K und 253 K auch mit den Streudaten für Sauerstoff in Eis mittels MCNP 6 und stichpunktartig mit OpenMC gerechnet. Die sich damit im Vergleich zu den eigentlichen Benchmark-Rechnungen ergebenden Differenzen  $\Delta k_{eff}$  gemäß

$$\Delta k_{eff} = k_{eff}(S_{\alpha,\beta}(^{16}O_{free})) - k_{eff}(S_{\alpha,\beta}(^{16}O_{Ice})) \quad (4.3)$$

sind für die Rechnungen mit MCNP 6 in Abb. 4.5 zusammengestellt.

Insgesamt zeigt Abb. 4.5 für die beiden Konfigurationen und verschiedenen Brennstoffzusammensetzungen Differenzen  $\Delta k_{eff}$  zwischen  $\pm 25$  pcm bei statistischen Unsicherheiten um etwa 20 pcm. Zudem ist im Rahmen der statistischen Unsicherheiten kein Trend zu eher positiven oder eher negativen Differenzen und auch kein unterschiedliches Verhalten der beiden Konfigurationen „Single Unit“ und „Infinite Array“ erkennbar. Somit

führt die Verwendung der Streudaten für freien Sauerstoff gegenüber denen für Sauerstoff in Eis im Rahmen der hier vorliegenden statistischen Unsicherheiten zu keinen signifikanten Änderungen im  $k_{\text{eff}}$  der untersuchten Benchmark-Konfigurationen. Auch die einzelnen Nachrechnungen mit OpenMC bestätigen dieses Verhalten.



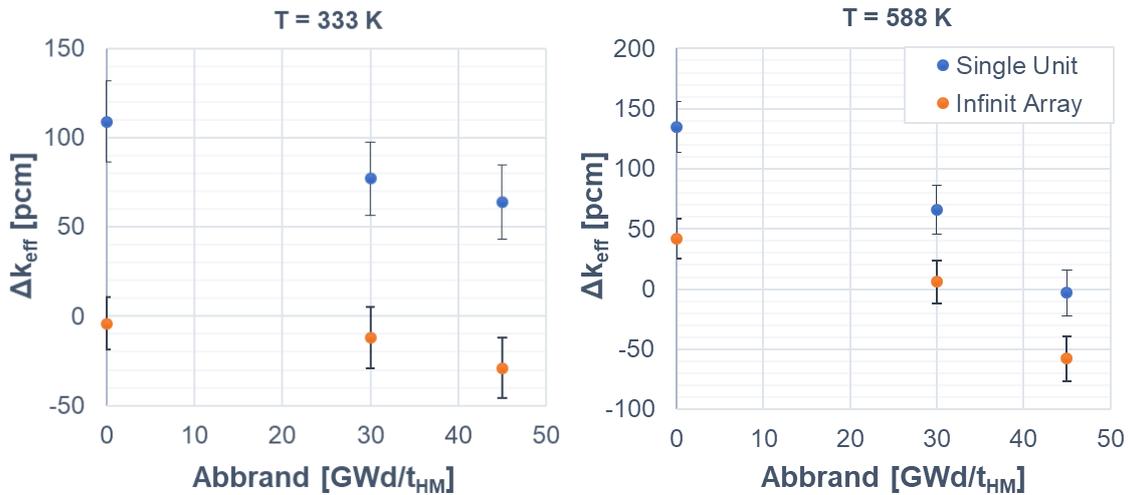
**Abb. 4.5** Differenz im Neutronenmultiplikationsfaktor der MCNP 6-Nachrechnungen bei Verwendung der nuklearen Streudaten für freien  $^{16}\text{O}$  und  $^{16}\text{O}$  in Eis

#### 4.2.2 Einfluss durch Verwendung der nuklearen Streudaten zur nächstliegenden Temperatur

In der vom BNL zur Verfügung gestellten Wirkungsquerschnittsbibliothek ENDF/B-VIII.0 liegen für die Benchmark-Temperaturen 333 K und 588 K keine direkt passenden nuklearen Streudaten vor. Verfügbar sind dagegen u. a. Streudaten für die Temperaturen 324 K und 350 K bzw. 574 K und 600 K. Um den möglichen Fehler zu ermitteln, der sich durch die Verwendung der nuklearen Streudaten bei der zur jeweiligen Benchmark-Temperatur nächstliegenden Temperatur im  $k_{\text{eff}}$  der MCNP 6-Rechnungen ergibt (vgl. Kap. 3.3), wurden die Neutronenmultiplikationsfaktoren jeweils sowohl unter Verwendung der Streudaten zur nächst kleineren Temperatur wie auch der Streudaten zur nächst höheren Temperatur mit MCNP 6 ermittelt. Dieses erfolgte für beide Benchmark-Konfigurationen („Single Unit“ und „Infinite Array“) und alle Brennstoffabbrände (frischer Brennstoff, 30 GWd/t, 45 GWd/t). Die so ermittelten Differenzen in  $k_{\text{eff}}$  bei Verwendung der Streudaten zur nächst kleineren Temperatur  $T_k$  und zur nächst höheren Temperatur  $T_h$  sind entsprechend:

$$\Delta k_{\text{eff}} = k_{\text{eff}}(S_{\alpha,\beta}(T_k)) - k_{\text{eff}}(S_{\alpha,\beta}(T_h)) \quad (4.4)$$

in Abb. 4.6 inklusive ihrer statistischen Unsicherheiten zusammengestellt.



**Abb. 4.6** Differenz im Neutronenmultiplikationsfaktor der MCNP 6-Nachrechnungen zwischen der Verwendung nuklearer Streudaten zur nächst kleineren und der nächst höheren Temperatur

Im Fall der Benchmark-Temperatur 333 K zeigen beide Konfigurationen Differenzen  $\Delta k_{\text{eff}}$ , die im Rahmen der statistischen Unsicherheiten nur wenig vom Brennstoffabbrand abhängt. So unterscheiden sich die Differenzen  $\Delta k_{\text{eff}}$  derselben Konfiguration bei frischem Brennstoff von denen bei einem Abbrand von 45 GWd/t um weniger als 50 pcm. Allerdings unterscheiden sich die Differenzen  $\Delta k_{\text{eff}}$  der beiden Konfigurationen in ihren absoluten Werten. Diese bewegen sich im Fall der Konfiguration „Single Unit“ um etwa 90 pcm, während sie sich für die Konfiguration „Infinite Array“ um -20 pcm bewegen. So führt also die Verwendung der nuklearen Streudaten zur Temperatur 324 K für das einzelne wasserreflektierte Brennelement zu einem etwa 90 pcm höheren  $k_{\text{eff}}$  als die Verwendung der Streudaten zur Temperatur 350 K. Dagegen zeigt sich kein wesentlicher Unterschied für das infinite Brennelementgitter. Mögliche Erklärungen für diesen stärkeren Effekt bei der „Single Unit“ könnten eine effektivere Rückstreuung oder ein geringeres Upscattering, das zu thermischeren Neutronen führt, sein. Diese Effekte konnten allerdings im Rahmen der durchgeführten Untersuchungen nicht überprüft werden. Für die Benchmark-Temperatur von 333 K ist also somit zu erwarten, dass sich durch die Verwendung der nuklearen Streudaten zur Temperatur von 324 K ein Fehler in  $k_{\text{eff}}$  von etwa der halben Differenz  $\Delta k_{\text{eff}}$  ergibt, d. h. für das einzelne wasserreflektierte

Brennelement ein Fehler um etwa 50 pcm und für das infinite Brennelementgitter dagegen ein im Rahmen der Rechengenauigkeit nicht signifikanter Fehler um etwa -10 pcm<sup>3</sup>.

Für die Benchmark-Temperatur 588 K ist die Differenz  $\Delta k_{\text{eff}}$  für beide Konfigurationen deutlich vom Brennstoffabbrand bzw. von der Brennstoffzusammensetzung abhängig. Sowohl für das einzelne wasserreflektierte Brennelement („Single Unit“) wie auch für das infinite Brennelementgitter („Infinite Array“) verringert sich  $\Delta k_{\text{eff}}$  mit zunehmendem Abbrand des Brennstoffs um etwa 140 pcm („Single Unit“) bzw. etwa 100 pcm („Infinite Array“) und wechselt im Fall des infiniten Brennelementgitters beim Abbrand von 45 GWd/t sogar das Vorzeichen. Dies könnte in einem Zusammenspiel aus weniger effektiver Moderation und Vorhandensein von Absorbern begründet sein. Wie im Fall der Benchmark-Temperatur von 333 K unterschieden sich auch hier die Differenzen  $\Delta k_{\text{eff}}$  der beiden Konfigurationen in ihren absoluten Werten, wobei wieder das einzelne Wasser-reflektierte Brennelement die größere Differenz  $\Delta k_{\text{eff}}$  aufweist. So betragen die Differenzen  $\Delta k_{\text{eff}}$  für das einzelne wasserreflektierte Brennelement zwischen etwa 140 pcm (frischer Brennstoff) und etwa 0 pcm (45 GWd/t) sowie für das infinite Brennelementgitter zwischen etwa 40 pcm (frischer Brennstoff) und etwa -60 pcm (45 GWd/t). Also unterscheiden sich die Differenzen  $\Delta k_{\text{eff}}$  der beiden Konfigurationen für frischen Brennstoff wieder um etwa 90 pcm, wobei sich der Unterschied mit zunehmendem Abbrand auf etwa 50 pcm bei 45 GWd/t verringert. Wie zuvor ist auch hier zu erwarten, dass sich durch die Verwendung der nuklearen Streudaten zur Temperatur von 600 K ein Fehler in  $k_{\text{eff}}$  von etwa der halben (negativen) Differenz  $\Delta k_{\text{eff}}$  ergibt, d. h. für das einzelne wasserreflektierte Brennelement ein Fehler um etwa -70 pcm bei frischem Brennstoff, der mit zunehmendem Abbrand bis 45 GWd/t gegen Null geht, sowie für das infinite Brennelementgitter ein gegenüber den Rechenunsicherheiten nur geringer Fehler zwischen etwa -20 pcm bei frischem Brennstoff und +30 pcm bei 45 GWd/t.

---

<sup>3</sup> Ein positiver Wert bedeutet hier, dass der errechnete Neutronenmultiplikationsfaktor für die entsprechende Benchmark-Temperatur um diesen Wert überschätzt wurde, ein negativer Wert eine entsprechende Unterschätzung des Neutronenmultiplikationsfaktors.

## 5 Weiterführende Untersuchungen

Zusätzlich zu den eigentlichen Benchmark-Resultaten wurden mit MCNP 6 weitere Untersuchungen zum besseren Verständnis der Einflüsse der Temperaturabhängigkeiten der Wirkungsquerschnitte, der nuklearen Streudaten und der Moderator-dichte auf  $k_{\text{eff}}$  vorgenommen. Diese Einflüsse wurden im Benchmark nur in der Summe betrachtet, so dass die Benchmark-Resultate insbesondere keine quantitativen Rückschlüsse auf die einzelnen Effekte erlauben.

Um hierzu Aussagen treffen zu können, wurden am Beispiel der Benchmark-Konfiguration „Single Unit“ anhand von zusätzlichen Rechnungen die Moderator-dichte, die Wirkungsquerschnitte des Moderators, die nuklearen Wasserstoff-Streudaten für den Moderator und die Wirkungsquerschnitte des Brennstoffs entsprechend ihrer jeweiligen Temperaturabhängigkeit jeweils einzeln variiert. Dabei wurde als Referenzpunkt die Benchmark-Spezifikation für die Temperatur  $T = 293$  K genutzt und davon ausgehend jeweils eine der genannten Größen entsprechend den Temperaturen 233 K, 253 K, 268 K, 273 K, 284 K, 300 K, 324 K und 350 K separat geändert und die nicht variierten Größen auf ihren Werten für  $T = 293$  K gehalten. Diese von der Benchmark-Spezifikation abweichenden Temperaturen wurden gewählt, da in der genutzten Wirkungsquerschnittsbibliothek ENDF/B-VIII.0 für diese Temperaturwerte die nuklearen Streudaten direkt vorliegen und dementsprechend für diese Größe keine Interpolation notwendig ist. Alle anderen variierten Größen wurden wie im Benchmark behandelt, d. h. die Wirkungsquerschnitte wurden in Abhängigkeit der Temperatur interpoliert und für die Moderator-dichten auf Literaturwerte /LEM 18/, /LEM 97/ zurückgegriffen. Als Aggregatzustand für den Moderator wurde dabei im Fall der Temperaturen 233 K bis inklusive 273 K Eis und für die Temperaturen ab 284 K (flüssiges) Wasser unterstellt. Die einzelnen Rechnungen wurden so durchgeführt, dass die statistischen Unsicherheiten der errechneten Neutronenmultiplikationsfaktoren jeweils um 20 pcm betragen (vergl. Kap. 3.4).

Die so erzielten Resultate sind nachfolgend in Abb. 5.1 bis Abb. 5.6 als Differenzen  $\Delta k_{\text{eff}}$  des jeweils errechneten Neutronenmultiplikationsfaktors  $k_{\text{eff}}(T)$  zum Neutronenmultiplikationsfaktor  $k_{\text{eff,ref}}$  des Referenzfalls gemäß

$$\Delta k_{\text{eff}} = k_{\text{eff}}(T) - k_{\text{eff,ref}} \quad (5.1)$$

dargestellt, wobei die Abb. 5.2, Abb. 5.4 und Abb. 5.6 lediglich detailliertere Darstellungen ( $-300 \text{ pcm} \leq \Delta k_{\text{eff}} \leq 150 \text{ pcm}$ ) der jeweils vorangegangenen Abbildungen ohne die Variation der Moderatorichte sind. Dabei geben die Datenkurven „nur Dichte variiert“ die Resultate mit separat variiertem Moderatorichte, die Datenkurven „nur Mod-XS variiert“ die Resultate mit separat variierten Wirkungsquerschnitten des Moderators, die Datenkurven „nur H-Sab variiert“ die Resultate mit separat variierten nuklearen Wasserstoff-Streudaten und die Datenkurven „nur Fuel-XS variiert“ die Resultate mit separat variierten Wirkungsquerschnitten des Brennstoffs wieder.

Mit den Differenzen sind auch deren statistische Unsicherheiten entsprechend der statistischen Unsicherheiten der einzelnen Neutronenmultiplikationsfaktoren gemäß

$$\sigma(\Delta k_{\text{eff}}) = \sqrt{\sigma(k_{\text{eff}}(T))^2 + \sigma(k_{\text{eff,ref}})^2} \quad (5.2)$$

wiedergegeben, wobei der Referenzwert bei  $T = 293 \text{ K}$  in dieser Darstellung per Definition gleich Null ist und keine Unsicherheit aufweist. Zusätzlich sind zur besseren Veranschaulichung der Datenpunktverläufe Verbindungslinien bzw. Trendgeraden eingezeichnet, die allerdings keiner detaillierten Funktionsanpassungen entstammen, d. h. z. B. die Korrelationen der Datenpunkte untereinander aufgrund des gemeinsamen Referenzwertes sind hier nicht berücksichtigt.

An den Ergebnissen fällt als erstes auf, dass die Temperaturabhängigkeit der Moderatorichte der hier dominierende Einflussfaktor auf die Temperaturabhängigkeit von  $k_{\text{eff}}$  ist. So ist insbesondere der Sprung im  $k_{\text{eff}}$  beim Wechsel des Aggregatzustandes des Moderators zwischen Wasser und Eis zu mehr als 90 % durch die Dichteänderung des Moderators gegeben. Ebenso sind die Änderungen im  $k_{\text{eff}}$  mit zunehmender Temperatur hauptsächlich durch die Dichteänderungen des Moderators bedingt.

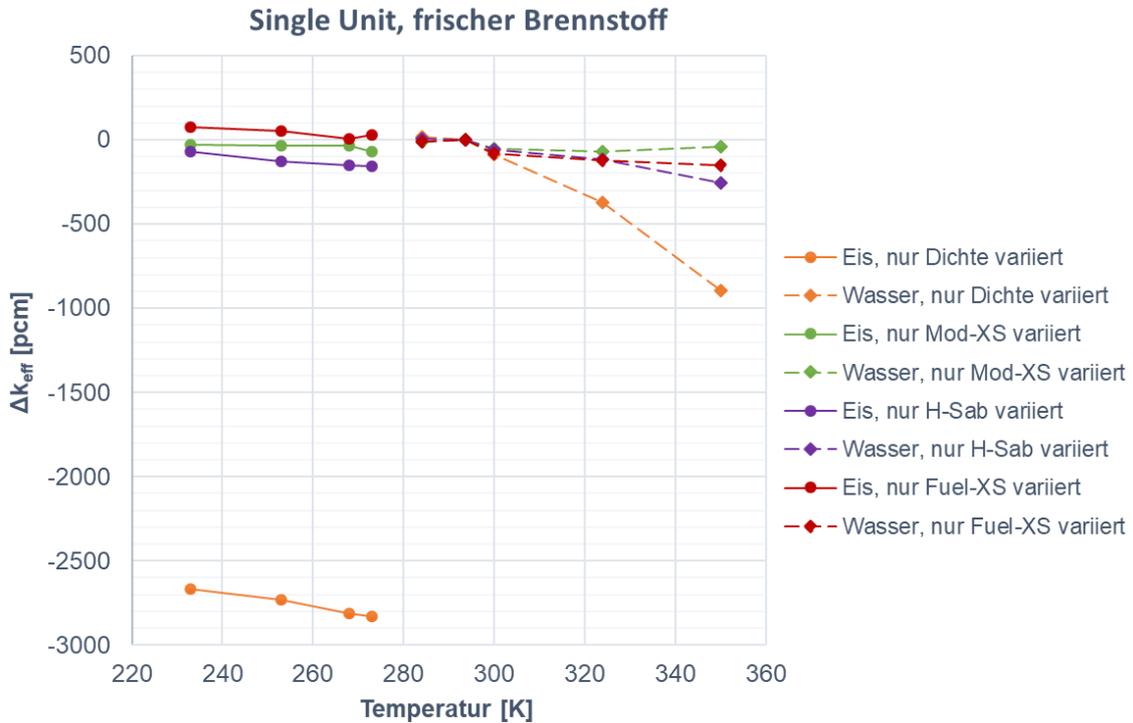
Die Temperaturabhängigkeiten der Wirkungsquerschnitte des Brennstoffs und der nuklearen Wasserstoff-Streudaten haben ebenfalls einen Einfluss auf  $k_{\text{eff}}$ . Diese Einflüsse sind oberhalb von  $0 \text{ °C}$  deutlich geringer als jener durch die Temperaturabhängigkeit der Moderatorichte, führen aber unterhalb von  $0 \text{ °C}$  zu ähnlichen temperaturabhängigen Änderungen in  $k_{\text{eff}}$ . Allerdings sind diese Änderungen in  $k_{\text{eff}}$  mit der Temperatur abhängig vom Brennstoffabbau bzw. der Brennstoffzusammensetzung und werden hier mit zunehmendem Brennstoffabbau geringer. Wie die Moderatorichte weisen beide Größen

einen bzgl. des Neutronenmultiplikationsfaktors negativen Temperaturkoeffizienten auf, d. h. mit zunehmender Temperatur führt die Änderungen in beiden Größen zu geringerem  $k_{\text{eff}}$ . Auszunehmen ist dabei auch hier der Wechsel des Aggregatzustands des Moderators von Eis nach Wasser. Hierbei führt der Wechsel der Wasserstoff-Streudaten zu einem sprunghaften Anstieg im  $k_{\text{eff}}$ . Bei frischem Brennstoff beträgt die Zunahme durch diesen Wechsel der nuklearen Streudaten für die hier betrachtete Konfiguration etwa 200 pcm und nimmt im Fall von bestrahltem Brennstoff ab, sodass sie bei einem Abbrand von 30 GWd/t bzw. 45 GWd/t hier nur noch etwa 130 pcm bzw. 80 pcm beträgt.

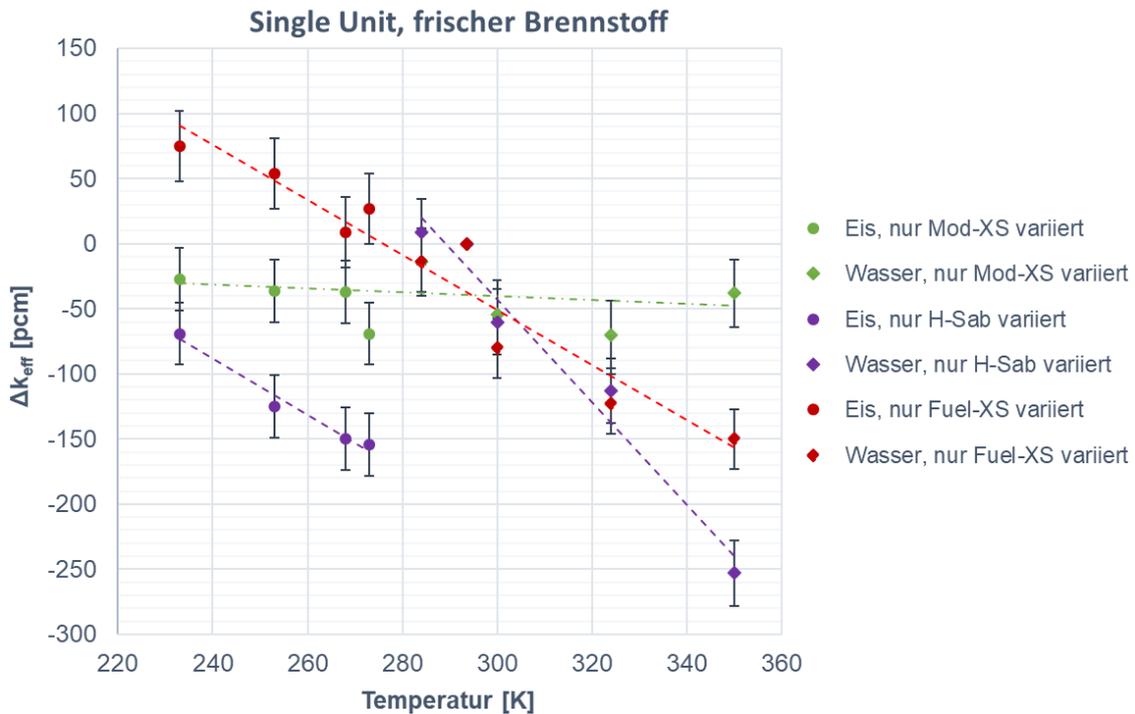
Die Temperaturabhängigkeiten der Wirkungsquerschnitte des Moderators, also der Wirkungsquerschnitte von Wasserstoff und Sauerstoff, zeigen dagegen keinen signifikanten Einfluss auf die Temperaturabhängigkeit von  $k_{\text{eff}}$ , d. h. es liegt in diesem Fall kein offensichtlicher temperaturabhängiger Trend im  $k_{\text{eff}}$  vor. Die Fluktuationen der einzelnen Datenpunkte wie auch die insbesondere im Fall des frischen Brennstoffs vermeintlich zu beobachtende systematische Abweichung der übrigen Datenpunkte zum Referenzwert bei  $T = 293 \text{ K}$  übersteigen augenscheinlich die statistischen Unsicherheiten der Datenpunkte bzw. die statistischen Fluktuation des als Referenzwert verwendeten Neutronenmultiplikationsfaktors. Eine detaillierte statistische Analyse wurde hierzu allerdings nicht durchgeführt.

Aus kritikalitätssicherheitstechnischer Sicht zeigen diese Resultate, dass neben anderen Einflussfaktoren die Temperaturabhängigkeit der Wirkungsquerschnitte des Brennstoffs und der nuklearen Wasserstoff-Streudaten zu Erhöhungen des Neutronenmultiplikationsfaktors führen können. Daher sind diese Einflussfaktoren in Kritikalitätssicherheitsanalysen zu berücksichtigen, um konservative Resultate und Aussagen zu erzielen. Dies gilt vor allem bei geringen Temperaturen, z. B. Raumtemperatur oder darunter. Der Sprung in  $k_{\text{eff}}$  beim Übergang des Aggregatzustands zwischen Wasser und Eis deutet an, dass eine Verwendung der für flüssiges Wasser nahe dem Gefrierpunkt gültigen nuklearen Wasserstoff-Streudaten anstelle der für Eis gültigen Streudaten ggf. konservativ sein kann. Allerdings belegen die hier erzielten Resultate wie auch die Fehlerabschätzung in Kap. 4.2.2, dass sowohl der Sprung in  $k_{\text{eff}}$  beim Wechsel des Aggregatzustands wie auch die Änderungen in  $k_{\text{eff}}$  mit der Temperatur merklich vom jeweils betrachteten System abhängen. Mit den bisherigen Untersuchungen ist nicht auszuschließen, dass für bestimmte Systeme, z. B. übermoderierte Systeme, der Sprung in  $k_{\text{eff}}$  oder die temperaturbedingten Änderungen in  $k_{\text{eff}}$  in die andere Richtung gehen könnte. In solchen Fällen wäre dann eine solche Ersetzung der nuklearen Streudaten nicht mehr konservativ. Eine allgemeingültige Aussage lässt sich an dieser Stelle dazu

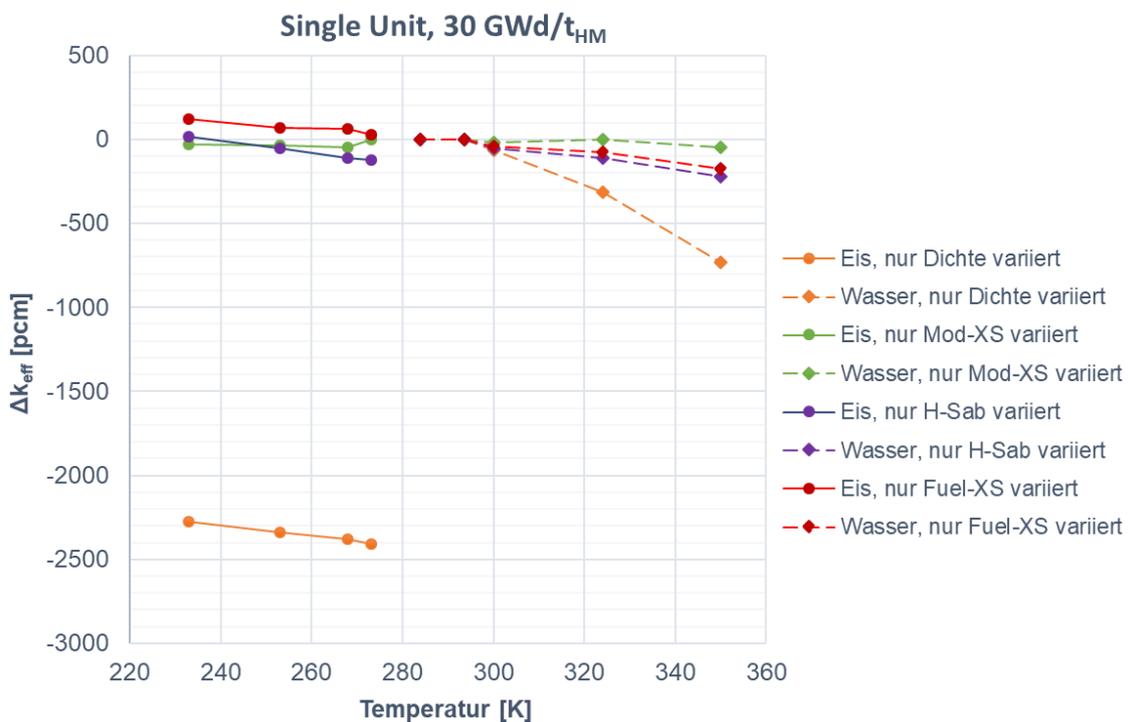
nicht treffen. Allerdings ist mit Blick auf die Tatsache, dass nicht jede Wirkungsquerschnittsbibliothek solche nuklearen Streudaten beinhaltet, eine genaue Prüfung des jeweiligen Systems dringend zu empfehlen, bevor die nuklearen Streudaten für Eis ersetzt werden.



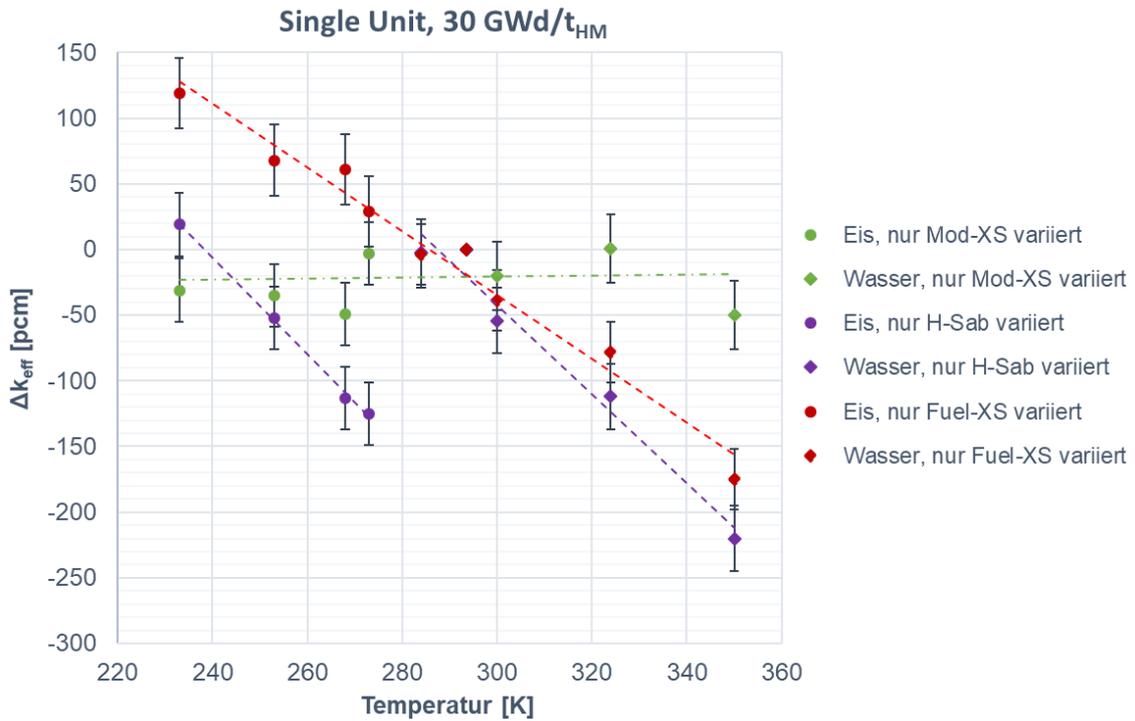
**Abb. 5.1** Variation des Neutronenmultiplikationsfaktors aufgrund der Temperaturabhängigkeit einzelner variiertes Einflussgrößen



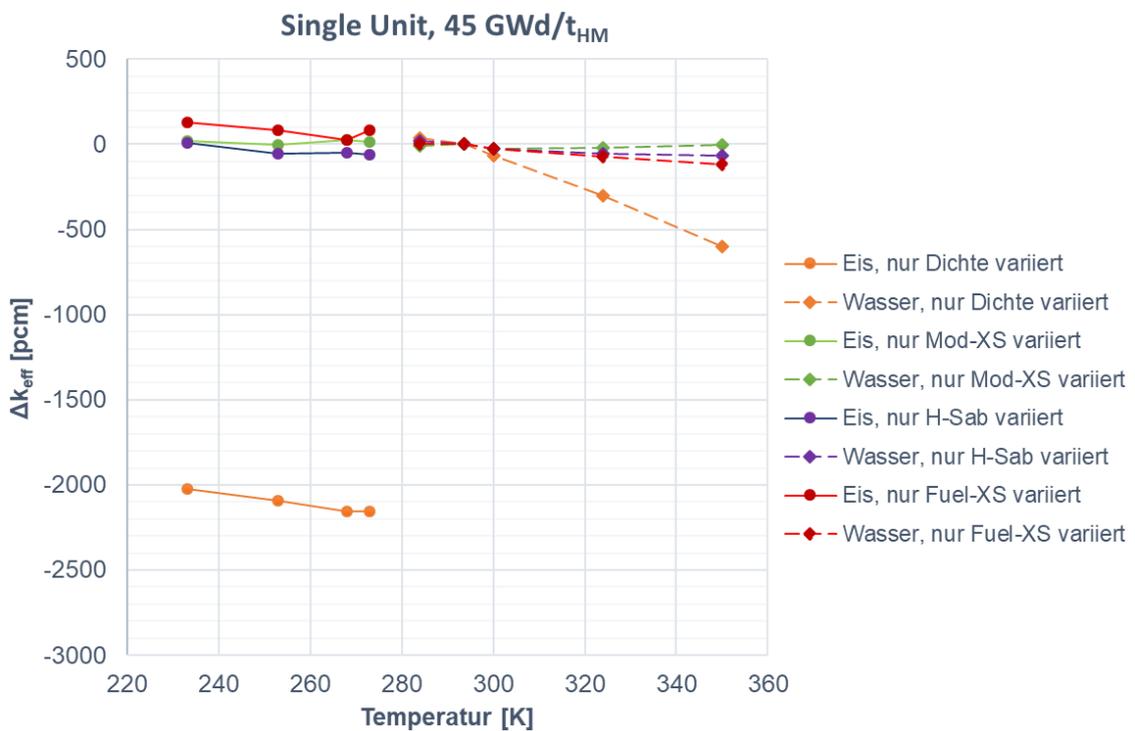
**Abb. 5.2** Variation des Neutronenmultiplikationsfaktors aufgrund der Temperaturabhängigkeit einzelner variiertes Einflussgrößen



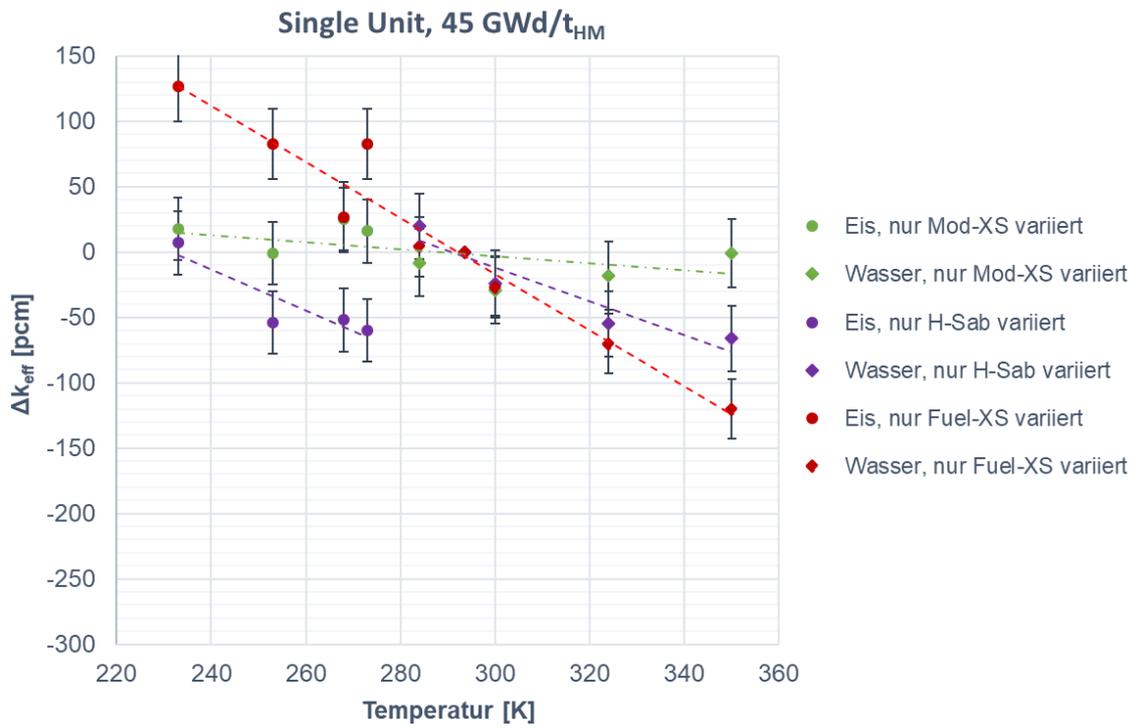
**Abb. 5.3** Variation des Neutronenmultiplikationsfaktors aufgrund der Temperaturabhängigkeit einzelner variiertes Einflussgrößen



**Abb. 5.4** Variation des Neutronenmultiplikationsfaktors aufgrund der Temperaturabhängigkeit einzelner variiertes Einflussgrößen



**Abb. 5.5** Variation des Neutronenmultiplikationsfaktors aufgrund der Temperaturabhängigkeit einzelner variiertes Einflussgrößen



**Abb. 5.6** Variation des Neutronenmultiplikationsfaktors aufgrund der Temperaturabhängigkeit einzelner variiertes Einflussgrößen



## 6 Zusammenfassung

Im vorliegenden Bericht wurde der Beitrag der GRS zum Benchmark der WPNCS der OECD-NEA zur Temperaturabhängigkeit des Neutronenmultiplikationsfaktors von DWR-Brennelementen zusammengefasst und diskutiert. Der konkrete Vergleich der errechneten Neutronenmultiplikationsfaktoren  $k_{\text{eff}}$  zeigt, dass bei Verwendung der Wirkungsquerschnittsbibliothek ENDF/B-VIII.0 alle drei verwendeten Transportcodes zumeist vergleichbare  $k_{\text{eff}}$ -Werte ermitteln, die in der Regel innerhalb der statistischen Unsicherheiten miteinander kompatibel sind. Für das unendliche Brennelementgitter („Infinite Array“) sind insgesamt etwas größere Differenzen im  $k_{\text{eff}}$  der verschiedenen Rechnungen als für das einzelne Brennelement („Single Unit“) zu beobachten, wobei auch dort die Mehrheit der Differenzen mit den statistischen Unsicherheiten vereinbar sind. Die jeweiligen  $k_{\text{eff}}$ -Werte unterschieden sich um bis zu etwa 200 pcm (Konfiguration „Single Unit“) bzw. etwa 300 pcm (Konfiguration „Infinite Array“) und entsprechen damit etwa den Unterschieden, die auch in anderen Arbeiten beim Einsatz unterschiedlicher Rechencodes zu beobachten sind. Dementsprechend können wesentliche Diskrepanzen in den Simulationen der berücksichtigten Temperaturabhängigkeiten der einzelnen Rechencodes ausgeschlossen werden. Mögliche geringe Unterschiede in den Simulationen der Temperaturabhängigkeiten, die Auswirkungen auf  $k_{\text{eff}}$  in der Größenordnung von 100 pcm haben, lassen sich mit den vorliegenden Benchmark-Resultaten allerdings nicht ausschließen.

Der Vergleich der mit SCALE und den verschiedenen ENDF/B-VII.1-Bibliotheken errechneten Neutronenmultiplikationsfaktoren zu den mit MCNP und der Bibliothek ENDF/B-VIII.0 errechneten Werten zeigt insbesondere für das unendliche Brennelementgitter mit bis zu etwa  $\pm 550$  pcm vergleichsweise große Differenzen. Dementsprechend übersteigen diese Differenzen die statistischen Unsicherheiten zumeist erheblich und sind zudem insgesamt deutlich größer als die Unterschiede, die die Resultate der Rechnungen mit den verschiedenen Transportcodes und ENDF/B-VIII.0 untereinander aufweisen. Die Ursache für diese großen Differenzen ist augenscheinlich in Unterschieden zwischen den Wirkungsquerschnitten der Bibliotheken ENDF/B-VII.1 und ENDF/B-VIII.0 sowie in den unterschiedlichen Darstellungen der Energieabhängigkeit der Wirkungsquerschnitte begründet.

Zudem deutet sich hier eine gewisse Temperaturabhängigkeit in den Differenzen zwischen den SCALE- und MCNP-Resultaten an, die verstärkt für die mit ENDF/B-VII.1 errechneten SCALE-Resultate, zum Teil auch für die mit ENDF/B-VIII.0 errechneten

Werte zu beobachten ist. Eine mögliche Erklärung ist, dass eine oder ggf. mehrere der Temperaturabhängigkeiten der betrachteten Einflussgrößen in beiden Rechencodes unterschiedlich wiedergegeben werden. Eine konkrete Recherche oder Analyse wurde an dieser Stelle allerdings nicht durchgeführt, und die vorliegenden Benchmark-Resultate lassen hier keine weiteren Schlussfolgerungen zu.

Die zusätzlich zum Benchmark durchgeführten Arbeiten zeigen, dass die Temperaturabhängigkeit der Moderatorichte der hier dominierende Einflussfaktor für die Temperaturabhängigkeit von  $k_{\text{eff}}$  ist. Insbesondere der Sprung in  $k_{\text{eff}}$  beim Wechsel des Moderators von Eis zu Wasser ist zu mehr als 90 % durch die Dichteänderung des Moderators gegeben. Ebenso sind die Änderungen im  $k_{\text{eff}}$  mit zunehmender Temperatur ab 0°C hauptsächlich durch die Dichteänderungen des Moderators bedingt, wohingegen der Einfluss der Temperaturabhängigkeiten der Wirkungsquerschnitte des Brennstoffs und der nuklearen Wasserstoff-Streudaten auf  $k_{\text{eff}}$  dort deutlich geringer ist. Für Temperaturen unter 0°C führen dagegen die Temperaturabhängigkeiten aller drei Einflussfaktoren zu ähnlich großen temperaturabhängigen Änderungen in  $k_{\text{eff}}$ . Auch im Fall der Wirkungsquerschnitte des Brennstoffs und der nuklearen Wasserstoff-Streudaten führt eine zunehmende Temperatur zu einem geringeren  $k_{\text{eff}}$ . Auszunehmen ist dabei ebenfalls der Wechsel des Moderators von Eis nach Wasser, da hierbei der Wechsel der Wasserstoff-Streudaten ebenfalls zu einem sprunghaften, aber vergleichsweise kleinen Anstieg im  $k_{\text{eff}}$  führt. Die Temperaturabhängigkeiten der Wirkungsquerschnitte des Moderators zeigen dagegen keinen signifikanten Einfluss auf  $k_{\text{eff}}$ .

Für Kritikalitätssicherheitsanalysen bedeuten diese Resultate, dass die Temperaturabhängigkeit der Wirkungsquerschnitte des Brennstoffs und die Temperaturabhängigkeit der nuklearen Wasserstoff-Streudaten insbesondere bei Raumtemperatur und darunter zu berücksichtigen sind, um konservative Resultate und Aussagen zu erzielen. Auch die nuklearen Streudaten für in Eis gebundenen Wasserstoff zeigen einen temperaturabhängigen Einfluss auf  $k_{\text{eff}}$ , durch den  $k_{\text{eff}}$  mit abnehmender Temperatur weiter ansteigen kann. Somit sind auch mögliche Änderungen in den Aggregatzuständen der Materialien in Kritikalitätssicherheitsanalysen für das Erzielen von konservativen Resultaten und Aussagen zu berücksichtigen.

## Literaturverzeichnis

- /BRO 18/ Brown, D. A., Chadwick, M. B., Capote, R., Kahler, A. C., Trkov, A., Herman, M. W., Sonzogni, A. A., Danon, Y., Carlson, A. D., Dunn, M., Smith, D. L., Hale, G. M., Arbanas, G., Arcilla, R., et al.: ENDF/B-VIII.0, The 8 th Major Release of the Nuclear Reaction Data Library with CIELO-project Cross Sections, New Standards and Thermal Scattering Data. Nuclear Data Sheets, Bd. 148, S. 1–142, DOI 10.1016/j.nds.2018.02.001, 2018.
- /GAN 18/ Gan, S., Wilson, A. R.: Benchmark Specification: The effect of temperature on the neutron multiplication factor for PWR fuel assemblies. OECD/NEA Working Party on Nuclear Criticality Safety, Subgroup 3, September 2018.
- /IAEA 18/ International Atomic Energy Agency (IAEA): Regulations for the Safe Transport of Radioactive Material. SSR-6 (1. Rev.):2018, 190 S., International Atomic Energy Agency (IAEA): Wien, 2018.
- /LEM 97/ Lemmon, E. W., McLinden, M. O., Friend, D. G.: Thermophysical Properties of Fluid Systems. In: Linstrom, P. J., Mallard, W. G. (Hrsg.): NIST Chemistry WebBook, NIST Standard Reference Database 69. National Institute of Standards and Technology, DOI 10.18434/T4D303: Gaithersburg, MD, USA, 1997.
- /LEM 18/ Lemmon, E. W., McLinden, M. O., Friend, D. G.: NIST Chemistry WebBook, NIST Standard Reference Database 69, Thermophysical Properties of Fluid Systems. Hrsg.: Linstrom, P. J., Mallard, W. G., National Institute of Standards and Technology: Gaithersburg, MD, USA, Stand vom Oktober 2018, erreichbar unter <https://webbook.nist.gov/chemistry/fluid/>, 2018.
- /PEL 13/ Pelowitz, D. B.: MCNP6 User's Manual, Version 1.0, Manual Rev. 0. Los Alamos National Laboratory, LA-CP-13-00634, Rev. 0, 765 S., Mai 2013.
- /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.

- /ROM 15/ Romano, P. K., Horelik, N. E., Herman, B. R., Nelson, A. G., Forget, B., Smith, K.: OpenMC, A state-of-the-art Monte Carlo code for research and development. *Annals of Nuclear Energy*, Bd. 82, S. 90–97, DOI 10.1016/j.anucene.2014.07.048, 2015.
- /WAR 19/ Ware, T., Hanlon, D.: Research into the Effect of Temperature on the Criticality Safety of Fissile Systems. Wood Nuclear Limited, 203171-AA-0022, ONR352, Rev. 2, 174 S.: Warrington, Cheshire, UK, März 2019.
- /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.

## Abbildungsverzeichnis

|          |   |    |
|----------|---|----|
| Abb. 2.1 | Schematische Darstellung der Konfiguration „Single Unit“ mit Brennelement und Wasserreflektor /GAN 18/ .....  | 8  |
| Abb. 2.2 | Schematische Darstellung der Querschnitte der Brennstab- und Steuerstabführungsrohreinheitszelle /GAN 18/ .....   | 8  |
| Abb. 4.1 | Grafische Darstellung der Neutronenmultiplikationsfaktoren $k_{\text{eff}}$ für die Konfiguration „Single Unit“ (eingereichte Resultate) .....                                  | 25 |
| Abb. 4.2 | Grafische Darstellung der Neutronenmultiplikationsfaktoren $k_{\text{eff}}$ für die Konfiguration „Infinite Array“ (eingereichte Resultate) .....                               | 26 |
| Abb. 4.3 | Differenzen der errechneten Neutronenmultiplikationsfaktoren gegenüber den MCNP 6-Resultaten für die Konfiguration „Single Unit“ .....  | 27 |
| Abb. 4.4 | Differenzen der errechneten Neutronenmultiplikationsfaktoren gegenüber den MCNP 6-Resultaten für die Konfiguration „Infinite Array“ .....                                       | 28 |
| Abb. 4.5 | Differenz im Neutronenmultiplikationsfaktor der MCNP 6-Nachrechnungen bei Verwendung der nuklearen Streudaten für freien $^{16}\text{O}$ und $^{16}\text{O}$ in Eis .....       | 30 |
| Abb. 4.6 | Differenz im Neutronenmultiplikationsfaktor der MCNP 6-Nachrechnungen zwischen der Verwendung nuklearer Streudaten zur nächst kleineren und der nächst höheren Temperatur ..... | 31 |
| Abb. 5.1 | Variation des Neutronenmultiplikationsfaktors aufgrund der Temperaturabhängigkeit einzelner variiertes Einflussgrößen .....   | 36 |
| Abb. 5.2 | Variation des Neutronenmultiplikationsfaktors aufgrund der Temperaturabhängigkeit einzelner variiertes Einflussgrößen .....   | 37 |
| Abb. 5.3 | Variation des Neutronenmultiplikationsfaktors aufgrund der Temperaturabhängigkeit einzelner variiertes Einflussgrößen .....   | 37 |
| Abb. 5.4 | Variation des Neutronenmultiplikationsfaktors aufgrund der Temperaturabhängigkeit einzelner variiertes Einflussgrößen .....   | 38 |
| Abb. 5.5 | Variation des Neutronenmultiplikationsfaktors aufgrund der Temperaturabhängigkeit einzelner variiertes Einflussgrößen .....   | 38 |
| Abb. 5.6 | Variation des Neutronenmultiplikationsfaktors aufgrund der Temperaturabhängigkeit einzelner variiertes Einflussgrößen .....   | 39 |



## Tabellenverzeichnis

|          |   |    |
|----------|---|----|
| Tab. 2.1 | Geometrische Abmessungen der Brennstab- und Steuerstabführungsrohreinheitszelle /GAN 18/ .....                          | 9  |
| Tab. 2.2 | Zusammensetzungen des frischen und bestrahlten Brennstoffs /GAN 18/.....  | 10 |
| Tab. 2.3 | Temperatur und Dichte des Moderators /GAN 18/ .....   | 11 |
| Tab. 3.1 | Mischungsverhältnisse der Wirkungsquerschnittsbibliotheken in den Materialdefinitionen.....                             | 15 |
| Tab. 4.1 | Neutronenmultiplikationsfaktoren $k_{\text{eff}}$ für die Konfiguration „Single Unit“ (eingereichte Resultate) .....    | 23 |
| Tab. 4.2 | Neutronenmultiplikationsfaktoren $k_{\text{eff}}$ für die Konfiguration „Infinite Array“ (eingereichte Resultate) ..... | 24 |

**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](http://www.grs.de)

**ISBN 978-3-947685-28-8**