Weiterentwicklung moderner Verfahren zu Neutronentransport und Unsicherheitsanalysen für Kernberechnungen

GRS - 498

Gesellschaft für Anlagen-
und Reaktorsicherheit
(GRS) gGmbH

Weiterentwicklung moderner Verfahren zu Neutronentransport und Unsicherheitsanalysen für Kernberechnungen

Winfried Zwermann
Alexander Aures
Friederike Bostelmann
Jérémy Bousquet
Robert Kilger
Bernard Krzykacz-Hausmann
Ihor Pasichnyk
Yann Périn
Fabian Sommer
Maik Stuke
Kiril Velkov
Matías Zilly

Mai 2018

Anmerkung:

Dieser Bericht ist von der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH mit Mitteln des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie (BMWi) im Rahmen des Vorhabens RS1536 erstellt worden.

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 - 498
ISBN 978-3-946607-83-0

Deskriptoren:

Monte-Carlo-Methode, Neutronentransport, Nukleare Daten, Reaktorkernberechnungen, Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen

Kurzfassung

Der vorliegende Bericht dokumentiert die im RS-Forschungsvorhaben RS1536 „Weiterentwicklung moderner Verfahren zu Neutronentransport und Unsicherheitsanalysen für Kernberechnungen“ durchgeführten Arbeiten und die erreichten Forschungs- und Entwicklungsziele. Das übergeordnete Ziel des Projekts ist die Entwicklung, Validierung und Anwendung von Neutronentransportmethoden und Unsicherheitsanalysen für Reaktorkernberechnungen. Diese Rechenmethoden sollen im Wesentlichen für Fragestellungen, die sich mit dem Kernverhalten von Leichtwasserreaktoren und innovativen Reaktorkonzepten, insbesondere schnellen flüssigmetallgekühlten Reaktoren, beschäftigen, eingesetzt werden. Dazu beitragende Einzelzielsetzungen sind die weitere Optimierung und Validierung deterministischer Berechnungsmethoden mit hoher Orts- und Energieauflösung, die Entwicklung eines gekoppelten Berechnungssystems unter Verwendung der Monte-Carlo-Methode für den Neutronentransport zur Beschreibung zeitabhängiger Reaktorkernzustände, die Prozessierung und Validierung nuklearer Daten, insbesondere hinsichtlich der Kovarianzdaten, die Weiterentwicklung, Validierung und Anwendung Sampling-basierter Methoden zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse, die Erstellung einer Plattform zur Durchführung systematischer Unsicherheitsanalysen für schnelle Reaktorsysteme sowie die Beschreibung von Zuständen schwerer Kernzerstörung mit der Monte-Carlo-Methode. Der deterministische Transport- und Abbrandcode nTRACER kann, allerdings mit hohem Rechenaufwand, für LWR-Ganzkernsimulationen eingesetzt werden. SCALE 6.2, ein Programmsystem für Kritikalitäts-, Abbrand- und Abschirmungsberechnungen sowie zur Prozessierung nuklearer Daten, wurde erfolgreich in die nukleare Berechnungssequenz der GRS integriert und kann für Kritikalitätsberechnungen und Unsicherheitsanalysen verwendet werden. Das gekoppelte Berechnungssystem zur Beschreibung reaktordynamischer Probleme wurde unter Verwendung des Diffusionscodes QUABOX/CUBBOX, des thermohydraulischen Systemcodes ATHLET und des Monte-Carlo-Transportcodes Serpent erfolgreich implementiert. Bei der Überprüfung nuklearer Datenevaluierungen in kontinuierlicher Energiedarstellung für schnelle Systeme ergab sich auch bei Einsatz aktueller Datenbibliotheken eine deutliche Ergebnisbandbreite, was die Durchführung von systematischen Unsicherheitsanalysen empfehlenswert macht. Zur Verwendung mit SCALE 6.2 wurde eine für schnelle Spektren optimierte Wirkungsquerschnittsbibliothek in Multigruppendarstellung sowie die zugehörigen Kovarianzdaten erzeugt und anhand von Brennelementen schneller natriumgekühlter Systeme überprüft. Für nahezu alle Aufgaben zum UAM-LWR-Benchmark Phase I wurden Unsicherheitsanalysen mit

TSUNAMI (Störungstheorie) und XSUSA/SCALE (Sampling) durchgeführt und die entsprechenden Ergebnisse eingereicht. Bezüglich einer Plattform für systematische Unsicherheitsanalysen schneller Reaktorsysteme wurde eine Spezifikation erstellt; erste Unsicherheitsanalysen wurden mit TSUNAMI-3D und XSUSA/SCALE mit den für schnelle Systeme optimierten Kovarianzdaten durchgeführt. Das GRS-Programmsystem XSUSA für Unsicherheitsanalysen bezüglich nuklearer Daten wurde an SCALE 6.2 angepasst, so dass von nun an XSUSA/SCALE 6.2 routinemäßig für Unsicherheitsanalysen von Kritikalitätsberechnungen eingesetzt werden kann. Ab der nächsten Version des deterministischen Gitter- und Abbrandcodes HELIOS-2 wird eine Schnittstelle zu XSUSA bereitgestellt, so dass dann die Möglichkeit besteht, Unsicherheitsanalysen mit HELIOS/XSUSA durchzuführen. Darüber hinaus wurden die im Vorgängervorhaben RS1503 begonnenen Arbeiten zum europäischen NURESAFE-Projekt fortgesetzt und abgeschlossen.

Abstract

This report documents the work performed and the research and development goals reached within the reactor safety research project RS1536 “Development of modern methods with respect to neutron transport and uncertainty analyses for reactor core calculations”. The superordinate goal of the project is the development, validation, and application of neutron transport methods and uncertainty analyses for reactor core calculations. These calculation methods shall mainly be applied to problems related to the core behaviour of light water reactors and innovative reactor concepts, in particular fast reactors cooled by liquid metal. The contributing individual goals are the further optimization and validation of deterministic calculation methods with high spatial and energy resolution, the development of a coupled calculation system using the Monte Carlo method for the neutron transport to describe time-dependent reactor core states, the processing and validation of nuclear data, particularly with regard to covariance data, the development, validation, and application of sampling-based methods for uncertainty and sensitivity analyses, the creation of a platform for performing systematic uncertainty analyses for fast reactor systems, as well as the description of states of severe core damage with the Monte Carlo method. The deterministic transport and depletion code nTRACER can be used for LWR full-core simulations, albeit at a high computational cost. SCALE 6.2, a code system for criticality, depletion, and shielding calculations and for nuclear data processing has been successfully integrated into the GRS nuclear calculation sequence and can be used for criticality calculations and uncertainty analyses. The coupled calculation system for describing reactor dynamics problems has been successfully implemented using the diffusion codes QUABOX/CUBBOX, the thermo-hydraulic system code ATHLET and the Monte Carlo transport code Serpent. When assessing nuclear data evaluations in continuous-energy representation for fast systems, the use of up-to-date data libraries also resulted in a significant bandwidth of results, making systematic uncertainty analyses advisable. For use with SCALE 6.2, a cross section library optimized for fast spectra in multi-group representation and the associated covariance data were generated and validated using fuel assemblies of fast sodium-cooled systems. For almost all the exercises of the UAM-LWR Benchmark Phase I, uncertainty analyses were performed with TSUNAMI (perturbation theory) and XSUSA/SCALE (sampling), and the corresponding results were submitted. Concerning a platform for systematic uncertainty analyses of fast reactor systems, a specification has been prepared; first uncertainty analyses were performed with TSUNAMI-3D and XSUSA/SCALE with the covariance data optimized for fast systems. The GRS code

package XSUSA for uncertainty analysis with respect to nuclear data has been adapted to SCALE 6.2 so that from now on XSUSA/SCALE 6.2 can be routinely used for uncertainty analyses of criticality calculations. As of the next version of the deterministic lattice and depletion code HELIOS-2, an interface to XSUSA will be provided so that it will then be possible to perform uncertainty analyses with HELIOS/XSUSA. Moreover, work regarding the European NURESAFE project, started in the preceding project RS1503, was continued and completed.

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung 1

2 Zielsetzung 3

2.1 Gesamtziel 3

2.2 Deterministische Berechnungsmethoden 4

2.3 Monte-Carlo-Berechnungsmethoden 5

2.4 Nukleare Daten 7

2.5 Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen 8

3 AP1: Deterministische Berechnungsmethoden 11

3.1 Validierung deterministischer Rechenprogramme 11

3.2 Beteiligung am europäischen NURESAFE-Projekt 30

4 AP2: Monte-Carlo-Berechnungsmethoden 41

4.1 Entwicklung eines Verfahrens zur Beschreibung transienter Vorgänge mit Hilfe der Monte-Carlo-Methode 41

4.2 Beschreibung von Zuständen schwerer Kernzerstörung mit der Monte-Carlo-Methode 60

5 AP3: Nukleare Daten 67

5.1 Überprüfung nuklearer Datenevaluierungen für schnelle Systeme 67

5.2 Erzeugung von Kovarianzdaten in Multigruppen-Darstellung 87

6 AP4: Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen 97

6.1 Fortsetzung der Teilnahme am UAM-LWR-Benchmark 97

6.2 Systematische Unsicherheitsanalysen für schnelle Reaktorsysteme 109

6.3 Weiterentwicklung der Sampling-basierten XSUSA-Methodik 114

6.4 Integration der XSUSA-Methodik in SCALE 6.2 und HELIOS-2 130

7 Zusammenfassung 141

Literaturverzeichnis 149

Abbildungsverzeichnis **156**

Tabellenverzeichnis **164**

A Technische Notizen **167**

B Veröffentlichungen **167**

C NURESAFE-Berichte **172**

D Ergebnisdateien zum UAM-LWR-Benchmark Phase I **173**

1 Einleitung

Mit der 13. Novelle des Atomgesetzes wurde festgelegt, dass alle Kernkraftwerke (KKW) in Deutschland schrittweise bis zum Jahr 2022 stillzulegen sind. Bis zu diesem Zeitpunkt muss für die am Netz befindlichen KKW ein sicherer Betrieb gewährleistet sein. Dies soll durch die Einhaltung höchster Sicherheitsansprüche gemäß §7c AtG dem nach fortschreitenden Stand von Wissenschaft und Technik erfolgen. Themen, die hierfür von Bedeutung sind, wurden u. a. in dem Evaluierungsbericht *Nukleare Sicherheitsforschung – Neuorientierung an aktuellen energiepolitischen Rahmenbedingungen* des Kompetenzverbundes Kerntechnik (KVKT) in Abstimmung mit den betreffenden Bundesressorts /KOM 13/ beschrieben.

Ausgewählte Aspekte dieser Themen werden aktuell bei der GRS im Bereich S*icherheitsforschung* von der Abteilung *Kernbrennstoff* bearbeitet. Im Vorhaben RS1536 werden Arbeiten durchgeführt, die zur Weiterentwicklung des Standes von Wissenschaft und Technik substantiell beitragen. Aufgrund langjähriger Entwicklungsarbeit und Anwendungserfahrung verfügt die Abteilung *Kernbrennstoff* über ein umfangreiches Softwaresystem, mit dem u. a. Reaktorkernberechnungen nach Industriestandard (Vorausberechnung homogenisierter Weniggruppen-Daten in Brennelement-Gitterberechnungen, stationäre und transiente Kernberechnungen mit nodalen Diffusionscodes in Kopplung mit Thermohydraulik-Systemcodes) durchgeführt werden können. Des Weiteren werden von der Abteilung Programme eingesetzt, die höherwertige Lösungsmethoden beinhalten (deterministische Transportcodes mit detaillierter Geometriedarstellung und feiner Auflösung der Energieabhängigkeit der nuklearen Daten und Monte-Carlo-Transportcodes), sowie die Unsicherheiten in den Ergebnisgrößen quantifizieren. Diese Methoden werden im Vorhaben RS1536 kontinuierlich verbessert und erweitert, um die Aussagegenauigkeit der Simulationsrechnungen zu erhöhen. Gegenwärtig bezieht sich die Anwendungserfahrung zu einem großen Teil auf (thermische) Leichtwasserreaktoren. Im Prinzip sind die genannten Methoden auch für schnelle Reaktoren einsetzbar. Dabei ist, aufgrund der im Vergleich zu LWR deutlich geringeren Betriebserfahrung, eine quantitative Ermittlung der Ergebnisunsicherheiten unerlässlich. Die Arbeiten des Vorhabens RS1536 werden im Folgenden ausführlich beschrieben.

Für die Durchführung des Vorhabens wurden verschiedene Rechenprogramme verwendet und teilweise weiterentwickelt, die hier kurz aufgelistet werden:

- SCALE/AMPX (ORNL): Umfassendes Programmsystem für Kritikalitäts-, Abbrand- und Abschirmungsberechnungen sowie zur Prozessierung nuklearer Daten.
- MCNP (LANL): Monte-Carlo-Transportcode mit nuklearen Daten kontinuierlicher Energie und in Multigruppendarstellung.
- Serpent (VTT): Monte-Carlo-Transportcode mit nuklearen Daten kontinuierlicher Energie.
- nTRACER (SNU): deterministischer 3d-Transport- und Abbrandcode.
- PARTISN (LANL): deterministischer 3d-Transportcode.
- HELIOS (Studsvik Scandpower): deterministischer 2d-Gitter- und Abbrandcode.
- QUABOX/CUBBOX (GRS): 3d-Diffusionscode.
- ATHLET (GRS): Thermohydraulischer Systemcode.
- XSUSA (GRS): Programmsystem für Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen bzgl. nuklearer Daten.
- KMACS (GRS): Kernsimulator.

2 Zielsetzung

Die in der Einleitung angesprochenen grundlegenden Fragestellungen zur Beschreibung des Kernverhaltens unter Einsatz von deterministischen und stochastischen Neutronentransportmethoden, Erweiterungen für innovative Reaktorkonzepte, sowie die Methoden für begleitende Unsicherheitsanalysen werden in diesem Abschnitt durch die Formulierung von Einzelzielsetzungen für das Forschungsvorhaben RS1536 konkretisiert.

2.1 Gesamtziel

Wie bereits in der Einleitung beschrieben, werden im Vorhaben RS1536 ausgewählte Themenschwerpunkte des Evaluierungsberichts *Nukleare Sicherheitsforschung – Neuorientierung an aktuellen energiepolitischen Rahmenbedingungen* des Kompetenzverbundes Kerntechnik (KVKT) adressiert. Diese sind im Detail

- die technisch-wissenschaftliche Absicherung des verbleibenden Betriebes der deutschen Kernkraftwerke und Forschungsreaktoren,
- die Beurteilung höchster Sicherheitsstandards nuklearer Anlagen im Ausland einschließlich neuer Reaktoren, sowie
- die Schaffung technisch-wissenschaftlicher Grundlagen für die Unterstützung internationaler Regelbildung bezüglich der nuklearen Sicherheit.

Dazu erfolgen Neu- und Weiterentwicklungen, Validierungen und Anwendungen von deterministischen und stochastischen Rechenprogrammen und von Methoden zu Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen; die nukleare Datenbasis wird erweitert und verbessert. Die Arbeiten bauen zum Teil auf den Ergebnissen des BMWi-Forschungsvorhabens RS1503 auf. Im Einzelnen werden folgende Arbeiten durchgeführt:

- weitere Optimierung und Validierung deterministischer Berechnungsmethoden mit hoher Orts- und Energieauflösung,
- Entwicklung eines gekoppelten Berechnungssystems unter Verwendung der Monte-Carlo-Methode für den Neutronentransport zur Beschreibung zeitabhängiger Reaktorkernzustände,
- Prozessierung und Validierung nuklearer Daten, insbesondere hinsichtlich der Kovarianzdaten,

- Weiterentwicklung, Validierung und Anwendung Sampling-basierter Methoden zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse,
- Erstellung einer Plattform zur Durchführung systematischer Unsicherheitsanalysen für schnelle Reaktorsysteme, sowie die
- Beschreibung von Zuständen schwerer Kernzerstörung mit der Monte-Carlo-Methode.

Darüber hinaus werden die im Vorhaben RS1503 begonnenen Arbeiten zum europäischen NURESAFE-Projekt fortgesetzt und abgeschlossen.

Die hieraus resultierenden Einzelziele werden in den folgenden Abschnitten detailliert dargestellt. Die durchgeführten Arbeiten und deren Ergebnisse werden anschließend beschrieben.

2.2 Deterministische Berechnungsmethoden

In den Nachweisverfahren für die Beherrschbarkeit von Transienten, Stör- und Unfällen spielen das Reaktivitätsverhalten und der Kritikalitätszustand des Kerns entscheidende Rollen. Für die Sicherheitsbewertung von Reaktorkernen ist etwa aufgrund der zunehmenden Optimierung von Kernbeladungen eine umfassende 3D-Beschreibung der neutronenphysikalischen Prozesse, vom stationären Anlagenzustand bis hin zu auslegungsüberschreitenden Ereignissen, erforderlich. Darüber hinaus werden deterministische Berechnungsmethoden bei der GRS genutzt, um das für Quelltermberechnungen relevante Nuklidinventar zu bestimmen bzw. abgebrannte Brennstoffe zu charakterisieren (vgl. auch /KOM 13/, Kap. 4.1.2).

Die GRS entwickelt und validiert hierzu u. a. Berechnungsmethoden mit einer expliziten geometrischen Auflösung (d. h. ohne die Notwendigkeit der räumlichen Homogenisierung von Teilbereichen des Reaktors). Zur Durchführung derartiger deterministischer stationärer und transienter Reaktorberechnungen wurde im Rahmen des Vorhabens RS1503 das Rechenprogramm nTRACER /SNU09/ in die nukleare Berechnungskette der GRS aufgenommen. Zur weiteren Absicherung der Aussagesicherheit der Ergebnisse ist es erforderlich, die Validierung von nTRACER durch Nachrechnung von Kritikalitätsbenchmarks, für die experimentelle Ergebnisse vorliegen, zu ergänzen. Dazu werden die LWR-Benchmarks KRITZ-2 und Benchmarks aus der VENUS-Serie herangezogen. Insbesondere die VENUS-9-Experimente sind hierzu besonders geeignet, da in diesen verschiedene für LWR repräsentative Heterogenitäten (z. B. Was-

serspalte, Steuerstabblätter), die eine Reihe von Brennstäben ersetzen, untersucht wurden. Darüber hinaus ist eine Validierung für Ganzkernsimulationen durch Vergleich mit Monte-Carlo-Referenzlösungen und, soweit verfügbar, mit gemessenen Daten erforderlich.

Zur Lösung vieler reaktorphysikalischer Aufgaben wird in der GRS das Programmsystem SCALE 6, bisher in der bis Mitte 2016 aktuellen Version SCALE 6.1 /SCA 11/, eingesetzt, hauptsächlich für Kritikalitäts- und Abbrandberechnungen, und damit zur Erzeugung von Wirkungsquerschnitten für Kernsimulationen. Während des Vorhabens RS1536 wurde eine neue Version SCALE 6.2 /REA 16/ freigegeben, die bis dahin nur als Beta-Version verfügbar war. Zur Integration in das GRS-Programmsystem ist eine sorgfältige Validierung der speziell von GRS benutzten Programmkomponenten von SCALE 6.2 erforderlich.

Innerhalb des siebten EU-Rahmenprogramms wird das Projekt *Nuclear Reactor Safety Simulation Platform* (NURESAFE) /EUR 13/ durchgeführt, welches verstärkt Aspekte der Sicherheit von Kernkraftwerken im Auslegungsbereich beinhaltet und den Anwendern verschiedene Rechenprogramme innerhalb der NURESIM-Plattform bereitstellt. Die GRS sieht eine Beteiligung am Vorhaben als wesentlichen Erkenntnisgewinn für die Reaktorsicherheitsforschung in Deutschland und beteiligte sich am Arbeitspaket *SWR-ATWS mit Unsicherheitsquantifizierung* bereits im Rahmen des Vorhabens RS1503; nach den Fukushima-Ereignissen sowie mit Blick auf den geplanten Bau von ABWR-Blöcken in unserer Nachbarschaft wird die Forschung hinsichtlich der Sicherheit von SWR als besonders wichtig angesehen. Die abschließenden Transientenberechnungen und deren Auswertung konnten innerhalb des Vorhabens RS1503 noch nicht durchgeführt werden; dies erfolgt im Rahmen des Vorhabens RS1536.

2.3 Monte-Carlo-Berechnungsmethoden

Nachweisverfahren für die Beherrschbarkeit von Transienten, Stör- und Unfällen erfordern die Beschreibung von dynamischen Vorgängen in einem Reaktorkern, die zwischen Millisekunden und Minuten andauern, und somit die zeit- und ortsabhängige Modellierung sowohl der neutronenphysikalischen als auch der thermohydraulischen Vorgänge sowie deren Wechselwirkungen untereinander erfordern. Bislang werden hierzu üblicherweise nodale Diffusionsprogramme verwendet, wobei homogenisierte Wirkungsquerschnitte für die Brennelemente mit einem Gittercode vorausberechnet

werden. Eine weitere Steigerung der Simulationsgenauigkeit über deterministische Berechnungsmethoden ohne räumliche Homogenisierung (siehe AP 2.2) hinaus kann durch die Beschreibung des Neutronentransports mit der Monte-Carlo-Methode erreicht werden. Im Vorhaben RS1536 wird dieser Ansatz verfolgt. Dadurch entfällt die Notwendigkeit zur räumlichen Homogenisierung. Die Energieabhängigkeit der nuklearen Daten ist entweder mit Daten kontinuierlicher Energie oder in einer sehr feinen Multigruppenstruktur darstellbar. Allerdings ist es trotz der mittlerweile verfügbaren Computer-Hardware noch immer schwierig, die direkte Simulation zeitabhängiger Vorgänge mit der Monte-Carlo-Methode in Verbindung mit einem Thermohydraulik-Code für Ganzkern-Systeme durchzuführen. Dies liegt daran, dass für Transienten, die keine quasistationäre Behandlung zulassen, sehr unterschiedliche Zeitskalen für die Entstehung von prompten und verzögerten Neutronen zu berücksichtigen sind und somit zur Erfassung des zeitlichen Verlaufs sehr viele Neutronenschicksale betrachtet werden müssen. Im Rahmen des Vorhabens RS1536 wird daher zunächst eine Hybridmethode entwickelt, bei der die Zeitabhängigkeit des Neutronenflusses durch einen deterministischen Code beschrieben wird. Die Wirkungsquerschnitte können dabei ebenso wie die kinetischen Parameter für individuelle Zeitschritte mit Hilfe der vom Monte-Carlo-Code ermittelten räumlichen Neutronenflussverteilung bestimmt werden.

Im Verlauf des Reaktorunglücks in Fukushima konnten nur wenige Aussagen zum Zustand der betroffenen Reaktorkerne bezüglich deren Kritikalität gemacht werden. Dies legt nahe, für Zustände, bei denen die reguläre Geometrie des Reaktorkerns gestört ist, also für die unterschiedlichen Stufen der Kernzerstörung, Methoden zu entwickeln, mit denen derartige Geometrien modelliert werden können. Damit können zuverlässigere Abschätzungen zur Kritikalität vorgenommen und auch Wirkungsquerschnittsdaten erzeugt werden. Diese können anschließend gegebenenfalls für eine Beschreibung des beschädigten Reaktors mit einem Kernsimulator, gekoppelt mit Codes zur Beschreibung des thermohydraulischen und thermomechanischen Verhaltens, verwendet werden. Zur Beschreibung dieser Zustände wird die Monte-Carlo-Methode eingesetzt.

2.4 Nukleare Daten

Nukleare Daten bilden die Grundlage aller Reaktorkernberechnungen. Daher ist es von größter Wichtigkeit, für die Kernsimulation vom stationären Anlagenzustand bis hin zu auslegungsüberschreitenden Ereignissen Wirkungsquerschnittsbibliotheken höchster Qualität bereitzustellen. Im Gegensatz zu nuklearen Daten zur Simulation von LWR-Anlagen, deren Unsicherheiten teilweise durch eine erhebliche Betriebserfahrung ausgeglichen werden können, fehlt diese Möglichkeit bei innovativen Reaktorkonzepten ganz oder zum großen Teil. So wurden bei einem internationalen Vergleich systematische Unterschiede in den Multiplikationsfaktoren aus Berechnungen mit den evaluierten Datenbibliotheken JEFF-3.1 /SAN 09/ und ENDF/B-VII /HER 11/ beobachtet. Dies betrifft unmittelbar die Aussagesicherheit für neue Reaktorkonzepte mit härteren Neutronenspektren. Es ist daher dringend erforderlich, diesen Unterschieden nachzugehen. Dazu muss identifiziert werden, welche Isotope die signifikanten Beiträge liefern, und ob die neuesten Evaluierungen (seit kurzem ist JEFF-3.2 /JEF 14/ verfügbar) dazu beitragen, diese Unterschiede zu reduzieren. Von besonderer Bedeutung ist hier auch die Nachrechnung von kritischen Experimenten mit schnellen Neutronenspektren.

Mittels Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen (siehe Abschnitt 2.5) ist die Aussagesicherheit von Simulationen zu quantifizieren. Für die systematische Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalyse bezüglich der Unsicherheiten in nuklearen Daten dienen die Kovarianzmatrizen der nuklearen Datenbibliotheken als Grundlage. Um diese verwenden zu können, müssen sie jedoch vorher von ihrer Darstellungsweise in den Basisdateien in eine Multigruppenstruktur verarbeitet werden, welche der Energiegruppenstruktur der Neutronentransportrechnung entspricht. Mit dem Programmsystem AMPX-2000 können systematisch Kovarianzdaten von Nukliden verarbeitet werden, um sie anschließend für die Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalyse bereitstellen zu können. Das System AMPX-2000 ist Teil der neuen Version SCALE 6.2; die damit prozessierten Wirkungsquerschnitts- und Kovarianzdaten sind direkt mit den Programmen von SCALE 6.2 einsetzbar. Dies wird insbesondere deshalb als wichtig angesehen, da zum einen die bisher eingesetzten Kovarianzdaten aus dem SCALE-System aus verschiedenen Datenquellen stammen. Hier kann durch Verwendung einheitlicher Basisdaten (ENDF/B-VII) mehr Konsistenz geschaffen werden. Zum anderen liegen die bisherigen SCALE-6-Kovarianzdaten in einer festen Energiegruppenstruktur (44 Gruppen) vor, die nicht für alle Spektralverhältnisse optimal ist. Dies ist zum Beispiel für die Sensitivitäts-

und Unsicherheitsanalysen von Reaktorsystemen mit einem schnellen Neutronenflussspektrum wichtig, da sonst der schnelle Energiebereich mit geringer Genauigkeit aufgelöst wird. Durch die eigene Prozessierung der Kovarianzdaten kann die Gruppenstruktur systemspezifisch optimal gewählt werden.

2.5 Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen

Um die Aussagesicherheit von Berechnungsmethoden zur Reaktorsimulation quantitativ bewerten zu können, ist eine systematische Behandlung der Unsicherheiten in den Berechnungen erforderlich, die durch Unsicherheiten in den Eingangsgrößen verursacht werden. Dies gilt ganz besonders für den Einfluss der nuklearen Daten und deren Verarbeitung in den wesentlichen Berechnungsschritten Zellrechnung zur Resonanzselbstabschirmung, Gitter-/Abbrandberechnungen für Brennelemente mit Bereitstellung von Weniggruppendaten und Berechnung des stationären und zeitabhängigen Kernverhaltens. Inzwischen wurde die zweite Phase des UAM-LWR-Benchmarks (*Uncertainty Analysis in Modelling for Light Water Reactors*) begonnen /POR 16/. Für die Abteilung *Kernbrennstoff* ist dabei in erster Linie das Arbeitspaket *Exercise II-2: Time-Dependent Neutronics* relevant. Dabei werden einerseits Brennelement-Abbrandrechnungen und andererseits zeitabhängige neutronenkinetische Vorgänge untersucht. Die GRS hat bereits erste Voruntersuchungen bzgl. der Brennelement-Abbrandrechnungen durchgeführt. Ziel des Vorhabens RS1536 ist es, das genannte Arbeitspaket (Brennelement-Abbrandrechnungen und zeitabhängige neutronenkinetische Vorgänge) möglichst vollständig zu bearbeiten.

Noch wichtiger als für Leichtwasserreaktoren, für die schon umfassende Erfahrung durch den Betrieb einer großen Anzahl von Anlagen über viele Jahre besteht, sind Unsicherheitsanalysen für Leistungsreaktoren mit schnellem Spektrum, für die im Vergleich dazu fast noch keine Betriebserfahrung vorhanden ist und die wenigen existierenden Daten praktisch nicht zugänglich sind. Die Ergebnisse von Simulationen können also kaum mit Messergebnissen verglichen werden. Zur Einschätzung der Aussagesicherheit von Untersuchungen von Betriebstransienten und Störfällen, die zur Beurteilung neuer Reaktorkonzepte nötig sind, sind also systematische Unsicherheitsanalysen unumgänglich. Solche Unsicherheiten werden für die nukleare Berechnungskette im Rahmen des Vorhabens RS1536 durchgeführt. Dazu wird es als sinnvoll erachtet, soweit wie möglich analog zur ersten Phase des UAM-LWR-Benchmarks /IVA 16/ vorzugehen. Das Ziel dieses Unterfangens ist es, am Ende des entsprechen-

den Teils der Berechnungskette die Unsicherheiten in den sicherheitsrelevanten Parametern repräsentativer schneller Systeme zu quantifizieren.

Am Programm XSUSA zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse werden weitere Entwicklungsarbeiten vorgenommen, die insbesondere auch für die Durchführung der genannten Analysen nötig sind. Dies betrifft insbesondere die Berücksichtigung der Unsicherheitsdaten für verzögerte Neutronen, sowie Anpassungen für schnelle Systeme. Unsicherheitsdaten für verzögerte Neutronen beeinflussen insbesondere die Unsicherheiten in den kinetischen Parametern. Erste Untersuchungen wurden im Rahmen des Vorhaben RS1503 durchgeführt. Das Vorhaben RS1536 hat die vollständige Integration in das XSUSA-System zum Ziel. Zusätzlich zu den wissenschaftlich-technischen Aspekten ist es Ziel der Entwicklung, das Programm XSUSA dahingehend zu ertüchtigen, dass die Qualitätsmerkmale (Portabilität, Benutzerfreundlichkeit, Wiederverwendbarkeit) der *QM-Richtlinie Programmentwicklung* der GRS umgesetzt werden.

3 AP1: Deterministische Berechnungsmethoden

Der folgende Abschnitt beschreibt die durchgeführten Arbeiten am nuklearen Programmsystem der GRS bezüglich deterministischer Rechenmethoden. Dies sind die weitere Validierung des direkten Ganzkern-Transport-Codes nTRACER und Validierungsarbeiten an der neuen SCALE-Version 6.2. Im Arbeitspaket *SWR-ATWS mit Unsicherheitsquantifizierung* wurden abschließende Transientenberechnungen und die Auswertung bezüglich sicherheitsrelevanter Ergebnisse, insbesondere des kritischen Leistungsverhältnisses, der maximalen Peaking-Faktoren, der maximalen Brennstab- und Hüllrohrtemperaturen, durchgeführt.

3.1 Validierung deterministischer Rechenprogramme

Validierung des direkten Ganzkern-Transport-Codes nTRACER

Die Validierung des Transportcodes nTRACER /SNU 09/ für die Berechnung von Leichtwasserreaktoren wurde in verschiedenen Stufen durchgeführt. In einem ersten Schritt wurden die für Leichtwasserreaktoren repräsentativen kritischen Experimentreihen VENUS-9 /NEA 17/ und KRITZ-2 /NEA 17/ herangezogen.

Die VENUS-9-Experimentreihe umfasst mehrere Experimente, die im Nullleistungsreaktor VENUS im belgischen Forschungszentrum SCK/CEN in Mol zwischen 1967 und 1968 durchgeführt wurden. Das Brennstabgitter besteht aus zwei Regionen. Die Brennstäbe der einen Region enthalten MOX-Brennstoff, der aufgrund seiner Zusammensetzung Brennstoff nach einem Jahr Betriebszeit repräsentiert. Diese Region ist von drei Seiten mit einem Brennstabgitter aus frischem UO_2-Brennstoff umgeben. In drei von vier Experimenten werden sieben UO_2-Brennstäbe an der Grenze zur MOX-Region durch folgende Materialien ersetzt: i) eine Aluminiumplatte mit einer Wandstärke von 0.905 cm, ii) sieben B_4C-Absorberstäbe und iii) Zellen, die nur mit Wasser gefüllt sind. Das Brennstabgitter für die B_4C-Anordnung ist in Abb. 3.1 dargestellt. Die in den Experimenten entlang der Brennstabreihe „UO_2 DEM“ / „MOX DEM“ (DEM = „demontable“ – dies sind speziell für die Messung von Reaktionsraten präparierte Brennstäbe) gemessene Stableistungsverteilung dient zum Vergleich mit den berechneten Werten. In den Experimenten war das Brennstabgitter exzentrisch in einem zylindrischen Behälter aus Stahl positioniert und durch Einstellen einer

kritischen Wasserhöhe wurde Kritikalität erreicht. Die Temperatur aller Materialien war 293 K.

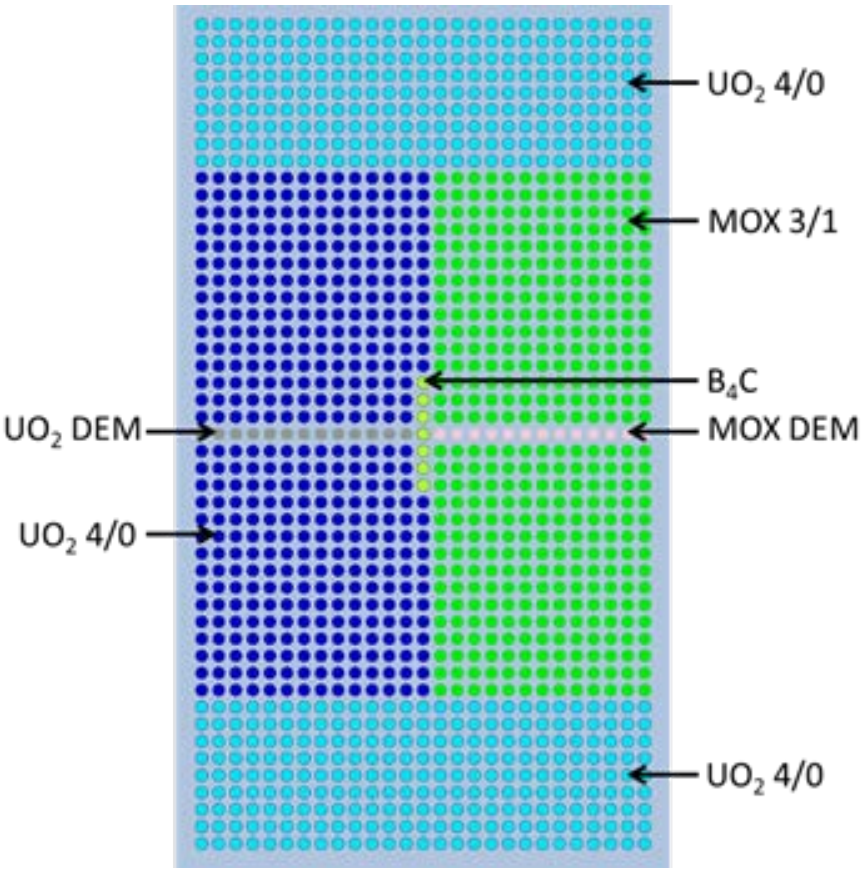

Abb. 3.1 Brennstabgitter der VENUS-9-Experimente, hier dargestellt mit den B_4C-Absorberstäben

Für die Simulationen mit nTRACER wurde auf die Modellierung des Stahlbehälters verzichtet, dabei jedoch eine den Kern umgebende Wasserschicht von ca. 35 cm modelliert. Des Weiteren wurden Strukturelemente und die Teile der Brennstäbe, welche sich oberhalb der kritischen Wasserhöhe befinden, nicht modelliert und durch Vakuumrandbedingungen ersetzt. Der Grund dafür ist, dass das Fehlen eines Moderators – in diesem Fall Wasser – zwischen den Brennstäben das Erreichen einer konvergenten Lösung bei der Neutronentransportrechnung verhindert. Dies zeigt eine nTRACER-Testrechnung mit einem vollständigen Modell. Um den Einfluss der Modellvereinfachungen abzuschätzen, wurden dieselben Vereinfachungen auf bereits vorhandene Modelle für den Monte-Carlo-Code KENO-V.a des Programmsystems SCALE 6.2 /REA 16/ angewendet. Unter Anwendung der ENDF/B-VII.0-Bibliothek mit 238 Energiegruppen ergibt sich eine Reaktivitätsdifferenz von ca. -1700 pcm (1 pcm = 10^{-5}) für das nominale Modell, das Modell mit der Aluminiumplatte und das Modell mit den

Wasserzellen. Für das B_4C-Modell resultiert die Vereinfachung in einer Reaktivitätsdifferenz von ca. -1000 pcm.

Im Folgenden werden für die Anordnungen die mit nTRACER und KENO-V.a berechneten Multiplikationsfaktoren miteinander verglichen; danach folgt ein Vergleich der Stableistungsverteilungen aus nTRACER mit den experimentellen Werten. Für nTRACER wurde auf eine Multigruppenbibliothek mit 47 Energiegruppen basierend auf ENDF/B-VI zurückgegriffen. Die KENO-V.a-Rechnung wurde mit 8000 aktiven Generationen mit je 25 000 Neutronenschicksalen durchgeführt.

Im Vergleich zum Stand des Zwischenberichts (GRS-452) wurden einige Eingabeparameter in den nTRACER Modellen modifiziert, sodass im vorliegenden Bericht aktualisierte Ergebnisse für die VENUS-9-Experimentreihe gezeigt werden.

In Tab. 3.1 wird der Vergleich der Multiplikationsfaktoren und der entsprechenden Reaktivitätsdifferenzen dargestellt.

Tab. 3.1 Multiplikationsfaktoren und Reaktivitätsdifferenzen für die VENUS-9-Anordnungen aus nTRACER und KENO-V.a

Anordnung	**nTRACER k_{eff}**	**KENO V.a k_{eff}**	**Δρ (pcm)**
nominal	0.97686	0.97908	-232
Al-Platte	0.97562	0.97786	-234
B_4C	0.98332	0.98486	-159
H_2O	0.97457	0.97712	-267

Generell weisen beide Neutronentransportcodes eine gute Übereinstimmung auf. Als geringste Differenz ergibt sich -159 pcm für die B_4C-Anordnung und als größte Differenz -267 pcm für die H_2O-Anordnung.

In den Abb. 3.2 – Abb. 3.5 werden für die Anordnungen die experimentell bestimmten Stableistungsverteilungen und die von nTRACER als auch die von KENO-V.a berechneten Stableistungsverteilungen gezeigt. Für alle Anordnungen zeigen nTRACER und KENO-V.a entlang der DEM Brennstabpositionen sehr gute Übereinstimmung. Im Weiteren wird deswegen nur auf nTRACER-Ergebnisse und die experimentellen Werten eingegangen.

Bei der nominalen Anordnung zeigt nTRACER am Rand der UO_2-Region, Position -22, sehr gute Übereinstimmung mit dem Experiment. An den Positionen -21 bis -10 werden die experimentellen Werte mit einer maximalen Abweichung von 2.5 % von nTRACER überschätzt. Die experimentellen und die berechneten Stableistungen an den Positionen -9 bis -5, welche an der Grenze zwischen der UO_2- und MOX-Brennstoffzone liegen, zeigen ebenfalls sehr gute Übereinstimmung. Mit abnehmender Distanz zum äußeren Rand der MOX-Brennstoffzone ist zu erkennen, dass die experimentellen Werte unterschätzt werden. Die größte Abweichung mit -3.5 % tritt an der Position 2 auf.

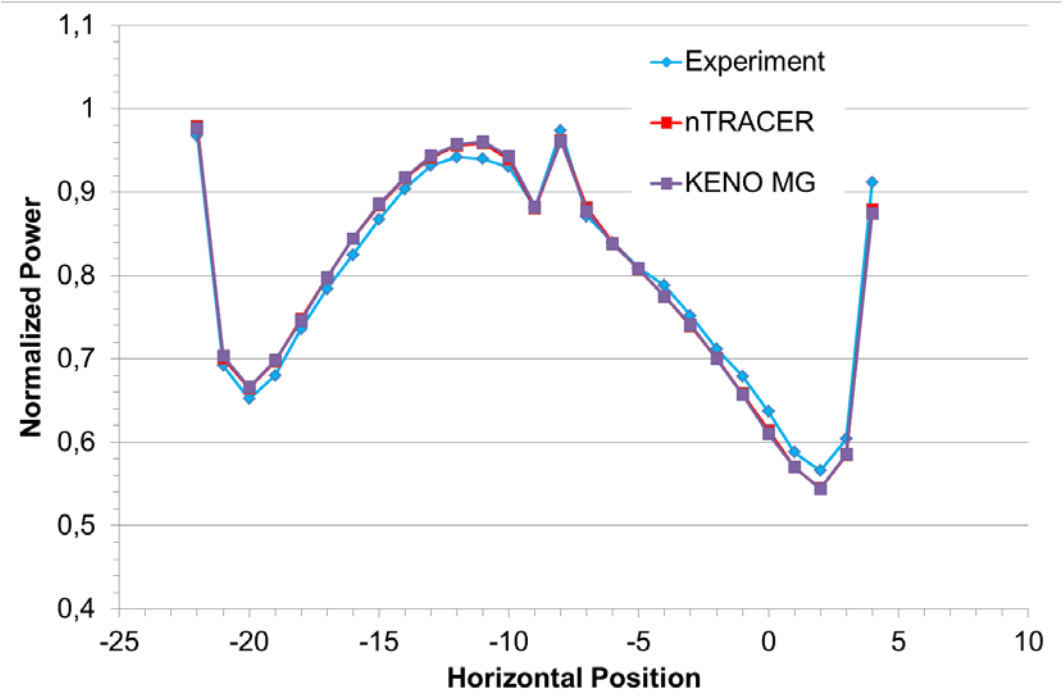

Abb. 3.2 Gemessene und berechnete Stableistungsverteilungen für die nominale VENUS-9-Anordnung

In Abb. 3.3 sind die Stableistungsverteilungen für die Anordnung mit der Aluminiumplatte dargestellt. An den äußeren Stabpositionen ergeben sich ähnliche Abweichungen wie für die nominale Anordnung. Die Stableistungen der UO_2-Brennstäbe auf den Positionen -21 bis -10 werden von nTRACER mit einer maximalen Abweichung von 3.0 % überschätzt. Für alle MOX-Brennstäbe ergibt sich dagegen eine Unterschätzung mit einer maximalen Abweichung von -4.0 % an der äußersten Brennstabposition.

Abb. 3.3 Gemessene und berechnete Stableistungsverteilungen für die VENUS-9-Anordnung mit Aluminiumplatte

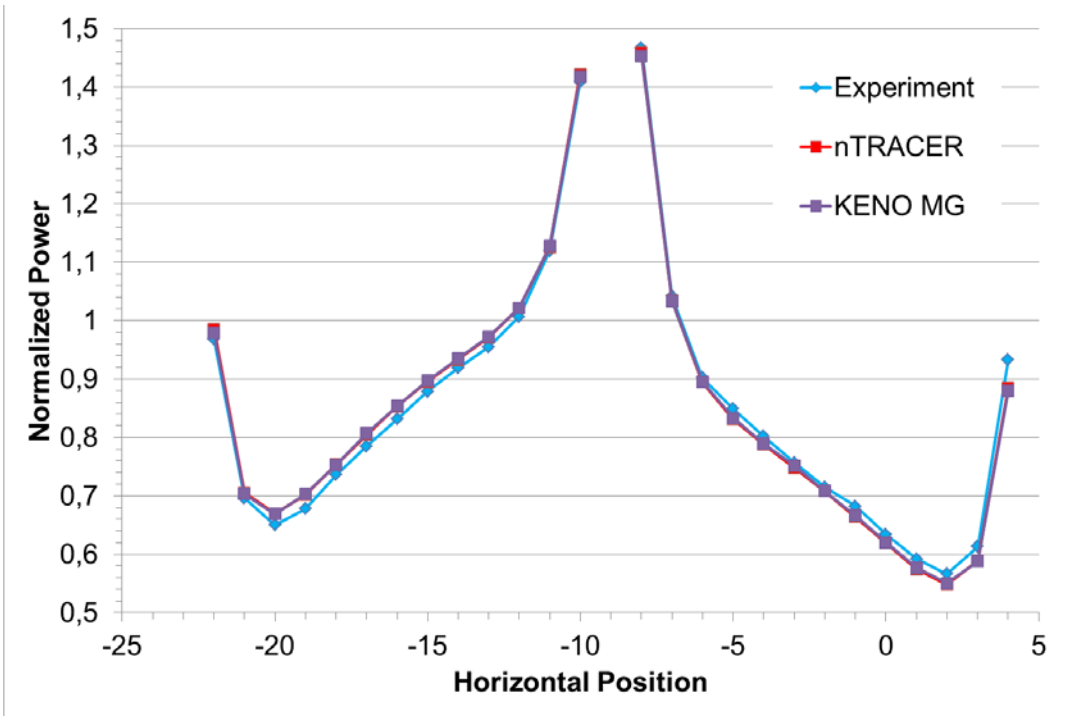

Abb. 3.4 Gemessene und berechnete Stableistungsverteilungen für die VENUS-9-Anordnung mit Wasserspalt

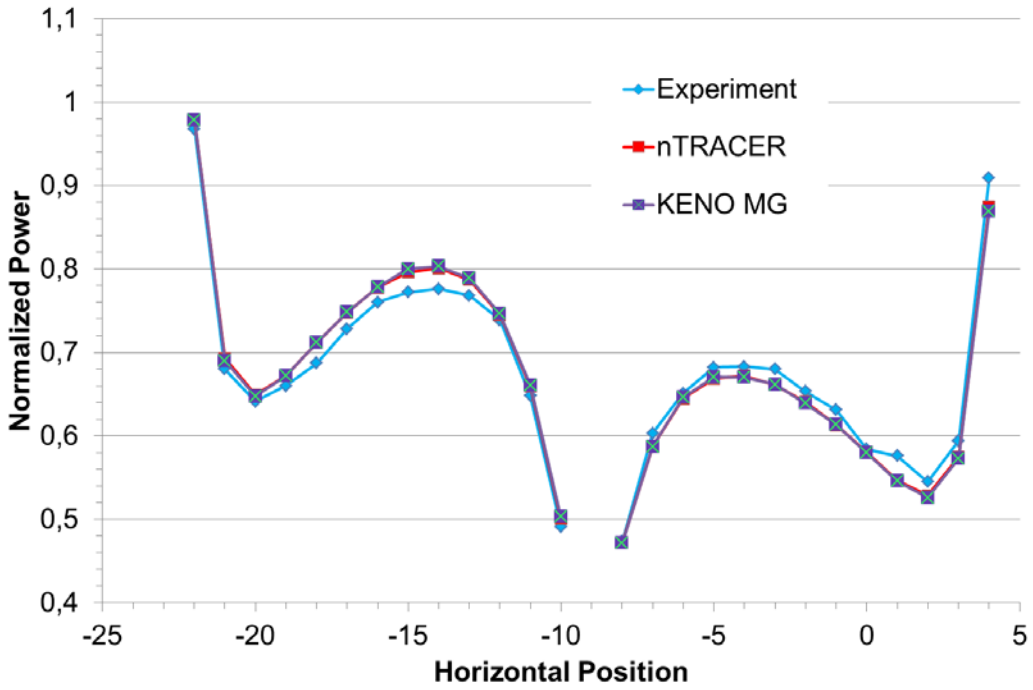

Abb. 3.5 Gemessene und berechnete Stableistungsverteilungen für die VENUS-9-Anordnung mit B_4C-Absorberstäben

In Abb. 3.4 werden die Stableistungsverteilungen für die Anordnung mit den Wasserzellen gezeigt. An den Positionen in der Umgebung des Wasserspalts liegt die Abweichung zwischen nTRACER und dem Experiment bei unter 1.0 %. Zu den Rändern des Kerns hin nimmt die Abweichung zu. In der UO_2-Region wird die Leistung überschätzt. An der Position -19 ergibt sich ein maximaler Wert von 3.6 %. In der MOX-Region wird die Leistung unterschätzt. Die maximale Abweichung ergibt sich hier ebenfalls am Rand mit einem Wert von -5.2 %.

In Abb 3.5 werden die Stableistungsverteilungen für die Anordnung mit den B_4C Absorberstäben gezeigt. Am Kernrand der UO_2-Region und in der Umgebung der Absorberstäbe zeigen die experimentellen und die berechneten Stableistungen eine sehr gute Übereinstimmung. Größere Abweichungen von max. 3.2 % bzw. -5.5 % treten in der Mitte der UO_2- bzw. MOX-Region auf.

Der Grund für die Abweichungen in den Stableistungsverteilungen resultiert vermutlich aus den Vereinfachungen, die in den nTRACER und KENO Modellen eingeführt wurden. Der Grund für die höheren Leistungswerte an den äußeren Positionen des Brennstabgitters liegt vermutlich in der größeren Wassermenge, die die äußeren Brennstäbe umgibt. Damit unterscheiden sich die Randbedingungen von denen, die in der bereits

vorher durchgeführten Resonanzbehandlung der Wirkungsquerschnitte angenommen werden, nämlich reflektierende Randbedingungen an allen vier Seiten. Aus demselben Grund wird wahrscheinlich auch die Leistung der UO_2-Brennstäbe in der Nähe der MOX-Brennstäbe unterschätzt, da durch die Nachbarschaft der MOX-Brennstäbe ein härteres Neutronenflussspektrum präsent ist und somit nicht dem der Resonanzbehandlung entspricht.

Ebenfalls wurde auf Basis der ungestörten Konfiguration des VENUS-9-Kerns die Verwendung von selbst erstellten Multigruppen-Wirkungsquerschnitten getestet. Hierzu wurden Neutronentransportrechnungen mit anschließender Wirkungsquerschnittshomogenisierung für die verschiedenen Stabzellen des VENUS-9 Kerns mit der T-XSEC-Sequenz des Programmsystems SCALE 6.1 durchgeführt. Dabei wurde für jede Stabzelle eine Multigruppenbibliothek mit 18 Energiegruppen und eine mit 7 Energiegruppen erstellt. Insbesondere wurde das Ziel verfolgt, auf die Transportkorrektur des Streuwirkungsquerschnitts zu verzichten und Streumatrizen höherer Ordnung in die Bibliothek mit aufzunehmen. Über ein selbst implementiertes Skript konnten die Multigruppenbibliotheken aus der SCALE Ausgabe ausgelesen und in die Bibliotheksdatei für nTRACER überführt werden. Dabei stand die Verwendung eines vollständigen und eines speicherplatzsparenden Formats zur Auswahl. Zum Ausschließen von Fehlern wurden beide Formate implementiert. Mit der 18-Gruppen-Bibliothek im speicherplatzsparenden Format brach das Programm immer wieder ab, so dass ebenfalls das vollständige Format getestet wurde. Jedoch konnte auch damit kein Erfolg erzielt werden. Um auszuschließen, dass die beobachteten Probleme durch die 18-Gruppen-Bibliothek verursacht werden, wurde ebenfalls die Bibliothek mit 7 Energiegruppen getestet. Jedoch war auch mit dieser Bibliothek in beiden Formaten kein Erfolg zu erreichen. Auch nach mehrmaliger Rücksprache mit den Programmentwicklern konnten mit nTRACER keine Ergebnisse mit den selbst generierten Multigruppenbibliotheken einschließlich der Verwendung von Streumatrizen höherer Ordnung erreicht werden.

Die KRITZ-2-Experimente wurden von September 1972 bis Februar 1973 in Schweden durchgeführt. Zu dieser Reihe von Experimenten gehören die Anordnungen KRITZ-2:1, KRITZ-2:13 und KRITZ-2:19. KRITZ-2:1 besteht aus einem Brennstabgitter mit 44 x 44 UO_2-Brennstäben, die in einem Abstand von 14.85 mm zueinander angeordnet sind. KRITZ-2:13 hat 40 x 40 UO_2-Brennstäbe, zeichnet sich jedoch durch einen Brennstababstand von 16.35 mm aus. Der Kern von KRITZ-2:19 besteht aus 25 x 24 (UO_2, PuO_2)-Brennstäben, welche in einem Abstand von 18.00 mm zueinander angeordnet

sind. Die kritischen Experimente wurden sowohl bei Raumtemperatur als auch bei Temperaturen von bis zu 248.5 °C durchgeführt /NEA 17/.

Wie bereits bei der Modellierung der VENUS-9-Experimente mit nTRACER wurden auch Vereinfachungen für die KRITZ-2-Modelle angewandt. Der Kernbehälter und der Druckbehälter sind nicht modelliert. Aufgrund der bekannten Konvergenzprobleme von nTRACER bei nicht vorhandenem Moderator zwischen den Brennstäben wurde ebenfalls auf die Modellierung des Kerns oberhalb der kritischen Wasserhöhe verzichtet. In Abb. 3.6 ist der Reaktorkern mit dem umgebenden Moderator des vereinfachten KRITZ-2:1-Modells dargestellt.

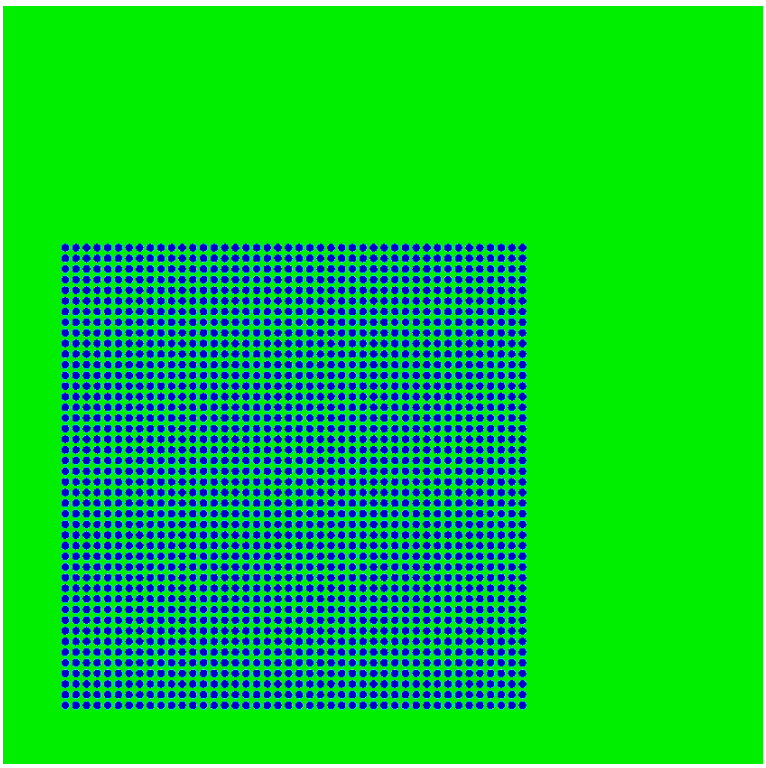

Abb. 3.6 Horizontaler Schnitt durch das vereinfachte KRITZ-2:1-Modell

Um die Auswirkungen der Vereinfachungen zu ermitteln, wurden mit KENO-V.a Neutronentransportrechnungen für die Referenzmodelle und für die vereinfachten Modelle durchgeführt. In Tab. 3.2 sind die jeweiligen Multiplikationsfaktoren und die zugehörigen Reaktivitätsdifferenzen angegeben. Je nach Anordnung resultieren die Vereinfachungen in Reaktivitätsdifferenzen von -232 pcm bis hin zu -918 pcm.

Tab. 3.2 Multiplikationsfaktoren der originalen und der vereinfachten Modelle für die KRITZ-2-Anordnungen ermittelt mit KENO-V.a

Anordnung	Temperatur [°C]	Original-Modell k_{eff}	Vereinfachtes Modell k_{eff}	Δρ [pcm]
KRITZ-2:1	19.7	0.99720	0.98815	-918
KRITZ-2:1	248.5	0.99456	0.98997	-466
KRITZ-2:13	22.1	0.99925	0.99652	-274
KRITZ-2:13	243	0.99720	0.99419	-303
KRITZ-2:19	21.1	1.00176	0.99887	-289
KRITZ-2:19	235.9	0.99915	0.99684	-232

In Tab. 3.3 sind die Multiplikationsfaktoren der vereinfachten KRITZ-2-Anordnungen, die mit nTRACER und KENO-V.a für die experimentelle kritische Wasserhöhe berechnet wurden, dargestellt. Es ist eine gute Übereinstimmung zwischen den beiden Neutronentransportprogrammen zu erkennen. Die geringste Reaktivitätsdifferenz von -27 pcm stellt sich für KRITZ-2:13 für den heißen Zustand ein. Die größte Abweichung beträgt 375 pcm und wird für KRITZ-2:19 bei Raumtemperatur berechnet.

Tab. 3.3 Multiplikationsfaktoren und Reaktivitätsdifferenzen für die vereinfachten KRITZ-2 Anordnungen aus nTRACER und KENO-V.a

Anordnung	Temperatur [°C]	Exp. kritische Wasserhöhe [mm]	nTRACER k_{eff}	KENO-V.a k_{eff}	Δρ [pcm]
KRITZ-2:1	19.70	652.8	0.98657	0.98815	162
KRITZ-2:1	248.50	1055.2	0.99099	0.98997	-104
KRITZ-2:13	22.10	961.7	0.99583	0.99652	70
KRITZ-2:13	243.00	1109.6	0.99446	0.99419	-27
KRITZ-2:19	21.10	665.6	0.99514	0.99887	375
KRITZ-2:19	235.90	1000.1	0.99470	0.99684	215

Darüber hinaus wurden mit nTRACER Berechnungen für das C5G7-TD-Benchmark der OECD/NEA durchgeführt. Hierzu wird das bestehende Modell basierend auf der Spezifikation aus dem Jahr 2004 an die neue Spezifikation, die im Mai 2016 freigegeben wurde, angepasst. Der aus UO_2- und MOX-Brennelementen bestehende Reaktorkern ist auf eine Länge von 128.52 cm verkürzt und besteht nun aus einem axialen Wasserreflektor auf der Ober- sowie auf der Unterseite mit einer Breite von 21.42 cm. Der radiale Wasserreflektor mit einer Breite von 21.42 cm bleibt unverändert. Die verwendeten Multigruppen-Wirkungsquerschnitte sind in der Spezifikation für sieben Energiegruppen gegeben. Es handelt es sich um transportkorrigierte P_0-Wirkungsquer-

schnitte, die für zwei räumlich homogenisierte Zonen, nämlich für die Brennstoff-Hüllrohr-Zone und für den Moderator, gegeben werden. Da in der neuen Spezifikation sowohl die Isotopendichten für die einzelnen Materialien als auch die detaillierte Brennstabgeometrie gegeben sind, wird auch ein Modell mit expliziter Brennstabgeometrie erstellt. Für einen Code-zu-Code-Vergleich wird auf ein bereits bestehendes Modell für den Monte-Carlo-Neutronentransportcode Serpent /LEP 15/ zurückgegriffen. Da Serpent mikroskopische Wirkungsquerschnitte mit kontinuierlicher Energiedarstellung basierend auf der ENDF/B-VII.0-Bibliothek verwendet, gilt der berechnete Multiplikationsfaktor von 1.14628(6) als Referenz. nTRACER ermittelt für das Modell mit expliziter Brennstabgeometrie und unter Verwendung einer Multigruppenbibliothek (ENDF/B-VI) mit 47 Energiegruppen einen Multiplikationsfaktor von 1.13474. Es ergibt sich somit eine Reaktivitätsdifferenz von 887 pcm. Die Ursache für die deutliche Abweichung ist vermutlich auf die 47-Gruppen-Bibliothek zurückzuführen, welche auf der älteren ENDF/B-VI-Bibliothek basiert. Bei Anwendung des räumlich homogenisierten Modells mit den transportkorrigierten Wirkungsquerschnitten wird ein Multiplikationsfaktor von 1.17675 bestimmt. Die sehr große Reaktivitätsdifferenz von 2258 pcm zu dem Referenzergebnis verdeutlicht, dass hier die Benutzung von transportkorrigierten, räumlich homogenisierten Wirkungsquerschnitten eine zu grobe Näherung darstellt.

Im Hinblick auf die Anwendung von nTRACER für Ganzkernsimulationen werden drei Anwendungsfälle des BEAVRS-Benchmarks /HOR 13/ nachgerechnet. Das BEAVRS-Benchmark (Benchmark for Evaluation and Validation of Reactor Simulations) wurde definiert, um die Genauigkeit von Reaktorphysikprogrammen für die Nachrechnung von Betriebszyklen von Druckwasserreaktoren zu ermitteln. Es beinhaltet detaillierte Geometrie- und Betriebsdaten von zwei Zyklen eines Druckwasserreaktors. In Abb. 3.7 ist ein Schnitt durch den Reaktorkern (¼-Kern-Darstellung) skizziert.

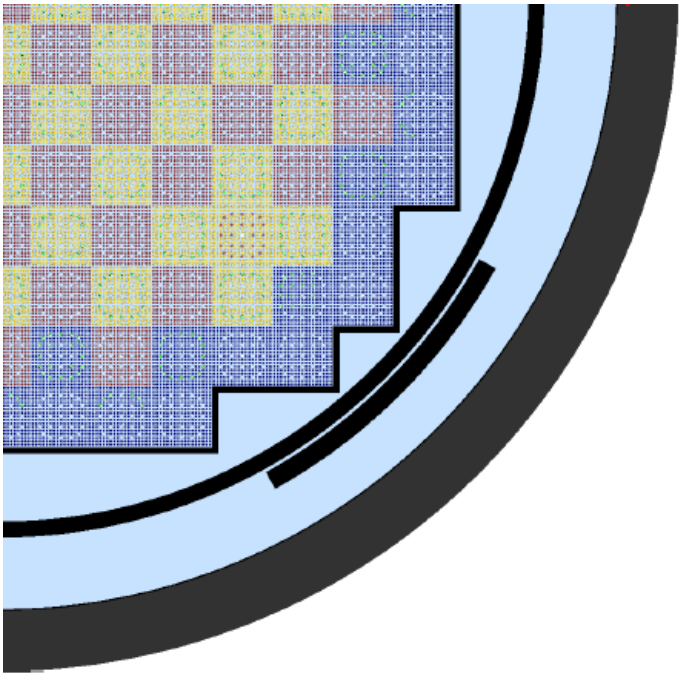

Abb. 3.7 Horizontaler Schnitt durch den Reaktorkern des BEAVRS-Benchmarks

Die drei nachgerechneten Fälle entsprechen der Spezifikation des ersten Betriebszyklus. Zwei davon sind stationäre Rechnungen, bei denen der Multiplikationsfaktor unter den folgenden Zuständen für den Ganzkern ermittelt wird: i) Nulllast heiß mit gezogenen Steuerelementen und einer Borkonzentration von 975 ppm, ii) Nulllast heiß mit teilweise eingefahrenen Steuerelementen und einer Borkonzentration von 902 ppm. Bei Fall iii) wird eine Abbrandberechnung für den ersten Zyklus mit diskreten Abbrandschritten bis zu einem totalen Abbrand von 13 GWd/t Schwermetall (HM) durchgeführt. Der Betriebszustand ist Volllast und die Borkonzentration wird nach jedem Abbrandschritt so angepasst, dass der Multiplikationsfaktor 1.0 beträgt. Die Rechnungen wurden auf dem GRS-Rechencluster mit 28 MPI-Prozessen mit jeweils 12 OpenMP-Prozessen durchgeführt. Für die stationären Szenarien i) und ii) ergeben sich Multiplikationsfaktoren von 0.99865 bzw. 1.00025. Bei Szenario iii), der Abbrandberechnung, ergibt sich zu Beginn des Zyklus eine Borkonzentration von 638 ppm. Bei einem Abbrand von 12 GWd/t HM bzw. 288 Volllasttagen beträgt die Borkonzentration 63 ppm. Bei 13 GWd/t HM bzw. 312 Volllasttagen stellt sich trotz einer Borkonzentration von 0 ppm nur noch ein Multiplikationsfaktor von 0.99891 ein. Insgesamt kann damit das Reaktivitätsverhalten des Kerns über einen Abbrandzyklus gut wiedergegeben werden.

Der Code nTRACER kann auch zur Erzeugung homogenisierter Zweigruppenwirkungsquerschnitte (WQ) verwendet werden, die in nodalen Ganzkern-Diffusionscodes

wie QUABOX/CUBBOX verwendet werden. Diese Option wird ebenfalls am Beispiel des BEAVRS-Benchmarks /HOR 13/ erprobt. Die im ersten Zyklus eingesetzten Brennelement(BE)-Typen werden zweidimensional mit reflektierenden Randbedingungen als nTRACER-Modell abgebildet. Unter Verwendung einer auf ENDF-B/VII basierenden, von der Seoul National University anhand eines UOX-LWR-Neutronenspektrums prozessierten 47-Gruppen-Bibliothek werden die WQ erzeugt. Für diese Betrachtung werden die Abstandhalter entsprechend ihres Volumenanteils im Brennelement im Kühlmittel homogen verschmiert. Vergleichsrechnungen werden mit dem Monte-Carlo-Code Serpent durchgeführt.

In Tab. 3.4 sind die bei Nulllast-heiß-Bedingungen berechneten Multiplikationsfaktoren für die Verschiedenen BE-Typen aufgelistet.

Tab. 3.4 Multiplikationsfaktoren für die BEAVRS-Brennelemente aus Serpent im Vergleich mit nTRACER

BE-Typ	Multiplikationsfaktor k		□k
	Serpent	nTRACER	[pcm]
1.6-0/0	0.99271	0.99577	310
1.6-0/1	0.61825	0.61944	312
2.4-0/0	1.13502	1.14087	452
2.4-0/1	0.74147	0.74414	484
2.4-12/0	1.01165	1.01539	364
2.4-16/0	0.97321	0.97655	351
3.1-0/0	1.21710	1.22491	524
3.1-0/1	0.82102	0.82518	614
3.1-8/0	1.13793	1.14428	488
3.1-12/0	1.09859	1.10430	471
3.1-14/0	1.08146	1.08706	476
3.1-16/0	1.06115	1.06636	460
3.1-20/0	1.02552	1.03019	442
3.1-24/0	0.99131	0.99553	428

Der BE-Typbezeichner enthält die U-235-Anreicherung (1.6/2.4/3.1 Gewichtsprozent), die Anzahl der Borglasstäbe (0/8/12/14/16/20/24) und den unkontrollierten / kontrollierten Zustand (0/1). Der Vergleich ergibt eine systematische Überschätzung des Multipli-

kationsfaktors um 300 - 650 pcm, die aber angesichts der unterschiedlichen Rechenmethodik und zugrundeliegenden nuklearen Daten im Rahmen des Üblichen ausfällt.

Auch die Erzeugung von 2-Gruppen-Reflektorwirkungsquerschnitten ist möglich, basierend auf einer linearen Anordnung aus einem BE und benachbarter Kernumgebung. Jedoch muss das nTRACER-Modell der Kernumgebung quadratische Abmessungen mit derselben Kantenlänge wie das Brennelement aufweisen. Dies beschränkt die Möglichkeit einer Berücksichtigung z. B. des Kernbehälters, der typischerweise etwas weiter als eine BE-Breite von der Kernumfassung entfernt ist. Der nTRACER-Code benötigt für 2D-Modelle mit der Abmessung eines Brennelements bei gleicher Anzahl Energiegruppen in etwa die gleiche Rechenzeit wie SCALE/NEWT, d.h. für 47 Energiegruppen ca. 5 CPU-min je Zustandspunkt.

Die mit nTRACER erzeugten Brennelement- und Reflektor-WQ in ihrem Zusammenspiel wurden durch Einsatz im QUABOX/CUBBOX-Diffusionscode am Beispiel des BEAVRS-Erstkerns erprobt. In Abb. 3.8 ist die radiale Nodalisierung dargestellt, die in QUABOX/CUBBOX verwendet wurde. Die Farben in der Abbildung symbolisieren die verschiedenen ^{235}U-Anreicherungsstufen bzw. den radialen Reflektor (blau). Die Zahlen stehen für die Zahl der Borglasstäbe, mit denen die WQ des jeweiligen ¼-Brennelements erzeugt wurden. Buchstaben stehen für Steuerelementgruppen.

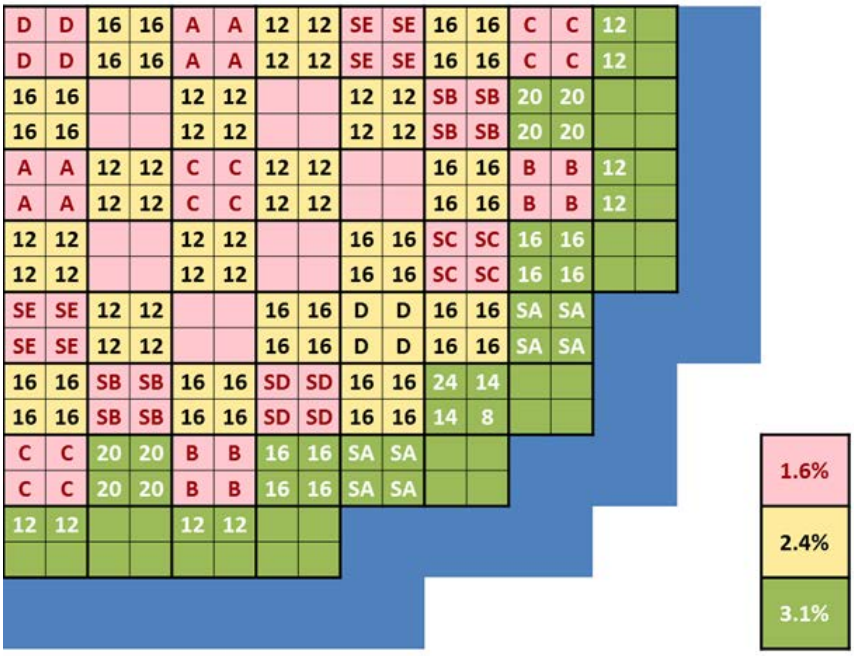

Abb. 3.8 ¼-Kern-Ausschnitt des QUABOX/CUBBOX-Modells zum BEAVRS-Erstkern

In Tab. 3.5 ist die bei Reaktorstart für verschiedene Steuerbankkonfigurationen gemessene kritische Borkonzentration und die mit dem QUABOX/CUBBOX-Modell erzielten Abweichungen vom kritischen Zustand k = 1.0 dargestellt. Die Bankstellung „ARO“ bezeichnet den stabfreien Reaktor, „D in“ etc. steht für die jeweils bis zur Endstellung eingefahrenen Steuerbänke. Die errechneten Abweichungen vom kritischen Zustand sind geringer als 300 pcm entsprechend einem Boräquivalent von weniger als 30 ppm, was eine zufriedenstellende Übereinstimmung darstellt.

Tab. 3.5 Gemessene kritische Borkonzentration für verschiedene Steuerbankkonfigurationen und Abweichungen von der Kritikalität im QUABOX/CUBBOX-Modell

Bankstellung	**Borkonzentration [ppm]**	**Δk [10^{-5}]**
ARO	975	88
D in	902	233
C, D in	810	130
A, B, C, D in	686	-49
A, B, C, D, SC, SD, SE in	508	-259

Implementierung und Validierung von SCALE 6.2

Die seit Mitte 2016 verfügbare neue Version des SCALE-Codesystems, SCALE 6.2 /REA 16/, wurde in die nukleare Berechnungssequenz der GRS mit aufgenommen. SCALE wird in der Abteilung Kernverhalten der GRS, und insbesondere im Rahmen des Vorhabens RS1536 hauptsächlich für Kritikalitäts- und Abbrandberechnungen, für die Erzeugung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten und für Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen eingesetzt. SCALE 6.2 enthält weitreichende Änderungen im Vergleich zur vorherigen Version, die bereits bei der GRS eingesetzt wurde. Zusätzlich zu der Verfügbarkeit neuer Module und Erweiterungen der vorhandenen Module betreffen die Änderungen an vorhandenen Modulen insbesondere die Resonanz-Selbstabschirmrechnungen für anschließende Neutronentransportrechnungen mit Multigruppen-Wirkungsquerschnitten. Der Vergleich dieser Rechnungen mit Referenzrechnungen durch andere Programme im Rahmen einer Validierungsstudie ist daher unbedingt erforderlich.

Während es relativ wenig Schwierigkeiten bereitet, Daten und ausführbare (vorkompilierte) Programme von SCALE 6.2 zu installieren, ist das Kompilieren des Quellcodes und die eigene Erzeugung der ausführbaren Programme deutlich aufwendiger, da dies erheblich von der jeweiligen Rechnerumgebung abhängig ist, insbesondere von den installierten Programmbibliotheken. Dies wird von den SCALE-6.2-Installationsskripten nicht vollständig berücksichtigt, so dass hier manuelle Anpassungen erforderlich waren. Erst durch die plattformspezifische Kompilierung des Quellcodes wurde die Einrichtung der parallelisierten Version ermöglicht, die insbesondere in Bezug auf die Referenz-Monte-Carlo-Rechnungen und die Unsicherheitsanalysen eine große Rechenzeitersparnis und effiziente Arbeitsweise ermöglicht. Ferner war eine Kompilierung erforderlich, um das zur Erzeugung von Multigruppen-Bibliotheken und Kovarianzdaten benötigte AMPX-System verfügbar zu machen. Eine kurze Beschreibung der zur Kompilierung auf dem GRS-Cluster nötigen Schritte ist in Anhang A03 zu finden. Während der Laufzeit des Vorhabens wurden drei Updates zur ursprünglichen Version SCALE 6.2 veröffentlicht, nämlich SCALE 6.2.1, SCALE 6.2.2 und SCALE 6.2.3. SCALE 6.2.1 und SCALE 6.2.2 wurden ebenfalls kompiliert und installiert; für SCALE 6.2.3, das erst am 16.05. verfügbar wurde, war dies nicht mehr möglich.

Zur Validierung wurden die entsprechenden SCALE-Module mit einer umfangreichen Testmatrix erprobt. Diese Testmatrix beinhaltet eine Reihe von Kritikalitäts- und Abbrandberechnungen. Dabei verwendet werden eindimensionale Systeme, bei denen die Rechenzeiten gering sind, ebenso wie aufwendigere kritische Anordnungen in dreidimensionaler Darstellung. Ergebnisse der Kritikalitätsrechnungen werden für eine Vielzahl von Größen, nämlich Multiplikationsfaktoren, Reaktivitätseffekte sowie Ein-Gruppen-Wirkungsquerschnitte, verglichen. Die betrachteten Anordnungen decken eine Vielzahl von Kernbrennstoff- und Kühlmittel-Materialien mit sehr unterschiedlichen Neutronenspektren ab. Für die Abbrandberechnungen werden Brennelemente in zweidimensionaler Darstellung herangezogen. Dabei handelt es sich um LWR-Brennelemente (DWR, SWR, WWER) sowie Brennelemente für schnelle natriumgekühlte Reaktoren, so dass auch hier unterschiedliche Neutronenspektren und unterschiedliche Geometrien (quadratisch und hexagonal) erfasst werden. Die Anordnungen der Testmatrix werden im Folgenden charakterisiert; für die detaillierte Beschreibung wird auf die entsprechende Literatur verwiesen.

Kritikalitätsberechnungen

a) GODIVA: Unreflektierte Kugel aus hoch angereichertem Uran /NEA 16/.

b) JEZEBEL: Unreflektierte Kugel aus Plutonium-239 /NEA 16/.

c) TOPSY: Von Natururan reflektierte Uranium-235-Kugel /NEA 16/.

d) POPSY: Von Natururan reflektierte Plutonium-Kugel /NEA 16/.

e) LEU-SOL-THERM-002, Fall 1: Wasserreflektierte Kugel mit niedrig angereichertem Uran-Oxyfluorid /NEA 16/.

f) HEU-SOL-THERM-009, Fall 1: Wasserreflektierte Kugel mit hoch angereichertem Uran-Oxyfluorid /NEA 16/.

g) PU-SOL-THERM-011, Fall 16-1: Unreflektierte Kugel mit Plutoniumnitrat /NEA 16/.

h) U233-SOL-THERM-005, Fall 1: Wasserreflektierte Kugel mit U-233-Uranylnitrat /NEA 16/.

i) KRITZ-2:1-Stabzelle: Quadratisches LWR-Gitter mit niedrig angereichertem UO_2-Brennstoff /NEA 17/.

j) KRITZ-2:19-Stabzelle: Quadratisches LWR-Gitter mit MOX-Brennstoff /NEA 17/.

k) SFR-Stabzelle: Hexagonales Gitter mit Natrium-gekühltem MOX-Brennstoff /BLA 12/.

l) GFR-Stabzelle: Hexagonales Gitter mit Helium-gekühltem metallischem U/Pu-Brennstoff /PER 15a/.

m) IMF-Stabzelle: Quadratisches LWR-Gitter mit oxydischem Pu/Th-232-Brennstoff /PAR 01/.

n) U9 (IEU-MET-FAST-010): Zylindrische Anordnung aus niedrig angereichertem Uran mit einem Reflektor aus abgereichertem Uran /NEA 16/.

o) KRITZ-2: Rechteckige Anordnungen aus quadratischen LWR-Gittern mit niedrig angereichertem UO_2- (KRITZ-2:1 und KRITZ-2:13) oder MOX-Brennstoff (KRITZ-2:19) /NEA 17/.

p) VENUS-7: Zylindrische und quadratische Anordnungen aus quadratischen LWR-Gittern mit niedrig angereichertem UO_2- und MOX-Brennstoff /NEA 17/.

q) VENUS-9: Rechteckige Anordnungen aus quadratischen LWR-Gittern mit niedrig angereichertem UO_2- und MOX-Brennstoff und Heterogenitäten /NEA 17/.

r) VENUS-1 und VENUS-2: Kreuzförmige Anordnungen aus quadratischen LWR-Gittern mit niedrig angereichertem UO_2- und MOX-Brennstoff und Absorberstäben /NEA 17/, /NEA 05/.

s) B&W PWR (LEU-COMP-THERM-008): Leichtwasser-moderierte quadratische Gitter mit niedrig angereichertem UO_2-Brennstoff und verschiedenen Heterogenitäten /NEA 16/.

Abbrandberechnungen

a) AAA-DWR: DWR-Brennelement aus dem GRS-Benchmark im Rahmen der AAA User Group /HAN 12/

b) AAA-SWR: SWR-Brennelement aus dem GRS-Benchmark im Rahmen der AAA User Group /HAN 12/

c) TMI-1: DWR-Brennelement (Three Mile Island 1) aus dem UAM-LWR-Benchmark /POR 16/

d) PB-2: SWR-Brennelement (Peach Bottom 2) aus dem UAM-LWR-Benchmark /POR 16/

e) KOZ-6: WWER-1000-Brennelement (Kozloduy 6) aus dem UAM-LWR-Benchmark /POR 16/

f) SFR-MOX3600: SFR-Brennelement mit oxydischem Brennstoff aus dem SFR-FT-Benchmark /BLA 12/

g) SFR-MET1000: SFR-Brennelement mit metallischem Brennstoff aus dem SFR-FTBenchmark /BLA 12/

Für die Überprüfung der in SCALE 6.2.2 enthaltenen Module für Resonanz-Selbstabschirmungs- und Neutronentransportberechnungen wurden die oben unter *Kritikalitätsberechnungen* genannten Anordnungen herangezogen. Als Transportprogramme kamen dabei der deterministische Code XSDRN für eindimensionale Berechnungen und der Monte-Carlo-Code KENO für dreidimensionale Berechnungen zum Einsatz. Alle diese Anordnungen werden auch zur Durchführung von Unsicherheitsanalysen verwendet, siehe Abschnitt 6.3. Diese sind auch in einer technischen Notiz (Anhang A01) ausführlich dokumentiert. Bei den durchgeführten Kritikalitätsberechnungen und den entsprechenden Unsicherheitsanalysen ergaben keine Auffälligkeiten; die Ergebnisse sind im Wesentlichen mit den Ergebnissen früherer Berechnungen und, soweit verfügbar, mit den gemessenen Werten konsistent. Für thermische Systeme ergeben sich keine signifikanten Unterschiede zwischen Ergebnissen, die mit den bereits in SCALE 6.1 verfügbaren, auf ENDF/B-VII.0-Daten mit 238 Energiegruppen erzielt wurden, und Ergebnissen mit neuen, auf ENDF/B-VII.1 basierenden nuklearen Daten mit 252 Energiegruppen, die Bestandteil von SCALE 6.2 sind. Diese Bibliotheken sind für thermische Systeme optimiert. Diese sind für schnelle Anordnungen nur bedingt geeignet; für solche Systeme wurden im Rahmen des Vorhabens geeignetere Bibliotheken erstellt, siehe Abschnitt 5.1.

Brennelement-Abbrandberechnungen werden meist in zweidimensionaler Darstellung durchgeführt; dazu kommt der in SCALE enthaltene Gittercode NEWT zum Einsatz. Die Berechnungen für die oben unter *Abbrandberechnungen* genannten Anordnungen basieren alle auf Eingabedatensätzen, mit denen bereits zuvor erfolgreich Berechnungen mit SCALE 6.1 durchgeführt worden waren. Zur Validierung der entsprechenden Module von SCALE 6.2 war nun beabsichtigt, diese Berechnungen zunächst mit der auf ENDF/B-VII.0 basierenden 238-Energiegruppen-Bibliothek, die auch mit SCALE 6.1 verfügbar war, zu wiederholen, und anschließend entsprechende Berechnungen mit der auf ENDF/B-VII.1 basierenden 252-Energiegruppen-Bibliothek durchzuführen. Dazu wurde die freigegebene Version zunächst von SCALE 6.2 verendet, nach Verfügbarkeit auch die aktuelle Version SCALE 6.2.2.

Die Ergebnisse waren unbefriedigend, wie aus Tab. 3.6 ersichtlich ist. Während mit SCALE 6.1 noch alle Abbrandberechnungen erfolgreich durchgelaufen sind (mit „X“ bezeichnet), konnten mit SCALE 6.2.2 und der 238-Energiegruppen-Bibliothek immerhin noch die Brennelemente mit quadratischem Gitter (DWR und SWR) berechnet werden. Mit SCALE 6.2.2 und der 252-Energiegruppen-Bibliothek scheiterten alle Be-

rechnungen bis auf die für den Fall AAA-SWR. Die Ursachen sind bisher noch nicht vollkommen klar.

In Abb. 3.9 sind die Ergebnisse für den Multiplikationsfaktor als Funktion des Abbrands für den Fall AAA-SWR dargestellt. Es zeigt sich, dass die Werte aus SCALE 6.1 und SCALE 6.2 mit beiden Datenbibliotheken in sehr guter Übereinstimmung sind. Bei SCALE 6.2 zeigt sich ein deutlicher Gewinn bei der Ausführungszeit: SCALE 6.1 238g - 4 h 50 m, SCALE 6.2 238g - 3 h 10 m, SCALE 6.2 252g - 4 h 10 m. Die Ergebnisse von SCALE 6.2 und SCALE 6.2.2 sind identisch.

Tab. 3.6 Brennelement-Abbrandberechnungen zur Validierung von SCALE 6.2

	SCALE 6.1, 238g	**SCALE 6.2, 238g**	**SCALE 6.2, 252g**
AAA-DWR	X	X	--
AAA-SWR	X	X	X
TMI-1	X	X	--
PB-2	X	X	--
KOZ-6	X	--	--
SFR-MOX3600	X	--	--
SFR-MET1000	X	--	--

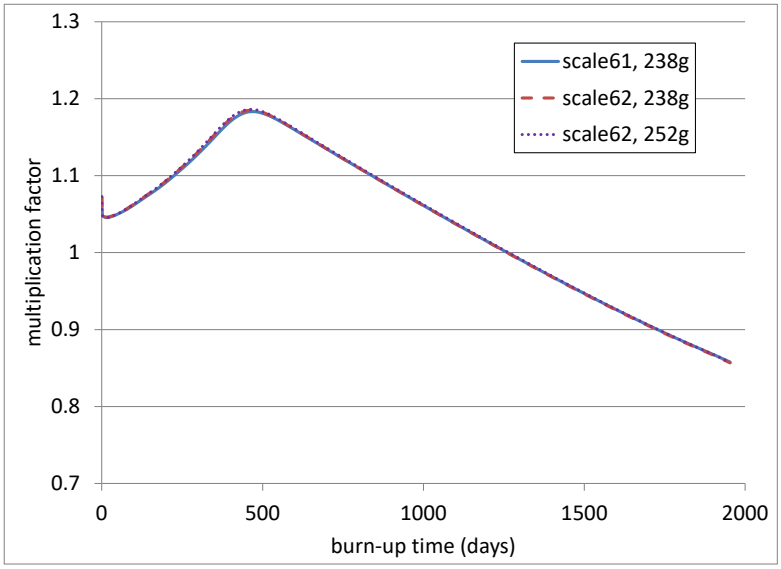

Abb. 3.9 Abbrand-Abhängigkeit des Multiplikationsfaktors aus Berechnungen mit SCALE

Die bisherigen Untersuchungen zur Überprüfung von SCALE 6.2.2 zeigen insgesamt sehr gute Ergebnisse bei Kritikalitätsberechnungen, und große Probleme bei der Durchführung von Abbrandberechnungen, insbesondere für hexagonale Brennelemente. Bislang konnte noch nicht systematisch ermittelt werden, wie sich diese Probleme durch Änderungen an den Eingabedatensätzen beheben lassen. Bis dahin ist es ratsam, nach wie vor auch SCALE 6.1 für die nukleare Berechnungssequenz verfügbar zu halten.

3.2 Beteiligung am europäischen NURESAFE-Projekt

Das Projekt NURESAFE (NUCLEAR REACTOR SAFETY SIMULATION PLATFORM) war ein gemeinschaftliches Projekt, das im Rahmen des FP7-Programms der Europäischen Kommission durchgeführt wurde. 27 europäische Organisationen nahmen am NURESAFE-Projekt teil. Das NURESAFE-Projekt begann am 1. Januar 2013 und endete am 31. Dezember 2015. Die GRS war hauptsächlich an drei Arbeitspaketen (WP) beteiligt:

- WP11: Testbed for integrated coupling and UQ methods (Plattform für integrierte Kopplungs- und UQ-Methoden)

- WP12: Higher-order PWR MSLB simulation (Simulation höherer Ordnung DWR MSLB)

- WP13: BWR ATWS with Uncertainty Quantification (SWR ATWS mit Unsicherheitsquantifizierung)

WP11: Plattform für integrierte Kopplungs- und UQ-Methoden

In WP11 war die Aufgabe der GRS die Integration der thermo-hydraulischen Codes ATHLET /LER 16/ und COBRA-TF (CTF) /SAL 15/ auf der NURESIM-Plattform (auch Salomé-Plattform genannt). Außerdem sollten diese Codes miteinander und mit dem Reaktordynamikcode DYN3D /ROH 16/ auf der Plattform gekoppelt werden. Die Integration von ATHLET und CTF auf der NURESIM-Plattform wurde in /PER 14a/ bzw. /PER 14b/ dokumentiert. Die Kopplung mit DYN3D wurde für mehrere Geometrietypen

und Transienten überprüft. Die Kopplung zwischen CTF und ATHLET wurde auf PWR- und BWR-Bedingungen mit zufriedenstellenden Ergebnissen getestet.

WP12: Simulation höherer Ordnung DWR MSLB

Im Rahmen des NURESAFE-Projektes wurde ein MSLB-Transiente (MSLB = Main Steam Line Break) in einem DWR simuliert. Die Referenzanlage ist Zion, ein DWR von Westinghouse. Modelle für ATHLET (thermo-hydraulischer Systemcode), für CTF (Unterkanalcode für den Kern) und DYN3D (Neutronentransportcode) wurden entwickelt. Der verfügbare ATHLET-Datensatz für den Zion-Reaktor wurde ursprünglich von der GRS entwickelt, um eine LBLOCA-Simulation (LBLOCA = Large-Break Loss of Coolant Accident) im Rahmen des BEMUSE-Benchmarks (BEMUSE = Best-Estimate Methods – Uncertainty and Sensitivity Evaluation) der OECD durchzuführen. Daher war es notwendig, den Eingabedatensatz zu modifizieren, um die Besonderheiten einer MSLB-Transiente zu berücksichtigen. Diese Modifikationen wurden am HZDR durchgeführt. Der Datensatz wurde von der GRS für die gekoppelte Berechnung auf der NURESIM-Plattform weiter angepasst. Der CTF-Datensatz für den Kern wurde von der GRS entwickelt. Der DYN3D-Datensatz für Zion wurde von HZDR entwickelt. Die Ergebnisse von WP12 sind in /KLI 15a/ und /KLI 15b/ im Detail beschrieben. Eine Zusammenfassung der GRS-Ergebnisse wird in diesem Abschnitt gegeben.

Beschreibung der gekoppelten Simulationen

Drei Simulationen der MSLB-Transiente wurden von der GRS durchgeführt, jeweils mit unterschiedlichen gekoppelten Systemen. Im ersten Kopplungssystem deckt das ATHLET-Modell das gesamte DWR-System mit Randbedingungen für den Dampfleitungsdruck sowie den Speisewassermassenstrom und die Speisewassertemperatur ab. ATHLET ist mit dem DYN3D-Kernmodell gekoppelt. Im zweiten Kopplungssystem ist das ATHLET-Modell das gleiche wie zuvor beschrieben, einschließlich des Kernmodells. Das CTF-Modell umfasst nur den Kern und ist mit ATHLET am Kerneintritt/-austritt gekoppelt (Einwegkopplung). Dieser Ansatz wird als Parallelkopplung bezeichnet. Das DYN3D-Modell ist sowohl an ATHLET- als auch CTF-Modelle gekoppelt. Jedoch empfängt DYN3D die thermohydraulischen Rückwirkungen nur von CTF. Es werden zwei Versionen des zweiten Kopplungsschemas verwendet. In der ersten Version erhält CTF die Eintrittstemperatur direkt aus den ATHLET-Kernkanälen, so dass nur

zwei unterschiedliche Temperaturen am Kerneinlass verwendet werden. In der zweiten Version wird die Temperatur aus einer Mischmatrix in jedem Kühlkanal berechnet.

ATHLET-DYN3D Simulation

In dieser Simulation treten zwei Leistungspeaks auf. Der erste Leistungspeak tritt nach 44.39 s auf und erreicht 209.4 MW. Da der Druck über 12.05 MPa bleibt, bleiben die Speisewasser-Pumpen während der gesamten Transiente in Betrieb. Der zweite Leistungspeak tritt nach 109.76 s auf und erreicht 499.5 MW. Während der Transiente bleibt das DNBR (DNBR = Departure from Nucleate Boiling Ratio) weit oberhalb des typischen Sicherheitskriteriums von 1.5. Nach 500 s ist die Leistung bei 224.5 MW stabil, was den Gleichgewichtszustand zwischen Primär- und Sekundärseite für den gegebenen Speisewassermassenstrom darstellt.

ATHLET-CTF-DYN3D Simulation (ohne Mischmatrix)

Der erste Leistungspeak tritt nach 44.52 s auf und erreicht 150.8 MW. Da der Druck über 12.05 MPa bleibt, bleiben die Speisewasserpumpen während der gesamten Transienten in Betrieb. Der zweite Leistungspeak tritt nach 129.56 s auf und erreicht 423.1 MW. Während des Transienten bleibt das DNBR weit oberhalb des typischen Sicherheitskriteriums von 1.5. Nach 500 s ist die Leistung bei dem gleichen Wert wie in der ATHLET-DYN3D Simulation stabil. Die beobachteten Unterschiede in der Kernleistung ergeben sich nur aus der genaueren Beschreibung des Kerns im CTF-Modell sowie Unterschieden in den Brennstoffmodellen und den Vorschriften zur Doppler-Temperaturberechnung in ATHLET und CTF.

ATHLET-CTF-DYN3D Simulation (mit Mischmatrix)

Anders als bei den zwei vorherigen Fällen kann kein erster Leistungspeak beobachtet werden. Der „zweite“ Leistungspeak tritt nach 118 s auf und erreicht 351.7 MW. Diesmal fällt der Druck nach 109 s unter 12.05 MPa ab. Daher stoppen die Speisewasser-Pumpen und die Leistung fällt nach 500 s auf 6.1 MW. Bis zur Sperrung der Speisewassereinspeisung stimmen die Ergebnisse gut mit den beiden Vorgängermodellen für Primär- und Sekundärseitenparameter überein. Nach diesem Punkt können jedoch sehr große Unterschiede beobachtet werden, da der Wärmeaustausch in allen Dampferzeugern auf 0 geht und daher auch die Leistung im Kern abnimmt. Weitere Untersuchungen wurden durchgeführt, um das Fehlen eines ersten Leistungspeaks zu erklä-

ren. Bei der Analyse der relativen Kerneinlassenthalpie in CTF kann man sehen, dass die Überkühlung mit der Mischmatrix tatsächlich stärker ist als im anderen Fall. Allerdings ist die Überkühlung im betroffenen Kernviertel nicht mehr homogen und die stärkere Überkühlung tritt nicht in der Nähe des steckengebliebenen Steuerstabs auf.

WP13: SWR-ATWS mit Unsicherheitsquantifizierung

Das Ziel von WP13 besteht darin, SWR-ATWS-Simulationen (ATWS = Anticipated Transient without Scram) auf der NURESIM-Plattform zu entwickeln und durchzuführen. Außerdem sollten Unsicherheitsanalysen für die Transiente durchgeführt werden. Dafür wurde die Anlage Peach Bottom 2 aus dem Turbine-Trip-Benchmark der OECD/NEA, für den bereits Wirkungsquerschnittsbibliotheken (sowie Neutronenkinetik- und Thermohydraulik-Modelle) vorhanden waren, ausgewählt. Die Ergebnisse von WP13 sind in /PER 15b/ im Detail beschrieben. Eine Zusammenfassung der GRS-Ergebnisse wird in diesem Abschnitt gegeben.

Transiente Beschreibung

Die Transiente ist ein Turbine Trip (TT) ohne Reaktorschnellabschaltung, der mit einer plötzlichen TSV-Schließung (TSV = Turbine Stop Valve) beginnt. Dies verursacht eine Druckwelle, die sich schnell zum Reaktordruckbehälter ausbreitet und zu einem Leistungspeak aufgrund thermohydraulischer (TH) Rückwirkungen führt. Der Leistungspeak wird normalerweise durch TH-Rückwirkungen und SCRAM gemildert, was im vorliegenden Fall nicht simuliert wird. Während die TSVs schließen, öffnen sich die Bypass-Systemventile, die eine Dampffreigabe (d. h. eine Druckentlastung) ermöglichen. Bei Bedarf können SRVs an vorgegebenen Sollwerten geöffnet werden, wodurch eine zusätzliche Druckentlastung erreicht wird.

Beschreibung des ATHLET-Modells

Das SWR-Modell für Peach Bottom Unit 2 basiert auf den vorgegebenen Anlagenvorgaben in den Benchmark-Spezifikationen. Das gesamte System besteht aus einem 33-Kanal-Kern mit Bypass, einem oberen und einem unteren Plenum, einer Rezirkulationsschleife mit Pumpen, einem Downcomer, einem Separator und dem „Steam Dome“ sowie einer Dampfleitung. Das Steuerungssystem wurde mit GCSM simuliert.

Die 764 Brennelemente im Reaktorkern wurden nach Brennelementtyp und radialer Position in 33 parallele Kanäle eingeteilt. Jeder Kernkanal wird mit 26 axialen Knoten nodalisiert. Die ersten und letzten Zellen sind die inaktiven Zellen (für die Reflektormodellierung). Der aktive Teil des Kerns ist gleichmäßig in 24 Zellen unterteilt und enthält Wärmeleitungsobjekte (HCOs) mit dem Zweck, die Wärme von den Brennstäben in das Kühlmittel zu übertragen. Eine schematische Darstellung der Kanäle für die ATHLET-Berechnungen ist in Abb. 3.10 gegeben.

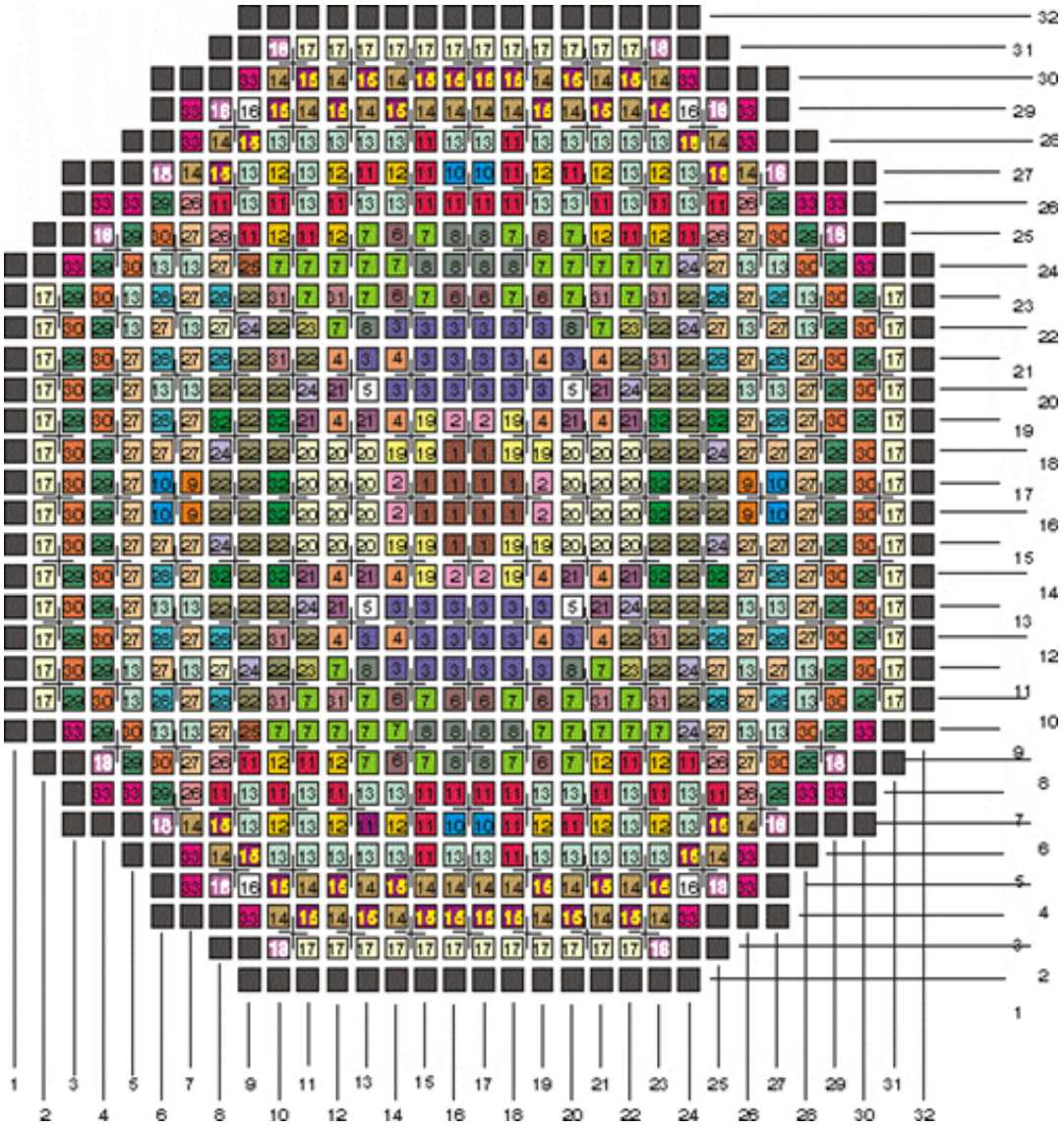

Abb. 3.10 ATHLET-Modell für Peach Bottom Unit 2

Beschreibung des CTF-Modells

Das Modell für Peach Bottom Unit 2 enthält 764 Brennelemente. Die Brennelemente sind von drei verschiedenen TH-Typen. Der Kern ist in drei radiale Zonen mit unterschiedlichen Drosselungen aufgeteilt. Die 764 Brennelemente werden parallel modelliert (kein Queraustausch zwischen den Kanälen). Die geometrischen Daten und die Druckverlustkoeffizienten wurden den Spezifikationen entnommen. Das Modell ist mit dem ATHLET-Anlagenmodell gekoppelt und empfängt die Kernmassenströme, die Kerneintrittstemperatur sowie den Druck im Kern aus dem oben beschriebenen 33-Kanal-ATHLET-Modell.

Beschreibung des DYN3D-Modells

Im aktiven Kern werden 24 axiale äquidistante Knoten, mit jeweils 15.24 cm Höhe verwendet. Für die axialen und radialen Reflektoren wurde auch eine Knotengröße von 15.24 cm verwendet. 19 Brennelementtypen sind definiert, wobei der Brennelementtyp 19 der Radialreflektor ist. Die Wirkungsquerschnittsbibliotheken sind die, die im Rahmen des OECD/NEA-Benchmarks an die Teilnehmer verteilt wurden. In diesen Bibliotheken sind der Abbrand und die von der Abbrandgeschichte abhängigen Parameter implizit in den makroskopischen Wirkungsquerschnitten enthalten.

Beschreibung der gekoppelten Simulationen

In der ersten gekoppelten Simulation deckt das ATHLET-Modell das gesamte SWR-System mit Randbedingungen für den Dampfleitungsdruck sowie den Speisewassermassenstrom und die Speisewassertemperatur ab. ATHLET ist mit DYN3D im Reaktorkern gekoppelt. In der zweiten gekoppelten Simulation ist das ATHLET-Modell das gleiche wie das vorhergehende, einschließlich des Kernmodells. Das CTF-Modell umfasst nur den Kern und ist gekoppelt (Einwegkopplung) mit ATHLET am Kerneintritt und -austritt. Dieser Ansatz wird als Parallelkopplung bezeichnet. Das DYN3D-Modell ist sowohl an ATHLET- als auch an CTF-Modelle gekoppelt. Jedoch empfängt DYN3D die thermohydraulischen Rückwirkungen nur von CTF.

Beschreibung der Best-Estimate-Simulationsergebnisse

Während der ersten Phase der Transiente wird die Kernleistung durch die Druckerhöhung bestimmt. Der Leistungsanstieg erfolgt nahezu sofort, aber die Transiente wird

durch die Rückkopplung von dem erhöhten direkten und geleiteten Wärmefluss zum Kühlmittel verlangsamt, was wiederum Dampf erzeugt und eine negative Reaktivitätsrückkopplung ergibt. Der Brennstofftemperaturanstieg ist ziemlich niedrig und der Dopplereffekt spielt im Vergleich zur Moderatordichte nur eine begrenzte Rolle. Im Fall einer normalen Turbine-Trip-Transiente würde die Reaktorschnellabschaltung bei einem vorgegebenen Leistungsniveau ausgelöst und die Transiente würde beendet. Es ist interessant festzustellen, dass der erste Leistungspeak nicht durch die Reaktorschnellabschaltung beeinflusst wird, da die Leistung bereits begonnen hat zu sinken, wenn diese stattfindet. Im ATWS-Fall findet die Reaktorschnellabschaltung nicht statt. Als Ergebnis zeigt die Reaktorleistung ein Oszillationsverhalten, das durch die Wechselwirkungen zwischen Leistung und Rückkopplungsmechanismen gesteuert wird. Dieses Verhalten wird durch das Öffnen der Freigabe- und Sicherheitsventile unterbrochen, die den Druck und die Leistung stabilisierten.

Die Simulationen wurden wie folgt ausgeführt: Zuerst wird für 30 s eine Nulltransiente durchgeführt. Während dieser Nulltransiente ist DYN3D noch im stationären Modus und wird nach jeder simulierten Sekunde aufgerufen. Anschließend sind während 2 s alle Codes im transienten Modus, aber nur die Regelsysteme sind aktiviert. Schließlich beginnt bei t = 32 s die Turbine-Trip-Transiente.

Die Turbine-Trip-Transiente ohne Reaktorschnellabschaltung wurde erfolgreich mit den beiden gekoppelten Codesystemen ATHLET-DYN3D und ATHLET-CTF-DYN3D simuliert: Während die Ergebnisse qualitativ gut übereinstimmen, wird eine starke Abweichung beobachtet, wenn die maximale Leistung, die den Begrenzungsparameter darstellt, verglichen wird. Solche Abweichungen sind zu erwarten, und die Unsicherheitsanalyse, die im nächsten Abschnitt vorgestellt wird, zeigt, dass die Unsicherheitsbänder die Best-Estimate-Ergebnisse beider Systeme abdecken.

Für die Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse wurde die URANIE-Plattform eingesetzt. Die von der CEA entwickelte URANIE-Plattform zielt darauf ab, Methoden und Algorithmen zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse (US) und Verifikation und Validierung (VV) in demselben Rahmen zusammenzufassen. URANIE basiert auf dem Datenanalyse-Framework ROOT, (http://root.cern.ch) einem vom CERN entwickelten objektorientierten Rechentool. Die für die Unsicherheitsanalyse ausgewählten unsicheren Parameter sind in Tab. 3.7 zusammengestellt. Die Auswahl der Parameter und deren jeweiliger Bereiche erfolgte anhand der Literatur sowie fachlicher Beurteilung.

Die Unsicherheitsanalyse wurde mit dem gekoppelten ATHLET-DYN3D-Modell durchgeführt. Dazu wurden 100 Simulationen mit variierten Parametern herangezogen. Zusätzlich zu der Unsicherheitsanalyse wurde eine Sensitivitätsanalyse bei jedem Zeitschritt der Transiente durchgeführt. Für die Sensitivitätsanalyse wurde der Pearson-Korrelationskoeffizient verwendet. Dieser Koeffizient wird durch Dividieren der Kovarianz von zwei Variablen durch das Produkt ihrer Standardabweichungen bestimmt. In dieser Studie werden die Pearson-Korrelationskoeffizienten für jeden unsicheren Parameter berechnet.

Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse

Tab. 3.7 Unsichere Parameter für die SWR-ATWS-Unsicherheitsanalyse

	Parameter	**Range**	**Distribution**
Boundary conditions	Outlet pressure	±0.5 %	Uniform
	Recirculation Mass flow rate	±0.5 %	Uniform
	Feedwater Mass flow rate	±0.5 %	Uniform
	Feedwater enthalpy	±0.2 %	Normal
Modelling parameters	Spacers friction	±5.0 %	Uniform
	Gas gap heat transfer	±35.0 %	Uniform
	Fuel thermal conductivity	±10.0 %	Uniform
	Fuel heat capacity	±1.0 %	Uniform
	Cladding thermal conductivity	±6.25 %	Uniform
	Cladding heat capacity	±3.0 %	Uniform
Internal ATHLET correlations	Rel. velocity in vertical pipe	[0.50; 1.50]	Uniform
	Rel. velocity in horizontal pipe	[0.75; 2.25]	Uniform
	Rel. velocity in bundle	[0.25; 2.00]	Uniform
	Rel. velocity in annulus	[0.50; 2.00]	Uniform
	Rel. velocity in horizontal cross−connection	[0.50; 2.00]	Uniform
	Critical velocity for onset of entrainment in bundle	[0.80; 3.60]	Uniform
	HTC: forced convection to liquid water	[0.85; 1.15]	Uniform
	HTC: natural convection to liquid	[0.85; 1.15]	Uniform
	HTC: nucleate boiling	[0.80; 1.20]	Uniform

	Parameter	Range	Distribution
	HTC: film boiling	[0.65; 1.30]	Uniform
	HTC: pool boiling	[0.75; 1.25]	Uniform
	HTC: forced convection to vapor / gas	[0.85; 1.25]	Uniform
	HTC: minimum film boiling and maximum re-wetting temperature	[0.90; 1.30]	Uniform
	HTC: critical heat flux (used for critical heat flux and return to nucleate boiling temperature)	[0.70; 1.30]	Uniform

Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse der Kernleistung

Die maximale Leistung variiert zwischen 7.4 GW und 12.8 GW. Der Mittelwert über die 100 Läufe ist sehr nahe am Referenz-(Best-Estimate)-Leistungsverlauf. Das Unsicherheitsband für die maximale Leistung umfasst die Ergebnisse der ATHLET-CTF-DYN3D und der ATHLET-DYN3D Referenzwerte.

Die Sensitivitätsanalyse zeigt, dass die wichtigsten unsicheren Parameter sind:

- (Initial) pressure in the downcomer
- Gas gap conductance
- Direct heating to coolant
- Fuel heat conductivity
- Spacer grip pressure coefficient and
- HTC: forced convection to liquid water (OHWFC)

Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse der Brennstofftemperatur

Das Unsicherheitsband für die maximale Brennstofftemperatur ist bereits vor dem Beginn der Transiente ca. 350 K breit, und steigt während der Transiente auf 450 K an. Der Maximalwert aller 100 durchgeführten Läufe beträgt 2060 K, was noch weit unter dem Schmelzpunkt von UO_2 liegt. Der Referenz-(Best-Estimate)-Wert liegt etwa 50 K unter dem Mittelwert der 100 Rechnungen.

Die Sensitivitätsanalyse zeigt, dass die wichtigsten unsicheren Parameter sind:

- Gas gap conductance
- Direct heating to coolant
- Fuel heat conductivity

- HTC: forced convection to liquid water (OHWFC)

Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse der Hüllrohrtemperatur

Das Unsicherheitsband für die maximale Hüllrohrtemperatur beginnt bei 10 K zu Beginn der Transiente und steigt dann bis auf 15 K während der Transiente an. Die maximale Hüllrohrtemperatur wird während der zweiten Phase der Transiente (nach dem ersten Leistungspeak) erreicht und bleibt unter 360 °C in allen 100 Läufen. Daher ist der Abstand bis zum Beginn der Zirconium-Oxidationsreaktion (etwa 1200 °C) in allen Fällen sehr groß. Der Referenz-(Best-Estimate)-Wert liegt sehr nahe am Mittelwert der 100 Rechnungen.

Die Sensitivitätsanalyse zeigt, dass die wichtigsten unsicheren Parameter sind:

- Gas gap conductance
- Direct heating to coolant
- Cladding heat conductivity
- HTC: forced convection to liquid water (OHWFC)
- HTC: film boiling (OHWFB)

4 AP2: Monte-Carlo-Berechnungsmethoden

Die Arbeiten zur Erweiterung der GRS-Berechnungsmethoden zur Beschreibung zeitabhängiger Vorgänge im Reaktorkern und zur Beschreibung von Zuständen in unterschiedlichen Phasen der Kernzerstörung nach einem schweren Störfall erfolgen im Rahmen des Arbeitspakets 2.

4.1 Entwicklung eines Verfahrens zur Beschreibung transienter Vorgänge mit Hilfe der Monte-Carlo-Methode

Für die Entwicklung eines Verfahrens zur Beschreibung transienter Vorgänge mit Hilfe von Monte-Carlo-Methoden (MC) wurde zunächst eine Literaturrecherche im Bereich Neutronentransportmethoden und Modellierung der Thermohydraulik durchgeführt. Dabei wurden im Bereich Neutronentransport sowohl stochastische als auch deterministische Methoden betrachtet und im Bereich Thermohydraulik Systemcodes und Unterkanalmodelle. Bereits seit vielen Jahren ist es Stand der Technik, transiente Vorgänge wie Betriebstransienten oder Reaktivitätsstörfälle durch Simulationen mit einem dreidimensionalen Neutronenkinetikcode (NK) gekoppelt mit einem Thermohydraulikcode (TH) abzubilden. Der NK-Code löst die Neutronendiffusionsgleichung mit wenigen Energiegruppen auf einem groben Gitter. Die Thermohydraulik wird meist durch einen thermohydraulischen Systemcode abgebildet, welcher die Simulation von Auslegungsstörfällen wie auch von auslegungsüberschreitenden Störfällen beherrscht. In der GRS wird hierzu der NK-Code QUABOX/CUBBOX (QC) /LAN 78/ und der TH-Systemcode ATHLET /LER 16/ genutzt, die als gekoppeltes NK/TH-Codesystem zur Verfügung stehen /LAN 05/. ATHLET simuliert die Thermohydraulik der Anlage einschließlich des Reaktorkerns und stellt QC die räumliche Verteilung der Brennstofftemperatur, der Moderatordichte und der Borkonzentration im Reaktorkern zur Verfügung. QC berechnet unter Einbeziehung der zuvor genannten thermohydraulischen Parameter die Leistungsverteilung und gibt diese an ATHLET zurück.

In einem vorausgehenden Schritt müssen für den NK-Code makroskopische, homogenisierte Wenig-Gruppen-Wirkungsquerschnitte (WG-Wirkungsquerschnitte) für jeden Brennelementtyp erzeugt werden. Dies erfolgt gewöhnlich mit einem Gittercode, bei dem jeder axial unterschiedliche Abschnitt jedes Brennelementtyps zweidimensional mit reflektierenden Randbedingungen modelliert wird. Da sich während eines transien-

ten Vorgangs die thermohydraulischen Bedingungen ändern, müssen die Brennelementrechnungen mit allen möglichen Kombinationen an thermohydraulischen Bedingungen durchgeführt werden, um einen parametrisierten Satz von WG-Wirkungsquerschnitten zu erhalten, der die thermohydraulischen Bedingungen während einer Transiente abdeckt.

Viele der Akzeptanzkriterien für Sicherheitsbewertungen beziehen sich auf lokale Größen im Reaktorkern. Aus diesem Grund ist man in den letzten Jahren zu einem Ansatz übergegangen, bei dem ein Unterkanalcode an den TH-Systemcode gekoppelt wird, um somit Werte auf Brennstabebene zu ermitteln /PER 10/. Ein solcher Unterkanalcode ist zum Beispiel COBRA-TF (CTF) /SAL 15/. Im Vergleich zu einem thermohydraulischen Systemcode nehmen jedoch die Anforderungen an Rechenkapazität bei der Simulation größerer Modelle mit einem Unterkanalcode deutlich zu.

In anderen Studien wurde der nodale Diffusionscode durch einen deterministischen Neutronentransportcode ersetzt, wie zum Beispiel DORT-TD (zweidimensional) /PAU 03/ und TORT-TD (dreidimensional) /SEU 08/. Diese Codes nutzen die Diskrete-Ordinaten Methode um die Neutronentransportgleichung zu lösen. Dies geschieht auf einem feineren räumlichen Gitter mit expliziter Behandlung der Winkelabhängigkeit und einer feineren Diskretisierung der Energievariablen. Aus diesen Gründen ist die Anwendung von deterministischen Neutronentransportcodes vorteilhaft für Systeme mit starken Gradienten des Neutronenflusses auf kurzen Distanzen, wie zum Beispiel in Reaktorkernen von Forschungsreaktoren.

Während der letzten Jahre wurden ebenfalls Ganzkern-Transport-Codes wie nTRACER /SNU 09/ entwickelt, welche den Neutronentransport anhand einer 2D-1D Methode durchführen. Radial wird die Neutronentransportgleichung mit Hilfe der Methode der Charakteristiken gelöst und in axialer Richtung per Diffusionslösung. Die Resonanzbehandlung der Multigruppenwirkungsquerschnitte erfolgt durch die Subgroup-Methode /SNU 09/. Die Berechnung ganzer Reaktorkerne stellt jedoch hohe Anforderungen an Rechenkapazität und -zeit.

Für den stochastischen Neutronentransport gibt es eine Vielzahl von Monte-Carlo-Neutronentransportprogrammen; in der GRS werden MCNP-6 vom Los Alamos National Laboratory, USA /GOO 12/, und Serpent vom VTT Technical Research Centre of Finland /LEP 15/, intensiv genutzt. Hinsichtlich MCNP-6 ist bereits im Vorhaben RS1503 eine Kopplung zwischen MCNP-6 und dem Thermohydraulikcode ATHLET

realisiert worden, um stationäre Reaktorzustände berechnen zu können /BER 15/. Im Programm Serpent sind bereits Methoden implementiert, um WG-Wirkungsquerschnitte auf zweidimensionalen Brennelementquerschnitten oder größeren Anordnungen zu ermitteln, wobei bei letzterem WG-Wirkungsquerschnitte gleichzeitig für verschiedene räumliche Bereiche bestimmt werden können.

Auf Basis der durchgeführten Literaturrecherche wurde ein Konzept für die Simulation reaktordynamischer Probleme unter Anwendung eines MC-Neutronentransportprogramms erstellt. Das Konzept sieht vor, eine Kopplung zwischen einem MC-Code und einem zeitabhängigen NK/TH-Codesystem herzustellen. MC-Codes haben den Vorteil, dass keine räumlichen Vereinfachungen an den Modellen vorgenommen werden müssen, da der Neutronentransport in beliebig komplexen Geometrien simuliert werden kann. Weiterhin verwenden MC-Codes gewöhnlich Wirkungsquerschnittsdaten in kontinuierlicher Energiedarstellung. Hierdurch können Ergebnisse wie zum Beispiel der Neutronenfluss oder Reaktionsraten mit hoher räumlicher und energetischer Auflösung berechnet werden. Ferner haben manche MC-Codes, wie zum Beispiel Serpent, die Funktionalität, homogenisierte makroskopische WG-Wirkungsquerschnitte für bestimmte Regionen eines dreidimensionalen Ganzkernmodells während der normalen Neutronentransportrechnung zu ermitteln. Auf Basis dieser WG-Wirkungsquerschnitte kann dann der NK-Code die Neutronendiffusionsgleichung lösen.

Ferner wurde eine Literaturrecherche nach Experimenten und Benchmarks mit transienten Prozessen durchgeführt, so dass mit dem Verfahren, welches in diesem Arbeitspaket entwickelt werden soll, Nachrechnungen und Vergleiche mit experimentellen Daten und Simulationsergebnisse durchgeführt werden können. Hier wurden das OECD/NEA C5G7-TD Benchmark (Siehe Anhang B18), das PWR MOX/UO_2 Core Transient Benchmark der OECD/NEA /KOZ 06/ und U.S. NRC, und die SPERT-III Experimente /OLS 03/ identifiziert.

Um das aufgestellte Konzept für die Simulation reaktordynamischer Probleme in einem ersten Schritt zu testen, wurden WG-Wirkungsquerschnitte für ein zweidimensionales Schachbrettmodell bestehend aus UO_2- und MOX-Brennelementen mit dem MC-Code Serpent erzeugt. Anschließend wurden sie bei einer Neutronendiffusionsrechnung mit dem NK-Code QUABOX/CUBBOX (QC) angewendet. Die Geometrie- und Materialdaten des Modells sind an die C5G7-TD-Benchmarkspezifikation angelehnt. Da die MC-Simulation, welche zur Erzeugung der WG-Wirkungsquerschnitte, gleichzeitig auch die Referenzlösung darstellt, wurden die Multiplikationsfaktoren aus der MC-Simulation

und der Neutronendiffusionsrechnung miteinander verglichen. Als Referenzergebnis liefert Serpent einen Multiplikationsfaktor von 1.28769 ± 0.00005. Die NK-Rechnung ermittelt einen Multiplikationsfaktor von 1.28735, so dass die Reaktivitätsdifferenz ca. 20 pcm zum Referenzergebnis beträgt. Zum weiteren Vergleich wurden WG-Wirkungsquerschnitte ebenfalls mit konventionellen Brennelementrechnungen ermittelt und diese in QC eingesetzt. Es ergibt sich eine Reaktivitätsdifferenz von -185 pcm. Dieses Ergebnis zeigt, dass der Einsatz von WG-Wirkungsquerschnitten, welche auf der Basis eines MC-Ganzkernmodells erzeugt wurden, mit einem NK-Code bessere Ergebnisse liefert.

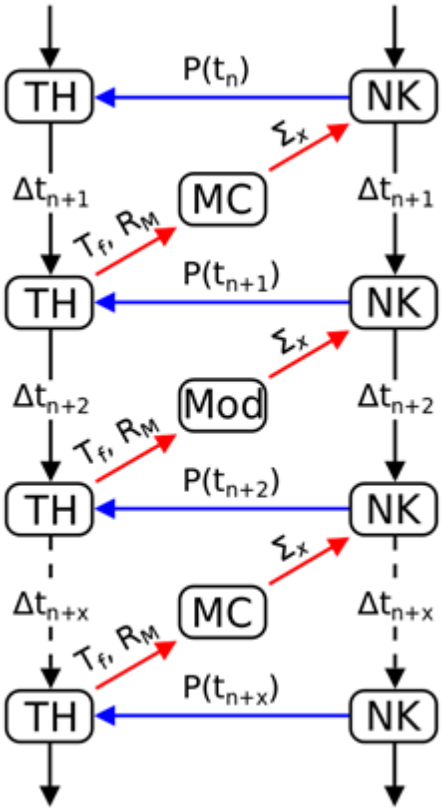

Abb. 4.1 Einbindung eines Monte-Carlo-Codes (MC) in ein Neutronenkinetik-Thermohydraulik- (NK/TH) Programmsystems

Die Anwendung von NK/TH-Codesystemen ist bereits ein bewährtes Konzept zur Durchführung von stationären und transienten Analysen von Leichtwasserreaktorsystemen. Eine Steigerung der räumlichen, energetischen und zeitlichen Auflösung wäre im Prinzip durch die Verwendung einer zeitabhängigen MC-Simulation einschließlich der Berücksichtigung von thermohydraulischen Rückwirkungseffekten zu erreichen /SJE 13/. Allerdings sind Simulationen von reaktordynamischen Problemen unter Anwendung von zeitabhängigen MC-Simulationen für große Modelle aufgrund erheblicher

Rechenzeiten noch nicht praktikabel. In dem nun geplanten Konzept sollen reaktordynamische Simulationen mit einem NK/TH-Codesystem kombiniert mit einer Aktualisierung der makroskopischen WG-Wirkungsquerschnitte durch MC-Simulationen durchgeführt werden. Das Schema ist in Abb. 4.1 dargestellt. Die Aktualisierung erfolgt dabei an bestimmten Zeitschritten während der Transiente durch erneute Simulationen mit dem MC-Ganzkernmodell, wobei die thermohydraulischen Parameter des aktuellen Zeitpunkts aus der TH-Rechnung verwendet werden. Durch dieses Verfahren ist zu erwarten, dass die WG-Wirkungsquerschnitte genauer sind im Vergleich zu den Ergebnissen der konventionellen Brennelementrechnungen im unendlichen Gitter, da bei der Erzeugung der tatsächliche Neutronenfluss des Ganzkernmodells einschließlich des Einflusses der benachbarten Brennelemente berücksichtigt wird. Des Weiteren können aus den MC-Simulationen an bestimmten Zeitschritten Ergebnisse mit hoher räumlicher Auflösung ermittelt werden, die sonst nur durch zusätzliche Maßnahmen bestimmt werden können, wie zum Beispiel durch Rekonstruktion der Brennstableistung auf Basis der Ergebnisse der NK-Rechnungen.

Da die Simulation einer Transiente, wie zum Beispiel der Auswurf eines Steuerstabs, aus einer großen Anzahl von Zeitschritten besteht, wäre es nicht praktikabel, an jedem Zeitschritt eine MC-Simulation durchzuführen. Aus diesem Grund soll nur nach einer bestimmten Anzahl von Zeitschritten, einem sogenannten Makrozeitschritt, eine weitere MC-Simulation durchgeführt werden. An den mikroskopischen Zeitschritten, also solchen, die innerhalb eines Makrozeitschritts liegen, werden die WG-Wirkungsquerschnitte extrapoliert; dies ist in Abb. 4.1 mit „Mod“ bezeichnet. Der Gradient für die Extrapolation wird anhand der Wirkungsquerschnittsdaten ermittelt, die aus der konventionellen Brennelementrechnung bestimmt werden. Als Stützstelle werden die Daten verwendet, die aus der MC-Simulation des letzten Zeitschritts gewonnen werden. Um zu prüfen, ob die Extrapolation von WG-Wirkungsquerschnitten anwendbar ist, wurden in einem ersten Schritt WG-Wirkungsquerschnitte auf Basis eines einzelnen UO_2-Brennelementmodells und für eine Region eines UO_2-Brennelements innerhalb des C5G7-Ganzkernmodells erzeugt. Dies wurde in diskreten Schritten für einen Brennstofftemperaturbereich von 600 bis 1800 K und für eine Moderatordichte von 0.2 bis 0.9 g/cm^3 durchgeführt. Die Verläufe des thermischen Spaltwirkungsquerschnitts und des thermischen Absorptionswirkungsquerschnitts sind als Funktion der Brennstofftemperatur bzw. Moderatordichte in Abb. 4.2 und Abb. 4.3 dargestellt.

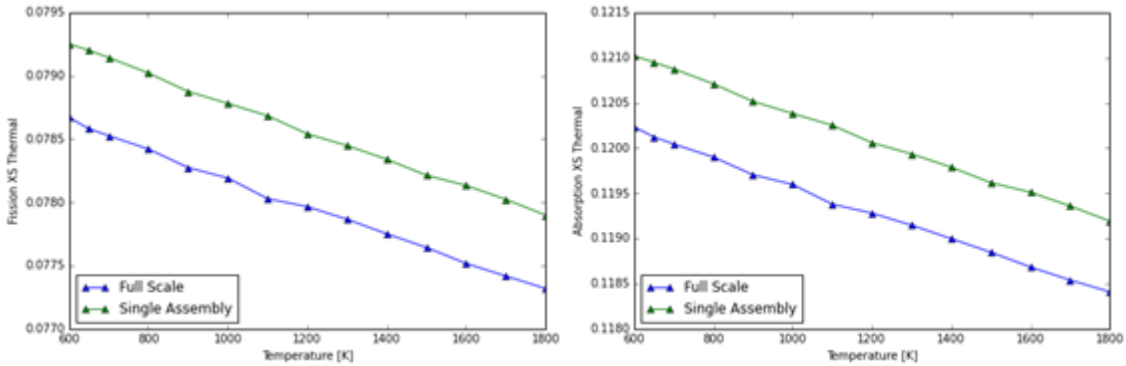

Abb. 4.2 Makroskopischer Spalt- und Absorptionswirkungsquerschnitt für den thermischen Energiebereich als Funktion der Brennstofftemperatur

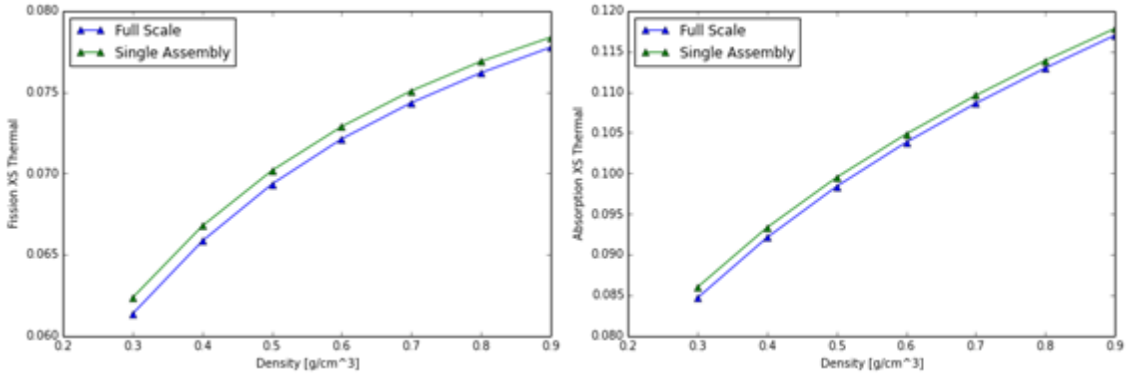

Abb. 4.3 Makroskopischer Spalt- und Absorptionswirkungsquerschnitt für den thermischen Energiebereich als Funktion der Moderatordichte

Qualitativ sind die Verläufe der WG-Wirkungsquerschnitte für Spaltung und Absorption als Funktion der Brennstofftemperatur nahezu parallel, weisen aber eine Differenz auf. Letzteres zeigt, dass die Neutronenflussspektren der beiden Anordnungen tatsächlich unterschiedlich sind und dies zu unterschiedlichen Werten der Wirkungsquerschnitte führt. Dasselbe lässt sich ebenfalls für die Verläufe der Wirkungsquerschnitte als Funktion der Moderatordichte beobachten. Dies zeigt, dass die Extrapolation von WG-Wirkungsquerschnitten prinzipiell anwendbar ist. Für die zulässige Länge eines Makrozeitschritts festzulegen, sind entsprechende Kriterien festzulegen.

Um Wirkungsquerschnittsdaten für die Bildung der Gradienten automatisiert erzeugen zu können, wurde ein Programm erstellt, das anhand von generischen Eingabedatensätzen Modelle von Brennelementen im unendlichen Gitter für den MC-Code Serpent erzeugt. In den Modellen werden die Brennstofftemperatur, die Moderatordichte und die Borkonzentration variiert, um somit WG-Wirkungsquerschnitte zu erhalten, die über

thermohydraulische Zustände parametrisiert sind, die während einer Transiente auftreten können. Ebenfalls wurde ein Programm geschrieben, welches die Wirkungsquerschnittsdaten aus den Serpent-Ausgabedateien liest und in die Datenbank des GRS-Kernsimulators KMacs /ZIL 16/ überführt. Mit den Funktionen des Kernsimulators können anschließend Eingabedaten für das NK/TH-Codesystem QC-ATHLET /LAN 05/ erzeugt werden, um durch eine gekoppelte Simulation entweder den Multiplikationsfaktor für einen bestimmten thermohydraulischen Zustand oder die kritische Borkonzentration zu ermitteln.

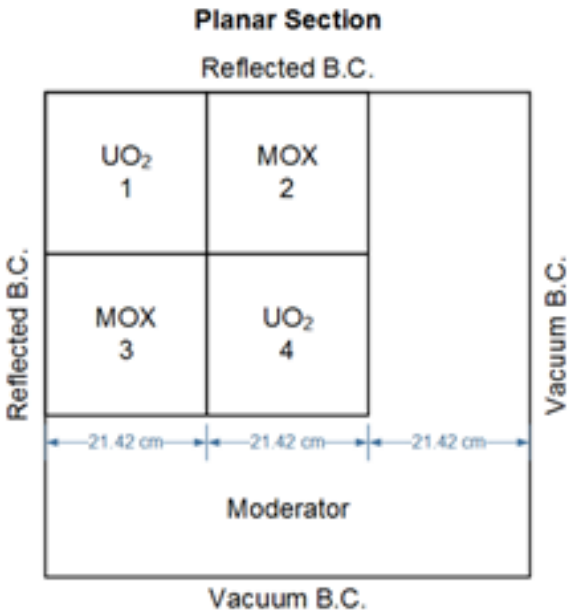

Abb. 4.4 Kernlayout des C5G7-TD Benchmarks

Auf Basis des C5G7-TD-Benchmarks wurde ein erster Test der Programmteile durchgeführt. In Abb. 4.4 ist das Kernlayout dieses Benchmarks dargestellt. Unter Anwendung des Programms zur Erstellung der Modelle für konventionelle Brennelementrechnungen wurden für ein UO_2- und ein MOX-Brennelement WG-Wirkungsquerschnitte für verschiedene Brennstofftemperaturen, Moderatordichten und Borkonzentrationen erzeugt (Brennstofftemperatur in K: 560.0, 900.0, 1000.0; ii) Moderatordichte in g/cm^3: 0.66114, 0.71186, 0.75206, iii) Borkonzentration in ppm: 0.0, 1000.0, 2000.0). Die Wirkungsquerschnittsdaten wurden anschließend in die Kernsimulator-Datenbank übertragen und Modelle des Kerns für das NK/TH-Codesystem erstellt. Dabei wurde jedes Brennelement des Kerns axial in vier Knoten mit einer Höhe von 21.42 cm unterteilt. Die Suche der kritischen Borkonzentration wurde für den Volllast-Zustand durchgeführt. Als Ergebnis wurde eine Borkonzentration von 994 ppm ermittelt. Die aus der gekoppelten Rechnung resultierenden thermohydraulischen Größen (Brennstofftempera-

tur, Moderatordichte, Borkonzentration) in jedem Knoten wurden in das Serpent-Ganzkernmodell übertragen; damit wurde anschließend eine Ganzkernrechnung durchgeführt. Es ergibt sich eine Reaktivitätsdifferenz von - 141 pcm zur NK/TH-Rechnung. Unter Beachtung, dass die Neutronentransportprogramme auf zwei unterschiedlichen Methoden basieren, kann dieses Ergebnis als sehr zufriedenstellend betrachtet werden. In Tab. 4.1 werden die relativen Brennelementleistungen von Serpent und QC-ATHLET miteinander verglichen. Generell weisen beide Programme eine gute Übereinstimmung auf.

Tab. 4.1 Relative C5G7-TD-Brennelementleistungen aus Serpent und QC-ATHLET

	Serpent	**QC-ATHLET**	**Rel. Diff. (%)**
UO_2 (1)	1.641(1)	1.678	2.30
MOX (2)	0.890(1)	0.878	-1.30
MOX (3)	0.891(1)	0.878	-1.43
UO_2 (4)	0.579(1)	0.565	-2.32

Ferner wurden mit beiden Codesystemen die Brennelementleistungen als Funktion der aktiven Brennelementlänge ermittelt. Ein Vergleich zwischen den Ergebnissen beider Codes wird für ein UO_2 und ein MOX Brennelement anhand der rel. Abweichung in Abb. 4.5 gezeigt. Es ergeben sich relative Abweichungen von bis zu ± 2.5 %.

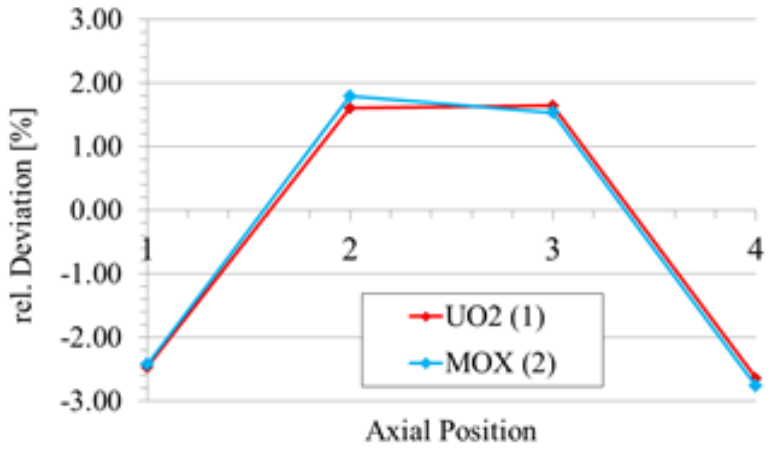

Abb. 4.5 Abweichung zwischen Serpent und QC-ATHLET bzgl. des axialen Verlaufs der Brennelementleistung für ein UO_2- und ein MOX-Brennelement

Einer der Vorteile der MC-Methode besteht in der Simulation des Neutronentransports in beliebig komplexen Geometrien, so dass auch Ergebnisse, wie zum Beispiel die Leistung, mit hoher räumlicher Auflösung bestimmt werden können.

Als Beispiel wird in Abb. 4.6 die Stableistungsverteilung gezeigt, welche während der Neutronentransportrechnung mit Serpent ermittelt wurde. Eine solche Berechnung wäre mit einem nodalen Neutronenkinetik-Code nur durch zusätzliche Methoden, wie Rekonstruktion der Brennstableistung, möglich.

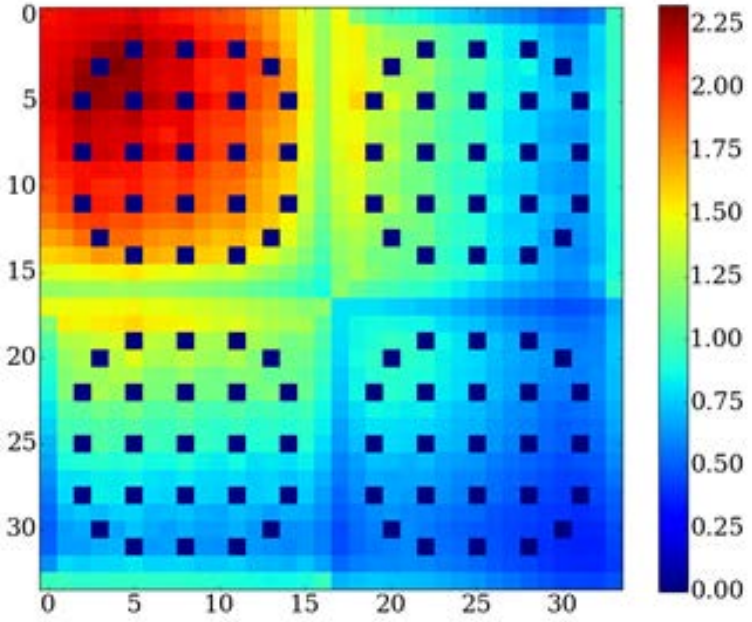

Abb. 4.6 Stableistungsverteilung im C5G7-Benchmark aus Serpent

Da eine MC-Ganzkernberechnung nach jedem Zeitschritt des NK/TH-Programmsystems zu aufwendig wäre, wurde die Extrapolationsmethode der WG-Wirkungsquerschnitte implementiert. Nach einer MC-Ganzkernrechnung werden für jede Region des Ganzkernmodells die WG-Wirkungsquerschnitte und der jeweilige thermohydraulische Zustand als neuer Eintrag in die Datenbank des GRS-Kernsimulators geschrieben. Damit das NK/TH-Codesystem in den folgenden Mikrozeitschritten die WG-Wirkungsquerschnitte entsprechend neuer thermohydraulischer Zustände interpolieren kann, wird eine lineare Extrapolation der WG-Wirkungsquerschnitte entlang absoluter Bereiche der thermohydraulischen Parameter durchgeführt. Die dazu notwendigen Gradienten werden auf Basis von parametrisierten, konventionellen WG-Wirkungsquerschnitten ermittelt. Die extrapolierten WG-Wirkungsquerschnitte werden ebenfalls in die Datenbank eingetragen, so dass jede Region des Kerns durch einen eigenen Satz von parametrisierten WG-Wirkungsquerschnitten entsprechend des thermohydraulischen Zustands beschrieben wird. In Abb. 4.7 ist für das MOX-Brennelement der homogenisierte, thermische Transportwirkungsquerschnitt als Funktion von Moderatordichte und Borkonzentration dargestellt, der konventionell (blau) und durch die Extrapolationsmethode (rot) berechnet wurde.

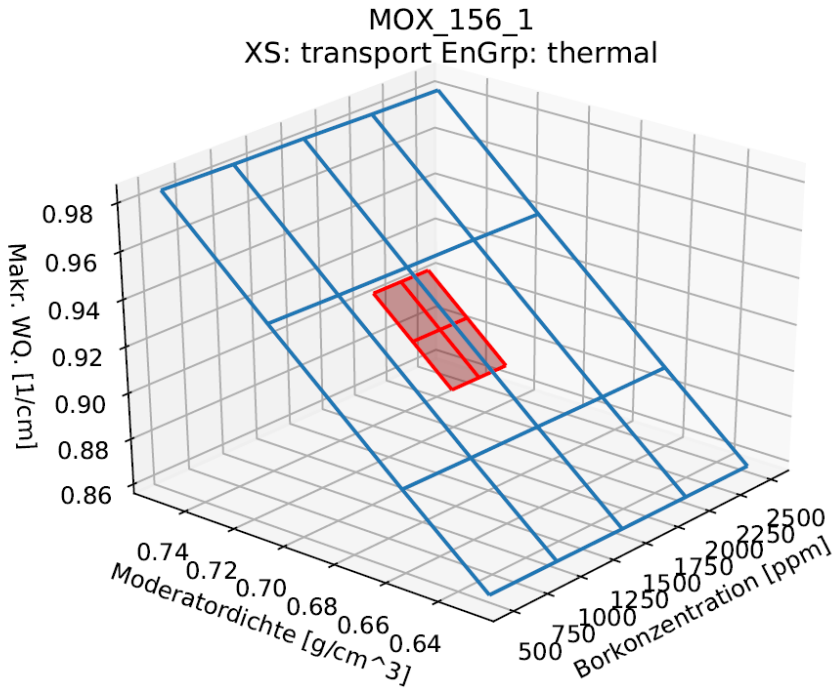

Abb. 4.7 Werte für den thermischen Transportwirkungsquerschnitt des MOX-Brennelements

In Abb. 4.8 werden konventionell (blau) und extrapolierte (rot) Werte für den thermischen Nu*Spaltwirkungsquerschnitt des UO_2-Brennelements als Funktion von Brennstofftemperatur und Moderatordichte gezeigt. Aufgrund des linearen Verlaufs der konventionell ermittelten Wirkungsquerschnitte über weite Bereiche der thermohydraulischen Parameter ist die lineare Extrapolation somit eine brauchbare Methode, um dem NK-Code einen Satz von parametrisierten Wirkungsquerschnittswerten für einen kleinen Bereich, der den aktuellen thermohydraulischem Zustandspunkt umgibt, zur Verfügung zu stellen. Jedoch wurde beobachtet, dass dies nur mit einer hohen Anzahl (> 50 Mio.) von Neutronenschicksalen bei den konventionellen Gitterrechnungen zu erreichen ist, da sonst die statistische Unsicherheit der Werte aufgrund der Monte-Carlo-Methode zu hoch ist.

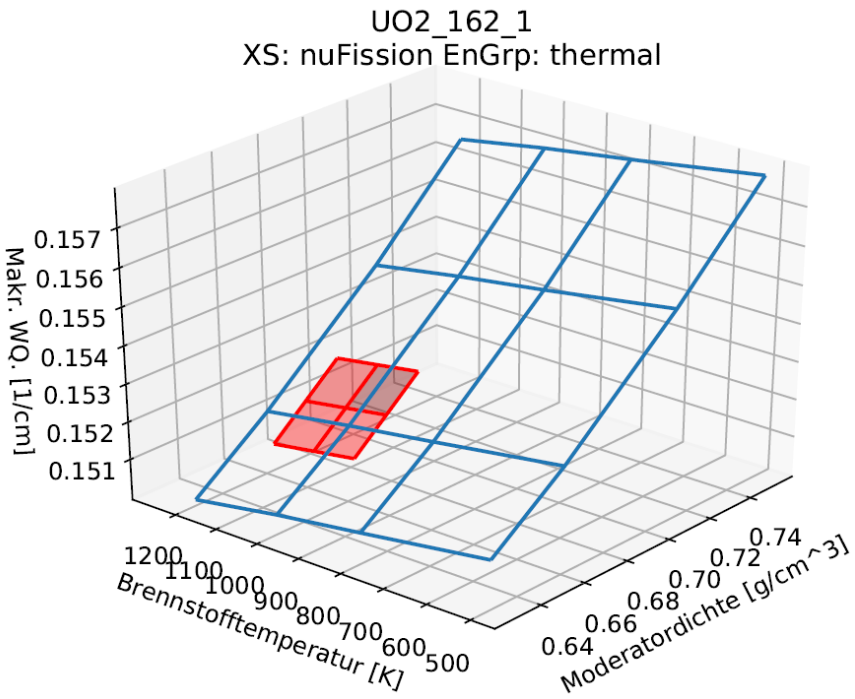

Abb. 4.8 Werte für den thermischen Nu*Spaltwirkungsquerschnitt des UO_2-Brennelements

Da die Eingabedateien für das NK/TH-Codesystem automatisch vom Kernsimulator auf Basis von generischen Eingabedaten erzeugt werden, müssen diese für die weitere Rechnung ebenfalls modifiziert werden. Da nun jede Region des Kerns durch einen eigenen Wirkungsquerschnittssatz beschrieben wird, wurde eine Implementierung vorgenommen, die die generischen Eingabedaten automatisch erweitert und die Zuordnung der Wirkungsquerschnittssätze zu den einzelnen Kernregionen vornimmt. Für einen Vergleich zwischen konventionellen und Ganzkern-WG-Wirkungsquerschnitten wurden Testrechnungen vorgenommen. Hierzu wurde mit dem C5G7-TD Kern eine Borsuche mit dem NK/TH-Codesystem mit den konventionellen Wirkungsquerschnitten durchgeführt. Die resultierende Verteilung der thermohydraulischen Parameter wurde in das MC-Ganzkernmodell übertragen und damit MC-Ganzkern-WG-Wirkungsquerschnitte ermittelt. Diese Wirkungsquerschnitte wurden anschließend über absolute Bereiche von Brennstofftemperatur, Moderatordichte und Borkonzentration extrapoliert und in die Datenbank überführt. Basierend auf den Ganzkern-WG-Wirkungsquerschnitten wurde schließlich eine zweite Bor-Suche durchgeführt. Da der Unterschied zwischen den ermittelten Borkonzentrationen mit ca. 150 ppm als noch nicht zufriedenstellend bewertet wurde, wurden Verbesserungen des Modells vorgenommen. Eine Verbesserung wurde durch die Verwendung des Transportwirkungsquerschnitts erreicht, der mit Hilfe der konsistenten Methode und nicht mit der inkonsistenten Me-

thode ermittelt wird, denn die konsistente Methode berücksichtigt die Anisotropie der Streuung an Wasserstoff /RAI 17/. Jedoch ist die Anwendung der konsistenten Methode bei MC-Neutronentransportprogrammen nicht direkt möglich, sie kann aber durch eine vorausgehende Fixed-Source-Rechnung mit einem Modell angenähert werden das nur aus Moderatormaterial besteht. In Abb. 4.9 sind als Funktion der Energiegruppe die mit der konsistenten Methode (CMM) und die mit der inkonsistenten Methode (INF) berechneten Transportwirkungsquerschnitte im Verhältnis zum totalen Wirkungsquerschnitt dargestellt. Im thermischen Energiebereich und zwischen 1 und 200 keV ist der Transportwirkungsquerschnitt, welcher mit der konsistenten Methode ermittelt wurde, geringer.

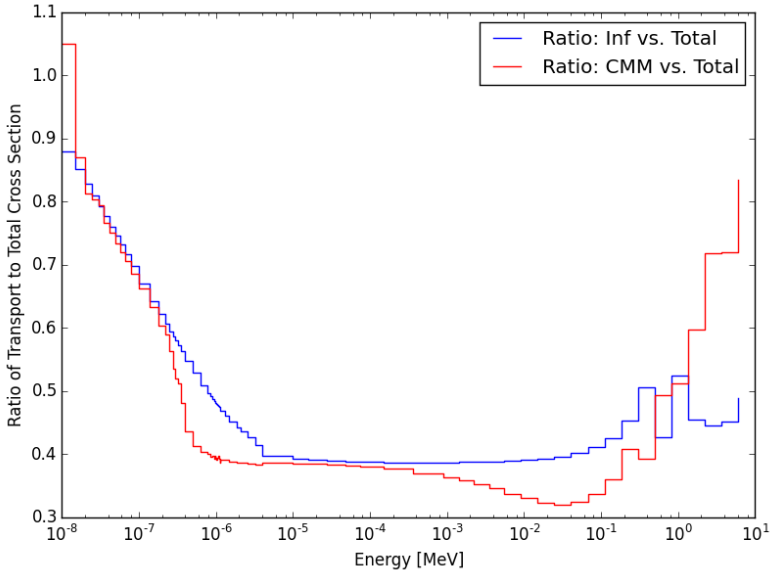

Abb. 4.9 Verhältnisse der mit verschiedenen Methoden berechneten Transportwirkungsquerschnitte zum totalen Wirkungsquerschnitt

Durch die Verwendung dieses Transportwirkungsquerschnitts konnte die Differenz zwischen den Borkonzentrationen auf unter 100 ppm reduziert werden. Um Kompensationseffekte auszuschließen, wurden Testrechnungen mit kleineren und größeren Modellen in zwei und drei Dimensionen durchgeführt; dabei konnte gezeigt werden, dass die Verwendung dieses Verfahrens gerade bei kleinen Kernen wie etwa dem C5G7-TD-Kern, bessere Ergebnisse liefert, da die hohe Neutronenleckage durch die konsistente Methode im Transportwirkungsquerschnitt berücksichtigt wird. Je größer der Kern ist, desto geringer wird der Einfluss der Neutronenleckage.

Um MC-Ganzkernrechnungen zu bestimmten Zeitschritten während des transienten Vorgangs unter Berücksichtigung der zu dem Zeitpunkt vorhandenen Verteilungen von

Brennstofftemperatur, Moderatordichte und Borkonzentration durchführen zu können, wurde auf die Callback-Funktionalität des Thermohydraulik-Systemcodes ATHLET zurückgegriffen. Hierzu wird ATHLET als dynamische Bibliothek kompiliert und über einen dazugehörigen Controller angesteuert. Dieser Controller ist in der Sprache Python programmiert und erlaubt neben dem Starten und Beenden von ATHLET auch Implementierungen von Rückruffunktionen, die zum Beispiel gerufen werden, nachdem die Eingabedatei gelesen worden ist oder bevor ATHLET den nächsten Zeitschritt ausführt. Der ATHLET-Controller wurde in das Programmsystem zur Beschreibung von Transienten integriert und so angepasst, dass nach jedem Zeitschritt über eine Rückruffunktion die Kontrolle ans Programmsystem übergeben wird und dieses anhand von Kriterien entscheidet, ob der nächste Zeitschritt durchgeführt oder eine MC-Ganzkernrechnung ausgeführt werden soll. Als Kriterium wurde die Länge eines Makrozeitschritts festgelegt, also das Zeitintervall zwischen zwei MC-Ganzkernrechnungen.

Zur Steuerung der MC-Ganzkernrechnungen wurde ein eigener Controller implementiert, der von der Rückruffunktion gerufen wird. Dieser Controller veranlasst, dass für den entsprechenden Zeitschritt die notwendigen Eingabedateien für den MC-Code Serpent erstellt werden. Dies umfasst eine Aktualisierung der Materialkarten entsprechend der Temperaturen und Massendichten aus der ATHLET-Rechnung. Weiterhin wird, wenn vorhanden, die aktuelle Steuerstabposition aus dem GCSM-Signal von ATHLET ausgelesen und übertragen, so dass auch im MC-Ganzkernmodell die aktuelle Einfahrtiefe des Steuerstabs berücksichtigt wird. Anschließend führt der Controller die Rechnung entweder interaktiv oder per Job-Scheduler auf dem Rechencluster aus und erledigt die Nachverarbeitung der Ausgabedateien, wie z.B. das Umwandeln in ein binäres Format mit dem Mathematikprogramm Octave /EAT 17/, welches dann einfach weiterverarbeitet werden kann. Nach der MC-Ganzkernrechnung veranlasst die Rückruffunktion die Extrapolation der WG-Wirkungsquerschnitte, sodass mit den WG-Wirkungsquerschnitten aus der MC-Ganzkernrechnung und den konventionell erzeugten WG-Wirkungsquerschnitten eine neue Bibliothek von extrapolierten WG-Wirkungsquerschnitten für den NK-Code erstellt wird. Damit für den NK-Code bei teilweise kontrollierten Nodes ein unkontrollierter und ein kontrollierter Satz von WG-Wirkungsquerschnitten zur Verfügung stehen, die in Mikrozeitschritten entsprechend der Steuerstabposition miteinander gewichteten werden können, wurde die Näherung eingeführt, dass die extrapolierten WG-Wirkungsquerschnitte aus dem unkontrollierten und dem kontrollierten Node unterhalb bzw. oberhalb des Nodes mit der Steuerstabspitze anhand des Verhältnisses von unkontrolliertem zu kontrolliertem Volumen des

Nodes miteinander gewichtet werden. Hierzu wurde ein Test mit einem Verhältnis von 0.099 unkontrolliertem zu kontrolliertem Volumen durchgeführt und die Absorptions- sowie die Nu*-Spaltungswirkungsquerschnitte für die thermische und die schnelle Energiegruppe betrachtet. Der manuell gewichtete Absorptionswirkungsquerschnitt für die schnelle Energiegruppe zeigte eine Abweichung von 1.1 % im Vergleich zum Wirkungsquerschnitt, der durch das MC-Ganzkernmodell erzeugt wurde. Der thermische Absorptionswirkungsquerschnitt wie auch der schnelle und der thermische Nu*Spaltungswirkungsquerschnitt wiesen eine Abweichung von unter 0.5 % auf. Nach der Aktualisierung der Wirkungsquerschnitte aller Regionen wird eine neue Bibliothek für den NK-Code erzeugt und in das Ausführungsverzeichnis kopiert. Damit im nächsten Zeitschritt die neue Bibliothek vom NK-Code gelesen und die Wirkungsquerschnitte aktualisiert werden, wurde die Implementierung des NK-Codes entsprechend geändert.

Als Vorbereitungsschritte für einen Test der implementierten Rechenkette wurden für das UO_2- das MOX-Brennelement sowie den Reflektor zuerst mit Serpent auf Basis von Brennelementmodellen im unendlichen Gitter konventionelle WG-Wirkungsquerschnitte auf dem folgenden Gitter von thermohydraulischen Zustandspunkten erzeugt: i) Brennstofftemperatur (K): 500.0; 800.0; 1000.0; 1200.0; ii) Moderatordichte (g/cm^3): 0.62822; 0.66114; 0.71187; 0.75206; iii) Borkonzentration (ppm): 500.0; 1000.0; 1500.0; 2000.0; 2500.0. Für die Serpent-Rechnungen wurde auf die Wirkungsquerschnittsbibliothek ENDF/B-VII.0 zurückgegriffen. Der C5G7-TD-Kern hat eine aktive Höhe von 128.52 cm und ist radial sowie unten und oben von Reflektoren umgeben. Der Kern besteht aus 4x4 Brennelementen; das Kernlayout ist in Abb. 4.4 dargestellt. Die zentralen UO_2-Brennelemente können mit AgInCd-Steuerstäben kontrolliert werden. Mit QC-ATHLET wurde für den Volllast-Heiß-Zustand (Brennstofftemperatur: 1000.0 K, Moderatordichte: 0.71187 g/cm^3, thermische Leistung: 90.87 MW) und einer Steuerstabeinfahrtiefe von 64.26 cm eine kritische Borkonzentration von 1270 ppm berechnet. Ausgehend von der kritischen Borkonzentration wurden die Steuerstabkurven, dargestellt in Abb. 4.10, mit gekoppelten QC-ATHLET-Rechnungen, QC-Standalone-Rechnungen und Serpent-Monte-Carlo-Referenzrechnungen für eine Einfahrtiefe von 0.26 - 64.26 cm ermittelt. Für die Reaktivitätsberechnung wurde für den Anteil verzögerter Neutronen ein Wert von 0.00598 zugrunde gelegt, der aus der Serpent-Rechnung ermittelt wurde.

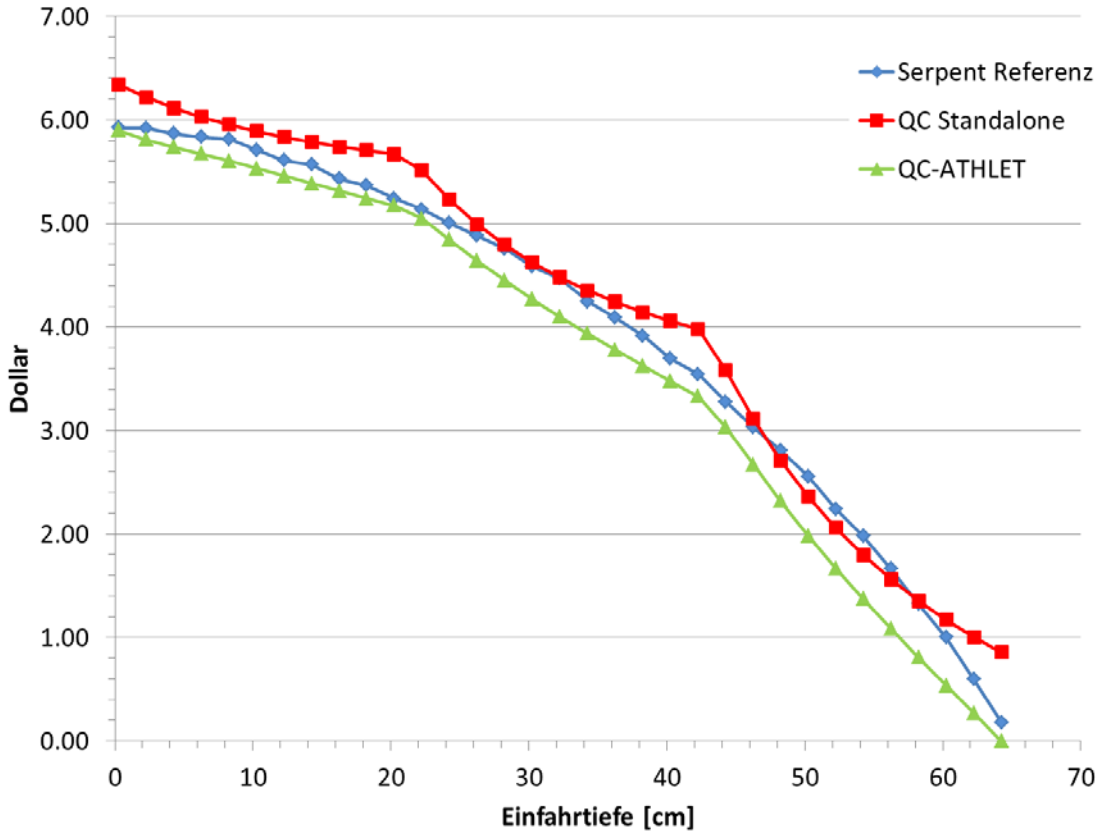

Abb. 4.10 Wirksamkeit der Steuerstäbe für den C5G7-TD-Kern

Die QC-ATHLET-Rechnung unterschätzt die Serpent-Referenzrechnung, da die gekoppelte Rechnung im Volllast-Zustand durchgeführt wurde und somit negative Rückwirkungen auftreten. Die QC-Standalone-Rechnung zeigt eine zufriedenstellende Übereinstimmung, wenn sich die Steuerstabspitze in der Mitte eines Nodes befindet, jedoch zeigt sich eine Überschätzung an den Nodegrenzen.

Für nachfolgende Rechnungen wurde die Analyse einer langsamen Transiente ausgewählt. Hierzu wurde die Einfahrtiefe der Steuerstäbe von 64.26 cm auf 42.84 cm innerhalb von 10 s verringert. Aufgrund des langsamen Verfahrens der Steuerstäbe und der prompt einsetzenden negativen Rückwirkungen ist die zugefügte Reaktivität deutlich geringer im Vergleich zu den Steuerstabkurven in Abb. 4.10. Der Verlauf der Leistung als Funktion der Zeit, berechnet mit QC-ATHLET, wird in Abb. 4.11 gezeigt.

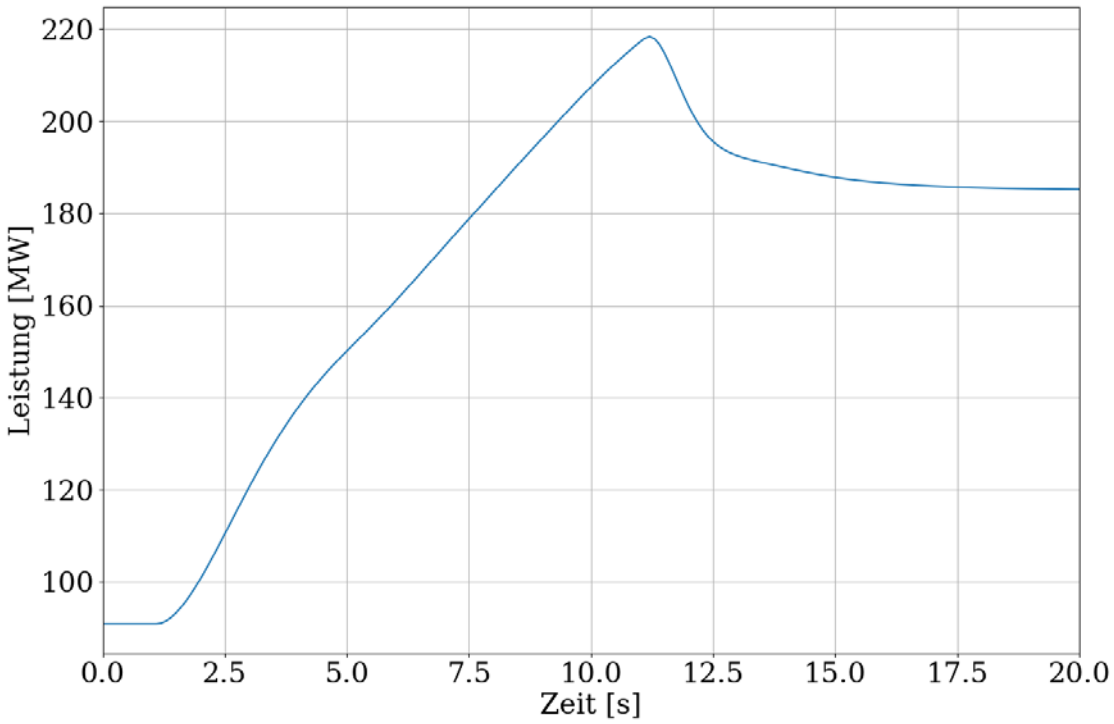

Abb. 4.11 Verlauf der Leistung im C5G7-TD-Kern beim Ziehen der Steuerstäbe von 64.26 cm auf 42.84 cm innerhalb 10 s aus QC-ATHLET

In einem weiteren Schritt wurde das Mitführen des MC-Ganzkernmodells während der Transiente getestet, jedoch ohne dass Werte aus der MC-Ganzkernrechnung an die QC-ATHLET-Rechnung zurückgegeben wurden. Über die Rückruffunktion wurde in Schritten von 0.5 s eine MC-Ganzkernrechnung durchgeführt. Die Verläufe der Multiplikationsfaktoren während der Transiente ist in Abb. 4.12 dargestellt. Insgesamt bildet die MC-Ganzkernrechnung den Verlauf des Multiplikationsfaktors nach, jedoch ist ein schwächerer Anstieg als auch ein frühzeitiger Abstieg zu erkennen. Die gleiche Analyse wurde ebenfalls für eine schnelle Transiente durchgeführt, bei der der Steuerstab innerhalb von 1 s von 64.26 cm auf 21.42 cm bewegt wird. In Abb. 4.13 werden die Verläufe der Multiplikationsfaktoren verglichen. Insgesamt bildet die MC Ganzkernrechnung den Verlauf nach, jedoch unterschätzt sie die QC-ATHLET Rechnung, insbesondere beim Maximum bei 1.6 s.

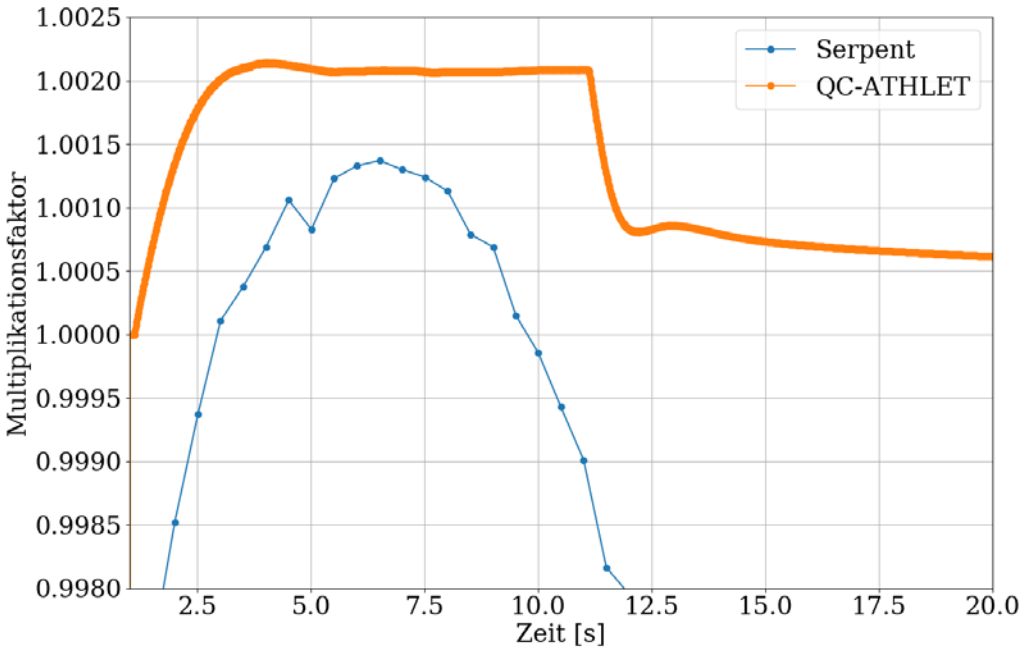

Abb. 4.12 Verlauf der Multiplikationsfaktoren im C5G7-TD-Kern beim Verfahren der Steuerstäbe von 64.26 cm auf 42.84 cm innerhalb 10 s aus QC-ATHLET und Serpent

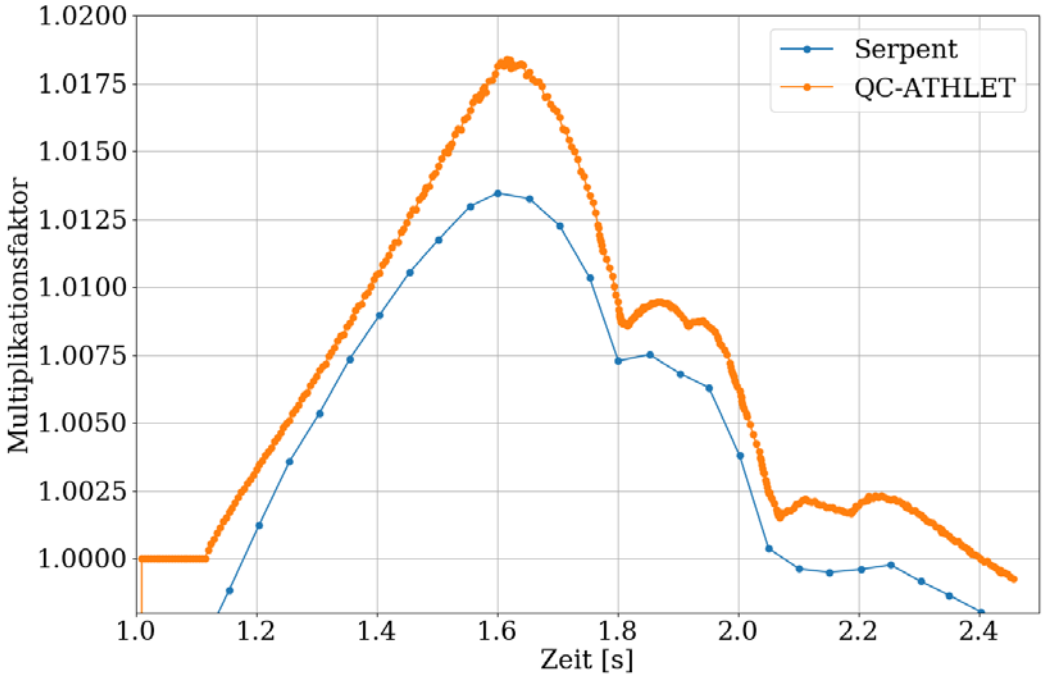

Abb. 4.13 Verlauf der Multiplikationsfaktoren im C5G7-TD-Kern beim Verfahren der Steuerstäbe von 64.26 cm auf 42.84 cm innerhalb 1 s aus QC-ATHLET und Serpent

Für die langsame Transiente wurde außerdem die Verteilung des Neutronenflusses bei verschiedenen Zeitschritten mit dem Serpent-Ganzkernmodell berechnet. In Abb. 4.14 ist die thermische Neutronenflussverteilung entlang eines vertikalen Schnitts durch den Kern an den Zeitpunkten 1.11 s und 11.51 s dargestellt. Der Neutronenfluss steigt in Folge der Steuerstabbewegung im zuvor kontrollierten Node an.

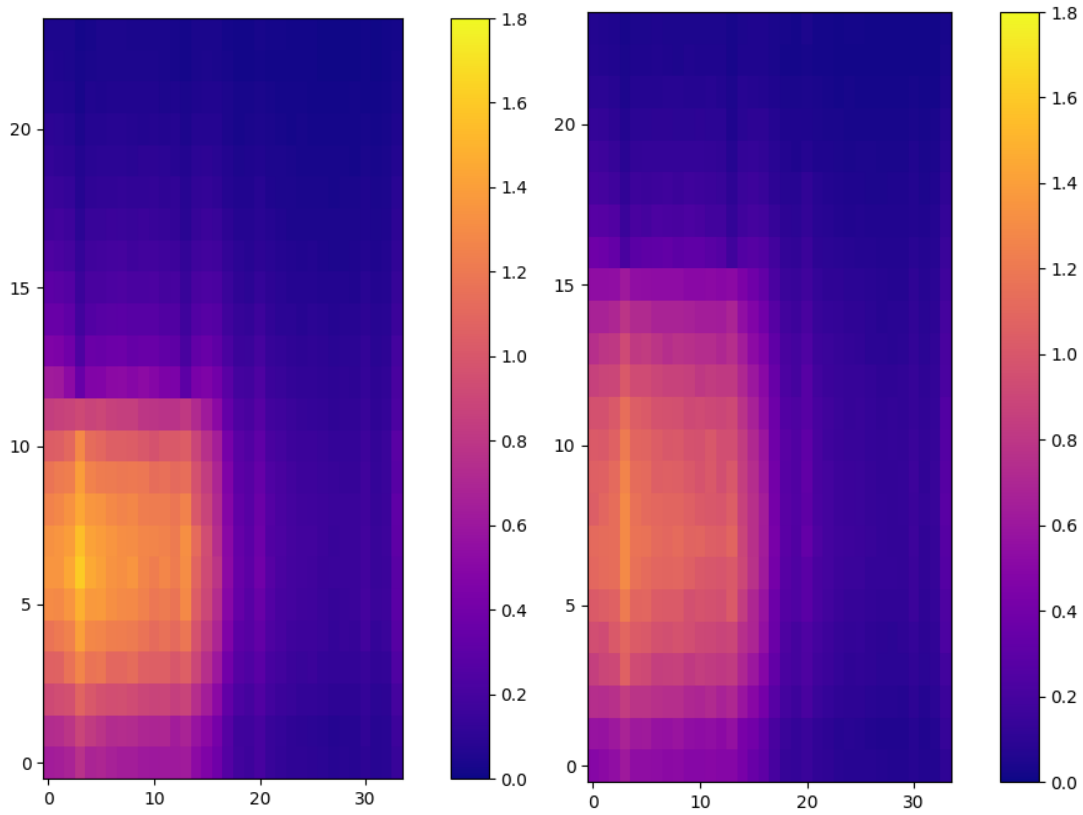

Abb. 4.14 Axiale Verteilung des thermischen Neutronenflusses im C5G7-TD-Kern vor und nach der Steuerstabbewegung

Auf Basis der langsamen Transiente wurde in einem nächsten Schritt die Anwendung von extrapolierten WG-Wirkungsquerschnitten während der transienten Analyse untersucht. Nach einer stationären QC-ATHLET-Rechnung wurde eine MC-Ganzkernrechnung durchgeführt und dabei eine Bibliothek mit extrapolierten WG-Wirkungsquerschnitten erstellt. Auf Basis dieser Bibliothek wurde eine neue QC-ATHLET Rechnung gestartet, welche die Steuerstabbewegung ausführt. Nach einem Zeitschritt von 0.25 s wurde eine MC-Ganzkernrechnung mit der aktuellen Verteilung der thermohydraulischen Parameter und der aktuellen Steuerstabstellung durchgeführt. Mit den ermittelten WG-Wirkungsquerschnitten aus der MC-Ganzkernrechnung wurde eine Bibliothek von extrapolierten WG-Wirkungsquerschnitten erstellt und vom NK-Code in den folgenden Mikrozeitschritten angewendet. In Abb. 4.15 ist der Verlauf der Multiplikati-

onsfaktoren dargestellt. Es ist zu erkennen, dass die Aktualisierung der WG-Wirkungsquerschnitte zu negativen Sprüngen im Multiplikationsfaktor von QC-ATHLET führt. Ab ca. 4.5 s nimmt der Multiplikationsfaktor jedoch deutlich zu, wohingegen der Multiplikationsfaktor von Serpent wieder abnimmt.

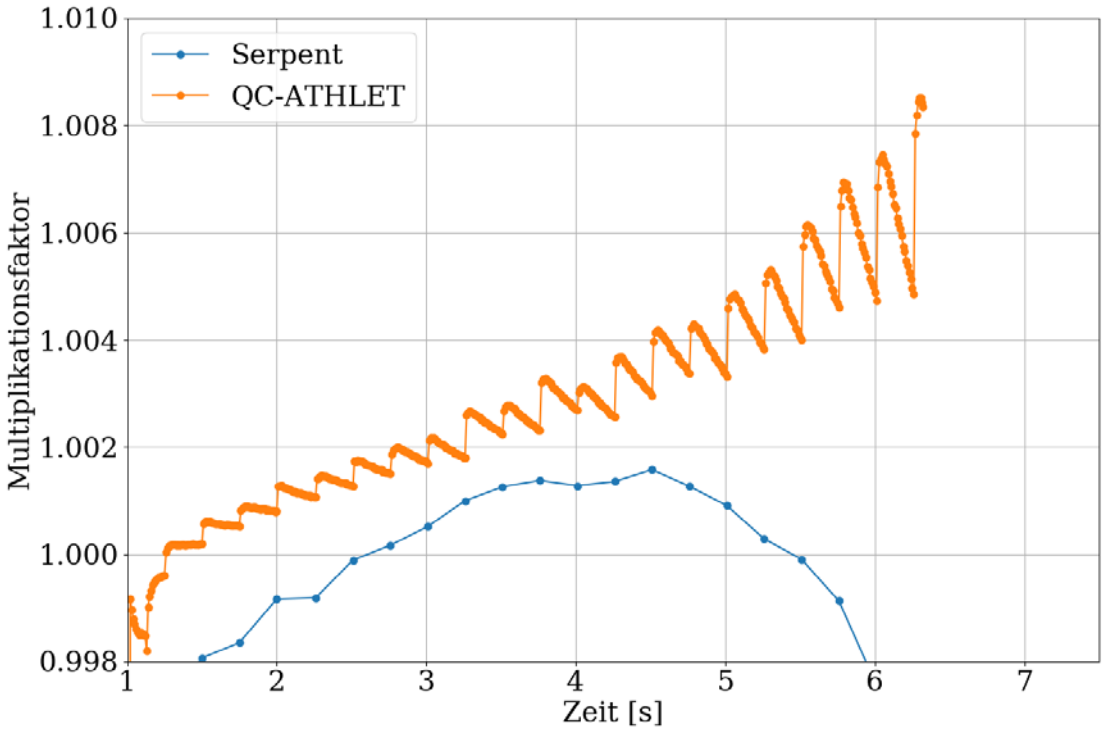

Abb. 4.15 Verlauf der Multiplikationsfaktoren für den C5G7-TD-Kern aus QC-ATHLET und Serpent unter Anwendung von extrapolierten WG-Wirkungsquerschnitten

Der Verlauf der Leistung, der mit QC-ATHLET berechnet wurde, ist in Abb. 4.16 dargestellt. Im Vergleich zur nominalen Rechnung, siehe Abb. 4.11, steigt die Leistung deutlich schneller an. Die Ursachen für diese Unterschiede sind noch nicht geklärt und sollen in einem Anschlussvorhaben untersucht werden.

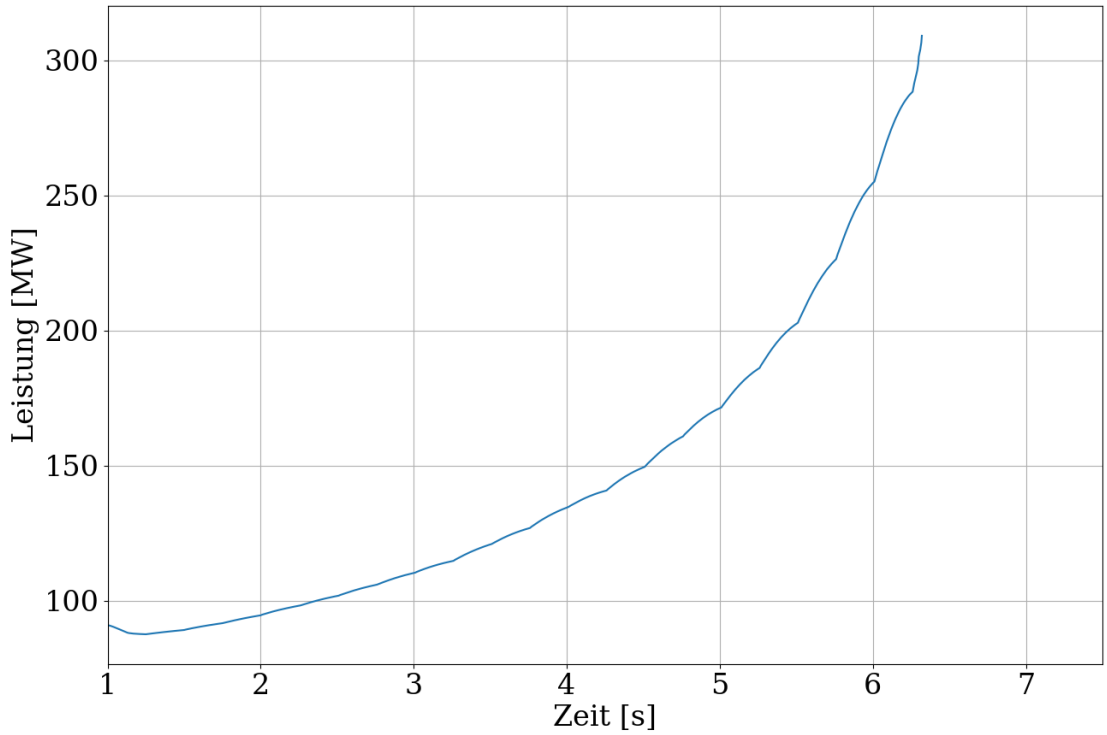

Abb. 4.16 Verlauf der Leistung im C5G7-TD-Kern beim Ziehen der Steuerstäbe von 64.26 cm auf 42.84 cm innerhalb 10 s aus QC-ATHLET unter Anwendung von extrapolierten WG-Wirkungsquerschnitten

4.2 Beschreibung von Zuständen schwerer Kernzerstörung mit der Monte-Carlo-Methode

Zur Beschreibung von Zuständen des Kerns eines Siedewasserreaktors in den unterschiedlichen Phasen der Kernzerstörung werden Szenarien mit unterschiedlichen Annahmen zur Geometrie des Reaktorkerns untersucht. Diese unterscheiden sich durch den Grad der Abweichung von der regulären Geometrie, also der Umverteilung des Kernbrennstoffs sowie des Struktur- und Absorbermaterials, und den Moderationszustand. Dafür wurden Modelle für einen frischen generischen SWR-Kern zur Simulation mit einem Monte-Carlo-Code erstellt. Dabei kann in einer ersten Phase von Modellen für den Monte-Carlo-Code MCNP-4c ausgegangen werden, die in früheren Untersuchungen erstellt wurden. Diese Modelle wurden erweitert und Anpassungen hinsichtlich der aktuellen MCNP-Version 6.1 vorgenommen. Des Weiteren wurden für die Untersuchungen aktuelle, auf ENDF/B-VII.1 basierende nukleare Daten verwendet, und zwar mit der Methode der OTF-Dopplerverbreiterung /PEL 13/. Bei dieser Methode (OTF = „on the fly“) ist es nicht nötig, prozessierte Daten bei den Temperaturen der Materialien in der untersuchten Anordnung zur Verfügung zu haben oder Daten auf ei-

nem Gitter von festen Temperaturen zu interpolieren; vielmehr wird die Dopplerverbreiterung der Resonanzen für die jeweilige Temperatur an der Stelle, an der eine Reaktion stattfindet, während der MCNP-Rechnung durchgeführt.

Es wurden Modelle für das ungestörte Brennstabgitter mit und ohne Steuerstäbe erstellt, und davon ausgehend Zustände des kontrollierten Kerns, bei denen in Teilbereichen die Steuerstäbe nicht vorhanden sind. Durch Bildung von Eutektika kann der Schmelzpunkt von Materialkombinationen, in diesem Fall Borkarbid und Stahl, signifikant herabgesetzt werden, so dass der Fall eintreten kann, dass in Teilbereichen Steuerstäbe verlorengehen, während das Brennstabgitter noch intakt ist. Durch Flutung dieser Bereiche kann dann Rekritikalität eintreten.

Tab. 4.2 Multiplikationsfaktor eines SWR-Kerns in unterschiedlichen Zuständen bezüglich der Steuerstäbe

Kernzustand	**k_{eff}**
vollständig unkontrolliert	1.13658
vollständig kontrolliert	0.94923
kontrolliert, Bereich 1 unkontrolliert	0.99187
kontrolliert, Bereich 2 unkontrolliert	1.01969
kontrolliert, Bereich 3 unkontrolliert	1.03341

In Tab. 4.2 sind einige exemplarische Ergebnisse für den Multiplikationsfaktor bei diesem Szenario dargestellt. Die statistische Unsicherheit beträgt bei allen Werten ca. 0.0001. Die Bereiche, in denen keine Steuerstäbe mehr vorhanden sind, wurden axial am oberen Kernrand und radial in der Kernmitte angenommen. Dabei wurden folgende Bereiche betrachtet.

- Bereich 1: fünf Brennelement-Viererbündel auf einer Höhe von 53 cm;
- Bereich 2: neun Brennelement-Viererbündel auf einer Höhe von 53 cm;
- Bereich 3: fünf Brennelement-Viererbündel auf einer Höhe von 106 cm.

Für den Kern wurde der kalte Zustand angenommen, da die Flutung mit kaltem Wasser erfolgt. Für das Szenario, bei dem fünf Steuerstäbe auf einer Länge von 53 cm als feh-

lend angenommen werden, bleibt der Kern gerade noch unterkritisch. Bei den beiden anderen Szenarien wird bereits deutlich Rekritikalität erreicht.

Für späte Zustände der Kernzerstörung wurden zunächst Szenarien angenommen, bei denen der Brennstoff sich vollständig fragmentiert im unteren Kernbereich befindet. Als Fragmente werden dabei Kugeln angenommen, deren Volumen dem einer einzelnen Brennstofftablette entspricht. Die minimale Höhe dieser Schüttung ist dann bestimmt durch die Annahme, dass die Brennstofffragmente in einer dichten Kugelpackung vorliegen; die Gesamtanzahl der Fragmente ist durch die Menge von Brennstoff im Reaktorkern bestimmt. In Wirklichkeit muss angenommen werden, dass eine solche Schüttung deutlich höher ist, da durch die unregelmäßigere Form der Fragmente die dichte Kugelpackung bei Weitem nicht erreicht werden kann. Daher wurden zunächst Parameterstudien durchgeführt, bei denen der Abstand im Kugelgitter ausgehend von dem der dichten Kugelpackung vergrößert wird. Dabei wird gleichzeitig die Höhe der Schüttung so angepasst, dass das gesamte Brennstoffvolumen konstant bleibt.

Die Ergebnisse einer solchen Studie sind in Abb. 4.17 dargestellt. Diese Abbildung zeigt die Abhängigkeit des Multiplikationsfaktors vom relativen Fragmentabstand (d. h. ein Wert von 1.0 entspricht der dichten Kugelpackung) bei gleichzeitiger Änderung der Schüttungshöhe. Der Multiplikationsfaktor nimmt zunächst mit dem Fragmentabstand schnell zu, da sich die dichte Kugelpackung in einem stark untermoderierten Zustand befindet. Das Maximum des Multiplikationsfaktors wird bei einem Fragmentabstand erreicht vom ca. 1.33-fachen dessen der dichten Kugelpackung erreicht; hier ist der Multiplikationsfaktor mit einem Wert von ca. 1.29 deutlich höher als der des unkontrollierten Kerns bei ungestörtem Brennstabgitter. Da angenommen wird, dass die Steuerstäbe in diesem Zustand nicht verfügbar sind, kann dar Kern nur durch Zugabe von Bor (oder eines anderen starken Absorbers) zum Kühlmittel unterkritisch gemacht werden. Dies ist in Abb. 4.18 dargestellt. Diese Abbildung zeigt die Abhängigkeit des Multiplikationsfaktors der Schüttung mit der höchsten Reaktivität, also dem relativen Fragmentabstand von 1.33, von der Borkonzentration. Bei einer Konzentration von natürlichem Bor von mehr als ca. 1250 ppm wird die Schüttung wieder unterkritisch.

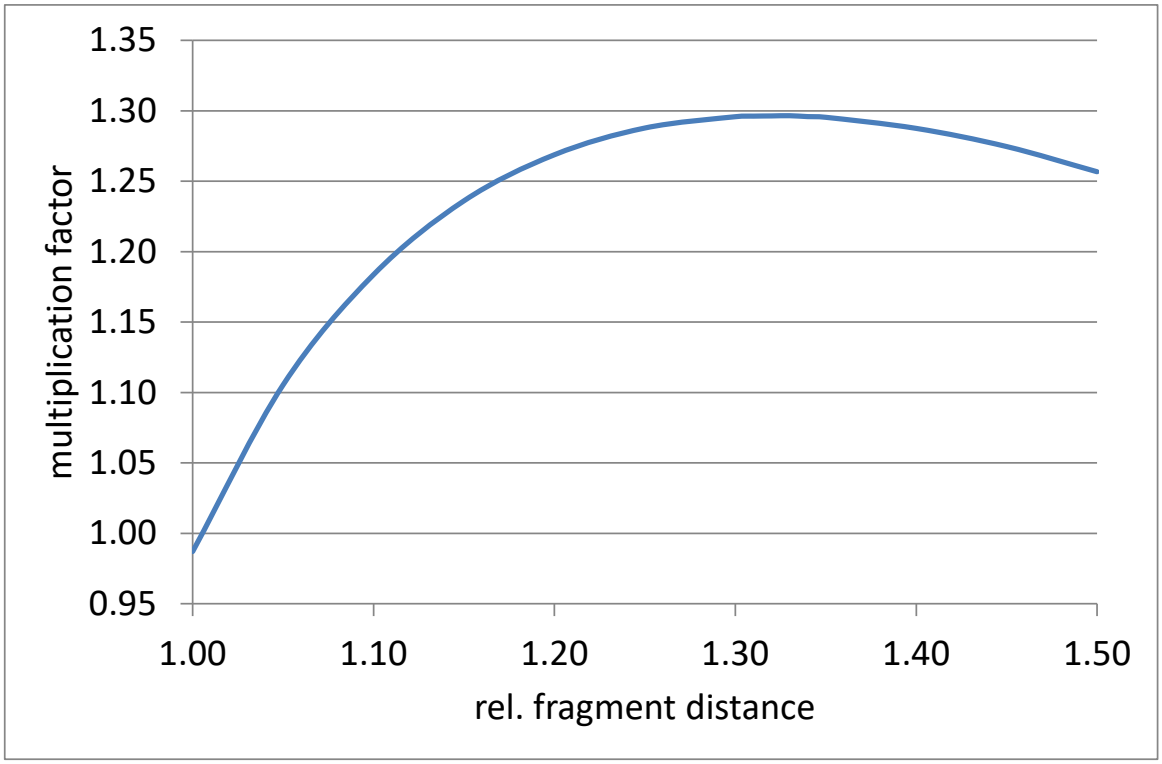

Abb. 4.17 Multiplikationsfaktor einer Schüttung von Brennstofffragmenten als Funktion des relativen Fragmentabstands

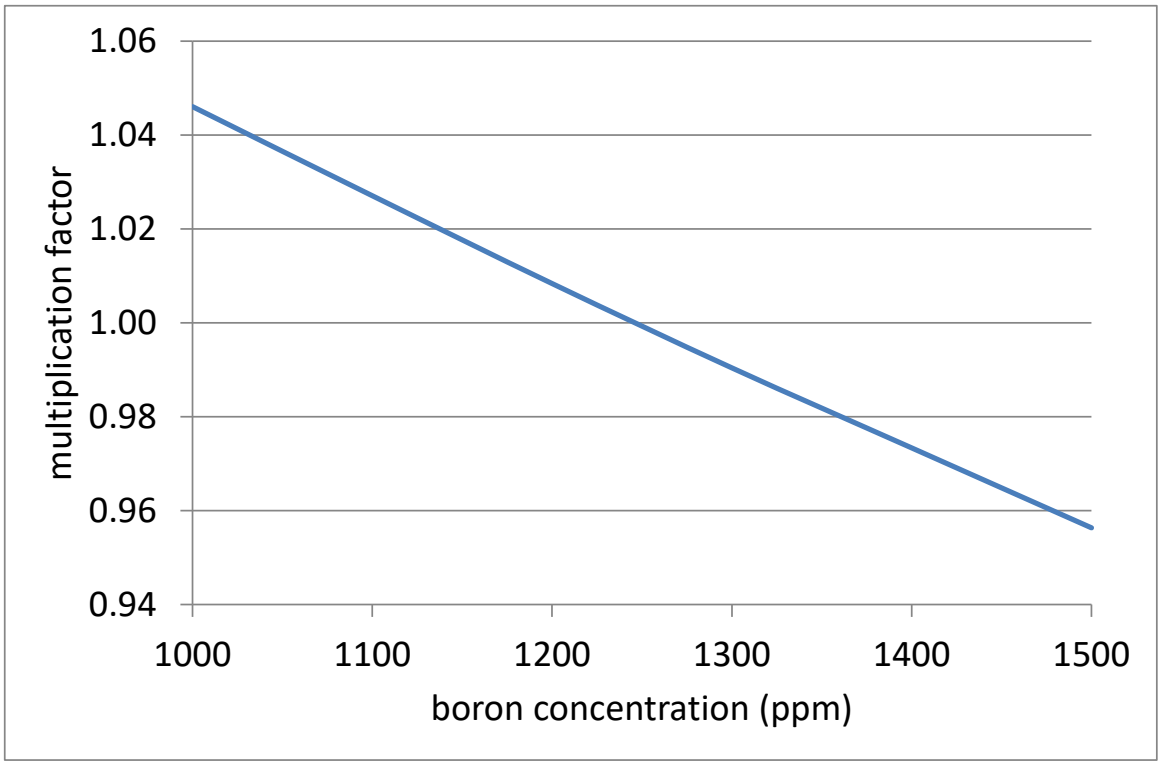

Abb. 4.18 Multiplikationsfaktor einer Schüttung maximaler Reaktivität als Funktion der Borkonzentration

Um bei Zuständen fortgeschrittener Kernzerstörung eine möglichst realistische Umverteilung der einzelnen Kernbestandteile zu berücksichtigen, ist die Modellierung mit einer zufälligen Verteilung der Bestandteile von großem Vorteil. Mit MCNP ist es möglich, einzelne Bestandteile in Form eines regelmäßigen Gitters zu modellieren. Während der Monte-Carlo-Rechnungen kann nun berücksichtigt werden, dass jedes Element innerhalb eines Gitterelements zufällig angeordnet ist. Mit Serpent /LEP 15/ ist es hingegen möglich, explizit eine Anzahl einzelner Elemente zufällig innerhalb einer vorgegebenen Geometrie zu modellieren. Eine Beschränkung auf eine Anordnung in einem Gitter entfällt vollständig. Da mit dem Code Serpent außerdem Weniggruppen-Daten für Diffusionsprogramme erzeugt werden können, ist dieses Programm für die weitere Beschreibung der angenommenen Szenarien am besten geeignet, und wurde für weitergehende Studien herangezogen.

Tab. 4.3 Serpent-Ergebnisse für den Multiplikationsfaktor und Zwei-Gruppen-Wirkungsquerschnitte (1/cm) für eine Fragmentschüttung

	Regelmäßiges Gitter	**Zufällige Verteilung**
Multiplikationsfaktor	1.2954	1.2940
Totaler Wirkungsquerschnitt schnell	7.28460E-01	7.27479E-01
Totaler Wirkungsquerschnitt thermisch	2.22449E+00	2.24312E+00
Einfangwirkungsquerschnitt schnell	6.93729E-03	6.83698E-03
Einfangwirkungsquerschnitt thermisch	3.34527E-02	3.31206E-02
Absorptionswirkungsquerschnitt schnell	9.27267E-03	9.18265E-03
Absorptionswirkungsquerschnitt thermisch	8.72425E-02	8.56959E-02
Spaltwirkungsquerschnitt schnell	2.33538E-03	2.34567E-03
Spaltwirkungsquerschnitt thermisch	5.37898E-02	5.25753E-02

Zunächst wurden Eingabedatensätze für Serpent erzeugt und die Ergebnisse der entsprechenden Rechenläufe mit den MCNP-Ergebnissen verglichen. Dabei wurde sehr gute Übereinstimmung erzielt. Zusätzlich wurden Berechnungen durchgeführt, bei denen für die Fragmentschüttung kein regelmäßiges Gitter angenommen wurde, sondern die Fragmente zufällige Positionen annehmen. Es ergaben sich nur geringfügige Unterschiede zwischen den Modellen mit regelmäßigem Gitter und mit der zufälligen Anordnung der Fragmente. Schließlich wurden mit Serpent Weniggruppen-Wirkungs-

querschnitte für die Fragmentschüttung erzeugt, die für entsprechende Simulationen mit einem nodalen Diffusionscode geeignet sind. Die Ergebnisse für einen relativen Fragmentabstand von 1.30, also etwa bei der maximalen Reaktivität der Schüttung, sind in Tab. 4.3 zusammengestellt.

5 AP3: Nukleare Daten

Die Prozessierung und Validierung nuklearer Daten mit besonderem Augenmerk auf die Eignung für schnelle Systeme, sowie die Erstellung nuklearer Kovarianzdaten in Multigruppenstruktur werden im Rahmen des Arbeitspakets 3 durchgeführt.

5.1 Überprüfung nuklearer Datenevaluierungen für schnelle Systeme

Bisher wurden nukleare Daten, die auf den Evaluierungen JEFF-3.1.2, ENDF/B-VII.0 und ENDF/B-VII.1 basieren, in der GRS hauptsächlich für thermische LWR-Anordnungen verwendet. Zur Überprüfung von deren Eignung für schnelle Systeme sind in erster Linie Monte-Carlo-Berechnungen mit Daten in kontinuierlicher Energiedarstellung, die aus den entsprechenden Evaluierungen prozessiert wurden, geeignet, da die wenigsten Prozessierungsschritte nötig sind und nahezu keine Näherungen durchgeführt werden müssen. Bei diesen im Folgenden beschriebenen Untersuchungen wurden auch die inzwischen verfügbaren JEFF-3.2-Daten hinzugenommen. Dazu wurden zunächst Anordnungen des internationalen Benchmarks SFR-FT der OECD/NEA-Arbeitsgruppe WPRS /BLA 12/, für die bereits erste Erfahrungen im Rahmen von Arbeiten im Vorhaben RS1513 /AUR 15/ existieren, mit den unterschiedlichen Sätzen von nuklearen Daten in kontinuierlicher Energiedarstellung mit dem Monte-Carlo-Code MCNP-6 /GOO 12/ berechnet.

Das SFR-FT-Benchmark spezifiziert vier verschiedene Anordnungen: große Kerne mit oxydischem und karbidischem Brennstoff (MOX-3600 und CAR-3600) und mittelgroße Kerne mit oxydischem und metallischem Brennstoff (MOX-1000 und MET-1000). Für die durchgeführten Studien wurde eine spezifische Materialzusammensetzung der inneren Kernzonen für jede der einzelnen Brennstoffanordnungen gewählt. Bei den untersuchten Parametern handelt es sich um Multiplikationsfaktoren sowie um Doppler- und Natrium-Void-Reaktivitätseffekte für den BOC-Zustand. Die Brennelemente sind sechseckig mit jeweils 271 Brennstäben, die hauptsächlich U-238 und Plutonium enthalten, mit Ausnahme der Brennelemente des großen Karbidkerns, bei dem die Anzahl der Brennstäben 469 beträgt. Das MCNP-Modell des MOX-3600-Brennelements ist in Abb. 5.1 (rot: Brennstoff, blau: Hüllrohr, grün: Kühlmittel, gelb: Brennelementkasten) dargestellt.

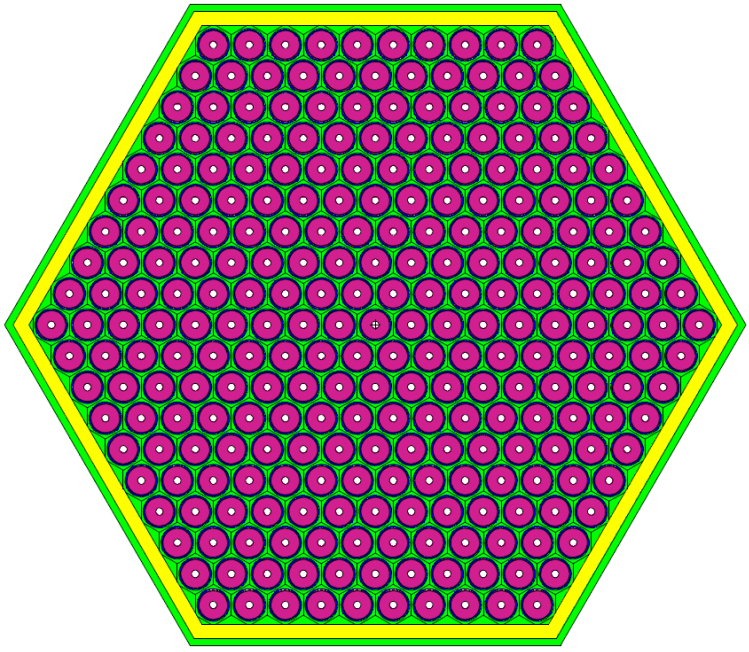

Abb. 5.1 MCNP-Modell des MOX-3600-Brennelements

In Tab. 5.1 – Tab. 5.4 sind die Ergebnisse der MCNP-Berechnungen mit verschiedenen nuklearen Daten dargestellt. Hier wurde eine konstante Temperatur von 600 K für alle Materialien gewählt, um sicherzustellen, dass die benötigten Wirkungsquerschnittsdaten direkt verfügbar sind und keine Temperaturinterpolation erforderlich ist. Für die Doppler-Reaktivität wurde die Brennstofftemperatur auf 1200 K geändert, und für die Natrium-Void-Reaktivität wurde eine Natriumdichte von 1 % des Nominalwertes gewählt. Da die Absolutwerte der Doppler-Reaktivität klein sind, wurden die Berechnungen für die entsprechenden Zustände, d. h. für den Nominalfall und bei hoher Brennstofftemperatur, mit einer großen Anzahl von aktiven Neutronenschicksalen durchgeführt, nämlich 300 000 000 für jeden Rechenlauf, um klar zwischen den Diskrepanzen, die durch die Verwendung verschiedener nuklearer Datenbibliotheken verursacht werden, und statistischen Unsicherheiten aufgrund der Monte-Carlo-Methode unterscheiden zu können. Die resultierende statistische 1σ-Unsicherheit beträgt etwa 0.00002 für die Multiplikationsfaktoren und entsprechend etwa 3 pcm in den Reaktivitätswerten. Die Werte der Natrium-Void-Reaktivität sind viel größer, so dass eine wesentlich geringere Anzahl von Neutronenschicksalen ausreicht; hier wurden 75 000 000 aktive Neutronenschicksale ausgewertet, was zu einer statistischen Unsicherheit von etwa 5 pcm in der Reaktivität führte.

Tab. 5.1 MCNP-Ergebnisse für das MOX-3600-Brennelement

	ENDF/B-VII.0	ENDF/B-VII.1	JEFF-3.1.2	JEFF-3.2
k-eff (nominal)	1.13712	1.13901	1.14505	1.13677
k-eff (hohe Brennstofftemp.)	1.12823	1.13016	1.13620	1.12804
k-eff (Na-void)	1.17258	1.17481	1.18222	1.17361
Doppler-Reaktivität (pcm)	-693	-688	-680	-681
Na-Void-Reaktivität (pcm)	2659	2675	2746	2761

Tab. 5.2 MCNP-Ergebnisse für das CAR-3600-Brennelement

	ENDF/B-VII.0	ENDF/B-VII.1	JEFF-3.1.2	JEFF-3.2
k-eff (nominal)	1.11570	1.11807	1.12598	1.11760
k-eff (hohe Brennstofftemp.)	1.10617	1.10857	1.11653	1.10828
k-eff (Na-void)	1.15699	1.15979	1.16934	1.16099
Doppler-Reaktivität (pcm)	-772	-766	-752	-752
Na-Void-Reaktivität (pcm)	3199	3217	3293	3344

Tab. 5.3 MCNP-Ergebnisse für das MOX-1000-Brennelement

	ENDF/B-VII.0	ENDF/B-VII.1	JEFF-3.1.2	JEFF-3.2
k-eff (nominal)	1.16898	1.17034	1.17804	1.16854
k-eff (hohe Brennstofftemp.)	1.16039	1.16177	1.16933	1.16001
k-eff (Na-void)	1.22129	1.22290	1.23277	1.22265
Doppler-Reaktivität (pcm)	-633	-630	-632	-629
Na-Void-Reaktivität (pcm)	3664	3672	3769	3787

Tab. 5.4 MCNP-Ergebnisse für das MET-1000-Brennelement

	ENDF/B-VII.0	ENDF/B-VII.1	JEFF-3.1.2	JEFF-3.2
k-eff (nominal)	1.30246	1.30418	1.32281	1.30791
k-eff (hohe Brennstofftemp.)	1.29839	1.30020	1.31883	1.30399
k-eff (Na-void)	1.40546	1.40718	1.43291	1.41628
Doppler-Reaktivität (pcm)	-241	-235	-228	-230
Na-Void-Reaktivität (pcm)	5627	5612	5809	5850

Signifikante Diskrepanzen lassen sich für die Multiplikationsfaktoren und Natrium-Void-Reaktivitäten aus den verschiedenen nuklearen Datenbibliotheken beobachten. Während ENDF/B-VII.0 und ENDF/B-VII.1 praktisch konsistente Ergebnisse mit einer kleinen und nahezu konstanten Abweichung der Multiplikationsfaktoren für alle berechneten Fälle ergeben, sind die Abweichungen bezüglich der JEFF-Bibliotheken wesentlich größer. Berechnungen mit JEFF-3.1.2 ergeben wesentlich höhere Multiplikationsfaktoren als die anderen Bibliotheken, insbesondere für den metallischen Kern. Die Übereinstimmung zwischen den Ergebnissen von JEFF-3.2 und ENDF/B-VII ist viel besser; jedoch bleibt für den metallischen Brennstoff bei geringer Natriumdichte eine deutliche Diskrepanz bestehen. Ebenso sind die Unterschiede in den Werten der Natrium-Void-Reaktivität weit außerhalb der statistischen Unsicherheit. Für die Doppler-Reaktivitäten wurden nur unbedeutende Unterschiede gefunden. JEFF-3.1.2 wurde bisher für Routine-LWR-Berechnungen in der GRS verwendet; insgesamt legen die Abweichungen der Ergebnisse mit dieser Datenbibliothek zu denen mit allen anderen Datenbibliotheken nahe, dass für schnelle Systeme eher auf JEFF-3.2 umgestellt werden sollte.

Um die Ursachen für die Abweichungen näher zu untersuchen, wurden für die drei Anordnungen MOX-3600, CAR-3600 und MET-1000 weitere Berechnungen zur Bestimmung des Multiplikationsfaktors durchgeführt. Als Ausgangsbasis dienen die Ergebnisse mit den Datenbibliotheken JEFF-3.1.2 und ENDF/B-VII.1 aus Tab. 5.1, Tab. 5.2 und Tab. 5.4. Ausgehend von den Berechnungen mit diesen Datenbibliotheken für jeweils alle Nuklide wurden zusätzliche Berechnungen durchgeführt, in denen jeweils ein wichtiges Nuklid ausgetauscht wurde. In Tab. 5.5 die Ergebnisse dieser Prozedur für die Datenbibliotheken JEFF-3.1.2 und JEFF-3.2 dargestellt. Dabei zeigt sich, dass für alle drei Brennelemente die Hauptbeiträge zu den Unterschieden durch die Nuklide Pu-240, U-238 und Na-23 geliefert werden; für das Brennelement mit metallischem Brennstoff spielt zusätzlich Zirkon eine wesentliche Rolle. Noch wichtiger ist die Ermittlung der Ursachen für die Unterschiede zwischen den Datenbibliotheken ENDF/B-VII.1 und JEFF-3.2; diese sind die derzeit neuesten Evaluierungen und sollten gleichermaßen zur Beschreibung schneller Anordnungen geeignet sein. In Tab. 5.6 sind die entsprechenden Ergebnisse dargestellt. Aus Tab. 5.1 – Tab. 5.4 war eine akzeptable Übereinstimmung der mit den beiden Datensätzen erhaltenen Multiplikationsfaktoren ersichtlich. Dies wird jetzt allerdings durch die Untersuchung der Beiträge einzelner Nuklide relativiert. Die Ergebnisse in Tab. 5.6 machen deutlich, dass es für einzelne Nuklide massive Abweichungen gibt, und dass die integral gute Übereinstimmung auf sich gegenseitig weghebende Beiträge zurückzuführen ist.

Tab. 5.5 Änderungen im Multiplikationsfaktor beim Übergang von JEFF-3.1.2 zu JEFF-3.2

		MOX-3600		CAR-3600		MET-1000	
		k	**Δk(x10^{-5})**	**k**	**Δk(x10^{-5})**	**k**	**Δk(x10^{-5})**
JEFF-3.1.2		1.14505		1.12598		1.32281	
JEFF-3.2	Alle Nuklide	1.13677	-828	1.11760	-838	1.30791	-1490
	C	--	--	1.12603	5	--	--
	O	1.14501	-4	--	--	--	--
	Na-23	1.14364	-141	1.12433	-165	1.32150	-131
	Fe-56	1.14485	-20	1.12592	-6	1.32274	-7
	Zr	--	--	--	--	1.31856	-425
	U-238	1.14333	-172	1.12474	-124	1.32172	-109
	Pu-238	1.14509	4	1.12604	6	1.32296	15
	Pu-239	1.14423	-82	1.12544	-54	1.32232	-49
	Pu-240	1.14154	-351	1.12235	-363	1.31609	-672

Tab. 5.6 Änderung im Multiplikationsfaktor beim Übergang von ENDF/B-VII.1 zu JEFF-3.2

		MOX-3600		CAR-3600		MET-1000	
		k	**Δk(x10^{-5})**	**k**	**Δk(x10^{-5})**	**k**	**Δk(x10^{-5})**
ENDF/B-VII.1		1.13901		1.11807		1.30418	
JEFF-3.2	Alle Nuklide	1.13677	-224	1.11760	-47	1.30791	373
	C	--	--	1.11807	0	--	--
	O	1.13890	-11	--	--	--	--
	Na-23	1.13779	-122	1.11718	-89	1.30328	-90
	Fe-56	1.14134	233	1.12069	262	1.31022	604
	Zr	--	--	--	--	1.30084	-334
	U-238	1.13762	-139	1.11690	-117	1.30819	401
	Pu-238	1.14189	288	1.12120	313	1.30653	235
	Pu-239	1.13465	-436	1.11426	-381	1.30262	-156
	Pu-240	1.13837	-64	1.11755	-52	1.30422	4

Abschließend lässt sich feststellen, dass zur Beschreibung schneller Anordnungen mit nicht-spaltbaren Materialien wie Natrium, Eisen und Zirkon die Datenlage keineswegs befriedigend ist. Unterschiedliche evaluierte nukleare Daten liefern deutlich unterschiedliche Ergebnisse für sicherheitsrelevante Parameter mit teilweise gegenläufigen Beiträgen. Dieser Zustand legt nahe, dass numerische Simulationen wo immer möglich durch systematische Unsicherheitsanalysen ergänzt werden sollten.

Die mit SCALE 6.2 zur Verfügung gestellten Multigruppen-Wirkungsquerschnittsbibliotheken für Neutronentransportrechnungen wurden für thermische Systeme optimiert. Sie weisen beispielsweise eine feine Energiegruppenstruktur im aufgelösten Resonanzbereich und eine nur grobe Struktur im schnellen Energiebereich auf. Im Fall von Systemen mit schnellen Neutronenspektren gibt es allerdings insbesondere durch Strukturmaterialien und minore Aktinide Resonanzen im schnellen Energiebereich, die ausreichend aufgelöst werden sollten. Vergleiche von Ergebnissen von Berechnungen mit den Multigruppenbibliotheken aus SCALE 6.2 und entsprechenden Monte-Carlo-Berechnungen mit Daten in kontinuierlicher Energiedarstellung haben gezeigt, dass die Multigruppen-Ergebnisse für schnelle Systeme teilweise erhebliche Abweichungen verursachen. Es wurde daher als notwendig erachtet, neue Multigruppen-Bibliotheken zu erstellen. Zusammen mit der neuen Version SCALE 6.2 wird das AMPX-Codesystem für die Erzeugung von Wirkungsquerschnittsbibliotheken in Multigruppenstrukturen zur Verfügung gestellt /WIA 16/. Nach einer Einarbeitungsphase in das AMPX-Codesystem konnten neue Multigruppen-Wirkungsquerschnittsbibliotheken optimiert für schnelle Systeme basierend auf ENDF/B-VII.1 Daten /CHA 11/ erzeugt werden.

Für die Erzeugung einer Multigruppen-Bibliothek sind die Energiegruppenstruktur und Funktionen für die Wichtung der vorliegenden kontinuierlichen Daten in den festgelegten Energieintervallen notwendig. Als Wichtungsfunktionen wurden die Neutronenflussspektren von zwei homogenisierten Brennelementen mit oxydischem (MOX3600) bzw. metallischem (MET1000) Brennstoff aus den Spezifikationen der OECD/NEA Sodium Fast Reactor Core Feedback and Transient Response (SFR-FT) Task Force /BUI 15/ ausgewählt (vgl. Abb. 5.2 und Abb. 5.3). In Abb. 5.4 sind diese Spektren im Vergleich zu dem entsprechenden Wichtungsspektrum für thermische LWR-Systeme abgebildet. Hier wird bereits deutlich, dass durch das harte Neutronenflussspektrum in den SFR-Brennelementen eine feine Gruppenstruktur im thermischen Energiebereich nicht notwendig ist, wohingegen im schnellen Energiebereich vermehrt Resonanzen auftreten, die durch die neue Multigruppenbibliothek berücksichtigt werden müssen.

Die Gruppenstrukturen der neuen Bibliotheken wurden vom DOE-NE Advanced Reactor Technologies (ART) Programm und insbesondere dem MC²-3 Code /LEE 12/ übernommen. Für die feinste Gruppenstruktur wurde der Energiebereich zwischen 0.414 eV und 14.191 MeV in 2082 Intervalle gleicher Lethargiebreite unterteilt. Für Bibliotheken mit geringerer Energiegruppenanzahl wurden einzelne Intervalle entsprechend zusammengefasst. In Tab. 5.7 befindet sich eine Übersicht über die erzeugten Bibliotheken. Die 230-, 425- und 2082-Gruppenstrukturen (mit * gekennzeichnet) wurden direkt von MC²-3 übernommen; für alle weiteren aufgelisteten Strukturen wurden Gruppengrenzen der 425g-Bibliothek zur 230g-Bibliothek hinzugefügt, um die Auflösung signifikanter Resonanzen zu verbessern.

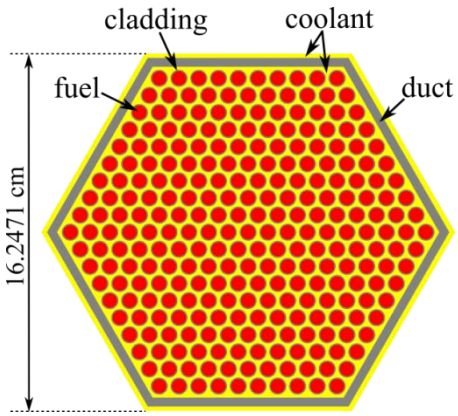

Abb. 5.2 MET1000-Brennelement mit metallischem Brennstoff

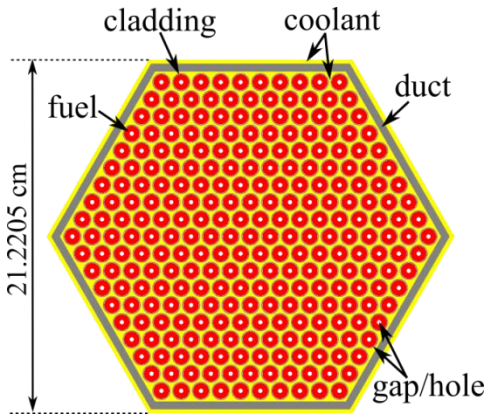

Abb. 5.3 MOX3600-Brennelement mit oxydischem Brennstoff

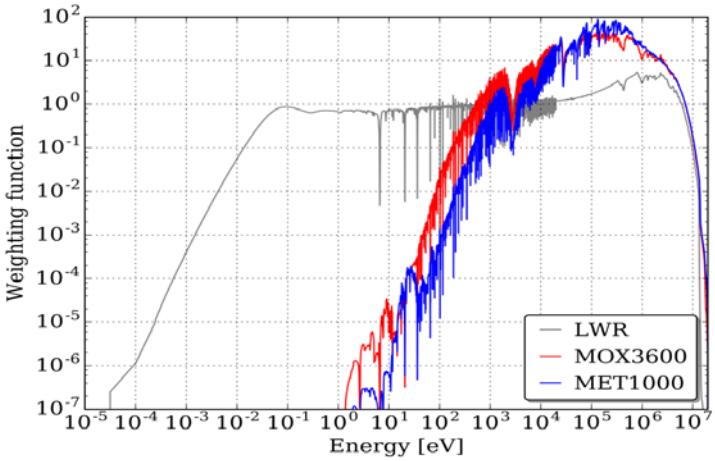

Abb. 5.4 Wichtungsspektren der erzeugten Wirkungsquerschnittsbibliotheken

Tab. 5.7 Übersicht über die für schnelle Systeme erzeugten Wirkungsquerschnittsbibliotheken

Anzahl der Energiegruppen	Wichtungsspektrum
230*	MET1000, MOX3600
245	MOX3600
253	MOX3600
271	MOX3600
302	MET1000, MOX3600
425*	MET1000, MOX3600
2082*	MET1000, MOX3600

Tab. 5.8 Unterschiede im Multiplikationsfaktor homogenisierter Brennelemente zwischen NEWT (Multigruppen-Daten) und KENO-VI (Daten kontinuierliche Energie)

MG-Bibliothek	MET1000 $(1/k_{MG}-1/k_{CE})$ [pcm]	MOX3600 $(1/k_{MG}-1/k_{CE})$ [pcm]
252g, LWR	253	-167
230g, MET1000	-95	-134
230g, MOX3600	-40	-126
245g, MOX3600	-3	-76
253g, MOX3600	0	-58
271g, MOX3600	48	-40
302g, MET1000	29	-16
302g, MOX3600	65	-23
425g, MET1000	37	-13
425g, MOX3600	62	-14
2082g, MET1000	64	9
2082g, MOX3600	73	10

In Kritikalitätsrechnungen mit dem deterministischen Programm NEWT aus SCALE 6.2 wurden der Multiplikationsfaktor, der Neutronenfluss sowie Reaktionsraten mit Referenzrechnungen des Monte-Carlo-Codes KENO-VI unter Nutzung von Daten in kontinuierlicher Energiedarstellung verglichen. In Tab. 5.8 sind die Unterschiede der Multiplikationsfaktoren zwischen NEWT und KENO-VI für die homogenisierten Brennelemente aufgelistet. Während die Abweichungen der NEWT-Ergebnisse mit der vorhandenen LWR-Bibliothek zu den entsprechenden Referenzwerten 253 pcm bzw. 167 pcm betragen, ist mit den neuen für schnelle Systeme optimierten Bibliothek eine deutliche Verbesserung zu erkennen. Da die 2082g-Bibliotheken die feinste Energiegruppenstruktur aufweisen, wird erwartet, dass NEWT-Ergebnisse mit diesen Bibliotheken am besten mit den KENO-VI-Ergebnissen übereinstimmen. Dies ist in der Tat der Fall für das oxydische Brennelement, bei dem der Unterschied von etwa 10 pcm innerhalb der statistischen 2σ-Unsicherheit des Referenzwerts liegt. Zudem wird bereits mit der 302g-Bibliothek ausreichende Übereinstimmung (Unterschied etwa 20 pcm) mit der Referenz erreicht. Der Einfluss des Wichtungsspektrums ist für den oxydischen Fall nicht signifikant. Für den metallischen Fall wird ein Multigruppen-Bias von etwa 70 pcm mit der 2082g-Bibliothek erzielt. Ein leichter Einfluss des Wichtungsspektrums ist erkennbar, sodass die 302g-Bibliothek mit dem oxydischen Wichtungsspektrum mit einem ähnlichen Bias wie die 2082g-Bibliothek als bestes Ergebnis zwischen den Ergebnissen mit unter 400 Energiegruppen angesehen wird.

Ein Vergleich der ermittelten Neutronenflüsse zwischen NEWT und KENO-VI ist in Abb. 5.5 zu sehen. Dabei wurden die NEWT-Rechnungen mithilfe der 302-Gruppen-Bibliothek durchgeführt und die KENO-VI Ergebnisse auf diese Gruppenstruktur kondensiert. Außerdem sind einige ausgewählte Reaktionsraten in Abb. 5.6, Abb. 5.7, Abb. 5.8 und Abb. 5.9 abgebildet. Es ist erkennbar, dass auch für den Verlauf des Neutronenflusses und der Reaktionsraten die NEWT Rechnungen mit der 302-Gruppenbibliothek zu ausgezeichneter Übereinstimmung mit den entsprechenden CE Rechnungen führt.

Um nicht nur die Verläufe, sondern auch kumulative Werte zu vergleichen, werden in Abb. 5.10 und Abb. 5.11 kollabierte 1-Gruppen-Wirkungsquerschnitte mit entsprechenden Referenzwerten aus KENO-VI-Rechnungen verglichen. Mit der 302g-Bibliothek wurde eine deutliche Verbesserung gegenüber den Ergebnissen mit der 252g-Bibliothek erzielt. Die verbliebenen Unterschiede zwischen Rechnungen mit der feinsten 2082g-Bibliothek werden als vernachlässigbar bezeichnet (Anm.: Die Abbildungen

sind unterschiedlich skaliert, so dass manche Unterschiede optisch größer erscheinen als sie quantitativ sind).

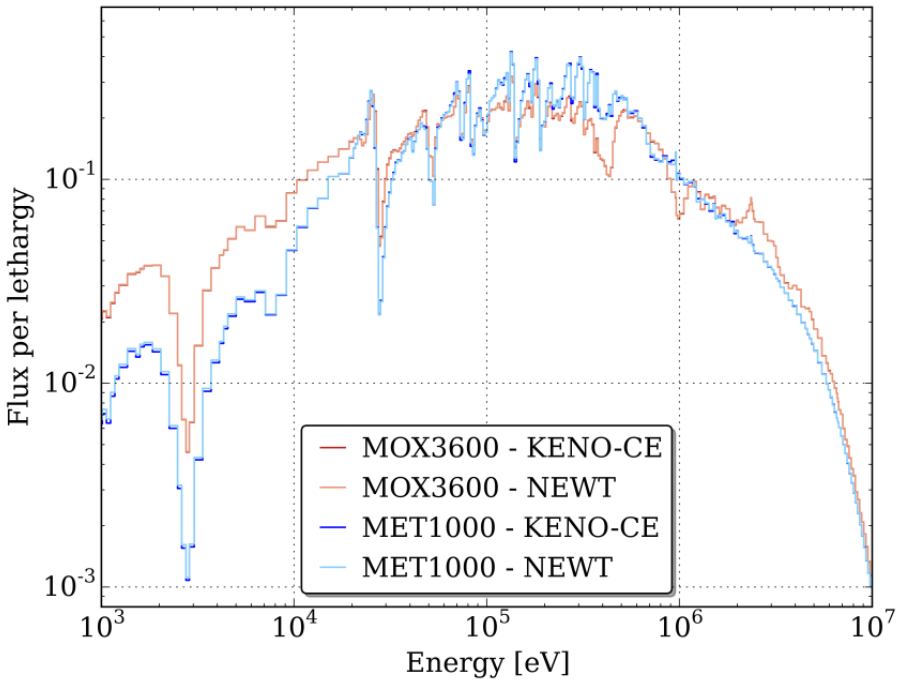

Abb. 5.5 Neutronenflussspektrum der homogenisierten Brennelemente im schnellen Energiebereich

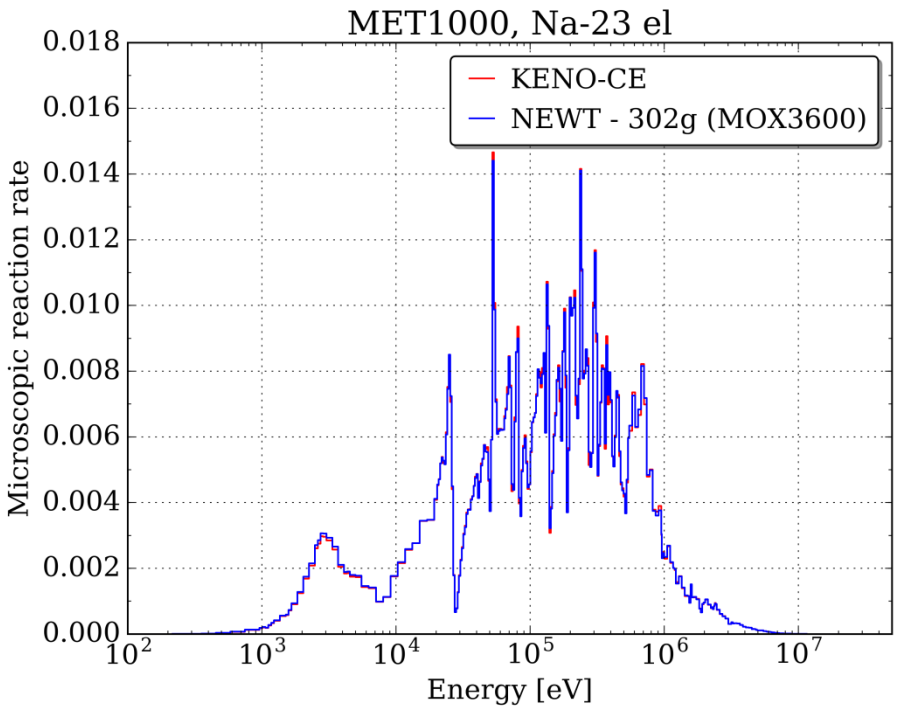

Abb. 5.6 Reaktionsrate elastischer Streuung an Na-23 im homogenisierten metallischen Brennelement im schnellen Energiebereich

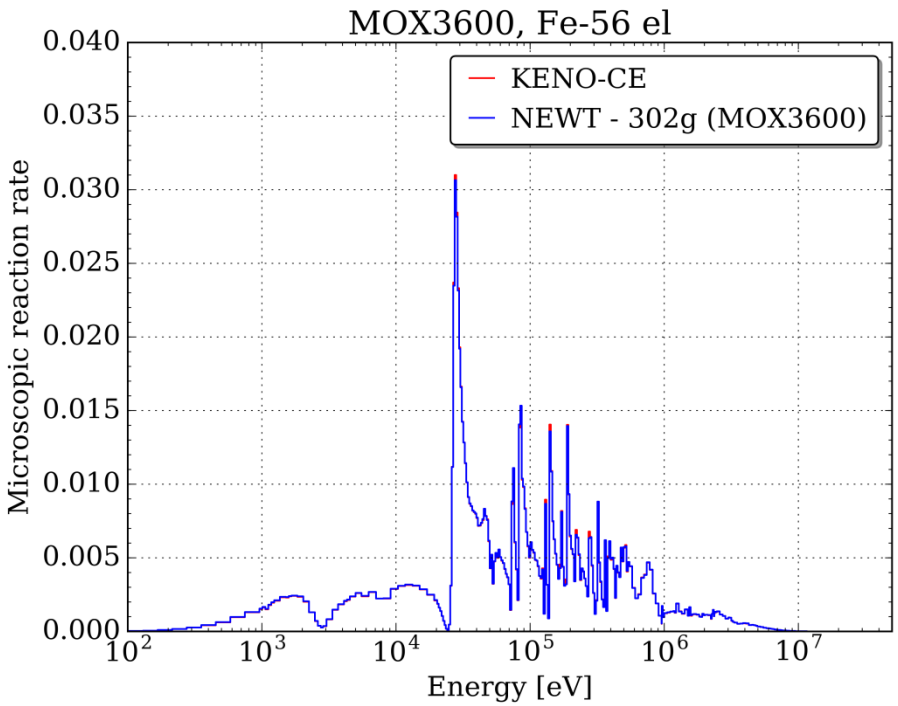

Abb. 5.7 Reaktionsrate elastischer Streuung an Fe-56 im homogenisierten oxydischen Brennelement im schnellen Energiebereich

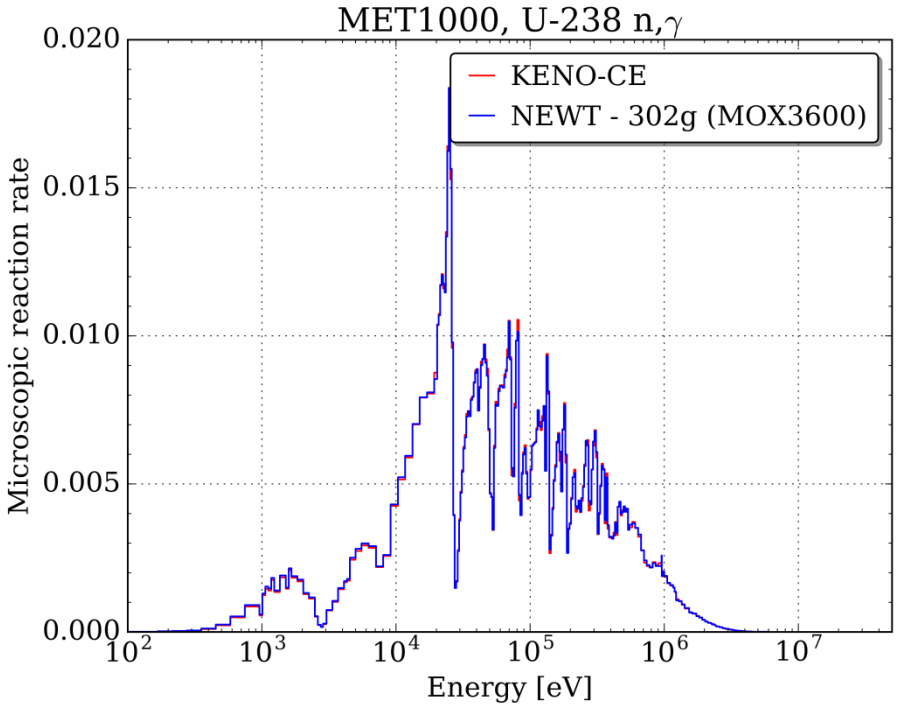

Abb. 5.8 Reaktionsrate des Neutroneneinfangs in U-238 im homogenisierten metallischen Brennelement im schnellen Energiebereich

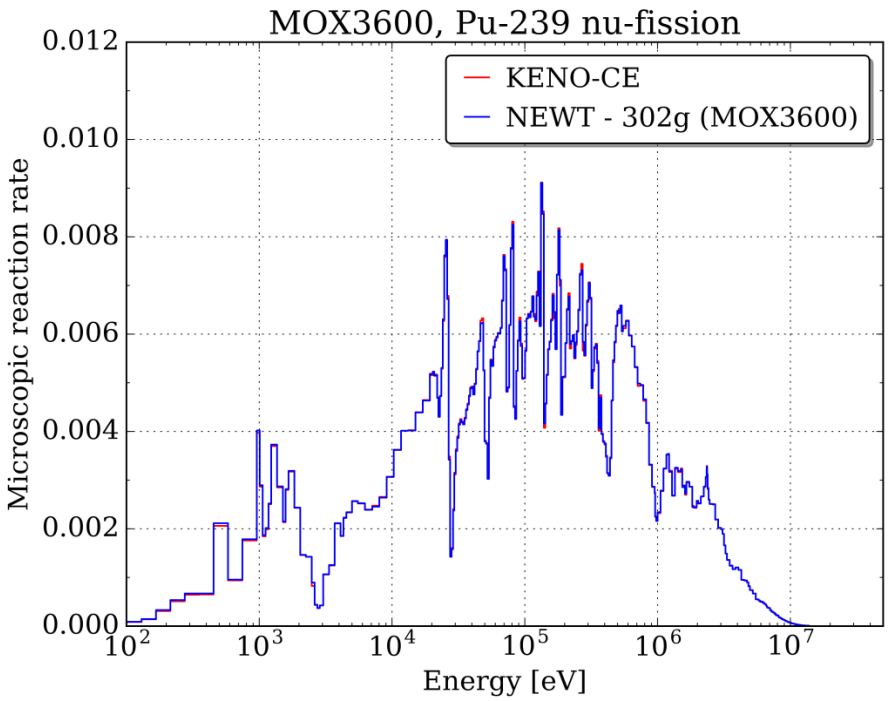

Abb. 5.9 Spaltrate von Pu-239 multipliziert mit der Anzahl von Neutronen pro Spaltung im homogenisierten oxydischen Brennelement im schnellen Energiebereich

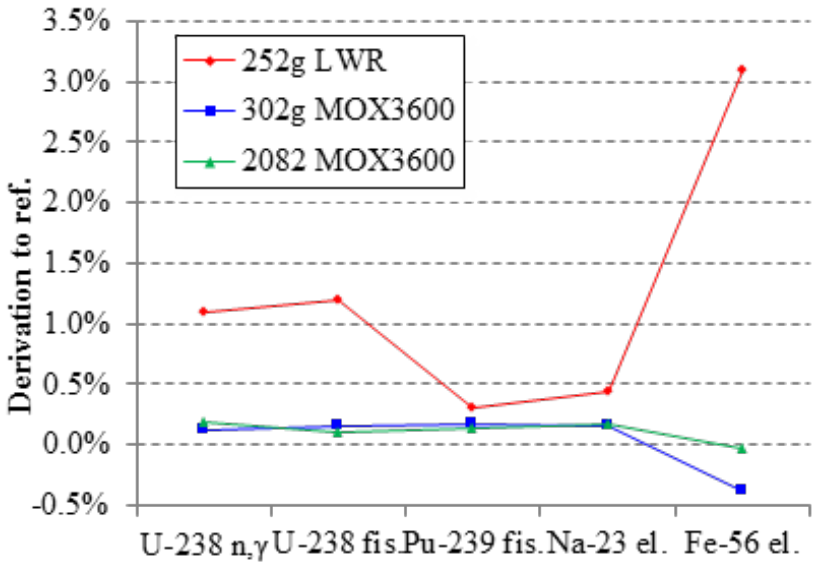

Abb. 5.10 Relative Abweichung der 1-Gruppen-Wirkungsquerschnitte zu den KENO-VI-Referenzwerten für das homogenisierte metallische Brennelement

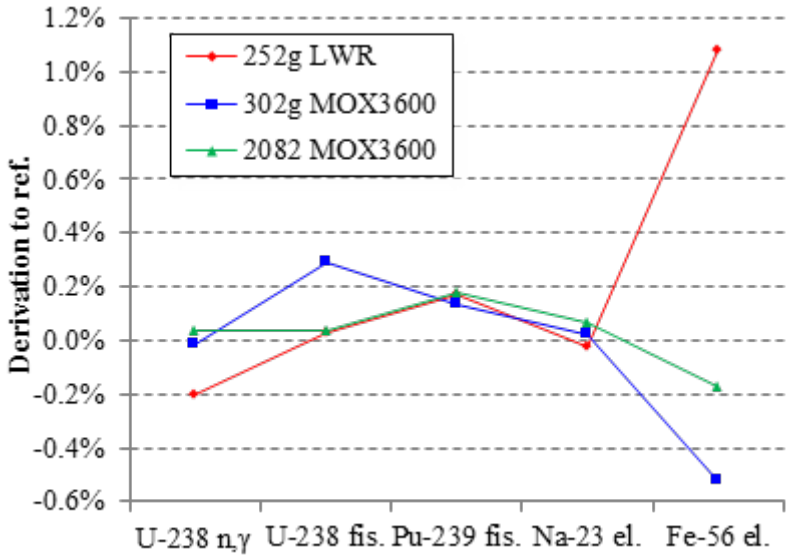

Abb. 5.11 Relative Abweichung der 1-Gruppen-Wirkungsquerschnitte zu den KENO-VI-Referenzwerten für das homogenisierte oxydische Brennelement

Im nächsten Schritt wurden die neuen Multigruppen-Bibliotheken in Kritikalitätsrechnungen von Stabzellen im unendlichen Gitter getestet. Während für die homogenisierten Brennelemente problemabhängige Multigruppen-Wirkungsquerschnitte durch Resonanzselbstabschirmungsrechnungen unendlich ausgedehnter Medien erzeugt wurden, wurde die entsprechende Berechnung hier anhand eindimensionaler Zellen durchgeführt. Die Neutronentransportrechnung selbst wurde dann mithilfe der abgeschirmten, problemabhängigen Wirkungsquerschnitte anhand der zweidimensionalen Modelle durchgeführt.

In Tab. 5.9 wird der Multiplikationsfaktor der heterogenen Stabzellen zwischen NEWT und KENO-VI verglichen. Die 2082-Gruppen-Rechnungen erzielen ein Bias von etwa 100 bzw. 40 pcm für die metallische und oxydische Stabzelle. Offensichtlich führt die Berücksichtigung einer Geometrie in der Resonanzselbstabschirmungsrechnung zu einem leicht erhöhten Bias im Vergleich zu den Modellen mit homogenisierten Mischungen. Allerdings ist dieser Effekt mit etwa 30 pcm sehr klein und daher zu vernachlässigen. Die Rechnungen mit der 302-Gruppen-Bibliothek stimmen gut mit den entsprechenden 2082-Gruppen-Rechnungen überein. Da auch die entsprechenden Verläufe des Neutronenflusses und Reaktionsraten gut übereinstimmen, wird diese Bibliothek auch hier als adäquat für die Simulation dieser Modelle eingeschätzt.

Tab. 5.9 Unterschiede im Multiplikationsfaktor heterogener Stabzellen zwischen NEWT (Multigruppen-Daten) und den KENO-VI (Daten kontinuierliche Energie)

MG-Bibliothek	MET1000 ($1/k_{MG}$-$1/k_{CE}$) [pcm]	MOX3600 ($1/k_{MG}$-$1/k_{CE}$) [pcm]
252g, LWR	-218	165
230g, MET1000	44	94
230g, MOX3600	-2	90
302g, MET1000	-75	-47
302g, MOX3600	-92	-43
425g, MET1000	-85	-21
425g, MOX3600	-104	-22
2082g, MET1000	-105	-37
2082g, MOX3600	-109	-38

Tab. 5.10 Unterschiede der Multiplikationsfaktoren zwischen NEWT-Multigruppen-Berechnungen und den Referenzrechnungen mit KENO-VI für die heterogenen Brennelemente bei 293 K

MG-Bibliothek	MET1000 ($1/k_{MG}$-$1/k_{CE}$) [pcm]	MOX3600 ($1/1/k_{MG}$-$1/k_{CE}$) [pcm]
252g, LWR	-43	437
230g, MET1000	296	394
230g, MOX3600	232	377
302g, MET1000	111	235
302g, MOX3600	84	232
302g, MOX3600, wrapper cell	-13	22
425g, MET1000	95	225
425g, MOX3600	66	215
2082g, MET1000	*(nicht konvergiert)*	*(nicht konvergiert)*
2082g, MOX3600	7	104
2082g, MOX3600, wrapper cell	-79	-28

Zusätzlich zu den homogenisierten Brennelementen wurden die neuen Multigruppen-Bibliotheken auch in Kritikalitätsrechnungen der zugehörigen heterogenen Brennelementmodelle getestet. Im Fall des metallischen Brennelements wurde mit den 2082g-Bibliotheken eine Übereinstimmung mit der KENO-VI Referenzrechnung bezüglich des Multiplikationsfaktors erzielt (vgl. Tab. 5.10). Die 302g-Bibliothek mit dem oxydischen Wichtungsspektrum weist einen etwas größeren Unterschied von etwa 80 pcm auf. Im Fall des oxydischen Brennelements wird ein Unterschied von etwa 100 pcm bei der NEWT-Rechnung mit 2082 Energiegruppen beobachtet; mit der 302g-Bibliothek liegt der Unterschied bei etwa 230 pcm. Diese im Vergleich zu den Rechnungen der homogenisierten Brennelemente etwas größeren Unterschiede zwischen NEWT und KENO-VI sind wahrscheinlich darauf zurückzuführen, dass im Gegensatz zu den Berechnungen der homogenisierten Modelle die Wirkungsquerschnitte für diese Neutronentransportrechnungen auf Basis eindimensionaler Modelle eines unendlichen Gitters aus Brennstäben abgeschirmt wurden. Ein Einfluss des Strukturmaterials in der Brennelementumfassung wurde hier somit vernachlässigt. Trotz der Unterschiede von 80 bzw. 232 pcm werden die Ergebnisse der NEWT-Rechnungen mit den neuen Bibliotheken als Verbesserung im Vergleich zu den Rechnungen mit der thermischen Bibliothek eingestuft. Die Unterschiede zur Referenz sind gleich bzw. verringert und die Übereinstimmung im Flussspektrum ist deutlich verbessert.

Um den Einfluss der Resonanzselbstabschirmungsrechnung auf die Ergebnisse der Berechnungen der heterogenen Brennelemente noch weitergehend zu untersuchen, wurden zusätzliche Rechnungen durchgeführt, bei denen die Modelle der Resonanzselbstabschirmungsrechnungen der direkt neben der Brennelementumfassung gelegenen Brennstäbe verändert wurde. Statt der normalen eindimensionalen Brennstäbe ohne zusätzliches Strukturmaterial wurde für diese Brennstäbe um die Zellen herum ein Ring aus Strukturmaterial modelliert, um einen zusätzlichen Einfluss des Strukturmaterials auf die Abschirmung der Wirkungsquerschnitte in diesen Brennstäben zu erzielen (vgl. Abb. 5.12). Die Ergebnisse für die 302- und für die 2082-Gruppen-Rechnungen sind in Tab. 5.9 unter den Einträgen mit der Kennzeichnung „wrapper cell“ zu finden. Es ist erkennbar, dass durch diese leichte Änderung der Resonanzselbstabschirmungsrechnung eine starke Verbesserung der Übereinstimmung mit der entsprechenden CE-Rechnung erzielt wird. Für die 302-Gruppen-Rechnungen wird Übereinstimmung gefunden und für die 2082-Gruppen-Rechnung wird das bekannte Bias für das MET1000 Brennelement gefunden und Übereinstimmung im Falle des MOX3600-Brennelements. Der Einfluss der Dicke des zusätzlichen Strukturmaterial-

rings im Modell für die Abschirmungsrechnung hat dabei einen vernachlässigbaren Einfluss auf das Ergebnis.

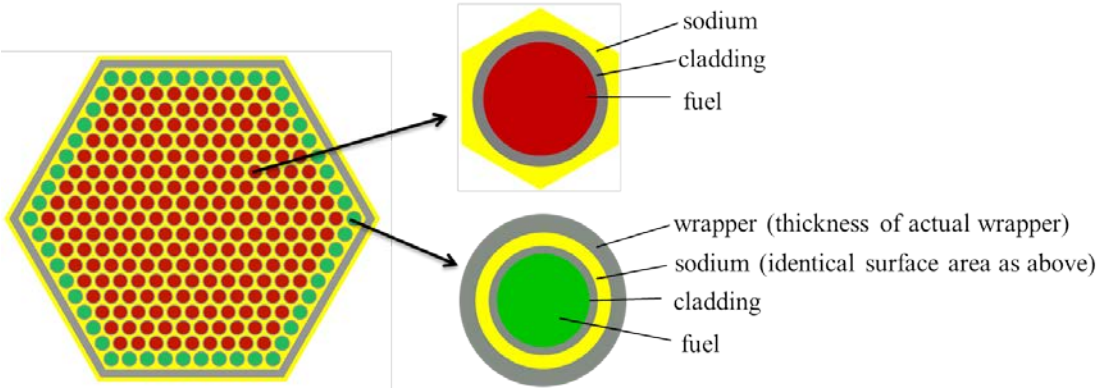

Abb. 5.12 Brennelement mit Zellen für die Abschirmungsrechnung

Nach Berücksichtigung der Rechenzeit und einer ausreichend guten Übereinstimmung mit der Referenz für beide Brennelement-Typen wird beschlossen, dass die 302g-Bibliothek mit dem oxydischen Wichtungsspektrum für nachfolgende Studien gewählt wird. Diese Bibliothek führt außerdem zu guten Übereinstimmungen bezüglich des Neutronenflussspektrums (vgl.) und der betrachteten Reaktionsraten.

Da die Brennelement-Rechnungen mit NEWT zu einem späteren Zeitpunkt zur Generierung von makroskopischen Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten für Ganzkernberechnungen mit einem nodalen Diffusionscode benutzt werden sollen, wurde die 302-Gruppen-Bibliothek auch für diese Anwendung getestet. Es wurden makroskopische Wirkungsquerschnitte in einer 8-Gruppen-Struktur /WAL 12/ (vgl. Tab. 5.11) erzeugt und mit Ergebnissen des Monte-Carlo-Codes Serpent unter Verwendung von Daten kontinuierlicher Energiedarstellung verglichen. In Abb. 5.13 und Abb. 5.14 ist zu sehen, dass die Unterschiede der erzeugten Wirkungsquerschnitte insbesondere für die höheren Energiegruppen (d.h. Gruppe 1-4) vernachlässigbar klein sind. Bei diesen Untersuchungen stellte sich allerdings heraus, dass NEWT in Kombination mit der LWR-252-Gruppen-Bibliothek auch sehr gute Übereinstimmung mit Serpent ergibt. Die Erzeugung der makroskopischen Wirkungsquerschnitte ist offensichtlich nicht sensitiv bezüglich der NEWT-Bibliothek. Das gleiche gilt für die Anwendung der oben beschriebenen alternativen Resonanzselbstabschirmungsrechnungen für die äußeren Brennstäbe: Diese Änderung hat keinen sichtbaren Einfluss auf die Wirkungsquerschnittserzeugung.

Tab. 5.11 Energiegrenzen für die 8-Gruppen-Struktur

Gruppe	Obere Energiegrenze	Gruppe	Obere Energiegrenze
1	20 MeV	5	111.09 keV
2	2.2313 MeV	6	39.859 keV
3	820.85 keV	7	15.034 keV
4	301.97 keV	8	0.74852 keV

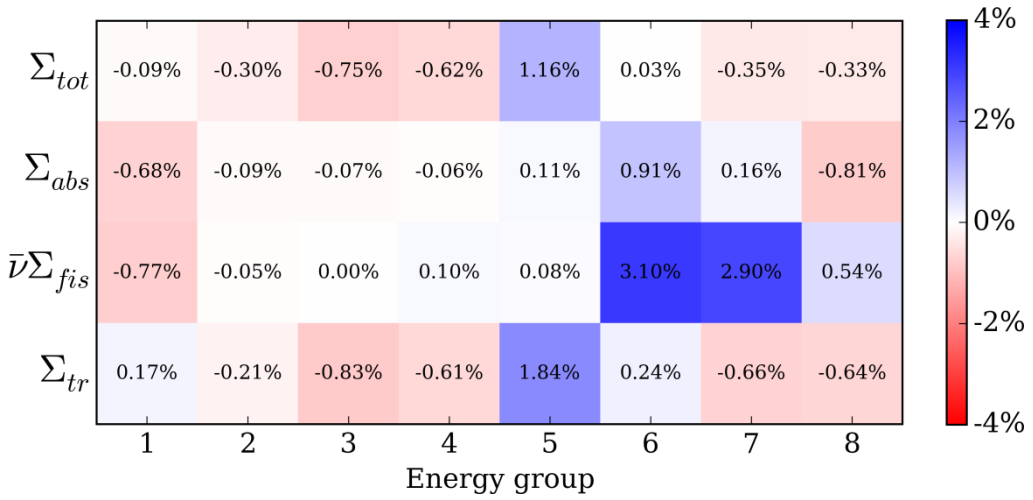

Abb. 5.13 Relativer Unterschied der makroskopischen 8-Gruppen-Wirkungsquerschnitte zwischen NEWT mit der 302-Gruppen-Bibliothek und Serpent für das MET1000 Brennelement

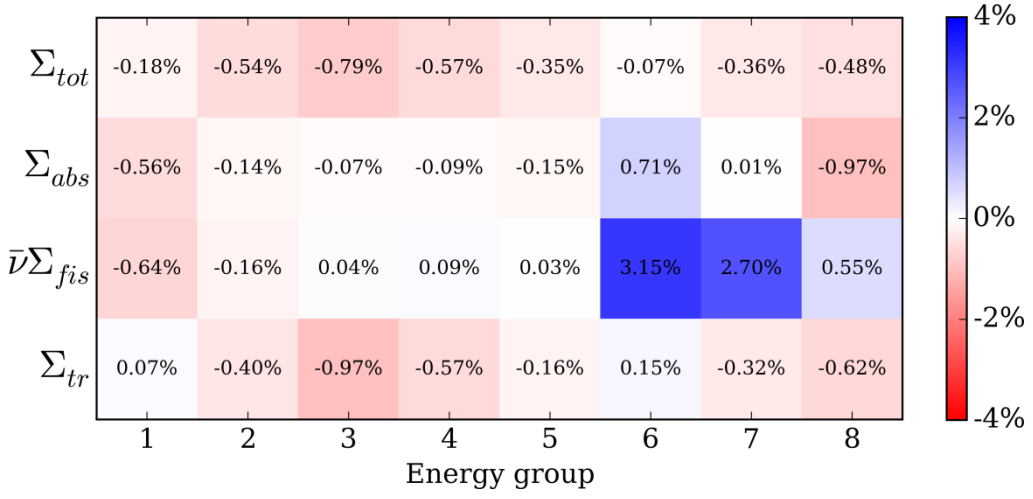

Abb. 5.14 Relativer Unterschied der makroskopischen 8-Gruppen-Wirkungsquerschnitte zwischen NEWT mit der 302-Gruppen-Bibliothek und Serpent für das MOX3600 Brennelement

Für die Reaktorkerne aus dem UAM-SFR-Benchmark, aus denen die Brennelement- und Brennstabmodelle entnommen wurden, wurden die Verteilungen der Brennelementleistung mit dem Monte-Carlo-Code SCALE/KENO-VI unter Verwendung der neuen 302-Gruppen-Bibliothek berechnet und mit entsprechenden Referenzrechnungen mit KENO-VI unter Verwendung von Daten in kontinuierlicher Energiedarstellung verglichen. Außerdem wurden die entsprechenden Multiplikationsfaktoren miteinander verglichen. Für einen weiteren Vergleich wurden entsprechende Rechnungen mit dem Monte Carlo Code Serpent durchgeführt.

In Tab. 5.12 sind die Unterschiede zwischen den KENO-VI-Multigruppen-Rechnungen und den CE-Rechnungen dargestellt. Die Unterschiede betragen weniger als 300 pcm, wobei diese durch die Anwendung der oben beschriebenen Resonanzselbstabschirmungsrechnung für die äußeren Brennstäbe in den Brennelementen deutlich reduziert werden. Die Multiplikationsfaktoren der CE-Rechnungen zwischen KENO-VI und Serpent unterscheiden sich um etwa 300 bzw. 400 pcm für den metallischen und oxydischen Reaktorkern. Dies lässt sich durch Unterschiede in den Wahrscheinlichkeitstabellen der verwendeten CE-Bibliotheken erklären. Werden diese Tabellen bei allen Rechnungen weggelassen, reduzieren sich die Unterschiede auf etwa 30 bzw. 80 pcm.

Die relativen Unterschiede der Brennelementleistungen zwischen den Multigruppen-Rechnungen und den CE-Rechnungen sind in Abb. 5.15 und Abb. 5.16 abgebildet. Sehr gute Übereinstimmung bei Unterschieden von maximal 0.3 % beim metallischen Kern und maximal 1 % beim oxydischen Kern wurden gefunden. Dabei soll erwähnt werden, dass bei den CE-Rechnungen die Symmetrie der Kernmodelle ausgenutzt wurde, wodurch sich auch der regelmäßige Verlauf der Unterschiede erklären lässt: Für den metallischen Kern wurde eine 1/6-Symmetrie berücksichtigt und für den oxydischen Kern wurde die 1/2-Symmetrie berücksichtigt. Die entsprechenden Vergleiche mit den Serpent-Rechnungen ergeben ebenfalls sehr gute Übereinstimmung bei unterschieden der CE-Rechnungen von weniger als 2 %, wobei ein Anteil dieser Abweichungen durch die begrenzte Neutronenstatistik erklärt werden kann.

Tab. 5.12 Unterschiede im Multiplikationsfaktor der Ganzkernmodelle zwischen KENO-VI mit Multigruppendaten und Daten kontinuierlicher Energie

MG-Bibliothek	MET1000 $(1/k_{MG}-1/k_{CE})$ [pcm]	MOX3600 $(1/k_{MG}-1/k_{CE})$ [pcm]
302g, MOX3600	252	280
302g, MOX3600, wrapper cell	138	61

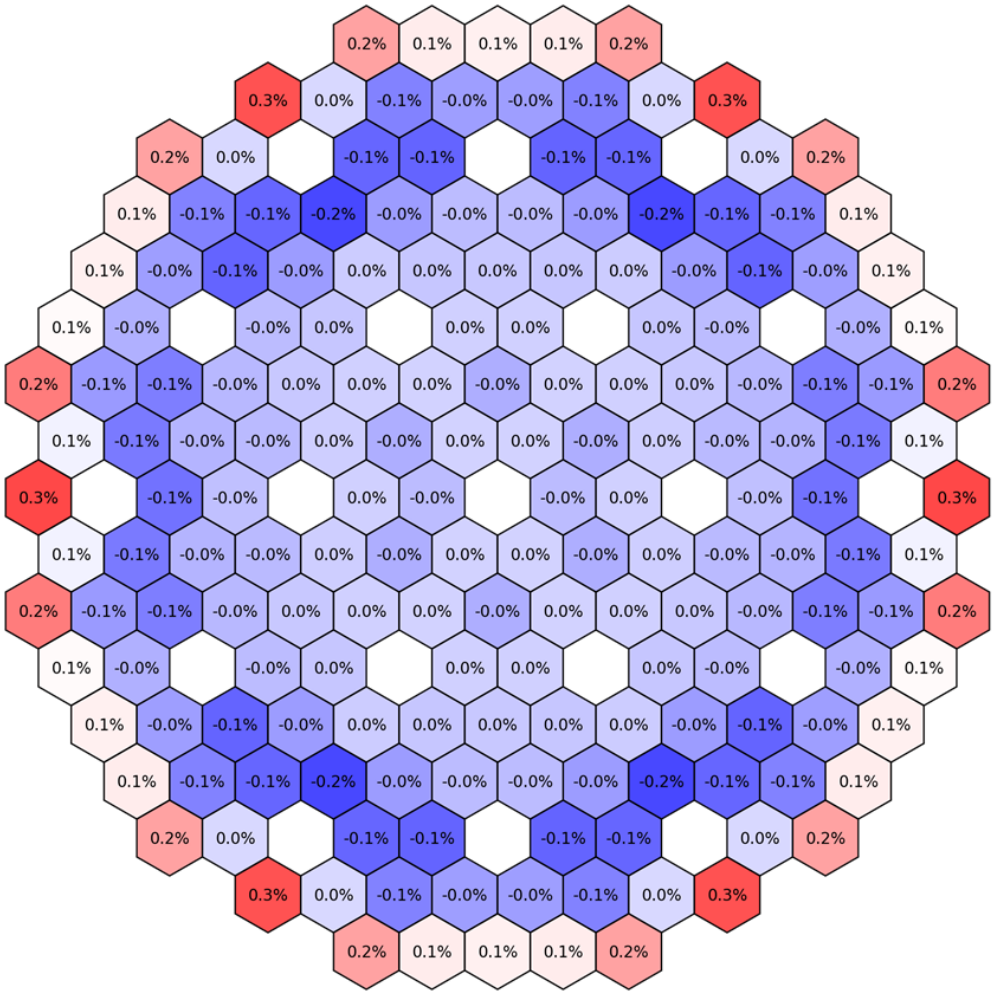

Abb. 5.15 Relativer Unterschied der Brennelementleistungen des MET1000-Reaktorkerns zwischen KENO-MG (302-Gruppen-Bibliothek) und KENO-CE

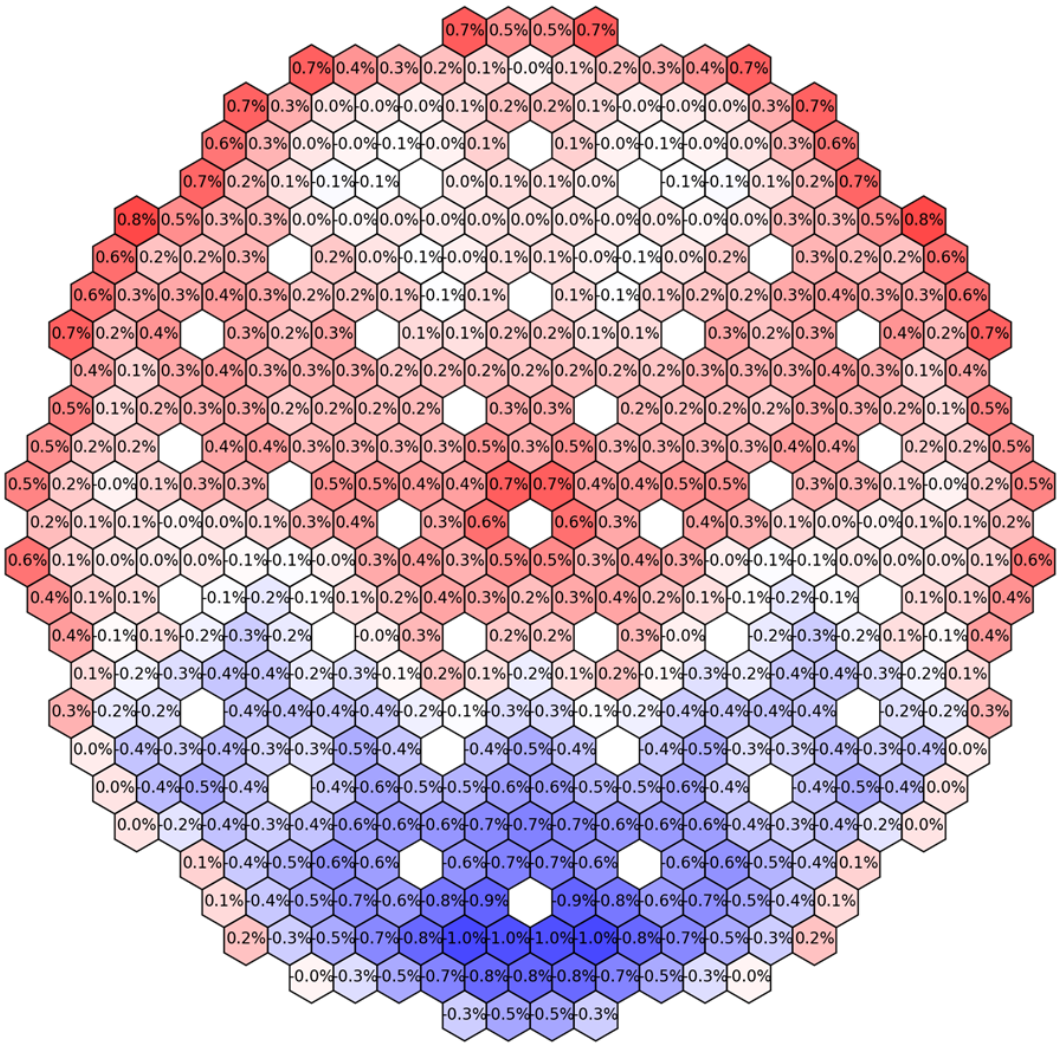

Abb. 5.16 Relativer Unterschied der Brennelementleistungen des MOX3600 Reaktorkerns zwischen KENO-MG (302-Gruppen-Bibliothek) und KENO-CE

Neben den Multigruppenrechnungen der theoretischen Brennelementmodelle wurden einige Experimente mit schnellen Neutronenspektrum aus dem „International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments“ (ICSBEP Handbook) /NEA 16/ mit der 252g-LWR-Bibliothek und der neuen 302g-Bibliothek nachgerechnet. In Tab. 5.13 ist zu erkennen, dass mit beiden Bibliotheken eine ähnliche Abweichung von der Kritikalität erzielt wurde; nur in einem Experiment (Thor) wurde eine Verbesserung des Ergebnisses durch die neue Multigruppen-Bibliothek erzielt (138 statt 207 pcm). Da in drei Fällen eine gute Übereinstimmung mit den Experimenten erzielt wurde und die Abweichungen in den anderen Fällen als akzeptabel angesehen werden, kann geschlossen werden, dass die neue 302g-Bibliothek geeignet für die Be-

rechnung einfacher Experimente mit schnellen Spektren ist. Die Vergleiche weiterer Rechnungen sind in Abschnitt 5.2 aufgeführt.

Tab. 5.13 Abweichungen der Multigruppenrechnungen von der Kritikalität für kritische Experimente.

ICSBEP Handbook Experiment	252g, LWR ($1/k_{MG}$-1) [pcm]	302g, MOX3600 ($1/k_{MG}$-1) [pcm]
Godiva (HEU-MET-FAST-001)	-26	-11
Jezebel (PU-MET-FAST-001)	-40	-44
Jezebel-U233 (U233-MET-FAST-001)	19	36
Flattop-Pu (PU-MET-FAST-006)	-124	-130
Flattop-25 (HEU-MET-FAST-028)	-349	-343
Thor (PU-MET-FAST-008)	207	138

5.2 Erzeugung von Kovarianzdaten in Multigruppen-Darstellung

Das mit SCALE 6.2 mitgelieferte AMPX-Codesystem ermöglicht die Erstellung von Kovarianzbibliotheken in Multigruppen-Darstellung zur Nutzung mit SCALE 6.2. Nach einer Phase der Einarbeitung wurden Kovarianzbibliotheken in Gruppenstrukturen speziell für schnelle Reaktorsysteme erstellt.

Die neuen Kovarianzdaten basieren hauptsächlich auf ENDF/B-VII.1-Daten. Einige fehlende Spaltspektrum-Unsicherheiten wurden aus JENDL-4.0-Daten übernommen. Außerdem wurden weitere Daten aus einer Zusammenarbeit der Brookhaven, Los Alamos und Oak Ridge National Laboratories sowie approximierte Daten der WPEC-Subgroup-26 verwendet /CHA 11/, /LIT 08/. Einige Daten stammen außerdem aus einer vorläufigen Version von ENDF/B-VII.2. Diese Zusammenstellung von Daten wurden freundlicher Weise vom SCALE-Team zur Verfügung gestellt, sodass die erzeugten Kovarianzbibliotheken konsistent mit den im SCALE-Softwarepaket mitgelieferten Kovarianzbibliotheken sind. Als Wichtungsspektrum wurde das Neutronenspektrum des oxydischen homogenisierten Brennelements verwendet (vgl. Abb. 5.4).

Es wurden Kovarianzbibliotheken mit verschiedenen Energiegruppenstrukturen erzeugt. Wie zuvor für die Multigruppenbibliotheken wurden eine 2082- und eine 302-Gruppenbibliothek erzeugt. Außerdem wurden eine Bibliothek mit 24 Gruppen /NIK 15/

basierend auf der 33-Gruppenstruktur in ERANOS /RUG 06/ und eine Bibliothek mit 8 Gruppen wie zuvor in der Erzeugung makroskopischer Wirkungsquerschnitte (vgl. Tab. 5.11) erzeugt. Die Gruppengrenzen wurden leicht angepasst, um jeweils zu den Gruppengrenzen der 302-Gruppenstruktur zu passen. In den im Folgenden beschriebenen Rechnungen und Analysen wurden die Gruppenstrukturen außerdem verändert, um die Sensitivität der Ergebnisse bezogen auf die Gruppenstruktur zu verändern. Einerseits wurde die 302-Gruppenstruktur vereinfacht und andererseits wurde die 8-Gruppenstruktur verfeinert.

Mithilfe der CE-TSUNAMI-Sequenz aus SCALE 6.2, welche Daten in kontinuierlicher Energiedarstellung für die Neutronentransportrechnung nutzt, wurden das MET1000- und das MOX3600-Brennelement bezüglich ihrer Kritikalität, Doppler-Reaktivität und Natrium-Void-Reaktivität untersucht. Die entsprechenden Ergebnisunsicherheiten und die Hauptbeiträge zu diesen Untersicherheiten wurden zwischen den Rechnungen mit den neu erzeugten Kovarianzbibliotheken verglichen. Als Referenz dienen die Rechnungen mit der 2082-Gruppen-Kovarianzbibliothek, da diese die feinste Energieauflösung besitzt.

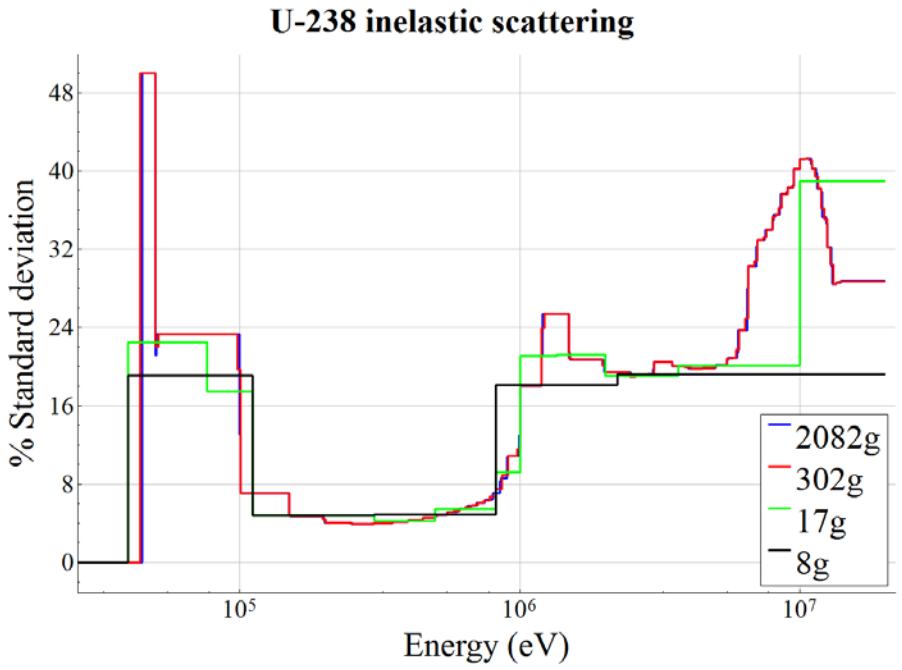

Abb. 5.17 Unsicherheit von inelastischer Streuung an U-238 in Abhängigkeit von der Energie in verschiedenen Energiegruppenstrukturen

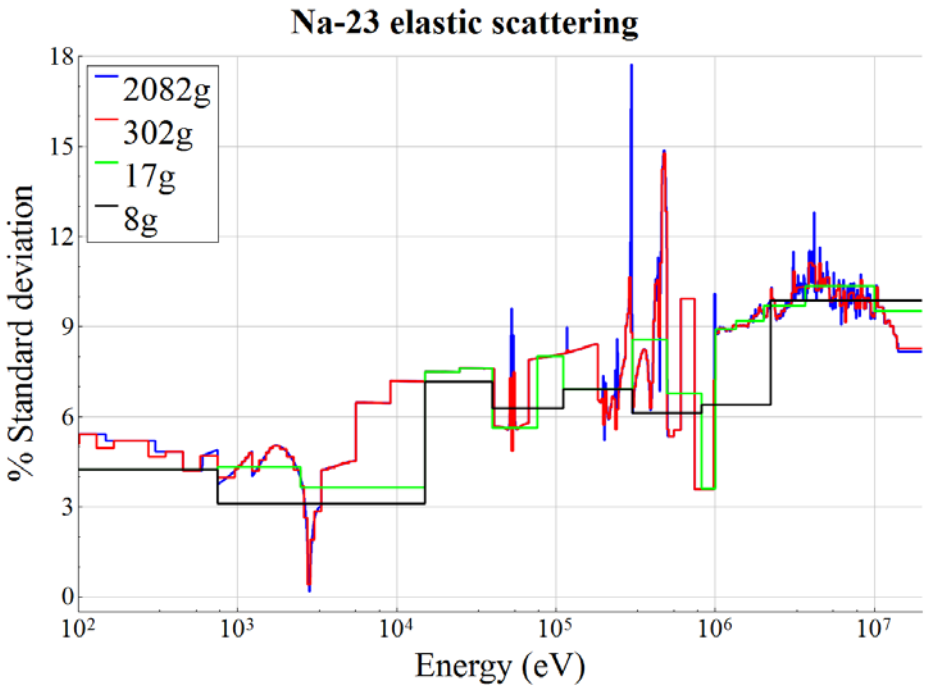

Abb. 5.18 Unsicherheit von elastischer Streuung an Na-23 in Abhängigkeit von der Energie in verschiedenen Energiegruppenstrukturen

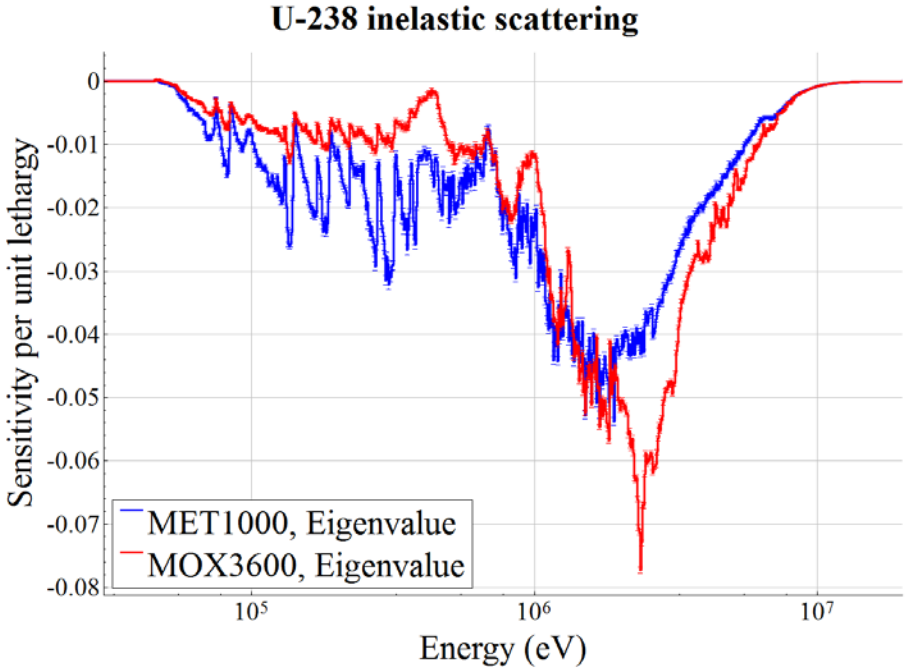

Abb. 5.19 Eigenwert-Sensitivität inelastischer Streuung an U-238

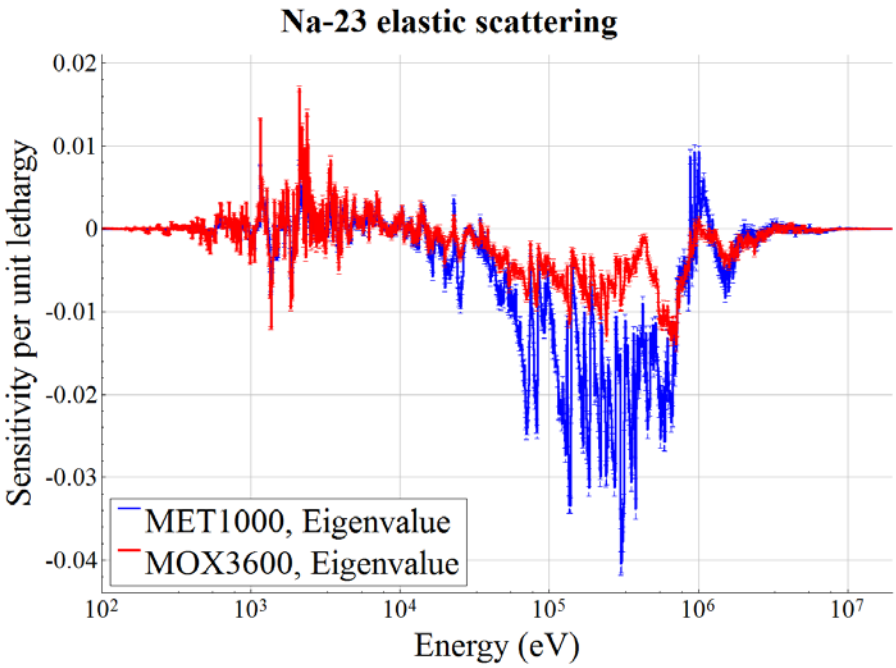

Abb. 5.20 Eigenwert-Sensitivität elastischer Streuung an Na-23

In Abb. 5.17 und Abb. 5.18 sind die Unsicherheiten von inelastischer Streuung an U-238 und elastischer Streuung an Na-23 abgebildet. Es ist deutlich erkennbar, dass eine feine Energieauflösung der Unsicherheit nicht in allen Energiebereichen notwendig ist, da die Daten ohnehin konstant sind. Es wird allgemein beobachtet, dass die Energieauflösung der für die vorliegenden Systeme wichtigen Unsicherheiten der Nuklidreaktionen im schnellen Energiebereich oft nur grob ist. Auf der anderen Seite kann man in Abb. 5.19 und Abb. 5.20 die zu den gezeigten Unsicherheiten zugehörigen Sensitivitäten erkennen. Wenn die Sensitivität in einem Energiebereich hoch ist, ist die Energieauflösung der Unsicherheit in diesem Energiebereich besonders signifikant. Im thermischen Energiebereich ist die Sensitivität z. B. des Eigenwerts zu wichtigen Nuklidreaktionen ohnehin gering, so dass eine feine Energieauflösung hier nicht notwendig ist. Durch die Berücksichtigung der für die untersuchten Anordnungen wichtigen Sensitivitäten und der zugehörigen Unsicherheiten wurden Energiegrenzen zu den groben Energiegruppenstrukturen hinzugefügt bzw. Energiegruppen der feinen 302-Gruppenstruktur zusammengefasst.

Die berechneten Unsicherheiten und relativen Unterschiede zur entsprechenden Referenz sind in Tab. 5.14 und Tab. 5.15 aufgeführt. Die Verwendung der 302-Gruppen-Kovarianzbibliothek führt zu konsistenten Ergebnissen mit der 2082-Gruppen-Bibliothek. Die Vereinfachung der Gruppenstruktur bis zu 8 Gruppen führt zu einer relativen Abweichung von maximal 5 % von der Referenz. Es kann somit gefolgert werden,

dass die Anzahl der Energiegruppen der Kovarianzbibliotheken erheblich reduziert werden kann, ohne die Ergebnisuntersicherheiten signifikant zu beeinflussen. Der Einfluss des Wichtungsspektrums ist selbst bei sehr grober Energiegruppenstruktur vernachlässigbar.

Tab. 5.14 MET1000-Brennelement: Unsicherheiten des Eigenwerts, der Doppler-Reaktivität und der Na-Void-Reaktivität

cov. lib.	Eigenwert		Doppler		Na-void	
	% Δk/k	rel. dev. to ref.	% Δρ/ρ	rel. dev. to ref.	% Δρ/ρ	rel. dev. to ref.
2082g	1.438(1)	(ref)	8.4(2)	(ref)	5.40(1)	(ref)
302g	1.438(1)	0.00 %	8.3(2)	-0.03 %	5.39(1)	-0.11 %
98g	1.437(1)	-0.07 %	8.3(3)	-0.87 %	5.38(1)	-0.31 %
24g	1.435(1)	-0.21 %	8.2(3)	-1.84 %	5.27(1)	-2.32 %
17g	1.434(1)	-0.28 %	8.0(4)	-3.63 %	5.33(1)	-1.30 %
11g	1.434(1)	-0.28 %	8.0(4)	-4.17 %	5.25(1)	-2.71 %
8g	1.420(1)	-1.25 %	8.0(4)	-4.58 %	5.21(1)	-3.46 %

Tab. 5.15 MOX3600-Brennelement: Unsicherheiten des Eigenwerts, der Doppler-Reaktivität und der Na-Void-Reaktivität

cov. lib.	Eigenwert		Doppler		Na-void	
	% Δk/k	rel. dev. to ref.	% Δρ/ρ	rel. dev. to ref.	% Δρ/ρ	rel. dev. to ref.
2082g	1.581(1)	(ref)	4.9(1)	(ref)	5.43(1)	(ref)
302g	1.581(1)	0.00 %	4.9(1)	-0.45 %	5.42(1)	-0.09 %
98g	1.580(1)	-0.06 %	4.8(1)	-0.80 %	5.41(1)	-0.44 %
24g	1.565(1)	-1.01 %	4.8(2)	-2.13 %	5.30(1)	-2.34 %
17g	1.576(1)	-0.32 %	4.8(2)	-2.11 %	5.38(1)	-0.94 %
11g	1.576(1)	-0.32 %	4.8(2)	-0.90 %	5.33(1)	-1.77 %
8g	1.529(1)	-3.29 %	4.7(2)	-3.37 %	5.34(2)	-1.68 %

In Tab. 5.16 und Tab. 5.17 sind die Beiträge wichtiger Kovarianzmatrizen zur entsprechenden Ergebnisunsicherheit aufgeführt. Der Einfluss der Gruppenstruktur, d. h. vor allem zusätzlicher Energiegruppen, ist hier etwas deutlicher zu erkennen. Die Untersuchung dieser Beiträge hat insbesondere zur Identifizierung wichtiger Energiegruppengrenzen beigetragen. Allerdings muss erwähnt werden, dass manchmal durch das Hinzufügen zusätzlicher Gruppengrenzen Unterschiede größer geworden sind (vgl. z. B. die Beiträge für die Na-Void-Reaktivität des MET1000-Brennelements zwischen der 17-Gruppen- und 24-Gruppen-Bibliothek). Hieraus kann man schließen, dass viele Veränderungen der Übereinstimmung durch den Effekt der Fehlerauslöschung entstanden sind. Insbesondere betrifft dies die Streureaktionen, da diese eine besonders

stark variierende Sensitivität zeigen, welche nur durch eine feine Energiegruppenstruktur wirklich gut abgebildet werden kann.

Tab. 5.16 MET1000-Brennelement: Hauptbeiträge zur Unsicherheit des Eigenwerts k, der Doppler-Reaktivität und der Na-Void-Reaktivität

	Kovarianz		% Δk/k 2082g	Relativer Unterschied zur 2082g-Referenz (%)					
				302g	98g	24g	17g	11g	8g
Eigenwert	U-238 n,n'	U-238 n,n'	1.211(1)	0.00	-0.03	-0.51	0.43	0.72	-0.81
	Na-23 el.	Na-23 el.	0.332(1)	-0.12	-0.36	-1.58	-1.73	-3.90	-3.66
	U-238 n,γ	U-238 n,γ	0.266(1)	-0.08	-0.08	1.71	0.81	0.96	0.95
Doppler	U-238 n,n'	U-238 n,n'	4.90(5)	-0.06	-0.10	-2.20	-0.19	-1.70	-4.13
	Na-23 el.	Na-23 el.	4.63(3)	0.78	0.20	0.32	-8.02	-11.16	-11.49
	Fe-56 el.	Fe-56 el.	4.33(9)	-0.41	-2.93	-4.87	-4.17	-2.69	-2.58
Na-void	Na-23 el.	Na-23 el.	4.464(1)	-0.12	-0.35	-1.58	-1.73	-3.90	-3.67
	Na-23 n,n'	Na-23 n,n'	2.171(1)	0.01	0.02	-1.33	0.94	1.41	0.38
	U-238 n,n'	U-238 n,n'	1.336(1)	0.01	-0.07	-7.64	-1.29	-2.04	-11.65

Tab. 5.17 MOX3600-Brennelement: Hauptbeiträge zur Unsicherheit des Eigenwerts k, der Doppler-Reaktivität und der Na-Void-Reaktivität

	Kovarianz		% Δk/k 2082g	Relativer Unterschied zur 2082g-Referenz (%)					
				302g	98g	24g	17g	11g	8g
Eigenwert	U-238 n,n'	U-238 n,n'	1.410(1)	0.00	-0.03	-0.90	0.28	0.36	-2.49
	U-238 n,γ	U-238 n,γ	0.348(1)	-0.06	-0.11	-0.28	0.59	0.41	0.41
	Pu-239 n,γ	Pu-239 n,γ	0.244(1)	0.00	-0.05	-0.30	-0.30	0.93	0.93
Doppler	U-238 n,n'	U-238 n,n'	3.90(3)	-0.17	-0.02	-1.62	-0.39	-0.72	-3.28
	O-16 el.	O-16 el.	1.33(1)	-0.03	-0.01	0.46	0.29	0.51	0.57
	U-238 n,n'	U-238 el.	1.16(3)	-2.03	-3.48	-12.6	-11.8	-12.6	-13.5
Na-void	Na-23 el.	Na-23 el.	3.656(1)	-0.06	-0.27	-1.91	-0.09	-1.01	-0.81
	Na-23 n,n'	Na-23 n,n'	3.079(1)	0.01	0.00	-0.42	0.63	0.92	1.28
	U-238 n,n'	U-238 n,n'	1.654(1)	-0.08	-0.19	-1.08	-1.01	-2.59	-0.15

Insgesamt lässt sich aus diesen Studien folgern, dass eine Vereinfachung der Energiegruppenstruktur der Kovarianzbibliothek keinen signifikanten Einfluss auf das Ergebnis von Unsicherheitsanalysen der betrachteten SFR-Systeme hat. Die Vereinfachung der Gruppenstruktur hat den Vorteil, dass bei Sampling-basierten Unsicherheitsanalysen mit XSUSA die Anzahl der zu variierenden Parameter deutlich reduziert wird (vgl. Abb. 5.21 und Tab. 5.18). Dies wiederum führt dazu, dass in anschließenden Sensitivitätsanalysen die Beiträge zur Gesamtunsicherheit bereits mit einem deutlich reduzierten Stichprobenumfang und entsprechend reduzierter Rechenzeit ermittelt werden können. Einerseits ist die Signifikanzschwelle für den Sensitivitätsindex R^2 deutlich reduziert und andererseits kann der Sensitivitätsindex SPC^2 überhaupt mit einer reduzierten Stichprobengröße ermittelt werden (SPC^2 benötigt eine Stichprobengröße, welche größer als die Gesamtzahl aller variierten Parameter im System ist).

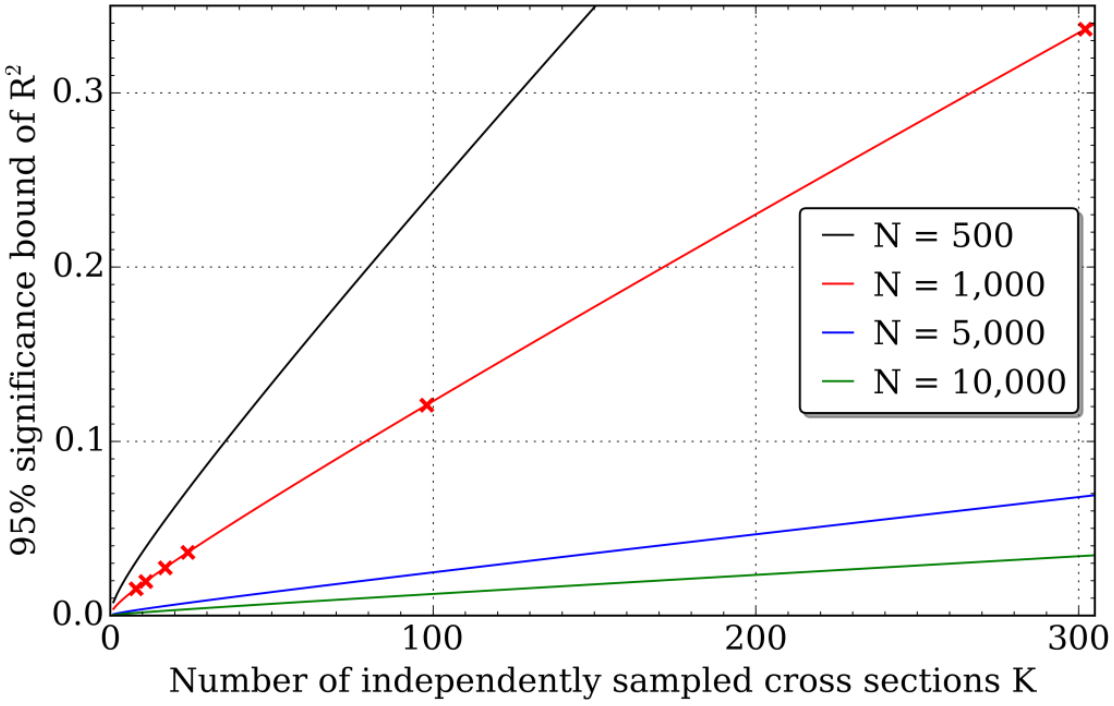

Abb. 5.21 95 %-Signifikanzschwelle der XSUSA-Sensitivitätsindex R^2 als Funktion der Anzahl der variierten Parameter für eine einzelne Nuklidreaktion für verschiedene Stichprobengrößen

Tab. 5.18 Gesamtzahl der zu variierenden Parameter in einer XSUSA-Analyse eines SFR-Brennelements

Anzahl von Energiegruppen in der Kovarianzbibliothek	Anzahl von unabhängig variierten Wirkungsquerschnitten
8	2342
11	3268
17	4591
24	5877
98	17575
302	32093

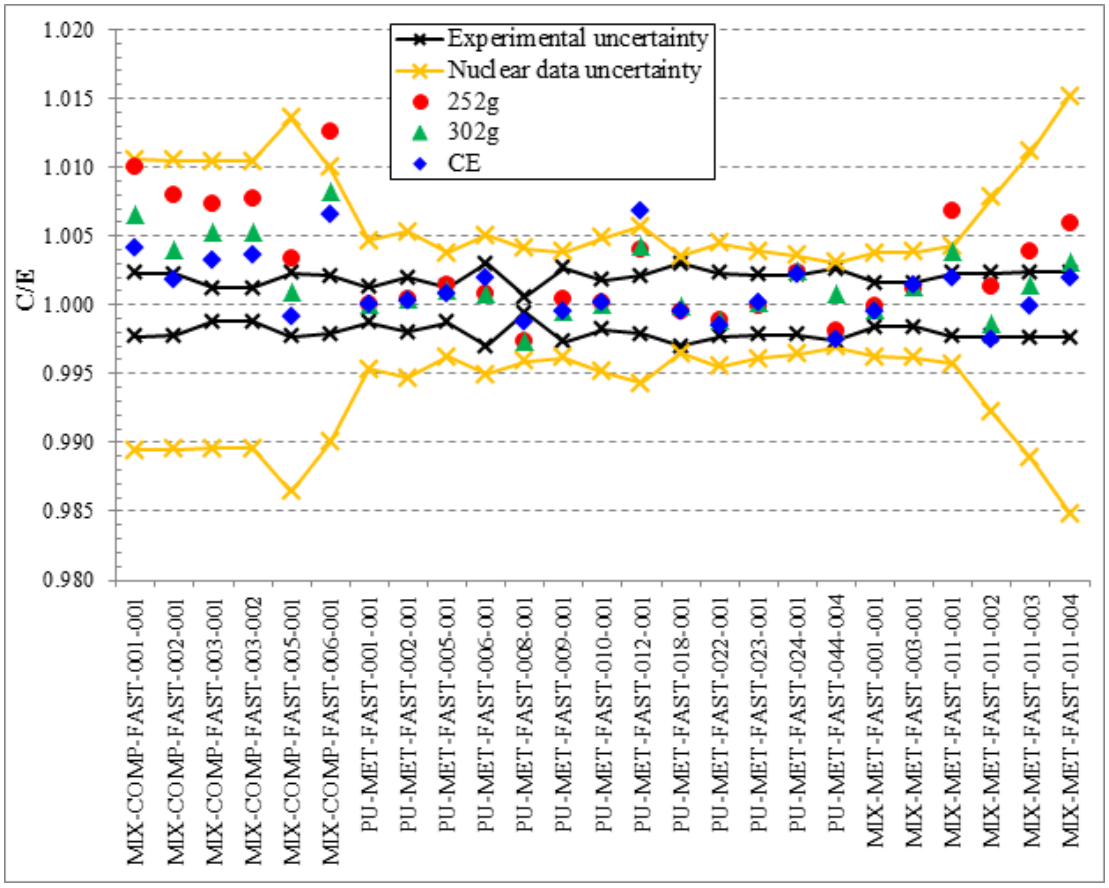

Abb. 5.22 Vergleich der Rechnungen mit verschiedenen schnellen Anordnungen aus dem ICSBEP-Handbuch

Um die neuen Wirkungsquerschnitts- und Kovarianz-Bibliotheken anhand von Experimenten zu testen, wurde eine Vielzahl von Experimenten mit schnellem Neutronenspektrum aus dem ICSBEP-Handbook nachgerechnet. Neben den neuen Bibliotheken

wurden auch CE-Daten und die 252-Gruppen-LWR-verwendet. In Abb. 5.22 ist zu erkennen, dass die 302-Gruppen-Rechnungen näher an den CE-Rechnungen liegen als die entsprechenden 252-Gruppen-Rechnungen. Unter Berücksichtigung der Unsicherheiten aus den nuklearen Daten stimmen die 302-Gruppen- und CE-Rechnungen sehr gut mit den Experimenten überein – bis auf eine Ausnahme einer CE-Rechnung des Experiments PU-MET-FAST-12. In Abb. 5.23 sind die Abweichungen der C/E-Werte von 1.0 für jede Kategorie von Experimenten noch einmal aufgeführt. Auch hier lässt sich die gute Übereinstimmung der Rechnungen mit dem Experiment ablesen, wobei für die Gruppe der PU-MET-FAST-Experimente die beste Übereinstimmung gefunden wurde.

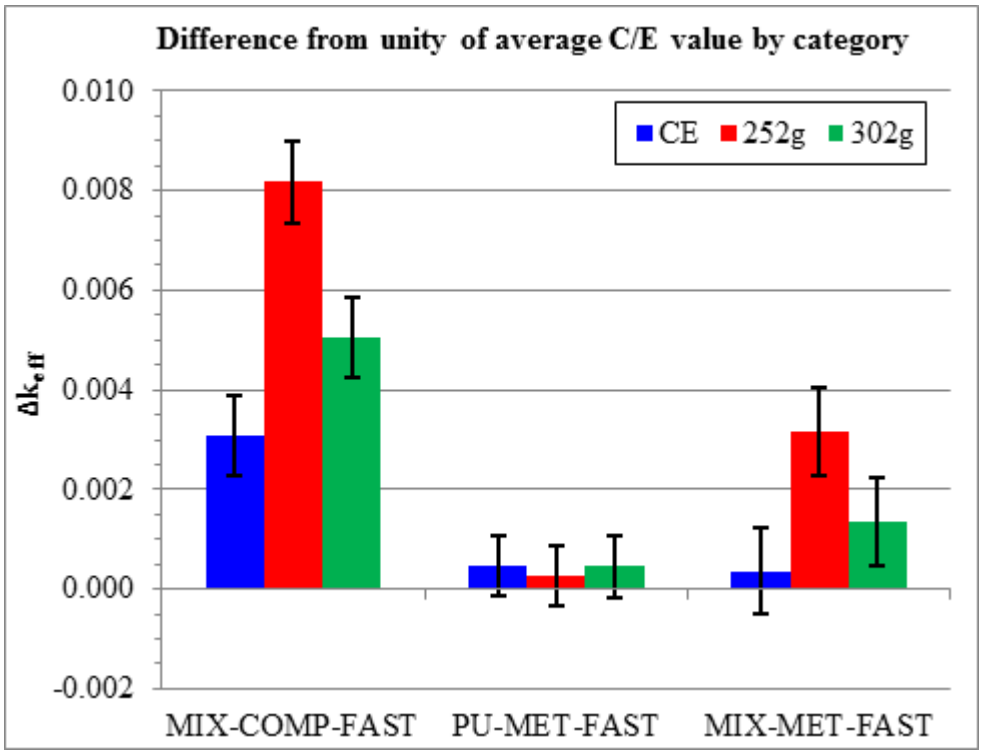

Abb. 5.23 Unterschied zu 1.0 vom durchschnittlichen C/E Wert für die verschiedenen Kategorien

6 AP4: Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen

Im Rahmen des Arbeitspakets 4 werden weitere systematische Unsicherheitsanalysen bezüglich nuklearer Daten durchgeführt, insbesondere zur Teilnahme am UAM-LWR-Benchmark und für schnelle Reaktorsysteme, sowie die erforderliche Weiterentwicklung des Programmsystems XSUSA (*Cross Section Uncertainty and Sensitivity Analysis*).

6.1 Fortsetzung der Teilnahme am UAM-LWR-Benchmark

Zur Teilnahme am UAM-LWR-Benchmark wurden die Arbeiten zu Brennelement-Abbrandberechnungen der Phase II /POR 16/ fortgesetzt. Diese Rechnungen wurden zunächst für ein DWR- und ein SWR-Brennelement in 238 Energiegruppen durchgeführt. Dazu waren auch Anpassungen bzgl. der geänderten Spezifikation notwendig. Bei Sampling-basierten Unsicherheitsanalysen für Brennelement-Abbrandberechnungen mit Wirkungsquerschnitten in einer Feingruppenstruktur ist die gleichzeitige Durchführung einer großen Anzahl von Rechenläufen problematisch, da es auf einzelnen Rechenknoten zu Engpässen hinsichtlich des Hauptspeichers und des temporären Festplattenplatzes, sowie des Datendurchsatzes beim Variieren und Kopieren der Wirkungsquerschnittsbibliotheken kommen kann. Dies konnte durch Optimierungen, wie etwa durch die Beschränkung der Anzahl von Jobs pro Knoten, oder das Bereitstellen von Kopien der Bibliotheken auf den lokalen Knoten-Laufwerken, abgemildert werden; dennoch konnte nicht vollständig verhindert werden, dass einzelne Rechenläufe abstürzen oder fehlerhafte Ergebnisse liefern. Daher waren genaue Überprüfungen erforderlich, mit denen sich solche Läufe identifizieren und wiederholen lassen. So liegen nun die Ergebnisse von je 1000 Rechenläufen vor, die statistisch ausgewertet wurden.

Im Folgenden werden einige Ergebnisse für das DWR-Brennelement dargestellt. Es handelt sich dabei um ein Brennelement des Reaktors Three Mile Island 1 (TMI-1) vom Typ 15x15-17; die regulären UO_2-Brennstäbe besitzen eine U-235-Anreicherung von 4.12 %, gekennzeichnet mit “1” in Abb. 6.1; die Position des UO_2/Gd-Brennstabs ist mit “2A” bezeichnet und die Positionen der Steuerstabführungsrohre und des Instrumentierungskanals mit “G” und “I”. Aus Symmetriegründen braucht nur ein Viertel des Brennelements für die Berechnungen betrachtet zu werden.

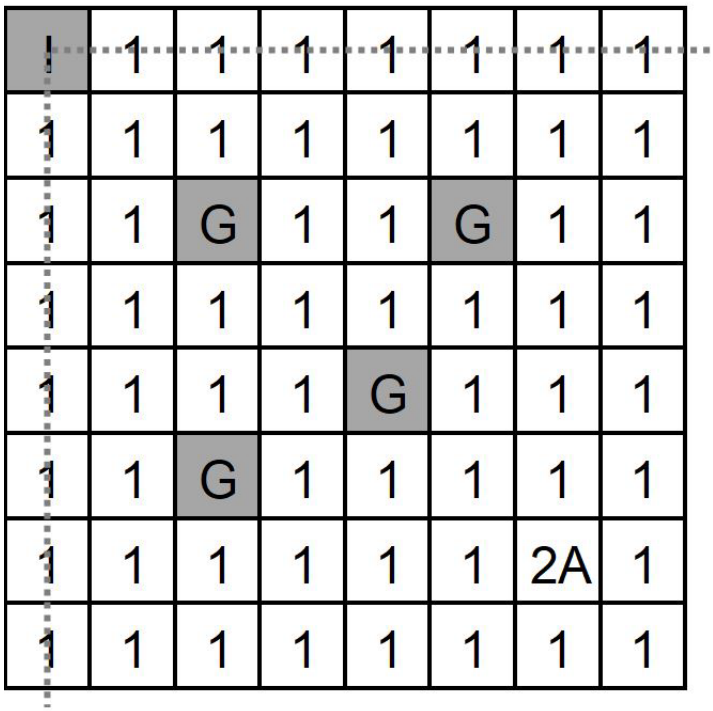

Abb. 6.1 Schematische Darstellung des TMI-1-Brennelements (ein Viertel).

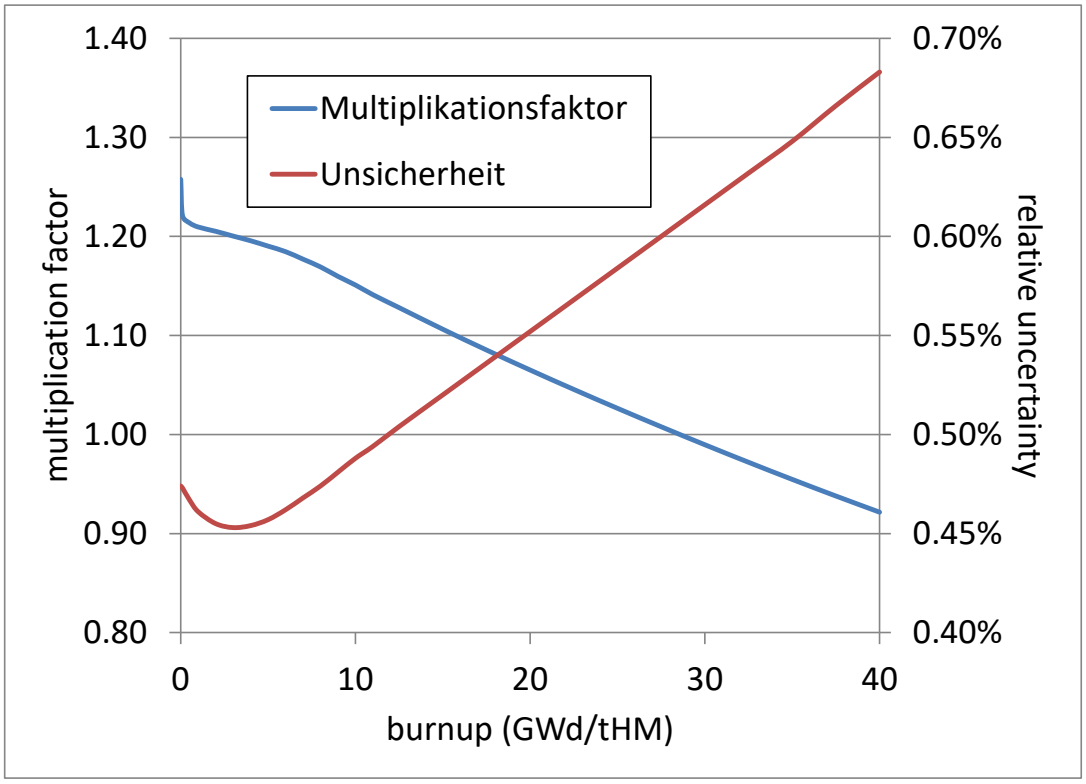

Abb. 6.2 Nominalwert und relative Unsicherheit des Multiplikationsfaktors für das TMI-1-Brennelement als Funktion des Abbrands

Zunächst sind in Abb. 6.2 der Nominalwert und die Unsicherheit des Multiplikationsfaktors für das TMI-1-Brennelement als Funktion des Abbrands dargestellt. Die Unsicherheit verhält sich so, wie aus früheren Beobachtungen für LWR-Stabgitteranordnungen zu erwarten ist, wenn die SCALE-6.1-Kovarianzbibliothek verwendet wird: Für das frische Brennelement, das ausschließlich aus niedrig angereicherten UO_2-Brennstoff besteht, liegt die relative 1σ-Unsicherheit bei ca. 0.5 %; mit dem Aufbau von Plutonium im Laufe des Abbrands nimmt sie deutlich zu.

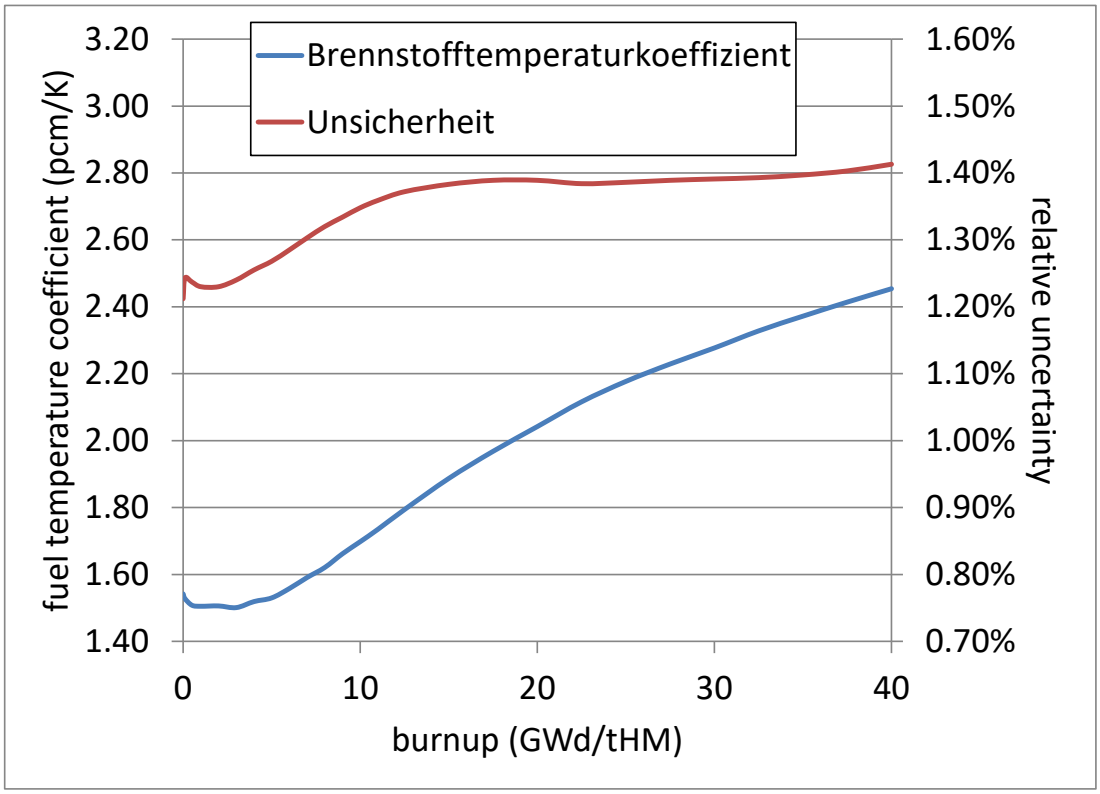

Abb. 6.3 Nominalwert und relative Unsicherheit des Brennstofftemperaturkoeffizienten für das TMI-1-Brennelement als Funktion des Abbrands

Die Abbrandberechnungen wurden beim Nominalwert von 900 K für die Brennstofftemperatur durchgeführt. Dabei wurde für jeden Abbrandzeitpunkt in einer zusätzlichen Transportrechnung der Multiplikationsfaktor bei einer leicht abweichenden Brennstofftemperatur von 890 K bestimmt; aus der entsprechenden Reaktivitätsdifferenz wurde der Reaktivitätskoeffizient der Brennstofftemperatur berechnet. Dieser ist gemeinsam mit der zugehörigen Unsicherheit in Abb. 6.3 als Funktion des Abbrands dargestellt. Abhängig vom Abbrand liegt die Unsicherheit des Brennstofftemperaturkoeffizienten in einem Bereich von 1.2 % - 1.4 %. Wenn man berücksichtigt, dass eine Unsicherheit in der Größenordnung von 10 % in einem Vergleichsbenchmark für verschiedene LWR-

Stabzellen mit unterschiedlichen Rechenprogrammen und nuklearen Daten beobachtet worden ist /MOS 07/, ist dieser Wert als nicht sicherheitsrelevant einzuordnen.

Schließlich ist die Unsicherheit der Stableistungsverteilung für das frische und das bis 40 GWd/tHM abgebrannte Brennelement in Abb. 6.4 dargestellt. Einzig für den frischen UO_2/Gd-Brennstab hat die relative 1σ-Unsicherheit eine nennenswerte Größe von etwas über 0.5 %; dies ist aber bei der geringen Leistung in diesem Brennstab völlig unbedeutend. Für alle anderen Brennstäbe liegt die Unsicherheit unter 0.1 %.

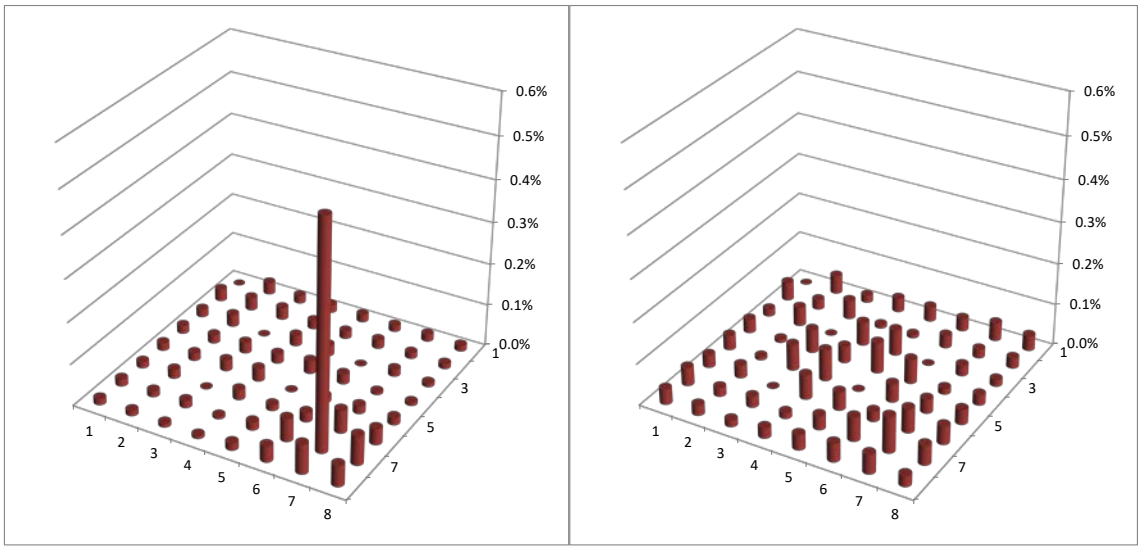

Abb. 6.4 Unsicherheiten der Stableistungen für das TMI-1-Brennelement im frischen (links) und abgebrannten (rechts) Zustand

Zusätzlich zu den beiden Brennelementen mit quadratischem Gitter wurden Unsicherheitsanalysen für das ebenfalls im Rahmen der Phase II des UAM-LWR-Benchmarks spezifizierte hexagonale WWER-1000-Brennelement des Reaktors Kozloduy 6 durchgeführt. Darauf wird im Abschnitt 6.4 eingegangen.

Signifikante Änderungen in den Spezifikationen für die Teilaufgaben zum UAM-LWR-Benchmark Phase I sowie in den Templates für die auszuwertenden Ergebnisgrößen und deren Unsicherheiten erforderten eine vollständige Überarbeitung der bisher durchgeführten Berechnungen und Auswertungen sowie die zusätzliche Durchführung von neu hinzugekommenen Aufgaben. Soweit möglich wurden dazu folgende Programme und Daten herangezogen: MCNP mit ENDF/B-VII.1-Daten in kontinuierlicher Energiedarstellung als Referenz für die Nominalergebnisse ohne Unsicherheiten; TSUNAMI mit ENDF/B-VII.0- und ENDF/B-VII.1-Daten in Multigruppendarstellung sowie den Kovarianzdaten aus SCALE 6.1 und SCALE 6.2; XSUSA mit den entspre-

chenden nuklearen Daten und Kovarianzdaten. Die ausgewerteten Ergebnisse wurden in den vorgesehenen Templates dem Benchmark-Team übergeben. Stabzell- und Brennelementberechnungen in zweidimensionaler Geometrie wurden zusätzlich mit HELIOS-2 und der XSUSA-Schnittstelle durchgeführt, siehe Abschnitt 6.4.

Die Dateien mit den vollständigen Ergebnissen sind diesem Bericht als Anhang D beigefügt. Die Auflistung bezeichnet die Serie von Anwendungsfällen, die Rechenmethodik und die verwendeten Kovarianzdaten bzw. die daraus erzeugten Variationsparameter (44 oder 56 Energiegruppen).

Insgesamt ergab sich ausgezeichnete Übereinstimmung zwischen den jeweiligen Ergebnissen der Nominalberechnungen mit den jeweiligen MCNP-Referenzlösungen. Für die Ergebnisunsicherheiten ergab sich ebenfalls ausgezeichnete Übereinstimmung zwischen XSUSA und TSUNAMI, wenn dieselben Kovarianzdaten verwendet wurden; mit den unterschiedlichen Kovarianzdaten aus SCALE 6.1 und SCALE 6.2 zeigen sich auch zum Teil deutliche Unterschiede in den Ergebnisunsicherheiten. Dies wird z. B. aus den Ergebnissen für die Unsicherheiten der radialen Leistungsverteilung zweier GEN-III-DWR-Kerne ersichtlich, siehe Abb. 6.5 und Abb. 6.6. Die Berechnungen wurden mit dem Monte-Carlo-Code KENO-V.a durchgeführt, die Unsicherheiten wurden mit XSUSA bestimmt. Es zeigt sich, dass für den UO_2-Kern die Unsicherheiten beim Übergang von SCALE-6.1- zu SCALE-6.2-Kovarianzdaten die Unsicherheiten geringfügig zunehmen, bedingt durch die höhere Unsicherheit der U-235-Neutronenmultiplizität in SCALE 6.2 im Vergleich zu SCALE 6.1; für den UO_2/MOX-Kern ist der umgekehrte Effekt zu beobachten, bedingt durch die geringere Unsicherheit der Pu-239-Neutronenmultiplizität in SCALE 6.2 im Vergleich zu SCALE 6.1.

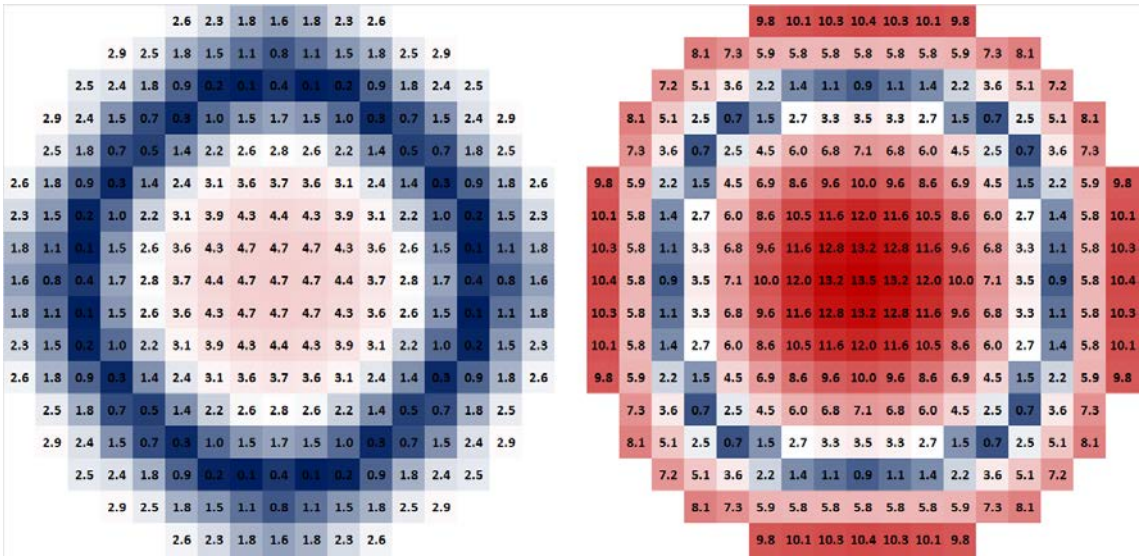

Abb. 6.5 Relative 1σ-Unsicherheiten (%) der radialen Leistungsverteilung für einen UO_2-Kern (links) und einen UO_2/MOX-Kern (rechts) mit Kovarianzdaten aus SCALE 6.1

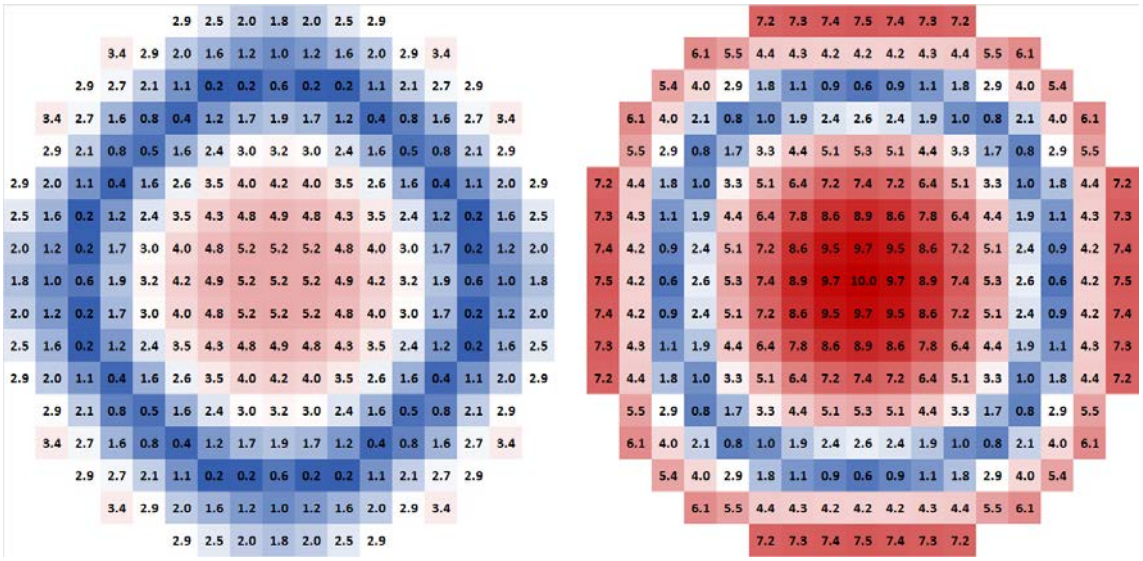

Abb. 6.6 Relative 1σ-Unsicherheiten (%) der radialen Leistungsverteilung für einen UO_2-Kern (links) und einen UO_2/MOX-Kern (rechts) mit Kovarianzdaten aus SCALE 6.2

Unsicherheitsanalysen zu Berechnungen im Rahmen des Kalinin-3-Benchmarks /TER 08/ sind Bestandteil der Phase III des UAM-LWR-Benchmarks, siehe Anhang B20. Dabei hat sich die GRS bereiterklärt, Gitter-/Abbrandberechnungen unter Variation der mikroskopischen nuklearen Daten mit der Abbrandsequenz TRITON aus SCALE 6.1 und XSUSA durchzuführen und so makroskopische, Brennelement-gemittelte Wirkungsquerschnitte in zwei Energiegruppen zu erzeugen, die von den

Benchmark-Teilnehmern anschließend für Unsicherheitsanalysen in Kernsimulationen verwendet werden können. Dazu wurden für die sechs unterschiedlichen Brennelement-Typen Gitter-/Abbrandrechnungen einschließlich der entsprechenden Verzweigungsrechnungen durchgeführt und damit Zwei-Gruppen-Daten auf einem Gitter der Brennstofftemperatur, der Moderatortemperatur und der Moderatordichte erzeugt, jeweils im unkontrollierten und kontrollierten Zustand. Zusätzlich zu den Brennelementdaten wurden Daten für die axialen und radialen Reflektoren erzeugt. Der vollständige Satz von Berechnungen mit den Nominalwerten der mikroskopischen Wirkungsquerschnitte wurde mit variierten mikroskopischen Wirkungsquerschnitten 1000-mal wiederholt. Die Daten in der Darstellung der Ausgabefiles von TRITON wurden in das NEMTAB-Format, das von vielen Programmen zur Kernsimulation gelesen werden kann, umgewandelt und an die Benchmark-Koordinatoren übergeben, so dass diese nun den Benchmark-Teilnehmern zur Verfügung stehen.

Zur Bearbeitung der Kerntransienten-Aufgaben des UAM-LWR-Benchmarks Phase II wurden der UAM-TMI-1-Minikern und der SPERT-III Kern ausgewählt. Der TMI-1-Minikern besteht aus einem 3x3-Brennelementgitter mit demselben UO_2-Brennelementtyp an jeder Position. Der UO_2-Brennstoff besitzt eine U-235-Anreicherung von 4.12 %. In Abb. 6.7 ist ein horizontaler Schnitt durch den Kern dargestellt.

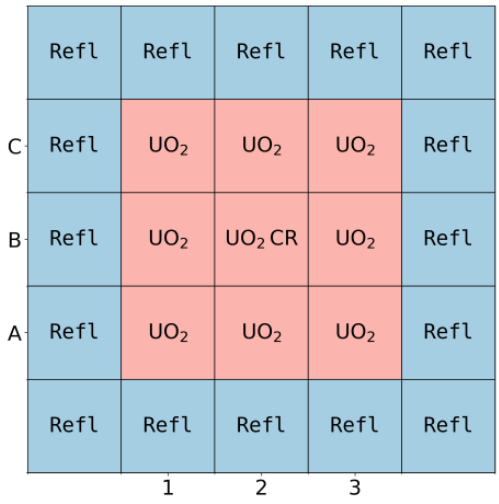

Abb. 6.7 Beladeplan des TMI-1-Minikerns

Vier Brennstäbe des UO_2-Brennelements enthalten 2.00 % Gd_2O_3. Der Kern hat eine aktive Länge von 365.76 cm und ist mit einem radialen Reflektor umgeben. Der Reflektor besteht aus Wasser und einer Edelstahl-Kernumfassung mit einer Weite von 1.91 cm. Das Brennelement auf der mittleren Kernposition kann über 16 AgInCd-Steuerstäbe kontrolliert werden. Im Gegensatz zur Benchmark-Spezifikation wurde die

Transiente mit einer größeren Steuerstabauslenkung und mit thermohydraulischen Rückwirkungen berechnet. Hierzu wurden zunächst Modelle des UO_2-Brennelements und des Reflektors für den Gittercode NEWT aus dem Programmsystem SCALE 6.1 erstellt. Für die thermohydraulischen Rückwirkungen wurde folgende Verzweigungsstruktur gewählt: i) Brennstofftemperatur (K): 560.0, 900.0, 1320, ii) Moderatordichte (g/cm^3): 0.66114, 0.71187, 0.75206, iii) Borkonzentration (ppm): 0.0, 1000.0, 2000.0. Anschließend wurden unter Anwendung der XSUSA-Methodik 1000 variierte homogenisierte Wirkungsquerschnittssätze für jeden Verzweigungspunkt für das Brennelement und für den Reflektor erstellt. Neben der Variation der mikroskopischen Wirkungsquerschnittsdaten wurden ebenfalls die Spaltausbeuten der verzögerten Neutronen variiert, so dass nicht nur die homogenisierten Wirkungsquerschnitte, sondern auch die kinetischen Parameter variiert werden. Zur Durchführung der Transientenanalysen wurden die entsprechenden Modelle für das Neutronenkinetik-/Thermohydraulik-Programmsystem QUABOX/CUBBOX-ATHLET für den Zustand Nulllast-Heiß erstellt. Vor Beginn der Transiente ist der Steuerstab vollständig eingefahren und der Reaktor hat eine thermische Leistung von 0.1409 MW. Innerhalb von 10 s wird dann der Steuerstab um 63.52 cm aus dem Kern herausgezogen und danach innerhalb von 20 s wieder vollständig eingefahren. Die Reaktivitätszufuhr beträgt 1.28 $. (Der Wert von 1.0 $ entspricht der Reaktivität, bei der der Reaktor prompt überkritisch wird.) In Abb. 6.8 sind der nominale Verlauf der Leistung, der Mittelwert über die 1000 Variationen sowie das 1σ-Unsicherheitsband dargestellt. Im nominalen Fall beträgt das Leistungsmaximum 1.8 MW und tritt 14.88 s nach Beginn der Steuerstabbewegung auf.

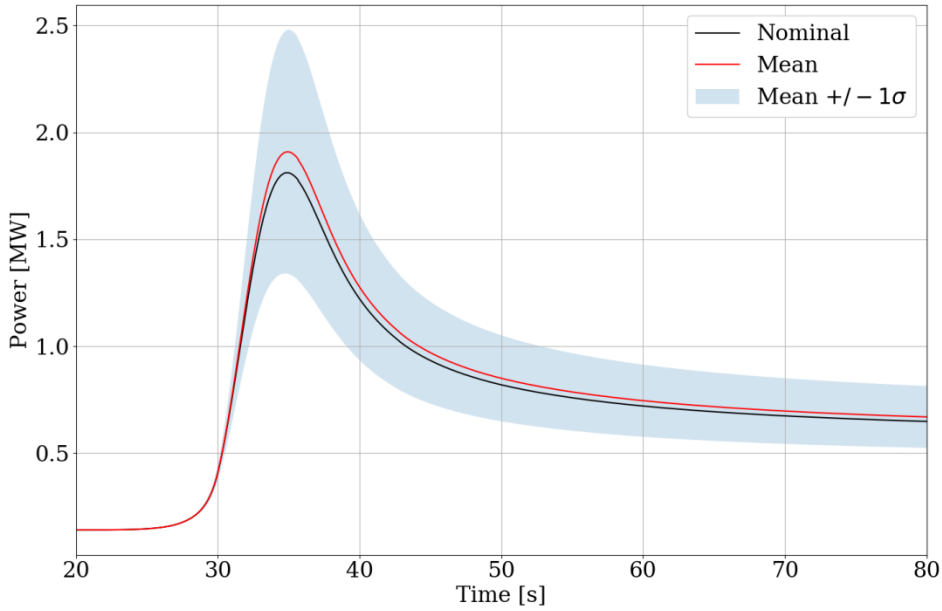

Abb. 6.8 Verlauf von nominaler und gemittelter Leistung mit dem 1σ-Unsicherheitsband für die Transiente des TMI-1-Minikerns

Im variierten Fall ergibt sich ein Leistungsmaximum von 1.91 MW, welches nach 14.95 s auftritt. Die relative Standardabweichung der Leistung beträgt zu diesem Zeitpunkt 29.89 %. Die maximale relative Standardabweichung ergibt sich zu 30.2 % zu einem Zeitpunkt von 15.63 s nach Beginn der Steuerstabbewegung. Nach dem Maximum reduziert sich die Leistung durch negative Rückwirkungen auf die Reaktivität. Bei Ende der Simulation beträgt die Leistung im nominalen Fall 0.65 MW und im variierten Fall 0.67 MW. Die relative Standardabweichung beträgt zu diesem Zeitpunkt 21.6 %. Durch eine Sensitivitätsanalyse wurde untersucht, welche Unsicherheiten in den nuklearen Wirkungsquerschnitten einen signifikanten Beitrag zur Unsicherheit der Leistung während der Transiente liefern. Für eine Auswahl von Nukliden und Reaktionen zeigt Abb. 6.9 die multiplen quadrierten Korrelationskoeffizienten R^2 mit den entsprechenden Konfidenzintervallen und Signifikanzbändern. Einen wesentlichen Beitrag liefern die Unsicherheiten der elastischen und der inelastischen Streuung von U-238. Weitere Beiträge liefern die Unsicherheiten des Spaltspektrums von U-235, der elastischen Streuung von H-1 und der Ausbeute der verzögerten Neutronen von U-235. Während der Steuerstabbewegung nehmen die Anteile der Unsicherheiten der elastischen und der inelastischen Streuung von U-238 an der gesamten Unsicherheit zu, während die Anteile der anderen Nuklidreaktionen abnehmen. Insgesamt lässt sich somit für die Analyse von Transienten feststellen, dass die Unsicherheiten in den nuklearen Daten-

bibliotheken einen signifikanten Einfluss auf das Maximum der Leistung und den anschließenden Verlauf nach dem Maximum haben.

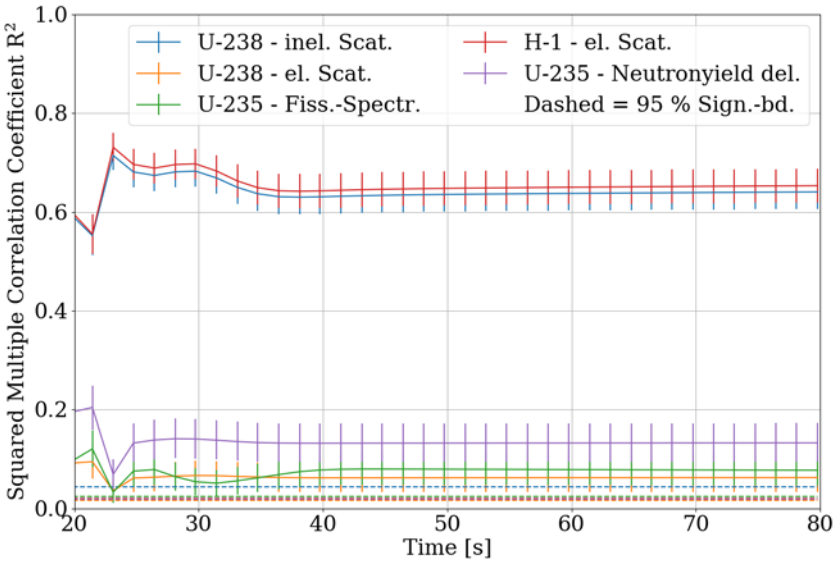

Abb. 6.9 Verlauf der Hauptbeiträge zur totalen Unsicherheit der Leistung für die Transiente des TMI-1-Minikerns

Zur Modellierung des SPERT-III-Kerns mit den entsprechenden Neutronentransportprogrammen wurde zunächst eine Literaturrecherche durchgeführt, um eine detaillierte Beschreibung der Geometrie und Materialzusammensetzungen zu erhalten. Hierzu eignen sich die Spezifikation des UAM-LWR-Benchmarks Phase II /POR 16/, die IAEA Technical Reports Series No. 480 „Research Reactor Benchmarking Database: Facility Specification and Experimental Data“ /OLS 15/ und der technische Bericht „SPERT III Reactor Facility E-Core Revision“, IDO-17036, /DUG 65/. Die SPERT-III-Experimente wurden in den USA durchgeführt, mit dem Zweck das dynamische Verhalten von Druckwasserreaktor-ähnlichen Reaktorkernen bei Reaktivitätszufuhr zu untersuchen. Der Kern besteht aus insgesamt 60 Brennelementen und hat eine aktive Länge von 97.28 cm. Von den 60 Brennelementen bestehen 48 aus einem 5x5-Brennstabgitter und 12 aus einem 4x4-Brennstabgitter. Von den 4x4-Brennelementen können 8 aus dem Kern herausgezogen werden, wobei an deren Stelle dann Steuerelemente in den Kern einfahren. Diese Steuerelemente sind als Vierkant-Hohlprofil ausgeführt und bestehen aus Edelstahl mit 1.35 % B-10. Darüber hinaus befindet sich in der Mitte des Kerns ein kreuzförmiger Steuerstab aus dem gleichen neutronenabsorbierenden Edelstahl. Der Brennstoff bei allen Brennelementen besteht aus UO_2 mit einer U-235 Anreicherung von 4.8 %. Um eine Referenzlösung für den stationären Ausgangszustand der Transienten zu erhalten, wurde zunächst ein Modell für das Monte-Carlo-

Neutronentransportprogramm Serpent erstellt. Anhand der Geometrie- und Materialspezifikationen wurde der Reaktorkern mit dem umgebenden Reaktordruckbehälter und der oberen und unteren Gitterplatte modelliert. In Abb. 6.10 ist ein horizontaler Schnitt und in Abb. 6.11 ein vertikaler Schnitt durch den Kern dargestellt.

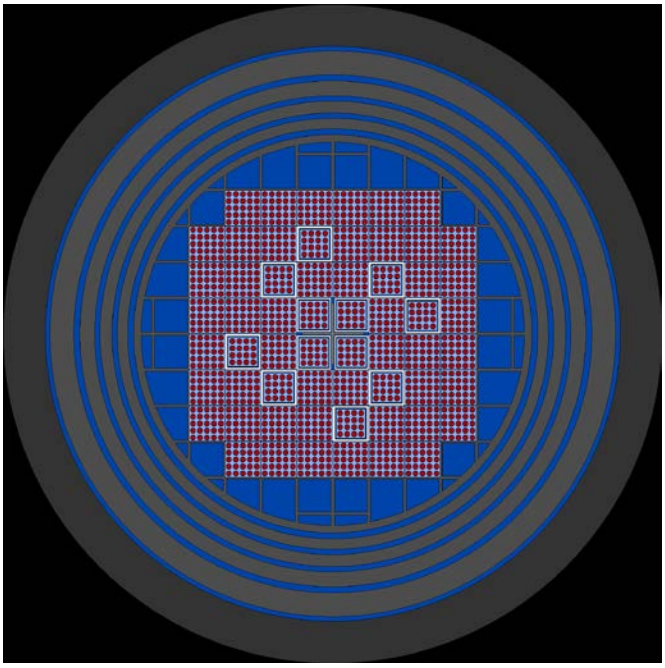

Abb. 6.10 Horizontaler Schnitt durch den SPERT-III-Kern

Die 8 Steuerelemente und der kreuzförmige Steuerstab wurden als verfahrbare Einheiten implementiert.

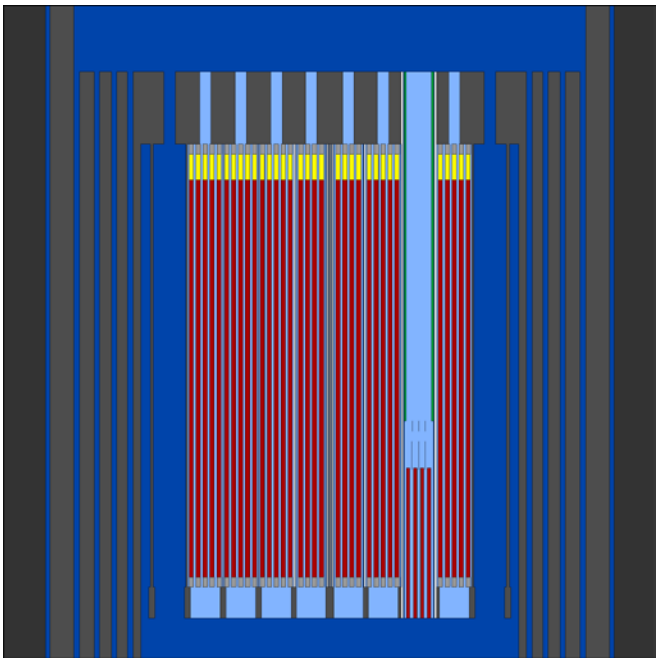

Abb. 6.11 Vertikaler Schnitt durch den SPERT-III-Kern

Für die gekoppelten Neutronenkinetik-/Thermohydraulik-Simulationen mit dem Programmsystem QUABOX/CUBBOX-ATHLET wurden zunächst für die verschiedenen Brennelementtypen und Reflektoren Modelle im unendlichen Gitter für das Programm Serpent erstellt und somit homogenisierte Wirkungsquerschnitte berechnet. Dabei wurde folgende Verzweigungsstruktur für die thermohydraulischen Parameter benutzt: i) Brennstofftemperatur (K): 294.0, 500.0, 700.0, 900.0, 1100.0, 1300.0; ii) Moderatordichte (g/cm^3): 0.95863, 0.97126, 0.98276, 0.99189, 0.99803. Für vollständig gezogene Steuerelemente zeigt Tab. 6.1 die Multiplikationsfaktoren der Serpent-Referenzrechnung und der gekoppelten Rechnung, die für den kalten Zustand (Kühlmitteltemperatur und Brennstofftemperatur bei 294 Kelvin) durchgeführt wurden. Bei Vergleich mit Ergebnissen in der Literatur /KNE 16/ ist bei beiden Rechnungen eine gute Übereinstimmung zu erkennen.

Die kritische Einfahrhöhe der 8 Steuerelemente bei vollständig gezogenem Steuerstab für beide Modelle ist ebenfalls in Tab. 6.1 angegeben. Das Serpent-Referenzergebnis weicht um 1.164 cm von der experimentell gemessenen Einfahrhöhe von 37.084 cm ab. Aufgrund der durchgeführten Vereinfachungen weist die Q/C-ATHLET-Rechnung eine deutlich niedrigere kritische Einfahrhöhe auf.

Tab. 6.1 Multiplikationsfaktor und kritische Steuerstabstellung für den SPERT-III-Kern

	Serpent-Referenz	**Q/C-ATHLET**
Multiplikationsfaktor	1.11724	1.11184
Kritische Einfahrhöhe (cm)	38.248	29.136

Für die Analyse der spezifizierten Transienten wurde ein Q/C-ATHLET-Eingabedatensatz mit Steuerstabbewegung erstellt. In der Literatur zu den Experimenten sind keine Steuerstabstellungen dokumentiert, so dass zuerst mit den 8 Steuerelementen eine kritische Steuerstabstellung bei ausgefahrenem kreuzförmigem Steuerstab gesucht werden musste. Anschließend wurde der kreuzförmige Steuerstab um eine Höhe eingefahren, die der gewünschten Reaktivitätszufuhr der Transiente entspricht. Durch erneutes Verfahren der 8 Steuerelemente wurde der unterkritische Reaktor wieder kritisch gemacht. Die Transiente wurde nun durch einen Auswurf des kreuzförmigen Steuerstabs verursacht. Zur Nachrechnung des Experiments 43, welches eine prompt überkritische Transiente mit 1.2 $ Reaktivitätszufuhr ist, wurde der Steuerstab innerhalb von 0.08 s von seiner Einfahrhöhe von 13.7 cm vollständig aus dem Reaktor aus-

gefahren. Der im Experiment ermittelte Verlauf der Leistung, bestehend aus einem prompten Anstieg von 50 W auf 280 MW und einer anschließenden Abnahme durch negative Rückwirkungen, konnte nicht nachgebildet werden. Weitere Studien anderer Transienten von SPERT-III und auch eines anderen kleinen DWR-Kerns mit einer Nodalisierung ähnlich zu der des SPERT-III-Kerns waren ohne Erfolg, sodass vermutet wird, dass Q/C bei einer Nodegröße, welche deutlich kleiner als die Kantenlänge eines üblichen Brennelements ist, Probleme bei der Zeitintegration hat.

6.2 Systematische Unsicherheitsanalysen für schnelle Reaktorsysteme

Bezüglich einer Plattform für systematische Unsicherheitsanalysen schneller Reaktorsysteme (UAM-FR) wurde ein Plan zur Vorgehensweise erstellt. In Analogie zum UAM-LWR Benchmark /IVA 16/ sollen systematische Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen schneller Reaktorsysteme auf unterschiedlichen Ebenen durchgeführt werden. In Benchmark-Spezifikationen (Anhang B33) werden die Analysen von Brennstabzellen, gefolgt von Brennelementen und ganzen Reaktorkernen für bestimmte Kerndesigns beschrieben, d. h. die Geometrien werden beschrieben und die geforderten Ausgabegrößen werden definiert. Der Fokus liegt derzeit auf Natrium-gekühlten Systemen basierend auf dem großen oxydischen und mittleren metallischen Reaktorkerndesign aus dem UAM-SFR-Benchmark, siehe Anhang B23. Zusätzlich zur Beschreibung der theoretischen Aufgaben werden Berechnungen von passenden Experimenten zur Validierung der angewandten Methoden vorgeschlagen. Die Experimente wurden auf Basis von Korrelationsrechnungen mit SCALE/TSUNAMI-IP zwischen den Brennelementen und ICSBEP-Experimenten ausgewählt: Zwei Experimente mit sehr hohen Korrelationsfaktoren, für die außer dem Multiplikationsfaktor auch Natrium-Void-Daten vorliegen, wurden hierfür ausgewählt. In Abstimmung mit dem technischen Komitee des UAM-SFR-Benchmarks werden die von der GRS vorgeschlagenen Unteraufgaben als Erweiterung in die UAM-SFR-Benchmark-Spezifikationen aufgenommen.

Tab. 6.2 Ergebnisse der Nominalrechnungen für die SFR-Reaktorkerne mit SCALE/KENO-VI

Reaktorkern		**MOX3600**		**MET1000**	
Wirkungsquerschnittsbibliothek		CE	302g	CE	302g
k_{eff}		1.0164	1.0194	1.0197	1.0223
β_{eff}	[pcm]	344	-	324	-
Absorberreaktivität (total)	[pcm]	-6218	-6242	-9796	-9801
Absorberreaktivität (5cm)	[pcm]	-134	-140	-232	-233
Doppler-Reaktivität	[pcm]	-848	-886	-378	-398
Na-Void-Reaktivität	[pcm]	1677	1650	1370	1464
1 % Natrium	[pcm/K]	0.523	-	0.362	-
1 % Wrapper	[pcm/K]	0.021	0.019	0.023	0.022
1 % Cladding	[pcm/K]	0.043	0.045	0.049	0.047
1 % Brennstoff	[pcm/K]	-0.295	-0.298	-0.567	-0.553
1 % Fuel + Axial	[pcm/K]	-0.125	-0.119	-0.277	-0.271
1 % Gitter	[pcm/K]	-0.757	-0.745	-1.093	-1.081

Nach Literaturrecherche und dem Austausch mit Wissenschaftlern anderer Forschungsinstitute wurde entschieden, in einem ersten Schritt neue Multigruppen-Wirkungsquerschnittsbibliotheken und Kovarianzdaten mit einer Energiegruppenstruktur und Wichtung optimiert für schnelle Reaktorsysteme zu entwickeln, da die verfügbaren Gruppenstrukturen in SCALE für thermische Systeme optimiert wurden. Diese Bibliotheken dienen als Basis der geplanten Unsicherheitsanalysen für schnelle Reaktorsysteme. Die Multigruppen- und die Kovarianzbibliotheken wurden daher für schnelle Systeme erzeugt und an einfachen Modellen getestet (siehe Abschnitt 5.1 und 5.2).

Als Basis für die späteren Unsicherheitsanalysen mit XSUSA wurden Nominalrechnungen der Ganzkerne entsprechend der aktuellen Benchmark-Spezifikationen mit SCALE/KENO-VI unter Verwendung von Daten kontinuierlicher Energiedarstellung (CE) bzw. der neuen Multigruppen-Wirkungsquerschnittsbibliothek durchgeführt und mit den Ergebnissen der anderen Benchmark-Teilnehmer verglichen, siehe Anhang B31. Die Ergebnisse sind in Tab. 6.2 dargestellt. Da die Änderung der Natriumdichte um 1 % nur eine sehr geringe Reaktivitätsänderung bewirkt, welche mit der Monte-Carlo-Methode nur schwer erfasst werden kann, konnte diese Reaktivität mit der

KENO-VI-Multigruppenrechnung nicht bestimmt werden. Im Falle von KENO-VI mit CE-Daten wurde der Effekt mittels Störungstheorie bestimmt, indem TSUNAMI-CE angewendet wurde, um die Sensitivität des Eigenwerts gegenüber der Änderung der Natriumdichte um 1 % im Brennelement zu bestimmen und daraus die Reaktivität zu ermitteln. Die Ergebnisse stimmen sehr gut mit denen der anderen Benchmark-Teilnehmer überein.

Erste Unsicherheitsanalysen bezüglich der Unsicherheit in den nuklearen Daten wurden mit XSUSA und TSUNAMI-3D durchgeführt. Hierfür wurden die neue 302-Gruppen-Wirkungsquerschnittsbibliothek und die neue 19-Gruppen-Kovariazbibliothek verwendet, die speziell für schnelle Systeme erzeugt wurden (siehe Abschnitt 5.1 und 5.2). Zur Beschreibung des Neutronentransports wurde der Monte-Carlo-Code KENO-VI eingesetzt. Damit wurden die Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren der Stabzellen und Brennelemente aus der Benchmark-Spezifikation berechnet. Für Ganzkernsimulationen wurden vereinfachte Modelle für den MET1000- und den MOX3600-Reaktorkern erstellt, bei denen die axiale Abhängigkeit vernachlässigt wurde. Diese sind in Abb. 6.12 und Abb. 6.13 dargestellt.

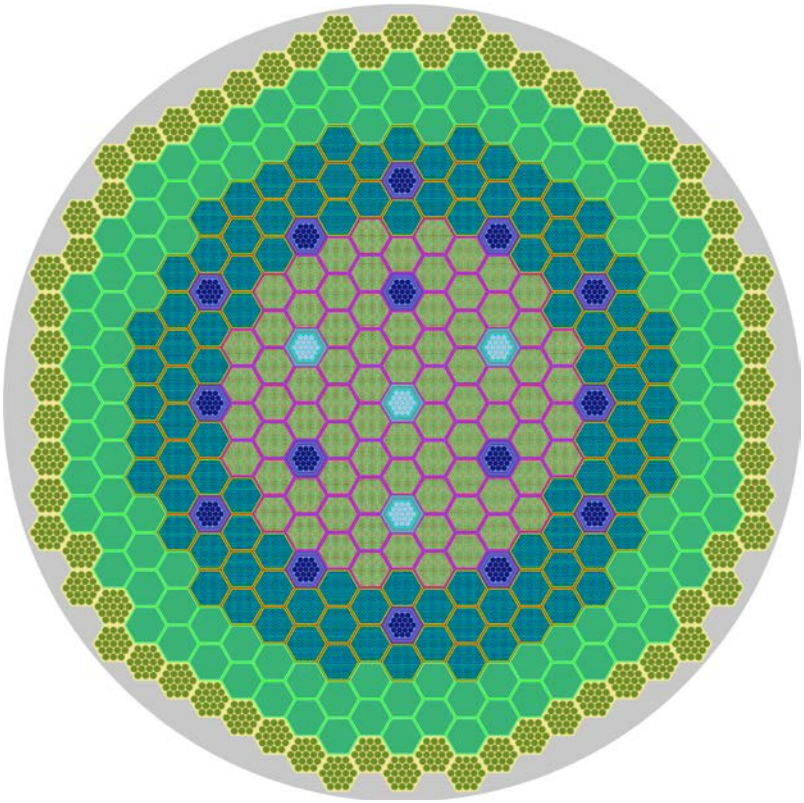

Abb. 6.12 KENO-VI-Modell des MET1000-Reaktorkerns

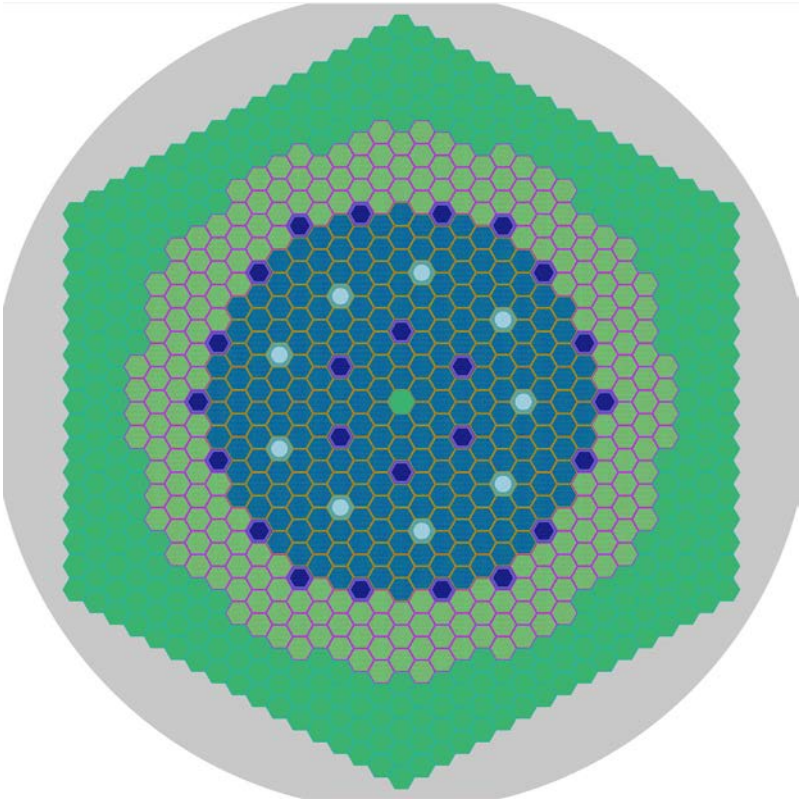

Abb. 6.13 KENO-VI-Modell des MOX3600-Reaktorkerns

Die Ergebnisse für die MET1000-Anordnungen sind in Tab. 6.3 aufgelistet. Diese betreffen die Nominalwerte sowie die Unsicherheiten für die Multiplikationsfaktoren der Stabzelle, des Brennelements und die Ganzkernanordnung, sowie den Reaktivitätswert aller Absorberelemente und den Natrium-Void-Reaktivitätswert für die Ganzkernanordnung. Für die Ermittlung der Reaktivitätswerte werden die Absorberelemente in der Rechnung durch Natrium ersetzt, bzw. das Natrium aus dem Reaktorkern entfernt. Es ergibt sich sehr gute Übereinstimmung der mit TSUNAMI-3D und XSUSA unter Verwendung der 302-Gruppen-Wirkungsquerschnittsbibliothek und der 19-Gruppen-Kovariazbibliothek berechneten Werte.

Tab. 6.3 Nominalwerte und relative 1σ-Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren und der Absorber- und Natrium-Void-Reaktivitätswerte für die MET1000-Anordnungen aus TSUNAMI-3D und XSUSA/KENO-VI

	Nominalwert	**Unsicher-heit TSUNAMI**	**Unsicher-heit XSUSA**
Multiplikationsfaktor Stabzelle	1.36107	1.51 %	1.55 %
Multiplikationsfaktor Brennelement	1.28550	1.38 %	1.42 %
Multiplikationsfaktor Ganzkern	0.99453	1.41 %	1.42 %
Absorber-Reaktivität Ganzkern (pcm)	13928	2.64 %	2.77 %
Na-Void-Reaktivität Ganzkern (pcm)	4590	5.82 %	5.84 %

Weitere systematische Unsicherheitsanalysen für alle Aufgaben der Benchmark-Spezifikation, Anhang B33, sollen mit XSUSA in Kombination mit Neutronentransportcodes aus dem SCALE-Codepaket durchgeführt und die Ergebnisse soweit möglich mit entsprechenden TSUNAMI-Ergebnissen verglichen werden. Die Unsicherheiten von sicherheitsrelevanten Systemgrößen wie dem Multiplikationsfaktor und Reaktivitätskoeffizienten werden dabei berechnet. Dies betrifft insbesondere die Propagation der Unsicherheiten durch die vollständige Berechnungssequenz zum Zweck von Kernsimulationen mit einem nodalen Diffusionscode. Jede Unsicherheitsanalyse wird durch eine zugehörige Sensitivitätsanalyse begleitet, in welcher die Nuklidreaktionen mit dem größten Beitrag zur Ergebnisgrößenunsicherheit ermittelt werden. Ursprünglich war vorgesehen, diese Ganzkernsimulationen mit den in SCALE 6.2 vorhandenen Wirkungsquerschnittsbibliotheken und Kovarianzbibliotheken durchzuführen. Nachdem sich herausgestellt hatte, dass diese Daten zur Beschreibung schneller Systeme nur bedingt geeignet sind, wurden zuerst für schnelle Systeme optimierte Datenbibliotheken erstellt und validiert, siehe Abschnitt 5.1 und 5.2. Die Durchführung systematischer Unsicherheitsanalysen für die vollständige Berechnungssequenz mit diesen Bibliotheken soll in einem Anschlussvorhaben durchgeführt werden.

6.3 Weiterentwicklung der Sampling-basierten XSUSA-Methodik

XSUSA-Validierungsmatrix

Zur Validierung von XSUSA zum momentanen Entwicklungsstand wurde eine Test–Matrix erstellt, deren Elemente einen weiten Bereich von Neutronenspektren, Materialzusammensetzungen und Geometrien abdecken. Gegenwärtig erfolgt die Validierung durch Vergleich von Unsicherheiten von integralen Größen (Multiplikationsfaktor, Reaktivitätswerte, Reaktionsraten, …) mit entsprechenden Ergebnissen des SCALE-Moduls TSUNAMI. In der Zukunft kann die Testmatrix verwendet werden, um weitergehende Ergebnisgrößen zu überprüfen, etwa Unsicherheiten für lokale Größen wie Leistungsverteilungen, oder Sensitivitäten. Die Testmatrix wird auch für XSUSA-Weiterentwicklungen herangezogen, wie z.B. dem Übergang zu einer variablen Energiegruppenstruktur. Die folgenden Ergebnisse beziehen sich auf die Implementierung XSUSA/SCALE 6.1, mit den 238-Gruppen-Wirkungsquerschnitten und den 44-Gruppen-Kovarianzdaten. Entsprechende Ergebnisse für die neue Implementierung XSUSA/SCALE 6.2 werden in Abschnitt 6.4 dargestellt.

Tab. 6.4 Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren sphärischer Anordnungen

	TSUNAMI	**XSUSA**
GODIVA	1.074 %	1.059 %
JEZEBEL	1.389 %	1.427 %
TOPSY	1.281 %	1.277 %
POPSY	1.253 %	1.286 %
LEU-SOL-THERM-002, Fall 1	0.536 %	0.512 %
HEU-SOL-THERM-009, Fall 1	0.900 %	0.860 %
PU-SOL-THERM-011, Fall 16-1	1.476 %	1.481 %
U233-SOL-THERM-005, Fall 1	0.889 %	0.879 %

In Tab. 6.4 sind die Ergebnisse für die Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren sphärischer Anordnungen angegeben, und in Tab. 6.5 die Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren von Stabzellen in eindimensionaler zylindrischer Darstellung. Für beide Kategorien wurde als Transportprogramm der eindimensionale S_N-Code XSDRN verwendet. Eine Zusammenfassung der Ergebnisse ist graphisch in Abb. 6.14 dargestellt.

Tab. 6.5 Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren von Stabzellen

	TSUNAMI	XSUSA
KRITZ-2:1-Stabzelle	0.590 %	0.581 %
KRITZ-2:19-Stabzelle	1.124 %	1.098 %
SFR-Stabzelle	1.917 %	1.937 %
GFR-Stabzelle	2.243 %	2.309 %
IMF-Stabzelle	1.137 %	1.113 %

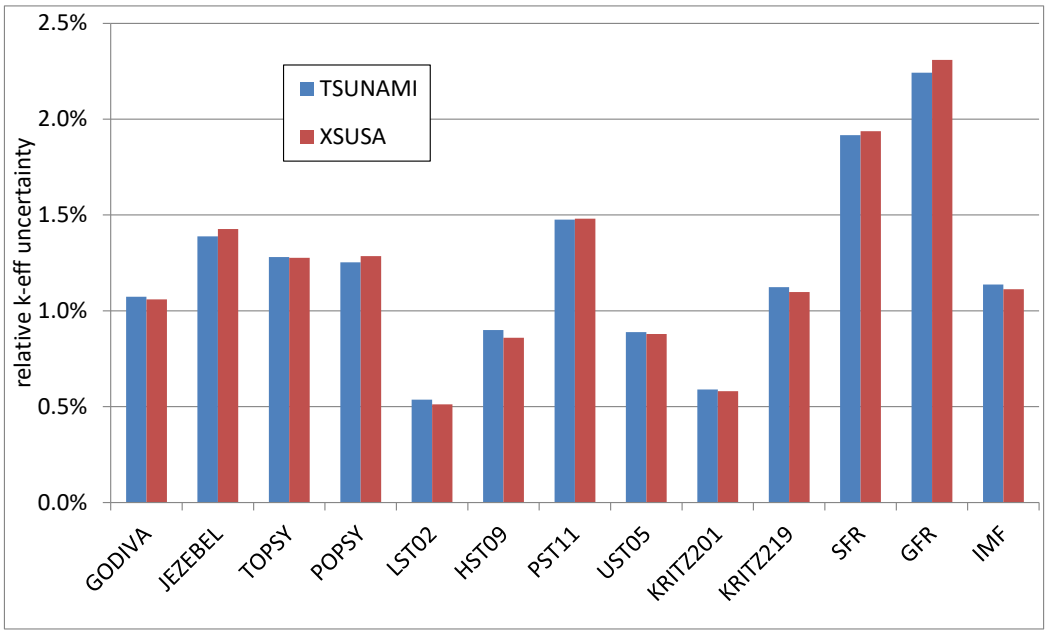

Abb. 6.14 Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren von eindimensionalen Anordnungen

Für die Stabzellanordnungen wurden Unsicherheiten für verschiedene weitere Größen ausgewertet, nämlich für energieintegrierte mikroskopische Wirkungsquerschnitte für Neutroneneinfang und Spaltung, sowie die Natrium-Void-Reaktivität und die Brennstofftemperatur-Reaktivität. Die Ergebnisse für die SFR-Stabzelle sind in Abb. 6.15 dargestellt. Weitere Vergleiche sind in einer technischen Notiz (Anhang A01) zusammengestellt. Für alle betrachteten Größen ergibt sich ausgezeichnete Übereinstimmung zwischen den TSUNAMI- und den XSUSA-Ergebnissen

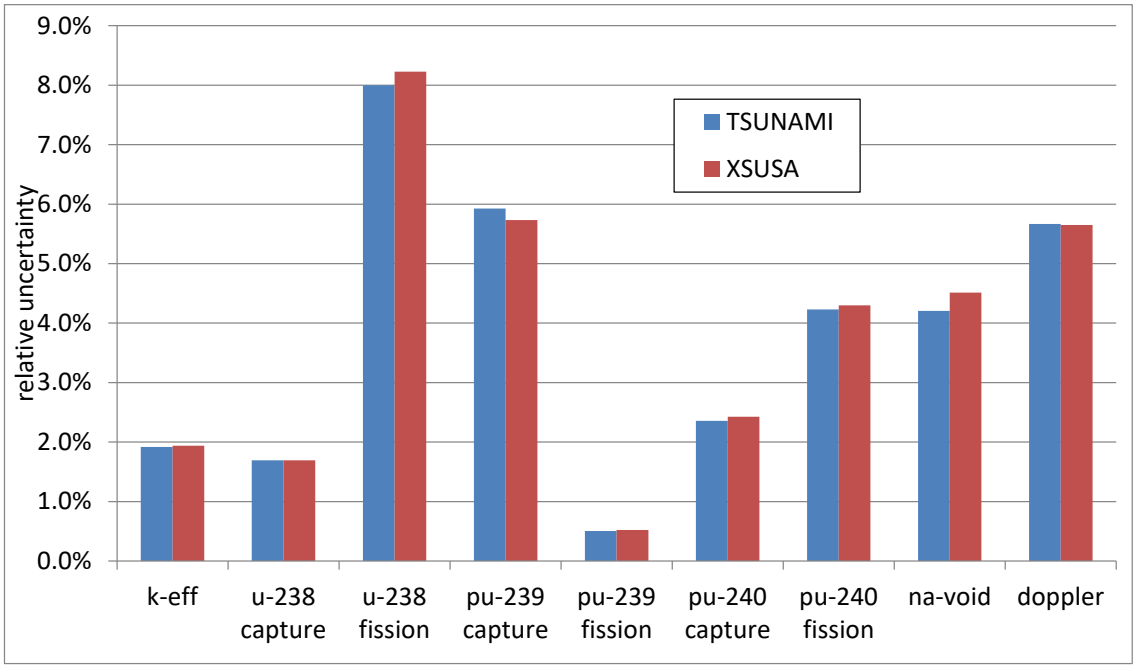

Abb. 6.15 Unsicherheiten des Multiplikationsfaktors, von energieintegrierten Wirkungsquerschnitten und Reaktivitätskoeffizienten der SFR-Stabzelle

Tab. 6.6 Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren von kritischen Anordnungen in dreidimensionaler Darstellung

	TSUNAMI	**XSUSA**
VENUS-7b	0.635 %	0.647 %
VENUS-9/1	0.623 %	0.635 %
VENUS-1	0.552 %	0.540 %
VENUS-2	0.528 %	0.518 %
KRITZ-2:1 (kalt)	0.582 %	0.580 %
KRITZ-2:13 (kalt)	0.538 %	0.536 %
KRITZ-2:19 (kalt)	1.175 %	1.158 %
B&W Beladung 2	0.461 %	0.450 %
U9	2.694 %	2.670 %

Ergebnisse für die Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren aus dreidimensionalen Berechnungen von kritischen Anordnungen mit dem Monte-Carlo-Transportcode KENO sind in Tab. 6.6 aufgelistet. Wiederum ergibt sich ausgezeichnete Übereinstimmung zwischen den TSUNAMI- und den XSUSA-Ergebnissen.

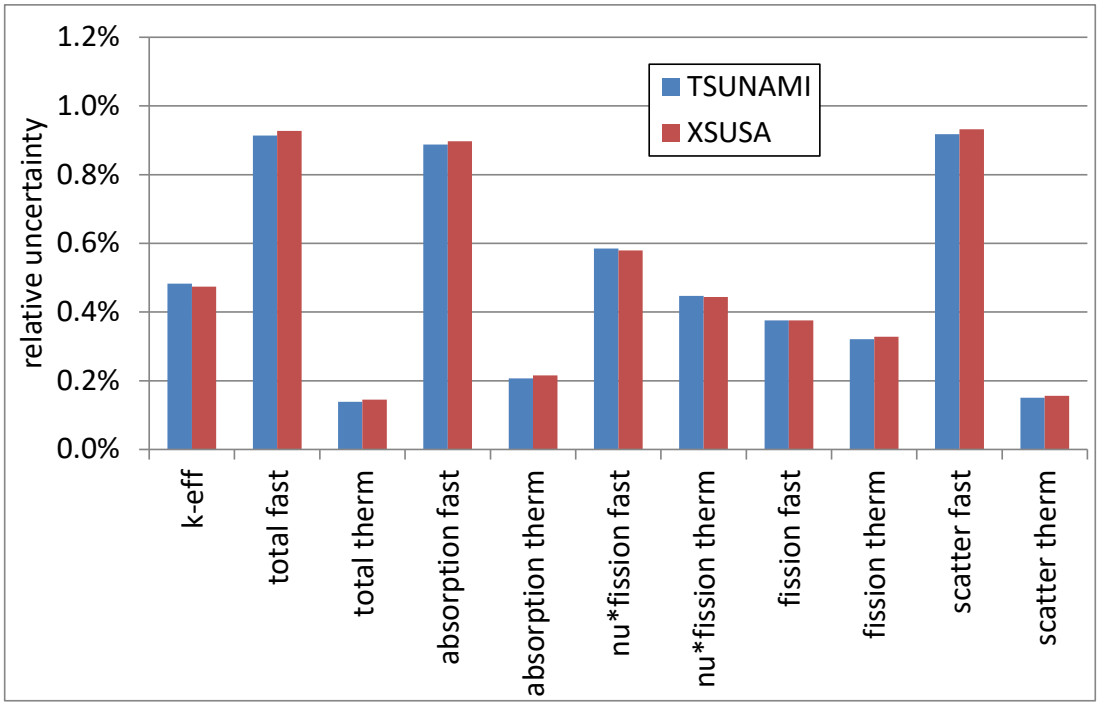

Abb. 6.16 Unsicherheiten des Multiplikationsfaktors und von 2-Gruppen-Wirkungsquerschnitten für das TMI-1-Brennelement

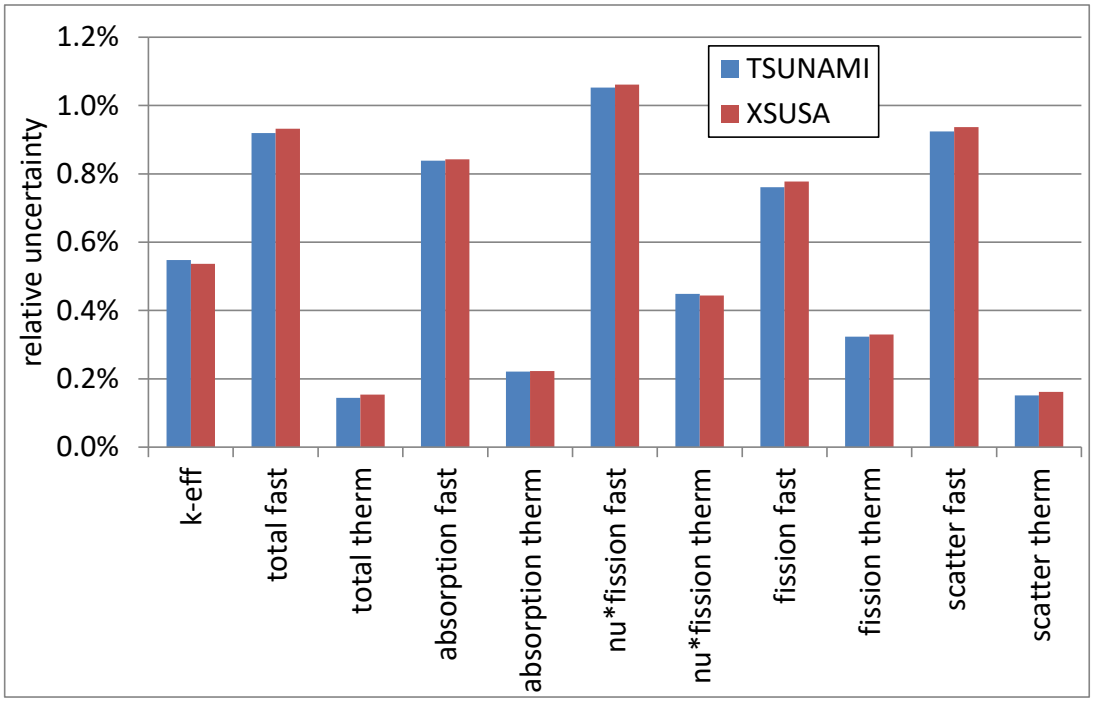

Abb. 6.17 Unsicherheiten des Multiplikationsfaktors und von 2-Gruppen-Wirkungsquerschnitten für das PB-2-Brennelement

Schließlich wurden Brennelemente betrachtet, für die Unsicherheitsanalysen in Abbrandberechnungen mit der SCALE-Abbrandsequenz TRITON in zweidimensionaler

Darstellung durchgeführt wurden. Zum Vergleich mit TSUNAMI können dabei nur die frischen Zustände herangezogen werden, da TSUNAMI nicht für Unsicherheitsanalysen in Abbrandberechnungen geeignet ist. Hier sind auch Unsicherheiten in den homogenisierten makroskopischen Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten, die in nachfolgenden Kernsimulationen verwendet werden können, von Bedeutung. Unsicherheiten in diesen Größen lassen sich mit TSUNAMI mittels verallgemeinerter Störungstheorie berechnen. Für die Testmatrix wurden ein DWR-Brennelement und ein SWR-Brennelement ausgewählt, und zwar die beiden im UAM-Benchmark spezifizierten Fälle Three Mile Island 1 (TMI-1) und Peach Bottom 2 (PB-2) /POR 16/. Die Wirkungsquerschnitte wurden in zwei Energiegruppen berechnet, mit einer thermischen Grenze von 0.625 eV. Die entsprechenden Ergebnisvergleiche sind in Abb. 6.16 für das TMI-1-Brennelement und in Abb. 6.17 für das PB-2-Brennelement dargestellt. Zunächst zeigt sich, dass sich für thermische Systeme die Unsicherheiten in einem moderaten Bereich bewegen, mit einer Größe für die relative 1σ-Unsicherheit von etwa 1 %. Insgesamt sind die jeweiligen Größen für das DWR- und das SWR-Brennelement sehr ähnlich, mit Ausnahme des Spaltwirkungsquerschnitts und entsprechend des mit der mittleren Anzahl von Spaltneutronen multiplizierten Spaltwirkungsquerschnitts in der schnellen Energiegruppe („fission fast“ und „nu*fission fast“ in Abb. 6.16 und Abb. 6.17). Auch hier ergibt sich wieder ausgezeichnete Übereinstimmung zwischen TSUNAMI und XSUSA in allen untersuchten Ergebnisgrößen.

Unsicherheiten in den Daten verzögerter Neutronen

Die Unsicherheiten in den nuklearen Daten beeinflussen über die Unsicherheiten in den in Brennelementrechnungen erzeugten homogenisierten Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten (siehe Abb. 6.16 und Abb. 6.17) die Unsicherheiten in den damit durchgeführten Kernsimulationen. Bei Transientenanalysen spielen für den zeitlichen Ablauf der Transiente zusätzlich kinetische Parameter eine wichtige Rolle, insbesondere der Anteil der verzögerten Neutronen. Dieser wiederum hängt stark vom verzögerten Anteil der mittleren Anzahl von Spaltneutronen in den mikroskopischen nuklearen Basisdaten ab. Um die Unsicherheiten von Kerntransienten zu ermitteln, ist es also wichtig, die Unsicherheit der mittleren Anzahl von verzögerten Spaltneutronen zu berücksichtigen. Die in SCALE 6.1 enthaltenen Kovarianzdaten enthalten nur die Unsicherheiten der gesamten mittleren Anzahl von Spaltneutronen, nicht jedoch individuell des prompten und verzögerten Anteils. Deshalb wurden im Vorhaben RS1503 separate Kovarianzdaten für den verzögerten Anteil prozessiert /ZWE 15/; dazu wurden die evaluierten

JENDL-4.0-Daten /SHI 11/ herangezogen, da diese einen umfangreichen Satz von entsprechenden Unsicherheitsdaten für die wichtigsten Aktiniden beinhalten. Im laufenden Vorhaben wurde das Modul CLAROLPLUS, welches die für die Transportrechnungen verwendeten Multigruppen-Daten entsprechend den zuvor erzeugten Variationsparametern modifiziert, so angepasst, dass nun auch Variationen der mittleren Anzahl von verzögerten Spaltneutronen automatisch berücksichtigt werden können. Wenn also individuelle Variationsparameter für Variationen die mittleren Anzahlen von prompten und verzögerten Spaltneutronen im verwendeten Datensatz vorhanden sind, werden diese separat variiert; andernfalls wird wie bisher nur die gesamte mittlere Anzahl von Spaltneutronen variiert.

Mit diesen Änderungen wurden mit XSUSA Unsicherheitsanalysen für Brennelement-Abbrandberechnungen mit der SCALE-Sequenz TRITON durchgeführt; der dabei verwendete Gittercode erzeugt neben Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten auch kinetische Parameter. Die entsprechenden Ergebnisse für den Anteil der verzögerten Neutronen wurden ausgewertet und mit Ergebnissen verglichen, bei denen nur die Unsicherheiten der gesamten mittleren Anzahlen von Spaltneutronen berücksichtigt sind.

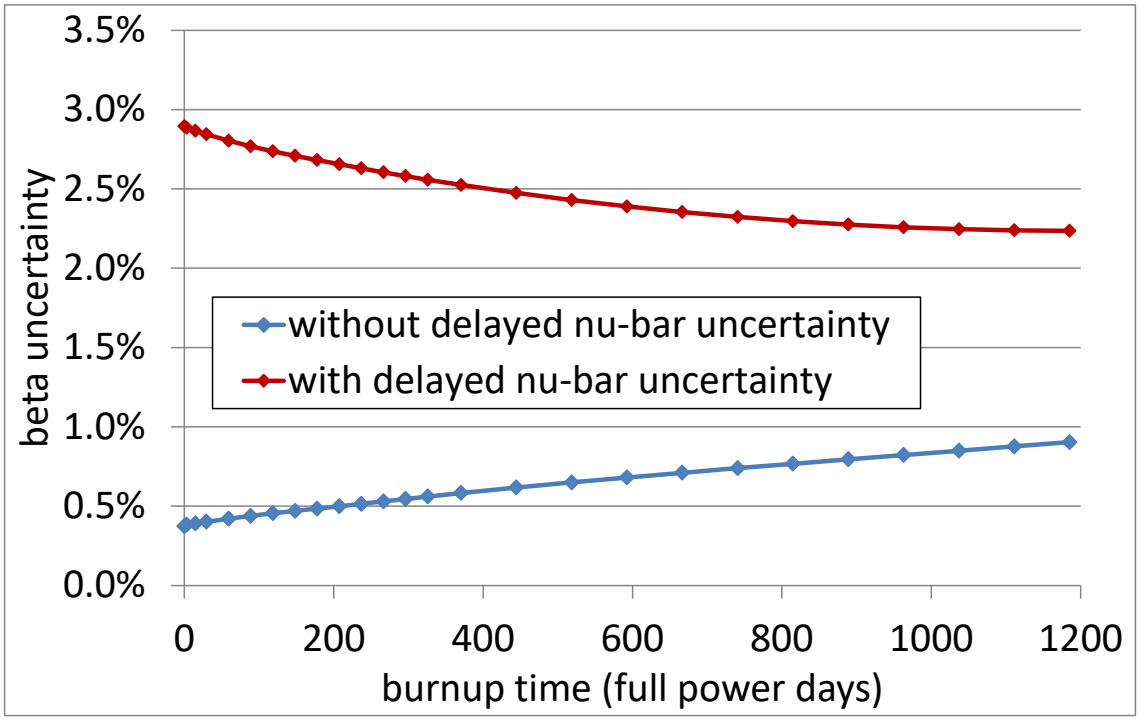

Abb. 6.18 Unsicherheiten des Anteils der verzögerten Neutronen für ein DWR-Brennelement als Funktion der Abbrandzeit

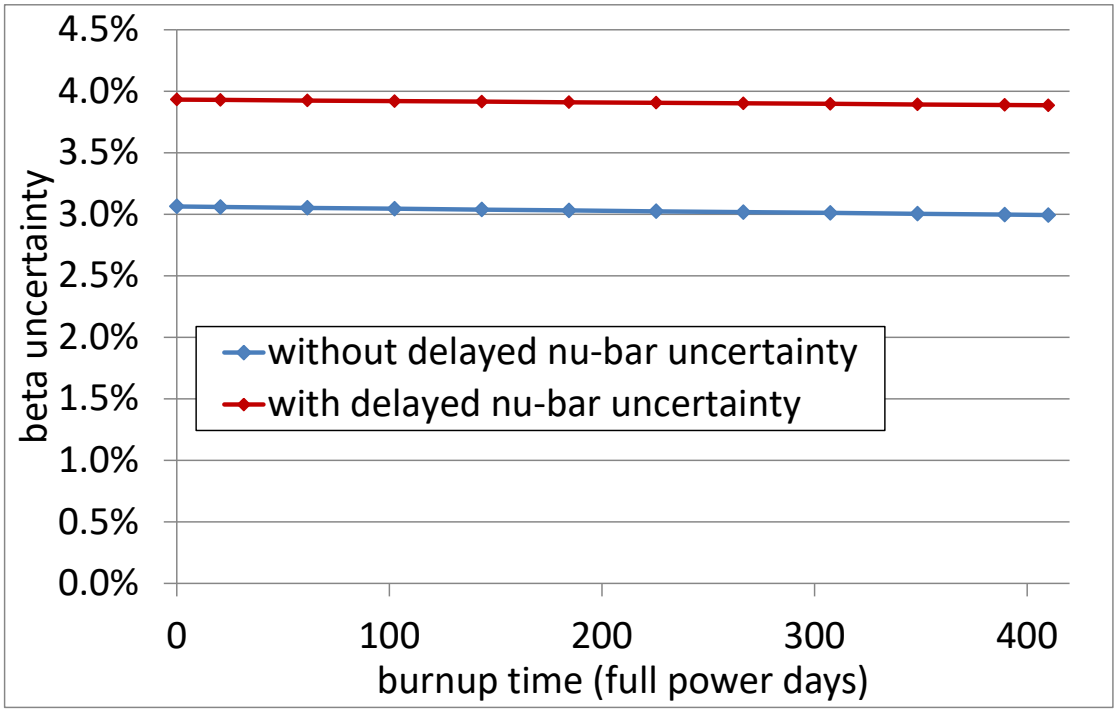

Abb. 6.19 Unsicherheiten des Anteils der verzögerten Neutronen für ein SFR-Brennelement als Funktion der Abbrandzeit

Die Ergebnisse sind in Abb. 6.18 für ein DWR-Brennelement (TMI-1) und in Abb. 6.19 für ein SFR-Brennelement aus dem SFR-FT-Benchmark dargestellt. Es ist ersichtlich, dass für das DWR-Brennelement die Einbeziehung der Unsicherheiten in der mittleren Anzahl der verzögerten Spaltneutronen die Unsicherheit des Anteils der verzögerten Neutronen um mehr als den Faktor zwei erhöht; der Anstieg während etwa der ersten Hälfte der Abbrandzeit ist sogar wesentlich höher. Für das SFR-Brennelement ist die Situation ganz anders: Hier ist die Abbrandabhängigkeit der Unsicherheiten schwach, da sich die Isotopenzusammensetzung nur geringfügig mit dem Abbrand ändert. Der Hauptunterschied zu den LWR-Fällen besteht darin, dass die Unsicherheit des Anteils der verzögerten Neutronen ohne die Einbeziehung der Unsicherheiten in der mittleren Anzahl der verzögerten Spaltneutronen viel größer ist als beim DWR; dadurch ist die Zunahme, die durch diese verursacht wird, wesentlich kleiner. Dies bedeutet, dass die Unsicherheiten des Anteils der verzögerten Neutronen für die SFR-Anordnung am empfindlichsten gegenüber anderen Reaktionen sind. Eine systematische Sensitivitätsanalyse, die zum gegenwärtigen Zeitpunkt noch nicht vollständig abgeschlossen ist, ergibt, dass hier die Unsicherheit im inelastischen Streuquerschnitt den Hauptbeitrag liefert. Man beachte jedoch, dass der Beitrag der Unsicherheiten in der mittleren Anzahl der verzögerten Spaltneutronen immer noch dieselbe Größenordnung wie im Fall des DWR, nämlich ca. 2 – 2.5 %, aufweist.

Unsicherheitsanalysen mit XSUSA und PARTISN

Für manche Anwendungsfälle ist es wichtig, Transportberechnungen und die entsprechenden Unsicherheitsanalysen mit einem dreidimensionalen deterministischen Transportcode durchzuführen. Dies ist insbesondere dann der Fall, wenn mittels „Direct Perturbation“ Sensitivitätsprofile bestimmt werden sollen (unter „Direct Perturbation“ ist die Variation einer individuellen Reaktion um einen festen Betrag für jede einzelne Energiegruppe und die anschließende Auswertung des Einflusses auf eine Ergebnisgröße zu verstehen). In diesem Fall ist eine hohe Anzahl von Berechnungen nötig, wobei das Ergebnis jeder Berechnung nur einen sehr kleinen numerischen Fehler aufweisen darf; deshalb ist die Monte-Carlo-Methode hier weniger geeignet.

Da SCALE keinen dreidimensionalen deterministischen Transportcode beinhaltet, muss daher ein zusätzliches Programm in die Berechnungskette integriert werden. Dazu besonders geeignet ist der dreidimensionale S_N-Code PARTISN /ALC 08/; mit diesem besteht in der GRS langjährige Anwendungserfahrung. Die Berechnungskette wurde also dergestalt erweitert, dass zunächst innerhalb des SCALE-Systems resonanzselbstabgeschirmte Wirkungsquerschnitte erzeugt werden; für nachfolgende Unsicherheitsanalysen werden diese entsprechend variiert. Mit diesen Wirkungsquerschnitten werden anschließend die Transportrechnungen mit PARTISN durchgeführt, entweder für die Nominalrechnung direkt im Anschluss an die Resonanzselbstabschirmungsrechnung oder für die Variationsrechnung im Anschluss an die Wirkungsquerschnittsvariation. Da PARTISN diese Daten in einem speziellen Format benötigt, müssen zunächst die Wirkungsquerschnitte im SCALE-spezifischen AMPX-Format in das für PARTISN geeignete XSLIB-Format umgewandelt werden. Dazu existiert ein Transformationsprogramm, das im Rahmen eines früheren Forschungsvorhabens durch Anpassung eines SCALE-Moduls erzeugt wurde.

Eine Schwierigkeit besteht darin, dass PARTISN das Spaltspektrum nicht als Teil des Wirkungsquerschnittsdatensatzes erwartet, sondern als Teil des Eingabedatensatzes; der vom Anwender erstellte Eingabedatensatz muss also per Skript während der Ausführung der Berechnungskette modifiziert werden. Zusätzlich muss spezifische Information zu den Wirkungsquerschnittsdaten in den Eingabedatensatz übertragen werden. Alle diese Bearbeitungsschritte sind in einer Reihe von Skripten realisiert, so dass die Berechnungskette in einem Durchlauf ohne weitere Eingriffe des Anwenders ausgeführt werden kann. Ein entsprechendes Flussdiagramm für die Nominalrechnung ist in Abb. 6.20 dargestellt.

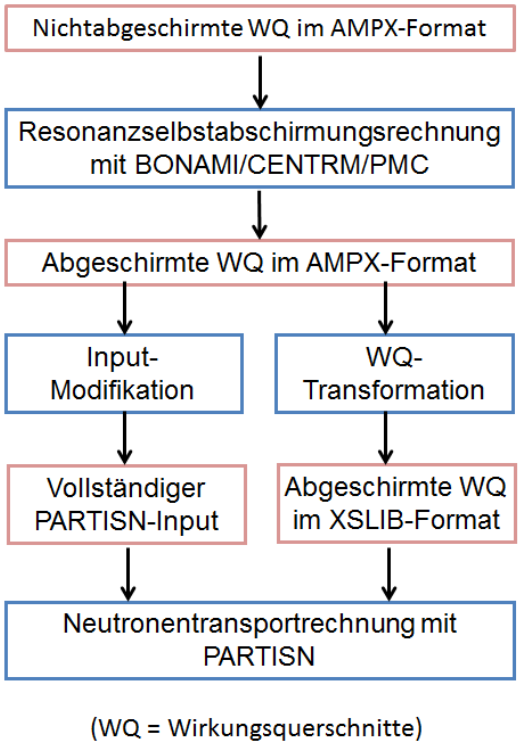

Abb. 6.20 Flussdiagramm für die SCALE/PARTISN-Berechnungskette

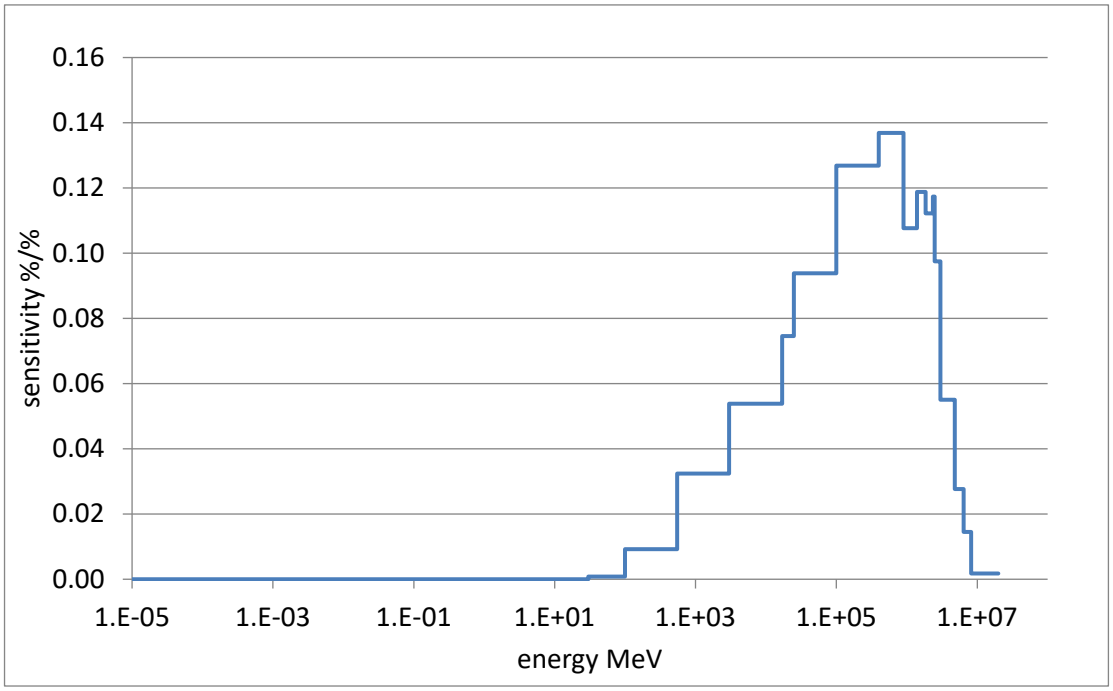

Abb. 6.21 Sensitivität des SNEAK-7A-Multiplikationsfaktors bezüglich der mittleren Anzahl von Spaltneutronen von Pu-239

Unsicherheitsanalysen mit XSUSA/SCALE/PARTISN wurden u. a. für die schnellen Anordnungen SNEAK-7A und SNEAK-7B /NEA 17/ durchgeführt, siehe auch Anhang B15. Dabei wurden, wie oben skizziert, energieabhängige Sensitivitäten mit der „Direct Perturbation“-Methode berechnet, aus denen sich dann durch Multiplikation mit der entsprechenden Kovarianzmatrix Beiträge zur Ergebnisunsicherheit bestimmen lassen. In Abb. 6.21 ist als Beispiel das Sensitivitätsprofil des Multiplikationsfaktors bezüglich der mittleren Anzahl von Spaltneutronen von Plutonium-239 für die Anordnung SNEAK-7A dargestellt. Es zeigt sich, dass die energieintegrierte Sensitivität von 0.782 in ausgezeichneter Übereinstimmung mit dem Ergebnis einer TSUNAMI-3d-Rechnung (7.86E-01 ± 2.24E-06) ist.

Unsicherheitsanalysen mit XSUSA und MCNP

In bestimmten Fällen ist es wünschenswert, Monte-Carlo-Transportrechnungen für kritische Anordnungen nicht mit den KENO-Modulen aus SCALE, sondern mit MCNP durchzuführen. Ein besonderer Grund kann folgender sein: Das ICSBEP-Handbuch /NEA 16/ und das IRPhEP-Handbuch /NEA 17/ enthalten für tausende von kritischen Experimenten fertige MCNP-Eingabedatensätze, die normalerweise für den Einsatz mit Wirkungsquerschnitten in kontinuierlicher Energiedarstellung vorgesehen sind. Diese Eingabedatensätze können mit geringen Änderungen mit XSUSA/MCNP verwendet werden, so dass es mit überschaubarem Aufwand möglich ist, Unsicherheitsanalysen für all diese kritischen Anordnungen durchzuführen.

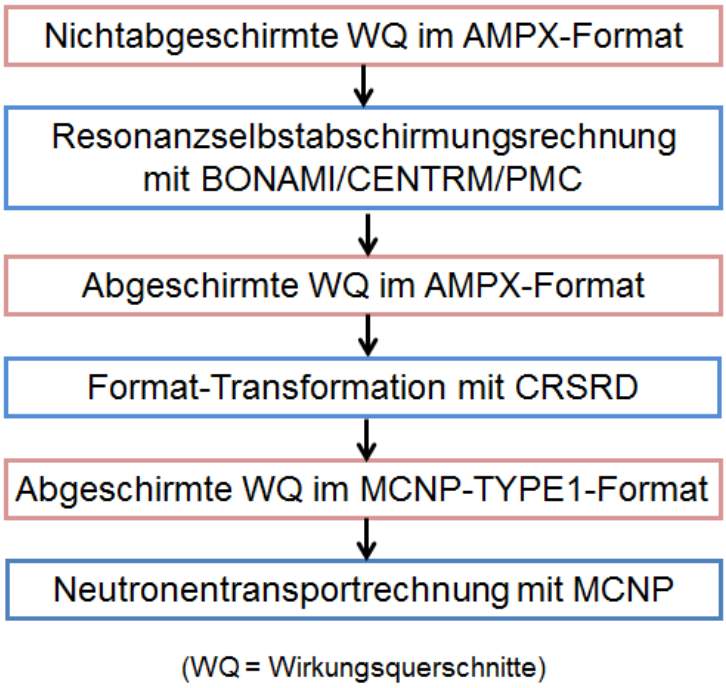

Abb. 6.22 Flussdiagramm für die SCALE/MCNP-Berechnungskette

Dazu wurde eine XSUSA/MCNP-Ablaufsequenz entwickelt. Dabei werden zunächst resonanzselbstabgeschirmte Wirkungsquerschnitte wie gewohnt mit SCALE im AMPX-Format erstellt und anschließend mit XSUSA variiert. Die Hauptaufgabe besteht nun darin, diese Daten für MCNP nutzbar zu machen. Dafür wird das Programm CRSRD /WAG 94/ herangezogen, welches in der Lage ist, Wirkungsquerschnitte in üblichen Formaten, darunter das AMPX-Format, in ein für Multigruppen-Rechnungen mit MCNP geeignetes Format zu transformieren. Anschließend werden die Kritikalitätsrechnungen mit MCNP durchgeführt. Ein entsprechendes Flussdiagramm für die Nominalrechnung ist in Abb. 6.22 dargestellt.

Diese Berechnungssequenz wurde anhand von Vergleichen mit TSUNAMI und XSUSA/SCALE überprüft, wobei für eindimensionale Anordnungen der S_N-Code XSDRN und für dreidimensionale Anordnungen der Monte-Carlo-Code KENO V.a verwendet wurden. Als eindimensionale Systeme wurden die metallischen kugelförmigen Anordnungen GODIVA, JEZEBEL und POPSY /NEA 16/ mit schnellem Spektrum, als dreidimensionale Systeme KRITZ-19 und eine der Anordnungen aus der Babcock&Wilcox (B&W) Benchmark-Serie /NEA17/ mit thermischem Spektrum ausgewählt. Für die thermischen Systeme wurden die Wirkungsquerschnitte und Kovarianzdaten aus SCALE 6.2 mit 252 bzw. 56 Energiegruppen verwendet, für die schnellen Systeme die innerhalb des Vorhabens erzeugten Daten mit 302 bzw. 19 Energiegrup-

pen, siehe Abschnitt 5.1 und 5.2. Die Ergebnisse für die Unsicherheiten und deren 95 %-Konfidenzintervalle sind in Tab. 6.7 dargestellt. Die Übereinstimmung ist durchwegs ausgezeichnet.

Tab. 6.7 Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren kritischer Anordnungen und deren 95 %-Konfidenzintervalle

	TSUNAMI-3D	**XSUSA/KENO**	**XSUSA/MCNP**
B&W Beladung 2	0.519 %	0.523 % ± 0.024 %	0.523 % ± 0.024 %
KRITZ 2:19 kalt	0.733 %	0.727 % ± 0.033 %	0.725 % ± 0.033 %
	TSUNAMI-1D	**XSUSA/XSDRN**	**XSUSA/MCNP**
GODIVA	1.093 %	1.065 % ± 0.048 %	1.066 % ± 0.048 %
JEZEBEL	0.568 %	0.573 % ± 0.026 %	0.573 % ± 0.026 %
POPSY	0.599 %	0.594 % ± 0.027 %	0.598 % ± 0.027 %

Weiterentwicklung der XSUSA-Module

Die XSUSA-Module RCOV, MAMEDI, RISUS und SAMOS wurden dahingehend erweitert, dass eine beliebige Energiegruppenstruktur zugelassen ist und die neue Nomenklatur der enthaltenen Nuklide in den Kovarianzdaten aus SCALE 6.2 berücksichtigt werden kann. Dies war nicht nur zur Verwendung von XSUSA mit SCALE 6.2 erforderlich, sondern auch um mit XSUSA/SCALE 6.1 die neuen Wirkungsquerschnitts- und Kovarianzbibliotheken aus SCALE 6.2 nutzen zu können, mit denen Aufgaben zum UAM-LWR-Benchmark bearbeitet wurden, siehe Abschnitt 6.1. Das Modul RCOV, welches die Kovarianzbibliotheken in ein für MAMEDI lesbares Eingabeformat bringt, musste zusätzlich angepasst werden, da die neuen Kovarianzbibliotheken die Kovarianzmatrizen in einem verkürzten Format enthalten, in welchem die Null-Einträge weggelassen werden. RCOV wurde dafür in Python neu geschrieben, da sich dies einfacher darstellte als die Modifikation des FORTRAN-Programms. Zusätzlich zu dem von dem SCALE-Modul COGNAC erzeugbaren ASCII-Format kann RCOV nun auch direkt die Binärdateien einlesen.

Weiterhin musste berücksichtigt werden, dass die neuen Daten Kovarianzmatrizen von Reaktionen beinhalten, welche sich aus der Summe anderer Reaktionen ermitteln. Beispielsweise ist in den neuen Daten die totale Neutronenmultiplizität enthalten, wel-

che sich aus den Anteilen der prompten und verzögerten Multiplizität ergibt, für die wiederum auch eigene Kovarianzmatrizen vorhanden sind.

Die Erzeugung der Variationen wurde mit dem Modul MAMEDI und die Sensitivitätsanalysen mit den Modulen RISUS und SAMOS mit beliebigen Energiegruppenstrukturen und den neuen Daten getestet. Durch einen Vergleich mit früheren Ergebnissen mit der 44-Gruppen-Struktur wurden die Neuerungen überprüft, und es wurde zugleich die Rückwärtskompatibilität getestet. Da Änderungen im Quellcode an vielen verschiedenen Stellen durchgeführt wurden, und da in den neuen Kovarianzbibliotheken eine größere Anzahl an Daten enthalten sind die teilweise redundant sind und für welche daher keiner Erfahrungen vorliegen, musste die Generierung der Variationen mit MAMEDI ausführlich verifiziert und validiert werden. Dies wurde im Rahmen des neuen Arbeitspunktes „Integration der XSUSA-Methodik in SCALE 6.2“ durchgeführt, siehe Abschnitt 6.4.

Zusätzlich wurde das Modul READPARAM, das aus den von MAMEDI erzeugten Variationsparametern für die Wirkungsquerschnitte eine Datei im AMPX-Format erstellt, die zur weiteren Verwendung mit SCALE nötig ist, vollkommen neu programmiert. Dadurch reduziert sich die Zeit für die Erstellung der AMPX-Datei, die für einen typischen Satz von Daten (etwa 400 Nuklide, 56 Energiegruppen, 1000 Sätze von Variationsparametern für jede Reaktion) benötigt wird, von mehreren Stunden auf ca. eine Minute.

Erfassung impliziter Effekte mit XSUSA

Mit XSUSA werden bisher die Variationen der nuklearen Daten auf die abgeschirmten mikroskopischen Wirkungsquerschnitte, also nach der Resonanzselbstabschirmungsrechnung, angebracht. Dies hat den Vorteil, dass die Resonanzselbstabschirmungsrechnung für jeden Anwendungsfall nur einmal bei der Nominalrechnung durchgeführt werden muss, und in den Variationsrechnungen nur noch die Kritikalitätsberechnung durchgeführt wird, was eine zum Teil erhebliche Rechenzeitersparnis einbringt gegenüber einer Methode, bei der bereits die nicht-abgeschirmten Wirkungsquerschnitte variiert werden und dann in jeder Variationsrechnung die vollständige Rechensequenz einschließlich der Resonanzselbstabschirmungsrechnung durchgeführt werden muss, wie dies im SCALE-Modul SAMPLER realisiert ist. Der Nachteil besteht darin, dass der Einfluss der Resonanzselbstabschirmungsrechnung auf die Variationsparameter unberücksichtigt bleibt, also sogenannte implizite Effekte vernachlässigt werden. Zwar hat sich bisher gezeigt, dass dadurch keine großen Fehler für die totalen Ergebnis-

unsicherheiten eingeführt werden; wenn man jedoch Einzeleffekte beobachtet, sind deutliche Unterschiede zu erkennen.

Ein Beispiel wird in Abb. 6.23 gegeben. Hier ist die Sensitivität des Multiplikationsfaktors für eine DWR-Stabzelle bezüglich des U-238-Einfangquerschnitts dargestellt, die mit TSUNAMI berechnet wurde, zum einen nur der explizite Anteil, also ohne Berücksichtigung der impliziten Effekte („tsunami-e“), zum anderen die totale Sensitivität, also mit Berücksichtigung der impliziten Effekte („tsunami-t“). Die Reduktion in den Einfangresonanzen durch die impliziten Effekte ist deutlich zu erkennen.

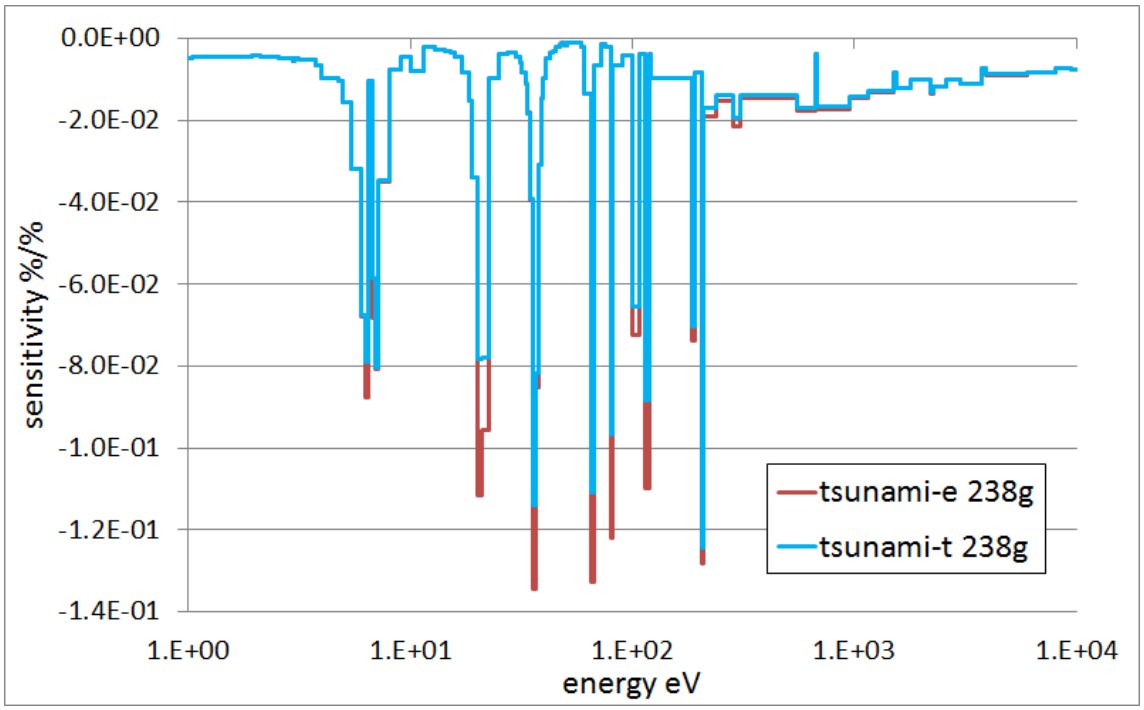

Abb. 6.23 TSUNAMI-Sensitivität des Multiplikationsfaktors für eine DWR-Stabzelle bezüglich des U-238-Einfangquerschnitts ohne und mit Berücksichtigung impliziter Effekte

Um die impliziten Effekte zu erfassen, werden bei TSUNAMI zunächst die Sensitivitäten der abgeschirmten bezüglich der nicht-abgeschirmten mikroskopischen Wirkungsquerschnitte störungstheoretisch bestimmt. Dieses Verfahren kann auch für XSUSA zur Anwendung gebracht werden. Dies ist in Abb. 6.24 schematisch dargestellt. Dabei wird deutlich, dass die Resonanzselbstabschirmungsrechnung nach wie vor nur ein einziges Mal durchgeführt werden muss. Zusätzlich ist eine TSUNAMI-Rechnung erforderlich, deren Rechenzeit aber im Vergleich zur Rechenzeit für die vielfache Durch-

führung der Resonanzselbstabschirmungsrechnung vollkommen unbedeutend ist. Der mathematische Formalismus wird in Anhang B23 beschrieben.

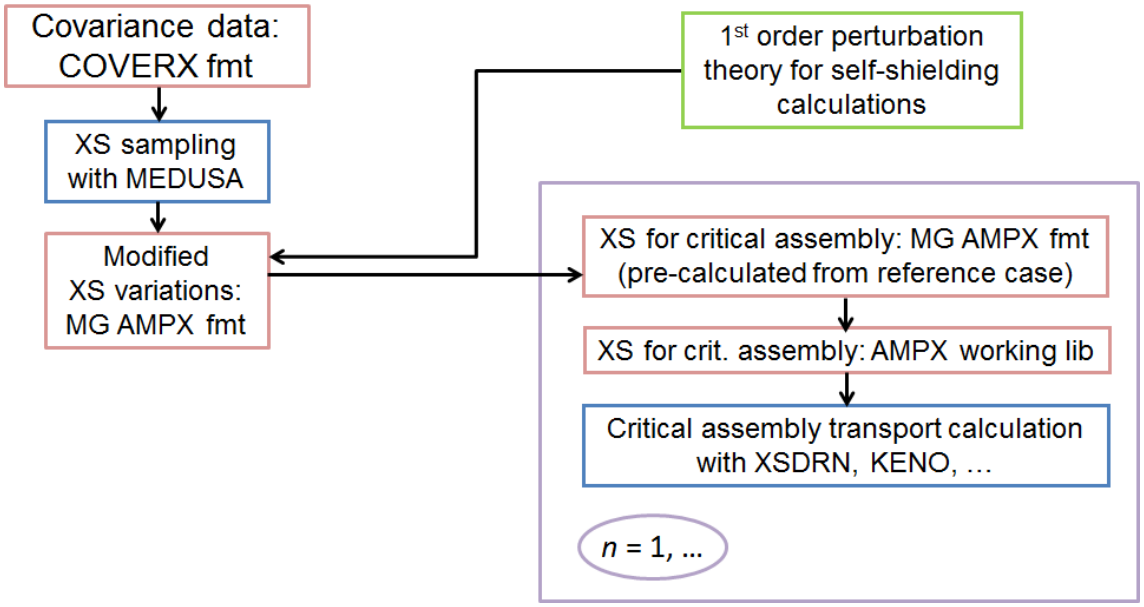

Abb. 6.24 XSUSA-Berechnungssequenz mit Berücksichtigung impliziter Effekte

Um die Funktionsfähigkeit dieses Zugangs zu überprüfen, wurde, analog zu Abb. 6.23, mit „Direct Perturbation“ (siehe oben) die Sensitivität des Multiplikationsfaktors für eine DWR-Stabzelle bezüglich des U-238-Einfangquerschnitts berechnet. Diese ist, wieder ohne und mit Berücksichtigung der impliziten Effekte, in Abb. 6.25 dargestellt. Es ist zu erkennen, dass der implizite Anteil praktisch dieselbe Änderung der Sensitivität hervorruft wie in der TSUNAMI-Rechnung. Die Methodik ist nicht auf „Direct Perturbation“ begrenzt, sondern kann auch in gleicher Weise mit Variationsparametern, die mit Random Sampling erzeugt wurden, verwendet werden. Es ist vorgesehen, diese in einem Anschlussvorhaben vollständig in XSUSA zu implementieren.

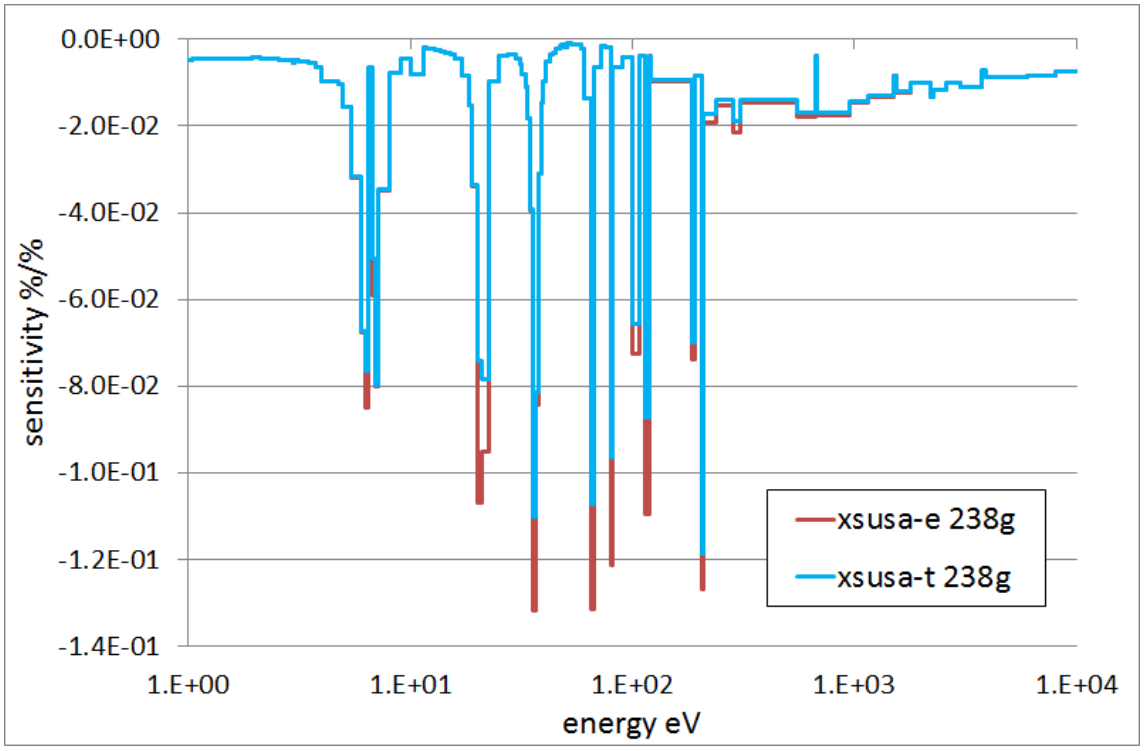

Abb. 6.25 XSUSA-Sensitivität des Multiplikationsfaktors für eine DWR-Stabzelle bezüglich des U-238-Einfangquerschnitts ohne und mit Berücksichtigung impliziter Effekte

XSUSA-Qualitätsmanagement

Im Rahmen der Qualitätssicherung bei der Erstellung von Computerprogrammen in der GRS wurde das XSUSA-Paket in die GRS-weite SVN-Plattform Teamforge integriert, welche ab sofort die Basis für die Zusammenarbeit an der Weiterentwicklung der XSUSA-Methodik bildet. Die einzelnen XSUSA-Module wurden einheitlich und daher übersichtlich geordnet und zudem mit der typischen SVN-Struktur aus tags- und trunk-Ordnern versehen. Dank des neuen XSUSA-SVNs und der neuen Ordnerstruktur ist die Übersichtlichkeit, Wartbarkeit, Erweiterbarkeit und Anwenderfreundlichkeit gewährleistet. In einem speziellen Ordner werden ferner Skripte zur Bedienung von XSUSA und zur Auswertung von Ergebnissen gesammelt. Dieses Repositorium vereinfacht und beschleunigt das Erzeugen und Auswerten von Ergebnissen. Die vorhandene erste Version der XSUSA-Dokumentation wurde um Beschreibungen einzelner Module zur Sensitivitätsanalyse erweitert (siehe Anhang A02). Außerdem wurde die in der QM-Richtlinie vorgesehene Aufspaltung des Dokuments in die Programmbeschreibung (Theorie), Programmdokumentation (technische Beschreibung der Programmroutinen) und die Benutzerdokumentation (User Manual) vorgenommen.

6.4 Integration der XSUSA-Methodik in SCALE 6.2 und HELIOS-2

XSUSA war bisher eng mit dem Programmsystem SCALE 6.1 gekoppelt. Seit dem Sommer 2016 ist SCALE 6.2 verfügbar; gleichzeitig wurde die Verteilung von SCALE 6.1 eingestellt, was zu Beginn des Vorhabens RS1536 nicht vorhersehbar war. Damit könnten zwar Erweiterungen an der bisherigen XSUSA-Version weiterhin vorgenommen werden; diese wären aber gegenwärtig nur mit SCALE 6.1 lauffähig. Im Sinne zukunftsorientierter Arbeit war es daher dringend erforderlich, XSUSA an SCALE 6.2 anzupassen. Weiterhin wurde auf der Grundlage einer Kooperationsvereinbarung zwischen der GRS und Studsvik Scandpower (SCM), eine Schnittstelle zwischen dem SCM-Code HELIOS-2 und XSUSA erstellt. Die Arbeiten wurden bei SCM durchgeführt; die GRS hat dabei intensive Unterstützung geleistet. Es ist von SCM geplant, diese Schnittstelle mit der nächsten HELIOS-2-Version verfügbar zu machen. Damit steht die XSUSA-Methodik dann auch interessierten HELIOS-2-Anwendern zur Verfügung. Dazu waren umfangreiche Validierungsarbeiten erforderlich, die von der GRS mit einer zeitlich begrenzten HELIOS-2-Evaluierungsversion durchgeführt wurden. Die durchgeführten Arbeiten zur Integration der XSUSA-Methodik in SCALE 6.2 und HELIOS-2 werden im Folgenden beschrieben.

Integration der XSUSA-Methodik in SCALE 6.2

Um die XSUSA-Methodik mit SCALE 6.2 verfügbar zu machen, war eine umfassende Überarbeitung und teilweise Neuprogrammierung der bestehenden XSUSA-Module erforderlich. Dies wurde in Abschnitt 6.3 beschrieben. Zur Validierung der Erzeugung der Variationsparameter wurde das Hilfsprogramm SACCO („sample covariance and correlation“) erstellt. Damit können für jedes Nuklid die Korrelationsmatrizen der Variationsparameter mit den entsprechenden ursprünglichen Korrelationsmatrizen verglichen werden. Diese sind zwar wegen der endlichen Anzahl der Variationen nicht identisch, müssen aber bei korrekter Ausführung der Erzeugung der Variationsparameter umso ähnlicher werden, je größer die Anzahl der Variationen ist. Dies wird in Abb. 6.26 und Abb. 6.27 für die Korrelationsmatrix von U-238 bzw. Pu-239 demonstriert, und zwar für die für schnelle Anordnungen erzeugten Kovarianzdaten mit 19 Energiegruppen (siehe Abschnitt 5.2) aus SCALE 6.2 mit einem Stichprobenumfang von 1000. Dabei ist die identische Struktur der entsprechenden Korrelationsmatrizen deutlich zu erkennen. Dies belegt die korrekte Durchführung der Bearbeitungsschritte, die zur Erzeugung der Variationsparameter erforderlich sind.

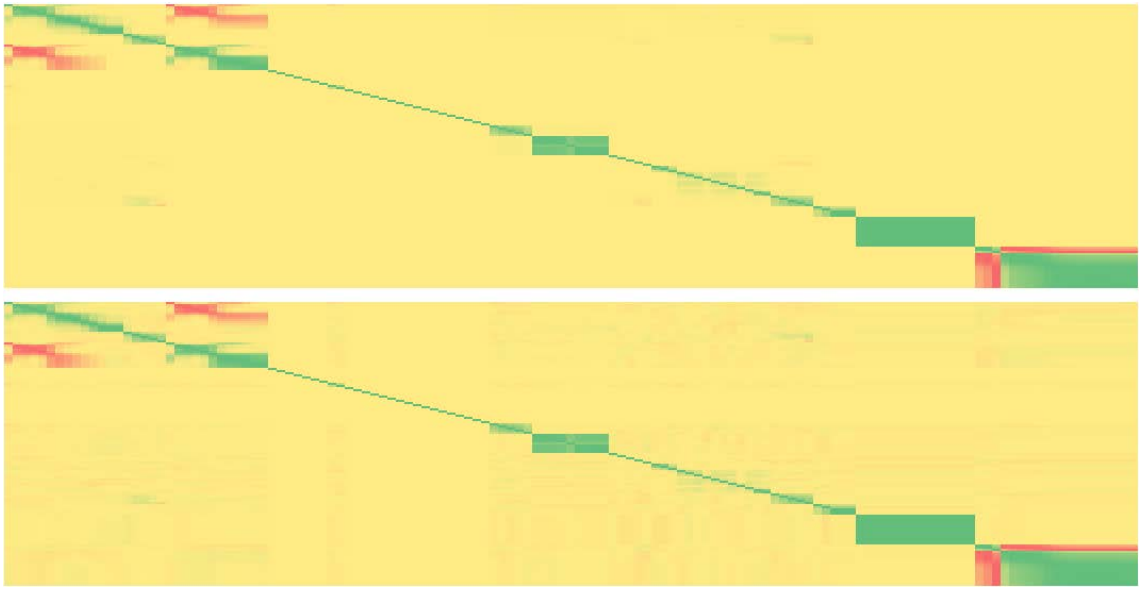

Abb. 6.26 Ausgangskorrelationsmatrix (oben) und Korrelationsmatrix der Stichprobe (unten) für U-238

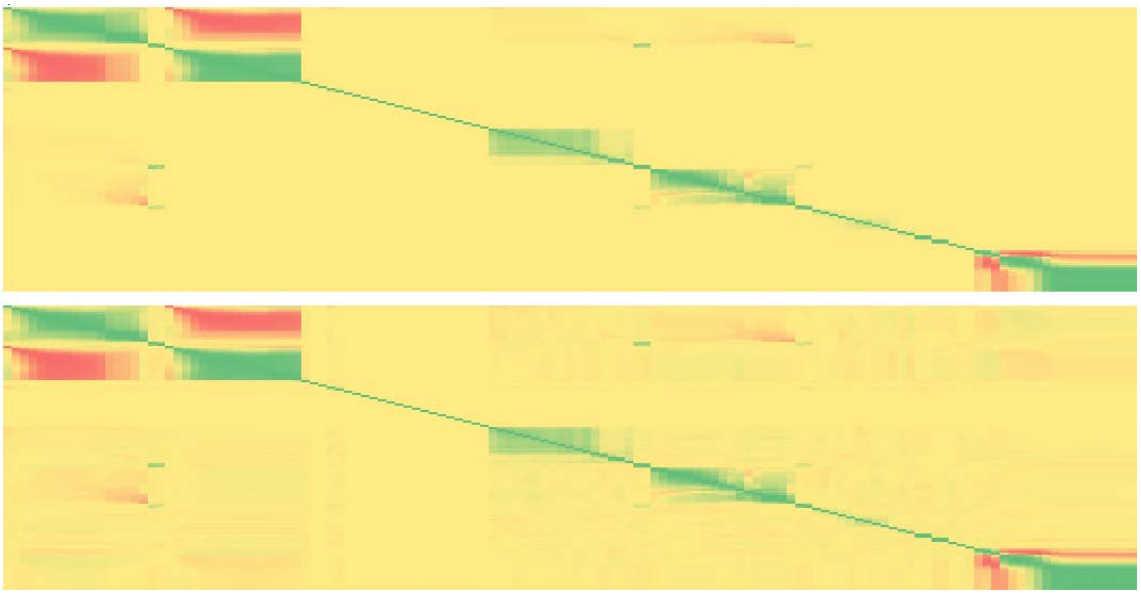

Abb. 6.27 Ausgangskorrelationsmatrix (oben) und Korrelationsmatrix der Stichprobe (unten) für Pu-239

Bedingt durch die geänderte Architektur von SCALE 6.2 gegenüber SCALE 6.1 wurden substantielle Änderungen in den XSUSA/SCALE-Ablaufsequenzen erforderlich. Die Durchführung der Anwendungsrechnungen mit variierten mikroskopischen Wirkungsquerschnitten erfolgt wie bisher in zwei Schritten; diese werden nun mit zwei Eingabedatensätzen durchgeführt. Der erste Eingabedatensatz beschreibt die vollständige Berechnungssequenz, bestehend aus Resonanzselbstabschirmungsrechnung und Neut-

ronentransportrechnung mit unvariierten mikroskopischen Wirkungsquerschnitten; dies führt zur Nominallösung. Dabei werden die abgeschirmten mikroskopischen Wirkungsquerschnitte abgespeichert. Der zweite Eingabedatensatz beschreibt die Anbringung der Variationsparameter auf die zuvor erzeugten abgeschirmten mikroskopischen Wirkungsquerschnitte, und die anschließende Neutronentransportrechnung mit diesen variierten Wirkungsquerschnitten. Dies erfordert auch Anpassungen in den SCALE-Steuersequenzen für die Kritikalitätsrechnungen. Damit lassen sich Neutronentransportrechnungen mit anschließenden Unsicherheitsanalysen mit den deterministischen Codes XSDRN (1-d) und NEWT (2-d) sowie dem Monte-Carlo-Code KENO (3-d) durchführen. Die variierten abgeschirmten mikroskopischen Wirkungsquerschnitte können auch nach entsprechender Transformation mit anderen Transportcodes wie PARTISN oder MCNP verwendet werden; dies ist bisher noch nicht mit XSUSA/SCALE 6.2 implementiert. Zuletzt erfolgt wie bisher die statistische Auswertung der Gesamtheit der Lösungen bezüglich der zu betrachtenden Ergebnisgrößen.

Zur Validierung hinsichtlich der Ergebnisunsicherheiten wurden Anwendungsfälle aus der XSUSA-Validierungsmatrix herangezogen. Dabei wurden die eindimensionalen kugelförmigen Anordnungen, die bereits in Abschnitt 3.1 aufgelistet sind, berechnet, nämlich die metallischen Kugeln GODIVA, JEZEBEL, TOPSY und POPSY mit schnellem Neutronenspektrum, und die Spaltstofflösungen LEU-SOL-THERM-002 Fall 1, HEU-SOL-THERM-009 Fall 1, PU-SOL-THERM-011 Fall 16-1 und U233-SOL-THERM-005 Fall 1 mit thermischem Spektrum. Letztere sind in Abb. 6.28 mit LST, HST, PST und UST bezeichnet. Als Neutronentransportcode kam XSDRN aus SCALE 6.2 zum Einsatz. Als zweidimensionale Anordnungen wurden die LWR-Brennelemente aus dem UAM-LWR-Benchmark Phase 1 verwendet, siehe Abschnitt 6.1. Diese wurden mit NEWT aus SCALE 6.2 als Transportprogramm berechnet. Für alle Unsicherheitsanalysen wurden die ENDF/B-VII.1-Wirkungsquerschnitte mit 252 Energiegruppen und die Kovarianzdaten in 56 Energiegruppen aus SCALE 6.2 verwendet; die Variationsparameter für XSUSA wurden mit den neu implementierten Modulen erzeugt. Es wurden jeweils Berechnungen mit 1000 Sätzen von Variationsparametern durchgeführt. Auf Unsicherheitsanalysen für dreidimensionale Anordnungen mit dem Monte-Carlo-Code KENO wurde bereits in Abschnitt 6.2 eingegangen.

In Abb. 6.28 sind die relativen Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren, die sich aus TSUNAMI und XSUSA/SCALE 6.2 ergeben, dargestellt. Die Übereinstimmung ist sehr gut. Kleine Abweichungen sind damit zu erklären, dass bei endlicher Stichprobengröße

die berechneten Standardabweichungen mit statistischen Unsicherheiten behaftet sind; bei der hier zugrundeliegenden Stichprobengröße von 1000 ist das relative 95 %-Konfidenzintervall ungefähr ± 4.5 %.

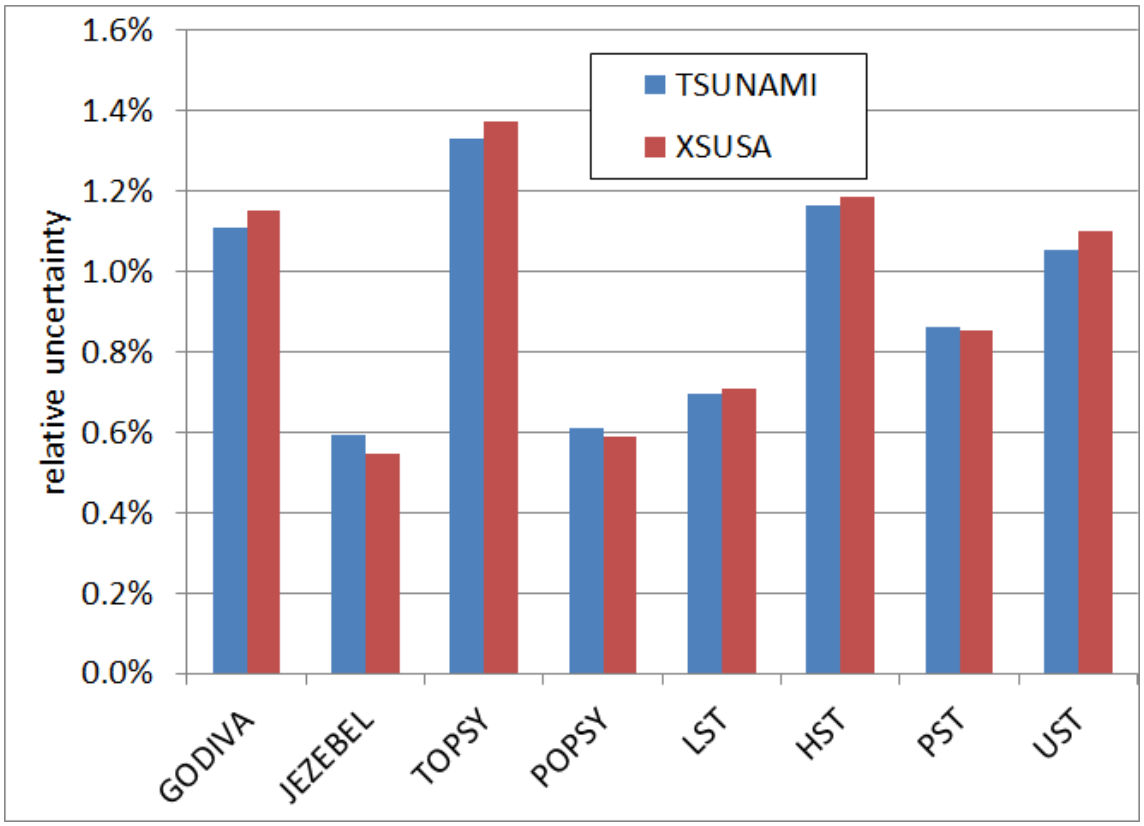

Abb. 6.28 Relative 1σ-Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren kugelförmiger Anordnungen aus TSUNAMI und XSUSA/SCALE 6.2

Die relativen Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren für die Brennelemente des UAM-LWR-Benchmarks aus TSUNAMI und XSUSA/SCALE 6.2 sind in Abb. 6.29 dargestellt. Dabei handelt es sich um ein SWR-Brennelement der Anlage Peach Bottom 2 (PB-2), ein DWR-Brennelement der Anlage Three Mile Island 1 (TMI-1), ein WWER-Brennelement der Anlage Kozloduy 6 (KOZ-6), und vier DWR-Brennelemente eines Generation-III-Designs (GEN-III), drei davon mit UO_2- und eines mit MOX-Brennstäben. HZP („hot zero power“) bezeichnet den Zustand Nulllast heiß, und HFP („hot full power“) den Zustand der Volllast. Die GEN-III-Brennelemente wurden alle bei Volllast berechnet. Für alle diese Brennelemente wurden zusätzlich Unsicherheiten in 2-Gruppen-Wirkungsquerschnitten mit TSUNAMI und XSUSA/SCALE 6.2 berechnet. Für das Brennelement der Anlage Peach Bottom 2 werden diese in Abb. 6.30 verglichen. Dabei bezeichnet „abs“ den Absorptionsquerschnitt, „fis“ den Spaltquerschnitt, „sct“ den Streuquerschnitt und „tot“ den totalen Wirkungsquerschnitt. Die schnelle

Energiegruppe ist mit „1“ bezeichnet, die thermische mit „2“. Die TSUNAMI-Ergebnisse beruhen auf verallgemeinerter Störungstheorie. Die Übereinstimmung ist ausgezeichnet. Dabei ist zu bemerken, dass die Berechnung der Unsicherheiten für einige Wirkungsquerschnitte mit TSUNAMI aus SCALE 6.2 problematisch ist; für diese Größen wurde daher TSUNAMI aus der früheren Version SCALE 6.1 herangezogen.

Durch die Gesamtheit der Vergleichsergebnisse wird die Korrektheit der Implementierung von XSUSA mit SCALE 6.2 bestätigt.

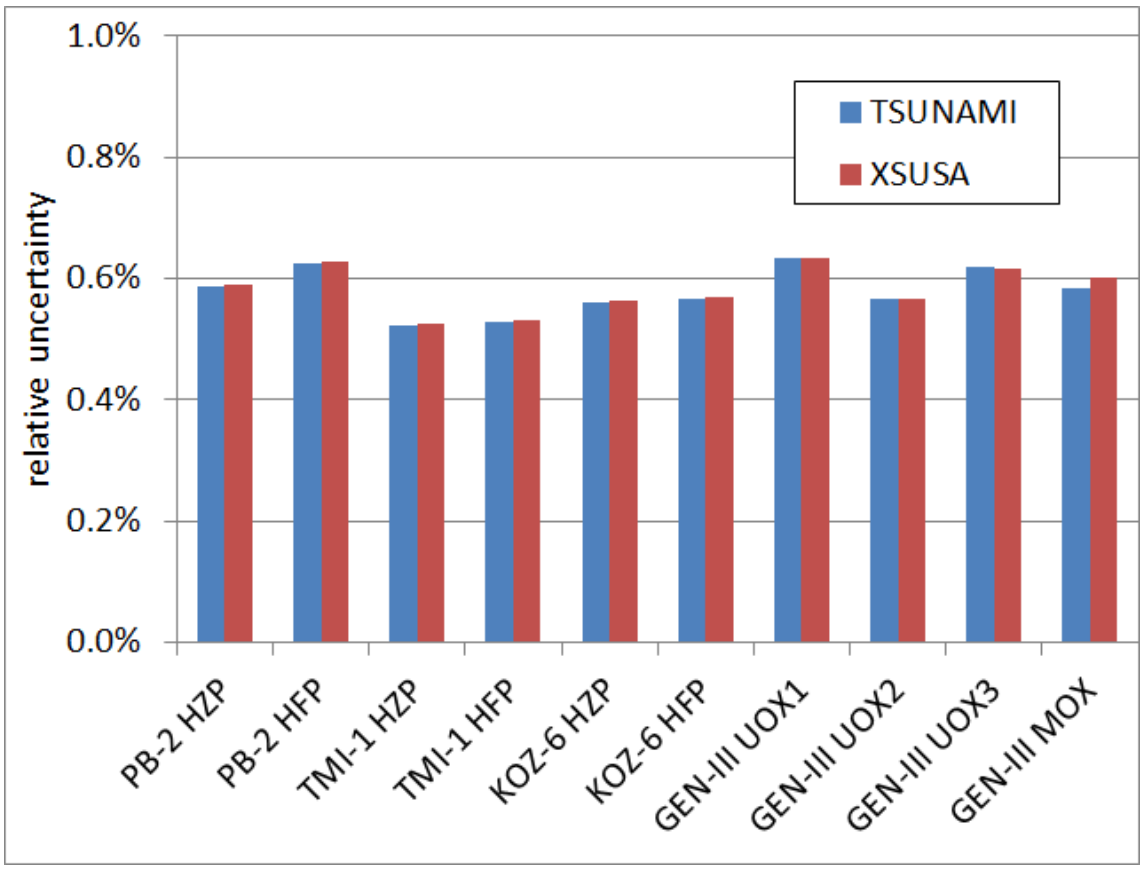

Abb. 6.29 Relative 1σ-Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren von Brennelementen des UAM-LWR-Benchmarks aus TSUNAMI und XSUSA/SCALE 6.2

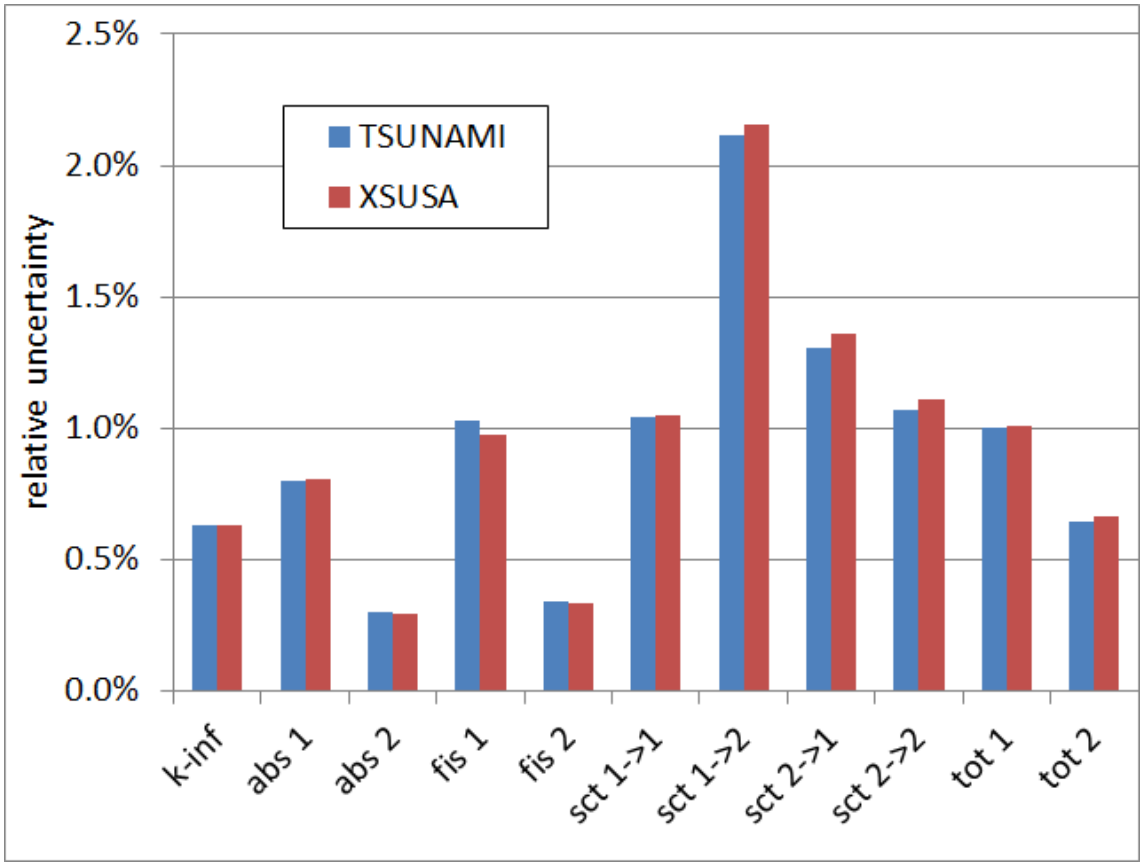

Abb. 6.30 Relative 1σ-Unsicherheiten des Multiplikationsfaktors und der 2-Gruppen Wirkungsquerschnitte des PB-2-Brennelements (HFP) des UAM-LWR-Benchmarks aus TSUNAMI und XSUSA/SCALE 6.2

Integration der XSUSA-Methodik in HELIOS-2

Die Kopplung von XSUSA mit HELIOS-2 erfolgte in intensiver Zusammenarbeit mit den HELIOS-Entwicklern von Studsvik Scandpower. Dort wurde eine Schnittstelle in HELIOS-2 zu XSUSA implementiert, die im Wesentlichen dieselbe Funktionalität bietet wie die XSUSA/SCALE-Schnittstelle, nämlich die Anbringung der von XSUSA erzeugten Variationsparameter auf die abgeschirmten Wirkungsquerschnitte nach der Resonanzselbstabschirmungsrechnung in HELIOS-2. Diese Schnittstelle ist derzeit auf die Variationsparameter limitiert, die aus den 44-Gruppen-Kovarianzdaten aus SCALE 6.1 erzeugt wurden. Von Studsvik Scandpower wurde dann der GRS eine HELIOS-2-Testversion zur Verfügung gestellt, die eine Schnittstelle zu XSUSA enthält, und mit der die entsprechenden Unsicherheitsanalysen durchgeführt werden können. Bei der GRS wurden mit dieser Version die entsprechenden Validierungsarbeiten durchgeführt, hauptsächlich mit Aufgaben des UAM-LWR-Benchmarks Phase I zu Kritikalitätsrech-

nungen für Brennelemente und des UAM-LWR-Benchmarks Phase II zu Abbrandrechnungen für Brennelemente.

Für die Kritikalitätsrechnungen wurden die Brennelemente herangezogen, die bereits zur Validierung der Implementierung XSUSA/SCALE 6.2 verwendet wurden, siehe Abb. 6.29. Die entsprechenden Ergebnisse für die relativen Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren aus XSUSA/SCALE 6.1 und XSUSA/HELIOS-2 sind in Abb. 6.31 dargestellt.

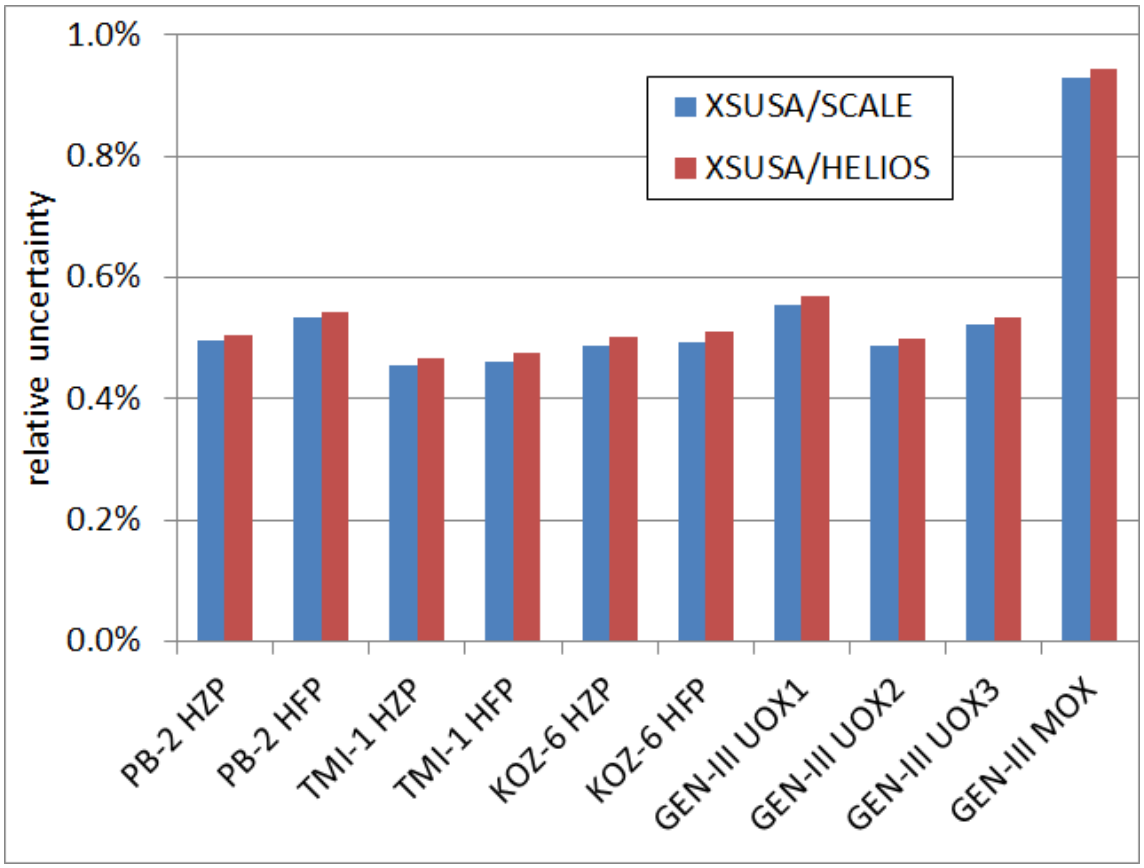

Abb. 6.31 Relative 1σ-Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren von Brennelementen des UAM-LWR-Benchmarks aus XSUSA/SCALE 6.1 und XSUSA/HELIOS-2

Wiederum wurden für alle diese Brennelemente zusätzlich Unsicherheiten in 2-Gruppen-Wirkungsquerschnitten mit XSUSA/SCALE 6.1 und XSUSA/HELIOS-2 berechnet. Für das Brennelement der Anlage Peach Bottom 2 werden diese in Abb. 6.32 verglichen. Die Nomenklatur ist dabei dieselbe wie in Abb. 6.30. Eine größere Abweichung ist dabei für die Unsicherheit des Selbststreuterms der schnellen Energiegruppe

(„sct 1->1“) zu beobachten. Dies liegt vermutlich an der unterschiedlichen Anbringung des Variationsparameters für höhere Streuordnungen mit XSUSA/SCALE 6.1 und XSUSA/HELIOS-2. Diese Diskrepanz überträgt sich auch auf den totalen Wirkungsquerschnitt, da für die schnelle Energiegruppe der Selbststreuterm den Hauptbeitrag zum totalen Wirkungsquerschnitt liefert.

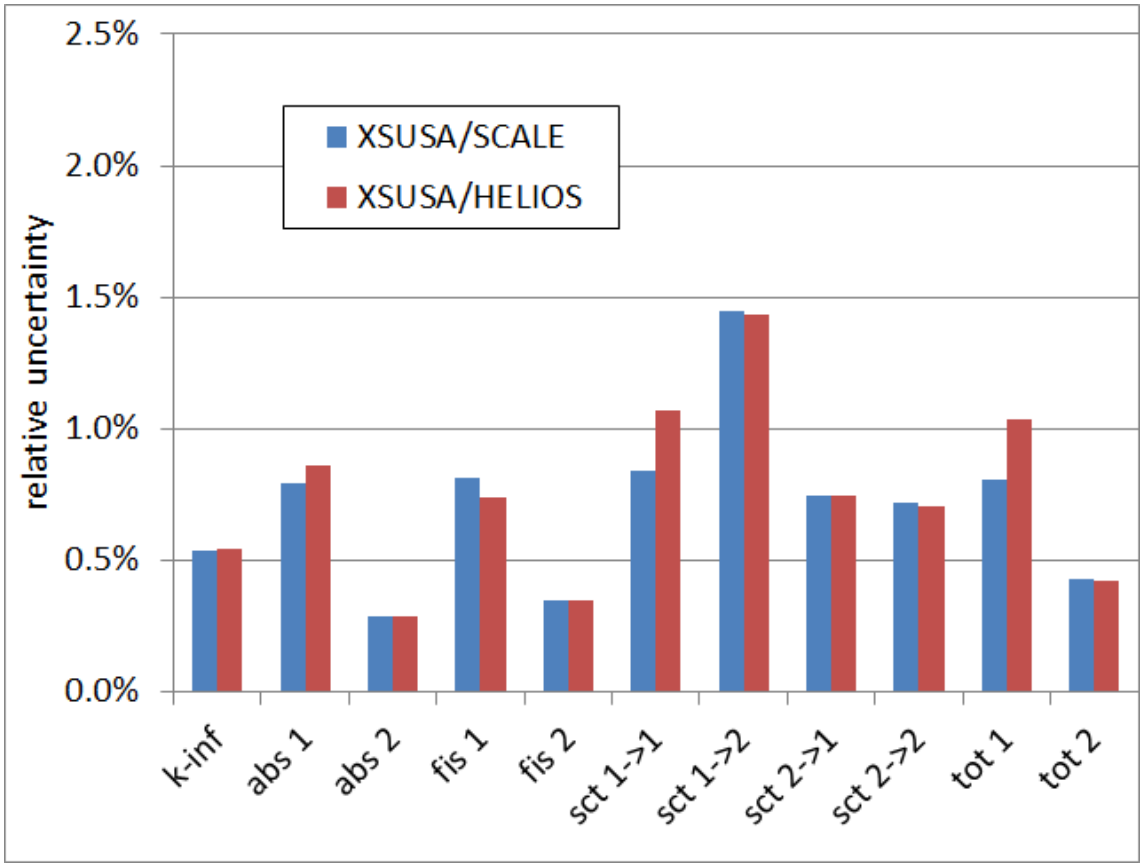

Abb. 6.32 Relative 1σ-Unsicherheiten des Multiplikationsfaktors und der 2-Gruppen-Wirkungsquerschnitte des PB-2-Brennelements (HFP) des UAM-LWR-Benchmarks aus XSUSA/SCALE 6.1 und XSUSA/HELIOS-2

Darüber hinaus wurden die Unsicherheiten für die Ergebnisse von Abbrandrechnungen verglichen. Diese wurden für das SWR-Brennelement der Anlage Peach Bottom 2, das WWER-Brennelement der Anlage Kozloduy 6 (beide aus dem UAM-LWR-Benchmark Phase II), sowie ein SWR-MOX-Brennelement des Typs Atrium, das in einem früheren OECD/NEA-Benchmark /NEA 03/ spezifiziert wurde, durchgeführt. Die entsprechenden HELIOS-Modelle sind in Abb. 6.33 dargestellt.

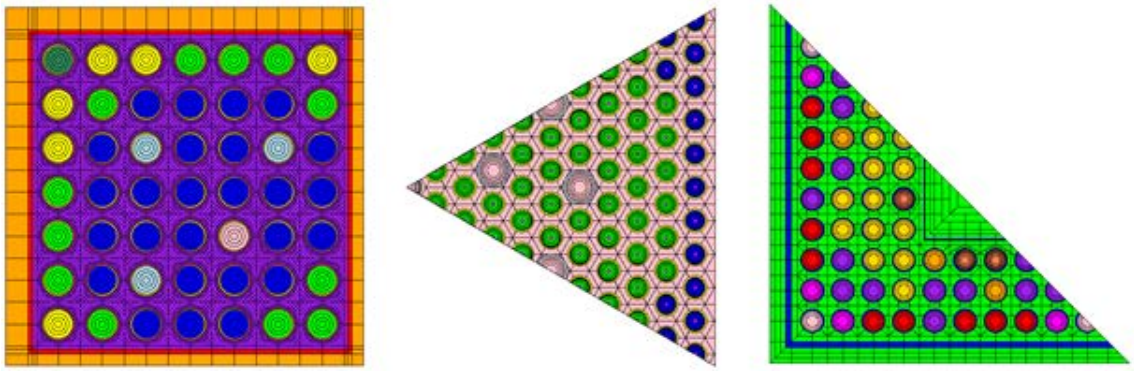

Abb. 6.33 HELIOS-Modelle für das SWR-UO2-Brennelement, das WWER-UO2-Brennelement und das SWR-MOX-Brennelement (v.l.n.r.)

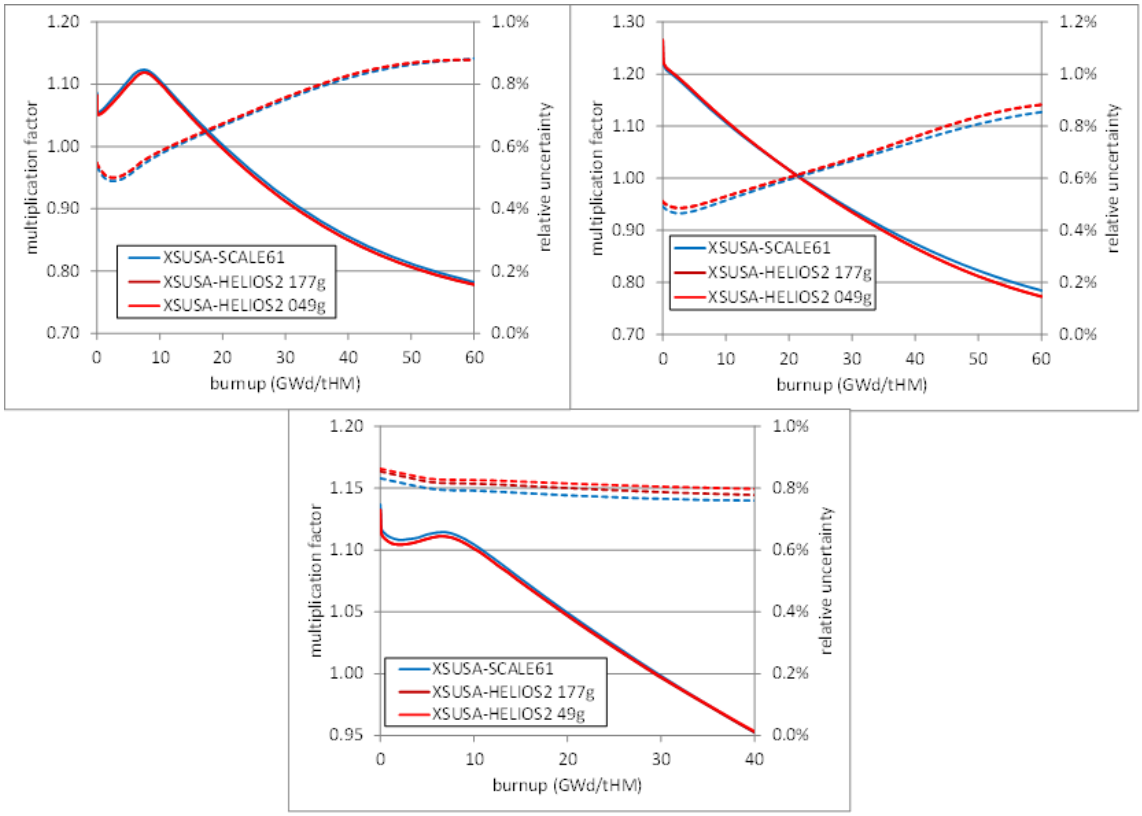

Abb. 6.34 Nominalwerte und relative 1σ-Unsicherheiten des Multiplikationsfaktors für die Brennelemente PB-2 (links oben), KOZ-6 (rechts oben) und SWR-MOX (unten) als Funktion des Abbrands aus XSUSA/SCALE 6.1 und XSUSA/HELIOS-2

In Abb. 6.34 werden die Ergebnisse für den Multiplikationsfaktor als Funktion des Abbrands für die drei Brennelemente, berechnet mit SCALE und HELIOS, verglichen (durchgezogene Linien). Die HELIOS-Berechnungen wurden mit einer feinaufgelösten Multigruppen-Bibliothek (177 Energiegruppen) und einer Bibliothek mit gröberer Auflö-

sung (49 Energiegruppen), die einen deutlichen Geschwindigkeitsvorteil verursacht, durchgeführt. In derselben Abbildung sind auch die entsprechenden Unsicherheiten, berechnet mit XSUSA/SCALE und XSUSA/HELIOS, dargestellt (gestrichelte Linien). Die Übereinstimmung ist ausgezeichnet.

Ebenso gute Übereinstimmung ergibt sich auch für die Unsicherheiten in den 2-Gruppen-Wirkungsquerschnitten, siehe Abb. 6.35 für das Brennelement der Anlage Peach Bottom 2, sowohl für den frischen Zustand (BOL) als auch zum Ende des Abbrands (EOL). Hier bezeichnet „abs“ den Absorptionsquerschnitt und „nsf“ das Produkt aus der mittleren Anzahl der Spaltneutronen und dem Spaltquerschnitt. Auf Abweichungen in der Unsicherheit des Selbststreuterms der schnellen Energiegruppe wurde bereits in Abb. 6.32 hingewiesen.

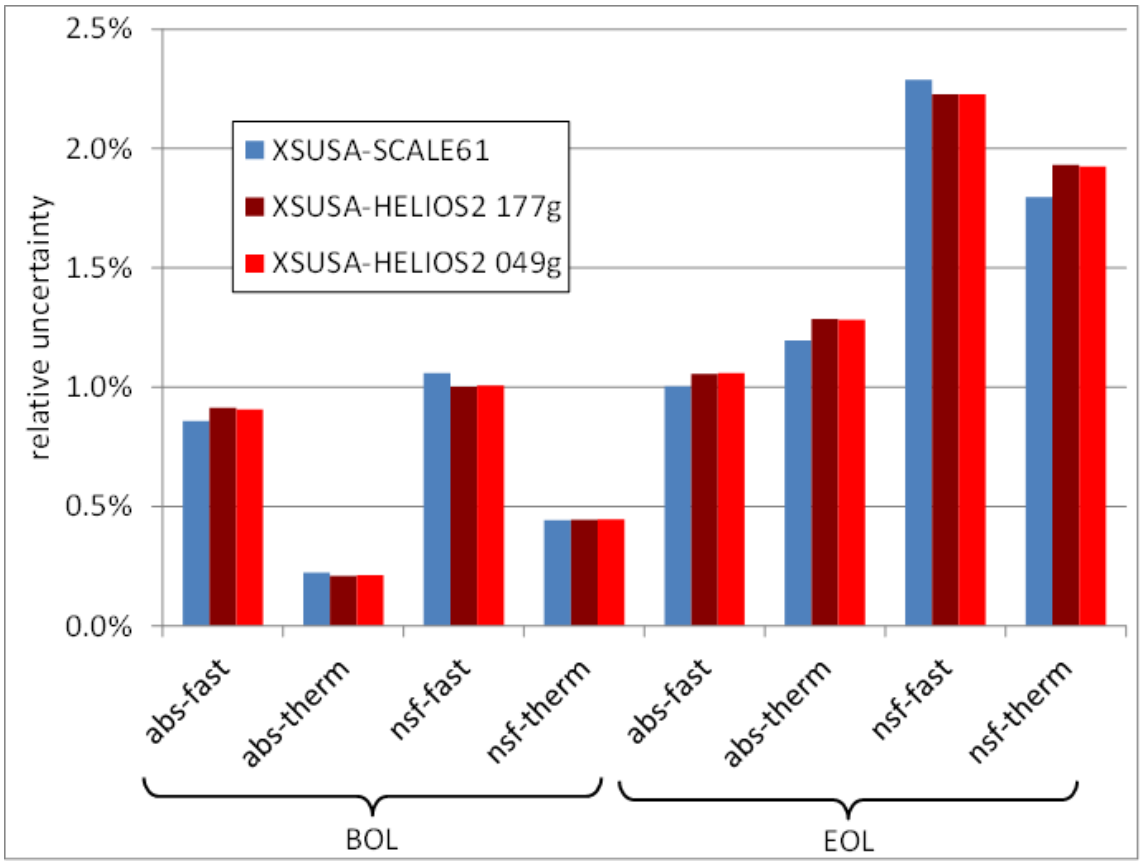

Abb. 6.35 Relative 1σ-Unsicherheiten der 2-Gruppen-Wirkungsquerschnitte des PB-2-Brennelements als Funktion des Abbrands aus XSUSA/SCALE 6.1 und XSUSA/HELIOS-2

Schließlich sind in Abb. 6.36 für dasselbe Brennelement die Unsicherheiten der Aktiniden-Konzentrationen beim Endabbrand dargestellt. Es ergibt sich wiederum gute

Übereinstimmung zwischen den mit XSUSA/SCALE 6.1 und XSUSA/HELIOS-2. Etwas größere Abweichungen weisen die Unsicherheiten für einige höhere Aktiniden (Pu-242, Am-243, Cm-244) auf, die aus den HELIOS-Analysen mit der 49-Gruppen-Bibliothek resultieren. Dies liegt daran, dass für die Produktion dieser Isotope der schnelle Energiebereich relevant ist, in dem die 49-Gruppen-Bibliothek eine geringe Energieauflösung besitzt.

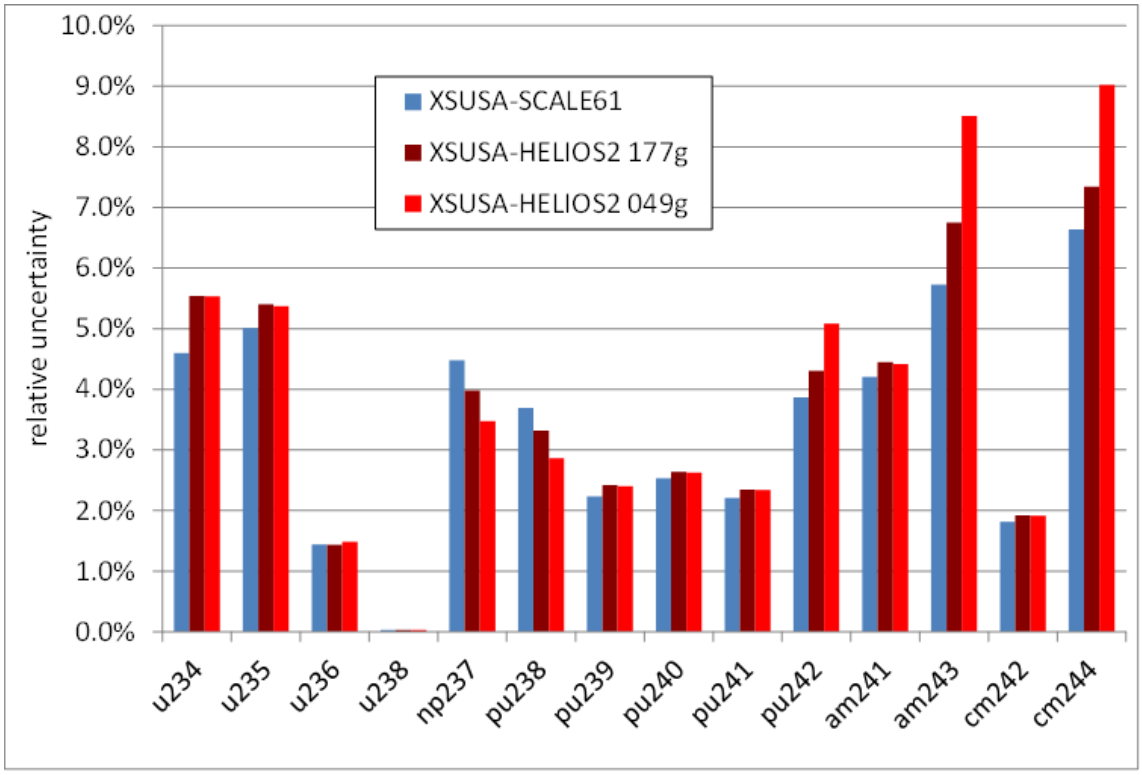

Abb. 6.36 Relative 1σ-Unsicherheiten der Aktiniden-Inventare beim Endabbrand des PB-2-Brennelements als Funktion des Abbrands aus XSUSA/SCALE 6.1 und XSUSA/HELIOS-2

7 Zusammenfassung

Der vorliegende Abschlussbericht beschreibt die im BMWi-Forschungsvorhaben RS1536 „Weiterentwicklung moderner Verfahren zu Neutronentransport und Unsicherheitsanalysen für Kernberechnungen“ durchgeführten Arbeiten und erzielten Ergebnisse. Die Arbeiten dienen dem Ziel von Neu- und Weiterentwicklungen, Validierungen und Anwendungen von deterministischen und stochastischen Rechenprogrammen und von Methoden zu Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen, sowie der Erweiterung und Verbesserung der nuklearen Datenbasis. Diese Rechenmethoden und nuklearen Daten sollen im Wesentlichen für Fragestellungen, die sich mit dem Kernverhalten von Leichtwasserreaktoren und innovativen Reaktorkonzepten, insbesondere schnellen flüssigmetallgekühlten Reaktoren, beschäftigen, eingesetzt werden.

Bezüglich deterministischer Rechenmethoden wurden weitere Arbeiten zur Validierung des Programms nTRACER durchgeführt, das den Neutronentransport mittels der Methode der Charakteristiken beschreibt, und das im Rahmen des Vorhabens RS1503 in das nukleare Programmsystem der GRS integriert wurde. Dazu wurden für Leichtwasserreaktoren repräsentative kritische Experimente herangezogen. Dies waren mehrere Anordnungen der VENUS-9-Experimente aus der VENUS-PRP-Serie (gemischte MOX/Uran-Kerne) sowie der KRITZ-2-Experimente (Uran- und MOX-Kerne). Für VENUS-9 liegen gemessene Stableistungsverteilungen auf einer Transversalen durch den Kern vor; diese wurden mit nTRACER nachgerechnet. Eine Herausforderung stellt dabei die Stableistung am Kernrand dar, sowie die Leistungsverteilung in der Nähe starker Heterogenitäten. Die Ergebnisse waren insgesamt sehr zufriedenstellend; auch in der Nähe starker Heterogenitäten zeigen die nTRACER-Lösungen ähnliche Abweichungen zu den Messergebnissen wie die Monte-Carlo-Referenzlösungen. Zur Validierung von Ganzkernsimulationen wurde das BEAVRS-Benchmark herangezogen. Dabei konnte das Reaktivitätsverhalten des Kerns über einen Abbrandzyklus sehr gut wiedergegeben werden.

Ebenfalls wurde im Rahmen der deterministischen Rechenmethoden die neueste Version des Programmsystems SCALE, SCALE 6.2.2, in die nukleare Berechnungskette der GRS integriert. SCALE wird im Arbeitsgebiet des Kernverhaltens für eine Vielzahl von Aufgaben eingesetzt, hauptsächlich für die Erzeugung resonanzabgeschirmter Multigruppen-Wirkungsquerschnitte zur Weiterverwendung mit Transport- oder Diffusionsprogrammen, Kritikalitätsberechnungen mit deterministischen und Monte-Carlo-

Transportprogrammen und Brennelement-Abbrandberechnungen, sowie Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen. Die Überprüfung wurde bereits kontinuierlich mit verschiedenen Versionen aus der Beta-Testphase sowie früheren, seit Sommer 2016 verfügbaren Release-Versionen durchgeführt. Die Validierung hinsichtlich Kritikalitätsberechnungen und der dazugehörigen Unsicherheitsanalysen wurde erfolgreich durchgeführt. Bei Brennelement-Abbrandberechnungen, die mit SCALE 6.1 durchgelaufen sind, kam es zu Programmabbrüchen mit teilweise nicht nachvollziehbaren Ursachen. Im Augenblick ist es daher angezeigt, nach wie vor auch SCALE 6.1 für die nukleare Berechnungskette verfügbar zu halten.

Im Arbeitspaket SWR-ATWS mit Unsicherheitsquantifizierung des Projekts *Nuclear Reactor Safety Simulation Platform* (NURESAFE) wurden abschließende Transientenberechnungen und die Auswertung bezüglich sicherheitsrelevanter Ergebnisse, insbesondere des kritischen Leistungsverhältnisses, der maximalen Peaking-Faktoren und der maximalen Brennstab- und Hüllrohrtemperaturen, durchgeführt. Eine Turbine-Trip-Transiente ohne Reaktorschnellabschaltung wurde erfolgreich mit den beiden gekoppelten Codesystemen ATHLET-DYN3D und ATHLET-CTF-DYN3D simuliert. Während die Ergebnisse qualitativ gut übereinstimmen, ergibt sich eine größere Abweichung, wenn die maximale Leistung, die den Begrenzungsparameter darstellt, verglichen wird. Diese Abweichungen waren zu erwarten, und die Unsicherheitsanalyse zeigt, dass die Unsicherheitsbänder die Best-Estimate-Ergebnisse beider Systeme abdecken. Zusätzlich zu der Unsicherheitsanalyse wurde eine Sensitivitätsanalyse bei jedem Zeitschritt der Transiente durchgeführt.

Für die Entwicklung eines Verfahrens zur Beschreibung reaktordynamischer Probleme mit Monte-Carlo-Neutronentransportmethoden wurde ein detailliertes Konzept erstellt. Dabei werden Wenig-Gruppen-Wirkungsquerschnitte auf Basis eines MC-Ganzkern-Modells erzeugt und in einer gekoppelten Thermohydraulik-/Neutronendiffusionsrechnung angewendet. Als geeigneter Monte-Carlo-Code wurde Serpent, als Diffusionscode QUABOX/CUBBOX und als thermohydraulischer Systemcode ATHLET ausgewählt. Ein weiterer wichtiger Punkt des Konzepts ist, dass Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte an Zeitpunkten während der Transiente extrapoliert werden. Hierzu werden Wirkungsquerschnittsdaten aus konventionellen Brennelementrechnungen zur Bildung des Gradienten verwendet; die Daten aus MC-Simulationen, welche an bestimmten Zeitpunkten während der Transiente durchgeführt werden, dienen als Stützstellen. Zu ausgewählten Zeitpunkten während der Transiente können dann mittels des

MC-Ganzkernmodells und der Verteilung der thermohydraulischen Parameter aus der gekoppelten Rechnung Leistungs- und Reaktionsratenverteilungen mit hoher Ortsauflösung berechnet werden. Als Plattform für den Datenaustausch dient der GRS-Kernsimulator KMacs. Die Implementierung des Konzepts wurde anhand von Berechnungen für den stationären Zustand des C5G7-TD-Benchmarks erfolgreich überprüft. Allerdings ergaben sich noch Abweichungen im Transientenverhalten, je nachdem ob mit Serpent oder mit NEWT erzeugte nodale Wirkungsquerschnitte verwendet werden. Dies wird, zusammen mit der Validierung und Erweiterung des Berechnungssystems für große Leistungsreaktoren, in einem Anschlussvorhaben untersucht.

Zur Beschreibung von Zuständen in unterschiedlichen Phasen der Kernzerstörung in einem SWR nach einem schweren Störfall wurden ausgehend von früheren Untersuchungen MCNP-Modelle für noch weitgehend intakte Brennelementgitter mit beginnender Zerstörung, sowie Schüttungen von fragmentiertem Kerninventar aktualisiert und erweitert. Die Berechnungen erfolgen mit ENDF/B-VII.1-Daten mit der Methode der Dopplerverbreiterung während der Berechnung. Entsprechende Berechnungen mit dem Monte-Carlo-Code Serpent lieferten sehr gute Übereinstimmung. Der Übergang von der Beschreibung der Schüttungen als regelmäßiges Gitter zur zufälligen Anordnung der Fragmente ergab nur geringfügige Unterschiede. Schließlich wurden für die Schüttung Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte erzeugt, die zur Anwendung mit einem nodalen Diffusionsprogramm geeignet sind.

Zur Überprüfung nuklearer Datenevaluierungen für schnelle Systeme wurden für Brennelemente der vier Anordnungen des SFR-FT-Benchmarks, Berechnungen für die Multiplikationsfaktoren sowie die Reaktivitätswerte der Brennstofftemperatur und der Natrium-Dichte durchgeführt. Dazu verwendet wurde der Monte-Carlo-Code MCNP-6 mit nuklearen Daten in kontinuierlicher Energiedarstellung auf der Basis der neuesten Evaluierungen ENDF/B-VII.1 und JEFF-3.2, sowie deren Vorgängern ENDF/B-VII.0 und JEFF-3.1.2. Dabei ergeben sich signifikante Unterschiede in sicherheitsrelevanten Parametern bei Verwendung unterschiedlicher nuklearer Datenevaluierungen. Insbesondere weist der Multiplikationsfaktor aus JEFF-3.1.2 eine deutliche Abweichung zu den übrigen Ergebnissen auf. JEFF-3.1.2 wurde bisher für Routine-LWR-Berechnungen in der GRS verwendet; die Ergebnisse legen nahe, dass für schnelle Systeme eher auf JEFF-3.2 umgestellt werden sollte. Aber auch die Ergebnisse mit den neuesten Evaluierungen ENDF/B-VII.1 und JEFF-3.2 sind nicht völlig konsistent; ins-

besondere die Natrium-Void-Reaktivität zeigt hier deutliche Diskrepanzen. Damit ergibt sich auch bei Einsatz aktueller Datenbibliotheken eine deutliche Ergebnisbandbreite.

Darüber hinaus wurden die mit SCALE 6.2 verfügbaren nuklearen Daten in einer 252-Gruppen-Struktur auf ihre Eignung für schnelle Reaktorsysteme überprüft. Dabei zeigt sich, dass diese aufgrund ihrer für thermische Systeme optimierten Struktur für schnelle Systeme wegen der relativ groben Auflösung im schnellen Energiebereich nur bedingt geeignet sind. Daher wurde eine für schnelle Spektren optimierte Wirkungsquerschnittsbibliothek mit 302 Energiegruppen erzeugt und anhand von Brennelementen des SFR-FT-Benchmarks überprüft; dies bildet die Basis für die Durchführung von Unsicherheitsanalysen für schnelle Systeme.

Das mit SCALE 6.2 mitgelieferte AMPX-Codesystem ermöglicht die Erstellung von Kovarianzdaten in Multigruppen-Darstellung zur Nutzung mit SCALE 6.2. Auf Basis der vom SCALE-Team zur Verfügung gestellten Unsicherheitsdaten wurden Kovarianzdaten-Bibliotheken erstellt, welche in der Gruppenstruktur an die für schnelle Spektren erzeugte Wirkungsquerschnittsbibliothek angepasst wurden. Als Vorbereitung für Sensitivitätsanalysen mit XSUSA wurden zusätzlich Kovarianzdaten mit stark reduzierter Gruppenanzahl erzeugt. Die Berechnung von Handbuch-Experimenten mit den neuen Wirkungsquerschnitts- und Kovarianzbibliotheken führte zu sehr guter Übereinstimmung mit den experimentellen Werten und bestätigt daher die Anwendbarkeit der neuen Bibliotheken für Systeme mit schnellem Neutronenspektrum.

Zur Teilnahme am UAM-LWR-Benchmark wurden die Arbeiten zu Brennelement-Abbrandrechnungen der Phase II fortgesetzt. Diese Abbrandberechnungen können nun auch in 238 Energiegruppen durchgeführt werden. Diese wurden als Benchmark-Beiträge eingereicht. Nodale Zwei-Gruppen-Wirkungsquerschnitten unter Variation der nuklearen Daten, die den Benchmark-Teilnehmern für Kernsimulationen zum Kalinin-3-Benchmark zur Verfügung gestellt werden sollen, wurden erstellt und an die UAM-LWR-Koordinatoren übergeben. Für nahezu alle Aufgaben zum UAM-LWR-Benchmark Phase I (Standalone-Neutronentransport für Stabzellen, Brennelemente, Superzellen und Ganzkernanordnungen) wurden entweder Eingabedatensätze erstellt oder vorhandene Eingabedatensätze wurden, soweit erforderlich, an die aktuelle Version der Spezifikation angepasst. Damit wurden Unsicherheitsanalysen mit TSUNAMI und XSUSA/SCALE 6.1 durchgeführt, sowohl mit der in SCALE 6.1 vorhandenen 238-Gruppen-Wirkungsquerschnittsbibliothek und den entsprechenden 44-Gruppen-Kovarianzdaten, als auch mit den neuen Bibliotheken aus SCALE 6.2 in 252 bzw. 56

Energiegruppen. Ein Teil der Aufgaben wurde auch mit XSUSA/HELIOS bearbeitet. Es ergab sich sehr gute Übereinstimmung zwischen den mit allen Codes berechneten Unsicherheiten, wenn dieselben Kovarianz-Bibliotheken verwendet wurden. Die ausgewerteten Ergebnisse wurden in den vorgesehenen Templates dem Benchmark-Team übergeben.

Bezüglich einer Plattform für systematische Unsicherheitsanalysen schneller Reaktorsysteme wurde eine Spezifikation erstellt, die nach Abstimmung mit den Koordinatoren des UAM-SFR-Benchmarks als Teil der UAM-SFR-Benchmark-Spezifikation aufgenommen wird. Diese Spezifikation orientiert sich an der Vorgehensweise des UAM-LWR-Benchmarks für thermische Leichtwasserreaktoren: Sie definiert Stabzell-, Brennelement- und Ganzkernanordnungen für die beiden Reaktorkerne des UAM-SFR-Benchmarks. Für die Ganzkernanordnungen wurden bereits Nominalrechnungen mit den Monte-Carlo-Codes SCALE/KENO-VI und Serpent mit Daten in kontinuierlicher Energiedarstellung und einer neu erzeugten, für schnelle Systeme optimierten Multigruppenbibliothek durchgeführt. Der Vergleich der Brennelement-Leistungsverteilungen führte zu konsistenten Ergebnissen. Für eine Anzahl von Reaktivitätseffekten wurde sehr gute Übereinstimmung mit den Ergebnissen der anderen Benchmark-Teilnehmer erzielt. Außerdem wurden für die Anordnungen der Benchmark-Spezifikation, teilweise in vereinfachter Darstellung, Unsicherheitsanalysen mit TSUNAMI-3D und XSUSA/KENO-VI mit den für schnelle Systeme optimierten Kovarianzdaten durchgeführt. Die entsprechenden Ergebnisse sind in ausgezeichneter Übereinstimmung. Damit sind alle Vorbereitungen getroffen, in Analogie zum UAM-LWR-Benchmark systematische Unsicherheitsanalysen für alle Schritte der nuklearen Berechnungssequenz von der Resonanzselbstabschirmungsrechnung bis hin zu gekoppelten Kernsimulationen im Rahmen eines internationalen OECD/NEA-Benchmarks durchzuführen. Dies ist in einem Anschlussvorhaben geplant.

Bezüglich Entwicklungsarbeiten an der Sampling-basierten XSUSA-Methodik wurde die Erfassung der Unsicherheiten in den Daten verzögerter Neutronen in das Variationsmodul für die nuklearen Daten aufgenommen. Damit wurde in Anwendungsfällen insbesondere der Einfluss auf die kinetischen Parameter untersucht. Zur optimalen Anpassung für schnelle Systeme ist nun eine variable Energiegruppenstruktur zugelassen; dazu waren Erweiterungen an den Modulen zur Erzeugung der Variationen für die Wirkungsquerschnitte, sowie am Variationsmodul erforderlich. Die hierzu erforderlichen Validierungsmaßnahmen wurden durchgeführt. Eine XSUSA-Sequenz zur Durch-

führung der Neutronentransport-Rechnung mit PARTISN ist verfügbar; erste Berechnungen wurden erfolgreich für die schnellen Anordnungen SNEAK-7A und -7B durchgeführt. Ebenfalls verfügbar ist eine XSUSA-Sequenz zur Durchführung der Neutronentransport-Rechnung mit MCNP; diese wurde durch Vergleiche mit Ergebnissen aus TSUNAMI sowie XSUSA mit den SCALE-Transportcodes XSDRN und KENO validiert. Zur Berücksichtigung impliziter Effekte mit XSUSA wurde ein Verfahren entwickelt, bei dem der Einfluss der Unsicherheiten der nuklearen Daten auf die resonanzselbstabgeschirmten mikroskopischen Wirkungsquerschnitte störungstheoretisch erfasst werden kann. Dazu ist für jede Serie von Anwendungsrechnungen mit variierten nuklearen Daten lediglich eine zusätzliche eindimensionale TSUNAMI-Berechnung erforderlich. Dieses Verfahren wurde durch Vergleiche von XSUSA-Ergebnissen mit „direct perturbation“ und TSUNAMI-Ergebnissen überprüft. Die vollständige Implementierung in XSUSA für Sampling-basierte Unsicherheitsanalysen wird in einem Anschlussvorhaben realisiert.

Zur Qualitätssicherung wurden in der QM-Richtlinie Programmentwicklung der GRS Software Management Group definierten Qualitätsmerkmale umgesetzt. Dazu wurde das XSUSA-Paket in die GRS-weite SVN-Plattform Teamforge integriert. Dies betrifft nun auch bisherige Veröffentlichungen zu XSUSA, auf die der Zugriff nun wesentlich schneller erfolgen kann. Das zentrale Repositorium von Skripten zur Bedienung von XSUSA und zur Ergebnisauswertung vereinfacht und beschleunigt das Erzeugen und Auswerten von Ergebnissen. Eine Matrix von Anwendungsfällen, die einen weiten Bereich des Neutronenspektrums abdeckt, und die zur Validierung von XSUSA dient, wurde erstellt. Die Zusammenfassung der Ergebnisse liegt in einem Evaluierungsbericht, in dem auch soweit möglich Vergleiche mit den SCALE-Unsicherheitsanalyse-Sequenzen SAMPLER und TSUNAMI durchgeführt werden, vor.

Hinsichtlich der Kopplung von XSUSA mit SCALE 6.2 wurde eine diesbezügliche umfassende Überarbeitung und teilweise Neuprogrammierung der bestehenden XSUSA-Module durchgeführt. Es wurden neue Programmablaufsequenzen für XSUSA/SCALE 6.2 entwickelt, mit denen Unsicherheitsanalysen für Berechnungen mit den Kritikalitätscodes NEWT, KENO Va und KENO-VI durchgeführt werden können. Die Ursachen für anfänglich beobachtete Probleme bei der Variation der Wirkungsquerschnitte wurden identifiziert und beseitigt. Die Korrektheit der Ergebnisse für die Unsicherheiten wurde durch Vergleiche mit Ergebnissen der auf Störungstheorie basierenden TSUNAMI-Sequenz und Vergleiche mit früheren Ergebnissen aus XSUSA/SCALE 6.1

überprüft. Dazu wurden eine Vielzahl von Anwendungsfällen aus der XSUSA-Validierungsmatrix sowie Aufgaben aus dem UAM-LWR-Benchmark Phase I herangezogen. Dabei wurde ausnahmslos sehr gute Übereinstimmung erzielt. Damit kann nun in Zukunft XSUSA/SCALE 6.2 routinemäßig für Unsicherheitsanalysen von Kritikalitätsberechnungen sowie Kernsimulationen unter Verwendung von mit SCALE 6.2 erzeugten homogenisierten Wirkungsquerschnitten verwendet werden.

Hinsichtlich der Kopplung von XSUSA mit HELIOS-2 wurde eine HELIOS-2-Testversion erzeugt, die eine Schnittstelle zu XSUSA enthält, und mit der entsprechende Unsicherheitsanalysen durchgeführt werden können. Diese wurde von Studsvik Scandpower mit intensiver Unterstützung durch die GRS entwickelt und der GRS zu Validierungszwecken zur Verfügung gestellt. Die erforderlichen Validierungsrechnungen wurden bei der GRS durchgeführt, hauptsächlich mit Aufgaben des UAM-LWR-Benchmarks Phase I und II, nämlich Unsicherheitsanalysen von Kritikalitäts- und Abbrandberechnungen für verschiedene Brennelemente. Die Überprüfung erfolgte durch Vergleiche mit Ergebnissen von den entsprechenden Unsicherheitsanalysen mit XSUSA/SCALE 6.1. Die Ergebnisse für die Unsicherheiten sind für die meisten Ausgabegrößen in sehr guter Übereinstimmung; Unterschiede sind auf die unterschiedlichen Implementierungen zurückzuführen. Damit wird mit der nächsten HELIOS-2-Version den Anwendern die Möglichkeit gegeben, Unsicherheitsanalysen mit der XSUSA-Methodik durchzuführen.

Literaturverzeichnis

/ALC 08/ R. E. Alcouffe, R. S. Baker, J. A. Dahl, S.A. Turner, R. Ward, PARTISN - A Time-Dependent, Parallel Neutral Particle Transport Code System, LA-UR-08-07258 (2008)

/AUR 15/ A. Aures, M. Behler, F. Bostelmann, L. Gallner, V. Hannstein, R. Kilger, F. Sommer, M. Stuke, K. Velkov, M. Zilly, W. Zwermann, Weiterentwicklung und Qualifizierung der GRS-Abbrandverfahren unter Einbeziehung schneller Spektren, GRS-386 (2015)

/BER 15/ W. Bernnat, N. Guilliard, J. Lapins, A. Aures, I. Pasichnyk, Y. Périn, K. Velkov, W. Zwermann, Monte Carlo Full Core Neutronics Analysis with Detailed Consideration of Thermal-Hydraulic Parameters, ANS MC2015 - Joint International Conference on Mathematics and Computation (M&C), Supercomputing in Nuclear Applications (SNA) and the Monte Carlo (MC) Method, Nashville, USA (2015)

/BLA 12/ D. Blanchet, L. Buiron, N. Stauff, T.- K. Kim, T. Taiwo, AEN – WPRS Sodium Fast Reactor Core Definitions, http://www.oecd-nea.org/science/wprs/sfr-taskforce/WPRS-AEN-SFR-Cores-V1.2.pdf

/BUI 15/ L. Buiron, P. Sciora, G. Rimpault, “OECD Benchmark: Main Conclusions from SFR-FT Task Force Benchmark,” Presentation at the 1st meeting of Uncertainty Analysis in Best-Estimate Modelling for Design, Operation and Safety Analysis of SFRs (SFR-UAM), May 2015

/CHA 11/ M. B. Chadwick, et al., “ENDF/B-VII.1 Nuclear Data for Science and Technology: Cross Sections, Covariances, Fission Product Yields and Decay Data,” *Nuclear Data Sheets,* 112, pp. 2887–2996, 2011

/DUG 65/ J. Dugone, SPERT III Reactor Facility: E-Core Revision, AEC Research and Development Report IDO-17036, Phillips Petroleum Company, ID (1965)

/EAT 17/ J. W. Eaton, D. Bateman, S. Hauberg, R. Wehbring, GNU Octave version 4.4.0 manual: a high-level interactive language for numerical computations. https://octave.org/doc/v4.4.0/ (2017)

/EUR 13/ *Nuclear Reactor Safety Simulation Platform*, (2013), http://www.nuresafe.eu

/GOO 12/ T. Goorley, et al., "Initial MCNP6 Release Overview", Nuclear Technology, 180, pp. 298-315 (Dec 2012)

/HAN 12/ V. Hannstein, R. Kilger, Rechenbenchmark zur Inventarberechnung von abgebrannten Druckwasser- und Siedewasser-Brennelementen, Technische Notiz im Anhang von /AUR 15/

/HER 11/ M. Herman, Development of ENDF/B-VII.1 and Its Covariance Components, Journal of the Korean Physical Society, 59, pp.1034–1039 (2011)

/HOR 13/ N. Horelik, B. Herman, Benchmark for Evaluation and Validation of Reactor Simulations, Release rev. 1.1.1, MIT Computational Reactor Physics Group (2013)

/IVA 16/ K. Ivanov, M. Avramova, S. Kamerow, I. Kodeli, E. Sartori, E. Ivanov, and O. Cabellos, Benchmark for Uncertainty Analysis in Modelling (UAM) for Design, Operation and Safety Analysis of LWRs, Volume I: Specification and Support Data for the Neutronics Cases (Phase I), Version 2.1, NEA/NSC/DOC(2012)10, 2016

/JEF 14/ JEFF-3.2 evaluated data library - Neutron data, 5 March 2014 release, OECD/NEA web site, https://www.oecd-nea.org/dbforms/data/eva/evatapes/jeff_32/ (2014)

/KLI 15a/ S. Kliem et al., Intermediate report on the reference case of PWR MSLB benchmark, NURESAFE-Bericht D12.31 (2015)

/KLI 15b/ S. Kliem et al., Final report on the advanced case of PWR MSLB benchmark, NURESAFE-Bericht D12.41 (2015)

/KNE 16/ M. Knebel L. Mercatali, V. Sanchez, R. Stieglitz, R. Macian-Juan, Validation of the Serpent 2-DYNSUB code sequence using the Special Power Excursion Reactor Test III (SPERT III), Annals of Nuclear Energy 91, 79-91 (2016)

/KOM 13/ Kompetenzverbund Kerntechnik. Nukleare Sicherheitsforschung - Neuorientierung an aktuellen energiepolitischen Rahmenbedingungen. GRS/PtR (2013), http://nuklear-server.nuklear.kit.edu/Kompetenzverbund/1280/berichte.htm

/KOZ 06/ T. Kozlowski, T. J. Downar, Pressurised Water Reactor MOX/UO2 Core Transient Benchmark, Final Report, December 2006, NEA/NSC/DOC(2006)

/LAN 78/ S. Langenbuch, W. Maurer, W. Werner, QUABOX/CUBBOX, Version 02: Ein Grobgitterverfahren zur Lösung von Neutronendiffusionsgleichungen - Programmbeschreibung, GRS-A-160 (1978)

/LAN 05/ S. Langenbuch, K. Velkov, Overview on the Development and Application of the Coupled Code System ATHLET-QUABOX/CUBBOX, Mathematics and Computation, Supercomputing, Reactor Physics and Nuclear and Biological Applications, Avignon, France (2005)

/LEE 12/ C. H. Lee, W. S. Yang, "MC²-3: Multigroup Cross Section Generation Code for Fast Reactor Analysis," ANL/NE-11-41, Ref.1, January 31, 2012.

/LEP 15/ J. Leppänen, M. Pusa, T. Vittanen, V. Valtavirta, T. Kaltiaisenaho, The Serpent Monte Carlo code: Status, development and applications in 2013, Ann. Nuc. Energy, 82, 142-150 (2015)

/LER 16/ G. Lerchl, H. Austregesilo, P. Schöffel, D. von der Cron, F. Weyermann, ATHLET 3.1A User's Manual, GRS-P-1/Vol. 1 Rev. 7, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit, (2016)

/LIT 08/ R. Little, T. Kawano, G. D. Hale, M. T. Pigni, M. Herman, P. Obložinský, M. L. Williams, M. E. Dunn, G. Arbanas, D. Wiarda, R. D. McKnight, J. N. McKamy and J. R. Felty, Low-fidelity Covariance Project, Nuclear Data Sheets, 109, pp. 2828–2833, 2008.

/MOS 07/ R.D. Mosteller, The Doppler-Defect Benchmark: Overview and Summary of Results, ANS MC2015 - Joint International Topical Meeting on Mathematics & Computation and Supercomputing in Nuclear Applications (M&C + SNA 2007), Monterey, USA (2007)

/NEA 03/ Physics of Plutonium Recycling Vol. VII: BWR MOX Benchmark – Specification and Results, NEA/NSC/DOC(2003), ISBN 92-64-19905-5

/NEA 05/ Benchmark on the Three-dimensional VENUS-2 MOX Core Measurements – Final Report, NEA/NSC/DOC(2005)17

/NEA 16/ International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments, OECD/NEA, NEA/NSC/DOC(95)03, Paris (2016)

/NEA 17/ International Handbook of Evaluated Reactor Physics Benchmark Experiments, OECD/NEA, NEA/NSC/DOC(2006)1, Paris (2017)

/NIK 15/ E. Nikitin, E. Fridman, K. Mikityuk, Solution of the OECD/NEA neutronic SFR benchmark with Serpent-DYN3D and Serpent-PARCS code systems, Ann. Nucl. Energy, 75, pp. 492-497 (2015)

/OLS 03/ A.P. Olson, Neutronics Calculations for SPERT-III, E-core, ANL/GTRI/TM-13/10, Argonne National Laboratory, (2003)

/OLS 15/ A. Olson, SPERT III Nuclear Reactor, Research Reactor Benchmarking Database: Facility Specification and Experimental Data, Technical Reports Series No. 480, IAEA (2015)

/PAR 01/ J.M. Paratte, R. Chawla, H. Akie, P.M.G. Damen, H.K. Joo, P. Mikolas, E. Padovani, Y. Pénéliau, and G. Youinou, A Numerical Neutronics Benchmark Study for Inert Matrix Plutonium Fuels in Uranium Dioxide and Mixed Plutonium-Uranium Dioxide Environments, Progress in Nuclear Energy, 38, pp. 335-342 (2001)

/PAU 03/ A. Pautz, A. Birkhofer, DORT-TD: A Transient Neutron Transport Code with Fully Implicit Time Integration, Nucl. Sci. Eng. Vol. 145, pp. 299-319, (2003)

/PEL 13/ D.B. Pelowitz (Hrsg.), MCNP6 User's Manual Version 1.0, Los Alamos Report LA-CP-13-00634, Rev. 0 (2013)

/PER 10/ Y. Périn, K. Velkov, A. Pautz, COBRA-TF/QUABOX-CUBBOX: Code System for Coupled Core and Subchannel Analysis, PHYSOR 2010, Pittsburgh, USA (2010)

/PER 14a/ Y. Périn, Description of the ATHLET API, NURESAFE-Bericht D11.15 (2014)

/PER 14b/ Y. Périn, Description of the CTF API, NURESAFE-Bericht D11.15 (2014)

/PER 15a/ Z. Perkó, S. Pelloni, K. Mikityuk, J. Křepel, M. Szieberth, G. Gaëtan, B. Vrban, J. Lüley, Š. Čerba, M. Halász, S. Fehér, T. Reiss, J.L. Kloosterman, R. Stainsby, C. Poette, Core Neutronics Characterization of the GFR2400 Gas Cooled Fast Reactor, Progress in Nuclear Energy, 83, pp. 460-481 (2015)

/PER 15b/ Y. Périn, A. Kubarev, S. Roshan, J. Jimenez, Report on Best Estimate Plus Uncertainty Analysis of BWR ATWS, NURESAFE-Bericht D13.50 (2015)

/POR 16/ N. Porter, T. Blyth, Jason Hou, M. Avramova, K. Ivanov, E. Royer, E. Sartori, O. Cabellos, H. Feroukhi, E. Ivanov, Benchmark for Uncertainty Analysis in Modelling (UAM) for Design, Operation and Safety Analysis of LWRs, Volume II: Specification and Support Data for the Core Cases (Phase II), Version 18.0, NEA/NSC/DOC(2016)

/RAI 17/ A. Rais, D. Siefman, M. Hursin, A. Ward, A. Pautz, Neutronics modeling of the CROCUS reactor with SERPENT and PARCS codes, MC 2017, Jeju, Korea (2017)

/REA 16/ B.T. Rearden, M.A. Jessee (Hrsg.), SCALE Code System, ORNL/TM-2005/39, Version 6.2, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, TN (2016)

/ROH 16/ U. Rohde, S. Kliem, E. Grundmann, S. Baier, Y. Bilodid, S. Duerigen, E. Fridman, A. Gommlich, A. Grahn, L. Holt, Y. Kozmenkov, S. Mittag, The reactor dynamics code DYN3D – models, validation and applications, Progress in Nuclear Energy, 89, pp. 170-190 (2016)

/RUG 06/ J.M. Ruggieri, J. Tommasi, J.F. Lebrat, C. Suteau, D. Plisson-Rieunier, C. De Saint Jean, G. Rimpault, J.C. Sublet, ERANOS 2.1: International Code System for GEN IV Fast Reactor Analysis, Proc. ICAPP ’06, Reno, NV, USA (2006)

/SAL 15/ R.K. Salko, M.N. Avramova, COBRA-TF Subchannel Thermal-Hydraulics Code (CTF) Theory Manual – Revision 0, CASL-U-2015-0054-000, Pennsylvania State University (2015)

/SAN 09/ A. Santamarina et al., The JEFF-3.1.1 Nuclear Data Library, JEFF Report 22, ISBN 978-92-64-99074-6, (2009)

/SCA 11/ SCALE: A Modular Code System for Performing Standardized Computer Analyses for Licensing, Version 6.1, ORNL/TM-2005/39, (2011)

/SEU 08/ A. Seubert, K. Velkov, S. Langenbuch, The Time-Dependent 3D Discrete Ordinates Code TORT-TD with Thermal-Hydraulic Feedback by ATHLET Models, PHYSOR 2008, Interlaken, Switzerland (2008)

/SHI 11/ K. Shibata et al., JENDL-4.0: A New Library for Innovative Nuclear Energy Systems, Journal of the Korean Physical Society, 59, pp.1046–1051 (2011)

/SJE 13/ B. L. Sjenitzer, The Dynamic Monte Carlo Method for Transient Analysis of Nuclear Reactors, PhD thesis, Delft University of Technology, (2013)

/SNU 09/ Seoul National University, Department of Nuclear Engineering, nTRACER Homepage: http://neutron.snu.ac.kr/node/7

/TER 08/ V.A. Tereshonok, S.P. Nikonov, M.P. Lizorkin, K. Velkov, A. Pautz, K. Ivanov, Kalinin-3 Coolant Transient Benchmark – Switching-off of One of the Four Operating Main Circulation Pumps at Nominal Reactor Power, OECD/NEA (2008)

/WAG 94/ J.C. Wagner, E.L. Redmond II, S.P. Palmtag, J.S. Hendricks, MCNP: Multigroup/Adjoint Capabilities, LA-12704, Los Alamos National Laboratory (1994).

/WAL 12/ A. E. Waltar, D. R. Todd, P. V. Tsvetkov, 4-Group and 8-Group Cross sections, in Fast Spectrum Reactors, Appendix F, p. 643, Springer (2012)

/WIA 16/ D. Wiarda, M. E. Dunn, N. M. Greene, C. Celik, L. M. Petrie, AMPX-6: A Modular Code System for Processing ENDF/B, ORNL/TM-2016/43, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee (2016)

/ZIL 16/ M. Zilly, M. Küntzel, A. Aures, V. Hannstein, K. Velkov, A. Pautz, KMacs, a modular adaptable core simulator, PHYSOR 2016, Sun Valley, Idaho (2016)

/ZWE 15/ W. Zwermann, A. Aures, W. Bernnat, J. Bousquet, L. Gallner, N. Guilliard, B. Krzykacz-Hausmann, M. Küntzel, J. Lapins, I. Pasichnyk, Y. Périn, K. Velkov, M. Zilly, Entwicklung und Einsatz von Neutronentransportmethoden und Unsicherheitsanalysen für Reaktorkernberechnungen - Abschlussbericht. GRS-382 (2015)

Abbildungsverzeichnis

Abb. 3.1 Brennstabgitter der VENUS-9-Experimente, hier dargestellt mit den B_4C-Absorberstäben 12

Abb. 3.2 Gemessene und berechnete Stableistungsverteilungen für die nominale VENUS-9-Anordnung 14

Abb. 3.3 Gemessene und berechnete Stableistungsverteilungen für die VENUS-9-Anordnung mit Aluminiumplatte 15

Abb. 3.4 Gemessene und berechnete Stableistungsverteilungen für die VENUS-9-Anordnung mit Wasserspalt 15

Abb. 3.5 Gemessene und berechnete Stableistungsverteilungen für die VENUS-9-Anordnung mit B_4C-Absorberstäben 16

Abb. 3.6 Horizontaler Schnitt durch das vereinfachte KRITZ-2:1-Modell 18

Abb. 3.7 Horizontaler Schnitt durch den Reaktorkern des BEAVRS-Benchmarks 21

Abb. 3.8 ¼-Kern-Ausschnitt des QUABOX/CUBBOX-Modells zum BEAVRS-Erstkern 23

Abb. 3.9 Abbrand-Abhängigkeit des Multiplikationsfaktors aus Berechnungen mit SCALE 29

Abb. 3.10 ATHLET-Modell für Peach Bottom Unit 2 34

Abb. 4.1 Einbindung eines Monte-Carlo-Codes (MC) in ein Neutronenkinetik-Thermohydraulik- (NK/TH) Programmsystems 44

Abb. 4.2 Makroskopischer Spalt- und Absorptionswirkungsquerschnitt für den thermischen Energiebereich als Funktion der Brennstofftemperatur 46

Abb. 4.3 Makroskopischer Spalt- und Absorptionswirkungsquerschnitt für den thermischen Energiebereich als Funktion der Moderatordichte 46

Abb. 4.4 Kernlayout des C5G7-TD Benchmarks 47

Abb. 4.5 Abweichung zwischen Serpent und QC-ATHLET bzgl. des axialen Verlaufs der Brennelementleistung für ein UO_2- und ein MOX-Brennelement 48

Abb. 4.6 Stableistungsverteilung im C5G7-Benchmark aus Serpent 49

Abb. 4.7 Werte für den thermischen Transportwirkungsquerschnitt des MOX-Brennelements 50

Abb. 4.8 Werte für den thermischen Nu*Spaltwirkungsquerschnitt des UO_2-Brennelements 51

Abb. 4.9 Verhältnisse der mit verschiedenen Methoden berechneten Transportwirkungsquerschnitte zum totalen Wirkungsquerschnitt 52

Abb. 4.10 Wirksamkeit der Steuerstäbe für den C5G7-TD-Kern 55

Abb. 4.11 Verlauf der Leistung im C5G7-TD-Kern beim Ziehen der Steuerstäbe von 64.26 cm auf 42.84 cm innerhalb 10 s aus QC-ATHLET 56

Abb. 4.12 Verlauf der Multiplikationsfaktoren im C5G7-TD-Kern beim Verfahren der Steuerstäbe von 64.26 cm auf 42.84 cm innerhalb 10 s aus QC-ATHLET und Serpent 57

Abb. 4.13 Verlauf der Multiplikationsfaktoren im C5G7-TD-Kern beim Verfahren der Steuerstäbe von 64.26 cm auf 42.84 cm innerhalb 1 s aus QC-ATHLET und Serpent 57

Abb. 4.14 Axiale Verteilung des thermischen Neutronenflusses im C5G7-TD-Kern vor und nach der Steuerstabbewegung 58

Abb. 4.15 Verlauf der Multiplikationsfaktoren für den C5G7-TD-Kern aus QC-ATHLET und Serpent unter Anwendung von extrapolierten WG-Wirkungsquerschnitten 59

Abb. 4.16 Verlauf der Leistung im C5G7-TD-Kern beim Ziehen der Steuerstäbe von 64.26 cm auf 42.84 cm innerhalb 10 s aus QC-ATHLET unter Anwendung von extrapolierten WG-Wirkungsquerschnitten 60

Abb. 4.17 Multiplikationsfaktor einer Schüttung von Brennstofffragmenten als Funktion des relativen Fragmentabstands 63

Abb. 4.18 Multiplikationsfaktor einer Schüttung maximaler Reaktivität als Funktion der Borkonzentration 63

Abb. 5.1 MCNP-Modell des MOX-3600-Brennelements..... 68

Abb. 5.2 MET1000-Brennelement mit metallischem Brennstoff 73

Abb. 5.3 MOX3600-Brennelement mit oxydischem Brennstoff..... 73

Abb. 5.4 Wichtungsspektren der erzeugten Wirkungsquerschnittsbibliotheken..... 73

Abb. 5.5 Neutronenflussspektrum der homogenisierten Brennelemente im schnellen Energiebereich..... 76

Abb. 5.6 Reaktionsrate elastischer Streuung an Na-23 im homogenisierten metallischen Brennelement im schnellen Energiebereich 76

Abb. 5.7 Reaktionsrate elastischer Streuung an Fe-56 im homogenisierten oxydischen Brennelement im schnellen Energiebereich 77

Abb. 5.8 Reaktionsrate des Neutroneneinfangs in U-238 im homogenisierten metallischen Brennelement im schnellen Energiebereich 77

Abb. 5.9 Spaltrate von Pu-239 multipliziert mit der Anzahl von Neutronen pro Spaltung im homogenisierten oxydischen Brennelement im schnellen Energiebereich 78

Abb. 5.10 Relative Abweichung der 1-Gruppen-Wirkungsquerschnitte zu den KENO-VI-Referenzwerten für das homogenisierte metallische Brennelement 78

Abb. 5.11 Relative Abweichung der 1-Gruppen-Wirkungsquerschnitte zu den KENO-VI-Referenzwerten für das homogenisierte oxydische Brennelement 79

Abb. 5.12 Brennelement mit Zellen für die Abschirmungsrechnung 82

Abb. 5.13 Relativer Unterschied der makroskopischen 8-Gruppen-Wirkungsquerschnitte zwischen NEWT mit der 302-Gruppen-Bibliothek und Serpent für das MET1000 Brennelement 83

Abb. 5.14 Relativer Unterschied der makroskopischen 8-Gruppen-Wirkungsquerschnitte zwischen NEWT mit der 302-Gruppen-Bibliothek und Serpent für das MOX3600 Brennelement..... 83

Abb. 5.15 Relativer Unterschied der Brennelementleistungen des MET1000-Reaktorkerns zwischen KENO-MG (302-Gruppen-Bibliothek) und KENO-CE 85

Abb. 5.16 Relativer Unterschied der Brennelementleistungen des MOX3600 Reaktorkerns zwischen KENO-MG (302-Gruppen-Bibliothek) und KENO-CE 86

Abb. 5.17 Unsicherheit von inelastischer Streuung an U-238 in Abhängigkeit von der Energie in verschiedenen Energiegruppenstrukturen..... 88

Abb. 5.18 Unsicherheit von elastischer Streuung an Na-23 in Abhängigkeit von der Energie in verschiedenen Energiegruppenstrukturen..... 89

Abb. 5.19 Eigenwert-Sensitivität inelastischer Streuung an U-238..... 89

Abb. 5.20 Eigenwert-Sensitivität elastischer Streuung an Na-23..... 90

Abb. 5.21 95 %-Signifikanzschwelle der XSUSA-Sensitivitätsindex R^2 als Funktion der Anzahl der variierten Parameter für eine einzelne Nuklidreaktion für verschiedene Stichprobengrößen 93

Abb. 5.22 Vergleich der Rechnungen mit verschiedenen schnellen Anordnungen aus dem ICSBEP-Handbuch 94

Abb. 5.23 Unterschied zu 1.0 vom durchschnittlichen C/E Wert für die verschiedenen Kategorien 95

Abb. 6.1 Schematische Darstellung des TMI-1-Brennelements (ein Viertel). 98

Abb. 6.2 Nominalwert und relative Unsicherheit des Multiplikationsfaktors für das TMI-1-Brennelement als Funktion des Abbrands 98

Abb. 6.3 Nominalwert und relative Unsicherheit des Brennstofftemperatur-koeffizienten für das TMI-1-Brennelement als Funktion des Abbrands..... 99

Abb. 6.4 Unsicherheiten der Stableistungen für das TMI-1-Brennelement im frischen (links) und abgebrannten (rechts) Zustand 100

Abb. 6.5 Relative 1σ-Unsicherheiten (%) der radialen Leistungsverteilung für einen UO_2-Kern (links) und einen UO_2/MOX-Kern (rechts) mit Kovarianzdaten aus SCALE 6.1..... 102

Abb. 6.6 Relative 1σ-Unsicherheiten (%) der radialen Leistungsverteilung für einen UO_2-Kern (links) und einen UO_2/MOX-Kern (rechts) mit Kovarianzdaten aus SCALE 6.2..... 102

Abb. 6.7 Beladeplan des TMI-1-Minikerns 103

Abb. 6.8 Verlauf von nominaler und gemittelter Leistung mit dem 1σ-Unsicherheitsband für die Transiente des TMI-1-Minikerns 105

Abb. 6.9 Verlauf der Hauptbeiträge zur totalen Unsicherheit der Leistung für die Transiente des TMI-1-Minikerns..... 106

Abb. 6.10 Horizontaler Schnitt durch den SPERT-III-Kern 107

Abb. 6.11 Vertikaler Schnitt durch den SPERT-III-Kern 107

Abb. 6.12 KENO-VI-Modell des MET1000-Reaktorkerns 111

Abb. 6.13 KENO-VI-Modell des MOX3600-Reaktorkerns 112

Abb. 6.14 Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren von eindimensionalen Anordnungen 115

Abb. 6.15 Unsicherheiten des Multiplikationsfaktors von energieintegrierten Wirkungsquerschnitten und Reaktivitätskoeffizienten der SFR-Stabzelle 116

Abb. 6.16 Unsicherheiten des Multiplikationsfaktors und von 2-Gruppen-Wirkungsquerschnitten für das TMI-1-Brennelement 117

Abb. 6.17 Unsicherheiten des Multiplikationsfaktors und von 2-Gruppen-Wirkungsquerschnitten für das PB-2-Brennelement..... 117

Abb. 6.18 Unsicherheiten des Anteils der verzögerten Neutronen für ein DWR-Brennelement als Funktion der Abbrandzeit..... 119

Abb. 6.19 Unsicherheiten des Anteils der verzögerten Neutronen für ein SFR-Brennelement als Funktion der Abbrandzeit 120

Abb. 6.20 Flussdiagramm für die SCALE/PARTISN-Berechnungskette..... 122

Abb. 6.21 Sensitivität des SNEAK-7A-Multiplikationsfaktors bezüglich der mittleren Anzahl von Spaltneutronen von Pu-239 122

Abb. 6.22 Flussdiagramm für die SCALE/MCNP-Berechnungskette..... 124

Abb. 6.23 TSUNAMI-Sensitivität des Multiplikationsfaktors für eine DWR-Stabzelle bezüglich des U-238-Einfangquerschnitts ohne und mit Berücksichtigung impliziter Effekte 127

Abb. 6.24 XSUSA-Berechnungssequenz mit Berücksichtigung impliziter Effekte... 128

Abb. 6.25 XSUSA-Sensitivität des Multiplikationsfaktors für eine DWR-Stabzelle bezüglich des U-238-Einfangquerschnitts ohne und mit Berücksichtigung impliziter Effekte 129

Abb. 6.26 Ausgangskorrelationsmatrix (oben) und Korrelationsmatrix der Stichprobe (unten) für U-238 131

Abb. 6.27 Ausgangskorrelationsmatrix (oben) und Korrelationsmatrix der Stichprobe (unten) für Pu-239..... 131

Abb. 6.28 Relative 1σ-Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren kugelförmiger Anordnungen aus TSUNAMI und XSUSA/SCALE 6.2 133

Abb. 6.29 Relative 1σ-Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren von Brennelementen des UAM-LWR-Benchmarks aus TSUNAMI und XSUSA/SCALE 6.2..... 134

Abb. 6.30 Relative 1σ-Unsicherheiten des Multiplikationsfaktors und der 2-Gruppen Wirkungsquerschnitte des PB-2-Brennelements (HFP) des UAM-LWR-Benchmarks aus TSUNAMI und XSUSA/SCALE 6.2..... 135

Abb. 6.31 Relative 1σ-Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren von Brennelementen des UAM-LWR-Benchmarks aus XSUSA/SCALE 6.1 und XSUSA/HELIOS-2 136

Abb. 6.32 Relative 1σ-Unsicherheiten des Multiplikationsfaktors und der 2-Gruppen-Wirkungsquerschnitte des PB-2-Brennelements (HFP) des UAM-LWR-Benchmarks aus XSUSA/SCALE 6.1 und XSUSA/HELIOS-2..... 137

Abb. 6.33 HELIOS-Modelle für das SWR-UO2-Brennelement, das WWER-UO2-Brennelement und das SWR-MOX-Brennelement (v.l.n.r.) 138

Abb. 6.34 Nominalwerte und relative 1σ-Unsicherheiten des Multiplikationsfaktors für die Brennelemente PB-2 (links oben), KOZ-6 (rechts oben) und SWR-MOX (unten) als Funktion des Abbrands aus XSUSA/SCALE 6.1 und XSUSA/HELIOS-2 138

Abb. 6.35 Relative 1σ-Unsicherheiten der 2-Gruppen-Wirkungsquerschnitte des PB-2-Brennelements als Funktion des Abbrands aus XSUSA/SCALE 6.1 und XSUSA/HELIOS-2 139

Abb. 6.36 Relative 1σ-Unsicherheiten der Aktiniden-Inventare beim Endabbrand des PB-2-Brennelements als Funktion des Abbrands aus XSUSA/SCALE 6.1 und XSUSA/HELIOS-2 140

Tabellenverzeichnis

Tab. 3.1 Multiplikationsfaktoren und Reaktivitätsdifferenzen für die VENUS-9-Anordnungen aus nTRACER und KENO-V.a 13

Tab. 3.2 Multiplikationsfaktoren der originalen und der vereinfachten Modelle für die KRITZ-2-Anordnungen ermittelt mit KENO-V.a 19

Tab. 3.3 Multiplikationsfaktoren und Reaktivitätsdifferenzen für die vereinfachten KRITZ-2 Anordnungen aus nTRACER und KENO-V.a 19

Tab. 3.4 Multiplikationsfaktoren für die BEAVRS-Brennelemente aus Serpent im Vergleich mit nTRACER 22

Tab. 3.5 Gemessene kritische Borkonzentration für verschiedene Steuerbankkonfigurationen und Abweichungen von der Kritikalität im QUABOX/CUBBOX-Modell 24

Tab. 3.6 Brennelement-Abbrandberechnungen zur Validierung von SCALE 6.2 29

Tab. 3.7 Unsichere Parameter für die SWR-ATWS-Unsicherheitsanalyse 37

Tab. 4.1 Relative C5G7-TD-Brennelementleistungen aus Serpent und QC-ATHLET 48

Tab. 4.2 Multiplikationsfaktor eines SWR-Kerns in unterschiedlichen Zuständen bezüglich der Steuerstäbe 61

Tab. 4.3 Serpent-Ergebnisse für den Multiplikationsfaktor und Zwei-Gruppen-Wirkungsquerschnitte (1/cm) für eine Fragmentschüttung 64

Tab. 5.1 MCNP-Ergebnisse für das MOX-3600-Brennelement 69

Tab. 5.2 MCNP-Ergebnisse für das CAR-3600-Brennelement 69

Tab. 5.3 MCNP-Ergebnisse für das MOX-1000-Brennelement 69

Tab. 5.4 MCNP-Ergebnisse für das MET-1000-Brennelement..... 69

Tab. 5.5 Änderungen im Multiplikationsfaktor beim Übergang von JEFF-3.1.2 zu JEFF-3.2 71

Tab. 5.6 Änderung im Multiplikationsfaktor beim Übergang von ENDF/B-VII.1 zu JEFF-3.2 71

Tab. 5.7 Übersicht über die für schnelle Systeme erzeugten Wirkungsquer schnittsbibliotheken 74

Tab. 5.8 Unterschiede im Multiplikationsfaktor homogenisierter Brennelemente zwischen NEWT (Multigruppen-Daten) und KENO-VI (Daten kontinuierliche Energie) 74

Tab. 5.9 Unterschiede im Multiplikationsfaktor heterogener Stabzellen zwischen NEWT (Multigruppen-Daten) und den KENO-VI (Daten kontinuierliche Energie)..... 80

Tab. 5.10 Unterschiede der Multiplikationsfaktoren zwischen NEWT-Multigruppen-Berechnungen und den Referenzrechnungen mit KENO-VI für die heterogenen Brennelemente bei 293 K..... 80

Tab. 5.11 Energiegrenzen für die 8-Gruppen-Struktur 83

Tab. 5.12 Unterschiede im Multiplikationsfaktor der Ganzkernmodelle zwischen KENO-VI mit Multigruppendaten und Daten kontinuierlicher Energie..... 85

Tab. 5.13 Abweichungen der Multigruppenrechnungen von der Kritikalität für kritische Experimente 87

Tab. 5.14 MET1000-Brennelement: Unsicherheiten des Eigenwerts, der Doppler-Reaktivität und der Na-Void-Reaktivität 91

Tab. 5.15 MOX3600-Brennelement: Unsicherheiten des Eigenwerts, der Doppler-Reaktivität und der Na-Void-Reaktivität 91

Tab. 5.16 MET1000-Brennelement: Hauptbeiträge zur Unsicherheit des Eigenwerts k, der Doppler-Reaktivität und der Na-Void-Reaktivität 92

Tab. 5.17 MOX3600-Brennelement: Hauptbeiträge zur Unsicherheit des Eigenwerts k, der Doppler-Reaktivität und der Na-Void-Reaktivität 92

Tab. 5.18 Gesamtzahl der zu variierenden Parameter in einer XSUSA-Analyse eines SFR-Brennelements 94

Tab. 6.1 Multiplikationsfaktor und kritische Steuerstabstellung für den SPERT-III-Kern 108

Tab. 6.2 Ergebnisse der Nominalrechnungen für die SFR-Reaktorkerne mit SCALE/KENO-VI 110

Tab. 6.3 Nominalwerte und relative 1σ-Unsicherheiten der Multiplikations faktoren und der Absorber- und Natrium-Void-Reaktivitätswerte für die MET1000-Anordnungen aus TSUNAMI-3D und XSUSA/KENO-VI 113

Tab. 6.4 Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren sphärischer Anordnungen ... 114

Tab. 6.5 Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren von Stabzellen 115

Tab. 6.6 Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren von kritischen Anordnungen in dreidimensionaler Darstellung 116

Tab. 6.7 Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren kritischer Anordnungen und deren 95 %-Konfidenzintervalle 125

Anhang

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

A Technische Notizen

A01 F. Bostelmann A. Aures, M. Stuke, W. Zwermann, A Comprehensive Evaluation Suite for the Uncertainty Analysis Codes XSUSA, SAMPLER, and TSUNAMI, Okt. 2017

A02 F. Bostelmann, A. Aures, B. Krzykacz-Hausmann, L. Gallner, K. Velkov, W. Zwermann, XSUSA: Cross Section Uncertainty and Sensitivity Analysis, Documentation and User Manual, Aug. 2017

A03 F. Bostelmann, Building SCALE 6.2.2 at GRS, TN-BOF-2017/1, Sep. 2017

A04 F. Bostelmann, Generation of Multi-Group Cross Section Libraries with AMPX of SCALE 6.2.2, TN-BOF-2017/2, Sep. 2017

A05 F. Bostelmann, Generation of Multi-Group Covariance Libraries with AMPX of SCALE 6.2.2, TN-BOF-2017/3, Sep 2017

B Veröffentlichungen

B01 A. Aures, F. Bostelmann, V. Hannstein, K. Velkov, W. Zwermann, N. Guilliard, J. Lapins, W. Bernnat, Depletion Calculation and Uncertainty/Sensitivity Analysis for a Sodium-Cooled Fast Spectrum Fuel Assembly, ANS MC2015, Nashville, TN, USA (2015)

B02 W. Bernnat, N. Guilliard, J. Lapins, A. Aures, I. Pasichnyk, Y. Périn, K. Velkov, W. Zwermann, Monte Carlo Full Core Neutronics Analysis with Detailed Consideration of Thermal-Hydraulic Parameters, ANS MC2015, Nashville, TN, USA (2015)

B03 F. Bostelmann, F.-P. Weiß, A. Aures, K. Velkov, W. Zwermann, B.T. Rearden, M.A. Jessee, M.L. Williams, D. Wiarda, W.A. Wieselquist, Uncertainty and Sensitivity Analysis in Criticality Calculations with Perturbation Theory and Sampling, ANS MC2015, Nashville, TN, USA (2015)

B04 F. Bostelmann, W. Zwermann, B. Krzykacz-Hausmann, L. Gallner, A. Aures, K. Velkov, Sampling-Based Nuclear Data Uncertainty Analysis in Criticality and Depletion Calculations, ANS MC2015, Nashville, TN, USA (2015)

B05 M. Zilly, K. Velkov, W. Zwermann, Y.S. Jung, H. G. Joo, Quantifying Nuclear Data Uncertainty in nTRACER Simulation Results with the XSUSA Method, ANS MC2015, Nashville, TN, USA (2015)

B06 W. Zwermann, F.-P. Weiß, A. Aures, K. Velkov, B.T. Rearden, M.A. Jessee, M.L. Williams, D. Wiarda, W.A. Wieselquist, Nuclear Data Uncertainty Analysis with Perturbation Theory and Random Sampling, Annual Meeting on Nuclear Technology 2015, Berlin, Germany (2015)

B07 W. Zwermann, VENUS 7: A Recent Evaluation for the IRPhE Handbook, Annual Meeting on Nuclear Technology 2015, Berlin (2015)

B08 I. Pasichnyk, S. Nikonov, W. Zwermann, K. Velkov, Uncertainty and Sensitivity Analysis of the OECD/NEA Kalinin-3 Benchmark, NURETH-16, Chicago, IL, USA, 2015 (2015)

B09 I. Pasichnyk, W. Zwermann, K. Velkov, S. Nikonov, Neutron-kinetic and thermo-hydraulic uncertainties in the study of Kalinin-3 Benchmark, Kerntechnik 80, p. 402, (2015)

B10 M. Avramova, K. Ivanov, T. Kozlowski, I. Pasichnyk, W. Zwermann, K. Velkov, E. Royer, A. Yamaji, J. Gulliford, Multi-physics and multi-scale benchmarking and uncertainty quantification within OECD/NEA Framework, Annals of Nuclear Energy 84, p. 178, (2015)

B11 A. Aures, F. Bostelmann, W. Zwermann, K. Velkov, Impact of nuclear data on sodium-cooled fast reactor calculations, EPJ Web of Conferences 111, 11003 (2016)

B12 N. Guilliard, W. Bernnat, J. Lapins, I. Pasichnyk, Y. Périn, K. Velkov, W. Zwermann, Analysis of Large Core Neutronics by the Monte Carlo Method Coupled with Thermal Hydraulics, PHYSOR 2016, Sun Valley, ID, USA (2016)

B13 F. Bostelmann, F.-P. Weiß, A. Aures, K. Velkov, W. Zwermann, B.T. Rearden, M.A. Jessee, M.L. Williams, D. Wiarda, W. Wieselquist, Influence of Nuclear Data on Fast Reactor Calculations, PHYSOR 2016, Sun Valley, ID, USA (2016)

B14 I.A. Kodeli, M. Aufiero, W. Zwermann, Comparison of Deterministic and Monte Carlo Codes SUS3D, SERPENT and XSUSA for Beta-Effective Sensitivity Calculations, PHYSOR 2016, PHYSOR, Sun Valley, ID, USA (2016)

B15 I.A. Kodeli, V. Mastrangelo, E. Ivanov, A. Aures, W. Zwermann, M. Aufiero, Y. Peneliau, K. Ivanov, E. Sartori, OECD/NEA Intercomparison of Deterministic and Monte Carlo Cross-Section Sensitivity Codes Using SNEAK-7 Benchmarks, PHYSOR 2016, Sun Valley, ID, USA (2016)

B16 F. Bostelmann, F.-P. Weiß, A. Aures, K. Velkov, W. Zwermann, B.T. Rearden, M.A. Jessee, M.L. Williams, D. Wiarda, W. Wieselquist, Nuclear Data Uncertainty Analysis for Fast Reactor Calculations, Annual Meeting on Nuclear Technology 2016, Hamburg, Germany (2016)

B17 I. Pasichnyk, S. Nikonov, W. Zwermann, K. Velkov, Coupled code analysis of uncertainty and sensitivity of Kalinin-3 benchmark, Kerntechnik 81, p. 427, (2016)

B18 V.F. Boyarinov, P.A. Fomichenko, J. Hou, K. Ivanov, A. Aures, W. Zwermann, K. Velkov, Deterministic Time-Dependent Neutron Transport Benchmark without Spatial Homogenization (C5G7-TD), Version 1.6, July 2016, NEA/NSC/DOC(2016)

B19 W.A. Wieselquist, M.L. Williams, F. Havlůj, R.A. Lefebvre, W. Zwermann, M. Klein, D. Wiarda, M.T. Pigni, I.C. Gauld, M.A. Jessee, J.P. Lefebvre, K.J. Dugan, B.T. Rearden, SAMPLER: A Module for Statistical Uncertainty Analysis with SCALE Sequences, in: B.T. Rearden, M.A. Jessee (Hrsg.), SCALE Code System, ORNL/TM-2005/39 Version 6.2.1 (2016)

B20 J. Hou, M. Avramova, K. Ivanov, E. Royer, M. Jessee, J. Zhang, W. Wieselquist, I. Pasichnyk, W. Zwermann, K. Velkov, Benchmark for Uncertainty Analysis in Modelling (UAM) for Design, Operation and Safety Analysis of LWRs - Volume III: Specification and Support Data for the System Cases (Phase III), Version 1.0 (Draft Version), April 2016, NEA/NSC/DOC(2016)

B21 L. Buiron, G. Rimpault, P. Sciora, N. Stauff, T. K. Kim, T. Taiwo, A. Keresztúri, A. Aures, W. Zwermann, K. Mikityuk, Benchmark for Uncertainty Analysis in Modelling (UAM) for Design, Operation and Safety Analysis of SFRs, Core Definitions, Version 1.5, Rev. 10, Feb. 10, 2017

B22 V.F. Boyarinov, P.A. Fomichenko, J. Hou, K. Ivanov, A. Aures, W. Zwermann, K. Velkov, Deterministic Time-Dependent Neutron Transport Benchmark without Spatial Homogenization (C5G7-TD) - Volume II: Dynamics Phase (Ver. 0.1), NEA/NSC/DOC, Apr. 2018

B23 F. Bostelmann, A. Pautz, W. Zwermann, Treatment of Implicit Effects with XSUSA, MC 2017, Jeju, Korea (2017)

B24 F. Bostelmann, N.R. Brown, A. Pautz, B.T. Rearden, K. Velkov, W. Zwermann, SCALE Multi-Group Libraries for Sodium-cooled Fast Reactor Systems, MC 2017, Jeju, Korea (2017)

B25 A. Aures, M. Zilly, K. Velkov, W. Zwermann, H.G. Joo, nTRACER and KENO V.a Calculations of the VENUS-9/1 Experimental Benchmark, MC 2017, Jeju, Korea (2017)

B26 J. Bousquet, F. Bostelmann, K. Velkov, W. Zwermann, Macroscopic Cross Section Generation with SCALE 6.2 for the MYRRHA Minimal Critical Core, MC 2017, Jeju, Korea (2017)

B27 A. Aures, A. Pautz, K. Velkov, W. Zwermann, Introduction of a Hybrid Deterministic / Stochastic Calculation Model for Transient Analysis, MC 2017, Jeju, Korea (2017)

B28 W. Bernnat, N. Guillard, J. Lapins, A. Aures, F. Bostelmann, J. Bousquet, K. Velkov, W. Zwermann, Uncertainty Analysis for VVER-1000 Core Simulations with MCNP/ATHLET, MC 2017, Jeju, Korea (2017)

B29 N.E. Stauff, T.K. Kim, T.A. Taiwo, L. Buiron, G. Rimpault, Y.K. Lee, B. Batki, A. Keresztúri, F. Bostelmann, W. Zwermann, E. Fridman, N. Guilliard, R. Lopez, A. Gomez, F. Puente-Espel, E. del Valle, A. Peregudov, M. Semenov, Y. Nakahara, T. Ivanova, J. Gulliford, Evaluation of the OECD/NEA/SFR-UAM Neutronics Reactivity Feedback and Uncertainty Benchmarks, IAEA-CN245-149, FR17, Yekaterinburg, Russland (2017)

B30 I.-A. Kodeli, G. Rimpault, P. Dufay, Y. Peneliau, J. Tommasi, E. Fridman, W. Zwermann, A. Aures, E. Ivanov, K. Ivanov, Y. Nakahara, T. Ivanova, J. Gulliford, Uncertainty Analysis of Kinetic Parameters for Design, Operation and Safety Analysis of SFRs, IAEA-CN245-136, FR17, Yekaterinburg, Russland (2017)

B31 G. Rimpault , L. Buiron, N.E. Stauff, T.K. Kim, T.A. Taiwo, Y-K Lee, A. Aures, F. Bostelmann, E. Fridman, A. Kereszturi, B. Batki, I.-A. Kodeli, K. Mikityuk, R. Lopez, A. Gomez, F. Puente-Espel, E. del Valle, A. Peregudov, M. Semenov, G. Manturov, Y. Nakahara, J. Dyrda, T. Ivanova, Objectives and Status of the OECD/NEA sub-group on Uncertainty Analysis in Modelling (UAM) for Design, Operation and Safety Analysis of SFRs (SFR-UAM), IAEA-CN245-220, FR17, Yekaterinburg, Russland (2017)

B32 W. Zwermann, Key Topic Enhanced Safety & Operation Excellence: Focus Session: Uncertainty Analyses in Reactor Core Simulations, atw International Journal for Nuclear Power Vol. 62, Issue 12 (2017)

B33 F. Bostelmann, W. Zwermann, K. Velkov, I. Trivedi, K. Ivanov, A. Pautz, Benchmark for Uncertainty Analysis in Modelling (UAM) for Design, Operation and Safety Analysis of SFRs – Definition of Sub-Exercises (Draft), März 2018

B34 F. Bostelmann, A. Pautz, W. Zwermann, SCALE Covariance Libraries for Sodium-Cooled Fast Reactor Systems, PHYSOR 2018, Cancun, Mexico (2018)

B35 J. Bousquet, U. Stoll, K. Velkov, W. Zwermann, C. Wemple, T. Simeonov, Nuclear Data Uncertainty Propagation with HELIOS2 and XSUSA for LWR Systems, PHYSOR 2018, Cancun, Mexico (2018)

B36 F. Bostelmann, B. Krzykacz-Hausmann, A. Aures, W. Zwermann, K. Velkov, Correlation-Based Multiple Sensitivity Coefficients for Sampling-Based Nuclear Data Uncertainty Analysis with XSUSA, BEPU-2018, Lucca, Italien (2018)

B37 A. Aures, W. Bernnat, F. Bostelmann, J. Bousquet, Bernard Krzykacz-Hausmann, A. Pautz, K. Velkov, W. Zwermann, Reactor Simulations with Nuclear Data Uncertainties, BEPU-2018, Lucca, Italien (2018)

B38 F. Bostelmann, A. Pautz, W. Zwermann, W. Bernnat, Nuclear Data Uncertainty Analyses with XSUSA and MCNP, Annual Meeting on Nuclear Technology 2018, Berlin (2018)

B39 G. Rimpault, L. Buiron, N. E. Stauff, T. K. Kim, T. A. Taiwo, Y-K Lee, W. Zwermann, F. Bostelmann, K. Velkov, N. Guilliard, E. Fridman, A. Kereszturi, B. Batki, I.-A. Kodeli, K. Mikityuk, R. Lopez, A. Gomez, F. Puente-Espel, E. del Valle, A. Peregudov, M. Semenov, G. Manturov, M. Abramova, I. Trivedi, K. Ivanov, A. Pautz, A. Yamaji, I. Hill, T. Ivanova, Current Status and Perspectives of the OECD/NEA sub-group on Uncertainty Analysis in Modelling (UAM) for Design, Operation and Safety Analysis of SFRs (SFR-UAM), BEPU-2018, Lucca, Italien (2018)

C NURESAFE-Berichte

C01 B. Chanaron (Koordinator), NURESAFE Second Periodic Report (2016)

C02 B. Chanaron (Koordinator), NURESAFE Final Report (2016)

D Ergebnisdateien zum UAM-LWR-Benchmark Phase I

D01 Exercise I1 Set 1: TSUNAMI, cov44

D02 Exercise I1 Set 1: TSUNAMI, cov56

D03 Exercise I1 Set 1: XSUSA/HELIOS, cov44

D04 Exercise I1 Set 1: XSUSA/SCALE, cov44

D05 Exercise I1 Set 1: XSUSA/SCALE, cov56

D06 Exercise I1 Set 2: TSUNAMI, cov44

D07 Exercise I1 Set 2: TSUNAMI, cov56

D08 Exercise I1 Set 2: XSUSA/HELIOS, cov44

D09 Exercise I1 Set 2: XSUSA/SCALE, cov44

D10 Exercise I1 Set 2: XSUSA/SCALE, cov56

D11 Exercise I2 Set 1: TSUNAMI, cov44

D12 Exercise I2 Set 1: TSUNAMI, cov56

D13 Exercise I2 Set 1: XSUSA/SCALE, cov44

D14 Exercise I2 Set 1: XSUSA/SCALE, cov56

D15 Exercise I2 Set 1r: TSUNAMI, cov44

D16 Exercise I2 Set 1r: TSUNAMI, cov56

D17 Exercise I2 Set 1r: XSUSA/SCALE, cov44

D18 Exercise I2 Set 1r: XSUSA/SCALE, cov56

D19 Exercise I2 Set 3: TSUNAMI, cov44

D20 Exercise I2 Set 3: TSUNAMI, cov56

D21 Exercise I2 Set 3: XSUSA/SCALE, cov44

D22 Exercise I2 Set 3: XSUSA/SCALE, cov56

D23 Exercise I2 Set 4: TSUNAMI, cov44

D24 Exercise I2 Set 4: TSUNAMI, cov56

D25 Exercise I2 Set 4: XSUSA/SCALE, cov44

D26 Exercise I2 Set 4: XSUSA/SCALE, cov56

D27 Exercise I3 Set 1: TSUNAMI, cov44

D28 Exercise I3 Set 1: TSUNAMI, cov56

D29 Exercise I3 Set 1: XSUSA/SCALE, cov44

D30 Exercise I3 Set 1: XSUSA/SCALE, cov56

D31 Exercise I3 Set 3: TSUNAMI, cov44

D32 Exercise I3 Set 3: TSUNAMI, cov56

D33 Exercise I3 Set 3: XSUSA/SCALE, cov44

D34 Exercise I3 Set 3: XSUSA/SCALE, cov56

D35 Exercise I3 Set 4: XSUSA/SCALE/MCNP, cov44

D36 Exercise I3 Set 4: XSUSA/SCALE/MCNP, cov56

Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH

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

Forschungszentrum
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

ISBN 978-3-946607-83-0