

MOMENTUS

**Moderne Methoden zu
Neutronentransport und
Unsicherheits- und
Sensitivitätsanalysen**

MOMENTUS

Moderne Methoden zu Neutronentransport und Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen

Alexander Aures
Matthias Behler
Nadine Berner
Jérémy Bousquet
Thomas Eisenstecken
Volker Hannstein
Romain Henry
Robert Kilger
Matthias Küntzel
Yann Périn
Kiril Velkov
Matías Zilly
Winfried Zwermann

Juni 2021

Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrunde liegende Forschungsvorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie (BMWi) unter dem Förderkennzeichen RS1564 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 BMWi übereinstimmen.

Deskriptoren

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

Kurzfassung

Dieser Bericht dokumentiert die im Forschungsvorhaben RS1564 „MOMENTUS – Moderne Methoden zu Neutronentransport und Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen“ durchgeführten Arbeiten und erreichten Forschungs- und Entwicklungsziele. Das übergeordnete Ziel dieses Vorhabens ist die Neu- und Weiterentwicklung, Validierung und Anwendung von stochastischen und deterministischen Rechenprogrammen zum stationären und zeitabhängigen NeutronenTransport sowie von Methoden zu Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen für Reaktorkernberechnungen. Diese Rechenverfahren werden für Fragestellungen zu Leichtwasserreaktoren und innovativen Reaktorkonzepten, dabei insbesondere von schnellen flüssigmetallgekühlten Reaktoren, eingesetzt.

Der GRS-eigene Kernsimulator KMACS ist für die Ermittlung von sicherheitsrelevanten Ergebnisgrößen auf Stabebene bei Reaktorkernberechnungen von Druckwasserreaktoren ertüchtigt worden. Zudem wurde der Anwendungsbereich von KMACS auf Reaktoren mit hexagonaler Kerngeometrie erweitert, um z. B. für russische WWER-Reaktoren, einen im Ausland weit verbreiteten Reaktortyp, Aussagen treffen zu können.

Zur Beschreibung des zeitabhängigen Reaktorkernverhaltens wurde ein gekoppeltes Berechnungssystem bestehend aus einem Neutronenkinetik-/Thermohydraulik-Codesystem und einem Monte Carlo-NeutronenTransportcode weiterentwickelt, um während der zeitabhängigen Rechnung homogenisierte Wirkungsquerschnitte aus der dreidimensionalen Monte-Carlo-Ganzkernrechnung abzuleiten und daraus neue Wirkungsquerschnittsbibliotheken für den Neutronenkinetikcode erstellen zu können. Das Verfahren ist anhand einer Steuerstabverfahrtransiente erprobt worden. Dieser Entwicklung gingen erfolgreiche Nachrechnungen von SPERT III Reaktivitätsexperimenten voraus, um das gekoppelte Codesystem DYN3D-ATHLET bei Verwendung von konventionell erzeugten Wirkungsquerschnitten mit dem Monte-Carlo-Code Serpent zu erproben.

Systematische Unsicherheitsanalysen für die nukleare Berechnungssequenz für schnelle Reaktorsysteme wurden im Rahmen einer Beteiligung an einer internationalen OECD/NEA-Benchmark durchgeführt. Unter Verwendung von stichprobenbasierten Methoden (XSUSA, SAMPLER) und Methoden basierend auf der Störungstheorie (TSUNAMI-2D) wurden Unsicherheiten von reaktorphysikalischen Ergebnisgrößen von Stabzell-, Brennelement- und Superzellmodellen mit metallischem sowie oxidischem Brennstoff ermittelt.

Im Arbeitsfeld der Sensitivitätsanalysen wurde ein Verfahren basierend auf der linearen Regressionsanalyse entwickelt, mit dem aus Ergebnissen von stichprobenbasierten Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen Sensitivitätsmaße ermittelt werden können, die hinsichtlich ihrer Interpretierbarkeit vergleichbar zu den Sensitivitätsmaßen aus der deterministischen linearen Störungstheorie sind. Die Anwendung des Verfahrens wurde bei der Ermittlung von Ergebnisunsicherheiten von kinetischen Parametern demonstriert.

Die GRS-eigene XSUSA-Methodik für stichprobenbasierte Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen wurde um die Behandlung impliziter Effekte mittels eines störungstheoretischen Ansatzes erweitert, sodass der Einfluss der Resonanzselbstabschirmungsrechnung auf die Ergebnisunsicherheiten erfasst werden kann.

Die HELIOS-2/XSUSA-Berechnungssequenz wurde hinsichtlich der Verwendung von SCALE-6.2-Kovarianzdaten aktualisiert. Für das C5G7-TD-Benchmark der OECD/NEA wurden nominale und variierte 7-Gruppen-Wirkungsquerschnittsbibliotheken für mehrere Brennstofftemperaturen erstellt, um sowohl nominale Transientensimulationen wie auch stichprobenbasierte Unsicherheitsanalysen für die Transientensimulationen durchführen zu können.

Die nuklearen Berechnungsmethoden und Wirkungsquerschnittsdaten der GRS wurden hinsichtlich ihrer Eignung für neutronenphysikalische Untersuchungen von *Accident Tolerant Fuel* überprüft. Für verschiedene *Accident Tolerant Fuel* Konzepte wurden Kritikalitätsrechnungen mit den Berechnungssequenzen aus SCALE 6.2.3 vorgenommen; Abbrand- und Aktivierungsrechnungen erfolgten ebenfalls mit SCALE 6.2.3 und mit dem GRS-eigenen Inventarberechnungsprogramm MoTive. Mit dem GRS-Kernsimulator KMACS wurden Zyklusrechnungen für einen Druckwasserreaktorkern mit einer teilweisen Beladung mit ausgewählten *Accident Tolerant Fuel* Brennelementen durchgeführt. Wo möglich erfolgten vergleichende Referenzrechnungen mit dem Monte Carlo-Code Serpent unter Verwendung von kontinuierlichen Wirkungsquerschnittsdaten.

Abstract

This report documents the work performed and the research and development goals achieved in the research project RS1564 “MOMENTUS – Modern Methods of Neutron Transport and Uncertainty and Sensitivity Analysis“. The overall objective of this project is the development, enhancement, validation, and application of stochastic and deterministic methods for steady-state and time-dependent neutron Transport as well as of uncertainty and sensitivity analysis methods for reactor core calculations. These methods are applied to questions related to the core behaviour of light water reactors and innovative reactor concepts, in particular liquid metal cooled reactors.

The applicability of the GRS core simulator KMACS has been enhanced by the possibility to determine safety-relevant parameters on the fuel pin level in simulations of pressurised water reactors. Moreover, the applicability of KMACS was extended by the ability to calculate reactors featuring hexagonal core geometries, e. g. Russian VVERs, a reactor type widely used abroad.

For the simulation of time-dependent reactor core behaviour, the coupling between a neutron-kinetic/thermal-hydraulic code system and a Monte Carlo neutron Transport code was developed further. During the transient calculation, homogenised cross sections are determined by a three-dimensional full-core Monte Carlo calculation. These cross sections are then used to form new libraries for the neutron-kinetic code. The procedure was tested on a control rod withdrawal transient. This study was preceded by successful calculations of SPERT III reactivity accident tests to assess the performance of the coupled code system DYN3D-ATHLET when using conventionally calculated cross sections, produced by the Monte Carlo code Serpent.

Systematic uncertainty and sensitivity analyses with respect to the nuclear calculation sequence for fast reactor systems were performed within the framework of participation in an international OECD/NEA benchmark. Using sampling-based methods (XSUSA, SAMPLER) and methods based on perturbation theory (TSUNAMI-2D), result uncertainties were determined in reactor physics calculations of pin cell, fuel assembly and super-cell models with metallic as well as oxide fuel.

In the field of sensitivity analysis, a method based on linear regression was outlined with which can determine sensitivity measures from the results of sampling-based uncertainty analyses. These sensitivity measures are directly comparable to the results of

deterministic linear perturbation theory. The application of the method was demonstrated in the determination of result uncertainties of kinetic parameters.

The XSUSA method for sampling-based uncertainty and sensitivity analysis developed by GRS was extended for the treatment of implicit effects using a perturbation theory-based approach, so that the influence of the resonance self-shielding on the result uncertainties is taken into account.

The HELIOS-2/XSUSA calculation sequence was extended by covariance data of SCALE 6.2. For the OECD/NEA C5G7-TD benchmark, nominal and varied 7-group cross section libraries were determined for several fuel temperatures in order to be able to perform both nominal transient calculations and sampling-based uncertainty analyses of the transient simulations.

The nuclear calculational methods and cross section data used by GRS were tested regarding their applicability to the neutron physics-related analysis of *Accident Tolerant Fuel*. Criticality calculations using the tools of SCALE 6.2.3 were performed for various *Accident Tolerant Fuel* concepts. Depletion and activation calculations were done with SCALE 6.2.3 and the GRS nuclide inventory code MoTive. The GRS core simulator KMACS was applied for cycle calculations of a pressurised water reactor partially loaded with fuel assemblies composed of *Accident Tolerant Fuel* materials. Where possible, reference calculations were performed using the Monte Carlo code Serpent with continuous-energy cross section data for comparison.

Inhaltsverzeichnis

	Kurzfassung.....	I
	Abstract.....	III
1	Einleitung	1
2	Zielsetzung.....	3
2.1	Gesamtziel.....	3
2.2	Weiterentwicklung des GRS-Kernsimulators KMACS	4
2.3	Beschreibung des Reaktorkernverhaltens mit der Monte-Carlo- Methode	5
2.4	Weiterentwicklung, Validierung und Anwendung von Methoden zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse.....	6
2.5	Überprüfung der Eignung der nuklearen Berechnungsmethoden der GRS für <i>Accident Tolerant Fuel</i>	7
3	AP 1: Weiterentwicklung des GRS-Kernsimulators KMACS	9
3.1	Umstellung des KMACS Quellcodes von Python 2.7 zu Python 3.8.....	9
3.2	Weiterentwicklung von KMACS für Druckwasserreaktoren	10
3.2.1	Ermittlung der Stableistungsverteilung für DWR	10
3.2.2	Einsatz von DYN3D in KMACS für DWR Zyklusrechnungen	17
3.2.3	Implementierung der Berechnung von stabweisen Abbranddaten in KMACS.....	19
3.2.4	Ermittlung DNB-Verhältnis mit COBRA-TF	27
3.2.5	Erprobung von KMACS zur Ermittlung von Parametern aus Anfahrttests	31
3.3	Weiterentwicklung von KMACS für Reaktoren mit hexagonaler Geometrie.....	35
3.3.1	Weiterentwicklungen von KMACS zur Beschreibung hexagonaler Reaktoren.....	35

3.3.2	Verifikation und Validierung der Weiterentwicklung von KMACS für die Beschreibung hexagonaler Reaktoren	40
4	AP 2: Beschreibung des Reaktorkernverhaltens mit der Monte-Carlo Methode.....	51
4.1	Erprobung der Rechenkette Serpent/DYN3D-ATHLET anhand der SPERT III Reaktivitätsexperimente	51
4.2	Erprobung von Wirkungsquerschnitten aus Monte-Carlo-Ganzkern-Rechnungen in nodalen Diffusionsrechnungen.....	62
4.3	Weiterentwicklung der Hybridmethode zur Beschreibung von Reaktortransienten mit der Monte-Carlo-Methode	65
4.4	Anwendung der Hybridmethode zur Simulation von Reaktortransienten..	69
5	AP 3: Weiterentwicklung, Validierung und Anwendung von Methoden zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse.....	73
5.1	Beteiligung am UAM-SFR-Benchmark.....	73
5.2	Beteiligung am C5G7-TD-Benchmark.....	81
5.3	Erweiterung von XSUSA für Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen mit linearer Regression.....	87
5.4	Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen für den Anteil verzögerter Neutronen.....	106
5.5	Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen mit HELIOS-2/XSUSA und Kovarianzdaten aus SCALE 6.2.....	124
5.6	Behandlung impliziter Effekte.....	133
5.7	Unsicherheitsanalysen zu Reaktortransienten	143
6	AP 4: Überprüfung der nuklearen Berechnungskette im Hinblick auf <i>Accident Tolerant Fuels</i>.....	147
6.1	Einführung	147
6.2	Vergleichende Analysen ausgewählter ATF-Konzepte gegenüber dem Standardsystem.....	149
6.2.1	Vorbereitende Arbeiten zur Sondierung	149
6.2.2	Betrachtete generische ATF-Modellsysteme.....	153
6.2.3	Eingesetzte Berechnungsverfahren	156

6.2.4	Ergebnisse des Brennstab- und Brennelementmodells.....	158
6.2.5	Kritische Benchmark-Experimente.....	160
6.2.6	Erzeugung von Wirkungsquerschnitten in zwei Energiegruppen.....	162
6.2.7	Nuklidinventar-Berechnungen.....	164
6.2.8	GRS-Kernsimulator KMACS	181
6.3	Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen für ATF-Systeme mit doppelter Heterogenität	188
7	Zusammenfassung	195
7.1	Weiterentwicklung des GRS-Kernsimulators KMACS	195
7.2	Beschreibung des Reaktorkernverhaltens mit der Monte-Carlo- Methode	198
7.3	Weiterentwicklung, Validierung und Anwendung von Methoden zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse.....	200
7.4	Überprüfung der nuklearen Berechnungskette im Hinblick auf <i>Accident Tolerant Fuels</i>	204
	Literaturverzeichnis.....	207
	Abbildungsverzeichnis.....	219
	Tabellenverzeichnis.....	229
A	Veröffentlichungen	233

1 Einleitung

Mit der 13. Novelle des Atomgesetzes wurde festgelegt, dass alle Kernkraftwerke in Deutschland schrittweise bis zum Jahr 2022 stillzulegen sind. Bis zu diesem Zeitpunkt muss für die am Netz befindlichen KKW ein sicherer Betrieb gewährleistet sein. Dies soll durch die Einhaltung höchster Sicherheitsansprüche gemäß dem nach AtG §7c fortschreitenden Stand von Wissenschaft und Technik erfolgen. Themen, die hierfür von Bedeutung sind, wurden u. a. in dem Evaluierungsbericht *Nukleare Sicherheitsforschung – Neuorientierung an aktuellen energiepolitischen Rahmenbedingungen* des Kompetenzverbund Kerntechnik (KVKT) in Abstimmung mit den betreffenden Bundesressorts /KVKT 13/ beschrieben. Darüber hinaus ist es in Deutschland politisch gewünscht und im Koalitionsvertrag 2018 festgelegt, dass das Fachwissen in der Kerntechnik zur internationalen Einflussnahme in Sicherheitsfragen auch über das Jahr 2022 hinaus erhalten und erweitert werden soll.

Im vorliegenden Bericht zum Vorhaben RS1564 werden Arbeiten dargestellt, die zur Weiterentwicklung des Standes von Wissenschaft und Technik beitragen. Aufgrund langjähriger Entwicklungsarbeit und Anwendungserfahrung verfügt die GRS über ein umfangreiches Rechenprogrammsystem, mit dem u. a. Reaktorkernberechnungen von Leichtwasserreaktoren nach Industriestandard (Vorausberechnung homogenisierter Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsdaten der Brennelemente und quasistationäre Betriebszyklusrechnung) durchgeführt werden können. Weiterhin werden Rechenprogramme eingesetzt, die den NeutronenTransport mit hoher räumlicher und hoher energetischer Auflösung simulieren. Dazu gehören NeutronenTransportprogramme basierend auf deterministischen Methoden oder auf der stochastischen Monte-Carlo-Methode. Darüber hinaus stehen Programme und Methoden zur Verfügung, mit denen Ergebnisunsicherheiten in reaktorphysikalischen Berechnungen ermittelt werden können. Ferner lassen sich mittels Sensitivitätsanalysen die wichtigsten Hauptbeiträge zur Ergebnisunsicherheit identifizieren. Die eingesetzten Methoden werden kontinuierlich verbessert, um die Aussagegenauigkeit der Simulationsrechnungen zu erhöhen.

In der Vergangenheit war die Anwendungserfahrung hauptsächlich auf (thermische) Leichtwasserreaktoren fokussiert. Im Prinzip sind die genannten Methoden auch für Reaktortypen der Generation IV /GIF 18/ einsetzbar. Dabei ist, aufgrund der im Vergleich zu Leichtwasserreaktoren deutlich geringeren Betriebserfahrung, eine systematische quantitative Ermittlung der Ergebnisunsicherheiten unerlässlich. Die durchgeführten Arbeiten des Vorhabens RS1564 werden im Folgenden ausführlich beschrieben.

2 Zielsetzung

Im Folgenden werden die grundlegenden Fragestellungen zur Beschreibung des Kernverhaltens von Leichtwasserreaktoren mit deterministischen und stochastischen NeutronenTransportmethoden, Erweiterung der Methoden auf Reaktortypen der Generation IV, Entwicklung und Anwendung der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysemethoden durch die Formulierung von Einzelzielsetzungen für das Vorhaben RS1564 präzisiert.

2.1 Gesamtziel

Im Vorhaben RS1564 werden ausgewählte Themenschwerpunkte des Evaluierungsberichts *Nukleare Sicherheitsforschung – Neuorientierung an aktuellen energiepolitischen Rahmenbedingungen /KVKT 13/* adressiert. Diese sind im Detail:

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

Dazu erfolgen Neu- und Weiterentwicklungen, Validierungen und Anwendungen von deterministischen und stochastischen Rechenprogrammen und von Methoden zu Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen. Die Arbeiten, die z. T. auf den Ergebnissen des BMWi-Forschungsvorhabens RS1536 /ZWE 18/ sowie des BMUB-Forschungsvorhabens 4715R01344 /ZIL 18a/ aufbauen, sind die

- Weiterentwicklung des GRS-Kernsimulators KMACS,
- Weiterentwicklung und Anwendung eines gekoppelten Berechnungssystems unter Verwendung der Monte-Carlo-Methode für den NeutronenTransport zur Beschreibung zeitabhängiger Reaktorkernzustände,
- Weiterentwicklung, Validierung und Anwendung von Methoden zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse und die damit verbundene Verarbeitung und Validierung nuklearer Daten und deren Kovarianzdaten,

- Überprüfung der Eignung der nuklearen Berechnungsmethoden der GRS für sog. *Accident Tolerant Fuel*.

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

2.2 Weiterentwicklung des GRS-Kernsimulators KMACS

Reaktorkerne werden vor allem unter Aspekten der (Neutronen)-Ökonomie optimiert. Zunehmend spielen aber auch andere Aspekte eine Rolle, wie z. B. die Eindämmung von Brennelementverbiegungen. Mit der Optimierung geht eine zunehmend heterogene Kernbeladung einher, die eine umfassende dreidimensionale Beschreibung der neutronenphysikalischen Prozesse erforderlich macht. Des Weiteren werden deterministische Berechnungsmethoden bei der GRS verwendet, um das für Quelltermberechnungen relevante Nuklidinventar zu bestimmen bzw. bestrahlte Kernbrennstoffe zu charakterisieren. Dies führt zu zuverlässiger Kenntnis der Inventare bei Transport, Zwischen- und Endlagerung.

Um die für Sicherheitsanalysen von Kernreaktoren entwickelten und validierten Programme der GRS-Rechenkette auf Leistungsreaktoren zur Simulation von Betriebszuständen, Transienten oder Störfällen anwenden zu können, ist die Kenntnis des aktuellen Kernzustands, charakterisiert durch das brennstabweise ortsaufgelöste Nuklidinventar, erforderlich. Dieser Kernzustand lässt sich ausgehend von der Betriebsgeschichte mit einem sogenannten Kernsimulator errechnen. Durch Bündelung bereits in der GRS vorhandener Rechenprogramme hat die GRS den Kernsimulator KMACS /ZIL 18a/, /ZIL 18b/ entwickelt und für die Anwendung auf Druckwasserreaktoren westlicher Bauart validiert.

Der Kernsimulator dient der quasistationären Simulation von Betriebszyklen. Ausgehend von einem Gesamt-Eingabedatensatz, d. h. der geometrischen Beschreibung sämtlicher Brennelemente, deren jeweilige Materialzusammensetzungen und dem Kernbeladepplan, erzeugt KMACS für den ausgewählten Spektralcode Eingabedatensätze für alle eingesetzten Brennelementtypen und die zu berücksichtigenden thermohydraulischen Betriebsbedingungen. Daraufhin werden die einzelnen Läufe des Spektralcodes durchgeführt, die jeweiligen Ergebnisdateien ausgelesen und in die zentrale KMACS-

Datenbank gespeichert. Nach Abschluss dieser Wirkungsquerschnittserzeugung erfolgt die quasistationäre Betriebszyklusrechnung durch Ganzkern-Fluss/Thermohydraulik-Rechnungen abwechselnd mit Abbrandrechnungen, deren Ansteuerung auch jeweils durch KMACS geschieht. Die Ortsauflösung der Ergebnisgrößen in KMACS entspricht dem Rechengitter des nodalen Ganzkern-Flusslösers, d. h. Abbrand und Nuklidinventar sind Mittelwerte in Quadern, sog. Knoten, deren Kantenlänge der Breite eines Brennelements entspricht.

Wesentliche Akzeptanzkriterien für den sicheren Reaktorbetrieb beziehen sich nicht auf nodale sondern auf brennstab aufgelöste Größen, z. B. die maximale lokale Stabileistung, das minimale DNB-Verhältnis oder der maximale lokale Brennstababbrand. Daher wurde in diesem Arbeitspaket KMACS dahingehend weiterentwickelt, brennstab aufgelöste Ergebnisgrößen nach Stand von Wissenschaft und Technik zu ermitteln.

Durch Weiterentwicklungen in KMACS sowie in den Schnittstellen zum Code DYN3D /ROH 16/ wurde KMACS für die Anwendung auf hexagonale Brennelement- und Kerngeometrien, d. h. z. B. auf WWER-1000 ertüchtigt, um somit auch für diesen im Ausland weit verbreiteten Reaktortyp Aussagen treffen zu können.

2.3 Beschreibung des Reaktorkernverhaltens mit der Monte-Carlo-Methode

Nachweisverfahren für die Beherrschbarkeit von transienten Betriebszuständen, Stör- und Unfällen erfordern die Beschreibung von dynamischen Vorgängen in einem Reaktorkern. Dies erfordert die zeit- und ortsabhängige Modellierung sowohl der neutronenphysikalischen als auch der thermohydraulischen Vorgänge sowie deren Wechselwirkungen untereinander. Bislang wurden hierzu üblicherweise nodale Neutronenkinetik-Programme basierend auf der Diffusionsmethode verwendet, wobei homogenisierte Wirkungsquerschnitte für die Brennelemente mit einem Spektralcode vorausberechnet werden. Lokale Größen können dabei etwa über Stabileistungsrekonstruktionsverfahren ermittelt werden.

Eine weitere Steigerung der Simulationsgenauigkeit kann durch die Beschreibung des NeutronenTransports mit der Monte-Carlo-Methode erreicht werden, die gegenüber nodalen Verfahren eine deutlich verbesserte, geometrische Abbildung erlaubt. Dadurch entfällt die Notwendigkeit zur räumlichen Homogenisierung und der Weniggruppen-

Darstellung der Energieabhängigkeit der nuklearen Wirkungsquerschnittsdaten. Trotz der verfügbaren Computer-Hardware ist es noch immer schwierig, die direkte Simulation zeitabhängiger Vorgänge mit der Monte-Carlo-Methode in Verbindung mit einem Thermohydraulik-Code für einen ganzen Reaktorkern durchzuführen. Dies liegt daran, dass für Transienten sehr unterschiedliche Zeitskalen für die Entstehung von prompten und verzögerten Neutronen zu berücksichtigen sind und somit zur Erfassung des zeitlichen Verlaufs sehr viele Neutronenschicksale betrachtet werden müssen. In dem Vorhaben wird eine Hybridmethode zur Simulation transienter Vorgänge unter Anwendung der Monte-Carlo-Methode weiterentwickelt und für Transientenrechnungen angewendet, deren Entwicklung bereits im Vorhaben RS1536 begonnen wurde.

2.4 Weiterentwicklung, Validierung und Anwendung von Methoden zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse

Um die Aussagesicherheit von Berechnungsmethoden der gesamten nuklearen Berechnungskette quantitativ bewerten zu können, ist eine systematische Behandlung der Unsicherheiten in den Berechnungen erforderlich, die durch Unsicherheiten in den Eingangsgrößen verursacht werden. Dies gilt für den Einfluss der nuklearen Wirkungsquerschnittsdaten und deren Verarbeitung in den wesentlichen Berechnungsschritten: Resonanzselbstabschirmungsrechnung, Brennelementrechnung im unendlichen Gitter, Bereitstellung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsdaten und Berechnung des stationären und zeitabhängigen Kernverhaltens.

Noch wichtiger als für Leichtwasserreaktoren, für die schon umfassende Erfahrung durch den Betrieb einer großen Anzahl von Anlagen über viele Jahre besteht, sind Unsicherheitsanalysen für Leistungsreaktoren mit schnellem Neutronenflussspektrum, für die im Vergleich dazu fast noch keine Betriebserfahrung vorhanden ist und für die nur sehr wenige Betriebsdaten zugänglich sind. Die Ergebnisse von Simulationen können bisher kaum durch Vergleich mit Messergebnissen validiert werden. Zur Einschätzung der Aussagesicherheit von Analysen, die zur Beurteilung neuer Reaktorkonzepte nötig sind, sind also Unsicherheitsanalysen unumgänglich. Im Rahmen dieses Vorhabens wurde eine Spezifikation für die Durchführung solcher Unsicherheitsanalysen als Teil des UAM-SFR-Benchmarks /BUI 19/ aufgenommen; dieser Benchmark wurde im Rahmen einer OECD/NEA-Arbeitsgruppe spezifiziert, um Unsicherheiten für schnelle natriumgekühlte Reaktoren zu quantifizieren.

Im Hinblick auf die Simulation transienter Vorgänge mit fortschrittlichen Rechenmethoden und der Quantifizierung der entsprechenden Unsicherheiten nimmt die GRS am *Deterministic Time-Dependent Neutron Transport Benchmark without Spatial Homogenization* (C5G7-TD) der OECD/NEA /BOY 17/ teil. In diesem Vorhaben wurden dazu erforderliche Arbeiten durchgeführt, die im Wesentlichen die Ermöglichung und Durchführung von mit der Thermohydraulik gekoppelten Rechnungen sowie Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen betreffen.

Im vorangegangenen Vorhaben RS1536 /ZWE 18/ wurden Möglichkeiten identifiziert, wie die in der GRS eingesetzten Unsicherheitsanalysewerkzeuge methodisch substantiell verbessert werden können. Dies betrifft u. a. die Erfassung der impliziten Effekte, d. h. die Beeinflussung der Unsicherheiten während der Resonanzselbstabschirmungsrechnung in XSUSA. Diese Arbeiten zur Verbesserung der Unsicherheitsanalysewerkzeuge wurden in diesem Vorhaben durchgeführt.

2.5 Überprüfung der Eignung der nuklearen Berechnungsmethoden der GRS für *Accident Tolerant Fuel*

International wird der Einsatz von verbesserten Brennstoffen und Hüllrohrmaterialien, sogenannten *Accident Tolerant Fuel* (ATF) untersucht. Ziel ist es Hüllrohrmaterialien zu entwickeln, bei denen auch im Hochtemperaturbereich eine exotherme Wasserstoffbildung ausgeschlossen werden kann. Des Weiteren soll die Schmelztemperatur des Brennstoffs gegenüber der Schmelztemperatur des heute verwendeten UO_2 Brennstoffs deutlich erhöht werden. Der Einsatz erster (Versuchs-)Brennstäbe bzw. Brennelemente wurde im Jahr 2018 begonnen /WNN 18/. In diesem Vorhaben wurde überprüft, ob die nuklearen Rechenmethoden und Daten der GRS unmittelbar für solche Brennelemente einsetzbar sind, insbesondere um auch zukünftig die Sicherheit von Reaktoren im Ausland beurteilen zu können. Im Rahmen dieses Vorhabens wurden erste Arbeiten durchgeführt, mit dem Ziel, anhand von Vergleichen mit repräsentativen Experimenten und Monte-Carlo-Referenzlösungen die Einsetzbarkeit bzw. den Verbesserungsbedarf der GRS-Codes und verfügbarer nuklearer Wirkungsquerschnittsdaten für solche Brennelemente festzustellen. Ferner wurden Sensitivitätsanalysen durchgeführt.

3 AP 1: Weiterentwicklung des GRS-Kernsimulators KMACS

Im Folgenden werden die durchgeführten Arbeiten und Weiterentwicklungen am Kernsimulator KMACS /ZIL 18b/ der GRS beschrieben. Dies sind die Umstellung des KMACS Quellcodes auf Python 3.8, die Ermittlung von brennstab aufgelösten Ergebnisgrößen bei Reaktorkernberechnungen von Druckwasserreaktoren westlicher Bauart (DWR), die Erweiterung des Anwendungsbereichs von KMACS auf Reaktoren mit hexagonaler Geometrie, z. B. Druckwasserreaktoren russischer Bauart (WWER-1000), und die weitere Verifikation und Validierung von KMACS anhand von Referenzlösungen und verfügbaren Betriebsdaten.

Zum Zweck bestimmter Weiterentwicklungen von KMACS wurde der Reaktordynamikcode DYN3D /ROH 16/ vom Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR) als Alternative zum nodalen Diffusionscode QUABOX/CUBBOX /LAN 78/ an KMACS angebunden. DYN3D löst für stationäre sowie für transiente Reaktorprobleme die Neutronendifusionsgleichung für quadratische und für hexagonale Reaktorgeometrien. Die Ermittlung von brennstab aufgelösten Ergebnisgrößen ist mittels eines Stableistungsrekonstruktionsverfahrens möglich. Zudem verfügt DYN3D über ein internes Thermohydraulikmodul zur Simulation der Thermohydraulik im Reaktorkern. Zur Umsetzung der verschiedenen Weiterentwicklungen von KMACS wurde in den verschiedenen Arbeitspunkten dieses Arbeitspakets die entsprechenden Schnittstellen zu DYN3D geschaffen und erweitert.

3.1 Umstellung des KMACS Quellcodes von Python 2.7 zu Python 3.8

KMACS ist ursprünglich in der Programmiersprache Python in der Version 2.7 implementiert worden. Während des Vorhabens ist die Unterstützung für Python 2.7 seitens des Herausgebers ausgelaufen /PYT 19/. Zur Sicherstellung der Zukunftsfähigkeit, Laufbarkeit, Korrektheit und der Anwendbarkeit von KMACS wurde in diesem Vorhaben der Quellcode auf Python 3.8 umgestellt. Dies stellt zudem sicher, dass weiterhin aktuelle Versionen von externen Programmbibliotheken in KMACS verwendet werden können, da diese mittlerweile nur noch für Python 3 erscheinen. Die erfolgreiche Umstellung des KMACS Quellcodes auf Python 3.8 wurde durch sog. Unit-Tests, die einzelne Funktionen der KMACS-Module auf ihre Korrektheit überprüfen, und durch vollständige Kernsimulator-Rechnungen von DWR und WWER sichergestellt.

3.2 Weiterentwicklung von KMACS für Druckwasserreaktoren

Nachfolgend werden die Weiterentwicklungen und Anwendungen von KMACS im Bereich der DWR Reaktorkernberechnungen beschrieben.

3.2.1 Ermittlung der Stableistungsverteilung für DWR

Zur Ermittlung der brennstabaufgelösten Leistungsverteilung mit KMACS wurde im KMACS-Modul *kflux* die Schnittstelle zum Reaktordynamikcode DYN3D erweitert. DYN3D ermittelt die Stableistungsverteilung mittels Stableistungsrekonstruktion basierend auf Stableistungsfaktoren aus der Wirkungsquerschnittsvorausrechnung und anhand der auf den Rändern der nodalen Rechenknoten berechneten Neutronenflüsse. Die Änderungen an KMACS umfassten zunächst das Auslesen der Stableistungsfaktoren aus den Ausgabedateien der Wirkungsquerschnittsvorausrechnung. Für die Wirkungsquerschnittsvorausrechnung wird die T-NEWT Spektralcodesequenz aus dem Kritikalitäts- und Abbrandmodul TRITON des SCALE 6.2.3-Programmsystems des *Oak Ridge National Laboratory* (ORNL), USA /REA 18/, verwendet. Innerhalb der T-NEWT Sequenz erfolgt zunächst die Resonanzselbstabschirmungsrechnung der Wirkungsquerschnitte; anschließend wird der zweidimensionale S_N -Code NEWT zur deterministischen Neutronentransportrechnung ausgeführt. Die resultierenden Stableistungsfaktoren werden in der KMACS-Datenbank gespeichert, wie es bereits für die homogenisierten Wirkungsquerschnitte durchgeführt wird. Das Datenbankmodul zur Speicherung von und zum Zugriff auf brennstabaufgelöste Leistungsverteilungen parametrisiert über Zykluszeitpunkte wurde entsprechend angepasst. Ferner wurden die Funktionen zum Schreiben der DYN3D-Eingabe erweitert und Funktionen zum Auslesen der Ergebnisse aus einer separat von DYN3D erzeugten Ausgabedatei implementiert.

Da Brennelemente ein asymmetrisches Stablayout aufweisen können, z.B. durch die Anordnung von Stäben mit einem abbrennbaren Neutronengift wie Gd_2O_3 oder B_2O_3 in nur einer Hälfte oder einem Viertel eines Brennelements, muss auch die Orientierung der Brennelemente, d.h. der Drehwinkel, mit dem sie in den Kern gesetzt werden, berücksichtigt werden. Das ist selbst bei rotationsinvarianten Brennelementtypen erforderlich, da durch Flussgradienten auf Stabebene ein inhomogener Abbrand entsteht. In diesem Zusammenhang ist es wichtig, ebenfalls die materialspezifischen, in der Multigruppenvariante von DYN3D unterstützten und vom Wirkungsquerschnittsmodul bereitgestellten, anisotropen *assembly discontinuity factors* (ADFs) konsistent zu

transformieren. In früheren KMACS-Versionen wurde hierbei nur ein gemittelter Wert berücksichtigt.

Für jedes Brennelement wird deshalb optional in der KMACS-Eingabe vermerkt, welchen Drehwinkel es gegenüber der ursprünglichen Definition in der KMACS-Eingabe in jedem Zyklus einnimmt. Diese Information wird vom KMACS-Modul *kflux* zum Schreiben der Eingabedatensätze für DYN3D verwendet.

Neben den für die Simulation und Datenspeicherung zuständigen Codeteilen erfuhr auch das für Postprozessierung und Visualisierung zuständige KMACS-Modul *kvip* eine Überarbeitung, um brennstab aufgelöste Struktur- und Ergebnisdaten sowohl in 2D-Schnitten als auch dreidimensional und zeitaufgelöst anzeigen zu können.

Zur Verifizierung der Stableistungsberechnung in KMACS wurde der Nulllast-Heiß-Zustand des BEAVRS-Benchmarks (Version 2.0.2) /HOR 18/ analysiert und mit Referenzergebnissen des Monte-Carlo-Codes Serpent 2 (nachfolgend Serpent genannt) von VTT, Finnland /LEP 15/, verglichen. Das BEAVRS-Benchmark dient zur Validierung von Kernsimulatoren für die Nachrechnung von Betriebszyklen von westlichen DWR. Es beinhaltet detaillierte Betriebs-, Geometrie- und Materialdaten von zwei aufeinanderfolgenden Betriebszyklen eines amerikanischen Westinghouse DWR mit vier Kühlkreisläufen. Der Kern ist mit 193 Brennelementen beladen und hat eine thermische Reaktorleistung von 3411 MW. Die Brennelemente bestehen aus einem 17 × 17-Stabgitter. Als Besonderheit weist der Kern vier Neutronenschilde als zusätzliche Reflektoren bei Nordost, Südost, Südwest und Nordwest außerhalb des Kernbehälters auf. In Abb. 3.1 ist der Kernaufbau schematisch dargestellt.

Die linke Abbildung in Abb. 3.1 zeigt anhand einer Viertelkerndarstellung den Beladeplan des BEAVRS Kerns. Die farbliche Kennzeichnung stellt die U-235 Anreicherung des UO_2 Brennstoffs dar: 3,1 % (blau), 1,6 % (rot) und 2,4 % (gelb). Darüber hinaus wird die Anzahl der Borglasstäbe (B_2O_3) pro Brennelement gegeben. Die Anordnung der B_2O_3 Stäbe wird in der rechten Viertelkerndarstellung in Abb. 3.1 gezeigt. Die Brennelemente auf den Positionen K1, H1, R6, R8, N3 und auf den entsprechenden spiegelsymmetrischen Positionen im gesamten Kern weisen dabei eine asymmetrische Anordnung der B_2O_3 Stäbe im Layout auf. Zusätzlich zeigt die rechte Viertelkerndarstellung die Anordnung der vier radialen Reflektoren R1 bis R4, die für die nachfolgenden Ganzkern-Rechnungen modelliert wurden.

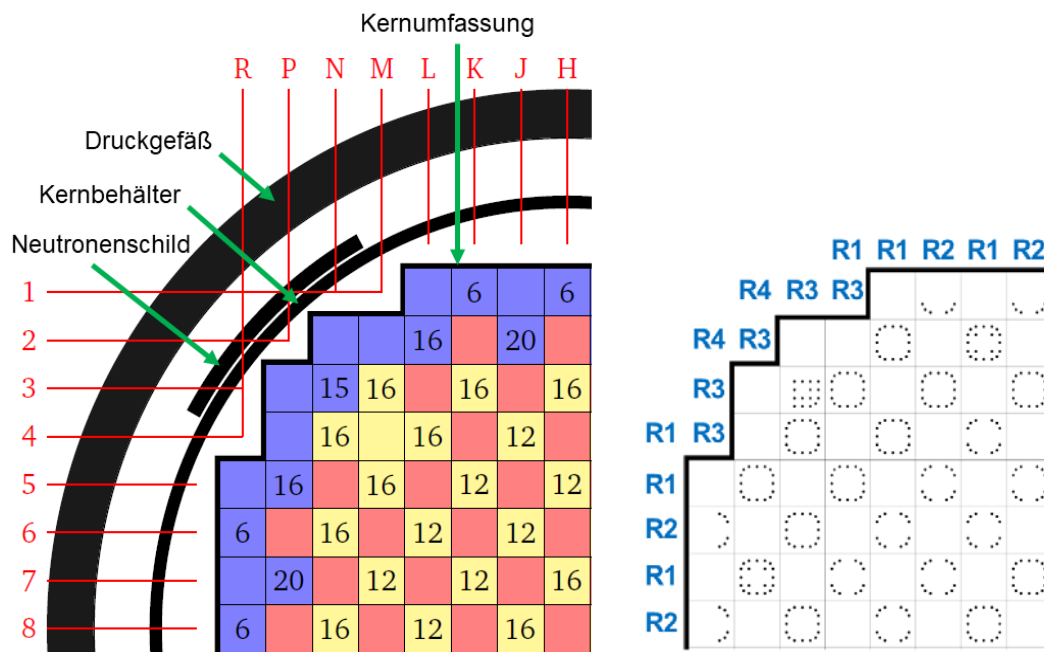


Abb. 3.1 BEAVRS Benchmark Viertelkerndarstellung, Beladeplan und Anordnung der B_2O_3 Stäbe sowie der vier Reflektoren R1 bis R4

Nach /HOR 18/.

Unter Anwendung der T-NEWT Sequenz zur Wirkungsquerschnittsberechnung wurden zunächst für die im Kern eingesetzten Brennelemente homogenisierte Wirkungsquerschnitte und Stableistungsfaktoren für den Nulllast-Heiß Zustand ermittelt (Brennstofftemperatur: 566,5 K, Moderatorichte: 0,74 g/cm³, Borkonzentration: 975 ppm). Für die Wirkungsquerschnittskondensierung wurde in T-NEWT das unendliche und nicht das B1-korrigierte Neutronenspektrum /REA 18/ angewendet, da mit dem unendlichen Neutronenspektrum bei einer nahezu kritischen Anordnung, wie es dieser Nulllast-Heiß Zustand ist, bessere Ergebnisse insbesondere bei der Leistungsverteilung erzielt werden können.

Ebenfalls wurden mit T-NEWT homogenisierte Wirkungsquerschnitte für die Reflektoren für den Nulllast-Heiß Zustand bestimmt. Um die Neutronenflussverteilung am Kernrand, welche unter anderem durch die Neutronenschilder beeinflusst wird, möglichst akkurat zu modellieren, wurden vier verschiedene radiale Reflektoren (R1, R2, R3, R4 in rechter Darstellung von Abb. 3.1) modelliert. Zudem wurde ein oberer axialer Reflektor (RT) und ein unterer axialer Reflektor (RB) modelliert. Der Aufbau und die Materialzusammensetzungen der Reflektoren werden in Tab. 3.1 zusammengefasst.

Tab. 3.1 Schichtweiser Aufbau und Materialzusammensetzung der modellierten Reflektoren

Typ	Aktiver Teil								
R1	UO ₂ -3,1 %	Material	Moderator	Stahl	Moderator	Stahl			
		Breite [cm]	0,1627	2,2226	16,7472	2,534			
R2	UO ₂ -3,1 % + 6 B ₂ O ₃	Material	Moderator	Stahl	Moderator	Stahl			
		Breite [cm]	0,1627	2,2226	16,7472	2,37114			
R3	UO ₂ -3,1 %	Material	Moderator	Stahl	Moderator	Stahl	Moderator	Stahl	
		Breite [cm]	0,1627	3,1431	9,9255	5,715	1,165	1,39234	
R4	UO ₂ -3,1 %	Material	Moderator	Stahl	Moderator	Stahl	Moderator	Stahl	Moderator
		Breite [cm]	0,1627	3,1431	1,5573	5,715	1,165	6,79	2,97054
RB	UO ₂ -3,1 %	Material	Moderator/ Stahl/	Material					
		Breite [cm]	1,748	15,00					
RT	UO ₂ -3,1 %	Material	Moderator/ Stahl/						
		Breite [cm]	14,656						

Der Multiplikationsfaktor, die radiale Brennelementleistungsverteilung und die radiale Stableistungsverteilung wurden anschließend in einer Ganzkern-Rechnung mit DYN3D bei konstanter Brennstofftemperatur, Moderatorichte und Borkonzentration ermittelt.

Der von DYN3D berechnete Multiplikationsfaktor beträgt 0,99883. Mit einer Reaktivitätsdifferenz von -103 pcm ist dieser Wert in sehr guter Übereinstimmung mit dem Serpent Referenzergebnis von 0,99987.

Abb. 3.2 zeigt die relative Abweichung zwischen den radialen Brennelementleistungsverteilungen von KMACS/T-NEWT-DYN3D und Serpent. Die Leistungsverteilung von Serpent weist aufgrund der statistischen Monte-Carlo-Methode eine geringe Asymmetrie auf und wurde deshalb nachträglich über Kernausschnitte von 45° gemittelt. Mit einem quadratischen Mittelwert der relativen Abweichungen von 1,8 % wird eine gute Übereinstimmung zwischen den Leistungsverteilungen von KMACS und Serpent erzielt. Größere relative Abweichungen treten bei den Brennelementen am Kernrand und insbesondere bei den Brennelementen mit einer asymmetrischen Anordnung der B_2O_3 Stäbe auf. Die maximale relative Abweichung beträgt 5,4 %.

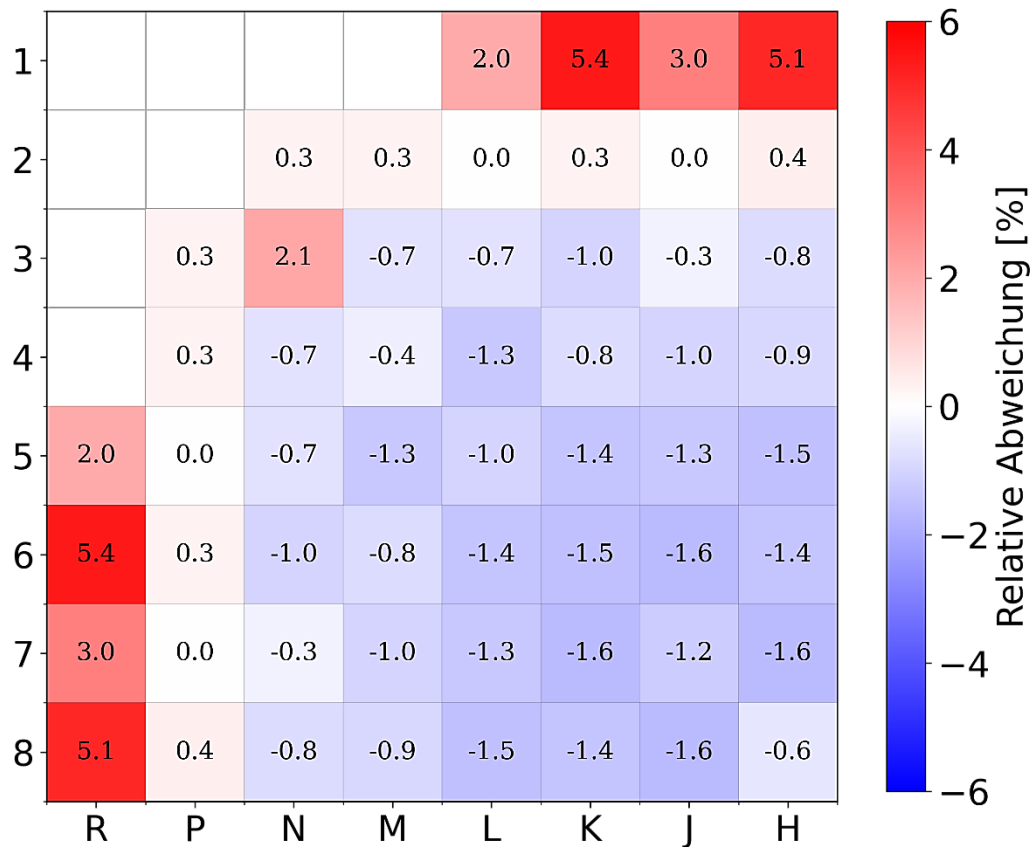


Abb. 3.2 Relative Abweichung der Brennelementleistungsverteilung zwischen KMACS/T-NEWT-DYN3D und Serpent für den BEAVRS Kern bei Nulllast-Heiß

Die Darstellung zeigt einen 90° Kernausschnitt (Viertelkern).

Abb. 3.3 zeigt die relative Abweichung der Stableistungsverteilung zwischen KMACS/T-NEWT-DYN3D und Serpent. Mit einem quadratischen Mittelwert der relativen Abweichungen von 3,7 % wird eine zufriedenstellende Übereinstimmung erreicht. Bei 39,2 % der Brennstäbe ist die absolute relative Abweichung unter 1 %, bei 70,0 % unter 2 % und bei 92,5 % unter 5 %. Größere Abweichungen werden bei den Brennelementen mit einer asymmetrischen Anordnung der B_2O_3 Stäbe und am Kernrand beobachtet. Bei den Brennelementen am Kernrand überschätzt KMACS/T-NEWT-DYN3D die Stableistung an den Eckpositionen und unterschätzt die Stableistung an den flachen Brennelementseiten.

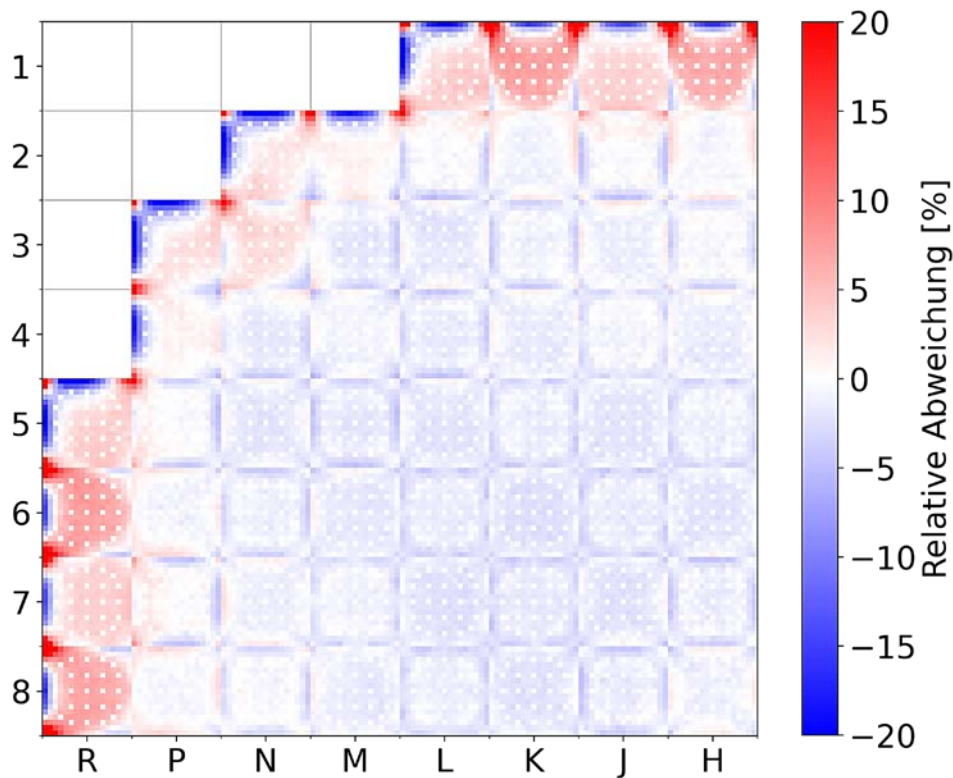


Abb. 3.3 Relative Abweichung der Stableistungsverteilung zwischen KMACS/T-NEWT-DYN3D und Serpent für den BEAVRS Kern bei Nulllast-Heiß

Die Darstellung zeigt einen 90° Kernausschnitt (Viertelkern)

Generell wurde mit KMACS unter Anwendung des Spektralcodes T-NEWT und des Reaktordynamikcodes DYN3D eine gute Übereinstimmung für die Brennelementleistungsverteilung sowie für die Stableistungsverteilung zu Serpent-Referenzergebnissen für den BEAVRS Kern beim Nulllast-Heiß Zustand erzielt. Größere Abweichungen wurden am Kernrand und insbesondere bei Brennelementen mit einer asymmetrischen Anordnung von B_2O_3 Stäben festgestellt. Verbesserungen bei der Brennelementleistungsverteilung sind, wie in /ZIL 17/ gezeigt, bei einer Unterteilung der Brennelemente in Viertel in der Ganzkern-Rechnung zu erwarten, weil dadurch der Gradient des Neutronenflusses innerhalb der Brennelemente besser modelliert werden kann. Jedoch ist es dann derzeit nicht möglich, eine Stableistungsrekonstruktion bei Brennelementen mit einer ungeraden Anzahl von Brennstäben pro Reihe, wie es beim BEAVRS Kern mit einem 17 x 17 Stablayout der Fall ist, durchzuführen.

3.2.2 Einsatz von DYN3D in KMACS für DWR Zyklusrechnungen

Der Einsatz des Reaktordynamikcodes DYN3D /ROH 16/ in KMACS wurde ebenfalls für Zyklusrechnungen von DWR erprobt. Zu diesem Zweck wurde der erste Betriebszyklus des BEAVRS-Benchmarks analysiert.

In der Vorausrechnung wurden homogenisierte Wirkungsquerschnitte für die eingesetzten Brennelemente mit dem Spektralcode T-NEWT aus SCALE 6.2.3 /REA 18/ für die folgenden Verzweigungsparameter ermittelt:

- Brennstofftemperatur: 560; 850; 1100 K,
- Moderatorichte: 0,62; 0,69; 0,71; 0,74 g/cm³,
- Borkonzentration: 0; 500; 1200 ppm,
- Abbrand: 0,0; 0,04; 0,15; 0,4; 0,8; 1,2; 1,6; 2,0; 2,8; 3,6; 4,4; 5,2; 6,0; 8,0; 10,0; 12,0; 14,0; 16,0; 18,0; 22,0; 26,0; 30,0; 34,0 MWd/kg SM.

Zur Kondensierung der homogenisierten Wirkungsquerschnitte wurde das B1-korrigierte Neutronenspektrum verwendet. Testrechnungen haben gezeigt, dass im Fall von Zyklusrechnungen mit der B1-Methode bessere Ergebnisse erzielt werden können. Hierzu werden künftig weitere Untersuchungen durchgeführt.

Auf Basis der homogenisierten Wirkungsquerschnitte wurde eine Zyklusrechnung mit KMACS unter Anwendung des Reaktordynamikcodes DYN3D mit dessen interner Thermohydraulik durchgeführt. Um Unterschiede zum bereits in KMACS zuvor verwendeten Neutronenkinetik-/Thermohydraulikcodesystem ATHLET-QUABOX/CUBBOX (AQC) zu identifizieren, wurde mit denselben Wirkungsquerschnitten eine zusätzliche Zyklusrechnung mit AQC durchgeführt. Für diese Untersuchung erfolgte die Abbrandberechnung mit dem trivialen Abbrandmodell von KMACS /BOU 18a/. Als Ergebnisgröße wurde die kritische Borkonzentration als Funktion der Volllasttage ausgewertet.

Abb. 3.4 zeigt die Verläufe der kritischen Borkonzentration von KMACS mit AQC (KMACS/AQC) und von KMACS mit DYN3D (KMACS/DYN3D) und den Verlauf der gemessenen kritischen Borkonzentration /HOR 18/. Beim Zykluszeitpunkt von 140 Volllasttagen ist bei allen Verläufen ein kurzzeitiges Ansteigen der Borkonzentration zu erkennen, was durch eine kurzzeitige Steuerstabbewegung verursacht wird. Die

Borkonzentrationen ermittelt mit KMACS/DYN3D als auch mit KMACS/AQC sind insgesamt in sehr guter Übereinstimmung mit der gemessenen Borkonzentration.

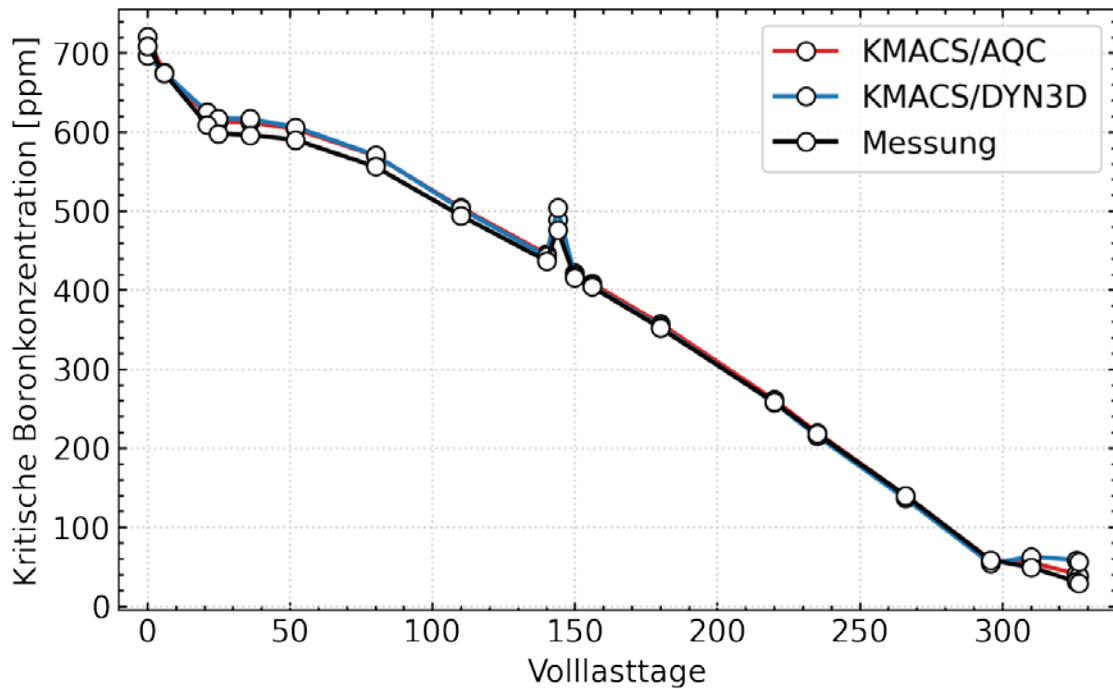


Abb. 3.4 Kritische Borkonzentration für BEAVRS Zyklus 1

Für eine genauere Betrachtung zeigt Abb. 3.5 die Differenz zwischen den berechneten und der gemessenen Borkonzentration. Über den Verlauf des Zyklus nähern sich beide ermittelten Borkonzentrationen der gemessenen Borkonzentration an. Zudem ist insgesamt eine gute Übereinstimmung zwischen KMACS/DYN3D und KMACS/AQC festzustellen. Beim Zykluszeitpunkt 140 Volllasttage (kurzzeitige Steuerstabbewegung) und ab 310 Volllasttage (Streckbetrieb durch Absenken der Reaktorleistung) überschätzt KMACS/DYN3D die gemessene Borkonzentration deutlicher als KMACS/AQC. Durch zukünftige Untersuchungen und Weiterentwicklungen an der Anbindung von DYN3D an KMACS sollen Verbesserungen für die Ermittlung der kritischen Borkonzentration erreicht werden.

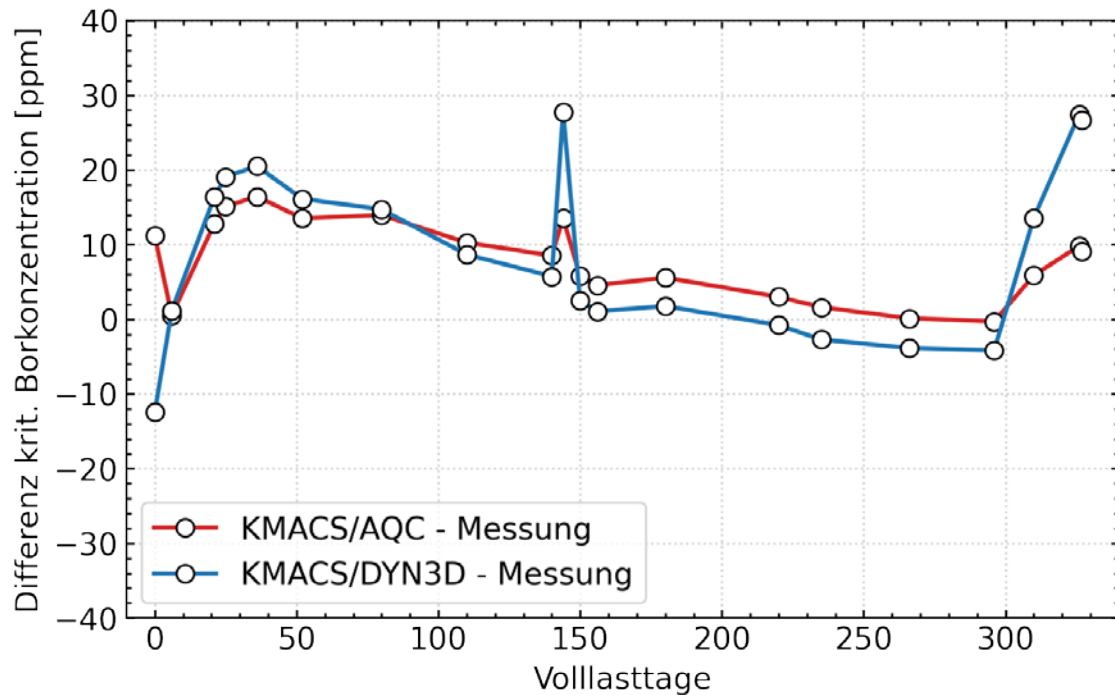


Abb. 3.5 Differenz zwischen berechneter und gemessener kritischer Borkonzentration zu BEAVRS Zyklus 1

3.2.3 Implementierung der Berechnung von stabweisen Abbranddaten in KMACS

Für die Untersuchung sicherheitsrelevanter lokaler Phänomene ist die Kenntnis des stabaufgelösten Abbrands und Nuklidinventars notwendig, beispielsweise um lokale Effekte bei Transienten zu analysieren. Grundsätzlich bieten sich für detaillierte neutronenphysikalische Analysen dreidimensionale NeutronenTransportprogramme wie zum Beispiel der Monte-Carlo-Code Serpent an. Diese ermöglichen eine hochaufgelöste Rechnung ohne geometrische Näherungen und unter Verwendung von Wirkungsquerschnittsdaten in kontinuierlicher Energiedarstellung (engl. *continuous-energy* – CE). Für Berechnungen an einem kompletten Reaktorkern erfordert die Verwendung solcher Programme allerdings einen erheblichen Rechenaufwand. Es bietet sich daher an, hierfür ein alternatives Rechenverfahren bereitzustellen, das eine Berechnung der erforderlichen Größen mit deutlich geringerem Aufwand bei hinreichender Genauigkeit ermöglicht. Hierzu war im vorliegenden Vorhaben vorgesehen, den Kernsimulator KMACS dahingehend zu erweitern, dass eine stabaufgelöste Abbrand- und Nuklidinventarberechnung erfolgen kann.

Die grundlegende Vorgehensweise für die Implementierung wird im Folgenden kurz skizziert: Der an KMACS angekoppelte Reaktordynamikcode DYN3D /ROH 16/ zur Berechnung des Neutronenflusses in Diffusionsnäherung ermöglicht eine Stableistungsrekonstruktion, bei der aus der in einem Knoten (ein Rechenknoten des Ganzkern-Diffusionsmodells), also einem Brennelement, berechneten Leistung auf die Leistung aller Brennstäbe in diesem Knoten einzeln rückgeschlossen werden kann.

Die so berechnete stabaufgelöste Leistung kann als Eingangsgröße für eine stabaufgelöste Abbrandberechnung mit dem Inventarberechnungsprogramm Ventura /AUR 15/, /BEH 18/ dienen. Hierbei ist jede Stabzelle in Ventura als ein abzubrennendes Material zu betrachten. Sämtliche abzubrennenden Materialien, im vorliegenden Fall also alle Stäbe in allen Knoten des Reaktorkerns, können dabei im Programm parallel berechnet werden. Ventura benötigt als Eingangsgrößen jeweils das Startinventar, die mikroskopischen Wirkungsquerschnitte und den Neutronenfluss für jedes Material sowie die globale Reaktorleistung. Anhand der Spalt- und Reaktionsenergien errechnet Ventura daraus intern für jedes Material die Leistung, so dass global der über den Zeitschritt vorgegebene Abbrand erreicht wird.

Da von DYN3D die stabaufgelöste Leistung, nicht jedoch ein stabaufgelöster Neutronenfluss ausgegeben wird, wird in KMACS für jeden Stab eines Knotens der Fluss im Knoten mit der jeweiligen stabaufgelösten Leistung renormiert. Auch wenn die Verteilung der knotenweisen Leistung über den Reaktorkern aufgrund der unterschiedlichen Berechnungsverfahren eventuell gegenüber DYN3D leicht unterschiedlich ausfällt, ist auf diese Weise sichergestellt, dass die von DYN3D vorgegebene relative Stableistungsverteilung innerhalb des Knoten reproduziert wird. Die mikroskopischen Wirkungsquerschnitte für die Nuklidinventarberechnung werden jeweils anhand des berechneten Abbrands für jeden Stab separat interpoliert. In der internen Datenbank von KMACS wurden zusätzliche Einträge für die stabaufgelösten Abbrände sowie die stabaufgelösten Nuklidinventare angelegt, um diese für eine spätere Analyse zur Verfügung zu haben. Die bisherigen knotenweisen Eintragsgrößen für Abbrand und Leistung bleiben bestehen, und werden jetzt aus den stabaufgelösten Größen durch Mittelung bestimmt.

Um die Implementierung zu testen, wurde ein vereinfachtes Modell eines Minikerns aufgesetzt. Dieses besteht aus einer quadratischen Anordnung von 6×6 Brennelementen umgeben von einer Reihe von Reflektorelementen. In axialer Richtung besteht der Kern aus einer einzelnen Ebene, die unter Verwendung reflektierender Randbedingungen als ein unendliches Gitter modelliert wird. Es wurden verschiedene Anordnungen unter-

sucht: Zunächst ein einfaches Modell mit einem einzigen Brennelementtyp, danach unter anderem ein Modell mit zwei verschiedenen Brennelementtypen unterschiedlicher U-235 Anreicherung des UO_2 Brennstoffs, die in einem Schachbrettmuster angeordnet wurden. Um den Vergleich mit einer Referenzrechnung zu ermöglichen, wurde jeweils ein analoges Modell für den Monte-Carlo-Code Serpent /LEP 15/ aufgesetzt und simuliert.

Beim einfachsten Minikern-Modell wird nur ein einziger Brennelementtyp eingesetzt. Bei diesem Brennelement handelt es sich um ein $17 \times 17 - 25$ Druckwasserreaktorbrennelement mit UO_2 Brennstoff mit einer U-235 Anfangsanreicherung von 2,4 %. Die Brennelemente wurden für einen Zyklus mit konstanter Leistung bis zu einem mittleren Abbrand von 11,3 GWd/tSM abgebrannt. Für den Minikern wird dabei eine Gesamtleistung von 36 MW angenommen.

In Abb. 3.6 ist exemplarisch die stabweise Leistungsverteilung nach 200 Volllasttagen gezeigt. Die Bezeichnungen B – G und 2 – 7 bezeichnen die Brennelement-Positionen. Jeder Brennstab ist durch einen Pixel in der Abbildung dargestellt, wobei die Farbe die Stableistung repräsentiert. Bei der dargestellten Leistung handelt es sich um die mit Ventina berechneten Werte, die aus zweierlei Gründen von den mit DYN3D berechneten abweichen können: Zum einen wird die Leistung in Ventina explizit aus der Anzahl an Spaltungen pro Nuklid und den hinterlegten nuklidweisen Spaltenergien inklusive Berücksichtigung der Einfangreaktionen bestimmt. Zum anderen wird in Ventina in jedem Abbrandschritt knotenweise die Abnahme der Reaktivität des Brennstoffs über den Zeitschritt aufgrund des Aufbaus von Neutronengiften berücksichtigt und durch ein entsprechendes Anheben des Neutronenflussniveaus kompensiert. Qualitativ ist eine typische Leistungsverteilung mit zentralem Maximum und sich Richtung Kernrand verringernder Leistung zu erkennen. Der Vergleich mit der mit Serpent berechneten Leistungsverteilung zeigt eine zufriedenstellende Übereinstimmung, die dem im folgenden gezeigten Vergleich der Abbrände entspricht.

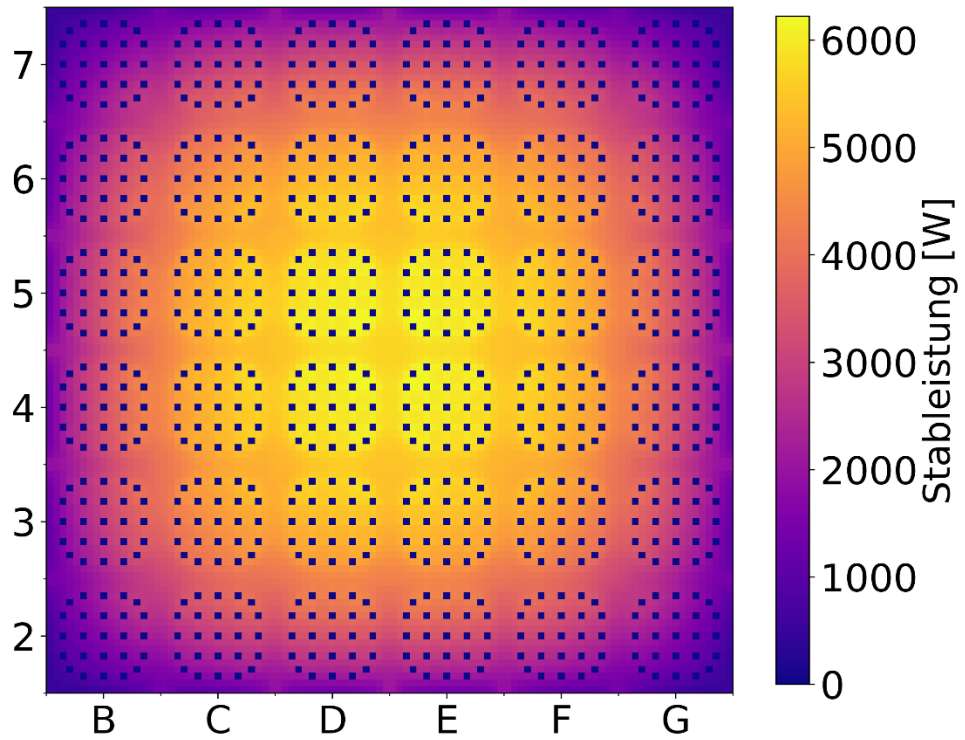


Abb. 3.6 Mit Ventina berechnete Stableistungverteilung des simulierten Minikerns.

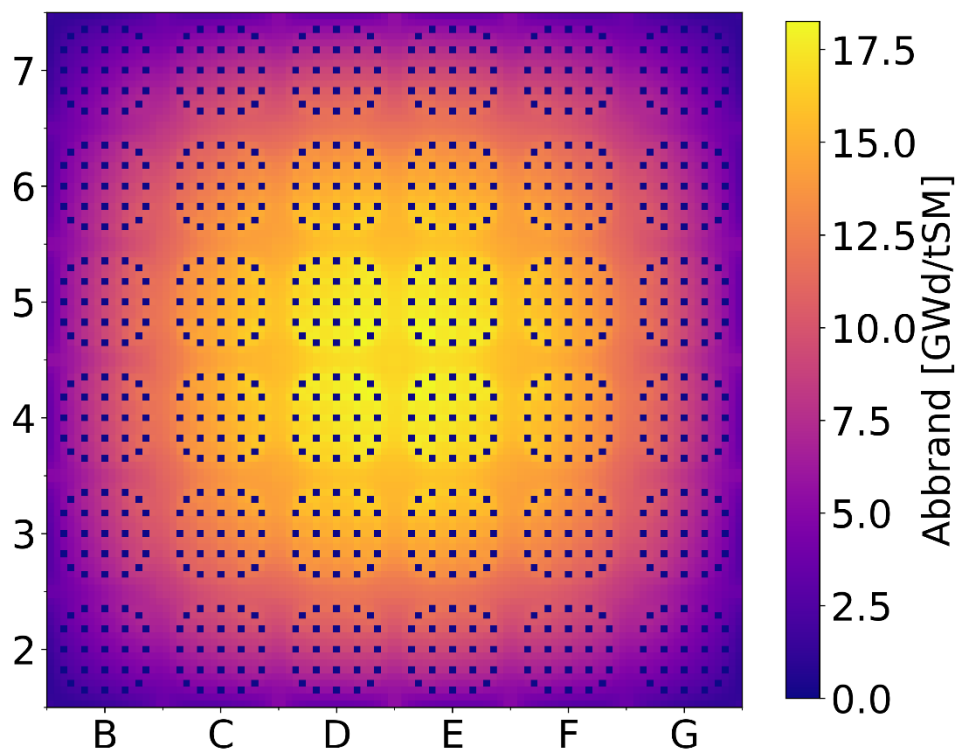


Abb. 3.7 Mit KMACS berechneter stabweiser Abbrand zum Ende des simulierten Zyklus.

In Abb. 3.7 ist die Abbrandverteilung zum Ende des Zyklus (275 Volllasttage) gemäß der Berechnung mit Ventina gezeigt. Für jeden Stab kann in der Datenbank das berechnete Nuklidinventar abgespeichert und bei Bedarf abgerufen werden.

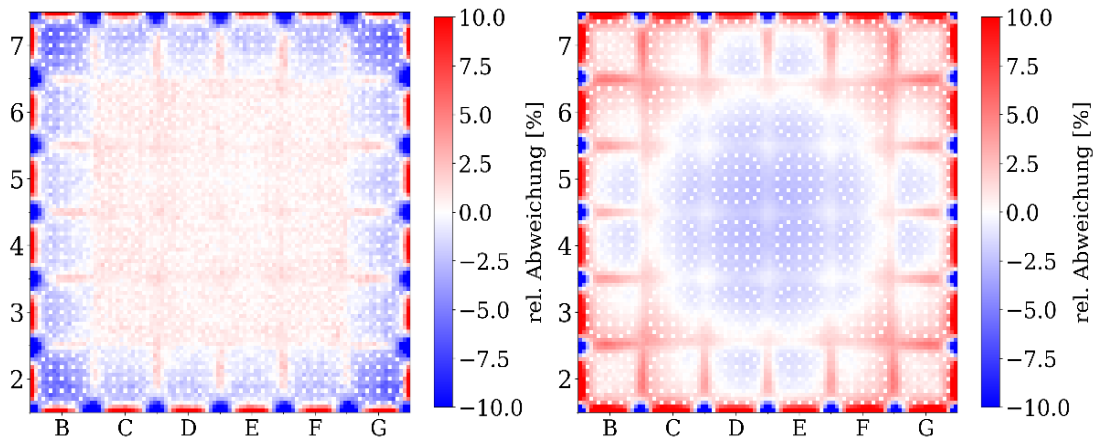


Abb. 3.8 Relative Abweichung in der stabweisen Abbrandberechnung zwischen Serpent und KMACS zu unterschiedlichen Zeitpunkten

Nach 5 (links) und 250 (rechts) Volllasttagen

Der Vergleich der Abbrandberechnung mit der Serpent-Referenzrechnung ist in Abb. 3.8 gezeigt. Über den gesamten Zyklus liegen die Abweichungen für große Teile der Geometrie im Bereich von etwa $\pm 2,5$ %. Lediglich an den Rändern des Minikerns sind deutlich höhere Unterschiede im Bereich 10 % zu erkennen. Letzteres kann mit bekannten Effekten der Homogenisierung bei der Modellierung der Reflektoren in der Diffusionsrechnung im Vergleich zu der in Serpent verwendeten exakten Geometrie erklärt werden. Während zu Beginn des Zyklus der Abbrand der zentralen Brennelemente von KMACS gegenüber Serpent leicht unterschätzt und gleichzeitig der Abbrand der äußeren Brennelemente überschätzt werden, kehrt sich dieses Bild im Verlauf des Zyklus um. Dies ist in einem gegenüber Serpent etwas stärker ausgeprägten globalen Leistungsgradienten begründet, die unabhängig von der stabweisen Leistungsberechnung auftritt. Zu erkennen ist außerdem eine im Vergleich zum Inneren der Brennelemente an den Rändern zunehmende lokale Abbranddifferenz. Hier zeigen sich möglicherweise die Grenzen der Stableistungsrekonstruktion, welche auf den Ergebnissen einer nodalen Diffusionsrechnung basiert, im Vergleich zur expliziten Berechnung mit Serpent. Von den hier beschriebenen Abweichungen abgesehen ergibt sich insgesamt eine zufriedenstellende Übereinstimmung zwischen der exakten Rechnung in Serpent und der in KMACS implementierten Näherung. Beachtenswert ist insbesondere, dass die relative

Abweichung über den Zyklus hinweg nicht wesentlich ansteigt. Die Differenz in den Leistungsverteilungen ergibt ein sehr ähnliches Bild wie hier für die Abbrände dargestellt.

Wie bereits beschrieben erhält man aus der hier dargestellten Erweiterung von KMACS neben den stabweisen Leistungs- und Abbranddaten auch entsprechende Nuklidinventare. Diese können u. a. genutzt werden, um eine stabaufgelöste Reaktivitätsrückwirkung aufgrund der Änderung des Nuklidinventars zu bestimmen. Zudem dienen die so berechneten Inventare als Eingabedaten für nachgelagerte Analysen, beispielsweise bei Untersuchungen zur Zwischen- und Endlagerung. Aufgrund der großen Datenmenge der nuklidweisen Ergebnisse muss in dem vorliegenden Bericht auf einen detaillierten Vergleich mit den Daten der Serpent-Referenzrechnung im Einzelnen verzichtet werden.

In Abb. 3.9 ist als stichprobenartige Analyse die relative Abweichung der Nuklidinventare beider Rechnungen für einen Stab eines einzelnen Brennelements und für ausgewählte Nuklide gezeigt. Es handelt sich dabei um einen mittigen Stab aus dem Brennelement an Position C3 gemäß Abb. 3.6. Das Nuklidinventar stammt vom Ende des berechneten Zyklus. In der Abbildung sind relative Abweichungen in den Ergebnissen der mit beiden Programmen berechneten Nuklidkonzentration in der Form von $(C_{\text{KMACS}}/C_{\text{Serpent}} - 1)$ -Werten gezeigt, wobei C_{KMACS} die mit KMACS berechneten Werte und C_{Serpent} die mit Serpent berechneten Werte bezeichnet. Die Auswahl der Nuklide entspricht einer typischen Nuklidenauswahl wie sie bei der Kritikalitätssicherheitsanalyse von bestrahlten Kernbrennstoffen für Abbrandkredit-Anwendungen verwendet wird.

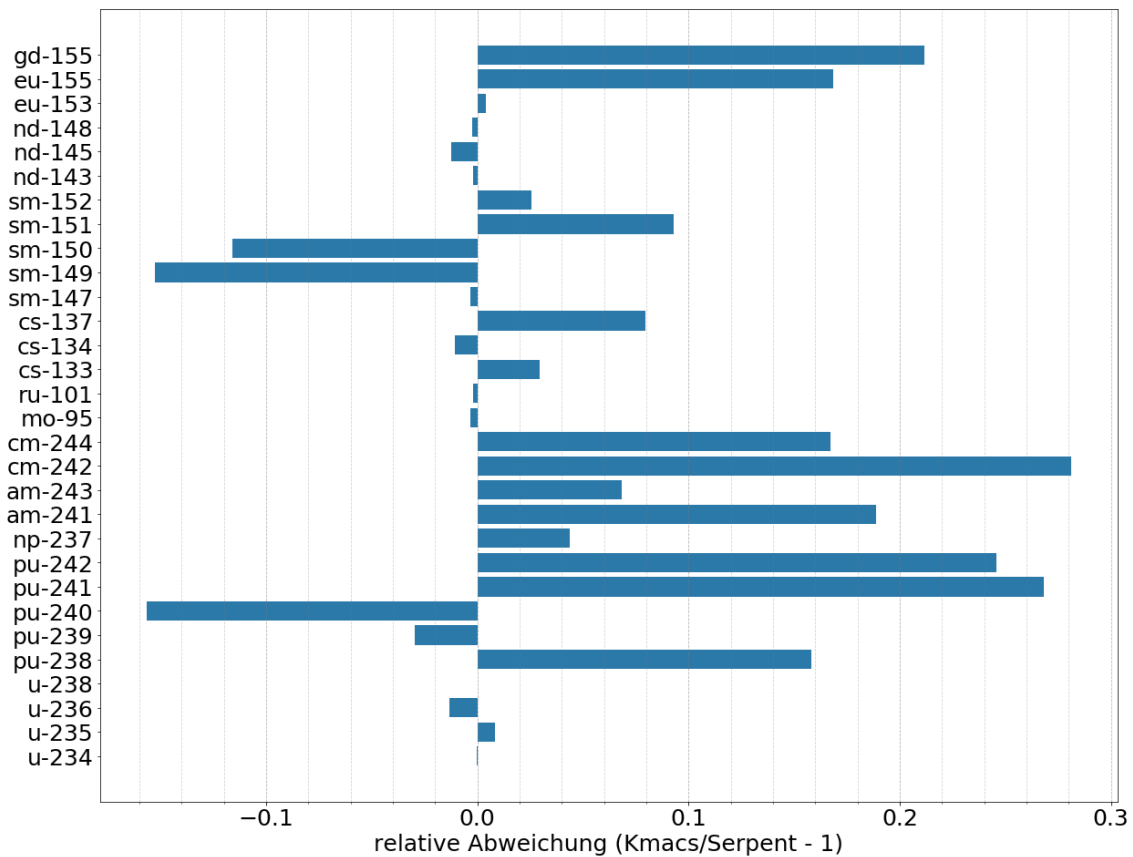


Abb. 3.9 Relative Abweichung in den Nuklidkonzentrationen ausgewählter Nuklide eines einzelnen Stabes zwischen den Rechnungen mit KMACS und Serpent

Der gewählte Probenstab zeigt eine geringe Abweichung in den berechneten Abbränden zwischen KMACS und Serpent im Bereich $< 1\%$, so dass hier mögliche Effekte unterschiedlicher Neutronenspektren signifikant hervortreten. Dies zeigt sich auch in der guten Übereinstimmung des Abbrandindikators Nd-148. Geringe Unterschiede sind auch in den spaltbaren Nukliden U-235 und Pu-239 zu erkennen, ebenso bei einigen der dargestellten Spaltprodukte. Größere Abweichungen sind bei einigen der höheren Aktinoide und bei spektral sensitiven Spaltprodukten zu erkennen. Dies lässt auf Unterschiede in den berechneten Neutronenspektren schließen. In Anbetracht der oben beschriebenen Näherungen, insbesondere der Tatsache, dass für in der KMACS-Rechnung der Neutronenfluss nur auf Basis der Knoten und nicht stabaufgelöst berechnet werden kann, sind die erzielten Ergebnisse zufriedenstellend.

Neben dem zuvor dargestellten einfachen Minikern, der mit nur einem einzigen Brennelementtyp beladen ist, wurden auch komplexere Anordnungen untersucht, um die Leistungsfähigkeit der Implementierung zu untersuchen. Unter anderem wurde ein Minikern

mit zwei Brennelementtypen mit zwei jeweils unterschiedlichen U-235 Anfangsanreicherungen untersucht, nämlich 2,4 % und 3,2 %. Diese wurden in einem Schachbrettmuster angeordnet. Abb. 3.10 zeigt einen beispielhaften Vergleich der Stableistungsverteilungen zwischen der KMACS-Rechnung und der Serpent-Referenzrechnung. Die Ergebnisse sind grundsätzlich mit denen der einfachen Anordnung vergleichbar. Als zusätzlicher Effekt ist plausibler Weise eine unterschiedliche Leistungsberechnung der beiden Brennelementtypen zu erkennen.

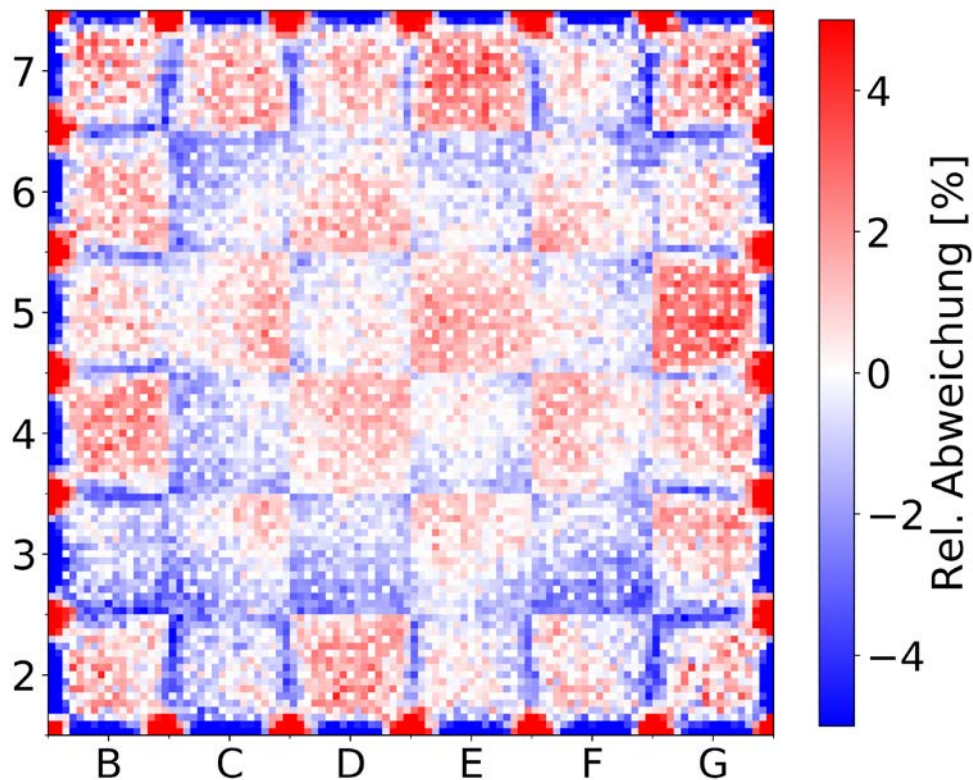


Abb. 3.10 Relative Abweichung in der stabweisen Leistungsverteilung zwischen Serpent und KMACS für die schachbrettförmige Anordnung

Die hier dargestellten Ergebnisse zeigen, dass eine stabweise Berechnung des Abbrands und von Nuklidinventaren mit KMACS möglich ist, und dass die dabei erzielten Ergebnisse im Rahmen der zu erwartenden Genauigkeit mit den Berechnungen einer Referenzrechnung mit einem 3D-Monte-Carlo-Verfahren übereinstimmen. Dabei können für KMACS deutliche Vorteile hinsichtlich der Rechengeschwindigkeit erzielt werden. Während im vorliegenden Fall für Demonstrationszwecke lediglich ein deutlich verkleinerter Modellkern modelliert wurde, stehen der Berechnung eines realistischen Reaktorkerns keine grundsätzlichen Hindernisse im Weg. Es ist allerdings hinsichtlich der erforderlichen Computer-Hardware auch nach heutigen Maßstäben mit einem erheblichen Speicherbedarf zu rechnen. Um dieses Problem abzumildern sind noch numerische

Optimierungen notwendig. Für die allgemeine Rechenperformance erscheint künftig eine Anbindung von Ventina als Bibliothek im Unterschied zur aktuellen Ankopplung über Ein- und Ausgabedateien als sinnvoll.

Für künftige Weiterentwicklungen ist eine Rückkopplung der stabweisen Daten in die Thermohydraulikrechnung und die Neutronenflussberechnung wichtig. Der stabweise Abbrand kann dabei für eine stabweise Berechnung der Wärmeleitfähigkeit des Brennstoffs genutzt werden. Das stabweise Nuklidinventar kann für eine Korrektur der lokalen Wirkungsquerschnitte und damit der lokalen Reaktivität genutzt werden. Beides kann für eine präzisere Berechnung der Stableistungen und damit für Sicherheitsparameter wie das DNB-Verhältnis (vgl. Kap. 3.2.4) genutzt werden. Hierzu sind künftig weitere Entwicklungsarbeiten notwendig.

3.2.4 Ermittlung DNB-Verhältnis mit COBRA-TF

Im Rahmen der Weiterentwicklung von KMACS für DWR ist die Kopplung des Unterkanal-Thermohydraulikcodes COBRA-TF (CTF) an KMACS zwecks Ermittlung des sicherheitsrelevanten Abstands zum Filmsieden, ausgedrückt durch den stabaufgelösten DNBR-Wert (*Departure from Nucleate Boiling Ratio*), vorgenommen worden. Dabei werden im CTF Modell Querströmungen innerhalb des Brennelements berücksichtigt.

Dazu wurde das neue KMACS-Modul *kpostal* (Zyklus Postprocessing Analyse) entwickelt, dessen Funktion die Ermittlung des stabaufgelösten DNBR-Werts ist. Als Backend für das *kpostal* Modul wird CTF verwendet. Die Implementierung von *kpostal* folgt der gleichen Struktur wie die der meisten KMACS Module, z. B. *kflux*, mit den drei Hauptfunktionen: *pre()* zur Vorbereitung des Backend-Eingabedatensatzes, *run()* zur Durchführung der Backend-Rechnung, *post()* zur Post-Prozessierung der Backend-Ergebnisse.

Die Funktion *pre()* nimmt zur Eingabedatensatzerstellung für CTF den Zyklusnamen des zu untersuchenden Zyklus, einen Zykluszeitpunkt dieses Zyklus, und ein Brennelement entweder per Brennelementname oder per Position im Kern. Die manuelle Auswahl des Brennelements ist optional. Stattdessen kann auch das höchstbelastete Brennelement per neuentwickelter Funktion automatisiert ausgewählt werden. Die DNBR-Wert Analyse erfolgt dann für das automatisiert oder manuell ausgewählte Brennelement.

Abb. 3.11 stellt schematisch ein *coolant-centered* Unterkanal-Modell dar und zeigt zudem auch die alternative Modellierung als *rod-centered* Unterkanal-Modell. Letzteres wurde in dieser Arbeit nicht umgesetzt, da das *coolant-centered* Modell eine bessere Modellierung der Thermohydraulik erlaubt. Alle zur CTF Modellerstellung benötigten Daten können aus der KMACS Eingabe entnommen werden. Für eine möglichst realistische Analyse der DNBR-Verteilung wird auf die zuvor mit DYN3D ermittelte Stableistungverteilung zurückgegriffen. Sollte keine Stableistungverteilung in der KMACS Datenbank vorhanden sein, wird eine gleichförmige radiale Leistungsverteilung innerhalb des CTF Brennelementmodells verwendet.

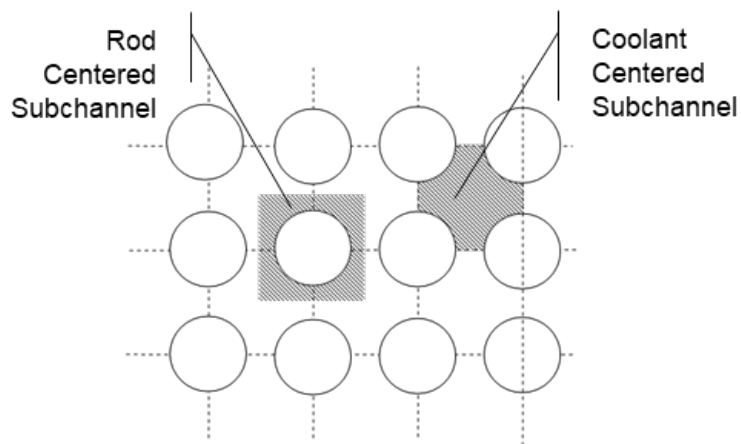


Abb. 3.11 Schematische Darstellung von *coolant-centered* und *rod-centered* Unterkanal-Modellen in CTF

Die Funktion *pre()* führt zur Erstellung eines *coolant-centered* Unterkanal-Modells für das ausgewählte Brennelement den CTF Präprozessor aus.

Die Funktion *run()* führt die CTF Rechnung mit dem durch *pre()* erzeugten Eingabedatensatz durch. Üblicherweise benötigt CTF für ein solches Modell ca. zwei Minuten Rechenzeit bei Ausführung auf einem einzelnen Prozessor.

Die CTF Ausgabe enthält für jede der vier modellierten Flächen (Viertel-Kreissegmente) eines Brennstabs und für jede axiale Ebene eines Brennelements DNBR-Werte. Abb. 3.12 stellt beispielhaft eine solche CTF Ausgabe dar. Die Funktion *post()* extrahiert aus der CTF Ausgabe den kleinsten DNBR-Wert für jeden Stab (aus den vier Flächen) und speichert diesen für jeden Stab und jede axiale Ebene eines Brennelements in der KMACS-Datenbank ab.

```

TIME =      2.8046087309758700
CHANNEL      305      ROD No.      264      SURF. No.      1
NODE  AXIAL POS. (in) Q" (BTU/hr-ft**2) CHF (BTU/hr-ft**2)      DNBR  TONG FAC.
 34  0.1417818701E+03  0.3246225907E+05  0.1308397706E+07  40.30520  1.00000
 33  0.1373443504E+03  0.4782009205E+05  0.1310995569E+07  27.41516  1.00000
 32  0.1329068307E+03  0.6591860658E+05  0.1315324788E+07  19.95377  1.00000
 31  0.1284693110E+03  0.8126561604E+05  0.1321562014E+07  16.26225  1.00000
 30  0.1240317913E+03  0.9432378764E+05  0.1329389798E+07  14.09390  1.00000
 29  0.1195942717E+03  0.1057082274E+06  0.1338570789E+07  12.66288  1.00000
 28  0.1151567520E+03  0.1157548218E+06  0.1348940485E+07  11.65343  1.00000
 27  0.1107192323E+03  0.1245831681E+06  0.1360352397E+07  10.91923  1.00000
 26  0.1062817126E+03  0.1323314393E+06  0.1372696135E+07  10.37317  1.00000
 25  0.1018441929E+03  0.1391678911E+06  0.1385873400E+07  9.95828  1.00000
 24  0.9740667323E+02  0.1449840579E+06  0.1399773269E+07  9.65467  1.00000
 23  0.9296915354E+02  0.1499185311E+06  0.1414295043E+07  9.43376  1.00000
 22  0.8853163386E+02  0.1540260330E+06  0.1429378423E+07  9.28011  1.00000
 21  0.8409411117E+02  0.1572165223E+06  0.1444912024E+07  9.18474  1.00000

```

Abb. 3.12 Beispiel für eine CTF Ausgabe mit Darstellung der axialen Verteilung von DNBR-Werten

Mit dem ersten Zyklus des BEAVRS-Benchmarks (vgl. Kap. 3.2.1) unter Verwendung einer stabaufgelösten Leistungsverteilung wurde die Implementierung des *kpostal* Moduls und die Anbindung von CTF zur DNBR-Wert Berechnung überprüft. Die Plots in Abb. 3.13 und Abb. 3.14 stellen die DNBR-Werte grafisch dar. Die Plots wurden mit dem KMACS-Modul *kvip* erstellt. Für den Zyklusbeginn zeigt Abb. 3.13 die radiale DNBR Verteilung für das höchstbelastete Brennelement sowie den axialen Verlauf des DNBR Werts für den höchstbelasteten Brennstab in diesem Brennelement. Abb. 3.14 zeigt solche Verteilungen für das Zyklusende. Am Zyklusbeginn unterliegt das Brennelement auf der Position M-12 der höchsten Belastung, am Zyklusende ist es das Brennelement an der Position G-14. Bei Zyklusbeginn ist die radiale DNBR-Verteilung im Brennelement sowie der axiale Verlauf des DNBR-Werts des höchstbelasteten Brennstabs nahezu symmetrisch. Beim Zyklusende ist innerhalb des Brennelements eine asymmetrische Verteilung der DNBR-Werte zu erkennen. Zudem zeigt der axiale Verlauf eine Abnahme des DNBR-Werts mit zunehmender Kernhöhe.

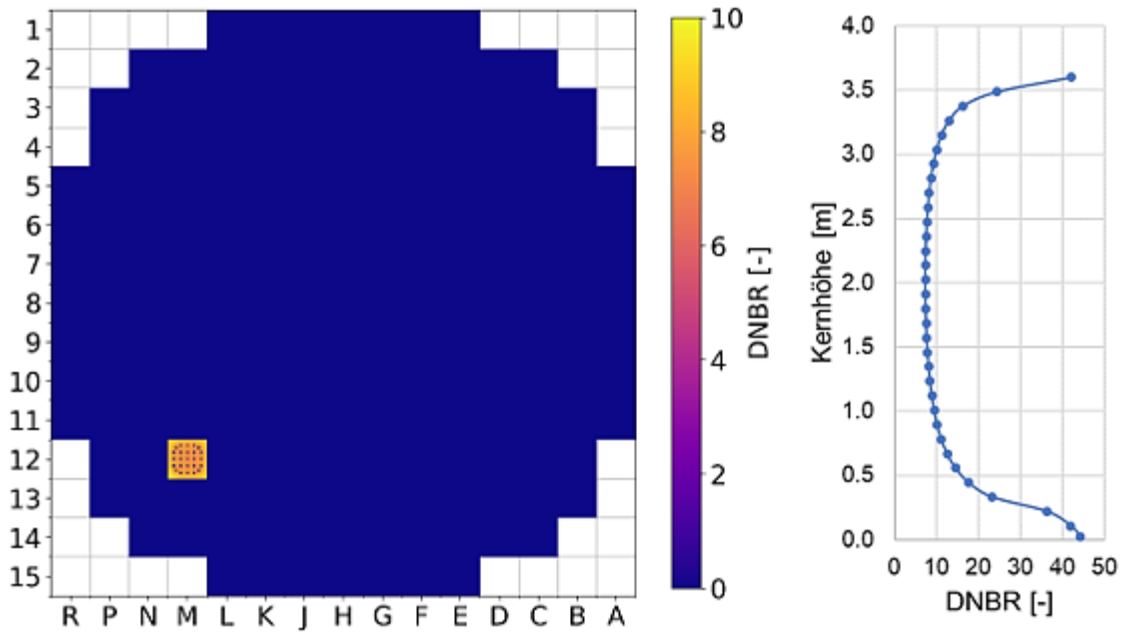


Abb. 3.13 Radiale DNBR-Verteilung im höchstbelasteten Brennelement und axiale DNBR-Verteilung im höchstbelasteten Brennstab am Zyklusbeginn

Links: Brennelement, radial; rechts: Brennstab, axial.

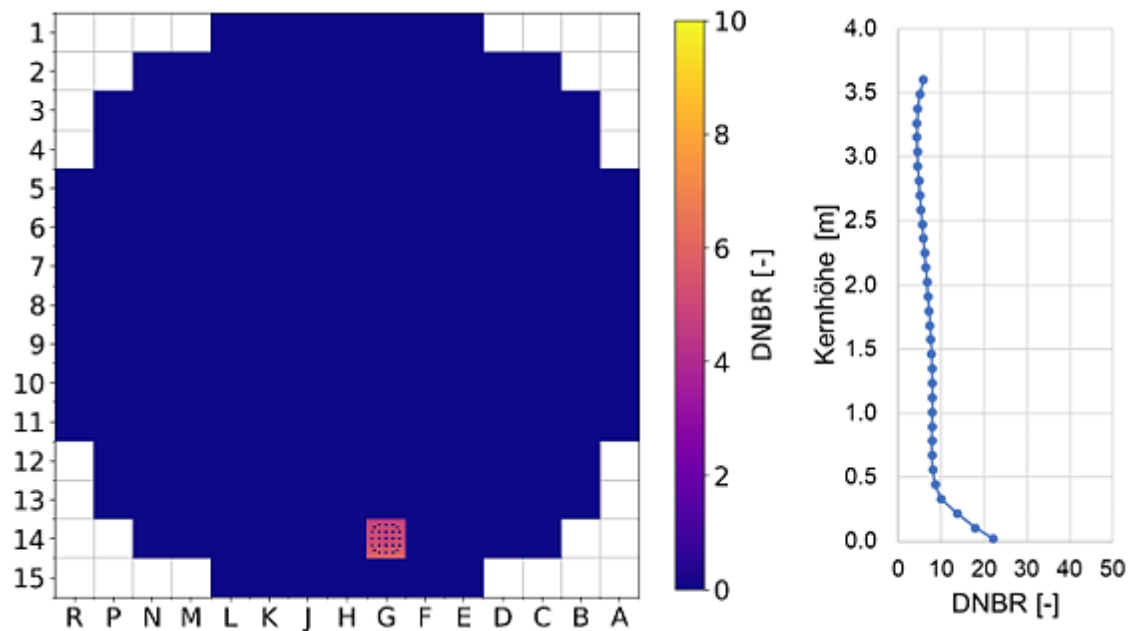


Abb. 3.14 Radiale DNBR-Verteilung im höchstbelasteten Brennelement und axiale DNBR-Verteilung im höchstbelasteten Brennstab am Zyklusende

Links: Brennelement, radial; rechts: Brennstab, axial.

3.2.5 Erprobung von KMACS zur Ermittlung von Parametern aus Anfahrtests

Beim Wiederanfahren eines Reaktors nach einem Brennelementwechsel werden zunächst im Rahmen von Anfahrtests unter Nulllast-Heiß Bedingungen sicherheitstechnisch relevante Kenngrößen zur Überprüfung der Kernausslegung bestimmt. Solche Kenngrößen, wie z. B. die Wirksamkeit von Steuerstabbänken, kritische Borkonzentrationen, isothermer Temperaturkoeffizient, bilden eine wertvolle Basis für die Validierung von Kernsimulatoren.

Mit den Kenngrößen des ersten und zweiten Zyklus des BEAVRS Benchmarks (rev. 2.0.2, /HOR 18/) wurde erprobt, inwieweit mit KMACS diese Parameter bereits ermittelt werden können. Über manuelle Änderungen des KMACS Eingabedatensatzes für den BEAVRS Kern wurden entsprechende Ganzkern-Diffusionsrechnungen mit QUABOX/CUBBOX /LAN 78/ bei den in Tab. 3.2 aufgeführten Nulllast-Heiß Bedingungen ausgeführt.

Tab. 3.2 Nulllast-Heiß Bedingungen für die Durchführung von Anfahrtests

Thermische Leistung	25 MW
Druck	15,51 MPa
Kerneintrittstemperatur	560 F (566,5 K)
Moderatordichte	0,73986 g/cm ³

Ausgehend vom Zustand, bei dem alle Steuerstabbänke ausgefahren sind (*All Rods Out, ARO*), wurden nacheinander die verschiedenen Bänke eingefahren und die jeweilige kritische Borkonzentration ermittelt. Da solche Tests bei Zyklusbeginn unter Nulllast durchgeführt werden, wurde der Xenon-freie Zustand des Reaktorkerns angenommen. Für Zyklus 1 und Zyklus 2 vergleicht Tab. 3.3 KMACS Ergebnisse zur kritischen Borkonzentration bei verschiedenen Steuerstabstellungen für Zyklus 1 und 2 des BEAVRS Benchmarks im Vergleich zu Messwerten /HOR 18/ die KMACS Ergebnisse mit den Messwerten /HOR 18/. Mit Abweichungen von 7 ppm bis 52 ppm in der Borkonzentration wurde eine sehr gute Übereinstimmung festgestellt.

Tab. 3.3 KMACS Ergebnisse zur kritischen Borkonzentration bei verschiedenen Steuerstabbankstellungen für Zyklus 1 und 2 des BEAVRS Benchmarks im Vergleich zu Messwerten /HOR 18/

Zyklus	Ausgewertete Steuerstabbank	Krit. Borkonzentration - Messwert [ppm]	Krit. Borkonzentration – KMACS [ppm]	Abweichung [ppm]
Zyklus 1	ARO	975	951	24
Zyklus 1	D	902	895	7
Zyklus 1	C, D	810	798	12
Zyklus 1	A, B, C, D	686	664	22
Zyklus 1	A, B, C, D, SE, SD, SC	508	481	27
Zyklus 2	ARO	1.405	1.353	52
Zyklus 2	C	1.273	1.258	15

Ferner wurden für Zyklus 1 und Zyklus 2 die Wirksamkeiten der verschiedenen Steuerstabbänke in Form von Reaktivitätsdifferenzen ermittelt. Dazu wurden entweder einzelne oder gleichzeitig mehrere Steuerstabbänke vollständig in den Kern eingefahren, der Multiplikationsfaktor ermittelt und die Reaktivitätsdifferenz zum ARO Referenzzustand gebildet. Tab. 3.4 und Tab. 3.5 vergleichen für Zyklus 1 und Zyklus 2 die mit KMACS ermittelten Steuerstabbankwirksamkeiten mit den verfügbaren Messwerten /HOR 18/. Mit Abweichungen von -52 pcm bis 106 pcm in der Reaktivitätsdifferenz wurde für beide Zyklen eine gute Übereinstimmung erzielt.

Tab. 3.4 KMACS Ergebnisse zu Steuerstabwirksamkeiten für BEAVRS Zyklus 1 im Vergleich zu Messwerten /HOR 18/

Ausgewertete Steuerstabbänke	Reaktivitätsdifferenz – Messwert [pcm]	Reaktivitätsdifferenz – KMACS [pcm]	Abweichung (Gemessene-Ergebnisse) [pcm]
D drin	788	726	62
C mit D drin	1.203	1.217	-14
B mit D, C drin	1.171	1.175	-4
A mit D, C, B drin	548	520	28
SE mit D, C, B, A drin	461	463	-2
SD mit D, C, B, A, SE drin	772	757	15
SC mit D, C, B, A, SE, SD drin	1.099	1.001	98

Tab. 3.5 KMACS Ergebnisse zu Steuerstabwirksamkeiten für BEAVRS Zyklus 2 im Vergleich zu Messwerten /HOR 18/

Ausgewertete Steuerstabbänke	Reaktivitätsdifferenz – Messwert [pcm]	Reaktivitätsdifferenz – KMACS [pcm]	Abweichung [pcm]
D	426	445	-19
C	1014	997	17
B	716	610	106
A	420	472	-52
SE	438	438	0
SD	305	303	2
SC	307	303	4
SB	781	753	28
SA	326	287	39
Berechnete Summe	4.733	4.608	125

Für die Ermittlung des isothermen Temperaturkoeffizienten wurden alle Temperaturen der Materialien im Reaktorkern um ± 10 F ($= \pm 5,55$ K) geändert. Unter der Annahme eines konstanten Systemdrucks ändert sich die Moderatorichte entsprechend zu $0,75035$ g/cm³ (550 F) bzw. $0,72879$ g/cm³ (570 F). Mit diesen geänderten Bedingungen wurden erneut Kritikalitätsrechnungen für die drei folgenden Zustände durchgeführt: i) ARO mit 975 ppm Bor, ii) eingefahrene Steuerstabbank D mit 902 ppm Bor, iii) eingefahrene Steuerstabbänke D und C mit 810 ppm Bor. Tab. 3.6 listet die berechneten und die gemessenen isothermen Temperaturkoeffizienten auf. Während für alle drei untersuchten Zustände von Zyklus 1 eine gute Übereinstimmung mit den Messwerten erreicht wurde, wurde für den ARO Zustand von Zyklus 2 eine signifikante Abweichung festgestellt. Der Grund für diese Abweichung wird in weiterführenden Untersuchungen geklärt werden.

Tab. 3.6 Isotherme Temperaturkoeffizienten für BEAVRS Zyklus 1 und 2 ermittelt mit KMACS im Vergleich zu Messwerten /HOR 18/

Zyklus	Steuerstabbank	Borkonzentration [ppm]	Isothermer Temperaturkoeffizient – Messwert [pcm/F]	Isothermer Temperaturkoeffizient – KMACS [pcm/F]
Zyklus 1	ARO	975	-1,75	-1,96
Zyklus 1	D drin	902	-2,75	-3,36
Zyklus 1	C, D drin	810	-8,01	-7,37
Zyklus 2	ARO	1405	-1,71	1,36

In dieser Studie wurde festgestellt, dass mit KMACS eine Ermittlung von sicherheitstechnisch relevanten Kenngrößen aus Anfahrtests bereits möglich ist. Aufgrund der Vielzahl manuell zu ändernder Parameter in der KMACS Eingabe für jede Rechnung können jedoch leicht Eingabefehler durch den Anwender gemacht werden. Um die Fehleranfälligkeit in Zukunft zu reduzieren, soll KMACS künftig dahingehend erweitert werden, dass diese Kenngrößen automatisiert berechnet werden können.

3.3 Weiterentwicklung von KMACS für Reaktoren mit hexagonaler Geometrie

Für die Sicherheitsbewertung von Reaktoren mit hexagonaler Geometrie, z. B. russische WWER-Reaktoren, wurde KMACS im Rahmen dieses Vorhabens für die Analyse von Reaktoren mit hexagonaler Kerngeometrie ertüchtigt. Zu diesem Zweck wurde das KMACS-Eingabedatenformat erweitert und Weiterentwicklungen am KMACS-Modul *kspect* zur Wirkungsquerschnittsgenerierung, am KMACS-Modul *kflux* zur Ganzkern-Rechnung und am KMACS-Modul *kvip* zur Postprozessierung und Visualisierung vorgenommen. Das Schema der KMACS-Datenbank ist geometrieunabhängig angelegt, sodass keine zusätzlichen Arbeiten an dieser Stelle geleistet werden mussten. Zur Verifikation und Validierung der Weiterentwicklungen wurden Nachrechnungen des Nulllast-Heiß Zustands und des ersten Betriebszyklus des WWER-1000 Kerns des X2 Benchmarks /LÖT 09/ durchgeführt.

3.3.1 Weiterentwicklungen von KMACS zur Beschreibung hexagonaler Reaktoren

In den folgenden Abschnitten werden die Weiterentwicklungen am KMACS-Eingabedatenformat und an den KMACS-Modulen detailliert beschrieben.

Erweiterung des KMACS-Eingabedatenformats

Das auf YAML /BEN 09/ basierende Eingabedatenformat von KMACS wurde für die Eingabe von hexagonalen Reaktorsystemen erweitert.

Zur Erstellung der Modelle zur Wirkungsquerschnittsvorausrechnung mit z. B. dem Spektralcode T-NEWT aus dem SCALE-Programmsystem werden geometrische Parameter des hexagonalen Brennelements und das Stabgitter eingegeben. Anhand des untenstehenden Auszugs (Abb. 3.15) der KMACS Eingabe zum Brennelement 390GO aus dem X2 Benchmark werden die entsprechenden Eingaben im Folgenden erklärt.

Der Parameter *subset:hexfull* legt fest, dass es sich um ein hexagonales Brennelement handelt und dass das gesamte Stabgitter zur Definition der Anordnung der verschiedenen Stabtypen innerhalb des Brennelements gegeben wird. Über *assemblyPitch* wird der Abstand zwischen zwei Brennelementen festgelegt, wobei diese Brennelemente mit der flachen Seite und nicht mit der Spitze nebeneinander liegen. Der Abstand ist somit

der Inkreisradius (Schlüsselweite) eines Hexagons. Der Parameter *hexAssemblyInnerPitch* dient zur Definition eines Hexagons, in dem sich das Stabgitter befindet. Ist *assemblyPitch* größer als *hexAssemblyInnerPitch* wird indirekt ein Wasserspalt zwischen zwei Brennelementen definiert. Ferner können durch Verschmierung von Materialien über das Wasserspaltvolumen Strukturteile wie ein Brennelementkasten oder Verstärkungsplatten definiert werden. Der Parameter *pinPitch* ist die Breite (Inkreisradius) einer hexagonalen Stabzelle. Das Stabgitter, d.h. die Anordnung der Brennstäbe und Führungsrohre im Brennelement, wird als Liste von Nummern angegeben. Diese Nummern werden in der KMACS Eingabe bei der Definition der unterschiedlichen Stabtypen vergeben. Das YAML Format erlaubt die Eingabe dieser Liste als Gitter mit hexagonaler Struktur, sodass Eingabefehler des Anwenders durch die intuitivere Darstellung reduziert werden können.

```
subset: hexFull
assemblyPitch: !unit 236.0 mm
hexAssemblyInnerPitch: !unit 233.5 mm
pinPitch: !unit 12.75 mm

# 1: Brennstab mit 4,0% U-235
# 2: Brennstab mit 3,6% U-235
# 3: Brennstab mit 3,3% U-235 und 5,0 Gew.-% Gd2O3
# 4: Zentrales Führungsrohr
# 5: Führungsrohr
|
|      2 2 2 2 2 2 2 2 2 2
|      2 2 1 1 1 1 1 1 1 1 2 2
|      2 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 2
|      2 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 2
|      2 1 1 1 1 1 1 5 1 1 1 1 1 1 2
|      2 1 1 1 1 5 1 1 1 1 5 1 1 1 1 2
|      2 1 1 1 1 1 1 1 1 1 3 1 1 1 1 1 1 2
|      2 1 1 1 5 1 3 1 5 1 1 1 1 5 1 1 1 2
|      2 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 5 1 1 1 1 1 1 2
|      2 1 1 1 1 1 1 5 1 1 1 1 1 3 1 1 1 1 1 2
|      2 2 1 1 1 5 1 1 1 1 4 1 1 1 1 5 1 1 1 2 2
|      2 1 1 1 1 1 3 1 1 1 1 1 5 1 1 1 1 1 1 2
|      2 1 1 1 1 1 1 5 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 2
|      2 1 1 1 5 1 1 1 1 5 1 3 1 5 1 1 1 1 2
|      2 1 1 1 1 1 1 1 3 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 2
|      2 1 1 1 1 5 1 1 1 1 5 1 1 1 1 1 1 1 2
|      2 1 1 1 1 1 1 1 5 1 1 1 1 1 1 1 1 2
|      2 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 2
|      2 2 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 2 2
|      2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2 2
```

Abb. 3.15 KMACS Eingabe zum Brennelement 390GO aus dem X2 Benchmark

Auf ähnliche Weise wird der Beladeplan des Reaktorkerns für die Ganzkern-Rechnung definiert. Der folgende Auszug (Abb. 3.16) aus der KMACS-Eingabe zeigt beispielhaft den Beladeplan des Zyklus 1 des X2 Kerns. Brennelemente werden anhand einer Bezeichnung, in diesem Beispiel nur eine Nummer, im hexagonalen Kerngitter positioniert. Die Bezeichnung wird in der KMACS-Eingabe bei den Definitionen der Brennelemente und Reflektoren festgelegt. Zudem können verschiedene Reflektoren, in diesem Beispiel gekennzeichnet mit `ref1` bis `ref5`, um den aktiven Kern angeordnet werden.

```

00|           ref2 ref3 ref4 ref5 ref4 ref3 ref2
01|       ref2 ref1 158 159 160 161 162 163 ref1 ref2
02|           ref3 149 150 151 152 153 154 155 156 157 ref3
03|       ref4 139 140 141 142 143 144 145 146 147 148 ref4
04|           ref5 128 129 130 131 132 133 134 135 136 137 138 ref5
05|       ref4 116 117 118 119 120 121 122 123 124 125 126 127 ref4
06|   ref3 103 104 105 106 107 108 109 110 111 112 113 114 115 ref3
07| ref2 89  90  91  92  93  94  95  96  97  98  99 100 101 102 ref2
08| ref1 76  77  78  79  80  81  82  83  84  85  86  87  88 ref1
09| ref2 62  63  64  65  66  67  68  69  70  71  72  73  74  75 ref2
10|   ref3 49  50  51  52  53  54  55  56  57  58  59  60  61 ref3
11|       ref4 37  38  39  40  41  42  43  44  45  46  47  48 ref4
12|           ref5 26  27  28  29  30  31  32  33  34  35  36 ref5
13|       ref4 16  17  18  19  20  21  22  23  24  25 ref4
14|           ref3  7  8  9 10 11 12 13 14 15 ref3
15|       ref2 ref1  1  2  3  4  5  6 ref1 ref2
16|           ref2 ref3 ref4 ref5 ref4 ref3 ref2

```

Abb. 3.16 Beladeplan des Zyklus 1 des X2 Kerns

Erweiterung des KMACS-Moduls *kspect*

Zur Vorausrechnung homogenisierter Wirkungsquerschnitte von hexagonalen Brennelementen wurde der Spektralcode T-NEWT aus dem SCALE-Programmsystem ausgewählt. Da T-NEWT im Rahmen von KMACS bereits für quadratische Brennelemente eingesetzt wird, konnte auf bereits implementierte Funktionen, wie z. B. die Erstellung der Materialzusammensetzungen, zurückgegriffen werden. Neue Funktionen wurden im Wesentlichen zur Geometrieerstellung von hexagonalen Stabzellen und von hexagonalen Brennelementen implementiert.

Für die Anordnung der Brennstäbe im hexagonalen Brennelementmodell von T-NEWT wird im Gegensatz zu den quadratischen Brennelementmodellen nicht die *array* Funktion (automatisierte Anordnung der Brennstäbe in einem regelmäßigen quadratischen oder hexagonalen Gitter über den Brennstababstand) von T-NEWT verwendet, sondern jeder Brennstab einzeln mittels der *hole* Funktion von T-NEWT (Einfügen eines kreisförmigen Ausschnitts in bestehender geometrischer Form zur Positionierung einer kreisförmigen Form) positioniert. Die *array* Funktion wurde zu diesem Zweck getestet, lieferte

jedoch keine zufriedenstellende Geometriedarstellung des Brennelements. Zudem können durch Anwendung der *hole* Funktion auch Führungsrohre im Brennelementgitter positioniert werden, deren Außendurchmesser größer als die Maschenweite des sonst implementierten Stabgitters mittels der *array* Funktion wäre. Als Beispiel für die automatisierte Erstellung von T-NEWT Modellen von hexagonalen Brennelementen mit KMACS zeigt Abb. 3.17 das T-NEWT Modell des 13AU Brennelements aus dem X2-Benchmark. Zur Modellierung eines unendlichen Gitters von Brennelementen werden weiße Randbedingungen, d.h. eine isotrope Rückstreuung von Neutronen bei Überschreiten der äußersten Geometrie, verwendet.

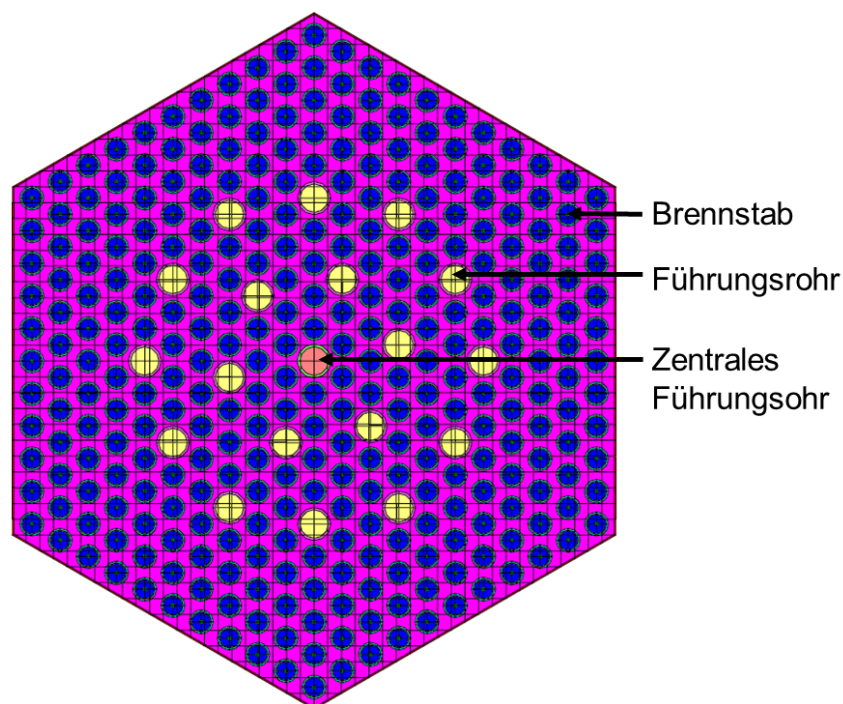


Abb. 3.17 Grafische Darstellung des zweidimensionalen T-NEWT-Modells des 13AU Brennelements aus dem X2 Benchmark

Zur Vorausrechnung von Reflektor-Wirkungsquerschnitten wird eine aktive Region bestehend aus einem Brennelement und einer Reflektorregion bestehend aus einer schichtweisen Aneinanderreihung von Reflektor-Materialien modelliert. Die aktive Region dient zur Erzeugung eines repräsentativen Neutronenflusses in der Reflektorregion, der zur Homogenisierung der Reflektor-Wirkungsquerschnitte benötigt wird. Abb. 3.18 zeigt als Beispiel ein T-NEWT-Reflektor-Modell aus dem X2-Benchmark. Neben dem Brennelement befindet sich die Reflektorregion bestehend aus einem Wasserspalt, einer Stahlschicht, einer Wasserschicht und einer äußeren Stahlschicht. Weiße Rand-

bedingungen werden sowohl für die positive und negative y-Koordinatenrichtung wie auch für die negative x-Koordinatenrichtung verwendet. In positiver x-Koordinatenrichtung werden Vakuum-Randbedingungen zur Modellierung der Neutronenleckage verwendet. Auch wenn das eigentliche Brennelement eine hexagonale Form besitzt, kann das Brennelement im T-NEWT-Reflektor-Modell momentan nur als Rechteck modelliert werden. Es ist geplant, dass in einer künftigen Ausbaustufe von KMACS komplexere T-NEWT-Reflektormodelle automatisiert erstellt werden können.

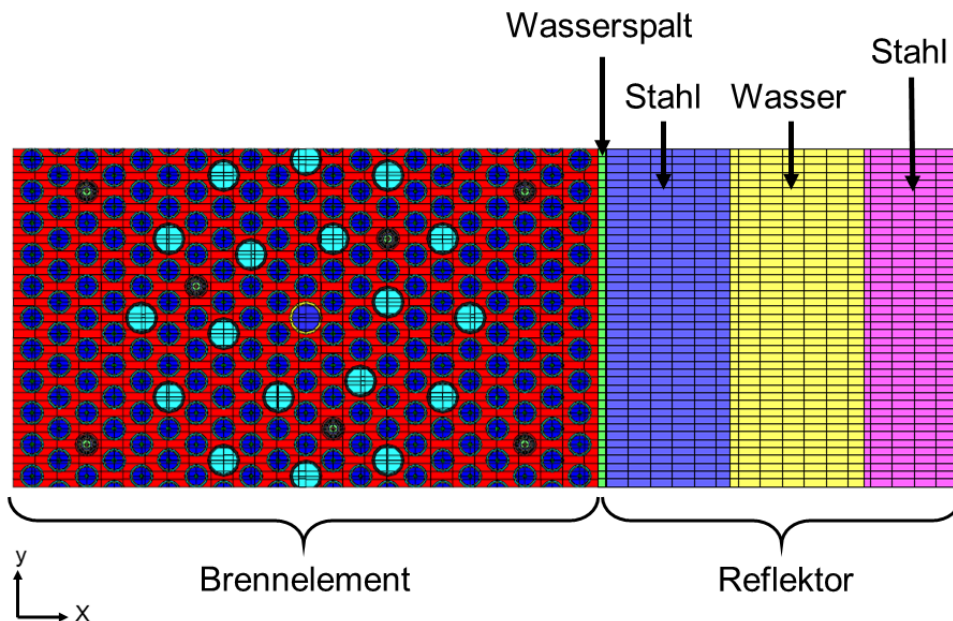


Abb. 3.18 T-NEWT-Modell zur Vorausrchnung von Reflektor-Wirkungsquerschnitten

Erweiterung des KMACS-Moduls *kflux*

Im *kflux* Modul wurde die Schnittstelle zum Reaktordynamikcode DYN3D zwecks Ganzkern-Rechnungen von hexagonalen Reaktoren erweitert. Aufgrund der hexagonalen Brennelement- und Reaktorgeometrie erforderte dies Erweiterungen an sämtlichen Funktionen zur Eingabeerzeugung. Zum Beispiel wird die Reaktorgeometrie über nicht-orthogonale Koordinatenachsen definiert. Ferner werden in die DYN3D Wirkungsquerschnittsbibliotheken pro Brennelement und Abbrandpunkt ADFs geschrieben. Dies geschieht unter Beachtung der richtigen Zuordnung der ADFs zur jeweiligen Brennelementseite (West bis Nordwest) und von möglichen Brennelementdrehungen.

Erweiterung des KMACS-Moduls *kvip*

Als Hilfsmittel bei der Erstellung der KMACS-Eingabe von hexagonalen Brennelementen für die Wirkungsquerschnittsvorausrechnung wurde die Möglichkeit geschaffen, das Stabgitter eines Brennelements sowie die entsprechenden Ergebnisse aus der Wirkungsquerschnittsberechnung auf seine Geometrie zu projizieren. Weiterhin können Beladepläne und die Anordnungen der Steuerstabgruppen auf die Kerengeometrie projiziert werden. Das Modul *kvip* erkennt und unterstützt jetzt dazu kategoriale Variablen auch in 2D-Ansichten, für die diskrete Farbbalken zur Anwendung kommen. Durch die Visualisierung von Eingabedaten wird dem Anwender die Möglichkeit gegeben, Eingabefehler bereits vor den KMACS-Rechnungen zu identifizieren und zu korrigieren.

3.3.2 Verifikation und Validierung der Weiterentwicklung von KMACS für die Beschreibung hexagonaler Reaktoren

Zur Verifikation und Validierung der Weiterentwicklung von KMACS für die Beschreibung von hexagonalen Reaktoren, z. B. WWER-Reaktoren, wurde das X2 Benchmark ausgewählt /LÖT 09/, /LÖT 10/, /BIL 20/. Dieses Benchmark basiert auf den Betriebsdaten des zweiten Blocks des Kernkraftwerks Chmelnyzkyj NPP vom Typ WWER-1000 in der Ukraine und dient durch eine umfassende Bereitstellung von Messdaten, z. B. kritische Borkonzentration, Reaktivitätskoeffizienten, Steuerstabwirksamkeiten und Neutronendetektorsignale, zur Verifikation und Validierung von Kernsimulatoren. Für Zyklusrechnungen stehen Betriebsparameter und Beladepläne für die ersten vier Betriebszyklen sowie Daten zu Anfahrtests beim Nulllast-Heiß Zustand bei Zyklusbeginn des ersten Zyklus zur Verfügung. In den Kern eingesetzt wurden Brennelemente, die nur aus UO_2 Brennstäben bestanden, sowie Brennelemente, die im Stabgitter neun oder sechs $\text{UO}_2+\text{Gd}_2\text{O}_3$ Brennstäbe enthielten.

Nachrechnung des Nulllast-Heiß Zustands

Im ersten Schritt wurde die KMACS-Eingabe zum X2 Benchmark erstellt. Die Eingabe umfasst die verschiedenen Brennelemente und Reflektoren mit den entsprechenden Materialzusammensetzungen, die Reaktorgeometrie, die Steuerstabanordnungen, die Beladepläne und die Betriebsparameter für den betrachteten Zyklus. Die korrekte Eingabe der Brennelemente, Beladepläne und der Anordnung der Steuerstabgruppen wurde mit *kvip*-erstellten Plots überprüft. Beispielhaft zeigt Abb. 3.19 das Layout des Brennelements 390GO. Anhand der diskreten Farbunterteilung werden die ver-

schiedenen Stabtypen, die in KMACS zur Verfügung stehen, im Layout identifiziert: *guideTube* = Führungsrohr, *waterRod* = Wasserstab, *gdFuel* = Brennstab bestehend aus $UO_2+Gd_2O_3$ Brennstoff, *fuel* = Brennstab bestehend aus UO_2 Brennstoff. Als zusätzliche Information wird beim Farbbalken unter den Stabtypen der radiale Aufbau der Stäbe von innen nach außen anhand der vergebenen Materialnamen dargelegt. Auf diese Weise kann sichergestellt werden, dass die verschiedenen Stäbe des Brennelements richtig definiert sind und dass deren Position im Stabgitter korrekt ist.

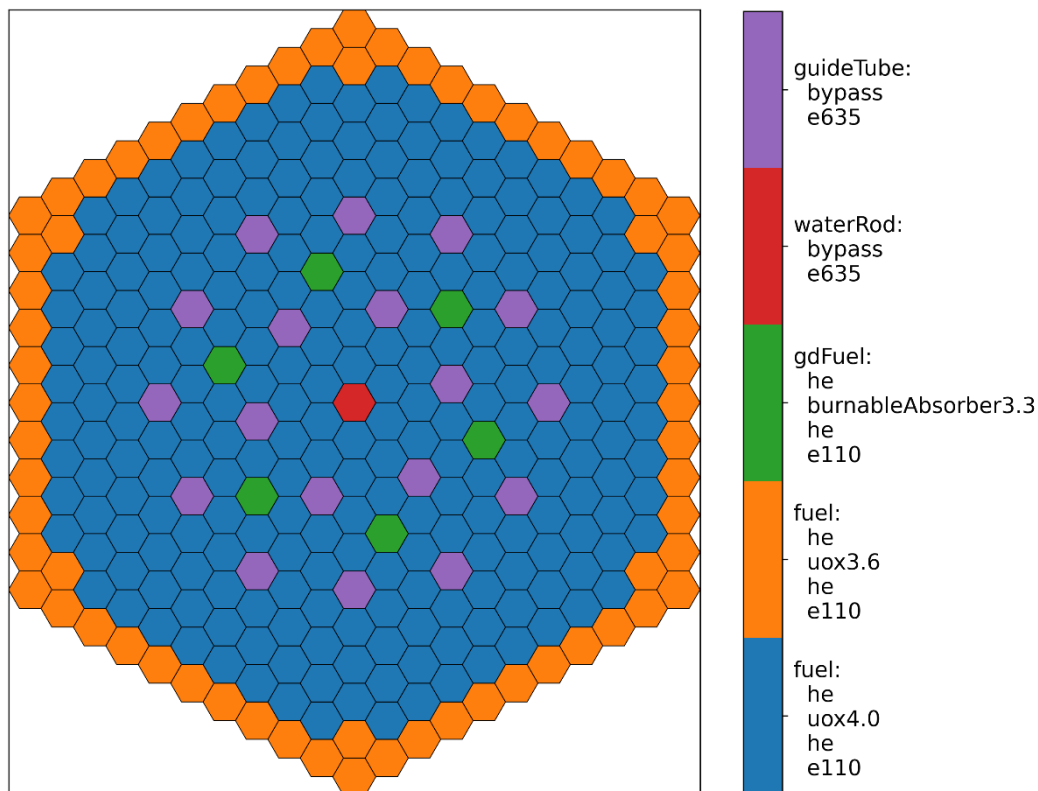


Abb. 3.19 KMACS-Darstellung des Layouts des Brennelements 390GO mit radialem Aufbau der Stäbe des X2 Benchmarks

Neben den Brennelementen wurden fünf radiale Reflektoren sowie ein unterer axialer Reflektor und ein oberer axialer Reflektor modelliert. Die radialen Reflektoren unterscheiden sich sowohl durch das Brennelement für den aktiven Teil als auch durch unterschiedliche Breiten der Wasser- und Stahl-Schichten in dem Reflektorteil. Die Maße der Wasser- und Stahlschichten wurden /JAN 20/ entnommen. Durch die Verwendung von fünf radialen Reflektoren wird das variierende Wasser-zu-Stahl-Verhältnis entlang des Umfangs des Reaktorkerns modelliert, welches durch die hexagonale Kerngeometrie und der Vielzahl von Wasserlöchern im Stahlreflektor bedingt ist.

Abb. 3.20 zeigt den aus der KMACS-Eingabe erstellten Beladeplan für den ersten Zyklus. Anhand der Farben bzw. der Schattierungen wurde die richtige Positionierung der Brennelemente und der radialen Reflektoren im Kern überprüft.

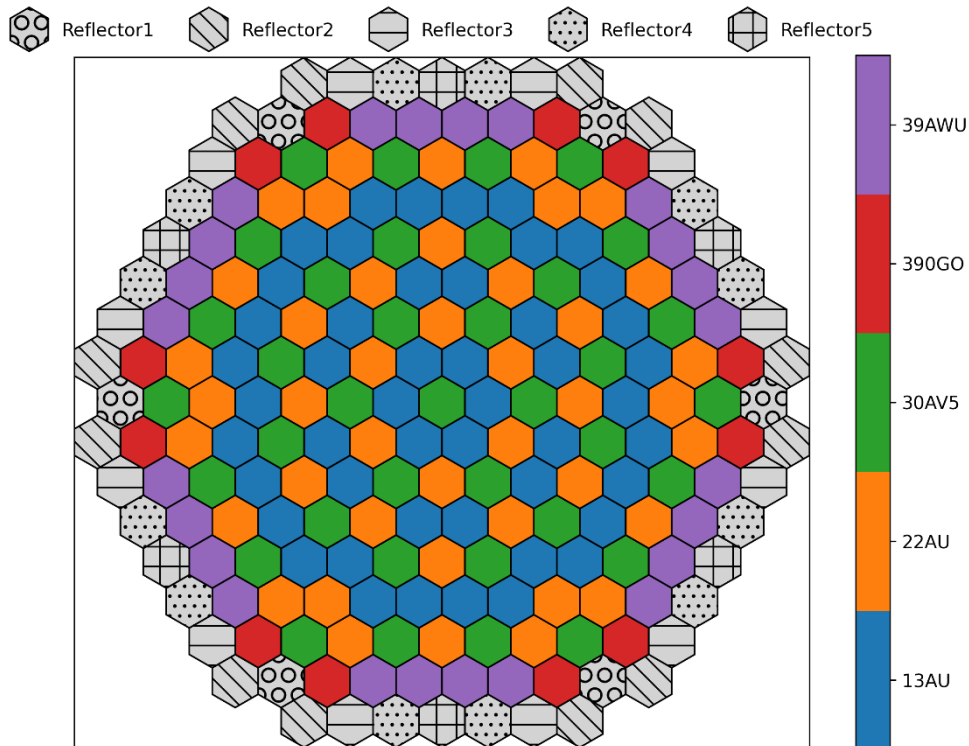


Abb. 3.20 KMACS-Darstellung des Beladeplans von Zyklus 1 des X2 Kerns

In Abb. 3.21 werden die Steuerstabgruppen auf das Kernlayout projiziert (gelb markierte Positionen). Die Kennzeichnung, in diesem Beispiel mittels einer zuvor vergebenen Nummer, identifiziert die jeweilige Steuerstabgruppe. In der KMACS-Eingabe zu den Betriebsparametern eines Zyklus wird die Einfahrtiefe einer Steuerstabgruppe für jeden Zeitschritt eines Zyklus vorgegeben.

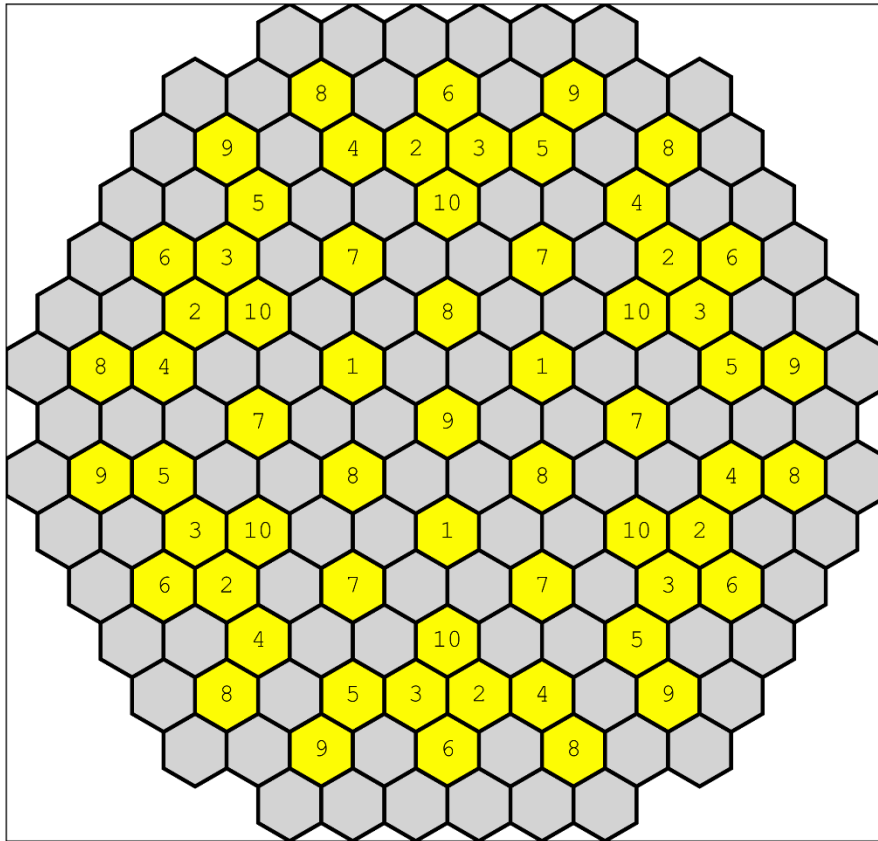


Abb. 3.21 KMACS-Darstellung der Steuerstabgruppen des X2 Kerns

Für die Analyse des Nulllast-Heiß Zustands bei Beginn des ersten Zyklus wurden homogenisierte Wirkungsquerschnitte für die Brennelemente und Reflektoren mit dem Spektラルcode T-NEWT ermittelt (Brennstofftemperatur: 554 K, Moderator-dichte: 0,7629 g/cm³, Borkonzentration: 1.207 ppm /BIL 20/). Zur Kondensierung der Wirkungsquerschnitte wurde wie beim BEAVRS Benchmark (Kap. 3.2.1) das unendliche Neutronenspektrum verwendet. Anschließend erfolgte die Ganzkern-Rechnung mit DYN3D bei konstanter Brennstofftemperatur, Moderator-dichte und Borkonzentration zur Bestimmung des Multiplikationsfaktors und der radialen Brennelementleistungverteilung. Zur Verifikation der KMACS/T-NEWT-DYN3D Ergebnisse wurde ein Referenzmodell für den Monte-Carlo-Code Serpent erstellt und eine entsprechende Rechnung durchgeführt. Die Leistungsverteilung von Serpent wies aufgrund der statistischen Monte-Carlo-Methode keine perfekte Symmetrie auf und wurde deswegen nachträglich über Kernausschnitte von 60° gemittelt. Der Multiplikationsfaktor von KMACS/T-NEWT-DYN3D beträgt 0,99738. Mit einer Reaktivitätsdifferenz von -279 pcm ist dieser Wert in guter Übereinstimmung mit dem Serpent Referenzergebnis von 1,00016. Wie in Abb. 3.22 gezeigt, stimmen die Leistungsverteilungen von KMACS/T-NEWT-DYN3D und Serpent sehr gut überein. Der

quadratische Mittelwert der relativen Abweichungen beträgt 1,5 %. Die maximale relative Abweichung ist 3,4 % und tritt bei Brennelementen am Kernrand auf.

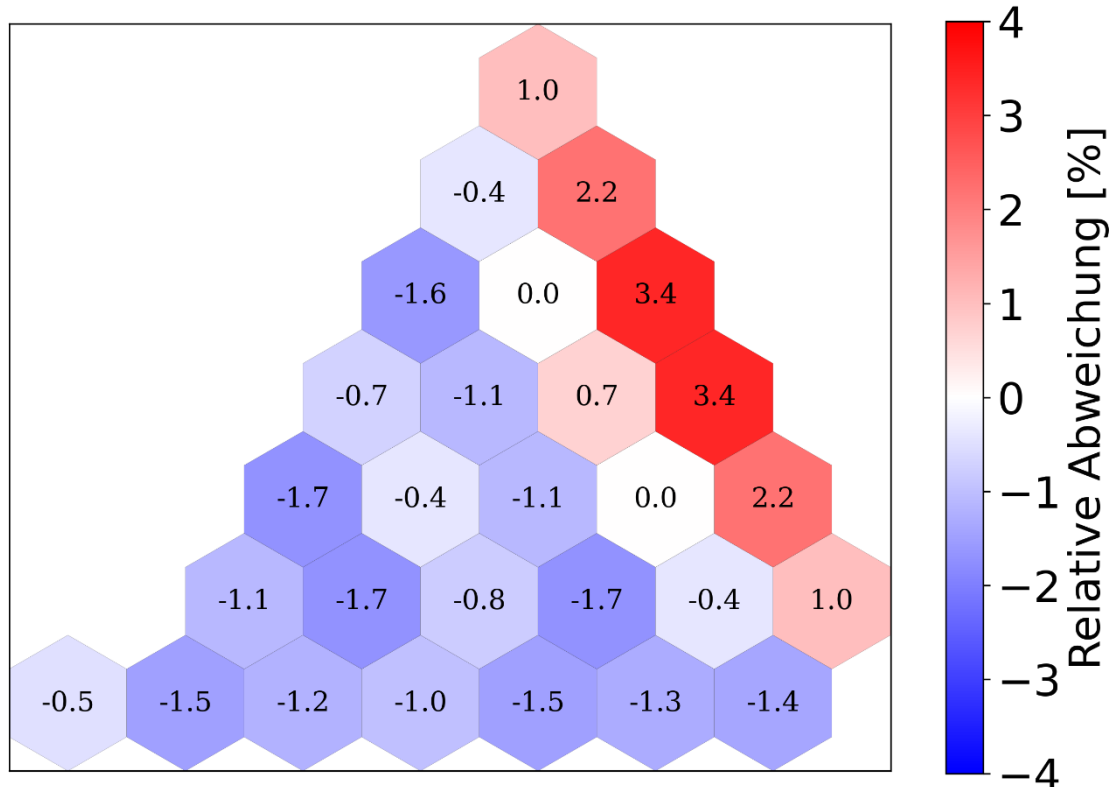


Abb. 3.22 Relative Abweichung der radialen Brennelementleistungsverteilung zwischen KMACS/T-NEWT-DYN3D und Serpent des X2 Kerns bei Nulllast-Heiß (Darstellung 60° Kernausschnitt)

Nachrechnung des ersten Betriebszyklus

Zur Nachrechnung des ersten Betriebszyklus wurde die für den Nulllast-Heiß Zustand erstellte KMACS-Eingabe um Betriebsparameter für den ersten Zyklus und um geeignete thermohydraulische Verzweigungsparameter für die Wirkungsquerschnittsvorausrechnung erweitert.

Als Betriebsparameter wurde der Systemdruck 15,76 MPa sowie für 323 Zykluszeitpunkte die Anzahl der Volllasttage, die thermische Reaktorleistung, die Einfahrtiefe der Steuerstabgruppe 10, die Kühlmiteleintrittstemperatur und der Kühlmittelmassenstrom vorgegeben.

In Abb. 3.23 wird der Verlauf der thermischen Leistung für den ersten Zyklus dargestellt. Insbesondere am Zyklusanfang sowie kurz vor Zyklusende wurde der Reaktor über längere Zeiträume bei einer geringeren Leistung als der nominellen thermischen Leistung von 3.000 MW betrieben.

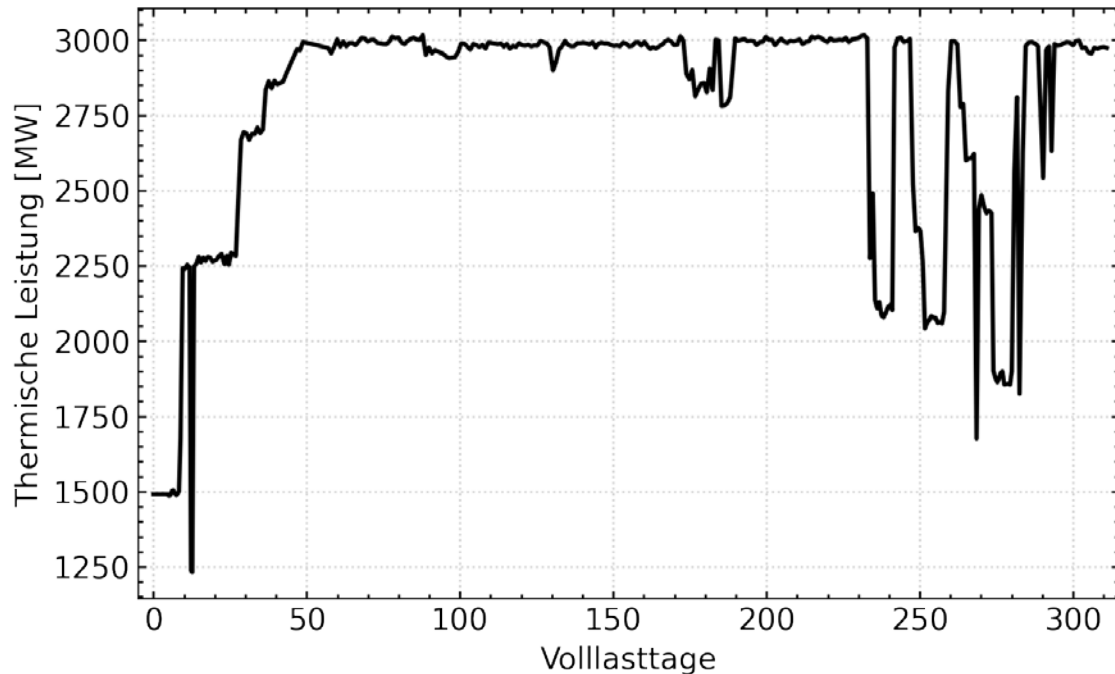


Abb. 3.23 Thermische Leistung beim ersten Zyklus des X2 Kerns

Zur Regelung der Kritikalität wird im Normalbetrieb nur die Steuerstabgruppe 10 verfahren. In der Benchmarkspezifikation wird die Ausfahrhöhe dieser Steuerstabgruppe in Prozent gegeben. Diese Ausfahrhöhe kann gem. /BIL 20/ in eine Ausfahrhöhe in cm umgerechnet werden, um somit den Abstand zwischen unterer Kernkante und der unteren Spitze der Steuerstäbe zu erhalten. Für die Verwendung in KMACS wurde diese Ausfahrhöhe zudem in eine Einfahrtiefe, d. h. Abstand zwischen oberer Kernkante und unterer Steuerstabspitze, umgerechnet. Dazu wurde nach /BIL 20/ eine aktive Kernhöhe von 355 cm für den heißen Reaktorzustand zugrunde gelegt. Abb. 3.24 zeigt den Verlauf der berechneten Einfahrtiefe der Steuerstabgruppe 10 für den ersten Zyklus.

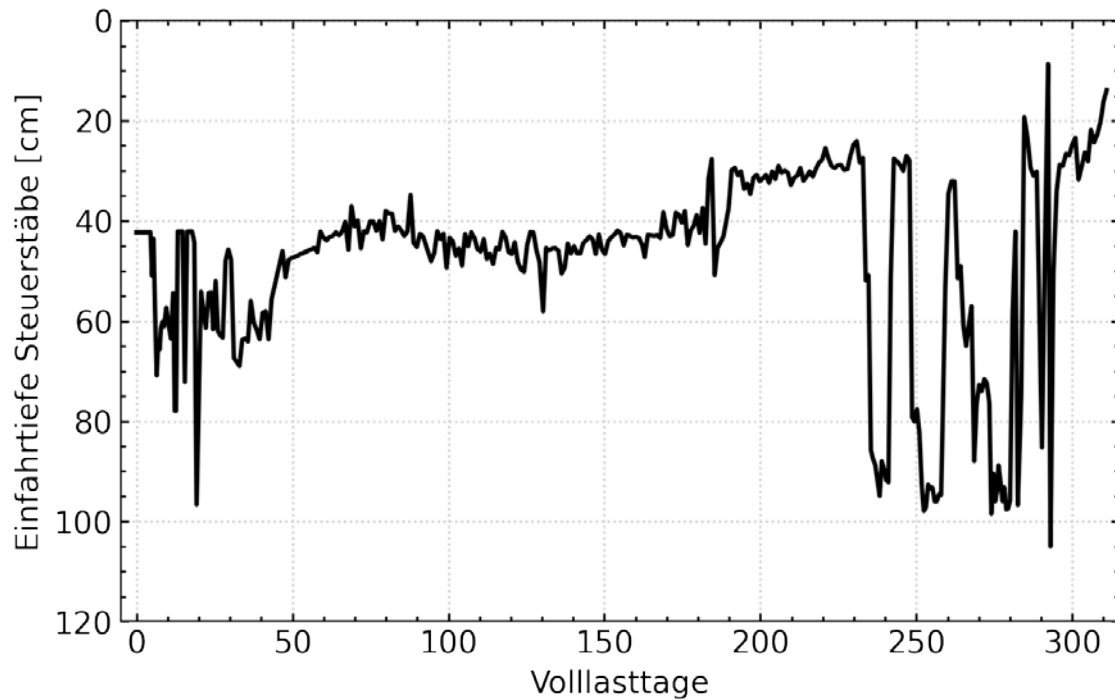


Abb. 3.24 Einfahrtiefe der Steuerstabgruppe 10 beim ersten Zyklus des X2 Kerns

Die Benchmarkspezifikation gibt für 323 Zykluszeitpunkte Werte für den gesamten Kühlmittelvolumenstrom und für die Eintrittstemperatur des Kühlmittels vor. Für die Nachrechnung mit KMACS wurde der zeitabhängige Kühlmittelvolumenstrom in einen zeitabhängigen Kühlmittelmassenstrom umgerechnet. Dazu wurde für jeden Zykluszeitpunkt eine Wasserdichte als Funktion des konstanten Systemdrucks und der variierenden Kühlmiteleintrittstemperatur ermittelt. Abb. 3.25 zeigt dazu den Verlauf der Kühlmiteleintrittstemperatur. Außerdem wurde speziell für die thermohydraulische Modellierung mit DYN3D, da das Reaktormodell aus Brennelementen und Reflektoren besteht, der gesamte Kühlmittelmassenstrom skaliert. Dazu wurde dieser zunächst um 3 % reduziert, um nur den Kühlmittelmassenstrom durch den aktiven Kern eines WWER-1000 Reaktors zu erhalten. Danach erfolgte eine Multiplikation mit dem Verhältnis aller Kernkanäle, d. h. Brennelemente und Reflektoren, zur Anzahl der Brennelemente. Abb. 3.26 zeigt den für die Zyklusrechnung verwendeten Verlauf des Kühlmittelmassenstroms.

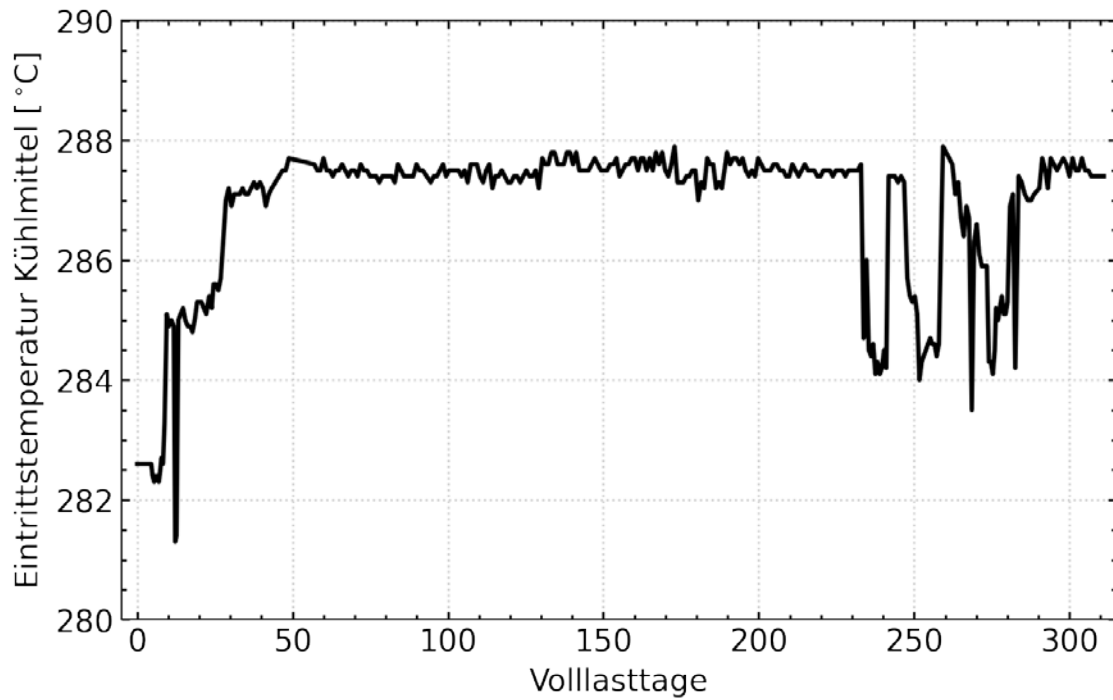


Abb. 3.25 Kühlmittelintrittstemperatur beim ersten Zyklus des X2 Kerns

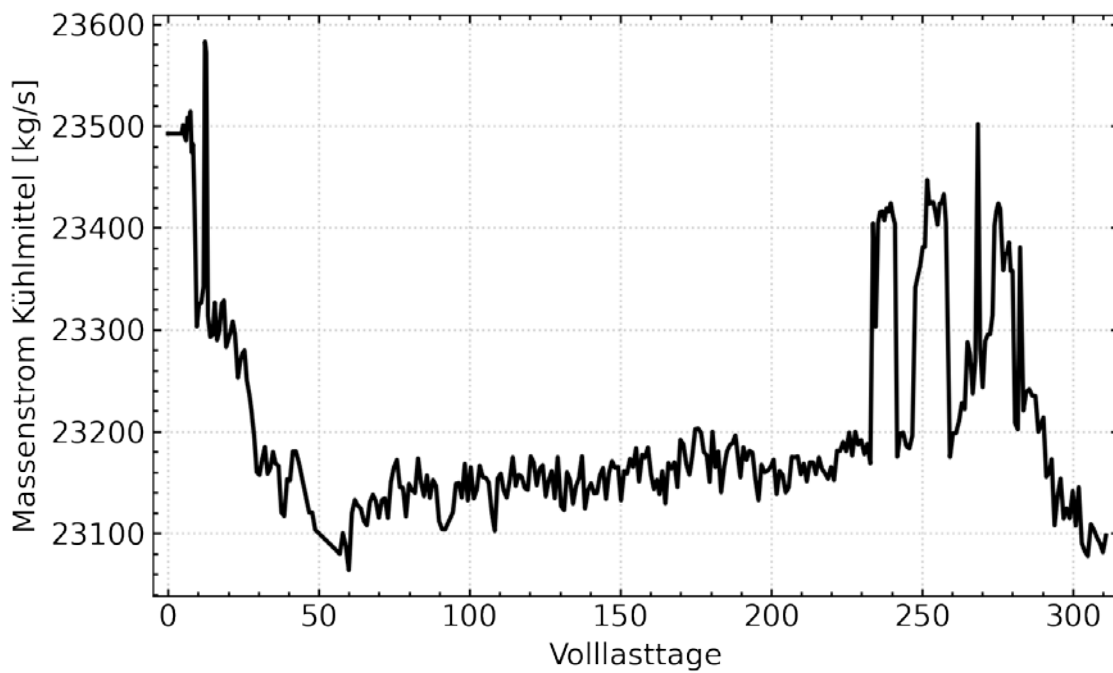


Abb. 3.26 Berechneter Kühlmittelmassenstrom für die Simulation des ersten Zyklus des X2 Kerns

Für die Vorausrechnung der homogenisierten Wirkungsquerschnitte der Brennelemente und Reflektoren mit T-NEWT wurden die folgenden Verzweigungsparameter zur Abdeckung des Teillast- und Volllastbetriebs gewählt:

- Brennstofftemperatur: 554; 850; 1.005; 1.300; 1.700 K,
- Moderatorichte: 0,66; 0,68181; 0,71667; 0,74654; 0,7629; 0,79 g/cm³,
- Borkonzentration: 0; 525; 1.500 ppm,
- Abbrand: 0; 0,25; 0,75; 1,5; 2,5; 3,5; 4,5; 5,5; 6,5; 7,5; 8,5; 9,5; 10,5; 11,5; 12,5; 13,5; 14,5; 15,5; 17,5; 18,5; 20,5; 21,5; 24,5; 25,5; 28,5; 31,5; 34,5; 37,5; 40,5; 43,5; 46,5; 49,5; 52,5; 55,5; 58,5; 61,5; 64,5; 67,5 MWd/kg HM.

Wie bereits bei der Zyklusrechnung des BEAVRS-Benchmarks (vgl. Kap. 3.2.2) wurde zur Kondensierung der Wirkungsquerschnitte das B1-korrigierte Neutronenspektrum verwendet.

Die Zyklusrechnung für den ersten Zyklus wurde auf Basis der homogenisierten Wirkungsquerschnitte und der zuvor genannten Betriebsparameter durchgeführt. KMACS hat dafür alternierend DYN3D Ganzkern-Rechnungen mit Abbrandrechnungen (triviales Abbrandmodul von KMACS) ausgeführt. Abb. 3.27 zeigt den Verlauf der berechneten kritischen Borkonzentration im Vergleich zum Verlauf der gemessenen kritischen Borkonzentration. Generell sind berechnete und gemessene kritische Borkonzentration in sehr guter Übereinstimmung.

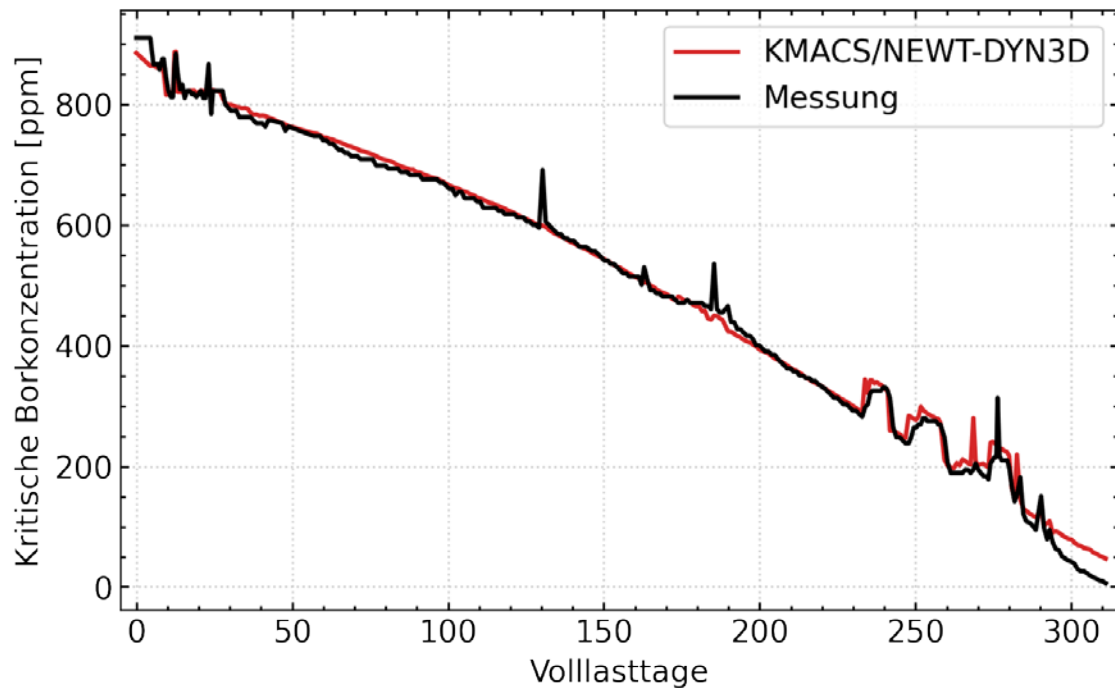


Abb. 3.27 Berechnete und gemessene kritische Borkonzentration für den ersten Zyklus des X2 Kerns

Wie in Abb. 3.27 bereits zu erkennen und in Abb. 3.28 anhand der Differenzen zwischen der berechneten und der gemessenen kritischen Borkonzentration deutlicher gezeigt, treten sowohl bei ca. 130 Volllasttage als auch bei ca. 185 Volllasttage größere Abweichungen auf. Der Grund ist vermutlich das kurzzeitige Verfahren der Steuerstäbe (vgl. Abb. 3.24), was zu einer Reaktivitätsänderung und somit zu einer Änderung der gemessenen kritischen Borkonzentration führt. Die gewählten Zeitschritte in der Zyklusrechnung sind zu lang, um das kurzzeitige reaktordynamische Verhalten bei diesen Zeitpunkten vollständig zu erfassen. Ab ca. 220 Volllasttage werden die Steuerstäbe jeweils über einen längeren Zeitraum deutlich verfahren. Bei Beginn und Ende eines solchen Zeitraums tritt ebenfalls eine größere Abweichung zwischen der berechneten und der gemessenen kritischen Borkonzentration auf; hier wird eine gute Übereinstimmung während des Zeitraums erreicht. Bei Zyklusende überschätzt KMACS/T-NEWT-DYN3D die gemessene kritische Borkonzentration um ca. 40 ppm.

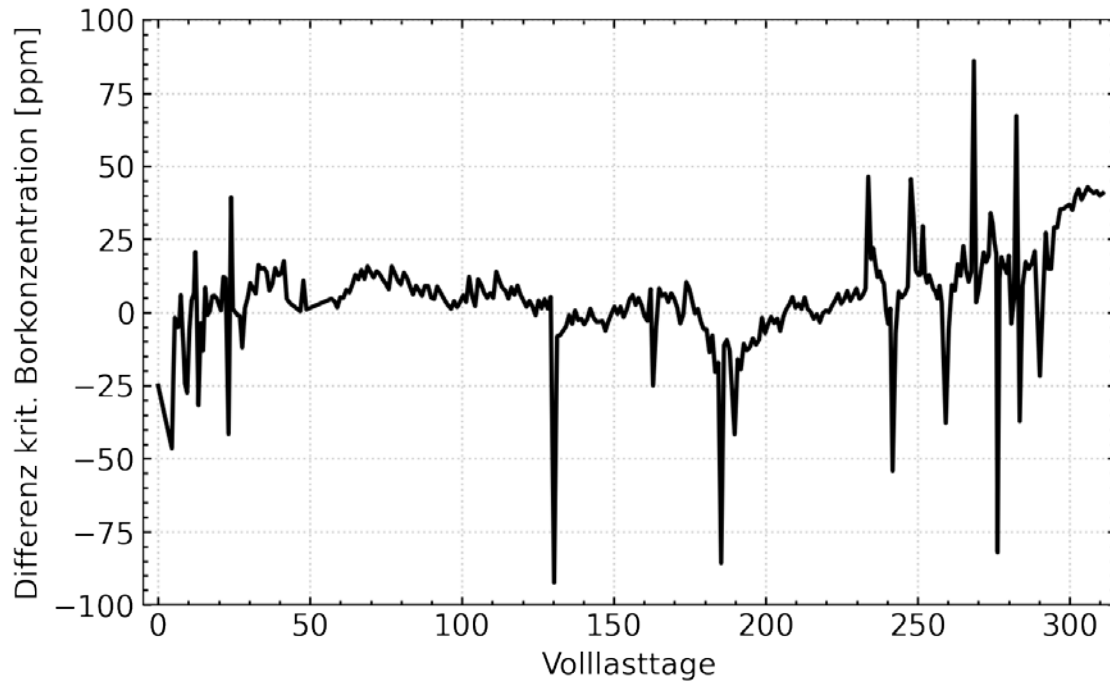


Abb. 3.28 Differenz zwischen berechneter und gemessener kritischer Borkonzentration für den ersten Zyklus des X2 Benchmarks

Die guten Ergebnisse für den Nulllast-Heiß Zustand und für den ersten Zyklus des X2 Benchmarks belegen, dass KMACS mit den umgesetzten Weiterentwicklungen für Reaktorkernberechnungen von hexagonalen Reaktoren erfolgreich eingesetzt werden kann.

Noch ist es mit KMACS nicht möglich, im Neutronenkinetikcode WWER Steuerelemente zu modellieren, die in Längsrichtung aus unterschiedlichen Neutronenabsorbermaterialien aufgebaut sind. Diese Funktionalität soll in zukünftigen Arbeiten implementiert werden, da dadurch eine weitere Verbesserung der Ergebnisse, insbesondere bei den Steuerstabwirksamkeiten, erwartet wird.

4 AP 2: Beschreibung des Reaktorkernverhaltens mit der Monte-Carlo Methode

In Rahmen des Arbeitspakets 2 wurde die Hybridmethode zur Simulation von Reaktortransienten weiterentwickelt und angewendet. Die Hybridmethode beschreibt das zeitabhängige neutronenphysikalische und thermohydraulische Verhalten mittels einer gekoppelten Neutronenkinetik-/Thermohydraulik-Rechnung (NK/TH). An ausgewählten Zeitschritten während der NK/TH Rechnung werden Monte-Carlo-Ganzkern-Rechnungen durchgeführt, um für einzelne Regionen innerhalb des Modells unter Berücksichtigung der dreidimensionalen Neutronenflussverteilung homogenisierte Wirkungsquerschnitte zu ermitteln, die in der fortlaufenden NK/TH Rechnung verwendet werden. Durch die Kondensierung der Wirkungsquerschnitte mittels der dreidimensionalen Neutronenflussverteilung wird der Einfluss benachbarter Brennelemente und Reflektoren berücksichtigt, was bei der konventionellen Vorgehensweise zur Generierung von homogenisierten Wirkungsquerschnitten mit Brennelementmodellen im unendlichen Gitter nicht der Fall ist.

Ursprünglich war die Verwendung des Neutronenkinetikcodes QUABOX/CUBBOX /LAN 78/ in der Hybridmethode vorgesehen. Aufgrund unvorhergesehener technischer Schwierigkeiten wurde von der Verwendung von QUABOX/CUBBOX abgesehen und stattdessen der Reaktordynamikcode DYN3D /ROH 16/ verwendet.

4.1 Erprobung der Rechenkette Serpent/DYN3D-ATHLET anhand der SPERT III Reaktivitätsexperimente

Die Hybridmethode basiert auf dem konventionellen Rechenverfahren für Reaktortransienten, nämlich der Generierung von homogenisierten Wirkungsquerschnitten und der anschließenden zeitabhängigen Ganzkernrechnung mit einem gekoppelten NK/TH-Codesystem. In der Hybridmethode wird hier der Monte-Carlo-Code Serpent zur Generierung von homogenisierten Wirkungsquerschnitten verwendet; für die Ganzkernrechnung kommt das gekoppelte NK/TH-Codesystem DYN3D-ATHLET zum Einsatz. Zunächst wurde überprüft, ob die Rechenkette Serpent/DYN3D-ATHLET bei konventioneller Verwendung für die Simulation von Reaktortransienten geeignet ist. Zu diesem Zweck wurden SPERT III Reaktivitätstransienten simuliert. Diese Untersuchungen führen Forschungsarbeiten des Vorhabens RS1536 /ZWE 18/ weiter.

Am SPERT III Forschungsreaktor in Idaho, USA, wurden in den 1960er Jahren 80 zerstörungsfreie Reaktivitätsexperimente durchgeführt, um das reaktordynamische Verhalten eines DWR-ähnlichen Reaktorkerns zu untersuchen. Der Reaktorkern war mit 60 Brennelementen beladen, wovon 48 Brennelemente ein 5×5 Brennstabgitter und 12 Brennelemente ein 4×4 Brennstabgitter besaßen. Die Brennstäbe hatten eine aktive Länge von 97,282 cm und enthielten UO₂ Brennstoff mit einer U-235 Anreicherung von 4,8 %. Der Zustand der Kritikalität wurde mit der Positionierung von acht Steuerelementen eingestellt; die Reaktivitätszufuhr für die Experimente wurde durch den Auswurf eines zentral angeordneten, kreuzförmigen Steuerstabs realisiert. Die Steuerelemente und der Steuerstab bestanden aus Edelstahl mit 1,35 Gew.-% B-10 als Neutronenabsorber. Der Reaktorkern wurde ohne Zusatz von Bor im Moderator betrieben. Die Experimente mit zugeführten Reaktivitäten von 0,5\$ bis 1,3\$ wurden bei vier unterschiedlichen Reaktorbedingungen mit unterschiedlicher Anfangsleistung durchgeführt. Von diesen Experimenten wurden im Rahmen dieses Arbeitspakets mehrere Reaktivitätstransienten bei den Reaktorbedingungen *cold-startup* sowie *hot-standby* untersucht. Die Bedingungen werden detailliert in Tab. 4.1 gegeben.

Tab. 4.1 SPERT III Ausgangsbedingungen für Reaktivitätsexperimente /CAR 69/

Bezeichnung	Kühlmittel-eintritts-temperatur [K]	System-druck [MPa]	Kühlmittel-geschwindigkeit [m/s]	Anfangs-leistung [MW]
<i>cold-startup</i>	294	0,1013	0,0	5,0 x 10 ⁻⁵
<i>hot-standby</i>	533	10,43	4,2672	1

In den folgenden Abschnitten werden die verwendeten Rechenmodelle vorgestellt, die Eignung der homogenisierten Wirkungsquerschnitte für DYN3D-Rechnungen dargelegt und schließlich Rechenergebnisse für die Reaktivitätstransienten vorgestellt.

Serpent Ganzkernmodelle und DYN3D/DYN3D-ATHLET-Modelle

Um geeignete Referenzergebnisse zu erhalten wurde zunächst auf ein vorhandenes Serpent Referenzmodell für den SPERT III Kern zurückgegriffen /ZWE 18/. Abb. 4.1 zeigt einen vertikalen Schnitt durch dieses Modell sowie die Detaildarstellung eines *flux suppressor* Elements. Ein Steuerelement besteht in Längsrichtung aus drei Teilen:

- einem oberen Absorberteil bestehend aus einem quadratischen Hohlprofil aus Edelstahl mit 1,35 Gew.-% B-10,
- einem unteren aktiven Teil mit einem 4 x 4 Brennstabgitter und
- einem mittig angeordneten *flux suppressor* Element. Ein *flux suppressor* Element ist aus zwölf kreuzförmig angeordneten Edelstahlplättchen mit 1,35 Gew.-% B-10 aufgebaut.

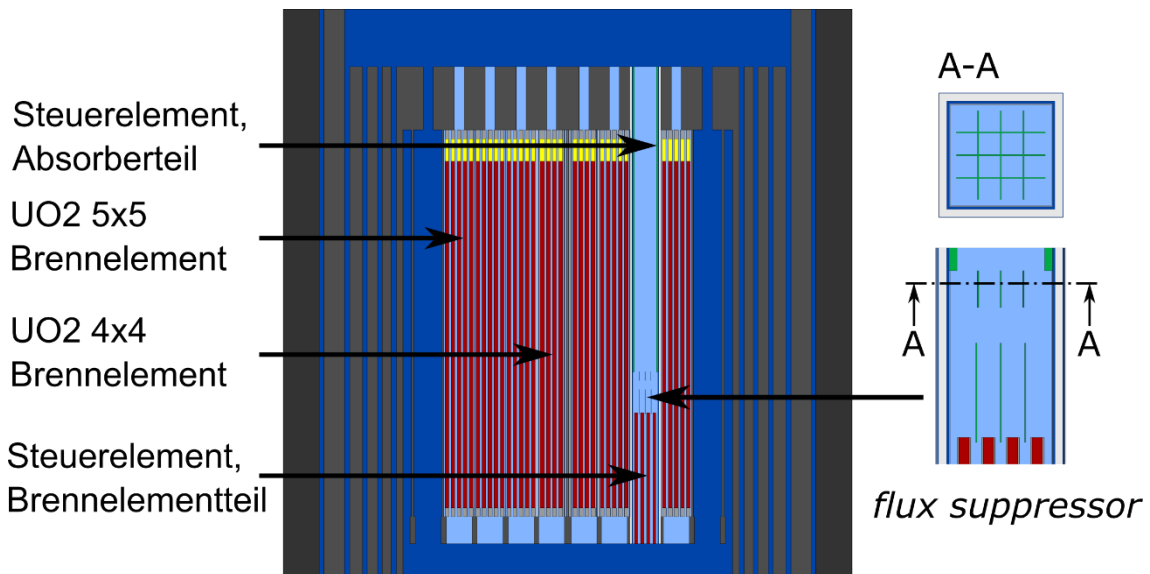


Abb. 4.1 Vertikaler Schnitt durch das SPERT III Serpent-Referenzmodell

Zusätzlich wurde ein vereinfachtes Serpent Ganzkern-Modell ohne *flux suppressor* Elemente in den Steuerelementen zur besseren Vergleichbarkeit mit dem statischen DYN3D Modell erstellt.

Das statische und das dynamische DYN3D-Modell beschreiben den SPERT III Kern mit einem Rechengitter, dessen radiale Diskretisierung einem Rechenknoten pro Brennelement (7,62 cm x 7,62 cm) entspricht. In axialer Richtung ist der aktive Kern in 40 Schichten (Schichtdicke: 2,43205 cm) diskretisiert, um die Bewegung des kreuzförmigen Steuerstabs präzise nachzubilden. Ein erster Versuch mit nur

10 Schichten resultierte in einem girlandenartigen Verlauf des Reaktivitätsanstiegs, also in einer zeitweisen Unterschätzung der Reaktivitätszufuhr, und erwies sich damit als ungeeignet was eine höhere Auflösung erforderlich machte. Der aktive Kern wird von zwei Schichten radialer Reflektoren (7,62 cm × 7,62 cm) und von jeweils einem axialen Reflektor an der Kernunterseite sowie -oberseite (Höhe: 9,7282 cm) umgeben. Aufgrund der komplexen geometrischen Form der *flux suppressor* Elemente wurden diese im DYN3D-Modell nicht modelliert. Dadurch ergeben sich für dieses Modell Unterschiede bei der kritischen Einfahrhöhe der Steuerelemente, welche jedoch mit dem Wert des vereinfachten Serpent Modell verglichen werden kann (vgl. Tab. 4.2). Das dynamische DYN3D-Modell verwendet für die Zeitintegration der Neutronenkinetik einen maximalen Zeitschritt von 0,1 ms.

Das assoziierte ATHLET-Modell zur Simulation der Thermohydraulik im SPERT III-Kern besitzt die gleiche radiale und axiale Diskretisierung wie das DYN3D-Modell. Jedes Brennelement wird mit einem thermohydraulischen Kanal abgebildet. Die Reflektoren werden jedoch in einem Bypass-Kanal zusammengefasst. Zudem wurde das ATHLET-Modell um Wärmekapazitätswerte von UO₂ aus /IAEA 06/ für einen Temperaturbereich von 298,15 K – 3120 K erweitert, da die in ATHLET implementierten Korrelationen zur automatisierten Berechnung der Wärmekapazität von UO₂ nur in einem Temperaturbereich von 533,15 K – 3023, 15 K gültig sind /AUS 16/. Wie beim dynamischen DYN3D-Modell verwendet auch das ATHLET-Modell einen maximalen Zeitschritt von 0,1 ms für die Zeitintegration der Thermohydraulik.

Erstellung von Wirkungsquerschnittsbibliotheken mit Serpent

Von dem vereinfachten Serpent-Ganzkernmodell wurden Brennelementmodelle in unendlichem Gitter sowie Reflektormodelle zur Berechnung homogenisierter Zwei-Gruppen-Wirkungsquerschnitte abgeleitet. Als Beispiel zeigt Abb. 4.2 das Serpent Modell des UO₂ 5×5 Brennelements und das Serpent-Modell des UO₂ 4×4 Brennelements. Letzteres bildet den unteren Teil eines Steuerelements. Zudem ist in weiß der Führungskasten aus Zircaloy-2 dargestellt, in dem das Steuerelement verfährt.

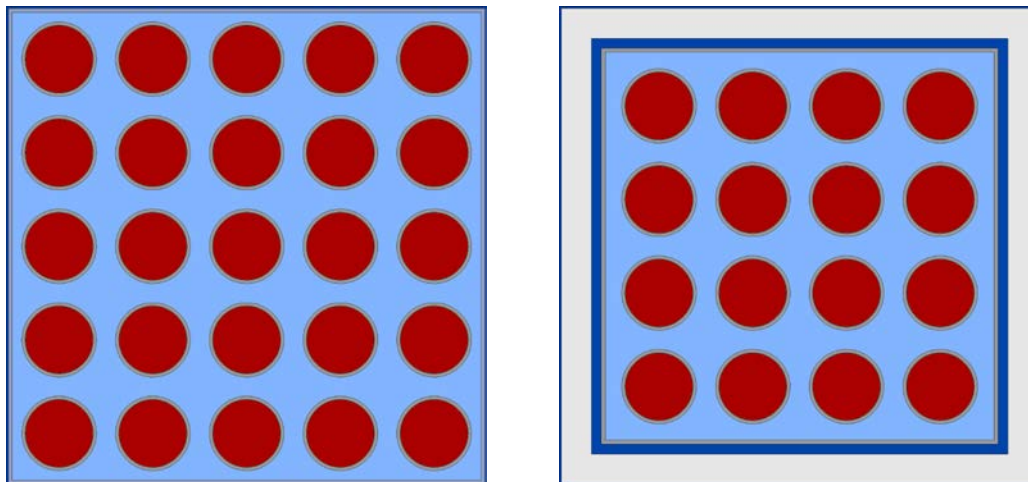


Abb. 4.2 Serpent Brennelementmodelle: *links*: UO₂ 5 x 5, *rechts*: UO₂ 4 x 4 (unterer Teil eines Steuerelements)

Für die *cold-startup* Bedingungen und für die *hot-standby* Bedingungen wurde jeweils eine Wirkungsquerschnittsbibliothek mit den folgenden Bereichen für Brennstofftemperatur und Moderatorichte erstellt:

- *cold-startup*:
 - Brennstofftemperatur: 294 K – 1300 K,
 - Moderatorichte: 0,99803 g/cm³ – 0,95863 g/cm³,
- *hot-standby*:
 - Brennstofftemperatur: 500 K – 1500 K,
 - Moderatortemperatur: 0,791 g/cm³ – 0,683 g/cm³.

Eignungsprüfung der Wirkungsquerschnitte für DYN3D Rechnungen

Die Eignung der homogenisierten Wirkungsquerschnittsbibliotheken für die Anwendung in DYN3D wurde mittels Kritikalitätsrechnungen mit DYN3D unter *cold-startup* Bedingungen überprüft. In Tab. 4.2 werden die kritische Einfahrhöhe der acht Steuerelemente sowie die Überschussreaktivitäten der acht Steuerelemente und des kreuzförmigen Steuerstabs mit experimentellen Werten und mit Ergebnissen der Serpent Ganzkern-Rechnungen verglichen. Die Überschussreaktivitäten in der Einheit Dollar [\$] wurden mittels der Anteile verzögerter Neutronen der jeweiligen Serpent-

Modelle bzw. beim DYN3D Modell mit dem Anteil verzögerter Neutronen des vereinfachten Serpent-Modells ermittelt (Serpent-Referenzmodell: 743 pcm, vereinfachtes Serpent Modell: 747 pcm).

Tab. 4.2 Vergleich von Serpent und DYN3D Ergebnissen mit experimentellen Daten für *cold-startup* Bedingungen

	Experiment	Serpent - Referenzmodell	Serpent - vereinfachtes Modell	DYN3D
Kritische Einfahrtöhe [cm]	37,084	38,248	29,046	28,879
Überschussreaktivität 8 Steuerelemente [\$]	14	14,12	14,03	13,58
Überschussreaktivität Steuerstab [\$]	4,8	4,67	4,59	4,65

Bei der kritischen Einfahrtöhe der Steuerelemente gemessen von der unteren Kante des aktiven Kerns wird zwischen dem Serpent Referenzmodell und dem Messwert eine zufriedenstellende Übereinstimmung festgestellt. Bei der Überschussreaktivität der acht Steuerelemente sowie des Steuerstabs liegt eine sehr gute Übereinstimmung zwischen dem Serpent Referenzmodell und den experimentellen Werten vor. Das vereinfachte Serpent-Modell und das DYN3D-Modell haben aufgrund der Vernachlässigung der *flux suppressor* Elemente eine deutlich geringere kritische Einfahrtöhe der Steuerelementgruppe, jedoch weisen beide Modelle untereinander eine sehr gute Übereinstimmung auf. Dies gilt ebenfalls für die Überschussreaktivitäten. Dies zeigt, dass die generierten Wirkungsquerschnittsbibliotheken zur Verwendung im DYN3D Modell des SPERT III-Kerns geeignet sind.

Simulation von SPERT III Reaktivitätstransienten

Für die *cold-startup* Bedingungen wurden die Reaktivitätstransienten *Test 43*, *Test 48*, *Test 49* und für die *hot-standby* Bedingungen wurden die Reaktivitätstransienten *Test 81*, *Test 82* simuliert. Für ausgewählte Transienten werden nachfolgend Verläufe der Leistung und der Reaktivität gezeigt. Ergebnisse aller untersuchten Reaktivitätstransienten werden vergleichend zu experimentellen Werten in den Tabellen Tab. 4.3 und Tab. 4.4 dargelegt.

Die Beschreibungen der SPERT III Experimente enthalten keine Angaben zu den anfänglichen Einfahrhöhen der Steuerelementgruppe und des Steuerstabs vor jeder Transiente. Für die Simulationen wurden die Einfahrhöhen über statische Reaktivitätsdifferenzen mit DYN3D-Kritikalitätsrechnungen ermittelt, sodass jede Transiente vom kritischen Zustand startet und der Auswurf des Steuerstabs die gewünschte positive Reaktivitätszufuhr verursacht. Auf Basis der jeweiligen Einfahrhöhe des Steuerstabs wurde dessen Verfahrensweg mit einer Beschleunigung von $50,8 \text{ m/s}^2$ ermittelt und als Weg-Zeit-Tabelle in das ATHLET-Modell eingegeben. Durch die Kopplungsschnittstelle zwischen DYN3D und ATHLET wird die zeitabhängige Einfahrhöhe an DYN3D weitergegeben.

Abb. 4.3 zeigt den mit DYN3D-ATHLET ermittelten Verlauf der Leistung für das prompt überkritische Experiment *Test 43*. Zu einem Zeitpunkt von $0,219 \text{ s}$ wird eine maximale Leistung von 286 MW erreicht. Dies ist in sehr guter Übereinstimmung mit der experimentell ermittelten Leistung von $280 \pm 42 \text{ MW}$ bei $0,23 \pm 0,006 \text{ s}$.

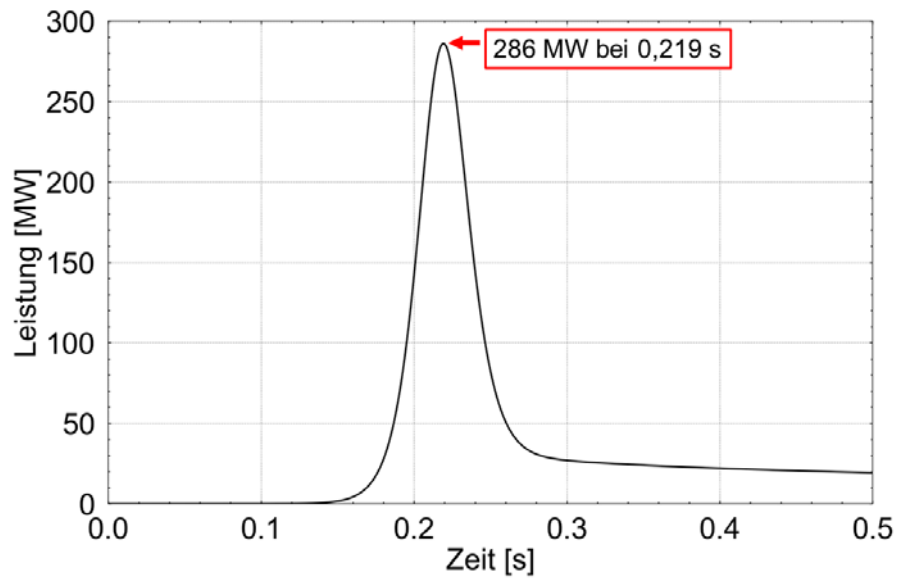


Abb. 4.3 SPERT III *Test 43*: Leistung ermittelt mit DYN3D-ATHLET

Abb. 4.4 zeigt für *Test 43* die von DYN3D-ATHLET berechneten Verläufe der gesamten Reaktivität und individueller Reaktivitätsbeiträge. Der Auswurf des Steuerstabs verursacht eine Reaktivitätszufuhr von 1,2 \$. Dieser Wert ist in sehr guter Übereinstimmung mit dem experimentellen Wert von $1,21 \pm 0,05$ \$. Nachdem die gesamte Reaktivität zunächst für ein kurzes Zeitintervall auf einem konstanten Niveau verbleibt, wird sie durch die zunehmende Neutronenabsorption im Brennstoff durch die ansteigende Brennstofftemperatur (Dopplereffekt) verringert. Reaktivitätsrückwirkungen durch Änderungen der Moderatordichte oder -temperatur sind zu vernachlässigen.

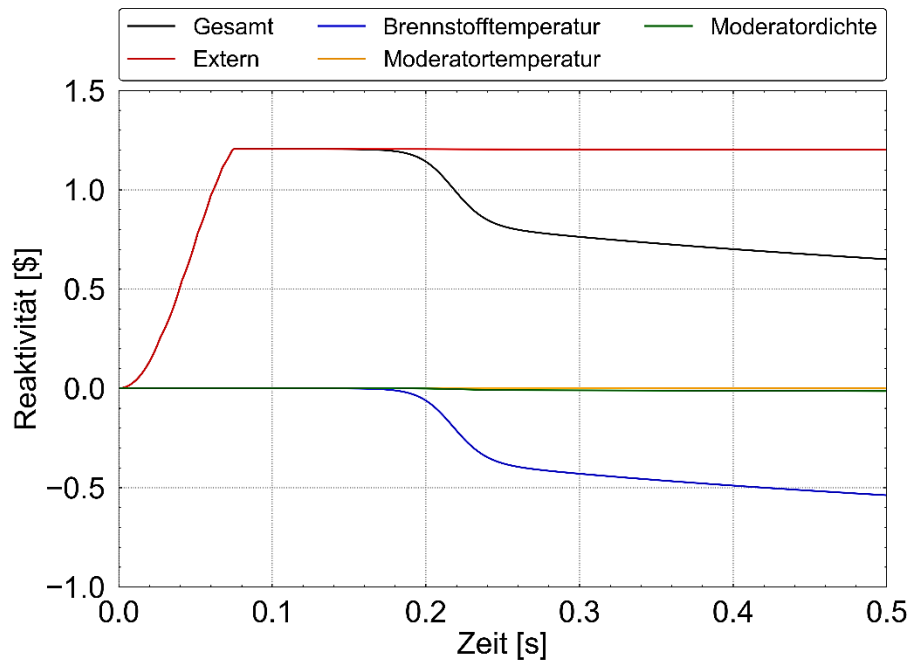


Abb. 4.4 SPERT III *Test 43*: Reaktivitätsbeiträge ermittelt mit DYN3D-ATHLET

Für die prompt kritische Reaktivitätstransiente *Test 49* ermittelt DYN3D-ATHLET, wie in Abb. 4.5 dargestellt, eine maximale Leistung von 12,3 MW. Dieser Wert ist in sehr guter Übereinstimmung mit der gemessenen maximalen Leistung von 11 ± 2 MW. Die berechnete maximale Leistung tritt bei 0,854 s auf und liegt damit vor dem Zeitpunkt des Experiments mit $0,97 \pm 0,04$ s. Die ermittelte Reaktivitätszufuhr ist mit 1,005 \$ in sehr guter Übereinstimmung mit dem experimentellen Wert von $1,00 \pm 0,04$ \$.

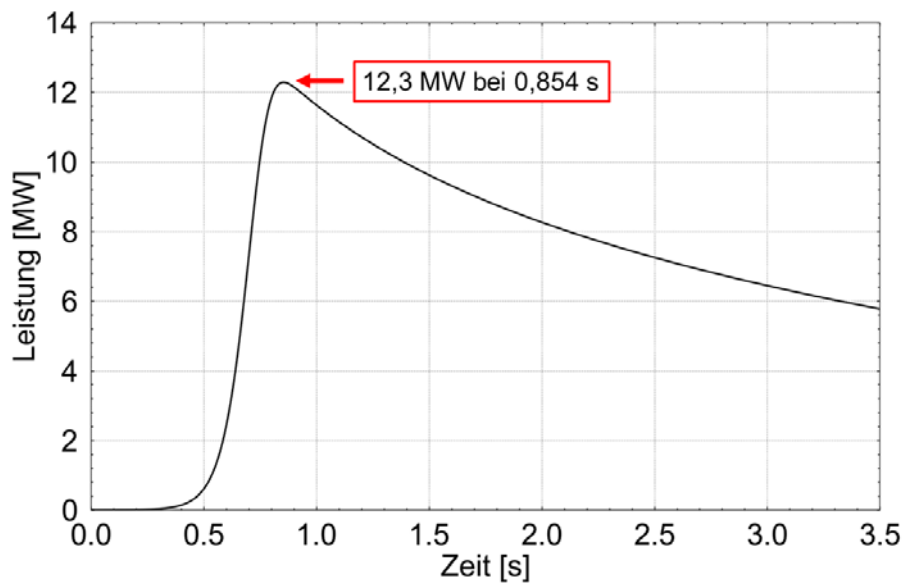


Abb. 4.5 SPERT III *Test 49*: Leistung ermittelt mit DYN3D-ATHLET

Das unter *hot-standby* Bedingungen durchgeführte Experiment *Test 82* war eine prompt überkritische Reaktivitätstransiente mit einer Reaktivitätszufuhr von $1,29 \pm 0,04 \text{ \$}$ und einer gemessenen maximalen Leistung von $880 \pm 90 \text{ MW}$ bei $0,118 \pm 0,002 \text{ s}$. Wie in Abb. 4.6 dargestellt, erreicht die berechnete Leistung einen maximalen Wert von 877 MW. Dieser Wert liegt in sehr guter Übereinstimmung mit dem experimentellen Wert. Mit einem Zeitpunkt von 0,1246 s tritt die berechnete maximale Leistung später als im Experiment auf.

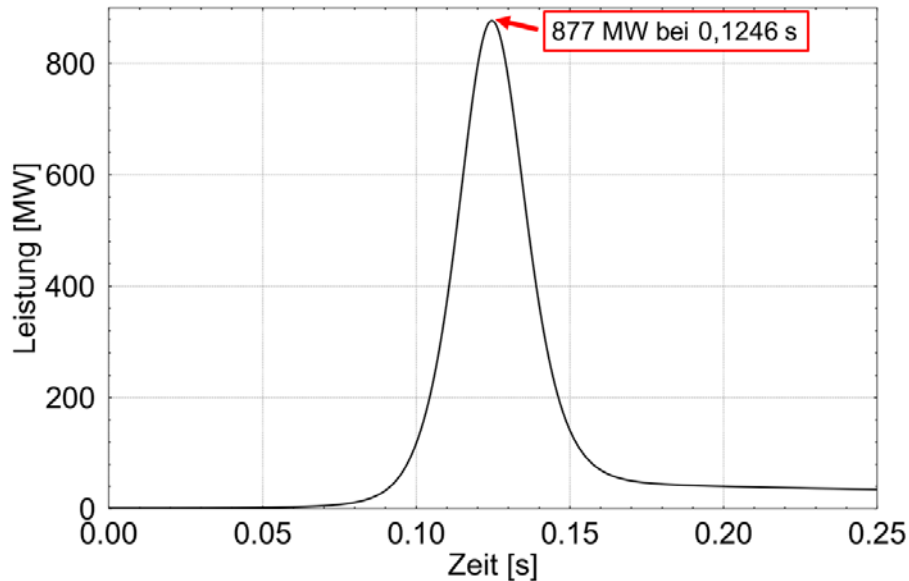


Abb. 4.6 SPERT III *Test 82*: Leistung ermittelt mit DYN3D-ATHLET

Abb. 4.7 zeigt für *Test 82* die berechneten Verläufe der gesamten Reaktivität und der verschiedenen Reaktivitätsbeiträge. Die Reaktivitätszufuhr erreicht einen maximalen Wert von $1,276 \text{ \$}$ und ist damit in sehr guter Übereinstimmung mit der Reaktivitätszufuhr im Experiment. Im Gegensatz zu den *cold-startup* Experimenten tritt bei den *hot-standby* Experimenten die Reaktivitätsrückwirkung durch den Dopplereffekt des Brennstoffs bereits während des Steuerstabauswurfs auf. Nach Erreichen der maximalen Leistung führt auch die Abnahme der Moderatorichte zu einer deutlichen Reaktivitätsrückwirkung. Eine Reaktivitätsrückwirkung durch eine Änderung der Moderatortemperatur ist hier zu vernachlässigen.

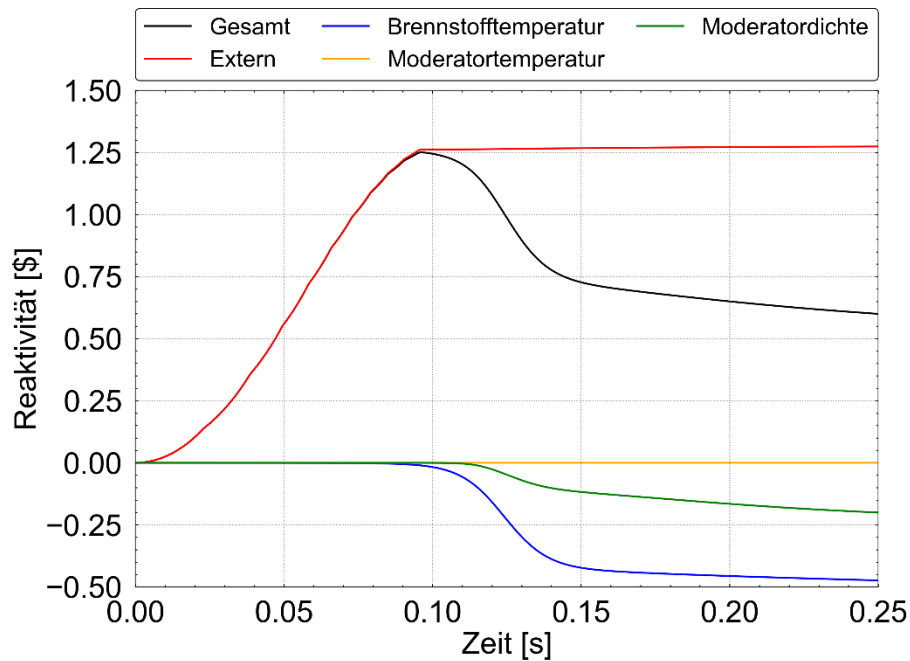


Abb. 4.7 SPERT III *Test 82*: Reaktivitätsbeiträge ermittelt mit DYN3D-ATHLET

In den Tabellen Tab. 4.3 und Tab. 4.4 werden die Ergebnisse der simulierten *cold-startup* Transienten und der *hot-standby* Transienten mit experimentellen Werten aus /OLS 13/ verglichen. Neben der Reaktivitätszufuhr, der maximalen Leistung und des Zeitpunkts der maximalen Leistung werden auch Werte zur Energiefreisetzung und der gesamten Reaktivitätskompensation zum Zeitpunkt der maximalen Leistung aufgeführt. Für die untersuchten Transienten wird bei der Reaktivitätszufuhr, der maximalen Leistung, der Energiefreisetzung und der Reaktivitätskompensation eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den DYN3D-ATHLET Ergebnissen und den experimentellen Werten erzielt. Der Zeitpunkt der maximalen Leistung liegt bei allen Reaktivitätstransienten innerhalb von drei Standardabweichungen des experimentell bestimmten Zeitpunkts. Somit ist gezeigt, dass DYN3D-ATHLET mit homogenisierten Zweigruppen-Wirkungsquerschnitten von Serpent für die Simulation von Reaktivitätstransienten, auch insbesondere bei kleinen Reaktorkernen, geeignet ist.

Tab. 4.3 DYN3D-ATHLET Ergebnisse und experimentelle Werte /OLS 13/ von SPERT III Reaktivitätstransienten unter *cold-startup* Bedingungen

	Test 43		Test 48		Test 49	
	Experiment	Rechnung	Experiment	Rechnung	Experiment	Rechnung
Reaktivitätszufuhr [\$]	1,21 ± 0,05	1,20	1,09 ± 0,04	1,091	1,00 ± 0,04	1,005
Max. Leistung [MW]	280 ± 42	286	63 ± 9	68,8	11 ± 2	12,3
Zeitpunkt max. Leistung [s]	0,23 ± 0,006	0,219	0,37 ± 0,01	0,35	0,97 ± 0,04	0,854
Energiefreisetzung [MJ]	6,0 ± 1,0	6,1	2,8 ± 0,5	3,1	2,1 ± 0,4	2,27
Reaktivitätskompensation [\$]	0,22 ± 0,02	0,212	0,11 ± 0,01	0,111	0,08 ± 0,01	0,081

Tab. 4.4 DYN3D-ATHLET Ergebnisse und experimentelle Werte /OLS 13/ von SPERT III Reaktivitätstransienten unter *hot-standby* Bedingungen

	Test 81		Test 82	
	Experiment	Rechnung	Experiment	Rechnung
Reaktivitätszufuhr [\$]	1,17 ± 0,04	1,157	1,29 ± 0,04	1,276
Max. Leistung [MW]	330 ± 30	330	880 ± 90	877
Zeitpunkt max. Leistung [s]	0,135 ± 0,003	0,1404	0,118 ± 0,002	0,1246
Energiefreisetzung [MJ]	7,8 ± 1	8,2	15 ± 2	12,9
Reaktivitätskompensation [\$]	0,18	0,162	0,3	0,27

4.2 Erprobung von Wirkungsquerschnitten aus Monte-Carlo-Ganzkern-Rechnungen in nodalen Diffusionsrechnungen

Die Hybridmethode sieht die Ermittlung von homogenisierten Wirkungsquerschnitten in sämtlichen Teilbereichen, sogenannten *universes*, eines Monte-Carlo-Ganzkernmodells und deren Einsatz in nodalen Diffusionsrechnungen vor. Die Teilbereiche des Monte-Carlo-Ganzkernmodells entsprechen dabei den räumlichen Rechenmaschen des

nodalen Diffusionsmodells, nachfolgend Knoten genannt. Dazu wurde zunächst mittels statischer Kritikalitätsrechnungen der Einsatz von homogenisierten Wirkungsquerschnitten aus einer Monte-Carlo-Ganzkern-Rechnung in nodalen Diffusionsrechnungen erprobt. Für diese Untersuchung wurde als Modell der TMI-1 Minikern aus Phase II des LWR-UAM Benchmarks /HOU 14/ gewählt. Abb. 4.8 zeigt einen radialen Schnitt durch das dreidimensionale Serpent Ganzkern-Modell. Der Kern besteht aus neun identischen Brennelementen mit jeweils 204 UO_2 Brennstäben (4,12 % Anreicherung U-235), 4 $\text{UO}_2+\text{Gd}_2\text{O}_3$ Brennstäben (4,12 % U-235 Anreicherung, 2% Gd), 16 Führungsrohren und einem zentralen Instrumentierungsrohr. Der Kern wird von einem radialen Reflektor aus einer Stahl-Kernumfassung und dem Moderator und Reflektor Wasser umgeben. Axiale Reflektoren sind nicht vorhanden. Der Kern hat eine aktive Länge von ca. 365 cm und ist in 16 axiale Abschnitte unterteilt.

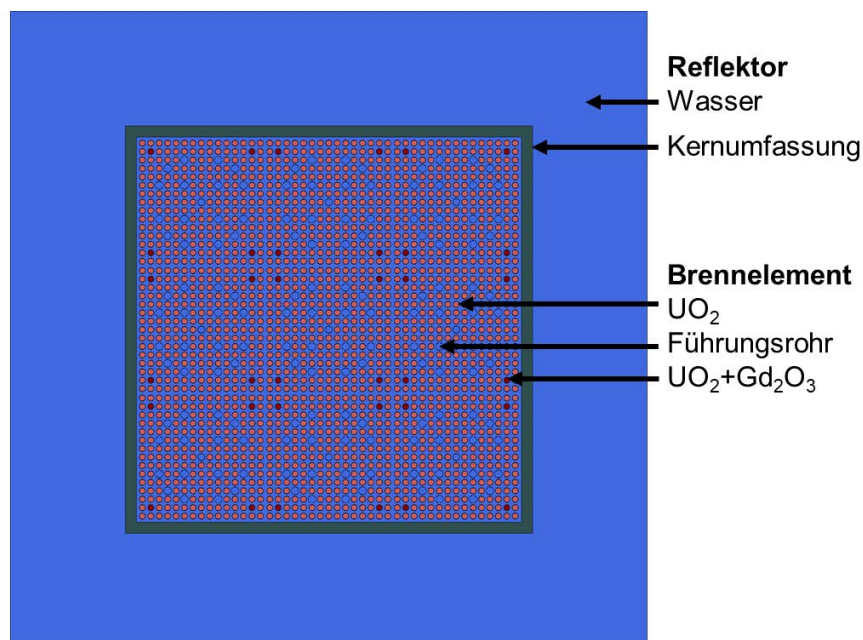


Abb. 4.8 Radialer Schnitt des Serpent Modells des TMI-1 Minikerns aus dem LWR-UAM Benchmark /HOU 14/

Im DYN3D Diffusionsmodell wurde jedes Brennelement und jedes Reflektorelement individuell modelliert. Zudem wurden auch alle 16 Knoten von jedem Brennelement und jedem Reflektorelement individuell modelliert, sodass jedem Knoten ein eigener Satz von Wirkungsquerschnitten über die Bibliothek zugewiesen werden konnte.

Mit einer Serpent Ganzkern-Rechnung, welche zudem auch als Referenzrechnung für den Multiplikationsfaktor und die Leistungsverteilung dient, wurde für eine

Brennstofftemperatur von 560 K, einer Moderatorndichte von $0,75206 \text{ g/cm}^3$ und einer Borkonzentration von 1.000 ppm homogenisierte Zweigruppen-Wirkungsquerschnitte in den einzelnen Regionen dieses Modells generiert. Neben den von Serpent standardmäßig-berechneten Diffusionskonstanten wurden zusätzlich Transport-korrigierte Diffusionskonstanten ermittelt. Die Verwendung von Transport-korrigierten Diffusionskonstanten kann insbesondere bei kleinen Reaktorkernen mit einer hohen Neutronenleckage zu besseren Ergebnissen führen [RAI 17]. *Assembly Discontinuity Factors (ADFs)* konnten mit dem Serpent Ganzkern-Modell für die einzelnen Regionen nicht ermittelt werden, da die in Serpent implementierte Methode nur für zweidimensionale Geometrien anwendbar ist. Aus diesem Grund wurde auf ADFs von zweidimensionalen Brennelement- und Reflektormodellen im unendlichen Gitter zurückgegriffen.

Die homogenisierten Wirkungsquerschnitte für die einzelnen Regionen wurden in entsprechende DYN3D Wirkungs-querschnittsdateien für die einzelnen Knoten des DYN3D-Modells übersetzt. DYN3D Kritikalitätsrechnungen ohne und mit Verwendung von ADFs sowie mit den standardmäßigen und den Transport-korrigierten Diffusionskonstanten wurden durchgeführt. Tab. 4.5 zeigt die Reaktivitätsdifferenz $\Delta\rho=(1/k_{\text{Serpent}} - 1/k_{\text{DYN3D}})$ sowie den quadratischen Mittelwert der relativen Abweichungen (RMS) der Leistungsverteilung zwischen DYN3D und Serpent. Ohne Verwendung von ADFs und mit der standardmäßig ermittelten Diffusionskonstante kann eine zufriedenstellende Reaktivitätsdifferenz erreicht werden. Der RMS Wert weist jedoch auf größere Abweichungen bei der Leistungsverteilung hin. Die Verwendung von ADFs führt zwar zu einer größeren Reaktivitätsdifferenz aber zu einer deutlich besseren Übereinstimmung bei der Leistungsverteilung. Durch die zusätzliche Verwendung von Transport-korrigierten Diffusionskonstanten kann sowohl bei der Reaktivitätsdifferenz als auch bei der Leistungsverteilung eine sehr gute Übereinstimmung erreicht werden.

Diese Ergebnisse zeigen, dass homogenisierte Wirkungsquerschnitte, welche in Regionen eines Serpent Ganzkern-Modells ermittelt wurden, in nodalen Diffusionsrechnungen eingesetzt werden können. Durch die Verwendung von ADFs ist eine sehr gute Übereinstimmung bei der Leistungsverteilung zu erreichen; die Verwendung von Transport-korrigierten Diffusionskonstanten führt zudem zu einer geringen Reaktivitätsdifferenz.

Tab. 4.5 DYN3D Ergebnisse zum TMI-1 Minikern basierend auf Wirkungsquerschnitten ermittelt mit dem Serpent Ganzkern-Modell

	ADFs	Verwendung Transport- korrigierte Diff.-konstante	k_{eff}	Reaktivitäts- differenz [pcm]	RMS (Rel. Abweichung Leistungs- verteilung) [%]
Serpent Referenz			1,08094		
DYN3D			1,07872	-191	2,77
DYN3D	ja		1,07589	-435	0,44
DYN3D	ja	ja	1,08114	17	0,17

4.3 Weiterentwicklung der Hybridmethode zur Beschreibung von Reaktortransienten mit der Monte-Carlo-Methode

Für die Hybridmethode wurde das Kopplungsschema für die zeitabhängige Simulation von Reaktortransienten der gekoppelten NK/TH-Codesysteme DYN3D-ATHLET /ROH 16/ und QUABOX/CUBBOX-ATHLET /LAN 97/ als Grundlage genommen. Dieses Schema wurde, wie in Abb. 4.9 gezeigt, um die Ausführung von Monte-Carlo-Ganzkern-Rechnungen bei der Durchführung von Zeitschritten erweitert.

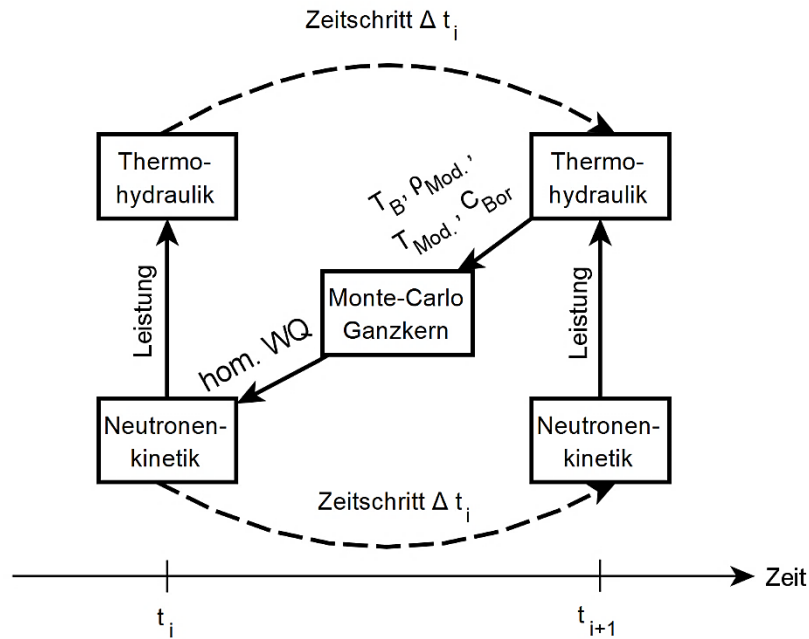


Abb. 4.9 Kopplungsschema zwischen der Neutronenkinetik, der Thermohydraulik und der Monte-Carlo-Ganzkernrechnung

Beim Zeitschritt t_i wird die dreidimensionale Leistungsverteilung vom Neutronenkinetikcode an den Thermohydraulikcode übergeben. Der Thermohydraulikcode vollzieht die Zeitschrittintegration um Δt_i nach t_{i+1} . Mit den resultierenden dreidimensionalen Verteilungen von Brennstofftemperatur (T_B), Moderatorordichte (ρ_M), Moderatortemperatur (T_{Mod}) und Borkonzentration (C_{Bor}) bei t_{i+1} wird eine Monte-Carlo-Ganzkern-Rechnung durchgeführt, um für die verschiedenen Regionen des Monte-Carlo-Ganzkern-Modells, welche den Knoten des nodalen Diffusionsmodell entsprechen, homogenisierte Wirkungsquerschnitte zu ermitteln. Diese Wirkungsquerschnitte können anschließend vom Neutronenkinetikcode zur Integration des Zeitschritts nach t_{i+1} verwendet werden.

Da homogenisierte Wirkungsquerschnitte für eine Region des Monte-Carlo-Ganzkern-Modells nur für die Brennstofftemperatur, Moderatorordichte und Borkonzentration in dieser Region ermittelt worden sind, würde eine neu erstellte Wirkungsquerschnitts-bibliothek für den Neutronenkinetikcode keine Wirkungsquerschnitte parametrisiert über mehrere Brennstofftemperaturen, Moderatorordichten und Borkonzentrationen enthalten. Der Neutronenkinetikcode kann somit keine Interpolation der Wirkungsquerschnitte zu veränderten thermohydraulischen Bedingungen bei einem nächsten Zeitpunkt vornehmen. Somit müsste prinzipiell bei jedem Zeitschritt eine Monte-Carlo-Ganzkern-Rechnung durchgeführt werden, um die Wirkungsquerschnitte entsprechend der veränderten thermohydraulischen Bedingungen neu zu ermitteln.

Um nicht bei jedem Zeitschritt eine rechenaufwändige Monte-Carlo-Rechnung durchführen zu müssen, werden parametrisierte Wirkungsquerschnittsbibliotheken durch eine lineare Extrapolation der Wirkungsquerschnitte aus der Ganzkernrechnung erstellt. In Abb. 4.10 wird das Verfahren am Beispiel eines Wirkungsquerschnitts (WQ) in Abhängigkeit der Brennstofftemperatur T_B dargestellt. Die Grundlage bilden Wirkungsquerschnitte, die zuvor konventionell mit Modellen im unendlichen Gitter für mehrere Brennstofftemperaturen berechnet worden sind. Von diesen Daten werden Gradienten dWQ/dT_B bestimmt. Zu einer Brennstofftemperatur T_B aus der gekoppelten Neutronenkinetik/Thermohydraulik-Rechnung (NK/TH) wird dann der entsprechende Gradient gewählt und mittels diesem der Wirkungsquerschnitt für eine kleinere und eine größere Brennstofftemperatur extrapoliert. Mit diesem Verfahren wird dem Neutronenkinetikcode eine parametrisierte Wirkungsquerschnittsbibliothek zur Verfügung gestellt, die solange gültig ist, wie die Brennstofftemperatur in dem für die Extrapolation gewählten Temperaturbereich liegt.

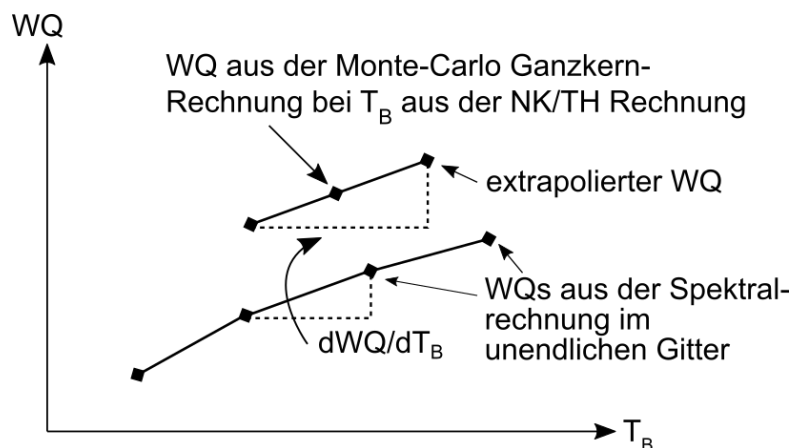


Abb. 4.10 Extrapolationsschema für Wirkungsquerschnitte aus der Monte-Carlo-Ganzkern-Rechnung

Ferner müssen für die Simulation einer Reaktortransiente mit einer Steuerstabbewegung dem Neutronenkinetikcode Wirkungsquerschnitte für das unkontrollierte Brennelement sowie für das kontrollierte Brennelement zur Verfügung gestellt werden, damit der Neutronenkinetikcode die Wirkungsquerschnitte entsprechend der Einfahrtiefe des Steuerstabs gewichten und die Steuerstabbewegung modellieren kann. Aus der Monte-Carlo-Ganzkern-Rechnung resultiert für einen Knoten jedoch nur ein Datensatz von Wirkungsquerschnitten, welcher die aktuelle Einfahrtiefe des Steuerstabs im Knoten repräsentiert. Um dennoch dem Neutronenkinetikcode unkontrollierte und kontrollierte

Wirkungsquerschnitte zur Verfügung zu stellen, werden zu Beginn der Simulation zwei Monte-Carlo-Ganzkern-Rechnungen durchgeführt.

Unter der Annahme, dass der Steuerstab bei Beginn der Transiente vollständig in den Kern eingefahren ist, modelliert das erste Monte-Carlo-Ganzkern-Modell den vollständig eingefahrenen Steuerstab. Beim zweiten Monte-Carlo-Ganzkern-Modell ist der Steuerstab um die Höhe des untersten Knoten ausgefahren. Auf diese Weise stehen zunächst unkontrollierte und kontrollierte Wirkungsquerschnitte zur Modellierung der Steuerstabbewegung im untersten Knoten des Neutronenkinetikmodells zur Verfügung. Sobald die Steuerstabspitze in den zweit-untersten Knoten eintritt, werden aus dem ersten Monte-Carlo-Ganzkern-Modell, bei dem die Steuerstabbewegung mitgeführt wird, die Wirkungsquerschnitte des darüberliegenden kontrollierten Knoten und des darunterliegenden unkontrollierten Knoten verwendet. An dieser Stelle erfolgt die Annahme, dass Brennelemente eines Druckwasserreaktors in axialer Richtung in ihrer geometrischen und materiellen Beschaffenheit homogen aufgebaut sind. Von dem zweiten Monte-Carlo-Ganzkern-Modell wird zu diesem Zeitpunkt kein Gebrauch mehr gemacht. Die Anwendbarkeit dieses Verfahrens zur Modellierung der Steuerstabbewegung im Neutronenkinetikmodell konnte mittels statischer Diffusionsrechnungen und Monte-Carlo-Rechnungen verifiziert werden.

Für die Hybridmethode wurde das gekoppelte NK/TH-Codesystem DYN3D-ATHLET und der Monte-Carlo-Code Serpent verwendet. Für den Datenaustausch zwischen DYN3D-ATHLET und Serpent wurde der GRS-Kernsimulator KMACS eingesetzt, der neben einer Ergebnisdatenbank auch Pre- und Post-Prozessierungs-Funktionen für DYN3D und ATHLET bereitstellt. Neue Funktionen wurden zur Pre- und Post-Prozessierung der Serpent Ganzkern-Rechnungen implementiert:

- i) das Zuweisen der thermohydraulischen Ergebnisgrößen auf das Ganzkern-Modell über die Serpent Multiphysik Schnittstelle sowie das Setzen der aktuellen Einfahrtiefen der Steuerstäbe,
- ii) die Durchführung der Ganzkern-Rechnung,
- iii) das Auslesen der Wirkungsquerschnitte für jede Region des Ganzkern-Modells.

Für die anschließende Extrapolation der Wirkungsquerschnitte wurde ein separates Modul in der Programmiersprache Python implementiert. Ferner wird DYN3D-ATHLET als dynamische Bibliothek über den in Python implementierten ATHLET-Controller

aufgerufen. Dadurch können Rückruffunktionen in dem ATHLET-Controller während der DYN3D-ATHLET Rechnung, z. B. vor jeder Zeitschrittintegration, aufgerufen werden. Über eine solche für den Zweck der Hybridmethode angepasste Rückruffunktion wird dann die Serpent Ganzkern-Rechnung, die Extrapolation der Wirkungsquerschnitte und die Erstellung der neuen DYN3D Wirkungsquerschnittsbibliotheken veranlasst. Durch das Setzen eines ATHLET GCSM-Signals wird DYN3D angewiesen, die neuen Wirkungsquerschnittsbibliotheken einzulesen. Damit nicht in jedem Zeitschritt der Simulation neue Wirkungsquerschnittsbibliotheken mittels einer Monte-Carlo-Ganzkern-Rechnung erstellt werden, wird als Kriterium zunächst ein zu wählendes Zeitintervall verwendet. Erst wenn dieses erneut überschritten wird, erfolgt eine Aktualisierung der Bibliotheken ansonsten interpoliert DYN3D die Wirkungsquerschnitte entsprechend der thermohydraulischen Bedingungen aus den bestehenden Bibliotheken.

4.4 Anwendung der Hybridmethode zur Simulation von Reaktortransienten

Die Hybridmethode wurde zur Simulation einer Steuerstabverfahrtransiente im TMI-1 Minikern (vgl. Kap. 4.2) angewendet. Als Ausgangssituation der Transiente sind im zentralen Brennelement des Kerns 16 Steuerstäbe aus AgInCd vollständig eingefahren, und der Kern befindet sich im Nulllast-Heiß Zustand. Mit Beginn der Transiente werden die Steuerstäbe innerhalb von 5 s um 54 cm aus dem Kern herausgefahren und verbleiben für die restliche Problemzeit auf dieser Einfahrtiefe. Das Zeitintervall für die Durchführung einer Monte-Carlo-Ganzkern-Rechnung und der Aktualisierung der DYN3D Wirkungsquerschnittsbibliotheken wurde zu 0,5 s gewählt. Zur Ermittlung der kritischen Bor-konzentration und des Gleichgewichtszustands zwischen der Neutronenkinetik und der Thermohydraulik startet die Simulation zunächst mit konventionell erzeugten Wirkungsquerschnitten.

Nach Erreichen des Gleichgewichts und der kritischen Bor-konzentration erfolgt die erste Serpent Ganzkern-Rechnung. Aus den Erfahrungen bei der Erprobung von Wirkungsquerschnitten aus einem Monte-Carlo-Ganzkern-Modell (vgl. Kap. 4.2) werden die Transport-korrigierten Diffusionskonstanten verwendet und auf ADFs der konventionellen Wirkungsquerschnittsvorausrechnung zurückgegriffen.

Da der Wechsel von den konventionell erzeugten Wirkungsquerschnitten zu den Wirkungsquerschnitten aus dem Ganzkern-Modell während der Transientenrechnung zu

einer negativen Reaktivitätszufuhr führt, wird auf Basis der Wirkungsquerschnitte aus dem Ganzkern-Modell eine Kritikalitätssuche mit DYN3D eingeschoben. Der resultierende Multiplikationsfaktor wird dann zur Abschwächung der negativen Reaktivitätszufuhr in der weiteren Simulation der Transiente zur Skalierung der Spaltwirkungsquerschnitte verwendet. Abb. 4.11 zeigt den zeitlichen Verlauf der Reaktivität für die Steuerstabverfahrtransiente. Nach 1,5 s erfolgt der Wechsel von den konventionell erzeugten Wirkungsquerschnitten zu den Wirkungsquerschnitten aus dem Ganzkern-Modell. Trotz Skalierung des Spaltwirkungsquerschnitts wird eine negative Reaktivitätszufuhr beobachtet. Mit Auszug des Steuerstabs steigt die Reaktivität zunächst an. Mit eintretenden Rückwirkungseffekten nimmt die Reaktivität ab ca. 7 s wieder ab. Die Aktualisierung der Wirkungsquerschnittsbibliotheken führt zu geringen Sprüngen im Reaktivitätsverlauf.

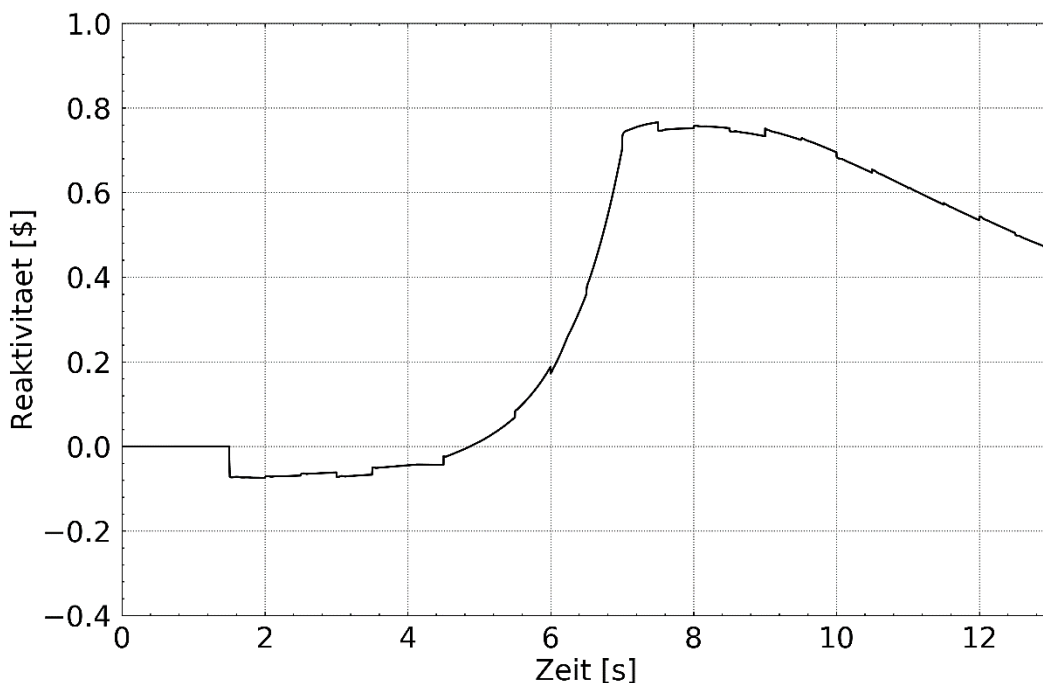


Abb. 4.11 Mit der Hybridmethode errechneter Verlauf der Reaktivität der Steuerstabverfahrtransiente im TMI-1 Minikernmodell

Der zeitliche Verlauf der Leistung wird in Abb. 4.12 gezeigt. Die negative Reaktivitätszufuhr bei 1,5 s verhindert zunächst einen deutlichen Anstieg der Leistung. Mit anwachsender positiver Reaktivität steigt ab ca. 7 s auch die Leistung an. Wie im Verlauf der Reaktivität sind auch beim Verlauf der Leistung geringe Sprünge zu erkennen.

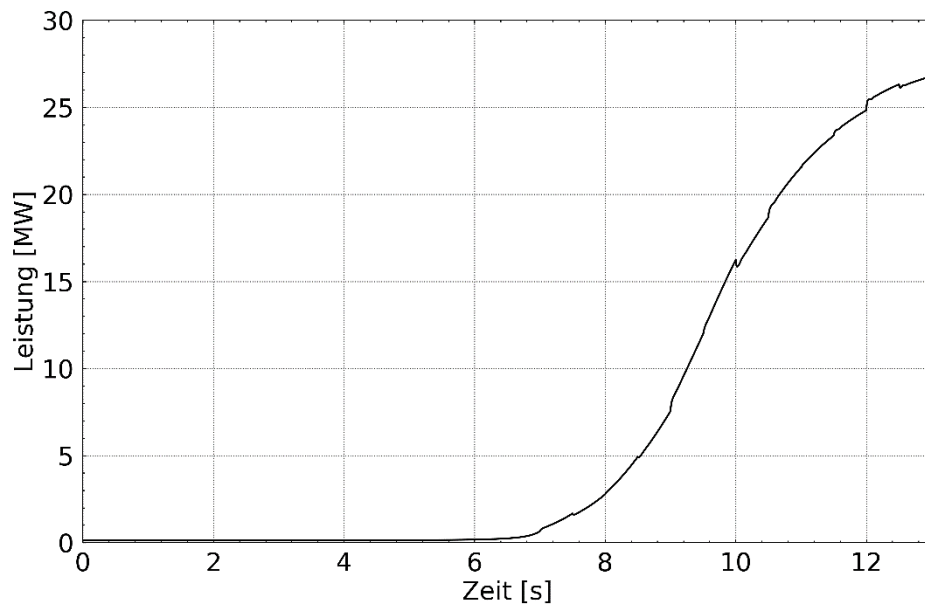


Abb. 4.12 Verlauf der Leistung der Steuerstabverfahrtransiente bei Anwendung der Hybridmethode

In zukünftigen Forschungs- und Entwicklungsarbeiten kann diese Hybridmethode weiter verbessert werden. Insbesondere soll eine Lösung zur Vermeidung des Reaktivitäts-sprungs beim Wechsel von den konventionellen Wirkungsquerschnitten zu den Wirkungsquerschnitten aus dem Ganzkern-Modell gefunden werden. Die geringen Sprünge in der Reaktivität sowie in der Leistung im weiteren Verlauf der Transiente sind nach derzeitigem Kenntnisstand eventuell auf eine zu geringe Anzahl von verwendeten Neutronschicksalen bei der Ganzkern-Rechnung zurückzuführen.

5 AP 3: Weiterentwicklung, Validierung und Anwendung von Methoden zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse

Im Rahmen des Arbeitspakets 3 werden systematische Unsicherheitsanalysen bezüglich nuklearer Daten, insbesondere für schnelle Reaktorsysteme, sowie die Weiterentwicklung von Methoden zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse beschrieben.

5.1 Beteiligung am UAM-SFR-Benchmark

Auf der Basis der im Vorhaben RS1536 erstellten Plattform für Unsicherheitsanalysen für schnelle Reaktorsysteme und der entsprechenden Spezifikation werden Unsicherheitsanalysen für die nukleare Berechnungssequenz im Rahmen der Beteiligung an einem internationalen OECD-NEA-Benchmark durchgeführt. Dies wurde mit dem technischen Komitee des UAM-SFR-Benchmarks abgestimmt.

Die von der GRS vorgeschlagenen Erweiterungen wurden inzwischen in die Gesamtspezifikation aufgenommen /BUI 19/. Dabei sollen die Ergebnisse von Berechnungen der Benchmark-Teilnehmer einschließlich der eigenen Ergebnisse mit unterschiedlichen Berechnungsmethoden für Nominalwerte, Unsicherheiten und Sensitivitäten für Stabzellen, Brennelemente, Superzellen (Anordnungen aus Absorberelementen und Brennelementen) und Ganzkernanordnungen verglichen und bewertet werden.

Den Anordnungen zugrunde liegen die Abmessungen und Nuklidichten für einen mittelgroßen Reaktorkern (thermische Leistung: 1.000 MW) mit metallischem Brennstoff, bezeichnet als MET1000, und für einen großen Reaktorkern (thermische Leistung: 3.600 MW) mit oxidischem Brennstoff, bezeichnet als MOX3600. Horizontale Schnitte durch die Anordnungen für die Stabzellen, Brennelemente und Superzellen sind in Abb. 5.1, Abb. 5.2 und Abb. 5.3 skizziert.

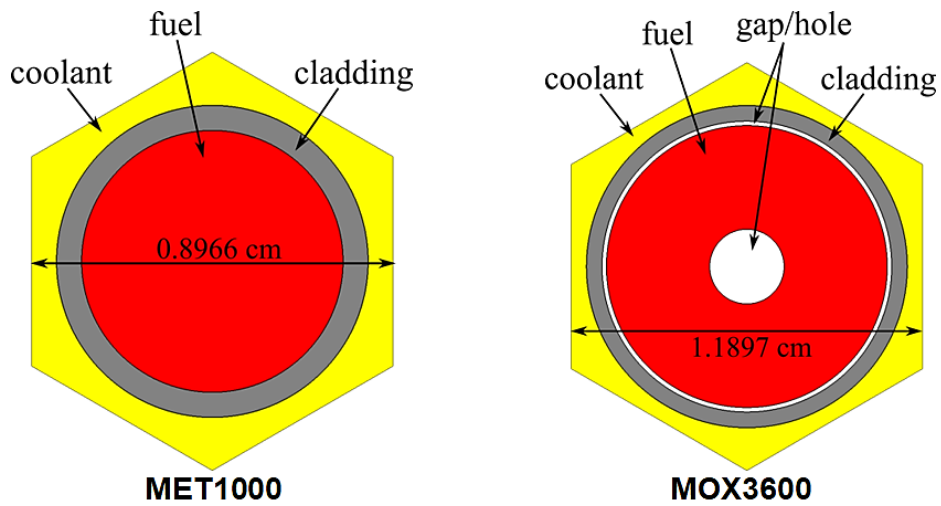


Abb. 5.1 UAM-SFR-Benchmark: Skizze der Stabzellen

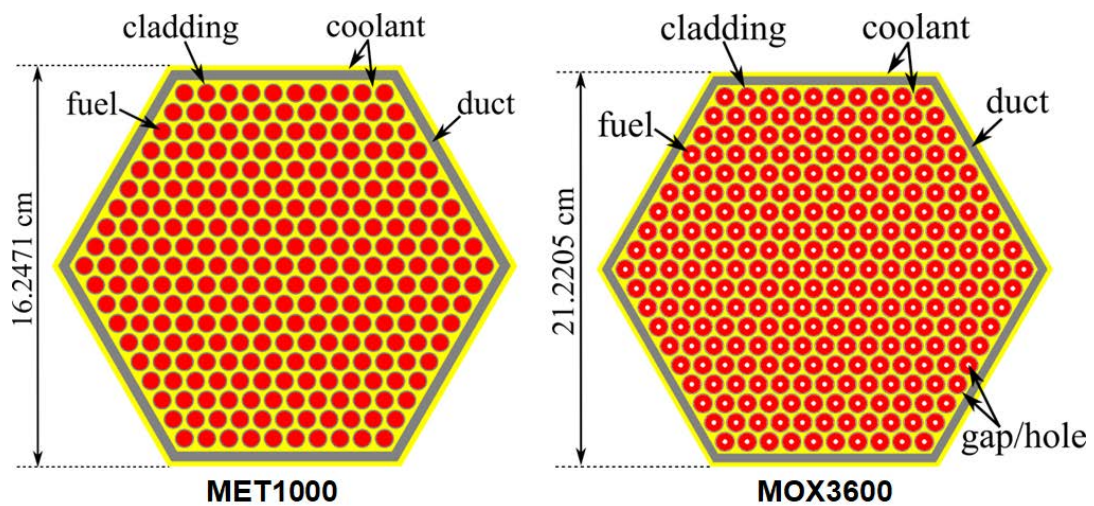


Abb. 5.2 UAM-SFR-Benchmark: Skizze der Brennelemente

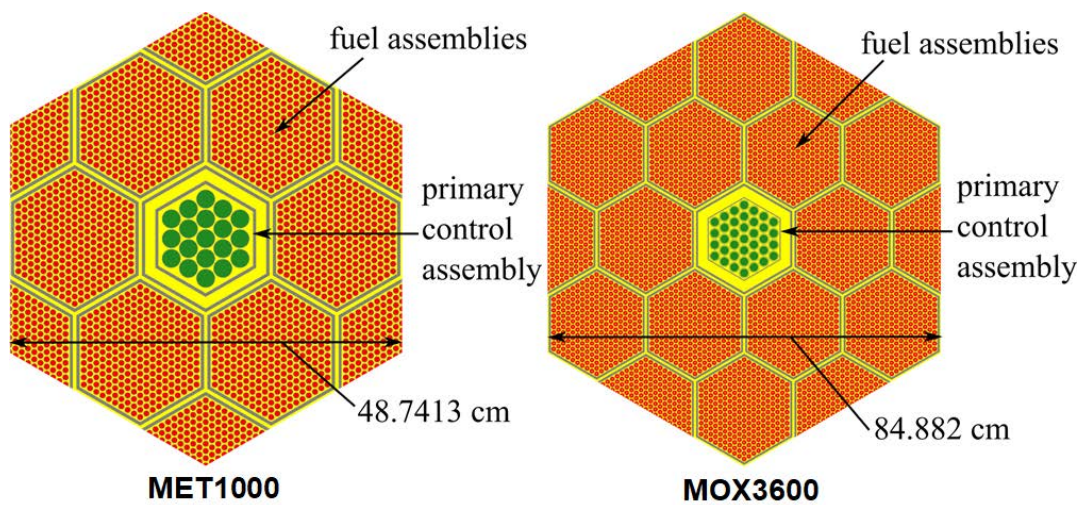


Abb. 5.3 UAM-SFR-Benchmark: Skizze der Superzellen

Zunächst wurden Eingabedatensätze für den Monte-Carlo-Code MCNP6 /PEL 13/ erstellt. Damit wurden mit nuklearen Daten in kontinuierlicher Energiedarstellung auf der Basis der Datenbibliothek ENDF/B-VII.1 /CHA 11/ Referenzlösungen erzeugt. Entsprechende Eingabedatensätze wurden zur Durchführung von deterministischen Transportrechnungen mit dem Code NEWT aus dem Programmsystem SCALE 6.2.3 /REA 18/ erstellt. Dabei ist zu bemerken, dass die Berechnung der größeren Anordnungen, insbesondere der Superzellen, mit NEWT eine große Herausforderung darstellt. Mit der in Abb. 5.3 dargestellten Modellierung und der Darstellung der Stabzellen durch hexagonale Gitter war es nicht möglich, erfolgreich NEWT-Rechnungen durchzuführen. Daher wurde zunächst die Hexagonalgeometrie in Rechteckgeometrie transformiert. Dies ist exakt möglich. Die Transformation ist in Abb. 5.4 skizziert. Zusätzlich wurde auf Verwendung hexagonaler Gitter verzichtet; stattdessen wurden alle Brennstäbe und Absorberstäbe einzeln positioniert.

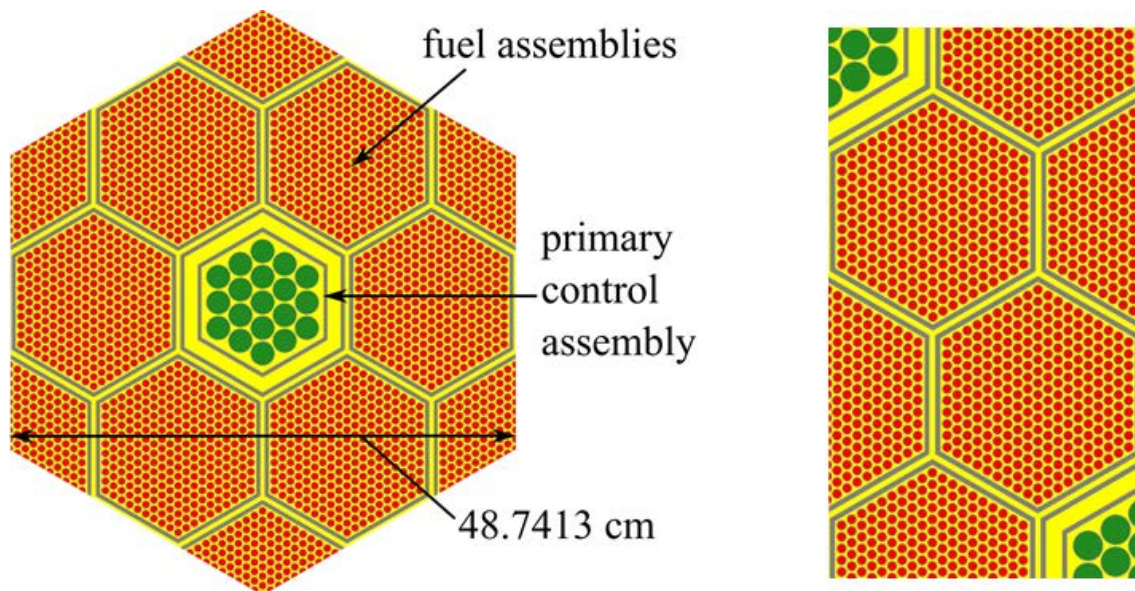


Abb. 5.4 UAM-SFR-Benchmark: Transformation der Modellierung der MET1000-Superzelle von Hexagonal- in Rechteckgeometrie

Unter Verwendung der im Vorhaben RS1536 /ZWE 18/ erzeugten Multigruppen-Wirkungsquerschnittsbibliotheken für schnelle Systeme ergibt sich dabei eine ausgezeichnete Übereinstimmung mit den Referenzlösungen hinsichtlich Multiplikationsfaktoren und Reaktivitätseffekten. Dies ist aus Abb. 5.5 und Abb. 5.6 ersichtlich, in denen Vergleiche der Multiplikationsfaktoren, die mit MCNP6 und NEWT berechnet wurden, für alle Anordnungen dargestellt sind.

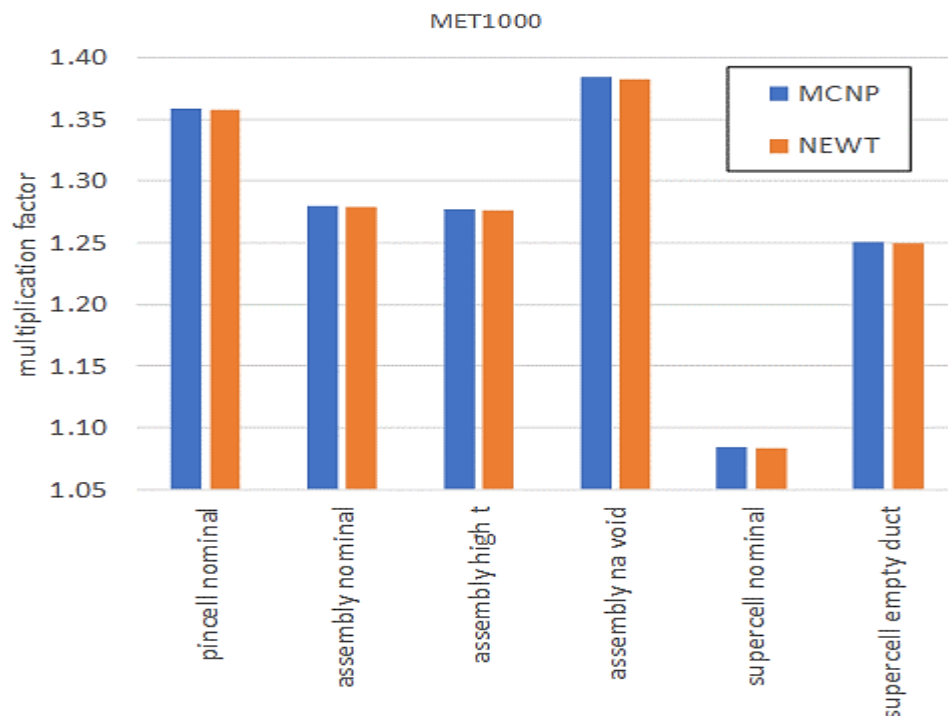


Abb. 5.5 UAM-SFR-Benchmark: Nominalergebnisse für die MET1000-Anordnungen aus MCNP und NEWT

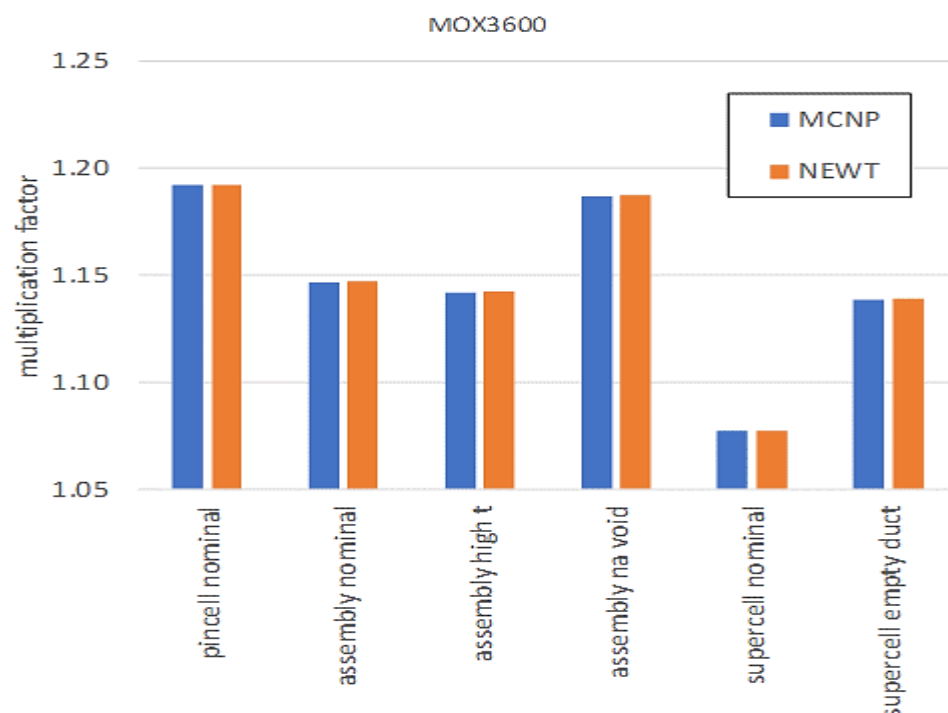


Abb. 5.6 UAM-SFR-Benchmark: Nominalergebnisse für die MOX3600-Anordnungen aus MCNP und NEWT

Auf der Basis der NEWT-Berechnungen mit Nominaldaten wurden Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen mit dem GRS-Programmsystem XSUSA /AUR 19/ sowie den

Berechnungssequenzen SAMPLER und TSUNAMI-2D aus SCALE 6.2.3 durchgeführt. Als nukleare Datenbibliothek diente ein Satz von Wirkungsquerschnitten mit 425 Energiegruppen, der im Rahmen des Vorgängervorhabens RS1536 für schnelle Systeme erzeugt worden war. Zur Erhöhung der Ausführungsgeschwindigkeit wurden Änderungen an den Steuersequenzen für XSUSA und SAMPLER vorgenommen. Dies sind für die komplexeren Anordnungen der Brennelemente und insbesondere der Superzellen von großem Vorteil. Die größte Anordnung, die Superzelle mit oxidischem Brennstoff, hätte mit der Standard-SAMPLER-Sequenz aus SCALE 6.2 mit den verfügbaren Ressourcen überhaupt nicht in vernünftiger Zeit analysiert werden können. Trotz dieser Optimierungen an den Steuersequenzen für XSUSA und SAMPLER zur Erhöhung der Ausführungsgeschwindigkeit ist die benötigte Rechenzeit für die komplexeren Anordnungen der Brennelemente und insbesondere der Superzellen erheblich. Dasselbe gilt für die TSUNAMI-2D-Analysen, bei denen für jede zu berechnende Unsicherheit einer Ergebnisgröße eine separate adjungierte Transportrechnung durchgeführt werden muss.

Insgesamt zeigt sich sehr gute Übereinstimmung der mit den verschiedenen Methoden berechneten Unsicherheiten hinsichtlich Multiplikationsfaktoren, Reaktivitätseffekten und Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten. Die Ergebnisse für die Stabzellen sind in Abb. 5.7 und Abb. 5.8, für die Brennelemente in Abb. 5.9 und Abb. 5.10, und für die Superzellen Abb. 5.11 und Abb. 5.12 dargestellt, jeweils für metallischen und oxidischen Brennstoff.

Allerdings wurden für einige makroskopische Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte der Brennelemente deutliche Abweichungen zwischen XSUSA und SAMPLER einerseits und TSUNAMI-2D andererseits beobachtet. Dies konnte auf Unregelmäßigkeiten in TSUNAMI-2D zurückgeführt werden. Darüber hinaus ergaben sich signifikante Abweichungen in den Eingruppen-Wirkungsquerschnitten einiger Reaktionen bei den Stabzell-Berechnungen zwischen XSUSA und SAMPLER einerseits und TSUNAMI-2D andererseits. Dies ist auf sehr große Unsicherheiten in den entsprechenden mikroskopischen Wirkungsquerschnitten zurückzuführen; hier ergeben sich naturgemäß bei der Durchführung des Samplings deutlich geringere Varianzen der Stichproben im Vergleich zu den Varianzen der Originaldaten, was schließlich zu geringen Ergebnisunsicherheiten führt. Um dies zu beheben, wird eine Methode entwickelt, mit der die XSUSA- und SAMPLER-Ergebnisse in einem Postprocessing-Schritt näherungsweise korrigiert werden können.

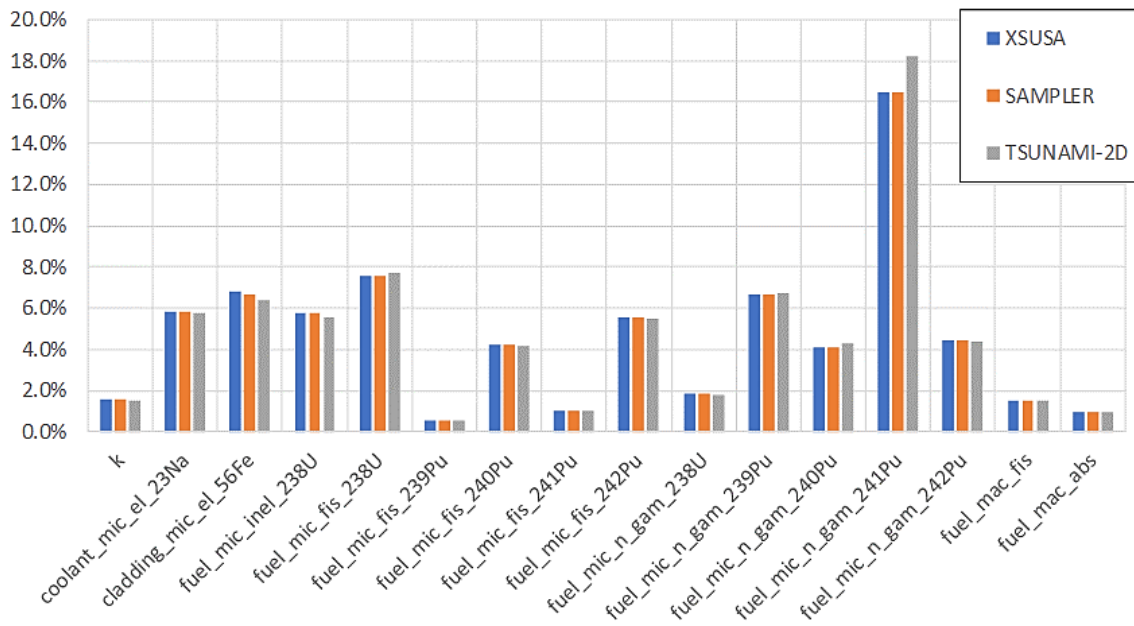


Abb. 5.7 UAM-SFR-Benchmark: Relative Unsicherheiten für den Multiplikationsfaktor und Eingruppen-Wirkungsquerschnitte der MET1000-Staffzellen aus XSUSA, SAMPLER und TSUNAMI-2D

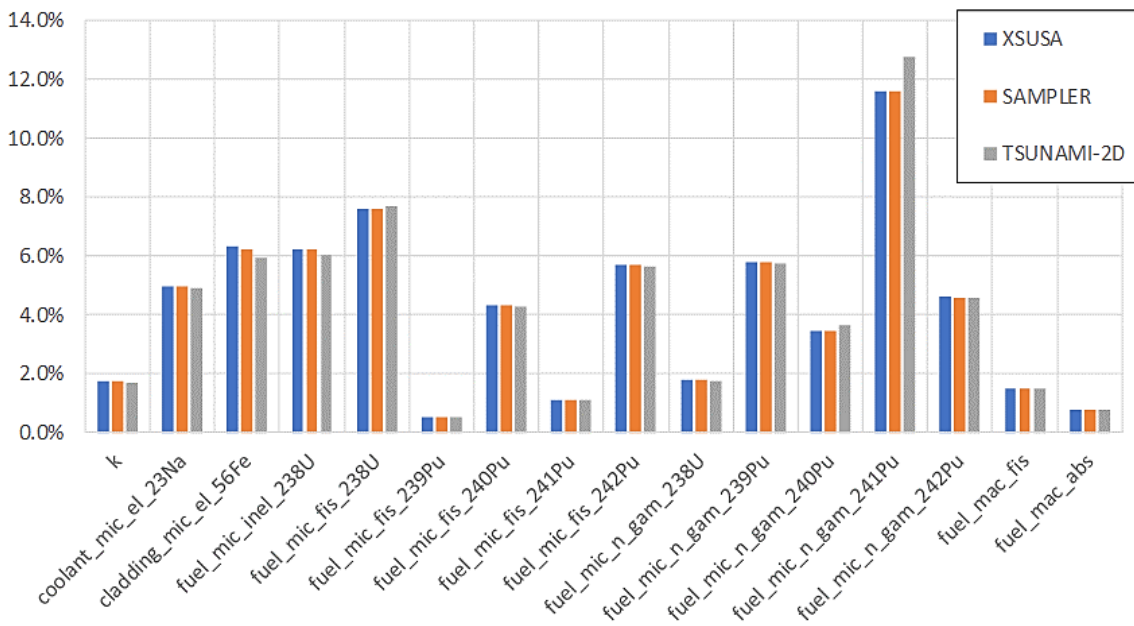


Abb. 5.8 UAM-SFR-Benchmark: Relative Unsicherheiten für den Multiplikationsfaktor und Eingruppen-Wirkungsquerschnitte der MOX3600-Staffzellen aus XSUSA, SAMPLER und TSUNAMI-2D

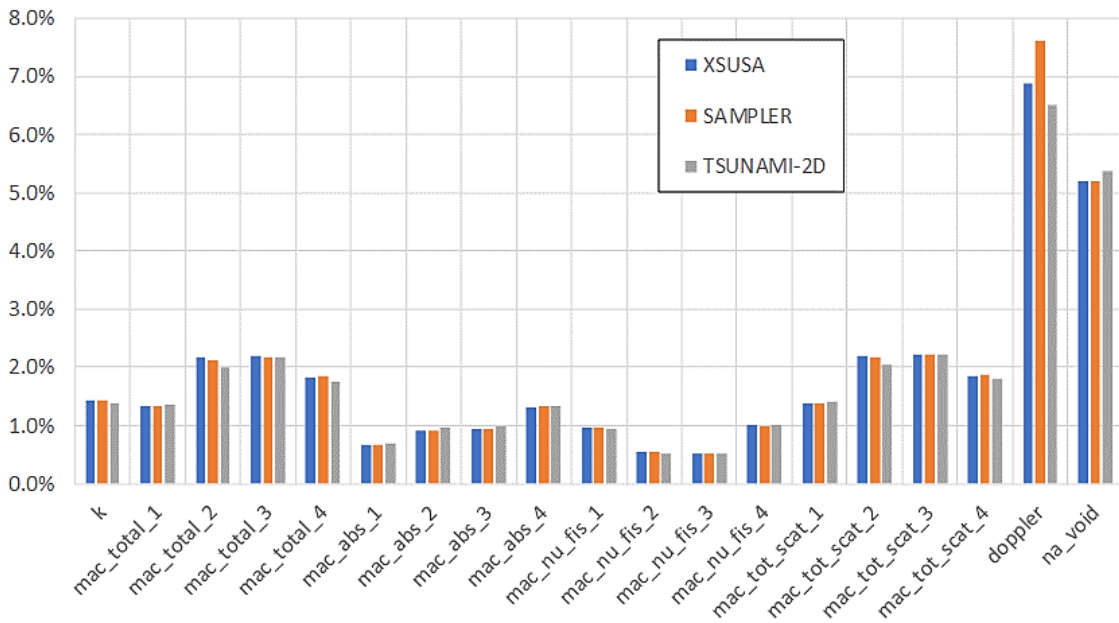


Abb. 5.9 UAM-SFR-Benchmark: Relative Unsicherheiten für den Multiplikationsfaktor, Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte und Reaktivitätskoeffizienten der MET1000-Brennelemente aus XSUSA, SAMPLER und TSUNAMI-2D

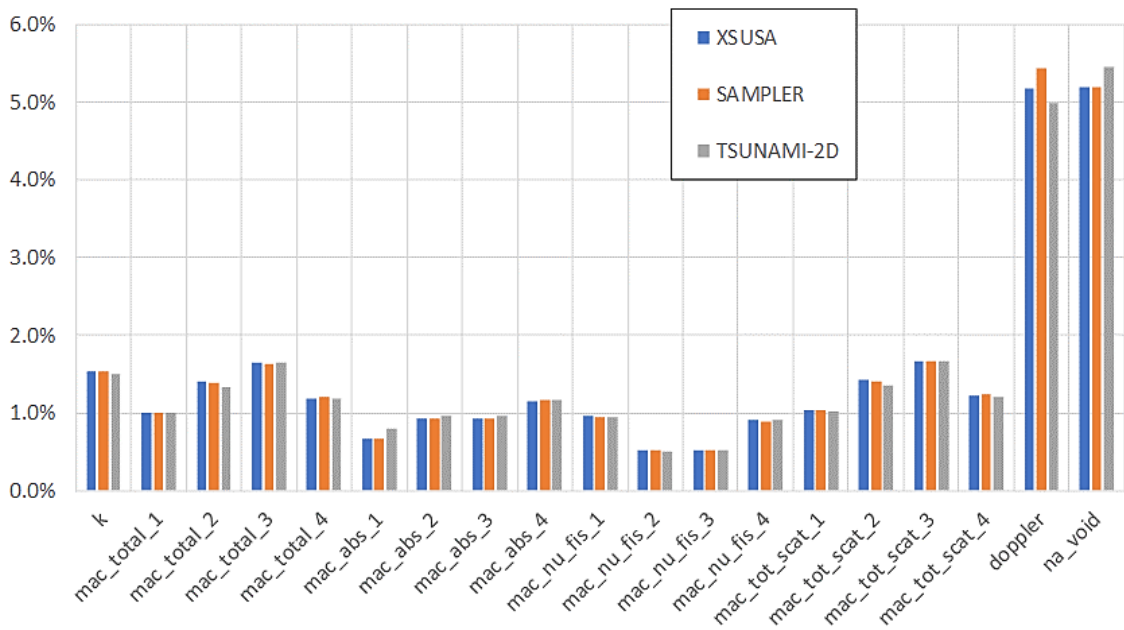


Abb. 5.10 UAM-SFR-Benchmark: Relative Unsicherheiten für den Multiplikationsfaktor, Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte und Reaktivitätskoeffizienten der MOX3600-Brennelemente aus XSUSA, SAMPLER und TSUNAMI-2D

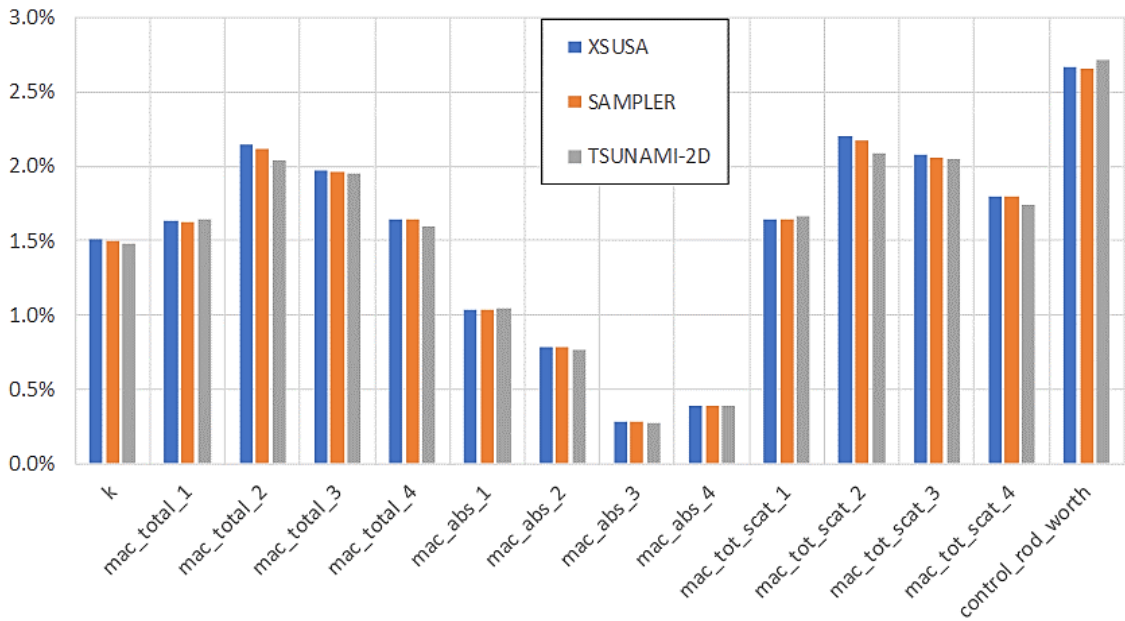


Abb. 5.11 UAM-SFR-Benchmark: Relative Unsicherheiten für den Multiplikationsfaktor, Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte und Reaktivitätskoeffizienten der MET1000-Superzellen aus XSUSA, SAMPLER und TSUNAMI-2D

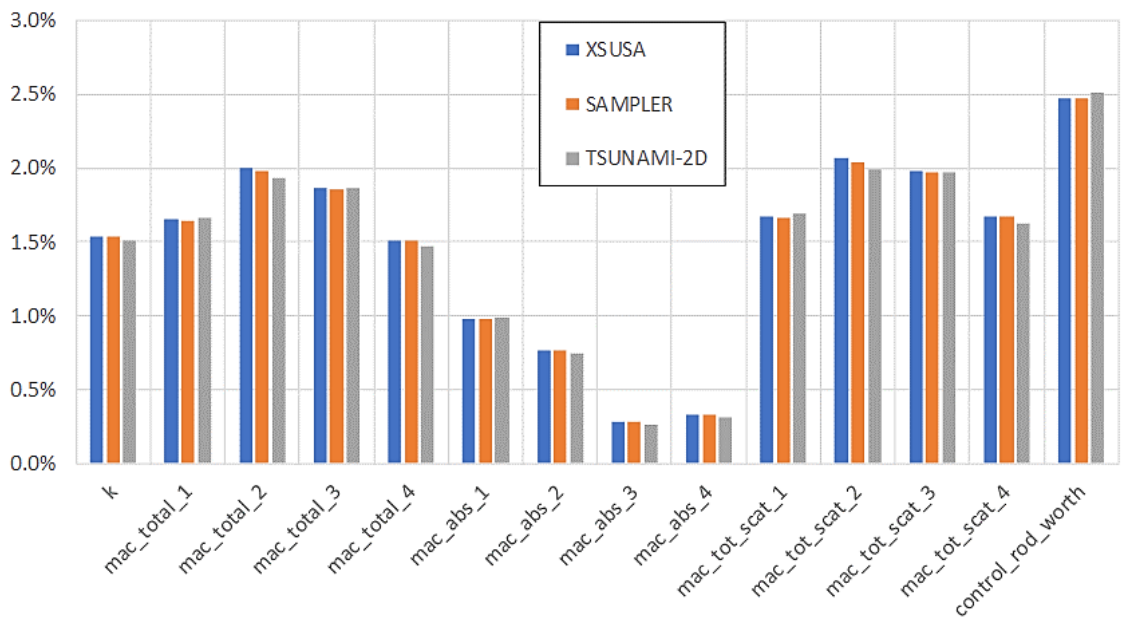


Abb. 5.12 UAM-SFR-Benchmark: Relative Unsicherheiten für den Multiplikationsfaktor, Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte und Reaktivitätskoeffizienten der MOX3600-Superzellen aus XSUSA, SAMPLER und TSUNAMI-2D

5.2 Beteiligung am C5G7-TD-Benchmark

Der C5G7-TD-Benchmark /BOY 19/ der OECD/NEA zur Durchführung von Transientensimulationen an einem beispielhaften kleinen DWR-artigen Reaktorkern verwendet bislang einen vorgefertigten Satz von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten für einen vorgegebenen Zustand bezüglich der thermohydraulischen Parameter (Brennstofftemperatur, Borkonzentration, Moderatortemperatur und -dichte). Dies reicht für die rein neutronenkinetische Beschreibung von Transienten aus. In den nächsten Phasen des Benchmarks ist geplant, gekoppelte Transientenberechnungen und später auch Unsicherheitsanalysen durchzuführen. Dies erfordert die Erstellung von neuen Wirkungsquerschnitten auf einem Stützstellengitter von thermohydraulischen Parametern. Diese Aufgabe hat die GRS übernommen. Im Berichtszeitraum wurden derartige Wirkungsquerschnitte erzeugt. Dazu wurde zunächst eine Multigruppenstruktur mit einer geringen Anzahl von Energiegruppen festgelegt, damit mit den resultierenden Wirkungsquerschnitten einerseits zeitabhängige deterministische Transportrechnungen mit vertretbarem Rechenaufwand durchgeführt werden können, andererseits die Ergebnisse keine zu großen Abweichungen zu Monte-Carlo-Referenzergebnissen aufweisen. Es wurde schließlich eine Struktur mit sieben Energiegruppen gewählt, die zu der Struktur der ursprünglichen Daten, die mit dem Spektralcode WIMS-D erzeugt wurden, ähnlich ist. Die Gruppengrenzen sind in Tab. 5.1 angegeben.

Tab. 5.1 Energiegruppengrenzen der Wirkungsquerschnitte für den C5G7-TD-Benchmark

Energie-Gruppe	Gruppengrenze (eV) WIMS-D	Gruppengrenze (eV) SCALE 6.2
1	1,000E+07	2,000E+07
2	1,353E+06	1,356E+06
3	9,118E+03	9,500E+03
4	4,805E+01	5,340E+01
5	4,000E+00	4,100E+00
6	6,250E-01	6,250E-01
7	1,400E-01	1,250E-01
8	0,000E+00	1,000E-05

Damit wurden Wirkungsquerschnitte auf einem Gitter von thermohydraulischen Parametern, zunächst der Brennstofftemperatur erzeugt, die mit dem Benchmark-Team abgestimmt wurden. Die Daten wurden durch Vergleich mit Monte-Carlo-Referenzrechnungen für Brennelemente und Ganzkernanordnungen validiert. Dabei hat sich gezeigt, dass es besser ist, als Anordnung für die Erzeugung der Wirkungsquerschnitte ein Schachbrettmuster aus UO_2 - und MOX-Brennelementen zu verwenden, als die jeweiligen Brennelemente im unendlichen Gitter. Dieses Modell ist in Abb. 5.13 dargestellt.

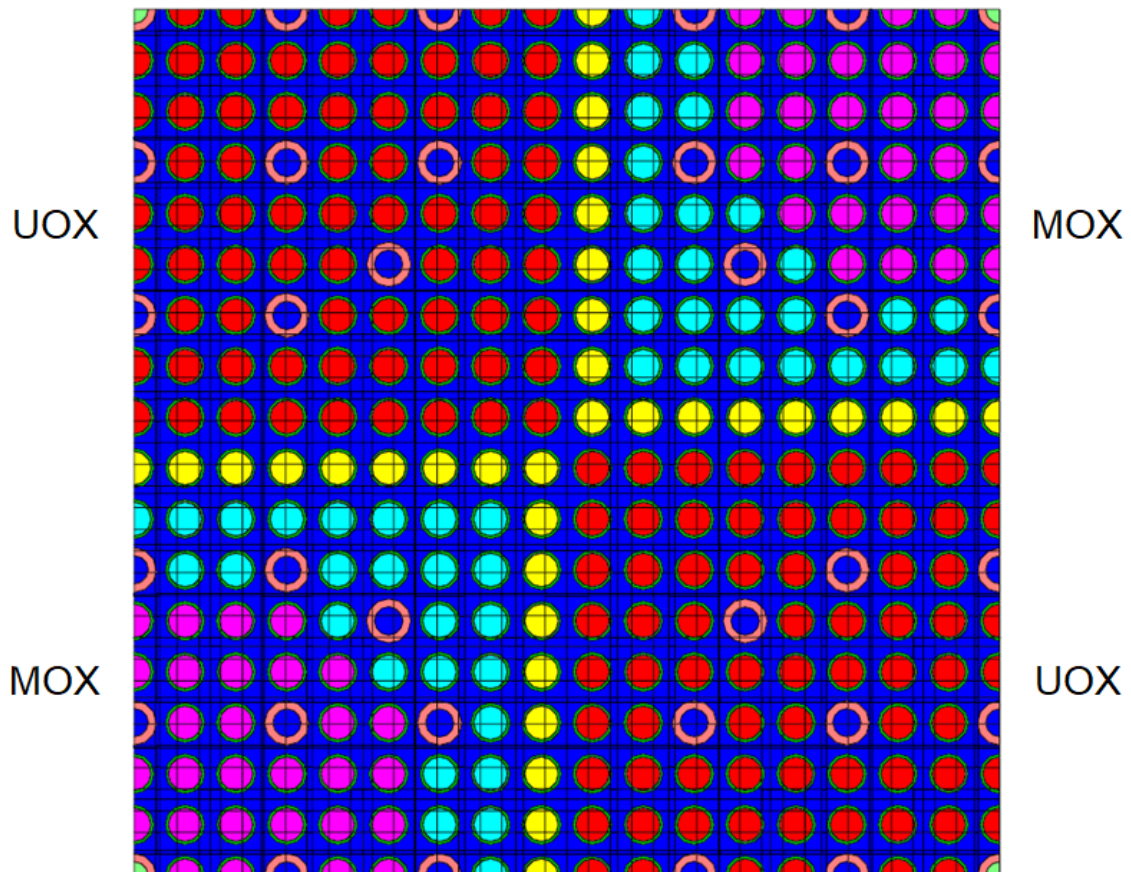


Abb. 5.13 C5G7-TD-Benchmark: Schachbrettanordnung aus UO_2 - und MOX-Brennelementen zur Erzeugung von 7-Gruppen-Wirkungsquerschnitten mit NEWT

Zur Validierung der 7-Gruppen-Wirkungsquerschnitte wurde zunächst die Schachbrettanordnung aus Abb. 5.13 herangezogen; für diese Anordnung wurde der Multiplikationsfaktor im unkontrollierten Zustand in Abhängigkeit von der Brennstofftemperatur berechnet und mit entsprechenden Ergebnissen mit der Multigruppen-Bibliothek mit 252 Energiegruppen aus SCALE 6.2.3 verglichen. Diese Vergleiche sind in Abb. 5.14 dargestellt. Dabei zeigen sich nur äußerst geringe Unterschiede über den gesamten Bereich der Brennstofftemperatur.

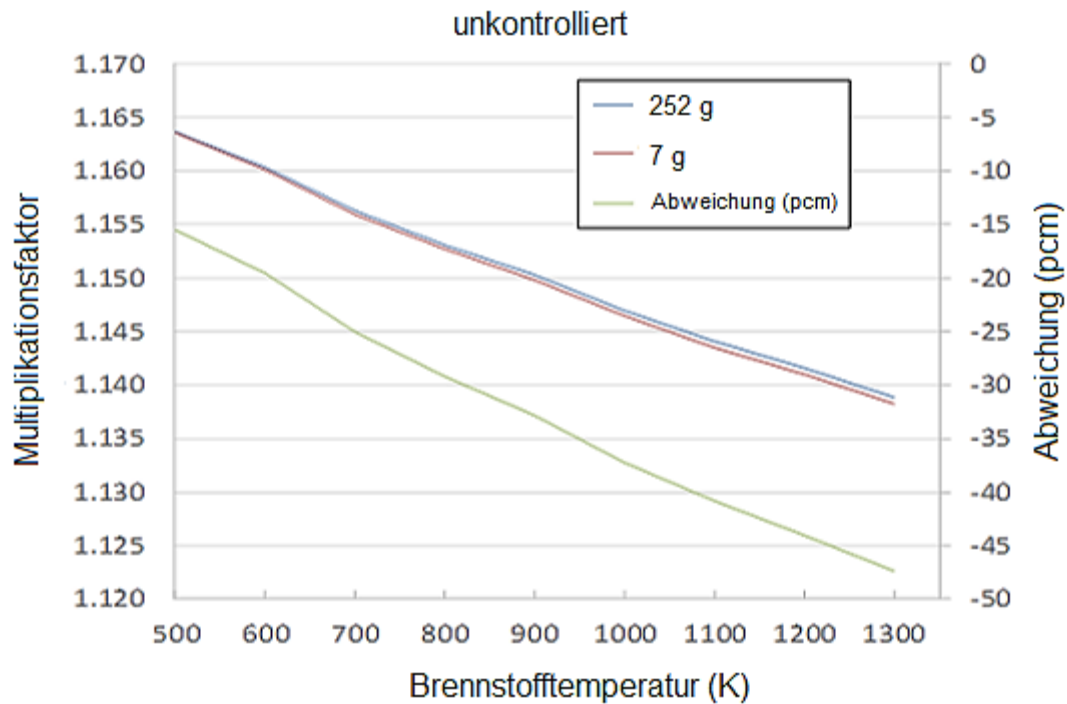


Abb. 5.14 C5G7-TD-Benchmark: Multiplikationsfaktor für die unkontrollierte Schachbrettanordnung aus UO_2 - und MOX-Brennelementen mit 252 und 7 Energiegruppen

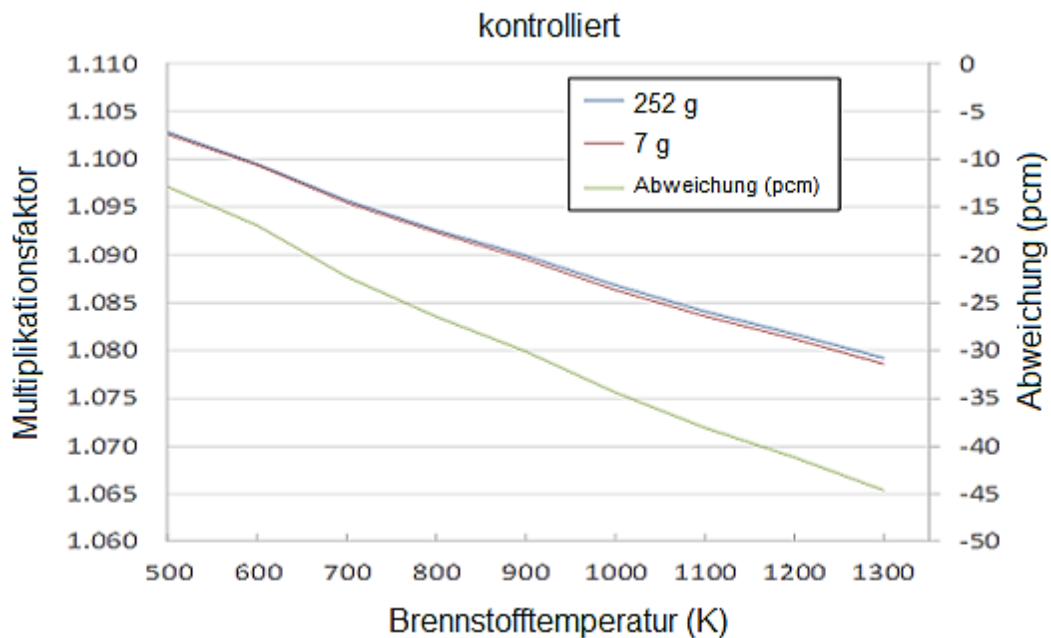


Abb. 5.15 C5G7-TD-Benchmark: Multiplikationsfaktor für die kontrollierte Schachbrettanordnung aus UO_2 - und MOX-Brennelementen mit 252 und 7 Energiegruppen

Schließlich wurde die Qualität der Wirkungsquerschnitte anhand der Ganzkern-Anordnung überprüft. Dazu wurden Berechnungen für ein dreidimensionales Modell mit dem Monte-Carlo-Code KENO Va aus SCALE 6.2.3 unter Verwendung der Bibliotheken mit 252 und 7 Energiegruppen durchgeführt und die Ergebnisse mit entsprechenden Ergebnissen in Daten kontinuierlicher Energiedarstellung verglichen. Das KENO-Modell ist in Abb. 5.16 dargestellt.

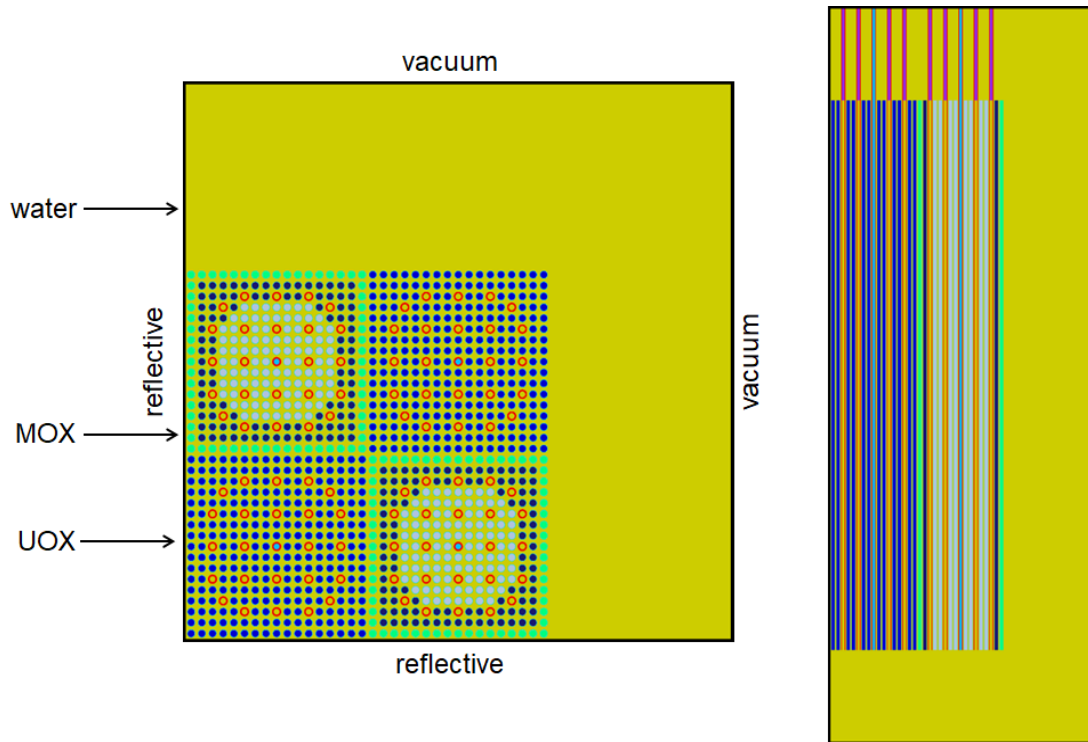


Abb. 5.16 C5G7-TD-Benchmark: KENO-Ganzkernmodell in horizontaler und axialer Darstellung

Zum Vergleich wurden die radialen Stableistungsverteilungen unter Verwendung der drei Wirkungsquerschnittssätze (kontinuierliche Energie, 252 Gruppen, 7 Gruppen) herangezogen. In Abb. 5.17 und Abb. 5.18 sind die Absolutwerte der relativen Abweichungen zwischen den Ergebnissen mit den Multigruppen-Daten und mit denen in kontinuierlicher Energiedarstellung skizziert. Diese reichen von 0,0 (weiße Farbe) bis zum stabweisen Maximalwert für die jeweilige Anordnung (rote Farbe); je intensiver die Farbe ist, desto größer ist die Abweichung. Erwartungsgemäß sind die Abweichungen mit der 252-Gruppen-Bibliothek geringer als mit der 7-Gruppen-Bibliothek: für die unkontrollierte Anordnung -1.52 % ... 1.65 % (252 Gruppen) und -1.87 % ... 3.28 % (7 Gruppen), für die kontrollierte Anordnung -2.31 % ... 3.26 % (252 Gruppen) und -3.59 % ... 3.11 % (7 Gruppen). Angesichts der groben Energieeinteilung der 7-Gruppen-Daten werden diese Abweichungen als akzeptabel angesehen.

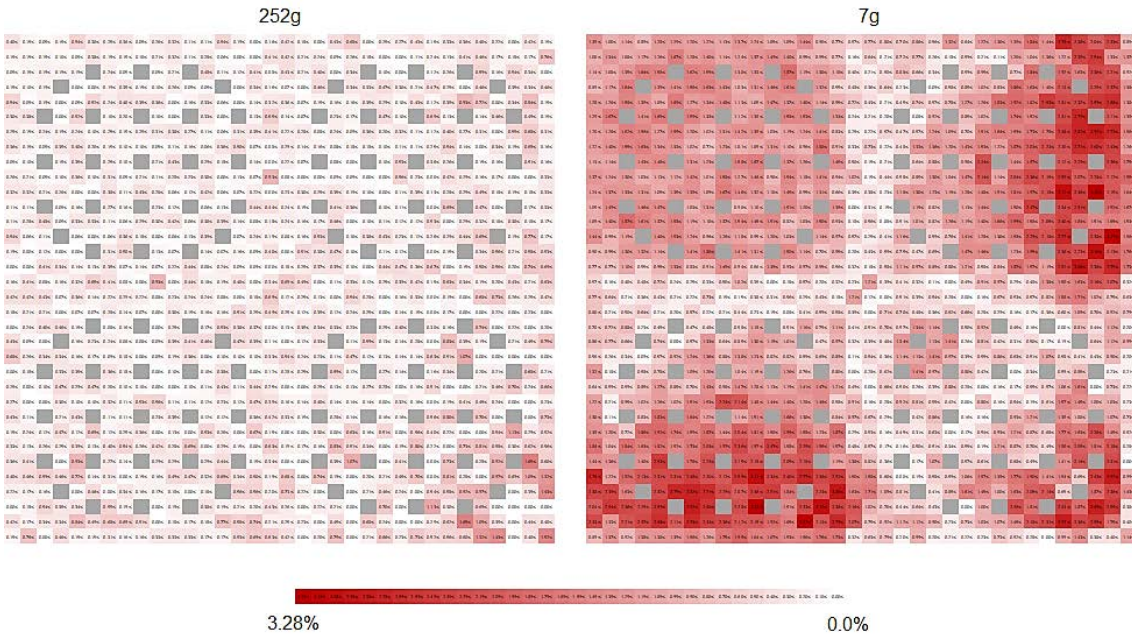


Abb. 5.17 C5G7-TD-Benchmark: Relative Abweichungen zwischen KENO-Ergebnissen für die radiale Stableistungsverteilung im unkontrollierten Kern mit Multigruppen-Daten und Daten kontinuierlicher Energie

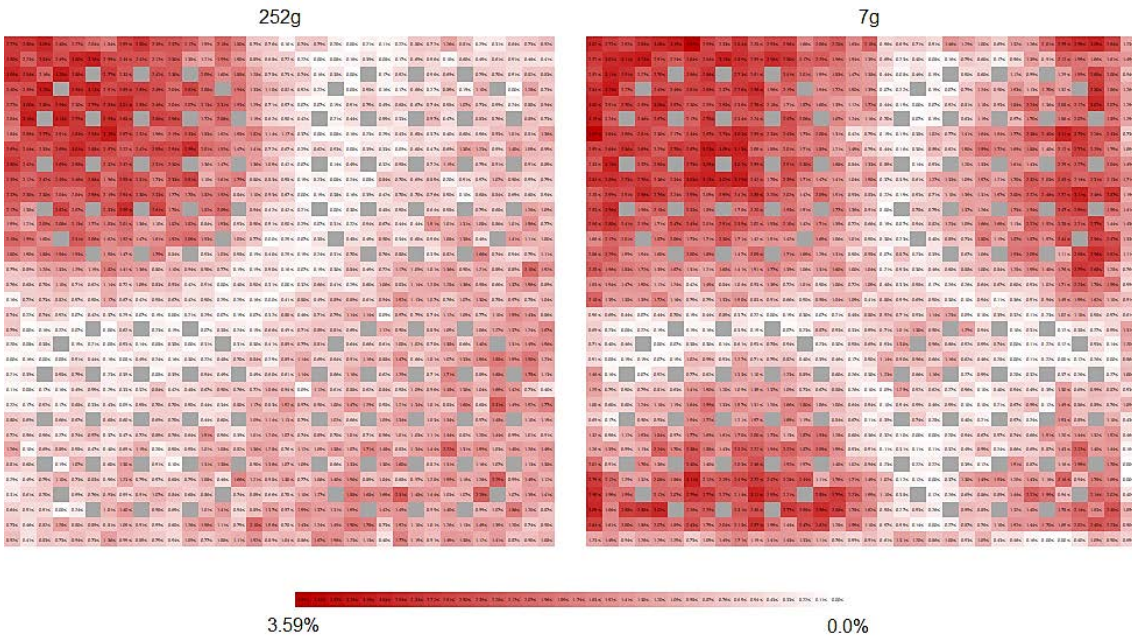


Abb. 5.18 C5G7-TD-Benchmark: Relative Abweichungen zwischen KENO-Ergebnissen für die radiale Stableistungsverteilung im kontrollierten Kern mit Multigruppen-Daten und Daten kontinuierlicher Energie

Die 7-Gruppen-Daten wurden in das vorgeschriebene Format überführt, die Qualitätssicherung wurde abgeschlossen, und die Daten wurden dem Benchmark-Team übergeben.

Zur Durchführung von stichprobenbasierten Unsicherheitsanalysen ist es erforderlich, Wirkungsquerschnitte mit variierten nuklearen Daten zu erzeugen. Für Transientenberechnungen sind hier auch die Unsicherheiten in der mittleren Anzahl von verzögerten Neutronen pro Spaltung relevant. Dabei hat sich herausgestellt, dass die in SCALE 6.2 verfügbaren Kovarianzdaten für einige Nuklide unrealistische Werte enthalten. So beträgt demnach die relative Unsicherheit für U-238 über den gesamten Energiebereich 100 %. Diese viel zu hohen Werte würden sich auch stark auf die Ergebnisunsicherheiten in Kerntransienten auswirken. Dies lässt sich nur umgehen, indem die entsprechenden Daten durch Daten aus anderen Evaluierungen ersetzt werden. Dazu werden die Daten aus JENDL-4.0 /SHI 11/ herangezogen, die einen vollständigen Satz von Kovarianzdaten der mittleren Anzahl von verzögerten Neutronen pro Spaltung enthalten. Ein Vergleich zwischen Kovarianzdaten aus SCALE 6.2, ENDF/B-VIII.0 /BRO 18/ und JENDL-4.0 ist in Abb. 5.19 dargestellt.

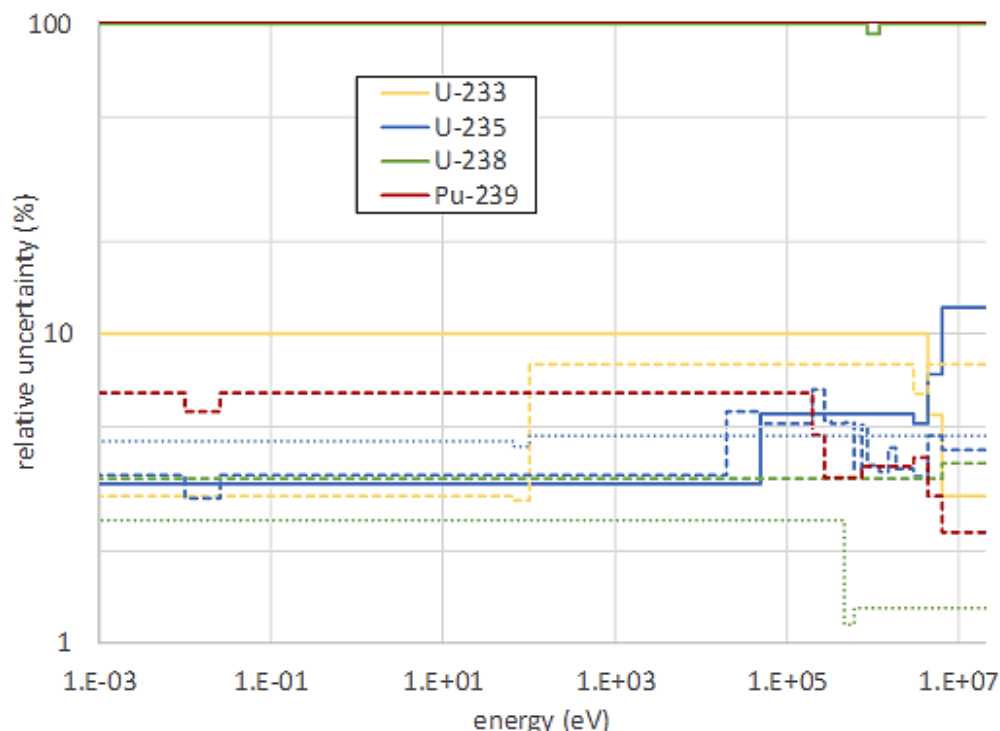


Abb. 5.19 Relative Unsicherheiten der mittleren Anzahl von verzögerten Neutronen pro Spaltung für wichtige Aktinoide aus SCALE 6.2 (durchgezogene Linien), JENDL-4.0 (gestrichelte Linien) und ENDF/B-VIII.0 (gepunktete Linien)

Die evaluierten Daten aus JENDL-4.0 wurden zunächst mit NJOY /MAC 94/ in die Multigruppenstruktur mit 56 Energiegruppen aus SCALE 6.2 prozessiert. Anschließend wurden mit dem XSUSA-Modul MEDUSA Variationsparameter für die kombinierten Datensätze (mittlere Anzahl von verzögerten Neutronen pro Spaltung aus JENDL-4.0, alle anderen Reaktionsdaten aus SCALE 6.2) mit einer Stichprobengröße von 1.000 erzeugt. Mit den entsprechend variierten mikroskopischen Wirkungsquerschnitten wurden die 7-Gruppen-Wirkungsquerschnitte für die erforderlichen Brennstofftemperaturen berechnet und in das vorgeschriebene Format überführt.

5.3 Erweiterung von XSUSA für Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen mit linearer Regression

Bei stichprobenbasierten Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen werden als Sensitivitätsmaße bisher der quadrierte multiple Korrelationskoeffizient oder der semipartielle multiple Korrelationskoeffizient ausgewertet. Diese stellen Maße für die Wichtigkeit einzelner Gruppen unsicherer Parameter, normalerweise individuelle Reaktionen individueller Nuklide, dar, mit denen eine Rangordnung der Wichtigkeit erstellt werden kann. Sie haben hier allerdings eine andere Interpretation als die Beiträge, die mit der deterministischen linearen Störungstheorie ausgewertet werden, und sind daher nicht direkt mit diesen vergleichbar. Um eine Vergleichbarkeit herzustellen ist es wünschenswert, aus stichprobenbasierten Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen Größen herzuleiten, die denen aus der deterministischen linearen Störungstheorie entsprechen. Dazu wurde innerhalb des Vorhabens ein Verfahren skizziert, mit dem aus XSUSA-Ergebnissen die gewünschten Beiträge näherungsweise berechnet werden können. Dies wird im Folgenden beschrieben. Diese Methodik wird fortan XSUSA(LR) genannt.

Dabei ist das Ziel, die bei Anwendung der deterministischen linearen Störungstheorie sich ergebenden Sensitivitätsvektoren zu berechnen, wie sie in einer Vielzahl von Erweiterungen zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse für Kritikalitätscodes implementiert sind, z. B. in SUS3D /KOD 11/ und TSUNAMI /REA 18/. Dieses Ziel wird durch die Beobachtung motiviert, dass im Zusammenhang mit stationären Kritikalitätsberechnungen die deterministische lineare Störungstheorie und die stochastische Methode sehr ähnliche Ergebnisse in Bezug auf die Gesamtunsicherheiten verschiedener Ergebnisgrößen für ein breites Spektrum von Systemen liefern, siehe z. B. /BOS 15/. Es wurde jedoch festgestellt, dass diese Annahmen bei der Untersuchung von Reaktortransienten möglicherweise nicht zutreffen, da das System starke Abweichungen von der Linearität

aufweisen kann /AUR 20/. In solchen Situationen sind sowohl die deterministische lineare Störungstheorie als auch die lineare Regression aus Zufallsstichproben nicht anwendbar.

Als Näherung erster Ordnung kann die skalare Ausgangsgröße y in \mathbb{R} als linear abhängig vom Vektor unsicherer Eingabeparameter $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_M)^T$ in \mathbb{R}^M betrachtet und als Funktion $f: \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}$ ausgedrückt werden:

$$y \approx f(X_1, \dots, X_M) = s_1 \cdot X_1 + \dots + s_M \cdot X_M + \text{const.} \quad (5.1)$$

Hier bezeichnet M die Gesamtzahl der Eingabeparameter mit nichtverschwindender Unsicherheit, und $\mathbf{s} = (s_1, \dots, s_M)^T$ in \mathbb{R}^M die entsprechenden Sensitivitäten, also die Ableitungen der Ergebnisgröße nach den Eingabeparametern.

Im Rahmen der deterministischen linearen Störungstheorie und mit mikroskopischen nuklearen Daten als unsicheren Eingabeparametern werden die Sensitivitäten üblicherweise berechnet, indem die direkte und die adjungierte Transportgleichung gelöst und der Gradient der jeweiligen Ergebnisgröße y in \mathbb{R} in Bezug auf den interessierenden Parameter berechnet wird:

$$\mathbf{s} = \nabla y = \begin{pmatrix} \frac{\partial y}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial y}{\partial x_M} \end{pmatrix} \quad (5.2)$$

Bei der stichprobenbasierten Methode kann der Sensitivitätsvektor aus der Eingangsparemeterstichprobe und der entsprechenden Ergebnisstichprobe abgeschätzt werden. Aufgrund der endlichen Stichprobengröße sind die Sensitivitäten Schätzer mit entsprechenden statistischen Unsicherheiten. Diese Sensitivitätsschätzungen ergeben sich durch Berechnung der Kovarianzmatrix zwischen den unsicheren Eingabeparametern und der Ergebnisgröße unter Verwendung der linearen Abhängigkeit in Gl. (5.1):

$$\text{cov}(\mathbf{X}, Y) \approx \text{cov}(\mathbf{X}, f(\mathbf{X})) = \text{cov}(\mathbf{X}, \mathbf{X}) \cdot \mathbf{s} \quad (5.3)$$

Dabei ist $\mathbf{s} = (s_1, \dots, s_M)^T$ der vollständige Sensitivitätsvektor, $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_M)^T$ der Vektor der unsicheren Eingabeparameter, und $cov(\mathbf{X}, \mathbf{X})$ die vollständige Kovarianzmatrix der Reaktionen aller Nuklide in der betrachteten Anordnung. Invertierung von Gl. (5.3) liefert einen Schätzer für den Sensitivitätsvektor:

$$\hat{\mathbf{s}} = cov(\mathbf{X}, \mathbf{X})^{-1} \cdot cov(\mathbf{X}, f(\mathbf{X})) \quad (5.4)$$

Die gesamte Ergebnisvarianz erhält man durch Anwendung der sog. *Sandwichformel* mit der vollständigen Kovarianzmatrix:

$$var(f(\mathbf{X})) = \hat{\mathbf{s}}^T \cdot cov(\mathbf{X}, \mathbf{X}) \cdot \hat{\mathbf{s}} \quad (5.5)$$

Den Unsicherheits-„Breakdown“ erhält man analog zur deterministischen linearen Störungstheorie, indem die entsprechenden Untervektoren und Untermatrizen der gesamten Kovarianzmatrix betrachtet werden:

$$v_{KL} = var(f(\mathbf{X}))_{KL} = \hat{\mathbf{s}}_K^T cov(\mathbf{X}, \mathbf{X})_{KL} \hat{\mathbf{s}}_L \quad (5.6)$$

Dabei beziehen sich K und L auf eine Indexliste $[j, i + 1, \dots, i + n]$, die ein entsprechendes Unterintervall aus dem Gesamtbereich $1, \dots, M$ unsicherer Eingabeparameter bezeichnet. Diese werden typischerweise als Bereich einer individuellen Reaktion eines einzelnen Nuklids gewählt. Im Fall $K = L$ ist dann v_{KK} die Ergebnisvarianz, die durch die Unsicherheiten der einzelnen Reaktion des einzelnen Nuklids allein verursacht würde, wenn es keine Korrelationen zu den Wirkungsquerschnitten aller anderen Nuklide bzw. Reaktionen gäbe. Im Fall $K \neq L$ ist v_{KL} der Wert, der zu $v_{KK} + v_{LL}$ addiert wird wenn man an der gemeinsam durch K und L verursachten Ergebnisvarianz interessiert ist. Sie kann positiv oder negativ sein, je nachdem, ob Korrelationen oder Antikorrelationen zwischen den Parametern der Gruppen K und L überwiegen.

Zur Klarheit wird hier angemerkt, dass in der deterministischen linearen Störungstheorie der Sensitivitätsvektor in Gl. (5.2) mit deterministischen Mitteln berechnet wird. Eine Invertierung der Parameter-Kovarianzmatrix ist nicht erforderlich. Die Berechnung des Unsicherheits-„Breakdowns“ mit Gl. (5.6) ist elementar und basiert auf der empirischen Kovarianzmatrix der nuklearen Daten.

Im Rahmen der linearen Regression mit der stichprobenbasierten Methode wird der Sensitivitätsvektor unter Verwendung der Kovarianzen zwischen dem Ergebnis und den unsicheren Eingabeparametern, Gl. (5.4), konstruiert. Dies sind nicht die wahren Kovarianzen die man mit einer unendlichen Stichprobengröße erhalten würde, sondern die Kovarianzen aus einer bestimmten Stichprobe, die eine zufällige Realisierung der wahren Werte bei Vorhandensein von Unsicherheiten darstellt. Dementsprechend muss statt der Parameter-Kovarianzmatrix $cov(\mathbf{X}, \mathbf{X})$ die Stichproben-Kovarianzmatrix verwendet werden, die eine konsistente Schätzung der Populationskovarianzmatrix darstellt. Die Populationskovarianzmatrix $cov(x, x)$, also die empirische Kovarianzmatrix der nuklearen Daten, ist normalerweise hochgradig singulär und muss als solche für die Anwendung des Stichprobenverfahrens modifiziert werden. Diese Modifikationen, die erforderlich sind, um eine positiv definite Kovarianzmatrix zu erhalten, enthalten eine gewisse Willkür, die zu Ungenauigkeiten bei der Konstruktion der Stichproben-Kovarianzmatrix und erst recht beim Invertieren führen kann. Dies kann letztendlich zu unzuverlässigen Ergebnissen für den Unsicherheits-„Breakdown“ führen.

Um diese Schwierigkeiten zu vermeiden, wird von der Tatsache Gebrauch gemacht, dass im Rahmen der deterministischen linearen Störungstheorie der Sensitivitätsvektor in Gl. (5.2) die Antworten des Systems auf Parameterstörungen darstellt und nicht von der Parameter-Kovarianzmatrix abhängt. Bei der stichprobenbasierten Methode würde dies für eine unendliche Stichprobengröße gelten; für eine endliche Stichprobengröße stellt es eine Näherung dar. Der Sensitivitätsvektor kann daher mittels einer gutartigen Stichproben-Kovarianzmatrix abgeschätzt werden, die sich aus einer gutartigen Populationskovarianzmatrix ergibt. Ein naheliegender Weg dies zu tun besteht darin, die vollständige Populationskovarianzmatrix durch ihre entsprechende Diagonalmatrix zu ersetzen, also nur die Varianzen der ursprünglichen Kovarianzmatrix beizubehalten und die Außerdiagonalelemente durch 0,0 zu ersetzen. Dies stellt sicher, dass die entsprechende Matrix den vollen Rang hat und streng positiv definit ist, und daher keine Modifikationen für die Erzeugung von Zufallsstichproben erfordert. Im Prinzip könnte man für jede Varianz einen beliebigen konstanten Wert wählen, z. B. 0,01, was einer relativen Standardabweichung von 10 % entspräche. Die Verwendung der Diagonalelemente der ursprünglichen Kovarianzmatrix ist jedoch vorteilhaft, da dies den Parametern mit größeren Unsicherheiten höhere Gewichte verleiht. Folglich hat die Stichproben-Kovarianzmatrix den vollen Rang und ist streng positiv definit und deshalb invertierbar, unter der Voraussetzung, dass die Stichprobengröße die Anzahl unsicherer Parameter überschreitet. Für die betrachteten Anordnungen liegt eine Stichprobengröße von 2.000

deutlich über der Anzahl unsicherer Parameter (ungefähr 1.200 bis 1.400, abhängig von der betrachteten Anordnung), und ist ein vernünftiger Kompromiss zwischen dem numerischen Aufwand und der Genauigkeit der Hauptbeiträge zu den Ergebnisunsicherheiten.

Das soeben beschriebene Verfahren liefert schließlich Abschätzungen der gesamten Ergebnisvarianz sowie des Unsicherheits-„Breakdowns“; es ist jedoch auch wünschenswert, die Konfidenzintervalle dieser Schätzer zu quantifizieren. Aufgrund der Komplexität der Funktionale, die die einzelnen Unsicherheitsbeiträge ausdrücken, ist ein Ausdruck in geschlossener Form für die Konfidenzintervalle nicht möglich. Daher wird ein auf Resampling basierender Ansatz gewählt, der geeignete Schätzungen für Konfidenzintervalle liefert. Hier erweist sich das sog. *Delete-1 Jackknife* als geeignete Methode /EFR 81/. Das Jackknife-Verfahren besteht darin, die interessierenden Ergebnisgrößen neu zu berechnen, indem neue Stichproben aus der Originalstichprobe ohne Zurücklegen gezogen werden. Insbesondere bei *Delete-1 Jackknife* wird jede neue Stichprobe ausgewählt, indem eine Beobachtung aus der Originalstichprobe entfernt wird. Wenn die ursprüngliche Stichprobengröße N ist, kann man N Jackknife-Stichproben der Größe $N-1$ erhalten. Wenn man an einem Schätzer der Standardabweichung für den Parameter v interessiert ist, im betrachteten Fall speziell an den Unsicherheitsbeiträgen nach Gl. (5.5) und Gl. (5.6), und v_i das i -te Jackknife-Replikat von v bezeichnet, ist die Jackknife-Standardabweichung /EFR 81/

$$\sigma(v)_{jack} = \left\{ \frac{N-1}{N} \sum_{i=1}^N (v_i - v)^2 \right\}^{1/2} \quad (5.7)$$

Dies ergibt schließlich 95 %-Konfidenzintervalle für die Ergebnisvarianzen von ungefähr $\pm 1,96 \sigma(v)_{jack}$. Der oben beschriebene Ansatz bietet den Rahmen, Abschätzungen für die einzelnen Beiträge zum Unsicherheits-„Breakdown“ zu berechnen, zusammen mit Abschätzungen für ihre 95 %-Konfidenzintervalle.

Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen mit der oben dargelegten Methodik der linearen Regression einer Ergebnisstichprobe wurden für die Anordnungen des UAM-SFR-Benchmarks durchgeführt, die in Kap. 5.1 beschrieben sind. Als NeutronenTransportcode für alle Anordnungen wird der zweidimensionale S_N -Code NEWT aus dem SCALE 6.2.3-Programmsystem /REA 18/ verwendet. Wirkungsquerschnitte für die Transportberechnungen werden mit der Resonanz-Selbstabschirmungssequenz aus

SCALE 6.2.3 erzeugt; diese besteht im Wesentlichen aus den Codes CENTRM, das Transportberechnungen mit kontinuierlichen Energiedaten im aufgelösten Resonanzbereich durchführt, und BONAMI, das im unaufgelösten Resonanzbereich die Bondarenko-Methode anwendet. Die mikroskopischen Wirkungsquerschnitte basieren auf ENDF/B-VII.1-Daten /CHA 11/.

In einem ersten Schritt werden die Daten durch Anwenden eines repräsentativen SFR-Gewichtungsspektrums wie in /BOS 17/ beschrieben zu einer Mehrgruppenbibliothek mit 425 Energiegruppen verarbeitet. Der Rechenaufwand der Transportberechnungen skaliert mit der Anzahl der berücksichtigten Energiegruppen; er ist besonders hoch für die Superzellmodelle. Da für die Durchführung stichprobenbasierter Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen die Transportberechnungen wiederholt durchgeführt werden – wobei die Stichprobengröße ein entscheidender Faktor für die Identifizierung der Hauptbeiträge zur Ergebnisunsicherheit ist – ist es sinnvoll, die Rechenzeiten für die individuellen Simulationen weiter zu optimieren. Zu diesem Zweck wird die Anzahl der berücksichtigten Energiegruppen erheblich reduziert, wobei sichergestellt wird, dass dies zu einer akzeptabel niedrigen Verringerung der Genauigkeit der Simulationsergebnisse führt. Umfangreiche Versuche haben ergeben, dass dies erreicht werden kann, indem die ursprüngliche Bibliothek mit 425 Gruppen auf 38 Gruppen reduziert wird, wobei die Spektren der Stabzellen als Wichtungsfunktionen verwendet werden. Die 38-Gruppen-Daten werden durch Vergleiche mit Ergebnissen für Multiplikationsfaktoren und Reaktivitätseffekte aus MCNP-6.1-Referenzberechnungen mit ENDF/B-VII.1-Daten mit kontinuierlicher Energiedarstellung validiert. Die Struktur der Energiegruppen ist in Tab. 5.2 angegeben.

Tab. 5.2 Energiegruppengrenzen der 38-Gruppen-Wirkungsquerschnitte

Energie-Gruppe	Gruppen-grenze (eV)	Energie-Gruppe	Gruppen-grenze (eV)	Energie-Gruppe	Gruppen-grenze (eV)
1	2.0000E+07	14	3.8774E+05	27	3.9859E+04
2	1.0000E+07	15	3.0197E+05	28	3.1828E+04
3	7.0469E+06	16	2.5349E+05	29	2.4787E+04
4	5.2205E+06	17	2.1280E+05	30	2.0294E+04
5	3.6788E+06	18	1.7863E+05	31	1.5034E+04
6	2.5924E+06	19	1.4996E+05	32	1.1709E+04
7	2.0190E+06	20	1.2907E+05	33	9.1188E+03
8	1.3534E+06	21	1.1109E+05	34	6.5886E+03
9	1.0026E+06	22	9.5616E+04	35	4.7604E+03
10	8.2085E+05	23	8.0265E+04	36	3.4395E+03
11	7.4274E+05	24	6.7379E+04	37	2.4852E+03
12	6.0810E+05	25	5.6562E+04	38	7.4852E+02
13	4.9787E+05	26	4.7481E+04	39	1.0000E-05

In Tab. 5.3 werden die Ergebnisse der Referenzberechnungen und die aus NEWT mit der 38-Gruppen-Bibliothek verglichen. Die Monte-Carlo-Standardabweichungen der MCNP-Ergebnisse betragen ca. 0,00003 im Multiplikationsfaktor. Insgesamt können die Unterschiede der NEWT-Ergebnisse zu den MCNP-Referenzergebnissen bei Verwendung der 38-Gruppen-Daten mit einem Maximalwert von ca. 200 pcm als akzeptabel gering angesehen werden.

Abweichend von der Spezifikation werden die MOX3600-Brennstäbe ohne das zentrale Loch und den Spalt zwischen Brennstoff und Hüllrohr durch eine geeignete Anpassung der Nukliddichten beschrieben. Dies verbessert das Konvergenzverhalten der NEWT-Berechnungen. Durch parallele Monte-Carlo-Berechnungen wurde bestätigt, dass der Einfluss dieser Vereinfachung vernachlässigbar ist.

Tab. 5.3 Nominalergebnisse für Multiplikationsfaktoren k und Reaktivitätseffekte aus MCNP-Referenzberechnungen mit Daten kontinuierlicher Energie (CE) und NEWT-Berechnungen mit 38-Gruppen-Daten.

Reaktivitätsunterschiede zwischen NEWT und MCNP in pcm in **Klammern**

	Ergebnisgröße	MCNP CE	NEWT 38 Gruppen
MET1000	Stabzelle: k	1,35907	1,35758 (-81)
	Brennelement: k	1,28022	1,27921 (-62)
	Brennelement: Doppler-Reaktivität (pcm)	-317	-296 (21)
	Brennelement: Na-Void-Reaktivität (pcm)	5.894	5.685 (-209)
	Superzelle: k	1,08438	1,08466 (24)
	Superzelle: Steuerstab-Reaktivität (pcm)	12241	12132 (-109)
MOX3600	Stabzelle: k	1,19228	1,19190 (-27)
	Brennelement: k	1,14695	1,14646 (-37)
	Brennelement: Doppler-Reaktivität (pcm)	-816	-728 (88)
	Brennelement: Na-Void-Reaktivität (pcm)	2930	2911 (-19)
	Superzelle: k	1,07743	1,07713 (-26)
	Superzelle: Steuerstab-Reaktivität (pcm)	5.001	4.961 (-40)

Die für die Transportberechnungen für die verschiedenen Anordnungen benötigten Rechenzeiten sind in Tab. 5.4 angegeben. Die Berechnungen wurden auf einem Rechencluster mit Intel® Xeon®-CPUs bei 2,80 GHz durchgeführt. Diese Zeiten beziehen sich auf die reinen Transportschritte der NEWT-Berechnungen. Die Gesamtzeiten für die kompletten Einzelläufe sind höher, da ein zusätzlicher Aufwand hauptsächlich durch die Wirkungsquerschnittsverarbeitung entsteht (Anwenden von Variationen auf die Wirkungsquerschnitte, Vorbereiten der Bibliothek für die Transportberechnung, Berechnung von Wirkungsquerschnitten mit wenigen Energiegruppen aus der Transportlösung). Der Overhead für einen einzelnen Lauf beträgt ungefähr eine Minute, so dass die Gesamtzeit, die für einen Lauf benötigt wird, zwischen einer Minute für die Stabzellen und Brennelemente und zwei bis drei Minuten für die Superzellen beträgt. Dies bedeutet, dass mit einer Stichprobengröße von 2.000, die für die Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen verwendet wird, und mit 100 verfügbaren CPUs die vollständige Serie von Simulationen für alle Anordnungen in ungefähr 6 Stunden durchgeführt werden kann. Die CPU-Zeiten für adjungierte Transportberechnungen sind ebenfalls in Tab. 5.4 angegeben. Diese sind für die Durchführung von TSUNAMI-Berechnungen relevant.

Tab. 5.4 Durchschnittliche CPU-Zeiten für die Transportberechnungen der SFR-Anordnungen

	MET1000		MOX3600	
	direkt	adjungiert	direkt	adjungiert
Stabzelle	0.2 sec	2 sec	0.2 sec	2 sec
Brennelement	4.1 sec	80 sec	5.4 sec	65 sec
Superzelle	41 sec	7 min	95 sec	20 min

Für die betrachteten Ergebnisgrößen wird, wie in der Spezifikation /BUI 19/, die Nomenklatur aus Tab. 5.5 verwendet:

Tab. 5.5 Nomenklatur für betrachtete Ergebnisgrößen

k	– Multiplikationsfaktor
coolant_mic_el_23Na	– Kühlmittel, mikroskopischer elastischer Streuquerschnitt für ²³ Na, 1 Gruppe
cladding_mic_el_56Fe	– Hüllrohr, mikroskopischer elastischer Streuquerschnitt für ⁵⁶ Fe, 1 Gruppe
fuel_mic_inel_238U	– Brennstoff, mikroskopischer inelastischer Streuquerschnitt für ²³⁸ U, 1 Gruppe
fuel_mic_fis_N	– Brennstoff, mikroskopischer Spaltquerschnitt für Nuklid N, 1 Gruppe
fuel_mic_n_gam_N	– Brennstoff, mikroskopischer Einfangquerschnitt für Nuklid N, 1 Gruppe
fuel_mac_fis	– Brennstoff, makroskopischer Spaltquerschnitt, 1 Gruppe
fuel_mac_abs	– Brennstoff, makroskopischer Absorptionsquerschnitt, 1 Gruppe
mac_total_x	– Brennelement, makroskopischer totaler Wirkungsquerschnitt für Gruppe x
mac_abs_x	– Brennelement, makroskopischer Absorptionsquerschnitt für Gruppe x
mac_nu_fis_x	– Brennelement, makroskopischer Spaltquerschnitt * nu-bar für Gruppe x
mac_tot_scat_x	– Brennelement, makroskopischer totaler Streuquerschnitt für Gruppe x
doppler	– Doppler-Reaktivität bei Verdoppelung der Brennstofftemperatur
na_void	– Natrium-Void-Reaktivität
control_rod_worth	– Steuerstabreaktivität

Mikroskopische Wirkungsquerschnitte werden in barn (10^{-24} cm²), makroskopische Wirkungsquerschnitte in 1/cm und Reaktivitäten in pcm (10^{-5}) angegeben. Während für die Natrium-Void-Reaktivität und die Steuerstabreaktivität die übliche Definition $\Delta\rho = 1/k_1 - 1/k_2$ verwendet wird, wobei k_1 und k_2 die Multiplikationsfaktoren des nominalen bzw. des modifizierten Zustands bezeichnen, ist die Doppler-Reaktivität definiert als $\Delta\rho = (1/k_1 - 1/k_2)/\ln(T_2/T_1)$, wobei T_1 und T_2 die Temperaturen der entsprechenden Zustände sind.

Als Beispiele für den Vergleich der Unsicherheiten sind in Abb. 5.20 und Abb. 5.21 zwei Fälle gewählt, nämlich die Unsicherheiten für die Ergebnisgrößen der MET1000-Brennelementanordnung bzw. der MOX3600-Superzelle.

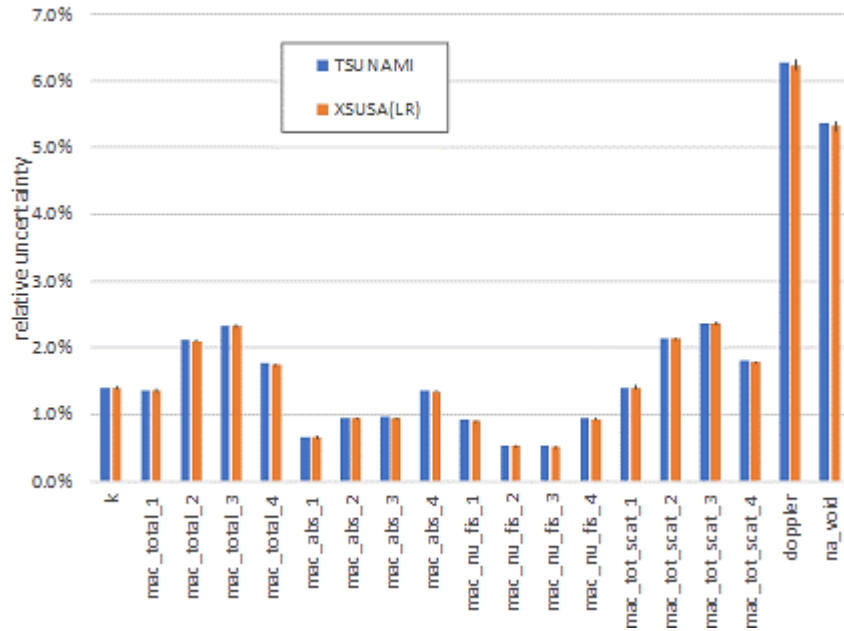


Abb. 5.20 Relative Unsicherheiten für das MET1000-Brennelement aus TSUNAMI und XSUSA(LR) mit 95 %-Jackknife-Konfidenzintervallen

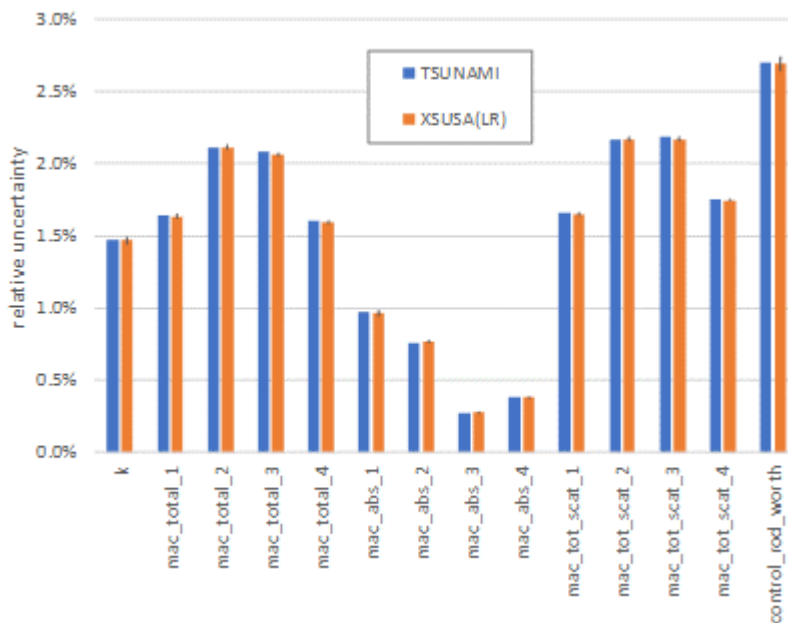


Abb. 5.21 Relative Unsicherheiten für die MOX3600-Superzelle aus TSUNAMI und XSUSA(LR) mit 95 %-Jackknife-Konfidenzintervallen

Wie bereits erwähnt besteht der Hauptzweck für die Durchführung von Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen mit XSUSA nach dem Stichprobenverfahren mit linearer Regression darin, Sensitivitätsprofile und daraus die Zerlegung in Unsicherheitsbeiträge einzelner Nuklidreaktionen, den sog. Unsicherheits-„Breakdown“, auszuwerten. Für zwei

Ergebnisgrößen, nämlich die Doppler-Reaktivität des MET1000-Brennelements und den Steuerstabwert der MOX3600-Superzelle, ist der Unsicherheits-„Breakdown“ der zehn Hauptbeiträge zusammen mit der Gesamtunsicherheit in Abb. 5.22 und Abb. 5.23 dargestellt. Für die Reaktionen wird die folgende Nomenklatur verwendet:

- el – elastischer Streuquerschnitt,
- n,n' – inelastischer Streuquerschnitt,
- fiss – Spaltquerschnitt,
- n,g – Einfangquerschnitt,
- nubar – mittlere Anzahl von Neutronen pro Spaltung,
- chi – Spaltspektrum.

Auch hier besteht in den meisten Fällen eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den Beiträgen aus XSUSA(LR) und TSUNAMI. Es gibt eine offensichtliche Ausnahme, nämlich den Beitrag des U-238-Spaltspektrums zur Unsicherheit der Steuerstabreaktivität der MOX3600-Superzelle (dasselbe gilt für den hier nicht gezeigten Wert der Steuerstabreaktivität der MET1000-Superzelle). Dieses Problem wird später in dem Abschnitt untersucht, der sich mit der Auswertung von Sensitivitätsvektoren befasst.

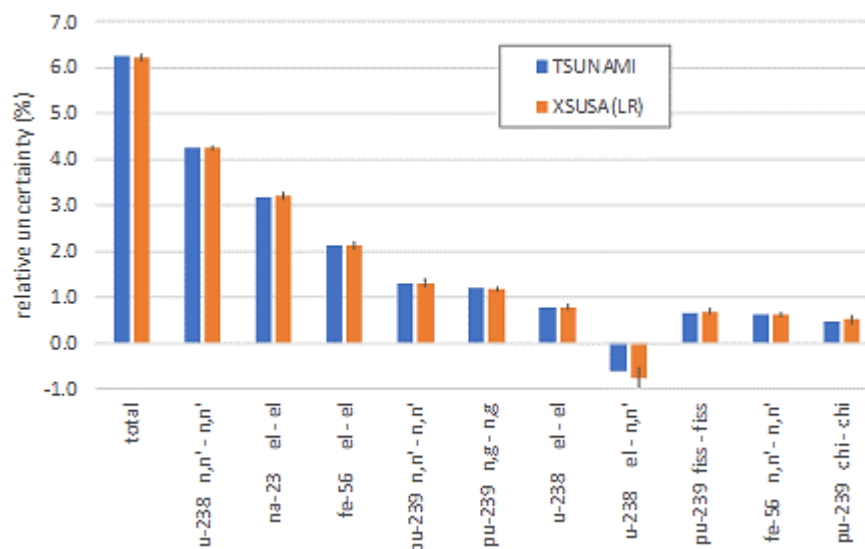


Abb. 5.22 Unsicherheits-„Breakdown“ für die Doppler-Reaktivität des MET1000-Brennelements aus TSUNAMI und XSUSA(LR) mit 95 %-Jackknife-Konfidenzintervallen

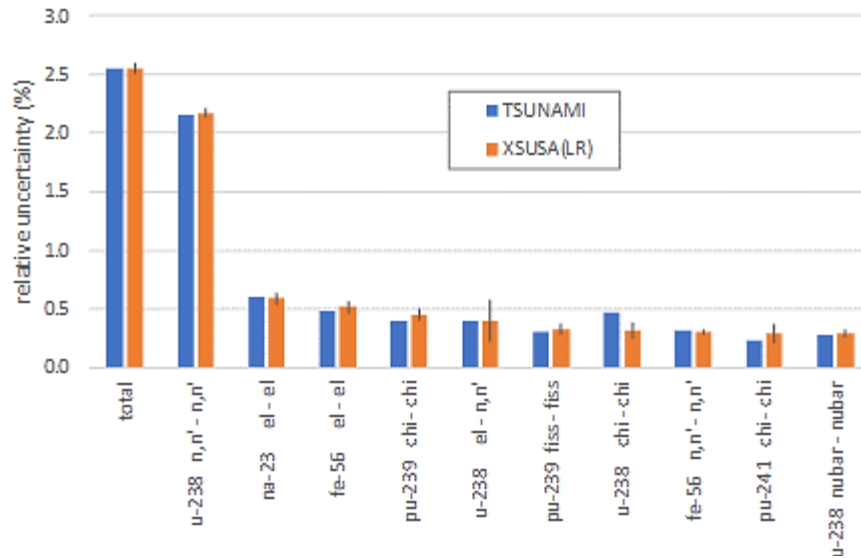


Abb. 5.23 Unsicherheits-„Breakdown“ für die Steuerstabreaktivität der MOX3600-Superzelle aus TSUNAMI und XSUSA(LR) mit 95%-Jackknife-Konfidenzintervallen

In Abb. 5.22 und Abb. 5.23 ist jeder Beitrag mit einem Paar von Reaktionen von nur einem Nuklid bezeichnet. Grundsätzlich bestehen gemischte Kovarianzen zwischen Reaktionen verschiedener Nuklide. Ihre Beiträge zur Ausgangsunsicherheit können durch Gl. (5.6) berechnet werden. Es stellt sich jedoch heraus, dass für die betrachteten Ergebnisgrößen die Hauptbeiträge nicht aus solchen gemischten Kovarianzen stammen, weshalb die erwähnte Kurzschreibweise verwendet wurde.

Eine Anmerkung zu negativen Werten aus Beiträgen zweier unterschiedlicher Reaktionen, wie sie in Abb. 5.22 für die elastische und inelastische Streuung von U-238 auftreten, ist hier angebracht: Wie im Zusammenhang mit Gl. (5.6) diskutiert, kann der Beitrag $v_{KL} = \text{var}(f(\mathbf{X}))_{KL}$ negativ sein, wenn Antikorrelationen zwischen den Parametern der Gruppen K und L dominieren. Ein negativer Wert für eine relative Unsicherheit ist als negative Quadratwurzel des Absolutwerts eines negativen Beitrags v_{KL} gemeint. Dies ist zwar nicht mathematisch streng, dennoch wird diese Notation hier übernommen da sie allgemein in der deterministischen linearen Störungstheorie häufig angewandt wird.

Ein Beispiel für Sensitivitätsprofile in der 19-Gruppen-Struktur der Kovarianzmatrizen ist in Abb. 5.24 für die Sensitivität der Doppler-Reaktivität des MET1000-Brennelements bzgl. der inelastischen U-238-Streuung dargestellt. Insbesondere im Bereich zwischen 10^5 und 10^6 eV werden relativ große 95 %-Jackknife-Konfidenzintervalle beobachtet. Dies liegt daran, dass ein einzelnes Energieintervall einer einzelnen Reaktion nur einen

kleinen Teil des verfügbaren Phasenraums abdeckt. Die Konfidenzintervalle sind besonders groß, wenn der entsprechende Parameter nur einen geringen Beitrag zur Ergebnisunsicherheit leistet. Durch die Konstruktion der Unsicherheitsbeiträge für die einzelnen Reaktionen, über die Energie aufsummiert, werden die Konfidenzintervalle jedoch deutlich kleiner, siehe Abb. 5.22.

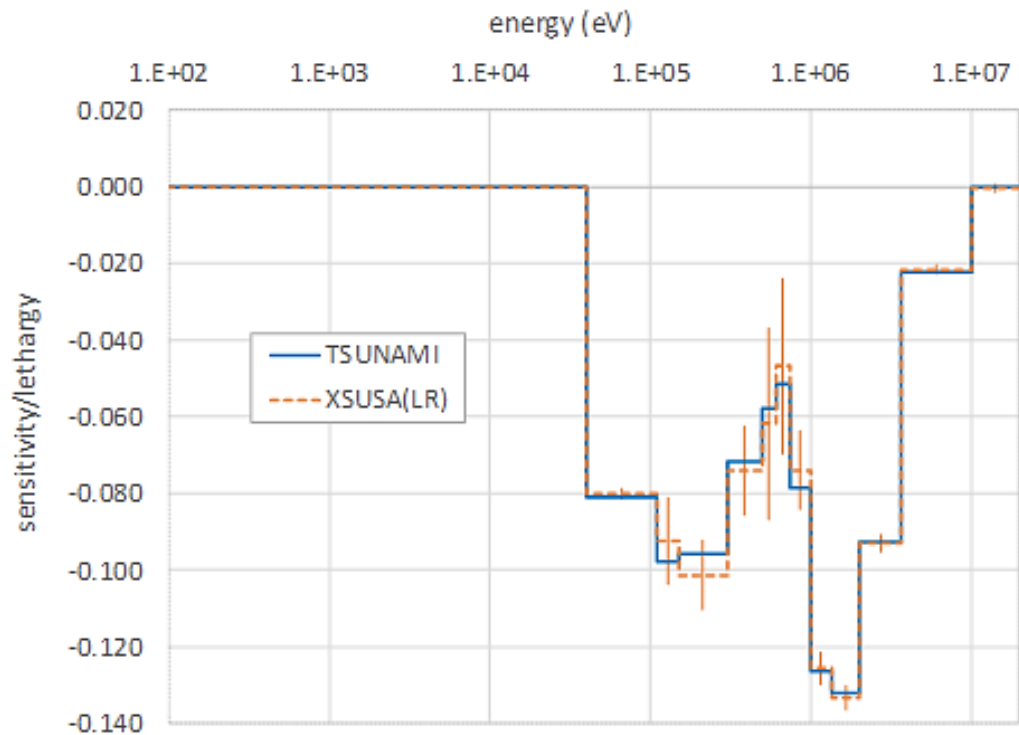


Abb. 5.24 Sensitivität der Doppler-Reaktivität des MET1000-Brennelements bzgl. inelastischer U-238-Streuung aus TSUNAMI und XSUSA(LR) mit 95 %-Jackknife-Konfidenzintervallen

Schließlich wird auf die Diskrepanz eingegangen, die in den Beiträgen des U-238-Spaltsspektrums zur Unsicherheit der mit TSUNAMI und XSUSA(LR) berechneten MOX3600-Absorberstabreaktivität beobachtet wurde. Um dieses Problem weiter zu untersuchen, werden entsprechenden Sensitivitätsprofile in Abb. 5.25 in Augenschein genommen. Zusätzlich wurde ein auf systematischer direkter Störung basierendes Sensitivitätsprofil erstellt, indem das U-238-Spaltsspektrum für jedes individuelle Energieintervall der Kovarianzmatrixstruktur um 5 % gestört wird. Dies ist auch in Abb. 5.25 dargestellt. Die Profile, die mit diesem direkten *Brute-Force* Störungsansatz und XSUSA(LR) erhalten wurden, stimmen innerhalb der 95 %-Jackknife-Konfidenzintervalle überein, während zwischen direkter Störung und TSUNAMI eine signifikante Abweichung besteht. Gleiches gilt für die energieintegrierten Unsicherheitsbeiträge,

nämlich TSUNAMI: 0.467 %; direkte Störung: 0.325 %; XSUSA(LR): 0.315 ± 0.064 %. Es ist daher anzunehmen, dass der Unsicherheitsbeitrag mit XSUSA(LR) zuverlässig abgeschätzt wird. Es ist bisher nicht klar, warum das TSUNAMI-Ergebnis von dem mit direkter Störung erhaltenen Ergebnis abweicht, welches als Referenz angesehen werden kann.

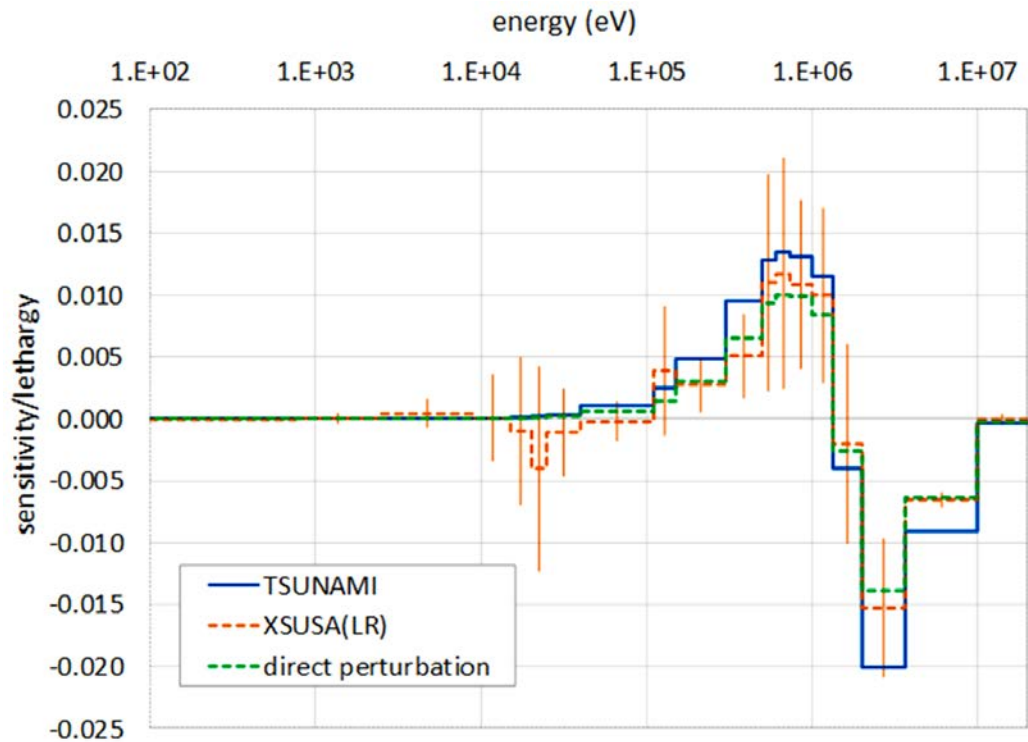


Abb. 5.25 Sensitivität der Steuerstabreaktivität der MOX3600-Superzelle bzgl. des U-238-Spaltspektrums aus TSUNAMI, direkter Störung und XSUSA(LR) mit 95 %-Jackknife-Konfidenzintervallen

Im Folgenden werden die Ergebnisse von Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen für eine für Leichtwasserreaktoren repräsentative Anordnung, nämlich die TMI-1-Stabzelle aus dem UAM-LWR-Benchmark /IVA 16/, vorgestellt. Dabei werden die Ergebnisse aus XSUSA(LR) mit denen aus TSUNAMI-2D mit Multigruppensdaten und TSUNAMI-CE mit Daten in kontinuierlicher Energiedarstellung verglichen. Alle Berechnungen wurden mit auf ENDF/B-VII.1 basierenden Wirkungsquerschnitten durchgeführt. Für die Multigruppen-Berechnungen wurde die 252-Gruppen-Bibliothek aus SCALE 6.2 verwendet. Als Kovarianzdaten-Bibliothek wurde ein aus den 56-Gruppen-Daten mit dem Code ANGELO /KOD 90/ auf 21 Gruppen kondensierter Datensatz herangezogen. Die Sensitivitätsprofile wurden in der entsprechenden 21-Gruppen-Struktur ausgewertet.

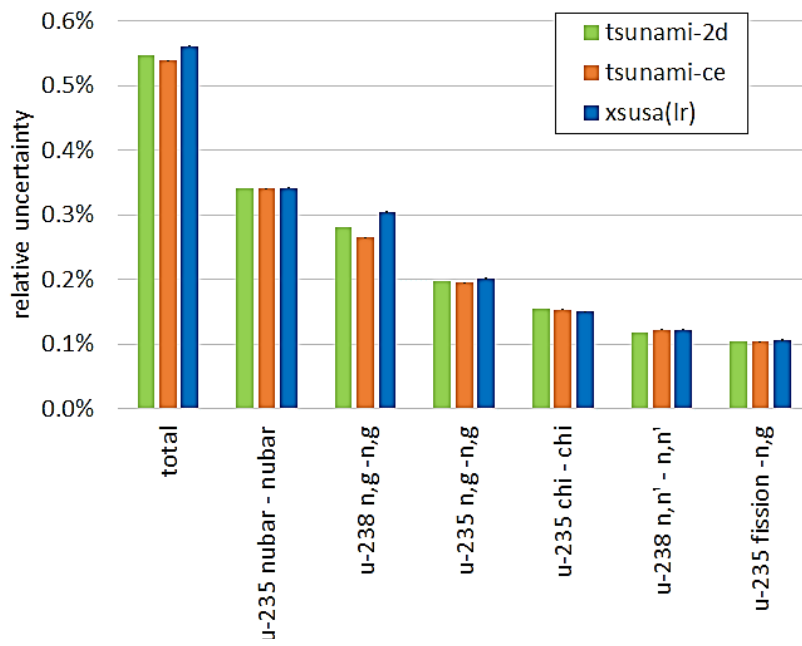


Abb. 5.26 Unsicherheits-„Breakdown“ für den Multiplikationsfaktor der TMI-1-Stabzelle aus TSUNAMI und XSUSA(LR)

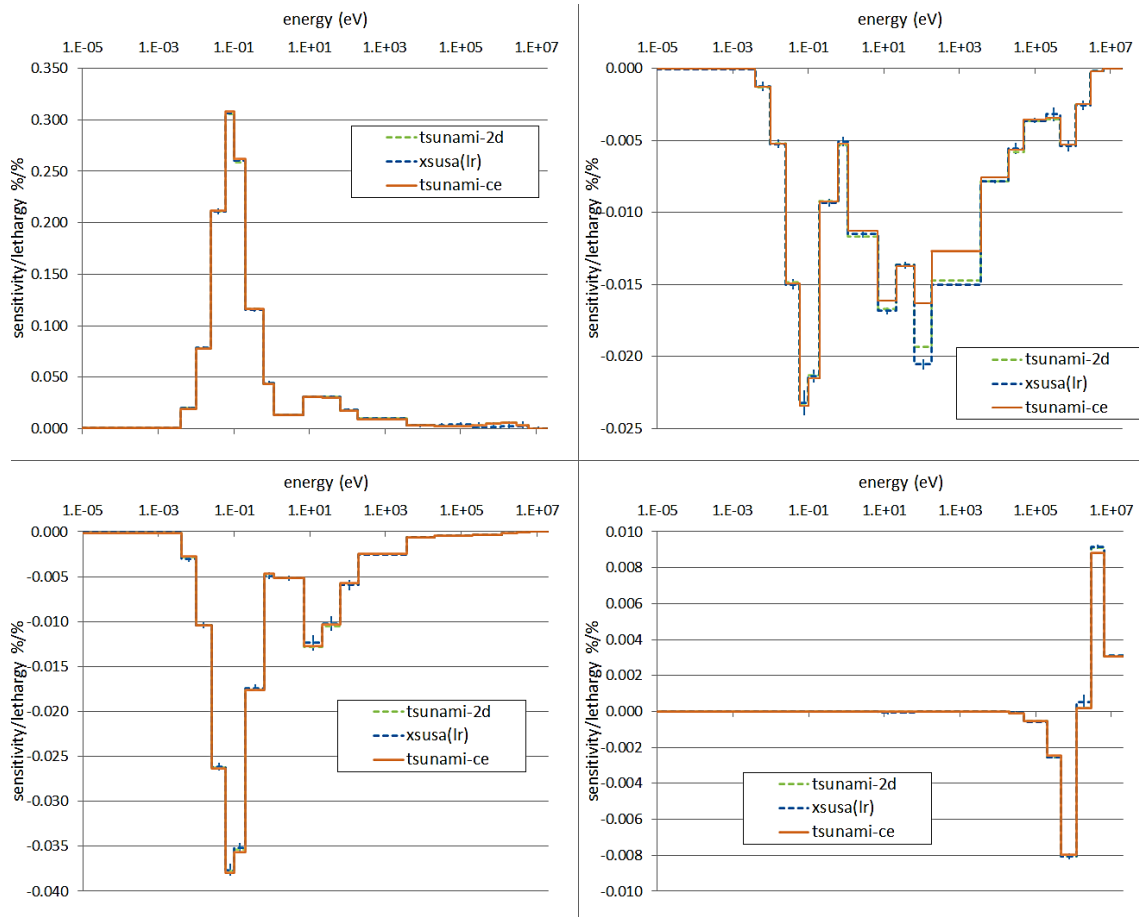


Abb. 5.27 Sensitivitätsprofile des Multiplikationsfaktors der TMI-1-Stabzelle

bzgl. der mittleren Anzahl von Neutronen pro U-235-Spaltung (links oben), dem U-238-Einfang (rechts oben), dem U-235-Einfang (links unten) und dem U-235-Spaltenspektrum (rechts unten) aus TSUNAMI und XSUSA(LR)

Zunächst werden Sensitivitäten und Unsicherheiten für den Multiplikationsfaktor betrachtet. In Abb. 5.26 werden die gesamte relative Ergebnisunsicherheit und der Unsicherheits-„Breakdown“ aus den verwendeten Programmen verglichen. Es ergibt sich eine gute Übereinstimmung zwischen den entsprechenden Ergebnissen. Diese gute Übereinstimmung ist auch in den Sensitivitätsprofilen bzgl. der wichtigsten Reaktionen, Abb. 5.27, erkennbar.

Die genannten Programme bieten auch die Möglichkeit, Sensitivitäten und Unsicherheiten in anderen Ergebnisgrößen als dem Multiplikationsfaktor, z. B. mikroskopischen Wirkungsquerschnitten, zu berechnen. In Abb. 5.28 ist der Unsicherheits-„Breakdown“ für den über den gesamten Energiebereich integrierten Spaltquerschnitt von U-235 dargestellt, abermals mit guter Übereinstimmung zwischen den Ergebnissen der drei Programme.

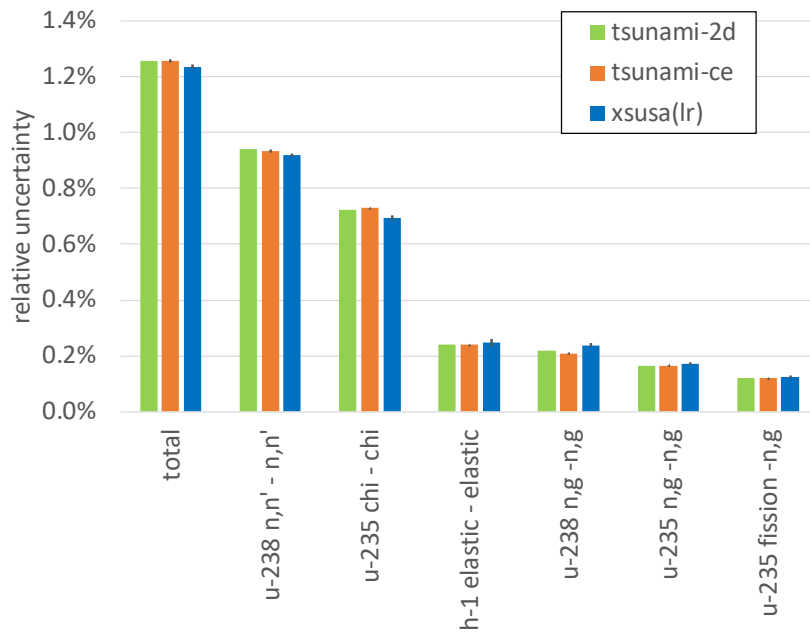


Abb. 5.28 Unsicherheits-„Breakdown“ für den mikroskopischen Eingruppen-Spaltquerschnitt von U-235 der TMI-1-Stabzelle aus TSUNAMI und XSUSA(LR)

Diese gute Übereinstimmung ist nicht für alle Reaktionen gegeben. Dies ist z. B. für den über den gesamten Energiebereich integrierten elastischen Streuquerschnitt von O-16 in Abb. 5.29 und Abb. 5.30 zu beobachten. Hier ist die Übereinstimmung zwischen TSUNAMI-2D und XSUSA(LR) wieder gut, aber die Werte aus TSUNAMI-CE weichen deutlich ab. Dies ist auch für andere Reaktionen zu beobachten, insbesondere bei der elastischen Streuung.

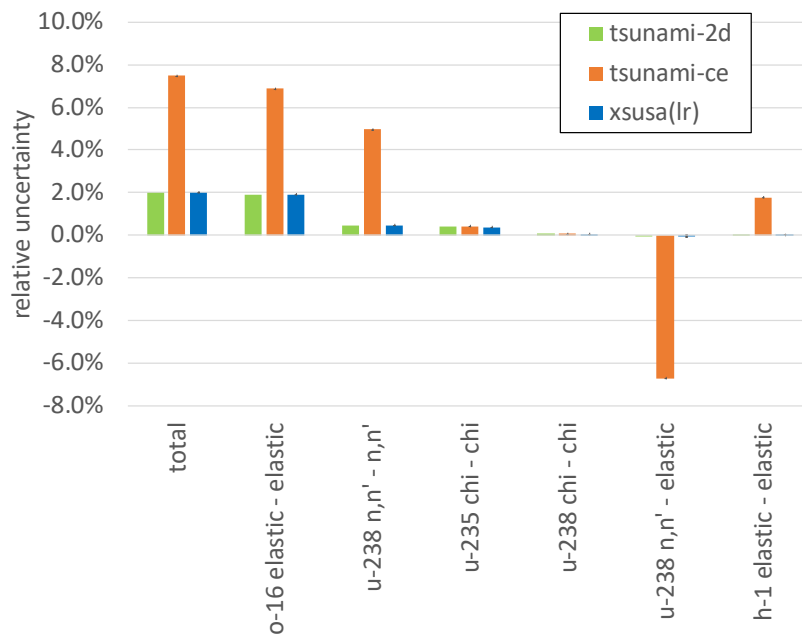


Abb. 5.29 Unsicherheits-„Breakdown“ für den mikroskopischen elastischen Eingruppen-Streuquerschnitt von O-16 der TMI-1-Stabzelle aus TSUNAMI und XSUSA(LR)

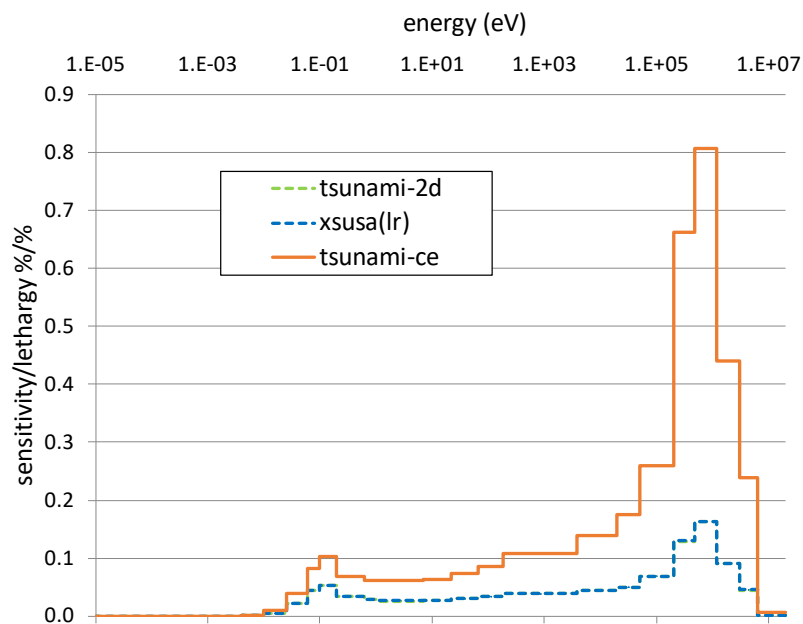


Abb. 5.30 Sensitivität des mikroskopischen elastischen Eingruppen-Streuquerschnitts von O-16 der TMI-1-Stabzelle bzgl. des elastischen Streuquerschnitts von O-16 aus TSUNAMI und XSUSA(LR)

Dementsprechend sind auch die mit TSUNAMI-CE berechneten gesamten Unsicherheiten in manchen Reaktionen unphysikalisch hoch, siehe Abb. 5.31.

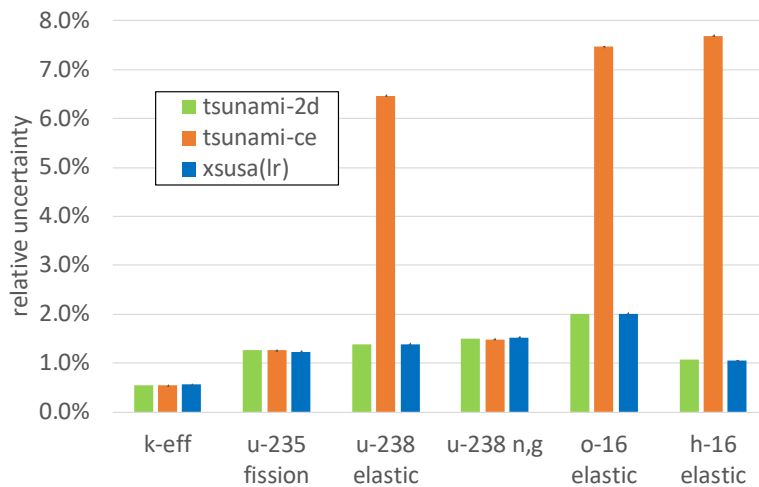


Abb. 5.31 Unsicherheiten für den Multiplikationsfaktor und einige mikroskopische Eingruppen-Wirkungsquerschnitte der TMI-1-Stabzelle aus TSUNAMI und XSUSA(LR)

Insgesamt wird daraus geschlossen, dass zur Berechnung von Sensitivitäten und Unsicherheiten von Wirkungsquerschnitten die aktuelle Implementierung von TSUNAMI-CE ist das SCALE 6.2 Paket gegenwärtig nicht verwendet werden sollte.

5.4 Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen für den Anteil verzögerter Neutronen

Die Dynamik eines Kernreaktors wird wesentlich durch den Anteil verzögerter Neutronen an der Gesamtzahl der Neutronen pro Spalt ereignis beeinflusst. Insbesondere wenn die einem kritischen Reaktor zugeführte Reaktivität höher ist als der effektive verzögerte Neutronenanteil (β_{eff}), wird der Reaktor prompt überkritisch, was typischerweise zu einem Leistungsanstieg führt, der deutlich schneller ist als bei einer Reaktivitätszufuhr weit unter β_{eff} , mit einer viel höheren Spitzenleistung. Bei der Berechnung einer Reaktortransiente mit einem Multiphysik-Simulationscode ist daher eine gute Kenntnis des verzögerten Neutronenanteils erforderlich, um zuverlässige Ergebnisse zu erhalten. Bei Verwendung eines nodalen Kernsimulators werden kinetische Parameter typischerweise im Voraus mit einem Spektralcode zusammen mit Wirkungsquerschnitten mit wenigen Energiegruppen für die einzelnen Brennelemente berechnet. Wesentliche Eingabeparameter für die Spektralrechnungen sind neben den Geometrie- und Materialdaten der

Brennelemente die zugrunde liegenden mikroskopischen nuklearen Daten. Diese haben inhärente Unsicherheiten. Aufgrund der starken Abhängigkeit der Reaktordynamik vom verzögerten Neutronenanteil ist es wichtig, deren Unsicherheit bzgl. der Unsicherheiten in den mikroskopischen Reaktionsdaten abzuschätzen. Eine äußerst genaue Kenntnis von β_{eff} ist im Rahmen kritischer Experimente noch wichtiger. Die mit einem Neutronen-Transportcode berechnete wesentliche Ergebnisgröße ist normalerweise der Multiplikationsfaktor k_{eff} . Bei der Auswertung des Multiplikationsfaktors aus Messdaten ist häufig β_{eff} erforderlich. Um eine zuverlässige Grundlage für die Code- und Datenvalidierung zu haben, von der ein wesentlicher Teil der Vergleich von berechneten und gemessenen Ergebnissen aus kritischen Experimenten ist, sollte die Unsicherheit von β_{eff} daher so gering wie möglich sein.

Im Rahmen von SCALE 6.2 /REA 18/ kann der Spektralcode NEWT verwendet werden, um Wirkungsquerschnitte mit wenigen Gruppen und kinetische Parameter für Brennelemente zu erzeugen. Unsicherheiten der kinetischen Parameter aufgrund nuklearer Datenunsicherheiten können durch eine stichprobenbasierte Unsicherheitsanalyse geschätzt werden. Einige Arbeiten in dieser Richtung wurden bereits unter Anwendung der XSUSA-Methodik /ZWE 13/ und des SCALE-Moduls SAMPLER /WIL 13/ durchgeführt. Entsprechende Analysen finden sich in /AUR 17/ bzw. /RAD 19/. Solche Berechnungen können die vollständige Unsicherheit und ein Wichtigkeitsranking in Bezug auf einzelne Nuklide/Reaktionen liefern, jedoch keine Sensitivitätsprofile, wie sie üblicherweise als Ergebnisse der deterministischen linearen Störungstheorie vorgefunden werden. Im Folgenden wird die im Kap. 5.3 beschriebene Erweiterung von XSUSA herangezogen, nämlich Sensitivitätsprofile mittels linearer Regressionsanalyse der Ergebnisgrößen zu schätzen. Diese Methodik wird auf kinetische Parameter angewandt. Als Validierungsstrategie werden Sensitivitätsprofile für β_{eff} mit denen, die mit deterministischer Störungstheorie erhalten wurden, verglichen. Bisher stellt SCALE 6.2 keine Optionen für die Durchführung von Sensitivitätsanalysen für β_{eff} bereit. Dies ist nur für Multiplikationsfaktoren, Reaktivitätseffekte sowie mikroskopische und makroskopische Wirkungsquerschnitte möglich. Es wird gezeigt, wie die SCALE-6.2-Programme problemlos um diese Funktion erweitert werden können.

Für einen Vergleich der berechneten β_{eff} -Nominalwerte mit experimentellen Daten werden kugelförmige kritische Anordnungen betrachtet. Dies sind die folgenden bekannten Standard-Benchmark-Anordnungen:

- GODIVA, eine unreflektierte Kugel aus U-235 (HEU-MET-FAST-001);
- JEZEBEL, eine unreflektierte Kugel aus Pu-239 (PU-MET-FAST-001);
- SKIDOO, eine unreflektierte Kugel aus U-233 (U233-MET-FAST-001);
- TOPSY, eine von U-nat reflektierte U-235-Kugel (HEU-MET-FAST-002);
- POPSY, eine von U-nat reflektierte Pu-239-Kugel (PU-MET-FAST-006);
- FLATTOP-23, eine von U-nat reflektierte U-233-Kugel (U233-MET-FAST-006).

Ihre detaillierten Beschreibungen finden sich im International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments /NEA 19a/; die jeweiligen Kennungen sind in der obigen Liste in Klammern angegeben. Die gemessenen β_{eff} -Werte wurden einer umfassenden Zusammenstellung gemessener verzögerter Neutronenparameter entnommen /MEU 06/.

Zusätzlich zu diesen einfachen kugelförmigen Anordnungen werden einige komplexere Anordnungen untersucht. Diese sind:

- SNEAK-7A und SNEAK-7B, schnelle Reaktoren mit einfachen Einzonen-Kernen mit quadratischer Geometrie, mit $\text{PuO}_2\text{-UO}_2$ als Brennstoff und metallischem abgereichertem Uran als Reflektor /NEA 19b/;
- VENUS-F, ein schneller Reaktor mit angereichertem metallischem Uranbrennstoff, umgeben von Blei /DOL 15/;
- eine Anordnung der TCA-Serie, ein zylindrisches quadratisches Gitter aus niedrig angereicherten wassermodierten UO_2 -Brennstäben /NAK 01/;
- VHTRC-1, eine graphitmoderierte Anordnung von niedrig angereichertem Uranbrennstoff vom BISO-Typ in hexagonaler Geometrie /AKI 94/.

Horizontale Schnitte durch vier dieser kritischen Anordnungen sind in Abb. 5.32 dargestellt.

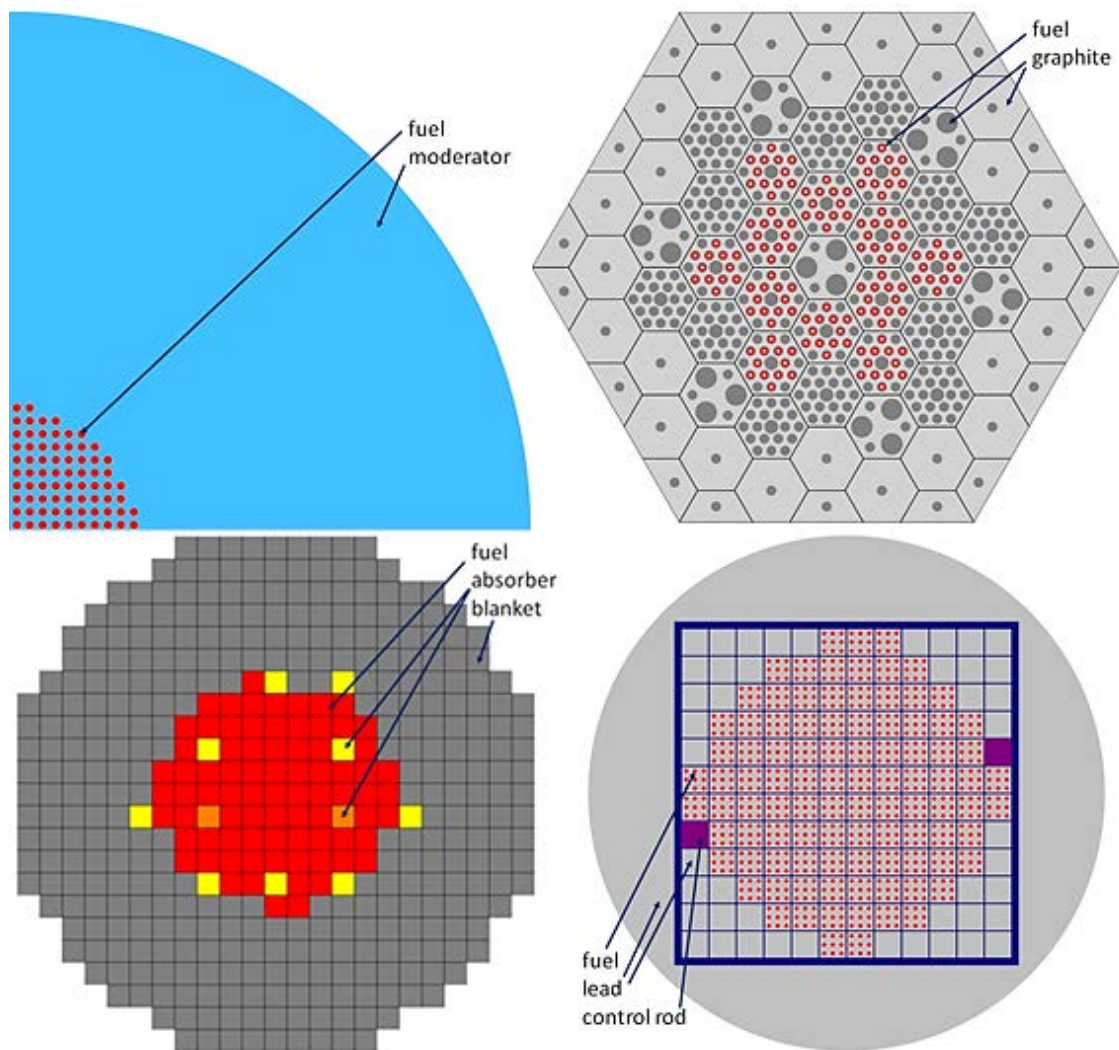


Abb. 5.32 Schnitte durch die zur Untersuchung der Unsicherheiten und Sensitivitäten bezüglich des Anteils verzögerter Neutronen herangezogenen kritischen Anordnungen

Oben links: TCA (Viertelkern). Oben rechts: VHTRC-1. Unten links: SNEAK-7A. Unten rechts: VENUS-F

Darüber hinaus werden kinetische Parameter sowie ihre Sensitivitäten und Unsicherheiten anhand von Spektralrechnungen für Brennelemente ausgewertet. Hierbei handelt es sich um zwei Druckwasserreaktor-Brennelemente, eines mit Uranbrennstoff mit niedriger U-235 Anreicherung (aus dem TMI-1-Reaktor, skizziert in Abb. 5.33 links) und das andere mit MOX-Brennstoff (aus einem generischen GEN-III-Design, skizziert in Abb. 5.33 rechts). Die Layouts stammen aus den UAM-LWR-Benchmarks der OECD/NEA /IVA 16/, in denen die detaillierten Spezifikationen aufgeführt sind.

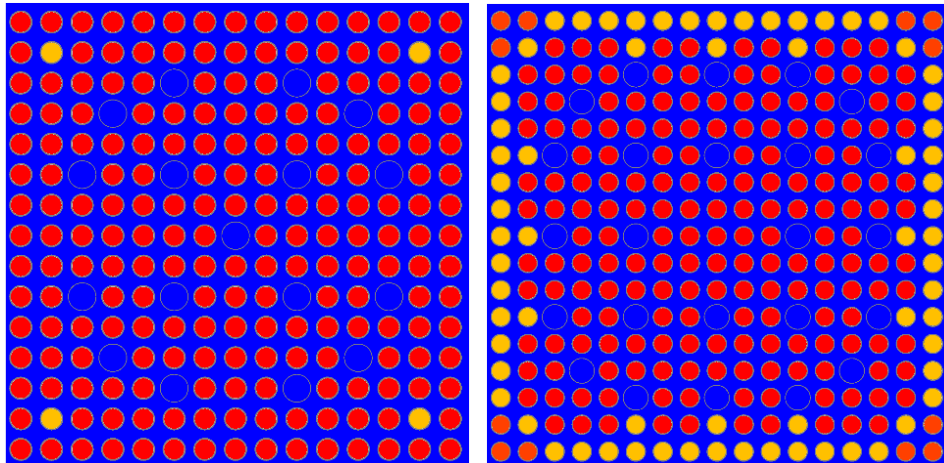


Abb. 5.33 Schnitte durch die zur Untersuchung der Unsicherheiten und Sensitivitäten bezüglich des Anteils verzögerter Neutronen herangezogenen Brennelementmodelle

Links: TMI-1, UO₂-Brennstäbe rot, UO₂/Gd₂O₃-Brennstäbe gelb. Rechts: GEN-III MOX, Brennstäbe mit unterschiedlichen Pu-Gehalten in unterschiedlichen Farben

Zur Berechnung effektiver verzögerter Neutronenanteile existieren verschiedene Ansätze. Bei der Durchführung deterministischer Transportberechnungen mit Wirkungsquerschnitten in Mehrgruppendarstellung werden üblicherweise Methoden angewendet, die auf einer adjungierten Berechnung und spektralen Wichtung der verzögerten Neutronenproduktionsrate basieren /ZUK 99/, /KOD 13/. Eine Methode, die keine Auswertung von adjungierten Flüssen zur Berechnung von β_{eff} erfordert, ist die sogenannte *Prompt-k-Ratio-Methode* /BRE 97/, die zwei direkte Transportberechnungen erfordert, eine mit unmodifizierten Reaktionsdaten und die andere mit einem Satz von mikroskopischen Reaktionen, bei denen die Gesamtzahl der pro Spaltung erzeugten Neutronen ($\bar{\nu}$) und das totale Spaltspektrum für jedes Nuklid durch ihre entsprechenden prompten Werte ersetzt werden. Normalerweise wird dieser Ansatz im Zusammenhang mit Monte-Carlo-Neutronen-Transportberechnungen mit nuklearen Daten in kontinuierlicher Energiedarstellung gewählt; er kann jedoch auch mit Multigruppdaten verwendet werden /KOD 14/. Der Ansatz eignet sich gleichermaßen zur Berechnung von β_{eff} -Sensitivitäten sowohl mit deterministischer Störungstheorie als auch mit dem Stichprobenverfahren, wie unten erläutert wird. Bei der *Prompt-k-Ratio-Methode* ist β_{eff} gegeben durch

$$\beta_{eff} = 1 - k_p/k \quad (5.8)$$

wobei k der wie gewöhnlich berechnete Multiplikationsfaktor des betrachteten Systems ist, also unter Berücksichtigung aller Spaltneutronen, und k_p der prompte Multiplikationsfaktor, bei dessen Berechnung nur prompte Spaltneutronen berücksichtigt werden.

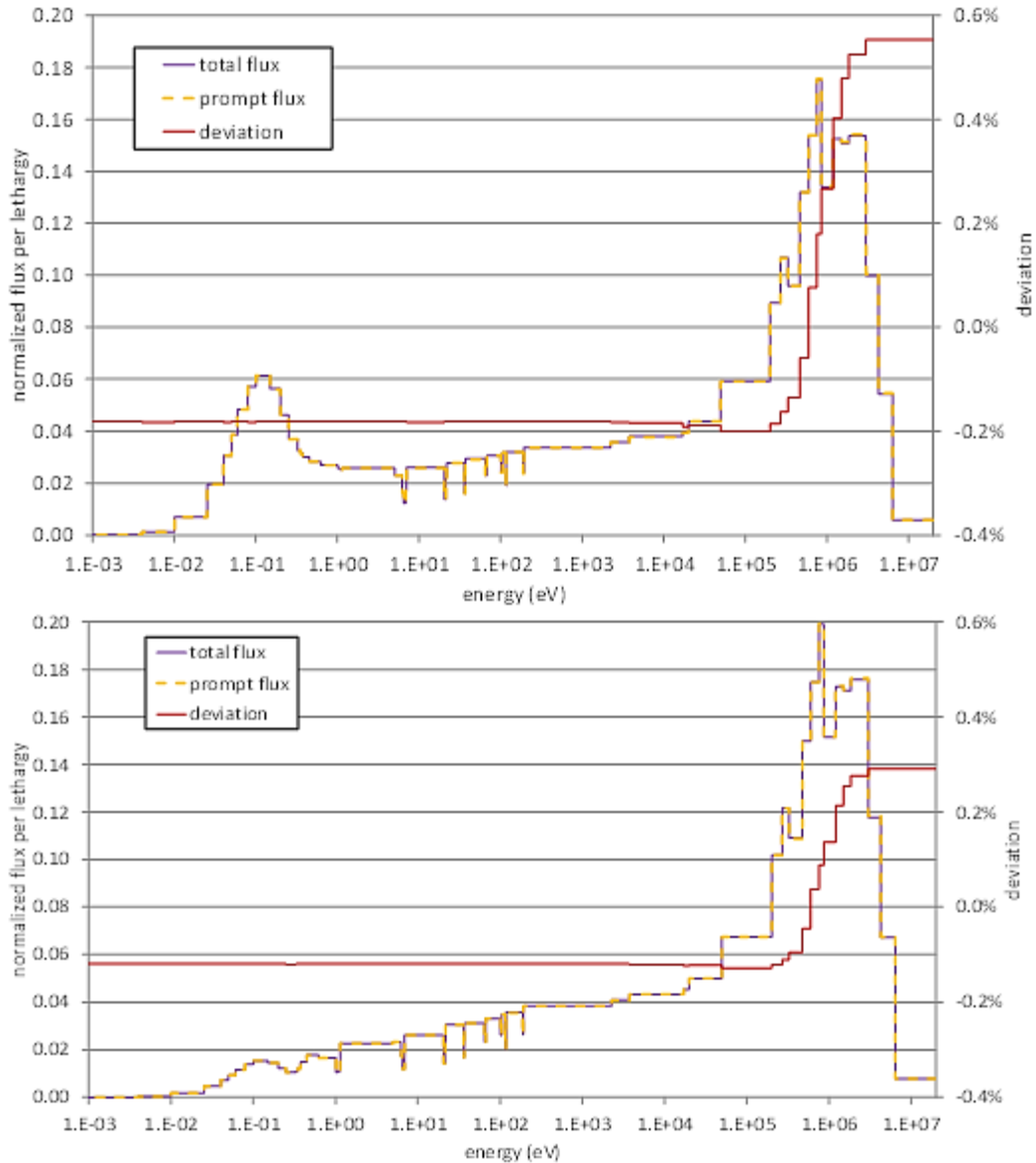


Abb. 5.34 Prompter und totaler Fluss für das TMI-1- (oben) und das GEN-III-MOX-Brennelement (unten) mit den jeweiligen relativen Abweichungen

In /CAR 11/ wird gezeigt, dass die Darstellung von β_{eff} nach Gl. (5.8) gut mit der klassischen Darstellung übereinstimmt, die aus direkten und adjungierten Transportberechnungen hergeleitet wird, wenn die spektralen Unterschiede zwischen totalem und promptem Fluss vernachlässigbar sind. Bei den hier betrachteten Systemen ist dies der Fall. In Abb. 5.34 sind Beispiele für zwei Anordnungen dargestellt, nämlich die Flüsse für das TMI-1- und das GEN-III-MOX-Brennelement zusammen mit deren Unter-

schieden. Für die Spektralrechnungen wurde der zweidimensionale S_N -Code NEWT aus dem SCALE 6.2.3-Programmsystem /REA 18/ mit der auf ENDF/B-VII.1 basierenden Wirkungsquerschnittsbibliothek mit 56 Energiegruppen verwendet. Es ist ersichtlich, dass der jeweilige prompte und totale Fluss sehr gut übereinstimmen, wobei die relativen Abweichungen des prompten vom totalen Fluss zwischen -0,2 % und +0,6 % liegen.

In Tab. 5.6 werden experimentelle und berechnete β_{eff} -Werte für die betrachteten kritischen Anordnungen verglichen. Für die sphärischen Anordnungen ist der Transportlöser der eindimensionale S_N -Code XSDRN, und für die komplexeren Anordnungen, die eine dreidimensionale Darstellung erfordern, wurden die Monte-Carlo-Codes KENO Va und KENO-VI verwendet, alle aus SCALE 6.2.3. Wirkungsquerschnitte sind der Satz mit 252 Gruppen aus SCALE 6.2.3 für die thermischen Systeme und ein Satz mit 425 Gruppen /BOS 17/ für die schnellen Systeme. Die angegebenen Unsicherheiten bezeichnen experimentelle 1σ -Unsicherheiten, und zusätzlich 1σ -Berechnungsunsicherheiten für die Fälle, in denen Monte-Carlo-Berechnungen durchgeführt wurden. Für den VHTRC-1 wurde für die Resonanzselbstabschirmungsrechnung die doppelte Heterogenität durch eine reaktivitätsäquivalente physikalische Transformation beschrieben /KIM 05/, weil mit dem SCALE 6.2.3-Code TSUNAMI, mit dem Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen durchgeführt wurden, die Behandlung von Systemen mit doppelter Heterogenität bislang nicht möglich ist. Es zeigt sich, dass die *Prompt-k-Ratio*-Methode in den meisten Fällen Werte mit Abweichungen vom Experiment von weniger als 1σ ergibt; für TOPSY beträgt die Abweichung 2σ .

Tab. 5.6 Effektive verzögerte Neutronenanteile (pcm), berechnet mit der Prompt-k-Ratio-Methode im Vergleich zu Messungen (mit 1σ -Unsicherheiten) für kritische Anordnungen

Kritische Anordnung	Experiment	Prompt-k-Ratio-Methode
GODIVA	659 ± 10	649
JEZEBEL	194 ± 10	186
SKIDOO	290 ± 10	286
TOPSY	665 ± 13	692
POPSY	276 ± 7	277
FLATTOP-23	360 ± 9	369
TCA	771 ± 17	776 ± 12
VHTRC-1	750 ± 20	742 ± 10
SNEAK-7A	395 ± 20	383 ± 10
SNEAK-7B	429 ± 26	408 ± 9
VENUS-F	730 ± 11	735 ± 4

Mit der Beziehung in Gl. (5.8) werden β_{eff} -Sensitivitäten unmittelbar aus den Sensitivitäten der Multiplikationsfaktoren berechnet. Eine relative Sensitivität S einer bestimmten Ergebnisgröße y in Bezug auf eine bestimmte Eingangsgröße x ist definiert als

$$S_x^y := \frac{x}{y} \frac{\partial y}{\partial x} \quad (5.9)$$

wobei die Ergebnisgröße y im vorliegenden Fall k , k_p oder β_{eff} sein kann und die Eingangsgröße x eine bestimmte mikroskopische Reaktion eines bestimmten Nuklids für eine bestimmte Energiegruppe ist, der Kürze halber mit σ bezeichnet. Ableitung von Gl. (5.8) nach σ liefert

$$S_\sigma^{\beta_{eff}} = \frac{(1 - \beta_{eff})}{\beta_{eff}} (S_\sigma^k - S_\sigma^{k_p}). \quad (5.10)$$

Zur Berechnung der Sensitivitäten auf der rechten Seite von Gl. (5.10) sind im Rahmen von SCALE 6.2.3 zwei TSUNAMI-Rechnungen erforderlich, eine im normalen Modus und eine mit einem Satz von Wirkungsquerschnitten, mit der Anzahl der prompten Neutronen pro Spaltung ν_p und dem prompten Spaltspektrum χ_p für jedes Nuklid anstelle der

entsprechenden totalen Größen ν_t und χ_t . In Bezug auf die technische Implementierung ist anzumerken, dass das Ersetzen von ν_t durch ν_p und von χ_t durch χ_p mit dem CLAROLPLUS-Modul von SCALE 6.2.3 durchgeführt werden kann, welches üblicherweise zur Anbringung zufälliger Variationen auf die mikroskopischen Wirkungsquerschnitte verwendet wird. Die β_{eff} -Sensitivitäten werden einfach aus den von TSUNAMI gelieferten Sensitivitäten des Multiplikationsfaktors unter Verwendung von Gl. (5.10) berechnet. Die β_{eff} -Sensitivitäten im SCALE-spezifischen SDF-Format (*Sensitivity Data File*) können schließlich vom SCALE 6.2.3-Modul TSUNAMI-IP verwendet werden, um die partiellen und totalen β_{eff} -Unsicherheiten berechnen.

Basierend auf der *Prompt-k-Ratio*-Methode können die Sensitivitäten für β_{eff} auch durch eine lineare Regressionsanalyse einer Stichprobe von β_{eff} -Ergebnissen geschätzt werden, die mit der statistischen Methode erhalten wurden. Dieser Ansatz wurde in Kap. 5.3 im Kontext der XSUSA-Methodik zur Abschätzung der Sensitivität von Multiplikationsfaktoren, Reaktivitätseffekten und Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten verwendet. In der vorliegenden Studie wird er ebenfalls auf eine β_{eff} -Stichprobe angewandt, die aus zwei Serien von Transportberechnungen unter Verwendung von mikroskopischen totalen bzw. prompten Daten erhalten wurde.

Kinetische Parameter in der traditionellen Sechs-Gruppen-Darstellung werden aus NEWT-Brennelement-Spektralrechnungen durch adjungierte Flusswichtung erhalten. Die Sensitivitäten für diese können nicht mittels linearer Störungstheorie mit TSUNAMI berechnet werden. Sie können jedoch auf einfache Weise aus einer Stichprobe von NEWT-Ergebnissen mit der XSUSA-Methodik mit linearer Regression geschätzt werden.

Zur Berechnung von Unsicherheiten und dem sogenannten Unsicherheits-„Breakdown“ wird wieder die *Sandwichformel* angewendet. Die verwendeten Kovarianzmatrizen entsprechen im Wesentlichen dem Satz mit 56 Energiegruppen, der Bestandteil des SCALE 6.2-Codepakets ist. Für die Durchführung einer Zufallsstichprobe mit linearer Regressionsanalyse der Ergebnisse ist es vorteilhaft, die Anzahl der Energiegruppen der Kovarianzdaten zu reduzieren. Für die Anwendung auf thermische Systeme wurden die 56-Gruppen-Daten mit dem Code ANGELO /KOD 90/ auf 21 Gruppen kondensiert. Für schnelle Systeme wird ein Satz mit 19 Gruppen mit einer höheren Auflösung im Hochenergiebereich verwendet, siehe Kap. 5.3. Für die mittlere Anzahl verzögerter Neutronen pro Spaltung wurden alternative Sätze in beiden Energiegruppenstrukturen aus JENDL-4.0-Daten /SHI 11/ prozessiert. Aus der linearen Störungstheorie mit

TSUNAMI berechnete Sensitivitäten, die in der Energiegruppenstruktur der zugrunde liegenden Multigruppen-Wirkungsquerschnittsdaten ausgegeben werden, wurden zur grafischen Darstellung und zum Vergleich mit Sensitivitäten aus der linearen Regressionsanalyse von Ergebnissen aus Zufallsstichproben auf oben genannte Breitgruppenstrukturen reduziert.

Die Sensitivitäten der effektiven verzögerten Neutronenanteile in Bezug auf einzelne Reaktionen werden, für die zu Beginn dieses Abschnitts beschriebenen kritischen Anordnungen berechnet. Die Ergebnisse für einige der eindimensionalen kugelförmigen Systeme sind in Abb. 5.35 angegeben. Hier sind Systeme mit unterschiedlichen spaltbaren Materialien gewählt, nämlich U-235, Pu-239 und U-233. Für jedes der Systeme werden nur die wichtigen β_{eff} -Sensitivitäten gezeigt. Die Auswahl erfolgt nicht einfach anhand der aufsummierten Sensitivitäten oder der Summen ihrer absoluten Werte; es wurden vielmehr solche Reaktionen ausgewählt, die letztendlich einen signifikanten Beitrag zu den Gesamtunsicherheiten liefern. Es ist zu beobachten, dass β_{eff} für jede der betrachteten Anordnungen am sensitivsten gegenüber der mittleren Anzahl verzögerter Neutronen pro Spaltung, $\bar{\nu}$, (in der Abbildung als *nu-bar* bezeichnet) der in der Anordnung enthaltenen spaltbaren Hauptmaterialien ist.

Dieser Befund ist plausibel: Der Multiplikationsfaktor ist näherungsweise proportional zur mittleren Gesamtzahl der Neutronen pro Spaltung, was zu einer integrierten Sensitivität von ungefähr 1,0 führt. Nach Gl. (5.8) ist β_{eff} näherungsweise die Differenz zwischen dem totalen und dem prompten Multiplikationsfaktor; somit skaliert es näherungsweise mit der Differenz von totalem und promptem $\bar{\nu}$, also dem verzögerten $\bar{\nu}$, was zu einer integrierten Sensitivität von näherungsweise 1,0 führt. Für die schnellen Systeme, die U-238 enthalten, haben auch das verzögerte $\bar{\nu}$ und der inelastische Streuquerschnitt dieses Isotops aufgrund der Wichtigkeit des Hochenergiebereichs einen gewissen Einfluss. Es ist zu erwähnen, dass in anderen Studien /KOD 13/, /ROM 19/ die Sensitivität in Bezug auf das prompten $\bar{\nu}$ normalerweise groß ist. In der vorliegenden Arbeit werden keine prompten $\bar{\nu}$ -Sensitivitäten ausgewertet, da totales und verzögertes $\bar{\nu}$ als unabhängige Variablen betrachten; das prompten $\bar{\nu}$ hängt direkt von diesen ab.

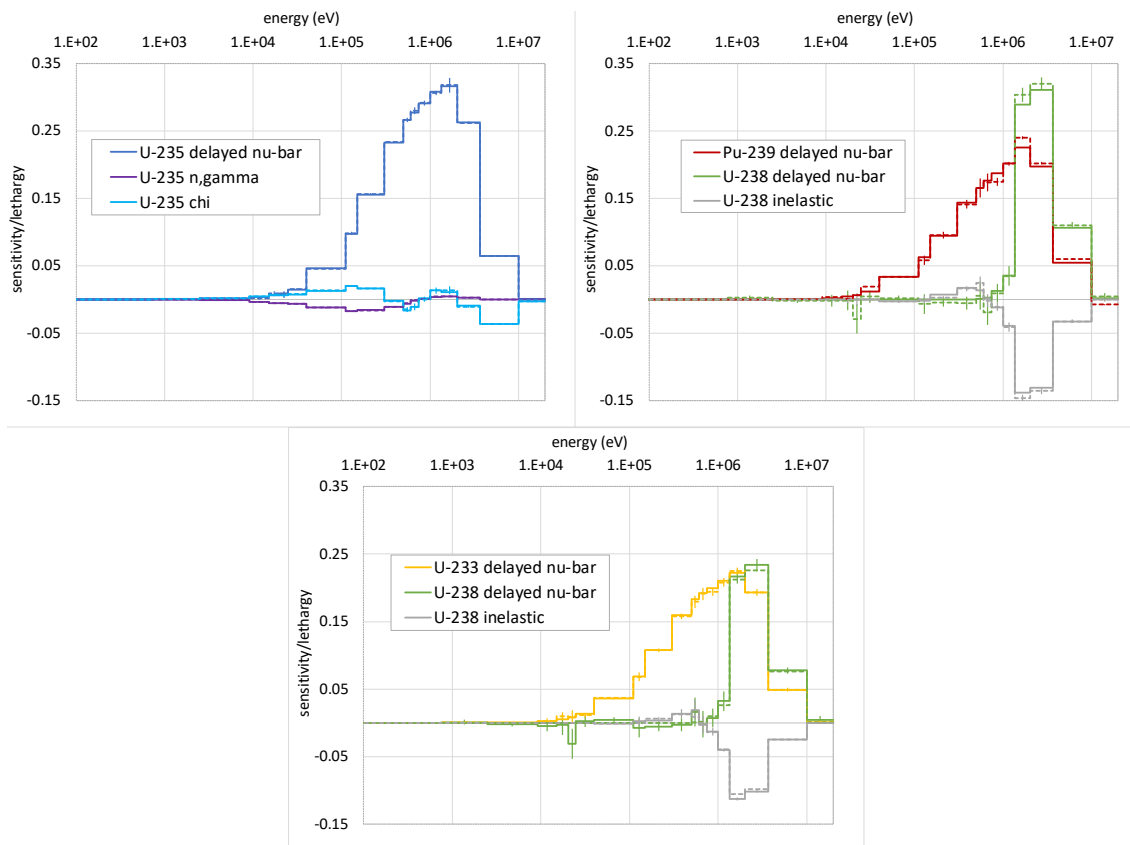


Abb. 5.35 Sensitivitäten der effektiven verzögerten Neutronenanteile

In Bezug auf wichtige Reaktionen, berechnet mit TSUNAMI (durchgezogene Linien) und XSUSA (gestrichelte Linien mit Fehlerbalken) für eindimensionale kritische Anordnungen. Oben links: GODIVA. Oben rechts: POPSY. Unten: FLATTOP-23.

In Abb. 5.35 sind die Sensitivitäten aus beiden in dieser Studie angewandter Methoden dargestellt, der deterministischen linearen Störungstheorie mit TSUNAMI und der linearen Regression aus der Zufallsstichprobe mit XSUSA mit einer Stichprobengröße von 2.000 für jede Serie. Die Fehlerbalken der XSUSA(LR)-Ergebnisse bezeichnen wieder 95 %-Jackknife-Konfidenzintervalle. Für alle relevanten Sensitivitäten wird eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den entsprechenden Ergebnissätzen beobachtet, was die näherungsweise Äquivalenz beider Ansätze bestätigt.

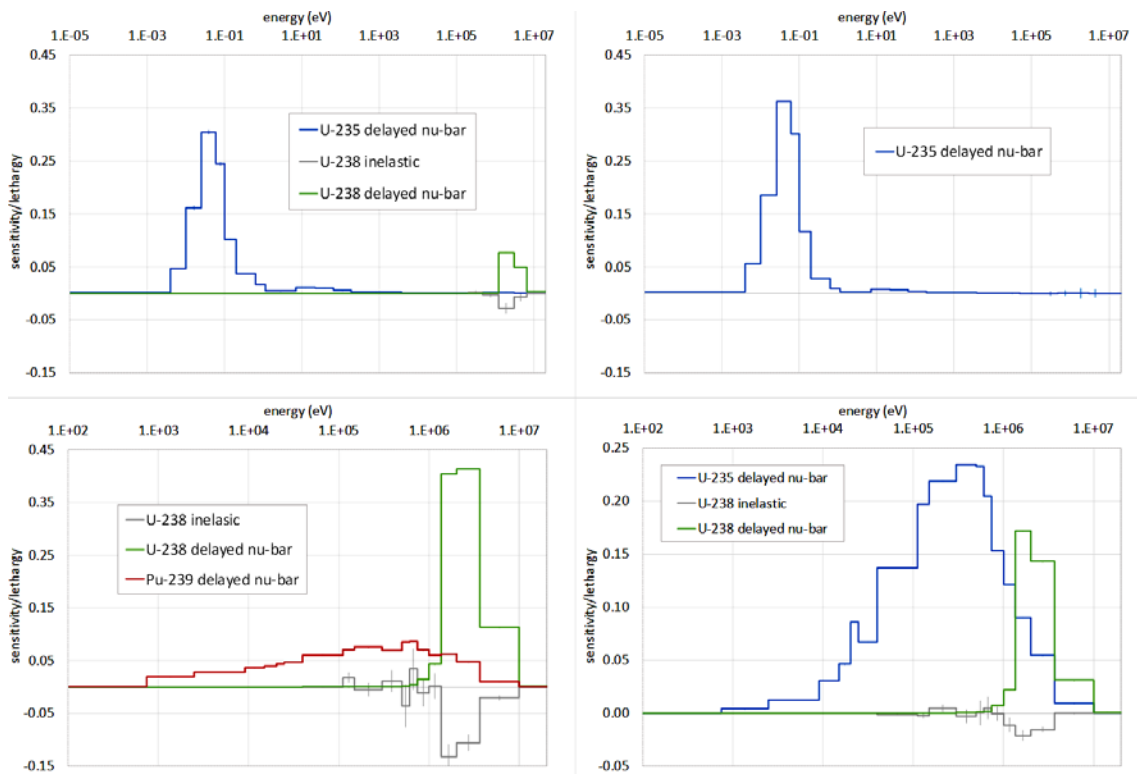


Abb. 5.36 Sensitivitäten der effektiven verzögerten Neutronenanteile

In Bezug auf wichtige Reaktionen, berechnet mit TSUNAMI für dreidimensionale kritische Anordnungen. Oben links: TCA. Oben rechts: VHTRC-1. Unten links: SNEAK-7A. Unten rechts: VENUS-F

Ähnliche Ergebnisse wie für die sphärischen eindimensionalen Anordnungen werden für die β_{eff} -Sensitivitäten der komplexeren Systeme in dreidimensionaler Darstellung beobachtet, Abb. 5.36: Die einflussreichsten Größen sind das verzögerte $\bar{\nu}$ des Spaltmaterials und für die schnellen Systeme zusätzlich verzögertes $\bar{\nu}$ und inelastische Streuung von U-238. Für das HTR-System ist, das verzögerte $\bar{\nu}$ von U-235 praktisch die einzige relevante Größe. Die Fehlerbalken in Abb. 5.36 bezeichnen die Unsicherheiten, die von der Monte-Carlo-Methode herrühren. Diese Unsicherheiten sind für die verzögerten $\bar{\nu}$ -Sensitivitäten unwichtig und für die inelastische U-238-Streuung deutlich größer. Dieses Verhalten kann durch Betrachten von Gl. (5.9) erklärt werden: Für alle Reaktionen außer verzögertem $\bar{\nu}$ ist der β_{eff} -Sensitivitätsvektor die Differenz zweier nahezu gleicher Sensitivitätsvektoren aus zwei ähnlichen Monte-Carlo-Berechnungen. Für das verzögerte $\bar{\nu}$ verschwindet offensichtlich die Sensitivität des prompten Multiplikationsfaktors, und die Sensitivität wird nur aus einem Monte-Carlo-Lauf berechnet. Die Anzahl der Neutronen in den KENO-Berechnungen lag zwischen 100 und 800 Millionen aktiven Neutronenschicksalen. Aufgrund der hohen Rechenzeit für eine einzelne KENO-Berechnung wäre

es sehr aufwendig gewesen, die Sensitivitäten aus Zufallsstichproben mit linearer Regression zu berechnen.

Nachdem die gute Übereinstimmung zwischen der deterministischen linearen Störungstheorie und der linearen Regression aus der Zufallsstichprobe für β_{eff} -Sensitivitäten gezeigt wurde, die mit der Prompt-k-Ratio-Methode berechnet wurden, werden nun Sensitivitäten kinetischer Parameter in sechs verzögerten Neutronengruppen betrachtet. Diese Parameter für Brennelemente werden im Rahmen von SCALE aus Spektralrechnungen mit NEWT durch adjungierte Flussgewichtung berechnet. Die Sensitivitäten für diese können mit deterministischer linearer Störungstheorie mit SCALE-Werkzeugen nicht mehr einfach berechnet werden, so wie dies bei β_{eff} der Fall war. Daher werden im Folgenden Ergebnisse gezeigt, die ausschließlich durch Zufallsstichproben mit linearer Regression erhalten wurden.

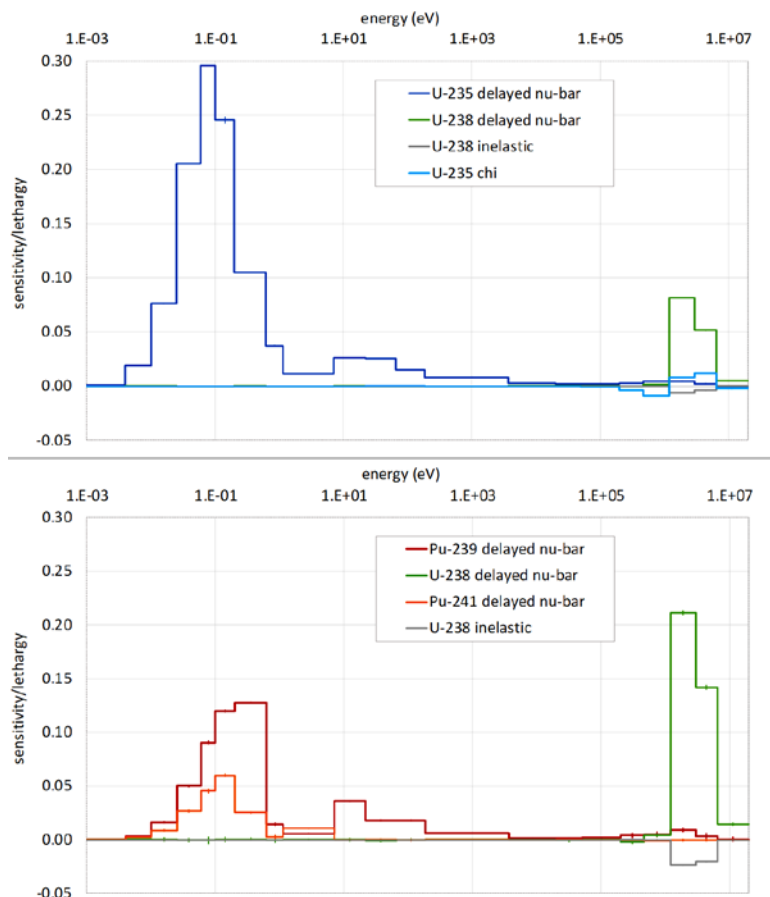


Abb. 5.37 Sensitivitäten der aufsummierten verzögerten Neutronenanteile in sechs Gruppen für zwei Brennelemente, geschätzt mit XSUSA(LR). Oben: TMI-1. Unten: GEN-III MOX

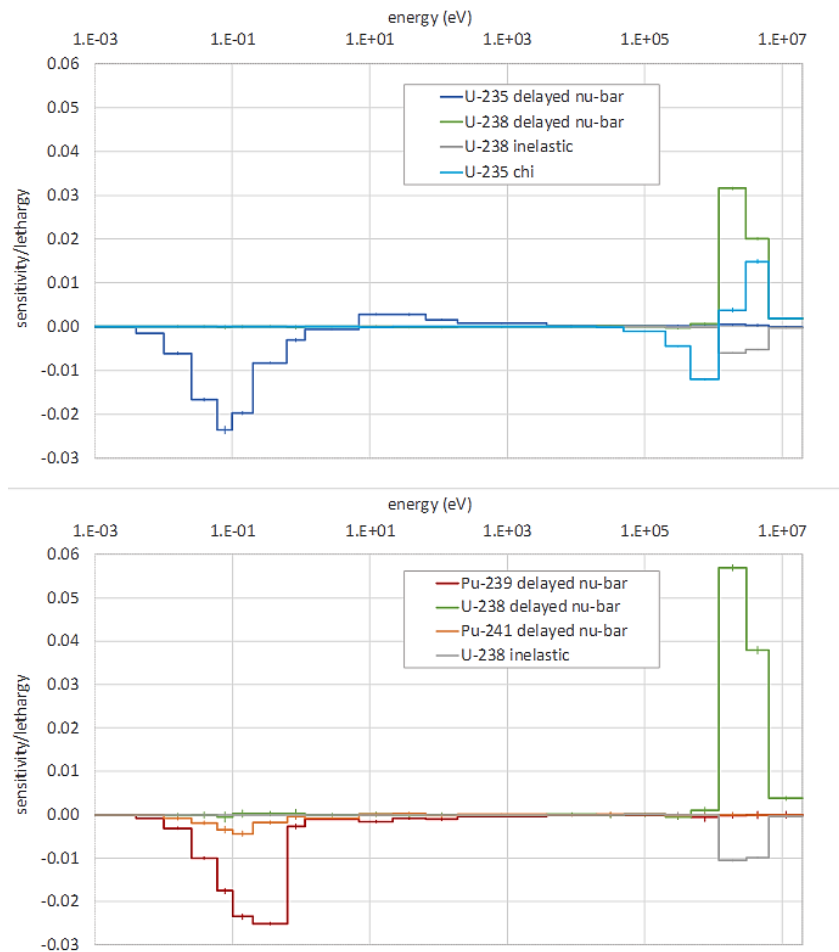


Abb. 5.38 Sensitivitäten der Zerfallskonstanten in der sechsten Gruppe für zwei Brennelemente, geschätzt mit XSUSA(LR). Oben: TMI-1. Unten: GEN-III MOX

In Abb. 5.37 sind die Sensitivitäten der Summen der verzögerten Neutronenanteile in sechs Gruppen in Bezug auf wichtige Reaktionen aus einer linearen Regressionsanalyse einer Ergebnisstichprobe für die LWR-Brennelemente dargestellt (siehe Abb. 5.33). Wiederum sind die wichtigsten Sensitivitäten diejenigen in Bezug auf das verzögerte $\bar{\nu}$ der Hauptaktinoiden in den Anordnungen. Aufgrund des thermischen Spektrums der Systeme finden Spaltungen hauptsächlich bei thermischen Energien statt, mit Ausnahme von U-238, das einen geringen Anteil der Spaltneutronen im schnellen Bereich ausmacht. Die Sensitivitäten der einzelnen Sechs-Gruppen-Werte zeigen ein qualitativ ähnliches Verhalten mit unterschiedlichen absoluten Größen. Die Sechs-Gruppen-Zerfallskonstanten sind ebenfalls am sensitivsten gegenüber den verzögerten $\bar{\nu}$ -Daten, jedoch mit wesentlich kleineren Sensitivitätswerten. Die Sensitivitäten für die sechste Gruppe sind in Abb. 5.38 dargestellt. Für die anderen Gruppen ist das Verhalten

qualitativ ähnlich, und die absoluten Größen sind niedriger als die Werte für die sechste Gruppe.

Tab. 5.7 Relative 1σ -Unsicherheiten der verzögerten Neutronenanteile für kritische Anordnungen aus TSUNAMI

Kritische Anordnung	SCALE 6.2 verzögertes $\bar{\nu}$	JENDL-4.0 verzögertes $\bar{\nu}$
GODIVA	5,58 %	3,06 %
JEZEBEL	46,88 %	2,49 %
SKIDOO	8,95 %	6,88 %
TOPSY	16,17 %	2,95 %
POPSY	46,98 %	4,04 %
FLATTOP-23	28,87 %	5,76 %
TCA	10,61 ± 0,03 %	2,53 ± 0,05 %
VHTRC-1	3,11 ± 0,01 %	2,69 ± 0,01 %
SNEAK-7A	51,86 ± 0,01 %	3,68 ± 0,14 %
SNEAK-7B	63,69 ± 0,01 %	4,66 ± 0,14 %
VENUS-F	18,46 ± 0,20 %	2,81 ± 0,10 %

Aus den Sensitivitäten der effektiven verzögerten Neutronenanteile in Bezug auf einzelne Reaktionen wurden die Gesamtergebnisunsicherheiten und der Unsicherheits-„Breakdown“ mit der *Sandwichformel* für die betrachteten kritischen Anordnungen ausgewertet. Die entsprechenden Gesamtergebnisunsicherheiten sind in Tab. 5.7 zusammengestellt, und diejenigen für die verzögerten Neutronenanteile und Zerfallskonstanten der LWR-Brennelemente in sechs Gruppen in Tab. 5.8 und Tab. 5.9. Bei Anwendung des Satzes von SCALE 6.2.3-Kovarianzdaten ist zu beobachten, dass für einige der Anordnungen die relativen Unsicherheiten hohe Werte von bis zu 64 % (1σ) annehmen, eine Größenordnung, die normalerweise bei anderen Ergebnisgrößen wie etwa Multiplikationsfaktoren, Reaktivitätswerte oder Reaktionsraten nicht angetroffen wird. Die Auswertung des Unsicherheits-„Breakdowns“ für die betreffenden Anordnungen zeigt, dass die Unsicherheiten in der mittleren Anzahl verzögerter Neutronen pro Spaltung die Hauptbeiträge zu den β_{eff} -Unsicherheiten liefern, was bereits durch die in Abb. 5.35 bis Abb. 5.37 gezeigten Sensitivitätsprofile nahegelegt wird. In Abb. 5.39 ist ein Beispiel dargestellt, das die Hauptbeiträge für die POPSY-Anordnung zeigt: diese enthält hauptsächlich Pu-239 als Spaltmaterial in einer zentralen Kugel, die von einem Mantel aus hauptsächlich U-238 umgeben ist. Die Beiträge des verzögerten $\bar{\nu}$ von U-238 und

Pu-239 betragen ungefähr 39 % bzw. 27 %. Dargestellt sind Ergebnisse von TSUNAMI sowie von XSUSA(LR), letztere mit 95 %-Jackknife-Konfidenzintervallen; beide Sätze stimmen gut überein. Durch Inspektion der entsprechenden SCALE 6.2.3 Kovarianzmatrizen wird der Grund klar: das verzögerte $\bar{\nu}$ sowohl von U-238 als auch von Pu-239 hat über den gesamten Neutronenenergiebereich unplausibel hohe relative 1σ -Unsicherheiten von 100 %, siehe Abb. 5.19.

Tab. 5.8 Nominalwerte (pcm) und relative 1σ -Unsicherheiten der verzögerten Neutronenanteile in sechs Gruppen für Brennelemente aus XSUSA(LR)

	Gruppe	Nominalwert	SCALE 6.2 verzögertes $\bar{\nu}$	JENDL-4.0 verzögertes $\bar{\nu}$
TMI-1	1	21,2	5,30 ± 0,03 %	3,11 ± 0,00 %
	2	141,9	7,59 ± 0,03 %	3,02 ± 0,00 %
	3	130,0	9,54 ± 0,04 %	2,95 ± 0,00 %
	4	269,6	10,92 ± 0,05 %	2,91 ± 0,00 %
	5	88,6	18,99 ± 0,10 %	2,76 ± 0,01 %
	6	30,0	18,68 ± 0,09 %	2,77 ± 0,01 %
	Summe	681,4	11,12 ± 0,05 %	2,90 ± 0,00 %
GEN-III MOX	1	7,9	63,63 ± 0,17 %	4,39 ± 0,01 %
	2	74,2	57,16 ± 0,18 %	3,92 ± 0,01 %
	3	61,0	53,65 ± 0,26 %	3,58 ± 0,02 %
	4	115,6	49,74 ± 0,33 %	3,22 ± 0,03 %
	5	48,1	50,43 ± 0,45 %	3,09 ± 0,04 %
	6	15,6	58,56 ± 0,49 %	3,55 ± 0,04 %
	Summe	322,4	51,42 ± 0,30 %	3,36 ± 0,02 %

Tab. 5.9 Nominalwerte (1/sec) und relative 1 σ -Unsicherheiten der Zerfallskonstanten in sechs Gruppen für Brennelemente aus XSUSA(LR)

	Gruppe	Nominalwert	SCALE 6.2 verzögertes $\bar{\nu}$	JENDL-4.0 verzögertes $\bar{\nu}$
TMI-1	1	0,01249	0,26 \pm 0,00 %	0,02 \pm 0,00 %
	2	0,03078	0,31 \pm 0,00 %	0,03 \pm 0,00 %
	3	0,11439	2,02 \pm 0,01 %	0,17 \pm 0,00 %
	4	0,30910	1,72 \pm 0,01 %	0,14 \pm 0,00 %
	5	1,22859	2,83 \pm 0,02 %	0,24 \pm 0,00 %
	6	3,28261	4,23 \pm 0,03 %	0,35 \pm 0,00 %
GEN-III MOX	1	0,01288	0,48 \pm 0,01 %	0,03 \pm 0,00 %
	2	0,03062	1,06 \pm 0,01 %	0,07 \pm 0,00 %
	3	0,12930	2,29 \pm 0,03 %	0,15 \pm 0,00 %
	4	0,33657	2,33 \pm 0,02 %	0,16 \pm 0,00 %
	5	1,27983	5,15 \pm 0,05 %	0,36 \pm 0,00 %
	6	3,42950	10,63 \pm 0,10 %	0,71 \pm 0,01 %

Daher wurden Studien mit einem alternativen Satz von Kovarianzdaten für das verzögerte $\bar{\nu}$ der für die betrachteten Systeme relevanten Aktinoiden durchgeführt, nämlich mit JENDL-4.0. Es ist ersichtlich, dass hier die relativen Unsicherheiten des verzögerten $\bar{\nu}$ typischerweise im Bereich zwischen 2 % und 10 % liegen, abhängig vom Aktinoid. Es ist nicht klar, warum die SCALE 6.2.3-Unsicherheiten für U-238 und Pu-239 so große Werte aufweisen.

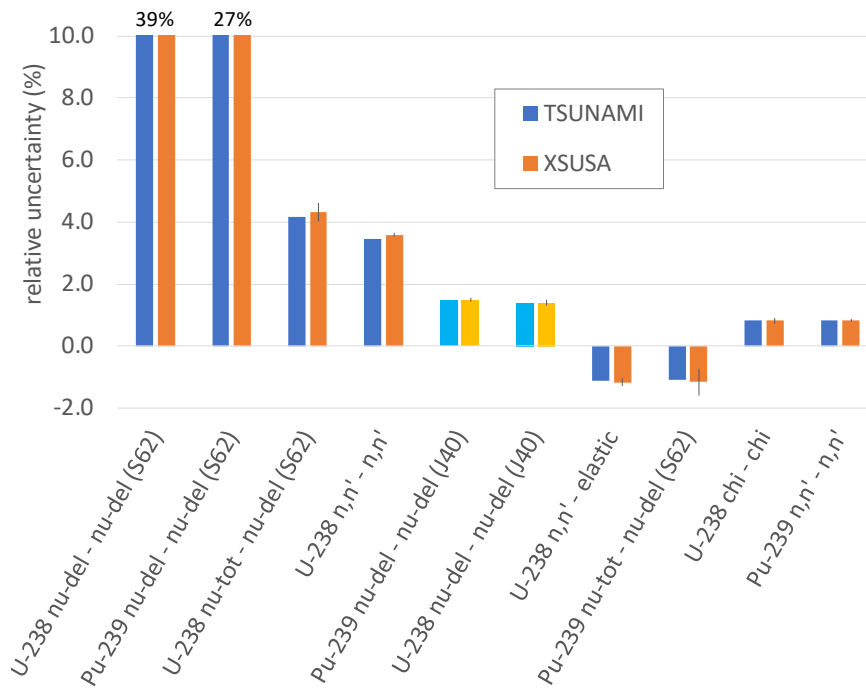


Abb. 5.39 Unsicherheits-„Breakdown“ des verzögerten Neutronenanteils für POPSY mit Unsicherheiten im verzögerten $\bar{\nu}$ aus SCALE 6.2 (S62) und JENDL-4.0 (J40)

Die mit Kovarianzdaten für das verzögerte $\bar{\nu}$ aus JENDL-4.0 ausgewerteten β_{eff} -Unsicherheiten sind ebenfalls in Tab. 5.7 und Tab. 5.8 angegeben, und die Beiträge zum Unsicherheits-„Breakdown“ für POPSY in Abb. 5.39 (in verschiedenen Schattierungen für JENDL-4.0 dargestellt), im Vergleich mit den entsprechenden Ergebnissen basierend auf Kovarianzdaten für das verzögerte $\bar{\nu}$ aus SCALE 6.2.3.

Nach dem oben Gesagten ist es offensichtlich, dass die Unsicherheiten für Systeme, die gegenüber dem verzögerten $\bar{\nu}$ von U-238 und Pu-239 stark sensitiv sind, drastisch verringert werden. Die relativen β_{eff} -Unsicherheiten nehmen nun Werte zwischen ungefähr 2,5 % und 7 % an, wobei die höchsten Werte für die Anordnungen mit U-233 als spaltbarem Material vorliegen, bei denen die Unsicherheit des verzögerten $\bar{\nu}$ von JENDL-4.0 über einen weiten Energiebereich 10 % beträgt. Für die schnellen Systeme, die eine große Menge an U-238 enthalten, wie dies bei POPSY der Fall ist, kann der Beitrag der inelastischen Streuung an U-238 hoch sein trotz nur mäßiger Sensitivitäten, aufgrund der großen Unsicherheit dieses Reaktionsquerschnitts von über 20 % für die höchsten Energien.

In Tab. 5.9 werden schließlich die Unsicherheiten der Zerfallsdaten in sechs Gruppen verglichen, die mit den Kovarianzdaten für das verzögerte $\bar{\nu}$ von SCALE 6.2.3 und JENDL-4.0 berechnet wurden. Während im Fall von SCALE 6.2.3 die relativen Unsicherheiten Werte von bis zu 10 % annehmen können, sind sie im Fall von JENDL-4.0 praktisch vernachlässigbar.

5.5 Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen mit HELIOS-2/XSUSA und Kovarianzdaten aus SCALE 6.2

Während des Vorhabens RS1536 /ZWE 18/ wurde im Rahmen einer Kooperation mit Studsvik-Scandpower eine Schnittstelle zwischen dem Spektral-/Abbrandcode HELIOS-2 /WEM 08/ und XSUSA implementiert und validiert, die in der aktuellen HELIOS-2-Version verfügbar ist /BOU 18b/. Bisher war dies auf Variationen beschränkt, die aus älteren Kovarianzdaten in einer Struktur mit 44 Energiegruppen, die mit SCALE 6.1 verfügbar sind, erzeugt wurden. Inzwischen wurden diese durch einen Satz von Kovarianzdaten in 56 Energiegruppen in SCALE 6.2 ersetzt, die hauptsächlich auf ENDF/B-VII.1 /CHA 11/ basieren und von vielen Institutionen, einschließlich der GRS, routinemäßig für Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen verwendet werden. Daher wurde die HELIOS2/XSUSA-Berechnungssequenz entsprechend aktualisiert.

Die Nominalrechnungen werden mit HELIOS-2.02.01 unter Verwendung der Wirkungsquerschnittsbibliothek mit 58 Energiegruppen basierend auf ENDF/B-VII.1 durchgeführt. Um die SCALE-6.2-Kovarianzdaten mit 56 Gruppen für HELIOS-2/XSUSA nutzbar zu machen, wurden sie im Vorfeld auf die 44-Gruppen-Struktur des SCALE-6.1-Satzes mit dem Code ANGELO /KOD 90/ reduziert. Zum Vergleich werden Ergebnisse von TSUNAMI-2D verwendet, d.h. mit NEWT als Transportprogramm. Diese wurden mit den ENDF/B-VII.1-Wirkungsquerschnittsdaten aus SCALE 6.2 mit 252 Energiegruppen und demselben Satz von Kovarianzdaten mit 44 Energiegruppen wie mit HELIOS-2/XSUSA erzeugt.

Die Unsicherheiten bzgl. nuklearer Daten werden durch Zufallsstichproben mit XSUSA auf der Grundlage der oben genannten SCALE-6.2-Kovarianzmatrizen, die auf 44 Energiegruppen transformiert wurden, abgeschätzt. Hierzu wird eine Stichprobengröße von 1.000 gewählt. Dies ergibt die Unsicherheiten beliebiger Ergebnisgrößen wie Multiplikationsfaktoren und mikroskopischer oder makroskopischer Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte. Die Hauptbeiträge zu diesen Unsicherheiten werden durch Berechnung der

quadrierten multiplen Korrelationskoeffizienten zwischen den betrachteten Ergebnissen und Gruppen unsicherer Eingabeparameter ermittelt, typischerweise einzelne Reaktionen einzelner Isotope, die über den gesamten Energiebereich integriert sind. Durch die Anwendung einer Erweiterung von XSUSA können Sensitivitätsvektoren abgeschätzt werden, die direkt mit den mit TSUNAMI berechneten vergleichbar sind. Diese Methode basiert auf der Durchführung einer linearen Regressionsanalyse der interessierenden Ergebnisgrößen. Dies ist in Kap. 5.3 im Detail beschrieben. Hier beträgt die Stichprobengröße von 2.000, was sich als groß genug herausstellte, um die relevanten Sensitivitätsvektoren und die entsprechenden partiellen Ergebnisunsicherheiten mit zufriedenstellend kleinen Konfidenzintervallen abzuschätzen.

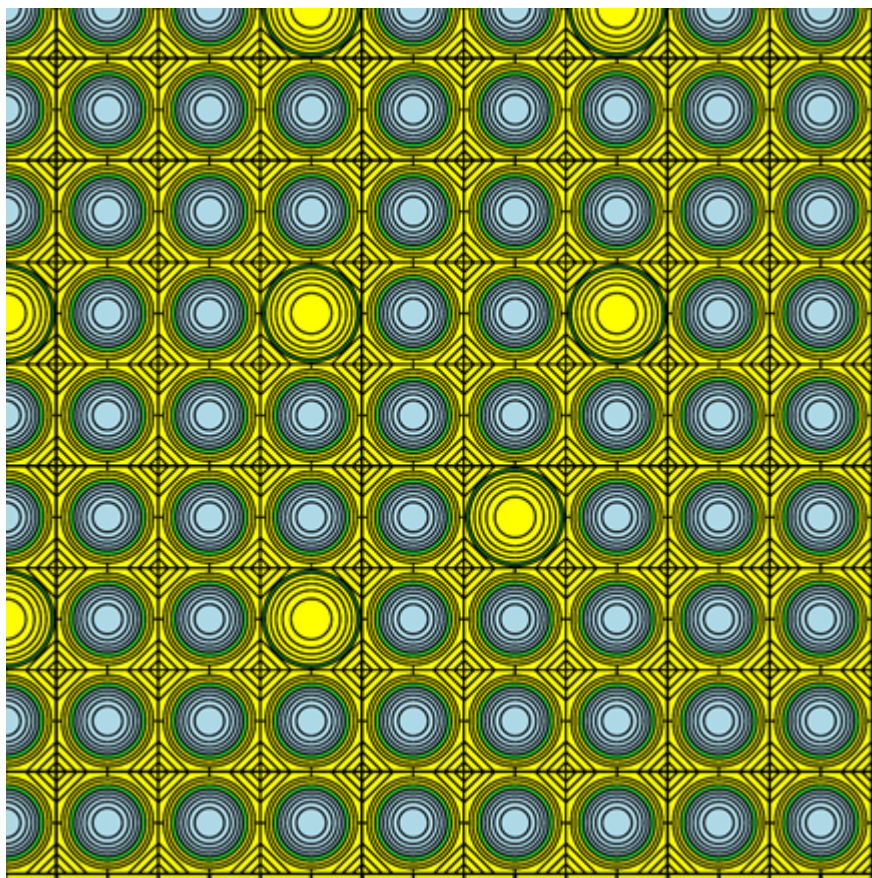


Abb. 5.40 HELIOS-2-Modell des GEN-III-UO₂-DWR-Brennelements (1/4-Geometrie)

Für die Ergebnisse, die im Folgenden vorgestellt werden, wurden zwei Stabzellen und eine Brennelementanordnung aus dem UAM-LWR-Benchmark ausgewählt. Dies sind (a) eine Stabzelle aus dem SWR Peach Bottom 2 mit UO₂-Brennstoff; (b) eine Stabzelle aus einem generischen GEN-III-MOX-DWR-Brennelement; (c) eine generische GEN-III-UO₂-DWR-Brennelementanordnung. Es wird angenommen, dass sich jede dieser

Anordnungen im frischen Zustand bei Vollast befindet. Details zu Geometrie und Materialzusammensetzung sind in /IVA 16/ angegeben. Eine Skizze des HELIOS-2-Modells für die Brennelementanordnung ist in Abb. 5.40 dargestellt.

Tab. 5.10 Multiplikationsfaktoren und Eingruppen-Wirkungsquerschnitte der Stabzellen aus SCALE und HELIOS-2 mit relativen Abweichungen. Einheiten sind barn für mikroskopische und 1/cm für makroskopische Querschnitte

	BWR UO2			GEN-III MOX		
	SCALE	HELIOS-2	Abw.	SCALE	HELIOS-2	Abw.
k	1,2342E+00	1,2315E+00	-0,22 %	1,1086E+00	1,1068E+00	-0,16 %
Mikro Absorption U-235	4,0779E+01	4,0744E+01	-0,09 %	1,5225E+01	1,5249E+01	0,16 %
Mikro Absorption U-238	8,5426E-01	8,4948E-01	-0,56 %	8,9232E-01	8,8550E-01	-0,76 %
Mikro Absorption Pu-239	--	--	--	2,7399E+01	2,7402E+01	0,01 %
Mikro Absorption Pu-240	--	--	--	2,1517E+01	2,1908E+01	1,82 %
Mikro Absorption Pu-241	--	--	--	3,1584E+01	3,1569E+01	-0,05 %
Mikro Absorption Pu-242	--	--	--	1,1740E+01	1,0613E+01	-9,60 %
Mikro Spaltung U-235	3,2891E+01	3,2778E+01	-0,34 %	1,1043E+01	1,1014E+01	-0,26 %
Mikro Spaltung U-238	8,9030E-02	8,8550E-02	-0,54 %	1,1900E-01	1,1798E-01	-0,86 %
Mikro Spaltung Pu-239	--	--	--	1,7645E+01	1,7619E+01	-0,15 %
Mikro Spaltung Pu-240	--	--	--	6,3416E-01	6,2858E-01	-0,88 %
Mikro Spaltung Pu-241	--	--	--	2,3770E+01	2,3753E+01	-0,07 %
Mikro Spaltung Pu-242	--	--	--	5,0682E-01	5,0172E-01	-1,01 %
Makro Absorption	4,7414E-02	4,7384E-02	-0,06 %	7,4717E-02	7,4755E-02	0,05 %
Makro Spaltung	2,4688E-02	2,4600E-02	-0,36 %	2,9826E-02	2,9764E-02	-0,21 %

Tab. 5.11 Multiplikationsfaktoren und makroskopische Zweigruppen-Wirkungsquerschnitte (1/cm) der Brennelementanordnung aus SCALE und HELIOS-2 mit relativen Abweichungen

	SCALE	HELIOS-2	Abw.
k	1,0487E+00	1,0489E+00	0,02 %
Absorption schnell	2,6873E-02	2,6959E-02	0,32 %
Absorption thermisch	1,9005E-01	1,8899E-01	-0,56 %
Spaltung schnell	6,6386E-03	6,6677E-03	0,44 %
Spaltung thermisch	1,3473E-01	1,3397E-01	-0,56 %
Streuung schnell → schnell	3,8248E-01	3,8396E-01	0,39 %
Streuung schnell → thermisch	8,4911E-04	8,5353E-04	0,52 %
Streuung thermisch → schnell	1,3086E-03	1,3436E-03	2,67 %
Streuung thermisch → thermisch	3,9096E-01	3,8867E-01	-0,59 %
Total schnell	4,0923E-01	4,1177E-01	0,62 %
Total thermisch	5,8101E-01	5,7900E-01	-0,35 %

Nominalergebnisse sind für Multiplikationsfaktoren und Eingruppen-Wirkungsquerschnitte der Stabzellen in Tab. 5.10 und Multiplikationsfaktoren und Zweigruppen-Wirkungsquerschnitte der Brennelementanordnung in Tab. 5.11 dargestellt. Alle aufgeführten Wirkungsquerschnitte beziehen sich auf die Brennstoffbereiche der Anordnungen. Die Energiegrenze zwischen der schnellen und der thermischen Gruppe beträgt 0,625 eV. Bei allen betrachteten Ergebnissen wird eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den HELIOS-2- und SCALE-Ergebnissen beobachtet, mit relativen Abweichungen im Bereich von 1 % bis 3 %. Die einzige Ausnahme ist der mikroskopische Absorptionsquerschnitt von Pu-242 in einer Energiegruppe mit einer relativen Abweichung von annähernd 10 %.

Die Gesamtunsicherheiten der Multiplikationsfaktoren und Wirkungsquerschnitte sind in Abb. 5.41 und Abb. 5.42 für die Stabzellen und in Abb. 5.43 für die Brennelementanordnung angegeben, zusammen mit ihren 95 %-Konfidenzintervallen, die unter der Annahme von Normalverteilungen und mit einer Stichprobengröße von 1.000 ungefähr $\pm 4,5$ % betragen. Bezüglich der Multiplikationsfaktoren und Eingruppen-Wirkungsquerschnitte der Stabzellen besteht eine sehr gute Übereinstimmung zwischen NEWT/TSUNAMI und HELIOS-2/XSUSA, mit Ausnahme des mikroskopischen Absorptionsquerschnitts von Pu-242, bei dem bereits eine signifikante Diskrepanz bei den Nominalwerten besteht, siehe Tab. 5.10. Für die Brennelementanordnung sind die

Abweichungen in einigen Fällen größer, insbesondere für die Unsicherheiten des thermischen Streuquerschnitts und demzufolge des totalen thermischen Wirkungsquerschnitts. Dieser Befund wird noch untersucht.

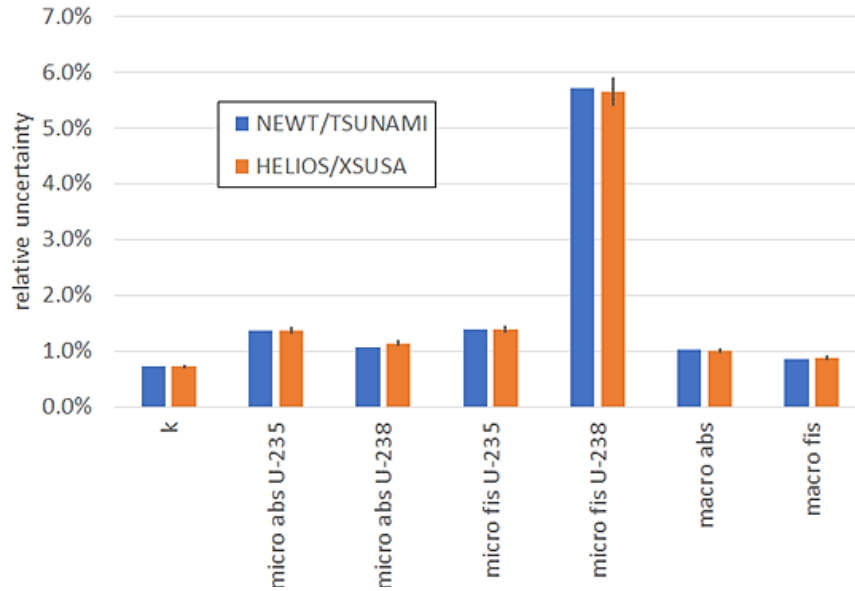


Abb. 5.41 Unsicherheiten für den Multiplikationsfaktor und die Eingruppen-Wirkungsquerschnitte der UO₂-SWR-Stabzelle aus SCALE und HELIOS-2

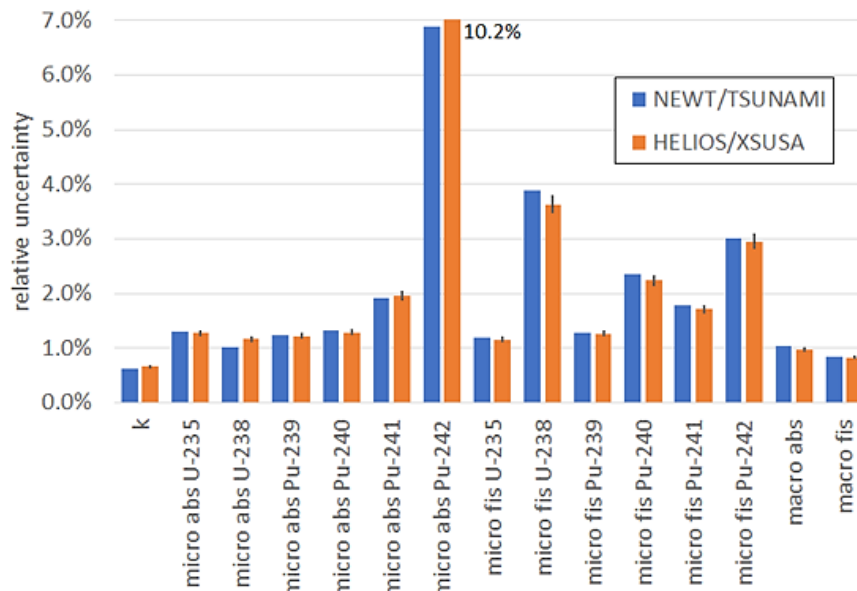


Abb. 5.42 Unsicherheiten für den Multiplikationsfaktor und die Eingruppen-Wirkungsquerschnitte der GEN-III-MOX-Stabzelle aus SCALE und HELIOS-2

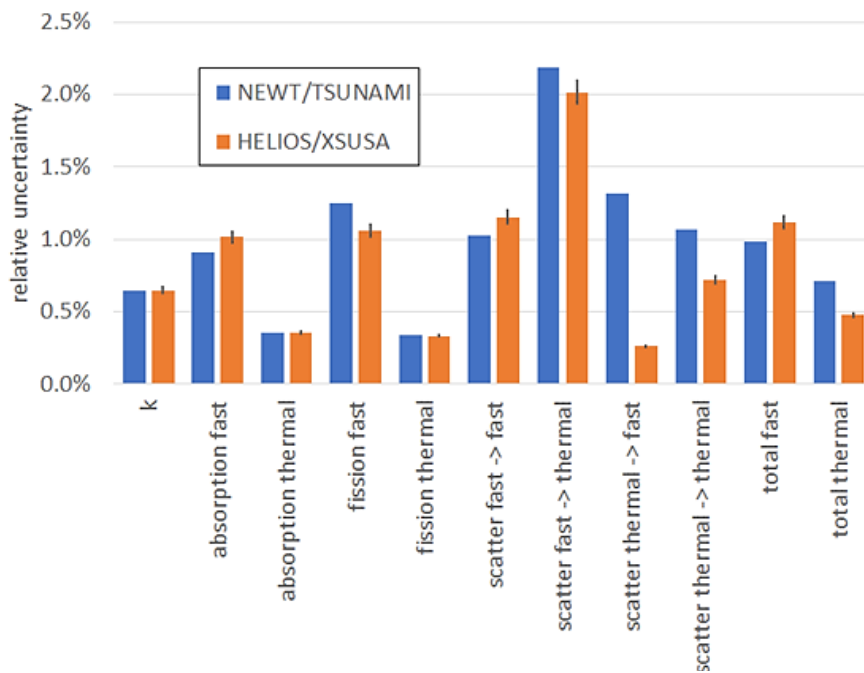


Abb. 5.43 Unsicherheiten für den Multiplikationsfaktor und die Zweigruppen-Wirkungsquerschnitte der GEN-III-UO₂-Brennelements aus SCALE und HELIOS-2

Um die Hauptbeiträge zur Unsicherheit einer betrachteten Ergebnisgröße zu identifizieren, bietet XSUSA ein Modul zur Berechnung der quadrierten multiplen Korrelationskoeffizienten R^2 zwischen den Ergebnissen und Gruppen unsicherer Eingabeparameter, für die üblicherweise die energieintegrierten Einzelreaktionen einzelner Nuklide gewählt werden. Diese Strategie wurde erfolgreich mit XSUSA in Kombination mit SCALE-Kritikalitätscodes genutzt und wird jetzt auch auf HELIOS-2/XSUSA angewendet. Der quadrierte multiple Korrelationskoeffizient kann als der relative Betrag der Ergebnisunsicherheit interpretiert werden, der sich aus der Unsicherheit der jeweiligen Parametergruppe ergibt, wobei Korrelationen zwischen den Eingabeparametern berücksichtigt werden. Ein Beispiel ist in Abb. 5.44 angegeben, nämlich die Wichtigkeitsreihenfolge für den Multiplikationsfaktor der SWR-Stabzelle.

Es ist ersichtlich, dass die Unsicherheit des U-238-Einfangquerschnitts den größten Beitrag zur Ergebnisunsicherheit liefert, gefolgt von der Unsicherheit der mittleren Anzahl von Neutronen pro Spaltung von U-235 und der Unsicherheit der Streureaktionen von U-238. Aus der Erfahrung mit anderen UO₂-LWR-Systemen würde man *a priori* keinen so hohen Beitrag der Unsicherheit des elastischen Streuquerschnitts erwarten. Tatsächlich ist die Unsicherheit dieser Reaktion für sich genommen nur von untergeordneter Bedeutung; der hohe Rang ist auf die starke Korrelation mit anderen Reaktionen

zurückzuführen, hauptsächlich mit dem inelastischen Streuquerschnitt. Wenn man ein Ranking durchführt, bei dem die Korrelationen der Eingangsparameter nicht berücksichtigt werden, wird der Beitrag der elastischen U-238-Streuung vernachlässigbar, wie unten zu sehen sein wird.

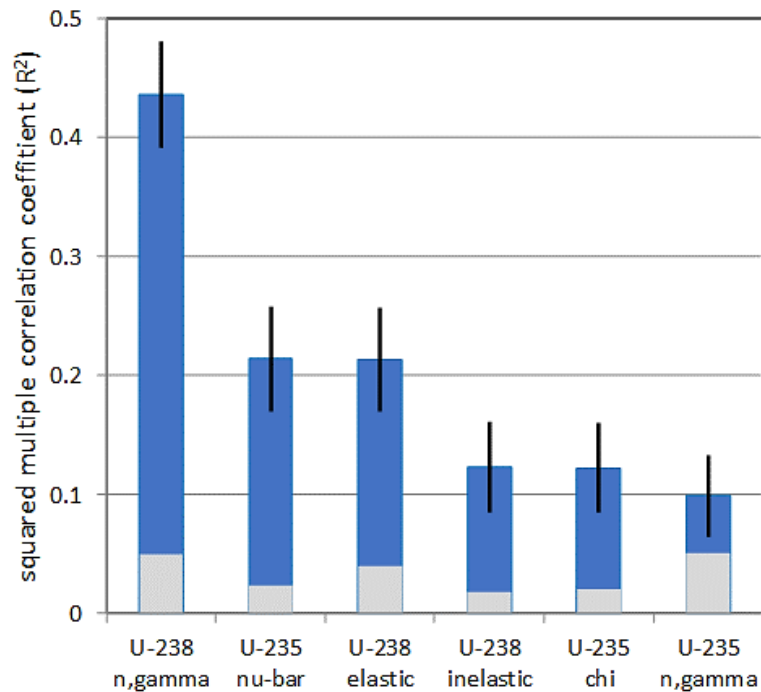


Abb. 5.44 Quadrierter multipler Korrelationskoeffizient für den Multiplikationsfaktor der SWR-Stabzelle aus HELIOS-2/XSUSA

Bei Anwendung der deterministischen linearen Störungstheorie werden normalerweise Sensitivitätsvektoren ausgewertet, also die Ableitungen einer betrachteten Ergebnisgröße in Bezug auf die unsicheren Eingabeparameter. Eine Aufschlüsselung nach partiellen Unsicherheitsbeiträgen wird dann mit den partiellen Sensitivitätsvektoren und den partiellen Kovarianzmatrizen für eine Gruppe unsicherer Eingabeparameter durchgeführt, wiederum typischerweise eine individuelle Reaktion eines einzelnen Nuklids, integriert über die Energie. Die resultierenden Größen können als Unsicherheiten interpretiert werden, die sich aus der einzelnen Reaktion ergeben, unter der Annahme, es gebe keine Korrelationen zu anderen Reaktionen.

In Abb. 5.45 und Abb. 5.46, die sich auf die SWR-Stabzelle beziehen, sind die Sensitivitätsvektoren des Multiplikationsfaktors in Bezug auf die beiden wichtigsten Reaktionen, den Einfangquerschnitt von U-238 und die mittlere Anzahl von Neutronen pro Spaltung von U-235, dargestellt. Für die TSUNAMI-Ergebnisse wurden die ursprünglich in

252 Energiegruppen angegebenen Sensitivitäten auf die 44-Gruppen-Struktur der Kovarianzdaten reduziert, um den Vergleich mit den Ergebnissen von HELIOS-2/XSUSA zu erleichtern. Diese werden zusammen mit abgeschätzten 95 %-Konfidenzintervallen angegeben. Für die mittlere Anzahl von Neutronen pro Spaltung von U-235 wird eine sehr zufriedenstellende Übereinstimmung beobachtet. Beim U-238-Einfangquerschnitt gibt es eine deutliche Abweichung im Resonanzbereich, vermutlich aufgrund der unterschiedlichen Resonanz-Selbstabschirmungsmethoden in SCALE und HELIOS-2 sowie der Vernachlässigung impliziter Effekte in HELIOS-2/XSUSA.

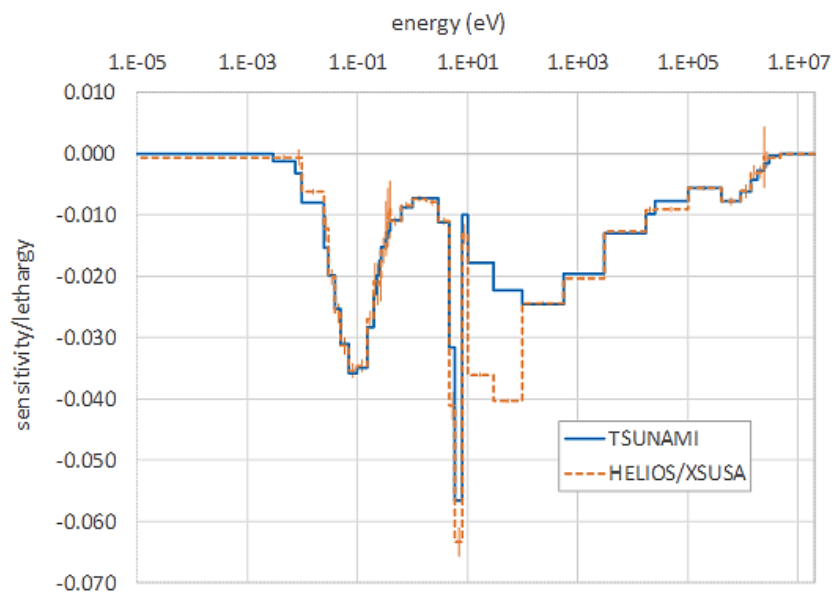


Abb. 5.45 Sensitivität des SWR-Stabzell-Multiplikationsfaktors bzgl. des U-238-Einfangquerschnitts aus TSUNAMI und HELIOS-2/XSUSA

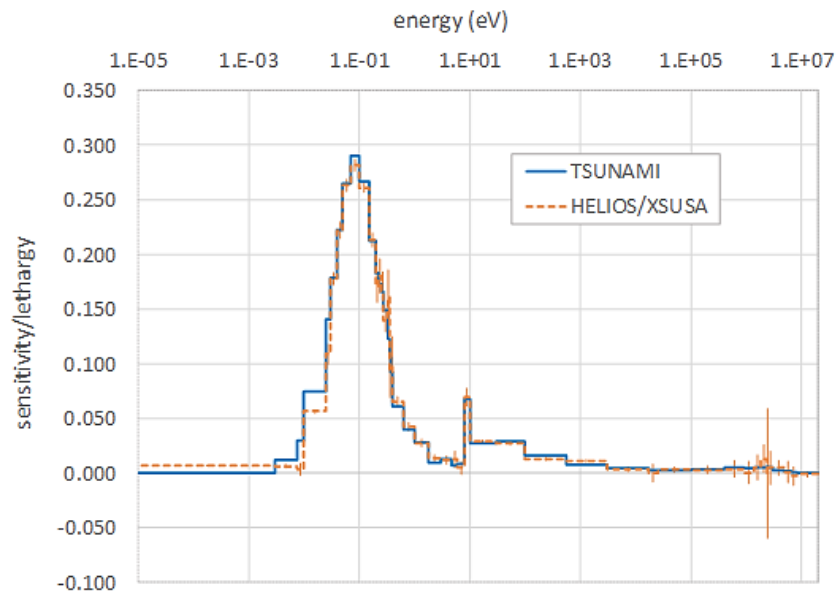


Abb. 5.46 Sensitivität des SWR-Stabzell-Multiplikationsfaktors bzgl. der mittleren Anzahl von Neutronen pro Spaltung von U-235 aus TSUNAMI und HELIOS-2/XSUSA

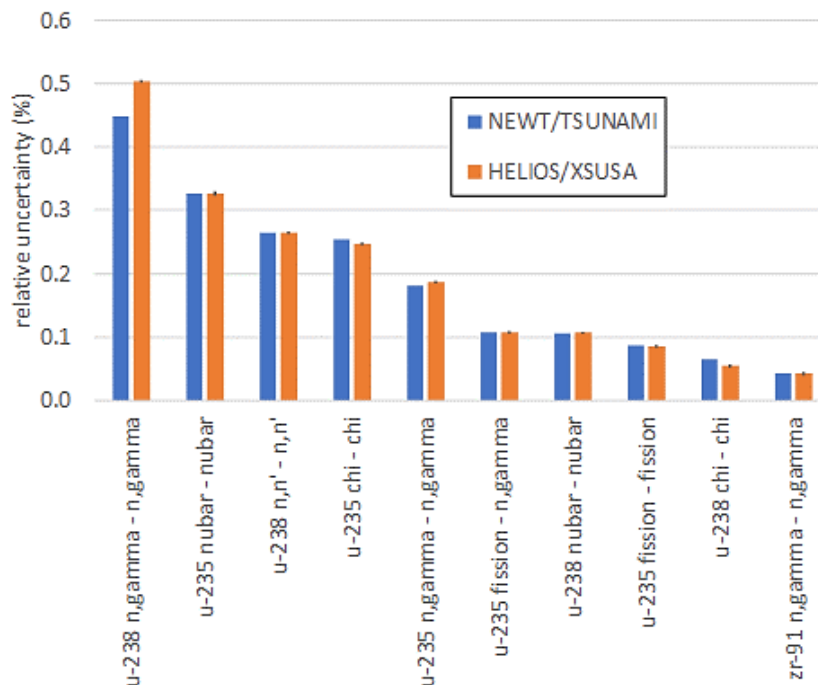


Abb. 5.47 Unsicherheits-"Breakdown" für den Multiplikationsfaktor der SWR-Stabzelle aus TSUNAMI und HELIOS-2/XSUSA

Schließlich ist in Abb. 5.47 der resultierende Unsicherheits-"Breakdown" dargestellt. Aufgrund des Unterschieds in den Sensitivitätsvektoren, die sich aus TSUNAMI und HELIOS-2/XSUSA ergeben, gibt es eine gewisse Abweichung für den Beitrag des

Einfangquerschnitts von U-238. Für alle anderen Reaktionen stimmen die Beiträge sehr gut überein. Die Hauptbeiträge, die durch Berechnung der quadrierten multiplen Korrelationskoeffizienten (siehe Abb. 5.44) gefunden wurden, sind auch in Abb. 5.47 mit einem hohen Rang aufgeführt, mit Ausnahme des elastischen U-238-Streuquerschnitts, wie oben erläutert.

5.6 Behandlung impliziter Effekte

Bislang wurden in XSUSA die Variationen der Wirkungsquerschnitte auf die bereits abgeschirmten Daten angewandt; damit wird der Einfluss der Resonanzselbstabschirmungsrechnung auf die Unsicherheiten, die sog. impliziten Effekte, vernachlässigt, was in vielen Anwendungsfällen eine gute Näherung ist. Dies hat gegenüber einer Vorgehensweise, bei der bereits die nicht-abgeschirmten Wirkungsquerschnitte variiert werden, wie sie im SCALE-Modul SAMPLER realisiert ist, den Vorteil, dass die Resonanzselbstabschirmungsrechnung nicht bei jedem Rechenlauf mit variierten Wirkungsquerschnitten erneut durchgeführt werden muss. Problemabhängig kann die Resonanzselbstabschirmungsrechnung einen signifikanten Anteil der Gesamtrechenzeit einnehmen. Dennoch können diese sog. impliziten Effekte eine deutliche Rolle spielen, etwa beim Einfangquerschnitt von U-238 im Resonanzbereich, und sollten daher mitberücksichtigt werden. Bei den Arbeiten zu RS1536 /ZWE 18/ wurde ein Verfahren skizziert, wie sich der implizite Anteil der Unsicherheiten störungstheoretisch erfassen lässt, ohne dass dabei zu jeder Variationsrechnung eine erneute Resonanzselbstabschirmungsrechnung durchgeführt werden müsste und der erhebliche Geschwindigkeitsvorteil der XSUSA-Methodik verlorengehe. Dies erfolgt durch Verwendung der in SCALE integrierten Methode zur Beschreibung der Sensitivitäten in der Resonanzselbstabschirmungsrechnung. Damit lassen sich Korrekturen für die Variationen der abgeschirmten Wirkungsquerschnitte bestimmen, die die impliziten Effekte beschreiben.

Nun hat sich bei der Implementierung der Methodik herausgestellt, dass diese Herangehensweise, bei der zunächst eindimensionale TSUNAMI-Berechnungen durchgeführt werden, und dann aus den erhaltenen Sensitivitätsdateien die Größen extrahiert werden, die dazu dienen, die Variationen der abgeschirmten Wirkungsquerschnitte zu korrigieren, höchst ineffizient ist. Schwerer wiegt allerdings, dass der TSUNAMI-Ansatz zur Berechnung der impliziten Sensitivitäten eine methodische Schwäche aufweist. Darauf wird weiter unten näher eingegangen. Insgesamt war es daher geboten, ein neues Verfahren

zu entwickeln, das zum einen einfach handhabbar, zum anderen methodisch einwandfrei ist.

In TSUNAMI wird zur Berechnung der impliziten Sensitivitäten ein AD-Verfahren (AD = *Automatic Differentiation*) auf die Resonanzselbstabschirmungsberechnung angewendet /HOR 91/. Diese Sequenz besteht gewöhnlich aus dem Modul BONAMI, das im nicht-aufgelösten Resonanzbereich die Bondarenko-Methode anwendet, und dem Modul CENTRM, das im aufgelösten Resonanzbereich die Boltzmann-Gleichung mit Wirkungsquerschnitten in kontinuierlicher Energiedarstellung löst. Dabei ist zu bemerken, dass zur Berechnung der impliziten Sensitivitäten das AD-Verfahren nur auf BONAMI angewendet wird, wofür Bondarenko-Faktoren über den vollständigen Energiebereich herangezogen werden. Dies stellt eine Näherung dar, die abhängig vom betrachteten System und der betrachteten Reaktion Abweichungen von der Referenzlösung verursachen kann. Das AD-Verfahren wird im Wesentlichen auf die Berechnung der Sensitivitäten bzgl. der Nukliddichten in BONAMI angewendet, was äquivalent zur Berechnung der Sensitivitäten bzgl. der totalen Wirkungsquerschnitte ist. Anschließend werden daraus die Sensitivitäten bzgl. der einzelnen partiellen Wirkungsquerschnitte (elastische und inelastische Streuung, $n, 2n$, Spaltung und Einfang) abgeleitet, siehe Gl. (6.3.29) in /REA 18/. Dabei wird stillschweigend angenommen, dass eine relative Änderung des totalen Wirkungsquerschnitts mit denselben relativen Änderungen der partiellen Wirkungsquerschnitte einhergeht, da wie gesagt von Änderungen in den Nukliddichten ausgegangen wird. In Wahrheit beschreibt die Sensitivität bzgl. eines partiellen Wirkungsquerschnitts aber die Änderung der Ergebnisgröße bei einer Störung des betrachteten partiellen Wirkungsquerschnitts allein, wobei die restlichen partiellen Wirkungsquerschnitte konstant gehalten werden. Die in TSUNAMI zugrundeliegende Annahme zur Herleitung der Sensitivitäten bzgl. der partiellen Wirkungsquerschnitte aus der Sensitivität bzgl. des totalen Wirkungsquerschnitts stellt also erneut eine Näherung dar, deren Qualität vom betrachteten System und der betrachteten Reaktion abhängt.

Daher wurde eine neue Berechnungssequenz eingeführt, bei der auf beide oben beschriebenen Näherungen verzichtet wird. Dabei werden zusätzlich zur nominalen Resonanzselbstabschirmungsberechnung noch solche Sequenzen durchgeführt, bei denen die individuellen partiellen Wirkungsquerschnitte für die relevanten Reaktionen separat um einen kleinen Betrag (hier hat sich ein Wert von 5 % als sinnvoll erwiesen) variiert werden. Dies erfordert zwar gegenüber TSUNAMI einen Mehraufwand, ist aber

methodisch befriedigender und liefert in einigen Fällen eine sichtbare Verbesserung der Ergebnisse, wie unten gezeigt wird.

Zur Validierung der Methodik wird ein eindimensionales System aus dem International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments /NEA 19a/ herangezogen, nämlich eine Lösung mit niedrig angereichertem Uran in sphärischer Geometrie, beschrieben unter dem Bezeichner LEU-SOL-THERM-002 (Case 1). Dabei werden Berechnungen mit TSUNAMI-CE und TSUNAMI-1D durchgeführt. TSUNAMI-CE verwendet als Transportprogramm den Monte-Carlo-Code KENO mit nuklearen Daten in kontinuierlicher Energiedarstellung; dies wird, was den Multiplikationsfaktor anbelangt, als Referenzlösung angesehen. TSUNAMI-1D verwendet als Transportprogramm den eindimensionalen S_N -Code XSDRN mit Multigruppen-Daten. Die Nominalergebnisse für den Multiplikationsfaktor werden in Tab. 5.12 mit dem Benchmark-Wert verglichen. Es zeigt sich, dass die Multigruppen-Daten mit 252 und 56 Energiegruppen nahezu identische Ergebnisse liefern; Für die Sensitivitätsanalysen werden daher die 56-Gruppen-Daten herangezogen.

Tab. 5.12 Multiplikationsfaktor für das kritische Experiment LEU-SOL-THERM-002 (Case 1) aus SCALE mit ENDF/B-VII.1-Daten

Benchmark	1,0038 ± 0,0040
KENO, kontinuierliche Energie	0,99908 ± 0,00008
XSDRN, 252 Gruppen	0,99873
XSDRN, 56 Gruppen	0,99816

Der Unsicherheits-„Breakdown“, der sich aus den verschiedenen Methoden ergibt, ist in Abb. 5.48 dargestellt. Dabei bezeichnet „TSUNAMI expl.“ die Werte, die sich aus TSUNAMI ohne Berücksichtigung der impliziten Anteile ergeben, „TSUNAMI total“ die Werte, die die Standard-Anwendung von TSUNAMI unter Berücksichtigung der impliziten und expliziten Beiträge liefert, und „TSUNAMI expl.+corr.“ die Werte aus der oben beschriebenen neuen Berechnungssequenz, denen die expliziten Sensitivitäten aus TSUNAMI zugrunde liegen, und deren implizite Anteile durch direkte Störung der nicht-abgeschirmten Wirkungsquerschnitte berechnet werden.

Die Balken für einige bzgl. impliziter Effekte irrelevanter Reaktionen sind in Abb. 5.48 abgeschnitten. Die impliziten Anteile treten erwartungsgemäß für den Einfangquerschnitt und den elastischen Streuquerschnitt von U-238 deutlich zutage, in geringerem Umfang auch für den elastischen Streuquerschnitt von H-1 und O-16. Besondere Beachtung ist

den Werten für den elastischen Streuquerschnitt von U-238 zu schenken, die in Abb. 5.48 zusätzlich vergrößert dargestellt sind. Hier zeigt sich ein deutlicher Unterschied zwischen den totalen Beiträgen aus TSUNAMI und der neuen Berechnungssequenz, wobei letztere wesentlich geringere Abweichungen zum Referenzwert aus TSUNAMI-CE liefert.

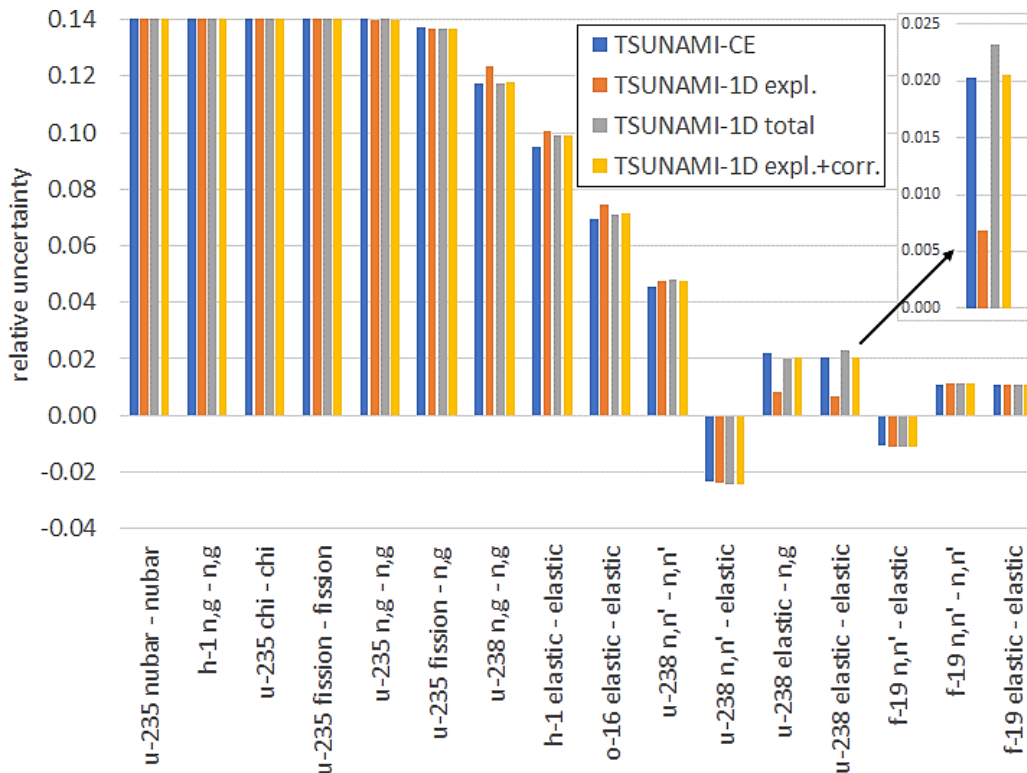


Abb. 5.48 Unsicherheits-"Breakdown" für den Multiplikationsfaktor der kritischen Anordnung LEU-SOL-THERM-002 (Case 1)

Der Einfluss der impliziten Anteile wird in den folgenden Abbildungen noch deutlicher, in denen die jeweiligen Sensitivitätsprofile dargestellt sind. Einen generellen Eindruck vermittelt Abb. 5.49, die das Sensitivitätsprofil bzgl. des Einfangquerschnitts von U-238 darstellt. Der Unterschied zwischen expliziten und totalen Sensitivitäten ist deutlich erkennbar. In diesem Fall stimmen die sich aus TSUNAMI und der neuen Berechnungssequenz ergebenden totalen Sensitivitäten sehr gut miteinander und mit denen aus TSUNAMI-CE überein; dies ist in dem gezeigten Ausschnitt für zwei Resonanzen verdeutlicht. Anders verhält es sich bei dem Sensitivitätsprofil bzgl. des elastischen Streuquerschnitts von U-238, siehe Abb. 5.50. Hier ist anhand des Ausschnitts sichtbar, dass sich die totalen Sensitivitäten aus TSUNAMI und der neuen Berechnungssequenz deutlich unterscheiden, und die neue Berechnungssequenz eine bessere Übereinstimmung mit

TSUNAMI-CE ergibt, was die Befunde für den Unsicherheits-„Breakdown“ in Abb. 5.48 erklärt.

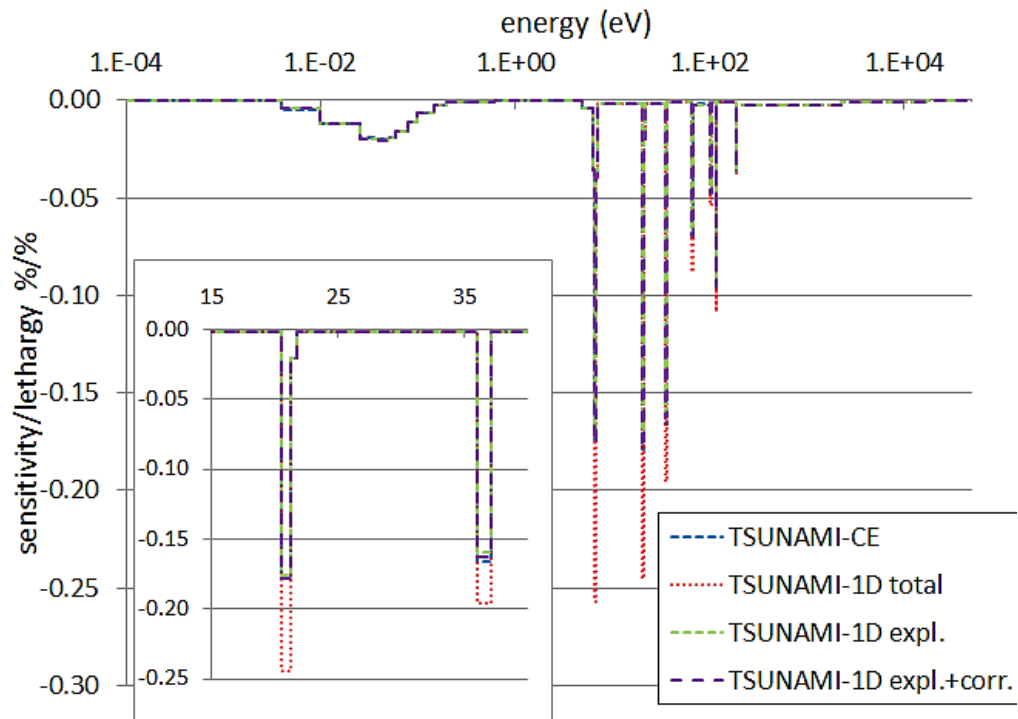


Abb. 5.49 Sensitivität des Multiplikationsfaktors von LEU-SOL-THERM-002 (Case 1) bzgl. des U-238-Einfangquerschnitts

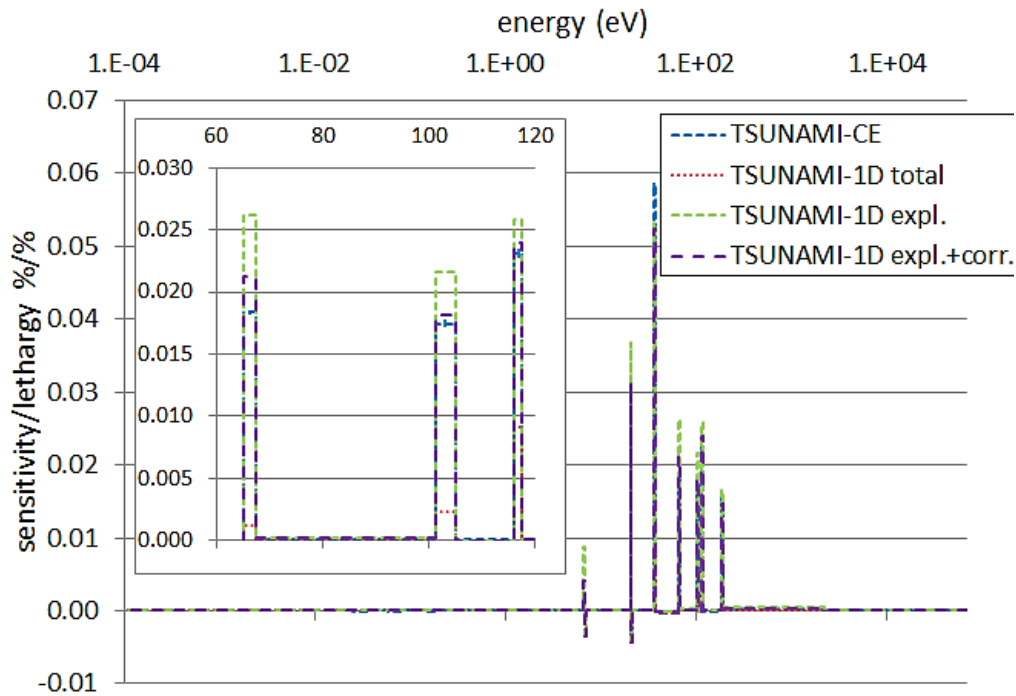


Abb. 5.50 Sensitivität des Multiplikationsfaktors von LEU-SOL-THERM-002 (Case 1) bzgl. des elastischen U-238-Streuquerschnitts

Sollen in S/U-Analysen neben den Unsicherheiten der Wirkungsquerschnitte auch die Unsicherheiten in den technologischen Parametern berücksichtigt werden, ist zu beachten, dass auch die Unsicherheiten der technologischen Parameter Einfluss auf die Resonanzselbstabschirmungsrechnungen haben können und damit analog zur gerade geführten Diskussion ebenfalls zu impliziten Effekten führen. Aus diesem Grund wird die Variation technologischer Parameter in Unsicherheitsanalysen mit Codes wie z. B. dem GRS-Code SUnCISTT /BEH 14/ oder dem SCALE-Modul SAMPLER vor der Resonanzselbstabschirmungsrechnung durchgeführt.

Um nun in S/U-Analysen unter Beteiligung von XSUSA auch Unsicherheiten in technologischen Parametern berücksichtigen zu können, bedarf es folglich einer entsprechenden Bestimmung dieser weiteren impliziten Effekte bzw. der sich daraus ergebenden Korrekturen für die Variationen der abgeschirmten Wirkungsquerschnitte in XSUSA. Sie können auf analoge Weise zur eben beschriebenen Methodik ermittelt werden. In diesem Fall sind dann ausgehend von der nominellen Situation entsprechende zusätzliche Resonanzselbstabschirmungsrechnungen mit einzeln variierten technologischen Parametern durchzuführen.

Die konkrete Umsetzung des oben beschriebenen Verfahrens erfolgte in Form eines eigenständigen Software-Moduls, welches dann die Bestimmung der impliziten Effekte bzw. der notwendigen Korrekturen für das System XSUSA/SCALE übernimmt. Dieses Modul, für welches der GRS-Arbeitsname DIMPLES (*determining implicit effects of self-shielded XS*) gewählt wurde, wurde in erster Linie als eigenständig lauffähig in der Programmiersprache Python implementiert (*Stand alone*-Variante). Es ist aber auch vorgesehen, dass es in den GRS-Code SUnCISTT direkt eingebunden und von diesem während der Laufzeit angesteuert und ausgeführt werden kann. Eine schematische Darstellung des Ablaufschemas der *Stand alone*-Variante ist in Abb. 5.51 wiedergegeben.

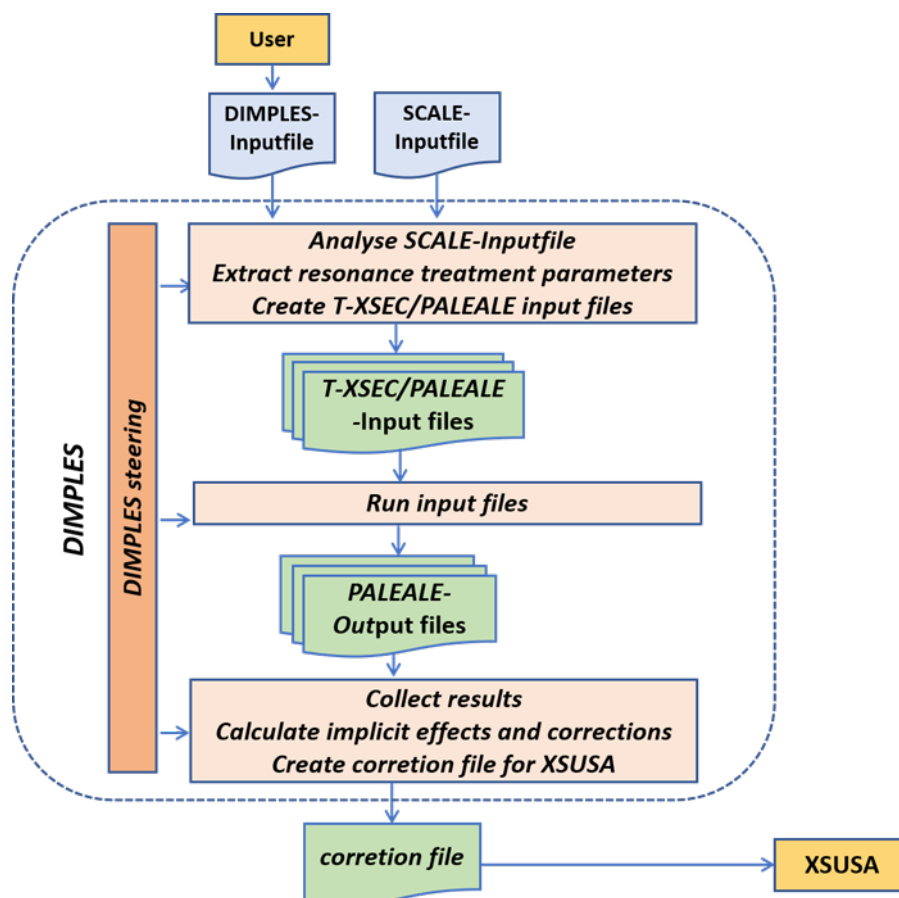


Abb. 5.51 Schematischer Programmablauf des Moduls DIMPLES

Mit den notwendigen Angaben des Anwenders bzw. mit den von SUnCISTT bereitgestellten Informationen erstellt DIMPLES eigenständig die notwendigen Eingabedaten für die Resonanzselbstabschirmungsrechnungen mit einzeln variierten Parametern und führt diese aus. Für die Resonanzselbstabschirmungsrechnungen wird das SCALE-Modul T-XSEC in Verbindung mit dem Modul PALEALE genutzt. Letzteres dient dabei dem einfachen Auslesen der mit T-XSEC erzeugten abgeschirmten Wirkungsquer-

schnittsbibliotheken und wird im selben Eingabedatensatz aufgerufen. Die damit erzeugten Ausgabedaten enthalten als Resultat die Werte der selbstabgeschirmten Wirkungsquerschnitte, welche mit den einzeln variierten Parametern erzeugt wurden, und aus welchen die Korrekturen für die Variationen der abgeschirmten Wirkungsquerschnitte in XSUSA abgeleitet werden können.

Um die Funktionsweise von DIMPLES zu demonstrieren wurde eine Brennstabzelle mit den geometrischen Abmessungen eines typischen 18×18 -Druckwasserreaktor-Brennelements und UO_2 -Brennstoff mit 4 % U-235 Anreicherung betrachtet und exemplarisch Pellet- sowie der Brennstabradius (= Claddingaußenradius) als unsichere technologische Parameter angenommen. Die Abb. 5.52 und Abb. 5.53 zeigen Beispiele der resultierenden abgeschirmten Wirkungsquerschnitte aus den mit DIMPLES durchgeführten Resonanzselbstabschirmungsrechnungen mit einzeln variierten Radien und unter Verwendung der im SCALE-Paket enthaltenen 56-Gruppen-Wirkungsquerschnittsbibliothek basierend auf ENDF/B-VII.1. Zusätzlich zeigen die Abbildungen Beispiele der Wirkungsquerschnittsänderungen in einzelnen Energiegruppen, woraus sich ein (weitgehend) linearer Zusammenhang mit den jeweiligen Änderungen der technologischen Parameter ergibt. Dieser lineare Zusammenhang dient dann zur Korrektur der variierten abgeschirmten Wirkungsquerschnitte in XSUSA.

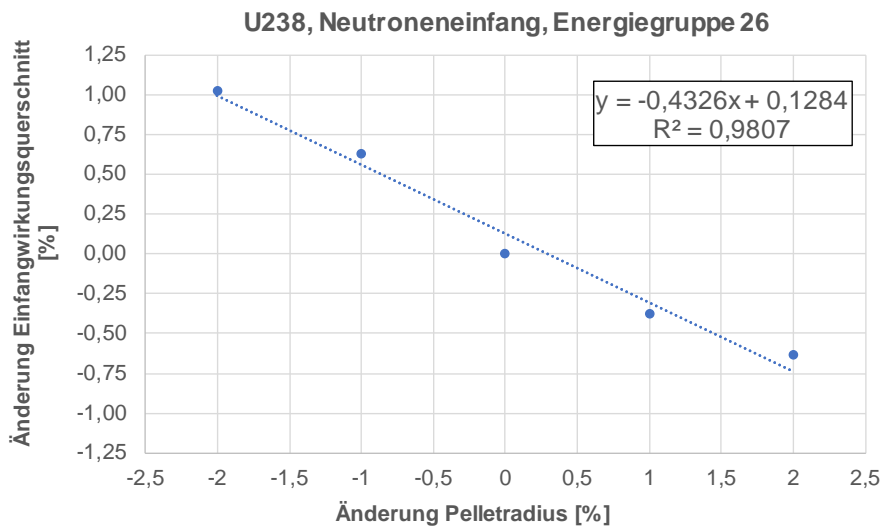
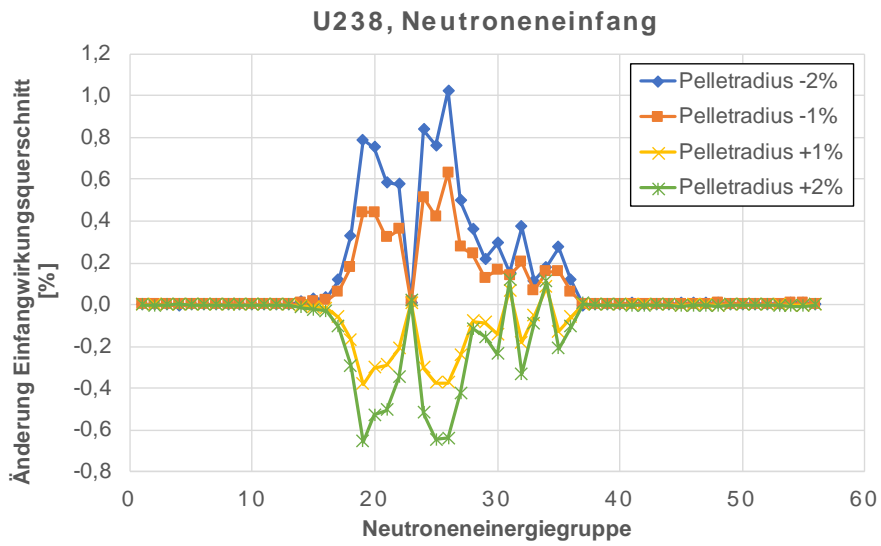
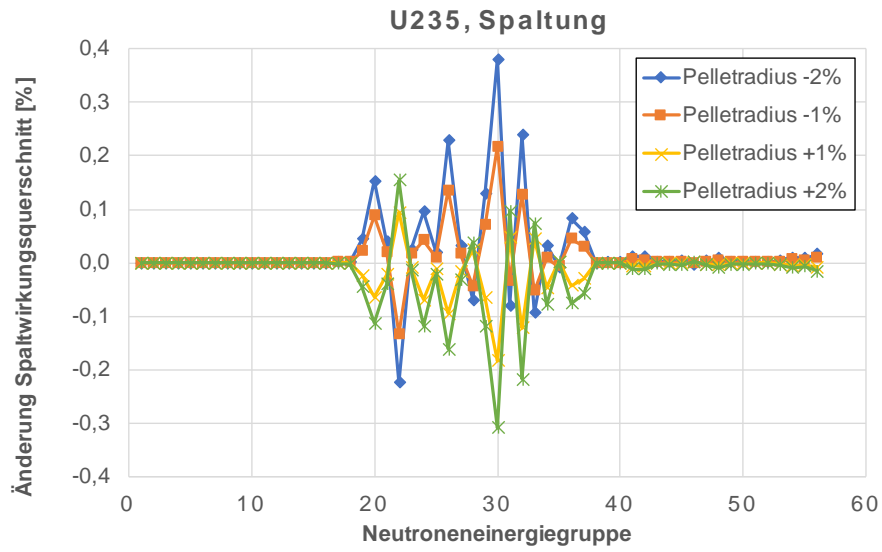


Abb. 5.52 Wirkungsquerschnittsänderungen aufgrund von Pelletradiusänderung

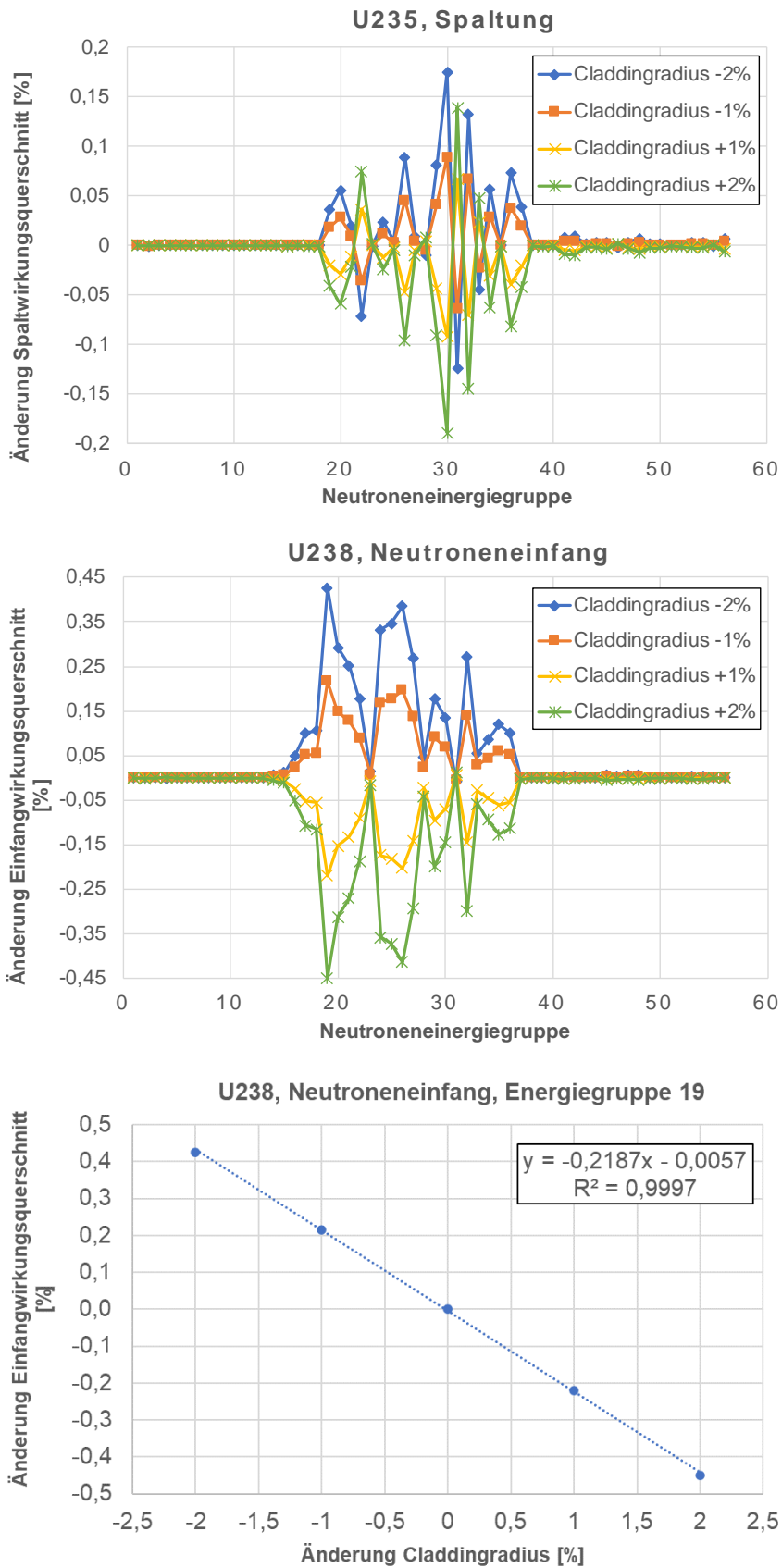


Abb. 5.53 Wirkungsquerschnittsänderungen aufgrund von Claddingradiusänderungen

5.7 Unsicherheitsanalysen zu Reaktortransienten

Die im Vorhaben RS1536 /ZWE 18/ begonnenen Untersuchungen zum Einfluss von Unsicherheiten nuklearer Wirkungsquerschnittsdaten auf Ergebnisunsicherheiten von Reaktortransienten wurden fortgesetzt. Hierzu wurde als Modellreaktor erneut der TMI-1 Minikern aus *Phase II* des LWR-UAM Benchmarks (vgl. Kap. 4.2) verwendet. Zur Modellierung charakteristisch unterschiedlicher Transientenverläufe innerhalb der Stichprobe, wurde in diesem Fall eine Reaktivitätszufuhr von nominal 0,97 \$, also knapp unterhalb des prompt kritischen Zustands, gewählt. Dafür wird das im Kern zentral angeordnete AgInCd-Steuerelement vom vollständig eingefahrenen Zustand innerhalb von 10 s um 60 cm aus dem Kern ausgefahren und anschließend, innerhalb der nächsten 20 s, wieder in den Kern eingefahren. Der Ausgangszustand entspricht dem Nulllast-Heiß Zustand mit einer anfänglichen Leistung von 0,1409 MW.

Für das UO₂-Brennelement und für den radialen Reflektor wurden 1.000 variierte, über thermohydraulische Rückwirkungsdaten parametrisierte Wirkungsquerschnittsbibliotheken verwendet /ZWE 18/. Diese basieren auf Spektralrechnungen mit T-NEWT aus dem SCALE 6.1-Programmpaket und auf der Variation der zugrundeliegenden mikroskopischen Wirkungsquerschnitte mit der XSUSA-Methodik. In dieser Studie wurde für die 1.000 Transientenrechnungen der Stichprobe das gekoppelte NK/TH-Codesystem DYN3D-ATHLET verwendet. In jeder Rechnung aus der Stichprobe erfolgt vor der zeitabhängigen Rechnung zunächst eine Ermittlung der kritischen Borkonzentration, damit jede Transiente vom kritischen Zustand startet. Aufgrund der variierten Wirkungsquerschnittsdaten ergibt sich für jede der 1.000 Rechnungen eine andere kritische Borkonzentration. Der Mittelwert der Stichprobe ergibt sich zu 1.252 ppm mit einer Standardabweichung von 56 ppm. Zudem wurde eine Transientenrechnung mit nominalen, also nicht-variierten Wirkungsquerschnitten durchgeführt. Die kritische Borkonzentration dieser Rechnung ist 1.251 ppm.

Abb. 5.54 zeigt den Verlauf der Leistung für die nominale Rechnung und den Mittelwert, den Median und das einseitige, obere (95 %, 95 %) Wilks Toleranzlimit der Stichprobe. Die Leistung der nominalen Rechnung erreicht ein Maximum von 15,99 MW. Die Stichprobe zeichnet sich durch Rechnungen mit charakteristisch unterschiedlichen Verläufen aus: Einige Rechnungen zeigen eine prompte Überkritikalität und somit hohe Leistungsspitzen, die anderen Rechnungen zeigen verzögert überkritisch und haben deswegen nur eine moderate Leistungszunahme. Die prompt überkritischen Fälle führen zu einer schiefen Verteilung der Leistung. Dies zeigt sich zum Beispiel an dem deutlich höheren

Maximum des Mittelwerts mit 38,36 MW im Vergleich zum Maximum des Medians mit 16,7 MW. Die Annahme einer Normalverteilung für die gesamte Problemzeit ist nicht gültig.

Aus diesem Grund wurde die Stichprobe mit dem verteilungsfreien, einseitigen, oberen (95 %, 95 %) Wilks Toleranzlimit anstatt mit einem symmetrischen Unsicherheitsintervall basierend auf Standardabweichungen ausgewertet. Das einseitige, obere (95 %, 95 %) Wilks Toleranzlimit schließt mit 95 % statistischer Konfidenz 95 % der Rechnungen ein /KRZ 90/. Das ermittelte Wilks Toleranzlimit dieser Stichprobe erreicht ein Maximum von 189,2 MW und ist somit in deutlichem Kontrast zum Maximum der nominalen Rechnung.

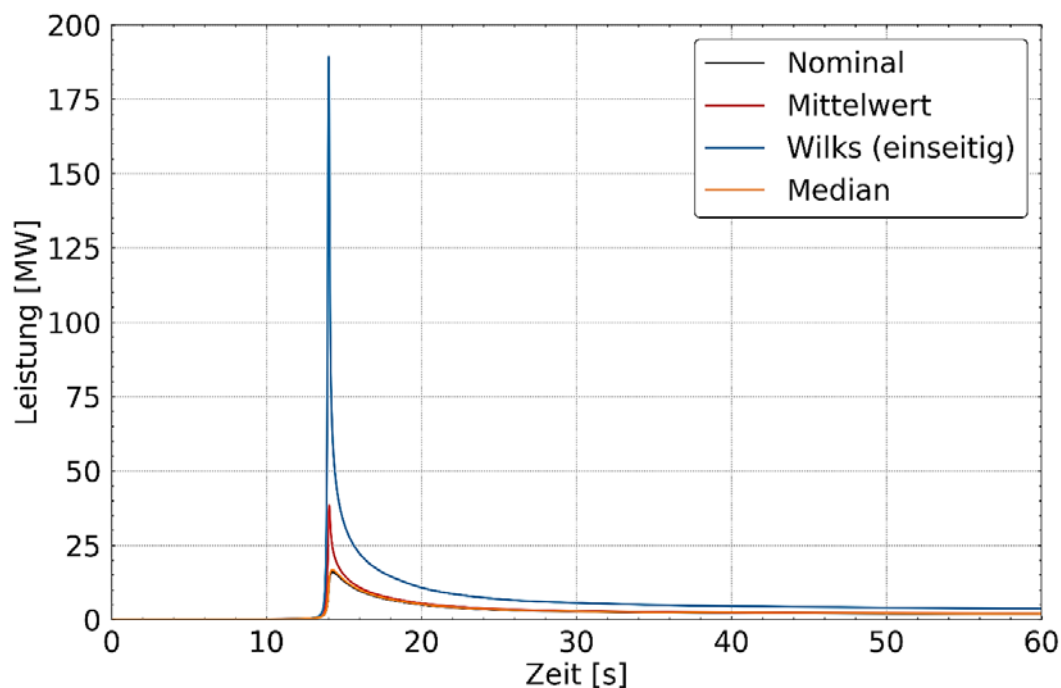


Abb. 5.54 Einfluss der Unsicherheiten nuklearer Wirkungsquerschnittsdaten auf den Leistungsverlauf einer 0,97 \$ Transiente im TMI-1 Minikern

Für ausgewählte Isotope und Reaktionen werden in Abb. 5.55 multiple quadrierte Korrelationskoeffizienten R^2 (vgl. Kap. 5.5) mit den entsprechenden Konfidenzintervallen und Signifikanzbändern gezeigt. Während des Ausfahrens des Steuerstabs liefert die Unsicherheit der U-235 Neutronenausbeute den Hauptbeitrag zur Unsicherheit der ermittelten Leistung. Ab ca. 11,5 s dominieren die Unsicherheiten der elastischen und inelastischen Streuung von U-238 die Unsicherheit der Leistung. Der hohe Beitrag der elastischen Streuung zur Ergebnisunsicherheit wird dabei durch die Korrelation zur inelastischen Streuung verursacht /AUR 17/. Die Beiträge der Unsicherheit des U-238 Neutroneneinfangs und der Unsicherheit des U-235 Spaltspektrums zur Ergebnis-

unsicherheit sind gering. Zum Zeitpunkt der maximalen Leistung ist bei allen R^2 -Verläufen, jedoch insbesondere bei den Streuquerschnitten von U-238, ein Minimum zu erkennen. Diese Minima deuten an, dass zu diesem Zeitpunkt die Unsicherheit der Leistung durch nicht-lineare Effekte beeinflusst wird. Diese Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse zeigte, dass bei einer Reaktivitätstransiente mit einer Reaktivitätszufuhr knapp unterhalb des prompt kritischen Zustands die Unsicherheiten in den Wirkungsquerschnittsdaten einen erheblichen Einfluss auf das berechnete reaktordynamische Verhalten des Kerns haben. Einige Fälle aus der Stichprobe erreichen den prompt kritischen bzw. überkritischen Zustand und damit hohe Reaktorleistungen.

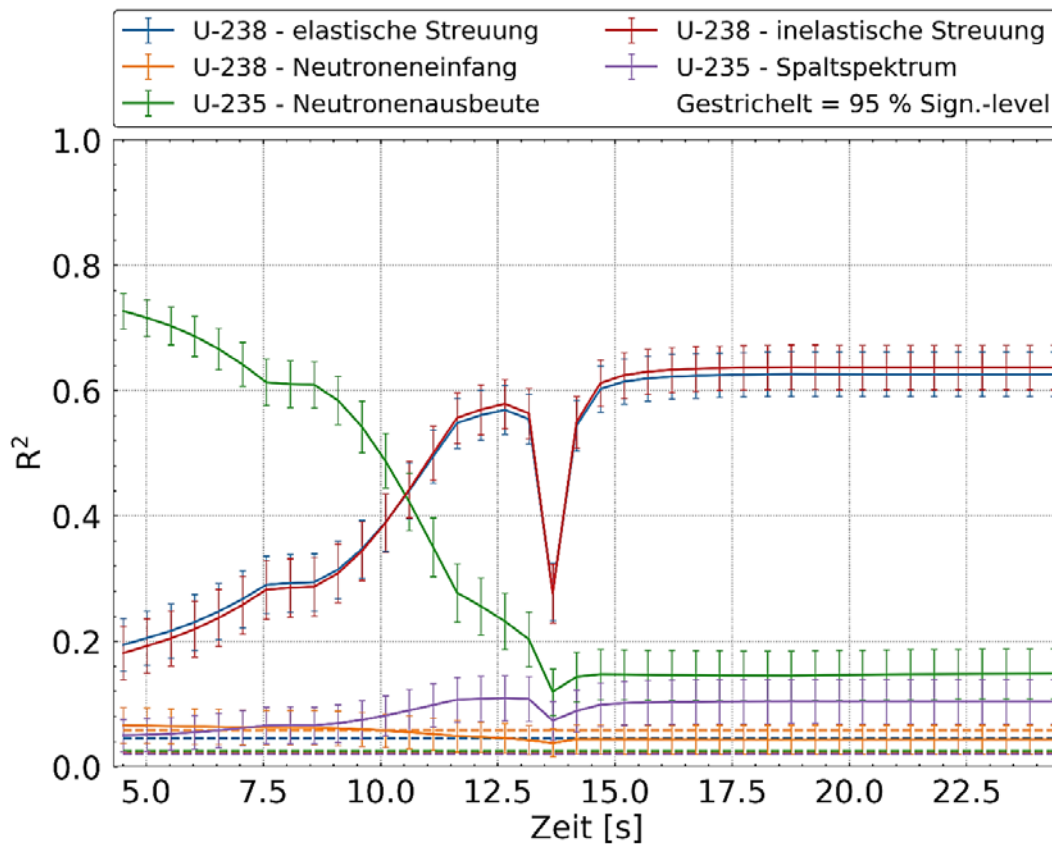


Abb. 5.55 Nuklidreaktionen die Hauptbeiträge zur Ergebnisunsicherheit der Leistung darstellen

6 AP 4: Überprüfung der nuklearen Berechnungskette im Hinblick auf *Accident Tolerant Fuels*

6.1 Einführung

Bereits seit der Kernschmelze 1979 in Harrisburg (TMI-2), USA, und erheblich verstärkt nach der Havarie des japanischen Kernkraftwerks Fukushima Daiichi im Jahr 2011 gibt es weltweit umfassende Bestrebungen, Kernbrennstoffe zu entwickeln, die unter Stör- und Unfallbedingungen eine erhöhte Widerstandsfähigkeit gegen Oxidation oder Schmelze aufweisen /ZIN 14/. Unter dem Oberbegriff der sog. *Accident-Tolerant Fuels* (ATF), die v. a. in der US-amerikanischen Literatur auch als *Advanced Technology Fuels* referenziert werden, versteht man eine Vielzahl neuer, vom herkömmlichen Uran-dioxid-Pellet in Zirkonium-basiertem Hüllrohr abweichender Brennstoffkonzepte, die diesen Anforderungen gerecht werden sollen. Sie reichen von vergleichsweise geringfügigen Modifikationen des bekannten Brennstabs wie dünnen Beschichtungen aus Chrom auf dem Zirkonium-basierten Hüllrohr bis hin zu völlig neuen Materialien wie Uransilizid als Brennstoff oder Eisen-Chrom-Aluminium (FeCrAl) oder Siliziumcarbid (SiC) als Hüllrohrmaterial. Mittlerweile befinden sich weltweit erste Teststäbe verschiedener Konzepte in mehreren kommerziellen Kernkraftwerken im Probetrieb /WNN 18/, /WNN 19a/, /WNN 19b/, /WNN 19c/, /WNN 19d/.

Neben vielen anderen Aspekten haben diese Änderungen Auswirkungen auf die neutronenphysikalischen Eigenschaften der eingesetzten Brennstoffe gegenüber den wohl-bekannt Standardmaterialien /YOU 16/. Daher hat die GRS die Eignung der Teile ihrer nuklearen Berechnungswerkzeuge /SCH 18/ mit Bezug zur Neutronenphysik für ausgewählte, repräsentative ATF-Konzepte überprüft. Dies betrifft externe ebenso wie selbst entwickelte Rechenverfahren sowie deren Kopplungen. Als Auswahlkriterien wurden einerseits die kurzfristige Einsatzreife jeweiliger Konzepte und andererseits die wissenschaftlich-technische Herausforderung bei der Modellierung z. B. aufgrund spezifischer geometrischer Heterogenitäten herangezogen.

Rechenverfahren

Der neutronenphysikalische Teil der GRS-Kernsimulationskette /SCH 18/ mit Wirkungsquerschnittsprozessierung und Neutronenkinetik sowie gekoppelter neutronenphysikalisch-/thermohydraulischer Berechnungsmethoden ist gut etabliert und für Leichtwasser-

reaktorsysteme mit quadratischen oder sechseckigen Brennelementen mit niedrig angereichertem Uranoxidbrennstoff und Hüllrohrmaterial auf Basis von Zirkoniumlegierungen (UO_2/Zr) validiert. Dabei werden auch externe Werkzeuge eingesetzt, darunter u. a. verschiedene Berechnungssequenzen aus dem SCALE-Programmsystem /REA 18/ und der Monte-Carlo-Code Serpent /LEP 15/.

Die Entwicklung verschiedener ATF-Konzepte führt neue Elemente und teilweise neue strukturelle Formen in die Brennstoffe ein, wodurch neue Anforderungen an die nukleare Daten- und Querschnittsverarbeitung ins Spiel kommen. Während eine generelle Anwendbarkeit moderner Codes und nuklearer Daten auf ATF erwartet werden kann, ist für deren Verwendung im Bereich der nuklearen Sicherheitsbewertung eine belastbare Verifikation und Validierung der Berechnungsergebnisse unabdingbar. In der Regel wird dies durch Berechnung, Analyse und Bewertung geeigneter Experimente, z. B. kritischer Benchmark-Experimente gewährleistet, was jedoch von der Verfügbarkeit ausreichend geeigneter Experimente abhängig ist. Als zweite Wahl können Vergleichsrechnungen mit verschiedenen, möglichst unabhängigen Codesystemen das Vertrauen in die Zuverlässigkeit einer Analyse erhöhen.

In diesem Zusammenhang bewertet die GRS die Anwendbarkeit seiner neutronenphysikalischen Rechenkette auf verschiedene ATF-Konzepte, auch anhand von Konsistenz- und Plausibilitätsprüfungen. Dazu wurden in der vorliegenden Arbeit verschiedene Berechnungssequenzen des SCALE 6.2.3¹-Programmsystems auf generische ATF-Modellsysteme angewendet, einschließlich Brennstab- und Brennelement-Modelle. Es wurden verschiedene ENDF/B-VII.1-basierte Wirkungsquerschnittsbibliotheken in 56 und 252 Energiegruppen verwendet, wie sie mit SCALE ausgeliefert wurden. Zu Vergleichszwecken wurde auch die ältere ENDF/B-VII.0-basierte Bibliothek in 238 Energiegruppen verwendet. Die Rechnungen umfassen statistische (CSAS5) und deterministische (NEWT) k_{eff} -Berechnungen, Wirkungsquerschnittsprozessierung (NEWT), Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen (TSUNAMI) sowie Abbrand- und Aktivierungsrechnungen (TRITON). Darüber hinaus wurde eine Reihe kritischer Benchmark-Konfigurationen modelliert und eine Überprüfung auf ihre Eignung zur stringenten Validierung

¹ Zum Zeitpunkt der abschließenden Berichterstellung war bereits die Version 6.2.4 des SCALE-Pakets aktuell. Weitergehende Untersuchungen mit dieser neuen Version wurden im Rahmen dieses Vorhabens nicht systematisch durchgeführt. Da es sich bei diesem Versionsschritt lediglich um Fehlerkorrekturen einzelner Module handelt, ist die grundsätzliche Aussage der vorliegenden Arbeiten im Hinblick auf SCALE 6.2 nicht in Frage gestellt.

eines ausgewählten ATF-Konzepts unter Verwendung einer generischen Eisen-Chrom-Aluminium-Beschichtung (FeCrAl) unternommen (TSUNAMI-IP).

Als davon unabhängiges Berechnungssystem wurde der Monte-Carlo-Code Serpent mit seinen im Lieferumfang befindlichen ENDF/B-VII.0-basierten CE Wirkungsquerschnittsdaten für k_{eff} -Berechnungen und die Querschnittsverarbeitung als unabhängiges Überprüfungswerkzeug verwendet. Serpent wird routinemäßig in der nuklearen Simulationskette der GRS eingesetzt /SCH 18/.

Vergleichende Abbrand- und Aktivierungsrechnungen wurden mit dem GRS-eigenen Rechenverfahren MoTive /HAN 19/ durchgeführt. Der GRS-Kernsimulator KMACS /ZIL 18b/ wurde ebenfalls anhand eines bekannten Benchmark-Systems /HOR 18/ (vgl. Kap. 3.2) erprobt, das zu diesem Zweck durch einige ATF-Komponenten modifiziert wurde.

Speziell zu Systemen mit doppelter Heterogenität, wie z. B. TRISO-Partikel in inerter Matrix in Pelletform, wurden Untersuchungen mit dem GRS-eigenen Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysewerkzeug XSUSA /ZWE 09/ durchgeführt.

6.2 Vergleichende Analysen ausgewählter ATF-Konzepte gegenüber dem Standardsystem

6.2.1 Vorbereitende Arbeiten zur Sondierung

Durch eine Recherche in aktuellen Publikationen wurden relevante ATF-Konzepte identifiziert und zusammengestellt. Entsprechende alternative Materialien oder Materialmodifikationen für den Kernbrennstoff selbst (Pellets) sowie die Hüllrohre wurden gesichtet, wobei der Bericht *State-of-the-Art Report on Light Water Reactor Accident-Tolerant Fuels* /BIS 18/ der OECD-NEA, Stand 2018, mit seinem Literaturverzeichnis eine maßgebliche Quelle darstellte. Wesentliche chemische Elemente und Komponenten dieser ATF-Konzepte, welche in dem bisherigen Standardsystem, UO₂-Brennstoff in Hüllrohren aus Zirkonium-basierten Legierungen (UO₂/Zr), keine Rolle spielen, wurden daraus erarbeitet. Neu sind v. a. die Isotope der Elemente Eisen (Fe), Chrom (Cr), Aluminium (Al) und Silizium (Si), sowie in geringerem Umfang vorkommend auch weitere Elemente wie Molybdän (Mo) und Kohlenstoff (C). Weiterhin werden Anordnungen mit höherer Heterogenität sowohl im Brennstoff als auch im Hüllrohr als in den bisherigen Standardkonzepten diskutiert.

Folgende wesentliche Herausforderungen an die bestehende neutronenphysikalische Rechenkette der GRS wurden daraus identifiziert:

- die Verwendung und Etablierung von Wirkungsquerschnitten von Materialien, die bislang weniger gut qualifiziert sind als die der Standardmaterialien UO_2 und Zirkonium,
- die Prozessierung von unterschiedlichen Wirkungsquerschnitten für heterogene Hüllrohre welche aus mehreren Schichten bestehen (Coating, Multi-Layer) mit Standardverfahren v. a. in Bezug auf Energie-Gruppendarstellung und Resonanz-Selbstabschirmung, sowie
- die Prozessierung von homogenisierten Wirkungsquerschnitten von (z. T. mehrfach) heterogenen Brennstoff-Systemen, z. B. Coated Particles (TRISO) in inerter Matrix in Pelletform, diese in Brennstäben in wassermoderierter LWR-Brennelement-Geometrie.

Übergeordnetes Ziel der Untersuchungen ist die Durchführung von Testrechnungen im Vergleich zu Experimenten, anderen Rechenverfahren (Rechen-Benchmarks), sowie Wirkungsquerschnitten in unterschiedlicher Energie-Darstellung, im Hinblick auf Übereinstimmung, Konsistenz und Plausibilität gegenüber physikalischen Zusammenhängen und Randbedingungen.

Zunächst wurden für eine umfangreiche Reihe von Brennstoff-/Hüllrohr-Kombinationen, welche aus der Literaturrecherche resultieren, Parameterstudien zur Reaktivität auf Basis eines standardisierten Stabzellenmodells (vgl. Kap. 6.2.2) durchgeführt. Diese Studien zeigen, je nach Brennstoffdichte und Neutronenabsorptionsvermögen der Hüllrohrmaterialien, plausible Ergebnisse: Je höher das Neutronenabsorptionsvermögen der beteiligten Elemente (z. B. Fe, Cr, ...) desto niedriger der resultierende infinite Multiplikationsfaktor k_{inf} des Stabzellensystems. Auch die Größenordnungen der Differenzen liegen in einem nach Expertenschätzung plausiblen Wertebereich.

In Abb. 6.1 sind als Voruntersuchung zu Sondierzwecken errechnete infinite Multiplikationsfaktoren k_{inf} für infinite Stabzellengitter aus Brennstäben gemäß verschiedenen ATF-Konzepten dargestellt. Die Konzepte sind grundsätzlich /BIS 18/ entnommen und dort näher beschrieben. Für die Kritikalitätsrechnungen wurden unterschiedliche Codes aus dem SCALE-Programmsystem /REA 18/ eingesetzt. Die roten Balken kennzeichnen Monte-Carlo-Rechnungen mit der Sequenz CSAS5 und CE Wirkungsquerschnitten

nach ENDF/B-VII.1, während grün deterministische zweidimensionale Rechnungen mit NEWT und blau wiederum Monte-Carlo-Rechnungen mit CSAS5 darstellen, die letzteren beiden mit Wirkungsquerschnitten nach ENDF/B-VII.1 in 56 Energiegruppen. Für weitere Analysen wurde diese umfangreiche Auswahl der untersuchten Konzepte anhand obenstehender Kriterien näher eingegrenzt, siehe Kap. 6.2.

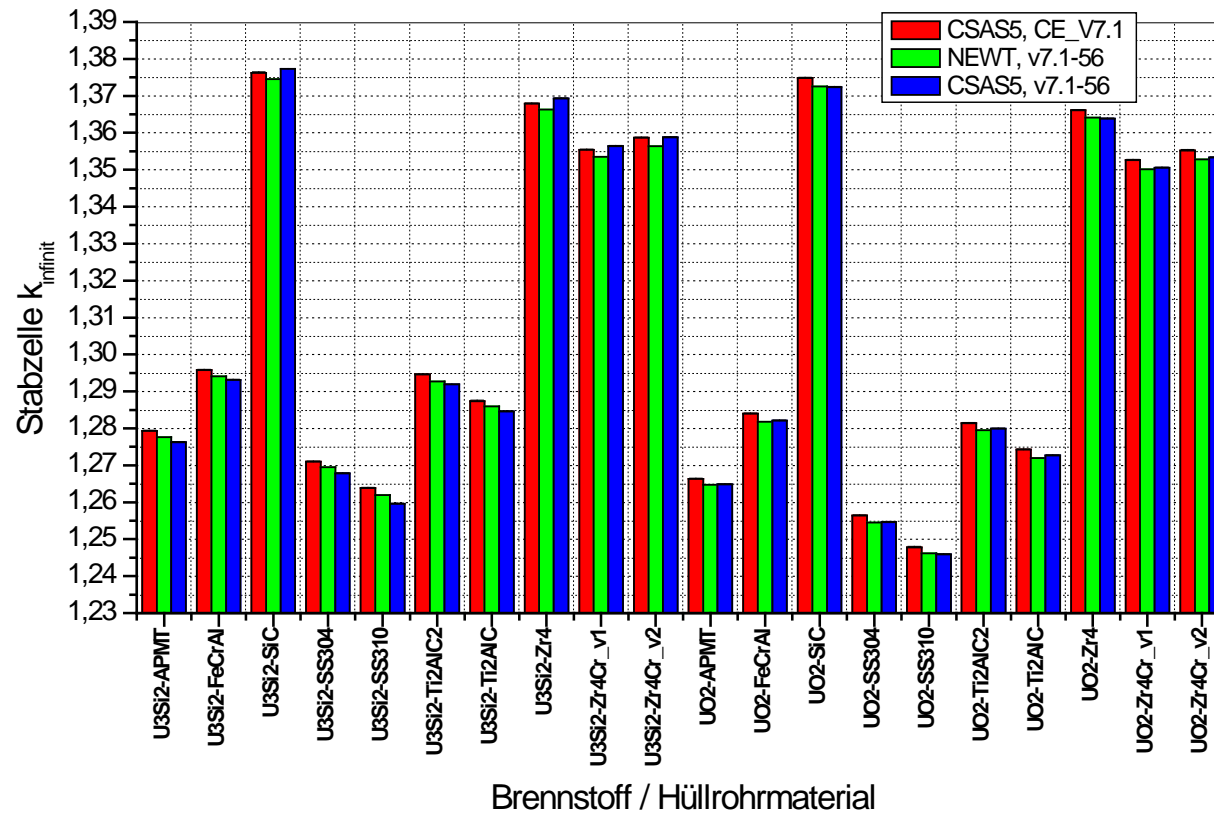


Abb. 6.1 Errechnete Stabzellen-Multiplikationsfaktoren k_{∞} für eine erweiterte Auswahl an ATF-Konzepten

Die Abbildung zeigt, dass für jedes der betrachteten Stabzellensysteme, die mit den unterschiedlichen Berechnungsvarianten erzielten Ergebnisse nahe beisammen liegen. Daraus wird gefolgert, dass eine Eingrenzung der ATF-Konzepte die allgemeine Gültigkeit der getroffenen Aussagen im Hinblick auf die Anwendbarkeit der eingesetzten Rechenverfahren nicht unnötig beschränkt. Monte-Carlo-Rechnungen werden häufig als Referenz betrachtet, da die spektrale Auflösung der Wirkungsquerschnittsdaten feiner ist als in der Gruppendarstellung. Innerhalb des SCALE-Programmsystems wird zudem der deterministische Code NEWT (bzw. die Rechensequenzen T-NEWT und T-DEPL) zur Erzeugung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten z. B. für den Einsatz in nodalen Codes oder einem Kernsimulator verwendet.

In den weiteren Arbeiten wurde eine Auswahl an ATF-Konzepten getroffen und vertieft verfolgt. Diese Arbeiten sind in den anschließenden Unterkapiteln näher ausgeführt.

6.2.2 Betrachtete generische ATF-Modellsysteme

Für die vorliegende Analyse wurde ein standardisiertes Stabzellenmodell definiert. Es wurde für Stabzellenberechnungen und für die Zusammenstellung eines standardisierten Brennelements verwendet. Dabei wurden sechs verschiedene Materialkombinationen untersucht, die als Fall 1 bis Fall 6 bezeichnet werden. Sie umfassen das UO_2/Zr -Standardsystem als Referenz, ein mit Chrom beschichtetes Zr-4-Hüllrohr (Fall 2), ein generisches Eisen-Chrom-Aluminium (FeCrAl)-Hüllrohr (Fall 3), ein generisches Siliziumkarbid-(SiC)-Hüllrohr ohne Liner (Fall 4), und Uransilizid als alternative Brennstoffform in FeCrAl-Hüllrohr (Fall 5). Zusätzlich wurde eine heterogene Brennstoffform modelliert, die TRISO-ähnliche Partikel in einer inerten Matrix umfasst und ein SiC-Hüllrohr unterstellt (Fall 6). Diese Auswahl erfolgte aufgrund der kurzfristig zu erwartenden (Fälle 2 und 3) sowie mittelfristig zu erwartenden (Fälle 4 und 5) Einsatzreife der Konzepte. Langfristig ist auch der praktische Einsatz von Fall 6 vorstellbar. Darüber hinaus wurden die Fälle 2 und 6 aufgrund ihrer gegenüber dem Referenzfall erhöhten strukturellen Heterogenität ausgewählt, da auch diese durch die Rechenkette abgebildet werden können müssen und gegenüber dem Referenzfall eine Herausforderung darstellen.

Es wird bei dem modellierten Brennstoff angenommen, dass er eine Dichte von $10,42 \text{ g/cm}^3$ (95% der theoretischen Dichte) und eine Anreicherung von 4,9% U-235 aufweist. Eine Ausnahme bildet das TRISO-Partikelmodell, bei dem angenommen wird,

dass eine Anreicherung von 9,9% U-235 die reduzierte Gesamtmasse an Uran (qualitativ) kompensiert (s. u.). Tab. 6.1 beschreibt die betrachteten Materialkombinationsfälle.

Tab. 6.1 Materialdefinitionen der betrachteten ATF-Modellfälle.

Fall	Brennstoff	Hülle	Schicht
1 (Referenz)	UO ₂	Zr-4	n/a
2	UO ₂	Zr-4	Cr, 50 µm
3	UO ₂	FeCrAl	n/a
4	UO ₂	SiC	n/a
5	U ₃ Si ₂	FeCrAl	n/a
6	TRISO/SiC	SiC	n/a

Für das Zr-4 wurde die vordefinierte Standardzusammensetzung des SCALE-Programmsystems angenommen. Die Dicke von 50 µm der Chrombeschichtung in Fall 2 wird willkürlich gewählt, und ist im Vergleich zu realen Beschichtungen relativ hoch, um rechnerisch einen signifikanten Effekt der schwach absorbierenden Beschichtung zu beobachten. Um das Moderationsverhältnis für alle sechs Fälle konstant zu halten, wird der Zr-4-Durchmesser in Fall 2 um 100 µm verringert und so der Außendurchmesser des Brennstabs beibehalten, um ein äquivalentes Moderationsverhältnis zu der Referenz-Stabzelle und den anderen Fällen zu erreichen.

Das in den Fällen 3 und 5 aus Eisen-Chrom-Aluminium bestehende Hüllrohr wird generisch als 75% Fe, 20% Cr und 5% Al im Gewicht mit einer Dichte von 7,1 g/cm³ modelliert, während das in den Fällen 4 und 6 aus Siliciumcarbid bestehende Hüllrohr als SiC mit einer Dichte von 2,58 g/cm³ modelliert wird, beides wie durch verschiedene Beiträge in /BIS 18/ vorgeschlagen. Eventuelle Liner-Materialien im SiC wie z. B. in /BIS 18/ beschrieben, werden hier vernachlässigt, da ihr Einfluss auf die neutronenphysikalischen Eigenschaften dieser Hüllrohre als geringfügig eingestuft wird.

Für die Brennelementberechnungen wurde ein repräsentatives generisches 17 x 17-Design mit 25 Führungsrohren verwendet, bestehend aus 263 Standard-Brennstäben (Typ Fall 1), ergänzt durch einen einzigen Brennstab des ATF-Typs an Position 16-16, wobei dieser in zehn gleich flächengroßen Ringzonen („Ringzelle“) modelliert wurde. Alternativ wurde für einige Untersuchungen ein vollständiges ATF-Brennelement ohne Ringzonen verwendet. In einigen weiteren Fällen wurde Sandvik „Kanthal® D Strip“

/SAN 18/ als willkürlich gewählte kommerzielle FeCrAl-Variante modelliert (vgl. Kap. 6.2.7.2), anstatt der oben erwähnten vereinfachten Zusammensetzung, die hier qualitativ gut vergleichbare Ergebnisse liefert. Abb. 6.2 zeigt die untersuchten Modelle der Stabzelle, der Ringzelle und der Brennelemente, während Tab. 6.2 die geometrischen Abmessungen der modellierten Systeme zusammenfasst.

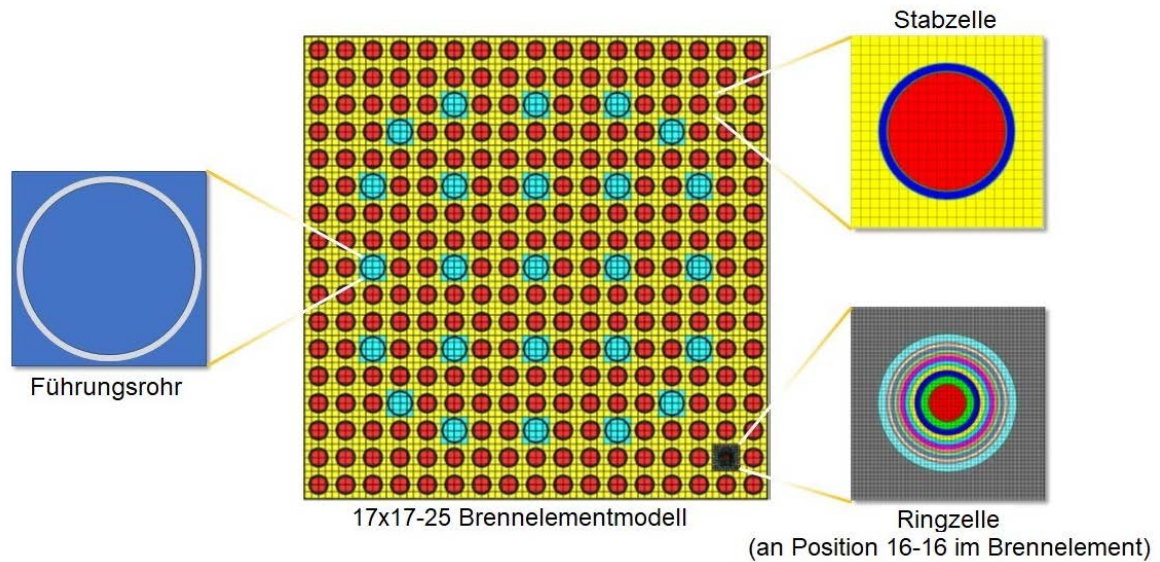


Abb. 6.2 Geometrische Darstellung der verwendeten generischen Berechnungsmodelle für Brennstäbe und Brennelemente mit ATF

Tab. 6.2 Stabzellenabmessungen für unbeschichtete und beschichtete Brennstäbe und Brennelemente

Parameter	Wert [cm] Fälle 1, 3 bis 6 (ohne Beschichtung)	Wert [cm] Fall 2 (mit Beschichtung)
Pelletdurchmesser	0,8192	0,8192
Spaltdurchmesser	0,8356	0,8356
Hüllrohrdurchmesser	0,9490	0,9390
Beschichtung Außendurchmesser	---	0,9490
Führungsrohr Innendurchmesser	0,56134	0,56134
Führungsrohr Außendurchmesser	0,60198	0,60198
Brennstab Mittenabstand (<i>pitch</i>)	1,326	1,326
Brennelement Mittenabstand	22,642	22,642

Alle Berechnungen gehen von heißen Nulleistungsbedingungen aus, d. h. hier einer Brennstofftemperatur von 1.200 K, einer Hüllrohrtemperatur von 600 K und einer mittleren Kühlmitteltemperatur und -dichte von 580 K bzw. 0,723 g/cm³. Eine über den Zyklus gemittelte konstante Absorberkonzentration von 630 ppm Bor wurde im Kühlmittel modelliert.

6.2.3 Eingesetzte Berechnungsverfahren

Für die Berechnung der Modellsysteme sowie der in Kap. 6.2.5 diskutierten kritischen Benchmark-Experimente werden für die vorliegenden Untersuchungen verschiedene Rechensequenzen und auf ENDF/B-VII.1 basierende Wirkungsquerschnittsbibliotheken aus SCALE 6.2.3 verwendet. Es werden CSAS5 mit CE-Wirkungsquerschnittsbibliothek (ce_v7.1_endf) sowie 56 (v7.1-56) und 252 (v7.1-252) Multigruppen-Wirkungsquerschnittsbibliotheken, mit MULTIREGION- und DOUBLEHET-Resonanzbehandlungsoptionen, sowie T-NEWT- und 56- und 252 Multigruppen-Wirkungsquerschnittsbibliotheken angewendet. Letztere wurde auch in einem zweistufigen Verfahren unter Verwendung von T-XSEC und NEWT für die in Kap. 6.2.6 beschriebene Zweigruppen-

Querschnittserzeugung verwendet. Zum Vergleich wurden auch einige Berechnungen mit der auf ENDF/B-VII.0 basierenden Bibliothek mit 238 Energiegruppen durchgeführt. Während die Fälle 3, 4 und 5 hauptsächlich die Wirkungsquerschnitte für Materialien neben dem $\text{UO}_2/\text{Zr-4}$ -System testen, stellen die Fälle 2 und 6 auch erweiterte Anforderungen an die Wirkungsquerschnittsprozessierungsroutinen. Die MULTIREGION-Option von SCALE, die für die Berücksichtigung der Beschichtung in Fall 2 erforderlich ist, wurde dabei aus Konsistenzgründen auf alle betrachteten Stabzellen angewendet, nicht das bei homogenem Hüllrohrmaterial ansonsten übliche LATTICECELL. Das heterogene Brennstoffmodell von Fall 6 besteht aus Pellets mit TRISO-ähnlichen Partikeln in einer Siliziumcarbid-Matrix mit einem Volumenanteil von 44 %. Im SCALE-Modell wurde dafür die Option DOUBLEHET zur Resonanzbehandlung mit der Unteroption MULTIREGION gewählt. SCALE/TSUNAMI wurde verwendet, um Sensitivitätsdaten für die Fälle 1 bis 5 zu erstellen, um deren Korrelationen zu den unten beschriebenen kritischen Benchmark-Experimenten mittels TSUNAMI-IP zu bestimmen (für den doppelt heterogenen Fall 6 ist TSUNAMI derzeit nicht anwendbar). Schließlich wurde die SCALE/TRITON-Sequenz mit der Bibliothek v7.1-56 für die in Kap. 6.2.7 beschriebenen vorläufigen Abbrandrechnungen verwendet.

Serpent wird für unabhängige Vergleichsberechnungen für einige Modellsysteme im Vergleich zu den SCALE-Ergebnissen angewendet. Es wurde ausgewählt, da es einen hochmodernen Monte-Carlo-Code darstellt, der kontinuierliche Wirkungsquerschnitte verarbeiten und über die Kritikalitätssicherheit hinaus problemabhängige, räumlich-homogenisierte und energie-kondensierte Wirkungsquerschnitte für Anwendungen in der Reaktorphysik erzeugen kann. In dieser Arbeit wurde die im Lieferumfang enthaltene Wirkungsquerschnittsbibliothek auf Basis von ENDF/B-VII.0 verwendet. Für den heterogenen Brennstoff des Falls 6 wurde ein explizites, konsistentes Modell mit zufällig verteilten Partikeln durch ein spezielles Skript generiert, das mit dem Code geliefert wurde. Eine Querschnittsansicht des Serpent-Stabzell-Modells sowie der geometrischen Definition der TRISO-Partikel mit Beschichtungen aus Kohlenstoff (C), Siliziumcarbid (SiC) und nochmals Kohlenstoff (C) ist in Abb. 6.3 dargestellt. Modelliert wurde eine Brennstoffdichte von 44 Vol.-% im Pellet, bei einer Partikelanzahl von 1.026.

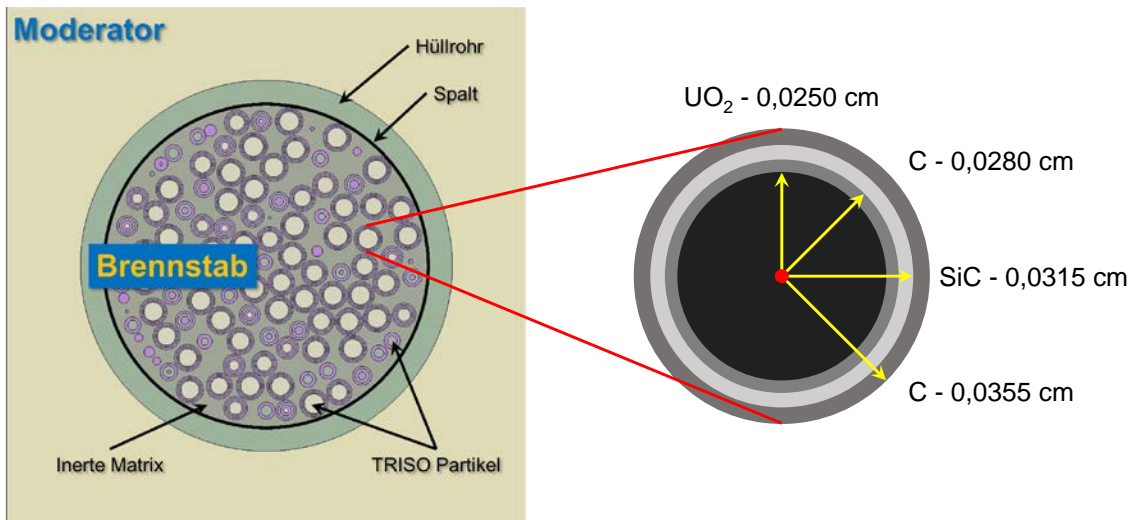


Abb. 6.3 Querschnittsansicht des Serpent-Modells eines beispielhaften heterogenen ATF-Brennstabs mit TRISO-Partikeln in inerter Matrix als Pellet

Links: Pellet-Beschreibung; rechts: Definition der modellierten, sphärischen, dreifach beschichteten TRISO Partikel (*coated particles*).

Die statistische Unsicherheit in k_{inf} bzw. k_{eff} aus der Monte-Carlo-Rechnung (1σ) lag für alle Konfigurationen im Rahmen dieser Studie etwa im Bereich von $\pm 1 \times 10^{-4}$ und wird hier nicht weiter diskutiert.

6.2.4 Ergebnisse des Brennstab- und Brennelementmodells

Zunächst wurden Stabzell-Berechnungen mit SCALE/CSAS5 unter Verwendung verschiedener Bibliotheken durchgeführt, um die Werte von k_{inf} und die Energie der durchschnittlichen Lethargie zu bestimmen, die die Spaltung verursacht (*energy of average lethargy causing fission, EALF*). Die Ergebnisse für k_{inf} sind insgesamt gut zwischen den verschiedenen Bibliotheken vergleichbar. Beispielhaft sind die berechneten Werte basierend auf v7.1-252 in Tab. 6.3 zusammengefasst.

Tab. 6.3 Ergebnisse für k_{inf} und EALF für unbestrahlte ATF-Brennstäbe unter Verwendung von SCALE/CSAS5 und v7.1-252

Fall	k_{inf}	EALF
1 (Referenz)	1,36423	0,654214
2	1,35228	0,666836
3	1,28203	0,746954
4	1,37293	0,658506
5	1,29312	0,905739
6	1,33567	0,119078

Das berechnete k_{inf} für Fall 2 liegt aufgrund der schwachen Neutronenabsorptionseigenschaften der dünnen Chrombeschichtung leicht unter dem Referenzfall, während die Werte für Fall 3 und 5 aufgrund der stärkeren Absorption des FeCrAl-Hüllrohrs deutlich niedriger liegen. Fall 4 zeigt das höchste k_{inf} , da SiC für Neutronen transparenter ist als Zr-4. Fall 6 mit heterogenem Brennstoff mit höherer Anreicherung aber geringerer Gesamt-Urandichte und SiC-Hülle ergibt einen k_{inf} -Wert, der innerhalb des Bereichs der betrachteten Systeme liegt. Die in den Fällen 3 und 5 erhöhten Werte von EALF deuten auf ein etwas härteres Neutronenspektrum gegenüber dem Referenzfall hin, während der deutlich niedrigere Wert in Fall 6 i. W. auf die höhere Anreicherung und damit verringerten Anteil an ^{238}U zurückzuführen ist. Letzterer ist in Fall 5 durch die höhere Gesamt-dichte des U_3Si_2 gegenüber UO_2 ebenfalls relativ leicht erhöht gegenüber dem Referenzfall.

Entsprechende Kritikalitätsrechnungen für ganze Brennelemente im infiniten Gitter mit SCALE/T-NEWT (anstelle von SCALE/CSAS5) und Serpent wurden als Zwischenschritt zu deterministischen Abbrand- und Wirkungsquerschnittsberechnungen durchgeführt. Die erzielten Ergebnisse sind in Tab. 6.4 zusammengefasst.

Tab. 6.4 Ergebnisse der k_{inf} -Berechnungen für unbestrahlte ATF-Brennelemente im infiniten Gitter

Fall	SCALE/ T-NEWT 56G VII.1	SCALE/ T-NEWT 238G VII.0	SCALE/ T-NEWT 252G VII.1	Serpent CE ENDF/B- VII.0
1 (Referenz)	1,37397	1,37238	1,37458	1,37650
2	1,36283	1,36150	1,36342	1,36574
3	1,29030	1,28913	1,29076	1,29366
4	1,38154	1,37992	1,38236	1,38422
5	1,30301	1,30112	1,30319	1,30596
6	1,29604	1,29643	1,29643	1,28907

Aus Tab. 6.4 geht hervor, dass die berechneten Multiplikationsfaktoren für alle Fälle im Allgemeinen ähnlich sind und leicht über den entsprechenden k_{inf} -Werten für die in Tab. 6.3 zusammengefassten Stäbe liegen, mit Ausnahme von Fall 6, bei dem das T-NEWT-Ergebnis mit etwa 4% in k_{inf} deutlich niedriger liegt als im Stabmodell. Die Erklärung für den letztgenannten Befund ist nicht völlig geklärt, könnte aber auf die Querschnittsverarbeitungsroutinen zurückzuführen sein, wahrscheinlich in Kombination mit dem zweidimensionalen Charakter von T-NEWT gegenüber dem dreidimensionalen CSAS5-Modell.

Für alle untersuchten Fälle 1 bis 5 mit homogenem Brennstoff einschließlich des Falles 2 mit beschichtetem Hüllrohr sind die Serpent-Ergebnisse um einige Promille in k_{inf} höher, aber etwa um die doppelte Differenz niedriger als für den heterogenen Fall 6. Dieser Effekt könnte aufgrund methodischer Unterschiede sowohl auf die unterschiedlichen Codes als auch auf die unterschiedlichen Wirkungsquerschnittsbibliotheken und Gruppenstrukturen zurückzuführen sein. Die Modellierung der TRISO-Partikel in Serpent ist explizit, während das Pellet in den SCALE-Modellen homogenisiert vorliegt. Die Differenzen liegen in Anbetracht dessen in einem akzeptablen Bereich.

6.2.5 Kritische Benchmark-Experimente

Zur Validierung der Kritikalitätsrechnungen wurden in der vorliegenden Arbeit insgesamt 353 bereits vollständig modellierte kritische Benchmark-Versuchskonfigurationen der GRS-Validierungsdatenbasis aus dem bekannten *ICSBEP Handbook/NEA 19a* ausgewählt. Diese Konfigurationen entstammen 36 LEU-COMP-THERM (LCT)-Serien und enthalten chemische Elemente, relevant für die Modellfälle 2, 3 und 5, einschließlich

FeCrAl-Ummantelungen, also Eisen, Chrom und Aluminium. Für andere Komponenten als des FeCrAl-ATF-Hüllrohrkonzepts ist in /NEA 19a/ gegenwärtig eine deutlich geringere Anzahl an kritischen Konfigurationen verfügbar. Zusätzlich wurde SCALE/TSUNAMI verwendet, um Sensitivitätsdaten zur Bestimmung von Korrelationen mit den entsprechenden Modellfällen unter Verwendung von TSUNAMI-IP zu erstellen.

Die berechneten k_{eff} -Werte reichen von 0,98492 bis 1,01328, mit einem Durchschnitt von 0,99777 und einer Standardabweichung von 0,00510, was für SCALE 6.2 bei der Berechnung von LCT-Konfigurationen nach Expertenschätzung als plausibel erscheint. Die berechneten Werte für EALF reichen von 0,06140 bis 2,26570 mit einem Durchschnitt von 0,28738 und einer Standardabweichung von 0,35484. Letzteres weist darauf hin, dass die Versuchsreihe i. A. stärker thermalisierte Konfigurationen enthält als die Modellfälle darstellen (vgl. Tab. 6.3), jedoch mit einer recht ungleichmäßigen und verzerrten Verteilung. Wie zu sehen ist, deckt dies den EALF-Bereich der Modellfälle 1 bis 5 ab, der sich von 0,654214 (Fall 1 – Referenz $\text{UO}_2/\text{Zr-4}$) bis 0,905739 (Fall 5 - $\text{U}_3\text{Si}_2/\text{FeCrAl}$) erstreckt, dem aber nicht vollständig entspricht.

In Bezug auf die Anwendbarkeit zur Validierung der ATF, insbesondere für die Fälle mit FeCrAl-Hüllrohren, erschienen viele der Konfigurationen in dem Satz auf den ersten Blick als generell geeignet. Allerdings ergaben nur 16 Konfigurationen einen TSUNAMI-IP-Korrelationskoeffizienten $c_k > 0,8$ für die Fälle 1, 2 und 4; und nur eine Konfiguration (LCT-008-001) erbrachte $c_k > 0,8$ für die Fälle 3 und 5, was wahrscheinlich auf eine begrenzte Anwendbarkeit des Experimentiersatzes hinweist. Eine tiefergehende Analyse, z. B. unter Verwendung zusätzlicher TSUNAMI-IP-Parameter wie g (*little-g*) oder traditionellerer Techniken, könnte künftig zu einem besseren Verständnis der Verwendbarkeit des vorliegenden Benchmark-Sets für eine quantitative Validierung führen. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit konnte dies nicht mehr realisiert werden.

Um die Ergebnisse für verschiedene Bibliotheken detaillierter zu vergleichen, wurden zudem zehn ausgewählte Konfigurationen mit SCALE/CSAS5 unter Verwendung der Bibliotheken `ce_v7.1_endf`, `v7.1-56` und `v7.1-252` berechnet. Die statistische Unsicherheit in k_{eff} aus der Monte-Carlo-Rechnung lag für alle Konfigurationen in der Größenordnung von $\pm 1 \times 10^{-4}$. Die k_{eff} -Ergebnisse für die Bibliothek `v7.1-252` mit CSAS5 und TSUNAMI-3D-K5 sind hier nicht identisch, sondern aus unterschiedlichen Neutronenstatistiken in den jeweiligen Eingabedateien resultierend.

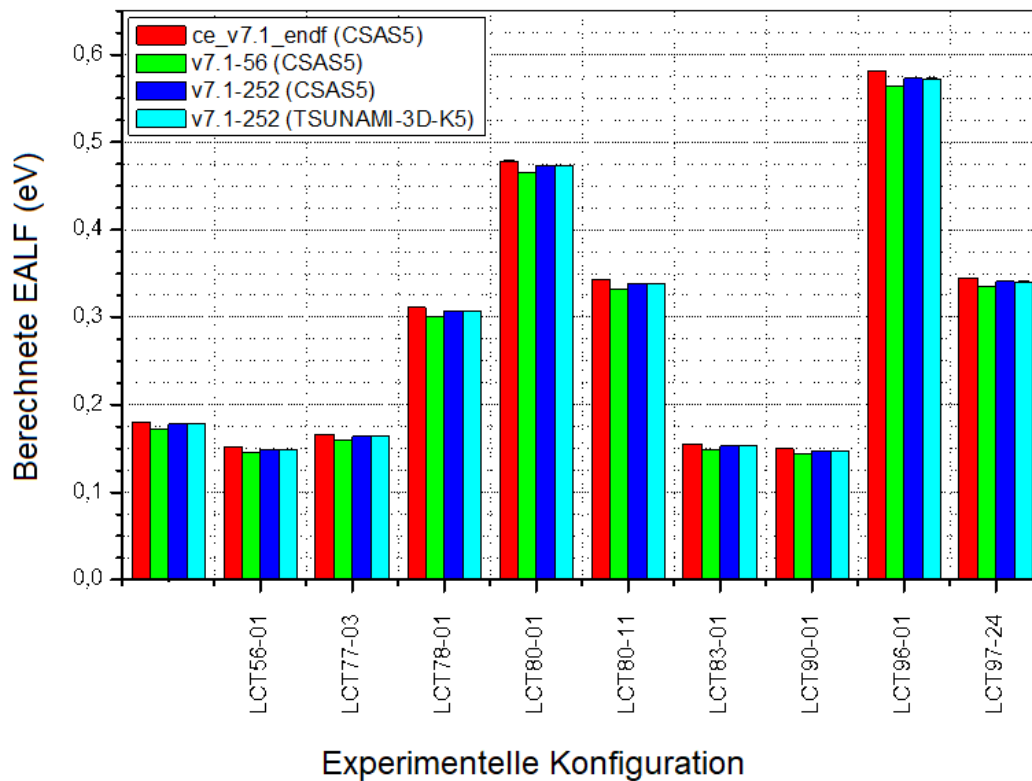


Abb. 6.4 Berechneter k_{eff} für verschiedene experimentelle Konfigurationen unter Verwendung verschiedener Wirkungsquerschnittsbibliotheken

Wie in Abb. 6.4 zu sehen ist, unterscheiden sich die berechneten k_{eff} -Werte für jede betrachtete kritische Konfiguration um 0,001 und weniger. Dies impliziert eine vernünftige bzw. gute Übereinstimmung zwischen den verschiedenen ENDF/B-VII.1 basierten SCALE 6.2.3 Bibliotheken und trägt somit dazu bei, weiteres Vertrauen in die Qualität der Multigruppen-Querschnittsberechnungen aufzubauen, die die Grundlage für weitere Analysen wie Abbrandrechnungen und Querschnittskondensationen unter Verwendung der 56-Gruppen-Bibliothek bilden. Die entsprechenden EALF-Werte (hier nicht abgebildet) zeigen ebenfalls eine gute Übereinstimmung zwischen den Bibliotheken.

6.2.6 Erzeugung von Wirkungsquerschnitten in zwei Energiegruppen

Sowohl SCALE/T-NEWT als auch Serpent wurden eingesetzt, um homogenisierte, kollabierte Zweigruppen-Wirkungsquerschnittsdaten für die Brennelement-Fälle 1 bis 5 im unbestrahlten heißen Zustand zu erzeugen. Für Fall6 wurden diese Wirkungsquerschnitte auch für mit Serpent generiert, während dies in der vorliegenden Version des

SCALE-Programmsystems (Version 6.2.3) aufgrund der doppelten Heterogenität dieses speziellen Falles nicht durchgeführt werden konnte. Als Energiegrenzen wurden willkürlich 10^{-5} bis 5,0 eV für die thermische Gruppe und 5,0 bis 2×10^7 eV für die schnelle Gruppe gewählt.

Serpent bietet die Möglichkeit zur expliziten geometrischen Modellierung der TRISO-Partikel im Pellet. Hier wird die Homogenisierung der Wirkungsquerschnitte in einem zweistufigen Verfahren durchgeführt /LEP 15/. Die homogenisierten Mehrgruppenwirkungsquerschnitte werden mit Hilfe von Standard-MC-Tallies berechnet, dann erfolgt die Kondensation zu Zweigruppenquerschnitten unter Verwendung der unendlichen und der B1-Leckage-korrigierten kritischen Spektren. fasst die berechneten Werte für T-NEWT und verschiedene Wirkungsquerschnittsbibliotheken sowie Serpent zusammen; der obere Wert steht für die schnelle und der untere Wert für die thermische Energiegruppe.

Tab. 6.5 fasst die berechneten Werte für T-NEWT und verschiedene Wirkungsquerschnittsbibliotheken sowie Serpent zusammen; der obere Wert steht für die schnelle und der untere Wert für die thermische Energiegruppe.

Tab. 6.5 Ergebnisse für den Total-Wirkungsquerschnitt in zwei Energiegruppen für unbestrahlte ATF-Brennelemente im Nulllast-Heiß Zustand

Fall	SCALE/ T-NEWT 56G VII.1	SCALE/ T-NEWT 238G VII.0	SCALE/ T-NEWT 252G VII.1	SERPENT 2 ENDF/B-VII.0 CE
1 (Referenz)	0,52629 1,26078	0,52915 1,26490	0,52541 1,26091	0,53777 1,26691
2	0,52725 1,26033	0,53040 1,26441	0,52937 1,26044	0,53872 1,26633
3	0,53704 1,29359	0,54117 1,29759	0,53928 1,29361	0,54819 1,29859
4	0,51890 1,25878	0,52241 1,26298	0,52129 1,25892	0,53053 1,26504
5	0,51432 1,26003	0,51598 1,26398	0,51438 1,25987	0,51566 1,26168
6	---	---	---	0,50172 1,28907

fasst die berechneten Werte für T-NEWT und verschiedene Wirkungsquerschnittsbibliotheken sowie Serpent zusammen; der obere Wert steht für die schnelle und der untere Wert für die thermische Energiegruppe.

Tab. 6.5 zeigt eine angemessenen gute Übereinstimmung für alle Zweigruppen-Wirkungsquerschnitte in den betrachteten Fällen, insbesondere auch zwischen SCALE 6.2.3 und Serpent. Mit seiner Chrombeschichtung auf Zr-4 stellt Fall 2 die einzige radial heterogene Hüllrohrstruktur in der Fallgruppe dar.

6.2.7 Nuklidinventar-Berechnungen

6.2.7.1 Abbrandrechnungen mit SCALE/TRITON

Wie oben beschrieben, weist FeCrAl geringfügig stärkere neutronenabsorbierende Eigenschaften auf als Zr-4. Somit ergibt sich im Vergleich bei einer FeCrAl-artigen Umhüllung unter sonst gleichen Bedingungen ein härteres Neutronenspektrum als eine Zr-4-Umhüllung.

Für einige der hier beschriebenen Untersuchungen wurde nicht das oben beschriebene generische FeCrAl modelliert, sondern eine kommerzielle Variante des FeCrAl namens „Kanthal® D Strip“ der Sandvik Group /SAN 18/, vgl. auch Kap. 6.2.7.2. Diese enthält neben der generischen Zusammensetzung aus Eisen, Chrom und Aluminium weitere Beigaben zur Legierung. Die Zusammensetzung wurde auf Basis der frei zugänglichen Herstellerangaben gewählt. Diese enthält für alle Komponenten des Materials die Angaben als maximale Massenprozent. Für die generische Modellrechnung wurde jeder Wert als maximiert angenommen, wobei der Massenanteil des Hauptbestandteils Eisen so gewählt wurde, dass in Summe 100% erreicht werden. Die verwendete Zusammensetzung ist in Tab. 6.6 aufgeführt.

Tab. 6.6 In der generischen Analyse verwendete alternative Zusammensetzung der FeCrAl-Variante „Kanthal® D Strip“

Element	Gewichtsanteil (%)
Eisen (Fe)	70,42
Chrom (Cr)	23,50
Aluminium (Al)	4,80
Silizium (Si)	0,70
Mangan (Mn)	0,50
Kohlenstoff (C)	0,08

Für die Geometrie der Brennstabzellen und Brennelemente wurden wiederum die in Kap. 6.2.1 beschriebenen Daten verwendet, insbesondere Fall 3.

Für ein unendliches Gitter aus unbestrahlten Stabzellen ist das Neutronenspektrum in Abb. 6.5 als Neutronenfluss pro Lethargie²-Einheit (in willkürlichen Einheiten) über der Neutronenenergie (eV; logarithmische Skala) dargestellt. Hier ist u. a. ein etwa 10% niedrigeres thermisches Maximum (gestrichelt eingekreist) für das FeCrAl-System (blaue Kurve) gegenüber dem Referenzsystem (rote Kurve) bei etwa 0,2 eV zu erkennen.

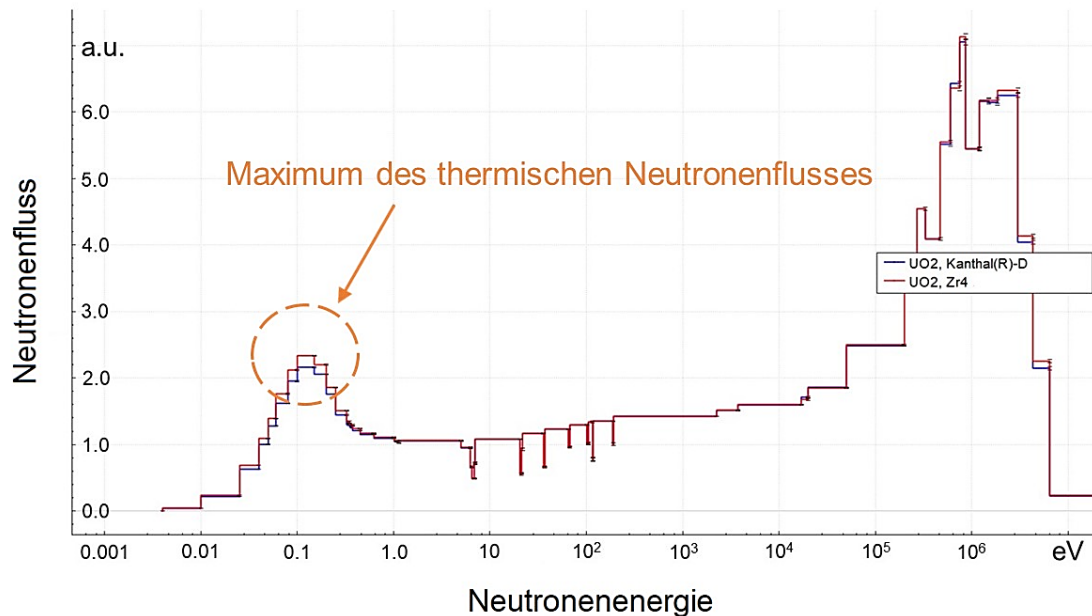


Abb. 6.5 Neutronenspektren für unbestrahlte, wassermodierte ATF-Brennstäbe mit Hüllrohren aus „Kanthal® D Strip“ als FeCrAl-Vertreter und dem Referenzmaterial Zr-4

Blau: Kanthal® D, rot: Referenzmaterial Zr-4. Gestrichelt eingekreist ist das Maximum des Neutronenflusses im thermischen Bereich bei etwa 0,2 eV.

In einem nächsten Schritt wurden Abbrandrechnungen für ausgewählte ATF-Systeme durchgeführt. Im Folgenden werden Ergebnisse für das generische FeCrAl-Modell

² Als Lethargie u wird der natürliche Logarithmus des Quotienten aus der Energie E_0 eines Neutrons, z. B. nach der Freisetzung in einer Spaltreaktion, und der Energie E nach Stoßprozessen bezeichnet: $u(E) = \ln(E_0/E)$. Diese Größe ist definitionsbedingt dimensionslos, hängt von der Wahl von E_0 ab und nimmt mit abnehmender Energie des Neutrons durch Stoßprozesse zu.

gemäß Kap. 6.2.1 (Fall3) als Hüllrohr gezeigt. Die erzielten Ergebnisse mit „Kanthal D Strip“ sind dem gegenüber qualitativ und quantitativ ähnlich, und werden hier in diesem Fall nicht separat dargestellt. Die Abbrandrechnungen wurden unter Verwendung der SCALE/TRITON-Sequenz T-DEPL und der Wirkungsquerschnittsbibliothek v7.1-56 durchgeführt. Es wurde eine konstante Leistung von 40 kW/kgSM für 1375 Tage angenommen, was zu einem Abbrand von 55 GWd/tSM führt. Zusätzlich wurde ein halbes Jahr Abklingzeit nach Bestrahlung angenommen.

Abb. 6.6 gibt das Verhältnis der berechneten Massen für wichtige Uran- und Plutonium-Isotope, Am-241 sowie Nd-148 wieder, subtrahiert um eins. Ein positiver Wert zeigt eine höhere Masse im ATF-Fall im Vergleich zum Referenzfall an.

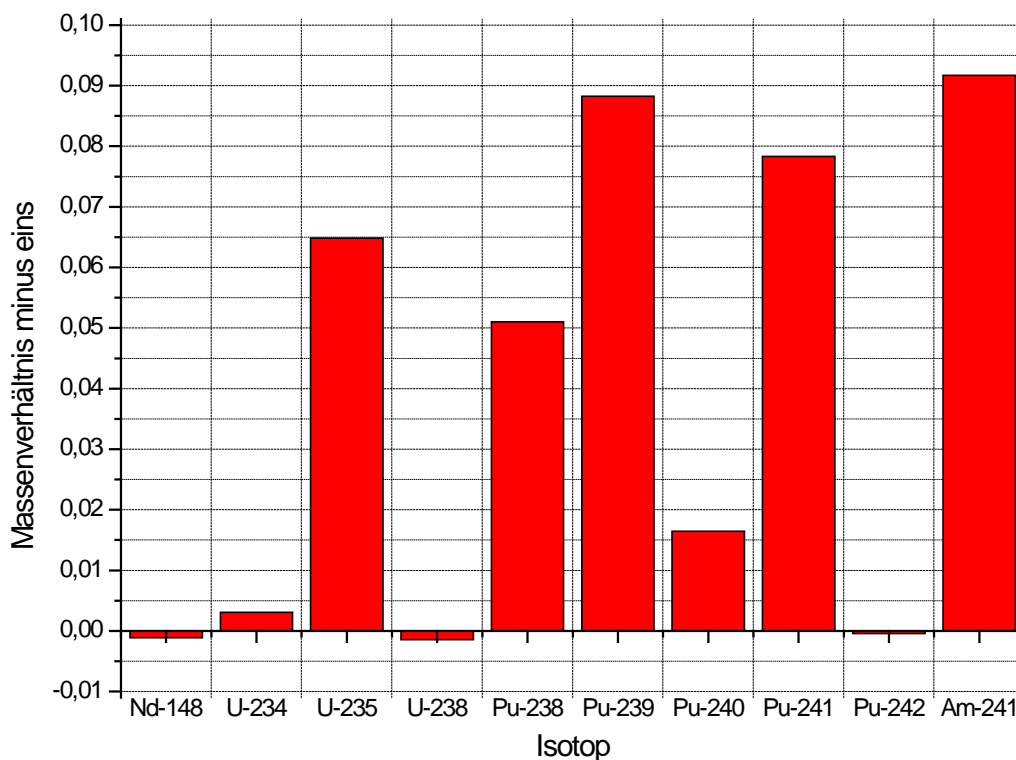


Abb. 6.6 Massenverhältnis der Hauptisotope von Uran und Plutonium sowie Nd-148 und Am-241 für einen bestrahlten ATF-Brennstab mit FeCrAl-Hüllrohr gegenüber dem Referenzstab mit Zr-4-Hüllrohr

Wie es aufgrund des härteren Neutronenspektrums zu erwarten war, ist für den FeCrAl-Fall ein ausgeprägterer Aufbau von Gesamtplutonium und ein geringerer Verbrauch von ^{235}U zu beobachten: Insbesondere die Massenverhältnisse (minus eins) für die thermisch spaltbaren Isotope Pu-239, Pu-241 und U-235 sind deutlich positiv. Der

entsprechende Wert für U-238 ist leicht negativ (was hier einem absoluten Wert von etwa 1,3 kg bezogen auf 1.000 kg der ursprünglichen Uranmasse entspricht), was folgerichtig auf einen höheren Verbrauch dieses Isotops im Fall des FeCrAl-enthaltenden Systems aufgrund des vergleichsweise härteren Neutronenspektrums hinweist.

Zur weiteren Überprüfung der Plausibilität und Konsistenz wurde ein solcher ATF-Stab innerhalb eines Standard-Brennelements modelliert. Dieser Stab ist hierbei in zehn gleichgroße Ringzonen modelliert, was hier als Ringzelle bezeichnet wird (vgl. Kap. 6.2.1). Im Hinblick auf die in Kap. 6.2.7.2 beschriebenen Aktivierungsrechnungen wurde das Hüllrohr nun exemplarisch wieder als Sandvik „Kanthal® D Strip“ modelliert.

Abb. 6.7 zeigt die Bildung des Gesamtplutoniums (alle Isotope integral) für jede der Ringzonen, sowohl für den ATF- Ringzellen-Brennstab (blaue Balken) als auch für einen Standard-Ringzellen-Brennstab an der gleichen Position als Referenzfall (rote Balken). Die Einblendung in der Abbildung zeigt den Unterschied zwischen den Ergebnissen dieser beiden Berechnungen. Zone 1 bezeichnet den inneren (mittleren) Bereich, während 10 den äußersten Ring bezeichnet, der das Pellet abschließt und an den Spalt bzw. das Hüllrohr angrenzt.

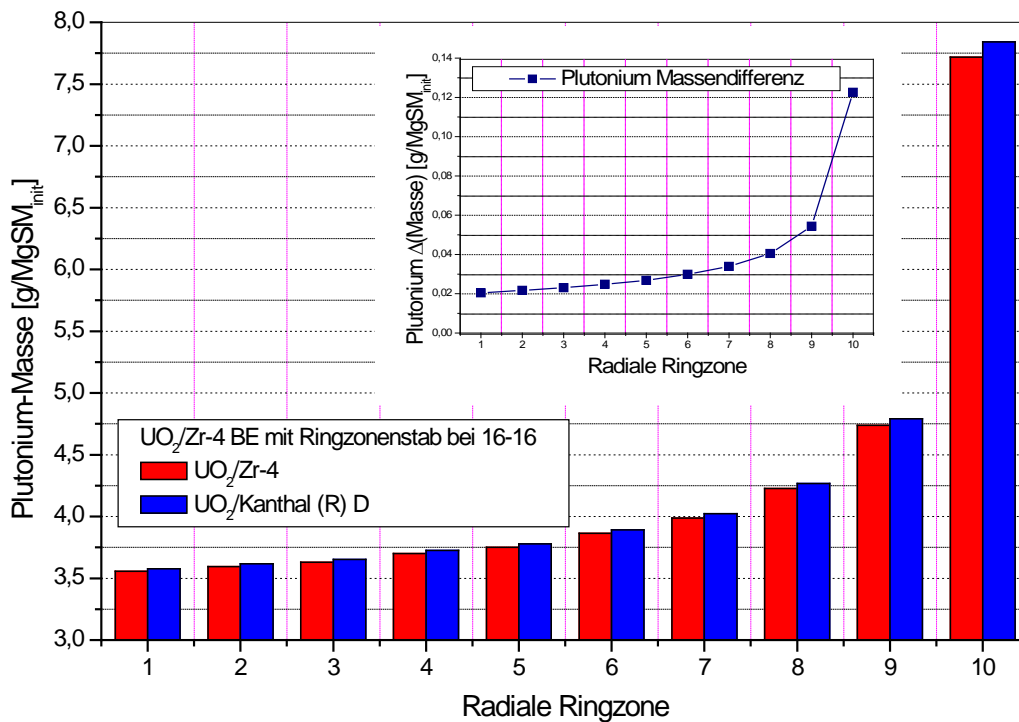


Abb. 6.7 Plutoniummasse für zehn Ringzonen nach 55 GWd/tSM Abbrand als Referenz und einen Brennstab mit „Kanthal® D Strip“ Hüllrohr

Zunächst ist der bekannte sog. *rim effect* mit einer stark ausgeprägten Plutoniumentstehung in der äußersten Ringzone bei beiden Stabtypen deutlich zu erkennen. Aufgrund des gehärteten Neutronenspektrums im Falle des FeCrAl-Hüllrohrmaterials ist diese Entstehung bei diesem ATF-Stab ausgeprägter, was durch die unterschiedliche Höhe der Balken im Hauptteil der Abbildung und vor allem durch die jeweiligen zonenweisen Unterschiede im eingefügten kleineren Diagramm deutlich wird. Dieses Ergebnis ist physikalisch plausibel und stimmt mit den Erwartungen überein.

6.2.7.2 Aktivierungsrechnungen zu einem ATF- Hüllrohr am Beispiel einer kommerziellen FeCrAl-Variante

Neben reinen Abbrandrechnungen wurde mit TRITON auch die Aktivierung des Hüllrohrmaterials FeCrAl berechnet. Um dabei ein breiteres Nuklidspektrum zu betrachten, wurde dazu die kommerzielle FeCrAl-Variante Sandvik „Kanthal® D Strip“ modelliert (vgl. Kap. 6.2.7.1). Die Bestrahlungsdaten entsprechen den in Kap. 6.2.7.1 angegebenen Werten. Der betrachtete Brennstab ist wiederum der Ringzellenstab an Position 16 - 16 in dem 17 × 17 Brennelement.

In Abb. 6.8 ist die berechnete Zusammensetzung des Hüllrohrmaterials nach Bestrahlung als Balkendiagramm dargestellt. Die Darstellung der Nuklidmassen auf der Ordinate ist aufgrund der großen Differenzen logarithmisch gewählt. Blau kennzeichnet die Nuklidmassen vor der Bestrahlung, gelb danach. Aus rechentechnischen Gründen (SCALE-Normierung) ist die Gesamtmasse des Hüllrohrs auf 1,0 Mg an unbestrahltem Material normiert.

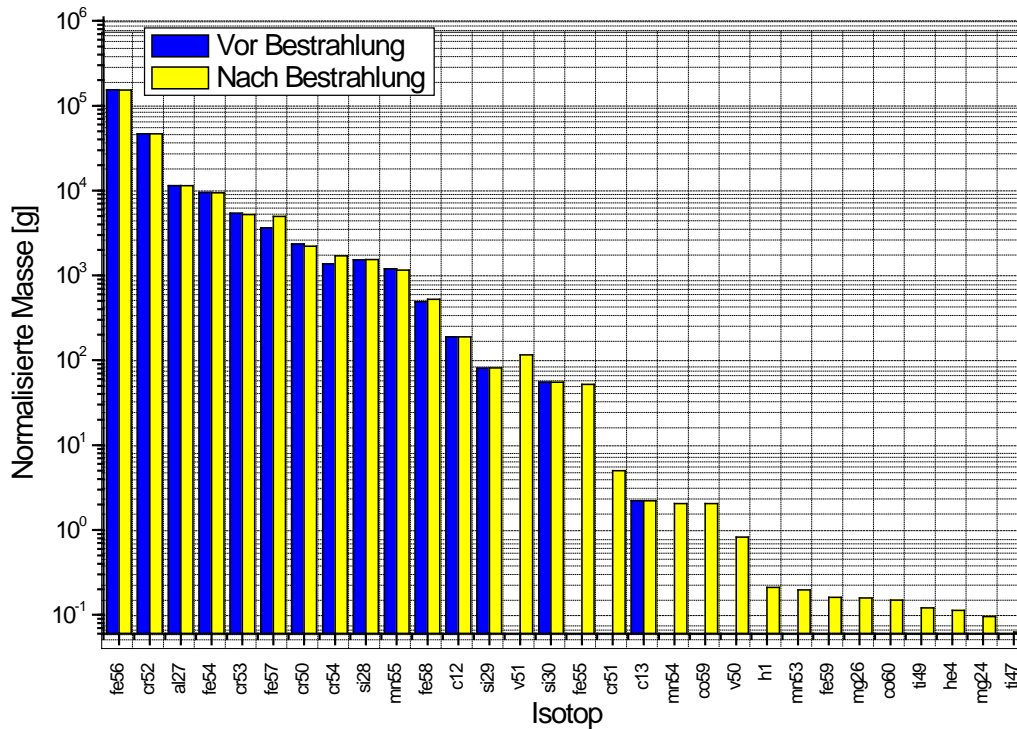


Abb. 6.8 In der generischen Aktivierungsrechnung errechnete Zusammensetzung der FeCrAl-Variante „Kanthal® D Strip“ nach Bestrahlung

Zu erkennen ist zunächst das Entstehen neuer Isotope durch Neutronenaktivierung. Dazu gehören in diesem Modellsystem v. a. V-51 (Vanadium), Fe-55 und Cr-51, sowie in geringem Umfang eine Reihe weiterer Isotope wie Mn-54 (Mangan), Co-59 (Kobalt), etc. Ebenfalls erkennbar ist die signifikante Massenveränderung einiger bestehender Nuklide, hier v. a. Fe-57 und Cr-54.

Zur Verdeutlichung ist in Abb. 6.9 die relative Änderung der Massen von Nukliden dargestellt, welche bereits im unbestrahlten Material vorliegen. Balken im positiven Bereich, d. h. nach rechts, indizieren einen relativen Zuwachs des Nuklids, während Balken im negativen Bereich, d. h. nach links, eine relative Abnahme anzeigen.

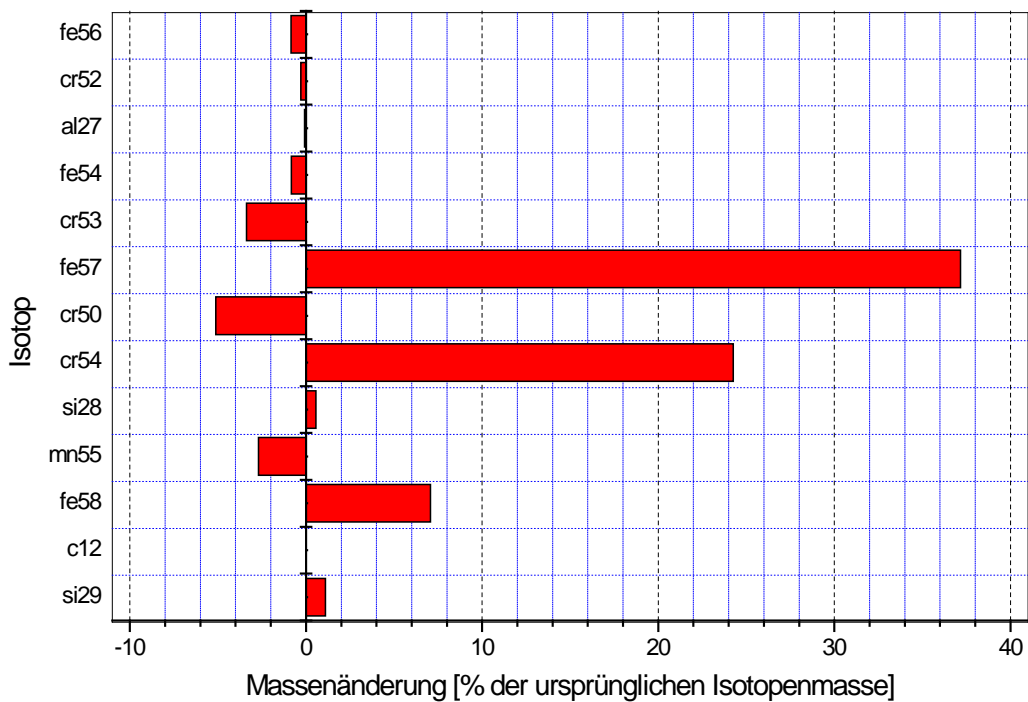


Abb. 6.9 Relative Änderung der Nuklidmassen in der generischen Aktivierungsrechnung der FeCrAl-Variante Kanthal® D nach Bestrahlung

Die stärkste relative Änderung erfahren hier demnach die Nuklide Fe-57, Cr-54 und Fe-58 durch Aufbau aus parasitärer Neutronenabsorption und Umwandlung leichterer Nuklide. Sichtbar ist auch der relative Verlust an Cr-50, Cr-53 und Mn-55 nach Neutronenabsorption. Speziell Cr-53 und Fe-57 liegen auch absolut in einem vergleichsweise hohen Massenanteil vor (vgl. Abb. 6.8), so dass bei diesen beiden Nukliden die größte absolute Änderung erkennbar ist.

Die Analyseergebnisse sind qualitativ plausibel und entsprechen den Erwartungen. Da gegenwärtig noch keine entsprechenden, direkt passenden Messdaten vorliegen, kann keine experimentelle Validierung dieser Rechnungen durchgeführt werden, um dies auch zu quantifizieren. Grundsätzlich kann festgestellt werden, dass diese Art von Aktivierungsrechnungen in der GRS durchgeführt werden kann.

Die Nachrechnung von Aktivierungsmessungen aus Teilen des Reaktordruckbehälters des Kernkraftwerks KGR-1 (KKW Greifswald, VVER-440/V-230), v. a. Kobalt, Eisen und Nickel, wurde schon früher erfolgreich demonstriert /WAG 11/, ebenso wie die Aktivierung spezieller Brennelement-Komponenten in einem Siedewasserreaktor /HES 93/,

jeweils mit den damals aktuellen Werkzeugen der GRS. Es sei an dieser Stelle erwähnt und betont, dass bei derartigen Aktivierungsrechnungen im Kernbereich die wesentliche Herausforderung oftmals die Berechnung der lokalen Neutronenflüsse und -fluenzen darstellt, sowie die präzise Kenntnis des Ausgangsmaterials. Dies sind Faktoren, welche kein Spezifikum des Einsatzes von ATF darstellen.

6.2.7.3 Vergleichende Abbrandrechnungen mit dem GRS-Inventarberechnungscode MoTlve gegenüber SCALE/TRITON

Neben der Verwendung des SCALE-Programmsystems steht der in der GRS entwickelte Abbrandcode MoTlve /HAN 19/ Version 0.7.5 zur Berechnung von Nuklidinventaren nach Bestrahlung zur Verfügung. In diesem Code können zur Flussberechnung alternativ KENO-VI aus SCALE oder OpenMC des *Massachusetts Institute of Technology* (MIT) mit Wirkungsquerschnitten in CE-Darstellung eingesetzt werden, während das gemeinsam mit dem Paul-Scherrer-Institut (PSI) entwickelte VENTINA zur Nuklidtransmutation verwendet wird.

Um die grundsätzliche Eignung von MoTlve für Inventarberechnungen im Fall von ATF zu demonstrieren, wurden exemplarische Berechnungen für verschiedene generische Brennelementvarianten mit ATF-Hüllrohren vorgenommen und die Ergebnisse mit entsprechenden Rechnungen mit der Abbrandsequenz T-DEPL (TRITON/NEWT) aus dem SCALE verglichen, siehe auch Kap. 6.2.7.1. Für einen Vergleich der beiden Codes wird an dieser Stelle wiederum die Hüllrohrvariante vom FeCrAl-Typ „Kanthal® D Strip“ von Sandvik diskutiert. Auf die eine Diskussion weiterer Hüllrohrmaterialien wurde hier verzichtet, da geeignete Wirkungsquerschnitte vorausgesetzt, eine Variation des Hüllrohrmaterials die grundsätzliche Eignung des Codes nicht beeinflusst. Dagegen wurden keine (mehrfach) heterogenen Brennstoff-Systeme untersucht, da diese mit dem aktuellen Entwicklungsstand von MoTlve noch nicht adäquat behandelt werden können.

Im Einzelnen wurden vier Brennelementvarianten betrachtet, bei denen die Nuklidinventare eines in zehn Ringzonen unterteilten Referenzstabes zum Vergleich genutzt wurden, vgl. Kap. 6.2.1 und Kap. 6.2.7.1. Die vier untersuchten Brennelementvarianten, die sich in den Hüllrohrmaterialien des Referenzbrennstabs und der übrigen Brennstäbe unterscheiden, sind in Tab. 6.7 aufgelistet.

Die Nuklidinventarberechnungen wurden zum einen mit MoTlve mit den Wirkungsquerschnittsbibliotheken ENDF/B-VII.1 /CHA 11/, ENDF/B-VIII.0 /BRO 18/, JEFF-3.2 /NEA 16a/ und JEFF-3.3 /PLO 20/ in CE-Darstellung, sowie zum anderen mit der Sequenz T-DEPL (TRITON/NEWT) aus dem SCALE 6.2.3 mit der mitgelieferten Wirkungsquerschnittsbibliothek v7.1-56 /REA 18/ vorgenommen.

Als Bestrahlungsbedingungen wurde ein Endabbrand von 55 GWd/tSM, eine Leistung von 40 MW/tSM und ein halbes Jahr Abklingzeit unterstellt. Verglichen wurden im Detail die Nuklidmassen nach Bestrahlung und Abklingphase für 28 Isotope, die z. B. im Rahmen von Kritikalitätsanalysen (*burnup credit*, Abbrandkredit) relevant sind: U-234, U-235, U-236, U-238, Np-237, Pu-238, Pu-239, Pu-240, Pu-241, Pu-242, Am-241, Am-243, Mo-95, Tc-99, Ru-101, Rh-103, Ag-109, Cs-133, Nd-143, Nd-145, Sm-147, Sm-149, Sm-150, Sm-151, Sm-152, Eu-151, Eu-153 und Gd-155 /NEA 08/.

Tab. 6.7 Definition der vier betrachteten Brennelementvarianten für vergleichende Abbrandrechnungen zwischen MoTlve und TRITON zu ATF

Fall	Hüllrohrmaterial ³	
	Referenzbrennstab	übrige Brennstäbe
A (Referenzfall)	Zr-4	Zr-4
B	FeCrAl	Zr-4
C	Zr-4	FeCrAl
D	FeCrAl	FeCrAl

Einige repräsentative Ergebnisse der durchgeführten Vergleiche sind in Abb. 6.10 bis Abb. 6.13 grafisch dargestellt. In Abb. 6.10 oben ist zunächst der Vergleich der errechneten Nuklidkonzentrationen vom MoTlve und TRITON bei jeweiliger Verwendung der ENDF/B-VII.1 Wirkungsquerschnittsbibliothek für eine mittlere Ringzone des Referenzstabes in einem Standard-Brennelement mit ausschließlich Zr-4-Hüllrohren gezeigt. Für die Mehrzahl der betrachteten Nuklide beträgt die Abweichungen zwischen ihren mit beiden Codes ermittelten Nuklidkonzentrationen weniger als 1%. Einige Plutonium- und Americium-Isotope sowie Rh-103 zeigen mit zwischen 1% und 2% geringfügig größere

³ FeCrAl ist hier als Sandvik „Kanthal® D“ modelliert, siehe Text, und vgl. auch Abschnitt 6.2.7.1.

Unterschiede in ihren Nuklidkonzentrationen. Lediglich das Spaltprodukt Tc-99 weist mit etwa 3,5% eine noch höhere Abweichung auf.

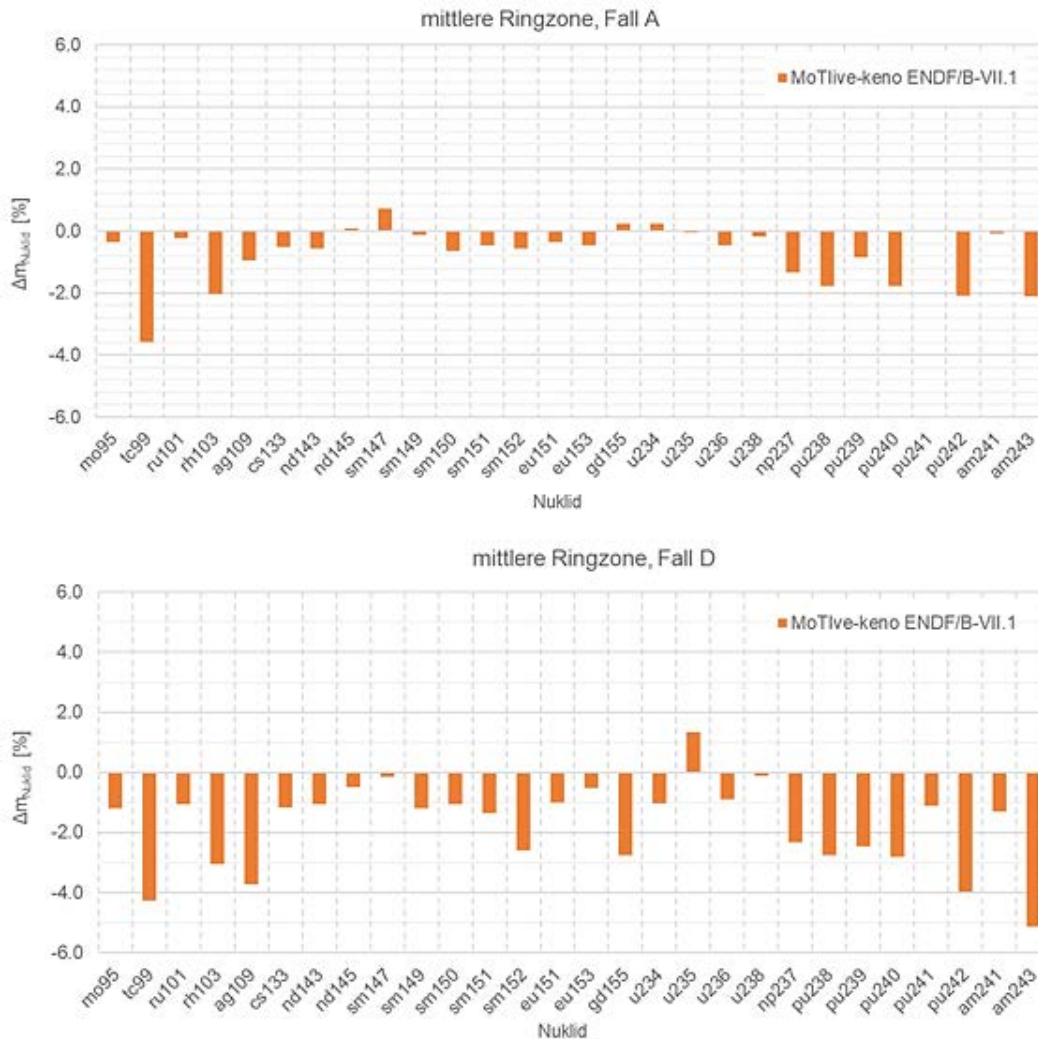


Abb. 6.10 Relative Abweichung in von MoTive und TRITON/NEWT errechneten Nuklidkonzentrationen

Fall A (oben) und Fall D (unten).

Die untere Grafik in Abb. 6.10 zeigt den analogen Vergleich für den Fall eines Brennelements mit ausschließlich FeCrAl-Hüllrohren (hier: „Kanthal® D Strip“). Die hier resultierenden Abweichungen zwischen den jeweiligen Nuklidkonzentrationen sind qualitativ vergleichbar mit denjenigen im Fall des Standard-Brennelements, wenn auch insgesamt größer. Dennoch betragen auch hier die Abweichungen für etwa die Hälfte der betrachteten Nuklide ca. 1% oder weniger, ansonsten zumeist weniger als 3%. Lediglich die Isotope Pu-242, Am-243, Ag-109 und Tc-99 weisen Abweichungen zwischen 3% und 5% auf.

In Abb. 6.11 sind die analogen Vergleiche wie in Abb. 6.10 für die äußere Ringzone dargestellt. Hier weisen die betrachteten Isotope im Fall des Standard-Brennelements (Abb. 6.11, oben) zumeist Abweichungen in ihren jeweiligen Konzentrationen zwischen 1 % und 2 % auf, wodurch die Abweichungen hier etwas größer als bei der mittleren Ringzone (Abb. 6.10, oben) ausfallen. Lediglich U-235 und Pu-242 zeigen Unterschiede von etwas mehr als 2 % und Gd-155 weist mit knapp 3 % die hier größte Abweichung auf.

Im Fall des Brennelements mit ausschließlich FeCrAl-Hüllrohren (Abb. 6.11, unten) zeigen die Isotope für die äußere Ringzone dagegen insgesamt niedrigere Abweichungen in ihren jeweiligen Konzentrationen als für die mittlere Ringzone. Hier liegen diese Abweichungen für die meisten Isotope unter 1 %. Lediglich die Isotope Pu-241, Pu-242, Am-241 und Tc-99 weisen größere Abweichungen auf, wobei Tc-99 mit etwa 4 % die größte Differenz zeigt.



Abb. 6.11 Relative Abweichung in von MoTive und TRITON/NEWT errechneten Nuklidkonzentrationen

Fall A (oben) und Fall D (unten).

Zusätzlich fällt auf, dass MoTive die Tendenz zeigt, die Nuklidkonzentrationen in Abhängigkeit des jeweiligen betrachteten Falls und der Ringzone gegenüber TRITON systematisch zu über- (Fall A) oder unterschätzen (Fall D).

Generell lassen sich die beobachteten Abweichungen in den durch MoTive und TRITON errechneten Nuklidkonzentrationen durch Unterschiede in beiden Codes erklären. Unter anderem bestehen diese Unterschiede in der grundsätzlichen Verwendung eines Monte-Carlo-Neutronen-Transportcodes (hier KENO-VI) durch MoTive, dessen Resultate immer auch einer statistischen Unsicherheit unterliegen, wohingegen die für den Vergleich genutzte Sequenz TRITON/NEWT den deterministischen NeutronenTransportcode

NEWT nutzt. Zudem werden in MoTlve die Wirkungsquerschnittsdaten in einer sehr feinen Gruppenstruktur, welche einer quasi CE-Darstellung nahekommt, verwendet. Dagegen kommt beim TRITON/NEWT eine deutlich gröbere Energiegruppenstruktur (hier: 56 Gruppen) mit entsprechender Resonanzbehandlung zum Einsatz. Aufgrund des unterschiedlichen Neutronenspektrums der äußeren Ringzone gegenüber den mittleren oder inneren Zonen durch die Selbstabschirmung des Brennstoffs, können sich zusätzlich Unterschiede in den verwendeten Wirkungsquerschnitten, wie z. B. die Energiegruppenstruktur, in unterschiedlicher Weise in den Resultaten der äußeren Zone und denen der mittleren bzw. inneren Zone auswirken. Dementsprechend können sich in der Folge auch unterschiedliche Abweichungen zwischen den Resultaten von MoTlve und TRITON/NEWT in den verschiedenen Ringzonen ausbilden.

Insgesamt zeigt dieser Vergleich eine für Abbrandrechnungen gute Übereinstimmung zwischen MoTlve und SCALE, da insbesondere auch für die anderen Ringzonen des Referenzstabs sowie auch die Vergleiche zwischen den Brennelementvarianten B und C (Tab. 6.7) vergleichbare Abweichungen zwischen den jeweiligen Nuklidkonzentrationen ergeben.

Neben dem diskutierten Vergleich zwischen MoTlve und TRITON/NEWT wurden die betrachteten Nuklidkonzentrationen ferner mit MoTlve unter Verwendung des Neutronen-Transportcodes OpenMC und verschiedener Wirkungsquerschnitte ermittelt. Einige daraus resultierenden Ergebnisse sind in Abb. 6.12 und Abb. 6.13 als Abweichung gegenüber den Resultaten von MoTlve unter Verwendung des Transportcodes KENO-VI und der Wirkungsquerschnittsbibliothek ENDF/B-VII.1 dargestellt.

Hieraus ergibt sich zum einen, dass die Verwendung der Transportcodes KENO-VI und OpenMC in MoTlve bei gleichen Wirkungsquerschnittsdaten zu vergleichbaren Ergebnissen führen. Geringe Unterschiede sind hierbei insbesondere aufgrund der statistischen Natur der NeutronenTransportrechnungen zu erwarten und zeigen sich auch entsprechend in den Resultaten. Zum anderen zeigen die Ergebnisse teils deutliche Unterschiede aufgrund der verschiedenen verwendeten Wirkungsquerschnittsbibliotheken. Insbesondere die beiden JEFF-Bibliotheken führen für verschiedene Isotope wie Ag-109, Eu-153, Gd-155, Pu-238 und Am-241 zu merklichen Änderungen von bis zu 15% in den errechneten Konzentrationen. Diese Änderungen sind allerdings nicht durch MoTlve, sondern hauptsächlich durch Unterschiede in den Wirkungsquerschnitten der verschiedenen Bibliotheken begründet.

Auch die Vergleiche zwischen den Resultaten für ein Standard-Brennelement mit Zr-4 Hüllrohren (Abb. 6.12, oben bzw. Abb. 6.13, oben) mit einem entsprechenden Brennelement mit FeCrAl-Hüllrohren (Abb. 6.12, unten bzw. Abb. 6.13, unten) für jeweils die gleiche Ringzone, zeigen qualitativ vergleichbare Abweichungen zwischen den jeweils errechneten Konzentrationen. Dieses gilt auch beim Vergleich der mittleren und äußeren Ringzonen miteinander.

Insgesamt zeigen alle Rechenergebnisse zur Nuklidinventarbestimmung von bestrahltem Kernbrennstoff eine gute Übereinstimmung. Punktuelle Differenzen können erklärt werden. Sowohl MoTive /HAN 18/, /HAN 19/ als auch SCALE/TRITON /ILA 12/, /RAD 14/ sind gut validiert im Hinblick auf bestrahlten Brennstoff aus Leichtwasserreaktoren.

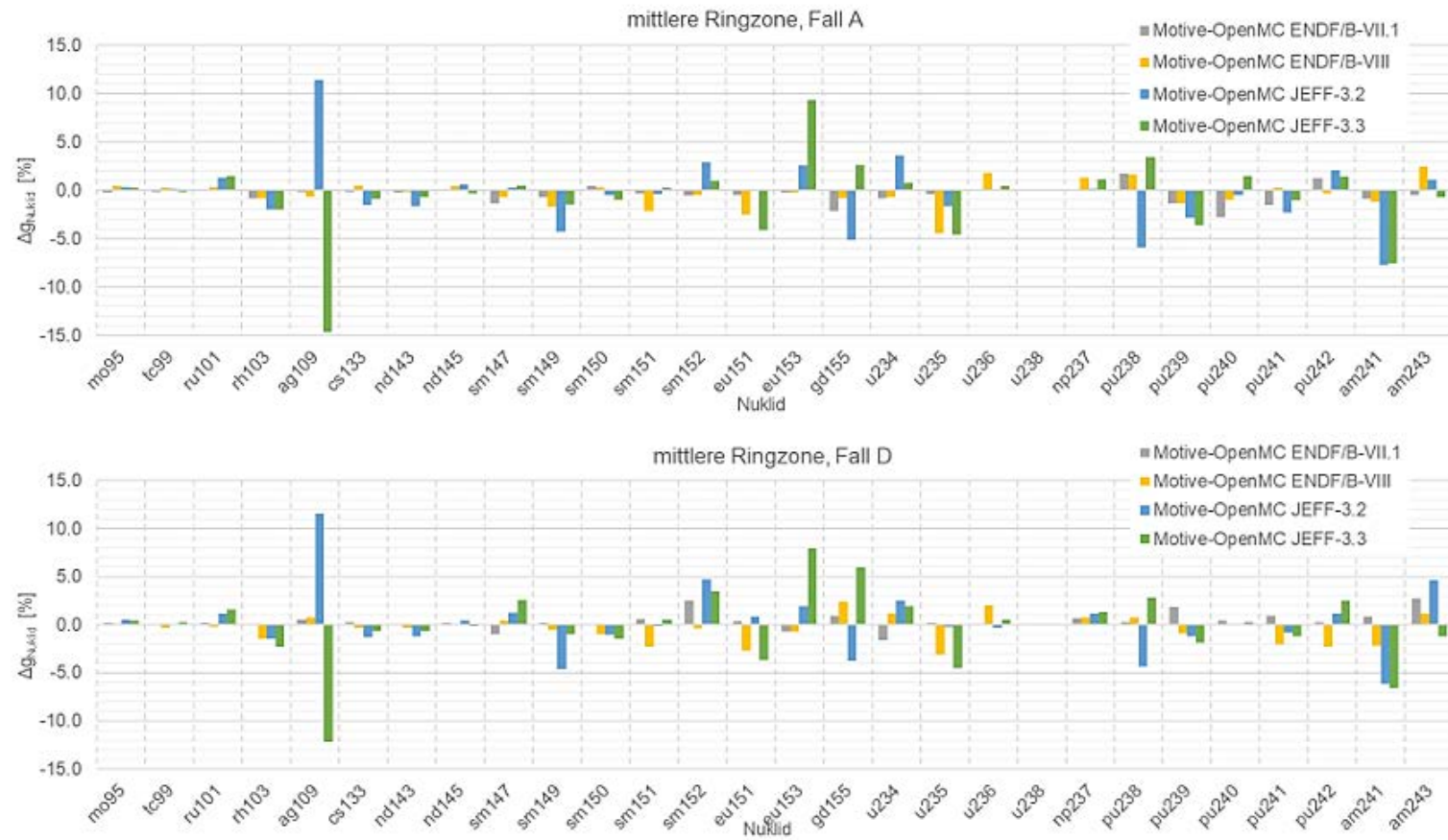


Abb. 6.12 Relative Abweichung der errechneten Nuklidkonzentrationen gegenüber MoTlve mit KENO-VI und der Bibliothek ENDF/B-VII.1 (1)

Mittlere Ringzone, Fall A (oben) und Fall D (unten).



Abb. 6.13 Relative Abweichung der errechneten Nuklidkonzentrationen gegenüber MoTlve mit KENO-VI und der Bibliothek ENDF/B-VII.1 (2)

Äußere Ringzone, Fall A (oben) und Fall D (unten).

6.2.8 GRS-Kernsimulator KMACS

Um den GRS-Kernsimulator KMACS (vgl. Kap. 2.2) für ATF zu testen, wurden für die weitere Bearbeitung neben dem Standardkonzept $\text{UO}_2/\text{Zr-4}$ als Referenzfall drei weitere Konzeptvarianten für ATF in Anlehnung an Tab. 6.1 verwendet. Diese umfassten die Standardkombination $\text{UO}_2/\text{Zr-4}$ mit einer zusätzlichen Chrombeschichtung ($\text{UO}_2/\text{Zr-4}/\text{Cr}$, Fall 2), eine Kombination mit demselben Brennstoff und einer Eisen-Chrom-Aluminium (FeCrAl) Legierung als Hüllrohrmaterial ($\text{UO}_2/\text{FeCrAl}$, Fall 3), und eine Kombination bestehend aus Uransilizid als Brennstoff und dem Hüllrohrmaterial FeCrAl ($\text{U}_3\text{Si}_2/\text{FeCrAl}$, Fall 5).

Für diese Untersuchungen wurde auf die Spezifikation des ersten Zyklus des BEAVRS Benchmarks /HOR 18/ (vgl. Kap. 3.2.1) zurückgegriffen und bestimmte Brennelemente durch ATF-Brennelemente ersetzt. Zunächst wurden für die einzelnen ATF-Brennelemente Abbrandrechnungen im unendlichen Gitter durchgeführt. Anschließend wurde der Nulllast-Heiß Zustand mit gezogenen Steuerstabbänken und einer Borkonzentration von 975 ppm betrachtet. Des Weiteren wurde für den ersten Zyklus eine Zyklusrechnung mit Ermittlung der kritischen Borkonzentration als Funktion der Volllasttage durchgeführt.

Im ersten Zyklus ist der Kern nominell mit frischen UO_2 Brennelementen mit drei verschiedenen U-235 Anreicherungsstufen – 1,6%, 2,4% und 3,1% – beladen. Die Überschussreaktivität des Kerns wird mit Borglasstäben, die an bestimmten Stellen im Kern in Führungsrohre eingefahren sind, kompensiert. Abb. 6.14 skizziert die verwendete Kernbeladung. Der Farbcode bezeichnet die verschiedenen U-235 Anreicherungen und hebt die Positionen (orange) hervor, in die ATF-Brennelemente eingesetzt wurden. Die Zahlenangabe in bestimmten Kästchen entspricht der Anzahl an Borglasstäben im jeweiligen Brennelement. Zur Modellierung des radialen Reflektors wurde in dieser Studie lediglich ein radialer Reflektortyp bestehend aus drei Schichten – Stahl (Kernumfassung), Wasser, Stahl (Kernbehälter) – verwendet /ZIL 17/.

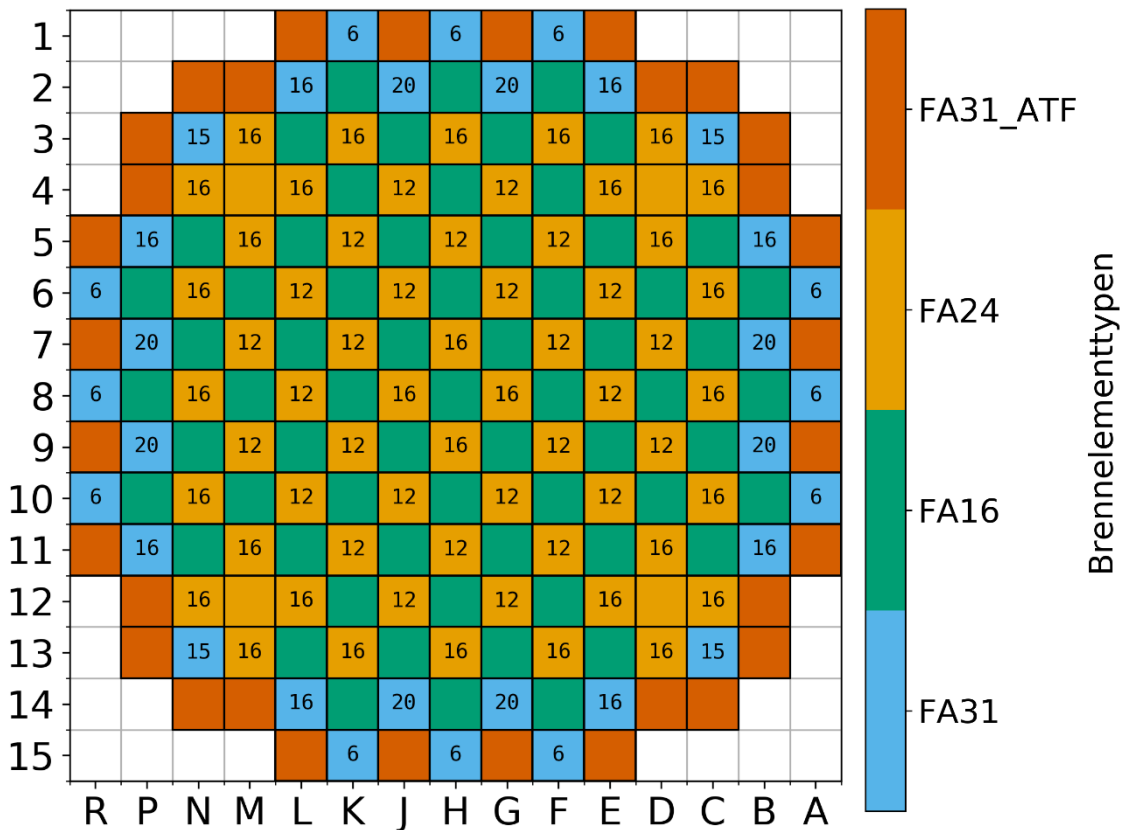


Abb. 6.14 Kernbeladung von Zyklus 1 des durch ATF-Brennelemente modifizierten BEAVRS-Benchmark

In den Rechnungen wird nur ein Teil der Brennelemente im Kern durch ATF-Brennelemente ersetzt. Die so gegenüber der Originalspezifikation modifizierten Brennelemente befinden sich ausschließlich am Rand des Kerns. Hintergrund ist hier die reaktivitätsmindernde Wirkung der modifizierten Hüllrohre, die bei einem flächendeckenden Einsatz in diesem Modell eine starke Unterkritikalität des Kerns verursacht hätte. In Summe wurden 32 der 193 Brennelemente im Kern mit ATF-Brennelementen ausgetauscht. Im Folgenden wurde bei allen ATF-Brennstäben stets dieselbe Urananreicherung von 3,1% U-235 angenommen, um eine bessere Vergleichbarkeit der erzielten Ergebnisse zu erreichen.

Zunächst wurden Kritikalitätsrechnungen für frische ATF-Brennelemente im unendlichen Gitter mit SCALE 6.2.3/T-NEWT und ENDF/B-VII.1 Wirkungsquerschnitten in 56 Energiegruppen sowie mit HELIOS-2 /CAS 91/ durchgeführt, wobei die jeweiligen Eingabedateien mithilfe von KMACS erzeugt werden. Als Ergebnisgröße wurde der Multiplikationsfaktor betrachtet. Als Referenzrechnungen wurden Monte-Carlo-Rechnungen mit Serpent durchgeführt. Für die Monte-Carlo-Rechnungen wird eine Neutronenpopulation

von 2×10^5 Neutronen mit 500 aktiven und 50 inaktiven Zyklen verwendet. Als Wirkungsquerschnittsbibliothek wurde die im Lieferumfang von Serpent enthaltene CE Bibliothek auf Basis von ENDF/B-VII.0 verwendet.

Für den Fall 2 (Standardkombination $\text{UO}_2/\text{Zr-4}$ mit einer zusätzlichen Chrombeschichtung) sind bei der automatisierten KMACS-Eingabedatensatzerstellung für das HELIOS-2 Programmpaket Defizite bei der Handhabung von radial heterogenen Hüllrohr-Materialien identifiziert worden, da diese in KMACS bisher nicht vorgesehen waren. Daher konnte mit dem aktuellen Entwicklungsstand von KMACS keine adäquate Eingabedatei für diesen Rechenfall erstellt werden. Abhilfe ist für die Zukunft vorgesehen.

Tab. 6.8 Ergebnisse für k_{inf} -Berechnungen für unbestrahlte Brennelemente

Fall	SCALE/ T-NEWT 56G VII.1	HELIOS-2	Serpent CE ENDF/B-VII.0
1 (Referenz)	1,27265	1,27244	1,27742
2	1,25605	---	1,26222
3	1,16054	1,16302	1,16312
5	1,17492	1,17623	1,17699

Wie aus Tab. 6.8 ersichtlich wird, zeigt der mit SCALE/T-NEWT für die unendlichen Geometrien errechnete Multiplikationsfaktor k_{inf} eine gute Übereinstimmung zu den Ergebnissen der Serpent Referenzrechnungen. Die maximal beobachtete Reaktivitätsdifferenz tritt zwischen der SCALE- und Serpent-Rechnung für Fall 2 (Zr-4 Hüllrohr mit Chrombeschichtung) auf und beträgt 389 pcm. Die hier verwendeten ATF-Brennelemente weisen im Vergleich mit der Referenzkombination $\text{UO}_2/\text{Zr-4}$ aufgrund der höheren Neutronenabsorption der ausgewählten ATF-Hüllrohrmaterialien eine niedrigere Reaktivität auf. Dabei weicht das berechnete k_{inf} für Fall 2 aufgrund der schwachen Neutronenabsorptionseigenschaften der Chrombeschichtung nur leicht vom Referenzfall ab, während k_{inf} für die Fälle 3 und 5 aufgrund der stärkeren Absorption des FeCrAl-Materials dem gegenüber deutlich verringert ist.

Im nächsten Schritt wurden stationäre Ganzkern-Rechnungen unter Nulllast-Heiß Bedingungen des modifizierten BEAVRS-Kerns durchgeführt. Hierbei wird lediglich das ATF-Material von Fall 3 berücksichtigt. In radialer Richtung wird die nodale Diskretisierung so gewählt, dass jedes Brennelement einer Rechenmasche im Diffusionsmodell

entspricht. Die axiale Diskretisierung des Kerns wurde zu 34 gewählt. Die homogenisierten Wirkungsquerschnitte wurden mit SCALE 6.2.3/T-NEWT erzeugt, und als nodaler Flusslöser wurde QUABOX/CUBBOX (Q/C) verwendet. Referenzergebnisse wurden wiederum mit dem Monte-Carlo-Code Serpent ermittelt. Hierbei wurde die Serpent-Rechnung mit einer Neutronenpopulation von 10^6 Neutronen mit 4.000 aktiven und 100 inaktiven Zyklen durchgeführt. Als Wirkungsquerschnittsbibliothek wurde ebenfalls die auf ENDF/B-VII.0 basierende CE Bibliothek verwendet. Wie in Tab. 6.9 ersichtlich, weisen die Multiplikationsfaktoren der Q/C- und der Serpent-Rechnungen eine gute Übereinstimmung auf. Für den Referenzfall beträgt die Reaktivitätsdifferenz zwischen der Q/C- und der Serpent-Rechnung 325 pcm, und für Fall 3 mit den Hüllrohrmaterial FeCrAl 208 pcm.

Tab. 6.9 Ergebnisse der k_{eff} -Berechnungen für stationäre Ganzkern-Rechnungen auf Basis des mit ATF modifizierten BEAVRS-Kerns

Fall	KMACS (SCALE/	Fall
1 (Referenz)	0,99699	1,00023
3	0,99027	0,99231

Wie bei den Kritikalitätsrechnungen von Brennelementen im unendlichen Gitter ist auch hier eine geringere Reaktivität bei der Verwendung von ATF-Materialien im Vergleich zum Referenzmaterial zu beobachten. Der Unterschied ist hier wesentlich geringer als beim vorherigen Vergleich einzelner Brennelemente, da nicht der ganze Kern, sondern lediglich ein geringer Anteil der Brennelemente des Kerns am Kernrand durch ATF-Brennelemente ersetzt wurde.

Die transversale Leistungsverteilung der Q/C- und der Serpent-Rechnung für Fall 3 und deren relative Abweichung ist in Abb. 6.15 in einer Viertelkern-Darstellung aufgezeigt. Aufgrund der Symmetrie des Modells ist dieser Ausschnitt repräsentativ für den ganzen Kern. Die Zahlenwerte der Leistungsverteilung sind relativ zur mittleren Leistung angegeben. Die Werte aus der Q/C-Rechnung stehen über den Werten der Serpent Referenzrechnung. Die relativen Abweichungen berechnen sich aus diesen beiden Zahlenwerten mittels $\Delta P = (P_{Q/C} - P_{\text{SERPENT}}) / P_{\text{SERPENT}}$ und sind in Prozent angegeben. Am äußeren Rand des Kerns, insbesondere an den Ecken, werden Abweichungen von bis zu 7% beobachtet. Dort befinden sich, wie in Abb. 3.1 illustriert, zusätzliche Neutronen-Schildplatten, die im Q/C-Modell nicht explizit modelliert werden konnten und daher im Vergleich zu den Serpent-Rechnungen zu Abweichungen führen können. In der inneren

Zone des Kerns halten sich die Abweichungen unter 4%. Im Allgemeinen sind dies im Hinblick auf die in der Q/C-Rechnung durchgeführten Näherungen akzeptable Werte (vgl. Kap. 3.2.1).

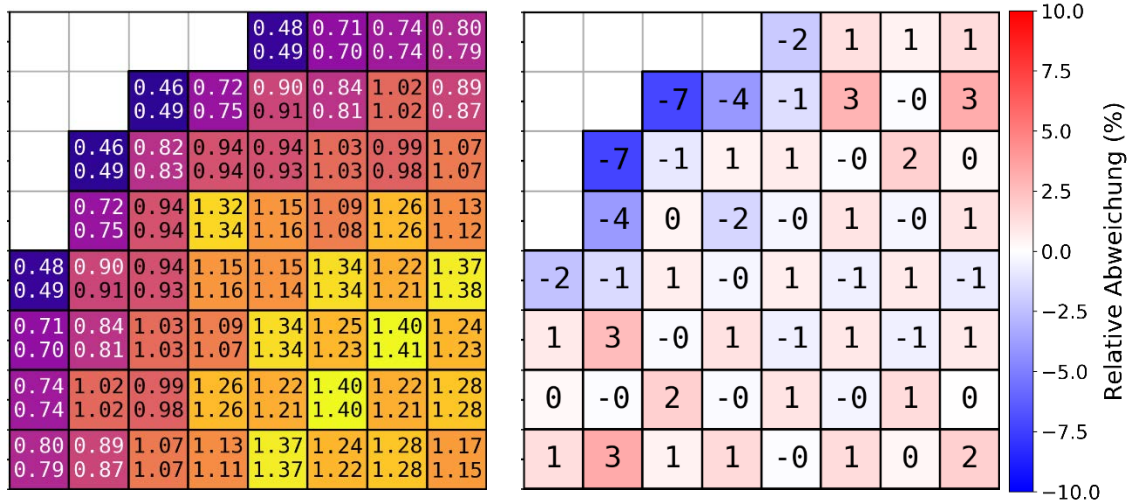


Abb. 6.15 Radiale Leistungsverteilung (links) und relative Abweichung der radialen Leistungsverteilung (rechts) des Viertelkerns zu Zyklusbeginn

Die Zahlenwerte aus der Q/C-Rechnung stehen über den Zahlenwerten der Serpent Referenzrechnung.

Ferner wurde eine Zyklusrechnung des ersten Zyklus des BEAVRS-Kerns durchgeführt. Analog zur vorherigen Vorgehensweise werden auch hier 32 Standard-Brennelemente sowohl mit $\text{UO}_2/\text{FeCrAl}$ -Brennelementen (Fall 3) als auch mit $\text{U}_3\text{Si}_2/\text{FeCrAl}$ -Brennelementen (Fall 5) ersetzt. Als homogenisierte Wirkungsquerschnitte wurden wiederum jene aus den SCALE 6.2.3/ T-NEWT-Rechnungen verwendet. Für die Zyklusrechnung wird Q/C-ATHLET verwendet, wobei die geometrische Diskretisierung sowohl bei Q/C als auch bei ATHLET analog zur vorherigen Nulllastrechnung gewählt wurde. Das heterogene ATF-Material $\text{UO}_2/\text{Zr-4}/\text{Cr}$ (Fall 2) konnte nicht berücksichtigt werden, da bei der automatisierten KMACS-Eingabedatensatzerstellung für das ATHLET Programm Defizite bei der Handhabung von mehrschichtigen Hüllrohr-Materialien festgestellt wurden.

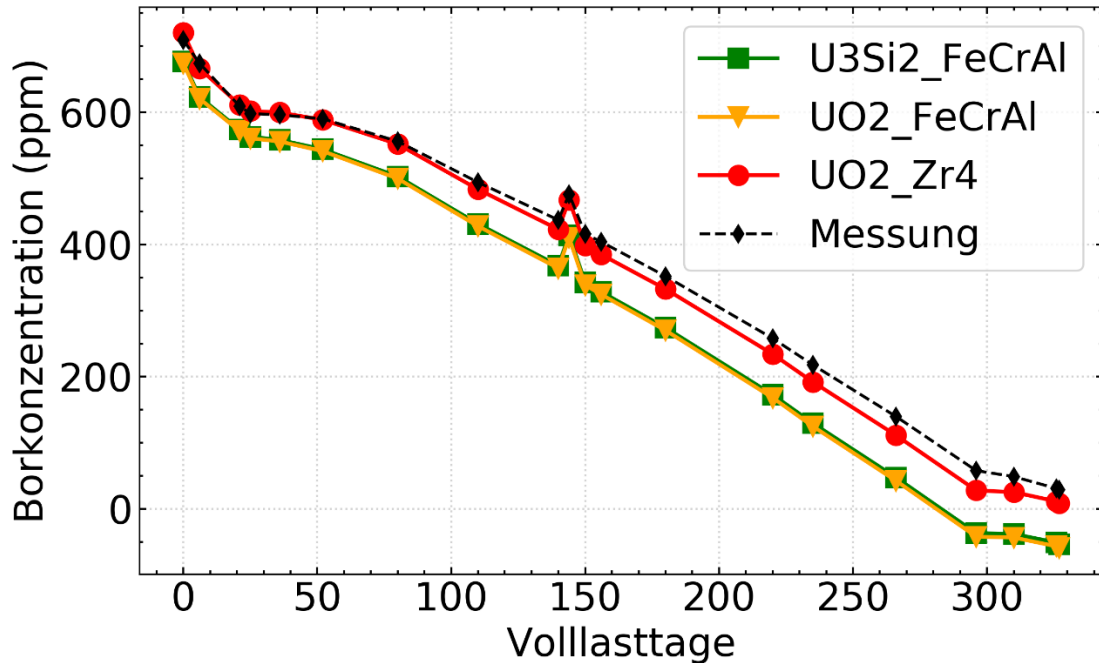


Abb. 6.16 Borkurve des 1. Zyklus für 3 verschiedene Materialien und der Messung

In Abb. 6.16 ist der Verlauf der kritischen Borkonzentration in Abhängigkeit der Volllasttage für den Referenzfall (rot) sowie für Fall 3 (gelb) und Fall 5 (grün) dargestellt. Zusätzlich ist in der Abbildung die Messkurve dargestellt (schwarz gestrichelt), die nur mit dem Referenzfall direkt vergleichbar ist.

Wie zu erwarten liegt die Borkurve aufgrund der höheren Neutronenabsorption der ATF-Hüllrohre sowohl beim $\text{UO}_2/\text{FeCrAl}$ - als auch beim $\text{U}_3\text{Si}_2/\text{FeCrAl}$ -Brennstoff unterhalb der Borkurve des Referenzmaterials $\text{UO}_2/\text{Zr-4}$. Diese im Allgemeinen niedrigere Reaktivität führt dazu, dass das natürliche Zyklusende bei ca. 280 Volllasttagen erreicht wird. Danach versucht Q/C-ATHLET mittels einer negativen Borkonzentration den kritischen Zustand zu halten. Dies macht aus physikalischer Sicht keinen Sinn und stellt ein numerisches Artefakt dar, das aber prinzipiell gut verstanden ist.

Auffallend ist ein kurzzeitiger Anstieg der kritischen Borkonzentration bei ca. 140 Volllasttagen in allen Kurven. Dieser liegt an veränderten Betriebsparametern zu diesem Zeitpunkt /HOR 18/, und ist kein Artefakt sondern messtechnisch real.

Die beiden Borkonzentrationskurven unter Berücksichtigung der ATF-Materialien überlappen sich nahezu über die gesamte Zyklus-Zeitspanne hinweg, wobei die kritische Borkonzentration des $\text{UO}_2/\text{FeCrAl}$ -Brennstabs aufgrund seiner niedrigeren Reaktivität

leicht unterhalb der kritischen Borkonzentration des $U_3Si_2/FeCrAl$ -Brennstabs liegt. Die niedrigere Reaktivität der verwendeten ATF Brennelemente schlägt sich auch, wie in Abb. 6.17 für Fall 3 und in Abb. 6.18 für Fall 5 dargestellt, in der Leistungsverteilung nieder. In den Darstellungen ist die relative Abweichung der Leistungsverteilung mit Zahlenwerten angegeben und wird zusätzlich mit dem Farbschema hervorgehoben.

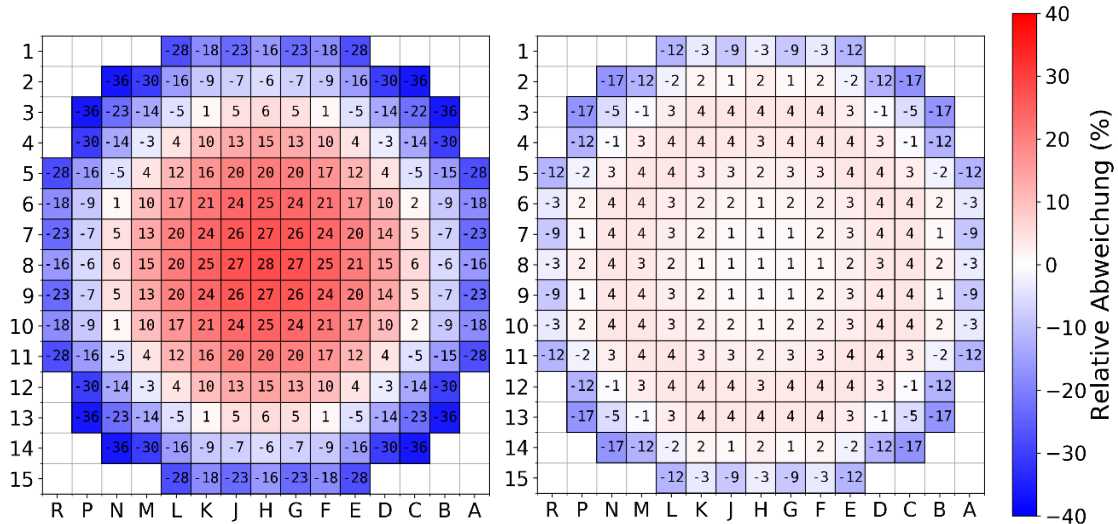


Abb. 6.17 Relative Abweichung der Leistungsverteilung $\Delta P = (P_{ATF} - P_{ref}) \times 10^2 / P_{ref}$ zwischen dem $UO_2/FeCrAl$ -Brennstoff und dem Referenzmaterial $UO_2/Zr-4$
Zeitpunkt t=0 Volllasttage (links) und t=266 Volllasttage (rechts).

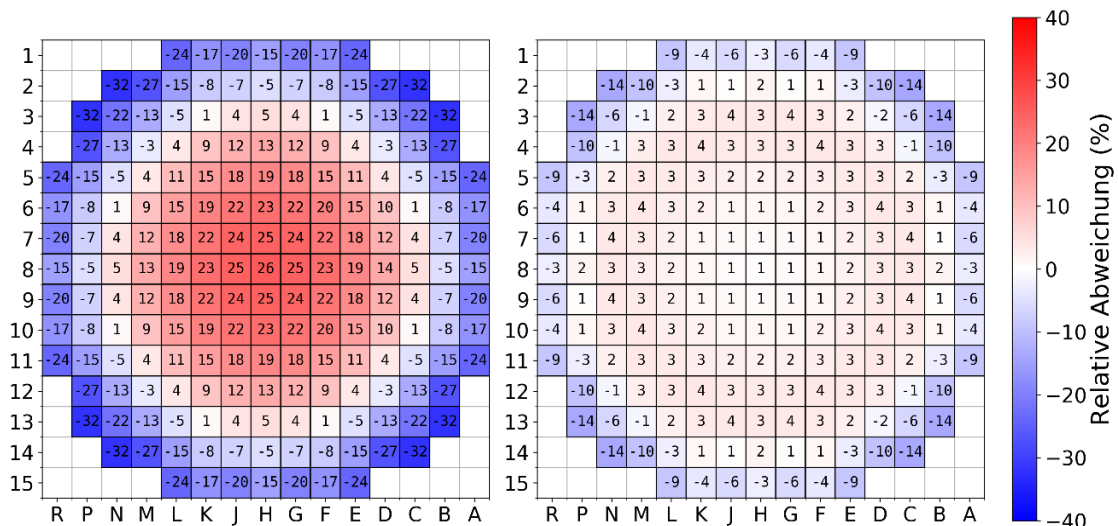


Abb. 6.18 Relative Abweichung der Leistungsverteilung $\Delta P = (P_{ATF} - P_{ref}) \times 10^2 / P_{ref}$ zwischen dem $U_3Si_2/FeCrAl$ -Brennstoff und dem Referenzmaterial $UO_2/Zr-4$
Zeitpunkt t = 0 Volllasttage (links) und t = 266 Volllasttage (rechts).

Da sich die ATF-Brennelemente am äußeren Rand des Kerns befinden (siehe Abb. 6.14), weist die Leistungsverteilung für beide betrachteten ATF-Materialien im Vergleich zum Referenzmaterial eine höhere Leistung im Inneren des Kerns und eine niedrigere Leistung am Rand des Kerns auf. Dies wird über die gesamte Zykluslänge beobachtet, wobei die Abweichungen gegen Ende des Zyklus weniger ausgeprägt sind. Auch hier kann beobachtet werden, dass die Abweichungen der Leistungsverteilung vom Referenzfall, aufgrund der leicht niedrigeren Reaktivität des $\text{UO}_2/\text{FeCrAl}$ -Materials im Vergleich zum $\text{U}_3\text{Si}_2/\text{FeCrAl}$ -Material, größer sind. Konkret werden für $\text{UO}_2/\text{FeCrAl}$ am Rand des Kerns Abweichungen von -16 % bis -36 % zu Zyklusbeginn und von -3 % bis -17 % nach 266 Volllasttagen beobachtet. Für $\text{U}_3\text{Si}_2/\text{FeCrAl}$ werden zu denselben Zeitpunkten Abweichungen von -17 % bis -32 % und von -3 % bis -14 % beobachtet.

Insgesamt zeigen die hier vorgestellten Arbeiten die Durchführbarkeit von KMACS-Rechnungen mit ATF-Brennstoff/Hüllrohr-Kombinationen. Alle hier durchgeführten Rechenschritte von der Erzeugung der homogenisierten Wirkungsquerschnitte bis hin zur Zyklusrechnung weisen plausible, physikalisch sinnvolle Ergebnisse auf. Die Kritikalitätsrechnungen der Brennelemente und die stationäre Ganzkernrechnung des Nulllast-Heiß-Zustands zeigen eine gute Übereinstimmung mit den Serpent-Referenzrechnungen als unabhängiges Codesystem. Auch bei der anschließenden Zyklusberechnung werden plausible Ergebnisse erzielt: Die geringere Borkonzentration reflektiert das höhere Neutronenabsorptionsvermögen der modellierten ATF-Brennelemente, und der stark radiale Abfall der Leistungsverteilung spiegelt die geometrische Verteilung der ATF-Brennelemente am Kernrand wieder. Lediglich bei der Handhabung von heterogenen Brennelementen (z. B. $\text{UO}_2/\text{Zr-4/Cr}$) wurden sowohl bei der KMACS-Eingabedatenerstellung für HELIOS als auch für ATHLET Defizite identifiziert, die in der weiteren Entwicklung von KMACS künftig behoben werden.

6.3 Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen für ATF-Systeme mit doppelter Heterogenität

Zur Durchführung von Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen wurde ein Brennelement mit heterogenem Brennstoff – TRISO-ähnliche Partikel in inerte Matrix (Fall 6, Abb. 6.3) – ausgewählt, da dies die größten Ansprüche an die Rechenmethodik stellt. Zur Durchführung von Transportberechnungen mit nuklearen Daten in Multigruppen-Darstellung ist in SCALE 6.2.3 eine spezielle Rechensequenz zur Resonanzselbstabschirmung für Anordnungen mit doppelter Heterogenität („DOUBLEHET“) verfügbar, das üblicherweise

für graphitmoderierte Hochtemperaturreaktoren eingesetzt wird, aber auch für die Behandlung der Resonanzselbstabschirmung von ATF-Brennstoff mit inerter Matrix verwendet werden kann /REA 18/.

Zunächst werden die in SCALE 6.2.3 verfügbaren nuklearen Daten und Berechnungsmethoden durch Vergleich mit Referenzberechnungen mit dem Monte-Carlo-Programm MCNP 6.1 überprüft, wobei Wirkungsquerschnittsdaten in kontinuierlicher Energiedarstellung zur Anwendung kommen. In Abb. 6.19 und Abb. 6.20 sind die Modelle für MCNP sowie für das Monte-Carlo-Code KENO-VI schematisch dargestellt.

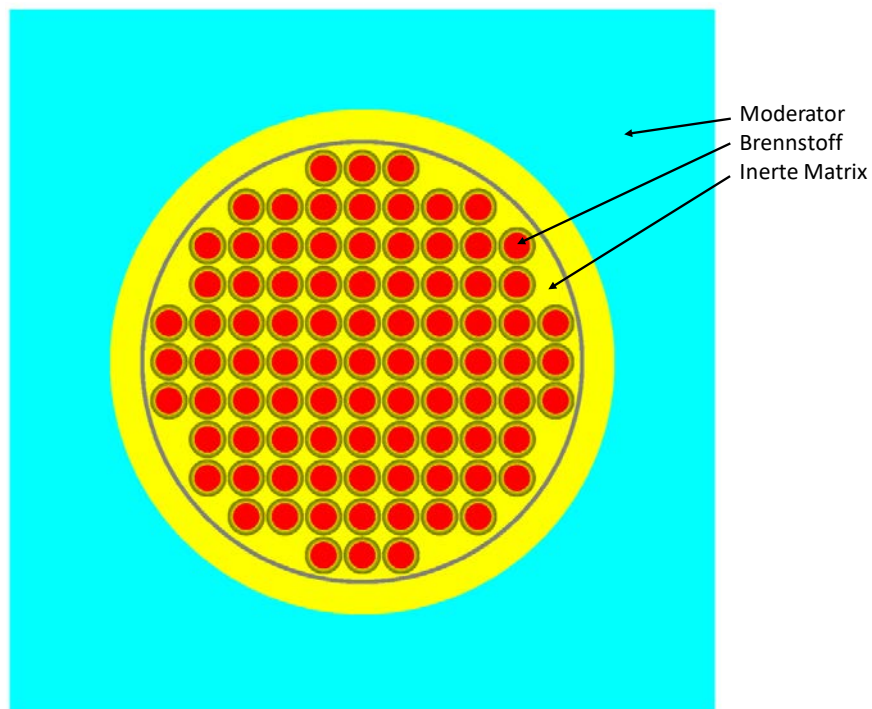


Abb. 6.19 MCNP- und KENO-VI-Modell einer Stabzelle mit Brennstoff mit inerter Matrix

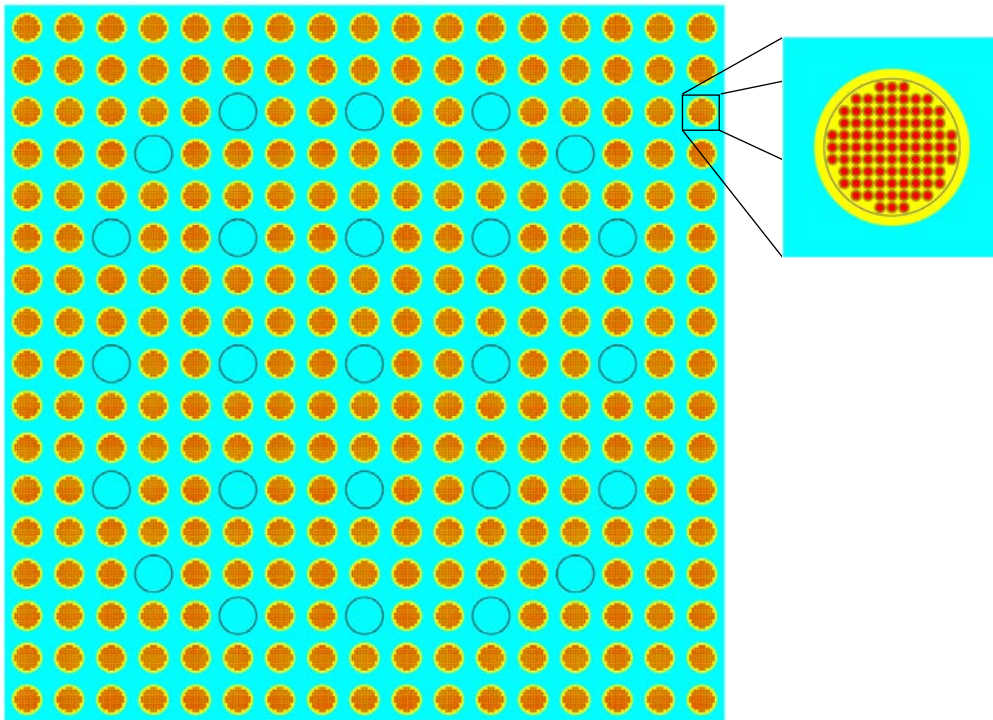


Abb. 6.20 MCNP- und KENO-VI-Modell eines Brennelements mit Brennstoff mit inerter Matrix

Die Untersuchungen wurden am Brennelement durchgeführt; Abb. 6.19 dient zur Verdeutlichung der Modellierung der Brennstabzelle mit den individuellen Brennstoffkörnern. Die Ergebnisse für die Multiplikationsfaktoren für das Brennelement sind in Tab. 6.10 zusammengestellt.

Tab. 6.10 Multiplikationsfaktoren für ein Brennelement mit inerter Matrix aus unterschiedlichen Rechenprogrammen

Code/Daten	Multiplikationsfaktor
MCNP 6.1, ENDF/B-VII.1 CE	1,29840 ± 0,00018
KENO-VI, ENDF/B-VII.1 CE	1,29658 ± 0,00022
NEWT, ENDF/B-VII.1 252 Gruppen	1,29729
NEWT, ENDF/B-VII.1 56 Gruppen	1,29702

Die NEWT-Ergebnisse wurden mit homogenisiertem Brennstoff erzielt, für den die Resonanzselbstabschirmung mit der DOUBLEHET-Option durchgeführt wurde. Es ergibt sich sehr gute Übereinstimmung zwischen allen unterschiedlichen Berechnungen; insbesondere unterscheiden sich die Werte aus den deterministischen Transportrechnungen mit den Wirkungsquerschnitten mit 252 und 56 Energiegruppen nur geringfügig, so

dass für die Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen die 56-Gruppen-Daten herangezogen wurden.

Sensitivitätsanalysen für Anordnungen mit doppelter Heterogenität sind mit den Werkzeugen, die SCALE 6.2.3 zur Verfügung stellt, nur mit dem auf dem Monte-Carlo-Code KENO basierenden Modul TSUNAMI-CE unter detaillierter Modellierung der Brennstoffkörner, siehe Abb. 6.19 und Abb. 6.20, mit Daten in kontinuierlicher Energiedarstellung möglich. Dafür ist allerdings bereits für einfache Sensitivitätsanalysen im Multiplikationsfaktor erheblicher Rechenaufwand erforderlich; die weiter unten gezeigten Sensitivitäten und Unsicherheiten wurden mit Rechenläufen erzeugt, die ca. 12 CPU-Stunden benötigen, wohingegen eine Sensitivitätsanalyse für ein konventionelles Brennelement mit TSUNAMI-2D unter Verwendung der Multigruppendaten mit 56 Energiegruppen in wenigen CPU-Minuten durchgeführt werden kann. Daher wurde eine Erweiterung von TSUNAMI-2D entwickelt, die sich auch für Systeme mit doppelter Heterogenität anwenden lässt, im Folgenden TSUNAMI-DH genannt. Ergebnisse für Sensitivitäten des Multiplikationsfaktors in Bezug auf wesentliche Reaktionen sind in Abb. 6.21 bis Abb. 6.24 dargestellt, und zwar für die vier Hauptbeiträge zur Gesamtunsicherheit. Es ergibt sich ausgezeichnete Übereinstimmung zwischen TSUNAMI-DH und den Referenzwerten aus TSUNAMI-CE.

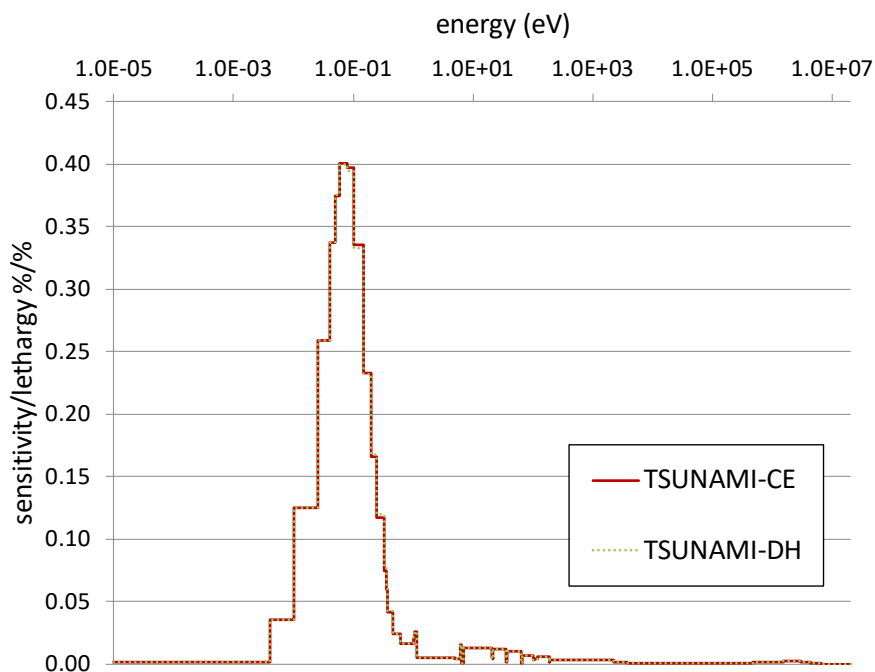


Abb. 6.21 Sensitivität des Multiplikationsfaktors des ATF-Brennelements in Bezug auf die mittlere Anzahl von Neutronen pro Spaltung von U-235

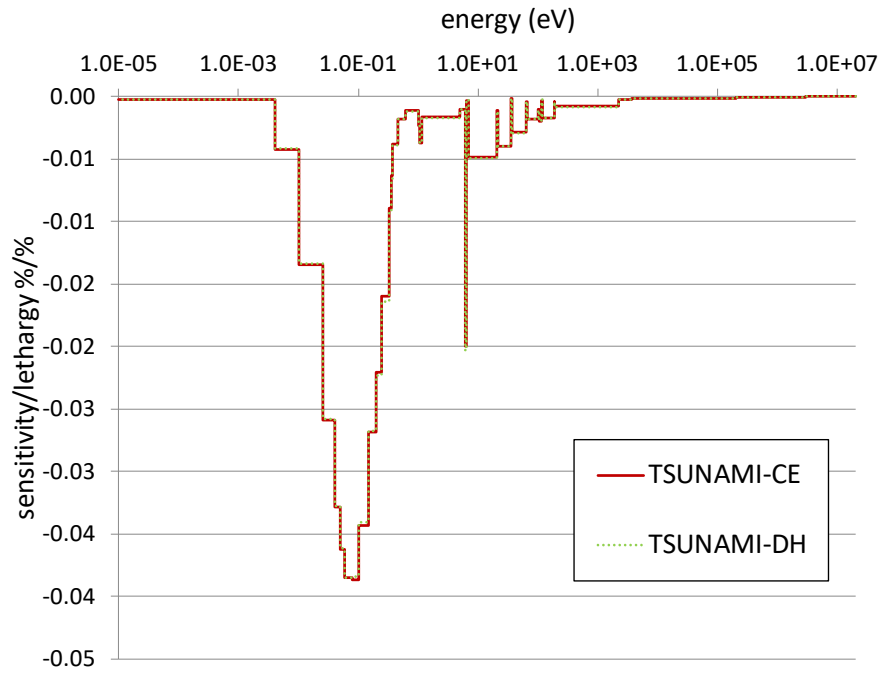


Abb. 6.22 Sensitivität des Multiplikationsfaktors des ATF-Brennelements in Bezug auf den Einfangquerschnitt von U-235

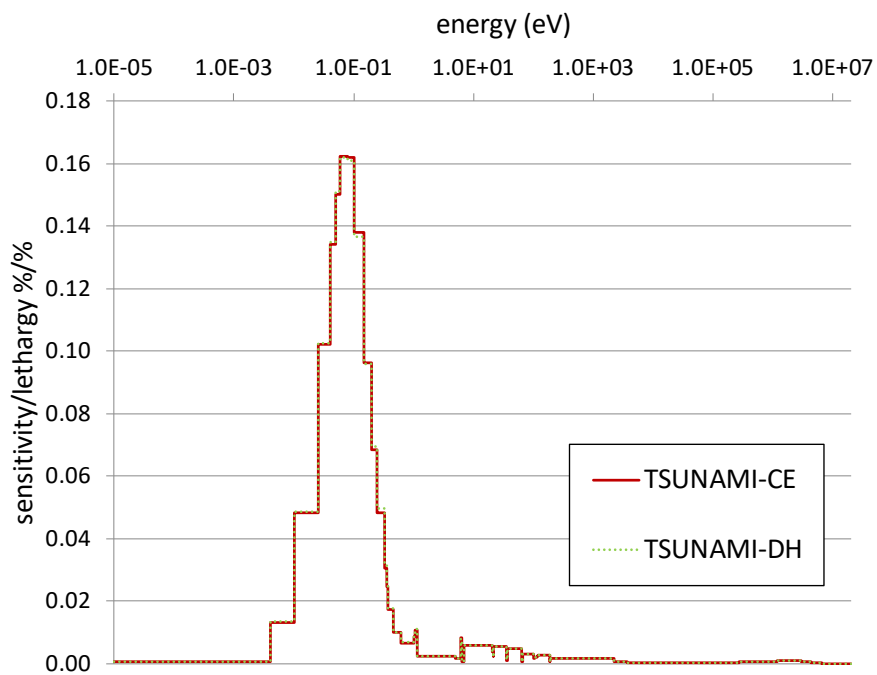


Abb. 6.23 Sensitivität des Multiplikationsfaktors des ATF-Brennelements in Bezug auf den Spaltquerschnitt von U-235

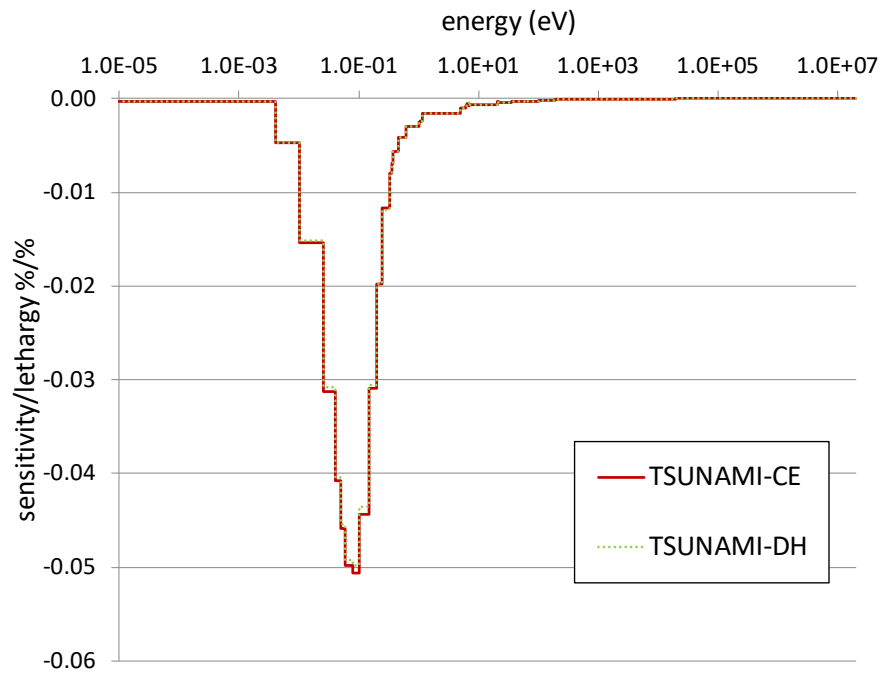


Abb. 6.24 Sensitivität des Multiplikationsfaktors des ATF-Brennelements in Bezug auf den Einfangquerschnitt von H-1

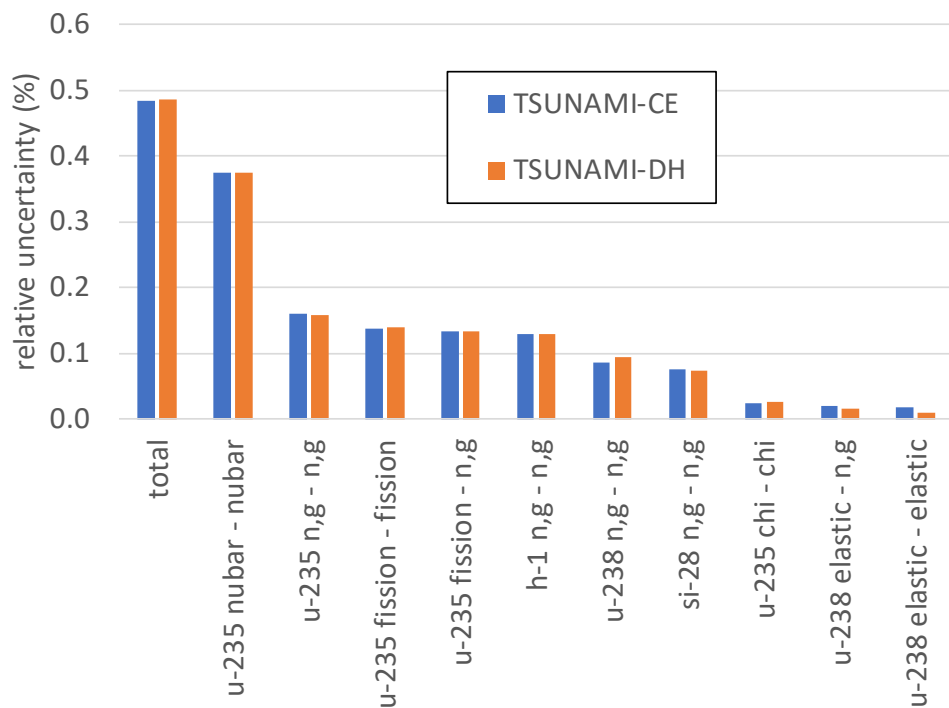


Abb. 6.25 Hauptbeiträge zur Unsicherheit des Multiplikationsfaktors des ATF-Brennelements

Die sich ergebenden Hauptbeiträge zur Unsicherheit des Multiplikationsfaktors sowie die Gesamtunsicherheit werden in Abb. 6.25 verglichen, wiederum mit sehr guter Übereinstimmung zwischen TSUNAMI-CE und TSUNAMI-DH. Insgesamt ist festzustellen, dass auch für ATF-Brennelemente mit inerter Matrix mit Werkzeugen der nuklearen Berechnungssequenz der GRS Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen geeignet durchgeführt werden können.

7 Zusammenfassung

Dieser Abschlussbericht dokumentiert die im BMWi-Forschungsvorhaben RS1564 „MOMENTUS – Moderne Methoden zu NeutronenTransport und Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen“ durchgeführten Arbeiten und erzielten Ergebnisse. Dazu zählen Neu- und Weiterentwicklungen, Validierungen und Anwendungen der eingesetzten neutronenphysikalischen Rechenverfahren und der Methoden zu Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen bezüglich nuklearer Wirkungsquerschnittsdaten. Diese Methoden werden bei Fragestellungen zum Kernverhalten von Druckwasserreaktoren westlicher Bauart, Reaktoren mit hexagonaler Brennelement- und Kerengeometrie, z. B. WWER, und von innovativen Reaktorkonzepten, dabei insbesondere von schnellen flüssigmetallgekühlten Reaktoren, eingesetzt.

Im Folgenden werden die durchgeführten Arbeiten und erzielten Ergebnisse der einzelnen Arbeitspakete dieses Forschungsvorhabens zusammenfassend dargestellt.

7.1 Weiterentwicklung des GRS-Kernsimulators KMACS

Weiterentwicklungen am GRS-Kernsimulator KMACS betreffen im Wesentlichen die Ermittlung stabaufgelöster Ergebnisgrößen bei DWR westlicher Bauart und die Erweiterung des Anwendungsbereichs von KMACS auf Reaktoren mit hexagonaler Kerengeometrie, wie WWER – einem im Ausland weit verbreiteten Druckwasserreakortyp russischer Bauart. Zur Sicherstellung der Zukunftsfähigkeit, Lauffähigkeit, Korrektheit und der Anwendbarkeit von KMACS wurde zudem der Quellcode von Python 2.7 auf Python 3.8 umgestellt. Die Weiterentwicklungen wurden durch Reaktorkernberechnungen und entsprechende Vergleiche mit Referenzlösungen und verfügbaren Betriebsdaten verifiziert und validiert.

Zur Ermittlung von verschiedenen stabaufgelösten Ergebnisgrößen bei Reaktorkernberechnungen von DWR wurde zunächst im KMACS-Modul *kflux* zur Ganzkern-Flussrechnung die Schnittstelle zwischen KMACS und dem Reaktordynamikcode DYN3D zwecks Berechnung der Stableistungsverteilung erweitert. Die Stableistungsverteilung kann dann einer nachfolgenden stabaufgelösten Abbrandberechnung sowie einer Unterkanal-Thermohydraulikrechnung als Eingangsgröße dienen. Die für die Stableistungsrekonstruktion notwendigen Stableistungsfaktoren werden dabei aus der Spektralrechnung mit SCALE/T-NEWT erhalten, in der KMACS-Datenbank gespeichert und über

diese dem *kflux* Modul als Eingabedaten zur Verfügung gestellt. Das KMACS-Eingabedatenformat wurde um die Information des Drehwinkels der Brennelemente für jeden Zyklus erweitert, damit sowohl die Stabileistungsfaktoren als auch die richtungsabhängigen *assembly discontinuity factors* korrekt zugeordnet werden.

Die Ermittlung der Stabileistungsverteilung mit KMACS unter Verwendung von DYN3D wurde mit einer Nachrechnung des Nulllast-Heiß Zustands des BEAVRS-Benchmarks und einem Vergleich zu einer Serpent-Referenzlösung verifiziert. Zwischen KMACS/DYN3D und Serpent wird eine zufriedenstellende Übereinstimmung erzielt. Größere Abweichungen treten am Kernrand auf; deren Ursache wird Gegenstand zukünftiger Untersuchungen sein.

Ferner wurde die Verwendung von DYN3D in KMACS für DWR-Zyklusrechnungen erprobt. Mit homogenisierten Wirkungsquerschnitten aus SCALE/T-NEWT erzielt KMACS unter Verwendung von DYN3D mit dessen internem Thermohydraulikmodul für den ersten Zyklus des BEAVRS-Benchmarks eine sehr gute Übereinstimmung zwischen der berechneten und der gemessenen kritischen Borkonzentration.

Mit der Implementierung eines weiteren KMACS-Moduls *kpostal* wurde der Unterkanal-Thermohydraulikcode COBRA-TF zur Ermittlung stabaufgelöster DNBR-Werte an KMACS angebunden. Der DNBR-Wert liefert Auskunft über den sicherheitsrelevanten Abstand zum Filmsieden. Nachfolgend zu einer Zyklusrechnung ist es mit KMACS nun möglich für ein manuell ausgewähltes oder für das höchstbelastete Brennelement für alle Zykluszeitpunkte COBRA-TF Rechnungen durchzuführen, um die radiale und axiale Verteilung von DNBR-Werten eines Brennelements zu ermitteln. Das Verfahren wurde erfolgreich für den ersten Zyklus des BEAVRS-Benchmarks getestet.

Für DWR wurde KMACS um die Berechnung des stabaufgelösten Abbrands und Nuklidinventars erweitert. Die unter Verwendung von DYN3D ermittelte Stabileistungsverteilung dient dabei als Eingangsgröße für das Inventarberechnungsprogramm Ventina, bei dem in jedem Knoten, jedes Brennstabsegment als ein abzubrennendes Material modelliert wird. Als weitere Eingangsdaten werden Ventina das Startinventar, mikroskopische Wirkungsquerschnitte und der Neutronenfluss für jedes Material sowie die globale Reaktorleistung übergeben. Da DYN3D nur eine stabaufgelöste Leistung jedoch keinen stabaufgelösten Neutronenfluss ausgibt, wird für jeden Stab eines Rechenknotens der Neutronenfluss in diesem Rechenknoten mittels der jeweiligen Stabileistung renormiert. In einem ersten Schritt wurde die Implementierung mit Zyklusrechnungen von

künstlichen, zweidimensionalen DWR-Minikern Modellen mit 6 x 6 Brennelementen überprüft. Zum Vergleich wurden Serpent-Referenzrechnungen durchgeführt. Für das Minikern Modell mit identischen UO₂ Brennelementen wurde für den gesamten Zyklus eine zufriedenstellende Übereinstimmung bei der stabaufgelösten Abbrandverteilung zwischen KMACS und Serpent festgestellt. Die relativen Abweichungen liegen mehrheitlich bei $\pm 2,5$ %. Größere Abweichungen werden am Kernrand beobachtet. Eine entsprechende Beobachtung gilt auch für die Nuklidinventare, wobei Neutronenspektrums-sensitive Nuklide größere Abweichungen zeigen. Für ein zweites Minikern Modell mit einer Schachbrettanordnung von zwei UO₂ Brennelementtypen mit unterschiedlicher U-235 Anreicherung werden ähnlich gute Ergebnisse erzielt. Diese Arbeiten werden fortgeführt mit dem Ziel, die Abweichungen zu verringern und das Verfahren auf Kerne von Leistungsreaktoren auszudehnen und zu überprüfen.

KMACS wurde zur Beschreibung von Reaktoren mit hexagonaler Kerngeometrie, speziell WWER – einem Druckwasserreaktor russischer Bauart, erweitert, um zukünftig Sicherheitsbewertungen für solche Reaktorsysteme durchführen zu können. Dazu wurden Erweiterungen am KMACS-Eingabedatenformat, am KMACS-Modul *kspect* zur Vorausrechnung homogenisierter Wirkungsquerschnitte, am KMACS-Modul *kflux* zur Durchführung gekoppelter Ganzkern-Rechnungen und am KMACS-Modul *kvip* zur Postprozessierung und Visualisierung von Ergebnisdaten vorgenommen. Für die gekoppelten Ganzkern-Rechnungen wird der Reaktordynamikcode DYN3D mit dessen internem Thermohydraulikmodell eingesetzt.

Die Erweiterungen in KMACS für die Beschreibung hexagonaler Reaktoren wurden mit der Nachrechnung des Nulllast-Heiß Zustands und des ersten Betriebszyklus des WWER-1000 Kerns aus dem X2 Benchmark überprüft. Mit Wirkungsquerschnitten, welche mit SCALE 6.2.3/T-NEWT berechnet wurden, wird für den Nulllast-Heiß Zustand zwischen KMACS mit DYN3D und einer Serpent Referenzlösung eine sehr gute Übereinstimmung beim Multiplikationsfaktor sowie bei der Brennelementleistungsverteilung erzielt. Die größte relative Abweichung mit 3,4 % tritt am Kernrand auf. Weitere Optimierungen an den radialen Reflektormodellen sollen zukünftig zu einer Verringerung der Abweichungen führen.

Für die Nachrechnung des ersten Betriebszyklus wurde die spezifizierte Betriebshistorie mit jeweils 323 Datenpunkten für die Leistung, Steuerstabstellung, Kühlmittelmassenstrom und Kühlmiteleintrittstemperatur zugrunde gelegt. Mit Wirkungsquerschnitten aus SCALE 6.2.3/T-NEWT ermittelt KMACS mit DYN3D einen Verlauf für die kritische

Borkonzentrationen, der in sehr guter Übereinstimmung mit dem Verlauf der gemessenen kritischen Borkonzentration ist. Für die Mehrheit der Zykluszeitpunkte ist die Abweichung geringer als 25 ppm.

Neben der Visualisierung von Ergebnissen können mit dem KMACS-Modul *kvip* nun auch KMACS-Eingabedaten wie das Stabgitter eines Brennelements, die Kernbeladung und die Steuerelementanordnung im Kern visualisiert werden. Diese Funktionalität dient insbesondere der frühzeitigen Erkennung von Eingabefehlern, sodass diese Fehler noch vor Durchführung der Zyklusrechnung korrigiert werden können.

7.2 Beschreibung des Reaktorkernverhaltens mit der Monte-Carlo-Methode

Im Rahmen dieses Vorhabens wurde die Hybridmethode zur Beschreibung des Reaktorkernverhaltens unter Verwendung von Monte-Carlo-Ganzkern-Rechnungen weiterentwickelt. Dazu wurde zunächst die Rechenkette bestehend aus dem Monte-Carlo-Code Serpent und dem Neutronenkinetik-/Thermohydraulik-Codesystem DYN3D-ATHLET bei konventioneller Verwendung – Vorausrechnung von homogenisierten Wirkungsquerschnitten mit Brennelementmodellen im unendlichen Gitter gefolgt von gekoppelte Ganzkern-Rechnungen – für die Analyse von Reaktortransienten erprobt. Hierzu wurden fünf Reaktivitätstransienten der SPERT III Experimente mit prompt kritischer oder prompt überkritischer Reaktivitätszufuhr bei unterschiedlichen anfänglichen Reaktorzuständen nachgerechnet. Für die untersuchten Ergebnisgrößen Reaktivitätszufuhr, maximale Leistung, Energiefreisetzung und Reaktivitätskompensation wird eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentell ermittelten Werten festgestellt. Der Zeitpunkt der maximalen Leistung liegt bei allen untersuchten Reaktivitätstransienten innerhalb von drei Standardabweichungen des experimentell ermittelten Zeitpunkts. Mit dieser Untersuchung konnte erfolgreich gezeigt werden, dass die Rechenkette bestehend aus dem Monte-Carlo-Code Serpent zur Berechnung von homogenisierten Wirkungsquerschnitten und dem Neutronenkinetik-/Thermohydraulik-Codesystem DYN3D-ATHLET für gekoppelte Ganzkern-Rechnungen für die Analyse von Reaktortransienten – auch von kleinen Reaktorkernen wie SPERT III – geeignet ist.

In einem weiteren Schritt wurde der Einsatz von homogenisierten Wirkungsquerschnitten aus Monte-Carlo-Ganzkern-Rechnungen mit dem Monte-Carlo-Code Serpent in nodalen Diffusionsrechnungen mit DYN3D erprobt. Hierzu wurde der TMI-1 Minikern als

Modell verwendet. Das Serpent-Ganzkern-Modell wurde räumlich wie das Diffusionsmodell diskretisiert, sodass für jeden Rechenknoten des Diffusionsmodells ein entsprechender Datensatz von homogenisierten Wirkungsquerschnitten im Serpent Ganzkern-Modell berechnet werden konnte. Für den Multiplikationsfaktor und die Leistungsverteilung wird eine zufriedenstellende Übereinstimmung mit der Serpent Referenzrechnung erreicht. Bei zusätzlicher Verwendung von ADFs kann die Leistungsverteilung erheblich verbessert werden. Dafür muss bislang jedoch auf ADFs von zweidimensionalen Brennelement- und Reflektormodellen im unendlichen Gitter zurückgegriffen werden, da die in Serpent implementierte Methode nur für zweidimensionale Modelle anwendbar ist. Bei zusätzlicher Verwendung von Transport-korrigierten Diffusionskonstanten wird zudem eine bessere Übereinstimmung beim Multiplikationsfaktor erreicht.

Für die Hybridmethode wurde das Kopplungsschema zwischen der Neutronenkinetik und der Thermohydraulik um Monte-Carlo-Ganzkern-Rechnungen zur Ermittlung von homogenisierten Wirkungsquerschnitten erweitert. Für die Neutronenkinetik-/Thermohydraulik-Rechnungen wird DYN3D-ATHLET eingesetzt; für die Monte-Carlo-Ganzkern-Rechnungen wird der Monte-Carlo-Code Serpent verwendet. Da eine Monte-Carlo-Ganzkern-Rechnung bei jedem Zeitschritt jedoch zu rechenaufwendig ist und die Wirkungsquerschnitte im Serpent-Ganzkern-Modell nur für einen einzelnen thermohydraulischen Zustand berechnet werden, wurde ein Extrapolationsverfahren implementiert, um Bibliotheken mit Wirkungsquerschnitten parametrisiert über Brennstofftemperatur, Moderatorichte und Borkonzentration erstellen zu können. Unkontrollierte und kontrollierte Wirkungsquerschnitte für die Modellierung von Steuerstabbewegungen im Neutronenkinetikmodell werden entweder über eine zusätzliche Monte-Carlo-Ganzkern-Rechnung bestimmt oder je nach Steuerstabstellung von benachbarten vollständig kontrollierten und vollständig unkontrollierten Rechenknoten übernommen. Die Hybridmethode wurde zur Simulation einer Steuerstabverfahrtransiente im TMI-1 Minikern mit einem vollständig kontrollierten Brennelement angewendet. Bei Start der Transientenrechnung werden zunächst konventionell erzeugte Wirkungsquerschnitte für die Ermittlung der kritischen Borkonzentration eingesetzt. Danach erfolgt die erste Serpent-Ganzkern-Rechnung und der Wechsel zu Wirkungsquerschnitten aus dem Ganzkern-Modell. Bei diesem Wechsel wird eine negative Reaktivitätszufuhr beobachtet, was zu einer Abschwächung des Leistungsanstiegs führt. In zukünftigen Untersuchungen soll eine Lösung zur Vermeidung der negativen Reaktivitätszufuhr gefunden werden. Zudem soll ein Verfahren entwickelt werden, mit dem ADFs direkt aus der Monte-Carlo-Ganzkern-Rechnung ermittelt werden können.

7.3 Weiterentwicklung, Validierung und Anwendung von Methoden zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse

Auf der Basis der im Vorhaben RS1536 erstellten Plattform für Unsicherheitsanalysen für schnelle Reaktorsysteme und der entsprechenden Spezifikation wurden in diesem Vorhaben Unsicherheitsanalysen für die nukleare Berechnungssequenz im Rahmen der Beteiligung an einem internationalen OECD/NEA-Benchmark durchgeführt. Als Transportprogramm wurde das SCALE-Modul NEWT herangezogen. Unter Verwendung der im Vorhaben RS1536 erzeugten Multigruppen-Wirkungsquerschnittsbibliotheken für schnelle Systeme ergibt sich dabei sehr gute Übereinstimmung mit den MCNP-Referenzlösungen hinsichtlich Multiplikationsfaktoren und Reaktivitätseffekten. Auf der Basis der NEWT-Berechnungen mit Nominaldaten wurden Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen mit dem GRS-Programmsystem XSUSA sowie den Berechnungssequenzen SAMPLER und TSUNAMI-2D aus SCALE 6.2 durchgeführt. Insgesamt zeigt sich sehr gute Übereinstimmung der mit den verschiedenen Methoden berechneten Unsicherheiten hinsichtlich Multiplikationsfaktoren, Reaktivitätseffekten und Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten.

Der C5G7-TD-Benchmark der OECD/NEA zur Durchführung von Transientensimulationen an einem beispielhaften kleinen DWR-artigen Reaktorkern verwendet bislang einen vorgefertigten Satz von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten für einen vorgegebenen Zustand bezüglich der thermohydraulischen Parameter. In diesem Vorhaben wurden Wirkungsquerschnitte mit sieben Energiegruppen auf einem Stützstellengitter von thermohydraulischen Parametern erzeugt. Die Daten wurden durch Vergleich mit Monte-Carlo-Referenzrechnungen für Brennelemente und Ganzkernanordnungen validiert und den Benchmark-Koordinatoren übergeben. Zur Durchführung von stichprobenbasierten Unsicherheitsanalysen wurden mit variierten mikroskopischen Wirkungsquerschnitten die 7-Gruppen-Wirkungsquerschnitte für die erforderlichen Brennstofftemperaturen berechnet und in das vorgeschriebene Format überführt.

Zur Durchführung einer Varianzdekomposition für die Ergebnisunsicherheit von Kritikalitätsberechnungen aus Zufallsstichproben der zugrunde liegenden mikroskopischen nuklearen Daten wurde in diesem Vorhaben ein linearer Regressionsansatz eingeführt; dies entspricht dem Unsicherheits-„Breakdown“, der normalerweise im Rahmen der deterministischen linearen Störungstheorie durchgeführt wird. Dabei hat es sich als vorteilhaft herausgestellt, die ursprünglichen Kovarianzdaten durch Diagonalmatrizen zu ersetzen, um den Sensitivitätsvektor zu schätzen. Der Unsicherheits-„Breakdown“ wird

schließlich durch Anwendung der „Sandwich-Formel“ mit dem geschätzten Sensitivitätsvektor und einer Stichproben-Kovarianzmatrix mit den vollständigen ursprünglichen Korrelationen durchgeführt. Der Ansatz basiert auf der Annahme, dass das Simulationsergebnis linear von den unsicheren Eingabeparametern abhängt. Die Leistungsfähigkeit der Methode wurde durch eine vergleichende Untersuchung der Ergebnisse von XSUSA (Random Sampling) und TSUNAMI (Störungstheorie) für die Anwendungsfälle aus dem UAM-SFR-Benchmark demonstriert. Die Konfidenzintervalle der Sensitivitätsindizes wurden durch Jackknife-Resampling abgeschätzt. Mit der vorgestellten Methode können Sensitivitäten und der Unsicherheits-„Breakdown“ für jede Ergebnisgröße einer Transportrechnung abgeschätzt werden, z. B. Diffusionskoeffizienten, während dies mit TSUNAMI nur für eine begrenzte Klasse von Ergebnissen möglich ist, im wesentlichen Reaktivitätsdifferenzen und mikroskopische und makroskopische Wirkungsquerschnitte. Darüber hinaus ist die Methodik nicht auf Simulationen mit SCALE beschränkt; sie kann eine gute Alternative für Codes sein, die keine adjungierten Transportrechnungen implementiert haben.

In diesem Vorhaben wurden zwei verschiedene Methoden zur Auswertung von Sensitivitäten und Unsicherheiten des effektiven verzögerten Neutronenanteils β_{eff} in Kritikalitätsberechnungen bezüglich nuklearer Datenunsicherheiten im Rahmen von SCALE 6.2, ergänzt durch die XSUSA-Methodik, beschrieben. Ein Ansatz basiert auf der deterministischen linearen Störungstheorie, und der andere auf einer linearen Regressionsanalyse einer Serie von Ergebnissen aus Zufallsstichproben. Beide Ansätze können angewendet werden, wenn β_{eff} mit Wirkungsquerschnitten in Multigruppendarstellung nach der sog. Prompt-k-Ratio-Methode berechnet wird. Der auf Stichproben basierende Ansatz ist auch für verzögerte Neutronenparameter anwendbar, die in sechs verzögerten Neutronengruppen dargestellt werden, wie sie durch adjungierte Flusswichtung in Gitterrechnungen berechnet werden. Für den Ansatz der linearen Störungstheorie wurde die TSUNAMI-Sequenz von SCALE zusammen mit einem zusätzlichen Satz von Multigruppen-Wirkungsquerschnittsdaten verwendet, bei denen die totale mittlere Anzahl der Neutronen pro Spaltung und das totale Spaltspektrum durch ihre entsprechenden prompten Werte ersetzt werden. Es wurde gezeigt, dass die Prompt-k-Ratio-Methode zur Berechnung von β_{eff} geeignet ist, da die totalen und prompten Neutronenflüsse der betrachteten Systeme gut übereinstimmen; Vergleiche von berechneten, mit gemessenen Werten für verschiedene schnelle und thermische kritische Anordnungen, zeigen mit einer Ausnahme Abweichungen innerhalb der experimentellen 1σ -Unsicherheiten. Die ungefähre Äquivalenz der deterministischen und stochastischen Methoden

zur Berechnung der β_{eff} -Sensitivitäten wird für die Fälle gezeigt, in denen beide Methoden einfach anwendbar sind, nämlich für die eindimensionalen kritischen Anordnungen, bei denen der NeutronenTransport mit dem deterministischen Transportcode XSDRN behandelt werden kann. Die wichtigsten β_{eff} -Sensitivitäten stimmen gut überein, und damit auch die Hauptbeiträge zur Gesamtunsicherheit. Bezüglich des Einflusses der Anzahl der pro Spaltung erzeugten verzögerten Neutronen ($\bar{\nu}$) beobachtet man sehr hohe Unsicherheitsbeiträge von U-238 und Pu-239 für Systeme mit großen Mengen dieser Isotope. Dies ist eine Folge der hohen β_{eff} -Sensitivitäten gegenüber diesen Größen und der unrealistisch hohen Unsicherheiten im verzögerten $\bar{\nu}$ in den SCALE 6.2-Kovarianzdaten von praktisch 100 % über den gesamten Energiebereich. Daher wird bei der Durchführung von Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen für verzögerte Neutronenparameter mit SCALE 6.2 vorerst die Verwendung von SCALE 6.2-Kovarianzdaten empfohlen, wobei allerdings die Kovarianzmatrizen für verzögerte $\bar{\nu}$ durch diejenigen ersetzt werden, die aus JENDL-4.0 prozessiert wurden.

Während des Vorhabens RS1536 wurde im Rahmen einer Kooperation mit Studsvik-Scandpower eine Schnittstelle zwischen dem Gitter-/Abbrandcode HELIOS-2 und XSUSA implementiert und validiert, die in der aktuellen HELIOS-2-Version verfügbar ist. Im Vorhaben RS1564 wurde das XSUSA/HELIOS-2-System dahingehend erweitert, dass beliebige Kovarianzdaten (bisher beschränkt auf die 44-Gruppen-Struktur aus SCALE 6.1) den Unsicherheitsanalysen zugrunde gelegt werden können. Von besonderem Interesse ist hier der Satz von Kovarianzdaten aus dem Programmsystem SCALE 6.2, das in der GRS für Produktionsrechnungen eingesetzt wird. Dies wird dadurch ermöglicht, dass die Energiestruktur der Kovarianzdaten aus SCALE 6.2 (56 Energiegruppen) auf die alte 44-Gruppen-Struktur umgestellt wird, auf deren Basis anschließend die Erzeugung der Variationsparameter erfolgt. Dazu muss die Schnittstelle im HELIOS-2-Quellcode nicht verändert werden. Die Interpolation der 56-Gruppen-Daten auf 44 Gruppen erfolgt mit dem Programm ANGELO2.3. Es wurden alle für Berechnungen von Stabzellen und Brennelementen aus dem UAM-LWR-Benchmark erforderlichen Kovarianzdaten prozessiert und damit einige Anordnungen neu simuliert. Die resultierenden Unsicherheiten wurden mit entsprechenden Größen aus TSUNAMI verglichen. In den meisten Fällen ist die Übereinstimmung gut; für einige zwei-Gruppen-Wirkungsquerschnitte ergeben sich größere Abweichungen in den Unsicherheiten, denen noch nachgegangen werden muss.

Bisher wurden in XSUSA die Variationen der Wirkungsquerschnitte auf die bereits abgeschirmten Daten angewandt; damit wird der Einfluss der Resonanzselbstabschirmungsrechnung auf die Unsicherheiten, die sog. impliziten Effekte, vernachlässigt, was in vielen Anwendungsfällen eine gute Näherung ist. Dennoch können diese sog. impliziten Effekte eine deutliche Rolle spielen, etwa beim Einfangquerschnitt von U-238 im Resonanzbereich, und sollten daher mitberücksichtigt werden. Im Vorhaben RS1536 war ein Verfahren skizziert worden, wie sich der implizite Anteil der Unsicherheiten störungstheoretisch unter Verwendung der Ergebnisse von eindimensionalen TSUNAMI-Berechnungen erfassen lässt. In diesem Vorhaben hat sich allerdings herausgestellt, dass der TSUNAMI-Ansatz zur Berechnung der impliziten Sensitivitäten methodische Schwächen aufweist. Daher wurde eine neue Berechnungssequenz entwickelt, bei der zusätzlich zur nominalen Resonanzselbstabschirmungsberechnung noch Sequenzen durchgeführt werden, bei denen die individuellen partiellen Wirkungsquerschnitte für die relevanten Reaktionen separat um einen kleinen Betrag variiert werden. Dies erfordert zwar gegenüber TSUNAMI einen Mehraufwand, ist aber methodisch befriedigender und liefert in einigen Fällen eine sichtbare Verbesserung der Ergebnisse. Zur Validierung der Methodik wurde ein eindimensionales System herangezogen. Dabei wurden Berechnungen mit TSUNAMI-CE und TSUNAMI-1D durchgeführt. In einigen Fällen ist zu sehen, dass die Sensitivitätsprofile und die daraus resultierenden Beiträge zur Ergebnisunsicherheit mit der neuen Berechnungssequenz besser mit den TSUNAMI-CE-Referenzergebnissen übereinstimmen als die entsprechenden Ergebnisse mit der ursprünglichen TSUNAMI-1D-Sequenz.

Ferner wurden die Untersuchungen zum Einfluss von Unsicherheiten in den nuklearen Wirkungsquerschnittsdaten auf die Ergebnisunsicherheiten von Reaktortransienten fortgesetzt. Untersucht wurde eine Steuerstabverfahrtransiente im TMI-1 Minikern beim Nulllast-Heiß Zustand mit einer nominalen Reaktivitätszufuhr von 0,97 \$. Auf der Basis von 1.000 variierten Wirkungsquerschnittsbibliotheken wurden 1.000 Transientenrechnungen mit DYN3D-ATHLET durchgeführt. Als wesentliches Ergebnis wurde festgestellt, dass die Stichprobe charakteristisch unterschiedliche Transientenverläufe enthält, da einige Fälle prompte Überkritikalität und dadurch hohe Werte für die Reaktorleistung erreichen. Dies resultiert in einer schiefen Stichprobenverteilung für die resultierende Reaktorleistung und die Annahme einer Normalverteilung kann nicht für die gesamte betrachtete Problemzeit aufrechterhalten werden. Aus diesem Grund wurde für die statistische Untersuchung der Stichprobe für die Reaktorleistung das verteilungsfreie Wilks Toleranzlimit ausgewertet. Mit Auswertung des multiplen quadrierten

Korrelationskoeffizienten R^2 wurden die Hauptbeiträge zur Ergebnisunsicherheit für die Reaktorleistung identifiziert. Zunächst ist dies Spaltneutronenausbeute von U-235; noch vor Erreichen des Leistungsmaximums bilden die Streuwirkungsquerschnitte von U-238 die Hauptbeiträge. Minima in den R^2 Verläufen zum Zeitpunkt der maximalen Leistung deuten an, dass zu diesem Zeitpunkt die Unsicherheit der Leistung durch nicht-lineare Effekte beeinflusst wird. Insgesamt zeigten diese Untersuchungen, dass bei einer Reaktivitätstransiente mit einer Reaktivitätszufuhr knapp unterhalb des prompt kritischen Zustands die Unsicherheiten in den Wirkungsquerschnittsdaten einen erheblichen Einfluss auf das berechnete reaktordynamische Verhalten des Kerns haben.

7.4 Überprüfung der nuklearen Berechnungskette im Hinblick auf *Accident Tolerant Fuels*

Ein weiterer Arbeitspunkt dieses Vorhabens stellt den Ausgangspunkt der Erprobung und des Nachweises der Anwendbarkeit der nuklearen Simulationskette der GRS für verschiedene ATF-Konzepte dar. Neben einer grundsätzlich gegebenen guten Anwendbarkeit der eingesetzten Werkzeuge wurde auch punktueller Handlungsbedarf für künftige Verbesserungen identifiziert.

Vergleichende Kritikalitätsberechnungen unter Verwendung verschiedener Berechnungssequenzen und Wirkungsquerschnittsbibliotheken von SCALE 6.2.3 auf der Basis ausgewählter, generischer ATF-Modellsysteme wurden durchgeführt. Hierbei konnte unter Verwendung verschiedener Sequenzen und Wirkungsquerschnittsdateien eine gute Übereinstimmung der Ergebnisse für die betrachteten Modellsysteme im Hinblick auf Multiplikationsfaktoren, EALF und kondensierte Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte im Nulllast-Heiß-Zustand erzielt werden. Um das Vertrauen in die Ergebnisse weiter zu stärken, wurden die Untersuchungen durch Analysen mit Serpent und ENDF/B-VII.0-Wirkungsquerschnitten als unabhängiges Codesystem ergänzt. Für die Modellsysteme, die den Brennstoff und/oder das Hüllrohrmaterial vollständig aus dem Referenzsystem ersetzen und dabei die Geometrie beibehalten, sind die Ergebnisse der k_{inf} -, EALF- und Zweigruppen-Wirkungsquerschnitte für die verschiedenen Codes ebenfalls gut vergleichbar. In Bezug auf doppelt heterogene Systeme wie TRISO-Partikel in inerter Matrix als Pellets in Hüllrohren weist das SCALE-Programmsystem bei der Prozessierung von Wirkungsquerschnitten noch Defizite auf, die durch den Einsatz von Serpent grundsätzlich ausgeglichen werden können, was aber noch nicht automatisiert z. B. im Rahmen des Kernsimulators umgesetzt ist.

In Erweiterung zur Code-zu-Code-Verifikation ist die Validierung gegen kritische Benchmark-Experimente noch eine größere Herausforderung. Obwohl Konfigurationen mit den betrachteten Elementen prinzipiell verfügbar sind, fehlt es an vollständig geeigneten experimentellen Konfigurationen mit ausreichender Empfindlichkeit für die geforderten Komponenten. Für eine robuste Quantifizierung werden künftig weitere Untersuchungen und Anstrengungen notwendig sein, um den aktuellen Stand in diesem Punkt zu klären.

In einem weiteren Schritt wurden für ausgewählte Brennstoff-/Hüllrohr-Kombinationen Abbrandrechnungen zur Inventarbestimmung durchgeführt. Dies erfolgte zunächst auf Basis der Stabzellenmodelle, zweitens anhand einzelner ATF-Brennstäbe innerhalb eines herkömmlichen Standard-Brennelements, und drittens anhand von vollständigen Brennelementen aus ATF-Brennstäben. Die Untersuchungen zeigen das erwartete Verhalten der Inventarentwicklung, insbesondere einen verstärkten Plutoniumaufbau bei spektraler Verhärtung durch Hüllrohrmaterialien, welche stärker Neutronen absorbieren als Zirkonium-basierte Materialien. Durch eine Modellierung der betrachteten Stabzellen in mehreren Brennstoff-Ringzonen konnte dieses Verhalten auch für den bekannten *rim effect*, also einem gegenüber der Pellet-Mitte verstärkten Plutoniumaufbau im äußeren Bereich der Pellets, gezeigt werden. Dieser *rim effect* wird bei stärker Neutronenabsorbierenden Hüllrohrmaterialien durch die spektrale Verhärtung als stärker ausgeprägt erwartet, was sich in den bisherigen Rechenergebnissen plausibel widerspiegelt. Weiterhin wurden Vergleichsrechnungen zwischen SCALE/TRITON und dem GRS-eigenen Inventarberechnungsprogramm MoTIVE durchgeführt, welches den Einsatz unterschiedlicher Wirkungsquerschnittsevaluationen erlaubt. Damit konnte zum einen der Bibliothekseffekt auf die Inventarbestimmung untersucht, und zum anderen eine gute Übereinstimmung der errechneten Nuklidmassen mit den unterschiedlichen Verfahren anhand eines ATF-Modellsystems demonstriert werden. Darüber hinaus wurden mit SCALE/TRITON Aktivierungsrechnungen für ein ausgewähltes kommerzielles Material vom FeCrAl-Typ als Hüllrohr durchgeführt, die zu plausiblen Ergebnissen geführt haben.

Die mit dem GRS-Kernsimulator KMACS durchgeführten Rechnungen mit ausgewählten ATF-Varianten liefern physikalisch plausible Ergebnisse. Dabei wurde die Rechenkette von der Wirkungsquerschnittserzeugung bis hin zur Ganzkern-Zyklusberechnung getestet. Die Wirkungsquerschnitte wurden mit den Spektralcodes SCALE 6.2.3/T-NEWT und mit HELIOS-2 erzeugt, wobei diese mit KMACS angesteuert wurden. Um das Vertrauen in die Ergebnisse zu stärken, wurden unabhängige Serpent-Rechnungen durchgeführt. Die maximal beobachtete Reaktivitätsdifferenz beträgt 389 pcm und zeigt somit eine

akzeptable Übereinstimmung auf. Des Weiteren wurden die mit SCALE erzeugten Wirkungsquerschnitte für eine stationäre Ganzkern-Rechnung bei Nulllast-Heiß Bedingungen mit QUABOX/CUBBOX verwendet. Die erzielten Ergebnisse wurden ebenfalls mit Serpent-Referenzrechnungen verglichen. Trotz der in der QUABOX/CUBBOX-Rechnung durchgeführten Näherungen werden mit einer Reaktivitätsdifferenz von 208 pcm und einer maximalen Differenz bei der Leistung von 7% akzeptable Werte erzielt. Bei der anschließend durchgeführten Zyklusberechnung wurde das gekoppelte Programmsystem ATHLET-QUABOX/CUBBOX verwendet. Die erzielten Ergebnisse liefern plausible Verläufe der kritischen Borkonzentration sowie plausible Leistungsverteilungen. Die Prozessierung heterogen aufgebauter Hüllrohre, z. B. Hüllrohre mit einer zusätzlichen Materialbeschichtung, ist in den meisten Spektralcodes prinzipiell machbar, jedoch ist die automatisierte Erstellung entsprechender Eingabedatensätze durch KMACS noch nicht vollständig implementiert.

In diesem Vorhaben wurden Nominalberechnungen für ein ATF-Brennelement mit heterogenem Brennstoff mit inerter Matrix durchgeführt, sowie die entsprechenden Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen. Die in SCALE 6.2 verfügbaren nuklearen Daten und Berechnungsmethoden wurden durch Vergleich mit Referenzberechnungen mit dem Monte-Carlo-Programm MCNP 6.1 unter Verwendung von Daten kontinuierlicher Energie überprüft; es ergibt sich sehr gute Übereinstimmung. Zur Durchführung von Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen für Systeme mit doppelter Heterogenität ist in SCALE 6.2 nur der Monte-Carlo-Code TSUNAMI-CE verfügbar; entsprechende Analysen erfordern allerdings sehr hohen Rechenaufwand. Deshalb wurde eine Erweiterung von TSUNAMI-2D mit Multigruppen-Daten entwickelt, die sich auch für Systeme mit doppelter Heterogenität anwenden lässt. Die ausgewerteten Sensitivitätsprofile und Beiträge zur Ergebnisunsicherheit stimmen sehr gut mit den Ergebnissen aus TSUNAMI-CE überein.

Literaturverzeichnis

- /AKI 94/ Akino, F., Takeuchi, M., Ono, T.: Measurement of Effective Delayed Neutron Fraction of VHTRC-1 Core. *Journal of Nuclear Science and Technology*, Bd. 31, Nr. 8, S. 861–863, DOI 10.1080/18811248.1994.9735232, 1994.
- /AUR 15/ Aures, A., Behler, M., Bostelmann, F., Gallner, L., Hannstein, V., Kilger, R., Sommer, F., Stuke, M., Velkov, K., Zilly, M., Zwermann, W.: Weiterentwicklung und Qualifizierung der GRS-Abbrandverfahren unter Einbeziehung schneller Spektren, Abschlussbericht. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-386, 181 S., ISBN 978-3-944161-67-9: Garching b. München, 2015.
- /AUR 17/ Aures, A., Bostelmann, F., Kodeli, I. A., Velkov, K., Zwermann, W.: Uncertainty in the delayed neutron fraction in fuel assembly depletion calculations. In: *EPJ Web of Conferences: Proceedings of ND 2016. International Conference on Nuclear Data for Science and Technology (ND2016)*, Bruges, Belgium, September 2016, Volume 146, DOI 10.1051/epjconf/201714602052, 2016.
- /AUR 19/ Aures, A., Bernnat, W., Bostelmann, F., Bousquet, J., Krzykacz-Hausmann, B., Pautz, A., Velkov, K., Zwermann, W.: Reactor simulations with nuclear data uncertainties. *Nuclear Engineering and Design*, Bd. 355, S. 110313, DOI 10.1016/j.nucengdes.2019.110313, 2019.
- /AUR 20/ Aures, A., Berner, N., Pautz, A., Zwermann, W.: Uncertainty and sensitivity analysis of PWR mini-core transients in the presence of nuclear data uncertainty using non-parametric tolerance limits. *Annals of Nuclear Energy*, Bd. 137, S. 107146, DOI 10.1016/j.anucene.2019.107146, 2020.
- /AUS 16/ Austregesilo, H., Bals, C., Hora, A., Lerchl, G., Romstedt, P., Schöffel, P. J., Cron, D. von der, Weyermann, F.: *ATHLET 3.1A - Models and Methods*. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-P-1 / Vol. 3, Rev. 4, 2016.

- /BEH 14/ Behler, M., Bock, M., Rowold, F., Stuke, M.: SUnCISTT - A Generic Code Interface for Uncertainty and Sensitivity Analysis. In: PSAM 12. Probabilistic Safety Assessment and Management, Honolulu, Hawaii, USA, 22. - 27. Juni 2014, 2014.
- /BEH 18/ Behler, M., Bostelmann, F., Hannstein, V., Küntzel, M., Sommer, F., Zwermann, W.: Weiterentwicklungen moderner Verfahren im Bereich Abbrandberechnung. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit gGmbH (GRS), GRS-528, ISBN 978-3-947685-13-4: Garching, September 2018.
- /BEN 09/ Ben-Kiki, O., Evans, C., Net, I.: YAML Ain't Markup Language (YAML™) Version 1.2, 3rd Edition. Erreichbar unter <https://yaml.org/spec/1.2/spec.html>, Stand von 2009.
- /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.
- /BIS 18/ Bischoff, J., Brachet, J. C., Bragg-Sitton, S., Chauvin, J.-P.: State-of-the-Art Report on Light Water Reactor Accident-Tolerant Fuels. OECD/NEA Report 7317, 2018.
- /BOS 15/ Bostelmann, F., Weiss, F.-P., Aures, A., Velkov, K., Zwermann, W., Rearden, B. T., Jessee, M. A., Williams, M. L., Wiarda, D., Wieselquist, W. A.: Uncertainty and Sensitivity Analysis in Criticality Calculations with Perturbation Theory and Sampling. In: Proceedings of M&C 2015. Nashville, TN, USA, 19. - 23. April 2015, 2015.
- /BOS 17/ Bostelmann, F., Brown, N. R., Pautz, A., Rearden, B. T., Velkov, K., Zwermann, W.: SCALE Multi-Group Libraries for Sodium-Cooled Fast Reactor Systems. In: Proceedings of M&C 2017. International Conference on Mathematics & Computational Methods Applied to Nuclear Science & Engineering, Jeju, Korea, 16. - 20. April 2017, 2017.

- /BOU 18a/ Bousquet, J., Zilly, M., Küntzel, M.: KMACS User Manual, Version 1.0. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), 2018.
- /BOU 18b/ Bousquet, J., Stoll, U., Velkov, K., Zwermann, W., Wemple, C., Simeonov, T.: Nuclear Data Uncertainty Propagation with HELIOS2 and XSUSA for LWR Systems. In: Proceedings of PHYSOR 2018. Reactor Physics Paving The Way Towards More Efficient Systems, Cancun, Mexico, 22. - 26. April 2018, 2018.
- /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/NSC/DOC(2017), 11 S., 2017.
- /BOY 19/ Boyarinov, V., Fomichenko P., Hou, J., Avramova, M., Ivanov, K., Aures, A., Zwermann, W., Velkov, K.: Deterministic Time-Dependent Neutron Transport Benchmark without Spatial Homogenization (C5G7-TD), Volume II: Dynamics Phase, Version 0.2. OECD Nuclear Energy Agency (NEA), 2019.
- /BRE 97/ Bretscher, M. M.: Evaluation of Reactor Kinetic Parameters without the Need for Perturbation Codes. In: International Meeting on Reduced Enrichment for Research and Test Reactors.
- /BRO 18/ Brown, D. A., Chadwick, M. B., Capote, R., Kahler, A. C., Trkov, A., Herman, M. W., Sonzogni, A. A., Danon, Y., Carlson, A. D., Dunn, M., Smith, D. L., Hale, G. M., Arbanas, G., Arcilla, R., et al.: ENDF/B-VIII.0: The 8th Major Release of the Nuclear Reaction Data Library with CIELO-project Cross Sections, New Standards and Thermal Scattering Data. Nuclear Data Sheets, Nr. 148, S. 1–142, DOI 10.1016/j.nds.2018.02.001, 2018.
- /BUI 19/ Buiron, L., Rimpault, G., Sciora, P., Stauff, N., Kim, T. K., Taiwo, T., Bostelmann, F., Pautz, A., Trivedi, I., Ivanov, K., Keresztúri, A., Aures, A., Velkov, K., Zwermann, W., Mikityuk, K.: Benchmarks for Uncertainty Analysis in Modelling (UAM) for Design, Operation and Safety Analysis of SFRs, Version 1.6 - Draft. Hrsg.: OECD Nuclear Energy Agency (NEA), 2019.

- /CAR 69/ McCardell, R. K., Herborn, D. I., Houghtaling, J. E.: Reactivity accident test results and analyses for the SPERT III E-core - A small oxide-fueled, pressurized-water reactor, IDO-17281. Hrsg.: U.S. Atomic Energy Commission (AEC): USA, 1969.
- /CAR 11/ Carta, M., Dulla, S., Peluso, V., Ravetto, P., Bianchini, G.: Calculation of the Effective Delayed Neutron Fraction by Deterministic and Monte Carlo Methods. Science and Technology of Nuclear Installations, 2011.
- /CAS 91/ Casal, J. J., Stamm'ler, R.J.J., 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.
- /CHA 11/ Chadwick, M. B., Herman, M., Obložinský, P., Dunn, M. E., Danon, Y., Kahler, A. C., Smith, D. L., Pritychenko, B., Arbanas, G., Arcilla, R., Brewer, R., Brown, D. A., Capote, R., Carlson, A. D., et al.: ENDF/B-VII.1 Nuclear Data for Science and Technology: Cross Sections, Covariances, Fission Product Yields and Decay Data. Nuclear Data Sheets, Bd. 112, Nr. 12, S. 2887–2996, DOI 10.1016/j.nds.2011.11.002, 2011.
- /DOL 15/ Doligez, X., Billebaud, A., Chabod, S., Chevret, T., Fourmentel, D., Krasa, A., Kochetkov, A., Lecolley, F. R., Lecouey, J. L., Lehaut, G., Marie, N., Mellier, F., Vittiglio, G., Wagemans, J.: Effective Delayed Neutron Fraction Measurement in the Critical VENUS-F Reactor Using Noise Techniques. In: Proceedings of ANIMMA 2015. International Conference on Advancements in Nuclear Instrumentation Measurement Methods and Their Applications, 2015.
- /EFR 81/ Efron, B., Stein, C.: The Jackknife Estimate of Variance. The Annals of Statistics, Bd. 9, Nr. 3, DOI 10.1214/aos/1176345462, 1981.
- /GIF 18/ Generation IV International Forum (GIF): GIF Portal - Home - Public. Stand vom 22. November 2018, erreichbar unter https://www.gen-4.org/gif/jcms/c_9261/home, abgerufen am 24. Januar 2020.

- /HAN 18/ Hannstein, V., Behler, M., Sommer, F.: Towards A Validation of the Burn-Up Code Motive. In: Proceedings of PHYSOR 2018. Reactor Physics Paving The Way Towards More Efficient Systems, Cancun, Mexico, 22. - 26. April 2018, 2018.
- /HAN 19/ Hannstein, V., Behler, M., Sommer, F.: Validation Of The Burn-Up Code MOTIVE Using ENDF/B-VIII Data. In: American Nuclear Society (ANS): ICNC 2019. International Conference on Nuclear Criticality Safety, Paris, Frankreich, 15. - 20. September 2019, 2019.
- /HES 93/ Hesse, U., Hummelsheim, K.: Detaillierte, dreidimensionale Abbrandberechnung für ein SWR-Atriumbrennelement. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-A-2116, 1993.
- /HOR 91/ Horwedel, J. E.: GRESS, a Preprocessor for Sensitivity Studies of Fortran Programs. Automatic Differentiation of Algorithms: Theory, Implementation and Application. In: Proceedings of SIAM. Philadelphia, USA, 1991.
- /HOR 18/ 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.
- /HOU 14/ Hou, J., Blyth, T., Porter, N., Avramova, M., Ivanov, K., Royer, E., Sartori, E., Cabellos, O., Feroukhi, H., Ivanov, E.: Benchmark for Uncertainty Analysis in Modelling (UAM) for Design, Operation and Safety Analysis of LWRs, Volume II: Specification and Support Data for the Core Cases (Phase II), Version 1.9. Hrsg.: Nuclear Energy Agency, NEA/NSC/DOC(2014), 2014.
- /IAEA 06/ International Atomic Energy Agency (IAEA): Thermophysical Properties Database of Materials for Light Water Reactors and Heavy Water Reactors. IAEA-TECDOC-1496, Juni 2006.
- /ILA 12/ Ilas, G., Gauld, I. C., Radulescu, G.: Validation of new depletion capabilities and ENDF/B-VII data libraries in SCALE. Annals of Nuclear Energy, Bd. 46, S. 43–55, DOI 10.1016/j.anucene.2012.03.012, 2012.

- /IVA 16/ Ivanov, K., Avramova, M., Kamerow, S., Kodeli, I. A., Sartori, E., Ivanov, E., Cabellos, O.: Benchmark for Uncertainty Analysis in Modelling (UAM) for Design, Operation and Safety Analysis of LWRs, Volume I: Specification and Support Data for the Neutronics Cases (Phase I), Version 2.1. Hrsg.: OECD Nuclear Energy Agency (NEA), NEA/NSC/DOC(2012)10, 2016.
- /JAN 20/ Jang, J., Hursin, M., Papadionysiou, M.: Preliminary results of ROSTOV-II benchmark. Präsentation, Rostov-2 benchmark team meeting, 16. Dezember 2020.
- /KIM 05/ Kim, Y., Kim, K.-S., J.M. and Noh: Reactivity-Equivalent Physical Transformation for Homogenization of Double-Heterogeneous Fuels. In: Transactions of the Korean Nuclear Society Autumn Meeting. Busan, Korea, 2005.
- /KOD 90/ Kodeli, I. A., Sartori, E.: Neutron Cross-Section Covariance Data in Multigroup Form and Procedure for Interpolation to Users' Group Structures for Uncertainty Analysis Applications. In: Proceedings of PHYSOR 1990. Marseille, Frankreich, 1990.
- /KOD 11/ Kodeli, I. A.: The SUS3D Code for Cross-Section Sensitivity and Uncertainty Analysis - Recent Development. In: Transactions of the American Nuclear Society. Nr. 104, Bd. 104, 2011.
- /KOD 13/ Kodeli, I.-A.: Sensitivity and uncertainty in the effective delayed neutron fraction β_{eff} . Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, Bd. 715, Nr. 1, S. 70–78, DOI 10.1016/j.nima.2013.03.020, 2013.
- /KOD 14/ Kodeli, I., Zwermann, W.: Evaluation of Uncertainties in β_{eff} by Means of Deterministic and Monte Carlo Methods. Nuclear Data Sheets, Bd. 118, S. 370–373, DOI 10.1016/j.nds.2014.04.083, 2014.
- /KRZ 90/ Krzykacz, B.: EQUUS: A Computer Program for the Derivation of Empirical Uncertainty Statements on Results from Large Computer Models. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH (GRS), GRS-A-1720, 1990.

- /KVKT 13/ Kompetenzverbund Kerntechnik: Nukleare Sicherheitsforschung; Neuorientierung an aktuellen energiepolitischen Rahmenbedingungen. März 2013.
- /LAN 78/ Langenbuch, S., Maurer, W., Werner, W.: QUABOX/CUBBOX - Version 02, Ein Grobgitterverfahren zur Lösung der Neutronendiffusionsgleichungen, Programmbeschreibung. GRS-A-160, Juli 1978.
- /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.
- /LEP 15/ Leppänen, J., Pusa, M., Viitanen, T., Valtavirta, V., Kaltiaisenaho, T.: The Serpent Monte Carlo Code, Status, Development and Applications in 2013. Annals of Nuclear Energy, Bd. 82, S. 142–150, DOI 10.1016/j.anucene.2014.08.024, 2015.
- /LÖT 09/ Lötsch, T., Khalimonchuk, V., Kuchin, A.: Proposal of a benchmark for core burnup calculation of a VVER-1000 reactor core. In: Symposium of AER 2009. 19th Symposium of AER on VVER Reactor Physics and Reactor Safety, Bulgaria, 21. - 25. September 2009, 2009.
- /LÖT 10/ Lötsch, T., Khalimonchuk, V., Kuchin, A.: Corrections and additions to the proposal of a benchmark for core burnup calculations for a VVER-1000 reactor. In: Symposium of AER 2010. 20th Symposium of AER on VVER Reactor Physics and Reactor Safety, Hanasaari, Espoo, Finland, 20. - 24. September 2010, 2010.
- /MAC 94/ MacFarlane, R. E., Muir, D. W.: The NJOY Nuclear Data Processing System Version 91. LA-12740-M, 1994.
- /MEU 06/ Meulekamp, R. K., van der Marck, S. C.: Calculating the Effective Delayed Neutron Fraction with Monte Carlo. Nuclear Science and Engineering, Bd. 152, Nr. 2, S. 142–148, DOI 10.13182/NSE03-107, 2006.

- /NAK 01/ Nakajima, K.: Re-evaluation of the Effective Delayed Neutron Fraction Measured by the Substitution Technique for a Light Water Moderated Low-enriched Uranium Core. *Journal of Nuclear Science and Technology*, Bd. 38, Nr. 12, S. 1120–1125, DOI 10.1080/18811248.2001.9715145, 2001.
- /NEA 08/ OECD Nuclear Energy Agency (NEA): Burn-up Credit Criticality Benchmark, Phase II-C: Impact of the Asymmetry of PWR Axial Burn-up Profiles on the End Effect. NEA No. 5435, ISBN 978-92-64-99049-4: Issy-les-Moulineaux, France, 2008.
- /NEA 16a/ OECD Nuclear Energy Agency (NEA): JEFF-3.2 evaluated data library. Hrsg.: OECD/NEA, Stand vom 10. März 2016, erreichbar unter https://www.oecd-nea.org/dbforms/data/eva/evatapes/jeff_32/, 2016.
- /NEA 19a/ OECD Nuclear Energy Agency (NEA) (Hrsg.): International Criticality Safety Benchmark Evaluation Project (ICSBEP), Handbook 2019. NEA/NSC/DOC(95)03, DOI 10.1787/e2703cd5-en: Paris, Juni 2019.
- /NEA 19b/ OECD Nuclear Energy Agency (NEA): International Reactor Physics Experiment Evaluation (IRPhE) Project. 2019.
- /OLS 13/ Olson, A. P.: Neutronics Calculations for SPERT-III, E-core, ANL/GTRI/TM-13/10. Argonne National Laboratory (ANL), 2013.
- /PEL 13/ Pelowitz, D. B.: MCNP6 User's Manual, Version 1.0, Manual Rev. 0. Los Alamos National Laboratory (LANL), LA-CP-13-00634, Rev. 0, 765 S., Mai 2013.
- /PLO 20/ Plompen, A. J. M., Cabellos, O., Saint Jean, C. de, Fleming, M., Algora, A., Angelone, M., Archier, P., Bauge, E., Bersillon, O., Blokhin, A., Cantargi, F., Chebboubi, A., Diez, C., Duarte, H., et al.: The Joint Evaluated Fission and Fusion Nuclear Data Library, JEFF-3.3. *The European Physical Journal A*, Bd. 56, Nr. 7, S. 1, DOI 10.1140/epja/s10050-020-00141-9, 2020.

- /PYT 19/ Python Software Foundation: Python Software Foundation: Press Release 20-Dec-2019 - PYTHON 2 SERIES TO BE RETIRED BY APRIL 2020. Erreichbar unter <https://www.python.org/psf/press-release/pr20191220/>, abgerufen am 26. April 2021.
- /RAD 14/ Radulescu, G., Gauld, I. C., Ilas, G., Wagner, J. C.: Approach for Validating Actinide and Fission Product Compositions for Burnup Credit Criticality Safety Analyses. Nuclear Technology, Bd. 188, Nr. 2, S. 154–171, DOI 10.13182/NT13-154, 2014.
- /RAD 19/ Radaideh, M. I., Wieselquist, W. A., Kozlowski, T.: A new framework for sampling-based uncertainty quantification of the six-group reactor kinetic parameters. Annals of Nuclear Energy, Bd. 127, Nr. 2, S. 1–11, DOI 10.1016/j.anucene.2018.11.043, 2019.
- /RAI 17/ Rais, A., Siefman, D., Hursin, M., Ward, A., Pautz, A.: Neutronics modeling of the CROCUS reactor with SERPENT and PARCS codes. In: Proceedings of M&C 2017. International Conference on Mathematics & Computational Methods Applied to Nuclear Science & Engineering, Jeju, Korea, 16. - 20. April 2017, 2017.
- /REA 18/ Rearden, B. T., Jessee, M. A. (Hrsg.): SCALE Code System, ORNL/TM-2005/39, Version 6.2.3. Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee, USA, Available from Radiation Safety Information Computational Center as CCC-834., März 2018.
- /ROH 16/ Rohde, U., Kliem, S., Grundmann, U., Baier, S., Bilodid, Y., Duerigen, S., Fridman, E., Gommlich, A., Grahn, A., Holt, L., Kozmenkov, Y., Mittag, S.: The reactor dynamics code DYN3D – models, validation and applications. Progress in Nuclear Energy, Bd. 89, S. 170–190, DOI 10.1016/j.pnucene.2016.02.013, 2016.
- /ROM 19/ Romojaro, P., Álvarez-Velarde, F., García-Herranz, N.: Sensitivity methods for effective delayed neutron fraction and neutron generation time with summon. Annals of Nuclear Energy, Bd. 126, S. 410–418, DOI 10.1016/j.anucene.2018.11.042, 2019.

- /SAN 18/ Sandvik Group: Datasheet Kanthal D Strip, v2018-07-06. Erreichbar unter <https://www.kanthal.com/en/products/material-datasheets/?query=kanthal+d&sort=>, Stand von 2018.
- /SCH 18/ Schaffrath, A., Wielenberg, A., Sonnenkalb, M., Kilger, R.: The nuclear simulation chain of GRS and its improvements for new ALWR and SMR typical phenomena. In: Chinese Nuclear Society (CNS), State Power Investment Corporation Limited (SPIC) (Hrsg.): NUTHOS-12, 12th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal-Hydraulics, Operation and Safety. Qingdao, China, 14. - 18. Oktober 2018, 2018.
- /SHI 11/ SHIBATA, K., IWAMOTO, O., NAKAGAWA, T., IWAMOTO, N., ICHIHARA, A., KUNIEDA, S., Chiba, S., FURUTAKA, K., OTUKA, N., OHSAWA, T., MURATA, T., MATSUNOBU, H., Zukeran, A., KAMADA, S., KATAKURA, J.-i.: JENDL-4.0: A New Library for Nuclear Science and Engineering. Journal of Nuclear Science and Technology, Bd. 48, Nr. 1, S. 1–30, DOI 10.1080/18811248.2011.9711675, 2011.
- /WAG 11/ Wagner, M., Hesse, U., Hummelsheim, K., Kirsch, M., Wehrfritz, M.: Aktivierung von Großkomponenten und daraus resultierende Dosisleistung in der Umgebung, Bewertung der Abklinglagerung von Großkomponenten aus dem Rückbau kerntechnischer Anlagen in Deutschland. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, GRS-A-3627, 2011.
- /WEM 08/ Wemple, C., Gheorghiu, H.-N. M., Stamm'ler, R.J.J., Villarino, E. A.: Recent Advances in the HELIOS 2 Lattice Physics Code. In: Proceedings of PHYSOR 2008. International Conference on the Physics of Reactors: "Nuclear Power: A Sustainable Resource", Interlaken, Switzerland, 14. - 19. September 2008, 2008.
- /WIL 13/ Williams, M. L., Ilas, G., Jessee, M. A., Rearden, B. T., Wiarda, D., Zwermann, W., Gallner, L., Klein, M., Krzykacz-Hausmann, B., Pautz, A.: A Statistical Sampling Method for Uncertainty Analysis with SCALE and XSUSA. Nuclear Technology, Bd. 183, Nr. 3, S. 515–526, DOI 10.13182/NT12-112, 2013.

- /WNN 18/ World Nuclear News (WNN): Hatch unit restarts with accident-tolerant fuel - World Nuclear. 2 S., Stand vom 7. März 2018, erreichbar unter <http://www.world-nuclear-news.org/UF-Hatch-unit-restarts-with-accident-tolerant-fuel-0703184.html>, abgerufen am 16. Juli 2019.
- /WNN 19a/ World Nuclear News (WNN): Chinese-developed ATF undergoing irradiation tests. Stand vom 24. Januar 2019, erreichbar unter <https://www.world-nuclear-news.org/Articles/Chinese-developed-ATF-undergoing-irradiation-tests>, abgerufen am 9. Juni 2021.
- /WNN 19b/ World Nuclear News (WNN): DOE funding for Westinghouse accident-tolerant fuel development. Stand vom 21. Januar 2019, erreichbar unter <https://www.world-nuclear-news.org/Articles/DOE-funding-for-Westinghouse-ATF-development>, abgerufen am 9. Juni 2021.
- /WNN 19c/ World Nuclear News (WNN): Further US grant for Framatome EATF development. Stand vom 16. Januar 2019, erreichbar unter <https://www.world-nuclear-news.org/Articles/Further-US-grant-for-Framatome-EATF-development>, abgerufen am 9. Juni 2021.
- /WNN 19d/ World Nuclear News (WNN): Rosatom starts testing accident-tolerant fuel for LWRs. Stand vom 29. Januar 2019, erreichbar unter <https://www.world-nuclear-news.org/Articles/Rosatom-starts-testing-accident-tolerant-fuel-for>, abgerufen am 9. Juni 2021.
- /YOU 16/ Younker, I., Fratoni, M.: Neutronic evaluation of coating and cladding materials for accident tolerant fuels. *Progress in Nuclear Energy*, Bd. 88, S. 10–18, DOI 10.1016/j.pnucene.2015.11.006, 2016.
- /ZIL 17/ Zilly, M., Bousquet, J., Velkov, K., Ban, Y. S., Joo, H. G.: Analyzing the BEAVRS HZP case with KMACS using 2-group data from SCALE-NEWT, HELIOS and nTRACER. In: *Proceedings of M&C 2017. International Conference on Mathematics & Computational Methods Applied to Nuclear Science & Engineering*, Jeju, Korea, 16. - 20. April 2017, 2017.

- /ZIL 18a/ Zilly, M., Aures, A., Bousquet, J., Küntzel, M.: Weiterentwicklung und Validierung des GRS-Kernsimulators für DWR. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), ISBN 978-3-946607-84-7, 2018.
- /ZIL 18b/ Zilly, M., Bousquet, J.: Multi-Cycle Depletion With The GRS Core Simulator KMACS: BEAVRS Cycles 1 And 2. In: Proceedings of M&C 2019. Bridging Theory and Applications, Portland, OR, USA, 25. - 29. August 2019, S. 2609–2618, 2019.
- /ZIN 14/ Zinkle, S. J., Terrani, K. A., Gehin, J. C., Ott, L. J., Snead, L. L.: Accident tolerant fuels for LWRs: A perspective. Journal of Nuclear Materials, Nr. 448, S. 374–379, 2014.
- /ZUK 99/ Zukeran, A., Hanaki, H., Sawada, S., Suzuki, T.: Uncertainty Evaluation of Effective Delayed Neutron Fraction β_{eff} of Typical Proto-type Fast Reactor. Journal of Nuclear Science and Technology, Bd. 36, Nr. 1, S. 61–80, DOI 10.1080/18811248.1999.9726182, 1999.
- /ZWE 09/ Zwermann, W., Krzykacz-Hausmann, B., Gallner, L., Pautz, A.: Influence of Nuclear Covariance Data on Reactor Core Calculations. In: Proceedings of WONDER 2009. 2nd International Workshop on Nuclear Data Evaluation for Reactor Applications, CEA Cadarache Château, France, 29. September - 2. Oktober 2009, 2009.
- /ZWE 13/ Zwermann, W., Gallner, L., Klein, M., Krzykacz-Hausmann, B., Pasichnyk, I., Pautz, A., Velkov, K.: Status of XSUSA for Sampling Based Nuclear Data Uncertainty and Sensitivity Analysis. EPJ Web of Conferences, Bd. 42, S. 3003, DOI 10.1051/epjconf/20134203003, 2013.
- /ZWE 18/ Zwermann, W., Aures, A., Bostelmann, F., Bousquet, J., Kilger, R., Krzykacz-Hausmann, B., Pasichnyk, I., Périn, Y., Sommer, F., Stuke, M., Velkov, K., Zilly, M.: Weiterentwicklung moderner Verfahren zu Neutronentransport und Unsicherheitsanalysen für Kernberechnungen, Abschlussbericht, RS1536. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-498, ISBN 978-3-946607-83-0, 2018.

Abbildungsverzeichnis

Abb. 3.1	BEAVRS Benchmark Viertelkerndarstellung, Beladeplan und Anordnung der B ₂ O ₃ Stäbe sowie der vier Reflektoren R1 bis R4.....	12
Abb. 3.2	Relative Abweichung der Brennelementleistungsverteilung zwischen KMACS/T-NEWT-DYN3D und Serpent für den BEAVRS Kern bei Nulllast-Heiß.....	15
Abb. 3.3	Relative Abweichung der Stableistungsverteilung zwischen KMACS/T-NEWT-DYN3D und Serpent für den BEAVRS Kern bei Nulllast-Heiß.....	16
Abb. 3.4	Kritische Borkonzentration für BEAVRS Zyklus 1.....	18
Abb. 3.5	Differenz zwischen berechneter und gemessener kritischer Borkonzentration zu BEAVRS Zyklus 1	19
Abb. 3.6	Mit Ventina berechnete Stableistungsverteilung des simulierten Minikerns.....	22
Abb. 3.7	Mit KMACS berechneter stabweiser Abbrand zum Ende des simulierten Zyklus.....	22
Abb. 3.8	Relative Abweichung in der stabweisen Abbrandberechnung zwischen Serpent und KMACS zu unterschiedlichen Zeitpunkten	23
Abb. 3.9	Relative Abweichung in den Nuklidkonzentrationen ausgewählter Nuklide eines einzelnen Stabes zwischen den Rechnungen mit KMACS und Serpent	25
Abb. 3.10	Relative Abweichung in der stabweisen Leistungsverteilung zwischen Serpent und KMACS für die schachbrettförmige Anordnung.....	26
Abb. 3.11	Schematische Darstellung von <i>coolant-centered</i> und <i>rod-centered</i> Unterkanal-Modellen in CTF	28
Abb. 3.12	Beispiel für eine CTF Ausgabe mit Darstellung der axialen Verteilung von DNBR-Werten.....	29
Abb. 3.13	Radiale DNBR-Verteilung im höchstbelasteten Brennelement und axiale DNBR-Verteilung im höchstbelasteten Brennstab am Zyklusanfang	30
Abb. 3.14	Radiale DNBR-Verteilung im höchstbelasteten Brennelement und axiale DNBR-Verteilung im höchstbelasteten Brennstab am Zyklusende	30

Abb. 3.15	KMACS Eingabe zum Brennelement 390GO aus dem X2 Benchmark	36
Abb. 3.16	Beladeplan des Zyklus 1 des X2 Kerns.....	37
Abb. 3.17	Grafische Darstellung des zweidimensionalen T-NEWT-Modells des 13AU Brennelements aus dem X2 Benchmark	38
Abb. 3.18	T-NEWT-Modell zur Vorausrechnung von Reflektor- Wirkungsquerschnitten	39
Abb. 3.19	KMACS-Darstellung des Layouts des Brennelements 390GO mit radialem Aufbau der Stäbe des X2 Benchmarks.....	41
Abb. 3.20	KMACS-Darstellung des Beladeplans von Zyklus 1 des X2 Kerns.....	42
Abb. 3.21	KMACS-Darstellung der Steuerstabgruppen des X2 Kerns	43
Abb. 3.22	Relative Abweichung der radialen Brennelementleistungsverteilung zwischen KMACS/T-NEWT-DYN3D und Serpent des X2 Kerns bei Nulllast-Heiß (Darstellung 60° Kernausschnitt)	44
Abb. 3.23	Thermische Leistung beim ersten Zyklus des X2 Kerns.....	45
Abb. 3.24	Einfahrtiefe der Steuerstabgruppe 10 beim ersten Zyklus des X2 Kerns.....	46
Abb. 3.25	Kühlmitteleintrittstemperatur beim ersten Zyklus des X2 Kerns.....	47
Abb. 3.26	Berechneter Kühlmittelmassenstrom für die Simulation des ersten Zyklus des X2 Kerns.....	47
Abb. 3.27	Berechnete und gemessene kritische Borkonzentration für den ersten Zyklus des X2 Kerns	49
Abb. 3.28	Differenz zwischen berechneter und gemessener kritischer Borkonzentration für den ersten Zyklus des X2 Benchmarks	50
Abb. 4.1	Vertikaler Schnitt durch das SPERT III Serpent-Referenzmodell	53
Abb. 4.2	Serpent Brennelementmodelle: <i>links</i> : UO2 5 x5, <i>rechts</i> : UO2 4 x 4 (unterer Teil eines Steuerelements).....	55
Abb. 4.3	SPERT III <i>Test 43</i> : Leistung ermittelt mit DYN3D-ATHLET.....	58
Abb. 4.4	SPERT III <i>Test 43</i> : Reaktivitätsbeiträge ermittelt mit DYN3D- ATHLET	59
Abb. 4.5	SPERT III <i>Test 49</i> : Leistung ermittelt mit DYN3D-ATHLET.....	59
Abb. 4.6	SPERT III <i>Test 82</i> : Leistung ermittelt mit DYN3D-ATHLET.....	60

Abb. 4.7	SPERT III <i>Test 82</i> : Reaktivitätsbeiträge ermittelt mit DYN3D-ATHLET.....	61
Abb. 4.8	Radialer Schnitt des Serpent Modells des TMI-1 Minikerns aus dem LWR-UAM Benchmark /HOU 14/.....	63
Abb. 4.9	Kopplungsschema zwischen der Neutronenkinetik, der Thermohydraulik und der Monte-Carlo-Ganzkernrechnung	66
Abb. 4.10	Extrapolationsschema für Wirkungsquerschnitte aus der Monte-Carlo-Ganzkern-Rechnung.....	67
Abb. 4.11	Mit der Hybridmethode errechneter Verlauf der Reaktivität der Steuerstabverfahrtransiente im TMI-1 Minikernmodell.....	70
Abb. 4.12	Verlauf der Leistung der Steuerstabverfahrtransiente bei Anwendung der Hybridmethode	71
Abb. 5.1	UAM-SFR-Benchmark: Skizze der Stabzellen	74
Abb. 5.2	UAM-SFR-Benchmark: Skizze der Brennelemente.....	74
Abb. 5.3	UAM-SFR-Benchmark: Skizze der Superzellen	74
Abb. 5.4	UAM-SFR-Benchmark: Transformation der Modellierung der MET1000-Superzelle von Hexagonal- in Rechteckgeometrie	75
Abb. 5.5	UAM-SFR-Benchmark: Nominalergebnisse für die MET1000-Anordnungen aus MCNP und NEWT.....	76
Abb. 5.6	UAM-SFR-Benchmark: Nominalergebnisse für die MOX3600-Anordnungen aus MCNP und NEWT.....	76
Abb. 5.7	UAM-SFR-Benchmark: Relative Unsicherheiten für den Multiplikationsfaktor und Eingruppen-Wirkungsquerschnitte der MET1000-Stabzellen aus XSUSA, SAMPLER und TSUNAMI-2D	78
Abb. 5.8	UAM-SFR-Benchmark: Relative Unsicherheiten für den Multiplikationsfaktor und Eingruppen-Wirkungsquerschnitte der MOX3600-Stabzellen aus XSUSA, SAMPLER und TSUNAMI-2D.....	78
Abb. 5.9	UAM-SFR-Benchmark: Relative Unsicherheiten für den Multiplikationsfaktor, Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte und Reaktivitätskoeffizienten der MET1000-Brennelemente aus XSUSA, SAMPLER und TSUNAMI-2D.....	79
Abb. 5.10	UAM-SFR-Benchmark: Relative Unsicherheiten für den Multiplikationsfaktor, Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte und	

	Reaktivitätskoeffizienten der MOX3600-Brennelemente aus XSUSA, SAMPLER und TSUNAMI-2D	79
Abb. 5.11	UAM-SFR-Benchmark: Relative Unsicherheiten für den Multiplikationsfaktor, Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte und Reaktivitätskoeffizienten der MET1000-Superzellen aus XSUSA, SAMPLER und TSUNAMI-2D	80
Abb. 5.12	UAM-SFR-Benchmark: Relative Unsicherheiten für den Multiplikationsfaktor, Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte und Reaktivitätskoeffizienten der MOX3600-Superzellen aus XSUSA, SAMPLER und TSUNAMI-2D	80
Abb. 5.13	C5G7-TD-Benchmark: Schachbrettanordnung aus UO ₂ - und MOX-Brennelementen zur Erzeugung von 7-Gruppen-Wirkungsquerschnitten mit NEWT	82
Abb. 5.14	C5G7-TD-Benchmark: Multiplikationsfaktor für die unkontrollierte Schachbrettanordnung aus UO ₂ - und MOX-Brennelementen mit 252 und 7 Energiegruppen	83
Abb. 5.15	C5G7-TD-Benchmark: Multiplikationsfaktor für die kontrollierte Schachbrettanordnung aus UO ₂ - und MOX-Brennelementen mit 252 und 7 Energiegruppen	83
Abb. 5.16	C5G7-TD-Benchmark: KENO-Ganzkernmodell in horizontaler und axialer Darstellung	84
Abb. 5.17	C5G7-TD-Benchmark: Relative Abweichungen zwischen KENO-Ergebnissen für die radiale Stableistungsverteilung im unkontrollierten Kern mit Multigruppen-Daten und Daten kontinuierlicher Energie	85
Abb. 5.18	C5G7-TD-Benchmark: Relative Abweichungen zwischen KENO-Ergebnissen für die radiale Stableistungsverteilung im kontrollierten Kern mit Multigruppen-Daten und Daten kontinuierlicher Energie	85
Abb. 5.19	Relative Unsicherheiten der mittleren Anzahl von verzögerten Neutronen pro Spaltung für wichtige Aktinoide aus SCALE 6.2 (durchgezogene Linien), JENDL-4.0 (gestrichelte Linien) und ENDF/B-VIII.0 (gepunktete Linien).....	86
Abb. 5.20	Relative Unsicherheiten für das MET1000-Brennelement aus TSUNAMI und XSUSA(LR) mit 95 %-Jackknife-Konfidenzintervallen	97
Abb. 5.21	Relative Unsicherheiten für die MOX3600-Superzelle aus TSUNAMI und XSUSA(LR) mit 95 %-Jackknife-Konfidenzintervallen	97

Abb. 5.22	Unsicherheits-„Breakdown“ für die Doppler-Reaktivität des MET1000-Brennelements aus TSUNAMI und XSUSA(LR) mit 95 %-Jackknife-Konfidenzintervallen.....	98
Abb. 5.23	Unsicherheits-„Breakdown“ für die Steuerstabreaktivität der MOX3600-Superzelle aus TSUNAMI und XSUSA(LR) mit 95%-Jackknife-Konfidenzintervallen.....	99
Abb. 5.24	Sensitivität der Doppler-Reaktivität des MET1000-Brennelements bzgl. inelastischer U-238-Streuung aus TSUNAMI und XSUSA(LR) mit 95 %-Jackknife-Konfidenzintervallen.....	100
Abb. 5.25	Sensitivität der Steuerstabreaktivität der MOX3600-Superzelle bzgl. des U-238-Spaltpektrums aus TSUNAMI, direkter Störung und XSUSA(LR) mit 95 %-Jackknife-Konfidenzintervallen	101
Abb. 5.26	Unsicherheits-„Breakdown“ für den Multiplikationsfaktor der TMI-1-Stabzelle aus TSUNAMI und XSUSA(LR)	102
Abb. 5.27	Sensitivitätsprofile des Multiplikationsfaktors der TMI-1-Stabzelle	103
Abb. 5.28	Unsicherheits-„Breakdown“ für den mikroskopischen Eingruppen-Spaltquerschnitt von U-235 der TMI-1-Stabzelle aus TSUNAMI und XSUSA(LR)	104
Abb. 5.29	Unsicherheits-„Breakdown“ für den mikroskopischen elastischen Eingruppen-Streuquerschnitt von O-16 der TMI-1-Stabzelle aus TSUNAMI und XSUSA(LR).....	105
Abb. 5.30	Sensitivität des mikroskopischen elastischen Eingruppen-Streuquerschnitts von O-16 der TMI-1-Stabzelle bzgl. des elastischen Streuquerschnitts von O-16 aus TSUNAMI und XSUSA(LR)	105
Abb. 5.31	Unsicherheiten für den Multiplikationsfaktor und einige mikroskopische Eingruppen-Wirkungsquerschnitte der TMI-1-Stabzelle aus TSUNAMI und XSUSA(LR).....	106
Abb. 5.32	Schnitte durch die zur Untersuchung der Unsicherheiten und Sensitivitäten bezüglich des Anteils verzögerter Neutronen herangezogenen kritischen Anordnungen.....	109
Abb. 5.33	Schnitte durch die zur Untersuchung der Unsicherheiten und Sensitivitäten bezüglich des Anteils verzögerter Neutronen herangezogenen Brennelementmodelle	110

Abb. 5.34	Prompter und totaler Fluss für das TMI-1- (oben) und das GEN-III-MOX-Brennelement (unten) mit den jeweiligen relativen Abweichungen	111
Abb. 5.35	Sensitivitäten der effektiven verzögerten Neutronenanteile.....	116
Abb. 5.36	Sensitivitäten der effektiven verzögerten Neutronenanteile.....	117
Abb. 5.37	Sensitivitäten der aufsummierten verzögerten Neutronenanteile in sechs Gruppen für zwei Brennelemente, geschätzt mit XSUSA(LR). Oben: TMI-1. Unten: GEN-III MOX	118
Abb. 5.38	Sensitivitäten der Zerfallskonstanten in der sechsten Gruppe für zwei Brennelemente, geschätzt mit XSUSA(LR). Oben: TMI-1. Unten: GEN-III MOX	119
Abb. 5.39	Unsicherheits-„Breakdown“ des verzögerten Neutronenanteils für POPSY mit Unsicherheiten im verzögerten ν aus SCALE 6.2 (S62) und JENDL-4.0 (J40)	123
Abb. 5.40	HELIOS-2-Modell des GEN-III-UO ₂ -DWR-Brennelements (1/4-Geometrie).....	125
Abb. 5.41	Unsicherheiten für den Multiplikationsfaktor und die Eingruppen-Wirkungsquerschnitte der UO ₂ -SWR-Stabzelle aus SCALE und HELIOS-2	128
Abb. 5.42	Unsicherheiten für den Multiplikationsfaktor und die Eingruppen-Wirkungsquerschnitte der GEN-III-MOX-Stabzelle aus SCALE und HELIOS-2	128
Abb. 5.43	Unsicherheiten für den Multiplikationsfaktor und die Zweigruppen-Wirkungsquerschnitte der GEN-III-UO ₂ -Brennelements aus SCALE und HELIOS-2	129
Abb. 5.44	Quadrierter multipler Korrelationskoeffizient für den Multiplikationsfaktor der SWR-Stabzelle aus HELIOS-2/XSUSA.....	130
Abb. 5.45	Sensitivität des SWR-Stabzell-Multiplikationsfaktors bzgl. des U-238-Einfangquerschnitts aus TSUNAMI und HELIOS-2/XSUSA	131
Abb. 5.46	Sensitivität des SWR-Stabzell-Multiplikationsfaktors bzgl. der mittleren Anzahl von Neutronen pro Spaltung von U-235 aus TSUNAMI und HELIOS-2/XSUSA	132
Abb. 5.47	Unsicherheits-"Breakdown" für den Multiplikationsfaktor der SWR-Stabzelle aus TSUNAMI und HELIOS-2/XSUSA	132

Abb. 5.48	Unsicherheits-"Breakdown" für den Multiplikationsfaktor der kritischen Anordnung LEU-SOL-THERM-002 (Case 1).....	136
Abb. 5.49	Sensitivität des Multiplikationsfaktors von LEU-SOL-THERM-002 (Case 1) bzgl. des U-238-Einfangquerschnitts.....	137
Abb. 5.50	Sensitivität des Multiplikationsfaktors von LEU-SOL-THERM-002 (Case 1) bzgl. des elastischen U-238-Streuquerschnitts.....	138
Abb. 5.51	Schematischer Programmablauf des Moduls DIMPLES	139
Abb. 5.52	Wirkungsquerschnittsänderungen aufgrund von Pelletradiusänderung.....	141
Abb. 5.53	Wirkungsquerschnittsänderungen aufgrund von Claddingradiusänderungen.....	142
Abb. 5.54	Einfluss der Unsicherheiten nuklearer Wirkungsquerschnittsdaten auf den Leistungsverlauf einer 0,97 \$ Transiente im TMI-1 Minikern	144
Abb. 5.55	Nuklidreaktionen die Hauptbeiträge zur Ergebnisunsicherheit der Leistung darstellen.....	145
Abb. 6.1	Errechnete Stabzellen-Multiplikationsfaktoren k_{inf} für eine erweiterte Auswahl an ATF-Konzepten	152
Abb. 6.2	Geometrische Darstellung der verwendeten generischen Berechnungsmodelle für Brennstäbe und Brennelemente mit ATF.....	155
Abb. 6.3	Querschnittsansicht des Serpent-Modells eines beispielhaften heterogenen ATF-Brennstabs mit TRISO-Partikeln in inerter Matrix als Pellet.....	158
Abb. 6.4	Berechneter k_{eff} für verschiedene experimentelle Konfigurationen unter Verwendung verschiedener Wirkungsquerschnittsbibliotheken.....	162
Abb. 6.5	Neutronenspektren für unbestrahlte, wassermoderierte ATF-Brennstäbe mit Hüllrohren aus „Kanthal® D Strip“ als FeCrAl-Vertreter und dem Referenzmaterial Zr-4.....	165
Abb. 6.6	Massenverhältnis der Hauptisotope von Uran und Plutonium sowie Nd-148 und Am-241 für einen bestrahlten ATF-Brennstab mit FeCrAl-Hüllrohr gegenüber dem Referenzstab mit Zr-4-Hüllrohr	166
Abb. 6.7	Plutoniummasse für zehn Ringzonen nach 55 GWd/tSM Abbrand als Referenz und einen Brennstab mit „Kanthal® D Strip“ Hüllrohr.....	168

Abb. 6.8	In der generischen Aktivierungsrechnung errechnete Zusammensetzung der FeCrAl-Variante „Kanthal® D Strip“ nach Bestrahlung	169
Abb. 6.9	Relative Änderung der Nuklidmassen in der generischen Aktivierungsrechnung der FeCrAl-Variante Kanthal® D nach Bestrahlung	170
Abb. 6.10	Relative Abweichung in von MoTlve und TRITON/NEWT errechneten Nuklidkonzentrationen	173
Abb. 6.11	Relative Abweichung in von MoTlve und TRITON/NEWT errechneten Nuklidkonzentrationen	175
Abb. 6.12	Relative Abweichung der errechneten Nuklidkonzentrationen gegenüber MoTlve mit KENO-VI und der Bibliothek ENDF/B-VII.1 (1)...	178
Abb. 6.13	Relative Abweichung der errechneten Nuklidkonzentrationen gegenüber MoTlve mit KENO-VI und der Bibliothek ENDF/B-VII.1 (2)...	179
Abb. 6.14	Kernbeladung von Zyklus 1 des durch ATF-Brennelemente modifizierten BEAVRS-Benchmark.....	182
Abb. 6.15	Radiale Leistungsverteilung (links) und relative Abweichung der radialen Leistungsverteilung (rechts) des Viertelkerns zu Zyklusbeginn	185
Abb. 6.16	Borkurve des 1. Zyklus für 3 verschiedene Materialien und der Messung.....	186
Abb. 6.17	Relative Abweichung der Leistungsverteilung $\Delta P = (P_{ATF} - P_{Pref}) \times 102/P_{Pref}$ zwischen dem UO ₂ /FeCrAl-Brennstoff und dem Referenzmaterial UO ₂ /Zr-4	187
Abb. 6.18	Relative Abweichung der Leistungsverteilung $\Delta P = (P_{ATF} - P_{Pref}) \times 102/P_{Pref}$ zwischen dem U ₃ Si ₂ /FeCrAl-Brennstoff und dem Referenzmaterial UO ₂ /Zr-4	187
Abb. 6.19	MCNP- und KENO-VI-Modell einer Stabzelle mit Brennstoff mit inerter Matrix.....	189
Abb. 6.20	MCNP- und KENO-VI-Modell eines Brennelements mit Brennstoff mit inerter Matrix.....	190
Abb. 6.21	Sensitivität des Multiplikationsfaktors des ATF-Brennelements in Bezug auf die mittlere Anzahl von Neutronen pro Spaltung von U-235	191

Abb. 6.22	Sensitivität des Multiplikationsfaktors des ATF-Brennelements in Bezug auf den Einfangquerschnitt von U-235	192
Abb. 6.23	Sensitivität des Multiplikationsfaktors des ATF-Brennelements in Bezug auf den Spaltquerschnitt von U-235	192
Abb. 6.24	Sensitivität des Multiplikationsfaktors des ATF-Brennelements in Bezug auf den Einfangquerschnitt von H-1	193
Abb. 6.25	Hauptbeiträge zur Unsicherheit des Multiplikationsfaktors des ATF-Brennelements	193

Tabellenverzeichnis

Tab. 3.1	Schichtweiser Aufbau und Materialzusammensetzung der modellierten Reflektoren.....	13
Tab. 3.2	Nulllast-Heiß Bedingungen für die Durchführung von Anfahrtests.....	31
Tab. 3.3	KMACS Ergebnisse zur kritischen Borkonzentration bei verschiedenen Steuerstabstellungen für Zyklus 1 und 2 des BEAVRS Benchmarks im Vergleich zu Messwerten /HOR 18/.....	32
Tab. 3.4	KMACS Ergebnisse zu Steuerstabwirksamkeiten für BEAVRS Zyklus 1 im Vergleich zu Messwerten /HOR 18/.....	33
Tab. 3.5	KMACS Ergebnisse zu Steuerstabwirksamkeiten für BEAVRS Zyklus 2 im Vergleich zu Messwerten /HOR 18/.....	33
Tab. 3.6	Isotherme Temperaturkoeffizienten für BEAVRS Zyklus 1 und 2 ermittelt mit KMACS im Vergleich zu Messwerten /HOR 18/.....	34
Tab. 4.1	SPERT III Ausgangsbedingungen für Reaktivitätsexperimente /CAR 69/.....	52
Tab. 4.2	Vergleich von Serpent und DYN3D Ergebnissen mit experimentellen Daten für <i>cold-startup</i> Bedingungen.....	56
Tab. 4.3	DYN3D-ATHLET Ergebnisse und experimentelle Werte /OLS 13/ von SPERT III Reaktivitätstransienten unter <i>cold-startup</i> Bedingungen.....	62
Tab. 4.4	DYN3D-ATHLET Ergebnisse und experimentelle Werte /OLS 13/ von SPERT III Reaktivitätstransienten unter <i>hot-standby</i> Bedingungen.....	62
Tab. 4.5	DYN3D Ergebnisse zum TMI-1 Minikern basierend auf Wirkungsquerschnitten ermittelt mit dem Serpent Ganzkern-Modell.....	65
Tab. 5.1	Energiegruppengrenzen der Wirkungsquerschnitte für den C5G7-TD-Benchmark.....	81
Tab. 5.2	Energiegruppengrenzen der 38-Gruppen-Wirkungsquerschnitte.....	93
Tab. 5.3	Nominalergebnisse für Multiplikationsfaktoren k und Reaktivitätseffekte aus MCNP-Referenzberechnungen mit Daten kontinuierlicher Energie (CE) und NEWT-Berechnungen mit 38-Gruppen-Daten.....	94
Tab. 5.4	Durchschnittliche CPU-Zeiten für die Transportberechnungen der SFR-Anordnungen.....	95
Tab. 5.5	Nomenklatur für betrachtete Ergebnisgrößen.....	96

Tab. 5.6	Effektive verzögerte Neutronenanteile (pcm), berechnet mit der Prompt-k-Ratio-Methode im Vergleich zu Messungen (mit 1σ -Unsicherheiten) für kritische Anordnungen	113
Tab. 5.7	Relative 1σ -Unsicherheiten der verzögerten Neutronenanteile für kritische Anordnungen aus TSUNAMI.....	120
Tab. 5.8	Nominalwerte (pcm) und relative 1σ -Unsicherheiten der verzögerten Neutronenanteile in sechs Gruppen für Brennelemente aus XSUSA(LR)	121
Tab. 5.9	Nominalwerte (1/sec) und relative 1σ -Unsicherheiten der Zerfallskonstanten in sechs Gruppen für Brennelemente aus XSUSA(LR)	122
Tab. 5.10	Multiplikationsfaktoren und Eingruppen-Wirkungsquerschnitte der Stabzellen aus SCALE und HELIOS-2 mit relativen Abweichungen. Einheiten sind barn für mikroskopische und 1/cm für makroskopische Querschnitte	126
Tab. 5.11	Multiplikationsfaktoren und makroskopische Zweigruppen-Wirkungsquerschnitte (1/cm) der Brennelementanordnung aus SCALE und HELIOS-2 mit relativen Abweichungen.....	127
Tab. 5.12	Multiplikationsfaktor für das kritische Experiment LEU-SOL-THERM-002 (Case 1) aus SCALE mit ENDF/B-VII.1-Daten	135
Tab. 6.1:	Materialdefinitionen der betrachteten ATF-Modellfälle.	154
Tab. 6.2:	Stabzellenabmessungen für unbeschichtete und beschichtete Brennstäbe und Brennelemente	156
Tab. 6.3	Ergebnisse für k_{inf} und EALF für unbestrahlte ATF-Brennstäbe unter Verwendung von SCALE/CSAS5 und v7.1-252.....	159
Tab. 6.4	Ergebnisse der k_{inf} -Berechnungen für unbestrahlte ATF-Brennelemente im infiniten Gitter.....	160
Tab. 6.5:	Ergebnisse für den Total-Wirkungsquerschnitt in zwei Energiegruppen für unbestrahlte ATF-Brennelemente im Nulllast-Heiß Zustand.....	163
Tab. 6.6	In der generischen Analyse verwendete alternative Zusammensetzung der FeCrAl-Variante „Kanthal® D Strip“	164
Tab. 6.7	Definition der vier betrachteten Brennelementvarianten für vergleichende Abbrandrechnungen zwischen MoTive und TRITON zu ATF.....	172

Tab. 6.8	Ergebnisse für k_{inf} -Berechnungen für unbestrahlte Brennelemente.....	183
Tab. 6.9	Ergebnisse der k_{eff} -Berechnungen für stationäre Ganzkern-Rechnungen auf Basis des mit ATF modifizierten BEAVRS-Kerns.....	184
Tab. 6.10	Multiplikationsfaktoren für ein Brennelement mit inerter Matrix aus unterschiedlichen Rechenprogrammen.....	190

A Veröffentlichungen

V.F. Boyarinov, P.A. Fomichenko, J. Hou, K. Ivanov, A. Aures, W. Zwermann K. Velkov, Deterministic Time-Dependent Neutron Transport Benchmark without Spatial Homogenization (C5G7-TD) - Volume I: Kinetics Phase, Version 1.9, NEA/NSC/DOC(2021).

V.F. Boyarinov, P.A. Fomichenko, J. Hou, M. Avramova, K. Ivanov, A. Aures, W. Zwermann K. Velkov, H.G. Joo, Deterministic Time-Dependent Neutron Transport Benchmark without Spatial Homogenization (C5G7-TD) - Volume II: Dynamics Phase, Version 0.4, NEA/NSC/DOC(2021).

J. Hou, G. Delipei, A. Abarca, M. Avramova, K. Ivanov, E. Royer, M. Jessee, J. Zhang, W. Wieselquist, I. Pasichnyk, W. Zwermann, K. Velkov, T. Kozlowski, Benchmark for Uncertainty Analysis in Modelling (UAM) for Design, Operation and Safety Analysis of LWRs - Volume III: Specification and Support Data for the System Cases (Phase III), Version 4, NEA/NSC/DOC(2021).

W. Zwermann, N. Berner, A. Aures, K. Velkov, Sensitivities of delayed neutron fractions in the framework of SCALE 6.2, Annals of Nuclear Energy, Vol. 153, 2021.

W. Zwermann, N. Berner, A. Aures, K. Velkov, Sensitivity and uncertainty analysis for the UAM-SFR sub-exercises with linear regression from random sampling, Annals of Nuclear Energy, Vol. 149, 2020.

A. Aures, A. Pautz, W. Zwermann, Transient Calculations of SPERT III Experiments, PHYSOR 2020, Cambridge, United Kingdom (2020).

A. Aures, N. Berner, A. Pautz, W. Zwermann, Uncertainty and sensitivity analysis of PWR mini-core transients in the presence of nuclear data uncertainty using non-parametric tolerance limits, Annals of Nuclear Energy, Vol. 137, 2020.

A. Aures, N. Berner, W. Zwermann, Closing the Gap Between Sensitivity Analyses Based on Perturbation Theory and Random Sampling, BEPU 2020 (postponed).

A. Aures, N. Berner, J. Bousquet, K. Velkov, W. Zwermann, HELIOS2/XSUSA Sensitivity and Uncertainty Analyses with SCALE 6.2 Covariance Data, BEPU 2020 (postponed).

L. Buiron, G. Rimpault, N.E. Stauff, T.K. Kim, T.A. Taiwo, Y.-K. Lee, W. Zwermann, F. Bostelmann, K. Velkov, N. Guilliard, E. Fridman, A. Kereszturi, B. Batki, I.-A. Kodeli, K. Mikityuk, R. Lopez, A. Gomez, F. Puente-Espel, E. del Valle, A. Peregudov, M. Semenov, G. Manturov, M. Avramova, I. Trivedi, K. Ivanov, A. Pautz, A. Yamaji, I. Hill, T. Ivanova, Y. Jo, W. Lee, X. Du, S. Choi, D. Lee, K. Zeng, J. Hou, Q. Liang, Y. Zheng, C. Wan, B. Lindley, Current Status and Perspectives of the OECD/NEA Sub-group on Uncertainty Analysis in Modelling (UAM) for Design, Operation and Safety Analysis of SFRs (SFR-UAM), BEPU 2020 (postponed).

R. Kilger, Current neutronics activities on LWR ATF at GRS, 2nd Workshop of Spanish Users on Nuclear Data “the Accident Tolerant Fuels for LWRs”, Web-Seminar, 2020.

A. Aures, W. Bernnat, F. Bostelmann, J. Bousquet, B. Krzykacz-Hausmann, A. Pautz, K. Velkov, W. Zwermann, Reactor Simulations with Nuclear Data Uncertainties, Nuclear Engineering and Design, Vol. 355, 2019.

A. Aures, K. Velkov, W. Zwermann, New Cross Sections for the C5G7-TD Benchmark, OECD Deterministic Time-Dependent Neutron Transport Benchmark without Spatial Homogenization (C5G7-TD) – Fourth Workshop, ORNL, Oak Ridge, TN, USA (2019).

A. Aures, N. Berner, W. Zwermann, Sensitivity Analyses with Perturbation Theory and Random Sampling – Part 1: A Note on the R² “Mystery”, OECD/NEA LWR-UAM-13, ORNL, Oak Ridge, TN, USA (2019).

A. Aures, N. Berner, W. Zwermann, Sensitivity Analyses with Perturbation Theory and Random Sampling – Part 2: Closing the Gap, OECD/NEA LWR-UAM-13, ORNL, Oak Ridge, TN, USA (2019).

A. Aures, N. Berner, A. Pautz, W. Zwermann, Uncertainty and Sensitivity Analysis of TMI-1 Mini-core Transients, OECD/NEA LWR-UAM-13, Oak Ridge, TN, USA (2019).

F. Bostelmann, B. Rearden, W. Zwermann, A. Pautz, SCALE/AMPX Multigroup Libraries for Sodium-Cooled Fast Reactor Systems, Annals of Nuclear Energy, Vol. 140, 2019.

L. Buiron, G. Rimpault, P. Sciora, N. Stauff, T.K. Kim, T. Taiwo, F. Bostelmann, A. Pautz, K. Ivanov, I. Trivedi, A. Keresztúri, A. Aures, K. Velkov, W. Zwermann, K. Mikityuk, Benchmarks for Uncertainty Analysis in Modelling (UAM) for Design, Operation and Safety Analysis Of SFRs, Version 1.6, NEA 2019.

R. Kilger, R. Henry, Application of the Neutronic Part of the Nuclear Simulation Chain of GRS to Accident Tolerant Fuel Systems – First Results, ICNC 2019 – 11th International conference on Nuclear Criticality Safety, Paris, France (2019).

M. Zilly, J. Bousquet, Multi-cycle Depletion with the GRS Core Simulator KMACS: BEAVRS Cycles 1 and 2, M&C 2019, Portland, OR, USA (2019).

A. Aures, F. Bostelmann, R. Kilger, K. Pletz, K. Velkov, M. Zilly, A. Pautz, W. Zwermann, Application of Serpent for Fuel Assembly Bowing and SPERT III Static Calculations, Serpent User Group Meeting, Helsinki, Finland, (2018).

A. Aures, A. Pautz, K. Velkov, W. Zwermann, A Hybrid Deterministic / Stochastic Calculation Model for Transient Analysis, Serpent User Group Meeting, Helsinki, Finland, (2018).

F. Bostelmann, B.T. Rearden, W. Zwermann, A. Pautz, Preliminary SCALE/TSUNAMI Results for the Sub-Exercises of the OECD/NEA Benchmark for Uncertainty Analysis in Modeling of Sodium-Cooled Fast Reactors, Transactions of the American Nuclear Society Vol. 119, 2018.

R. Kilger, Accident Tolerant Fuels (ATF) Applicability of GRS Neutronics Toolbox – First Steps, 18th AAA Workshop, Garching, Germany, (2018).

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

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

Forschungszentrum
Boltzmannstraße 14
85748 Garching b. München
Telefon +49 89 32004-0
Telefax +49 89 32004-300

Kurfürstendamm 200
10719 Berlin
Telefon +49 30 88589-0
Telefax +49 30 88589-111

Theodor-Heuss-Straße 4
38122 Braunschweig
Telefon +49 531 8012-0
Telefax +49 531 8012-200

www.grs.de