

**Analysen und Ergebnisse  
zum OECD/NEA  
WPNCS EGUNF  
Benchmark Phase II**



Gesellschaft für Anlagen-  
und Reaktorsicherheit  
(GRS) gGmbH

**Analysen und Ergebnisse  
zum OECD/NEA  
WPNCs EGUNF  
Benchmark Phase II**

Technischer Bericht

Volker Hannstein  
Fabian Sommer

Mai 2017

**Anmerkung:**

Das diesem Bericht zugrunde liegende F&E-Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz, Bau und Reaktorsicherheit (BMUB) unter dem Kennzeichen 3614R03341 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 - 475  
ISBN 978-3-946607-58-8**

**Deskriptoren**

Abbrandberechnung, Abbrandkredit, Nuklidinventar, OECD/NEA, Rechenbenchmark, Siedewasserreaktor

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung und Zielsetzung .....</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Benchmark Spezifikationen .....</b>	<b>5</b>
2.1	Geometrie.....	5
2.2	Materialien .....	6
2.3	Abbrandbedingungen .....	7
2.4	Angeforderte Daten .....	8
<b>3</b>	<b>Programmspezifische Einstellungen und Untersuchungen .....</b>	<b>13</b>
3.1	HELIOS .....	13
3.2	TRITON .....	14
3.3	POLARIS.....	15
3.4	KENOREST .....	16
3.5	SERPENT.....	17
3.6	MOTIVE.....	17
<b>4</b>	<b>Vergleich: Multiplikationsfaktor <math>k_{\text{eff}}</math> .....</b>	<b>19</b>
4.1	HELIOS .....	19
4.2	SCALE.....	20
4.3	KENOREST .....	22
4.4	Vergleich aller Programme .....	23
<b>5</b>	<b>Vergleich: Abbrand des gadoliniumhaltigen Brennstabes .....</b>	<b>25</b>
<b>6</b>	<b>Vergleich: Isotopenzusammensetzung .....</b>	<b>27</b>
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung .....</b>	<b>31</b>

<b>Literaturverzeichnis.....</b>	<b>33</b>
<b>Abbildungsverzeichnis .....</b>	<b>35</b>
<b>Tabellenverzeichnis.....</b>	<b>37</b>
<b>Abkürzungen .....</b>	<b>39</b>

# 1 Einleitung und Zielsetzung

Im Folgenden werden die Untersuchungen und Ergebnisse zusammengestellt, die im Zuge des Phase II Benchmarks der Expert Group of Used Nuclear Fuel (EGUNF) der Working Party of Nuclear Criticality Safety (WPNCS) der Nuclear Energy Agency (NEA) der Organisation for Economic Co-operation and Development (OECD) durchgeführt wurden /OEC 16/. Das Rechenmodell des hier diskutierten Benchmarks baut auf dem Phase III-C Benchmark der Expert Group on Burn-up Credit Criticality Safety (BUC) der WPNCS auf /SUY 16/. Die im Benchmark spezifizierten Untersuchungen wurden in vollem Umfang durchgeführt. Die Arbeiten wurden im Rahmen des BMUB-Vorhabens 3614R03341 durchgeführt dessen Ergebnisse in /BEH 17/ dokumentiert sind. Der vorliegende Bericht ist als Ergänzung zu diesem zu sehen.

Ziel dieses Benchmarks ist der Vergleich von Abbrandrechnungen eines generischen Brennelements (BE) aus einem Siedewasserreaktor (SWR) mit gadoliniumhaltigen Brennstäben (BS) mit mehreren Computercodes und Querschnittsbibliotheken durch verschiedene internationale Arbeitsgruppen und Institutionen. Dabei liegt der Fokus auf dem Abbrand von Gadolinium bei geringen Gesamtabbränden und seinem Einfluss auf die Kritikalität des Gesamtsystems. Das verwendete Rechenmodell erlaubt die Bewertung der Genauigkeit, mit der die Inventare der gadoliniumhaltigen BS berechnet werden, um deren Einfluss auf SWR-Abbrandkredit Berechnungen zu ermitteln.

Brennelemente für Siedewasserreaktoren besitzen zum einen sehr heterogene Anreicherungen (verschiedene BS in einem BE), Symmetrien (Wasserkanäle innerhalb und außerhalb der BS Matrix (rund, eckig, flügelartig), separierende Strukturen) und teillange Brennstäbe. Zum anderen sind sie axial und radial stark heterogenen Spektralverhältnissen aufgrund des von unten nach oben ansteigenden Dampfblasengehalts (DBG) und den Einsatz von Wasserkanälen und Steuerkreuzen ausgesetzt. Zusätzlich finden in solchen Brennelementen meist gadoliniumhaltige Brennstäbe Verwendung, die aufgrund der großen Selbstabschirmung von Gadolinium eine spezielle und aufwendigere Modellierung erfordern. Ein Ansatz ist die in diesem Benchmark verwendete Modellierung der gadoliniumhaltigen BS mit einer höheren örtlichen Auflösung durch Ringzonen der gadoliniumhaltigen BS. Der Benchmark ist so angelegt, dass Freiheiten der Modellierung möglichst weitgehend eingeschränkt werden, um den Einfluss von für den Gadoliniumabbrand relevanten Programmmethoden und -daten zu isolieren.

Für den internationalen Vergleich wurden insgesamt Rechnungen mit acht Programmen, Sequenzen aus Programmen, bzw. Wirkungsquerschnittsbibliotheken eingereicht. Zusätzlich wurde mit einem Teil dieser Programme zahlreiche weitere Bibliotheken, Geometrievarianten und Optionen untersucht. Dieser ausführliche Vergleich mit zahlreichen Abbrandprogrammen und Optionen führte zu einem außerordentlich guten Überblick über die Stärken und Schwächen der einzelnen Programme. Die eingesetzten Programme umfassten dabei TRITON aus SCALE 6.1.2 /SCA 11/ und SCALE 6.2.1 /SCA 16/ und Polaris aus SCALE 6.2.1, das Programm HELIOS 1.12 von Studsvik /CAS 91/ und den Monte-Carlo-basierten Abbrandcode Serpent 2.1.24 /LEP 15/ von VTT. Außerdem die internen Programme KENOREST /HES 99/ und MOTIVE /HAN 17/ in Version 0.4.1. In Tab. 1.1 sind alle gerechneten Programme, verwendeten Bibliotheken und Optionen aufgeführt. Zusätzlich ist die ungefähre Rechenzeit für die längste Rechnung jedes Codes angegeben. Für die Rechenzeit sind dabei jeweils die Zeiten für serielle Rechnungen angegeben. Da einige Codes die Möglichkeit zur parallelen Abarbeitung des Problems bieten, sind für diese die Zeiten entsprechend umgerechnet. Spezifika zu den verwendeten Programmen, Bibliotheken und Optionen sind in Kapitel 3 für die einzelnen Programme individuell erläutert.

**Tab. 1.1** Übersicht über alle gerechneten Programme, Bibliotheken, Optionen und Rechenzeiten

Programm Paket	Programm	Bibliothek: fast alle ENDF/B	Flusslöser	Dauer	Kommentar
	HELIOS	v6_190g_corr	CCCP	5 min	4 Geometrievarianten, 5 Kopplungsparameter
SCALE 6.1.2	TRITON	v5_44g	newt	1 d	
		v5_238g	newt	3.5 d	
		v6_238g	newt	3.5 d	
		v7.0_238g	newt	3.5 d	
SCALE 6.2.1	TRITON	v7.1_56g	newt	18 h	
		v7.0_238g	newt	18 h	
		v7.1_252 g	newt	1.5 d	
		v7.1_252g	newt	3 d	addnux = 4
		v7.1_252g	newt	2.5 d	ohne Dancoff Faktor
		v7.0_ce	KENO VI	17 d	
SCALE 6.2.1	POLARIS	v7.1_252g	MoC	24 h	einige besondere geometrische Änderungen
	KENOREST	ENDF/B-VII ange- passt	MC	7 h	
		JEF-2.2-basiert	MC	7 h	

		JENDL-4.0 angepasst	MC	7 h	
	SERPENT	ENDF/B-VII.0 CE	MC	26 h	Fähigkeit zur Parallelrechnung
	MOTIVE	ENDF/B-VII.1 CE	KENO VI	12 d	Fähigkeit zur Parallelrechnung

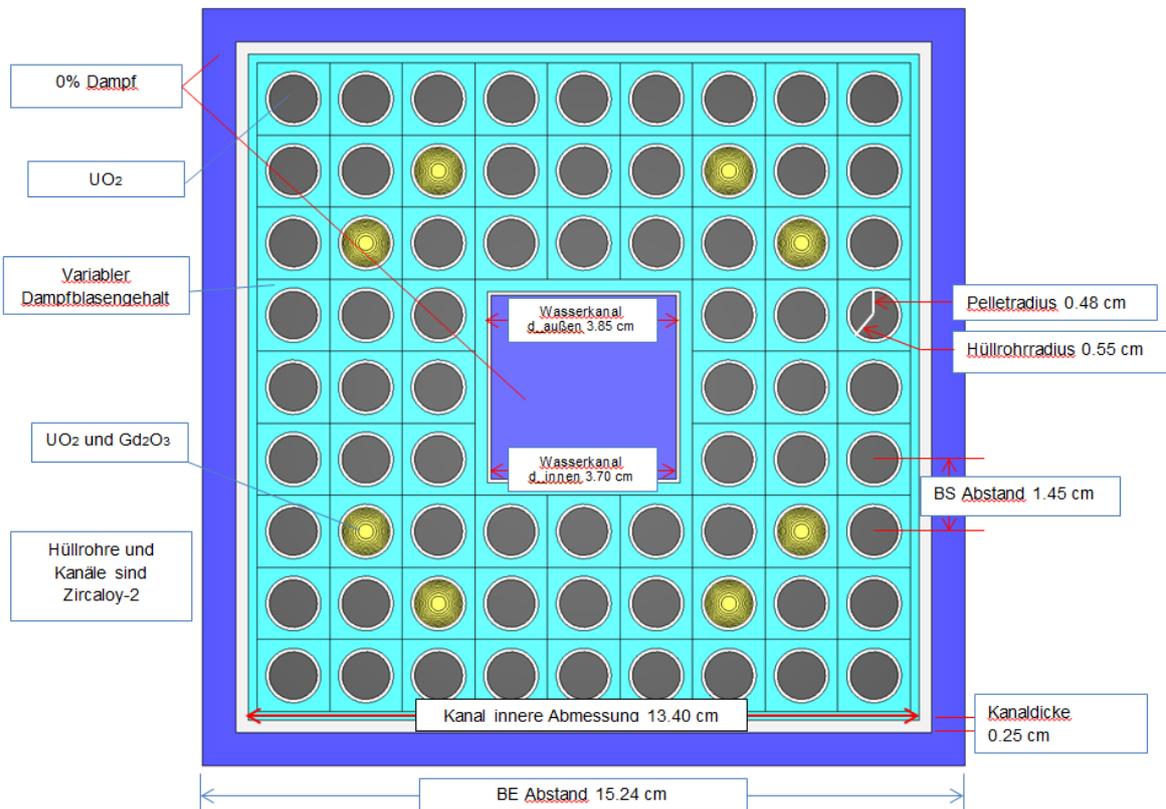


## 2 Benchmark Spezifikationen

Das BE Modell für diesen EGUNF Benchmark Phase II wurde mit einigen Vereinfachungen aus dem BUC Phase III-C Benchmark übernommen. Die genaue Spezifikation des Benchmarks ist in Referenz /OEC 16/ zu finden und wird im Folgenden erneut wiedergegeben.

### 2.1 Geometrie

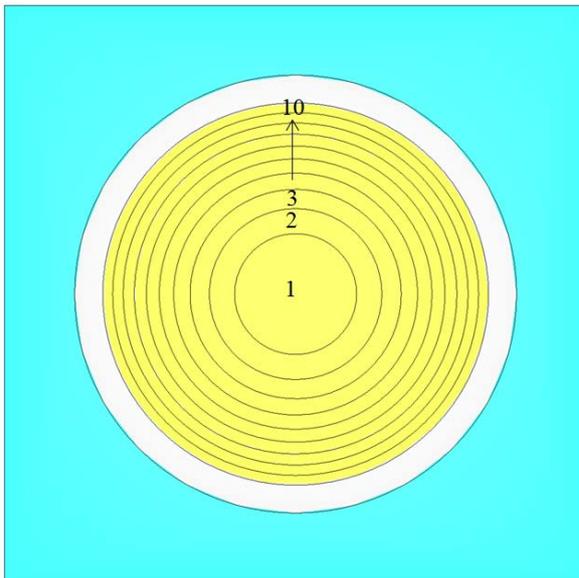
Die Geometrie des betrachteten Brennelements ist in Abb. 2.1 gezeigt.



**Abb. 2.1** 2D Geometrie des Brennelements

Das BE besteht aus einem 9x9 BS-Gitter mit einem gleichmäßigen BS-Abstand von 1,45 cm und reflektierenden Randbedingungen. Die inneren 9 BS sind durch einen Wasserkanal ohne Dampfblasengehalt ersetzt. Um die Modellierungsfreiheit zu verringern wird in diesem Benchmark vorgegeben, dass die acht gadoliniumhaltigen BS mit 10 konzentrischen Ringzonen gleicher Fläche modelliert werden sollen, die von innen nach außen nummeriert werden und deren Nuklidinventare über den Abbrand separat

verfolgt werden sollen. Die Aufteilung eines gadoliniumhaltigen Stabes und die Angabe der Radien der Ringzonen ist in Abb. 2.2 gezeigt.



Ringnummer	Radius [cm]
1	0.151789
2	0.214663
3	0.262907
4	0.303579
5	0.339411
6	0.371806
7	0.401597
8	0.429325
9	0.455368
10	0.48

**Abb. 2.2** Gadoliniumhaltiger Stab mit Radien der 10 Ringzonen

## 2.2 Materialien

Alle Brennstäbe haben eine Anreicherung von 4,0 Gew%  $^{235}\text{U}$ . Die Kernzahldichten für alle Materialien finden sich in Tab. 2.1 und Tab. 2.2.

**Tab. 2.1** Kernzahldichten von Brennstoff und Absorber

Material	Isotop/Element	Kernzahldichte (atoms/b-cm)
$\text{UO}_2$	$^{234}\text{U}$	$8.4700 \times 10^{-6}$
	$^{235}\text{U}$	$9.4763 \times 10^{-4}$
	$^{238}\text{U}$	$2.2447 \times 10^{-2}$
	O	$4.6807 \times 10^{-2}$
$\text{UO}_2 + \text{Gd}_2\text{O}_3$	$^{234}\text{U}$	$6.8396 \times 10^{-6}$
	$^{235}\text{U}$	$7.6521 \times 10^{-4}$
	$^{238}\text{U}$	$2.1460 \times 10^{-2}$
	O	$4.6225 \times 10^{-2}$
	$^{154}\text{Gd}$	$2.5654 \times 10^{-5}$
	$^{155}\text{Gd}$	$1.7417 \times 10^{-4}$
	$^{156}\text{Gd}$	$2.4089 \times 10^{-4}$
	$^{157}\text{Gd}$	$1.8417 \times 10^{-4}$
	$^{158}\text{Gd}$	$2.9232 \times 10^{-4}$
$^{160}\text{Gd}$	$2.5725 \times 10^{-4}$	

**Tab. 2.2** Kernzahldichten von Wasser und Zircaloy

Material	Element	Kernzahldichte (atoms/b-cm)
0% DBG Wasser	H	$4.3417 \times 10^{-2}$
	O	$2.1708 \times 10^{-2}$
40% DBG Wasser	H	$2.7998 \times 10^{-2}$
	O	$1.3999 \times 10^{-2}$
70% DBG Wasser	H	$1.6434 \times 10^{-2}$
	O	$8.2170 \times 10^{-3}$
Zircaloy-2	Sn	$4.9797 \times 10^{-4}$
	Fe	$9.1782 \times 10^{-5}$
	Cr	$7.5861 \times 10^{-5}$
	Ni	$4.0314 \times 10^{-5}$
	Zr	$4.2465 \times 10^{-2}$

Der Brennstoff besitzt eine Temperatur von 900 K. Alle anderen Materialien werden mit 600 K gerechnet, einem Wert, der in vielen Querschnittsbibliotheken mit kontinuierlichem Spektrum („continuous energy“, CE) enthalten ist. Da einigen Monte-Carlo Codes die Möglichkeit fehlt Wirkungsquerschnitte zwischen verschiedenen Temperaturen zu interpolieren, dient diese Festlegung dazu unerwünschte Modellierungsunterschiede auszuschließen. Allerdings liegt dieser Wert etwa 40 K über typischen SWR Kühlwassertemperaturen und entspricht bei gegebener Kühlmitteldichte einem Druck von 123 bar im Gegensatz zu etwa 70 bar in realen SWRs. Die Benchmark Spezifikation definiert somit einen an sich unphysikalischen Arbeitspunkt des Reaktors. Es werden drei Dampfblasengehalte von 0 %, 40 % und 70 % betrachtet, wobei die Kernzahldichten aus Tab. 2.2 verwendet werden.

### 2.3 Abbrandbedingungen

Die brennelementgemittelte spezifische Leistung beträgt 25,0 MW/tSM (Megawatt pro Tonne Schwermetall). Das BE wird über einen einzigen Zyklus von insgesamt 20 GWd/tSM (Gigawatt-Tage pro Tonne Schwermetall) ohne Stillstandzeiten mit 61 festgelegten Abbrandschritten abgebrannt. Nach den ersten zwei Schritten mit 0,1 und 0,15 GWd/tSM folgen bis zu einem Gesamtabbrand von 10 GWd/tSM 39 Schritte mit je 0,25 GWd/tSM gefolgt von 20 Schritten mit je 0,5 GWd/tSM bis 20 GWd/tSM. Die Einteilung der Abbrandschritte ist in Tab. 2.3 wiedergegeben.

**Tab. 2.3** Abbrandschritte

Schritt	Dauer	Kumulativer Abbrand	Schritt	Dauer	Kumulativer Abbrand
#	[GWd/tSM]	[GWd/tSM]	#	[GWd/tSM]	[GWd/tSM]
1	0.10	0.10	32	0.25	7.75
2	0.15	0.25	33	0.25	8.00
3	0.25	0.50	34	0.25	8.25
4	0.25	0.75	35	0.25	8.50
5	0.25	1.00	36	0.25	8.75
6	0.25	1.25	37	0.25	9.00
7	0.25	1.50	38	0.25	9.25
8	0.25	1.75	39	0.25	9.50
9	0.25	2.00	40	0.25	9.75
10	0.25	2.25	41	0.25	10.0
11	0.25	2.50	42	0.5	10.5
12	0.25	2.75	43	0.5	11.0
13	0.25	3.00	44	0.5	11.5
14	0.25	3.25	45	0.5	12.0
15	0.25	3.50	46	0.5	12.5
16	0.25	3.75	47	0.5	13.0
17	0.25	4.00	48	0.5	13.5
18	0.25	4.25	49	0.5	14.0
19	0.25	4.50	50	0.5	14.5
20	0.25	4.75	51	0.5	15.0
21	0.25	5.00	52	0.5	15.5
22	0.25	5.25	53	0.5	16.0
23	0.25	5.50	54	0.5	16.5
24	0.25	5.75	55	0.5	17.0
25	0.25	6.00	56	0.5	17.5
26	0.25	6.25	57	0.5	18.0
27	0.25	6.50	58	0.5	18.5
28	0.25	6.75	59	0.5	19.0
29	0.25	7.00	60	0.5	19.5
30	0.25	7.25	61	0.5	20.0
31	0.25	7.50			

## 2.4 Angeforderte Daten

Im Zuge des Internationalen Vergleichs der Ergebnisse sollen folgende Daten geliefert werden:

- Planarer Multiplikationsfaktor  $k_{\text{eff}}$  für das unbestrahlte Brennelement und nach jedem der 61 Abbrandschritte ohne Abklingzeit.
- Kernzahldichten in atoms/barn-cm der in Tab. 2.4 genannten Aktiniden und Spaltprodukte (SP) gemittelt über alle nicht-Gd Stäbe ohne und mit 5 Jahren Abklingzeit in 10 Schritten à 2 GWd/tSM Abbrand (siehe Tab. 2.5).

- Kernzahldichten in atoms/barn-cm der in Tab. 2.4 genannten Gadoliniumisotope für jeden der Gadoliniumringe ohne und mit 5 Jahren Abklingzeit und für  $^{148}\text{Nd}$  nur nach 5 Jahren Abklingzeit in 10 Schritten à 2 GWd/tSM Abbrand (siehe Tab. 2.5).
- Abbrand des Gadoliniumstabes gemittelt über alle 10 Ringzonen in 10 Schritten à 2 GWd/tSM Abbrand (siehe Tab. 2.5).

**Tab. 2.4** Betrachtete Isotope

Aktinoide	$^{234,235,236,238}\text{U}$ , $^{237}\text{Np}$ , $^{238,239,240,241,242}\text{Pu}$ , $^{241}\text{Am}$
SP	$^{99}\text{Tc}$ , $^{103}\text{Rh}$ , $^{131}\text{Xe}$ , $^{155}\text{Eu}$ , $^{133}\text{Cs}$ , $^{143,148}\text{Nd}$ , $^{147, 149,151,152}\text{Sm}$
Gd	$^{154,155,156,157,158,160}\text{Gd}$

**Tab. 2.5** Abbrand und Abklingschritte

Abbrand (GWd/tSM)	Abklingzeit (Jahre)
2	0 und 5
4	0 und 5
6	0 und 5
8	0 und 5
10	0 und 5
12	0 und 5
14	0 und 5
16	0 und 5
18	0 und 5
20	0 und 5

Zusätzlich sollen zu jedem Code folgende allgemeinen Informationen eingereicht werden:

- 1 Name des Instituts
- 2 Name des Teilnehmers
- 3 Kontaktperson
- 4 Emailadresse der Kontaktperson
- 5 Verwendetes Programm
- 6 Methode des Flusslösers (z.B. Monte Carlo,  $S_n$ , MOC)

- 7 Methode der Abbrandkopplung (z.B. predictor-corrector, predictor only, iterative predictor-corrector, midpoint predictor-corrector)
- 8 Neutronen Datenbibliothek (ENDF/B-VII.1, JEFF-3.1)
- 9 Zerfallsdatenbibliothek (decay data library)
- 10 Spaltproduktausbeute-Datenbibliothek (fission product yield data)
- 11 Anzahl an Energiegruppen (oder continuous energy)
- 12 Teil des Brennelements, das modelliert wurde (z.B. komplett, ein Achtel, ...)
- 13 Optionale Programmbeschreibung

Diese allgemeinen Informationen sind für alle eingereichten Programme in Tab. 2.6 zusammengefasst.

**Tab. 2.6** Allgemeine Informationen aller eingereichten Codes

Programm	HELIOS 1.12	SCALE6.1.2, TRITON	SCALE6.2.1, TRITON	SCALE6.2.1, TRITON	SCALE6.2.1, POLARIS	KENOEST v1.0	Serpent 2.1.24	MOTIVE 0.4.1
Flusslöser	current-coupling and collision probability (CCCP)	NEWT	NEWT	KENO VI	MoC trans- port solver	Monte Carlo	Monte Carlo	Monte Carlo
Abbrandkopplung	predictor-corrector	midpoint	midpoint	midpoint	predictor- corrector	predictor only	predictor- corrector	predictor- corrector
Bibliothek	ENDF/B-VI adjusted	ENDF/B-VII.0 (v7-238)	ENDF/B-VII.1 (v7-252)	ENDF/B-VII.0 (ce_v7_endf)	ENDF/B-VII.1 (v7-252)	ENDF/B-VII correc- ted	ENDF/B- VII.0	ENDF/B- VII.1
Gruppenanzahl	190	238	252	ce	252	84	ce	ce
Konvergenzkriterium	current: epsilon = 0.00025	default ( $k_{eff}$ , innere und äußere Itera- tion: sig=0.0001)	default ( $k_{eff}$ , innere und äußere Itera- tion: sig=0.0001)	$K_{eff}$ : sig=0.0005		$K_{eff}$ : sig=0.001, fissionrate: 0.01		$K_{eff}$ : sig=0.0005
Programmbeschrei- bung (optional)	Schnittstellenstrom- kopplungsfaktor $\$k=4$ (Einteilung der Strö- me zwischen geomet- rischen Segmenten in 4 Sektoren ( $180^\circ/4$ )), 10 Ringzonen für alle Brennstäbe	pn=1 für Brennstoff und Zirc, pn=3 für H2O, Dancoff Faktoren verwendet	pn=1 für Brennstoff und Zirc, pn=3 für H2O, Dancoff Faktoren verwendet, addnux=4		innerer Was- serkanal durch 3x3 runde Was- serrohre ersetzt, wo- bei das Ver- hältnis von Moderator mit und ohne Dampfbla- sengehalt erhalten bleibt	Kopplung zwi- schen KENO-Va für den Neutronen- fluss und $k_{eff}$ , 1D- OREST für Wir- kungsquerschnitte (HAMMER) und ORIGEN für die Inventarberech- nung		Kopplung von KENO- VI (SCALE 6.2.1) mit dem haus- internen VENTINA Code



### 3 Programmspezifische Einstellungen und Untersuchungen

Die in Kapitel 2 dargelegten Spezifikationen wurden in den einzelnen Abbrandprogrammen programmspezifisch möglichst nahe an den Vorgaben umgesetzt. Darüber hinaus gibt es einige Einstellungen, die im Folgenden für jedes verwendete Programm individuell erläutert werden. Für alle Programme wurde das komplette Brennelement modelliert und nicht auf das Ausnützen von Symmetrien zurückgegriffen.

#### 3.1 HELIOS

Wie in Tab. 1.1 schon erwähnt, wurden für das HELIOS Modell verschiedene Kopplungsparameter  $\$k$ , unterschiedliche Einteilung der Nicht-Gd-Stäbe in Ringzonen und mehrere Geometrievarianten untersucht. Der Kopplungsparameter  $\$k$  definiert die Einteilung der Ströme zwischen geometrischen Segmenten in azimutale und polare Winkel-Segmente.  $\$k=1$  steht für keine Einteilung, positive Zahlen bis 5 stehen für eine entsprechende Anzahl azimutaler Einteilungen, negative Zahlen für eine gleiche Einteilung in azimutale und polare Winkelsegmente.  $\$k=18$  entspricht der oft verwendeten S4-Einteilung in zwei polare Winkel, wobei der eine in zwei azimutale Sektoren und der andere in vier azimutale Sektoren unterteilt wird.

Tab. 3.1 gibt alle untersuchten Varianten wieder. Dabei gibt es vier Geometrievarianten:

- einfach: Wasser um BS in vier Geometrieviertel, Größe der Geometrieelemente außerhalb vom BS: etwa Brennstababstand/2
- fein\_H2O: Wasser um BS in vier Geometrieviertel, feinere Einteilung der Geometrieelemente außerhalb vom BS in beide Richtungen: etwa Brennstababstand/4
- fein\_BS: zwei zusätzlichen Wasserringe um BS und zusätzliches Geometrieelement in den Pinzellenecken, Größe der Geometrieelemente außerhalb von BS: etwa Brennstababstand/2
- fein: zwei zusätzlichen Wasserringe um BS und zusätzliches Geometrieelement in den Pinzellenecken, Feinere Einteilung der Geometrieelemente außerhalb von BS in beide Richtungen: etwa Brennstababstand/4

Für alle Fälle wurde die Bibliothek hy190n48g110a mit 190 Gruppen verwendet, die auf der ENDF/B-VI Daten aufbaut und für Leichtwasserreaktorberechnungen korrigiert ist.

**Tab. 3.1** Übersicht über alle in HELIOS gerechneten Varianten

Variante	Kopplungsparameter \$k	# Ringzonen nicht Gd-Stäbe	Geometrie-modell	Kommentar
vers_03	1	1	einfach	
vers_04	1	10	fein_BS	
vers_05	1	1	fein_H2O	
vers_06	1	6	fein	
vers_07	4	10	fein	
vers_08	0	10	fein	läuft nicht
vers_09	18	10	fein	
vers_10	-3	10	fein	\$k = -4, -5 laufen nicht
vers_11	4	5	fein	
vers_12	2	10	fein	
vers_13	4	1	einfach	
vers_14	1	1	einfach	wie vers_03
vers_15	2	1	einfach	
vers_16	4	10	fein	aus vers_07: T = 600 K, statt 559 K

### 3.2 TRITON

Mit der Abbrandsequenz TRITON aus dem SCALE Paket wurden insgesamt 10 Rechnungen durchgeführt. Eine Übersicht findet sich in Tab. 1.1. Dabei kommt sowohl die etablierte Programmversion SCALE 6.1.2 /SCA 11/ zum Einsatz, als auch die neu veröffentlichte Version SCALE 6.2.1 /SCA 16/, in der zahlreiche neue Optionen und Möglichkeiten implementiert wurden. Es wurden zahlreiche Querschnittsbibliotheken mit verschiedenen Energiegruppeneinteilungen verwendet, die auf verschiedenen Versionen der ENDF/B-Bibliothek basieren. Mit SCALE 6.2.1 gibt es auch erstmals die Möglichkeit Abbrandrechnungen mit TRITON unter Verwendung einer Querschnittsbibliothek mit kontinuierlichem Spektrum durchzuführen. Während für alle andere Berechnungen NEWT als Flusslöser verwendet wurde, kommt hierfür KENO-VI zum Einsatz.

Für fast alle Rechnungen wurde der Standardwert für die Anzahl der in der Abbrandkette zu verfolgenden Nuklide verwendet (addnux=2). Die Anzahl der hierbei berücksichtigten Nuklide hat sich von 64 in SCALE 6.1.2 auf 95 in SCALE 6.2.1 erhöht. Für eine Liste aller verwendeter Nuklide, siehe /SCA 16/. SCALE 6.2.1 bietet laut Manual mit der Option „addnux=-2“ die Möglichkeit, auf die ursprüngliche Liste der Version 6.1.2 zurückzugreifen. Diese Option führt allerdings zu einem Programmabsturz, so-

dass ein entsprechender Vergleich mit den gleichen Nukliden momentan leider nicht möglich ist. Ein Fall wurde mit der genauesten Energiegruppeneinteilung (252 Gruppen) und der Maximalzahl von 388 verfolgbaren Nukliden gerechnet (addnux=4).

Für alle Rechnungen mit Multigruppen-Bibliotheken wurden die Dancoff-Faktoren berechnet und verwendet. Diese korrigieren bei der Resonanzbehandlung die Abweichungen der Moderationsverhältnisse zwischen den Pinzellen im realen 2D Gitter und dem unendlichen Pinzellengitter, das bei diesem Teil der Berechnung angenommen wird. Vergleichend wurde eine Rechnung ohne Anwendung der Dancoff-Faktoren durchgeführt.

Für alle NEWT Rechnungen werden für den Brennstoff und das Zirkalloy-Cladding als Streuordnung pn=1 und für Wasser pn=3 verwendet, der Empfehlung des SCALE Manuals folgend.

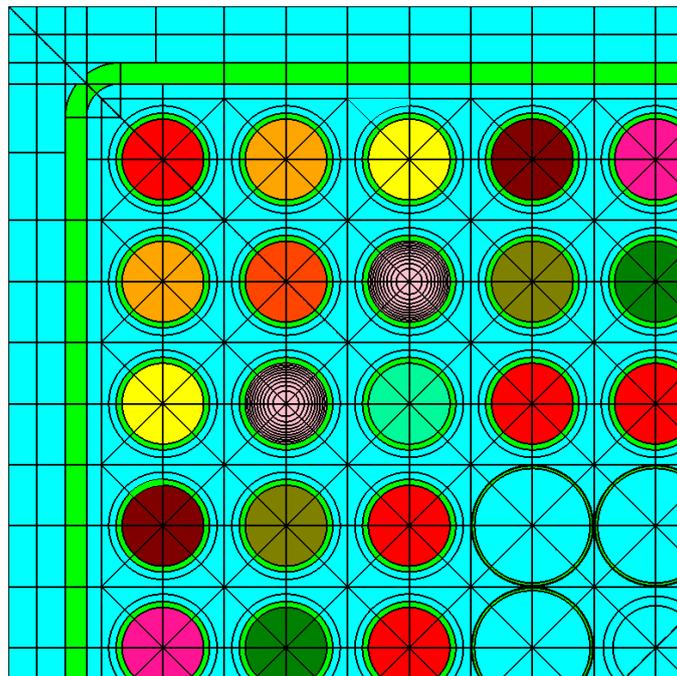
Den Empfehlungen des SCALE Manuals folgend, werden die 10 Ringe der Gadoliniumstäbe mit vorgegebenem Neutronenfluss („flux“-Option) abgebrannt und nicht mit vorgegebener Leistung („power“-Option). Vergleichsrechnungen haben gezeigt, dass zwischen diesen beiden Optionen nur marginale Unterschiede herrschen.

### **3.3 POLARIS**

Für die Berechnung mit POLARIS aus dem SCALE 6.2.1 Paket wurde die Bibliothek ENDF/B-VII.1 mit 252 Gruppen verwendet. Da sich POLARIS noch in der Entwicklung befindet, sind die Möglichkeiten zur Modellierung von Siedewasserreaktor-Brennelemente noch begrenzt, sodass einige Anpassungen des geometrischen Modells für die Berechnung notwendig waren.

Zum einen gibt es keine Möglichkeit, einen zentralen eckigen Wasserkanal über 3x3 Pins zu modellieren. Dieser wurde durch ein zentrales Wassergeometrieelement und darum herum 8 wasserführende Rohre mit einem Innenradius von 0,67901 cm und einem Außenradius von 0,71142 cm ersetzt. Diese Radien wurden so gewählt, dass die Flächenverhältnisse zwischen Wasser mit, Wasser ohne Dampfblasengehalt und Zirkalloy denen des originalen Modells entsprechen und somit das Moderationsverhältnis gewahrt bleibt. Es ergibt sich nur eine unterschiedliche räumliche Verteilung der Materialien in diesem zentralen Teil des BE.

Zum anderen erlaubt POLARIS keinen Brennelementkasten um das Brennelement mit nicht abgerundeten Ecken. Der minimale Innenradius der Ecken mit dem das Programm nicht abstürzt beträgt 0,4 cm. Die automatische Graphikausgabe der Geometrie zeigt in den Ecken eine nichtdurchgehende Wand, an deren Außenseite eine kleine Ecke fehlt. Es konnte nicht geklärt werden, ob dieser Fehler nur in der Graphikausgabe vorhanden ist, oder auch im eigentlichen Rechenmodell. Abb. 3.1 zeigt das linke obere Viertel des Brennelements, aus dem die beschriebenen geometrischen Veränderungen ersichtlich sind.



**Abb. 3.1** POLARIS Rechenmodell mit nötigen geometrischen Veränderungen

### 3.4 KENOREST

KENOREST besitzt die Eigenheit, dass man den Brennstoff nicht mithilfe von Kernzahl-dichten, sondern nur als Moleküle und Gemische mit Gewichtsprozent-Verhältnissen angeben kann. Aus diesem Grund wurden aus den in der Benchmark Beschreibung angegebenen Kernzahl-dichten diese Verhältnisse ausgerechnet. Damit besteht der normale Brennstoff aus  $U+2 \cdot O$  mit 0,0356 wt%  $^{234}U$ , 4,00009 wt%  $^{235}U$  und 95,96431 wt%  $^{238}U$  mit einer Gesamtdichte von 10,4899 g/cm<sup>3</sup>. Der gadoliniumhaltige Brennstoff besitzt eine Dichte von 10,3192 g/cm<sup>3</sup> und enthält 3,4255 wt%  $Gd_2O_3$ , wobei das Gadolinium folgende Zusammensetzung besitzt: 2,13790 wt%  $^{154}Gd$ , 14,60908 wt%  $^{155}Gd$ , 20,33573 wt%  $^{156}Gd$ , 15,64839 wt%  $^{157}Gd$ , 24,99426 wt%  $^{158}Gd$

und 22,27464 wt%  $^{160}\text{Gd}$ . Das Uran besteht aus 0,03026 wt%  $^{234}\text{U}$ , 3,39994 wt%  $^{235}\text{U}$  und 96,56980 wt%  $^{238}\text{U}$ .

Zirkalloy kann gemäß den Angaben der Kernzahldichten in der Benchmarkbeschreibung umdefiniert werden. KENOREST rechnet die Dichte des Wasser-Dampf-Gemischs intern aus Moderator Temperatur, Dichte und Dampfblasengehalt aus. Um etwa die korrekten Wasser- und Sauerstoffdichten zu erhalten, wurde der Druck auf 123 bar festgelegt.

### **3.5 SERPENT**

Für die Rechnungen mit Serpent wurde auf die mitgelieferte ENDF/B-VII.0 Bibliothek zurückgegriffen. Zur Modellierung der Brennstäbe mit gadoliniumhaltigem Brennstoff wurde die Option zur automatischen Generierung von volumengleichen Ringzonen verwendet. Es wurden zehn Ringzonen modelliert. In jeder Flussberechnungsiteration wurden 1000 Generationen mit je 5000 Neutronen simuliert. Die ersten 100 Generationen wurden für die Ergebnisberechnung vernachlässigt.

### **3.6 MOTIVE**

MOTIVE ist ein neu in der GRS entwickelter Abbrandcode, der als Nachfolger des Programms KENOREST eingesetzt wird. MOTIVE koppelt ein externes Neutronentransportprogramm mit dem internen Inventarberechnungscode VENTINA. Als Neutronentransportcode wurde im vorliegenden Fall KENO-VI aus dem SCALE6.2.1 Paket verwendet. Analog zu Serpent wurde zur Simulation der gadoliniumhaltigen Brennstäbe eine Option zur automatischen Generierung von Ringzonen eingesetzt, wobei ebenfalls zehn Ringzonen eingestellt wurden.

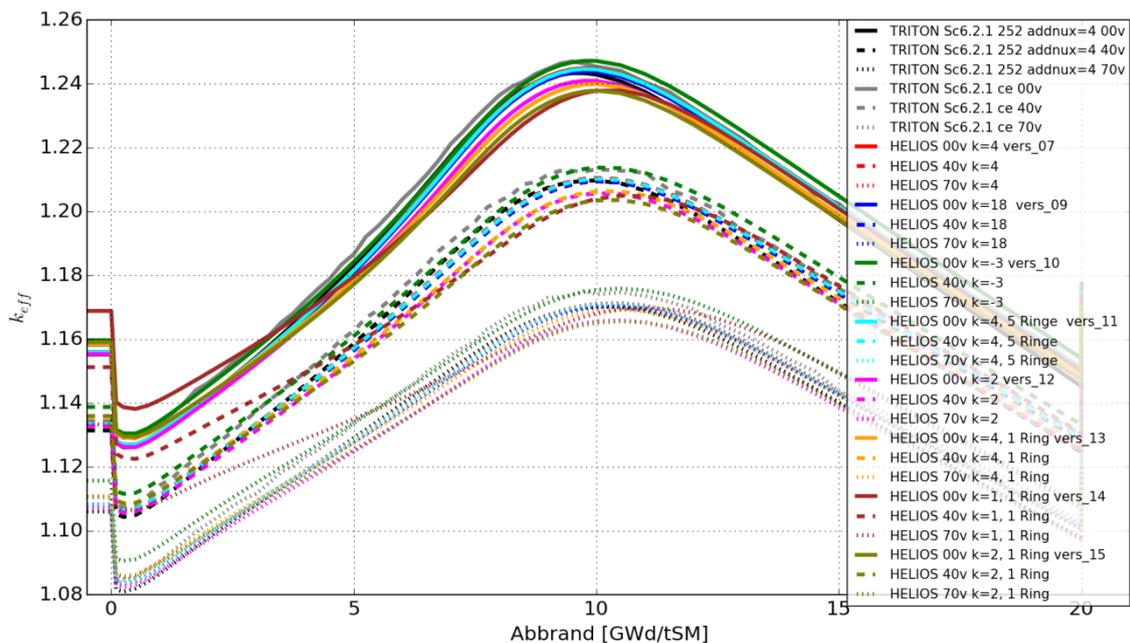


## 4 Vergleich: Multiplikationsfaktor $k_{eff}$

Im Folgenden werden sämtliche Rechnungen mit den zwei Rechnungen verglichen, die mit SCALE 6.2.1 mit 252 Gruppen und erweiterter Nuklidliste und der Querschnittsbibliothek mit kontinuierlichem Spektrum durchgeführt wurden. Es sind jeweils die Ergebnisse für 0 % (durchgezogene Linie), 40 % (gestrichelte Linie) und 70 % (gepunktete Linie) Dampfblasengehalt in derselben Abbildung gezeigt.

### 4.1 HELIOS

Abb. 4.1 zeigt den  $k_{eff}$ -Verlauf der HELIOS Rechnungen im Vergleich zu den zwei SCALE Rechnungen.



**Abb. 4.1**  $k_{eff}$  Verlauf der HELIOS Rechnungen mit verschiedenen Kopplungsparametern und Geometrievarianten.

Die Verwendung des Kopplungsparameter  $k=1$  (vers\_14, braun) ergibt eine deutliche Abweichung der Kurvenform zu allen anderen Rechnungen. Zum einen liegt  $k_{eff}$  am Anfang des Abbrandes bis zu 2,5 % über den anderen Kurven (70 % Dampfblasengehalt), zum anderen sind die Kurven deutlich flacher als alle anderen. Damit liegen sie im Bereich des Gadolinium-Maximums am unteren Rand der Kurvenschar. Da dieser  $k_{eff}$ -Verlauf sowohl von den anderen HELIOS Rechnungen, als auch von den Rech-

nungen aller anderer Codes deutlich abweicht, scheint ein Kopplungsfaktor von  $k=1$  für die korrekte Berechnung des Kritikalitätsverlaufs nicht ausreichend zu sein.

Die Verwendung von  $k=2$  (vers\_12, pink und vers\_15, oliv) zeigen denselben Effekt weniger ausgeprägt, der flachere Kurvenverlauf ist aber aus der Abbildung ersichtlich. Damit sollte auch die Verwendung von  $k=2$  ausgeschlossen werden. Auch die Verwendung nur einer Ringzone (vers\_13, gelb) führt zu einer leichten Abflachung der  $k_{\text{eff}}$  Kurve und sollte aus diesem Grund vermieden werden.

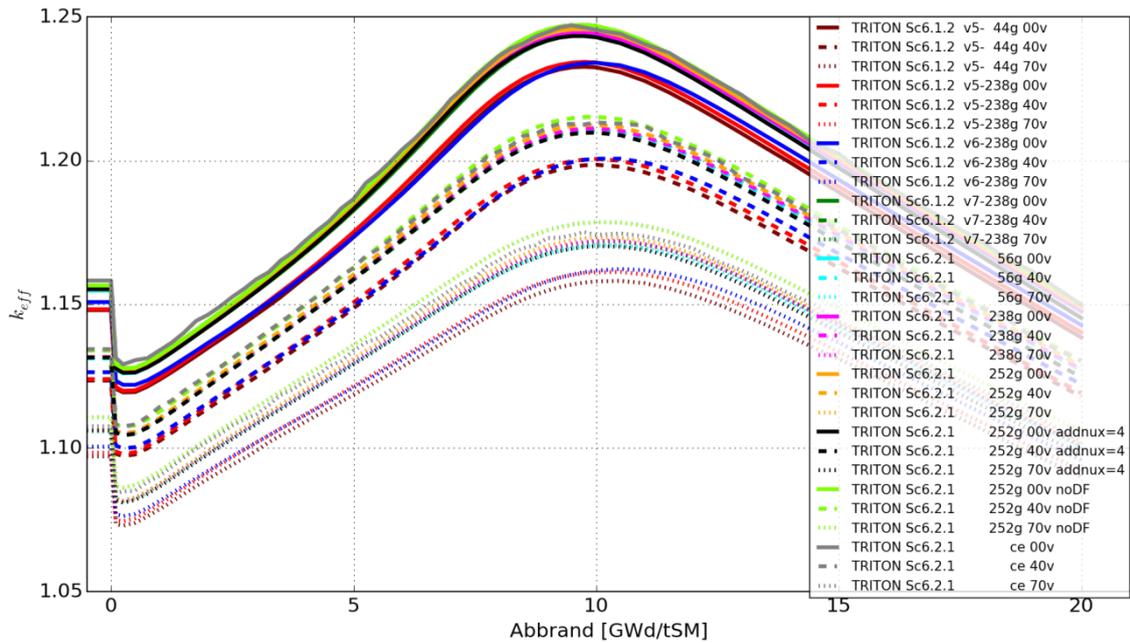
Die Rechnung mit  $k=-3$  (vers\_10, grün) liegt über allen anderen HELIOS Rechnungen und ist der SCALE CE-Rechnung am nächsten.

Die Rechnungen mit  $k=4$  mit 10 Ringen (vers\_07, rot),  $k=4$  mit 5 Ringen (vers\_11, cyan),  $k=18$  (vers\_09, blau) zeigen so gut wie keine Unterschiede auf.

Zusammenfassend kann man sagen, dass die Verwendung von  $k=4$  und 10 Ringzonen ein guter Kompromiss zwischen Rechengenauigkeit und Rechenzeit ist.

## 4.2 SCALE

Abb. 4.2 zeigt die  $k_{\text{eff}}$  Verläufe aller durchgeführten Rechnungen mit SCALE. Für alle drei Dampfblasengehalte ergeben sich zwei Gruppen von Kurven, die sich im Maximum bei knapp 10 GWd/tSM um etwa 1 % unterscheiden. Die drei Rechnungen, die einen geringeren Multiplikationsfaktor zeigen, wurden mit den Versionen V oder VI der ENDF/B Querschnittsbibliothek mit unterschiedlichen Gruppenstrukturen gerechnet (v5-44g, v5-238g, v6-238g). Alle Rechnungen mit der Bibliothek ENDF/B-VII stimmen für 0 % Dampfblasengehalt innerhalb  $\pm 0,18$  % überein (40 % und 70 %: 0,25 %). Die Rechnung ohne Beachtung der Dancoff-Faktoren ist ab etwa 7 GWd/tSM am konservativsten. Dieser Effekt verstärkt sich mit zunehmendem Dampfblasengehalt. Die Vernachlässigung der Dancoff-Faktoren führt folglich zu keinem sicherheitsrelevanten Änderung von  $k_{\text{eff}}$ , baut aber vor allem bei höherem Dampfblasengehalt unnötige Konservativitäten auf.



**Abb. 4.2**  $k_{\text{eff}}$  Verlauf der SCALE Rechnungen mit verschiedenen Bibliotheken und Einstellungen.

Bei niedrigen Abbränden ist die Rechnung mit der Querschnittsbibliothek mit kontinuierlichem Spektrum am reaktivsten. Im gesamten betrachteten Abbrandbereich liegt diese über allen weiteren Rechnungen mit Gruppenstruktur der Querschnittsbibliotheken.

Der direkte Vergleich zwischen SCALE 6.1.2 und SCALE 6.2.1 für die 238-Gruppen Bibliothek zeigt für alle Dampfblasengehalte keinen signifikanten Unterschied.

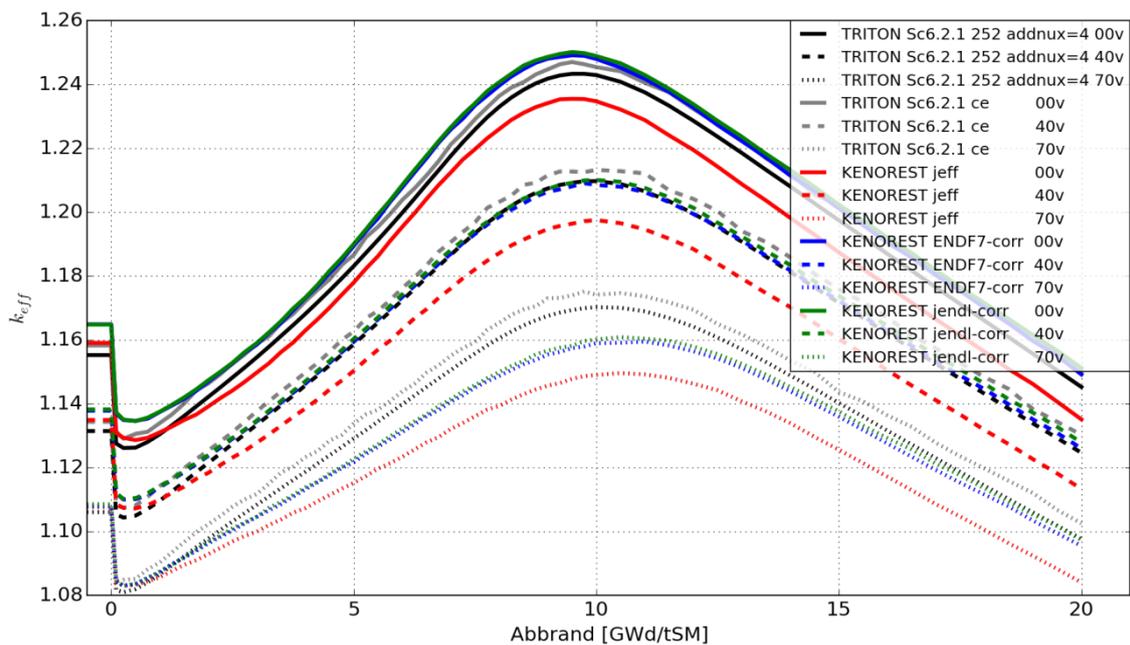
Mit zunehmender Anzahl der Energiegruppen (56g  $\rightarrow$  238g  $\rightarrow$  252g  $\rightarrow$  ce) steigt  $k_{\text{eff}}$  leicht, wobei der Unterschied zwischen 252g und ce für alle Dampfblasengehalte und für den gesamten betrachteten Abbrandbereich unter 0,3 % liegt und sich mit steigendem Abbrand verringert.

Die Verwendung zusätzlicher Nuklide (addnux=4, schwarz, 388 statt 95 Nuklide) ergibt einen Verlauf des Multiplikationsfaktors, der die Schar der ENDF/B-VII Rechnungen von unten begrenzt. Damit mag diese Rechnung am genauesten sein, liefert aber auch die am wenigsten konservative Kurve.

Die zwei Rechnungen mit kontinuierlicher Querschnittsbibliothek zum einen und mit der Querschnittsbibliothek mit 252 Gruppen und der Betrachtung von 388 Nukliden rahmen die anderen ENDF/B-VII Rechnungen von oben und unten ein.

### 4.3 KENOREST

Die  $k_{eff}$ -Verläufe der drei KENOREST Rechnungen mit verschiedenen Bibliotheken sind in Abb. 4.3 im Vergleich mit den zwei SCALE Rechnungen gezeigt.



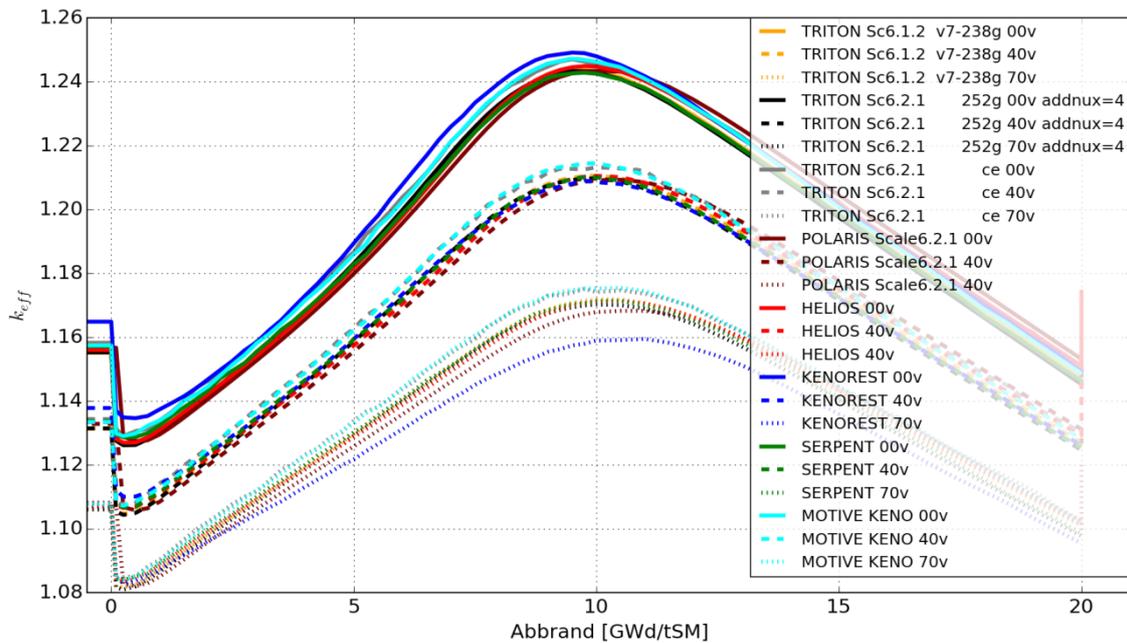
**Abb. 4.3**  $k_{eff}$  Verlauf der KENOREST Rechnungen mit verschiedenen Bibliotheken.

Die  $k_{eff}$ -Verläufe der Rechnungen mit der korrigierten ENDF/B-VII und der korrigierten JENDL Bibliothek zeigen einen sehr ähnlichen Verlauf, während die Rechnungen mit der JEFF Bibliothek deutlich niedriger liegen, auch im Vergleich mit SCALE Rechnungen. Dies scheint ein Effekt zu sein, der von der älteren Wirkungsquerschnittsbibliothek herrührt, da ein ähnliches Verhalten auch schon bei den SCALE-Rechnungen mit älteren ENDF/B-Daten beobachtet wurde. Aufgrund der beschriebenen Unterschiede wird im Vergleich mit den anderen Programmen die Rechnung mit der ENDF/B-VII Bibliothek herangezogen. Für 0 % und 40 % Dampfblasengehalt liegt die JENDL und ENDF/B-VII Rechnung sehr nahe an den SCALE Rechnungen mit ENDF/B-VII Biblio-

thek. Für 70 % Dampfblasengehalt liegen diese zwei Rechnungen deutlich unter den SCALE Ergebnissen.

#### 4.4 Vergleich aller Programme

Abb. 4.4 zeigt den  $k_{eff}$  Verlauf aller gerechneter Codes im Vergleich.



**Abb. 4.4**  $k_{eff}$  Verlauf aller gerechneter Codes im Vergleich.

Mit steigendem Dampfblasengehalt verschiebt sich für alle Codes das Maximum des Multiplikationsfaktors leicht zu höheren Abbränden.

Alle berechneten  $k_{eff}$  Verläufe ausgenommen der KENOREST Rechnung stimmen innerhalb  $\pm 0,4\%$  überein. Die KENOREST-Rechnung liegt für 0 % Dampfblasengehalt vor allem zu Beginn der Rechnung und kurz vor dem Gadoliniummaximum über den anderen Kurven, um dann im abfallenden Ast wieder zwischen den anderen Kurven zu liegen. Für 40 % Dampfblasengehalt liegt die Rechnung über den kompletten Abbrandbereich innerhalb der anderen Kurven, für 70 % um maximal 1 % unterhalb der anderen Kurven.

Für alle drei Moderator-dichten unterschätzt POLARIS anfangs den Multiplikationsfaktor und überschätzt ihn nach Erreichen des Gadoliniummaximums. Damit liegt die Kurve

der Rechnung bis 10 GWd/tSM an der unteren Grenze aller Kurven, danach an der oberen.

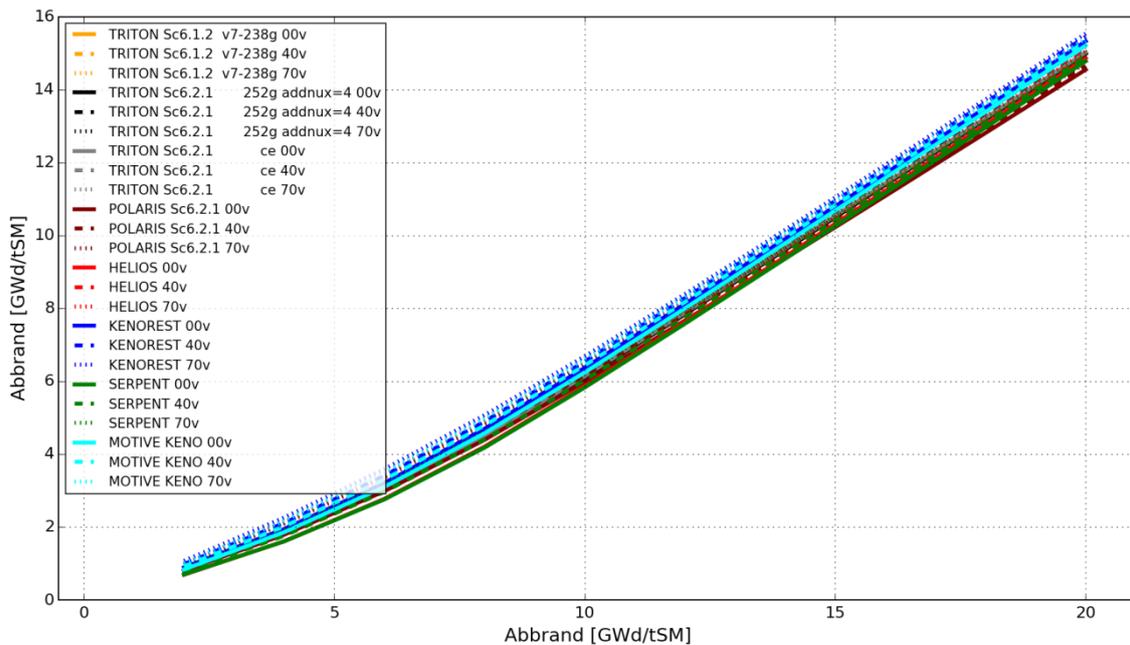
Die Rechnungen mit SCALE 6.1.2 mit 238 Gruppen, SCALE 6.2.1 mit 252 Gruppen und 388 betrachteten Nukliden, die HELIOS Rechnung und die SERPENT Rechnung haben für alle Dampfblasengehalte eine maximal Abweichung von  $\pm 0,2\%$ .

Die SCALE 6.2.1 CE-Rechnung und die MOTIVE-Rechnungen zeigen über den gesamten Abbrandbereich keinen glatten Verlauf, sondern haben beide einen „zappeligen“ Verlauf. Beide liegen innerhalb ihrer Schwankung übereinander.

Die gute Übereinstimmung der Rechnungen mit MOTIVE insbesondere mit der TRITON CE-Rechnung aber auch mit den anderen Rechnungen mit aktuellen Codes und Daten ist eine gute Bestätigung für die Ergebnisqualität für dieses neu entwickelte Programm. Insbesondere zeigt es auch die Verbesserungen gegenüber dem Vorgänger KENOREST.

## 5 Vergleich: Abbrand des gadoliniumhaltigen Brennstabes

Abb. 5.1 zeigt den Abbrand des gadoliniumhaltigen Brennstabes gemittelt über alle zehn Ringzonen in Abhängigkeit des Gesamtabbrands des gesamten Brennelements für alle drei Dampfblasengehalte.



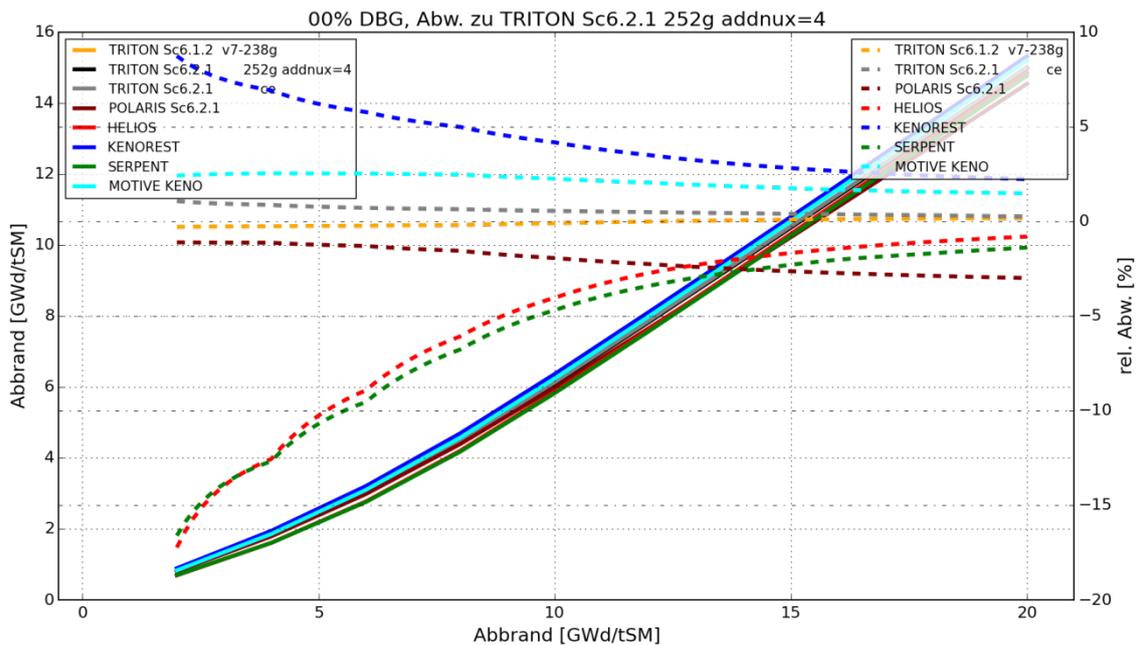
**Abb. 5.1** Abbrand des gadoliniumhaltigen Stabes aller gerechneten Codes im Vergleich.

Der Abbrand des gadoliniumhaltigen Brennstabes liegt bei etwa 15 GWd/tSM bei einem Abbrand des gesamten Brennelements von 20 GWd/tSM. Die Nichtlinearität des Abbrandes bis zu einem Gesamtabbrand von etwa 10 GWd/tSM entsteht durch das sukzessive Ausbrennen von Gadolinium aus diesem Stab. Dabei fängt Gadolinium als starker Neutronenabsorber einen Teil der Neutronen ab, die in Folge nicht mehr zur Spaltung des Urans beitragen und so lokal den Abbrand verringern.

Alle Codes zeigen einen leicht erhöhten Abbrand mit steigendem Dampfblasengehalt. Dies kann mit dem härteren Spektrum aufgrund einer geringeren Moderation bei niedrigerer Moderatordichte erklärt werden. Da die Absorption von Gadolinium vor allem im thermischen Bereich stattfindet, wirkt sich dessen Effekt bei höherer mittlerer Neutronenenergie weniger stark aus, sodass der Abbrand der gadoliniumhaltigen Stäbe hier

höher ist. Damit konsistent ist das leicht nach hinten verschobene Gadoliniummaximum mit steigendem Dampfblasengehalt, siehe Abb. 4.4.

Abb. 5.2 zeigt den Abbrand aller gerechneten Codes für 0 % Dampfblasengehalt (durchgezogene Linien). Zusätzlich sind die relativen Abweichungen aller Codes zu der SCALE 6.2.1 Rechnung mit 252 Energiegruppen und 388 betrachteter Nuklide gezeigt.

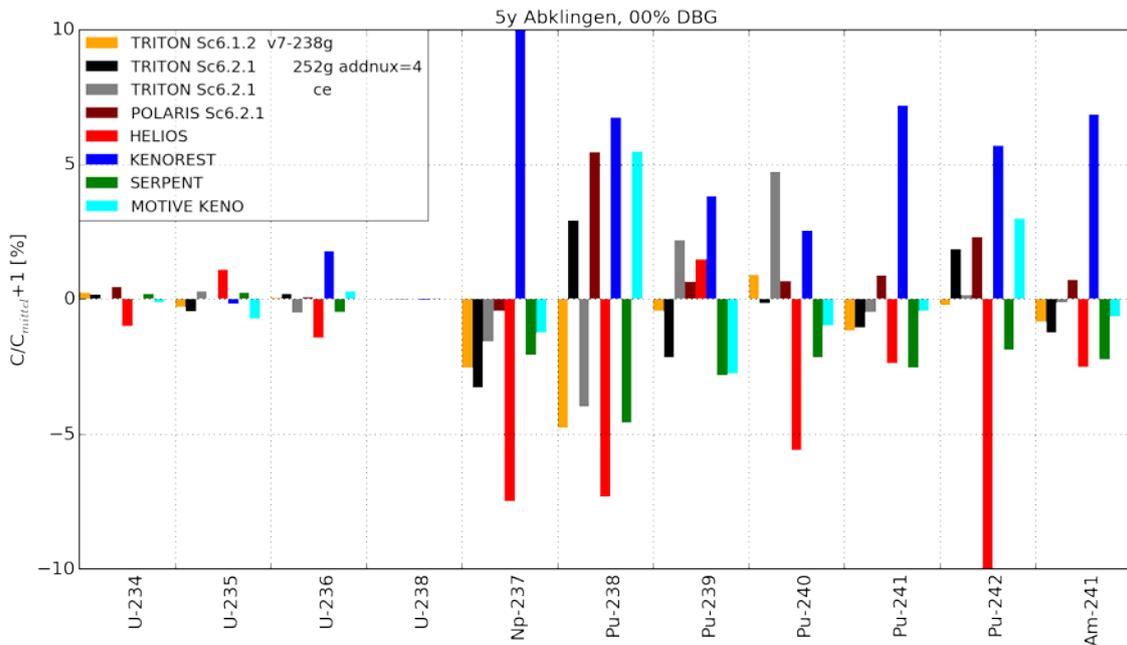


**Abb. 5.2** Abbrand des gadoliniumhaltigen Stabes aller gerechneten Codes für 0 % Dampfblasengehalt und dessen Abweichung von der Rechnung mit SCALE 6.2.1 mit 252 Energiegruppen und 388 Nukliden.

Während die relativen Abweichungen zu Beginn des Abbrandes bis zu 15 % erreichen, liegen sie bei 20 GWd/tSM bei maximal 3 %. Die vier SCALE Rechnungen (TRITON mit SCALE 6.1.2 und SCALE 6.2.1 252 g, CE und POLARIS) liegen über den kompletten Abbrandbereich innerhalb  $\pm 3$  %. KENOREST überschätzt anfangs den Abbrand des Gadoliniumstabs gegenüber dem Mittelwert der Rechnungen um etwa 8 %, nähert sich aber den anderen Rechnungen im Verlauf an. Der Verlauf von HELIOS und SERPENT zeigen den gleichen Verlauf mit einer anfänglichen Unterschätzung des Abbrands. MOTIVE zeigt einen ähnlichen Abbrandverlauf wie die SCALE-Rechnungen.

## 6 Vergleich: Isotopenzusammensetzung

Abb. 6.1 zeigt die Abweichungen der Kernzahldichten der Aktinoide gemittelt über alle nicht gadoliniumhaltigen Brennstäbe vom Mittelwert aller acht Codes ( $C/C_{\text{mean}} - 1$ ) für 0 % Dampfblasengehalt und 5 Jahre Abklingzeit.



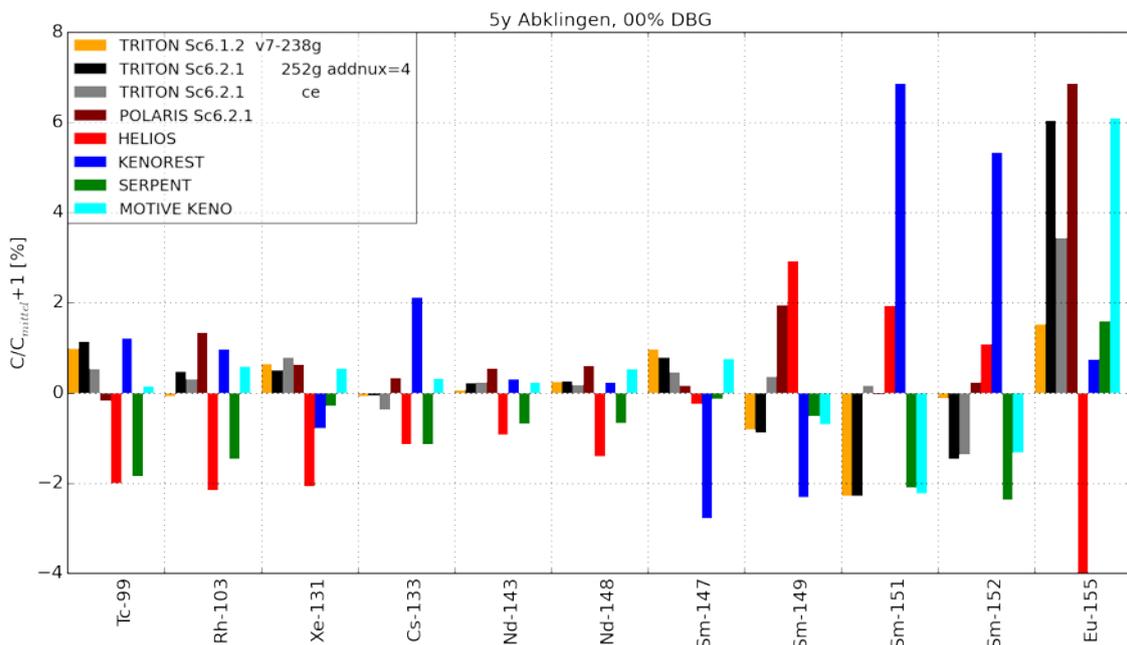
**Abb. 6.1** Abweichungen der Kernzahldichten der Aktinoide gemittelt über alle nicht-gadoliniumhaltigen Brennstäbe vom Mittelwert aller acht Codes nach 5 Jahren Abklingzeit und 0 % Dampfblasengehalt.

Die KENOREST-Rechnung hat für  $^{237}\text{Np}$  eine Abweichung von ca. 18 %, die HELIOS-Rechnung für  $^{242}\text{Pu}$  von ca. -11 %.

Die Uranisotope werden von allen Codes innerhalb etwa 1 % konsistent berechnet mit der Ausnahme von HELIOS und KENOREST, die teilweise Abweichungen von etwa 2 % zeigen. Auch bei den anderen Aktinoiden zeigen diese beiden Codes höhere Abweichungen vom Mittelwert, wobei HELIOS die meisten Nuklide unterschätzt, während KENOREST die Nukliddichten überschätzt. Alle anderen Codes stimmen innerhalb weniger Prozent überein.

Für 40 % und 70 % Dampfblasengehalt sind die Abweichungen etwas höher. Für KENOREST steigt diese auf bis zu knapp 25 % für  $^{237}\text{Np}$  an.

Abb. 6.2 zeigt den gleichen Vergleich für die Spaltprodukte gemittelt über alle nicht-gadoliniumhaltigen Brennstäbe.

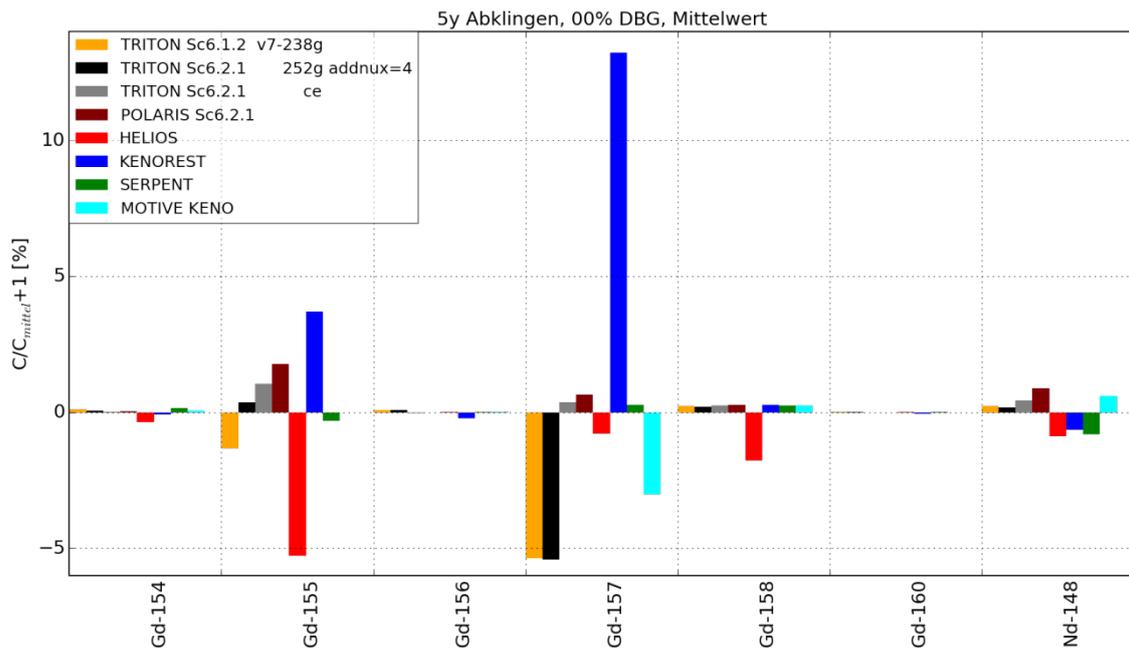


**Abb. 6.2** Abweichungen der Kernzahldichten der Spaltprodukte gemittelt über alle nicht-gadoliniumhaltigen Brennstäbe vom Mittelwert aller acht Codes nach 5 Jahren Abklingzeit und 0 % Dampfblasengehalt.

Auch die Spaltprodukte werden von fast allen Codes innerhalb weniger Prozent gleich berechnet. Eine Ausnahme bildet hier das Isotop  $^{155}\text{Eu}$  von HELIOS (-27 %) und eine teilweise Überschätzung der Samarium-Isotope durch KENOREST. Die scheinbare Überschätzung von  $^{155}\text{Eu}$  durch alle Codes bis auf HELIOS ergibt sich aufgrund der Absenkung des Mittelwerts durch die große negative Abweichung durch HELIOS.

Für 40 % und 70 % Dampfblasengehalt ergibt sich ein sehr ähnliches Bild.

Abb. 6.3 zeigt den gleichen Vergleich für die Gadoliniumisotope und  $^{148}\text{Nd}$  gemittelt über alle zehn Ringzonen des gadoliniumhaltigen Brennstabs. Für die Gadoliniumisotope mit geradzahligem Neutronenzahl, die einen relativ kleinen Einfangquerschnitt aufweisen, und  $^{148}\text{Nd}$  liegt die Abweichung für alle Codes unter 1 %, für  $^{155}\text{Gd}$  und  $^{157}\text{Gd}$ , die jeweils sehr große Einfangquerschnitte haben, bei bis zu 5 %. Nur die KENOREST Rechnung für  $^{157}\text{Gd}$  überschätzt die Kernzahldichte um ca. 13 %.

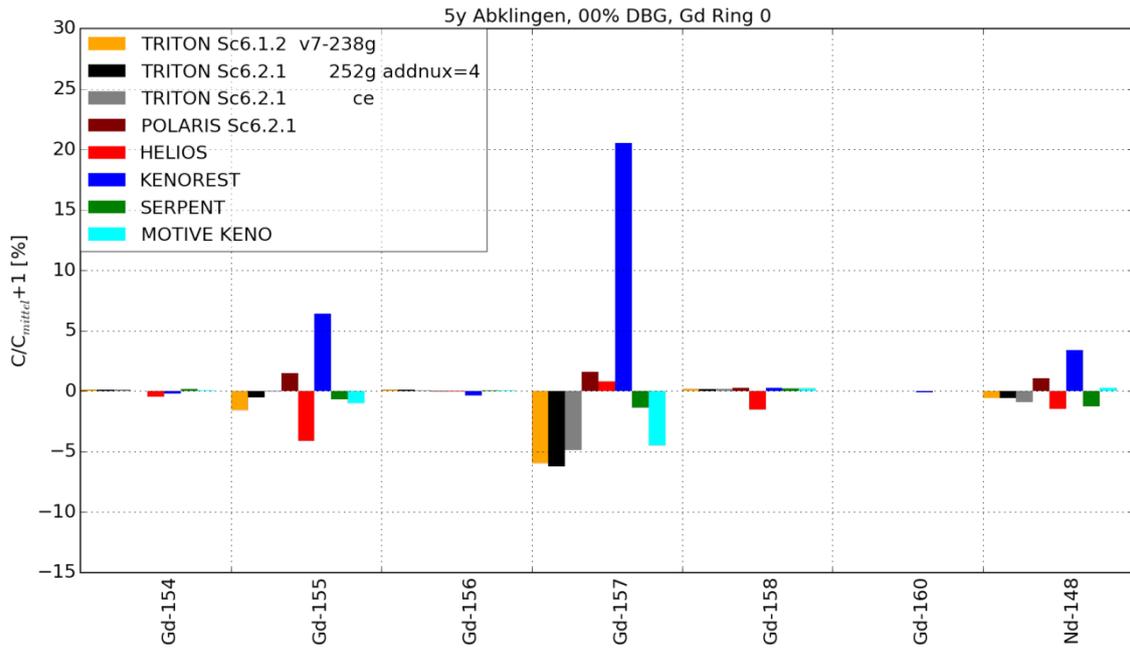


**Abb. 6.3** Abweichungen der Kernzahldichten der Gadoliniumisotope gemittelt über alle Ringzonen des gadoliniumhaltigen Brennstabs vom Mittelwert aller acht Codes nach 5 Jahren Abklingzeit und 0 % Dampfblasengehalt.

Bei Betrachtung der einzelnen Ringzonen zeigt sich die Abweichung der KENOREST Rechnung für  $^{157}\text{Gd}$  (und weniger stark für  $^{155}\text{Gd}$ ) am stärksten für den Innersten Ring (21 %) und schwächt sich nach außen hin auf unter 5 % ab.

Für 40 % und 70 % Dampfblasengehalt zeigt sich ein sehr ähnliches Bild, allerdings ist die Abweichung der KENOREST Rechnung für  $^{155}\text{Gd}$  und  $^{157}\text{Gd}$  noch stärker ausgeprägt. Diese liegt für den über alle Ringzonen gemittelten Wert für 40% bei ca. 5 % für  $^{155}\text{Gd}$  und bei knapp 17 % für  $^{157}\text{Gd}$ . Damit weichen auch die zwei TRITON SCALE 6.1.2 Rechnungen um gut -7 % vom Durchschnitt ab. Für 70% Dampfblasengehalt liegen die Abweichungen bei knapp 10% für  $^{155}\text{Gd}$  und gut 22 % für  $^{157}\text{Gd}$ . Damit weichen auch die zwei TRITON SCALE 6.1.2 Rechnungen um knapp -10 % vom Durchschnitt ab. Die Maximale Abweichung bekommt man für die innerste Ringzone bei 70 % Dampfblasengehalt für die KENOREST Rechnung für  $^{157}\text{Gd}$  von +29 %. Die übrigen Rechnungen zeigen ein ähnliches Verhalten, wie es auch bei den über alle Ringzonen gemittelten Inventaren zu beobachten ist.

Abb. 6.3 zeigt beispielhaft die Ergebnisse für die innerste Ringzone nach fünf Jahren Abklingzeit und 0% Dampfblasengehalt.



**Abb. 6.4** Abweichungen der Kernzahldichten der Gadoliniumisotope für die innerste Ringzone des gadoliniumhaltigen Brennstabs vom Mittelwert aller acht Codes nach 5 Jahren Abklingzeit und 0 % Dampfblasengehalt.

## **7 Zusammenfassung**

Der vorliegende Bericht beschreibt die für die Teilnahme am Rechenbenchmark Phase II der EGUNF der OECD/NEA durchgeführten Arbeiten und Abbrandrechnungen. Seitens der GRS wurden bei dem Benchmark Ergebnisse der externen Rechenprogramme TRITON und Polaris (SCALE-Paket), sowie SERPENT und Helios und der eigenen Codes MOTIVE und KENOREST eingereicht. Ergänzend zu den eingereichten Ergebnissen, wurden insbesondere mit der Abbrandsequenz TRITON aus dem SCALE-Paket umfangreiche Studien durchgeführt, um die Unterschiede zwischen verschiedenen Programmversionen und unterschiedlichen verfügbaren Optionen zu quantifizieren. Die aus diesen Vergleichsrechnungen gewonnenen Erkenntnisse sind im vorliegenden Bericht dargestellt.

Die Vergleichsrechnungen bieten außerdem die Möglichkeit zur Verifikation der Ergebnisse des in Entwicklung befindlichen Codes MOTIVE der als Nachfolger des GRS-Programms KENOREST vorgesehen ist. Hier zeigen sich einerseits deutliche Verbesserungen im Vergleich zu KENOREST und andererseits konnte gezeigt werden, dass mit MOTIVE Ergebnisse erzielt werden, die vergleichbar sind zu denen etablierter moderner Rechenverfahren.



## Literaturverzeichnis

- /BEH 17/ M. Behler, V. Hannstein, R. Kilger, F. Sommer, M. Stuke, „Untersuchungen zu Validierungsmöglichkeiten von Rechencodes für Kritikalitäts- und Abbrandrechnungen von Siedewasserreaktor-Brennstoff“, GRS-470, ISBN 978-3-946607-53-3, Juli 2017.
- /CAS 91/ J. J. Casal, R. J. J. Stamm'ler, E. A. Villarino, and A. A. Ferri, "HELIOS: Geometric Capabilities of a New Fuel-assembly Program", Proc. Int. Topl. Mtg. Advances in Mathematics, Computations, and Reactor Physics, Pittsburgh, Penn., Vol. II, Sect. 10.2.1, 1-13, April 28 – May 2 (1991).
- /HAN 17/ Hannstein, V., Behler, M., Sommer, F.: MOTIVE - A New Modular Burn-up Code. In: M&C 2017, International Conference on Mathematics & Computational Methods Applied to Nuclear Science & Engineering, M&C, Jeju, Korea, April 16-20, 2017.
- /HES 99/ U. Hesse, S. Langenbuch, „KENOREST, eine direkte Kopplung von KENO und OREST“, GRS-A-2783, Dezember 1999.
- /LEP 15/ J. Leppänen, M. Pusa, T. Viitanen, V. Valtavirta, T. Kaltiaisenaho, "The Serpent Monte Carlo code: Status, development and applications in 2013." Ann. Nucl. Energy, 82, 142-150 (2015).
- /OEC 16/ OECD/NEA: Code Comparison for Depletion of Gadolinium-Bearing Fuel Rods in Boiling Water Reactor Assemblies, 2016
- /SCA 11/ *SCALE: A Comprehensive Modeling and Simulation Suite for Nuclear Safety Analysis and Design*, ORNL/TM-2005/39, Version 6.1, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee, June 2011. Available from Radiation Safety Information Computational Center at Oak Ridge National Laboratory as CCC-785.
- /SCA 16/ ORNL: SCALE Code System, ORNL/TM-2005/39, Version 6.2.1, Editors: B. T. Rearden and M. A. Jesse, August 2016

/SUY 16/ K. Suyama, Y. Uchida, T. Kashima, T. Ito, and T. Miyaji, "Burn-up Credit  
Criticality Safety Benchmark Phase III-C," OECD/NEA, Paris, France,  
March 1, 2016

## Abbildungsverzeichnis

<b>Abb. 2.1</b>	2D Geometrie des Brennelements.....	5
<b>Abb. 2.2</b>	Gadoliniumhaltiger Stab mit Radien der 10 Ringzonen.....	6
<b>Abb. 3.1</b>	POLARIS Rechenmodell mit nötigen geometrischen Veränderungen.....	16
<b>Abb. 4.1</b>	$k_{\text{eff}}$ Verlauf der HELIOS Rechnungen mit verschiedenen Kopplungsparametern und Geometrievarianten.....	19
<b>Abb. 4.2</b>	$k_{\text{eff}}$ Verlauf der SCALE Rechnungen mit verschiedenen Bibliotheken und Einstellungen. ....	21
<b>Abb. 4.3</b>	$k_{\text{eff}}$ Verlauf der KENOREST Rechnungen mit verschiedenen Bibliotheken. ....	22
<b>Abb. 4.4</b>	$k_{\text{eff}}$ Verlauf aller gerechneter Codes im Vergleich.....	23
<b>Abb. 5.1</b>	Abbrand des gadoliniumhaltigen Stabes aller gerechneten Codes im Vergleich. ....	25
<b>Abb. 5.2</b>	Abbrand des gadoliniumhaltigen Stabes aller gerechneten Codes für 0 % Dampfblasengehalt und dessen Abweichung von der Rechnung mit SCALE 6.2.1 mit 252 Energiegruppen und 388 Nukliden. ....	26
<b>Abb. 6.1</b>	Abweichungen der Kernzahldichten der Aktinoide gemittelt über alle nicht-gadoliniumhaltigen Brennstäbe vom Mittelwert aller acht Codes nach 5 Jahren Abklingzeit und 0 % Dampfblasengehalt.....	27
<b>Abb. 6.2</b>	Abweichungen der Kernzahldichten der Spaltprodukte gemittelt über alle nicht-gadoliniumhaltigen Brennstäbe vom Mittelwert aller acht Codes nach 5 Jahren Abklingzeit und 0 % Dampfblasengehalt. ....	28
<b>Abb. 6.3</b>	Abweichungen der Kernzahldichten der Gadoliniumisotope gemittelt über alle Ringzonen des gadoliniumhaltigen Brennstabs vom Mittelwert aller acht Codes nach 5 Jahren Abklingzeit und 0 % Dampfblasengehalt. ....	29
<b>Abb. 6.4</b>	Abweichungen der Kernzahldichten der Gadoliniumisotope für die innerste Ringzone des gadoliniumhaltigen Brennstabs vom Mittelwert	

aller acht Codes nach 5 Jahren Abklingzeit und 0 % Dampfblasengehalt.....	30
--	----

## Tabellenverzeichnis

<b>Tab. 1.1</b>	Übersicht über alle gerechneten Programme, Bibliotheken, Optionen und Rechenzeiten.....	2
<b>Tab. 2.1</b>	Kernzahldichten von Brennstoff und Absorber .....	6
<b>Tab. 2.2</b>	Kernzahldichten von Wasser und Zircaloy .....	7
<b>Tab. 2.3</b>	Abbrandschritte .....	8
<b>Tab. 2.4</b>	Betrachtete Isotope.....	9
<b>Tab. 2.5</b>	Abbrand und Abklingschritte .....	9
<b>Tab. 2.6</b>	Allgemeine Informationen aller eingereichten Codes .....	11
<b>Tab. 3.1</b>	Übersicht über alle in HELIOS gerechneten Varianten .....	14



## Abkürzungen

BE	Brennelement
BS	Brennstab
DBG	Dampfblasengehalt
SP	Spaltprodukte
SWR	Siedewasserreaktor

**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)