

**Entwicklung
eines modernen
Neutronenkinetikcodes
für unregelmäßige
Geometrien für (v)SMRs
und fortschrittliche
sowie innovative
Reaktorsysteme**

**Entwicklung
eines modernen
Neutronenkinetikcodes
für unregelmäßige
Geometrien für (v)SMRs
und fortschrittliche
sowie innovative
Reaktorsysteme**

Abschlussbericht

Armin Seubert
Jeremy Bousquet
Romain Henry
Silvia Io Muzio

Juli 2022

Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrunde liegende Forschungsvorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz, nukleare Sicherheit und Verbraucherschutz (BMUV) unter dem Förderkennzeichen RS1576 durchgeführt.

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei der GRS.

Der Bericht gibt die Auffassung und Meinung der GRS wieder und muss nicht mit der Meinung des BMUV übereinstimmen.

Deskriptoren

Diffusionsgleichung, FENNECS, Finite-Elemente-Methode, innovative Reaktorkonzepte, komplexe unregelmäßige Geometrie, Mikroreaktoren, MMR, PEMTY, SMR, SP_3 -Methode, Transienten- und Störfallsimulation

Kurzfassung

Die Zielsetzung des Vorhabens ist die Entwicklung des 3D-Weniggruppen-Neutronenkinetikcodes FENNECS zur Sicherheitsbewertung von SMRs (Small Modular Reactors) und MMRs (Micro Modular Reactors) und fortschrittlichen sowie innovativen Reaktorsystemen mit komplexen und unregelmäßigen Geometrien. Die Besonderheiten der Kerne solcher Anlagen bzw. Konzepte sind u. a. ihre Kompaktheit (die große Neutronenflussgradienten und erhöhte Leckage zur Folge haben), lange Zykluszeiten, ihre komplexen, von regelmäßigen Gittern abweichenden Geometrien und ihre heterogene Materialzusammensetzung mit speziellen Brennstoffen, Absorbern und Kühlmedien. Als Grundlage dieses Vorhabens dient der in der GRS entwickelte stationäre Weniggruppen-Finite-Elemente-Diffusionscode FEM-Diff-3D, dessen Entstehung auf das frühere BMWi-Vorhaben RS1183 zurückgeht und in der Folge u. a. auf drei Dimensionen erweitert wurde.

Dieser Bericht dokumentiert die durchgeführten Forschungs- und Entwicklungsarbeiten zu folgenden Themen:

- Erweiterungen von FENNECS zur Berücksichtigung thermisch-hydraulischer Rückwirkungen,
- Erweiterungen von FENNECS für zeitabhängige Simulationen,
- Bereitstellung von Vernetzungswerkzeugen zur räumlichen Diskretisierung der Kerngeometrien,
- Verifizierung und Validierung,
- Verfolgung internationaler Trends in der Neutronenphysik unregelmäßiger Geometrien,
- Entwicklung und Verifikation der vereinfachten Transportmethode (Simplified P_3 , SP_3) in FENNECS.

Die Arbeiten zur SP_3 -Methode wurden von einer Nachwuchswissenschaftlerin der GRS durchgeführt, die eine Promotion an der TU München anstrebt. Im Ergebnis wurde der Neutronenkinetik-Code FENNECS wesentlich weiterentwickelt und das von FENNECS für die Vernetzung komplexer Geometrien benötigte Vernetzungswerkzeug PEMTY neu entwickelt. Für beide Softwaretools wurden erste Validierungen und Anwendungen durchgeführt, u.a. auch in dem Forschungsvorhaben RS1589 (INNOSYS-II).

Abstract

The objective of this research project is the further development of the 3-d few-group neutron kinetic code FENNECS for the safety assessment of SMRs (Small Modular reactors) and MMRs (Micro Modular Reactors) and advanced and innovative reactor systems with complex and irregular geometries. The peculiarities of the cores of such systems or concepts are, e. g., their compactness, which can have large neutron flux gradients and increased leakage, long cycle times, their complex geometries that deviate from regular grids and their heterogeneous material composition with special fuels, absorbers and cooling media. The basis for this project is the stationary few-group finite element diffusion code FEM-Diff-3D developed at GRS, which had been developed in the past BMWi project RS1183.

This report documents the performed research and development work on the following topics:

- Extensions of FENNECS to account for thermal-hydraulic feedback,
- Extensions of FENNECS for time-dependent simulations,
- Provision of mesh generators for geometry discretization (meshing),
- Verification and validation,
- Pursuing international trends in neutron physics of irregular geometries,
- Development and verification of a Simplified P_3 (SP_3) transport solver in FENNECS.

The work on the SP_3 method was carried out by a young scientist from GRS who is aiming for a doctorate at the Technical University of Munich. As an outcome, the neutron kinetics code FENNECS has been substantially further developed and the meshing tool PEMTY needed by FENNECS for the meshing of complex geometries has been newly developed. For both software tools, first validation and applications have been carried out, e.g., in the research project RS1589 (INNOSYS-II).

Inhaltsverzeichnis

| | | |
|----------|---|------------|
| | Kurzfassung..... | I |
| | Abstract..... | II |
| | Inhaltsverzeichnis..... | III |
| 1 | Zielsetzung und Arbeitsprogramm..... | 1 |
| 1.1 | Gesamtziel | 1 |
| 1.2 | Einzelziele..... | 2 |
| 1.3 | Arbeitsprogramm | 2 |
| 1.3.1 | AP1: Erweiterungen von FEM-Diff-3D zur Berücksichtigung thermohydraulischer Rückwirkungen..... | 2 |
| 1.3.2 | AP2: Erweiterungen zur Durchführung zeitabhängiger Berechnungen..... | 2 |
| 1.3.3 | AP3: Maschengeneratoren zur Geometrievernetzung..... | 3 |
| 1.3.4 | AP4: Verifizierung und Validierung | 3 |
| 1.3.5 | AP5: Verfolgung internationaler Trends der Neutronenphysik unregelmäßiger Geometrien..... | 3 |
| 2 | Wissenschaftlicher und technischer Stand, an den angeknüpft wurde..... | 5 |
| 3 | AP1: Kopplung von FENNECS mit thermohydraulischen Modellen | 7 |
| 3.1 | Programmtechnische Aspekte..... | 7 |
| 3.2 | Kopplungsstrategie..... | 8 |
| 4 | AP2: Erweiterung von FENNECS für zeitabhängige Berechnungen.. | 11 |
| 4.1 | Implementierung der zeitabhängigen Gleichungen mit verzögerten Neutronen..... | 11 |
| 4.2 | Entwicklung geeigneter Modelle zur Steuerstabbewegung..... | 13 |
| 4.2.1 | Steuerstabbänke..... | 13 |
| 4.2.2 | Steuerstabtrommeln..... | 17 |
| 4.3 | Überprüfung, Testrechnungen..... | 18 |
| 4.3.1 | Überprüfung der Kopplung mit ATHLET | 18 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 4.3.2 | Überprüfung der Implementierung der zeitabhängigen Diffusionsgleichung..... | 19 |
| 5 | AP3: Maschengeneratoren zur Geometrievernetzung..... | 21 |
| 5.1 | Internes Vernetzungswerkzeug für regelmäßige Gitteranordnungen..... | 21 |
| 5.2 | Frei verfügbare Vernetzungswerkzeuge | 21 |
| 5.3 | Neuentwickeltes Vernetzungswerkzeug PEMTY..... | 22 |
| 5.4 | Anpassungen des internen Vernetzungswerkzeugs und von PEMTY..... | 24 |
| 5.5 | Anpassung des Vernetzungsmoduls von FENNECS..... | 25 |
| 6 | AP4: Verifizierung und Validierung | 27 |
| 6.1 | Das SFR-Konzept ASTRID – Test der zeitabhängigen Erweiterung und der Kopplung mit ATHLET..... | 27 |
| 6.2 | Der Heat Pipe-cooled Micro Reactor (HPMR) – Test der Anwendbarkeit auf MMR..... | 33 |
| 6.2.1 | Monte-Carlo-Modell des HPMR in Serpent..... | 34 |
| 6.2.2 | Simulation des HPMR mit FENNECS..... | 36 |
| 6.3 | Der X2-Benchmark – Test der Anwendbarkeit auf LWR vom Typ WWER-1000..... | 38 |
| 6.3.1 | Modellierung im Monte-Carlo-Code Serpent..... | 40 |
| 6.3.2 | Modellierung mit FENNECS..... | 41 |
| 6.3.3 | Ergebnisse | 42 |
| 6.4 | Verifikation der Kopplung von FENNECS mit ATHLET..... | 46 |
| 6.5 | Weitere V&V-Arbeiten..... | 50 |
| 7 | AP5: Verfolgung internationaler Trends der Neutronenphysik unregelmäßiger Geometrien..... | 51 |
| 8 | AP7: Ergänzung einer Transportnäherung in FENNECS..... | 53 |
| 8.1 | Implementierung der stationären Weniggruppen- SP_3 -Gleichungen | 53 |
| 8.1.1 | Stationäre SP_3 -Gleichungen..... | 53 |
| 8.1.2 | Galerkin-Darstellung der SP_3 -Gleichungen..... | 59 |
| 8.1.3 | Implementierung der SP_3 -Gleichungen in FENNECS..... | 62 |
| 8.2 | Überprüfung der SP_3 -Implementierungen | 65 |

| | | |
|-----------|--|------------|
| 8.2.1 | Akademischer Hébert-Benchmark..... | 65 |
| 8.2.2 | Brennelemente des C5G7-Benchmarks..... | 68 |
| 9 | Zusätzliche Arbeiten und Ergebnisse | 79 |
| 9.1 | Implementierung der inversen Vektoriteration nach Wielandt | 79 |
| 9.2 | Implementierung der <i>Error-Mode</i> -Extrapolation..... | 84 |
| 9.3 | Extrapolation der Flussverteilung zum nächsten Zeitschritt | 85 |
| 9.4 | Entwicklung eines Postprozessor für FENNECS..... | 86 |
| 10 | Zusammenfassung | 89 |
| 10.1 | Erweiterungen von FENNECS zur Berücksichtigung thermohydraulischer Rückwirkungen | 89 |
| 10.2 | Erweiterungen von FENNECS für zeitabhängige Simulationen | 90 |
| 10.3 | Bereitstellung von Vernetzungswerkzeugen zur räumlichen Diskretisierung der Kerngeometrien..... | 90 |
| 10.4 | Verifizierung und Validierung..... | 90 |
| 10.5 | Verfolgung internationaler Trends in der Neutronenphysik unregelmäßiger Geometrien..... | 91 |
| 10.6 | Entwicklung und Verifikation der vereinfachten Transportmethode (Simplified P ₃ , SP ₃) in FENNECS | 91 |
| 10.7 | Erreichter Stand und weitere notwendige Schritte..... | 92 |
| | Abbildungsverzeichnis..... | 93 |
| | Tabellenverzeichnis..... | 97 |
| | Literaturverzeichnis..... | 99 |
| A | Anhang..... | 105 |
| A.1 | Veröffentlichungen..... | 105 |
| A.2 | Glossar..... | 107 |

1 Zielsetzung und Arbeitsprogramm

1.1 Gesamtziel

Die Zielsetzung dieses Vorhabens bestand in der Entwicklung eines 3D-Weniggruppen-Neutronenkinetikcodes zur Sicherheitsbewertung von SMRs (Small and Medium-size Reactors) und MMRs (Micro Modular Reactors) sowie von fortschrittlichen bzw. innovativen Reaktorsystemen mit komplexen und unregelmäßigen Geometrien. Die Besonderheiten der Kerne solcher Anlagen bzw. Konzepte sind u. a. ihre Kompaktheit, die große Neutronenflussgradienten und erhöhte Leckage aufweisen können, lange Zykluszeiten, ihre komplexen, von regelmäßigen Gittern abweichenden Geometrien und ihre heterogene Materialzusammensetzung mit speziellen Brennstoffen, Absorbern und Kühlmedien. Im Ergebnis sollte eine grundlegend weiterentwickelte und ertüchtigte Version von FEM-Diff-3D erreicht werden, die u. a. auf folgende Einsatzgebiete angewandt werden kann:

- moderne MMRs und SMRs u.a. für die Strom- und Wärmeerzeugung sowie Antriebe,
- Generation-IV-Systeme mit stabweiser Auflösung („Pin by pin“),
- zukünftige Anwendung in der hybriden Monte-Carlo-Simulation von transienten Vorgängen im Reaktorkern mit nicht quadratischen Brennelementen.

1.2 Einzelziele

Das Gesamtziel wurde erreicht, indem die folgenden Einzelziele erfüllt wurden:

- Kopplung von FEM-Diff-3D mit dem Thermohydraulik-Systemcode ATHLET zur Berücksichtigung thermohydraulischer Rückwirkungen.
- Implementierung der zeitabhängigen Diffusionsgleichung einschließlich der Dynamik verzögerter Neutronen zur Simulation von Transienten und Störfällen.
- Erweiterungen des Vernetzungswerkzeugs bzw. Erprobung und Einsatz externer Tools zur Vernetzung komplexerer Geometrien als regelmäßige Gitter.
- Verifizierung und Validierung.
- Verfolgung internationaler Trends der Neutronenphysik unregelmäßiger Geometrien.

1.3 Arbeitsprogramm

1.3.1 AP1: Erweiterungen von FEM-Diff-3D zur Berücksichtigung thermohydraulischer Rückwirkungen

Zur Berücksichtigung thermohydraulischer Rückwirkungen auf die Neutronenkinetik wurde FEM-Diff-3D¹ mit ATHLET gekoppelt werden. Die Kopplung ist so allgemein, dass thermohydraulische Zustände, die mit den verschiedenen Modellen berechnet werden, von FEM-Diff-3D zur Berücksichtigung der thermohydraulischen Rückwirkungen verwendet werden können. Dabei konnte das umfassende Know-how der GRS hinsichtlich der Kopplung neutronenkinetisch-thermohydraulischer Codes genutzt werden.

1.3.2 AP2: Erweiterungen zur Durchführung zeitabhängiger Berechnungen

Für die Implementierungen der Lösung zeitabhängiger Probleme wurden in FEM-Diff-3D die zeitabhängige Diffusionsgleichung einschließlich der Dynamik verzögerter Neutronen implementiert. Dabei konnte auf die Erfahrung des numerisch voll-impliziten Verfahrens zur Lösung der Neutronentransportgleichung in TORT-TD zurückgegriffen werden.

¹ FEM-Diff-3D war der Arbeitstitel des Code-Prototypen, der die Basis für die Entwicklung von FENNECS war.

1.3.3 AP3: Maschengeneratoren zur Geometrievernetzung

Die komplexen, teils unregelmäßigen Geometrien der zu betrachtenden Reaktorsysteme bzw. -konzepte erfordern geeignete, effiziente Maschengeneratoren zur Geometrievernetzung. Neben der Auswahl und Erprobung frei verfügbarer Vernetzungstools wurden Erweiterungen am FEM-Diff-3D-eigenen Maschengenerator vorgenommen und insbesondere das Python-Werkzeug PEMTY entwickelt.

1.3.4 AP4: Verifizierung und Validierung

Die genannten Weiterentwicklungen und Erweiterungen wurden durch Nachrechnung geeigneter Testfälle und Benchmarks bzw. durch Vergleiche mit Monte-Carlo-Referenzrechnungen erprobt und überprüft. Dies erforderte neben der jeweiligen Modellerstellung insbesondere die Generierung geeigneter parametrisierter Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsbibliotheken.

1.3.5 AP5: Verfolgung internationaler Trends der Neutronenphysik unregelmäßiger Geometrien

Dieses Arbeitspaket diente dazu, neben dem in diesem Vorhaben betrachteten Finite-Elemente-Lösungsverfahren internationale Entwicklungstrends auf dem Gebiet der 3D-Reaktorkernberechnungen innovativer Systeme mit komplexen und unregelmäßigen Geometrien zu verfolgen, wie z. B. die Finite-Volumen-Methode, unstetige (*discontinuous*) Galerkin-Verfahren für FEM, Lattice-Boltzmann-Verfahren oder sog. gitterfreie Ansätze (Mesh-free methods). Ziel war es, diesbezüglich die relevanten internationalen Erfahrungen und Ergebnisse zu verfolgen, um diese in Zukunft nutzbar machen zu können.

2 **Wissenschaftlicher und technischer Stand, an den angeknüpft wurde**

Als Grundlage dieses Vorhabens diente der in der GRS entwickelte stationäre Weniggruppen-Finite-Elemente-Diffusionscode FEM-Diff-3D, dessen Entstehung auf das frühere BMWi-Vorhaben RS1183 und die darin durchgeführte Studie *Auswertung von Ansätzen zur Behandlung (der Neutronentransportgleichung) mit unstrukturierten Gittern* zurückgeht /PAU 12/ und in der Folge u. a. auf drei Dimensionen erweitert wurde.

FEM-Diff-3D verwendet als finite Elemente gerade Dreiecksprismen mit linearen Basisfunktionen. Da für die Form der Dreiecksprismen prinzipiell keine Einschränkungen bestehen, können mit FEM-Diff-3D neben regelmäßigen hexagonalen (mindestens sechs Prismen je Gitterzelle) und cartesischen Gittern (mindestens zwei oder vier Prismen je Gitterzelle) prinzipiell auch unregelmäßige Geometrien modelliert werden, wie sie für o. g. stabweise Darstellungen von Minikernanordnungen flüssigmetallgekühlter Brennelemente oder andere moderne Reaktorkonzepte SMRs oder MMRs als nukleare Energiequellen für die Luft- und Raumfahrt) erforderlich sind.

FEM-Diff-3D wurde anhand mehrerer internationaler Benchmarks und einem EU-Projekt, u. a. dem *OECD/NEA benchmark on SFR concepts*, erprobt /SEU 14/ sowie im Rahmen des EU-Projekts ESNII+ zur Modellierung des ASTRID-Kerns /BOR 17/ und im Rahmen des *OECD/NEA MHTGR-350 MW Core Design Benchmarks* zur Bearbeitung der Exercise *3D steady state neutronics* /SEU 14/ erfolgreich eingesetzt.

Im Rahmen des hier beschriebenen Vorhabens ging aus dem Code FEM-Diff-3D dessen substantielle Weiterentwicklung FENNECS hervor.

In den folgenden Kapiteln werden die Entwicklungs- sowie Verifikations- und Validierungsarbeiten dokumentiert, die im Rahmen von RS1576 durchgeführt worden waren. Die Arbeiten und Ergebnisse wurden während der Laufzeit des Vorhabens bereits in einer Reihe von Publikationen und Konferenzbeiträgen veröffentlicht. Im Einzelfall wird daher auf diese Veröffentlichungen verwiesen, die Darstellung in diesem Bericht beschränkt sich dann auf wesentliche Kerninhalte.

3 AP1: Kopplung von FENNECS mit thermohydraulischen Modellen

Die realistische Simulation von Transienten und Störfallszenarien erfordert die Kopplung von FENNECS mit geeigneten Thermohydraulikmodellen des Reaktorkerns. In der GRS stehen für thermohydraulische Berechnungen der Systemcode ATHLET (Analyse der Thermohydraulik von LEcks und Transienten) /WIE 19/ und für unterkanalweise Modellierungen der Code CTF, der eine modernisierte und weiterentwickelte Version von COBRA-TF (COolant-Boiling in Rod Arrays – Two Fluids) ist, zur Verfügung. Gegenüber dem 1D-Parallelkanal-Ansatz von ATHLET bietet CTF den Vorteil, echte dreidimensionale Simulationen von Fluidodynamik und Wärmetransportprozessen durchzuführen. Allerdings ist CTF auf Wasser als Arbeitsmedium beschränkt, wohingegen ATHLET in den vergangenen Jahren um die Simulation von Natrium, Helium und Blei einschließlich eutektischer Blei-Wismut-Legierung erweitert wurde. Daher wurde FENNECS im Rahmen dieses Vorhabens mit ATHLET gekoppelt.

3.1 Programmtechnische Aspekte

Die Kopplung von FENNECS mit ATHLET nutzt die sog. Plug-in-Schnittstelle von ATHLET. Dies erforderte aus technischer Sicht die Bereitstellung von FENNECS in Form einer während der Laufzeit von ATHLET dynamisch ladbaren Bibliothek (*shared library*). Wird im ATHLET-Eingabedatensatz unter dem Keyword `PLUGIN` die Bezeichnung `n3kinfennecs` eingetragen, so lädt und nutzt ATHLET automatisch FENNECS als 3D-Neutronenkinetik-Code:

```
C----- PLUGIN
@
n3kinfennecs
```

Die Kopplung und der Datenaustausch erfolgen über die universelle ATHLET-Schnittstelle /LAN 97/.

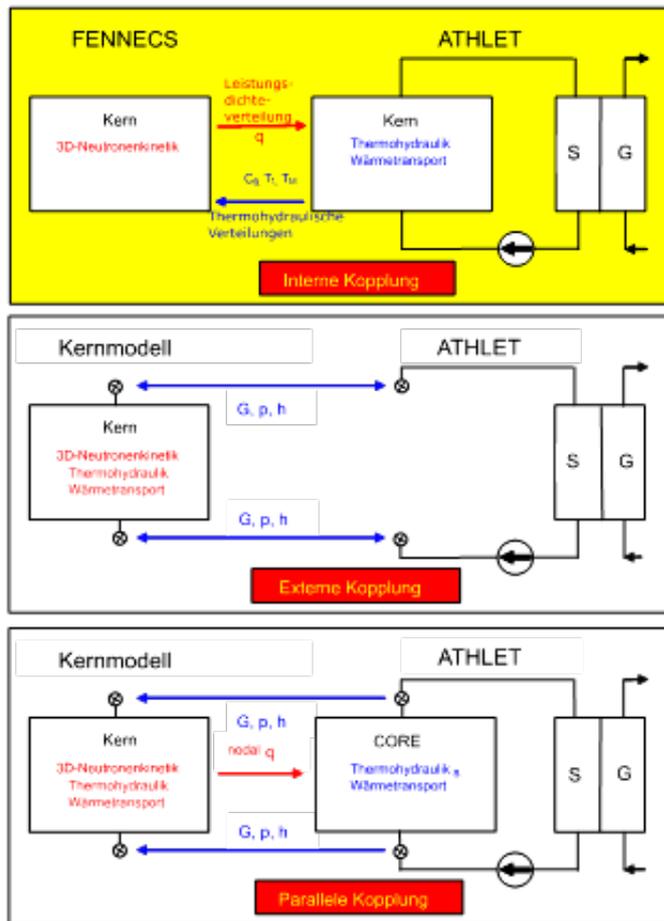


Abb. 3.1 Die verschiedenen Arten der Kopplung eines Kernmodells mit einem Thermohydraulikcode

3.2 Kopplungsstrategie

Von den drei in Abb. 3.1 dargestellten Kopplungsarten wurde die sog. *interne Kopplung* implementiert, bei der Fluidodynamik und Wärmeübertragungsprozesse in Reaktorkern, Kühlkreislauf und der gesamten Anlage von ATHLET und die Neutronenkinetik von FENNECS behandelt werden. Diese Art der Kopplung entspricht jener, mit der auch z.B. TORT-TD mit ATHLET gekoppelt ist /SEU 08/. Seitens ATHLET bietet diese Strategie den Vorteil, die fluidodynamischen Gleichungen in geschlossener Form integrieren zu können. Dies ist insbesondere bei Transport von Temperatur- oder Dichteänderungen von Bedeutung, oder wenn Strömungsumkehr auftritt. Diese Art der Kopplung entspricht jener, mit der auch z. B. TORT-TD mit ATHLET gekoppelt ist /SEU 08/.

Über die Schnittstelle erhält ATHLET die von FENNECS berechnete räumliche Leistungsverteilung und liefert umgekehrt an FENNECS die räumliche Verteilung der

Parameter des momentanen thermohydraulischen Zustandes. Die Abbildung der Thermohydraulik auf die Neutronenkinetik und umgekehrt ist flexibel gestaltet. So kann die Zuordnung thermohydraulischer Kanäle zu einzelnen geometrischen Strukturen von FENNECS, die z. B. Brennelemente, Heat Pipes, Brennstabzellen o. ä. darstellen, erfolgen. Die Zuordnungsabbildung kann einerseits im ATHLET-Eingabedatensatz unter dem Keyword NEUKIN3D über das Pseudo-Kyword FEEDBMAP erfolgen. Auf Anwenderseite birgt dies infolge der Diskretisierung von etwa hexagonalen Strukturen in mindestens sechs (je nach gewünschter räumlicher Auflösung auch mehr) Dreiecksprismen jedoch hohes Fehlerpotential, da bei Änderung der räumlichen Auflösung in FENNECS auch die Zuordnungsabbildung der neuen Auflösung manuell angepasst werden muss. Alternativ kann daher die Abbildung der thermohydraulischen Rückwirkungen (Feedback-Mapping) automatisch von FENNECS generiert werden, indem Informationen über die Zuordnung thermohydraulischer Kanäle zu neutronenphysikalischen Geometrie- bzw. Materialzonen direkt im Geometrie-Eingabedatensatz von FENNECS bereitgestellt werden. Dies erspart die manuelle Erstellung des Feedback-Mappings im ATHLET-Eingabedatensatzes. Entsprechende Angaben unter dem Pseudokeyword FEEDBMAP des ATHLET-Eingabedatensatzes werden nicht mehr benötigt und auch nicht mehr eingelesen, wenn entsprechende Angaben im Geometrie-Eingabedatensatz von FENNECS unter dem Keyword FEEDBMAP vorhanden sind.

Die axiale Nodalisierung in ATHLET ist ebenfalls nicht an das Maschennetz von FENNECS gebunden. Dies wird durch die universelle Auslegung der Schnittstelle ermöglicht, die bereits durch Kopplung von ATHLET mit anderen 3D-Neutronenkinetikmodellen wie QUABOX/CUBBOX, BIPR-8, DYN3D, KIKO-3D, SADCO oder TORT-TD vielfach verifiziert ist.

Die Steuerung des Programmablaufs übernimmt ATHLET. Insbesondere veranlasst ATHLET die Ausführung von FENNECS. Dies erfordert u. a., dass FENNECS in Form eines Unterprogramms aufgerufen werden kann. Im Übrigen entsprechen die Ausführungsarten von FENNECS,

- stand-alone,
- gekoppelt stationär,
- einzelner Zeitschritt gekoppelt

und die 3-Schritt-Vorgehensweise bei der Simulation einer Transiente,

- Bestimmung des gekoppelten stationären Ausgangszustands,
- Durchführung einer so genannten *Nulltransiente*,
- Berechnung der eigentlichen Transiente

der bewährten Erfahrung aus den Kopplungen mit anderen 3D-Neutronenkinetikcodes (siehe z.B. /SEU 08/).

4 AP2: Erweiterung von FENNECS für zeitabhängige Berechnungen

4.1 Implementierung der zeitabhängigen Gleichungen mit verzögerten Neutronen

Zur Simulation von Transienten und Störfällen wurde FENNECS im Rahmen dieses Vorhabens um die Lösung der zeitabhängigen Weniggruppen-Diffusionsgleichung in Finite-Elemente-Darstellung erweitert. Die Weniggruppen-Diffusionsgleichung lautet allgemein:

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{v_g} \frac{\partial}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot [D_g(\vec{r}) \vec{\nabla}] + \sigma_g^{tot}(\vec{r}) \right) f_g(\vec{r}, t) & \quad (4.1) \\ = \sum_{g'} \sigma_{gg'}^{scat}(\vec{r}) f_{g'}(\vec{r}, t) + \chi_g (1 - \beta) \sum_{g'} v \sigma_{g'}^{fis}(\vec{r}) f_{g'}(\vec{r}, t) \\ + \sum_l \chi_{gl}^d \lambda_l c_l(\vec{r}, t) \end{aligned}$$

Es wird die vollständig implizite Zeitintegration angewendet, die unbedingt numerische Stabilität gewährleistet, d. h. die Zeitschrittweite Δt ist nur durch Diskretisierungsfehler und das Konvergenzverhalten nach oben begrenzt. In der obigen Gleichung ist $f_g(\vec{r}, t)$ die räumlich-zeitliche Neutronenflussverteilung, v_g die Neutronengruppengeschwindigkeit, χ_{gl}^d , λ_l und $c_l(\vec{r}, t)$ sind das Gruppenspektrum der verzögerten Neutronen, die Zerfallskonstanten und die Verteilung der Mutterkerne der verzögerten Neutronen (Vorläufer) der Familie l jeweils zum Zeitpunkt t . Gleichung (4.1) wird gleichzeitig mit der Vorläuferbilanzgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} c_l(\vec{r}, t) = \beta_l \sum_{g'} v \sigma_{g'}^{fis}(\vec{r}) f_{g'}(\vec{r}, t) - \lambda_l c_l(\vec{r}, t) \quad (4.2)$$

gelöst.

Durch Ausführen der Zeitdiskretisierung von Gleichung (4.1) entspricht die resultierende Gleichung für einen einzelnen Zeitschritt einem stationären Fixed-Source-Problem in einem multiplizierenden Medium:

$$\begin{aligned}
 & (\vec{\nabla} \cdot [D_g(\vec{r})\vec{\nabla}] + \sigma'_g(\vec{r})) f_g^\tau(\vec{r}) \\
 & = \sum_{g'} \sigma_{gg'}^{scat}(\vec{r}) f_{g'}^\tau(\vec{r}) + \chi'_g \sum_{g'} v \sigma_{g'}^{fis}(\vec{r}) f_{g'}^\tau(\vec{r}) \\
 & + q_g^{\tau-1}(\vec{r})
 \end{aligned} \tag{4.3}$$

Darin sind

$$\sigma'_g(\vec{r}) = \sigma_g^{tot}(\vec{r}) + \frac{1}{v_g \Delta t}$$

der modifizierte totale Wirkungsquerschnitt,

$$\chi'_g = \chi_g (1 - \beta) + \sum_l \chi_{gl}^d \lambda_l \gamma_l \beta_l$$

das modifizierte Gruppenspaltspektrum,

$$q_g^{\tau-1}(\vec{r}) = \frac{1}{v_g \Delta t} f_g^{\tau-1}(\vec{r}) + \frac{1}{\Delta t} \sum_l \chi_{gl}^d \lambda_l \gamma_l c_l^{\tau-1}(\vec{r})$$

der zeitabhängige Fixed-Source-Term und

$$\gamma_l = \frac{\Delta t}{1 + \lambda_l \Delta t}$$

eine Abkürzung. Der Index τ bezeichnet den aktuellen und $\tau - 1$ den vorherigen Zeitschritt. Der bereits vorhandene Löser für das Eigenwertproblem kann somit nach der Neudefinition der obigen Größen zur Lösung der implizit diskretisierten transienten Diffusionsgleichung (4.3) verwendet werden. Dies geschieht durch Anwendung der Galerkin-Darstellung auf Gl. (4.3). Die Bilanzgleichung für die verzögerten Neutronenvorläufer Gl. (4.2) wird ebenfalls implizit zeitlich diskretisiert und simultan mit Gl. (4.3) gelöst. Das

in FENNECS implementierte Verfahren entspricht damit der in TORT-TD realisierten Methode /SEU 08/.

4.2 Entwicklung geeigneter Modelle zur Steuerstabbewegung

Für die Simulation von Reaktivitätsstörfällen oder die Suche nach einer kritischen Kernkonfiguration wird die Bewegung des Steuerstabsystems in stationären und transienten Zuständen benötigt. Die Variation der Position des Steuerstabsystems erfordert zwei unterschiedliche Aspekte, die berücksichtigt werden müssen:

- Die Materialzusammensetzung der das Regelsystem beschreibenden Elemente kann sich ändern. Dies bedeutet, dass für diese Elemente verschiedene Wirkungsquerschnittssätze austauschbar sein müssen. Man bezieht sich normalerweise auf Zustände ohne (*unkontrolliert*) oder mit Steuerstäben (*kontrolliert*).
- Je nach Stellung eines Steuerstabs kann durch ein finites Element eine Materialgrenze gehen. Ein solches Element wird als *teilweise kontrolliert* bezeichnet. Teilweise kontrollierte Elemente erfordern geeignete Methoden, um eine direkte präzise Lösung zu erhalten.

Die Implementierung des Steuerstabsystems in FENNECS wurde für gewöhnliche Steuerstäbe (*Control Bank*: vertikale Bewegung; typischerweise verwendet in LWR) und Steuertrommeln (*Control Drum*: Rotation; typischerweise verwendet für MMR) durchgeführt. Die Steuerstabsysteme sind in der Benutzerdokumentation von FENNECS im Detail beschrieben; im Benutzerhandbuch (User Manual) ist die Handhabung dokumentiert, Theorie und Implementierung sind im Modell- und Methodenhandbuch (Models and Methods Manual) beschrieben. Nachfolgend wird eine Übersicht über die wichtigsten Aspekte von Control Bank und Control Drum gegeben.

4.2.1 Steuerstabbänke

Die Definition von Steuerstäben und -bänken ist flexibel gestaltet, so dass Einfahren von Steuerstäben sowohl von oben nach unten (PWR) als auch von unten nach oben (BWR) simuliert werden kann. Eine Steuerstabbank kann mehrere Steuerstäbe (an verschiedenen radialen Kernpositionen) enthalten und wird durch die axiale Beschreibung der vollständig eingefahrenen Bank definiert. Diese Angaben ermöglichen es dem Benutzer, axial verschiedene Absorbermaterialien oder Steuerzustände für das finite Element zu

definieren. Eine solche Beschreibung wurde gewählt, um die Beschreibung von Reaktoren mit axial heterogener Steuerstabszusammensetzung (beispielsweise bei WWER-Typen) zu ermöglichen und um sicherzustellen, dass einige der Bänke nicht auf den gleichen Brennelementtyp beschränkt sind.

Die Position jeder Steuerbank kann im Eingabedatensatz von FENNECS festgelegt werden und sich während eines transienten Szenarios ändern. Eine solche Änderung wird durch eine Tabelle aus Zeit- und Positions-Angaben beschrieben. Intern interpoliert FENNECS die Position zwischen zwei Tabellenpunkten linear.

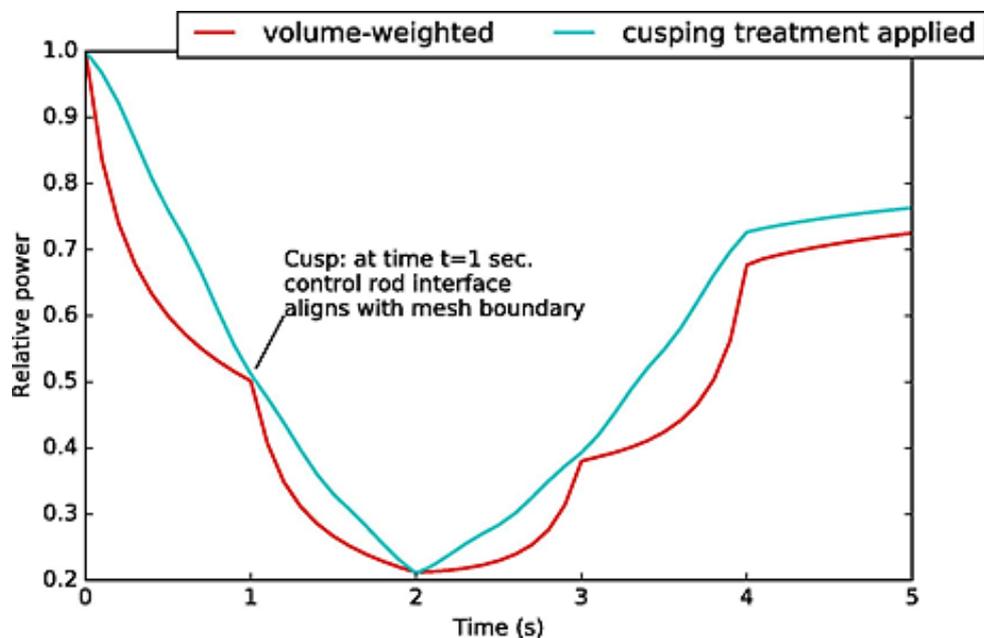


Abb. 4.1 Sägezahnartiger (*cusping*) relativer Leistungsverlauf bei Steuerstabbewegungen (rot, Volumengewichtung) anstelle des physikalisch korrekten Verlaufs (grün, Cuspingeffekt eliminiert) /SCH 19/

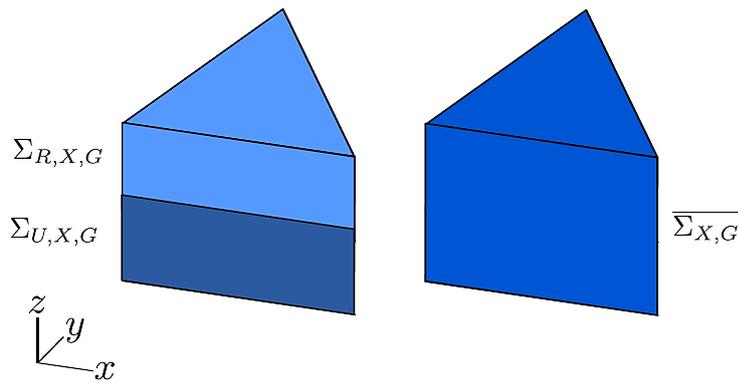


Abb. 4.2 Axial teilweise kontrolliertes finites Element (links) und effektiver Wirkungsquerschnitt (rechts) /GON 11/

Werden keine besonderen Maßnahmen ergriffen, kommt es bei Steuerstabbewegungen während Transientensimulationen zu unphysikalischen, sägezahnartigen Leistungsverläufen, wie Abb. 4.1 beispielhaft zeigt. Dieser *Cusping-Effekt* ist umso ausgeprägter, je größer die axiale Nodalisierung (im Falle axialer Steuerstabbewegungen) ist. Ursache dafür ist, dass während der Steuerstabbewegungen die Steuerstabspitze innerhalb eines finiten Elements zu liegen kommen kann, d. h. eine Materialgrenze wird zeitweise innerhalb eines finiten Elements liegen (Abb. 4.2 links). Die Bestimmung der effektiven Wirkungsquerschnitte (Abb. 4.2 rechts) eines solchen teilweise kontrollierten Elements durch einfache Volumengewichtung führt zum beschriebenen Cusping-Effekt. Um den Cusping-Effekt zu minimieren, wurde ein Fluss-Volumen-Gewichtungsmodell implementiert, welches nachfolgend skizziert wird.

Die Idee besteht darin, für jeden Reaktionstyp einen effektiven makroskopischen Wirkungsquerschnitt (Σ_{eff}) für das teilweise kontrollierte Element zu definieren:

$$\Sigma_{\text{eff},g} = \frac{\int \Sigma * \varphi}{\int \varphi} \quad (4.4)$$

Zur Auswertung dieser Integrale muss man den mittleren Fluss über und unter der Steuerstabspitze kennen. Da diese Informationen nicht verfügbar sind, werden sie wie folgt approximiert:

$$flux_{1,g} = \frac{\varphi_{1,g} * h_1 + V_{ratio} * h * \varphi_{mix,g}}{h_1 + V_{ratio} * h} \quad (4.5)$$

$$flux_{2,g} = \frac{\varphi_{2,g} * h_2 + (1 - V_{ratio}) * h * \varphi_{mix,g}}{h_2 + (1 - V_{ratio}) * h} \quad (4.6)$$

Die Bedeutung der Größen h , h_1 , h_2 und V_{ratio} geht aus Abb. 4.3 hervor, wobei $V_{ratio} = h'/h$ gilt.

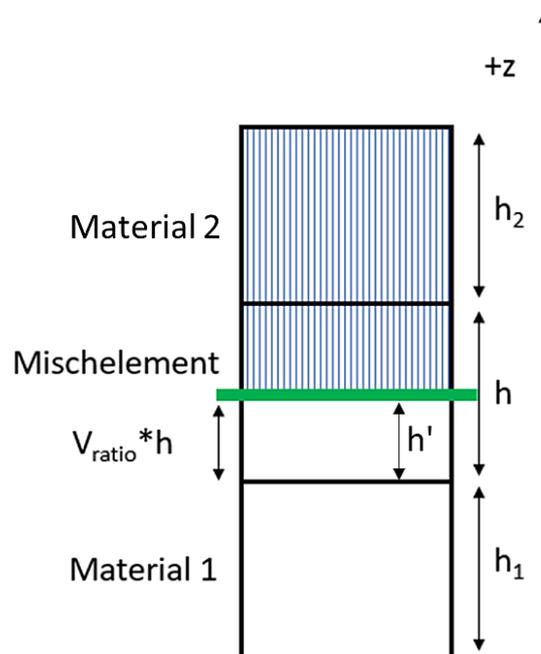


Abb. 4.3 Schema eines teilweise kontrollierten Elements. Die grüne Linie ist die durch die Steuerstabspitze definierte Grenzfläche zwischen Material 1 und 2

Die Definitionen Gl. (4.5) und (4.6) gewährleisten die Erhaltung der Reaktionsraten des 3-Knoten-Problems im äquivalenten 2-Knoten-Problem, das durch die Position der Steuerstabspitze definiert ist. Werden die Ausdrücke (4.5) und (4.6) in Gl. (4.4) eingesetzt, ergibt sich für den effektiven Wirkungsquerschnitt des teilweise kontrollierten Elements:

$$\Sigma_{eff,g} = \frac{\Sigma_{1,g} * V_{ratio} * flux_{1,g} + \Sigma_{2,g} * (1 - V_{ratio}) * flux_{2,g}}{V_{ratio} * flux_{1,g} + (1 - V_{ratio}) * flux_{2,g}} \quad (4.7)$$

Folglich kann Σ_{eff} als gewichteter Mittelwert zwischen dem kontrollierten und dem unkontrollierten Wirkungsquerschnitt des Brennelements ausgedrückt werden:

$$\Sigma_{eff,g} = \omega_g * \Sigma_{1,g} + (1 - \omega_g) * \Sigma_{2,g} \quad (4.8)$$

Die darin auftretenden Gewichtungsfaktoren der Energiegruppe g , ω_g , sind dabei wie folgt definiert:

$$\omega_g = \frac{V_{ratio} * flux_{1,g}}{V_{ratio} * flux_{1,g} + (1 - V_{ratio}) * flux_{2,g}} \quad (4.9)$$

Die Verifizierung und Validierung wurden anhand des LMW-Testfalls und des X2-Benchmarks erfolgreich durchgeführt. Näheres dazu ist den Kap. 4.3.2 und 6.3 zu entnehmen.

4.2.2 Steuerstabtrommeln

Wie bereits erwähnt, ist die Rotation von Steuertrommeln (*Control Drums*) für die Simulation von MMRs notwendig. Dies erforderte die Bereitstellung einiger zusätzlicher Mascheninformationen in der Element-Konnetktivitätsliste für FENNECS. Dementsprechend wurde PEMTY weiterentwickelt, um diese Informationen zu erzeugen. Im nächsten Schritt wurde die Möglichkeit der Rotation der Trommel während der zeitabhängigen Simulation in FENNECS implementiert. Steady-State-Verifikationen wurden durch Vergleich mit dem Monte-Carlo-Code SERPENT für das HPMR-Problem (Heat Pipe-cooled Micro Reactor, vgl. Kap. 6.2) durchgeführt. Allerdings konnte noch keine zufriedenstellende Zustimmung erzielt werden (Abb. 4.4), insbesondere ist der Cusping-Effekt vorhanden. Um das Problem des teilweisen, kontrollierten Elements anzugehen,

wurde das für die Steuerstabbänke entwickelte Modell (Berechnung fluss-volumen-gewichteter, effektiver Wirkungsquerschnitte) aktualisiert. Dennoch gelang es bisher noch nicht, damit den Cusping-Effekt zufriedenstellend zu eliminieren. Es sind daher weitergehende Untersuchungen und Entwicklungsarbeiten erforderlich, die in einem späteren Vorhaben durchgeführt werden sollen.

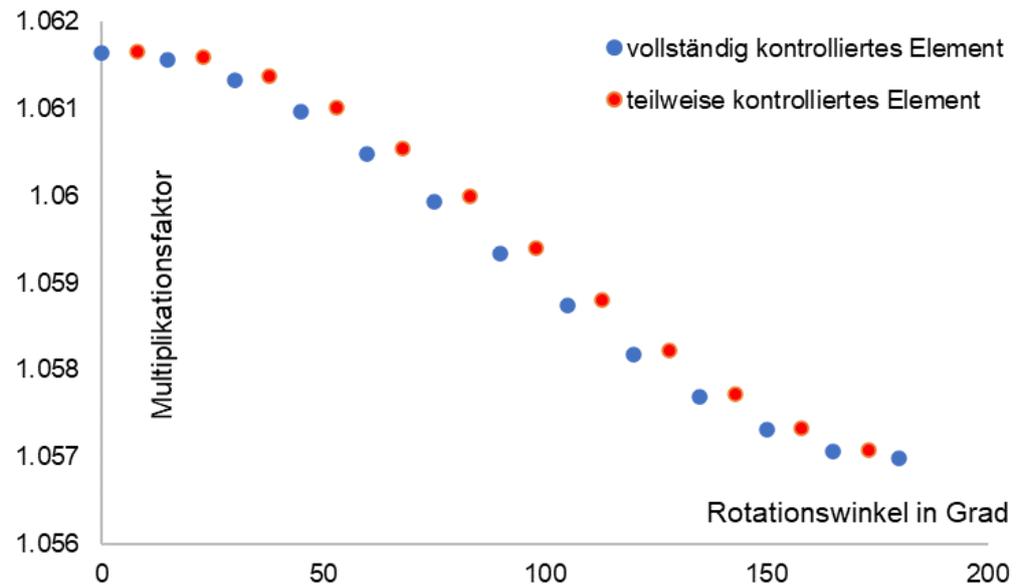


Abb. 4.4 Multiplikationsfaktor als Funktion des Rotationswinkels einer Steuerstabs-trommel (0° entspricht voll ausgefahren, 180° entspricht voll eingefahren)

4.3 Überprüfung, Testrechnungen

4.3.1 Überprüfung der Kopplung mit ATHLET

Als erster Testfall zur Überprüfung der Kopplung mit ATHLET wurde ein einzelnes Brennelement des Superphénix-Reaktors, dessen Daten im Rahmen eines Benchmarks im EU-Projekt ESFR-SMART /MIK 17/ zur Verfügung standen, nachgerechnet. Hierfür wurden Modelle in FENNECS und ATHLET entwickelt. Ferner wurde das Brennelement auch mit dem Monte-Carlo-Code Serpent modelliert, um für die verschiedenen axialen Zonen Wirkungsquerschnitte in 12 Energiegruppen zu generieren. Zur Berücksichtigung thermohydraulischer Rückwirkungen wurden diese Wirkungsquerschnitte nach Brennstofftemperatur (5 Stützstellen zwischen 300 K und 1500 K), Kühlmitteldichte (4 Stützstellen zwischen 0.744 g/cm³ und 0.941 g/cm³), Hüllrohrtemperatur (3 Stützstellen

zwischen 300 K und 900 K) sowie nach der Brennelement-Gitterweite (3 Stützstellen zwischen 17.9 cm und 18.05 cm) parametrisiert. Der Testfall diente in erster Linie dazu,

- den Datenaustausch zwischen FENNECS und ATHLET zu überprüfen,
- den Aufruf von FENNECS von ATHLET aus zu testen für die Initialisierung, die gekoppelte stationäre FENNECS-ATHLET-Iteration und die gekoppelte Berechnung eines Zeitschritts zu überprüfen,
- die Wirkungsquerschnittsinterpolation zu überprüfen,
- etwaige Fehler in der Implementierung der zeitabhängigen Gleichungen in FENNECS zu identifizieren.

Dazu wurde für das Superphénix-Brennelement mit FENNECS/ATHLET zunächst der gekoppelte stationäre Zustand und anschließend eine Nulltransiente simuliert. Wären in einem der oben genannten Punkte Fehler in Algorithmen und/oder deren Implementierungen gewesen, würde sich keine stabile Nulltransiente einstellen. Numerisch stabile Nulltransienten stellen daher bereits weitreichende Tests dar. Weitere Überprüfungen sind in Kap. 6.4 dokumentiert.

4.3.2 Überprüfung der Implementierung der zeitabhängigen Diffusionsgleichung

Ein erster Test der zeitabhängigen Erweiterung von FENNECS wurde anhand des LMW-Benchmarks (benannt nach den Autoren Langenbuch, Maurer und Werner) /LAN 77/ durchgeführt. Als Beispiel zeigt Abb. 4.5 einen Vergleich der transienten Leistungsdichteentwicklung, die mit FENNECS für das LMW-Testproblem berechnet wurde, mit einer S_4 -Transportlösung, die mit dem Diskrete-Ordinaten-Code TORT-TD generiert wurde. Die erzielte gute Übereinstimmung deutet auf eine korrekte Implementierung der zeitabhängigen Diffusionsgleichungen sowie der Bilanzgleichungen der verzögerten Neutronen hin. Weitergehende Überprüfungen sind in Kap. 6.4 dokumentiert.

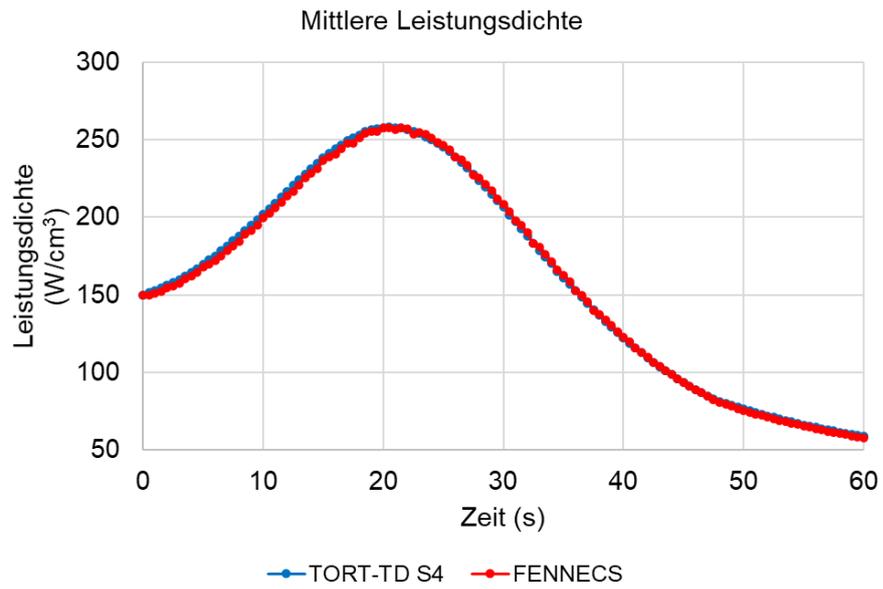


Abb. 4.5 Zeitverlauf der FENNECS-Leistungsdichte für den LMW-Benchmark im Vergleich zu einer mit TORT-TD berechneten S₄-Transportlösung

5 AP3: Maschengeneratoren zur Geometrievernetzung

5.1 Internes Vernetzungswerkzeug für regelmäßige Gitteranordnungen

Für die Diskretisierung der Problemgeometrie in finite Elemente (hier: gerade Dreiecksprismen) verfügt FENNECS über ein eigenes, internes Vernetzungswerkzeug (Meshing-Tool), welches regelmäßige Anordnungen von Brennelementen in hexagonalen oder cartesischen Gittern vernetzen kann. Das interne Meshing-Tool liest dazu Informationen über Geometrie und Materialverteilung aus einem ASCII-Eingabedatensatz, der von dem Benutzer erstellt wird. Das interne Meshing-Tool liefert als Ergebnis der Geometrievernetzung zwei ASCII-Dateien, die die Knoten- und Elementkonktivitätsdaten der Problemgeometrie enthalten. FENNECS liest dann diese beiden ASCII-Eingabedateien und stellt sie dem Solver zur Verfügung. Das interne Vernetzungswerkzeug ist in der Lage, regelmäßige cartesische und hexagonale Gitteranordnungen zu vernetzen, nicht jedoch davon abweichende, kompliziertere Geometrie, wie sie bei MMRs (etwa rotierende Steuerstabbrommeln) und andere innovative Konzepte und auch SMRs zu finden sind.

5.2 Frei verfügbare Vernetzungswerkzeuge

Für die Vernetzung unregelmäßiger Geometrien von MMRs wurden daher zunächst frei verfügbare Vernetzungswerkzeuge, die gerade Dreiecksprismen als Basiselemente verwenden, identifiziert und auf ihre Tauglichkeit für FENNECS untersucht. Durch geeignete zu entwickelnde Anpassungsfunktionen sollte erreicht werden, dass die vom externen Vernetzungstool gelieferten Knoten- und Elementkonktivitätsdaten einschließlich Randbedingungen in dem für FENNECS geeigneten Format vorliegen. So wurden frei verfügbare Werkzeuge wie RGG (*Reactor Geometry Generator*), der ursprünglich vom Argonne National Lab entwickelt worden war [JAI 15], getestet. Bald stellte sich jedoch heraus, dass die notwendigen Anpassungen für FENNECS einerseits und zu erwartende Erweiterungen für geometrische Besonderheiten andererseits, die von RGG u. U. nicht abgedeckt werden können, vom Aufwand her größer sind als die Entwicklung eines eigenen Vernetzungstools, das von Beginn an gezielt auf die Anforderungen der MMR-Geometrien und FENNECS ausgelegt werden kann.

5.3 Neuentwickeltes Vernetzungswerkzeug PEMTY

Daher wurde mit der Entwicklung eines externen Meshing-Tools auf Basis eines Python-3-Moduls begonnen. Dieses erzeugt die o. g. Dateien der Knoten- und Elementkonktivitätsdaten aus dem bekannten Geometrie-Eingabedatensatz des internen Meshing-Tools. Darüber hinaus können über einen eigenen Eingabedatensatz im YAML-Format nicht nur regelmäßige Gitteranordnungen vernetzt werden, sondern auch Control-Drums von Mikroreaktoren und deren runde Kernbegrenzungen. Dieses Tool, das aus nahe liegenden Gründen PEMTY (*Python External Meshing Tool with Yaml input*) genannt wurde, könnte zukünftig auch in anderen GRS-Projekten (wie z.B. AtlasNeo oder KMACS) eingesetzt werden, die bereits in Python geschrieben sind. Die Integration dieses Tools in AtlasNeo wäre interessant für die 3D-Visualisierung der Ergebnisse transients gekoppelter FENNECS/ATHLET-Rechnungen zur Laufzeit der Simulationen.

PEMTY kann den Geometrie-Eingabedatensatz von FENNECS oder alternativ den YAML-Input einlesen und die beiden Dateien der Knoten- und Elementkonktivitätsdaten generieren. Ausführliche Informationen zu PEMTY können Publikationen entnommen werden, etwa /BOU 20a/.

Im Laufe des Vorhabens wurde PEMTY beständig weiterentwickelt und verbessert. So ist es mit PEMTY unter Einsatz von FENNECS und mit Hilfe einer Serpent-Referenz-Flussverteilung möglich, SPH-korrigierte Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsdaten zu generieren. Hierdurch können Homogenisierungsfehler insbesondere bei starken Neutronenabsorbieren korrigiert werden. Ferner ist PEMTY in der Lage, Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsdaten aus Serpent-Result-Dateien („*_res.m“) zu lesen und daraus Wirkungsquerschnittsbibliotheken im von FENNECS verwendeten NEMTAB-Format zu generieren. Des Weiteren verfügt PEMTY über die Option, axial integrierte radiale Leistungsverteilungen sowohl aus Serpent-Ausgabedateien („*_core0“) als auch aus der FENNECS-Ausgabe zu lesen, miteinander quantitativ zu vergleichen und die Abweichungen graphisch darzustellen.

Die nachfolgenden Abbildungen illustrieren den Einsatzbereich von PEMTY. Abb. 5.1 zeigt Vernetzungsbeispiele für einen MMR sowie für regelmäßige hexagonale und Carthesische Gitteranordnungen, die in Kap. 6 näher erläutert werden. Geometrische Details der Vernetzung einer Steuerstabtrommel mit PEMTY mit unterschiedlichem Detaillierungsgrad gibt Abb. 5.2 wieder. Weitere Beispiele zu PEMTY sind in Kap. 6 zu finden.

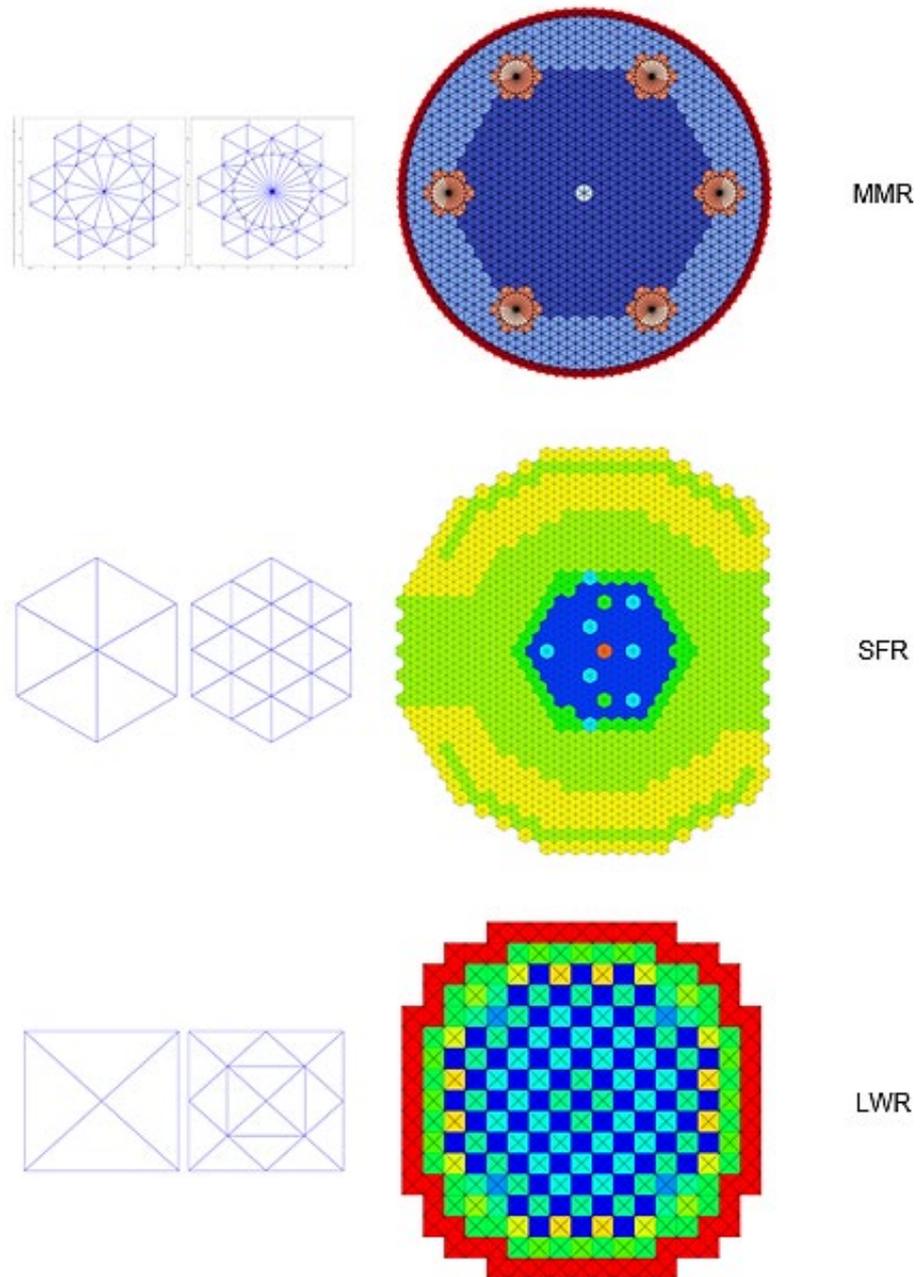


Abb. 5.1 Beispiele für geometrische Grundformen von PEMTY für die Vernetzung verschiedener Reaktorkonzepte

MMR: Modular Micro Reactor, SFR: Sodium-cooled Fast Reactor, LWR: Light Water Reactor.

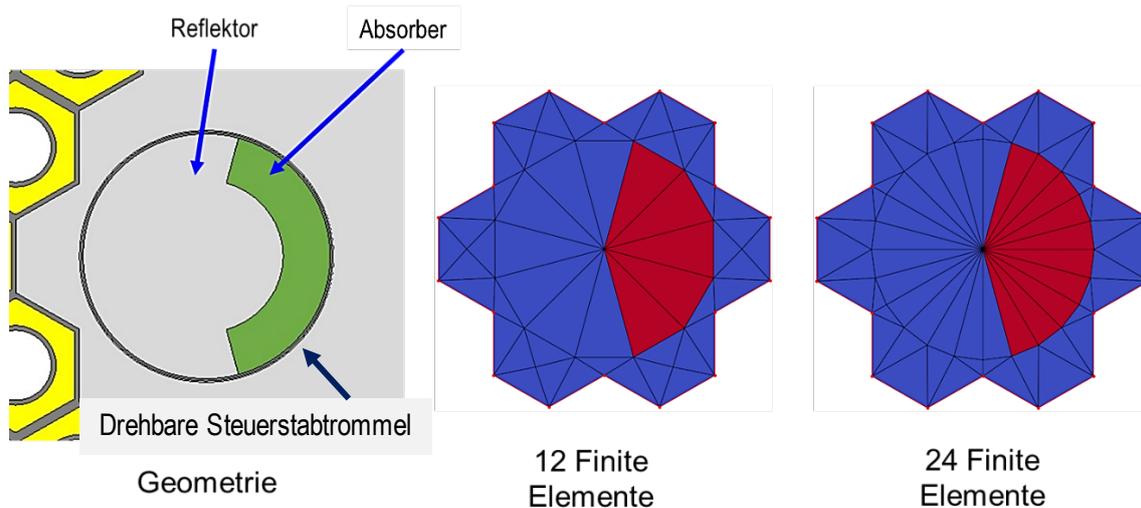


Abb. 5.2 Geometrische Details der Vernetzung einer drehbaren Steuerstabtrommel (links) mit PENTY mit unterschiedlichem Detaillierungsgrad (Mitte und rechts)

5.4 Anpassungen des internen Vernetzungswerkzeugs und von PENTY

Zusätzlich zu den geometrischen Fähigkeiten des internen Vernetzungswerkzeugs und von PENTY wurden diese in verschiedener Weise für besondere Anforderungen angepasst und erweitert. Dies betrifft in der Liste der Elementkonnektivitäten Informationen für

- die automatische Erzeugung der räumlichen Abbildung (*feedback mapping*) der Leistungsdichteverteilung und thermohydraulischer Parameter (siehe Kap. 3.2),
- die Modelle zur axialen und planaren Bewegung von Steuerstäben (siehe Kap. 4.2),
- die vereinfachte Transportmethode (SP_3 , siehe Kap. 8),
- den neuentwickelten Postprozessor von FENNECS (*Region-Indizes*, siehe Kap. 9.4).

5.5 Anpassung des Vernetzungsmoduls von FENNECS

Parallel zu PEMTY wurden auch Anpassungen am internen Vernetzungswerkzeug vorgenommen. Dies betrifft die Generierung zusätzlicher Daten

- zur automatischen Erzeugung der räumlichen Abbildung (*feedback mapping*) der Leistungsdichteverteilung und thermohydraulischer Parameter (siehe Kap. 3.2),
- zur axialen und planaren Bewegung von Steuerstäben (siehe Kap. 4.2),
- für den neuentwickelten Postprozessor von FENNECS (*Region*-Indizes, siehe Kap. 9.4).

6 AP4: Verifizierung und Validierung

Im Folgenden werden die in diesem Vorhaben durchgeführten Verifikations- und Validierungsarbeiten dargestellt. Sie erfolgten anhand unterschiedlichster Reaktorkonzepte. Ausnahme ist die Verifikation der SP₃-Methode, die in einem eigenen Kap. 8 dokumentiert ist.

6.1 Das SFR-Konzept ASTRID – Test der zeitabhängigen Erweiterung und der Kopplung mit ATHLET

Ziel dieses Testfalls ist es, sowohl die Implementierung der zeitabhängigen Erweiterungen von FENNECS als auch die Kopplung mit ATHLET zu überprüfen. Dies erfolgt anhand einer gekoppelten Transientensimulation des Reaktorkonzepts ASTRID (*Advanced Sodium Technological Reactor for Industrial Demonstration*), ein natriumgekühlter Reaktor mit schnellem Neutronenspektrum.

Die Spezifikation des ASTRID-Kerns wurde aus dem EU-Projekt ESNII+ /WAH 17/ übernommen. Der ASTRID-Kern hat eine stark heterogene axiale Konstruktion (siehe Abb. 4.5) mit vier axialen Schichten, einer unteren Brutzone, gefolgt von einer inneren Brennstoffzone (mit MOX-Brennstoff), einer inneren Brutzone und einer oberen Brennstoffzone für die 177 Brennelemente der inneren radialen Kernzone. Die 114 Brennelemente der äußeren radialen Kernzone bestehen nur aus einer äußeren axialen Brennstoffzone oberhalb der unteren axialen Brutzone, die über die Oberkante der inneren Kernbrennstoffzone hinausragt. Die wichtigsten ASTRID-Kernparameter im nominalen Betriebszustand sind, eine thermische Leistung von 1500 MW, ein Kernmassenstrom von 7785 kg/s, Kühlmittlertemperaturen von 673 K am Kerneintritt und 823 K am Kernaustritt (mittlere Kühlmittlertemperatur: 748 K) sowie Brut- und Brennstofftemperaturen von im Mittel 900 K bzw. 1500 K. Unter Betriebsbedingungen betragen die aktiven Kernhöhen 110,863 cm und 120,912 cm für den inneren bzw. den äußeren Kern. Jedes Brennelement besteht aus einer hexagonalen Anordnung von 217 Stäben. Die Brennelementgitterweite beträgt unter Nominalbedingungen 17,611 cm.

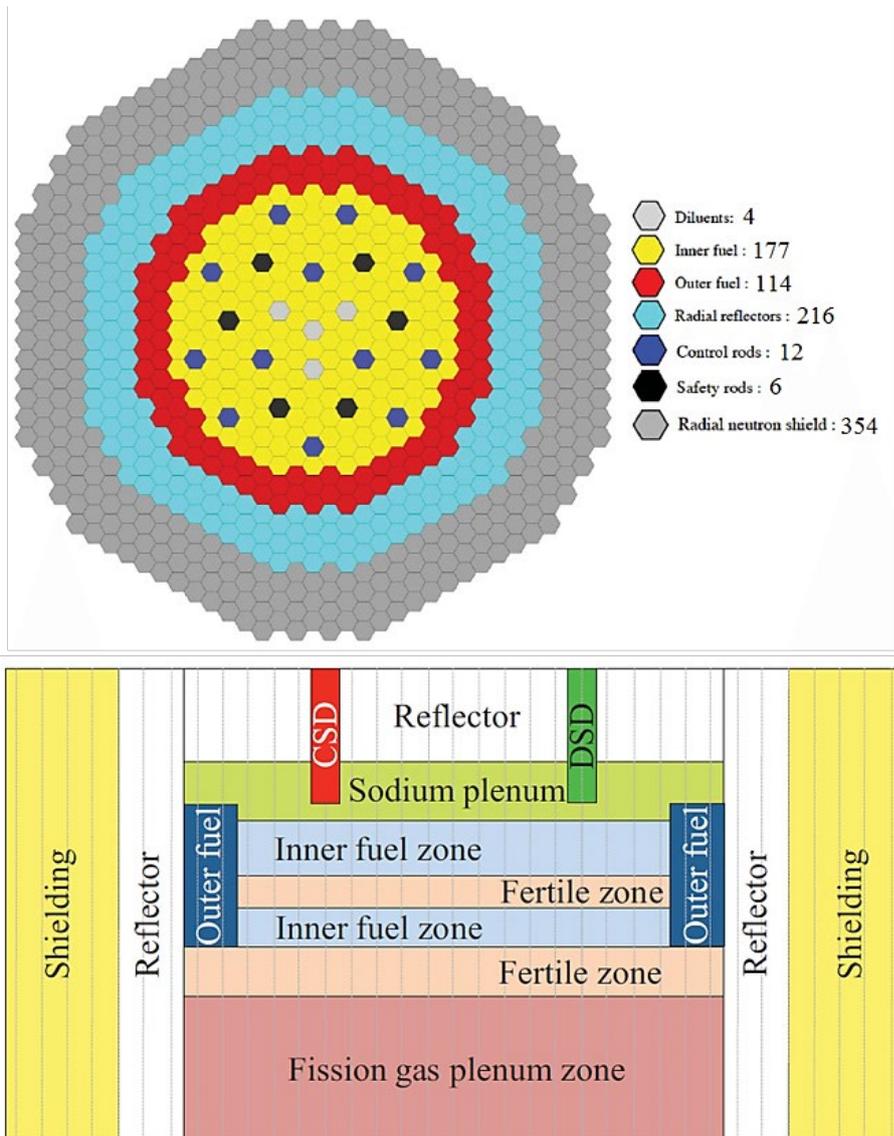


Abb. 6.1 Brennelementanordnung (oben) und axialer Aufbau (unten) des ASTRID-Kerns

Fertile zone: Brutzone, Inner/outer fuel zone: innere/äußere Brennstoffzone, Fission gas: Spaltgas, Sodium plenum: Natriumplenum, Shielding: Abschirmung.

Die Modellierung in FENNECS greift auf parametrisierte Wirkungsquerschnittsbibliotheken zurück, die im Rahmen eines früheren BMWi-Projekts (RS1547 INNOSYS) mittels Serpent generiert worden waren. Sie liegen in 12 Energiegruppen vor und sind nach 4 thermohydraulischen Rückwirkungsgrößen parametrisiert. Einzelheiten dazu sind der Tab. 6.1 zu entnehmen. Ebenfalls wurde in diesem Projekt ein thermohydraulisches Parallelkanalmodell des Reaktorkerns in ATHLET entwickelt.

Tab. 6.1 Rückwirkungsparameter und Stützstellen, nach denen die Wirkungsquerschnittsbibliotheken für ASTRID parametrisiert sind

| Stützstellenindex | Brennstofftemperatur (K) | Kühlmitteltemperatur (K) | Hüllrohrtemperatur (K) | Brennelement-Gitterweite (cm) |
|-------------------|--------------------------|--------------------------|------------------------|-------------------------------|
| 1 | 300 | 370 | 1148 | 17,58 |
| 2 | 900 | 680 | 1548 | 17,61 |
| 3 | 1200 | 1200 | | 17,88 |
| 4 | 1500 | | | |
| 5 | 1800 | | | |
| 6 | 2500 | | | |
| 7 | 3000 | | | |

Mit diesen Wirkungsquerschnittsbibliotheken wurde ein Modell von ASTRID in FENNECS erstellt. Abb. 6.2 zeigt Geometrie, Diskretisierung und Materialverteilung. Die innere Brennstoffzone erscheint blau, die äußere grün. Für das thermohydraulische Modell wurde der ATHLET-Datensatz, der ebenfalls in RS1547 entwickelt wurde, verwendet. Es wird eine 1-zu-1-Abbildung zwischen Neutronenphysik und Thermohydraulik verwendet, d. h. jedes Brennelement in FENNECS wird einem individuellen thermohydraulischen Parallelkanal in ATHLET zugeordnet.

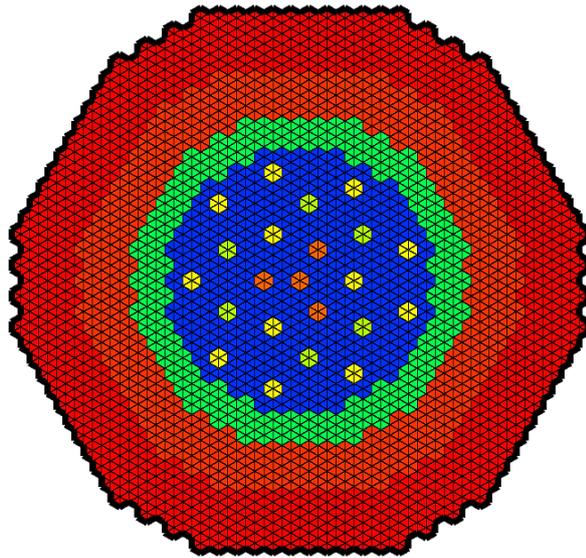


Abb. 6.2 Modell des ASTRID-Kerns in FENNECS. Die Farben stehen für unterschiedliche Materialien bzw. Wirkungsquerschnittsbibliotheken

Verschiedene Farben kennzeichnen verschiedene Materialien, die durch entsprechende Wirkungsquerschnittsbibliotheken repräsentiert werden.

Abb. 6.3 zeigt den mit FENNECS/ATHLET berechneten Leistungsverlauf während der Transiente als rote Linie. Die gleiche Rechnung wurde mit PARCS/ATHLET wiederholt und ist zum Vergleich im selben Diagramm mit blauer Linie dargestellt. Da die beiden Linien nahezu übereinanderliegen, ist letztere kaum zu erkennen. Wie zu erwarten, führt die vorübergehende Anhebung der Kerneintrittstemperatur zu einer Leistungsabsenkung. Der kurze und leichte Anstieg vor der Absenkung ist eine Folge geringerer Neutronenabsorption aufgrund der Verringerung der Kühlmitteldichte in Verbindung mit der Kühlmitteltemperaturerhöhung.

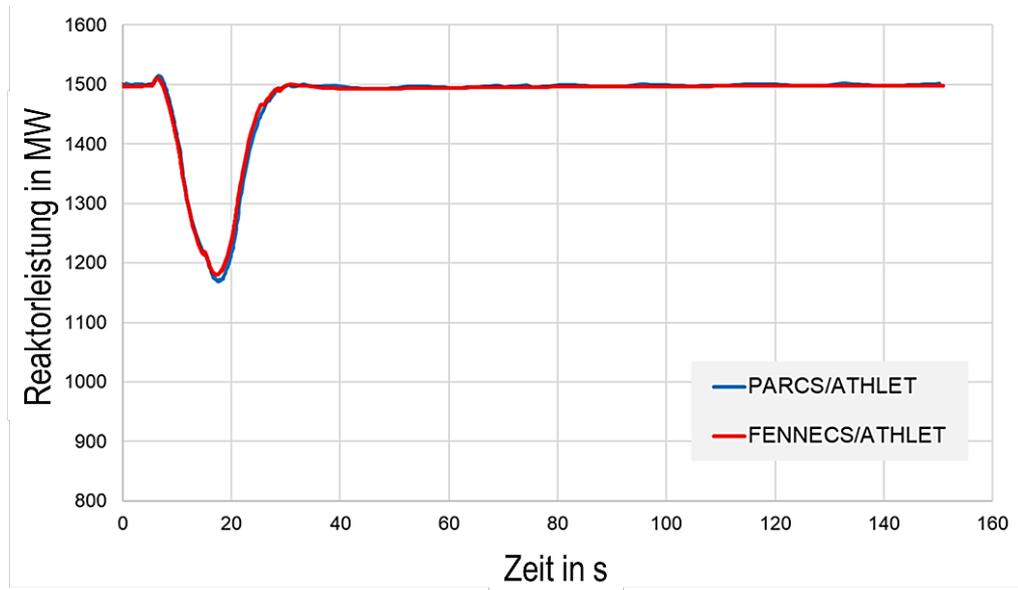


Abb. 6.3 Von FENNECS/ATHLET berechneter Leistungsverlauf (rote Linie) infolge einer vorübergehenden Anhebung der Kerneintrittstemperatur im Vergleich mit einer PARCS/ATHLET-Simulation (blaue Linie)

Die gute Übereinstimmung zwischen FENNECS und PARCS ist ein Hinweis auf die korrekte Implementierung der zeitabhängigen Erweiterungen von FENNECS und auch der Kopplung von FENNECS mit ATHLET. Abb. 6.4 zeigt die Leistungsdichteverteilung und Abb. 6.5 die Brennstofftemperaturverteilung jeweils vor Beginn der Transiente als Ergebnis der gekoppelten Berechnung des stationären Ausgangszustands. Bei der Temperaturverteilung ist der Wert von 900 K an Reflektor- und Steuerstabpositionen fiktiv und daher ohne Bedeutung, da die zugehörigen Wirkungsquerschnitte nicht nach der Brennstofftemperatur parametrisiert sind und es nur eine (künstliche) Stützstelle bei 900 K gibt.

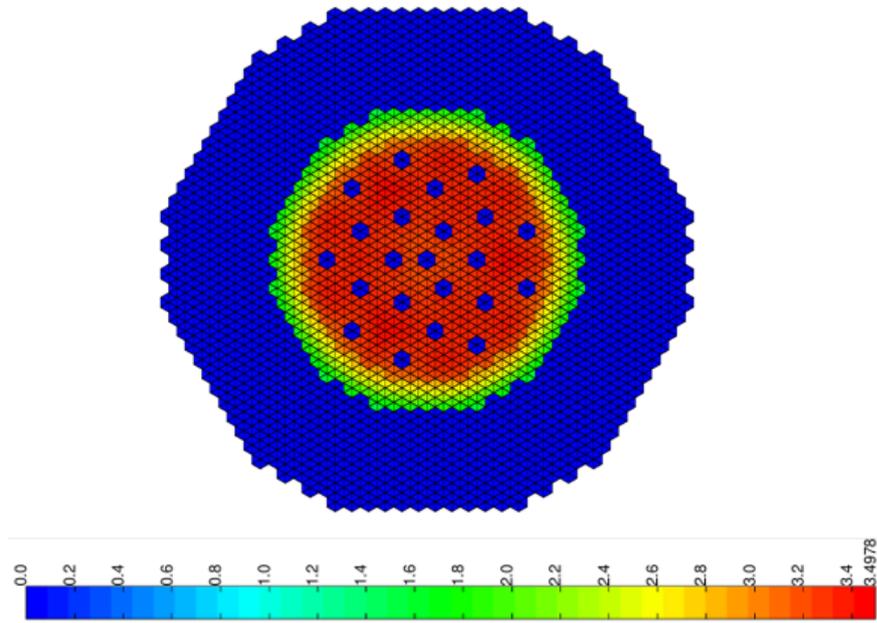


Abb. 6.4 Leistungsdichteverteilung (in Einheiten von 100 W/cm^3) des stationären Zustands vor Beginn der Transiente am axialen Ort ihres Maximums

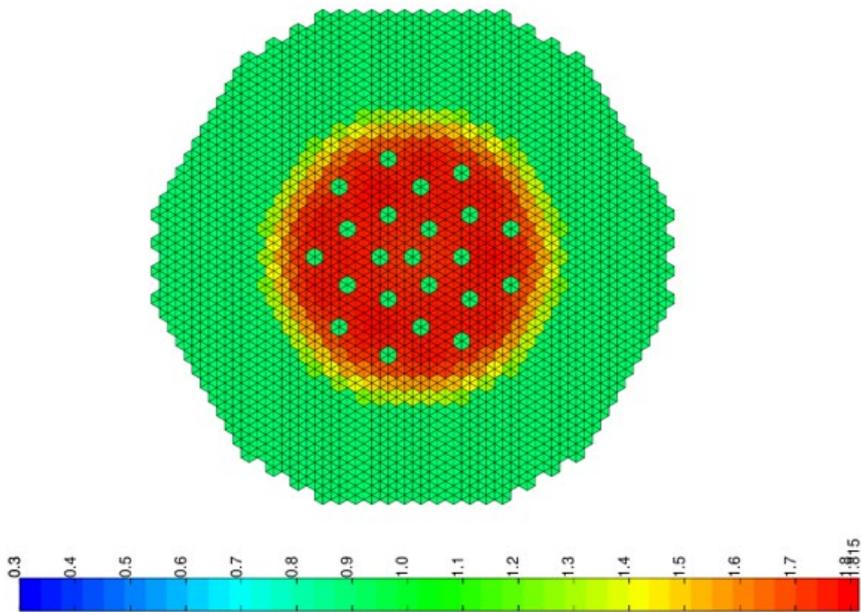


Abb. 6.5 Brennstofftemperaturverteilung (in Einheiten von 1000 K) des stationären Zustands vor Beginn der Transiente am axialen Ort ihres Maximums

Wert 900 K an Reflektor- und Steuerstabpositionen ist fiktiv (siehe Text).

6.2 Der Heat Pipe-cooled Micro Reactor (HPMR) – Test der Anwendbarkeit auf MMR

Ein Beispiel für einen MMR ist der hier betrachtete, in öffentlich zugänglichen Dokumenten /HU 19/ beschriebene HPMR (*Heat Pipe-cooled Micro Reactor*). Die Spezifikation enthält eine detaillierte Beschreibung der Geometrie. Die Kernkonfiguration besteht aus 192 hexagonalen Brennelementen, die von sechs Steuerstabtrommeln umgeben sind (siehe Abb. 6.6). Die Brennelemente haben eine Gitterweite von 5,4 cm und jeweils ein zentrales zylindrisches Wärmerohr (heat pipe) mit einem Durchmesser von 3 cm, das von Brennstoff umgeben ist, der sich in einem hexagonalen Edelstahlkasten (SS-316) befindet. Axial besteht jedes Brennelement aus zwei 15-cm-Reflektorzonen aus Berylliumoxid (BeO), die direkt über und unter der 100 cm hohen Brennstoffzone angeordnet sind. Der metallische Brennstoff besteht aus zu 18,1% angereichertem Uran mit einem Gewichtsanteil von 10 % Zirkonium (U-10Zr) und einer Porosität von 10 %, um ein Aufquellen aufgrund der Freisetzung von Spaltgas zu ermöglichen.

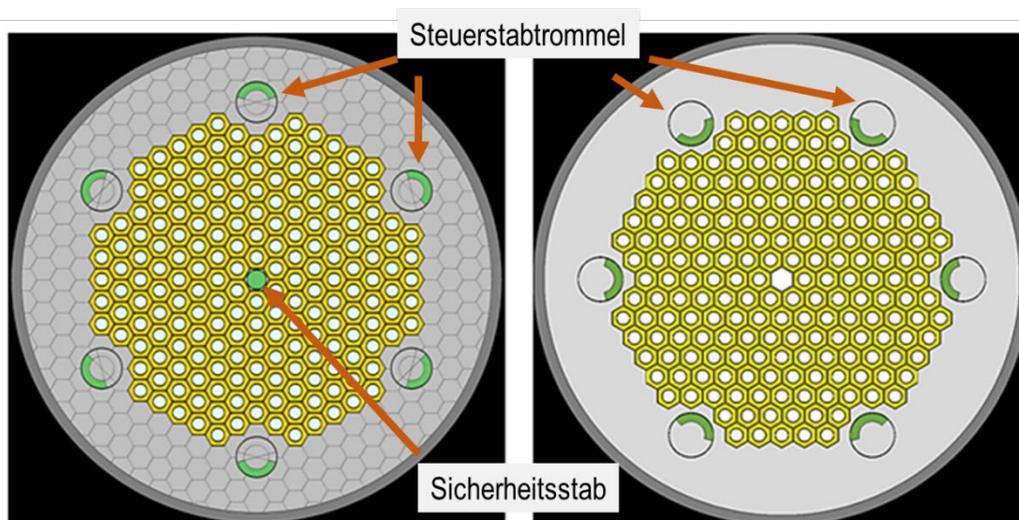


Abb. 6.6 Querschnitt durch den HPMR mit dem hexagonalen Brennstoff-/Heat-Pipe-Gitter und den sechs Steuerstabtrommeln

Links der der Zustand All Rods Out (ARO), rechts All Rods In (ARI).

Zur Kontrolle der Reaktivität sind außerhalb des Brennstoff-/Heat-Pipe-Gitters sechs Steuertrommeln vorgesehen (siehe Abb. 6.6). Die Steuertrommeln sind Zylinder mit 10,8 cm Durchmesser. Sie bestehen aus Reflektormaterial (Aluminiumoxidkeramik, Al_2O_3) und Absorbermaterial, die in 150°-Ringsektoren von 2 cm Dicke am Rand der Steuertrommeln angeordnet sind. Das Absorbermaterial ist Borcarbid (B_4C) mit einer ^{10}B -Anreicherung von 90 %. In den hexagonalen Edelstahlkasten in der Kernmitte, kann

ein Sicherheitsabschaltstab eingefahren werden. Sein Durchmesser beträgt 4,65 cm. Es besteht ebenfalls aus B₄C mit einer ¹⁰B-Anreicherung von 90 %. Der radiale Reflektor besteht aus Al₂O₃. Das Kühlmedium ist Kalium (K). Die nominale thermische Leistung des HPMR beträgt 5 MW.

6.2.1 Monte-Carlo-Modell des HPMR in Serpent

Für den HPMR wurde ein Monte-Carlo-Modell in Serpent entwickelt, dessen Zweck zweierlei ist. Zum einen dient es als Referenzmodell für Vergleiche mit den FENNECS-Simulationsergebnissen. Zum anderen wird es dafür verwendet, makroskopische Wirkungsgruppen-Wirkungsquerschnittsdaten für die verschiedenen Materialzonen (z. B. Brennstoffzellen, Steuerstabtrommeln usw.) zu generieren, die für die deterministischen Berechnungen mit FENNECS benötigt werden. Im Gegensatz zu geometrischen Daten enthält die Spezifikation keine Informationen zu den Massendichten der Materialien; diese wurden aus verschiedenen offen zugänglichen Literaturquellen recherchiert und sind in Tab. 6.2 zusammengefasst.

Tab. 6.2 Massendichten der verschiedenen Materialien, die für die Serpent-Simulationen verwendet wurden

| Material | Massendichte (g/cm ³) |
|--------------------------------|-----------------------------------|
| U-10Zr | 13,9032 |
| BeO | 3,01 |
| SS-316 | 7,970 |
| Al ₂ O ₃ | 3,987 |
| B ₄ C | 2,52 |

In Serpent wurden Monte-Carlo-Modelle für die folgenden beiden Konfigurationen entwickelt:

- Zustand All Rods Out (ARO, Abb. 6.6 links): Da die Absorberringsegmente aller Steuerstrommeln aus dem Kern herausgedreht sind, ist dies die Konfiguration mit der größten Reaktivität. In dieser Steuerstabtrommelposition ist die Absorption minimal und die Reflexion maximal.
- All Rods In (ARI, Abb. 6.6 rechts): In dieser Konfiguration ist die Reaktivität signifikant kleiner (unterkritisch), da die Absorberringsegmente aller Steuerstrommeln kerneinwärts gedreht sind. Diese Steuerstrommelposition führt zu einer Maximierung der Absorption, während die Reflexion minimiert ist.

In beiden Konfigurationen ist der zentrale Sicherheitssteuerstab vollständig aus dem Kern herausgezogen und als hexagonaler, mit Kühlmittel gefüllter Kasten modelliert². Um die durch die Monte-Carlo-Methode bedingten statistischen Unsicherheiten auf ein akzeptables Niveau zu begrenzen, wird jede Serpent-Simulation mit 5000 Zyklen (und 100 inaktiven Zyklen) mit je 50000 Quellneutronen durchgeführt. Dies ergibt eine Unsicherheit für den Multiplikationsfaktor von weniger als $5 \cdot 10^{-5}$. Alle Berechnungen werden mit der JEFF-3.1.1-Punktdatenbibliothek durchgeführt.

Die für FENNECS erforderlichen homogenisierten makroskopischen Wirkungsquerschnittsbibliotheken wurden unter Verwendung der in Tab. 6.1 angegebenen 12-Energie-Gruppenstruktur erstellt. Sie basiert auf der in /WAL 12/ vorgeschlagenen 8-Energie-Gruppenstruktur, die um zusätzliche Gruppenunterteilungen erweitert wurde. Diese 12-Energie-Gruppenstruktur wurde bereits in mehreren SFR-Analysen erfolgreich angewendet (siehe /BOU 19/ und /BOU 20b/).

Tab. 6.3 Untere Grenzen der 12-Energie-Gruppenstruktur, die für die Wirkungsquerschnittserzeugung mit Serpent verwendet wurde

| Gruppen-index | Untere Grenze (MeV) | Gruppen-index | Untere Grenze (MeV) | Gruppen-index | Untere Grenze (MeV) |
|---------------|---------------------|---------------|---------------------|---------------|---------------------|
| 1 | 6,0653E+00 | 5 | 1,1109E-01 | 9 | 2,0347E-03 |
| 2 | 2,2313E+00 | 6 | 4,0868E-02 | 10 | 7,4852E-04 |
| 3 | 8,2085E-01 | 7 | 1,5034E-02 | 11 | 1,4894E-04 |
| 4 | 3,0197E-01 | 8 | 5,5309E-03 | 12 | 1,0000E-11 |

Die mit Serpent erhaltenen Multiplikationsfaktoren aus /HU 19/ und sind in Tab. 6.4 dargestellt. Die Differenz zwischen den Multiplikationsfaktoren beträgt weniger als 40 pcm in ARO-Konfiguration und etwa 140 pcm in ARI. Dies zeigt, dass beide Modelle in guter Übereinstimmung mit den in /HU 19/ veröffentlichten Ergebnissen sind und für die für FENNECS erforderliche Wirkungsquerschnittsgenerierung verwendet und auch als Referenz für Vergleichszwecke mit FENNECS verwendet werden können.

² Diese Annahme weicht von der Spezifikation ab.

Tab. 6.4 Mit Serpent für die ARO- und ARI-Konfigurationen erhaltene Multiplikationsfaktoren und Vergleich mit den Benchmark-Ergebnissen

| | ARO | | ARI | |
|---|-----------|---------------------|-----------|---------------------|
| | k_{eff} | stat. Unsicherheit | k_{eff} | stat. Unsicherheit |
| Benchmark /HU 19/ | 1,02321 | $3,6 \cdot 10^{-5}$ | 0,98953 | $3,6 \cdot 10^{-5}$ |
| Serpent | 1,02348 | $2,9 \cdot 10^{-5}$ | 0,99097 | $3,0 \cdot 10^{-5}$ |
| Abweichung vom Benchmark (Reaktivität, pcm) | 26 | - | 147 | - |

6.2.2 Simulation des HPMR mit FENNECS

Abb. 6.7 zeigt die mit PEMTY generierte radiale Vernetzung des HPMR-Kerns in FENNECS sowohl für die ARO- als auch die ARI-Konfigurationen. Dunkleres Blau kennzeichnet das regelmäßige Gitter der hexagonalen Brennstoff-/Heat-Pipe-Zellen, helleres Blau stellt den radialen Reflektor dar. Jede sechseckige Zelle wird durch sechs gleichseitige Prismen dargestellt. Die zentrale Stabzelle für den Sicherheits-Abschaltstab ist deutlich hell zu erkennen. Der runde Kernmantel erscheint rot. Die 6 Steuerstabtrommeln mit ihren explizit aufgelösten 150° -Absorbersegmenten sind in das hexagonale Stabzellgitter eingebettet. Die axiale Diskretisierung besteht aus 27 gleich großen Maschen von jeweils 5 cm Höhe.

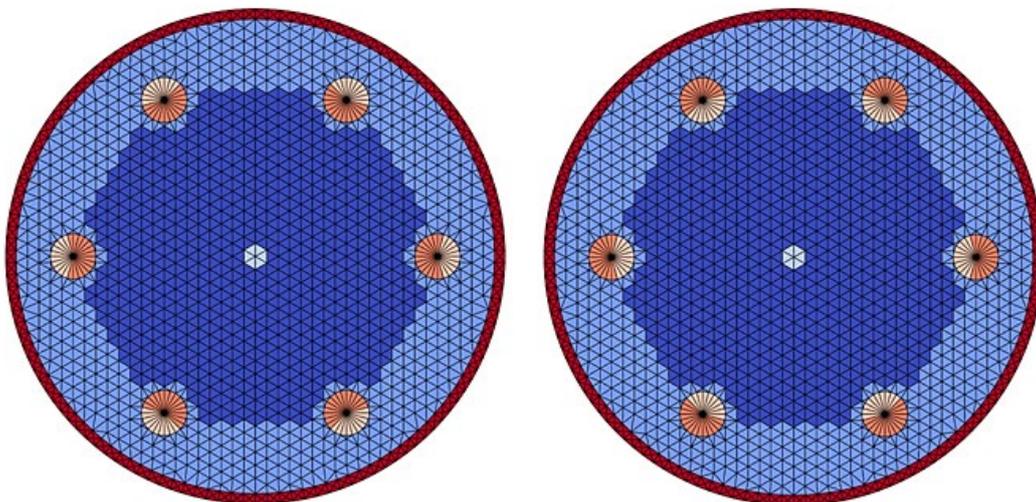


Abb. 6.7 Vernetzung und Materialverteilung des HPMR in FENNECS, links für den Zustand ARO, rechts für ARI

Für die FENNECS-Simulationen konnten zufriedenstellende Übereinstimmungen mit den jeweiligen Monte-Carlo-Referenzergebnissen festgestellt werden. So liefert FENNECS mit den von Serpent generierten Wirkungsquerschnitten für den Zustand ARO einen Multiplikationsfaktor, der um 116 pcm bzgl. der Reaktivität unterhalb der Serpent-Referenz liegt. Für den Zustand ARI ist die Unterschätzung mit 144 pcm bzgl. der Reaktivität geringfügig größer. Durch eine feinere Unterteilung der hexagonalen Stabzellen in 24 statt 6 Prismen je axialer Masche kann eine bessere Übereinstimmung mit den Monte-Carlo-Referenzlösungen erzielt werden. Die Reaktivitätsdifferenz beträgt für ARO dann -52 pcm, für ARI mit -64 pcm geringfügig mehr.

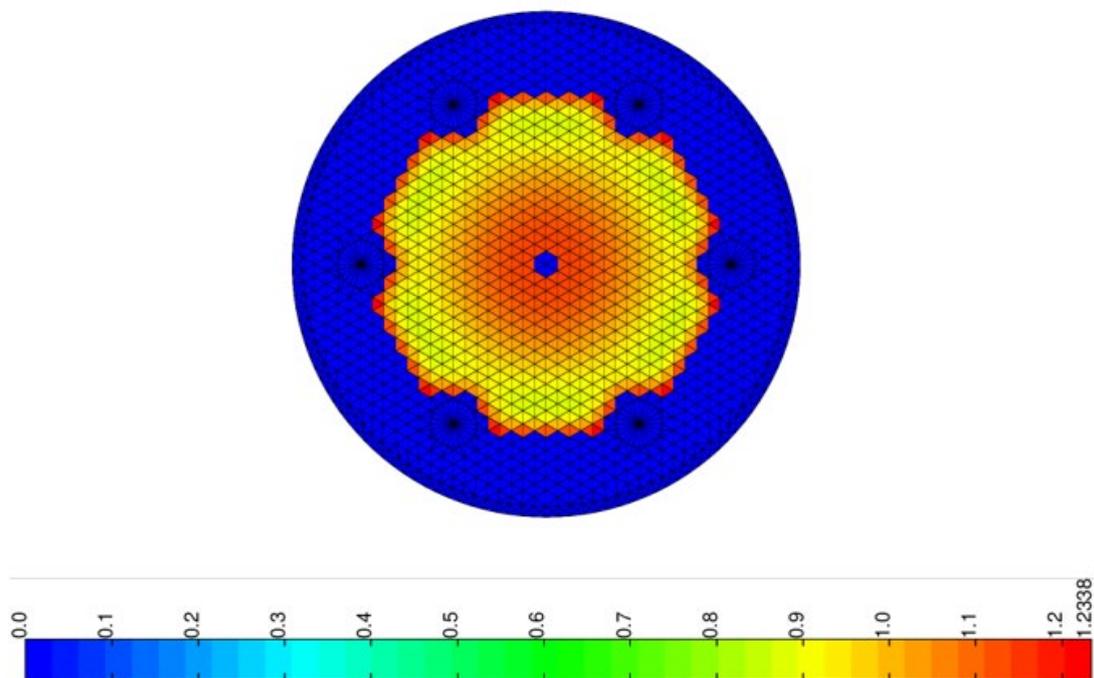


Abb. 6.8 Radiale Leistungsdichteverteilung 60 cm oberhalb der Kernunterkante

Zahlenwerte ergeben, mit 10 multipliziert, die Leistungsdichte in W/cm^3 .

Zusätzlich zu den Multiplikationsfaktoren wurden auch die radialen Leistungsverteilungen untersucht. In Abb. 6.8 ist zur Illustration die radiale Leistungsdichteverteilung 60 cm oberhalb der Kernunterkante zu sehen, in der man auch die Wirkung des radialen Reflektors (blau dargestellt) auf die direkt angrenzenden Brennstoff-/Heat-Pipe-Zellen und die dort leicht höhere Leistungsdichte sieht. Quantitative Aussagen sind Abb. 6.9 zu entnehmen, die die relativen Abweichungen der von FENNECS berechneten radialen Leistungsverteilung gegenüber Serpent für die beiden Zustände ARO und ARI zeigt. Erkennbar ist, dass FENNECS die Leistung am Kernrand mit bis zu 3,96 % unterschätzt und in der Kernmitte mit bis zu 2,54 % überschätzt. Zu berücksichtigen ist, dass bei dem

geringen Durchmesser des HPMR starke radiale Neutronenflussgradienten über relativ kurze Distanzen auftreten, die u. U. von der Diffusionsnäherung nicht besser erfasst werden können. Es wäre daher interessant, diese Simulationen mit der vereinfachten Transportmethode SP_3 zu wiederholen, auch unter Einbeziehung anisotroper Streuung durch Berücksichtigung höherer Legendre-Entwicklungsordnungen. Auch Homogenisierungsfehler bei der Wirkungsquerschnittserzeugung können eine Rolle spielen, die beispielsweise durch eine SPH-Korrektur gemindert werden können.

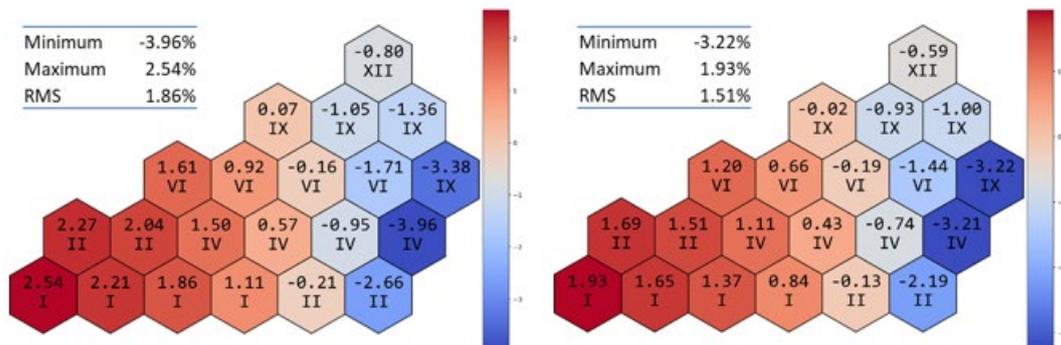


Abb. 6.9 Prozentuale Abweichungen der von FENNECS berechneten radialen Leistungsverteilung gegenüber Serpent. Links: ARO, rechts: ARI

6.3 Der X2-Benchmark – Test der Anwendbarkeit auf LWR vom Typ WWER-1000

Der X2-WWER-1000-Benchmark enthält Betriebsdaten aus dem Block 2 des ukrainischen Kernkraftwerks Chmelnyzkyj (X2) und bietet somit die Möglichkeit, nukleare Simulationscodes in hexagonaler Geometrie zu validieren. Der erste Teil des Benchmarks ist dem frischen Kern, im Zustand Nulllast heiß (*Hot Zero Power*, HZP), gewidmet. Während der Inbetriebnahmephase wurden in verschiedenen Versuchsreihen mehrere Größen wie der Reaktivitätswirksamkeit der Steuerstabbänke und isotherme Temperaturreaktivitätskoeffizienten ermittelt. Da es keine thermohydraulische Rückkopplung gibt, ist dieser Benchmark ideal für die Validierung eigenständiger neutronenphysikalischer Methoden und Codes.

Der Kern (siehe Abb. 6.10) enthält folgende fünf verschiedene frische Brennelementtypen:

- 48 Brennelemente (13AU in Abb. 6.10) mit einer ^{235}U -Anreicherung von 1,3 %,
- 42 Brennelemente (22AU in Abb. 6.10) mit einer ^{235}U -Anreicherung von 2,2 %,
- 37 Brennelemente (30AV5 in Abb. 6.10) mit einer durchschnittlichen ^{235}U -Anreicherung von 2,98 % (Brennstab mit Gadolinium),
- 24 Brennelemente (39AWU in Abb. 6.10) mit einer durchschnittlichen ^{235}U -Anreicherung von 3,99 % (Brennstab mit Gadolinium),
- 12 Brennelemente (390GO in Abb. 6.10) mit einer durchschnittlichen ^{235}U -Anreicherung von 3,96 % (Brennstab mit Gadolinium).

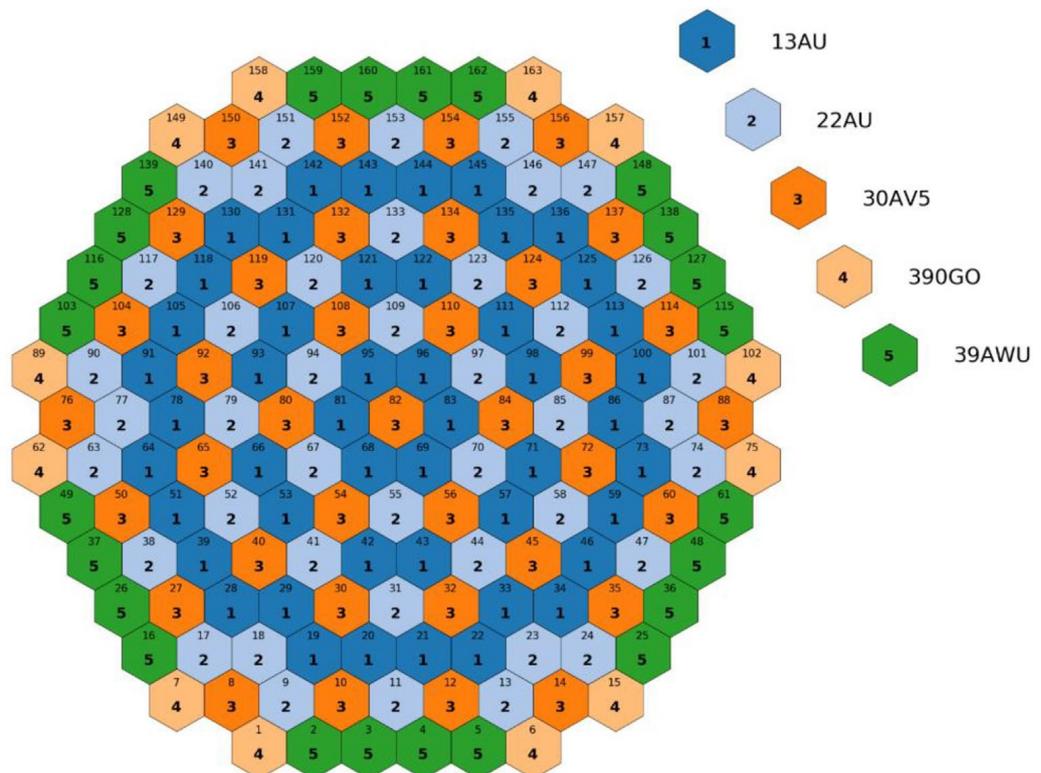


Abb. 6.10 Kernbeladung des ersten Zyklus des X2-Benchmarks

Die Modellierung in Serpent und FENNECS sowie die Generierung der Wirkungsquerschnitte in zwei Energiegruppen sind ausführlich in /HEN 21/ dokumentiert. Im vorliegenden Bericht werden daher nur die wichtigsten Gesichtspunkte und Ergebnisse dargestellt.

6.3.1 Modellierung im Monte-Carlo-Code Serpent

Die Modellierung mit Serpent dient zweierlei Zielen, einerseits der Generierung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsdaten für FENNECS und andererseits der Berechnung einer Referenzlösung für die Leistungsverteilung, da hierfür keine experimentellen Daten vorliegen. Das Modell des Kerns des X2-Benchmarks basiert auf der Spezifikation /BIL 20/. Die hexagonalen Brennelemente sind in einem Kerngitter mit einer nominalen Gitterweite von 23,6 cm angeordnet und von einer Trennwand (engl. *Baffle*) umgeben, die an mehreren Stellen durchbrochen ist (Abb. 6.11). Radial und axial herrschen Vakuumrandbedingungen.

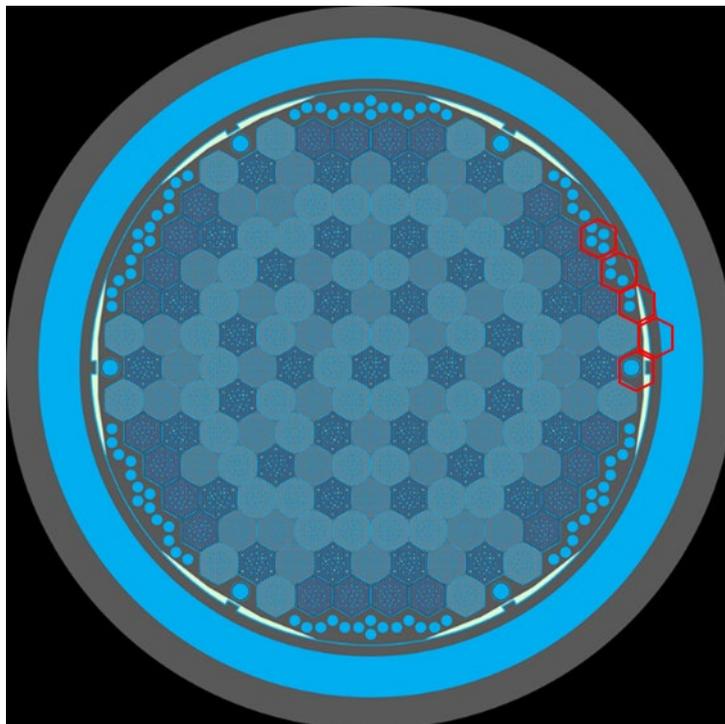


Abb. 6.11 Draufsicht des Serpent-Kernmodells des X2-Benchmarks mit dem radialen Reflektor (rot dargestellt)

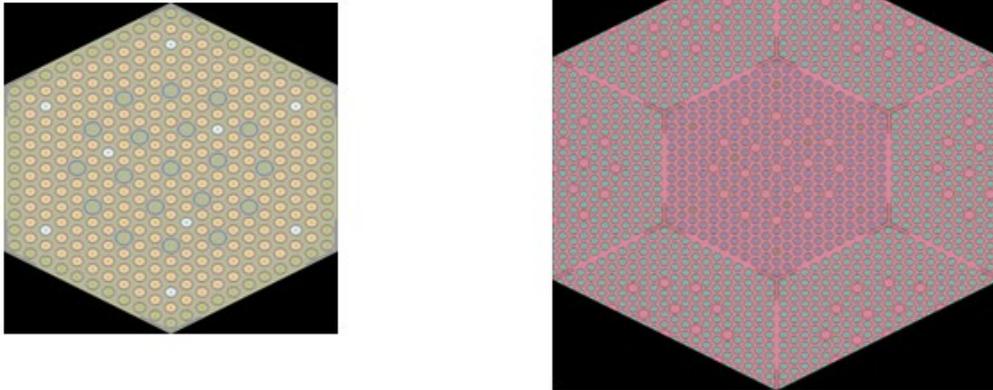


Abb. 6.12 Serpent-Modelle zur Wirkungsquerschnittserzeugung für den X2-Benchmark

Jedes Brennelement ist im Serpent-Modell detailliert dargestellt, d. h. heterogene axiale und radiale Strukturen werden in voller Auflösung modelliert. Dabei entsprechen alle geometrischen Parameter und Materialzusammensetzungen der Benchmark-Spezifikation /BIL 20/. Abb. 6.12 zeigt links das Serpent-Modell eines Brennelements. Für den oberen und unteren axialen Reflektor wird das in Abb. 6.12 rechts dargestellte Superzellmodell in Serpent verwendet. Zur Korrektur von Homogenisierungsfehlern wurde die Superhomogenisierungsmethode (*Super homogenisation method, SPH*) eingesetzt, die als iterative Rechensequenz aus FENNECS und Serpent in PEMTY implementiert ist.

6.3.2 Modellierung mit FENNECS

Das Modell des X2-Kerns in FENNECS wird durch ein Netz aus insgesamt 243.072 finiten Elementen (48 axiale Schichten zu je 5064 Dreiecksprismen, siehe Abb. 6.13 links). Dieses Netz liefert die gewünschte Genauigkeit bei akzeptablem Rechenaufwand.

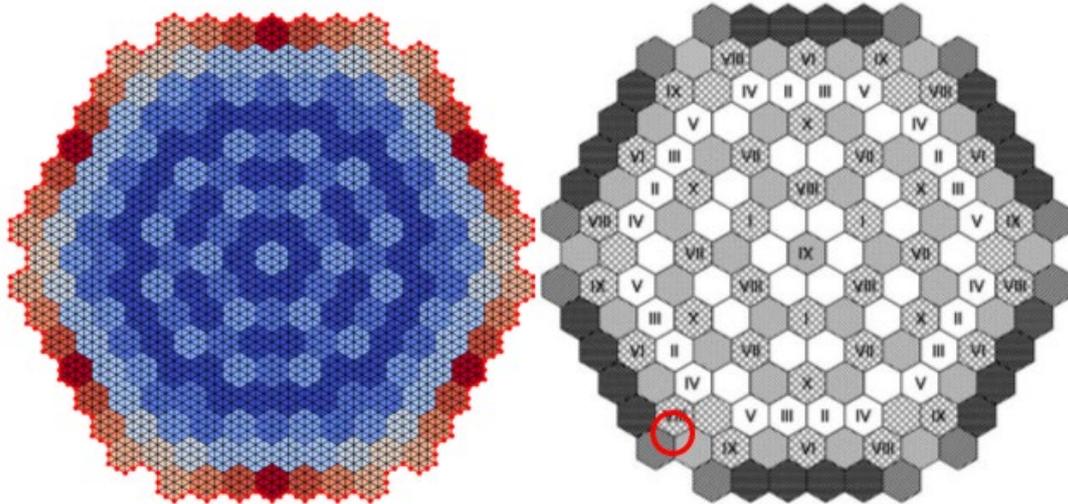


Abb. 6.13 Draufsicht auf das FENNECS-Modell des X2-Kerns (links) und die Steuerstabbankpositionen (rechts)

6.3.3 Ergebnisse

6.3.3.1 Zustand Nulllast heiß

Der Zustand Nulllast (HZP) heiß ist gekennzeichnet durch eine homogene Temperatur von 281 °C und eine zu 76 % ausgefahrene Steuerstabbank 10; die kritische Borkonzentration beträgt 1207 ppm. Für diesen Zustand liefert SERPENT einen Multiplikationsfaktor von $1,00018 \pm 1$ pcm. FENNECS berechnet einen Wert von 1,00156, was einer Abweichung von 138 pcm entspricht. Zusätzlich ist in Abb. 6.14 ein relativer Vergleich der Brennelementleistungsverteilung in einem 60°-Sektor des Kerns dargestellt, die maximal beobachtete Abweichung beträgt 3,6 %. Insgesamt wird eine zufriedenstellende Übereinstimmung zwischen den beiden Lösungen erhalten.

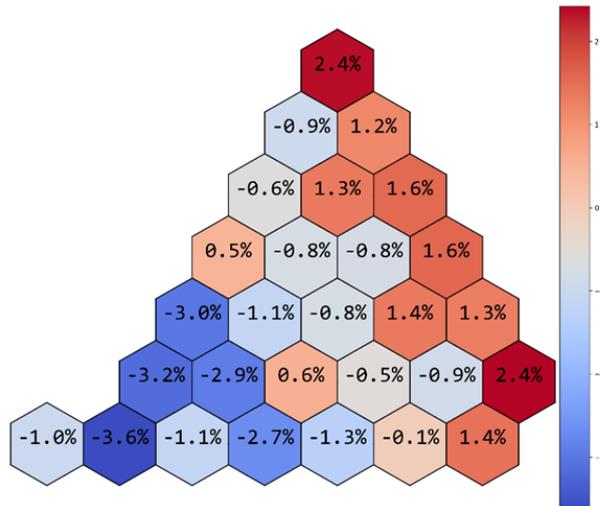


Abb. 6.14 Relative Differenz der Brennelementleistungsverteilung zwischen FENNECS und SERPENT

6.3.3.2 Isotherme Temperaturkoeffizienten

Für den Zustand Nulllast heiß des frischen Kerns wurden auch isotherme Reaktivitätskoeffizienten für zwei verschiedene Konfigurationen der Steuerstabbank mit FENNECS berechnet. Die FENNECS-Ergebnisse sind zusammen mit den Messwerten in Tab. 6.5 angegeben. Die erste Messung ist der HZP-Konfiguration sehr ähnlich, d. h. nur die Bank 10 ist leicht eingefahren. Bei Messung 2 hingegen sind die Bänke 7, 8 und 9 vollständig eingefahren. Jede Messung wurde zweimal durchgeführt, wobei die Ergebnisse jeweils um fast 10 % voneinander abwichen. Unter Berücksichtigung dieser Unsicherheiten ist festzustellen, dass die FENNECS-Simulationen gut mit den Messwerten übereinstimmen.

Tab. 6.5 Gemessene und berechnete Werte des isothermen Reaktivitätskoeffizienten. C_B ist die Borkonzentration

| | C_B (ppm) | Isotherme Temperaturän- derung (°C) | Isothermer Reaktivitäts- koeffizient (pcm/°C) | |
|---|----------------|---|--|---------|
| | | | Messung | FENNECS |
| Messung 1: Bank 10 zu 76 % ausgefah- ren, übrige Bänke ausgefahren | 1233 | 280,7 → 276,0 | -4,88 ± 0,50 | -4,77 |
| | | 276,4 → 280,6 | -5,39 ± 0,54 | |
| Messung 2: Bank 10 zu 76 % ausgefah- ren, Bänke 7, 8, 9 eingefahren, übrige Bänke ausgefahren | 997 | 280,3 → 275,7 | -13,58 ± 0,14 | -13,30 |
| | | 275,7 → 280,2 | -14,67 ± 0,15 | |

6.3.3.3 Reaktivitätswirksamkeiten der Steuerstäbe

Abschließend wurde der SCRAM-Wert während des Starttests bewertet. Zwei Werte wurden berechnet, einer berücksichtigte das gleichzeitige Einfahren aller Steuerstabbankposition bis auf eine (roter Kreis in Abb. 6.13 rechts), der andere entspricht dem Einfahren aller Steuerstabbankpositionen und ergibt somit den gesamten SCRAM-Wert. Die thermohydraulischen Bedingungen blieben während des SCRAM-Tests unverändert. Der von FENNECS berechnete Wert wurde aus zwei stationären FENNECS-Simulationen ermittelt, bei denen nur die Steuerstabbankpositionen geändert wurden. Die Simulationen wurden mit zwei verschiedenen Wirkungsquerschnittsdatensätzen für die Steuerstäbe durchgeführt; bei einem handelt es sich um den direkt mit Serpent berechneten, beim anderen um den mit der SPH-Methode korrigierten Datensatz.

Tab. 6.6 FENNECS-Ergebnisse für die Steuerstabwirksamkeiten (WQ = Wirkungsquerschnittsdatensatz der Steuerstäbe)

| | Experi- ment | FENNECS Reaktivitätswirksamkeit (pcm) | |
|-----------------------------|-----------------|--|-----------------------|
| | | Unkorrigierte WQ | SPH-korrigierte WQ |
| SCRAM ohne Steuerstab 17 | 5230 ± 310 | 6034 | 5643 |
| SCRAM | 7000 ± 430 | 8011 | 7402 |

Wie aus Tab. 6.6 hervorgeht, führt der nicht weiter behandelte Steuerstab-Wirkungsquerschnittsdatensatz zu einer deutlichen Überschätzung der Steuerstabwirksamkeit (Spalte *Unkorrigierte WQ*) gegenüber der Messung. Mit dem SPH-korrigierten Steuerstab-Wirkungsquerschnittsdatensatz ist hingegen eine deutliche Verbesserung zu erzielen (Spalte *SPH-korrigierte WQ*). Es sei darauf hingewiesen, dass große experimentelle Unsicherheiten ein bekanntes Problem darstellen, das in der Spezifikation diskutiert wird /BIL 20/. Aufgrund der Einschränkungen der Messtechnik werden die gemessenen Werte daher um fast 10 % unterschätzt. Unter Einbeziehung dieser Informationen liefert FENNECS in Verbindung mit den SPH-korrigierten Wirkungsquerschnitten akzeptable Ergebnisse.

Zusätzlich wurden Messung zur integralen und differentiellen Reaktivitätswirksamkeit der Steuerstabbank 10 nachgerechnet. Während dieses Versuchs wurde die Borkonzentration erhöht, während die anfangs voll eingefahrene Bank 10 schrittweise vollständig ausgefahren wurde. Auch hier wurden für 11 äquidistante Bankstellungen zwischen voll ein- und voll ausgefahrenem Zustand, jeweils stationäre FENNECS-Simulationen durchgeführt und mit den Messungen verglichen. Wie aus Abb. 6.15 oben hervorgeht, wird die integrale Wirksamkeit von FENNECS um fast 10 % unterschätzt. Die differentielle Wirksamkeit ist in Abb. 6.15 unten dargestellt. Während nahe der ein- bzw. ausgefahrenen Stellung FENNECS gut die Messungen reproduziert, sind für etwa halb ausgefahrene Zustände größere Abweichungen festzustellen. Da die Messwerte nicht das erwartete glatte Verhalten aufweisen, ist mit entsprechend großen experimentellen Unsicherheiten zu rechnen (im Benchmark sind dazu keine Angaben). Abschließend sei darauf hingewiesen, dass in den FENNECS-Ergebnissen kein Cusping-Effekt zu beobachten ist, was darauf hindeutet, dass das Steuerstabmodell angemessen implementiert wurde.

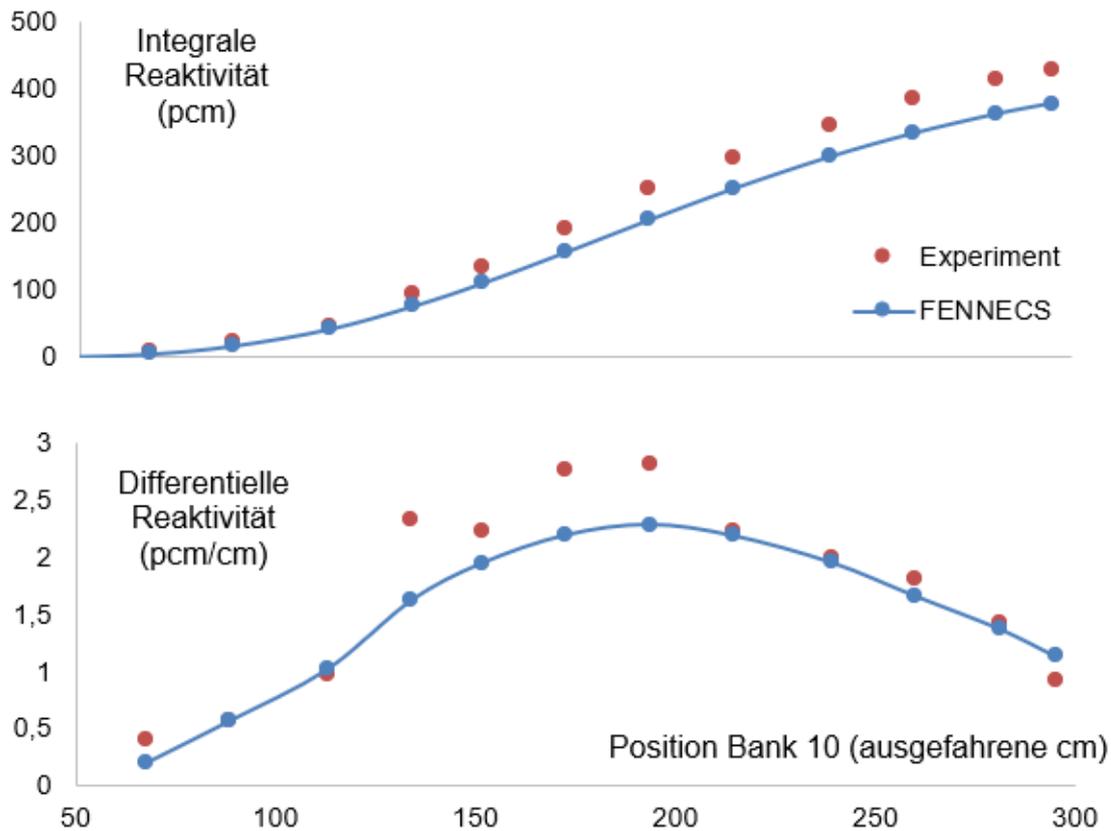


Abb. 6.15 Integrale (oben) und differentielle (unten) Wirksamkeit der Steuerstabbank 10

6.4 Verifikation der Kopplung von FENNECS mit ATHLET

Die weiterentwickelte Kopplung wurde anhand gekoppelter 3D-Kernberechnungen für den BEAVRS-Benchmark (*Benchmark for Evaluation And Validation of Reactor Simulations*) getestet. Grundlage ist die Spezifikation /HOR 18a/ des Zustands Volllast heiß (Hot Full Power, HFP). Die Wirkungsquerschnitte wurden mit Hilfe des GRS-Kernsimulators KMACS in zwei Energiegruppen generiert und nach Moderatorichte, Borkonzentration und Brennstofftemperatur parametrisiert. Anzahl und Werte der Stützstellen der Rückwirkungsparameter sind in Tab. 6.7 angegeben. Abb. 6.16 zeigt das FENNECS-Modell des BEAVRS-Reaktorkerns in Form der Materialverteilung.

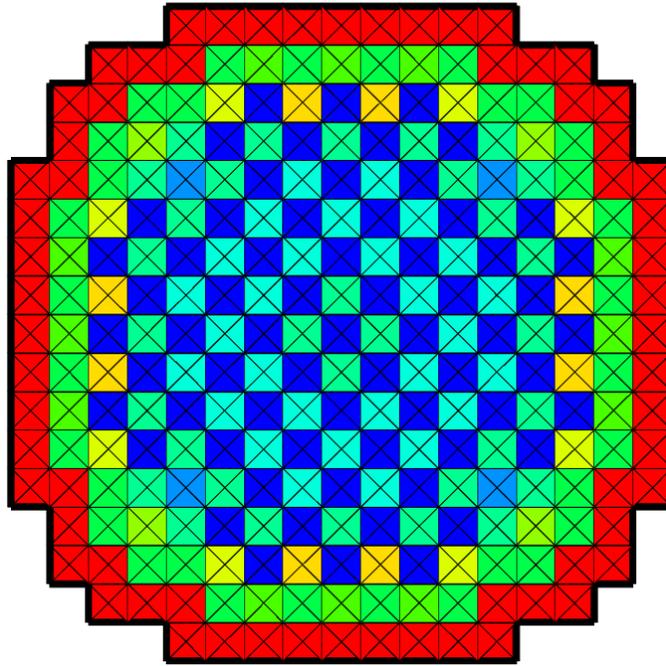


Abb. 6.16 FENNECS-Modell (Materialverteilung) des BEAVRS-Benchmarks

Verschiedene Farben kennzeichnen verschiedene Materialien, die durch entsprechende Wirkungsquerschnittsbibliotheken repräsentiert werden.

Zur thermohydraulischen Beschreibung wurde ein ATHLET-Modell für gekoppelte stationäre und transiente Simulationen mit FENNECS/ATHLET verwendet. Die Simulationen dienten in erster Linie dazu zu überprüfen, ob der Datenaustausch zwischen FENNECS und ATHLET auf Basis der FEM-Datenstruktur und des automatischen Feedback-Mappings korrekt arbeiten, indem z. B. die räumlichen Verteilungen thermohydraulischer Parameter auf die zu erwartende Symmetrie geprüft werden. Dazu wurde die Visualisierung für die Postprozessierung thermohydraulischer Verteilungen in FENNECS erweitert. Abb. 6.17, Abb. 6.18 und Abb. 6.19 zeigen die räumlichen Verteilungen der Leistungsdichte, der Brennstofftemperatur bzw. der Moderatorndichte und belegen durch ihre erwartete physikalisch plausiblen Symmetrien und Verteilungen die Korrektheit des Datenaustauschs.

Tab. 6.7 Rückwirkungsparameter und Stützstellen, nach denen die Wirkungsquerschnittsbibliotheken für BEAVRS parametrisiert sind.

| Stützstellenindex | Brennstofftemperatur (°C) | Borkonzentration (ppm) | Moderatordichte (g/cm ³) |
|-------------------|---------------------------|------------------------|--------------------------------------|
| 1 | 560 | 0 | 0,62 |
| 2 | 850 | 500 | 0,69 |
| 3 | 1100 | 1200 | 0,71 |
| 4 | - | - | 0,74 |

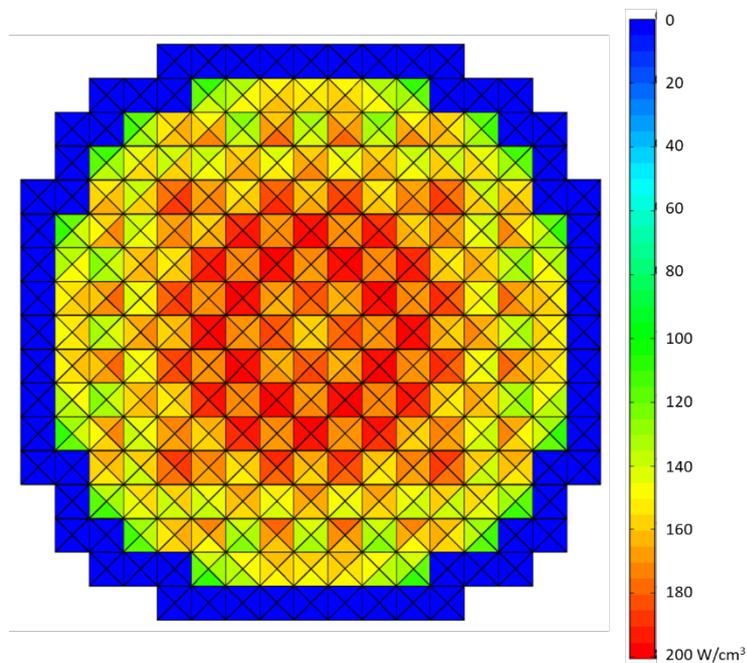


Abb. 6.17 Leistungsdichteverteilung des gekoppelten stationären Zustands am axialen Ort ihres Maximums

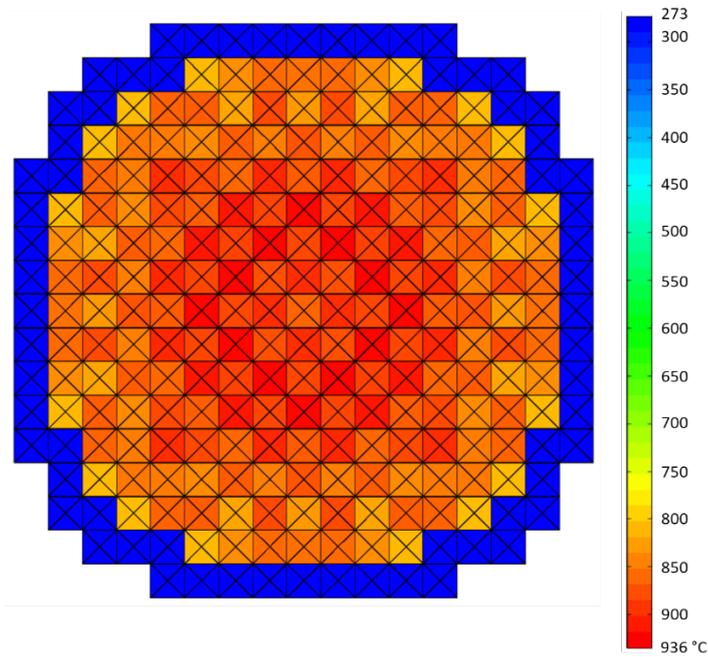


Abb. 6.18 Brennstofftemperaturverteilung des gekoppelten stationären Zustands am axialen Ort ihres Maximums

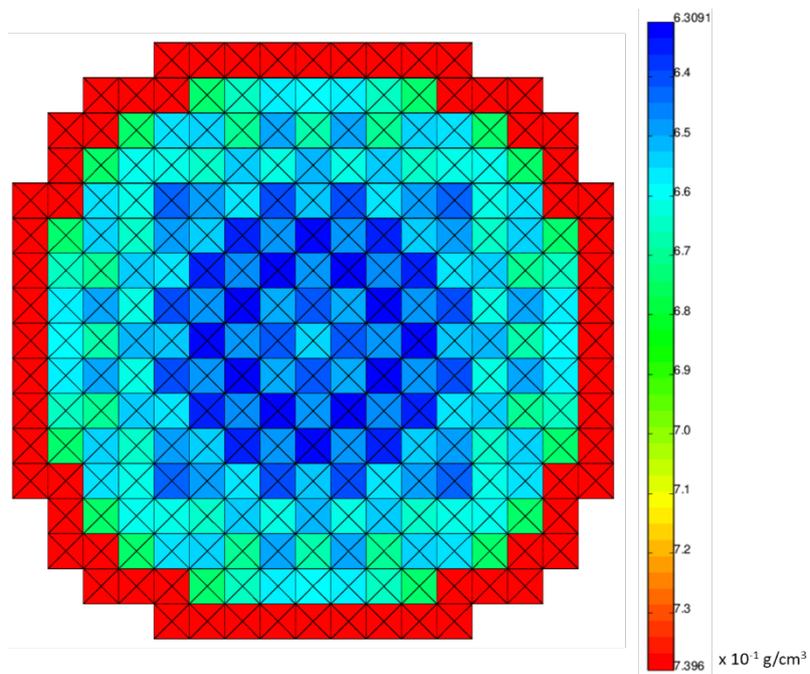


Abb. 6.19 Moderatorichteverteilung des gekoppelten stationären Zustands am Kernaustritt

6.5 Weitere V&V-Arbeiten

Im Rahmen des BMWi-/BMUV-Projekts RS1547 – also außerhalb des vorliegenden Vorhabens – wurden V&V-Arbeiten durchgeführt und neue Einsatzgebiete für FENNECS bzw. FENNECS/ATHLET erschlossen. Es handelt sich um

- die Validierung von FENNECS anhand des *Neutronics Benchmark of CEFR Start-Up Tests*, die im Rahmen der Teilnahme am Coordinated Research Project I31032 der IAEA durchgeführt wurden /SEU 22/,
- den Einsatz von FENNECS/ATHLET zur hochauflösenden stabzell- bzw. unterkanalweisen Simulation von Kernausschnitten (Minikernen) von natriumgekühlten Reaktoren am Beispiel des CEFR,
- eine stationäre Simulation des ESFR-Kerns nach Spezifikationen des Horizon-2020-Projekts ESFR-SMART als Beispiel für einen großen natriumgekühlten Reaktor.

7 AP5: Verfolgung internationaler Trends der Neutronenphysik unregelmäßiger Geometrien

Neben dem in diesem Vorhaben betrachteten Finite-Elemente-Lösungsverfahren der Neutronendifusions- und Transportgleichung existieren eine Reihe weiterer gebräuchlicher und auch moderner Methoden, die für 3D-Reaktorkernberechnungen innovativer Systeme mit komplexen und unregelmäßigen Geometrien in Frage kommen können, wie z. B. die Finite-Volumen-Methode, unstetige (engl. *Discontinuous*) Galerkin-Verfahren für Finite-Elemente-Methode, Lattice-Boltzmann-Verfahren oder sog. Gitterfreie Ansätze (engl. *Mesh-free methods*). Gegenstand dieses Arbeitspakets war es, diesbezüglich die relevanten internationalen Entwicklungstrends zu verfolgen, um diese ggfs. In Zukunft nutzbar machen zu können.

Die Konferenz Physor 2020 bot in der speziellen Sitzung „Reactor Concepts and Special Mission Reactors“ einige interessante Beiträge zu Mikroreaktoren einschließlich neutronenphysikalischer Simulationsmethoden. Ein Beispiel ist der *Neutronic Benchmark on Holo-Quad Micro-Reactor Concept /STA 21/*, bei dem es sich um ein HTGR-Konzept mit einer thermischen Leistung von 22 MW und Zyklus von 8 Volllastjahren handelt. Des Weiteren wurde im Rahmen dieses Arbeitspakets der Bericht *Multi-Physics Simulations of Heat Pipe Micro Reactor* recherchiert und die darin enthaltenen Informationen zum HPMR für das Projekt genutzt. Informationen zur Kernauslegung des *Kilowatt Reactor Using Stirling Technology (KRUSTY)* können /POS 16/ entnommen werden. Im *Special issue on the Kilopower Project* welches in der Zeitschrift *Nuclear Technology* erschienen ist /MCC 20/, sind weitere Informationen, auch zu Experimenten, enthalten. Weitere Informationsquellen sind beispielsweise die Konferenz NETS 2017 /LAP 17/ und die Publikation /WAN 20/.

Auch an Monte-Carlo-Verfahren für zeitabhängige Kernberechnungen – auch in Kopplung mit thermohydraulischen Modellen – wird international zunehmend geforscht, etwa in Form des Codes *Serpent 2*. Es ist davon auszugehen, dass mittel- bis langfristig die Monte-Carlo-Methode (u. a. aufgrund ihrer Fähigkeit zur exakten geometrischen Modellierung ohne Diskretisierung oder die Verwendung nuklearer Punktdaten einschließlich Kovarianzdaten anstelle problembezogener Wirkungsquerschnitte) die deterministischen Verfahren zur 3D-Kernberechnung ersetzen werden.

Gitterfreie Verfahren (*mesh-free methods*, MFM) benötigen im Gegensatz zur Finite-Elemente-Methode keine räumliche Vernetzung des Problemgebiets. Stattdessen werden im Problemgebiet und auf dessen Rand nur Knoten (Punkte) verteilt, die je nach Erfordernis lokal unterschiedlich dicht verteilt sein können. Mit Hilfe der Knotenverteilung lassen sich Ansatzfunktionen ähnlich der FEM konstruieren. Wie bei der FEM wird bei den MFM ein Gleichungssystem aufgestellt, in dem die zu lösende Differentialgleichung in eine schwache Form (*weak form*) gebracht wird. Der große Vorteil der MFM besteht darin, dass der der eigentlichen Lösung vorausgehende, zeitintensive und Erfahrung verlangende Vernetzungsprozess des Problemgebiets entfällt. Beispiele für gitterfreie Verfahren sind die Element Free Galerkin Method (EFGM) oder die Radial Point Interpolation Method (RPIM). Eine Einführung in gitterfreie Verfahren gibt beispielsweise /LIU 05/.

8 AP7: Ergänzung einer Transportnäherung in FENNECS

Für das Vorhaben RS1576 war neben den vereinbarten wissenschaftlichen Zielen und entsprechend definierten Arbeitspaketen ursprünglich vorgesehen, eine Neutronen-transportnäherung als Ergänzung zur Diffusionsnäherung zu implementieren. Im Rahmen von RS1576 erfolgte die Umsetzung im AP7³, indem zunächst die stationären SP_3 -Gleichungen in FENNECS implementiert wurden. Die Verifikation erfolgte anhand von Testfällen unterschiedlicher Komplexität.

8.1 Implementierung der stationären Weniggruppen- SP_3 -Gleichungen

Die Implementierung erfolgte in drei Schritten. Zunächst wurde die stationäre SP_3 -Näherung aus der eindimensionalen stationären Transportgleichung in Energiegruppen-darstellung hergeleitet. Im zweiten Schritt wurden die Gleichungen in den Finite-Elemente-Methode-Formalismus umgeschrieben und die Ausdrücke für Randbedingungen hergeleitet. Abschließend wurde die stationäre SP_3 -Gleichung im Finite-Elemente-Methode-Formalismus in FENNECS implementiert. Die einzelnen Schritte werden im Folgenden dargestellt.

8.1.1 Stationäre SP_3 -Gleichungen

Ausgangspunkt ist die eindimensionale stationäre Transportgleichung in Energiegruppen-darstellung, die in Standardnotation wie folgt lautet:

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} \Psi_g(x, \mu) + \Sigma_{t,g}(x) \Psi_g(x, \mu) \\ = \frac{1}{4\pi} \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} \sum_{g'=1}^G \Sigma_{s,g'g}(x, \mu_0) \Psi_{g'}(x, \mu') d\omega' d\mu' \\ + \frac{\chi_g}{k_{eff}} \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{f,g'}(x) \phi_{g'}(x) \end{aligned} \quad (8.1)$$

³ AP 6 war für das Projektmanagement und -controlling vorgesehen.

Alle Terme, die in Gl. (8.1) eine Abhängigkeit vom Winkel μ aufweisen, werden nach Legendre-Polynome entwickelt, d. h.

$$f(\mu) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{2} P_n(\mu) \int_{-1}^1 f(\mu) P_n(\mu) d\mu = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{2} P_n(\mu) f_n \quad (8.2)$$

Mit

$$f_n = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 f(\mu) P_n(\mu) d\mu \quad (8.3)$$

Für praktische Anwendungen muss die Reihe in Gl. (8.2) nach einer endlichen Anzahl von Termen, hier $N + 1$, abgebrochen werden, d. h. die Funktion $f(\mu)$ folgendermaßen approximiert:

$$f(\mu) \approx \sum_{n=0}^N \frac{2n+1}{2} P_n(\mu) f_n \quad (8.4)$$

Werden alle winkelabhängigen Terme nach Legendre-Polynomen entwickelt, so erhält man nach einigen algebraischen Umformungen und unter Verwendung von Additionstheorem und Orthogonalitätsrelation der Legendre-Polynome (siehe z. B. /STA 07/, /BUR 18/, /LEW 84/) folgender Ausdruck:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \sum_{n=0}^N \frac{\partial}{\partial x} \phi_{n,g}(x) \left(\frac{2n}{2m+1} \delta_{n-1,m} + \frac{2(n+1)}{2m+1} \delta_{m,n+1} \right) \\ & + \sum_{m=0}^M \Sigma_{t,g}(x) \phi_{m,g}(x) \\ & = \sum_{m=0}^M \sum_{g'=1}^G \Sigma_{s,m,g'g}(x) \phi_{m,g'}(x) \\ & + \frac{\chi_g}{k_{eff}} \sum_{g'=1}^G \vartheta \Sigma_{f,g'}(x) \phi_{0,g'}(x), \quad n, m \in N \end{aligned} \quad (8.5)$$

Darin ist δ das Kronecker-Delta ist. In Gl. (8.5) kann man n in $n = m + 1$ umbenennen. Zusätzlich kann der Streuungsterm als Summe zweier Terme umgeschrieben werden, d. h.

$$\begin{aligned} \sum_{g'=1}^G \Sigma_{s,m,g'g}(x) \phi_{m,g'}(x) \\ = \Sigma_{s,m,gg}(x) \phi_{m,g}(x) \\ + \sum_{g'=1, g' \neq g}^G \Sigma_{s,m,g'g}(x) \phi_{m,g'}(x), \forall n, m \in \mathbf{N} \end{aligned} \quad (8.6)$$

Durch das Einsetzen der Umbenennung und von Gl. (8.6) in Gl. (8.5) ergibt sich die endgültige Form der allgemeinen P_N -Gleichung:

$$\begin{aligned} \sum_{m=0}^M \left(\frac{m+1}{2m+1} \left(\frac{\partial}{\partial x} \phi_{m+1,g}(x) + \frac{\partial}{\partial x} \phi_{m-1,g}(x) \right) \right. \\ \left. + \phi_{m,g}(x) \left(\Sigma_{t,g}(x) - \Sigma_{s,m,gg}(x) \right) \right) = S_{m,g}(x), \forall m \in \mathbf{N} \end{aligned} \quad (8.7)$$

Der Term $S_{m,g}(x)$ enthält alle Neutronenquellen der Energiegruppe g , d. h.

$$S_{m,g}(x) = \frac{\chi_g}{k_{eff}} \sum_{g'=1}^G \vartheta \Sigma_{f,g'g}(x) \phi_{0,g'}(x) + \sum_{g'=1, g' \neq g}^G \Sigma_{s,m,g'g}(x) \phi_{m,g'}(x), \quad (8.8)$$

Aus der Gleichung für die P_N -Näherung kann das P_3 -Gleichungssystem hergeleitet werden, indem man $m = 0, 1, 2, 3$ in Gl. (8.7) einsetzt. Dabei wird zusätzlich angenommen, das anisotrope Streuung nur innerhalb einer Energiegruppe, nicht aber zwischen verschiedenen Energiegruppen stattfindet, d. h.

$$\Sigma_{s,m,g'g}(x) = 0, \forall g' \neq g, \forall m > 0 \Rightarrow S_{m,g}(x) = 0, \forall m > 0. \quad (8.9)$$

Damit haben die P₃-Gleichungen die folgende Form:

$$\frac{\partial \phi_{1,g}(x)}{\partial x} + \phi_{0,g}(x) (\Sigma_{t,g}(x) - \Sigma_{s,0,gg}(x)) = S_{0,g}(x) \quad (8.10)$$

$$\frac{2}{3} \frac{\partial \phi_{2,g}(x)}{\partial x} + \frac{1}{3} \frac{\partial \phi_{0,g}(x)}{\partial x} + \phi_{1,g}(x) (\Sigma_{t,g}(x) - \Sigma_{s,1,gg}(x)) = 0 \quad (8.11)$$

$$\frac{3}{5} \frac{\partial \phi_{3,g}(x)}{\partial x} + \frac{2}{5} \frac{\partial \phi_{1,g}(x)}{\partial x} + \phi_{2,g}(x) (\Sigma_{t,g}(x) - \Sigma_{s,1,gg}(x)) = 0 \quad (8.12)$$

$$\frac{3}{7} \frac{\partial \phi_{2,g}(x)}{\partial x} + \phi_{3,g}(x) (\Sigma_{t,g}(x) - \Sigma_{s,1,gg}(x)) = 0 \quad (8.13)$$

Durch Umformen der Gl. (8.11) und (8.13) erhält man die folgenden Ausdrücke für die Neutronenflüsse ungerader Legendre-Ordnungen:

$$\phi_{1,g}(x) = -D_{0,g} \frac{\partial}{\partial x} F_{0,g}(x) \quad (8.14)$$

$$\phi_{3,g}(x) = -D_{1,g} \frac{\partial}{\partial x} F_{1,g}(x) \quad (8.15)$$

Hier sind $D_{0,g}$ und $D_{1,g}$ die Diffusionskonstanten nullter und erster Ordnung, die wie folgt definiert sind:

$$D_{0,g}(x) = \frac{1}{3 (\Sigma_{t,g}(x) - \Sigma_{s,1,gg}(x))} \quad (8.16)$$

$$D_{1,g}(x) = \frac{3}{7 (\Sigma_{t,g}(x) - \Sigma_{s,3,gg}(x))} \quad (8.17)$$

$F_{0,g}(x)$ und $F_{1,g}(x)$ repräsentieren die Neutronenflüsse mit gerader Legendre-Ordnung, diese entsprechen

$$F_{0,g}(x) = \phi_{0,g}(x) + 2\phi_{2,g}(x) \quad (8.18)$$

$$F_{1,g}(x) = \phi_{2,g}(x) \quad (8.19)$$

Anhand dieser beiden Ausdrücke wird Gl. (8.14) in Gl. (8.10) eingesetzt und die Ausdrücke (8.14) und (8.15) in Gl. (8.12), und mit $\frac{5}{3}$ multipliziert. Somit bekommt man die folgenden zwei Gleichungen:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{0,g}(x) \frac{\partial}{\partial x} F_{0,g}(x) \right) \\ = \left(F_{0,g}(x) - 2F_{1,g}(x) \right) \left(\Sigma_{t,g}(x) - \Sigma_{s,0,gg}(x) \right) - S_{0,g}(x) \end{aligned} \quad (8.20)$$

$$\begin{aligned} \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{0,g}(x) \frac{\partial}{\partial x} F_{0,g}(x) \right) = \\ - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{1,g}(x) \frac{\partial}{\partial x} F_{1,g}(x) \right) + \frac{5}{3} F_{1,g}(x) \left(\Sigma_{t,g}(x) - \Sigma_{s,2,gg}(x) \right) \end{aligned} \quad (8.21)$$

Durch Einsetzen von Gl. (8.20) in Gl. (8.21) bekommt man die zwei Gleichungen der P_3 -Näherung:

$$\begin{aligned} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{0,g}(x) \frac{\partial}{\partial x} F_{0,g}(x) \right) + F_{0,g}(x) \left(\Sigma_{t,g}(x) - \Sigma_{s,0,gg}(x) \right) \\ - 2F_{1,g}(x) \left(\Sigma_{t,g}(x) - \Sigma_{s,0,gg}(x) \right) = S_{0,g}(x) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{2}{3}F_{0,g}(x) \left(\Sigma_{t,g}(x) - \Sigma_{s,0,gg}(x) \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{1,g}(x) \frac{\partial}{\partial x} F_{1,g}(x) \right) \\
& + F_{1,g}(x) \left(\frac{4}{3} \left(\Sigma_{t,g}(x) - \Sigma_{s,0,gg}(x) \right) \right. \\
& \left. + \frac{5}{3} \left(\Sigma_{t,g}(x) - \Sigma_{s,2,gg}(x) \right) \right) = -\frac{2}{3}S_{0,g}(x)
\end{aligned} \tag{8.22}$$

Darin ist

$$\begin{aligned}
S_{0,g}(x) &= \frac{\chi_g}{k_{eff}} \sum_{g'=1}^G \vartheta \Sigma_{f,g'}(x) \left(F_{0,g'}(x) - 2F_{1,g'}(x) \right) \\
& + \sum_{g'=1, g' \neq g}^G \Sigma_{s,0,g'g}(x) \left(F_{0,g'}(x) - 2F_{1,g'}(x) \right)
\end{aligned} \tag{8.23}$$

Aus den eindimensionalen P_3 -Gleichungen lassen sich die SP_3 -Gleichungen in drei Raumdimensionen herleiten, indem man die zweite Ableitung durch den Laplace-Operator und die Raumkoordinate x durch den Ortsvektor \vec{r} ersetzt. Damit schreibt sich die SP_3 -Naherung wie folgt:

$$\begin{aligned}
& -\Delta F_{0,g}(\vec{r}) D_{0,g}^e + F_{0,g}(\vec{r}) \left(\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,0,gg}^e \right) - 2F_{1,g}(\vec{r}) \left(\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,0,gg}^e \right) = \\
& S_{0,g}(\vec{r}), \forall \vec{r} \in e
\end{aligned} \tag{8.24}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{2}{3}F_{0,g}(\vec{r}) \left(\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,0,gg}^e \right) - \Delta F_{1,g}(\vec{r}) D_{1,g}^e + F_{1,g}(\vec{r}) \left(\frac{4}{3} \left(\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,0,gg}^e \right) + \right. \\
& \left. \frac{5}{3} \left(\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,2,gg}^e \right) \right) = -\frac{2}{3}S_{0,g}(\vec{r}) \forall \vec{r} \in e
\end{aligned} \tag{8.25}$$

Darin ist

$$\begin{aligned}
S_{0,g}(\vec{r}) &= \frac{\chi_g}{k_{eff}} \sum_{g'=1}^G \vartheta \Sigma_{f,g'}^e \left(F_{0,g'}(\vec{r}) - 2F_{1,g'}(\vec{r}) \right) + \\
& \sum_{g'=1, g' \neq g}^G \Sigma_{s,0,g'g}^e \left(F_{0,g'}(\vec{r}) - 2F_{1,g'}(\vec{r}) \right) \forall \vec{r} \in e
\end{aligned} \tag{8.26}$$

8.1.2 Galerkin-Darstellung der SP_3 -Gleichungen

Zur Implementierung in FENNECS müssen die obigen SP_3 -Gleichungen in die Galerkin-Darstellung des FEM-Formalismus überführt werden. Die Vorgehensweise, die in /SEU 20/ beschrieben ist, besteht darin, die Gleichungen mit Testfunktionen $\varphi^T(\vec{r}) = (\varphi_1(\vec{r}), \dots, \varphi_6(\vec{r}))^T$ zu multiplizieren und anschließend über das Problemgebiet bzw. ein finites Element Γ^e zu integrieren. Anschließende Anwendung des Satzes von Gauß überführt zweite, in erste räumliche Ableitungen.

Die Terme, die die Neutronenflüssen enthalten, also $F_{0,g}(\vec{r})$ und $F_{1,g}(\vec{r})$, werden anhand der 6 Testfunktionen $\varphi_i(\vec{r})$, $i = 1, \dots, 6$ entwickelt, d. h.

$$F_{k,g}(\vec{r}) = \sum_{j=1}^6 \varphi_j(\vec{r}) f_{k,g,j}^e = \begin{pmatrix} \varphi_1(\vec{r}) \\ \vdots \\ \varphi_6(\vec{r}) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} f_{k,g,1}^e \\ \vdots \\ f_{k,g,6}^e \end{pmatrix} = \vec{\varphi}(\vec{r}) \overrightarrow{f_{k,g}^e} \quad (8.27)$$

$k = 0, 1$

Damit lauten die Gleichungen in Galerkin-Form folgendermaßen:

$$\begin{aligned} \overrightarrow{f_{0,g}^e} \int_{\Gamma^e} [D_{0,g}^e \nabla \varphi(\vec{r}) \nabla \varphi^T(\vec{r}) + (\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,0,g,g}^e) \varphi(\vec{r}) \varphi^T(\vec{r})] dV \\ + \overrightarrow{f_{1,g}^e} \int_{\Gamma^e} [-2(\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,0,g,g}^e) \varphi(\vec{r}) \varphi^T(\vec{r})] dV \\ = \int_{\Gamma} S_{0,g}(\vec{r}) \varphi^T(\vec{r}) dV \\ + \overrightarrow{f_{0,g}^e} \int_{\partial \Gamma_j^e} D_{0,g}^e \nabla \varphi(\vec{r}) \varphi^T(\vec{r}) dA, \forall \vec{r} \in e \end{aligned} \quad (8.28)$$

$$\begin{aligned}
& \overrightarrow{f}_{0,g}^e \int_{\Gamma^e} \left[-\frac{2}{3} (\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,0,gg}^e) \varphi_i(\vec{r}) \varphi_j(\vec{r}) \right] dV \\
& + \overrightarrow{f}_{1,g}^e \int_{\Gamma^e} \left[D_{1,g}^e \nabla \varphi(\vec{r}) \nabla \varphi^T(\vec{r}) \right. \\
& + \frac{4}{3} (\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,0,gg}^e) \varphi(\vec{r}) \varphi^T(\vec{r}) \\
& \left. + \frac{5}{3} (\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,2,gg}^e) \varphi(\vec{r}) \varphi^T(\vec{r}) \right] dV \\
& = -\frac{2}{3} \int_{\Gamma^e} S_{0,g}(\vec{r}) \varphi^T(\vec{r}) dV \\
& + \overrightarrow{f}_{1,g}^e \int_{\partial \Gamma^e} D_{1,g}^e \nabla \varphi(\vec{r}) \varphi^T(\vec{r}) dA, \forall \vec{r} \in e
\end{aligned} \tag{8.29}$$

$$\begin{aligned}
& \int_{\Gamma^e} S_{0,g}(\vec{r}) \varphi_i(\vec{r}) dV \\
& = \int_{\Gamma^e} \varphi(\vec{r}) \varphi^T(\vec{r}) \left[\frac{\chi_g}{k_{eff}} \sum_{g'=1}^G \vartheta_{\Sigma_{f,g'}}^e (\overrightarrow{f}_{0,g'}^e - 2\overrightarrow{f}_{1,g'}^e) \right. \\
& \left. + \sum_{g'=1, g' \neq g}^G \Sigma_{s,0,g'g}^e (\overrightarrow{f}_{0,g'}^e - 2\overrightarrow{f}_{1,g'}^e) \right] dV, \forall \vec{r} \in e
\end{aligned} \tag{8.30}$$

Hier bezeichnet $\partial \Gamma^e$ die Oberfläche (Rand) des finiten Elements. Da die finite Elemente Prismen sind, besteht $\partial \Gamma^e$ aus 5 Flächen, d. h.

$$\partial \Gamma^e = \sum_{h=1}^5 \partial \Gamma_h^e \tag{8.31}$$

In den Gl. (8.28) und (8.29) bezeichnen die Terme, die Integrale über $\partial\Gamma^e$ sind, die Randbedingungen, deren Werte von der Position des finiten Elements e und dessen 5 Flächen abhängen. Folgende vier Fälle sind zu unterscheiden:

- Innenfläche-Randbedingung: $\partial\Gamma_h^e \in \partial\Gamma^I$, wobei $\partial\Gamma^I$ die Innenflächen sind.
- Vakuum-Randbedingung: $\partial\Gamma_h^e \in \partial\Gamma^V$, wobei $\partial\Gamma^V$ die Grenzaußenfläche zu Vakuum ist und Vakuum bedeutet, dass es keinen in das Problemgebiet einlaufenden Neutronenstrom gibt.
- Reflektierende Randbedingung: $\partial\Gamma_h^e \in \partial\Gamma^R$, wobei $\partial\Gamma^R$ die Außenfläche der Geometrie mit reflektierender Randbedingung ist.
- Null-Fluss-Randbedingung: $\partial\Gamma_h^e \in \partial\Gamma^{NF}$, wobei $\partial\Gamma^{NF}$ die Außenfläche der Geometrie, an der verschwindender Neutronenfluss erzwungen wird.

Durch das Auswerten der Randbedingungsterme für diese vier Fälle erhält man die finale Form der Gl. (8.28), (8.29) und (8.30):

$$\begin{aligned}
 & \left[D_{0,g}^e d + (\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,0,gg}^e) c - \sum_{h=1}^5 \left(-\frac{\beta_{0,h}^e}{\gamma_h^e} \right) p \right] \overrightarrow{f_{0,g}^e} = \\
 & c \left[\frac{\chi_g}{k_{eff}} \sum_{g'=1}^G \vartheta \Sigma_{f,g'}^e (\overrightarrow{f_{0,g'}^e} - 2\overrightarrow{f_{1,g'}^e}) + \sum_{g'=1, g' \neq g}^G \Sigma_{s,0,g'g}^e (\overrightarrow{f_{0,g'}^e} - 2\overrightarrow{f_{1,g'}^e}) \right] \\
 & + \left[2(\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,0,gg}^e) c + \sum_{h=1}^5 \left(-\frac{\alpha_{0,h}^e}{\gamma_h^e} \right) p \right] \overrightarrow{f_{1,g}^e}
 \end{aligned} \tag{8.32}$$

$$\begin{aligned}
 & \left\{ D_{1,g}^e d + \left[\frac{4}{3} (\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,0,gg}^e) + \frac{5}{3} (\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,2,gg}^e) \right] c - \sum_{h=1}^5 \left(-\frac{\alpha_{1,h}^e}{\gamma_h^e} \right) p \right\} \overrightarrow{f_{1,g}^e} \\
 & = -\frac{2}{3} c \left[\frac{\chi_g}{k_{eff}} \sum_{g'=1}^G \vartheta \Sigma_{f,g'}^e (\overrightarrow{f_{0,g'}^e} - 2\overrightarrow{f_{1,g'}^e}) \right. \\
 & + \left. \sum_{g'=1, g' \neq g}^G \Sigma_{s,0,g'g}^e (\overrightarrow{f_{0,g'}^e} - 2\overrightarrow{f_{1,g'}^e}) \right] \\
 & + \left[\frac{2}{3} (\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,0,gg}^e) c + \sum_{h=1}^5 \left(-\frac{\beta_{1,h}^e}{\gamma_h^e} \right) p \right] \overrightarrow{f_{0,g}^e}
 \end{aligned} \tag{8.33}$$

Darin ist

$$d = \int_{\Gamma^e} \nabla \varphi(\vec{r}) \nabla \varphi^T(\vec{r}) dV, \quad \forall \vec{r} \in e$$

$$c = \int_{\Gamma^e} \varphi_i(\vec{r}) \varphi_j(\vec{r}) dV, \quad \forall \vec{r} \in e$$

$$p = \int_{\partial \Gamma^e} \nabla \varphi(\vec{r}) \varphi^T(\vec{r}) dA, \quad \forall \vec{r} \in e$$

Die Werte von $\frac{1}{\gamma_h^e}$, $\beta_{0,h}^e$, $\beta_{1,h}^e$, $\alpha_{0,h}^e$ und $\alpha_{1,h}^e$ hängen von der Randbedingung der Elementfläche ab und sind in Tab. 8.1 angegeben.

Tab. 8.1 Werte von $\frac{1}{\gamma_h^e}$, $\beta_{0,h}^e$, $\beta_{1,h}^e$, $\alpha_{0,h}^e$ und $\alpha_{1,h}^e$ je nach Randbedingung

| | $\frac{1}{\gamma_h^e}$ | $\beta_{0,h}^e$ | $\beta_{1,h}^e$ | $\alpha_{0,h}^e$ | $\alpha_{1,h}^e$ |
|---|------------------------|-----------------|-----------------|------------------|------------------|
| Grenzfläche-Randbedingung: $\partial \Gamma_h^e \in \partial \Gamma^I$ | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Vakuum-Randbedingung: $\partial \Gamma_h^e \in \partial \Gamma^V$ | $\frac{1}{8}$ | 4 | -1 | -3 | 7 |
| Reflektierende-Randbedingung: $\partial \Gamma_h^e \in \partial \Gamma^R$ | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Null-Fluss-Randbedingung: $\partial \Gamma_h^e \in \partial \Gamma^{NF}$ | ∞ | 4 | -1 | -3 | 7 |

8.1.3 Implementierung der SP₃-Gleichungen in FENNECS

Wenn man die Gl. (8.32) und (8.33) näher betrachtet, erkennt man, dass beide eine gemeinsame Struktur besitzen, nämlich:

$$A_{g,k}^e \vec{f}_{k,g}^e = \vec{b}_{g,k}^e + T_{g,k}^e \vec{f}_{l,g}^e, \quad (k, l) = (0, 1; 1, 0) \quad (8.34)$$

Die Matrix $A_{g,k}^e$ bezeichnet die Systemmatrix und hat für die erste und zweite Gleichung folgende Gestalt:

$$A_{g,0}^e = D_{0,g}^e d + (\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,0,gg}^e) c - \sum_{h=1}^5 \left(-\frac{\beta_{0,h}^e}{\gamma_h^e} \right) p \quad (8.35)$$

$$A_{g,1}^e = D_{1,g}^e d + \left[\frac{4}{3} (\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,0,gg}^e) + \frac{5}{3} (\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,2,gg}^e) \right] c - \sum_{h=1}^5 \left(-\frac{\alpha_{1,h}^e}{\gamma_h^e} \right) p \quad (8.36)$$

Der Vektor $\overrightarrow{b_{g,k}^e}$ („rechte Seite“) enthält alle Quellterme, also Spalt- und Streuquellterm.

Für $k = 0$ und $k = 1$, also für die erste und zweite Gleichung, hat $\overrightarrow{b_{g,k}^e}$ folgende Formen:

$$\overrightarrow{b_{g,0}^e} = c \left[\frac{\chi_g}{k_{eff}} \sum_{g'=1}^G \vartheta_{\Sigma_{f,g'}}^e (\overrightarrow{f_{0,g'}} - 2\overrightarrow{f_{1,g'}}) + \sum_{g'=1, g' \neq g}^G \Sigma_{s,0,g'g}^e (\overrightarrow{f_{0,g'}} - 2\overrightarrow{f_{1,g'}}) \right] \quad (8.37)$$

$$\overrightarrow{b_{g,1}^e} = -\frac{2}{3} \overrightarrow{b_{g,0}^e} = -\frac{2}{3} c \left[\frac{\chi_g}{k_{eff}} \sum_{g'=1}^G \vartheta_{\Sigma_{f,g'}}^e (\overrightarrow{f_{0,g'}} - 2\overrightarrow{f_{1,g'}}) + \sum_{g'=1, g' \neq g}^G \Sigma_{s,0,g'g}^e (\overrightarrow{f_{0,g'}} - 2\overrightarrow{f_{1,g'}}) \right] \quad (8.38)$$

Der Term $T_{g,k}^e$, der mit $\overrightarrow{f_{l,g}^e}$ multipliziert wird, hat folgende Gestalt:

$$T_{g,0}^e = 2(\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,0,gg}^e)c + \sum_{h=1}^5 \left(-\frac{\alpha_{0,h}^e}{\gamma_h^e} \right) p \quad (8.39)$$

$$T_{g,1}^e = \frac{2}{3}(\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,0,gg}^e)c + \sum_{h=1}^5 \left(-\frac{\beta_{1,h}^e}{\gamma_h^e} \right) p \quad (8.40)$$

Wie man an Gl. 62) sehen kann, wird $T_{g,0}^e$ mit $\overrightarrow{f_{1,g}^e}$ multipliziert und $T_{g,1}^e$ mit $\overrightarrow{f_{0,g}^e}$.

Die Terme von Gl. (8.34) beziehen sich auf ein einzelnes finites Element. Der zu modellierende Kern besteht aus einer Vielzahl finiter Elemente, für die jeweils elementweise Systemmatrizen und Rechte-Seite-Vektoren berechnet werden. Das Gesamtgleichungssystem erhält man dann durch das in der Finite-Elemente-Methode übliche *Assemblieren* der elementweisen Matrizen und Vektoren für jede Energiegruppe. Das Gesamtgleichungssystem für die Energiegruppe g besitzt folgende Gestalt:

$$A_{g,k} \overrightarrow{f_{k,g}} = \overrightarrow{b_{g,k}} + T_{g,k} \overrightarrow{f_{l,g}}, \quad (k, l) = (0, 1; 1, 0) \quad (8.41)$$

An der Stelle sei angemerkt, dass beide Seiten der Gleichung von $\overrightarrow{f_{0,g}}$ und $\overrightarrow{f_{1,g}}$ abhängig sind.

Zur Lösung des Gesamtgleichungssystem je Energiegruppe wird der gleiche Algorithmus genutzt, der in FENNECS bereits für die Lösung der Diffusionsgleichung existiert. Der einzige Unterschied besteht darin, dass der Term $T_{g,k} \overrightarrow{f_{l,g}}$ immer dann neu berechnet wird, wenn eine neue Iterierte von $\overrightarrow{b_{g,k}}$ vorliegt.

8.2 Überprüfung der SP_3 -Implementierungen

Im Rahmen dieses Vorhabens wurde der implementierte SP_3 -Solver sowohl anhand von akademischen Benchmarks als auch anhand von Modellen, für die mit dem Monte-Carlo-Code Serpent Referenzlösungen und Wirkungsquerschnitte generiert wurden, überprüft. Im Folgenden werden zunächst Vergleichsrechnungen mit einem akademischen Benchmark und danach realistischere DWR-Brennelementsimulationen gezeigt.

8.2.1 Akademischer Hébert-Benchmark

Für eine der ersten V&V-Arbeiten wurde ein Cartesischer Benchmark von Hébert /HÉB 10/ ausgewählt. Der Kern besteht aus rechteckigen Brennelementen, wie in Abb. 8.1 zu sehen ist.

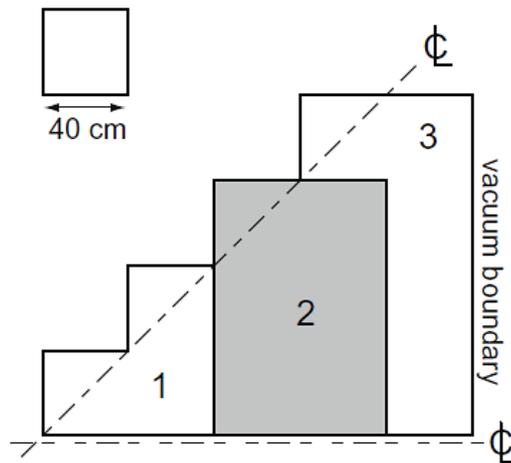


Abb. 8.1 Geometrie des Cartesischen Benchmarks aus /HÉB 10/ (CL: Spiegelachse)

Für dieses Modell beschränkt sich die Untersuchung auf den effektiven Multiplikationsfaktor. Für den Vergleich mit dem FENNECS SP_3 -Solver wurde der FENNECS Diffusionssolver, TRIVAC SP_3 mit Raviart-Thomas-Schneider-Diskretisierung nullter Ordnung (RT0) mit analytischer Integration als auch mit Gauss-Legendre-Quadratur genutzt. Die Referenzlösung, zusammen mit den TRIVAC Ergebnissen, wurde /HÉB 06/ entnommen. Die Ergebnisse sind in Tab. 8.2 angegeben. Die Referenzlösung ist $k_{\text{eff}} = 0.99216$. Zunächst ist auffällig, dass der Diffusionssolver von FENNECS eine mit über 4300 pcm erhebliche Diskrepanz zu dieser Referenz aufweist, aber auch im Vergleich zu den SP_3 -Solvem aus FENNECS und TRIVAC. Dazu zeigen die Multiplikationsfaktoren aus FENNECS- SP_3 eine große Verbesserung der Ergebnisse, wenn man die

Anzahl an radiale Elemente pro Brennelemente erhöht, sodass mit 2116 Elemente eine Diskrepanz von nur 106 pcm erreicht wird. Ab hier scheint eine Erhöhung der Elementenanzahl keine Wirkung mehr auf k_{eff} zu haben. Im Gegensatz dazu bewirkt eine Verfeinerung von 4 auf 16 finiten Elementen je Brennelement die größte Verbesserung von k_{eff} : Die Diskrepanz wird mehr als halbiert.

Tab. 8.2 Effektive Multiplikationsfaktoren von FENNECS und TRIVAC und jeweilige Abweichungen von der Referenz

| Solver | | Anzahl radiale Elemente pro Brennelement | k_{eff} | Differenz vs. Referenz (pcm) |
|---------------|--|--|------------------|------------------------------|
| FENNECS | SP ₃ | 4 | 0,98079 | -1168 |
| | | 16 | 0,98793 | -432 |
| | | 36 | 0,98960 | -261 |
| | | 64 | 0,99024 | -195 |
| | | 100 | 0,99056 | -163 |
| | | 144 | 0,99073 | -145 |
| | | 196 | 0,99084 | -134 |
| | | 256 | 0,99091 | -127 |
| | | 324 | 0,99096 | -122 |
| | | 400 | 0,99099 | -119 |
| | | 484 | 0,99102 | -116 |
| | | 576 | 0,99104 | -114 |
| | | 676 | 0,99105 | -113 |
| | | 784 | 0,99106 | -112 |
| | | 900 | 0,99107 | -111 |
| | | 1024 | 0,99108 | -110 |
| | | 1156 | 0,99108 | -110 |
| | | 1296 | 0,99109 | -109 |
| | | 1444 | 0,99110 | -108 |
| | | 1600 | 0,99111 | -107 |
| | 1764 | 0,99111 | -107 | |
| | 1936 | 0,99111 | -107 | |
| | 2116 | 0,99112 | -106 | |
| 2304 | 0,99112 | -106 | | |
| 2500 | 0,99112 | -106 | | |
| | Diffusion | 4 | 0,94575 | -4946 |
| | | 16 | 0,95129 | -4330 |
| TRIVAC RT0 | SP ₃ mit analytischer Integration | 4 | 0,995780 | 366 |
| | | 16 | 0,992535 | 38 |
| | | 36 | 0,991794 | -37 |
| | SP ₃ mit Gauss – Legendre Quadratur | 4 | 0,989783 | -242 |
| | | 16 | 0,990796 | -139 |
| | | 36 | 0,990989 | -119 |

8.2.2 Brennelemente des C5G7-Benchmarks

Im Gegensatz zu den vorstehenden akademischen Testfällen handelt es sich bei den Brennelementen des C5G7-Benchmarks /BOY 17/ um realitätsnahe DWR-Brennelemente. Ziel ist es, neben den Multiplikationsfaktoren auch stabweise Leistungsverteilungen sowohl mit der Diffusionsapproximation als auch mit der SP_3 -Methode von FENNECS zu berechnen und mit Referenzlösungen zu vergleichen. Dazu wurden zunächst Wirkungsquerschnitte generiert. Im Unterschied zur Benchmarkspezifikation wurden die einzelnen Stabzellen homogenisiert, d. h. es wurden stabzellhomogenisierte Wirkungsquerschnittsbibliotheken generiert.

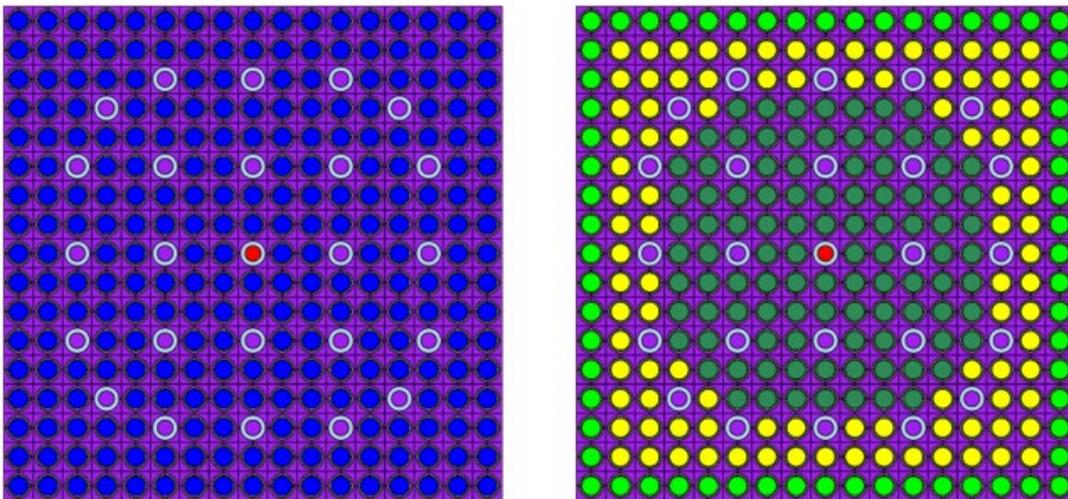


Abb. 8.2 HELIOS-Modelle des UO₂- (links) und des MOX-Brennelements des C5G7-Benchmarks. Im MOX-Brennelement sind Stäbe mit 4,3 %, 7,0 % und 8,7 % Pu-Gehalt hellgrün, gelb bzw. dunkelgrün

Weitergehende Informationen zur Brennelementauslegung ist der Spezifikation des C5G7-Benchmarks /BOY 17/ zu entnehmen.

Zu diesem Zweck wurden beide Brennelemente mit dem Zell- und Abbrandcode HELIOS /CAS 91/ modelliert, um hiermit einerseits stabzellhomogenisierte Wirkungsquerschnittsbibliotheken in den 7 Energiegruppen des C5G7-Benchmarks und andererseits stabweise Leistungsverteilungen zu generieren, die neben den Multiplikationsfaktoren als Referenz für FENNECS herangezogen wurden. Abb. 8.3 zeigt die mit HELIOS berechnete stabweise Leistungsverteilung im UO₂-Brennelement, Abb. 8.4 jene im MOX-Brennelement. In letzterer ist die stärker profilierte Leistungsverteilung aufgrund der unterschiedlichen Pu-Gehalte deutlich zu erkennen.

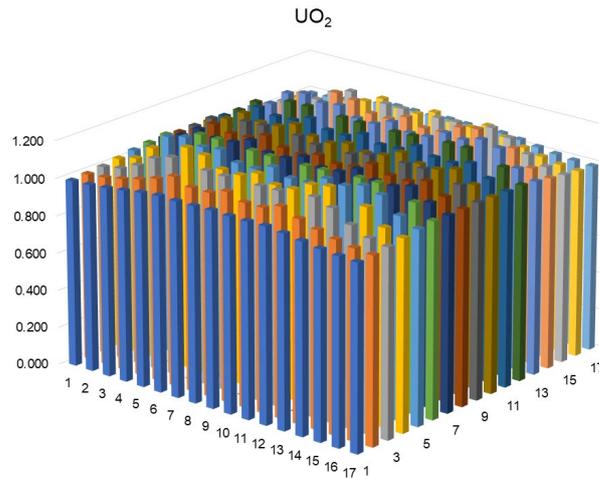


Abb. 8.3 Stabweise normierte Leistungsverteilung im UO₂-Brennelement aus HELIOS.

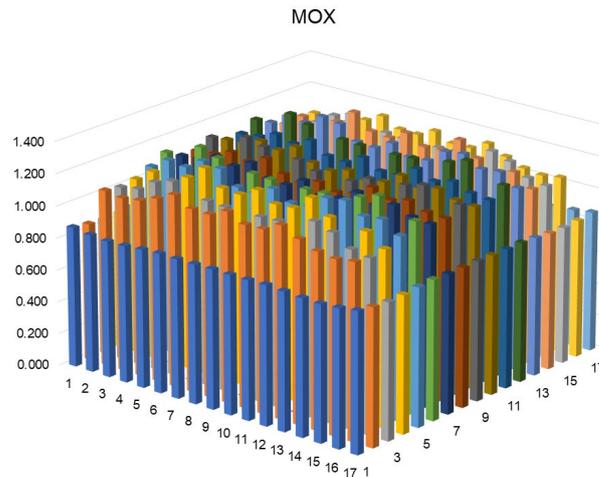


Abb. 8.4 Stabweise normierte Leistungsverteilung im MOX-Brennelement aus HELIOS.

Um die Wirkungsquerschnitte zu testen, wurden zusätzlich entsprechende Modelle für den Transportcode TORT-TD entwickelt und hiermit Multiplikationsfaktoren und stabweise Leistungsverteilungen berechnet, die anschließend mit den entsprechenden HELIOS-Ergebnissen verglichen wurden. Zum Vergleich zeigen Abb. 8.5 und Abb. 8.6 die für das UO₂- und das MOX-Brennelement ermittelten Abweichungen der stabweisen

Leistungsverteilung von S₄-P₃-Transportrechnungen⁴ mit TORT-TD. Der mittlere quadratische und maximale Fehler beträgt 0,15 % bzw. 0,31 % für das UO₂- bzw. 0,37 % und 0,65 % für das MOX-Brennelement. Die etwas höheren Abweichungen sind eine Folge der heterogeneren Zusammensetzung des MOX-Brennelements. Im letzten Schritt wurden mit FENNECS Multiplikationsfaktoren und stabweise Leistungsverteilungen für beide Brennelemente berechnet und mit den jeweiligen HELIOS-Referenzlösungen verglichen. Die Ergebnisse werden nachfolgend dargestellt.

| | | | | | | | | | | | | | | | | |
|------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|------|
| 0.0% | 0.1% | 0.1% | 0.0% | 0.2% | 0.0% | 0.0% | 0.0% | 0.0% | 0.0% | 0.0% | 0.0% | 0.2% | 0.0% | 0.1% | 0.1% | 0.0% |
| 0.1% | 0.0% | 0.2% | 0.1% | 0.2% | -0.3% | 0.2% | 0.2% | -0.1% | 0.2% | 0.2% | -0.3% | 0.2% | 0.1% | 0.2% | 0.0% | 0.1% |
| 0.1% | 0.2% | 0.1% | -0.2% | -0.1% | - | -0.2% | -0.2% | - | -0.2% | -0.2% | - | -0.1% | -0.2% | 0.1% | 0.2% | 0.1% |
| 0.0% | 0.1% | -0.2% | - | -0.1% | -0.2% | 0.1% | 0.2% | -0.1% | 0.2% | 0.1% | -0.2% | -0.1% | - | -0.2% | 0.1% | 0.0% |
| 0.2% | 0.2% | -0.1% | -0.1% | 0.3% | -0.1% | 0.1% | 0.2% | -0.1% | 0.2% | 0.1% | -0.1% | 0.3% | -0.1% | -0.1% | 0.2% | 0.2% |
| 0.0% | -0.3% | - | -0.2% | -0.1% | - | -0.2% | -0.1% | - | -0.1% | -0.2% | - | -0.1% | -0.2% | - | -0.3% | 0.0% |
| 0.0% | 0.2% | -0.2% | 0.1% | 0.1% | -0.2% | 0.1% | 0.1% | -0.2% | 0.1% | 0.1% | -0.2% | 0.1% | 0.1% | -0.2% | 0.2% | 0.0% |
| 0.0% | 0.2% | -0.2% | 0.2% | 0.2% | -0.1% | 0.1% | 0.1% | -0.1% | 0.1% | 0.1% | -0.1% | 0.2% | 0.2% | -0.2% | 0.2% | 0.0% |
| 0.0% | -0.1% | - | -0.1% | -0.1% | - | -0.2% | -0.1% | - | -0.1% | -0.2% | - | -0.1% | -0.1% | - | -0.1% | 0.0% |
| 0.0% | 0.2% | -0.2% | 0.2% | 0.2% | -0.1% | 0.1% | 0.1% | -0.1% | 0.1% | 0.1% | -0.1% | 0.2% | 0.2% | -0.2% | 0.2% | 0.0% |
| 0.0% | 0.2% | -0.2% | 0.1% | 0.1% | -0.2% | 0.1% | 0.1% | -0.2% | 0.1% | 0.1% | -0.2% | 0.1% | 0.1% | -0.2% | 0.2% | 0.0% |
| 0.0% | -0.3% | - | -0.2% | -0.1% | - | -0.2% | -0.1% | - | -0.1% | -0.2% | - | -0.1% | -0.2% | - | -0.3% | 0.0% |
| 0.2% | 0.2% | -0.1% | -0.1% | 0.3% | -0.1% | 0.1% | 0.2% | -0.1% | 0.2% | 0.1% | -0.1% | 0.3% | -0.1% | -0.1% | 0.2% | 0.2% |
| 0.0% | 0.1% | -0.2% | - | -0.1% | -0.2% | 0.1% | 0.2% | -0.1% | 0.2% | 0.1% | -0.2% | -0.1% | - | -0.2% | 0.1% | 0.0% |
| 0.1% | 0.2% | 0.1% | -0.2% | -0.1% | - | -0.2% | -0.2% | - | -0.2% | -0.2% | - | -0.1% | -0.2% | 0.1% | 0.2% | 0.1% |
| 0.1% | 0.0% | 0.2% | 0.1% | 0.2% | -0.3% | 0.2% | 0.2% | -0.1% | 0.2% | 0.2% | -0.3% | 0.2% | 0.1% | 0.2% | 0.0% | 0.1% |
| 0.0% | 0.1% | 0.1% | 0.0% | 0.2% | 0.0% | 0.0% | 0.0% | 0.0% | 0.0% | 0.0% | 0.0% | 0.2% | 0.0% | 0.1% | 0.1% | 0.0% |

Abb. 8.5 Prozentuale Abweichung zwischen den stabweisen Leistungsverteilungen aus HELIOS und der TORT-TD-S₄-P₃-Transportlösung für das UO₂-Brennelement

⁴ S₄ kennzeichnet niveausymmetrische Winkelquadratur vierter Ordnung, P₃ bedeutet Einbeziehung von Anisotropie der Neutronenstreuung und Neutronenwinkelflüsse bis dritter Legendre-Entwicklungsortnung.

| | | | | | | | | | | | | | | | | |
|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| -0.1% | 0.2% | 0.4% | 0.6% | 0.6% | 0.6% | 0.6% | 0.6% | 0.6% | 0.6% | 0.6% | 0.6% | 0.6% | 0.6% | 0.4% | 0.2% | -0.1% |
| 0.2% | -0.5% | -0.1% | -0.2% | -0.4% | -0.4% | -0.4% | -0.3% | -0.3% | -0.3% | -0.4% | -0.4% | -0.4% | -0.2% | -0.1% | -0.5% | 0.2% |
| 0.4% | -0.1% | -0.1% | -0.3% | -0.5% | - | -0.2% | -0.1% | - | -0.1% | -0.2% | - | -0.5% | -0.3% | -0.1% | -0.1% | 0.4% |
| 0.6% | -0.2% | -0.3% | - | -0.4% | -0.5% | 0.0% | 0.0% | -0.3% | 0.0% | 0.0% | -0.5% | -0.4% | - | -0.3% | -0.2% | 0.6% |
| 0.6% | -0.4% | -0.5% | -0.4% | -0.5% | 0.0% | 0.3% | 0.3% | 0.1% | 0.3% | 0.3% | 0.0% | -0.5% | -0.4% | -0.5% | -0.4% | 0.6% |
| 0.6% | -0.4% | - | -0.5% | 0.0% | - | 0.1% | 0.1% | - | 0.1% | 0.1% | - | 0.0% | -0.5% | - | -0.4% | 0.6% |
| 0.6% | -0.4% | -0.2% | 0.0% | 0.3% | 0.1% | 0.2% | 0.3% | 0.1% | 0.3% | 0.2% | 0.1% | 0.3% | 0.0% | -0.2% | -0.4% | 0.6% |
| 0.6% | -0.3% | -0.1% | 0.0% | 0.3% | 0.1% | 0.3% | 0.4% | 0.3% | 0.4% | 0.3% | 0.1% | 0.3% | 0.0% | -0.1% | -0.3% | 0.6% |
| 0.6% | -0.3% | - | -0.3% | 0.1% | - | 0.1% | 0.3% | - | 0.3% | 0.1% | - | 0.1% | -0.3% | - | -0.3% | 0.6% |
| 0.6% | -0.3% | -0.1% | 0.0% | 0.3% | 0.1% | 0.3% | 0.4% | 0.3% | 0.4% | 0.3% | 0.1% | 0.3% | 0.0% | -0.1% | -0.3% | 0.6% |
| 0.6% | -0.4% | -0.2% | 0.0% | 0.3% | 0.1% | 0.2% | 0.3% | 0.1% | 0.3% | 0.2% | 0.1% | 0.3% | 0.0% | -0.2% | -0.4% | 0.6% |
| 0.6% | -0.4% | - | -0.5% | 0.0% | - | 0.1% | 0.1% | - | 0.1% | 0.1% | - | 0.0% | -0.5% | - | -0.4% | 0.6% |
| 0.6% | -0.4% | -0.5% | -0.4% | -0.5% | 0.0% | 0.3% | 0.3% | 0.1% | 0.3% | 0.3% | 0.0% | -0.5% | -0.4% | -0.5% | -0.4% | 0.6% |
| 0.6% | -0.2% | -0.3% | - | -0.4% | -0.5% | 0.0% | 0.0% | -0.3% | 0.0% | 0.0% | -0.5% | -0.4% | - | -0.3% | -0.2% | 0.6% |
| 0.4% | -0.1% | -0.1% | -0.3% | -0.5% | - | -0.2% | -0.1% | - | -0.1% | -0.2% | - | -0.5% | -0.3% | -0.1% | -0.1% | 0.4% |
| 0.2% | -0.5% | -0.1% | -0.2% | -0.4% | -0.4% | -0.4% | -0.3% | -0.3% | -0.3% | -0.4% | -0.4% | -0.4% | -0.2% | -0.1% | -0.5% | 0.2% |
| -0.1% | 0.2% | 0.4% | 0.6% | 0.6% | 0.6% | 0.6% | 0.6% | 0.6% | 0.6% | 0.6% | 0.6% | 0.6% | 0.6% | 0.4% | 0.2% | -0.1% |

Abb. 8.6 Prozentuale Abweichung zwischen den stabweisen Leistungsverteilungen aus HELIOS und der TORT-TD-S₄-P₃-Transportlösung für das MOX-Brennelement

In Tab. 8.3 sind die Multiplikationsfaktoren für das UO₂-Brennelement aufgelistet. Für 4 radiale Elemente pro Brennelement als auch für 16 kann man beobachten, dass die k_{eff} aus der SP₃-Rechnung deutlich näher an der aus HELIOS sind im Vergleich zu die aus dem Diffusionssolver. Zusätzlich, mit steigender Anzahl an Elemente, sinkt für beide Solvern die Diskrepanz zu HELIOS, sodass mit FENNECS-SP₃ mit 16 radialen Elementen pro Stabzelle die Diskrepanz nur 27 pcm ist.

Tab. 8.3 Effektiver Multiplikationsfaktor für das UO₂-Brennelement

| Programm | Anzahl radialer Elemente pro Stabzelle | Solver | k_{eff} | Differenz vs. HELIOS (pcm) |
|----------|--|------------------------|------------------|----------------------------|
| HELIOS | | Transport ⁵ | 1,32705 | – |
| FENNECS | 4 | Diffusion | 1,32821 | 66 |
| | | SP ₃ | 1,32798 | 53 |
| | 16 | Diffusion | 1,32779 | 42 |
| | | SP ₃ | 1,32752 | 27 |

Auch für das das MOX-Brennelement sind die Multiplikationsfaktoren, die mit der SP₃-Näherung gerechnet wurden, näher an der HELIOS-Referenz als jene der Diffusionsnäherung, wie aus Tab. 8.4 hervorgeht. Für das MOX-Brennelement ist die Abweichung gegenüber HELIOS größer als für das UO₂-Brennelement. Das gilt nicht für den SP₃-Solver. Damit ist für MOX der Unterschied zwischen den Multiplikationsfaktoren aus der SP₃ und aus der Diffusion größer als für UO₂. Dementsprechend kann man für MOX mit SP₃ eine größere Verbesserung erzielen als für UO₂. Die SP₃-Methode liefert offenbar für heterogenere Brennstoffzusammensetzung wie die im MOX-Brennelement bessere Ergebnisse als die Diffusionsnäherung.

Tab. 8.4 Effektiver Multiplikationsfaktor für das MOX-Brennelement

| Programm | Anzahl radiale Elemente pro Brennstab | Solver | k_{eff} | Differenz vs. HELIOS (pcm) |
|----------|---------------------------------------|-----------------|------------------|----------------------------|
| HELIOS | | Transport | 1,17632 | |
| FENNECS | 4 | Diffusion | 1,17514 | -85 |
| | | SP ₃ | 1,17562 | -51 |
| | 16 | Diffusion | 1,17503 | -93 |
| | | SP ₃ | 1,17561 | -51 |

Neben den Multiplikationsfaktoren wurden auch die Leistungsverteilungen ausgewertet. Aus dem Vergleich der stabweisen Leistungsverteilung zwischen HELIOS und FENNECS wurde der mittlere quadratische (*Root mean square*, RMS) und der maximale

⁵ Es wurde die CCCP-Methode (Current Coupling Collision Probability) von HELIOS 1.12 verwendet.

Fehler bestimmt und in Tab. 8.5 angegeben. Für das UO₂-Brennelement liefern Diffusionsapproximation und SP₃-Methode mit 4 radialen Elementen pro Stabzelle sehr ähnliche Leistungsverteilungen, wie man in Abb. 8.7 und Abb. 8.8 sehen kann. Der Vergleich der RMS zeigt jedoch, dass die SP₃-Methode einen geringeren Fehler aufweist, auch der maximale Fehler reduziert sich.

Tab. 8.5 RMS (%) und maximale Abweichung der stabweisen Leistungsverteilungen zwischen HELIOS und FENNECS für das UO₂- und das MOX-Brennelement

| Anzahl radiale Elemente pro Stabzelle | Solver | UO ₂ -Brennelement | | MOX-Brennelement | |
|---------------------------------------|-----------------|-------------------------------|----------|------------------|----------|
| | | RMS (%) | Max. (%) | RMS (%) | Max. (%) |
| 4 | Diffusion | 0,54 | 1,43 | 1,11 | 1,95 |
| | SP ₃ | 0,52 | 1,48 | 0,88 | 1,54 |
| 8 | Diffusion | 0,25 | 0,68 | 0,64 | 1,44 |
| | SP ₃ | 0,23 | 0,55 | 0,46 | 1,00 |

| | | | | | | | | | | | | | | | | |
|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| -0.3% | -0.3% | -0.3% | -0.2% | -0.2% | -0.4% | -0.1% | -0.1% | -0.3% | -0.1% | -0.1% | -0.4% | -0.2% | -0.2% | -0.3% | -0.3% | -0.3% |
| -0.3% | -0.3% | -0.2% | -0.3% | 0.6% | -0.4% | 0.6% | 0.6% | -0.5% | 0.6% | 0.6% | -0.4% | 0.6% | -0.3% | -0.2% | -0.3% | -0.3% |
| -0.3% | -0.2% | 0.4% | -0.6% | 0.3% | - | -0.5% | -0.6% | - | -0.6% | -0.5% | - | 0.3% | -0.6% | 0.4% | -0.2% | -0.3% |
| -0.2% | -0.3% | -0.6% | - | 0.5% | -0.6% | 0.7% | 0.8% | -0.5% | 0.8% | 0.7% | -0.6% | 0.5% | - | -0.6% | -0.3% | -0.2% |
| -0.2% | 0.6% | 0.3% | 0.5% | 1.4% | -0.4% | 0.7% | 0.8% | -0.5% | 0.8% | 0.7% | -0.4% | 1.4% | 0.5% | 0.3% | 0.6% | -0.2% |
| -0.4% | -0.4% | - | -0.6% | -0.4% | - | -0.5% | -0.5% | - | -0.5% | -0.5% | - | -0.4% | -0.6% | - | -0.4% | -0.4% |
| -0.1% | 0.6% | -0.5% | 0.7% | 0.7% | -0.5% | 0.8% | 0.8% | -0.5% | 0.8% | 0.8% | -0.5% | 0.7% | 0.7% | -0.5% | 0.6% | -0.1% |
| -0.1% | 0.6% | -0.6% | 0.8% | 0.8% | -0.5% | 0.8% | 0.6% | -0.5% | 0.6% | 0.8% | -0.5% | 0.8% | 0.8% | -0.6% | 0.6% | -0.1% |
| -0.3% | -0.5% | - | -0.5% | -0.5% | - | -0.5% | -0.5% | - | -0.5% | -0.5% | - | -0.5% | -0.5% | - | -0.5% | -0.3% |
| -0.1% | 0.6% | -0.6% | 0.8% | 0.8% | -0.5% | 0.8% | 0.6% | -0.5% | 0.6% | 0.8% | -0.5% | 0.8% | 0.8% | -0.6% | 0.6% | -0.1% |
| -0.1% | 0.6% | -0.5% | 0.7% | 0.7% | -0.5% | 0.8% | 0.8% | -0.5% | 0.8% | 0.8% | -0.5% | 0.7% | 0.7% | -0.5% | 0.6% | -0.1% |
| -0.4% | -0.4% | - | -0.6% | -0.4% | - | -0.5% | -0.5% | - | -0.5% | -0.5% | - | -0.4% | -0.6% | - | -0.4% | -0.4% |
| -0.2% | 0.6% | 0.3% | 0.5% | 1.4% | -0.4% | 0.7% | 0.8% | -0.5% | 0.8% | 0.7% | -0.4% | 1.4% | 0.5% | 0.3% | 0.6% | -0.2% |
| -0.2% | -0.3% | -0.6% | - | 0.5% | -0.6% | 0.7% | 0.8% | -0.5% | 0.8% | 0.7% | -0.6% | 0.5% | - | -0.6% | -0.3% | -0.2% |
| -0.3% | -0.2% | 0.4% | -0.6% | 0.3% | - | -0.5% | -0.6% | - | -0.6% | -0.5% | - | 0.3% | -0.6% | 0.4% | -0.2% | -0.3% |
| -0.3% | -0.3% | -0.2% | -0.3% | 0.6% | -0.4% | 0.6% | 0.6% | -0.5% | 0.6% | 0.6% | -0.4% | 0.6% | -0.3% | -0.2% | -0.3% | -0.3% |
| -0.3% | -0.3% | -0.3% | -0.2% | -0.2% | -0.4% | -0.1% | -0.1% | -0.3% | -0.1% | -0.1% | -0.4% | -0.2% | -0.2% | -0.3% | -0.3% | -0.3% |

Abb. 8.7 Prozentuale Abweichung zwischen den stabweisen Leistungsverteilungen aus HELIOS und FENNECS-Diffusion mit 4 radialen Elementen pro Stabzelle für das UO₂-Brennelement

| | | | | | | | | | | | | | | | | |
|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| -0.3% | -0.3% | -0.3% | -0.3% | -0.4% | -0.6% | -0.3% | -0.3% | -0.6% | -0.3% | -0.3% | -0.6% | -0.4% | -0.3% | -0.3% | -0.3% | -0.3% |
| -0.3% | -0.3% | -0.4% | -0.5% | 0.6% | -0.2% | 0.6% | 0.6% | -0.2% | 0.6% | 0.6% | -0.2% | 0.6% | -0.5% | -0.4% | -0.3% | -0.3% |
| -0.3% | -0.4% | 0.5% | -0.4% | 0.7% | - | -0.4% | -0.4% | - | -0.4% | -0.4% | - | 0.7% | -0.4% | 0.5% | -0.4% | -0.3% |
| -0.3% | -0.5% | -0.4% | - | 0.8% | -0.6% | 0.6% | 0.7% | -0.4% | 0.7% | 0.6% | -0.6% | 0.8% | - | -0.4% | -0.5% | -0.3% |
| -0.4% | 0.6% | 0.7% | 0.8% | 1.5% | -0.4% | 0.6% | 0.7% | -0.4% | 0.7% | 0.6% | -0.4% | 1.5% | 0.8% | 0.7% | 0.6% | -0.4% |
| -0.6% | -0.2% | - | -0.6% | -0.4% | - | -0.4% | -0.4% | - | -0.4% | -0.4% | - | -0.4% | -0.6% | - | -0.2% | -0.6% |
| -0.3% | 0.6% | -0.4% | 0.6% | 0.6% | -0.4% | 0.6% | 0.6% | -0.4% | 0.6% | 0.6% | -0.4% | 0.6% | 0.6% | -0.4% | 0.6% | -0.3% |
| -0.3% | 0.6% | -0.4% | 0.7% | 0.7% | -0.4% | 0.6% | 0.4% | -0.5% | 0.4% | 0.6% | -0.4% | 0.7% | 0.7% | -0.4% | 0.6% | -0.3% |
| -0.6% | -0.2% | - | -0.4% | -0.4% | - | -0.4% | -0.5% | - | -0.5% | -0.4% | - | -0.4% | -0.4% | - | -0.2% | -0.6% |
| -0.3% | 0.6% | -0.4% | 0.7% | 0.7% | -0.4% | 0.6% | 0.4% | -0.5% | 0.4% | 0.6% | -0.4% | 0.7% | 0.7% | -0.4% | 0.6% | -0.3% |
| -0.3% | 0.6% | -0.4% | 0.6% | 0.6% | -0.4% | 0.6% | 0.6% | -0.4% | 0.6% | 0.6% | -0.4% | 0.6% | 0.6% | -0.4% | 0.6% | -0.3% |
| -0.6% | -0.2% | - | -0.6% | -0.4% | - | -0.4% | -0.4% | - | -0.4% | -0.4% | - | -0.4% | -0.6% | - | -0.2% | -0.6% |
| -0.4% | 0.6% | 0.7% | 0.8% | 1.5% | -0.4% | 0.6% | 0.7% | -0.4% | 0.7% | 0.6% | -0.4% | 1.5% | 0.8% | 0.7% | 0.6% | -0.4% |
| -0.3% | -0.5% | -0.4% | - | 0.8% | -0.6% | 0.6% | 0.7% | -0.4% | 0.7% | 0.6% | -0.6% | 0.8% | - | -0.4% | -0.5% | -0.3% |
| -0.3% | -0.4% | 0.5% | -0.4% | 0.7% | - | -0.4% | -0.4% | - | -0.4% | -0.4% | - | 0.7% | -0.4% | 0.5% | -0.4% | -0.3% |
| -0.3% | -0.3% | -0.4% | -0.5% | 0.6% | -0.2% | 0.6% | 0.6% | -0.2% | 0.6% | 0.6% | -0.2% | 0.6% | -0.5% | -0.4% | -0.3% | -0.3% |
| -0.3% | -0.3% | -0.3% | -0.3% | -0.4% | -0.6% | -0.3% | -0.3% | -0.6% | -0.3% | -0.3% | -0.6% | -0.4% | -0.3% | -0.3% | -0.3% | -0.3% |

Abb. 8.8 Prozentuale Abweichung zwischen den stabweisen Leistungsverteilungen aus HELIOS und FENNECS-SP₃ mit 4 radialen Elementen pro Stabzelle für das UO₂-Brennelement

Die Leistungsverteilungen mit 16 radialen Elementen pro Stabzelle zeigen eine weitere Verbesserung gegenüber 4 Elementen. Die Diffusionsrechnung hat höhere Fehler im Vergleich zur SP₃, wie man in Abb. 8.9 und Abb. 8.10 sehen kann. Das spiegelt sich auch im RMS wider.

| | | | | | | | | | | | | | | | | |
|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| -0.3% | -0.3% | -0.2% | -0.2% | -0.1% | -0.2% | -0.1% | -0.1% | -0.2% | -0.1% | -0.1% | -0.2% | -0.1% | -0.2% | -0.2% | -0.3% | -0.3% |
| -0.3% | -0.2% | -0.2% | -0.2% | 0.2% | -0.2% | 0.3% | 0.3% | -0.2% | 0.3% | 0.3% | -0.2% | 0.2% | -0.2% | -0.2% | -0.2% | -0.3% |
| -0.2% | -0.2% | 0.1% | -0.2% | 0.1% | - | -0.2% | -0.2% | - | -0.2% | -0.2% | - | 0.1% | -0.2% | 0.1% | -0.2% | -0.2% |
| -0.2% | -0.2% | -0.2% | - | 0.3% | -0.2% | 0.4% | 0.4% | -0.2% | 0.4% | 0.4% | -0.2% | 0.3% | - | -0.2% | -0.2% | -0.2% |
| -0.1% | 0.2% | 0.1% | 0.3% | 0.7% | -0.1% | 0.4% | 0.4% | -0.2% | 0.4% | 0.4% | -0.1% | 0.7% | 0.3% | 0.1% | 0.2% | -0.1% |
| -0.2% | -0.2% | - | -0.2% | -0.1% | - | -0.2% | -0.1% | - | -0.1% | -0.2% | - | -0.1% | -0.2% | - | -0.2% | -0.2% |
| -0.1% | 0.3% | -0.2% | 0.4% | 0.4% | -0.2% | 0.4% | 0.4% | -0.2% | 0.4% | 0.4% | -0.2% | 0.4% | 0.4% | -0.2% | 0.3% | -0.1% |
| -0.1% | 0.3% | -0.2% | 0.4% | 0.4% | -0.1% | 0.4% | 0.3% | -0.2% | 0.3% | 0.4% | -0.1% | 0.4% | 0.4% | -0.2% | 0.3% | -0.1% |
| -0.2% | -0.2% | - | -0.2% | -0.2% | - | -0.2% | -0.2% | - | -0.2% | -0.2% | - | -0.2% | -0.2% | - | -0.2% | -0.2% |
| -0.1% | 0.3% | -0.2% | 0.4% | 0.4% | -0.1% | 0.4% | 0.3% | -0.2% | 0.3% | 0.4% | -0.1% | 0.4% | 0.4% | -0.2% | 0.3% | -0.1% |
| -0.1% | 0.3% | -0.2% | 0.4% | 0.4% | -0.2% | 0.4% | 0.4% | -0.2% | 0.4% | 0.4% | -0.2% | 0.4% | 0.4% | -0.2% | 0.3% | -0.1% |
| -0.2% | -0.2% | - | -0.2% | -0.1% | - | -0.2% | -0.1% | - | -0.1% | -0.2% | - | -0.1% | -0.2% | - | -0.2% | -0.2% |
| -0.1% | 0.2% | 0.1% | 0.3% | 0.7% | -0.1% | 0.4% | 0.4% | -0.2% | 0.4% | 0.4% | -0.1% | 0.7% | 0.3% | 0.1% | 0.2% | -0.1% |
| -0.2% | -0.2% | -0.2% | - | 0.3% | -0.2% | 0.4% | 0.4% | -0.2% | 0.4% | 0.4% | -0.2% | 0.3% | - | -0.2% | -0.2% | -0.2% |
| -0.2% | -0.2% | 0.1% | -0.2% | 0.1% | - | -0.2% | -0.2% | - | -0.2% | -0.2% | - | 0.1% | -0.2% | 0.1% | -0.2% | -0.2% |
| -0.3% | -0.2% | -0.2% | -0.2% | 0.2% | -0.2% | 0.3% | 0.3% | -0.2% | 0.3% | 0.3% | -0.2% | 0.2% | -0.2% | -0.2% | -0.2% | -0.3% |
| -0.3% | -0.3% | -0.2% | -0.2% | -0.1% | -0.2% | -0.1% | -0.1% | -0.2% | -0.1% | -0.1% | -0.2% | -0.1% | -0.2% | -0.2% | -0.3% | -0.3% |

Abb. 8.9 Prozentuale Abweichung zwischen den stabweisen Leistungsverteilungen aus HELIOS und FENNECS Diffusion mit 16 radialen Elementen pro Stabzelle für das UO₂-Brennelement

| | | | | | | | | | | | | | | | | |
|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| -0.3% | -0.3% | -0.3% | -0.3% | -0.3% | -0.4% | -0.2% | -0.2% | -0.4% | -0.2% | -0.2% | -0.4% | -0.3% | -0.3% | -0.3% | -0.3% | -0.3% |
| -0.3% | -0.3% | -0.3% | -0.3% | 0.2% | 0.0% | 0.2% | 0.1% | 0.0% | 0.1% | 0.2% | 0.0% | 0.2% | -0.3% | -0.3% | -0.3% | -0.3% |
| -0.3% | -0.3% | 0.0% | 0.0% | 0.4% | - | 0.0% | 0.0% | - | 0.0% | 0.0% | - | 0.4% | 0.0% | 0.0% | -0.3% | -0.3% |
| -0.3% | -0.3% | 0.0% | - | 0.5% | -0.1% | 0.2% | 0.2% | 0.0% | 0.2% | 0.2% | -0.1% | 0.5% | - | 0.0% | -0.3% | -0.3% |
| -0.3% | 0.2% | 0.4% | 0.5% | 0.6% | 0.0% | 0.2% | 0.2% | 0.0% | 0.2% | 0.2% | 0.0% | 0.6% | 0.5% | 0.4% | 0.2% | -0.3% |
| -0.4% | 0.0% | - | -0.1% | 0.0% | - | 0.0% | 0.0% | - | 0.0% | 0.0% | - | 0.0% | -0.1% | - | 0.0% | -0.4% |
| -0.2% | 0.2% | 0.0% | 0.2% | 0.2% | 0.0% | 0.2% | 0.2% | 0.0% | 0.2% | 0.2% | 0.0% | 0.2% | 0.2% | 0.0% | 0.2% | -0.2% |
| -0.2% | 0.1% | 0.0% | 0.2% | 0.2% | 0.0% | 0.2% | 0.1% | -0.1% | 0.1% | 0.2% | 0.0% | 0.2% | 0.2% | 0.0% | 0.1% | -0.2% |
| -0.4% | 0.0% | - | 0.0% | 0.0% | - | 0.0% | -0.1% | - | -0.1% | 0.0% | - | 0.0% | 0.0% | - | 0.0% | -0.4% |
| -0.2% | 0.1% | 0.0% | 0.2% | 0.2% | 0.0% | 0.2% | 0.1% | -0.1% | 0.1% | 0.2% | 0.0% | 0.2% | 0.2% | 0.0% | 0.1% | -0.2% |
| -0.2% | 0.2% | 0.0% | 0.2% | 0.2% | 0.0% | 0.2% | 0.2% | 0.0% | 0.2% | 0.2% | 0.0% | 0.2% | 0.2% | 0.0% | 0.2% | -0.2% |
| -0.4% | 0.0% | - | -0.1% | 0.0% | - | 0.0% | 0.0% | - | 0.0% | 0.0% | - | 0.0% | -0.1% | - | 0.0% | -0.4% |
| -0.3% | 0.2% | 0.4% | 0.5% | 0.6% | 0.0% | 0.2% | 0.2% | 0.0% | 0.2% | 0.2% | 0.0% | 0.6% | 0.5% | 0.4% | 0.2% | -0.3% |
| -0.3% | -0.3% | 0.0% | - | 0.5% | -0.1% | 0.2% | 0.2% | 0.0% | 0.2% | 0.2% | -0.1% | 0.5% | - | 0.0% | -0.3% | -0.3% |
| -0.3% | -0.3% | 0.0% | 0.0% | 0.4% | - | 0.0% | 0.0% | - | 0.0% | 0.0% | - | 0.4% | 0.0% | 0.0% | -0.3% | -0.3% |
| -0.3% | -0.3% | -0.3% | -0.3% | 0.2% | 0.0% | 0.2% | 0.1% | 0.0% | 0.1% | 0.2% | 0.0% | 0.2% | -0.3% | -0.3% | -0.3% | -0.3% |
| -0.3% | -0.3% | -0.3% | -0.3% | -0.3% | -0.4% | -0.2% | -0.2% | -0.4% | -0.2% | -0.2% | -0.4% | -0.3% | -0.3% | -0.3% | -0.3% | -0.3% |

Abb. 8.10 Prozentuale Abweichung zwischen den stabweisen Leistungsverteilungen aus HELIOS und FENNECS SP₃ mit 16 radialen Elementen pro Stabzelle für das UO₂-Brennelement

Bei der Leistungsverteilung im MOX-Brennelement liefert der Diffusionssolver höhere Fehler im Vergleich zur SP₃-Näherung, wie man in Abb. 8.11, Abb. 8.12, Abb. 8.13 und Abb. 8.14 sehen kann. Auch für das MOX-Brennelement sinken die Abweichungen mit steigender Anzahl an Elementen je Stabzelle. Im Fall vom MOX sind generell die Fehler höher, was der heterogeneren Struktur des MOX- gegenüber dem UO₂-Brennelement geschuldet ist. Das zeigt sich auch im RMS der Rechnung mit dem Diffusionssolver mit 4 radialen Elementen pro Stabzelle, dessen Wert über 1,1 % ist. Aus demselben Grund, wie schon für den Multiplikationsfaktor beobachtet, bringt die Anwendung der SP₃ für das MOX-Brennelement größere Verbesserungen gegenüber der Diffusion als im Vergleich zum UO₂-Brennelement.

| | | | | | | | | | | | | | | | | |
|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| -0.8% | -1.0% | -1.3% | -1.4% | -1.4% | -1.6% | -1.4% | -1.3% | -1.6% | -1.3% | -1.4% | -1.6% | -1.4% | -1.4% | -1.3% | -1.0% | -0.8% |
| -1.0% | 2.0% | 1.3% | 1.0% | 1.8% | 0.5% | 1.8% | 1.8% | 0.5% | 1.8% | 1.8% | 0.5% | 1.8% | 1.0% | 1.3% | 1.9% | -1.0% |
| -1.3% | 1.3% | 1.0% | -0.6% | 0.0% | - | -1.1% | -1.1% | - | -1.1% | -1.1% | - | 0.0% | -0.6% | 1.0% | 1.3% | -1.3% |
| -1.4% | 1.0% | -0.6% | - | -0.4% | -0.5% | 1.1% | 1.1% | -0.4% | 1.1% | 1.1% | -0.5% | -0.4% | - | -0.6% | 1.0% | -1.4% |
| -1.4% | 1.8% | 0.0% | -0.4% | 1.7% | -0.7% | 0.7% | 0.7% | -0.8% | 0.7% | 0.7% | -0.7% | 1.7% | -0.4% | 0.0% | 1.8% | -1.4% |
| -1.6% | 0.5% | - | -0.5% | -0.7% | - | -0.8% | -0.8% | - | -0.8% | -0.8% | - | -0.7% | -0.5% | - | 0.5% | -1.6% |
| -1.4% | 1.8% | -1.1% | 1.1% | 0.7% | -0.8% | 0.7% | 0.7% | -0.7% | 0.7% | 0.7% | -0.8% | 0.7% | 1.1% | -1.1% | 1.8% | -1.4% |
| -1.3% | 1.8% | -1.1% | 1.1% | 0.7% | -0.8% | 0.7% | 0.4% | -0.6% | 0.4% | 0.7% | -0.8% | 0.7% | 1.1% | -1.1% | 1.8% | -1.3% |
| -1.6% | 0.5% | - | -0.4% | -0.8% | - | -0.7% | -0.6% | - | -0.6% | -0.7% | - | -0.8% | -0.4% | - | 0.5% | -1.6% |
| -1.3% | 1.8% | -1.1% | 1.1% | 0.7% | -0.8% | 0.7% | 0.4% | -0.6% | 0.4% | 0.7% | -0.8% | 0.7% | 1.1% | -1.1% | 1.8% | -1.3% |
| -1.4% | 1.8% | -1.1% | 1.1% | 0.7% | -0.8% | 0.7% | 0.7% | -0.7% | 0.7% | 0.7% | -0.8% | 0.7% | 1.1% | -1.1% | 1.8% | -1.4% |
| -1.6% | 0.5% | - | -0.5% | -0.7% | - | -0.8% | -0.8% | - | -0.8% | -0.8% | - | -0.7% | -0.5% | - | 0.5% | -1.6% |
| -1.4% | 1.8% | 0.0% | -0.4% | 1.7% | -0.7% | 0.7% | 0.7% | -0.8% | 0.7% | 0.7% | -0.7% | 1.7% | -0.4% | 0.0% | 1.8% | -1.4% |
| -1.4% | 1.0% | -0.6% | - | -0.4% | -0.5% | 1.1% | 1.1% | -0.4% | 1.1% | 1.1% | -0.5% | -0.4% | - | -0.6% | 1.0% | -1.4% |
| -1.3% | 1.3% | 1.0% | -0.6% | 0.0% | - | -1.1% | -1.1% | - | -1.1% | -1.1% | - | 0.0% | -0.6% | 1.0% | 1.3% | -1.3% |
| -1.0% | 2.0% | 1.3% | 1.0% | 1.8% | 0.5% | 1.8% | 1.8% | 0.5% | 1.8% | 1.8% | 0.5% | 1.8% | 1.0% | 1.3% | 2.0% | -1.0% |
| -0.8% | -1.0% | -1.3% | -1.4% | -1.4% | -1.6% | -1.4% | -1.3% | -1.6% | -1.3% | -1.4% | -1.6% | -1.4% | -1.4% | -1.3% | -1.0% | -0.8% |

Abb. 8.11 Prozentuale Abweichung zwischen den stabweisen Leistungsverteilungen aus HELIOS und FENNECS Diffusion mit 4 radialen Elementen pro Stabzelle für das MOX-Brennelement

| | | | | | | | | | | | | | | | | |
|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| -0.7% | -0.9% | -1.1% | -1.1% | -1.2% | -1.5% | -1.1% | -1.1% | -1.4% | -1.1% | -1.1% | -1.5% | -1.2% | -1.1% | -1.1% | -0.9% | -0.7% |
| -0.9% | 1.1% | 0.4% | 0.1% | 1.4% | 0.8% | 1.5% | 1.5% | 0.8% | 1.5% | 1.5% | 0.8% | 1.4% | 0.1% | 0.4% | 1.1% | -0.9% |
| -1.1% | 0.4% | 0.6% | -0.5% | 0.7% | - | -0.9% | -0.8% | - | -0.8% | -0.9% | - | 0.7% | -0.5% | 0.6% | 0.4% | -1.1% |
| -1.1% | 0.1% | -0.5% | - | 0.3% | -0.6% | 0.6% | 0.7% | -0.3% | 0.7% | 0.6% | -0.6% | 0.3% | - | -0.5% | 0.1% | -1.1% |
| -1.2% | 1.4% | 0.7% | 0.3% | 1.5% | -0.6% | 0.4% | 0.4% | -0.5% | 0.4% | 0.4% | -0.6% | 1.5% | 0.3% | 0.7% | 1.4% | -1.2% |
| -1.5% | 0.7% | - | -0.6% | -0.6% | - | -0.5% | -0.4% | - | -0.4% | -0.5% | - | -0.6% | -0.6% | - | 0.7% | -1.5% |
| -1.1% | 1.5% | -0.9% | 0.6% | 0.4% | -0.5% | 0.6% | 0.7% | -0.2% | 0.7% | 0.6% | -0.5% | 0.4% | 0.6% | -0.9% | 1.5% | -1.1% |
| -1.1% | 1.5% | -0.8% | 0.7% | 0.4% | -0.4% | 0.7% | 0.3% | -0.3% | 0.3% | 0.7% | -0.4% | 0.4% | 0.7% | -0.8% | 1.5% | -1.1% |
| -1.4% | 0.8% | - | -0.3% | -0.5% | - | -0.2% | -0.3% | - | -0.3% | -0.2% | - | -0.5% | -0.3% | - | 0.8% | -1.4% |
| -1.1% | 1.5% | -0.8% | 0.7% | 0.4% | -0.4% | 0.7% | 0.3% | -0.3% | 0.3% | 0.7% | -0.4% | 0.4% | 0.7% | -0.8% | 1.5% | -1.1% |
| -1.1% | 1.5% | -0.9% | 0.6% | 0.4% | -0.5% | 0.6% | 0.7% | -0.2% | 0.7% | 0.6% | -0.5% | 0.4% | 0.6% | -0.9% | 1.5% | -1.1% |
| -1.5% | 0.7% | - | -0.6% | -0.6% | - | -0.5% | -0.4% | - | -0.4% | -0.5% | - | -0.6% | -0.6% | - | 0.7% | -1.5% |
| -1.2% | 1.4% | 0.7% | 0.3% | 1.5% | -0.6% | 0.4% | 0.4% | -0.5% | 0.4% | 0.4% | -0.6% | 1.5% | 0.3% | 0.7% | 1.4% | -1.2% |
| -1.1% | 0.1% | -0.5% | - | 0.3% | -0.6% | 0.6% | 0.7% | -0.3% | 0.7% | 0.6% | -0.6% | 0.3% | - | -0.5% | 0.1% | -1.1% |
| -1.1% | 0.4% | 0.6% | -0.5% | 0.7% | - | -0.9% | -0.8% | - | -0.8% | -0.9% | - | 0.7% | -0.5% | 0.6% | 0.4% | -1.1% |
| -0.9% | 1.1% | 0.4% | 0.1% | 1.4% | 0.8% | 1.5% | 1.5% | 0.8% | 1.5% | 1.5% | 0.8% | 1.4% | 0.1% | 0.4% | 1.1% | -0.9% |
| -0.7% | -0.9% | -1.1% | -1.1% | -1.2% | -1.5% | -1.1% | -1.1% | -1.4% | -1.1% | -1.1% | -1.5% | -1.2% | -1.1% | -1.1% | -0.9% | -0.7% |

Abb. 8.12 Prozentuale Abweichung zwischen den stabweisen Leistungsverteilungen aus HELIOS und FENNECS SP₃ mit 4 radialen Elementen pro Stabzelle für das MOX-Brennelement

| | | | | | | | | | | | | | | | | |
|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| -0.5% | -0.8% | -0.9% | -1.0% | -0.9% | -1.0% | -1.0% | -1.0% | -1.0% | -1.0% | -1.0% | -1.0% | -0.9% | -1.0% | -0.9% | -0.8% | -0.5% |
| -0.8% | 1.4% | 1.0% | 0.9% | 0.9% | 0.6% | 0.8% | 0.9% | 0.7% | 0.9% | 0.8% | 0.6% | 0.9% | 0.9% | 1.0% | 1.4% | -0.8% |
| -0.9% | 1.0% | 0.4% | 0.0% | -0.1% | - | -0.3% | -0.2% | - | -0.2% | -0.3% | - | -0.1% | 0.0% | 0.4% | 1.0% | -0.9% |
| -1.0% | 0.9% | 0.0% | - | -0.6% | 0.2% | 0.2% | 0.3% | 0.1% | 0.3% | 0.2% | 0.2% | -0.6% | - | 0.0% | 0.9% | -1.0% |
| -0.9% | 0.9% | -0.1% | -0.6% | 0.2% | 0.0% | 0.0% | 0.0% | -0.1% | 0.0% | 0.0% | 0.0% | 0.2% | -0.6% | -0.1% | 0.9% | -0.9% |
| -1.0% | 0.6% | - | 0.2% | 0.0% | - | -0.1% | -0.1% | - | -0.1% | -0.1% | - | 0.0% | 0.2% | - | 0.6% | -1.0% |
| -1.0% | 0.8% | -0.3% | 0.2% | 0.0% | -0.1% | -0.1% | -0.1% | -0.1% | -0.1% | -0.1% | -0.1% | 0.0% | 0.2% | -0.3% | 0.8% | -1.0% |
| -1.0% | 0.9% | -0.2% | 0.3% | 0.0% | -0.1% | -0.1% | 0.0% | 0.0% | 0.0% | -0.1% | -0.1% | 0.0% | 0.3% | -0.2% | 0.9% | -1.0% |
| -1.0% | 0.7% | - | 0.1% | -0.1% | - | -0.1% | 0.0% | - | 0.0% | -0.1% | - | -0.1% | 0.1% | - | 0.7% | -1.0% |
| -1.0% | 0.9% | -0.2% | 0.3% | 0.0% | -0.1% | -0.1% | 0.0% | 0.0% | 0.0% | -0.1% | -0.1% | 0.0% | 0.3% | -0.2% | 0.9% | -1.0% |
| -1.0% | 0.8% | -0.3% | 0.2% | 0.0% | -0.1% | -0.1% | -0.1% | -0.1% | -0.1% | -0.1% | -0.1% | 0.0% | 0.2% | -0.3% | 0.8% | -1.0% |
| -1.0% | 0.6% | - | 0.2% | 0.0% | - | -0.1% | -0.1% | - | -0.1% | -0.1% | - | 0.0% | 0.2% | - | 0.6% | -1.0% |
| -0.9% | 0.9% | -0.1% | -0.6% | 0.2% | 0.0% | 0.0% | 0.0% | -0.1% | 0.0% | 0.0% | 0.0% | 0.2% | -0.6% | -0.1% | 0.9% | -0.9% |
| -1.0% | 0.9% | 0.0% | - | -0.6% | 0.2% | 0.2% | 0.3% | 0.1% | 0.3% | 0.2% | 0.2% | -0.6% | - | 0.0% | 0.9% | -1.0% |
| -0.9% | 1.0% | 0.4% | 0.0% | -0.1% | - | -0.3% | -0.2% | - | -0.2% | -0.3% | - | -0.1% | 0.0% | 0.4% | 1.0% | -0.9% |
| -0.8% | 1.4% | 1.0% | 0.9% | 0.9% | 0.6% | 0.8% | 0.9% | 0.7% | 0.9% | 0.8% | 0.6% | 0.9% | 0.9% | 1.0% | 1.4% | -0.8% |
| -0.5% | -0.8% | -0.9% | -1.0% | -0.9% | -1.0% | -1.0% | -1.0% | -1.0% | -1.0% | -1.0% | -1.0% | -0.9% | -1.0% | -0.9% | -0.8% | -0.5% |

Abb. 8.13 Prozentuale Abweichung zwischen den stabweisen Leistungsverteilungen aus HELIOS und FENNECS Diffusion mit 16 radialen Elementen pro Stabzelle für das MOX-Brennelement

| | | | | | | | | | | | | | | | | |
|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| -0.4% | -0.6% | -0.7% | -0.7% | -0.6% | -0.7% | -0.6% | -0.6% | -0.6% | -0.6% | -0.6% | -0.7% | -0.6% | -0.7% | -0.7% | -0.6% | -0.4% |
| -0.6% | 0.5% | 0.2% | 0.1% | 0.2% | 0.8% | 0.3% | 0.4% | 1.0% | 0.4% | 0.3% | 0.8% | 0.2% | 0.1% | 0.2% | 0.5% | -0.6% |
| -0.7% | 0.2% | -0.2% | 0.3% | 0.3% | - | 0.2% | 0.3% | - | 0.3% | 0.2% | - | 0.3% | 0.3% | -0.2% | 0.2% | -0.7% |
| -0.7% | 0.1% | 0.3% | - | 0.0% | 0.3% | -0.4% | -0.3% | 0.4% | -0.3% | -0.4% | 0.3% | 0.0% | - | 0.3% | 0.1% | -0.7% |
| -0.6% | 0.2% | 0.3% | 0.0% | -0.3% | 0.3% | -0.5% | -0.4% | 0.4% | -0.4% | -0.5% | 0.3% | -0.3% | 0.0% | 0.3% | 0.2% | -0.6% |
| -0.7% | 0.8% | - | 0.3% | 0.3% | - | 0.4% | 0.5% | - | 0.5% | 0.4% | - | 0.3% | 0.3% | - | 0.8% | -0.7% |
| -0.6% | 0.3% | 0.2% | -0.4% | -0.5% | 0.4% | -0.3% | -0.3% | 0.5% | -0.3% | -0.3% | 0.4% | -0.5% | -0.4% | 0.2% | 0.3% | -0.6% |
| -0.6% | 0.4% | 0.3% | -0.3% | -0.4% | 0.5% | -0.3% | -0.2% | 0.5% | -0.2% | -0.3% | 0.5% | -0.4% | -0.3% | 0.3% | 0.4% | -0.6% |
| -0.6% | 1.0% | - | 0.4% | 0.4% | - | 0.5% | 0.5% | - | 0.5% | 0.5% | - | 0.4% | 0.4% | - | 1.0% | -0.6% |
| -0.6% | 0.4% | 0.3% | -0.3% | -0.4% | 0.5% | -0.3% | -0.2% | 0.5% | -0.2% | -0.3% | 0.5% | -0.4% | -0.3% | 0.3% | 0.4% | -0.6% |
| -0.6% | 0.3% | 0.2% | -0.4% | -0.5% | 0.4% | -0.3% | -0.3% | 0.5% | -0.3% | -0.3% | 0.4% | -0.5% | -0.4% | 0.2% | 0.3% | -0.6% |
| -0.7% | 0.8% | - | 0.3% | 0.3% | - | 0.4% | 0.5% | - | 0.5% | 0.4% | - | 0.3% | 0.3% | - | 0.8% | -0.7% |
| -0.6% | 0.2% | 0.3% | 0.0% | -0.3% | 0.3% | -0.5% | -0.4% | 0.4% | -0.4% | -0.5% | 0.3% | -0.3% | 0.0% | 0.3% | 0.2% | -0.6% |
| -0.7% | 0.1% | 0.3% | - | 0.0% | 0.3% | -0.4% | -0.3% | 0.4% | -0.3% | -0.4% | 0.3% | 0.0% | - | 0.3% | 0.1% | -0.7% |
| -0.7% | 0.2% | -0.2% | 0.3% | 0.3% | - | 0.2% | 0.3% | - | 0.3% | 0.2% | - | 0.3% | 0.3% | -0.2% | 0.2% | -0.7% |
| -0.6% | 0.5% | 0.2% | 0.1% | 0.2% | 0.8% | 0.3% | 0.4% | 1.0% | 0.4% | 0.3% | 0.8% | 0.2% | 0.1% | 0.2% | 0.5% | -0.6% |
| -0.4% | -0.6% | -0.7% | -0.7% | -0.6% | -0.7% | -0.6% | -0.6% | -0.6% | -0.6% | -0.6% | -0.7% | -0.6% | -0.7% | -0.7% | -0.6% | -0.4% |

Abb. 8.14 Prozentuale Abweichung zwischen den stabweisen Leistungsverteilungen aus HELIOS und FENNECS SP₃ mit 16 radialen Elementen pro Stabzelle für das MOX-Brennelement

9 Zusätzliche Arbeiten und Ergebnisse

9.1 Implementierung der inversen Vektoriteration nach Wielandt

Große Reaktorkerne sind oftmals durch Dominanzverhältnisse (Verhältnis des nächsthöheren Eigenwerts zum fundamentalen Eigenwert) von nahe eins gekennzeichnet. Das angewandte Verfahren der Vektoriteration (Potenzmethode) konvergiert zwar stets zum betragsmäßig größten Eigenwert, jedoch umso langsamer, je näher das Dominanzverhältnis bei eins liegt. Die inverse Vektoriteration nach Wielandt /SUT 88/ ist eine Methode, das Dominanzverhältnis eines Eigenwertproblems zu reduzieren und damit die eine Konvergenzbeschleunigung zu erzielen. Dies wird erreicht, indem ein Anteil der Spaltquelle, entsprechend einem verschobenen Eigenwert $k_s = k_{eff} + \Delta k$ ($\Delta k > 0$), auf die linke Seite der Diffusions- (oder auch der Transport-)Gleichung verschoben wird:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} d^3r [D_g(\vec{r}) \vec{\nabla} \Phi_i(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla} f_g(\vec{r}) + \sigma_g^{tot}(\vec{r}) f_g(\vec{r}) \Phi_i(\vec{r}) - \Phi_i(\vec{r}) s_g^W(\vec{r})] = & \quad (9.1) \\ = \int_{\Omega} d^3r s_g(\vec{r}) \Phi_i(\vec{r}) + \oint_{\partial\Omega} d^2r D_g(\vec{r}) \Phi_i(\vec{r}) g_n & \\ - \int_{\Omega} d^3r s_g^W(\vec{r}) \Phi_i(\vec{r}) & \end{aligned}$$

Darin bezeichnet Ω das Problemgebiet mit seiner Oberfläche (Berandung) $\partial\Omega$, g_n enthält die Randbedingungen und

$$s_g^W(\vec{r}) = \frac{\lambda_g}{k_s} \sum_{g'} v \sigma_{g'}^{fiss}(\vec{r}) f_{g'}(\vec{r}) \quad (9.2)$$

ist die *Wielandt-verschobene* Spaltquelle. Setzt man diesen Ausdruck für $s_g^W(\vec{r})$ in Gl. (9.2) ein und benutzt man die Entwicklung des Neutronenflusses nach den Basisfunktionen eines finiten Elements,

$$f_g^u(\vec{r}) = \sum_{j=1}^N f_{gj}^u \Phi_j(\vec{r}) \quad (9.3)$$

worin μ der Iterationsindex und N die Anzahl der Knoten der geometrischen Vernetzung ist, lässt sich die rechte Seite von Gl. (9.1) wie folgt umformulieren:

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^N f_{gj}^\mu \int_{\Omega} d^3r [D_g(\vec{r}) \vec{\nabla} \Phi_i(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla} \Phi_j(\vec{r}) + \sigma_g^{tot}(\vec{r}) \Phi_i(\vec{r}) \Phi_j(\vec{r})] \\
& - \frac{\chi_g}{k_s} \int_{\Omega} d^3r \Phi_i(\vec{r}) \sum_{g'} v \sigma_{g'}^{fiss}(\vec{r}) \sum_{j=1}^N f_{g'j}^{\mu-1} \Phi_j(\vec{r}) = \\
& = \sum_{j=1}^N f_{gj}^\mu \int_{\Omega} d^3r [D_g(\vec{r}) \vec{\nabla} \Phi_i(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla} \Phi_j(\vec{r}) \\
& + \sigma_g^{tot}(\vec{r}) \Phi_i(\vec{r}) \Phi_j(\vec{r})] \\
& - \sum_{j=1}^N f_{gj}^\mu \frac{\chi_g}{k_s} \int_{\Omega} d^3r \Phi_i(\vec{r}) \Phi_j(\vec{r}) \sum_{g'} v \sigma_{g'}^{fiss}(\vec{r}) \frac{f_{g'j}^{\mu-1}}{f_{gj}^\mu}
\end{aligned} \tag{9.4}$$

Das Gleichungssystem nimmt somit folgende Form an:

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^N f_{gj}^\mu \int_{\Omega} d^3r \left[D_g(\vec{r}) \vec{\nabla} \Phi_i(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla} \Phi_j(\vec{r}) \right. \\
& \left. + \left(\sigma_g^{tot}(\vec{r}) - \frac{\chi_g}{k_s f_{gj}^{\mu-1}} \sum_{g'} v \sigma_{g'}^{fiss}(\vec{r}) f_{g'j}^{\mu-1} \right) \Phi_i(\vec{r}) \Phi_j(\vec{r}) \right] \\
& = \\
& = \int_{\Omega} d^3r s_g(\vec{r}) \Phi_i(\vec{r}) + \oint_{\partial\Omega} d^2r D_g(\vec{r}) \Phi_i(\vec{r}) g_n \\
& - \int_{\Omega} d^3r s_g^W(\vec{r}) \Phi_i(\vec{r})
\end{aligned} \tag{9.5}$$

Darin wurde f_{gj}^μ im Ausdruck für die Spaltquelle durch den Wert aus der vorherigen Iteration, $f_{gj}^{\mu-1}$, approximiert, wodurch das Gleichungssystem wieder in die ursprüngliche Struktur gebracht wird.

Den Eigenwert k_{eff}^μ der aktuellen Iteration erhält man folgendermaßen: Anstelle des Standard-Eigenwertproblems (siehe z.B. /LEW 93/)

$$M^{\mu-1} F_\mu \Psi^\mu = \frac{1}{k_{eff}^{\mu-1}} F_{\mu-1} \Psi^{\mu-1} \quad (9.6)$$

in dem M der Transportoperator ist, der alle Nicht-Spalt-Beiträge enthält, und $F_\mu(\vec{r}) \Psi^\mu = \Sigma_{g'} \nu \sigma_{g'}^{fiss}(\vec{r}) f_{g'}^\mu(\vec{r})$ die räumliche Verteilung der Spaltneutronen darstellt, ist jetzt das *verschobene* Eigenwertproblem

$$\left(M^{\mu-1} - \frac{1}{k_s} F_\mu \right) \Psi^\mu = \left(\frac{1}{k_{eff}^{\mu-1}} - \frac{1}{k_s} \right) F_{\mu-1} \Psi^{\mu-1} \quad (9.7)$$

zu lösen. Definiert man

$$A^{\mu-1} := M^{\mu-1} - \frac{1}{k_s} F_\mu \quad \text{and} \quad \frac{1}{k^{\mu-1}} := \frac{1}{k_{eff}^{\mu-1}} - \frac{1}{k_s} \quad (9.8)$$

kann Gl. (9.7) wie folgt umgeschrieben werden, jetzt mit dem Eigenwert $k^{\mu-1}$:

$$M^{\mu-1} \Psi^\mu = \frac{1}{k^{\mu-1}} F_{\mu-1} \Psi^{\mu-1} \quad (9.9)$$

Durch die Streuquelleniteration wird der Operator $M^{\mu-1}$ invertiert. Dies liefert einen Ausdruck für Ψ^μ :

$$\Psi^\mu = \frac{1}{k^{\mu-1}} (M^{\mu-1})^{-1} F_{\mu-1} \Psi^{\mu-1} \quad (9.10)$$

Die Potenzmethode (Vektoriteration) liefert iterativ eine verbesserte Approximation k^μ für den Eigenwert aus dem Verhältnis der Spaltquellen zweier aufeinanderfolgender Iterationen gemäß

$$k^\mu = k^{\mu-1} \frac{\int_{\Omega} \sum_{g'} v \sigma_{g'}^{fiss}(\vec{r}) f_{g'}^\mu(\vec{r})}{\int_{\Omega} \sum_{g'} v \sigma_{g'}^{fiss}(\vec{r}) f_{g'}^{\mu-1}(\vec{r})} \quad (9.11)$$

Bezeichnet man dieses Verhältnis mit $\alpha_{\mu-1}$, d. h.

$$\alpha_{\mu-1} := \frac{\sum_{g'} \int_{\Omega} d^3 r v \sigma_{g'}^{fiss}(\vec{r}) f_{g'}^{\mu-1}(\vec{r})}{\sum_{g'} \int_{\Omega} d^3 r v \sigma_{g'}^{fiss}(\vec{r}) f_{g'}^\mu(\vec{r})} \quad (9.12)$$

so kann Gl. (9.11) abgekürzt als $k^\mu = \frac{1}{\alpha_{\mu-1}} k^{\mu-1}$ geschrieben werden. Unter Verwendung der Definition von k^μ nach Gl. (9.8) ergibt sich dann:

$$\frac{k^\mu}{k^{\mu-1}} = \frac{1}{\alpha_{\mu-1}} \Leftrightarrow \left(\frac{1}{k_{eff}^\mu} - \frac{1}{k_s} \right)^{-1} \left(\frac{1}{k_{eff}^{\mu-1}} - \frac{1}{k_s} \right) = \frac{1}{\alpha_{\mu-1}} \quad (9.13)$$

Löst man diese Gleichung nach k_{eff}^μ auf, erhält man den endgültigen Ausdruck für den Eigenwert k_{eff}^μ der μ -ten Iteration:

$$k_{eff}^\mu = \left(\frac{\alpha_{\mu-1}}{k_{eff}^\mu} + \frac{1 - \alpha_{\mu-1}}{k_s} \right)^{-1} \quad (9.14)$$

Die inverse Vektoriteration nach Wielandt ist in FENNECS so implementiert, dass sie entweder mit einer fest im Eingabedatensatz vorgegebenen Eigenwertverschiebung Δk oder mit einer während des Iterationsprozesses dynamisch angepassten Eigenwertverschiebung k'_{eff} arbeitet, die dem in PARCS implementierten Ansatz folgt:

$$k'_{eff} = \left[\max \left(\frac{1}{k_{eff}^n} - 10 \cdot \left| \frac{1}{k_{eff}^n} - \frac{1}{k_{eff}^{n-1}} \right| - 0.025, \frac{1}{3} \right) \right]^{-1} \quad (9.15)$$

Im Gegensatz zur festen Eigenwertverschiebung wurden im Rahmen dieses Vorhabens jedoch noch nicht genügend Erfahrungen bezüglich der Leistungsfähigkeit und der Grenzen dieser dynamisch angepassten Eigenwertverschiebung gewonnen. Unter Verwendung einer festen Eigenwertverschiebung ist der optimale Verschiebungswert problemabhängig. Da der Eigenwert des konkret vorliegenden Problemfalls noch unbekannt ist und sich während des Iterationsprozesses zudem noch ändert, während der verschobene Eigenwert konstant ist, kann die Verschiebung von ihrer anfänglichen, im Eingabedatensatz angegebenen, abweichen. Daher ist es erforderlich, den verschobenen Eigenwert von Zeit zu Zeit (beispielsweise alle 10 äußere Iterationen) gemäß der gewünschten Verschiebung zu aktualisieren. Dies wird durch einen Eingangsparameter gesteuert, der auch Aktualisierungen der Systemmatrix für jede Energiegruppe bewirkt, da nämlich der verschobene Eigenwert gemäß Gl. (9.1) in die Systemmatrix eingeht.

Die durch das Wielandt-Verfahren erzielte Beschleunigung der äußeren Iteration ist in der Regel viel höher als der zusätzliche Rechenaufwand für dieses Update. Um eine geeignete grobe Abschätzung von Spaltquelle und Eigenwert zu erhalten, beginnt der Iterationsprozess immer mit einer bestimmten Anzahl konventioneller Vektoriterationen, die durch einen weiteren Eingabeparameter angegeben wird.

Tab. 9.1 Untersuchte Testfälle

| Testfall | LMW /LAN 77/ | IAEA3D /ANL 77/ | BEAVRS /HOR 18b/ | ASTRID /VAR 12/ |
|--|-----------------|--------------------|---------------------|--------------------|
| Anzahl Energiegruppen | 2 | 2 | 2 | 11 |
| Anzahl Vektoriterationen | 158 | 231 | 240 | 168 |
| Anzahl inverser Vektoriterationen (Wielandt) | 24 (-85 %) | 38 (-84 %) | 114 (-53 %) | 99 (-41 %) |
| Eigenwertverschiebung | 0,05 | 0,02 | 0,07 | 0,8 |
| Wielandt-Iteration beginnt erstmals bei Iteration... | 5 | 8 | 20 | 20 |
| Aktualisierung von Systemmatrix und Eigenwertverschiebung alle ... Iteration | 5 | 8 | 10 | 8 |

Tab. 9.1 zeigt Vergleiche zwischen der Vektoriteration und der Wielandt-Iteration für ausgewählte thermische und schnelle Reaktortypen. Während die Wielandt-Iteration für die 2-Gruppen-Fälle eine deutlich geringere Anzahl äußerer Iterationen liefert, ist der Effekt für das 11-Gruppen-Problem des natriumgekühlten Reaktorkonzepts ASTRID geringer. Dies liegt daran, dass durch das Verschieben eines Teils der Spaltquelle auf die linke Seite diese ähnlich wie die Streuquelle behandelt wird und dadurch künstlich Aufwärtsstreubeiträge entstehen, die das Konvergenzverhalten verschlechtern. Für solche Fälle sollten zusätzliche Maßnahmen ergriffen werden, um die Effizienz der Wielandt-Iteration zu erhalten.

9.2 Implementierung der *Error-Mode-Extrapolation*

Zur Konvergenzbeschleunigung des transienten Fixed-Source-Problems eines Zeitschritt τ wird die sog. *Error-Mode-Extrapolation*/TOM 76/ angewendet. Zu diesem Zweck werden die Verhältnisse aufeinanderfolgender L1-Normen zwischen der aktuellen und den vorherigen Fixed-Source-Iterationen ausgewertet:

$$\mu^n = \frac{\sum_g \sum_j |f_{gj}^n - f_{gj}^{n-1}|}{\sum_g \sum_j |f_{gj}^{n-1} - f_{gj}^{n-2}|} \quad (9.16)$$

Darin ist n der Iterationsindex, g der Energiegruppenindex und j der Knotenindex. Während des iterativen Prozesses ist die Annäherung an die Konvergenz durch $0 < \mu^n \leq 1$

gekennzeichnet, wobei $\mu^n = 1$ vollständiger Konvergenz entspricht. Die *Error-Mode-Extrapolation* wird daher nur angewandt, wenn μ diese Bedingung erfüllt (sonst würde eine Entwicklung in Richtung Divergenz resultieren). In diesem Fall wird die Flussverteilung durch

$$f_{gj}^n := f_{gj}^n + d^n \cdot (f_{gj}^n - f_{gj}^{n-1}) \quad (9.17)$$

besser approximiert, wobei

$$d^n = \frac{\mu^n}{1 - \mu^n} \quad (9.18)$$

Ist. Die Erfahrung zeigt, dass hierdurch die CPU-Zeit, die zum Konvergieren des Fixed-Source-Problems eines bestimmten Zeitschritts benötigt wird, um einen Faktor von bis zu fünf reduziert wird.

9.3 Extrapolation der Flussverteilung zum nächsten Zeitschritt

Der Rechenaufwand für einen einzelnen Zeitschritt ist vergleichbar mit dem eines stationären Eigenwertproblems. Die Anzahl der Iterationen für die konvergierte Neutronenflussverteilung des nächsten Zeitschritts hängt stark von einer guten Schätzung der erwarteten Flussverteilung ab. Anstatt die Flussverteilung des vorherigen Zeitschritts zu verwenden, wird dieser Fluss zunächst zum nächsten Zeitschritt mit den räumlich und energetisch aufgelösten inversen Reaktorperioden extrapoliert. Damit erhält man in der Regel eine gute Schätzung der tatsächlichen Flussverteilung des nächsten Zeitschritts. Unter der Annahme einer exponentiellen Abhängigkeit des Flusses zwischen aufeinanderfolgenden Zeitschritten kann die Beziehung

$$f_g^{\tau+1}(\vec{r}) = f_g^{\tau}(\vec{r}) \cdot e^{\omega_g^{\tau}(\vec{r})\Delta t} \quad (9.19)$$

genutzt werden, um hieraus eine brauchbare Approximation der Flussverteilung des nächsten Zeitschritts abzuleiten. Die inversen Reaktorperioden können ebenfalls aus Gl. (9.19) abgeschätzt werden, indem sie für die Zeitschritte τ und $\tau - 1$ ausgewertet wird:

$$\omega_g^T(\vec{r}) = \frac{1}{\Delta t} \ln \frac{f_g^T(\vec{r})}{f_g^{T-1}(\vec{r})} \quad (9.20)$$

Vor der iterativen Lösung des Fixed-Source-Problems des nächsten Zeitschritts berechnet FENNECS die räumliche und energetische Verteilung der inversen Reaktorperioden an jedem Finite-Elemente-Knotenpunkt unter Verwendung der Flussverteilungen der beiden vorherigen Zeitschritte und extrapoliert die Flussverteilung entsprechend. Dies erfolgt erst nach mindestens fünf Zeitschritten.

9.4 Entwicklung eines Postprozessor für FENNECS

Um räumliche Verteilungen von FENNECS-Eingaben und -Ausgaben in zweidimensionaler Darstellung für jede axiale Masche in Textform anzeigen zu können, wurde ein spezieller Postprozessor entwickelt, der auch mit unregelmäßigen Geometrien umgehen kann. Zusätzlich kann der Postprozessor auch axial integriert oder axial gemittelt erzeugen räumliche Verteilungen generieren und ausgeben.

Der Postprozessor macht von der *Region*-Kennung Gebrauch, die jedem finiten Element in der Liste der Elementkonnektivitäten zugewiesen wird. Alle finiten Elemente mit demselben *Region*-Bezeichner gehören zu derselben räumlichen Region, beispielsweise die sechs ein Hexagon bildenden Prismen. Der Postprozessor berechnet die Schwerpunktskoordinaten jeder Region, die wiederum verwendet werden, um den gewünschten Ausgabewert (beispielsweise die Leistungsdichte) jeder Region an einer Stelle in der Text-Ausgabedatei von FENNECS anzuzeigen, die den Schwerpunktskoordinaten dieser Region entspricht.

Mit diesem Postprozessor können nicht nur räumliche Verteilungen oder axial integrierte oder axial gemittelte Ergebnisgrößen (z. B. Leistungs- und Neutronenflussverteilungen, Verteilungen thermohydraulischer Parameter) ausgegeben werden, sondern auch Eingangsgrößen wie die Materialverteilung des simulierten Reaktors, vgl. Abb. 9.1. Neben dem existierenden graphischen Visualisierungs-Tool erlaubt der Postprozessor somit den direkten Zugriff auf numerische Resultate in der Darstellung der Reaktorgeometrie.

Distribution "material":

```
Axial mesh 1:
      10 10 10 10 10 10 10 10 10 10
    10 9 9 8 8 7 7 8 8 8 8 9 10
  10 10 9 8 8 7 1 1 1 1 1 1 1 10
10 10 9 8 8 7 1 1 1 1 1 1 1 1 10
10 9 9 8 8 7 1 1 1 1 1 1 1 1 10
  10 9 8 7 1 1 1 1 1 1 7 8 9 10
    10 9 8 7 7 7 7 7 7 7 8 9 10
      10 9 8 8 8 8 8 8 8 9 10
        10 9 9 9 9 9 9 9 9 10
          10 10 10 10 10 10 10 10
```

Abb. 9.1 Beispiel des Postprozessors für eine Materialverteilung in hexagonaler Kernanordnung (Takeda-Testfall)

10 Zusammenfassung

Die Zielsetzung des Vorhabens war die Entwicklung des 3D-Weniggruppen-Neutronenkinetikcodes FENNECS zur Sicherheitsbewertung von SMRs und MMRs sowie fortschrittlichen und innovativen Reaktorsystemen mit komplexen und unregelmäßigen Geometrien. Als Grundlage dieses Vorhabens dient der in der GRS entwickelte stationäre Weniggruppen-Finite-Elemente-Diffusionscode FEM-Diff-3D, dessen Entstehung auf das frühere BMWi-Vorhaben RS1183 zurückgeht und in der Folge u. a. auf drei Dimensionen erweitert wurde.

Im Ergebnis dieses Vorhabens steht ein wesentlich weiterentwickelter Neutronenkinetikcode FENNECS ebenso zur Verfügung wie das von FENNECS für die Vernetzung komplexer Geometrien benötigte und neu entwickelte Vernetzungswerkzeug PEMTY. Für beide Softwaretools wurden erste Validierungen und Anwendungen durchgeführt, u. a. im Forschungsvorhaben RS1589 (INNOSYS-II).

Dieser Bericht dokumentiert die durchgeführten Forschungs- und Entwicklungsarbeiten zu folgenden Themen:

10.1 Erweiterungen von FENNECS zur Berücksichtigung thermohydraulischer Rückwirkungen

Gegenstand dieses Arbeitspunktes war die Kopplung von FENNECS mit thermohydraulischen Modellen, die hier in Form einer Kopplung mit dem GRS-Systemcode ATHLET realisiert wurde. Dazu wurde anhand der auszutauschenden räumlichen Parameter zwischen FENNECS und ATHLET die Schnittstelle definiert und implementiert. Dabei ist das Datenformat bezüglich der Geometrie so allgemein, dass Unterschiede in der Geometriedarstellung seitens der Thermohydraulik und 3D-Neutronenkinetik automatisch berücksichtigt werden. Für die Kopplung selbst wurde das sog. Interne Kopplungsschema implementiert, bei der Fluidynamik und Wärmeübertragungsprozesse in Reaktorkern, Kühlkreislauf und der gesamten Anlage von ATHLET und die Neutronenkinetik von FENNECS behandelt werden. Die Kopplung wurde anhand gekoppelter Testfälle, z. B. BEAVRS, erfolgreich getestet.

10.2 Erweiterungen von FENNECS für zeitabhängige Simulationen

Die für die Sicherheitsbewertung wichtige Fähigkeit zur Simulation von Transienten und Störfällen wurde in diesem Arbeitspaket in FENNECS realisiert. Dabei wird parallel zur Lösung der zeitabhängigen Diffusionsgleichung auch die Dynamik der verzögerten Neutronen berechnet. Beide Gleichungssysteme werden voll-implizit zeitdiskretisiert, was unbedingte numerische Stabilität, d. h. keine Begrenzung der Zeitschrittweite, ermöglicht. Ferner wurden die für die Simulation von Reaktivitätsstörfällen oder die Suche nach kritischen Kernzuständen notwendigen Modelle zu Bewegung von Steuerstäben entwickelt, implementiert und erfolgreich getestet. Dabei können nicht nur axiale Steuerstabbewegungen simuliert werden, sondern auch azimutale Rotationen von Steuerstabtrommeln, wie sie in Mikroreaktoren vorzufinden sind.

10.3 Bereitstellung von Vernetzungswerkzeugen zur räumlichen Diskretisierung der Kerngeometrien

In diesem Arbeitspaket wurden Informationen über existierende und frei verfügbare Vernetzungswerkzeuge in Erfahrung gebracht und eines getestet. Dabei stellte sich frühzeitig zweierlei heraus, nämlich dass erstens zahlreiche Adaptionen zur für FENNECS benötigten Darstellung von Knoten- und Elementkonnektivitätsdaten einschließlich Informationen zu den Randbedingungen erforderlich sind und es zweitens schwierig ist, mit existierenden Vernetzungswerkzeugen geometrische Besonderheiten von MMRs wie rotierende Steuerstabtrommeln in Verbindung mit den in FENNECS entwickelten Steuerstabmodellen zur translatorischen und rotatorischen Bewegung der Steuerstäbe zu behandeln. Entwicklung und Pflege eines eigenen Vernetzungswerkzeugs erwies sich daher als sinnvoller, da man so auf geometrische Besonderheiten in Zukunft leichter eingehen kann. Dies führte zum neuentwickelten, auf Python basierenden Softwarewerkzeug PEMTY, das erfolgreich getestet und eingesetzt wird.

10.4 Verifizierung und Validierung

Die Verifizierung und Validierung erfolgte anhand von Beispielen verschiedener Reaktorkonzepte, von SFR über den Mikroreaktor HPMR, einen LWR vom Typ WWER-1000 bis zu einem DWR westlicher Bauart. Darüber wurden in einem anderen Vorhaben (RS1589, INNOSYS-II) Validierungsrechnungen für den CEFR, Kernberechnungen für

den ESFR und gekoppelte stabzell-/unterkanal aufgelöste Kernausschnitte des CEFR einschließlich Transienten simuliert.

10.5 Verfolgung internationaler Trends in der Neutronenphysik unregelmäßiger Geometrien

Dieses Arbeitspaket wurde dazu genutzt, internationale Entwicklungstendenzen, die für dieses und künftige Vorhaben von Bedeutung sein können, in Erfahrung zu bringen. Dabei handelt es sich neben Simulationsansätzen und -methoden auch um Informationen zu Kernkonzepten und Benchmarks. Interessant sind beispielsweise un stetige (engl. Discontinuous) Galerkin-Verfahren für Finite-Elemente-Methode, oder sog. Gitterfreie Ansätze (engl. Mesh-free methods). Auch an Monte-Carlo-Verfahren für zeitabhängige Kernberechnungen – auch in Kopplung mit thermohydraulischen Modellen – wird international zunehmend geforscht, etwa in Form des Codes Serpent 2. Es ist davon auszugehen, dass mittel- bis langfristig die Monte-Carlo-Methode (u. a. aufgrund ihrer Fähigkeit zur exakten geometrischen Modellierung ohne Diskretisierung oder die Verwendung nuklearer Punktdaten einschließlich Kovarianzdaten anstelle problembezogener Wirkungsquerschnitte) als Referenz auch für transiente 3D-Kernberechnung an Bedeutung gewinnen wird.

10.6 Entwicklung und Verifikation der vereinfachten Transportmethode (Simplified P_3 , SP_3) in FENNECS

In diesem Arbeitspaket wurde in FENNECS die vereinfachte P_3 -Transportmethode (Simplified P_3 , SP_3) für stationäre 3D-Kernberechnungen implementiert und ersten Verifikationen unterzogen. Die Implementierung erfolgte in drei Schritten. Zunächst wurde die stationäre SP_3 -Näherung aus der eindimensionalen stationären Transportgleichung in Energiegruppendarstellung hergeleitet. Im zweiten Schritt wurden die Gleichungen in den Finite-Elemente-Methode-Formalismus umgeschrieben und die Ausdrücke für Randbedingungen hergeleitet. Abschließend wurde die stationäre SP_3 -Gleichung im Finite-Elemente-Methode-Formalismus in FENNECS implementiert. Die Arbeiten wurden von einer Nachwuchswissenschaftlerin der GRS durchgeführt, die eine Promotion an der TU München anstrebt.

Im Ergebnis bietet FENNECS neben der Diffusionslösung eine vereinfachte Transportmethode, die in besonderen Situationen, in denen die Diffusionsnäherung an ihre Gültigkeitsgrenzen stößt, eingesetzt werden kann.

Über die vorstehenden Themen hinausgehend wurden folgende zusätzliche Arbeiten durchgeführt:

- Implementierung der inversen Vektoriteration nach Wielandt,
- Implementierung der Error-Mode-Extrapolation,
- Extrapolation der Flussverteilung zum nächsten Zeitschritt und
- Entwicklung eines Postprozessors für FENNECS.

10.7 Erreichter Stand und weitere notwendige Schritte

Die durchgeführten und in diesem Bericht dokumentierten Arbeiten und Ergebnisse demonstrieren die Einsatzfähigkeit des aus FENNECS und PEMTY bestehenden Softwarepakets für Mikroreaktoren und verschiedene Reaktortypen und -konzepte anderer Bauart, insbesondere innovativer Systeme. Notwendige weitere Arbeiten betreffen u.a. die

- weitere Entwicklung und Verifikation der SP₃-Transportmethode von FENNECS, auch für Transientensimulationen,
- Implementierung weiterer Konvergenzbeschleunigungsverfahren in FENNECS,
- Weiterentwicklung des Vernetzungswerkzeugs PEMTY, u.a. um geometrische Besonderheiten der jeweils betrachteten MMRs zu berücksichtigen, sowie
- Verifizierung und Validierung.

Die genannten Themenfelder werden in einem Anschlussvorhaben bearbeitet.

Abbildungsverzeichnis

| | | |
|----------|---|----|
| Abb. 3.1 | Die verschiedenen Arten der Kopplung eines Kernmodells mit einem Thermohydraulikcode..... | 8 |
| Abb. 4.1 | Sägezahnartiger (<i>cusping</i>) relativer Leistungsverlauf bei Steuerstabbewegungen (rot, Volumengewichtung) anstelle des physikalisch korrekten Verlaufs (grün, Cuspingeffekt eliminiert) /SCH 19/..... | 14 |
| Abb. 4.2 | Axial teilweise kontrolliertes finites Element (links) und effektiver Wirkungsquerschnitt (rechts) /GON 11/ | 15 |
| Abb. 4.3 | Schema eines teilweise kontrollierten Elements. Die grüne Linie ist die durch die Steuerstabspitze definierte Grenzfläche zwischen Material 1 und 2..... | 16 |
| Abb. 4.4 | Multiplikationsfaktor als Funktion des Rotationswinkels einer Steuerstabtrommel (0° entspricht voll ausgefahren, 180° entspricht voll eingefahren)..... | 18 |
| Abb. 4.5 | Zeitverlauf der FENNECS-Leistungsdichte für den LMW-Benchmark im Vergleich zu einer mit TORT-TD berechneten S ₄ -Transportlösung | 20 |
| Abb. 5.1 | Beispiele für geometrische Grundformen von PEMTY für die Vernetzung verschiedener Reaktorkonzepte..... | 23 |
| Abb. 5.2 | Geometrische Details der Vernetzung einer drehbaren Steuerstabtrommel (links) mit PEMTY mit unterschiedlichem Detaillierungsgrad (Mitte und rechts)..... | 24 |
| Abb. 6.1 | Brennelementanordnung (oben) und axialer Aufbau (unten) des ASTRID-Kerns..... | 28 |
| Abb. 6.2 | Modell des ASTRID-Kerns in FENNECS. Die Farben stehen für unterschiedliche Materialien bzw. Wirkungsquerschnittsbibliotheken..... | 30 |
| Abb. 6.3 | Von FENNECS/ATHLET berechneter Leistungsverlauf (rote Linie) infolge einer vorübergehenden Anhebung der Kerneintrittstemperatur im Vergleich mit einer PARCS/ATHLET-Simulation (blaue Linie)..... | 31 |
| Abb. 6.4 | Leistungsdichteverteilung (in Einheiten von 100 W/cm ³) des stationären Zustands vor Beginn der Transiente am axialen Ort ihres Maximums | 32 |
| Abb. 6.5 | Brennstofftemperaturverteilung (in Einheiten von 1000 K) des stationären Zustands vor Beginn der Transiente am axialen Ort ihres Maximums | 32 |

| | | |
|-----------|---|----|
| Abb. 6.6 | Querschnitt durch den HPMR mit dem hexagonalen Brennstoff-/Heat-Pipe-Gitter und den sechs Steuerstabbrommeln..... | 33 |
| Abb. 6.7 | Vernetzung und Materialverteilung des HPMR in FENNECS, links für den Zustand ARO, rechts für ARI..... | 36 |
| Abb. 6.8 | Radiale Leistungsdichteverteilung 60 cm oberhalb der Kernunterkante..... | 37 |
| Abb. 6.9 | Prozentuale Abweichungen der von FENNECS berechneten radialen Leistungsverteilung gegenüber Serpent. Links: ARO, rechts: ARI..... | 38 |
| Abb. 6.10 | Kernbeladung des ersten Zyklus des X2-Benchmarks..... | 39 |
| Abb. 6.11 | Draufsicht des Serpent-Kernmodells des X2-Benchmarks mit dem radialen Reflektor (rot dargestellt)..... | 40 |
| Abb. 6.12 | Serpent-Modelle zur Wirkungsquerschnittserzeugung für den X2-Benchmark..... | 41 |
| Abb. 6.13 | Draufsicht auf das FENNECS-Modell des X2-Kerns (links) und die Steuerstabbankpositionen (rechts)..... | 42 |
| Abb. 6.14 | Relative Differenz der Brennelementleistungsverteilung zwischen FENNECS und SERPENT..... | 43 |
| Abb. 6.15 | Integrale (oben) und differentielle (unten) Wirksamkeit der Steuerstabbank 10..... | 46 |
| Abb. 6.16 | FENNECS-Modell (Materialverteilung) des BEAVRS-Benchmarks..... | 47 |
| Abb. 6.17 | Leistungsdichteverteilung des gekoppelten stationären Zustands am axialen Ort ihres Maximums..... | 48 |
| Abb. 6.18 | Brennstofftemperaturverteilung des gekoppelten stationären Zustands am axialen Ort ihres Maximums..... | 49 |
| Abb. 6.19 | Moderatordichteverteilung des gekoppelten stationären Zustands am Kernaustritt..... | 49 |
| Abb. 8.1 | Geometrie des Cartesischen Benchmarks aus /HÉB 10/ (CL: Spiegel-achse)..... | 65 |
| Abb. 8.2 | HELIOS-Modelle des UO ₂ - (links) und des MOX-Brennelements des C5G7-Benchmarks. Im MOX-Brennelement sind Stäbe mit 4,3 %, 7,0 % und 8,7 % Pu-Gehalt hellgrün, gelb bzw. dunkelgrün..... | 68 |
| Abb. 8.3 | Stabweise normierte Leistungsverteilung im UO ₂ -Brennelement aus HELIOS..... | 69 |

| | | |
|-----------|--|----|
| Abb. 8.4 | Stabweise normierte Leistungsverteilung im MOX-Brennelement aus HELIOS..... | 69 |
| Abb. 8.5 | Prozentuale Abweichung zwischen den stabweisen Leistungsverteilungen aus HELIOS und der TORT-TD-S ₄ -P ₃ -Transportlösung für das UO ₂ -Brennelement..... | 70 |
| Abb. 8.6 | Prozentuale Abweichung zwischen den stabweisen Leistungsverteilungen aus HELIOS und der TORT-TD-S ₄ -P ₃ -Transportlösung für das MOX-Brennelement..... | 71 |
| Abb. 8.7 | Prozentuale Abweichung zwischen den stabweisen Leistungsverteilungen aus HELIOS und FENNECS-Diffusion mit 4 radialen Elementen pro Stabzelle für das UO ₂ -Brennelement..... | 73 |
| Abb. 8.8 | Prozentuale Abweichung zwischen den stabweisen Leistungsverteilungen aus HELIOS und FENNECS-SP ₃ mit 4 radialen Elementen pro Stabzelle für das UO ₂ -Brennelement..... | 74 |
| Abb. 8.9 | Prozentuale Abweichung zwischen den stabweisen Leistungsverteilungen aus HELIOS und FENNECS Diffusion mit 16 radialen Elementen pro Stabzelle für das UO ₂ -Brennelement..... | 74 |
| Abb. 8.10 | Prozentuale Abweichung zwischen den stabweisen Leistungsverteilungen aus HELIOS und FENNECS SP ₃ mit 16 radialen Elementen pro Stabzelle für das UO ₂ -Brennelement..... | 75 |
| Abb. 8.11 | Prozentuale Abweichung zwischen den stabweisen Leistungsverteilungen aus HELIOS und FENNECS Diffusion mit 4 radialen Elementen pro Stabzelle für das MOX-Brennelement..... | 76 |
| Abb. 8.12 | Prozentuale Abweichung zwischen den stabweisen Leistungsverteilungen aus HELIOS und FENNECS SP ₃ mit 4 radialen Elementen pro Stabzelle für das MOX-Brennelement..... | 77 |
| Abb. 8.13 | Prozentuale Abweichung zwischen den stabweisen Leistungsverteilungen aus HELIOS und FENNECS Diffusion mit 16 radialen Elementen pro Stabzelle für das MOX-Brennelement..... | 77 |
| Abb. 8.14 | Prozentuale Abweichung zwischen den stabweisen Leistungsverteilungen aus HELIOS und FENNECS SP ₃ mit 16 radialen Elementen pro Stabzelle für das MOX-Brennelement..... | 78 |
| Abb. 9.1 | Beispiel des Postprozessors für eine Materialverteilung in hexagonaler Kernanordnung (Takeda-Testfall)..... | 87 |

Tabellenverzeichnis

| | | |
|----------|--|----|
| Tab. 6.1 | Rückwirkungsparameter und Stützstellen, nach denen die Wirkungsquerschnittsbibliotheken für ASTRID parametrisiert sind..... | 29 |
| Tab. 6.2 | Massendichten der verschiedenen Materialien, die für die Serpent-Simulationen verwendet wurden..... | 34 |
| Tab. 6.3 | Untere Grenzen der 12-Energie-Gruppenstruktur, die für die Wirkungsquerschnittserzeugung mit Serpent verwendet wurde..... | 35 |
| Tab. 6.4 | Mit Serpent für die ARO- und ARI-Konfigurationen erhaltene Multiplikationsfaktoren und Vergleich mit den Benchmark-Ergebnissen..... | 36 |
| Tab. 6.5 | Gemessene und berechnete Werte des isothermen Reaktivitätskoeffizienten. C_B ist die Borkonzentration..... | 44 |
| Tab. 6.6 | FENNECS-Ergebnisse für die Steuerstabwirksamkeiten (WQ = Wirkungsquerschnittsdatensatz der Steuerstäbe) | 44 |
| Tab. 6.7 | Rückwirkungsparameter und Stützstellen, nach denen die Wirkungsquerschnittsbibliotheken für BEAVRS parametrisiert sind. | 48 |
| Tab. 8.1 | Werte von $1_{\gamma he}$, $\beta 0, he$, $\beta 1, he$, $\alpha 0, he$ und $\alpha 1, he$ je nach Randbedingung | 62 |
| Tab. 8.2 | Effektive Multiplikationsfaktoren von FENNECS und TRIVAC und jeweilige Abweichungen von der Referenz..... | 67 |
| Tab. 8.3 | Effektiver Multiplikationsfaktor für das UO ₂ -Brennelement..... | 72 |
| Tab. 8.4 | Effektiver Multiplikationsfaktor für das MOX-Brennelement | 72 |
| Tab. 8.5 | RMS (%) und maximale Abweichung der stabweisen Leistungsverteilungen zwischen HELIOS und FENNECS für das UO ₂ - und das MOX-Brennelement..... | 73 |
| Tab. 9.1 | Untersuchte Testfälle | 84 |

Literaturverzeichnis

- /ANL 77/ Argonne National Laboratory (ANL): Argonne Code Center: Benchmark Problem Book, Computational Benchmark Problems Committee of the Mathematic and Computation Division of the American Nuclear Society. 7416. Aufl., 451 S., Juni 1977.
- /BIL 20/ Bilodid, Y., Fridman, E., Lötsch, T.: X2 VVER-1000 benchmark revision: Fresh HZP core state and the reference Monte Carlo solution. *Annals of Nuclear Energy*, Bd. 144, S. 107558, DOI 10.1016/j.anucene.2020.107558, 2020.
- /BOR 17/ Bortot, S., et al.: Evaluation of the ASTRID core safety coefficients, Preparing ESNII for HORIZON 2020 - FP7-Fission-2013. 2017.
- /BOU 19/ Bousquet, J., Seubert, A., Henry, R.: 3-D COUPLED PARCS/ATHLET TRANSIENT SIMULATION 3-D COUPLED PARCS/ATHLET TRANSIENT SIMULATION OF SFR USING DETAILED EXPANSION MODELING. In: *Proceedings of M&C 2019. International Conference on Mathematics Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering (M&C 2019)*, Portland, OR, USA, 25. - 29. August 2019, 2019.
- /BOU 20a/ Bousquet, J., Seubert, A., Henry, R.: New finite element neutron kinetics coupled code system FENNECS/ATHLET for safety assessment of (very) Small and Micro Reactors. *Journal of Physics: Conference Series*, Bd. 1689, S. 12008, DOI 10.1088/1742-6596/1689/1/012008, 2020.
- /BOU 20b/ Bousquet, J., Henry, R., Seubert, A.: 3-D TRANSIENT COUPLED SIMULATION OF SUPERPHENIX WITH PARCS/ATHLET. In: *Proceedings of PHYSOR 2020 - International Conference on the Physics of Reactors. Transition to a Scalable Nuclear Future*, Cambridge, United Kingdom, 01.01.2020 00:00:00 - 2020, 2020.
- /BOY 17/ Boyarinov, V., Fomichenko P., Hou, J., Ivanov, K. (Hrsg.): *Deterministic Time-Dependent Neutron Transport Benchmark without Spatial Homogenization (C5G7-TD) Volume II: Dynamics Phase*. OECD Nuclear Energy Agency (NEA), NEA/NSC/DOC(2017), 11 S., 2017.

- /BUR 18/ Burrone, M.: Study of eigenvalue formulations in the PN approximation of the neutron transport equation. Bd. 2018, 2018.
- /CAS 91/ Casal, J. J., Stamm'ler, R., Villarino, E. A., Ferri, A. A.: HELIOS: Geometric Capabilities of a New Fuel-assembly Program. Proc. Int. Topl. Mtg. Advances in Mathematics, Computations, and Reactor Physics, Vol. II, Sect. 10.2.1, pp. 1-13: Pittsburgh, PA, USA, 28. April 1991.
- /GON 11/ Gonzalez-Pintor, S., Verdu, G.: Correction of the Rod Cusping Effect for a High Order Finite Element Method. In: Proceedings of M&C 2011. International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering (M&C 2011), Rio de Janeiro, Brazil, 1. - Januar 0001, ISBN 978-85-63688-00-2, Mai 2011,
- /HÉB 06/ Hébert, A.: The Search for Superconvergence in Spherical Harmonics Approximations. Nuclear Science and Engineering, Bd. 154, Nr. 2, S. 134–173, DOI 10.13182/NSE06-A2623, 2006.
- /HÉB 10/ Hébert, A.: Mixed-dual implementations of the simplified method. Annals of Nuclear Energy, Bd. 37, Nr. 4, S. 498–511, DOI 10.1016/j.anucene.2010.01.006, 2010.
- /HEN 21/ Henry, R., Seubert, A., Bousquet, J.: Analysis of the X2 VVER-1000 benchmark with FENNECS. In: 30th International Conference Nuclear Energy for New Europe (NENE 2021). Bled, Slovenia, 6. - 9. September 2021, 2021.
- /HOR 18a/ Horelik, N., Herman, B., Kumar, S., Liang, J., Forget, B., Smith, K.: Benchmark for Evaluation And Validation of Reactor Simulations (BEAVRS). MIT Computational Reactor Physics Group, 177 S., 2018.
- /HOR 18b/ Horelik, N., Herman, B., Ellis, M., Kumar, S., Liang, J., Forget, B., Smith, K.: Benchmark for Evaluation And Validation of Reactor Simulations (BEAVRS), Release rev. 2.0.2. 177 S., 2018.
- /HU 19/ Hu, G., Hu, R., Kelly, J. M., Ortensi, J.: Multi-Physics Simulations of Heat Pipe Micro Reactor. Argonne National Laboratory (ANL), September 2019.

- /JAI 15/ Jain, R., Tautges, T.: RGG: Reactor Geometry (and Mesh) Generator. In: Wolff, J. (Hrsg.): An Introduction to Political Philosophy. ISBN 9780199658015, DOI 10.1093/hepl/9780199658015.003.0001, Oxford University Press, 2015.
- /LAN 77/ Langenbuch, S., Maurer, W., Werner, W.: Coarse-Mesh Flux-Expansion Method for the Analysis of Space-Time Effects in Large Light Water Reactor Cores. Nuclear Science and Engineering, Bd. 63, Nr. 4, S. 437–456, DOI 10.13182/NSE77-A27061, 1977.
- /LAN 97/ Langenbuch, S., Velkov, K., Lizorkin, M.: 3D neutronic codes coupled with thermal-hydraulic system codes for PWR, and BWR and VVER reactors. In: Ebert, D. (Hrsg.): Proceedings of the OECD/CSNI workshop on transient thermal-hydraulic and neutronic codes requirements. S. 506–524, 1997.
- /LAP 17/ Laptop, P.: NETS-2017-Proceedings. In: NETS 2017. Nuclear and Emerging Technologies for Space, Orlando, Florida, 27. - Februar 2017, 2017.
- /LEW 84/ Lewis, E. E., Miller, W. F.: Computational methods of neutron transport, E. E. Lewis, W. F. Miller, Jr. 401 S., ISBN 0471092452, Wiley: New York, 1984.
- /LEW 93/ Lewis, E. E., Miller, W. F.: Computational Methods of Neutron Transport. American Nuclear Society: La Grange Park, Illinois, USA, 1993.
- /LIU 05/ Liu, G. R., Gu, Y. T.: An Introduction to Meshfree Methods and Their Programming. 1. Aufl., Springer-Verlag: Dordrecht, 2005.
- /MCC 20/ McClure, P.: Foreword Special issue on the Kilopower Project, Kilowatt Reactor Using Stirling Technology (KRUSTY) Test. Nuclear Technology, Bd. 206, sup1, S. 3, DOI 10.1080/00295450.2020.1737486, 2020.
- /MIK 17/ Mikityuk, K.: ESFR-SMART: new Horizon-2020 project on SFR safety, International conference on fast reactors (FR17). 2017.

- /PAU 12/ Pautz, A., Perin, Y., Pasichnyk, I., Velkov, K., Zwermann, W.: GRS-A-3661, Abschlussbericht RS 1183, GRS-A-3661. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, 171 S., Mai 2012.
- /POS 16/ Poston, D. I.: KRUSTY Design and Modeling. Los Alamos National Laboratory (LANL), 210 S., November 2016.
- /SCH 19/ Schunert, S., Wang, Y., Ortensi, J., Laboure, V., Gleicher, F., DeHart, M., Martineau, R.: Control rod treatment for FEM based radiation transport methods. *Annals of Nuclear Energy*, Bd. 127, S. 293–302, DOI 10.1016/j.anucene.2018.11.054, 2019.
- /SEU 08/ Seubert, A., Velkov, K., Langenbuch, S.: The time-dependent 3D discrete ordinates code TORT-TD with thermal-hydraulic feedback by ATHLET models. Nr. International Conference on the Physics of Reactors “Nuclear Power: A Sustainable Resource”, Casino-Kursaal Conference Center, Interlaken, Switzerland, September 14-19, 2008, 2008.
- /SEU 14/ Seubert, A., Velkov, K.: Stand-alone Neutronic Solutions of the OECD/NEA MHTGR-350 MW Core Design Benchmark. In: Jahrestagung Kerntechnik. Frankfurt am Main, 6. - 8. Mai 2014, Mai 6-8, 2014.
- /SEU 20/ Seubert, A.: A 3-D finite element few-group diffusion code and its application to generation IV reactor concepts. In: Proceedings of PHYSOR 2020 - International Conference on the Physics of Reactors. Transition to a Scalable Nuclear Future, Cambridge, United Kingdom, 01.01.2020 00:00:00 - 2020, 2020.
- /SEU 22/ Seubert, A.: Simulation of CEFR Neutronic Start-up Tests with FENNECS. In: Proceedings of PHYSOR 2022. International Conference on Physics of Reactors 2022 (PHYSOR 2022), Pittsburgh, PA (USA), 15. - 20. Mai 2022, Mai 2022.
- /STA 07/ Stacey, W. M.: Nuclear reactor physics. 2. Aufl., 706 S., ISBN 9783527406791, DOI 10.1002/978-3-527-61104-1, Wiley-VCH: Weinheim, 2007.

- /STA 21/ Stauff, N. E., Lee, C. H., Shriwise, P., Wells, A., Filippone, C.: NEUTRONIC BENCHMARK ON HOLOS-QUAD MICRO-REACTOR CONCEPT. In: PHYSOR 2020, Transition to a Scalable Nuclear Future. Cambridge, United Kingdom, Bd. 247, S. 1006, DOI 10.1051/epjconf/202124701006, 2020.
- /SUT 88/ Sutton, T. M.: Wielandt Iteration as Applied to the Nodal Expansion Method. Bd. 98, S. 169–173, DOI 10.13182/NSE88-1, 1988.
- /TOM 76/ Tomlinson, E. T., Robinson, J. C., Vondy, D. R.: Iterative Solution of the Diffusion and P1 Finite Element Equations. Oak Ridge National Laboratory, 104 S.: Oak Ridge, Tennessee, USA, Februar 1976.
- /VAR 12/ Varaine, F.: Pre conceptual design study of ASTRID core. In: International Congress on Advances in Nuclear Power Plants. Chicago, USA, 24. - 28. Juni 2012, 2012.
- /WAH 17/ Wahide, C.: Preparing ESNII for HORIZON 2020 (ESNII+), Project proposal. 2017.
- /WAL 12/ Waltar, A. E., Todd, D. R., Tsvetkov, P. V. (Hrsg.): Fast Spectrum Reactors. ISBN 78-1-4419-9571-1, Springer-Verlag: New York, Dordrecht, Heidelberg, London, 2012.
- /WAN 20/ Wang, C., Sun, H., Tang, S., Tian, W., Qiu, S., Su, G.: Thermal-hydraulic analysis of a new conceptual heat pipe cooled small nuclear reactor system. Nuclear Engineering and Technology, Bd. 52, Nr. 1, S. 19–26, DOI 10.1016/j.net.2019.06.021, 2020.
- /WIE 19/ Wielenberg, A., Lovasz, L., Pandazis, P., Papukchiev, A., Tiborcz, L., Schöffel, P. J., Spengler, C., Sonnenkalb, M., Schaffrath, A.: Recent improvements in the system code package AC2 2019 for the safety analysis of nuclear reactors. Nuclear Engineering and Design, Nr. 354, DOI 10.1016/j.nucengdes.2019.110211, 2019.

A Anhang

A.1 Veröffentlichungen

Im Rahmen des Vorhabens RS 1576 entstanden folgende Veröffentlichungen bzw. Präsentationen für Konferenzen, in Fachzeitschriften und für Fachgespräche:

A. Seubert, *A 3-d Finite Element Few-group Diffusion Code and its Application to Generation IV Reactor Concepts*, PHYSOR 2020, Cambridge, United Kingdom, March 29th-April 2nd, 2020.

J. Bousquet, A. Seubert, R. Henry, *New finite element neutron kinetics coupled code system FENNECS/ATHLET for safety assessment of (very) Small and Micro Reactors*, Journal of Physics: Conference Series 1689 (2020) 012008, doi:10.1088/1742-6596/1689/1/012008.

A. Schaffrath, A. Wielenberg, R. Kilger, A. Seubert, *SMRs – Overview, International Developments, Safety Features and the GRS Simulation Chain*, Front. Energy 15, 793–809 (2021), <https://doi.org/10.1007/s11708-021-0751-2>.

R. Henry, A. Seubert, J. Bousquet, *Analysis of the X2 VVER-1000 benchmark with FENNECS*, International Conference Nuclear Energy for New Europe (NENE), Bled, Slowenien, September 6-9, 2021.

A. Seubert, J. Bousquet, R. Henry, *Recent Advances of the FENNECS NeutroniCS Code for Safety Assessment of (v)SMR, Generation IV and other Innovative Concepts*, ANS M&C 2021 – The International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering, Raleigh, North Carolina, October 3–7, 2021.

J. Bousquet, R. Henry, A. Seubert, *New Finite Element Neutron Kinetics Code System FENNECS/ATHLET for COUPLED Safety Assessment of (Very) Small and Micro Reactors*, International Conference on Fast Reactors and Related Fuel Cycles (FR 22), April 9–22, 2022, Vienna, Austria.

A. Seubert, *Advanced Coupled Code Systems TORT-TD/ATTICA3D, TORT-TD/ATHLET and FENNECS/ATHLET for the Safety Assessment of Pebble-bed and Prismatic HTGRs*, IAEA Technical Meeting on the Safety of High Temperature Gas Cooled Reactors and Molten Salt Reactors (EVT203061), May 9–13, 2022, IAEA Headquarters, Vienna, Austria, and virtual participation.

S. Io Muzio, A. Seubert, L. Guo, *Simulation of CEFR Neutronic Start-up Tests with FENNECS and Coupled Pin-by-pin Model of a CEFR Subassembly*, Kerntechnik 2022, June 21-22, Leipzig.

S. Io Muzio, A. Seubert, *Implementation and validation of the steady-state SP_3 -approximation in the FENNECS code*, International Conference Nuclear Energy for New Europe (NENE), Portorož, Slovenien, September 12-15, 2022 (Abstract submitted).

A. Seubert, J. Bousquet, R. Henry, S. Io Muzio, *The Finite Element Neutronics Code FENNECS for the Safety Assessment of SMRs, Micro Reactors and other Innovative Concepts*, International Conference on Topical Issues in Nuclear Installation Safety: Strengthening Safety of Evolutionary and Innovative Reactor Designs (TIC-2022), IAEA Headquarters Vienna, Austria, October 18–21, 2022.

A.2 Glossar

| | |
|------------|--|
| ARI | All Rods In |
| ARO | All Rods Out |
| ASTRID | Advanced Sodium Technological Reactor for Industrial Demonstration |
| ATHLET | Analyse der THERmohydraulik von LEcks und Transienten |
| BWR | Boiling Water -cooled Reactor |
| COBRA-TF | Coolant Boiling in Rod Arrays – Two Fluids |
| CTF | Weiterentwickelte und modernisierte Version von COBRA-TF |
| ESFR-SMART | European Sodium Fast Reactor Safety Measures Assessment and Research Tools |
| FENNECS | Finite ElemeNt NEutroniCS code |
| HPMR | Heat Pipe-cooled Micro Reactor |
| HFP | Hot Full Power |
| HZP | Hot Zero Power |
| LMW | Langenbuch Maurer Werner |
| LWR | Ligh Water-cooled Reactor |
| PARCS | Purdue Advanced Reactor Core Simulator |
| PEMTY | Python External Meshing Tool with Yaml input |
| PWR | Pressurized Water-cooled Reactor |
| RMS | Root Mean Square |
| SFR | Sodium-cooled Fast neutron spectrum Reactor |
| SPH | Super homogenisation method |
| WWER | Wasser-Wasser-Energie-Reaktor |

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

Schwertnergasse 1
50667 Köln

Telefon +49 221 2068-0

Telefax +49 221 2068-888

Boltzmannstraße 14

85748 Garching b. München

Telefon +49 89 32004-0

Telefax +49 89 32004-300

Kurfürstendamm 200

10719 Berlin

Telefon +49 30 88589-0

Telefax +49 30 88589-111

Theodor-Heuss-Straße 4

38122 Braunschweig

Telefon +49 531 8012-0

Telefax +49 531 8012-200

www.grs.de