

**Weiterentwicklung  
moderner Verfahren zu  
Neutronentransport und  
Unsicherheitsanalysen  
für Kernberechnungen**

## **Weiterentwicklung moderner Verfahren zu Neutronentransport und Unsicherheitsanalysen für Kernberechnungen**

Zwischenbericht

Winfried Zwermann  
Alexander Aures  
Friederike Bostelmann  
Ihor Pasichnyk  
Yann Périn  
Kiril Velkov  
Matias Zilly

Dezember 2016

### **Anmerkung:**

Das diesem Bericht zugrunde liegende FE-Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie (BMWi) unter dem Kennzeichen RS1536 durchgeführt.

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Auftragnehmer.

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

**Deskriptoren:**

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

## Kurzfassung

Der vorliegende Bericht dokumentiert den Zwischenstand (3. Quartal 2016) der im RS-Forschungsvorhaben RS1536 „Weiterentwicklung moderner Verfahren zu Neutronentransport und Unsicherheitsanalysen für Kernberechnungen“ 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. Darüber hinaus werden die im Vorgängervorhaben RS1503 begonnenen Arbeiten zum europäischen NURESAFE-Projekt fortgesetzt und abgeschlossen.

## **Abstract**

This report documents the status of 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” as of the 3<sup>rd</sup> quarter of 2016. The superordinate goal of the project is the development, validation, and application of neutron transport methods and uncertainty analyses for reactor core calculations. These calculation methods will mainly be applied to problems related to the core behaviour of light water reactors and innovative reactor concepts, 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. Moreover, work regarding the European NURES SAFE project, started in the preceding project RS1503, are being continued and completed.

## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung .....</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Zielsetzung.....</b>	<b>2</b>
2.1	Gesamtziel.....	2
2.2	Deterministische Berechnungsmethoden.....	3
2.3	Monte-Carlo-Berechnungsmethoden .....	4
2.4	Nukleare Daten.....	5
2.5	Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen.....	7
<b>3</b>	<b>AP1: Deterministische Berechnungsmethoden .....</b>	<b>9</b>
3.1	Validierung deterministischer Rechenprogramme.....	9
3.2	Beteiligung am europäischen NURESAFE-Projekt .....	20
<b>4</b>	<b>AP2: Monte-Carlo-Berechnungsmethoden .....</b>	<b>30</b>
4.1	Entwicklung eines Verfahrens zur Beschreibung transienter Vorgänge mit Hilfe der Monte-Carlo-Methode .....	30
4.2	Beschreibung von Zuständen schwerer Kernzerstörung mit der Monte- Carlo-Methode.....	38
<b>5</b>	<b>AP3: Nukleare Daten .....</b>	<b>43</b>
5.1	Überprüfung nuklearer Datenevaluierungen für schnelle Systeme.....	43
5.2	Erzeugung von Kovarianzdaten in Multigruppen-Darstellung.....	54
<b>6</b>	<b>AP4: Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen .....</b>	<b>56</b>
6.1	Fortsetzung der Teilnahme am UAM-LWR-Benchmark .....	56
6.2	Systematische Unsicherheitsanalysen für schnelle Reaktorsysteme (UAM-FR) .....	60
6.3	Weiterentwicklung der Sampling-basierten XSUSA-Methodik.....	61
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung .....</b>	<b>72</b>
<b>8</b>	<b>Literaturverzeichnis.....</b>	<b>77</b>

<b>Abbildungsverzeichnis.....</b>	<b>83</b>
<b>Tabellenverzeichnis.....</b>	<b>86</b>
<b>Anhang A Technische Notizen .....</b>	<b>88</b>
<b>Anhang B Veröffentlichungen .....</b>	<b>88</b>
<b>Anhang C NURESAFE-Berichte .....</b>	<b>91</b>

# 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 dem nach AtG §7c 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 bei der GRS im Bereich *Reaktorsicherheitsforschung* von der Abteilung *Kernverhalten* 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 *Kernverhalten* 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 Betriebs Erfahrung, eine quantitative Ermittlung der Ergebnisunsicherheiten unerlässlich. Die Arbeiten des Vorhabens RS1536 werden im Folgenden ausführlich beschrieben.



## 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 auslegungüberschreitenden 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 /SNU 09/ 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 Abschnitt 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.

Das Reaktorunglück in Fukushima, in dessen Verlauf nur wenige Aussagen zum Zustand der betroffenen Reaktorkerne bezüglich deren Kritikalität gemacht werden konnten, 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 der Kritikalität vorgenommen und auch Wirkungsquerschnittsdaten erzeugt werden, die gegebenenfalls anschließend für eine Beschreibung des beschädigten Reaktors mit einem Kernsimulator, gekoppelt mit Codes zur Beschreibung des thermohydraulischen und thermomechanischen Verhaltens, verwendet werden können. 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, die durch Unsicherheiten in den Eingangsgrößen verursacht werden, erforderlich. 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 /BLY 13/. Für die Abteilung *Kernverhalten* 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 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 entsprechenden 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

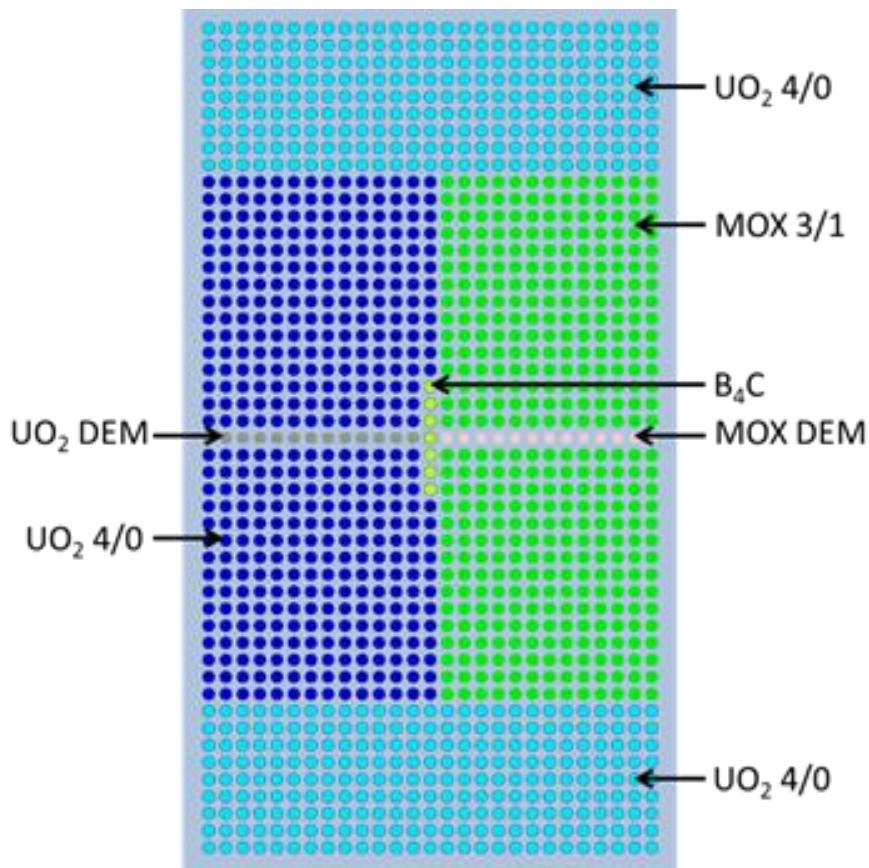
Der folgende Abschnitt beschreibt die durchgeführten Arbeiten am nuklearen Programmsystem der GRS bezüglich deterministischer Rechenmethoden. Dies sind die weitere Validierung des direkten Ganzkern-Transport-Codes nTRACER und Validierungsarbeiten an der neuen SCALE-6.2-Version. Im Arbeitspaket *SWR-ATWS 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 ist in verschiedenen Stufen geplant. In einem ersten Schritt wurden mehrere für Leichtwasserreaktoren repräsentative kritische Experimente der VENUS-9 Serie herangezogen /NEA 15b/. Diese Serie von Experimenten wurde im Nullleistungsreaktor VENUS im belgischen Forschungszentrum SCK/CEN in Mol zwischen 1967 und 1968 durchgeführt. Das Brennstabgitter bestand 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  $\text{UO}_2$  Brennstoff umgeben. In drei von vier Experimenten wurden sieben  $\text{UO}_2$ -Brennstäbe an der Grenze zur MOX-Region durch folgende Materialien ersetzt: i) eine Aluminiumplatte mit einer Wandstärke von 0.905 cm, ii) sieben  $\text{B}_4\text{C}$ -Absorberstäbe und iii) Zellen, die nur mit Wasser gefüllt sind. Das Brennstabgitter für die  $\text{B}_4\text{C}$ -Anordnung ist in Abb. 3.1 dargestellt. Die in den Experimenten entlang der Brennstabreihe „ $\text{UO}_2$  DEM“ / „MOX DEM“ (DEM = „demonstrable“ – 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 vorerst 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 ist, dass bei ersten Testrechnungen mit einem vollständigen Modell keine Konvergenz erreicht werden konnte. Nach ersten Einschätzungen wird dies durch das Fehlen eines Moderators - in diesem Fall Wasser - zwischen den Brennstäben verursacht. Dieses Verhalten soll Gegenstand zukünftiger Untersuchungen sein. Um den Einfluss der Modellvereinfachungen abzuschätzen, wurden dieselben Vereinfachungen auf bereits vorhandene Modelle für den Monte-Carlo-Code KENO-V.a des SCALE-6.2-Programmsystems /REA 16/ angewendet. Unter Anwendung der ENDF/B-VII.0-Bibliothek mit 238 Energiegruppen wurde eine Reaktivitätsdifferenz von ca. -1700 pcm für das nominale Modell, das Modell mit der Aluminiumplatte und das Modell mit den Wasserzellen ermittelt. Für das  $B_4C$ -Modell resultiert die Vereinfachung in einer Reaktivitätsdifferenz von ca. -1000 pcm.

Im Folgenden werden für die vier Anordnungen die mit nTRACER und KENO-V.a berechneten Multiplikationsfaktoren miteinander verglichen; danach folgt für drei Anordnungen 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. Für die KENO-V.a-Rechnung wurden 8000 aktive Generationen mit je 25000 Neutronenschicksalen gewählt. In Tab. 3.1 sind der Vergleich der Multiplikationsfaktoren und der entsprechenden Reaktivitätsdifferenzen dargestellt.

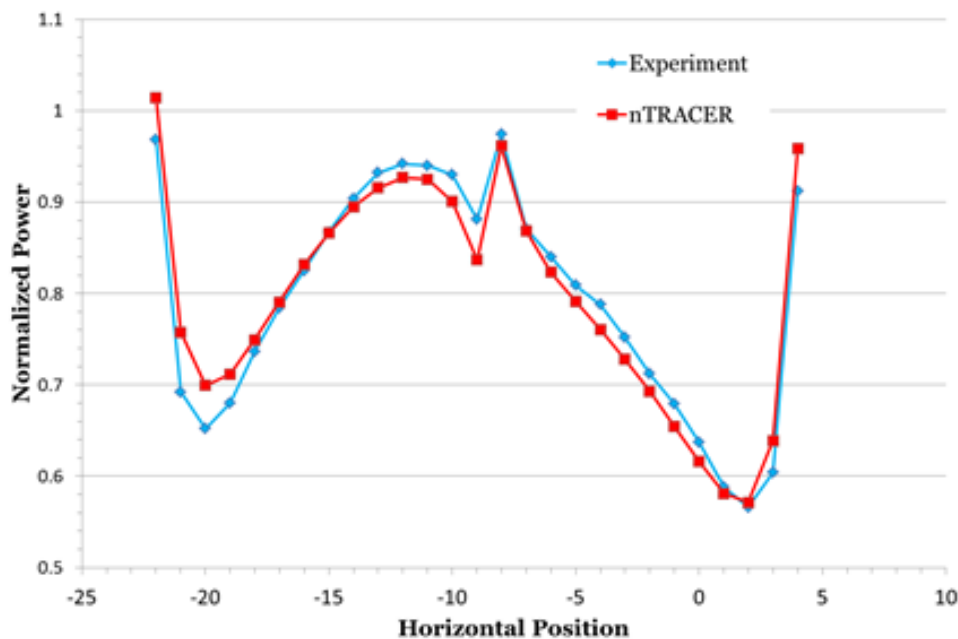
**Tab. 3.1** Multiplikationsfaktoren und Reaktivitätsdifferenzen für vier VENUS-9-Anordnungen aus nTRACER und KENO-V.a.

Anordnung	nTRACER $k_{\text{eff}}$	KENO V.a $k_{\text{eff}}$	$\Delta\rho$ (pcm)
nominal	0.97900	0.979079	-8
Al-Platte	0.97802	0.977856	17
B <sub>4</sub> C	0.98574	0.984855	91
H <sub>2</sub> O	0.97700	0.977116	-12

Generell weisen beide Neutronentransportcodes eine sehr gute Übereinstimmung auf. Als kleinste Differenz ergibt sich -8 pcm für die nominale Anordnung und als größte Differenz 91 pcm für die B<sub>4</sub>C Anordnung.

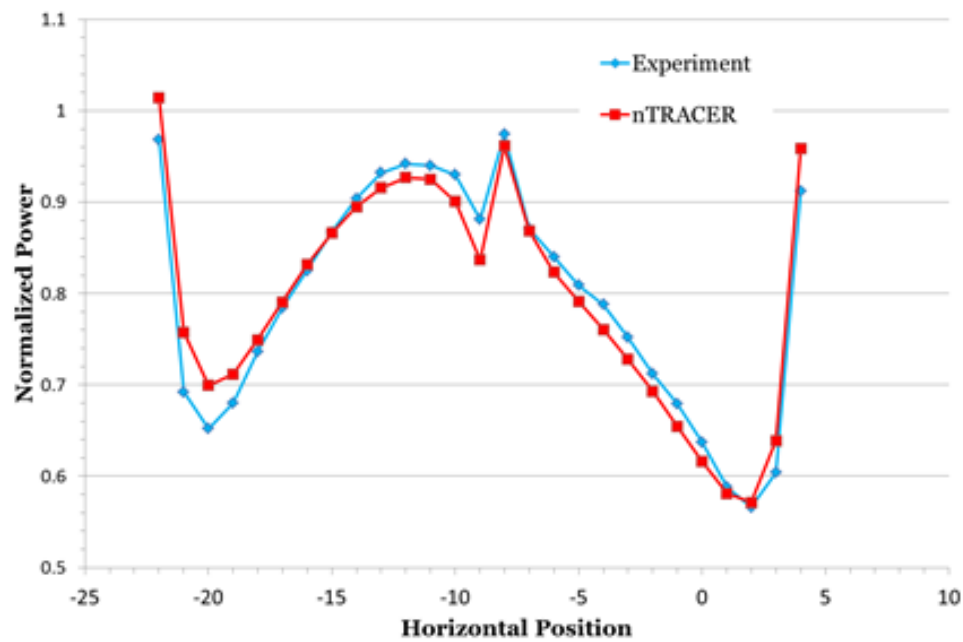
In Abb. 3.2 werden für die nominale Anordnung die experimentell bestimmte Stableistungsverteilung und die von nTRACER berechnete Stableistungsverteilung verglichen. Bei den UO<sub>2</sub>-Brennstäben auf den Positionen -22 bis -18 überschätzt nTRACER die experimentellen Werte. An den Positionen -17 bis -14 ist eine sehr gute Übereinstimmung zu erkennen. Die Stableistung der UO<sub>2</sub>-Brennstäbe in der Nähe zum MOX-Brennstabgitter wird von nTRACER unterschätzt, wohingegen eine gute Übereinstimmung bei den MOX-Brennstäben zu erkennen ist. In der Mitte des MOX-Brennstabgitters an den Positionen -6 bis 0 weisen die berechneten und gemessenen Leistungswerte eine geringe Abweichung auf. Auf den äußeren Positionen 3 und 4 kommt es dagegen wieder zu einer Überschätzung seitens nTRACER. 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  $\text{UO}_2$ -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. In zukünftigen Untersuchungen ist geplant, die Ursache für die Abweichungen zu finden, wie z.B. durch die Wahl einer anderen Multigruppenbibliothek mit mehr Energiegruppen oder die Wahl anderer Parameter für die Resonanzbehandlung.

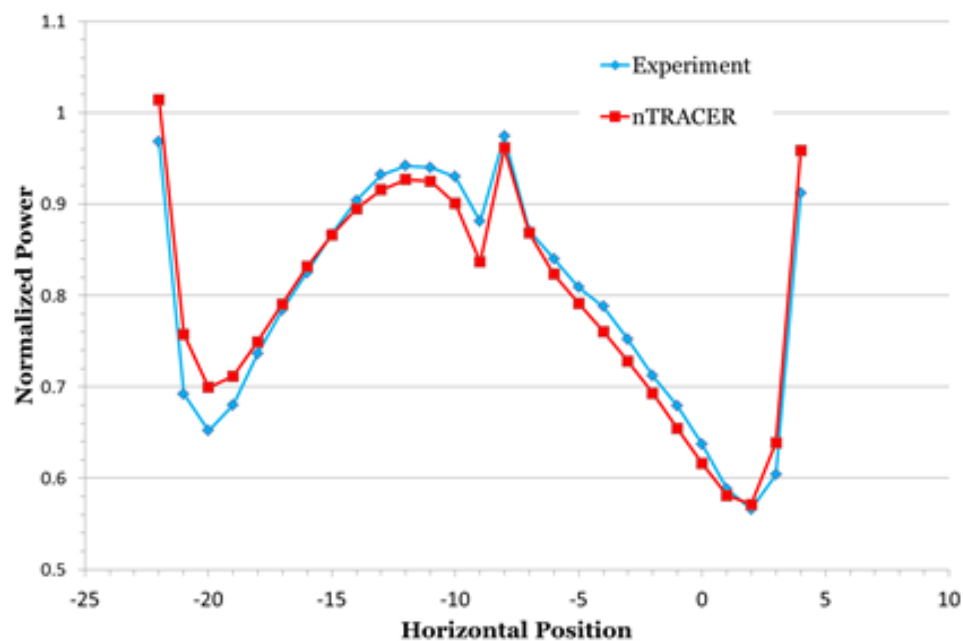


**Abb. 3.2** Gemessene und berechnete Stableistungsverteilungen für die nominale VENUS-9-Anordnung

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. Bei den Brennstäben in der Nähe der Aluminiumplatte unterschätzt nTRACER die Stableistung deutlich sowohl bei den  $\text{UO}_2$ - als auch bei den MOX-Brennstäben. In Abb. 3.4 werden die Stableistungsverteilungen für die Anordnung mit den Wasserzellen gezeigt. An den Rändern berechnet nTRACER wieder höhere Brennstableistungen im Vergleich zu den gemessenen Werten. Bei den mittleren Positionen der  $\text{UO}_2$ -Brennstäbe ergibt sich eine gute Übereinstimmung. Bei den MOX-Brennstäben ist lediglich eine geringe Abweichung zu erkennen. Jedoch werden die gemessenen Brennstableistungen beider Brennstabtypen in der Nähe der Wasserzellen von nTRACER deutlich unterschätzt.



**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

In weiterführenden Studien soll so weit wie möglich auf die geometrischen Vereinfachungen verzichtet werden. Außerdem soll untersucht werden, wie die Abweichungen bei den berechneten Stableistungsverteilungen im Vergleich zu den experimentellen

Werten verringert werden können. Dazu wurden die Eingabedatensätze und Ergebnisse an das nTRACER-Entwicklerteam übergeben.

Darüber hinaus wurden mit nTRACER Berechnungen für das C5G7-TD-Benchmark der OECD/NEA durchgeführt. Hierzu wurde das bestehende Modell basierend auf der Spezifikation aus dem Jahr 2004 an die neue Spezifikation, die im Mai 2016 freigegeben wurde, angepasst. Der aus  $\text{UO}_2$ - und MOX-Brennelementen bestehende Reaktorkern ist auf eine Länge von 128.52 cm verkürzt worden 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 transport-korrigierte  $P_0$ -Wirkungsquerschnitte, 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, wurde auch ein Modell mit expliziter Brennstabgeometrie erstellt. Für einen Code-zu-Code-Vergleich konnte auf ein bereits bestehendes Modell für den Monte-Carlo-Neutronentransportcode Serpent 2 /LEP 15/ zurückgegriffen werden. Da Serpent 2 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 transport-korrigierten Wirkungsquerschnitten wird ein Multiplikationsfaktor von 1.17675 bestimmt. Die sehr große Reaktivitätsdifferenz von 2258 pcm zu dem Referenzergebnis beweist, dass die Benutzung von transport-korrigierten, räumlich homogenisierten Wirkungsquerschnitten eine zu starke Näherung darstellt.

Im Hinblick auf die Anwendung von nTRACER für Ganzkernsimulationen wurden erste Berechnungen für das BEAVRS-Benchmark /HOR 13/ durchgeführt. Es wurden drei verschiedene Anwendungsfälle nachgerechnet. Das BEAVRS-Benchmark (Benchmark for Evaluation and Validation of Reactor Simulations) wurde definiert, um die Genauig-

keit von Reaktorphysikprogrammen zu ermitteln. Es beinhaltet detaillierte Geometrie- und Betriebsdaten von zwei Zyklen eines Druckwasserreaktors. 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 Zustand ist Vollast 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. Von allen drei Rechnungen wurden die Multiplikationsfaktoren ausgewertet. 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.

### ***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 Berechnungskette der GRS mitaufgenommen. 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-Installationskripten 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.

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 15a/.
- b) JEZEBEL: Unreflektierte Kugel aus Plutonium-239 /NEA 15a/.
- c) TOPSY: Von Natururan reflektierte Uranium-235-Kugel /NEA 15a/.

- d) POPSY: Von Natururan reflektierte Plutonium-Kugel /NEA 15a/.
- e) LEU-SOL-THERM-002, Fall 1: Wasserreflektierte Kugel mit niedrig angereichertem Uran-Oxyfluorid /NEA 15a/.
- f) HEU-SOL-THERM-009, Fall 1: Wasserreflektierte Kugel mit hoch angereichertem Uran-Oxyfluorid /NEA 15a/.
- g) PU-SOL-THERM-011, Fall 16-1: Unreflektierte Kugel mit Plutoniumnitrat /NEA 15a/.
- h) U233-SOL-THERM-005, Fall 1: Wasserreflektierte Kugel mit U-233-UranylNitrat /NEA 15a/.
- i) KRITZ-2:1-Stabzelle: Quadratisches LWR-Gitter mit niedrig angereichertem  $UO_2$ -Brennstoff /NEA 15b/.
- j) KRITZ-2:19-Stabzelle: Quadratisches LWR-Gitter mit MOX-Brennstoff /NEA 15b/.
- 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 15a/.
- 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 15b/.
- p) VENUS-7: Zylindrische und quadratische Anordnungen aus quadratischen LWR-Gittern mit niedrig angereichertem  $UO_2$ - und MOX-Brennstoff /NEA 15b/.
- q) VENUS-9: Rechteckige Anordnungen aus quadratischen LWR-Gittern mit niedrig angereichertem  $UO_2$ - und MOX-Brennstoff und Heterogenitäten /NEA 15b/.



- r) VENUS-1 und VENUS-2: Kreuzförmige Anordnungen aus quadratischen LWR-Gittern mit niedrig angereicherterem  $\text{UO}_2$ - und MOX-Brennstoff und Absorberstäben /NEA 15b/, /NEA 05/.
- s) B&W PWR (LEU-COMP-THERM-008): Leichtwasser-moderierte quadratische Gitter mit niedrig angereicherterem  $\text{UO}_2$ -Brennstoff und verschiedenen Heterogenitäten /NEA 15a/.

*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 /BLY 13/.
- d) PB-2: SWR-Brennelement (Peach Bottom 2) aus dem UAM-LWR-Benchmark /BLY 13/.
- e) KOZ-6: WWER-1000-Brennelement (Kozlodui 6) aus dem UAM-LWR-Benchmark /BLY 13/.
- 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-FT-Benchmark /BLA 12/.

Für die Überprüfung der in SCALE 6.2 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. Während des Berichtszeitraums waren die Berechnungen mit einer Beta-Version von SCALE 6.2 (beta3) durchgeführt worden. 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.

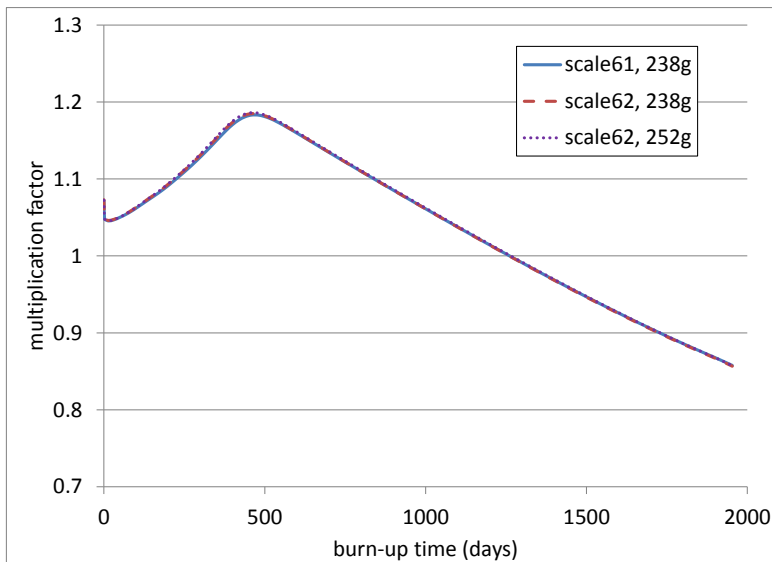
Bisher ergaben sich bei den zugrundeliegenden Kritikalitätsberechnungen und den entsprechenden Unsicherheitsanalysen keine Auffälligkeiten; die Ergebnisse sind im Wesentlichen mit den Ergebnissen früherer Berechnungen konsistent. Die vollständige Durchführung der Berechnungen mit der freigegebenen Version von SCALE 6.2 erfolgt bis zum Vorhabensende; insbesondere werden dann auch die nun verfügbaren auf ENDF/B-VII.1 basierenden nuklearen Daten mit 252 Energiegruppen verwendet.

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 von SCALE 6.2 verwendet.

Die Ergebnisse waren unbefriedigend, wie aus Tab. 3.2 ersichtlich ist. Während mit SCALE 6.1 noch alle Abbrandberechnungen erfolgreich durchgelaufen sind (mit „X“ bezeichnet), konnten mit SCALE 6.2 und der 238-Energiegruppen-Bibliothek immerhin noch die Brennelemente mit quadratischem Gitter (DWR und SWR) berechnet werden. Mit SCALE 6.2 und der 252-Energiegruppen-Bibliothek scheiterten alle Berechnungen bis auf die für den Fall AAA-SWR. Die Ursachen sind bisher noch nicht vollkommen klar.

**Tab. 3.2** 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. 3.5** Abbrand-Abhängigkeit des Multiplikationsfaktors aus Berechnungen mit SCALE

In Abb. 3.5 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 bisherigen Untersuchungen zur Überprüfung von SCALE 6.2 zeigen insgesamt gute Ergebnisse bei Kritikalitätsberechnungen, und große Probleme bei der Durchführung von Abbrandberechnungen, insbesondere für hexagonale Brennelemente. Weitere Studien müssen zeigen, ob 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 Berechnungskette 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 thermohydraulisch 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 Speisewasserpumpen 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 erklären. 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.

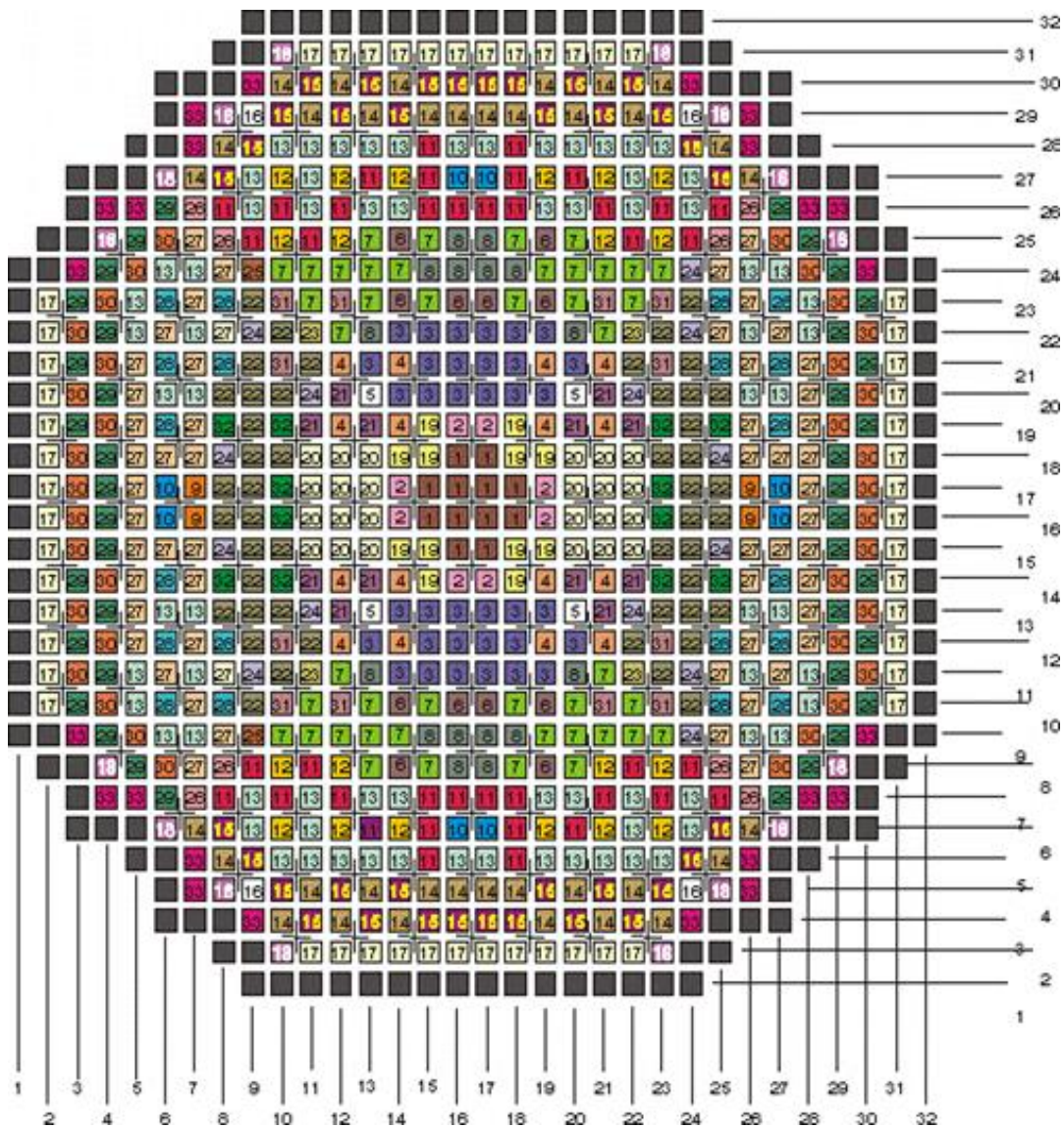
#### *Transiente Beschreibung*

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 vor-

liegenden 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.



**Abb. 3.6** ATHLET-Modell für Peach Bottom Unit 2

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. 3.6 gegeben.

#### *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 thermo-hydraulisch Rückwirkungen nur von CTF.

### *Beschreibung der Best-Estimate-Simulationsergebnisse*

Während der ersten Phase der Transiente wird die Kernleistung durch die Druckerhöhung bestimmt. Die 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 stabilisieren.

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.

**Tab. 3.3** 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
	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

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 Da-

tenanalyse-Framework ROOT, (<http://root.cern.ch>) einem vom CERN entwickelten objektorientierten Rechentool. Die für die Unsicherheitsanalyse ausgewählten unsicheren Parameter sind in Tab. 3.3 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 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  $\text{UO}_2$  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 (OHWFEC)

*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 Zirkonium-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 (OHWFEC)
- 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 Neutronendifusionsgleichung mit wenigen Energiegruppen auf einem groben Gitter. Die Thermohydraulik wird meist durch einen thermohydraulischen Systemcode abgebildet, welcher die Simulation von Auslegungstörfällen 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 2 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

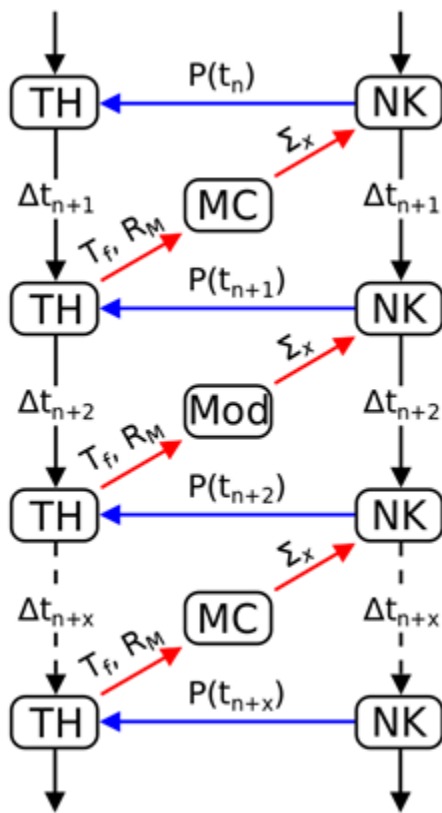
realisiert worden, um stationäre Reaktorzustände berechnen zu können /BER 15/. Im Programm Serpent sind bereits Methoden implementiert, um WG-Wirkungsquerschnitte auf zweidimensionalen Brennelementquerschnitten oder größeren Anordnungen zu ermitteln, wobei bei letzterem WG-Wirkungsquerschnitte gleichzeitig 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 2, 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/ $\text{UO}_2$  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  $\text{UO}_2$ - und MOX-Brennelementen mit dem MC-Code Serpent 2 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 2 einen Multiplikationsfaktor von  $1.28769 \pm 0.00005$ . 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. In Zukunft soll dies für kompliziertere Anordnungen getestet werden.



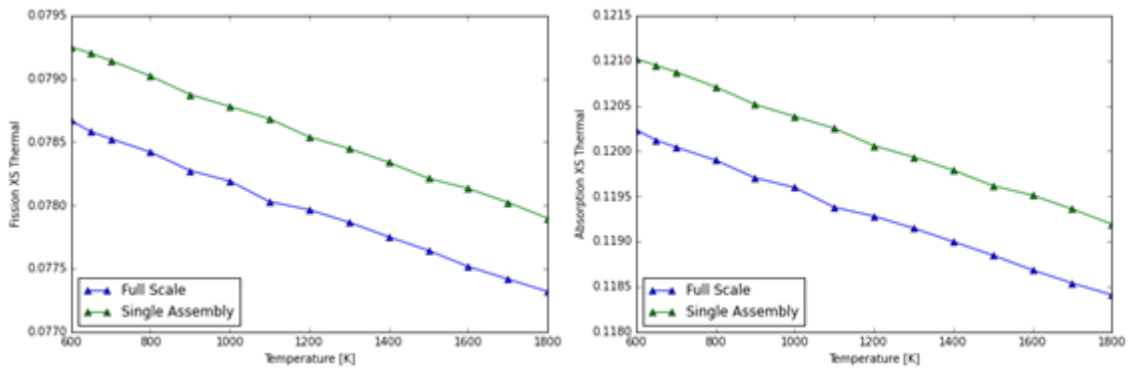
**Abb. 4.1** Einbindung eines Monte-Carlo-Codes (MC) in ein Neutronenkinetik-Thermohydraulik- (NK/TH) Programmsystems

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 An-

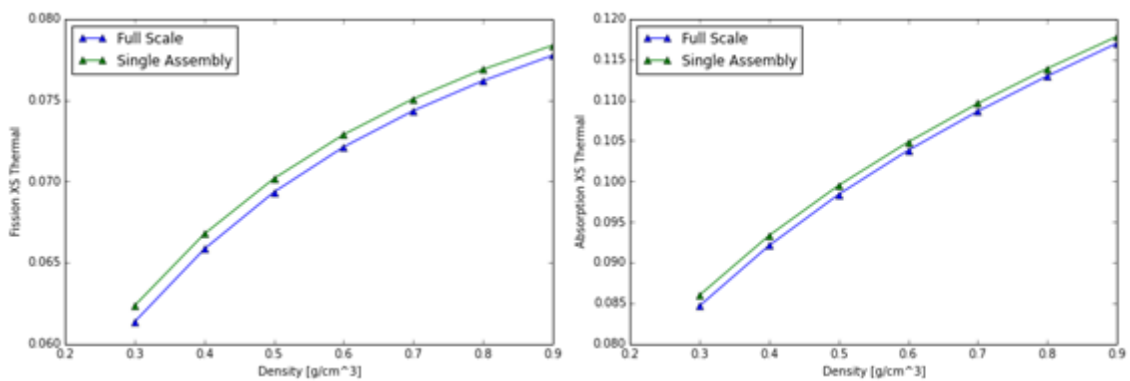


wendung von zeitabhängigen MC-Simulationen für große Modelle aufgrund erheblicher Rechenzeiten noch nicht praktikabel. In dem nun geplanten Konzept sollen reaktordynamische Simulationen mit einem NK/TH-Codesystem kombiniert mit einer Aktualisierung der makroskopischen WG-Wirkungsquerschnitte durch MC-Simulationen 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  $\text{UO}_2$ -Brennelementmodells und für eine Region eines  $\text{UO}_2$ -Brennelements innerhalb des C5G7-Ganzkernmodells erzeugt. Dies wurde in diskreten Schritten für einen Brennstofftemperaturbereich von 600 bis 1800 K und für eine Moderatorichte von 0.2 bis  $0.9 \text{ g/cm}^3$  durchgeführt. Die Verläufe des thermischen Spaltwirkungsquerschnitts und des thermischen Absorptionswirkungsquerschnitts sind als Funktion der Brennstofftemperatur bzw. Moderatorichte in Abb. 4.2 und Abb. 4.3 dargestellt.



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

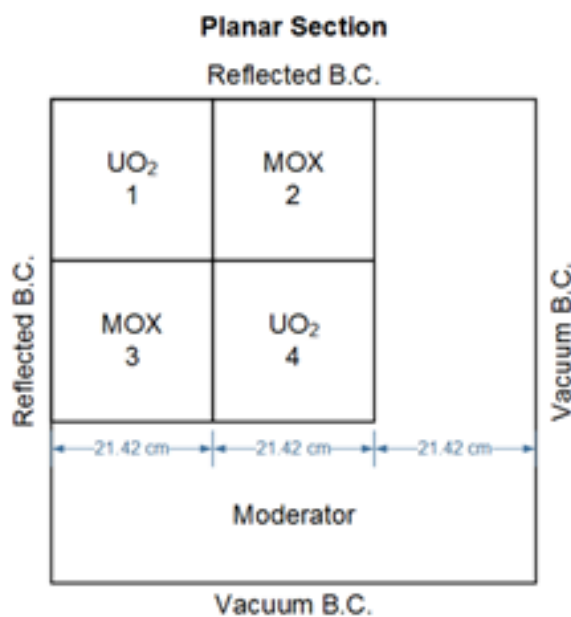


**Abb. 4.3** Makroskopischer Spalt- und Absorptionswirkungsquerschnitt für den thermischen Energiebereich als Funktion der Moderatorichte

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 Moderatorichte beobachten. Dies zeigt, dass die Extrapolation von WG-Wirkungsquerschnitten prinzipiell anwendbar ist, jedoch sollen in Zukunft noch weitere Untersuchungen durchgeführt werden. Um die zulässige Länge eines Makrozeitschritts festzulegen, sollen entsprechende Kriterien gefunden und implementiert werden.

Um in Zukunft 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 Moderatorichte

te 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

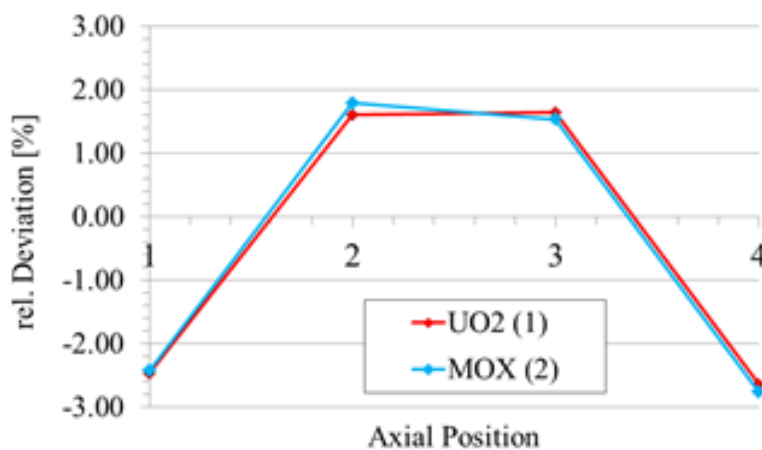
Auf Basis des C5G7-TD-Benchmarks wurde ein erster Test der Programmteile durchgeführt. In Abb. 4.4 ist das Kernlayout dieses Benchmarks dargestellt. Unter Anwendung des Programms zur Erstellung der Modelle für konventionelle Brennelementrechnungen wurden für ein  $\text{UO}_2$ - und ein MOX-Brennelement WG-Wirkungsquerschnitte für verschiedene Brennstofftemperaturen, Moderatorichten und Borkonzentrationen erzeugt (Brennstofftemperatur in K: 560.0, 900.0, 1000.0; ii) Moderatorichte in  $\text{g/cm}^3$ : 0.66114, 0.71186, 0.75206, iii) Borkonzentration in ppm: 0.0, 1000.0, 2000.0). Die Wirkungsquerschnittsdaten wurden anschließend in die Kernsimulatordatenbank 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 Vollast-Zustand durchge-

führt. Als Ergebnis wurde eine Borkonzentration von 994 ppm ermittelt. Die aus der gekoppelten Rechnung resultierenden thermohydraulischen Größen (Brennstofftemperatur, Moderatorichte, 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

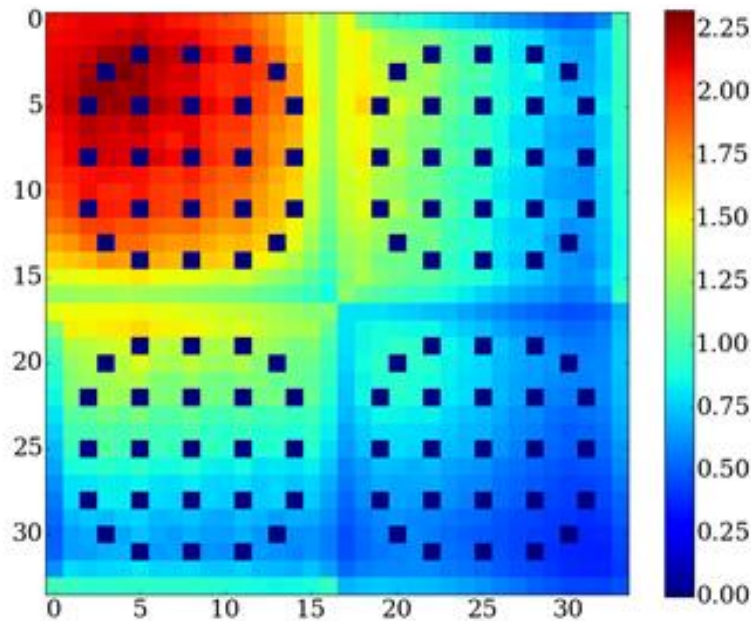
	Serpent	QC-ATHLET	Rel. Diff. (%)
UO <sub>2</sub> (1)	1.641(1)	1.678	2.30
MOX (2)	0.890(1)	0.878	-1.30
MOX (3)	0.891(1)	0.878	-1.43
UO <sub>2</sub> (4)	0.579(1)	0.565	-2.32

Ferner wurden mit beiden Codesystemen die Brennelementleistungen als Funktion der aktiven Brennelementlänge ermittelt. Ein Vergleich zwischen den Ergebnissen beider Codes wird für ein UO<sub>2</sub> und ein MOX Brennelement anhand der rel. Abweichung in Abb. 4.5 gezeigt. Es ergeben sich relative Abweichungen von bis zu  $\pm 2.5\%$ .



**Abb. 4.5** Abweichung zwischen Serpent und QC-ATHLET bzgl. dem axialen Verlauf der Brennelementleistung für ein UO<sub>2</sub>- 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

Als nächster Schritt ist die vollständige Implementierung des Konzepts vorgesehen, so dass WG-Wirkungsquerschnitte entweder ermittelt durch die Ganzkern-MC-Rechnung oder durch die Extrapolationsmethode an das NK/TH-Codesystem zurückgegeben werden können. Nach Erprobungen mit dem C5G7-TD-Benchmarkmodell soll die Methode ebenfalls auf komplexere Modelle angewendet werden.

#### 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 MCNP-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 einem 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 nämlich 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	$k_{\text{eff}}$
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.

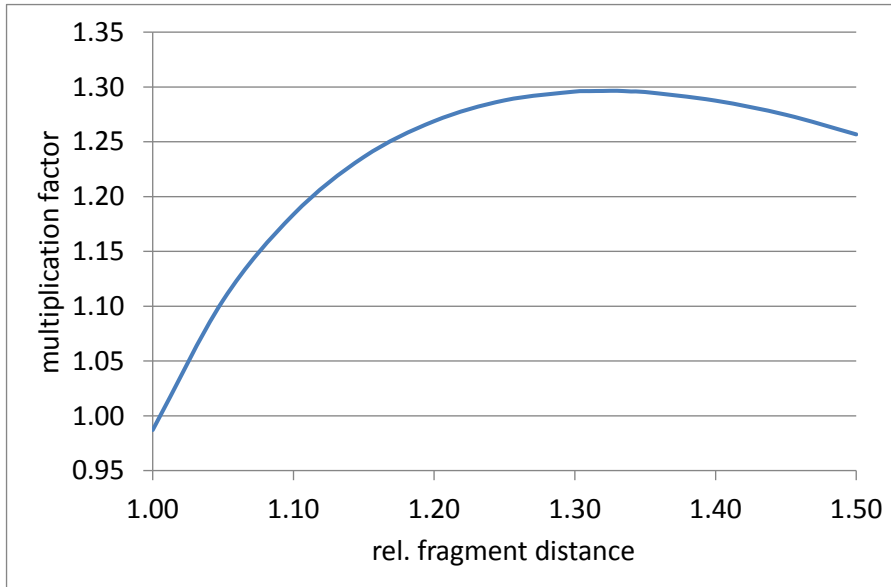
- Bereich 1: fünf Brennelement-Viererbündel auf einer Höhe von 53 cm;
- Bereich 2: neun Brennelement-Viererbündel auf einer Höhe von 53 cm;
- Bereich 3: fünf Brennelement-Viererbündel auf einer Höhe von 106 cm.

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

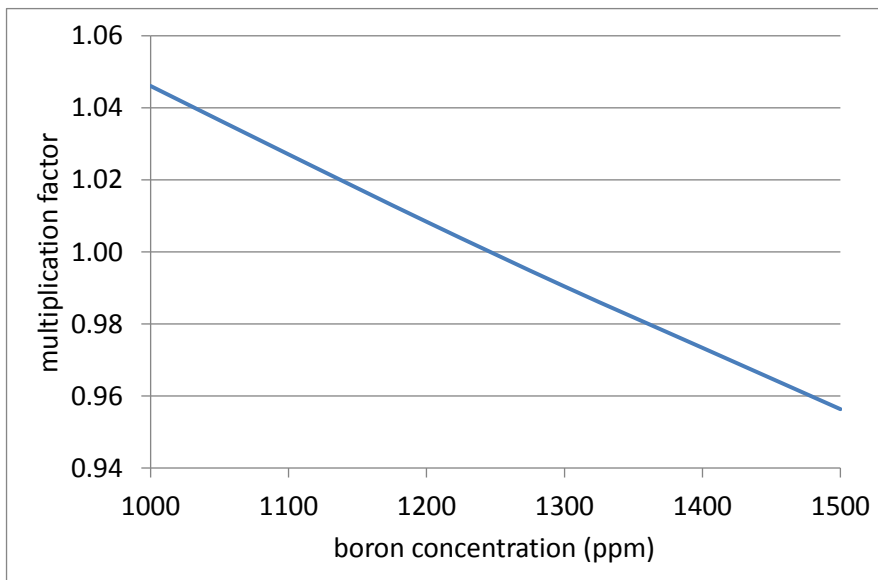
Für späte Zustände der Kernzerstörung wurden zunächst Szenarien angenommen, bei denen der Brennstoff sich vollständig fragmentiert im unteren Kernbereich befindet. Als Fragmente werden dabei Kugeln angenommen, deren Volumen dem einer einzelnen Brennstofftablette entspricht. Die minimale Höhe dieser Schüttung 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. 4.7 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 der Kern nur durch Zugabe von Bor (oder eines anderen starken Absorbers) zum Kühlmittel unterkritisch gemacht werden. Dies ist in Abb. 4.8 dargestellt. Diese Abbildung zeigt die Abhängigkeit des Multiplikati-

onsfaktors 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. 4.7** Multiplikationsfaktor einer Schüttung von Brennstofffragmenten als Funktion des relativen Fragmentabstands



**Abb. 4.8** 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 ei-



ner 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 Serpent außerdem Weniggruppen-Daten für Diffusionsprogramme erzeugt werden können, ist dieses Programm für die weitere Beschreibung der angenommenen Szenarien am besten geeignet und wird für weitergehende Studien herangezogen.

## 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.

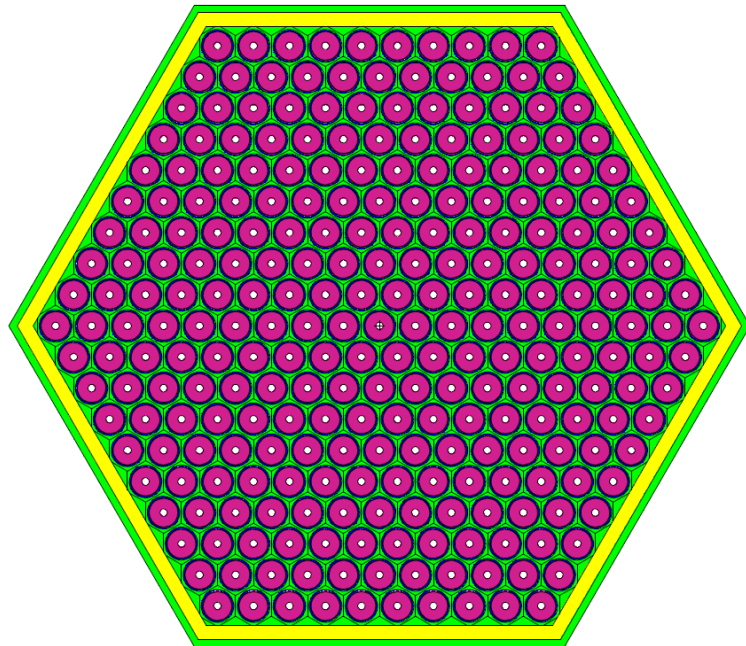
Das SFR-FT-Benchmark spezifiziert vier verschiedene Anordnungen: große Kerne mit oxydischem und karbidischem Brennstoff (MOX-3600 und CAR-3600) und mittelgroße Kerne mit oxydischem und metallischem Brennstoff (MOX-1000 und MET-1000). Für die durchgeführten Studien wurde eine spezifische Materialzusammensetzung 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.

```

11/24/16 18:05:10
sfr-ft, large oxide core, inner
core 1

probid = 11/24/16 18:03:06
basis: XY
( 1.000000, 0.000000, 0.000000)
( 0.000000, 1.000000, 0.000000)
origin:
( 0.00, 0.00, 0.00)
extent = ( 12.60, 12.60)

```



**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  $1\sigma$ -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

	<b>ENDF/B-VII.0</b>	<b>ENDF/B-VII.1</b>	<b>JEFF-3.1.2</b>	<b>JEFF-3.2</b>
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

	<b>ENDF/B-VII.0</b>	<b>ENDF/B-VII.1</b>	<b>JEFF-3.1.2</b>	<b>JEFF-3.2</b>
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

	<b>ENDF/B-VII.0</b>	<b>ENDF/B-VII.1</b>	<b>JEFF-3.1.2</b>	<b>JEFF-3.2</b>
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

	<b>ENDF/B-VII.0</b>	<b>ENDF/B-VII.1</b>	<b>JEFF-3.1.2</b>	<b>JEFF-3.2</b>
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 den 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 sind 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 Tabelle 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	$\Delta k(x10^{-5})$	k	$\Delta k(x10^{-5})$	k	$\Delta k(x10^{-5})$
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	$\Delta k(x10^{-5})$	k	$\Delta k(x10^{-5})$	k	$\Delta k(x10^{-5})$
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

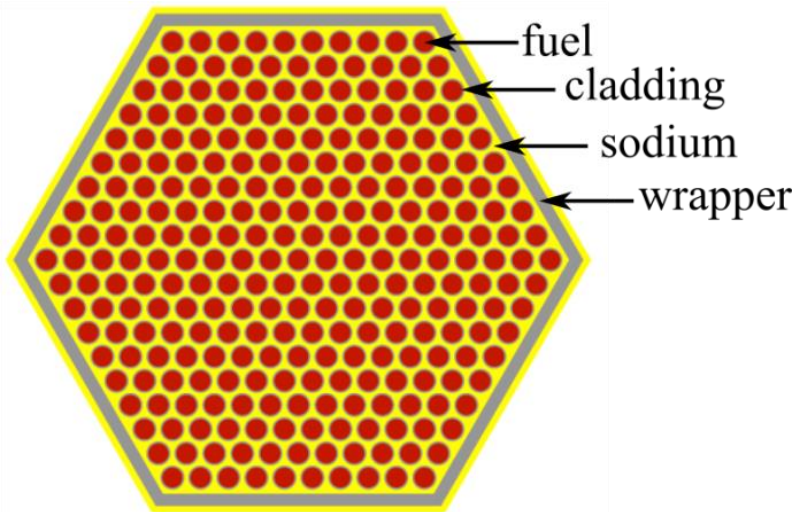
Abschließend lässt sich feststellen, dass zur Beschreibung schneller Anordnungen mit nicht-spaltbaren Materialien wie Natrium, Eisen und Zirkon die Datenlage keineswegs befriedigend ist. Unterschiedliche evaluierte nukleare Daten liefern deutlich unterschiedliche Ergebnisse für sicherheitsrelevante Parameter 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 müssen. 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.

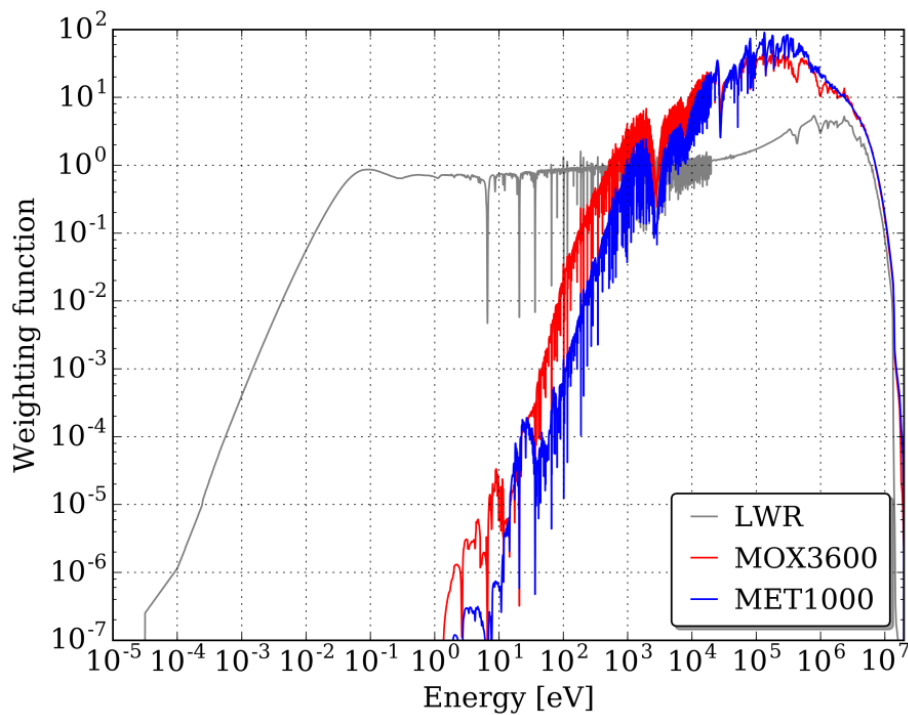
Für die Erzeugung einer Multigruppen-Bibliothek sind die Energiegruppenstruktur und Funktionen für die Wichtung der vorliegenden kontinuierlichen Daten in den festgelegten Energieintervallen notwendig. Als Wichtungsfunktionen wurden die Neutronenflussspektren von zwei homogenisierten Brennelementen mit 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). In Abb. 5.3 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 MC<sup>2</sup>-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 MC<sup>2</sup>-3 übernommen; für alle weiteren aufgelisteten Strukturen wurden Gruppen Grenzen 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** Wichtungsspektren der erzeugten Wirkungsquerschnittsbibliotheken



**Tab. 5.7** Übersicht über die für schnelle Systeme erzeugten Wirkungsquerschnittsbibliotheken

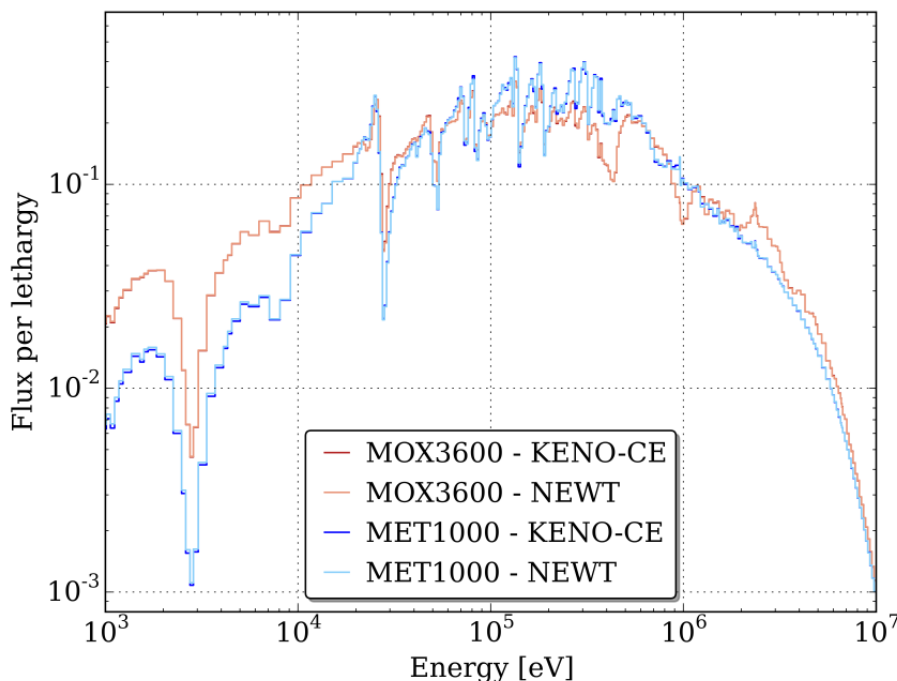
Anzahl der Energiegruppen	Wichtungsspektrum
230*	MET1000, MOX3600
245	MOX3600
253	MOX3600
271	MOX3600
302	MET1000, MOX3600
425*	MET1000, MOX3600
2082*	MET1000, MOX3600

**Tab. 5.8** Unterschiede im Multiplikationsfaktor homogener Brennelemente zwischen NEWT (Multigruppen) und den KENO-VI (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 konti-

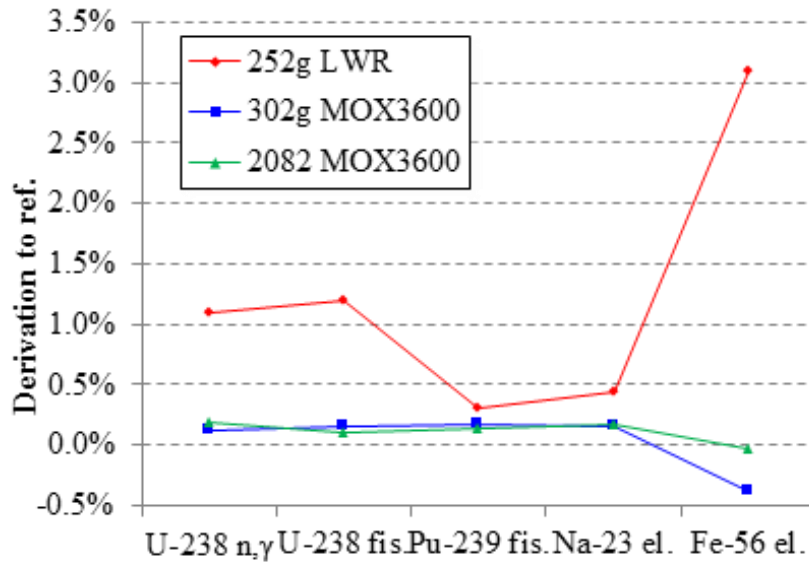
nuierlicher Energiedarstellung verglichen. In Tab. 5.8 sind die Unterschiede der Multiplikationsfaktoren zwischen NEWT und KENO-VI für die homogenisierten Brennelemente aufgelistet. Während die Abweichungen der NEWT-Ergebnisse mit der vorhandenen LWR-Bibliothek zu den entsprechenden Referenzwerten 253 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 oxidische Brennelement, bei dem der Unterschied von etwa 10 pcm innerhalb der statistischen  $2\sigma$ -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 einen ähnlichen Bias wie die 2082g-Bibliothek als bestes Ergebnis zwischen den Ergebnissen mit unter 400 Energiegruppen angesehen wird.



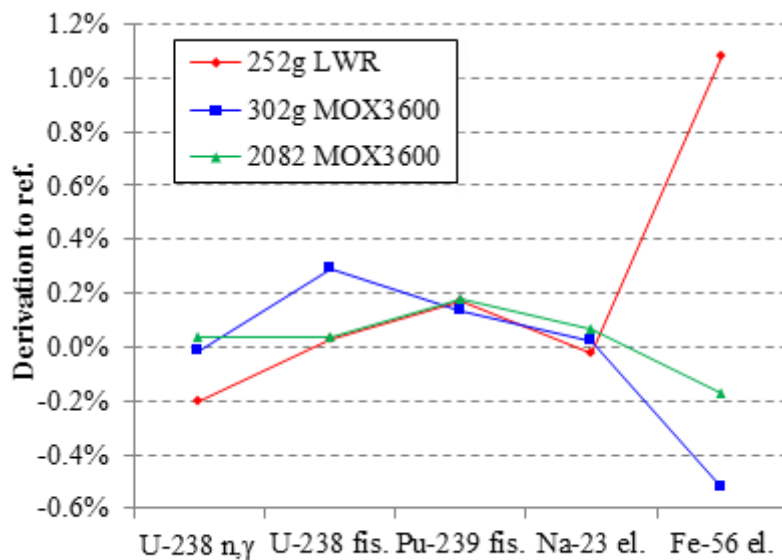
**Abb. 5.4** Neutronenflussspektrum der homogenisierten Brennelemente im schnellen Energiebereich

Nach Berücksichtigung der Rechenzeit und einer ausreichend guten Übereinstimmung mit der Referenz für beide Brennelement-Typen wird geschlossen, dass die 302g-

Bibliothek mit dem oxidischen Wichtungsspektrum für nachfolgende Studien gewählt wird. Diese Bibliothek führt außerdem zu guten Übereinstimmungen bezüglich des Neutronenflussspektrums (vgl. Abb. 5.4) und der betrachteten Reaktionsraten.



**Abb. 5.5** Relative Abweichung der 1-Gruppen-Wirkungsquerschnitte zu den KENO-VI-Referenzwerten für das homogenisierte metallische Brennelement



**Abb. 5.6** Relative Abweichung der 1-Gruppen-Wirkungsquerschnitte zu den KENO-VI-Referenzwerten für das homogenisierte oxydische Brennelement

Um nicht nur die Verläufe sondern auch kumulative Werte zu vergleichen, werden in Abb. 5.5 und Abb. 5.6 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, sodass manche Unterschiede größer erscheinen, als sie vergleichsweise sind).

**Tab. 5.9** Unterschiede der Multiplikationsfaktoren zwischen NEWT-Multigruppenrechnungen und den Referenzrechnungen mit KENO-VI für die heterogenen Brennelemente bei 293K

<b>MG-Bibliothek</b>	<b>MET1000 (<math>1/k_{MG}-1/k_{CE}</math>) [pcm]</b>	<b>MOX3600 (<math>1/1/k_{MG}-1/k_{CE}</math>) [pcm]</b>
252g, LWR	59	-437
302g, MET1000	-107	-235
302g, MOX3600	-80	-232
2082g, MET1000	14	(nicht konvergiert)
2082g, MOX3600	4	-104

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. 5.9). 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. In Vergleichsrechnungen mit Brennstabmodellen ist geplant, den Einfluss der Abschirmungsrechnung näher zu untersuchen. 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 erhöht.

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 15a/ mit der 252g-LWR-Bibliothek und der neuen 302g-Bibliothek nachgerechnet. In Tab. 5.10 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 Berechnung einfacher Experimente mit schnellen Spektren ist.

**Tab. 5.10** Abweichungen der Multigruppenrechnungen von der Kritikalität ( $k_{\text{eff}}=1$ )

ICSBEP Handbook Experiment	252g, LWR (1/ $k_{\text{MG}}-1$ ) [pcm]	302g, MOX3600 (1/ $k_{\text{MG}}-1$ ) [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. Auf Basis der vom SCALE-Team zur Verfügung gestellten Unsicherheitsdaten /CHA 11, LIT 08/ und nach einer Phase der Einarbeitung konnte eine erste Kovarianzbibliothek in einer Gruppenstruktur speziell für schnelle Reaktorsysteme erstellt werden. Hierfür wurde die in den Kritikalitätsrechnungen (siehe Kapitel 5.1) als vielversprechend eingestufte Struktur mit 302 Energiegruppen gewählt.

Mithilfe des CE-TSUNAMI-Moduls aus SCALE 6.2, welches Daten in kontinuierlicher Energiedarstellung für die Neutronentransportrechnung nutzt, wurden die Ergebnisse von Unsicherheitsanalysen unter Verwendung der neu erzeugten 302g-Kovarianzbibliothek und der mit dem Codesystem zur Verfügung gestellten 56g-Kovarianzbibliothek, bei denen die Gruppenstruktur für thermische Systeme optimiert ist, miteinander verglichen (siehe Tab. 5.11). Dieser Vergleich lässt für die untersuchten homogenisierten Brennelemente (siehe Abschnitt 5.1) erkennen, dass die Gruppenstruktur der Kovarianzdaten für die Unsicherheit des Multiplikationsfaktors eine nur eingeschränkte Bedeutung hat. Obwohl in der 56g-Bibliothek nur eine im Vergleich zur 302-Gruppenstruktur stark vereinfachte Auflösung des schnellen Energiebereichs vorliegt, liegt die relative Abweichung der ermittelten Unsicherheiten für den metallischen und oxydischen Fall bei weniger als 0.4 bzw. 0.08%. Eine Verfeinerung der Gruppenstruktur im schnellen Energiebereich bringt also nur bedingt eine Verbesserung der Abbildung der Ausgangsdaten, da diese Daten im schnellen Energiebereich für die in diesen Anordnungen wichtigen Nuklide oft nur in grober Energieauflösung gegeben sind. Diese Erkenntnis eröffnet die Möglichkeit, die 302-Gruppenstruktur schrittweise zu vereinfachen, um mit einer möglichst geringen Anzahl an Gruppen adäquate Unsicherheiten zu berechnen. Für Sampling-basierte Unsicherheitsanalysen mit XSUSA würde die Anzahl der zu variierenden Parameter dadurch deutlich reduziert werden. Dies wiederum würde dazu führen, dass in anschließenden Sensitivitätsanalysen die Beiträge zur Gesamtunsicherheit bereits mit einem deutlich reduzierten Stichprobenumfang und entsprechend reduzierter Rechenzeit ermittelt werden können.

**Tab. 5.11** Unsicherheiten des Multiplikationsfaktors in CE-TSUNAMI-Rechnungen für die homogenisierten Brennelemente bei 293K.

Kovarianzbibliothek	MET1000 [% $\Delta k/k$ ]	MOX3600 [% $\Delta k/k$ ]
56g	1.4083(4)	1.5172(5)
302g	1.4130(2)	1.5160(2)

## 6 AP4: Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen

Im Rahmen des Arbeitspakets 4 werden weitere systematische Unsicherheitsanalysen bezüglich nuklearer Daten durchgeführt, insbesondere 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 /BLY 13/ fortgesetzt. Diese Rechnungen wurden nun 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 wurde 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  $\text{UO}_2$ -Brennstäbe besitzen eine U-235-Anreicherung von 4.12 %, gekennzeichnet mit "1" in Abb. 6.1; die Position des  $\text{UO}_2/\text{Gd}$ -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.

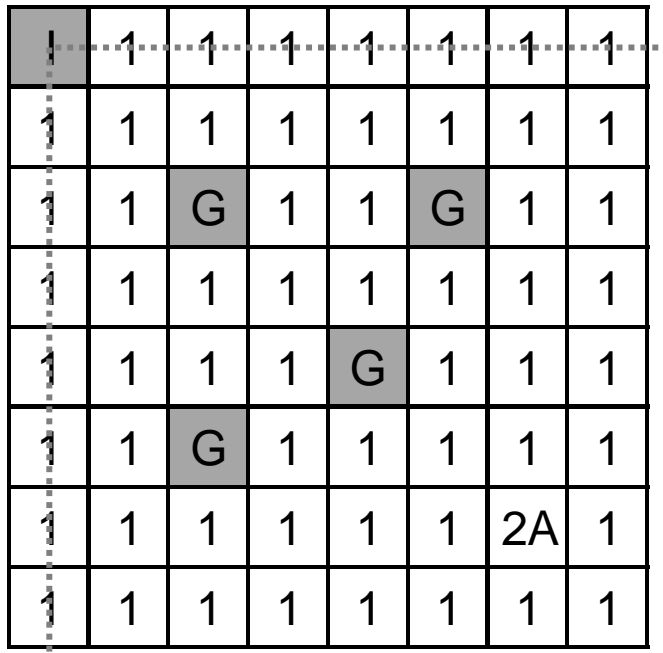


Abb. 6.1 Schematische Darstellung des TMI-1-Brennelements (ein Viertel)

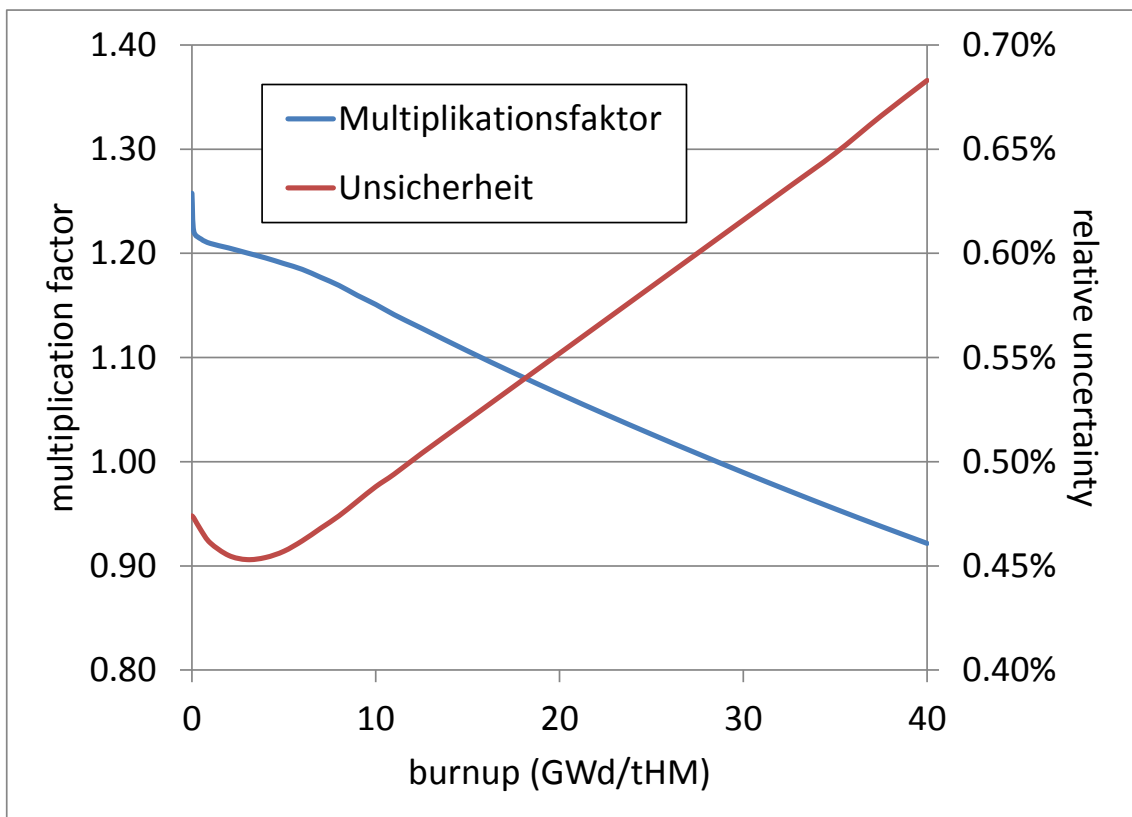
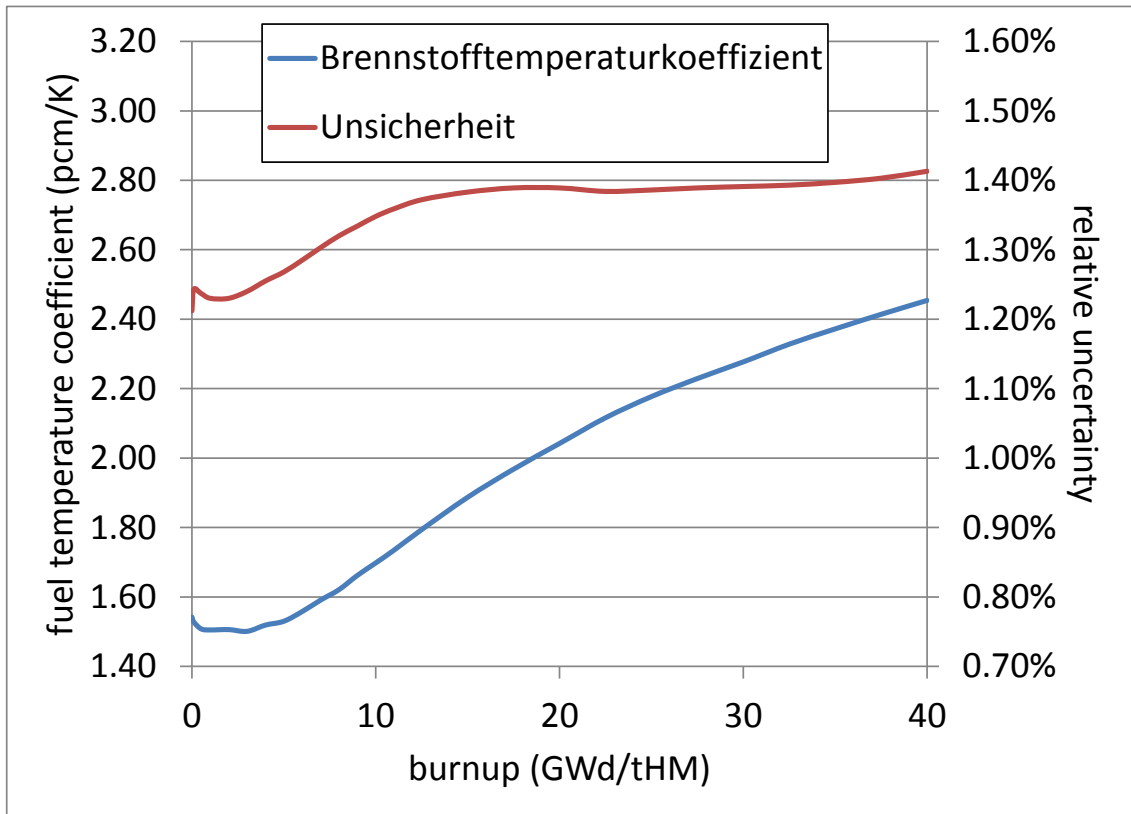


Abb. 6.2 Nominalwert und Unsicherheit des Multiplikationsfaktors für das TMI-1-Brennelement als Funktion des Abbrands



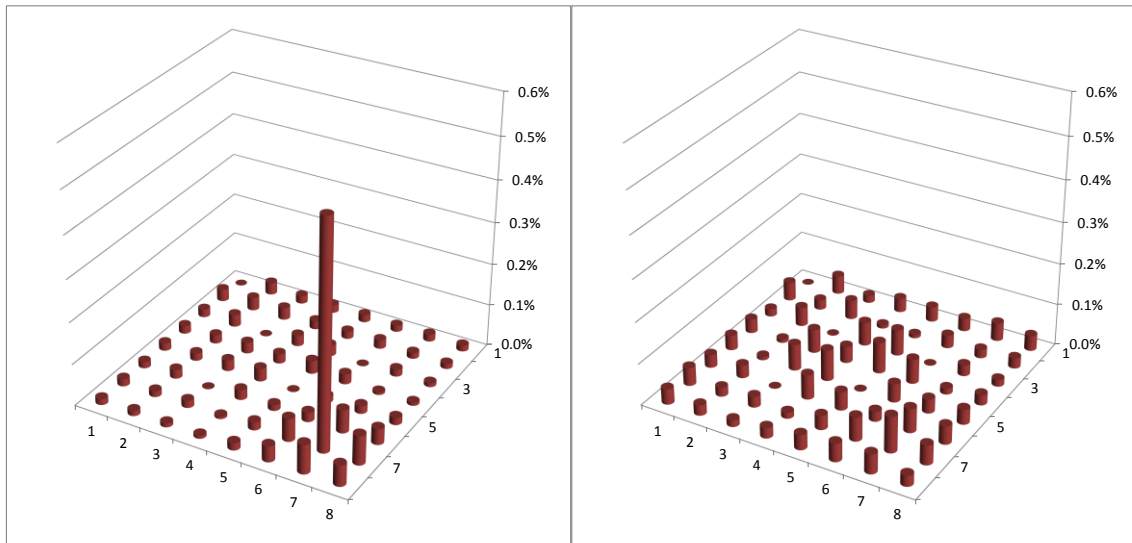
Zunächst sind in Abb. 6.2 der Nominalwert und die Unsicherheit des Multiplikationsfaktors für das TMI-1-Brennelement als Funktion des Abbrands dargestellt. Die Unsicherheit verhält sich so, wie es aus früheren Beobachtungen für LWR-Stabgitteranordnungen erwartet wird, wenn die SCALE-6.1-Kovarianzbibliothek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



**Abb. 6.3** Nominalwert und 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 war /MOS 07/, scheint dieser Wert nicht sicherheitsrelevant zu sein.



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

Schließlich ist in die Unsicherheit der Stableistungsverteilung für das frische und das bis 40 GWd/tHM abgebrannte Brennelement dargestellt. Einzig für den frischen  $\text{UO}_2/\text{Gd}$ -Brennstab hat die relative  $1\sigma$ -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%.

Zusätzlich zu den beiden Brennelementen mit quadratischem Gitter wurde ein Eingabedatensatz für eine Nominal-Abbrandberechnung für das ebenfalls im Rahmen der Phase II des UAM-LWR-Benchmarks spezifizierte hexagonale WWER-1000-Brennelement des Reaktors Kozlodui 6 erstellt und erprobt, siehe Tab. 3.2. Dazu werden bis zum Ende des Vorhabens ebenfalls Unsicherheitsanalysen durchgeführt und als Beitrag UAM-LWR-Benchmark eingereicht.

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 500-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.

## **6.2 Systematische Unsicherheitsanalysen für schnelle Reaktorsysteme (UAM-FR)**

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 werden die Analysen von Brennstäben, gefolgt von Brennelementen und schließlich ganzen Reaktorkernen für bestimmte Kerndesigns beschrieben; d.h. die Geometrien werden beschrieben und die geforderten Ausgabegrößen werden definiert. Zusätzlich zur Beschreibung der theoretischen Aufgaben werden Berechnungen von passenden Experimenten zur Validierung der angewandten Methoden vorgeschlagen. Der Fokus liegt anfangs auf Natrium-gekühlten Systemen basierend auf dem großen oxydischen und mittleren metallischen Reaktorkerndesign aus dem bereits abgeschlossenen SFR-FT Benchmark /BUI 15/. Allerdings sollen auch andere Konzepte wie z.B. Blei- oder Blei-Bismut-gekühlte Systeme in gewissem Maß berücksichtigt werden.

Die genannten Unsicherheitsanalysen sollen mit XSUSA in Kombination mit Neutronentransportcodes aus dem SCALE-Codepaket durchgeführt werden, wobei neben den Transportrechnungen mit Hilfe der Brennelementrechnungen makroskopische Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte für Ganzkernrechnungen erzeugt werden. Diese Ganzkernrechnungen sollen mit dem bei der GRS verfügbaren Programm DYN3D

/ROH 16/ durchgeführt und mit Monte-Carlo-Rechnungen für stationäre Zustände validiert werden. Die Unsicherheiten von entscheidenden Systemgrößen wie z.B. dem Multiplikationsfaktor, Reaktivitätskoeffizienten und Leistungsverteilungen werden dabei untersucht. Jede Unsicherheitsanalyse wird durch eine zugehörige Sensitivitätsanalyse begleitet, in welcher die Nuklidreaktionen mit dem größten Beitrag zur Ergebnisgrößenunsicherheit ermittelt werden.

Nach Literaturrecherche und dem Austausch mit Wissenschaftlern anderer Forschungsinstitute wurde entschieden, 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. Multigruppen-Bibliotheken für schnelle Systeme wurden bereits erzeugt und an einfachen Modellen getestet (vgl. AP 3.1 in Abschnitt 5.1); eine erste Kovarianzbibliothek konnte ferner erzeugt und erfolgreich angewendet werden (vgl. AP 3.2 in Abschnitt 5.2).

Es wurden bereits Eingabedatensätze für einige Anordnungen der ersten Berechnungsschritte (Resonanz-Selbstabschirmung für Stabzellen, Neutronentransportrechnungen für Brennelemente im unendlichen Gitter) erstellt und erste Tests durchgeführt; für abschließende Ergebnisse sollen allerdings die speziell für schnelle Systeme erzeugten Wirkungsquerschnitts- und Kovarianzdaten verwendet werden.

### **6.3 Weiterentwicklung der Sampling-basierten XSUSA-Methodik**

#### ***XSUSA-Validierungsmatrix***

Zur Validierung von XSUSA zum momentanen Entwicklungsstand wurde eine Testmatrix 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 werden, wie z.B. dem Übergang zu einer variablen Energiegruppenstruktur.

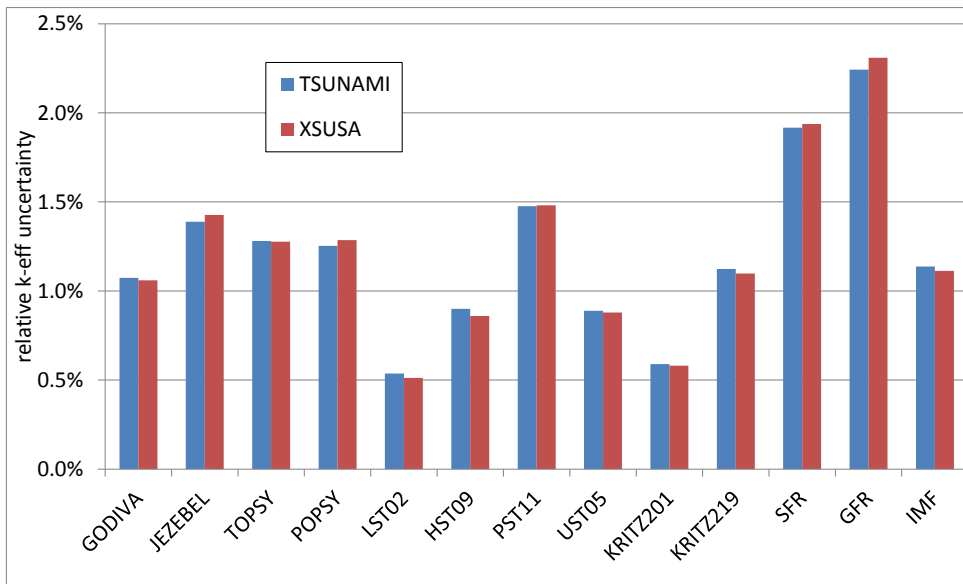
**Tab. 6.1** Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren sphärischer Anordnungen

	<b>TSUNAMI</b>	<b>XSUSA</b>
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. 6.1 sind die Ergebnisse für die Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren sphärischer Anordnungen angegeben, und in Tab. 6.2 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. 6.5 dargestellt.

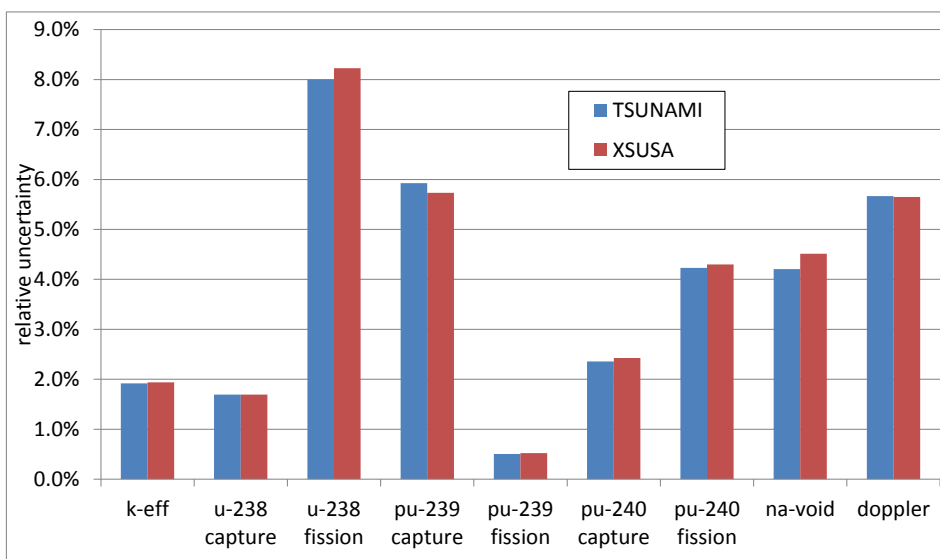
**Tab. 6.2** Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren von Stabzellen

	<b>TSUNAMI</b>	<b>XSUSA</b>
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. 6.5** 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. 6.6 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.

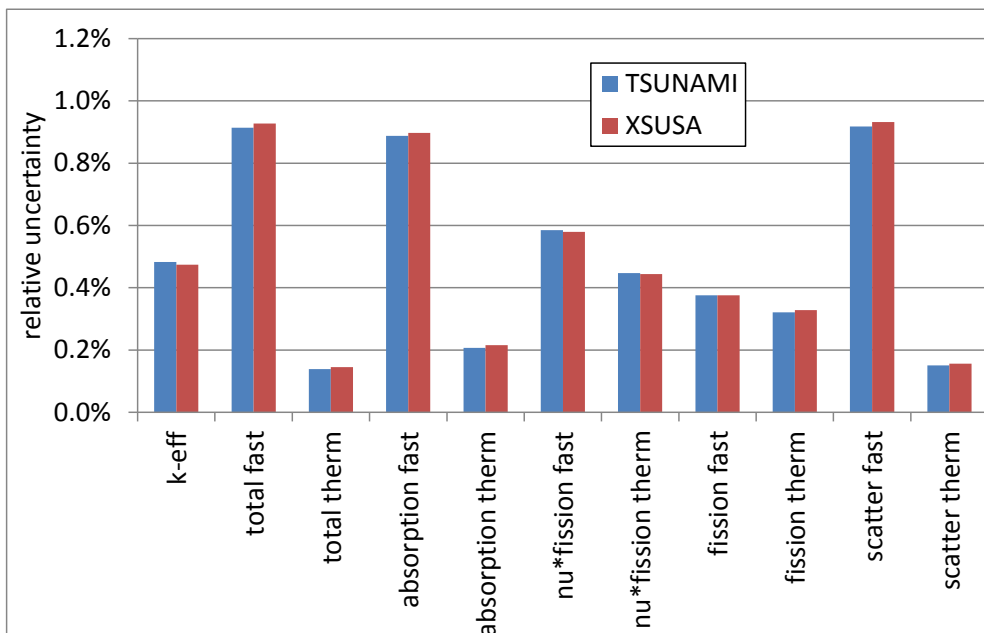


**Abb. 6.6** Unsicherheiten des Multiplikationsfaktors, von energieintegrierten Wirkungsquerschnitten und Reaktivitätskoeffizienten der SFR-Stabzelle

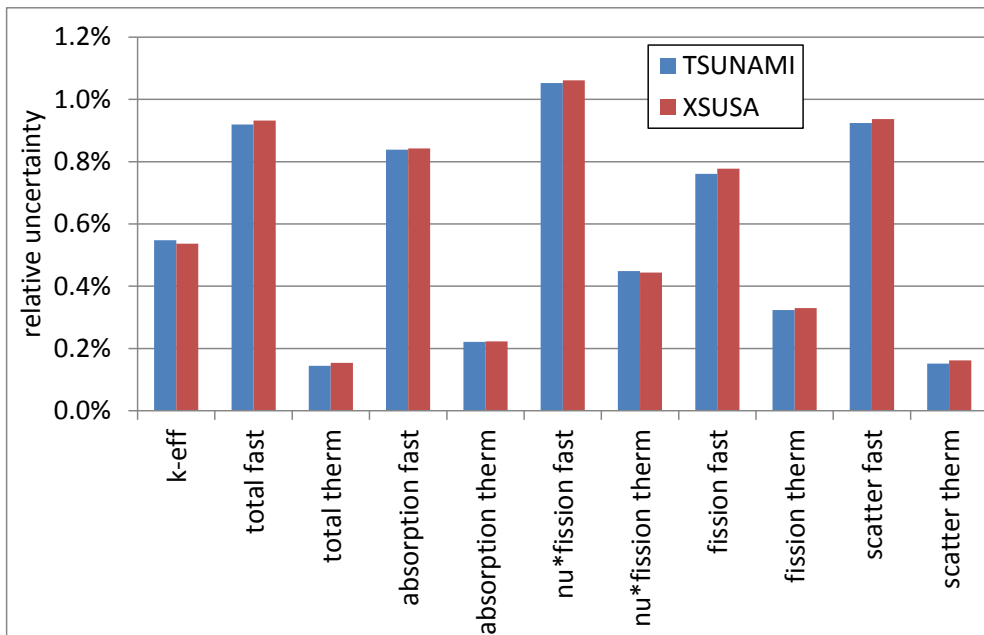
**Tab. 6.3** Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren von kritischen Anordnungen in dreidimensionaler Darstellung

	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. 6.3 aufgelistet. Wiederum ergibt sich ausgezeichnete Übereinstimmung zwischen den TSUNAMI- und den XSUSA-Ergebnissen.



**Abb. 6.7** Unsicherheiten des Multiplikationsfaktors und von 2-Gruppen-Wirkungsquerschnitten für das TMI-1-Brennelement



**Abb. 6.8** Unsicherheiten des Multiplikationsfaktors und von 2-Gruppen-Wirkungsquerschnitten für das PB-2-Brennelement

Schließlich wurden noch 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) /BLY 13/. Die Wirkungsquerschnitte wurden in zwei Energiegruppen berechnet, mit einer thermischen Grenze von 0.625 eV. Die entsprechenden Ergebnisvergleiche sind in Abb. 6.7 für das TMI-1-Brennelement und in Abb. 6.8 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  $1\sigma$ -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. 6.7 und Abb. 6.8). Auch hier

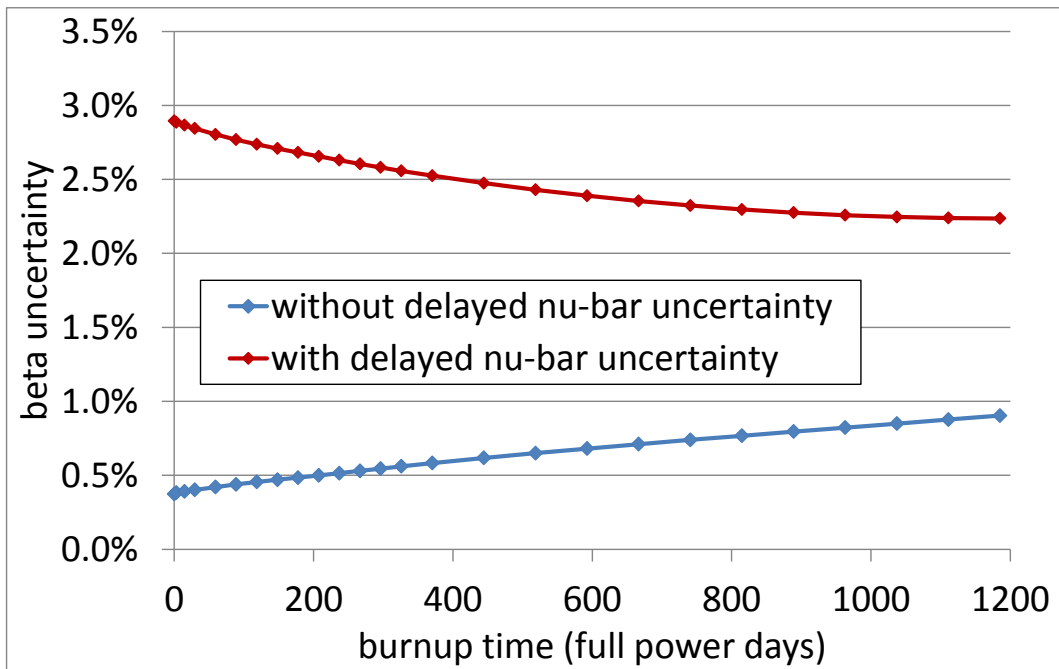


ergibt sich wieder ausgezeichnete Übereinstimmung zwischen TSUNAMI und XSUSA in allen untersuchten Ergebnisgrößen.

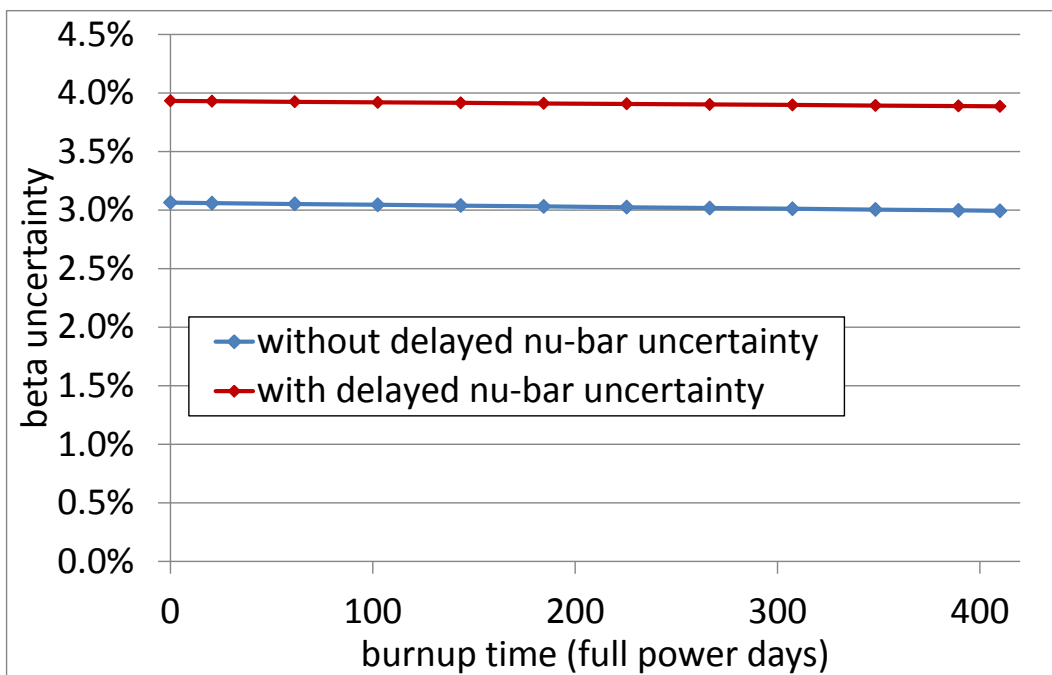
### ***Unsicherheiten in den Daten verzögerter Neutronen***

Die Unsicherheiten in den nuklearen Daten beeinflussen über die Unsicherheiten in den in Brennelementrechnungen erzeugten homogenisierten Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten (siehe Abb. 6.7 und Abb. 6.8) 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, das 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 der 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. 6.9** Unsicherheiten des Anteils der verzögerten Neutronen für ein DWR-Brennelement als Funktion der Abbrandzeit



**Abb. 6.10** Unsicherheiten des Anteils der verzögerten Neutronen für ein SFR-Brennelement als Funktion der Abbrandzeit

Die Ergebnisse sind in Abb. 6.9 für ein DWR-Brennelement (TMI-1) und in Abb. 6.10 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

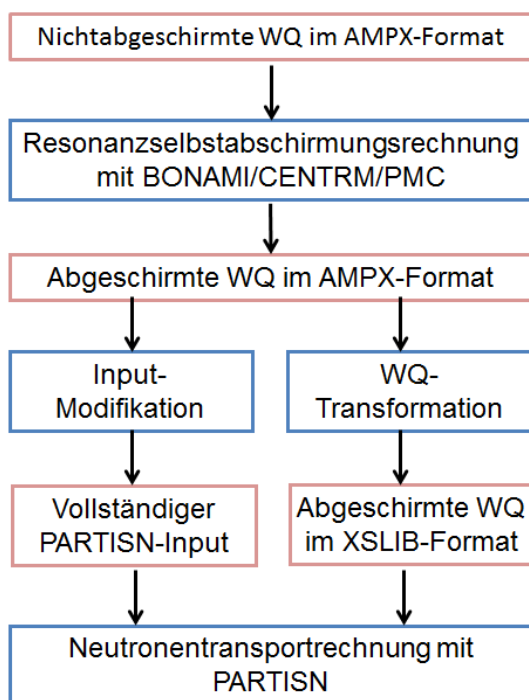
Anzahl der verzögerten Spaltneutronen die Unsicherheit des Anteils der verzögerten Neutronen um mehr als den Faktor zwei erhöht; der Anstieg während etwa der ersten Hälfte der Abbrandzeit ist sogar wesentlich höher. Für das SFR-Brennelement ist die Situation ganz anders. Hier ist die Abbrandabhängigkeit 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 nun 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. 6.11 dargestellt.

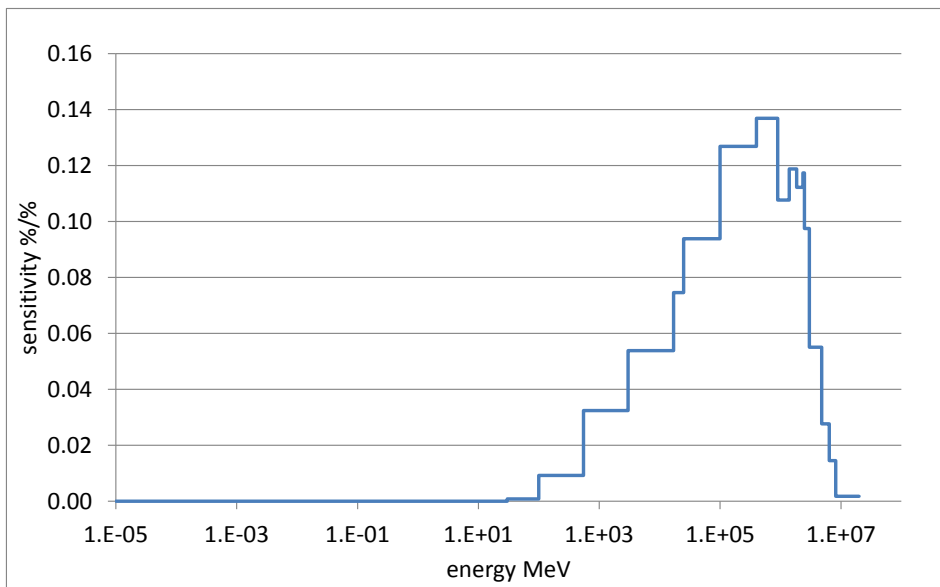


(WQ = Wirkungsquerschnitte)

**Abb. 6.11** Flussdiagramm für die SCALE/PARTISN-Berechnungskette

Unsicherheitsanalysen mit XSUSA/SCALE/PARTISN wurden u.a. für die schnellen Anordnungen SNEAK-7A und SNEAK-7B /NEA 15b/ 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. 6.12 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 ( $7.86E-01 \pm 2.24E-06$ ) ist.



**Abb. 6.12** Sensitivität des SNEAK-7A-Multiplikationsfaktors bezüglich der mittleren Anzahl von Spaltneutronen von Pu-239.

#### *Verallgemeinerung von XSUSA bezüglich der Energiegruppenstruktur*

Das XSUSA-Modul RCOV zum Lesen und Umformatieren der zu den nuklearen Daten gehörenden Unsicherheitsdaten und das XSUSA-Modul MAMED1 zur Erzeugung der variierten Wirkungsquerschnitte 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. Dank der Variabilität in der Energiegruppenstruktur und der Nuklid-Nomenklatur können nun von RCOV die Kovarianzdaten aus SCALE 6.2, die in neuen Energiegruppenstrukturen vorliegen, ausgelesen werden. Von MAMED1 können in diesen Gruppenstrukturen Variationen erzeugt werden. Durch einen Vergleich mit früheren Ergebnissen mit der 44-Gruppen-Struktur wurden diese Neuerungen überprüft und es wurde zugleich die

Rückwärtskompatibilität getestet. Aktuelle Entwicklungsarbeiten betreffen die Anwendung von MAMEDI auf Wirkungsquerschnitte mit sogenannten Kreuzkorrelationen. Diese Kreuzkorrelationen bezeichnen Korrelationen zwischen Wirkungsquerschnitten verschiedener Nuklide (In den meisten Fällen liegen lediglich Korrelationen zwischen Reaktionen desselben Nuklids vor). In der aktuellen Version von MAMEDI sind diese Nuklide im Quellcode explizit angegeben. Dies soll in zukünftigen Versionen vermieden werden. Stattdessen soll MAMEDI selbst die Nuklide mit solchen sogenannten Kreuzkorrelationen erkennen.

### ***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-Ordern versehen. Dank des neuen XSUSA-SVNs und der neuen Ordnerstruktur wurde die Übersichtlichkeit, Wartbarkeit, Erweiterbarkeit und Anwenderfreundlichkeit deutlich verbessert. In einem speziellen Ordner werden ferner Skripte zur Bedienung von XSUSA und zur Auswertung von Ergebnissen gesammelt. Dieses Repository 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.

## 7 Zusammenfassung

Der vorliegende Bericht gibt den Stand der Arbeiten am BMWi-Forschungsvorhaben RS1536 „Weiterentwicklung moderner Verfahren zu Neutronentransport und Unsicherheitsanalysen für Kernberechnungen“. zum Ende des 3. Quartals 2016 wieder. 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 zunächst mehrere Anordnungen der VENUS-9-Experimente aus der VENUS-PRP-Serie (gemischte MOX/Uran-Kerne). Für diese liegen gemessene Stableistungsverteilungen 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 zufriedenstellend; in der Nähe starker Heterogenitäten zeigen die nTRACER-Lösungen größere Abweichungen zu den Messergebnissen als 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, 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 ver-

schiedenen Versionen aus der Beta-Testphase 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 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(MC)-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. Ein weiterer wichtiger Punkt des Konzepts ist, dass Wenig-Gruppen 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 ermittelt werden. Als Plattform für den Datenaustausch dient der GRS-Kernsimulator KMacS. Die Implementierung des Konzepts wurde an-



hand von Berechnungen für den stationären Zustand des C5G7-TD-Benchmarks erfolgreich überprüft.

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. Die Umstellung dieser Datensätze für die Verwendung mit dem MC-Code Serpent 2 zur Erzeugung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten wurde begonnen.

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; insbesondere 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 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 konnten erste Kovarianzdaten-Bibliotheken erstellt werden. Diese werden noch weiter optimiert und in der Gruppenstruktur an die für schnelle Spektren erzeugte Wirkungsquerschnittsbibliothek angepasst.

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. Zusätzlich zu den DWR- und SWR-Brennelementen mit quadratischen Stabgittern wurden auch Berechnungen für ein VVER-Brennelement mit hexagonalem Stabgitter durchgeführt. Diese werden noch der Qualitätssicherung unterzogen und dann als Benchmark-Beiträge eingereicht. Nucleare 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.

Bezüglich einer Plattform für systematische Unsicherheitsanalysen schneller Reaktorsysteme wurde ein Plan zur Durchführung erstellt. Dieser orientiert sich an der Vorgehensweise des UAM-LWR-Benchmarks für thermische Leichtwasserreaktoren: Nach Stabzell-Selbstabschirmungsrechnungen sollen mit im SCALE-Paket vorhandenen Programmen die für Ganzkernrechnungen erforderlichen Wirkungsquerschnitte erzeugt werden. Für diese Ganzkernrechnungen ist geplant, DYN3D zu verwenden, welches bei der GRS verfügbar ist. Die für diesen Code erzeugten Wirkungsquerschnitte sollen mit Monte-Carlo-Rechnungen für stationäre Zustände validiert werden. Anschließende Untersuchungen von Transienten sind mit einer Kopplung aus DYN3D und ATHLET geplant. Für alle Schritte dieser Berechnungskette werden Unsicherheitsanalysen durchgeführt. Die Berechnungen erfolgen auf der Basis einer für schnelle Anordnungen optimierten Multigruppen-Bibliothek und den entsprechenden Kovarianzdaten.

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 sind im Gange. Eine XSUSA-Sequenz zur Durchführung der Neutronentransport-Rechnung mit PARTISN ist verfügbar; erste Berechnungen wurden erfolgreich für die schnellen Anordnungen SNEAK-7A und -7B durchgeführt.

Zur Qualitätssicherung wurden in der QM-Richtlinie Programmentwicklung der GRS Software Management Group definierten Qualitätsmerkmale umgesetzt. Dazu wurde in erster Linie 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 Repository 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 vorläufigen Evaluierungsbericht, in dem auch soweit möglich Vergleiche mit den SCALE-Unsicherheitsanalyse-Sequenzen SAMPLER und TSUNAMI durchgeführt werden, vor.

## 8 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-neo.org/science/wprs/sfr-taskforce/WPRS-AEN-SFR-Cores-V1.2.pdf>
- /BLY 13/ T. Blyth, M. Avramova, K. Ivanov, E. Royer, E. Sartori, O. Cabellos, H. Ferroukhi, and E. Ivanov, Benchmark for Uncertainty Analysis in Modelling (UAM) for Design, Operation and Safety Analysis of LWRs, Volume I: Specification and Support Data for the Core Cases (Phase II), available from OECD/NEA Data Bank (2013)
- /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
- /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, Techni-  
sche Notiz im Anhang von /AUR 15/
- /HER 11/ M. Herman, Development of ENDF/B-VII.1 and Its Covariance Compo-  
nents, *Journal of the Korean Physical Society*, **59**, pp.1034–1039 (2011)
- /HOR 13/ N. Horelik, B. Herman, Benchmark for Evaluation And Validation of Reac-  
tor 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/](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, NURES SAFE-Bericht D12.31 (2015)
- /KLI 15b/ S. Kliem et al., Final report on the advanced case of PWR MSLB bench-  
mark, NURES SAFE-Bericht D12.41 (2015)
- /KOM 13/ Kompetenzverbund Kerntechnik. Nukleare Sicherheitsforschung - Neuori-  
entierung an aktuellen energiepolitischen Rahmenbedingungen. GRS/PtR  
(2013), <http://nuklear->

- /KOZ 06/ T. Kozlowski, T. J. Downar, Pressurised Water Reactor MOX/UO<sub>2</sub> 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 Neutronendifusionsgleichungen - 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, "MC<sup>2</sup>-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.
- /NEA 05/ Benchmark on the Three-dimensional VENUS-2 MOX Core Measurements – Final Report, NEA/NSC/DOC(2005)17
- /NEA 15a/ International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments, OECD/NEA, NEA/NSC/DOC(95)03, Paris (2015)

- /NEA 15b/ International Handbook of Evaluated Reactor Physics Benchmark Experiments, OECD/NEA, NEA/NSC/DOC(2006)1, Paris (2015)
- /OLS 03/ A.P. Olson, Neutronics Calculations for SPERT-III, E-core, ANL/GTRI/TM-13/10, Argonne National Laboratory, (2003)
- /PAR 01/ J.M. Paratte, R. Chawla, H. Akie, P.M.G. Damen, H.K. Joo, P. Mikolas, E. Padovani, Y. Pénéliou, 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, NURES SAFE-Bericht D11.15 (2014)
- /PER 14b/ Y. Périn, Description of the CTF API, NURES SAFE-Bericht D11.15 (2014)
- /PER 15a/ Z. Perkó, S. Pelloni, K. Mikityuk, J. Křepel, M. Szieberth, G. Gaëtan, B. Vrbán, J. Lüleý, 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, NURES SAFE-Bericht D13.50

(2015)

- /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, 170–190 (2016)
- /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/research02-1.html>
- /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)

/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 Neutronentransportmetho-  
den und Unsicherheitsanalysen für Reaktorkernberechnungen - Ab-  
schlussbericht. GRS-382 (2015)

## Abbildungsverzeichnis

<b>Abb. 3.1</b>	Brennstabgitter der VENUS-9-Experimente, hier dargestellt mit den B <sub>4</sub> C-Absorberstäben .....	10
<b>Abb. 3.2</b>	Gemessene und berechnete Stableistungsverteilungen für die nominale VENUS-9-Anordnung .....	12
<b>Abb. 3.3</b>	Gemessene und berechnete Stableistungsverteilungen für die VENUS-9-Anordnung mit Aluminiumplatte .....	13
<b>Abb. 3.4</b>	Gemessene und berechnete Stableistungsverteilungen für die VENUS-9-Anordnung mit Wasserspalt.....	13
<b>Abb. 3.5</b>	Abbrand-Abhängigkeit des Multiplikationsfaktors aus Berechnungen mit SCALE.....	20
<b>Abb. 3.6</b>	ATHLET-Modell für Peach Bottom Unit 2.....	24
<b>Abb. 4.1</b>	Einbindung eines Monte-Carlo-Codes (MC) in ein Neutronenkinetik-Thermohydraulik- (NK/TH) Programmsystems .....	33
<b>Abb. 4.2</b>	Makroskopischer Spalt- und Absorptionswirkungsquerschnitt für den thermischen Energiebereich als Funktion der Brennstofftemperatur .....	35
<b>Abb. 4.3</b>	Makroskopischer Spalt- und Absorptionswirkungsquerschnitt für den thermischen Energiebereich als Funktion der Moderatorichte.....	35
<b>Abb. 4.4</b>	Kernlayout des C5G7-TD Benchmarks .....	36
<b>Abb. 4.5</b>	Abweichung zwischen Serpent und QC-ATHLET bzgl. dem axialen Verlauf der Brennelementleistung für ein UO <sub>2</sub> - und ein MOX-Brennelement.....	37
<b>Abb. 4.6</b>	Stableistungsverteilung im C5G7-Benchmark aus Serpent.....	38
<b>Abb. 4.7</b>	Multiplikationsfaktor einer Schüttung von Brennstofffragmenten als Funktion des relativen Fragmentabstands .....	41

<b>Abb. 4.8</b>	Multiplikationsfaktor einer Schüttung maximaler Reaktivität als Funktion der Borkonzentration .....	41
<b>Abb. 5.1</b>	MCNP-Modell des MOX-3600-Brennelements.....	44
<b>Abb. 5.2</b>	MET1000-Brennelement mit metallischem Brennstoff .....	49
<b>Abb. 5.3</b>	Wichtungsspektren der erzeugten Wirkungsquerschnittsbibliotheken.....	49
<b>Abb. 5.4</b>	Neutronenflussspektrum der homogenisierten Brennelemente im schnellen Energiebereich .....	51
<b>Abb. 5.5</b>	Relative Abweichung der 1-Gruppen-Wirkungsquerschnitte zu den KENO-VI-Referenzwerten für das homogenisierte metallische Brennelement ....	52
<b>Abb. 5.6</b>	Relative Abweichung der 1-Gruppen-Wirkungsquerschnitte zu den KENO-VI-Referenzwerten für das homogenisierte oxydische Brennelement .....	52
<b>Abb. 6.1</b>	Schematische Darstellung des TMI-1-Brennelements (ein Viertel) .....	57
<b>Abb. 6.2</b>	Nominalwert und Unsicherheit des Multiplikationsfaktors für das TMI-1-Brennelement als Funktion des Abbrands .....	57
<b>Abb. 6.3</b>	Nominalwert und Unsicherheit des Brennstofftemperaturkoeffizienten für das TMI-1-Brennelement als Funktion des Abbrands .....	58
<b>Abb. 6.4</b>	Unsicherheiten der Stableistungen für das TMI-1-Brennelement im frischen (links) und abgebrannten (rechts) Zustand.....	59
<b>Abb. 6.5</b>	Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren von eindimensionalen Anordnungen.....	63
<b>Abb. 6.6</b>	Unsicherheiten des Multiplikationsfaktors, von energieintegrierten Wirkungsquerschnitten und Reaktivitätskoeffizienten der SFR-Stabzelle.	63
<b>Abb. 6.7</b>	Unsicherheiten des Multiplikationsfaktors und von 2-Gruppen-Wirkungsquerschnitten für das TMI-1-Brennelement .....	64

<b>Abb. 6.8</b>	Unsicherheiten des Multiplikationsfaktors und von 2-Gruppen-Wirkungsquerschnitten für das PB-2-Brennelement.....	65
<b>Abb. 6.9</b>	Unsicherheiten des Anteils der verzögerten Neutronen für ein DWR-Brennelement als Funktion der Abbrandzeit .....	67
<b>Abb. 6.10</b>	Unsicherheiten des Anteils der verzögerten Neutronen für ein SFR-Brennelement als Funktion der Abbrandzeit .....	67
<b>Abb. 6.11</b>	Flussdiagramm für die SCALE/PARTISN-Berechnungskette.....	69
<b>Abb. 6.12</b>	Sensitivität des SNEAK-7A-Multiplikationsfaktors bezüglich der mittleren Anzahl von Spaltneutronen von Pu-239.....	70

## Tabellenverzeichnis

<b>Tab. 3.1</b>	Multiplikationsfaktoren und Reaktivitätsdifferenzen für vier VENUS-9-Anordnungen aus nTRACER und KENO-V.a.....	11
<b>Tab. 3.2</b>	Brennelement-Abbrandberechnungen zur Validierung von SCALE 6.2....	19
<b>Tab. 3.3</b>	Unsichere Parameter für die SWR-ATWS-Unsicherheitsanalyse.....	27
<b>Tab. 4.1</b>	Relative C5G7-TD-Brennelementleistungen aus Serpent und QC-ATHLET .....	37
<b>Tab. 4.2</b>	Multiplikationsfaktor eines SWR-Kerns in unterschiedlichen Zuständen bezüglich der Steuerstäbe .....	39
<b>Tab. 5.1</b>	MCNP-Ergebnisse für das MOX-3600-Brennelement .....	45
<b>Tab. 5.2</b>	MCNP-Ergebnisse für das CAR-3600-Brennelement.....	45
<b>Tab. 5.3</b>	MCNP-Ergebnisse für das MOX-1000-Brennelement .....	45
<b>Tab. 5.4</b>	MCNP-Ergebnisse für das MET-1000-Brennelement.....	45
<b>Tab. 5.5</b>	Änderungen im Multiplikationsfaktor beim Übergang von JEFF-3.1.2 zu JEFF-3.2.....	47
<b>Tab. 5.6</b>	Änderung im Multiplikationsfaktor beim Übergang von ENDF/B-VII.1 zu JEFF-3.2.....	47
<b>Tab. 5.7</b>	Übersicht über die für schnelle Systeme erzeugten Wirkungsquerschnittsbibliotheken.....	50
<b>Tab. 5.8</b>	Unterschiede im Multiplikationsfaktor homogener Brennelemente zwischen NEWT (Multigruppen) und den KENO-VI (kontinuierliche Energie).....	50

<b>Tab. 5.9</b>	Unterschiede der Multiplikationsfaktoren zwischen NEWT-Multigruppenrechnungen und den Referenzrechnungen mit KENO-VI für die heterogenen Brennelemente bei 293K.....	53
<b>Tab. 5.10</b>	Abweichungen der Multigruppenrechnungen von der Kritikalität ( $k_{\text{eff}}=1$ ) ..	54
<b>Tab. 5.11</b>	Unsicherheiten des Multiplikationsfaktors in CE-TSUNAMI-Rechnungen für die homogenisierten Brennelemente bei 293K.....	55
<b>Tab. 6.1</b>	Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren sphärischer Anordnungen .....	62
<b>Tab. 6.2</b>	Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren von Stabzellen.....	62
<b>Tab. 6.3</b>	Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren von kritischen Anordnungen in dreidimensionaler Darstellung.....	64

## **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.

### **Anhang A      Technische Notizen**

- A01 F. Bostelmann A. Aures, W. Zwermann, A Comprehensive Evaluation Suite for the Uncertainty Analysis Codes XSUSA, SAMPLER, and TSUNAMI (Draft)
- 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 (Draft)
- A03 F. Bostelmann, Installing SCALE 6.2 at GRS

### **Anhang 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 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. Penelieu, 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. Havluj, 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)

## **Anhang C      NURES SAFE-Berichte**

C01 B. Chanaron (Koordinator), NURES SAFE Second Periodic Report, 01.04.2016

C02 B. Chanaron (Koordinator), NURES SAFE Final Report, Entwurfsversion  
01.04.2016

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