

Methodenentwicklung im Bereich Nuklidinventar- und Abbrandberechnung

Methodenentwicklung im Bereich Nuklidinventar- und Abbrandberechnung

Abschlussbericht zum
Vorhaben MODENA

Matthias Behler
Thomas Eisenstecken
Volker Hannstein
Romain Henry
Matthias Küntzel
Fabian Sommer
Anton Travleev

Februar 2023

Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrunde liegende Forschungsvorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz, nukleare Sicherheit und Verbraucherschutz (BMUV) unter dem Förderkennzeichen RS1582 durchgeführt.

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

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

Deskriptoren

Abbrand, Analyseproben, MOTIVE, Nachbestrahlung, Nukleare Daten, Zerfallsleistung

Kurzfassung

Der vorliegende Bericht dokumentiert die im Eigenforschungsvorhaben RS1582 „MODENA - Methodenentwicklung im Bereich Nuklidinventar- und Abbrandberechnung“ durchgeführten Arbeiten und erreichten Forschungs- und Entwicklungsziele. Das übergeordnete Ziel des Vorhabens war die Weiterentwicklung der GRS-eigenen Programme zur Abbrandberechnung MOTIVE und VENTINA, die Integration dieser Programme in ausgewählte Programmsysteme der GRS (u. a. KMACS, ATHLET-CD und COCOSYS) und deren vertiefte Validierung anhand der Nachrechnung von radiochemischen Analysproben und kalorimetrischen Messungen an bestrahlten Brennelementen.

Im Rahmen dieser Arbeiten wurden verschiedene neue Funktionen in MOTIVE umgesetzt. Dazu gehört eine hybride Methode zur Reaktionsratenberechnung, die eine Berücksichtigung der unaufgelösten Resonanzen für relevante Nuklide ermöglicht, ohne wesentliche Einschränkungen bei der Rechenzeit hervorzurufen. Weiterhin wurden Modelle für bisher fehlende komplexe Siedewasserreaktorbrennelement-Geometrien ergänzt.

In VENTINA wurden separate Modi für Aktivierungsrechnungen und für reine Zerfallsrechnungen umgesetzt, die die Anbindung an andere Programme vereinfachen und für eine verbesserte numerische Performanz sorgen. Die Kopplung an den Kernsimulator KMACS der GRS wurde verbessert, insbesondere in Hinblick auf die Simulation längerer Standzeiten einzelner Brennelemente. Zur Unterstützung der Einbindung von VENTINA in die GRS-Programme ATHLET-CD und COCOSYS aus dem Paket AC² wurde ein Modul zur schnellen Abbrandberechnung auf der Grundlage von vorgerechneten Wirkungsquerschnitten entwickelt. Die Einbindung selbst erfolgt im Vorhaben RS1574. Darüber hinaus wurde eine Kopplung an das Neutronentransport-Programm MCNP für Aktivierungsrechnungen erstellt.

Das Werkzeug NuGra zur Bereitstellung von Zerfallsdaten und Nuklidketteninformationen für die Abbrandrechnung wurde in Hinblick auf die Konsistenz der erzeugten Datensätze verbessert und so erweitert, dass eine größere Zahl an Neutronenreaktionen verarbeitet werden kann.

Für die Erweiterung der Validierungsdatenbasis wurden erstmalig Nachrechnungen von kalorimetrischen Messungen an bestrahlten Brennelementen durchgeführt, um die Berechnung der Zerfallsleistung in MOTIVE zu validieren. Darüber hinaus wurden

zusätzliche radiochemische Analyseproben nachgerechnet, um die Validierung der Nuklidinventarberechnung weiter zu verbessern. Die erzielte Übereinstimmung zwischen Rechnung und Experiment entspricht den für aktuelle Rechenverfahren anderer Institutionen publizierten Ergebnissen. Die Details zu diesen Rechnungen sind in einem separaten Bericht dokumentiert.

Schließlich wurde eine Reihe von numerischen und technischen Verbesserungen und qualitätssichernden Maßnahmen umgesetzt. Dies umfasst unter anderem das Aufsetzen einer automatisierten Testumgebung für MOTIVE und VENTINA, Arbeiten zur Parallelisierung von MOTIVE und das Erstellen einer graphischen Benutzeroberfläche zur vereinfachten Auswertung von Rechenergebnissen.

Abstract

The report at hand documents the work performed in the project RS1582 “MODENA - Method Development in the Area of Nuclide Inventory and Burn-up Calculation” and shows on the achieved research and development goals. The general aim of this project was to further develop the GRS burnup codes MOTIVE and VENTINA, the integration of these into other GRS codes (e.g. KMACS, ATHLET-CD, and COCOSYS), and the extended validation with the help of calorimetric measurements and radio-chemical analyses of spent fuel assemblies.

Within this work, several new functionalities were implemented in MOTIVE. A hybrid method for the calculation of reaction rates was developed, allowing to take into account the unresolved resonances in relevant nuclides without overly compromising the numerical performance in terms of speed. Moreover, additional previously not available models for complex boiling water reactor fuel assemblies were added to the calculation system.

In VENTINA, separate modes for activation calculations and pure decay calculations were added, simplifying the way VENTINA can be called from other codes and improving numerical performance. The coupling to the GRS core simulator KMACS was improved, especially regarding the simulation of fuel assemblies with long cooling times between cycles. The integration of VENTINA into the GRS codes ATHLET-CD and COCOSYS from AC² package was supported by developing a module for fast burnup calculations based on precalculated cross-sections. The integration itself is part of the project RS1574. Additionally, a coupling to the Monte Carlo neutron transport code MCNP was developed with the purpose of application to activation calculations.

The tool NuGra for the processing of decay data and nuclide decay chain information for burnup calculations was improved regarding the consistency of the data sets created and enhanced by allowing the processing of more reaction channels.

Calorimetric measurements of spent fuel assemblies were used for the validation of the decay heat prediction of MOTIVE for the first time, extending the general validation base. Additional radiochemical analysis samples were also calculated, in order to further improve the validation of the nuclide inventory calculation. The observed agreement between calculations and experiments is similar to results from current codes published by other groups. The details of these calculations are documented in a separate report.

Finally, a number of numerical and technical improvements to the code and quality assurance measures were implemented. These include implementing an automated testing environment for MOTIVE and VENTINA, work on the parallelisation of MOTIVE, and the creation of a graphical user interface for a simplified analysis of computational results.

Inhaltsverzeichnis

	Kurzfassung.....	I
	Abstract.....	III
1	Einleitung	1
2	Zielsetzung.....	3
2.1.1	Weiterentwicklung MOTIVE und VENTINA.....	4
2.1.2	Verbesserungen im Bereich der nuklearen Datenbasis.....	5
2.1.3	Validierung MOTIVE/VENTINA und Anwendung auf spezifische Problemstellungen im Bereich der Abbrandrechnung	6
2.1.4	Maßnahmen zur Qualitätssicherung, zur numerischen Optimierung und zur weiteren Verbesserung der Benutzerfreundlichkeit	6
3	AP1: Weiterentwicklung MOTIVE und VENTINA.....	9
3.1	Funktionale Weiterentwicklung MOTIVE und VENTINA.....	9
3.1.1	Entwicklung einer hybriden Berechnungsmethode für Reaktionsraten in MOTIVE.....	9
3.1.2	Abbrandbenchmark für schnelle Reaktorsysteme	14
3.1.3	Separate Modi für Zerfalls- und Aktivierungsrechnungen mit VENTINA...	18
3.1.4	Erweiterung der CRAM-Methode zum Lösen der inhomogenen Bateman-Gleichung	20
3.1.5	Zusätzliche Ausgabedaten für MOTIVE	23
3.2	Schnittstellen zu anderen Programmen	23
3.2.1	Erweiterung der Wirkungsquerschnittskorrektur in KMACS	23
3.2.2	Anbindung von VENTINA an ATHLET-CD.....	35
3.2.3	Implementierung einer Schnittstelle zur Aktivierungsberechnung mit MCNP und VENTINA.....	36
3.3	Verbesserung und Erweiterung der Verarbeitung der nuklearen Daten in MOTIVE und VENTINA.....	41

3.3.1	Weiterentwicklung des Werkzeugs NuGra zur Zerfallsdatenprozessierung.....	41
3.3.2	Adjungierte Lösung der Batemangleichung.....	42
4	AP2: Validierung MOTIVE/VENTINA und Anwendung auf spezifische Problemstellungen im Bereich Abbrandrechnung.....	49
4.1	Modellierung zusätzlicher Siedewasser-Brennelementtypen	49
4.1.1	SVEA-100 und SVEA-64	49
4.1.2	SVEA-96.....	51
4.2	Erweiterung der Validierungsdatenbasis von MOTIVE.....	54
4.2.1	Nachbestrahlungsanalyseproben.....	54
4.2.2	Validierungsrechnungen zur Zerfallswärmeleistung von LWR-Brennelementen	54
4.3	Brennstofftemperaturberechnung und Modelle zur effektiven Brennstofftemperatur	56
4.4	Aktivierungsrechnungen zu neuartigen Hüllrohrmaterialien	63
5	AP3: Numerische Optimierungen, Benutzerfreundlichkeit und Maßnahmen zur Qualitätssicherung	69
5.1	Arbeiten zur Parallelisierung von MOTIVE.....	69
5.2	Grafische Benutzeroberfläche zur Auswertung von MOTIVE-Rechenergebnissen.....	70
5.3	Weitergehende Maßnahmen zur Qualitätssicherung	74
6	Zusammenfassung	75
	Literaturverzeichnis.....	77
	Abbildungsverzeichnis.....	85
	Tabellenverzeichnis.....	87

1 Einleitung

Die rechnerische Bestimmung des Nuklidinventars bestrahlter Brennelemente und daraus abgeleiteter Größen ist ein zentraler Bestandteil sowohl kernphysikalischer Berechnungsmethoden als auch von Analysemethoden für die Zwischen- und Endlagerung dieser Brennelemente. Bei reaktorphysikalischen Ganzkernrechnungen ermöglicht die Berechnung des brennelementweisen Nuklidinventars eine Korrektur der vorausgerechneten Wenig-Gruppen-Querschnitte und somit eine Verbesserung der Rechengenauigkeit. Für die bei der Kritikalitätssicherheit von Transport- und Lagerbehältern für bestrahlten Kernbrennstoff häufig angewandte sog. Abbrandkredit-Methode, bei der die Reaktivitätsminderung aufgrund der geänderten Brennstoffzusammensetzung berücksichtigt wird, ist eine zuverlässige Bestimmung des Nuklidinventars des Brennstoffs notwendig. Für Betrachtungen zur Wärmeentwicklung von solchen Behältern ist die Kenntnis der Nachzerfallsleistung der Brennelemente eine wichtige Voraussetzung. Für Abschirmungsrechnungen benötigt man Strahlungsquellterme, die sich ebenfalls aus dem berechneten Nuklidinventar ergeben. Auch bei der Endlagerung spielt die Kenntnis von Nuklidinventar und Wärmeentwicklung eine wesentliche Rolle. Insbesondere ist in diesem Zusammenhang international zuletzt eine möglichst genaue Bestimmung der Nachzerfallsleistung verstärkt in den Fokus gerückt.

Für Sicherheitsanalysen in diesen Bereichen ist die Bereitstellung fortgeschrittener, unabhängiger Berechnungsmethoden zur Nuklidinventarberechnung wesentlich, um beispielsweise der zunehmend heterogenen Auslegung moderner Brennelemente insbesondere in SWR, aber auch DWR, Rechnung zu tragen.

Die GRS entwickelt die Programme MOTIVE und VENTINA zur Abbrand- und Nuklidinventarberechnung und wendet diese auf relevante aktuelle Fragestellungen an. Im Rahmen des Vorhabens RS1582 (MODENA) wurde eine Weiterentwicklung und erweiterte Validierung dieser Programme sowie die verbesserte Integration von VENTINA in den GRS Kernsimulator KMACS umgesetzt. Der vorliegende Bericht dokumentiert die in diesem Vorhaben durchgeführten Arbeiten und erzielten Ergebnisse.

2 Zielsetzung

Für Sicherheitsanalysen im Bereich bestrahlter Brennelemente ist der Einsatz hochgenauer Verfahren zur rechnerischen Bestimmung des Nuklidinventars und daraus abgeleiteter Größen, wie z. B. die Nachzerfallsleistung, Aktivität oder Strahlungsspektren, erforderlich. Die GRS entwickelt und pflegt hierfür das Programm MOTIVE /HAN 17/, das auf modulare Weise externe Programme zur dreidimensionalen Neutronenflussberechnung und zur Nuklidinventarberechnung koppelt. Für die Kopplung wird aus diesem ein hochfeiner Multigruppen-Fluss ausgelesen und zur Ableitung von Reaktionsraten für relevante neutroneninduzierte Prozesse für die Abbrandgleichungen zur Berechnung des Nuklidauf- und -abbaus verwendet.

Für die Flussberechnung sind aktuell die externen Programme KENO-VI aus dem SCALE-Paket /REA 17/ und OpenMC /ROM 15/ in das MOTIVE-Paket modular integriert. Zur Nuklidinventarberechnung ist das Programm VENTINA angekoppelt, das in Zusammenarbeit mit dem Paul-Scherrer-Institut (PSI) in der Schweiz weiterentwickelt wird /AUR 15/. VENTINA ist ein flexibles Softwaremodul für die Lösung der nuklearen Abbrandgleichungen (*Bateman-Equations*). Es wird im *Stand-Alone*-Modus für nulldimensionale Abbrandprobleme (ähnlich wie der bekannte Code ORIGEN /REA 17/), sowie als mikroskopisches Abbrandmodul in der Kopplung an ein Abbrandprogramm wie MOTIVE oder an einen Kernsimulator wie KMACS /ZIL 18a/ eingesetzt. In letzterem Fall ist eine große Anzahl von räumlichen Maschen separat und parallel zu berechnen. Ergänzend erfolgt die Bereitstellung der Zerfallsdaten und Spaltproduktausbeuten mit dem Programm ENDF2Graph /AUR 15/. Mit diesem Programm können Wirkungsquerschnittsbibliotheken im ENDF-Format ausgelesen, die ausgelesenen Daten mit graphentheoretischen Methoden analysiert und für die Verwendung mit MOTIVE und VENTINA bereitgestellt werden.

Um die Rechengenauigkeit von MOTIVE weiter zu verbessern und gleichzeitig das mögliche Einsatzspektrum zu erweitern, sind eine Reihe von Maßnahmen umgesetzt worden. Diese betreffen zum einen die zugrunde liegende nukleare Datenbasis und zum anderen spezifische Aspekte der Methodik selbst. Aufbauend auf diesen Erweiterungen erfolgten Untersuchungen verschiedener spezifischer Fragestellung sowie eine Erweiterung der Validierungsdatenbasis für MOTIVE. Die dabei verfolgten Einzelziele sind im Folgenden dargestellt.

2.1.1 Weiterentwicklung MOTIVE und VENTINA

Die in MOTIVE implementierte Reaktionsratenberechnung auf der Basis von hochfeinen Multigruppendaten zeichnet sich durch hohe Effizienz aus und erzielt im Allgemeinen sehr gute Ergebnisse. Allerdings wird dabei der Anteil der sogenannten nicht-aufgelösten Resonanzen vernachlässigt, was insbesondere bei Systemen mit schnellem Neutronspektrum zu signifikanten systematischen Fehlern führen kann: Der Hauptbeitrag stammt dabei von einigen wenigen Aktinoiden. Hierzu wurde eine Methode entwickelt, mit der eine exakte Berechnung ohne wesentliche Laufzeitnachteile ermöglicht wird.

Das Programm VENTINA wird neben MOTIVE auch zur Nuklidinventarbestimmung im Kernsimulator KMACS der GRS eingesetzt. Dies dient der Korrektur der interpolierten, vorgerechneten makroskopischen Wirkungsquerschnitte aufgrund des tatsächlich berechneten Inventars. Hierzu wurden Arbeiten durchgeführt mit dem Ziel, die Genauigkeit der Methode verbessern. Dabei wurde zum einen die Änderung des Nuklidinventars durch radioaktiven Zerfall für Brennelemente, die für einen Zyklus oder länger im Lagerbecken gestanden haben, berücksichtigt. Zum anderen wurden Methoden untersucht, die die Berücksichtigung des GadoliniumAusbrands bei Brennstäben mit abbrennbarem Absorber in KMACS verbessern können.

Als Standardlösungsmodus ist in VENTINA bisher der Abbrand mit einem zeitschrittweise konstanten Neutronenfluss vorgesehen, wobei dieser mit der intern in VENTINA berechneten Brennelement- oder Reaktorleistung skaliert wird. Andere Szenarien wie etwa die Berechnung des reinen Zerfalls ohne Neutronenfluss oder einer Aktivierung mit fest vorgegebenem Neutronenfluss waren nur indirekt über entsprechende Festlegung der Eingabedaten (z. B. durch einen auf null gesetzten Neutronenfluss) beschreibbar. Effizienter ist es, diese Situationen durch jeweils eigene Modi separat zu behandeln. Zu diesem Zweck wurde eine Schnittstelle zu dem Programm MCNP /GOO 12/ erstellt, um aus einer vorgeschalteten Neutronentransportrechnung materialspezifische Flüsse bereitzustellen, die dann für eine Aktivierungsrechnung mit VENTINA verwendet werden können.

Weiterhin wurden unterstützende Arbeiten mit dem Ziel, VENTINA in die GRS-Programme ATHLET-CD und COCOSYS zu integrieren, durchgeführt.

Die ausführliche Beschreibung der genannten Arbeiten erfolgt in den Kapiteln 3.1 und 3.2.

2.1.2 Verbesserungen im Bereich der nuklearen Datenbasis

Im früheren Eigenforschungsvorhaben RS1542 wurde an den Codes VENTINA und NuGra die Möglichkeit zur Bereitstellung und Verarbeitung der nuklearen Datenbasis für VENTINA wesentlich erweitert. So wurde die Erzeugung der Datenbibliotheken für neue Evaluationen automatisiert und verbessert, und die Datenbasis um zusätzliche Neutronenreaktionskanäle, also mögliche neutroneninduzierte Umwandlungsprozesse, erweitert. Aufgrund der Art und Weise der internen Verarbeitung der Daten in den Programmen konnte dabei die Erweiterung um zusätzliche Reaktionskanäle bisher noch nicht vollständig umgesetzt werden.

Deswegen wurden einige Anpassungen in NuGra und VENTINA notwendig, so dass im Anschluss daran alle wesentlichen, in den Evaluationen verfügbaren Reaktionskanäle in MOTIVE/VENTINA Berücksichtigung finden. Diese Erweiterung ermöglicht unter anderem einen Einsatz von VENTINA für Aktivierungsrechnungen. Im Rahmen des Vorhabens wurde dies genutzt, um Aktivierungsanalysen für Cladding-Materialien von sogenannten *Accident Tolerant Fuels* (ATF) /ZIN 14/, /KIL 22/, /AUR 21/ durchzuführen. Hierbei wurden auch möglicherweise relevante chemische Veränderungen des Materials durch Nuklidtransmutation abgeschätzt /GEO 13/.

Bisher kommen für Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen bezüglich nuklearer Daten insbesondere in Abbrandrechnungen in der GRS Sampling-basierte Methoden zum Einsatz, das hauseigene XSUSA /ZWE 14/ sowie SAMPLER /BOS 22/aus dem SCALE6.2-Programmsystem. Auch wenn diese Methoden bereits einen hohen Entwicklungs- und Optimierungsgrad erreicht haben, können damit Unsicherheitsanalysen für realistische Abbrandrechnungen aufgrund der hohen Anzahl an Abbrandschritten und hoher Stichprobengrößen einen beträchtlichen Rechenaufwand erfordern. Eine effiziente Alternative zur Berechnung der Sensitivitäten und Unsicherheiten von Multiplikationsfaktoren, Isotopeninventaren etc. stellen störungstheoretische Methoden dar, bei denen das gekoppelte System aus Boltzmann- und Bateman-Gleichung betrachtet wird. International nimmt die Entwicklung derartiger Methoden zu, allerdings existieren bisher nur wenige allgemein einsatzfähige Implementierungen /BUI 18/. Bei der GRS ist bisher kein entsprechendes Programm verfügbar. Im Rahmen dieses Eigenforschungsvorhabens wurden entsprechende Forschungs- und Entwicklungsarbeiten hierzu begonnen.

Diese Arbeiten sind in Kapitel 3.3 näher beschrieben, die Darstellung der Arbeiten zur Hüllrohraktivierung finden sich im Kapitel 4.4

2.1.3 Validierung MOTIVE/VENTINA und Anwendung auf spezifische Problemstellungen im Bereich der Abbrandrechnung

Die im Vorhaben RS1542 erstellte Validierungsbasis für Nachrechnungen von Nachbestrahlungsanalyseproben wurde um weitere Modelle ergänzt. Hierzu wurde die SFCOMPO2.0 Datenbank der OECD/NEA herangezogen. Ziel war, diejenigen noch nicht berücksichtigten Proben von Druckwasser- und Siedewasserreaktoren hierzu heranzuziehen, bei denen alle für die Nachrechnung notwendigen Eingabedaten verfügbar sind und bei denen neben den Uran- und Plutonium-Isotopen auch eine signifikante Anzahl an Spaltprodukten und höheren Aktiniden gemessen wurden. Ein weiteres Ziel war eine Validierung der Nachzerfallsleistungsberechnung anhand frei verfügbarer experimenteller Daten. Die Ergebnisse mit MOTIVE/VENTINA wurden quantitativ im Vergleich zu den experimentellen Daten und zu den Resultaten anderer Codes ausgewertet.

Zur realistischen Berücksichtigung der Brennstofftemperatur bei neutronenphysikalischen Berechnungen ist es in einigen Fällen aufgrund der Resonanzselbstabschirmung notwendig, sogenannte effektive Temperaturen anzusetzen. Hierfür existieren verschiedene Modellansätze, die auf analytischen Überlegungen beruhen. Diese näherungsweise Ansätze wurden im Vorhaben mit der in MOTIVE gegebenen exakteren Möglichkeit zur ringzonenweisen Temperaturberechnung verglichen, um deren Plausibilität näher zu untersuchen.

Die Beschreibung der genannten Arbeiten ist in den Kapiteln 4.1 und 4.3. Die für die Validierung analysierten experimentellen Daten und die dazu erstellten Modelle sind in einem separaten Bericht ausführlich dokumentiert /BEH 23/.

2.1.4 Maßnahmen zur Qualitätssicherung, zur numerischen Optimierung und zur weiteren Verbesserung der Benutzerfreundlichkeit

Ein Hauptaugenmerk bei der bisher erfolgten Entwicklung von MOTIVE lag auf der Verringerung der Fehleranfälligkeit bei der Eingabe durch den Nutzer. Hierzu wurde besonders auf Benutzerfreundlichkeit des Programms, geachtet. Beispielsweise wurde das Eingabedatenformat so angelegt, dass die meisten Eingaben über einfache Parameter (Schlüsselwort-Werte-Paare oder Parameterlisten) erfolgt und dem Nutzer komplexe geometrische Definitionen weitgehend abgenommen werden. Um die Arbeit mit MOTIVE weiter zu vereinfachen, war ein Ziel die Erstellung einer graphischen Benutzeroberfläche (GUI) zur graphischen Auswertung der Ergebnisdaten.

Während die an MOTIVE gekoppelten Programme vielfach einen parallelisierten Aufruf unterstützen, war in MOTIVE zu Beginn des Vorhabens keine Parallelisierung implementiert. Da in einigen Fällen die Datenprozessierung einen relevanten Anteil an der Laufzeit haben kann, wurde für das vorliegende Vorhaben angestrebt für MOTIVE in relevanten Programmteilen eine Parallelisierung umzusetzen.

Zur Qualitätssicherung der im Vorhaben durchgeführten Entwicklungsarbeiten wurden eine Reihe von Maßnahmen im Einklang mit der QM-Richtlinie der GRS zur Programmentwicklung durchführt. Die zu den Programmen zugehörigen Dokumente zur Dokumentation wurden entsprechend der durchgeführten Arbeiten gepflegt und vervollständigt. Für die Softwareentwicklungsprojekte der GRS steht ein *Continuous Integration (CI)* System als Teil der Entwicklungsplattform GitLab zur Verfügung. Dieses ermöglicht ein automatisiertes Testen der Kompilierfähigkeit und der korrekten Funktion eines Programms in regelmäßigen Zeitabständen. Im Rahmen des Vorhabens wurde eine entsprechende Umgebung für die Programme MOTIVE und VENTINA aufgesetzt und in die obengenannte Testumgebung integriert.

Die Umsetzung dieser Ziele ist in Kapitel 5 beschrieben.

3 AP1: Weiterentwicklung MOTIVE und VENTINA

3.1 Funktionale Weiterentwicklung MOTIVE und VENTINA

Zur Erweiterung des Anwendungsbereichs und um zusätzliche Funktionalitäten bereitzustellen wurden im Rahmen des Vorhabens mehrere Entwicklungsarbeiten an den Programmen MOTIVE und VENTINA umgesetzt, die im Folgenden beschrieben werden.

3.1.1 Entwicklung einer hybriden Berechnungsmethode für Reaktionsraten in MOTIVE

Zur Berechnung der Änderung des Nuklidinventars im Kernbrennstoff während der Bestrahlung im Reaktor werden die Reaktionsraten für die verschiedenen berücksichtigten Neutronenreaktionen benötigt. Diese beschreiben die Anzahl der auftretenden Reaktionen eines Reaktionstyps pro Zeiteinheit und ergeben sich aus dem Produkt aus Neutronenfluss und Wirkungsquerschnitt für die betrachtete Reaktion. Zur effizienten Berechnung der Reaktionsraten wird in MOTIVE ein hochaufgelöster Multigruppenansatz verwendet. Dabei wird im Flussberechnungsprogramm für jedes abzubrennende Material ein Multigruppenfluss in einem extrem fein aufgelösten Energiegruppensatz berechnet (aktuell in MOTIVE 27 687 Energiegruppen). Dieser wird mit Hilfe einer generischen Multigruppen-Wirkungsquerschnittsbibliothek zu den benötigten Reaktionsraten kondensiert. Aufgrund der durch VENTINA gegebenen Randbedingungen erfolgt dieser Schritt zweistufig: Zunächst werden Zwei-Gruppen-Flüsse und mikroskopische Wirkungsquerschnitte als Eingabedaten für VENTINA berechnet, die dann innerhalb von VENTINA zu Reaktionsraten kondensiert werden. Da für jedes zu berechnende Material nur ein sogenanntes *Tally* innerhalb des Monte-Carlo Neutronentransportprogramms zu berechnen ist, ist diese Methode sehr effizient. Ein Tally bezeichnet in Monte-Carlo-Programmen einen virtuellen Detektor, mit dem physikalische Größen aus der Neutronenstatistik heraus bestimmt werden können. Gleichzeitig wird durch das hochaufgelöste Energiegruppenschema das Problem der Resonanzselbstabschirmung umgangen. Allerdings werden bei diesem Verfahren die unaufgelösten Resonanzen vernachlässigt. Hierbei handelt es sich um Resonanzen der Wirkungsquerschnitte im epithermischen Energiebereich, die so schmal sind, dass sie in der kontinuierlichen Energiedarstellung nicht explizit berücksichtigt werden können. Stattdessen werden sie durch die sogenannten „Probability Tables“ dargestellt.

Eine alternative Methode, um Reaktionsraten unter Berücksichtigung der unaufgelösten Resonanzen zu berechnen besteht bei Verwendung von Monte Carlo Programmen zur Flussberechnung in der expliziten Berechnung über *Tallies*. Dabei muss für jedes Nuklid und jede Reaktion ein eigenes Tally definiert werden. Wenn dies für alle Nuklide und Reaktionen im Modell gemacht wird, führt dies zu einer erheblichen Verlängerung der Rechenzeit.

Da der Haupteffekt der unaufgelösten Resonanzen von einigen wenigen Nukliden – im Wesentlichen einige höhere Aktinoide – stammt, ist die in MOTIVE neu umgesetzte Idee einen hybriden Ansatz zu verfolgen. Dabei werden für im Input auszuwählende Nuklide die Reaktionsraten per Tally berechnet, während die übrigen weiterhin über die Multi-gruppen-Methode bestimmt werden. Dieser Ansatz wurde im aktuellen Vorhaben umgesetzt und getestet.

Als vorbereitender Schritt wurde in die Flussberechnung in KENO-VI von der bisherigen Variante über die Eingabeoption `FLX=YES` auf eine Tally-basierte Berechnung umgestellt. Dies vereinheitlicht die Kopplung der beiden aktuell ansteuerbaren Monte Carlo Codes KENO-VI und OpenMC und vereinfacht die interne Schnittstelle, insbesondere das Auslesen der Ergebnisdaten von KENO-VI.

Für die Implementierung der Funktionalität mussten einige Anpassungen in MOTIVE vorgenommen werden. Die Routinen zur Erzeugung der Eingabedatensätze für die Monte Carlo Codes wurden um die Option zum Schreiben von zusätzlichen Tallies ergänzt. Die zugehörigen Ausleseroutinen wurden ebenso ergänzt, um die Tally-Ergebnisse einzulesen und weiterzuverarbeiten. Standardmäßig werden bei der Erzeugung der Eingabedaten für VENTINA die aus dem Multigruppenfluss und der zugehörigen Wirkungsquerschnittsbibliothek bestimmten Wirkungsquerschnittsdaten verwendet. Für die relevanten Nuklide werden diese nun durch die eingelesenen Tally-basierten Wirkungsquerschnitte ersetzt. Während in KENO-VI direkt Tallies für Wenig-Gruppen-Wirkungsquerschnitte verwendet werden können, deren Ausgabe direkt den für VENTINA benötigten Größen entspricht, sind in OpenMC nur Tallies verfügbar die Reaktionsraten berechnen. Diese müssen in Motive unter Verwendung des zugehörigen Flusses rückgerechnet werden. Wenn ein Nuklid, für das eine Reaktionsrate bzw. ein Wirkungsquerschnitt berechnet werden soll, nicht im zugrundeliegenden Material vorhanden ist – dies tritt vor allem bei frischem Brennstoff oder bei sehr geringen Abbränden auf – ist die Tally-Berechnung im Monte Carlo Code teilweise nicht möglich. Um dieses Problem zu umgehen, wurde eine Abfrage eingebaut, die dafür sorgt, dass die jeweiligen Tallies nur

dann definiert werden, wenn das Nuklid im Material vorhanden ist. Solange dies nicht der Fall ist, werden die standardmäßigen Multi-Gruppen-basierten Daten verwendet. Schließlich wurde ein neuer Parameter für die Eingabedatei `tally_nuclides` definiert, der als Wert eine Liste von Nuklid-Identifikatoren annimmt. Für alle Nuklide, die in diesem Parameter aufgeführt werden, werden in der Eingabedatei des Monte Carlo Programms *Tallies* für alle in der Nuklidinventarberechnung verwendeten Reaktionskanäle definiert. In der Standardeinstellung ist der Parameter leer und hat keinen Effekt.

Für eine erste Testrechnung wurde der Datensatz der Probe SF98-05 aus dem japanischen Siedewasserreaktor Fukushima-Daini-2 aus der Datenbank SFCOMPO 2 nachgerechnet. Die Rechnungen wurden mit beiden gekoppelten Monte Carlo Codes KENO-VI und OpenMC, jeweils mit der Datenbibliothek ENDF/B-VIII durchgeführt. In beiden Fällen wurden jeweils Rechnungen mit und ohne der Tally-basierten Reaktionsratenberechnung durchgeführt und verglichen. Es wurden jeweils Tallies für die Nuklide ^{235}U , ^{238}U , ^{237}Np , ^{239}Pu , ^{240}Pu , ^{241}Pu , ^{242}Pu , ^{241}Am , $^{242\text{m}1}\text{Am}$, ^{243}Am , ^{242}Cm , ^{243}Cm , ^{244}Cm verwendet.

Es zeigt sich, dass die Verwendung Tally-basierter Reaktionsraten nur zu geringen Änderungen gegenüber der Multigruppen-basierten Berechnung führt. Bei den Reaktionsraten selbst ist der größte Effekt bei der Absorptionsrate von ^{240}Pu zu beobachten, die sich um etwa 2,5 % verringert. Bei ^{238}U ist die Absorptionsrate um etwa 0,4 % verringert. Die Änderungen in den übrigen Absorptions- und Spaltraten von ^{235}U , ^{238}U und ^{239}Pu sind vernachlässigbar. Die mit KENO-VI berechneten Änderungen sind in der Tendenz geringfügig größer als diejenigen von OpenMC, weisen aber grundsätzlich die gleichen Tendenzen auf. Die Unterschiede in den k_{eff} -Werten zwischen den Rechnungen mit und ohne Tally-basierter Reaktionsratenberechnung bleibe für kleine Abbrände im Bereich der Monte Carlo-Unsicherheit. Erst für Abbrände ab etwa 20 GWd/tHM wachsen sie langsam an und erreichen schließlich Werte von 0,13 % Δk_{eff} für OpenMC und 0,19 % Δk_{eff} für KENO-VI.

Im resultierenden Nuklidinventar ergeben sich ebenfalls nur geringfügige Abweichungen zwischen den beiden Rechenmethoden. In Abb. 3.1 und Abb. 3.2 sind die Ergebnisse für ausgewählte Spaltprodukte und Aktinoide gezeigt. Die Auswahl entspricht dabei der Liste der in der Nachbestrahlungsanalyse gemessenen Nuklide. Die beobachteten Abweichungen für die Spaltprodukte sind durchgängig im Bereich $< 0,4$ %.

Hier geht der Effekt der Tally-basierten Reaktionsratenberechnung nur indirekt über geänderte Massenverhältnisse der spaltbaren Nuklide ein.

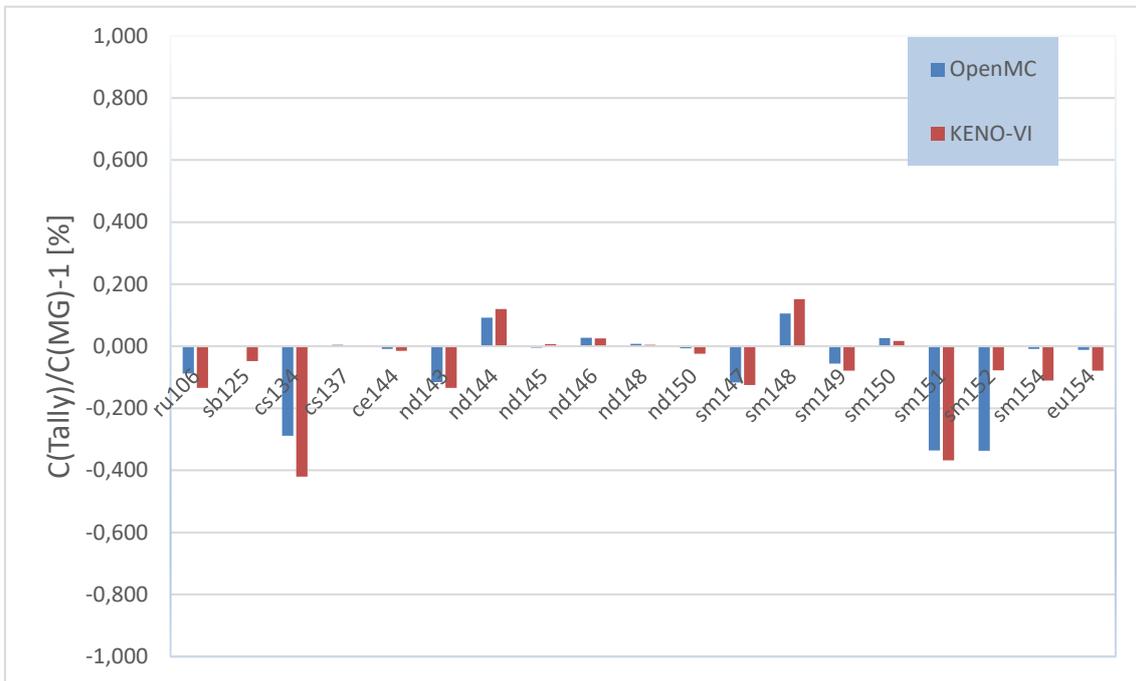


Abb. 3.1 Abweichung im Nuklidinventar für ausgewählte Spaltprodukte zwischen Rechnungen mit Tally-basierter und Multigruppen-basierter Reaktionsratenberechnung

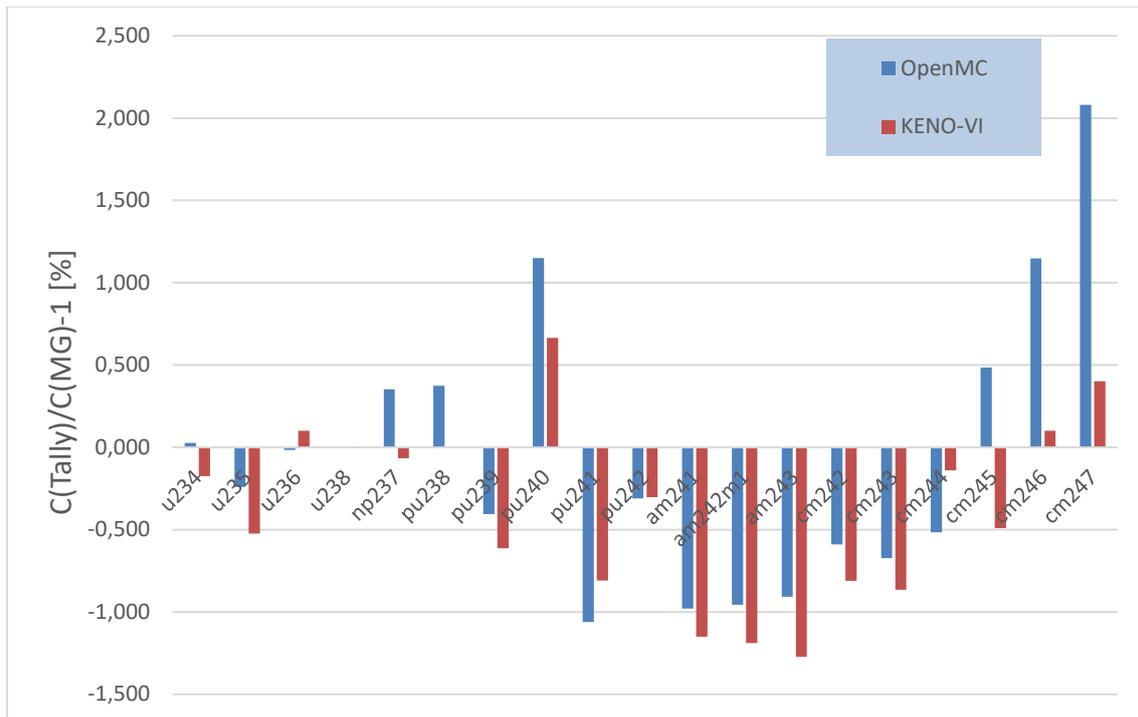


Abb. 3.2 Abweichung im Nuklidinventar für ausgewählte Aktinoide zwischen Rechnungen mit Tally-basierter und Multigruppen-basierter Reaktionsratenberechnung

Der Effekt bei den Aktinoiden ist erwartungsgemäß etwas größer. Die Abweichungen bleiben größtenteils im Bereich +/- 1 %. Größere Abweichungen treten lediglich bei der Rechnung mit OpenMC für das Nuklid ^{247}Cm auf, das seinerseits nur mit geringen absoluten Massen vorkommt. Die große Mehrzahl der Nuklide zeigt konsistentes Verhalten beim Vergleich beider Codes. Insgesamt bleibt festzuhalten, dass die beobachteten Korrekturen gering gegenüber den Abweichungen zwischen Rechnung und Experiment sind, die in Abb. 3.3 gezeigt sind. Für die Mehrheit der Nuklide führen die Korrekturen zu einer leichten Verbesserung in der Nachrechnung.

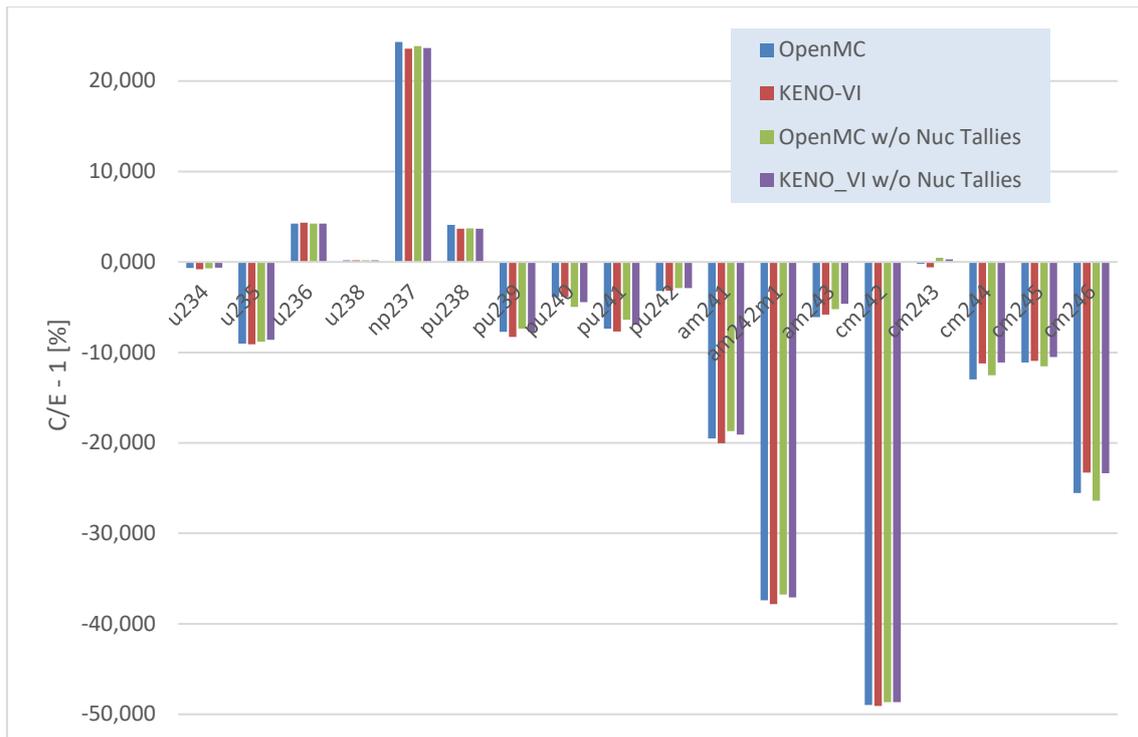


Abb. 3.3 Abweichung zwischen Rechnung und Experiment für die vier durchgeführten Rechnungen

3.1.2 Abbrandbenchmark für schnelle Reaktorsysteme

Die relative Bedeutung des Bereichs der unaufgelösten Resonanzen für die Wirkungsquerschnitte ist für Reaktorsysteme mit schnellem Neutronenspektrum größer als für solche mit thermischem Spektrum. Das ist darin begründet, dass in einem solchen System der Schwerpunkt des Neutronenspektrums im schnellen Bereich liegt und somit eine relativ gesehen höhere Wahrscheinlichkeit für eine Neutronenabsorption im Resonanzbereich und dort insbesondere im Bereich der unaufgelösten Resonanzen besteht. Dieser schließt sich in Richtung absteigender Energien direkt an den schnellen Bereich an. Daher ist es sinnvoll, den Effekt der implementierten Reaktionsratenkorrektur an einem schnellen System zu überprüfen. Zu diesem Zweck wurde ein Abbrandbenchmark für ein Brennelement eines Natriumgekühlten Schnellen Reaktors (*Sodium Cooled Fast Reactor*, SFR) herangezogen, der im Rahmen des *Benchmark for Uncertainty Analysis in Modeling for Design, Operation, and Safety Analysis of SFR* (UAM-SFR) der OECD/NEA definiert wurde [BUI 19]. Für diesen Benchmark wurden bereits in einem Vorgängervorhaben (RS1513) Rechnungen mit SCALE, HELIOS und SERPENT durchgeführt [AUR 15], so dass Vergleichsergebnisse vorliegen.

Der Benchmark umfasst den Abbrand eines Brennelements aus der inneren Kernregion des in /BUI 19/ beschriebenen Reaktorkerns mit oxidischem Brennstoff (MOX3600). Das Brennelement soll für 410 Tage bei einer spezifischen thermischen Leistung von 50,4 MW/tHM abgebrannt werden. Die Geometrie des Brennelements ist in Abb. 3.4 gezeigt. Das Nuklidinventar des Brennstoffs entspricht dabei der Zusammensetzung für einen Gleichgewichtskern, wobei der tatsächliche Spaltproduktgehalt durch eine effektive Konzentration von Molybdän modelliert wird. Die verwendete Nuklidkonzentration und weitere Details der Rechnung können aus /BUI 19/ entnommen werden.

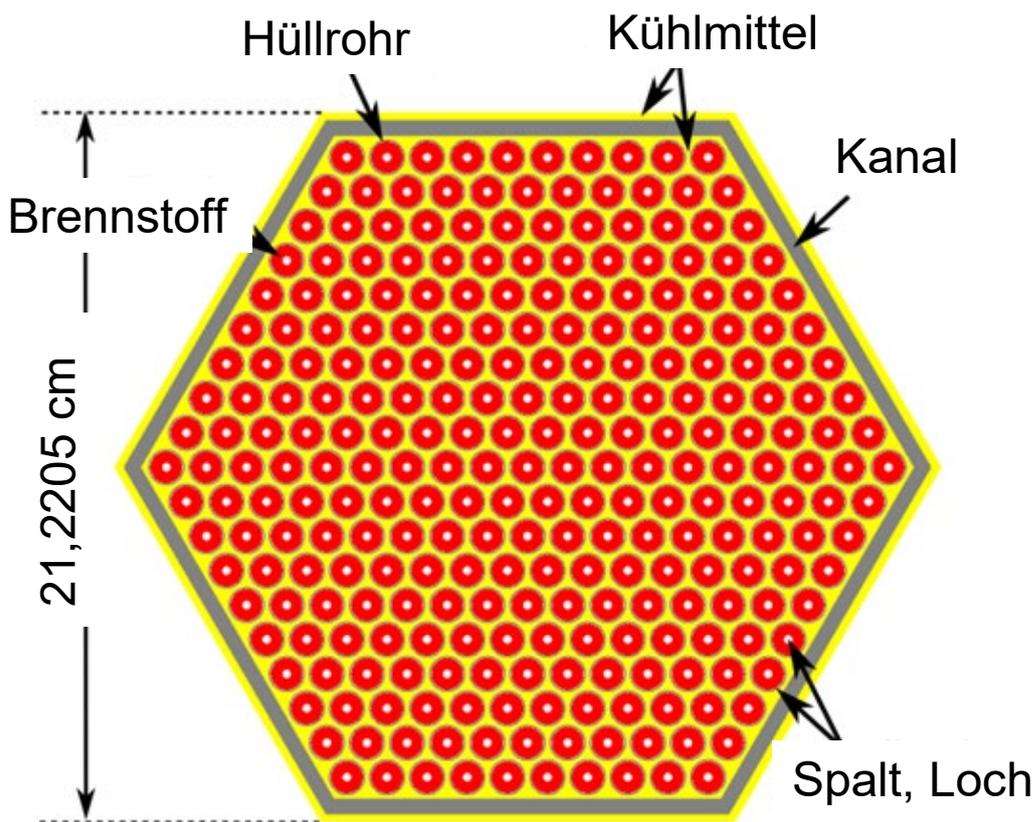


Abb. 3.4 MOX3600-Brennelement mit oxydischem Brennstoff

Um die Berechnung eines SFR-Brennelements in MOTIVE zu ermöglichen, waren einige zusätzliche Anpassungen im Programm notwendig. Zunächst wurde ein Geometriemodell für das Brennelement erzeugt. Hierbei konnte in weiten Teilen auf das bereits implementierte Modell für VVER1000 Brennelemente zurückgegriffen werden. Weiterhin mussten für die Inventarberechnung die Spaltproduktausbeuten und die Verzweungsverhältnisse für Neutronenreaktionen an das schnelle Neutronenspektrum angepasst werden. Für die Interpolation der Spaltproduktausbeuten wurden dabei Werte für die mittlere Energie der eine Spaltung auslösenden Neutronen (*Average Energy Causing Fission*, AECF) benötigt. Diese wurden über eine neu implementierte Funktion zur

Berechnung dieser Werte mit MOTIVE erzeugt. Für die Verzweungsverhältnisse wurde das bestehende Skript zur Wirkungsquerschnittsbibliothekserzeugung für MOTIVE mit einem generischen schnellen Neutronenspektrum, wie es in Programm NJOY vordefiniert ist, verwendet. Da für schnelle Neutronenspektren bei dem standardmäßig an VENTINA übergebenen Zwei-Gruppen-Fluss die thermische Gruppe im Monte Carlo Programm nicht hinreichend mit Neutronen bevölkert wird, um für diese sinnvolle Werte zu berechnen, wurde für die Rechnungen auf einen Ein-Gruppen-Fluss umgestellt.

Zum Test der Tally-basierten Reaktionsratenberechnung wurde der Benchmark mit MOTIVE jeweils mit und ohne diese Option nachgerechnet. Dabei wurden je zwei entsprechende Rechnungen unter Verwendung von KENO-VI und von OpenMC durchgeführt, jeweils unter Verwendung der Bibliothek ENDF/B-VII.1.

Der jeweils berechnete Verlauf des Multiplikationsfaktors k_{eff} über die Bestrahlungsdauer ist in Abb. 3.5 für die vier beschriebenen Rechnungen mit MOTIVE sowie für die im Rahmen des Vorhabens RS1513 erstellten Rechnungen mit Serpent und MCNP, die hier als Referenz dienen, dargestellt. Es ist zu erkennen, dass bereits zu Beginn der Rechnung trotz gleicher Wirkungsquerschnittsbibliothek eine signifikante Abweichung zwischen den vier eingesetzten Neutronentransportcodes besteht, dessen Ursprung nicht abschließend geklärt werden konnte. Wenn man jeweils die beiden MOTIVE-Rechnungen mit und ohne Verwendung der Tally-basierten Reaktionsratenberechnung vergleicht, stellt man eine leicht unterschiedliche Steigung beim Verlauf von k_{eff} fest, die zu einem Reaktivitätsunterschied im Bereich von etwa 100-150 pcm zum Ende der Bestrahlung führt. Dieser Unterschied ist allerdings klein im Vergleich zum Unterschied zwischen den Programmen.

Neben den Unterschieden im Multiplikationsfaktor wurde auch der Einfluss der nicht-aufgelösten Resonanzen auf das Nuklidinventarergebnis untersucht. Da die Tally-basierte Reaktionsratenberechnung nur für die wichtigsten Actinoide eingeschaltet wurde, war zu erwarten, dass für Spaltprodukte nur kleine Unterschiede in den Konzentrationen aufgrund von indirekten Effekten auftreten. Dies wurde auch so beobachtet. Ein etwas größerer Einfluss ergibt sich für einige Actinoide, wie in Abb. 3.6 zu erkennen ist.

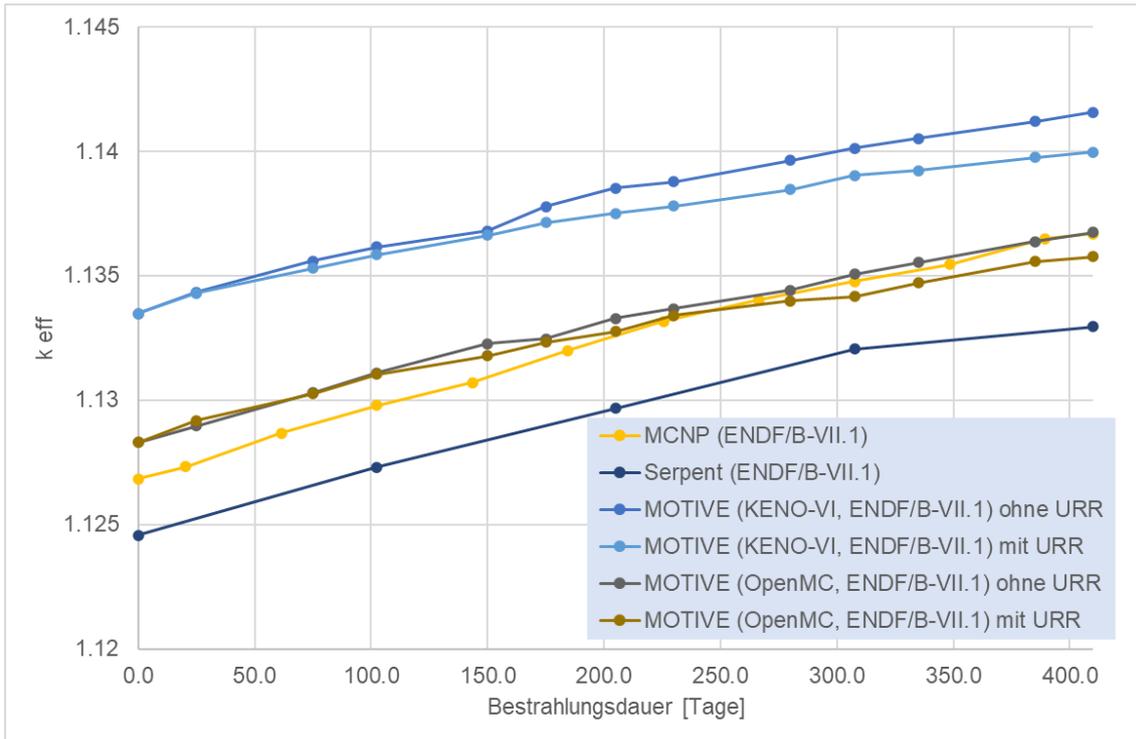


Abb. 3.5 Verlauf des Multiplikationsfaktors über die Bestrahlungsdauer für die Referenzrechnungen mit Serpent und MCNP und für die neu durchgeführten MOTIVE-Rechnungen

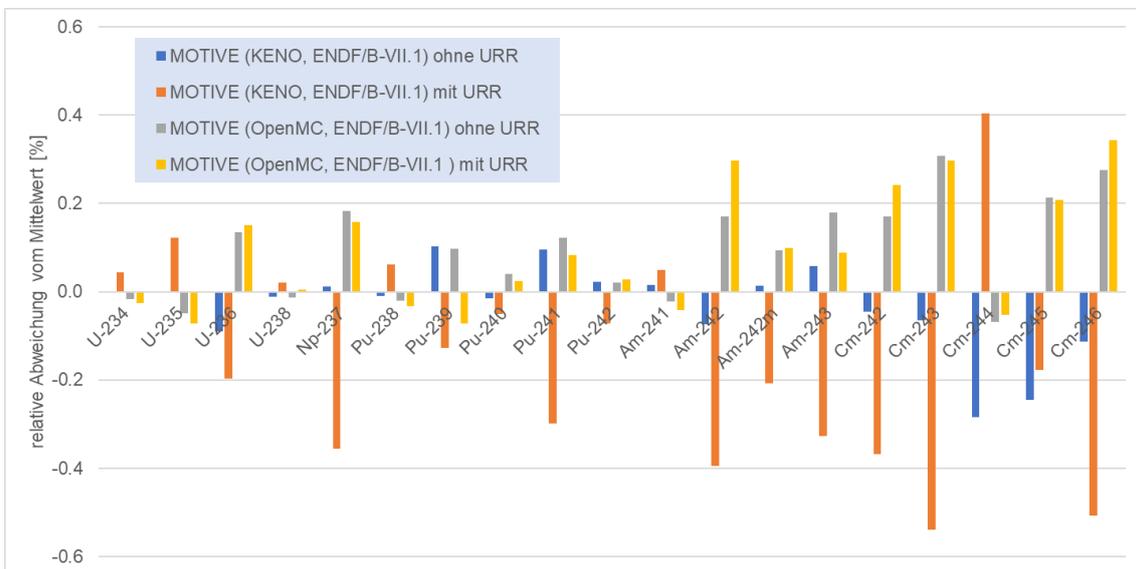


Abb. 3.6 Relative Abweichungen im Nuklidinventar im Vergleich zum Mittelwert der MOTIVE-Rechnungen

Dort sind die relativen Abweichungen der Nuklidkonzentrationen im Vergleich zum Mittelwert für einige Actinoide dargestellt. Wie zu erkennen ist treten bei der Rechnung mit KENO größere Unterschiede auf als bei der Rechnung mit OpenMC. Der Grund hierfür konnte im Rahmen des Vorhabens nicht ermittelt werden, da hierfür eine tiefe Kenntnis der jeweiligen Implementierungsdetails erforderlich gewesen wäre. Auch bei den KENO-Rechnungen treten jedoch relative Abweichungen zwischen den Ergebnissen mit und ohne Berücksichtigung der unaufgelösten Resonanzen von maximal etwa einem halben Prozent auf. Betroffen sind hier insbesondere die Curium-Nuklide. Die Größe der Unterschiede führt zu einer geringen praktischen Relevanz des Effekts.

Wie in Abb. 3.7 dargestellt treten die größten Abweichungen in Reaktionsraten für Spaltung und Absorption bei den Nukliden ^{239}Pu und ^{241}Pu auf und liegen bei maximal 2,7 %.

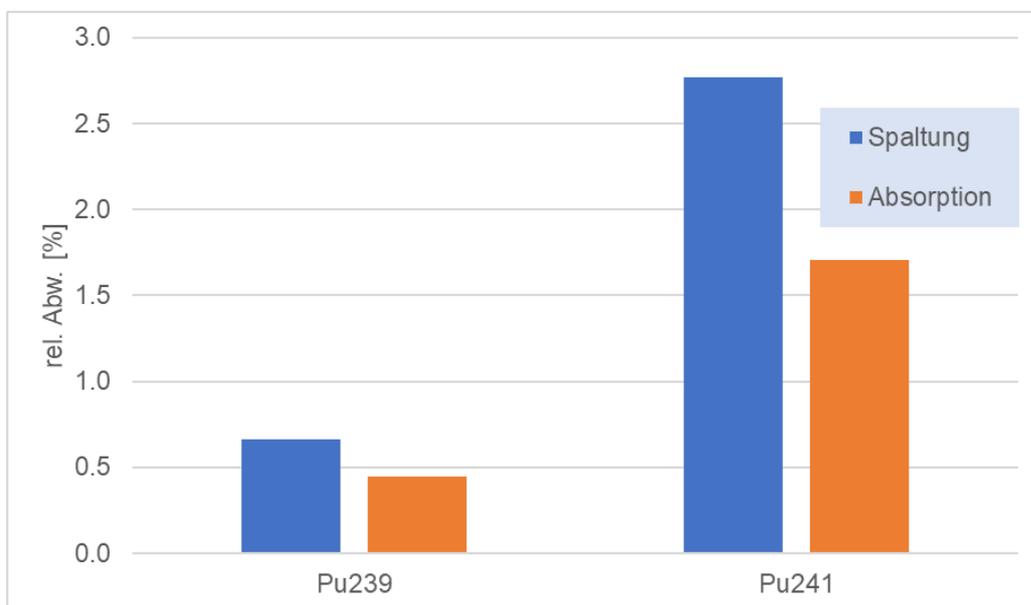


Abb. 3.7 Relative Abweichung der Spalt- und Absorptionsraten für ^{239}Pu und ^{241}Pu mit und ohne Berücksichtigung der unaufgelösten Resonanzen

3.1.3 Separate Modi für Zerfalls- und Aktivierungsrechnungen mit VENTINA

Für reine Abklingrechnungen, d. h. Nuklidinventarberechnungen in Abwesenheit eines Neutronenflusses, bei denen nur die Zerfallsprozesse eine Rolle spielen, wurde bisher in VENTINA eine Standardabbrandrechnung verwendet bei der die Leistung auf Null gesetzt wurde. Dies führt zu Nachteilen in der Handhabung, da Angaben gemacht werden müssen, die für das vorliegende Problem eigentlich nicht benötigt werden. So müssen beispielsweise Wirkungsquerschnittsdaten für Neutronenreaktionen angegeben

werden. Außerdem wurden teilweise numerische Artefakte beobachtet. Daher wurde im Vorhaben ein separater Modus für eine reine Abklingrechnung umgesetzt. Im Unterschied zum bisher verfolgten Ansatz wird dabei die Abbrandmatrix, d. h. die Koeffizientenmatrix der Batemangleichungen, von vorneherein nur mit den Übergangsraten, die sich aus den Zerfallsprozessen ergeben, belegt. Weiterhin wurde die Eingabemaske von allen Einträgen befreit, die für die Berechnung der Zerfallsprozesse irrelevant sind. Dies betrifft die Systemleistung, die Neutronenflüsse, die Wirkungsquerschnittsdaten, die Schwermetallmasse und die Materialvolumina. Das Ergebnis ist eine numerisch stabilere Berechnung, die zusätzlich im Allgemeinen eine geringere Laufzeit aufweist.

Auch die Anforderungen einer Aktivierungsrechnungen an den Inventarcode in Hinblick auf die Eingabedaten unterscheiden sich in einigen Punkten von denen einer Abbrandrechnung. Während bei einer Abbrandrechnung für jedes abzubrennende Material und jeden Zeitschritt ein problemspezifischer Wirkungsquerschnittsdatensatz erzeugt wird, werden bei Aktivierungsrechnungen typischerweise generische, problemunabhängige Daten verwendet. Diese liegen dafür in einer feineren Gruppenstruktur vor, um die wesentlichen Effekte der Resonanzselbstabschirmung berücksichtigen zu können. Daher wurde in VENTINA ein neuer Eingabemodus für Aktivierungsrechnungen realisiert. Bei diesem werden die Wirkungsquerschnittsdaten nicht mehr in der Eingabedatei für jedes Material einzeln übergeben, sondern separat eingelesen und für alle Materialien bereitgestellt. Für die zu aktivierenden Materialien sind lediglich die Materialinformationen in Form von nuklidweisen Anzahlichten und der Neutronenfluss innerhalb der jeweiligen Materialzone in der vorgegebenen Gruppenstruktur relevant. Um Speicherplatz zu sparen, müssen bei der Materialdefinition nur die von Null verschiedenen Nuklidichten zusammen mit dem jeweiligen Nuklidkürzel angegeben werden. Die Gruppenstruktur für den Neutronenfluss ist von der Wirkungsquerschnittsbibliothek vorgegeben, aber insofern flexibel, als dass Wirkungsquerschnittsdaten mit beliebigen Gruppenstrukturen verwendet werden können. Eine Funktion zur Wirkungsquerschnittskondensation war in VENTINA bereits implementiert.

3.1.4 Erweiterung der CRAM-Methode zum Lösen der inhomogenen Bateman-Gleichung

Die Chebyshev Rational Approximation Method (CRAM) /PUS 10/ ist eine weit verbreitete Methode zum Lösen der homogenen Bateman-Gleichung:

$$\frac{dN}{dt} = AN, \quad N(0) = N^0$$

Hier bezeichnet N den zeitabhängigen Nuklidvektor und die $(n \times n)$ -Matrix A , die auch als Koeffizienten-Matrix bezeichnet wird, beinhaltet die Übergangsraten zwischen den Nukliden. Im Allgemeinen ist die Koeffizienten-Matrix zeitabhängig, da die Übergangsraten vom Neutronenfluss und den nuklearen Wirkungsquerschnitten abhängen. Lediglich für reine Zerfallsprozesse verschwindet die Zeitabhängigkeit der Koeffizienten-Matrix. In der Regel wird zum Lösen der Bateman-Gleichung das Zeitintervall $(0, t)$ in weitere Unterintervalle unterteilt und die Koeffizienten-Matrix innerhalb dieser Unterintervalle als konstant angenommen. CRAM kann nur zum Lösen der homogenen Gleichung mit konstanter Koeffizienten-Matrix eingesetzt werden, jedoch kann für einen zeitlich konstanten Quellterm die resultierende inhomogene Gleichung leicht in eine homogene Gleichung überführt werden /ISO 15/:

$$\frac{dN}{dt} = AN + s \rightarrow \frac{d\tilde{N}}{dt} = \tilde{A}\tilde{N},$$

mit der modifizierten Koeffizienten-Matrix und dem Nuklidvektor:

$$\tilde{A}\tilde{N} = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} & s_1 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} & s_n \\ 0 & \cdots & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N_1 \\ \vdots \\ N_n \\ d \end{pmatrix}$$

Der Quellterm wird folglich als Pseudonuklid $d(t)$ repräsentiert. Um die Äquivalenz mit der inhomogenen Gleichung zu erfüllen, gilt $d(t) = 1$. Die Anfangsbedingungen lauten $\tilde{N}(0) = (N_1(0), \dots, N_n(0), 1)$. Die Lösung dieser homogenisierten Gleichung lautet $\tilde{N}(t) = e^{\tilde{A}t}\tilde{N}(0)$ und kann wiederum mit CRAM gelöst werden.

Der implementierte CRAM-Solver wurde dahingehend ertüchtigt, auch die inhomogene Bateman-Gleichung mit konstanten Quelltermen zu lösen. Dabei war es nötig, die Koeffizienten-Matrix um die Quellterme und den Nuklidvektor um das Pseudonuklid zu

erweitern. Zur Validierung der Implementierung wurde der Zerfallsprozess einer linearen Nuklidkette mit zwei Nukliden studiert und mit der analytischen Lösung verglichen. Als Startnuklid wurde ^{230}Th gewählt, das mit einer Halbwertszeit τ_{Th} von ca. $2,38\text{e}+12$ s in das Tochternuklid ^{226}Ra zerfällt, das wiederum mit einer Halbwertszeit τ_{Ra} von ca. $5,05\text{e}+10$ s zerfällt. Das Gleichungssystem in diesem Fall lautet:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} N_{Th} \\ N_{Ra} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\lambda_{Th} & 0 \\ \lambda_{Th} & -\lambda_{Ra} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N_{Th} \\ N_{Ra} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} S_{Th} \\ 0 \end{pmatrix},$$

mit den Anfangsbedingungen $N_{Th}(t=0) = N_{Th}^0 = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, $N_{Ra}^0 = 0 \text{ cm}^{-3}$ und einem zeitlich konstanten Thorium-Quellterm $S_{Th} = 5 \text{ cm}^{-3}\text{s}^{-1}$. Die Zerfallskonstanten ergeben sich als $\lambda_x = \ln(2) / \tau_x$.

Die analytische Lösung lautet:

$$\begin{pmatrix} N_{Th} \\ N_{Ra} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} N_{Th}^0 e^{-\lambda_{Th}t} + \frac{S_{Th}}{\lambda_{Th}} (1 - e^{-\lambda_{Th}t}) \\ \frac{N_{Th}^0 \lambda_{Th} - S_{Th}}{\lambda_{Th} - \lambda_{Ra}} (e^{-\lambda_{Th}t} - e^{-\lambda_{Ra}t}) + \frac{S_{Th}}{\lambda_{Ra}} (1 - e^{-\lambda_{Ra}t}) \end{pmatrix}$$

Die numerische Lösung mittels CRAM wurde für tausend äquidistante Zeitschritte bis $t = 10^{13}\text{s}$ berechnet.

In Abb. 3.8 ist der relative Fehler zwischen der analytischen und der numerischen Lösung aufgetragen. Wie ersichtlich ist der Fehler kleiner als $1\text{e}-9$. Die numerische Lösung stimmt sehr gut mit der analytischen Referenzlösung überein. Die Abweichungen in der Größenordnung von $\pm 1\text{e}-9$ ergeben sich zum Teil durch die Ausgabegenauigkeit von zehn Stellen bei der numerischen Lösung und sind somit nicht weiter verwunderlich.

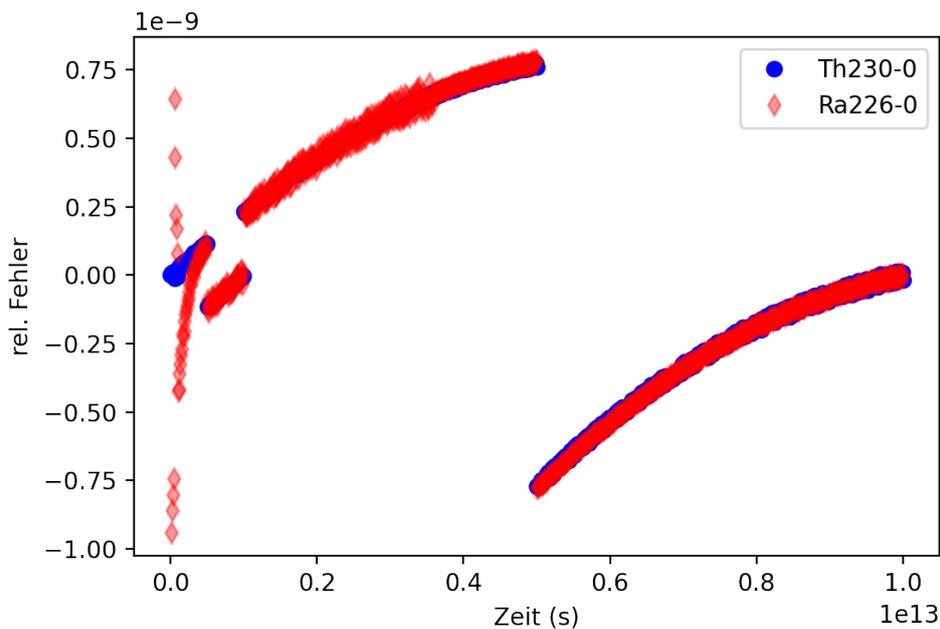


Abb. 3.8 Relativer Fehler zwischen der numerischen und der analytischen Lösung in Abhängigkeit der Zeit für die beiden betrachteten Nuklide

Formal kann auch ein anderer Ansatz zur Lösung der inhomogenen Gleichung verfolgt werden. Die Lösung der inhomogenen Gleichung lautet im Allgemeinen:

$$\mathbf{N}(t) = \mathbf{N}(0)e^{At} + e^{At} \int_0^t d\tau e^{-A\tau} \mathbf{s}$$

Wobei mit \mathbf{s} die funktionale Darstellung des Quellterm bezeichnet ist. Das Integral lässt sich für eine konstante Koeffizienten-Matrix und konstantem Quellterm analytisch berechnen:

$$\mathbf{N}(t) = \mathbf{N}(0)e^{At} - (\mathbf{1} - e^{At})\mathbf{A}^{-1}\mathbf{s}$$

Allerdings ist die Koeffizienten-Matrix im Allgemeinen nicht invertierbar. Werden zum Beispiel auch stabile Nuklide in der Problemstellung betrachtet, so führt dies zu Nullspalten in der Koeffizienten-Matrix und somit zu einer singulären Matrix. Jedoch kann die hier implementierte Methode leicht dazu erweitert werden, das Integral des inhomogenen Teils der Lösung mittels eines numerischen Lösungsansatzes zu bestimmen.

3.1.5 Zusätzliche Ausgabedaten für MOTIVE

Zur Erweiterung des Einsatzspektrums wurden zusätzliche Ausgabedaten in die MOTIVE-Ergebnisdaten integriert. Dies betrifft zunächst die Integration von Ausgaben zur Spontanspaltung und insbesondere die Ergänzung der Angaben zur Aktivität hinsichtlich Spontanspaltungsneutronen.

Weiterhin wurde eine Option zur Ausgabe, der sich aus dem berechneten Inventar ergebenden Energiespektren zur Gamma-Strahlung in einer beliebigen benutzerdefinierten Energiegruppenstruktur implementiert. Hierzu musste zunächst das Auslesen der Spektren aus den Datenevaluationen und deren Aufbereitung für die MOTIVE Datenbibliotheken in NuGra ergänzt werden. Weiterhin wurde eine Routine für die Kondensation der Daten in die gewünschte Energiegruppenstruktur ergänzt.

3.2 Schnittstellen zu anderen Programmen

3.2.1 Erweiterung der Wirkungsquerschnittskorrektur in KMACS

Der GRS-Kernsimulator KMACS /ZIL 19/, /ZIL 18a/ kombiniert Gittercodes zur Erzeugung problemabhängiger Wirkungsquerschnitte und nodale Diffusionscodes für Ganzkernberechnungen mit Berücksichtigung von thermohydraulischen Wechselwirkungen und Methoden zur Bestimmung des zeitabhängigen Nuklidinventars in einem LWR-Kern. KMACS erlaubt es, für jede dieser Funktionen verschiedene Simulationscodes anzu-steuern.

Nodale Diffusionscodes verwenden Bibliotheken von homogenisierten Wirkungsquerschnitten mit wenigen Energiegruppen. Diese Wirkungsquerschnitte sind in Abhängigkeit der Betriebsparameter wie Brennstofftemperatur, Moderatorichte, Borkonzentration und Abbrand, parametrisiert. Die Veränderungen des Nuklidinventars werden mithilfe von Gittercodes in einer Abbrandrechnung unter kerngemittelten (nominalen) Bedingungen bestimmt. Jedoch kann der akkumulierte Abbrand in einer bestimmten Position im Kern vom kerngemittelten Abbrand abweichen, da lokale Betriebsparameter vom kerngemittelten Zustand abweichen können. Die spektrale Abbrand-Historie verursacht aufgrund des veränderten lokalen Neutronenspektrums auch ein lokal verändertes Nuklidinventar. Eine Methode, die lokale Veränderungen im Neutronenspektrum berücksichtigt, ist eine Kopplung an eine mikroskopische Abbrandrechnung /BAH 05/, /BIL 16/. Die Grundidee dieser Methode beruht auf der expliziten Berechnung des Nuklidinventars

in jeder Rechenmasche (*node*) und der anschließenden lokalen Korrektur der homogenen makroskopischen Wirkungsquerschnitte. Dabei werden die makroskopischen Wirkungsquerschnitte um die Abweichung des aktuellen, tatsächlichen Nuklidinventars vom nominellen Nuklidinventar korrigiert. Die hier vorgestellte und in KMACS implementierte Methode weicht von den Methoden von /BIL 16/, /BAH 05/ insofern ab, als dass in KMACS im Wesentlichen die erzeugten Wirkungsquerschnitte nur über den Abbrand als einzigen Einfluss der Bestrahlungshistorie parametrisiert sind. Effekte einer veränderten Kühlmitteldichte, Borkonzentration, Brennstofftemperatur und Kontrollstabeinfahrtiefe werden in KMACS lediglich als instantan angenommen. Im Gegensatz dazu werden in /BAH 05/ die Wirkungsquerschnitte auch über die Historie dieser Parameter parametrisiert. Ähnlich verhält es sich bei der in /BIL 16/ vorgestellten Methode, bei der zusätzlich zur kerngemittelten (nominellen) Abbrandrechnung mindestens eine weitere Abbrandrechnung zu anderen Betriebsparametern durchgeführt wird. Derartige zusätzlichen rechenintensiven Abbrandrechnungen während der Wirkungsquerschnittsgeneration sind in der aktuellen Version von KMACS 1.0 nicht vorgesehen.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Wirkungsquerschnittskorrektur für die von KMACS ansteuerbaren Simulationscodes SCALE/T-NEWT /WIE 20/ als Gittercode für die Wirkungsquerschnittserzeugung, QUABOX/CUBBOX (Q/C) /LAN 78/ als nodalen Diffusionslöser und VENTINA /MAL 18/ als Abbrandcode implementiert. Eine Erweiterung auf alle von KMACS ansteuerbaren Simulationscodes ist für die Zukunft vorgesehen.

Die übliche Vorgehensweise bei der Verwendung von KMACS besteht aus zwei Schritten. Erstens, der Generierung der homogenisierten, makroskopischen Wirkungsquerschnitte einzelner Brennelemente mittels eines Gittercodes und, zweitens, der anschließenden Ganzkernrechnung mit einem nodalen Flusslöser unter Verwendung der zuvor erzeugten Wirkungsquerschnitte. Um thermohydraulische Wechselwirkungen zu berücksichtigen kann der Thermohydraulikcode ATHLET /AUS 22/ angekoppelt werden. Bei der Anwendung der mikroskopischen Abbrandrechnung werden zusätzliche Zwischenschritte eingefügt. Die makroskopischen Wirkungsquerschnitte werden lokal für jedes Rechengitter wie folgt korrigiert:

$$\Sigma^{actual} = \Sigma^{hom} + \sum_i \sigma_i (N_i^{actual} - N_i^{pre}) \quad (3.1)$$

wobei Σ^{actual} dem korrigierten makroskopischen Wirkungsquerschnitt, Σ^{hom} dem homogenisierten makroskopischen Wirkungsquerschnitt, σ_i den mikroskopischen Wirkungsquerschnitten, N_i^{actual} den lokalen, aktuellen Nukliddichten und N_i^{pre} den in der vorausgehenden Gitterrechnung berechneten Nukliddichten entspricht. Die Summe erstreckt sich über jene Nuklide, für die die Korrektur durchgeführt werden soll. Im Allgemeinen können die Größen Σ^{hom} , σ_i , N_i^{pre} aus den Ausgabedaten der Gitterrechnung ausgelesen werden und sind in Abhängigkeit des Abbrands, der Borkonzentration, Moderatorichte und der Brennstofftemperatur gegeben. Sie müssen für die Ganzkernrechnung zu den jeweiligen aktuellen, lokalen Betriebsparametern interpoliert werden. Die aktuellen Nukliddichten N_i^{actual} werden zu jedem Zykluszeitpunkt mit VENTINA berechnet. Die Nukliddichten N_i^{pre} sind durch im Grunde durch die (nominelle) Abbrandrechnung bestimmt. Um die Konsistenz zwischen den Nukliddichten N_i^{pre} und N_i^{actual} zu wahren, werden die Nukliddichten N_i^{pre} mit VENTINA nachgerechnet. Während dieser Nachrechnung wird der Neutronenfluss mit demselben nodalen Diffusionslöser, welcher später in der Ganzkernrechnung eingesetzt wird, in Einzelbrennelementrechnungen berechnet. Dies eliminiert den systematischen Fehler im Nuklidinventar, der ansonsten aufgrund der Verwendung unterschiedlicher Rechencodes für die Berechnung des Neutronenflusses und des Nuklidinventars entsteht.

Während der Ganzkernberechnung wird die Korrektur der Wirkungsquerschnitte sukzessive zu jedem Zykluszeitschritt und für jeden Rechenknoten durchgeführt, und die resultierenden Wirkungsquerschnitte werden als Eingabe für den nodalen Flusslöser bereitgestellt. Dabei werden der Absorptions- und Spaltungswirkungsquerschnitt sowie die pro Kernspaltung im Mittel emittierten Neutronen und die im Mittel pro Spaltung emittierte Energie korrigiert. Für den Transportwirkungsquerschnitt und die Streumatrix wird keine Korrektur durchgeführt. Ein Korrekturansatz für die letzteren beiden Größen wird in /BIL 15/ vorgestellt.

Die Verifikation der Wirkungsquerschnittskorrektur wurde anhand von Abbrandrechnungen einzelner Brennelemente im Vergleich mit SCALE/T-NEWT-Referenzrechnungen durchgeführt. Ferner wurden, um die Funktionalität der Wirkungsquerschnittskorrektur für Ganzkernberechnungen zu demonstrieren, Rechnungen zu einem KWU Pre-KONVOI Druckwasserreaktor mit vier Kühlkreisläufen durchgeführt.

Für die folgenden Verifikationsrechnungen mit Einzelbrennelementen wurde ein Standardbrennelement mit 17×17 Brennstäben und UO_2 Brennstoff mit einer ^{235}U -Anreicherung von 3 % verwendet. Die Generierung der Wirkungsquerschnitte wurde unter folgenden generischen kerngemittelten (nominellen) Bedingungen durchgeführt: die Moderatorichte betrug $0,6 \text{ g/cm}^3$, die Brennstofftemperatur 900 K und die Bor-konzentration 0 ppm. Es wurde eine thermische Reaktorleistung pro Brennelement von 1,6 MW angenommen. Zusätzlich wurden folgende Verzweigungspunkte berücksichtigt: eine Moderatorichte von $0,8 \text{ g/cm}^3$, eine Brennstofftemperatur von 1200 K und eine Bor-konzentration von 1000 ppm. Es wurden dabei bewusst große Parameterbandbreiten gewählt, um größere Effekte bei der Verifizierung zu erhalten. Zur Wirkungsquerschnitts-generation wurde SCALE 6.2.3/T-NEWT mit ENDF/B-VII.1 Wirkungsquerschnitten in 56 Energiegruppen eingesetzt, wobei die Eingabedateien mit KMACS erstellt wurden.

Diese generierten Wirkungsquerschnitte wurden anschließend für weitere Zyklusberechnungen verwendet, wobei folgende Testszenarios berücksichtigt wurden: 1) eine vom kerngemittelten (nominellen) Zustand abweichende Moderatorichte von $0,7 \text{ g/cm}^3$, 2) eine veränderte Brennstofftemperatur von 1050 K und 3) eine Abbrandrechnung mit einem Reaktorstillstand von vier Jahren. Diese mit Q/C und VENTINA durchgeführten Rechnungen wurden anschließend mit Referenzrechnungen verglichen, die mit SCALE/T-NEWT unter denselben veränderten Betriebsbedingungen durchgeführt wurden. Um einen besseren Vergleich zwischen den nodalen Diffusionsrechnungen und den Referenzrechnungen zu ermöglichen, wurden die Abbrandzeitschritte während der Zyklusberechnung so gewählt, dass sie den Abbrandzeitpunkten der Referenz-Gitterrechnung entsprechen.

Für den Fall der veränderten Moderatorichte ist in Abb. 3.9 die Reaktivitätsdifferenz zwischen der Q/C-Rechnung und der SCALE/T-NEWT Referenzrechnung abgebildet. Die blaue Kurve entspricht der Q/C-Rechnung ohne Wirkungsquerschnittskorrektur und die orange Kurve der Rechnung mit Wirkungsquerschnittskorrektur. Wie ersichtlich ist, weicht die Reaktivität bei der Rechnung ohne Wirkungsquerschnittskorrektur stark von der Referenzrechnung ab und die Reaktivitätsdifferenz erreicht Werte von größer als 10^3 pcm gegen Ende des berechneten Abbrand-Intervalls. Bei der Rechnung unter Berücksichtigung der Wirkungsquerschnittskorrektur bleibt die Reaktivitätsdifferenz über den beobachteten Zeitraum zwischen -250 und 250 pcm. Lediglich für sehr kleine Abbrandwerte weichen beide Rechnungen von der SCALE/T-NEWT Referenzrechnung ab. Der Grund hierfür liegt an der unterschiedlichen Berechnung der Konzentration des

Neutronengifts Xenon (^{135}Xe) mit dem Gittercode SCALE/T-NEWT und dem nodalen Diffusionslöser Q/C. Während bei der SCALE/T-NEWT-Rechnung die Xenon-Konzentration explizit über den Abbrand bestimmt wird, wird bei der Q/C-Rechnung instantan die Xenon-Gleichgewichtskonzentration angenommen.

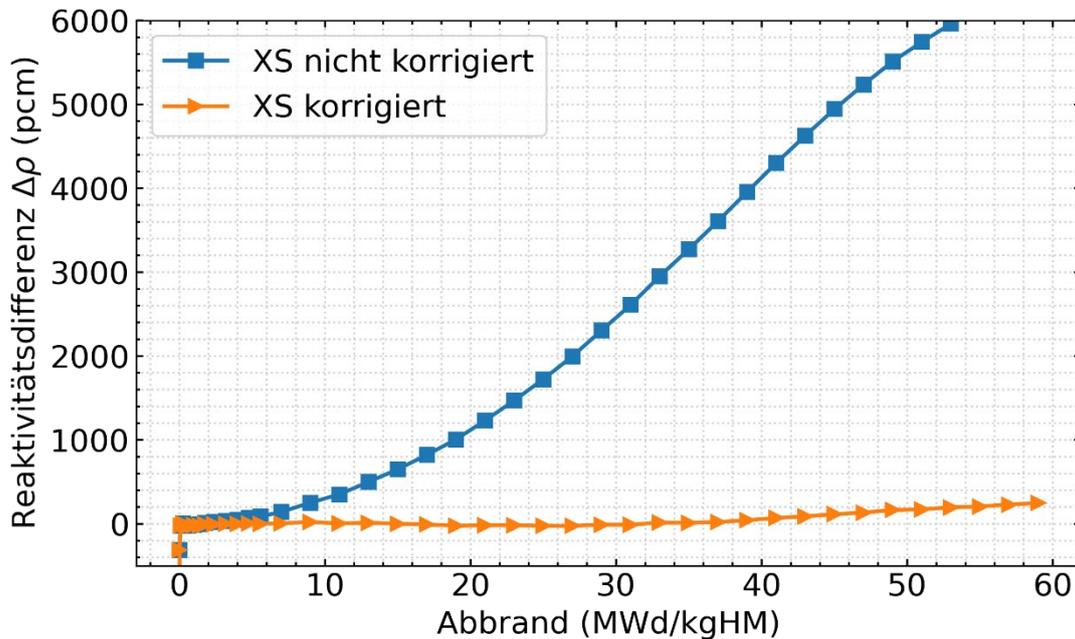


Abb. 3.9 Reaktivitätsdifferenz zwischen Q/C-Rechnung und SCALE/T-NEWT Referenzrechnung ohne (blau) und mit (orange) durchgeführter Wirkungsquerschnittskorrektur für Rechnung mit vom nominellen Zustand abweichender Moderator-dichte

Für den Fall der veränderten Brennstofftemperatur ist in Abb. 3.10 die Reaktivitätsdifferenz zwischen der Q/C-Rechnung und der SCALE/T-NEWT Referenzrechnung abgebildet. Wiederum entspricht die blaue Kurve der Q/C-Rechnung ohne Korrektur und die orange Kurve der Rechnung mit Korrektur. Wie ersichtlich weicht die Reaktivität bei der Rechnung ohne Wirkungsquerschnittskorrektur wieder stark von der Referenzrechnung ab und die Reaktivitätsdifferenz erreicht Werte von -600 pcm gegen Ende des berechneten Zeitraums. Im Gegensatz dazu bleibt bei Anwendung der Wirkungsquerschnittskorrektur mit Ausnahme des Anfangszeitpunkts die Reaktivitätsdifferenz über den beobachteten Zeitraum zwischen 0 und 250 pcm. Die Abweichung der Reaktivitätsdifferenz am Anfangszeitpunkt bis zum Erreichen der Xenon-Gleichgewichtskonzentration ist wiederum bedingt durch die unterschiedlichen Berechnungsmethoden der Xenon-Konzentration mit SCALE/T-NEWT und Q/C.

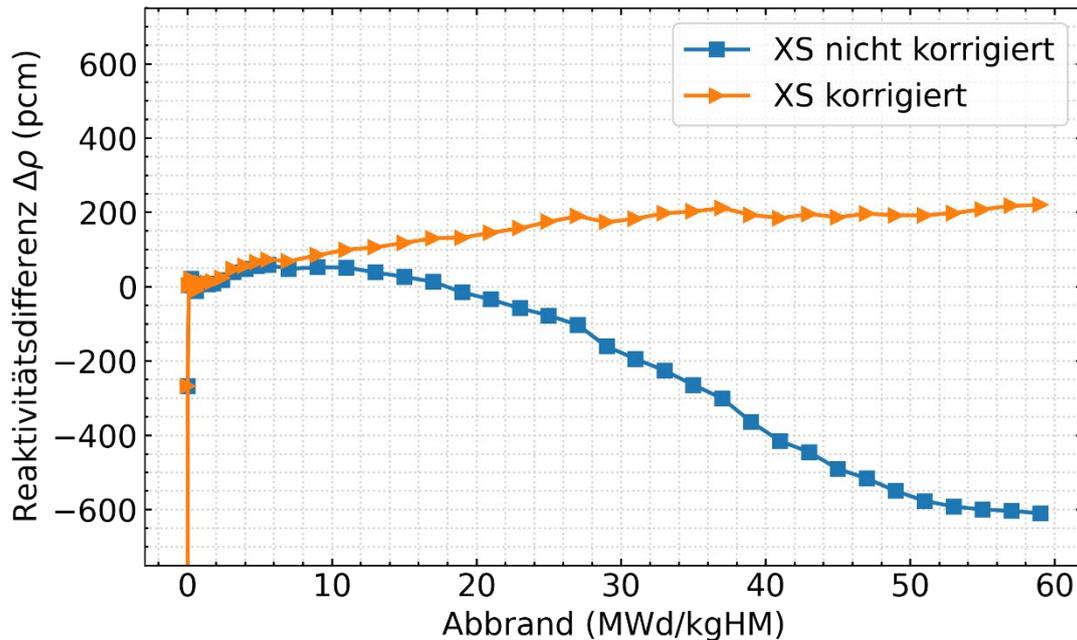


Abb. 3.10 Reaktivitätsdifferenz zwischen Q/C-Rechnung und SCALE/T-NEWT Referenzrechnung ohne (blau) und mit (orange) durchgeführter Wirkungsquerschnittskorrektur für Rechnung mit vom nominellen Zustand abweichender Brennstofftemperatur

In Abb. 3.11 ist der Fall eines vierjährigen Reaktorstillstands illustriert. Die kerngemittelten (nominellen) Bedingungen entsprechen im Wesentlichen den bereits berichteten Werten, mit Ausnahme der Moderatorerdichte, die hier auf $0,7 \text{ g/cm}^3$ gesetzt wurde. Die Reaktivitätsdifferenz der Rechnung mit (orange) und der Rechnung ohne (blau) Wirkungsquerschnittskorrektur ist für die ersten 1100 Vollasttage identisch und weicht lediglich um ca. 200 pcm von der Referenzrechnung ab. Im Zeitraum zwischen 1100-2600 Tagen ist das Brennelement keinem Neutronenfluss ausgesetzt, jedoch findet während dieser Zeitspanne radioaktiver Zerfall statt. Dies wird bei Verwendung der Wirkungsquerschnittskorrektur berücksichtigt und die Reaktivitätsdifferenz im Vergleich zur SCALE/T-NEWT-Referenzrechnung bleibt nach der Stillstandzeit auf niedrigem Niveau von unter 300 pcm. Bei Nichtanwendung der Wirkungsquerschnittskorrektur, werden die durch radioaktiven Zerfall veränderten Nuklidkonzentrationen nicht berücksichtigt und dies führt zu einer starken Abweichung der Reaktivitätsdifferenz von über 600 pcm am Ende der Stillstandzeit. Wiederum bedingt durch die unterschiedlichen Berechnungsmethoden der Xenon-Konzentration mit SCALE/T-NEWT und Q/C ist eine Abweichung der

Reaktivitätsdifferenz am Anfangszeitpunkt bis zum Erreichen der Xenon-Gleichgewichtskonzentration zu beobachten.

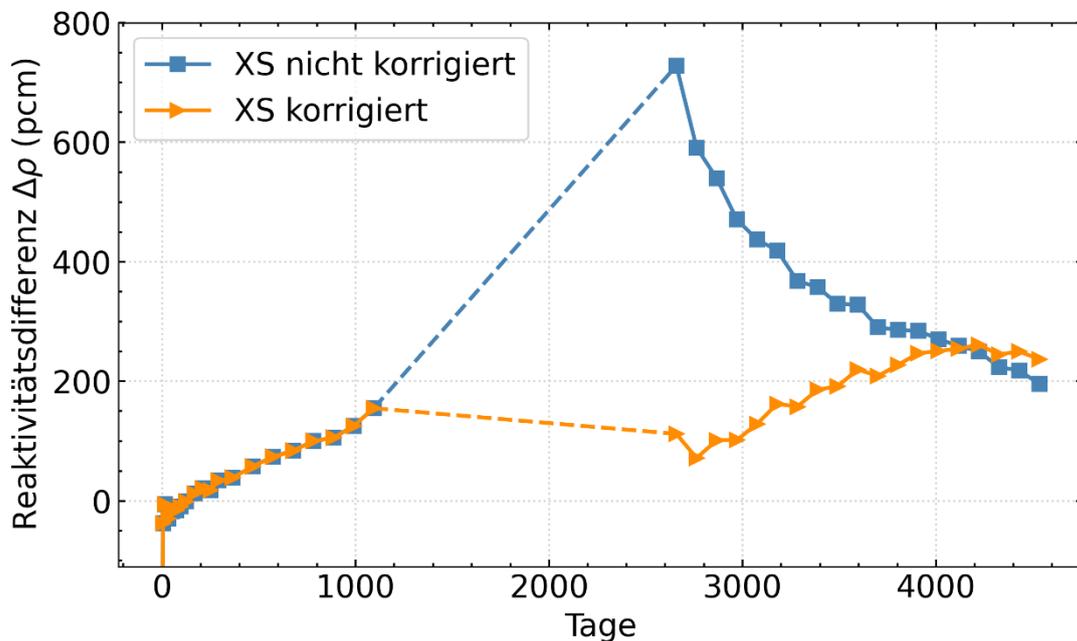


Abb. 3.11 Reaktivitätsdifferenz zwischen Q/C-Rechnung und SCALE/T-NEWT Referenzrechnung ohne (blau) und mit (orange) durchgeführter Wirkungsquerschnittskorrektur für Rechnung mit vierjähriger Stillstandzeit

Es sei angemerkt, dass die hier aufgeführten Beispielrechnungen der Wirkungsquerschnittskorrektur Extremfälle umfassen und nur zur Illustration der Wirkungsweise dienen. Die hier gewählten Abweichungen von den kerngemittelten (nominellen) Betriebsparametern sind sehr groß, und diese treten in einem solchen Ausmaß während des Normalbetriebs in Druckwasserreaktoren kaum auf. Jedoch wurde gezeigt, dass die erzielten Ergebnisse plausibel sind, und sie unterstreichen die Verbesserung der Ergebnisse unter Berücksichtigung der Korrektur.

Die folgende Zyklusrechnung eines KWU Vor-KONVOI Druckwasserreaktors /ZIL 18b/ soll die Durchführbarkeit der Wirkungsquerschnittskorrektur im Rahmen einer typischen Ganzkernrechnung illustrieren. Der Reaktorkern ist mit 193 Brennelementen bestückt, deren Brennstäbe in einem 16×16 Gitter angeordnet sind. Für den betrachteten Zyklus sind lediglich Brennelemente mit UO_2 und $UO_2-Gd_2O_3$ Brennstoff vorhanden. Die Kernbeladung ist in Abb. 3.12 aufgezeigt. Das Farbschema entspricht dabei den beiden unterschiedlichen Brennelementtypen. Der hier berechnete Zyklus startet nicht mit

ausschließlich unbestrahlten Brennelementen und daher ergibt sich eine endliche Abbrandverteilung bereits zu Beginn des Zyklus. Die initiale Abbrandverteilung kann auch aus Abb. 3.12 mittels der Zahlenwerte in MWd/kg abgelesen werden. Die geometrische Diskretisierung wurde so gewählt, dass in radialer Richtung jede Rechenmasche einem Brennelement entspricht. Die axiale Diskretisierung des Kerns wurde zu 17 gewählt. Die homogenisierten Wirkungsquerschnitte wurden mit SCALE 6.2.3/T-NEWT berechnet. Die Zyklusrechnung wurde mit Q/C-ATHLET durchgeführt und als Abbrandcode wurde VENTINA verwendet. Die Eingabedateien wurden mit KMACS erstellt und die jeweiligen Simulationscodes mit KMACS angesteuert.

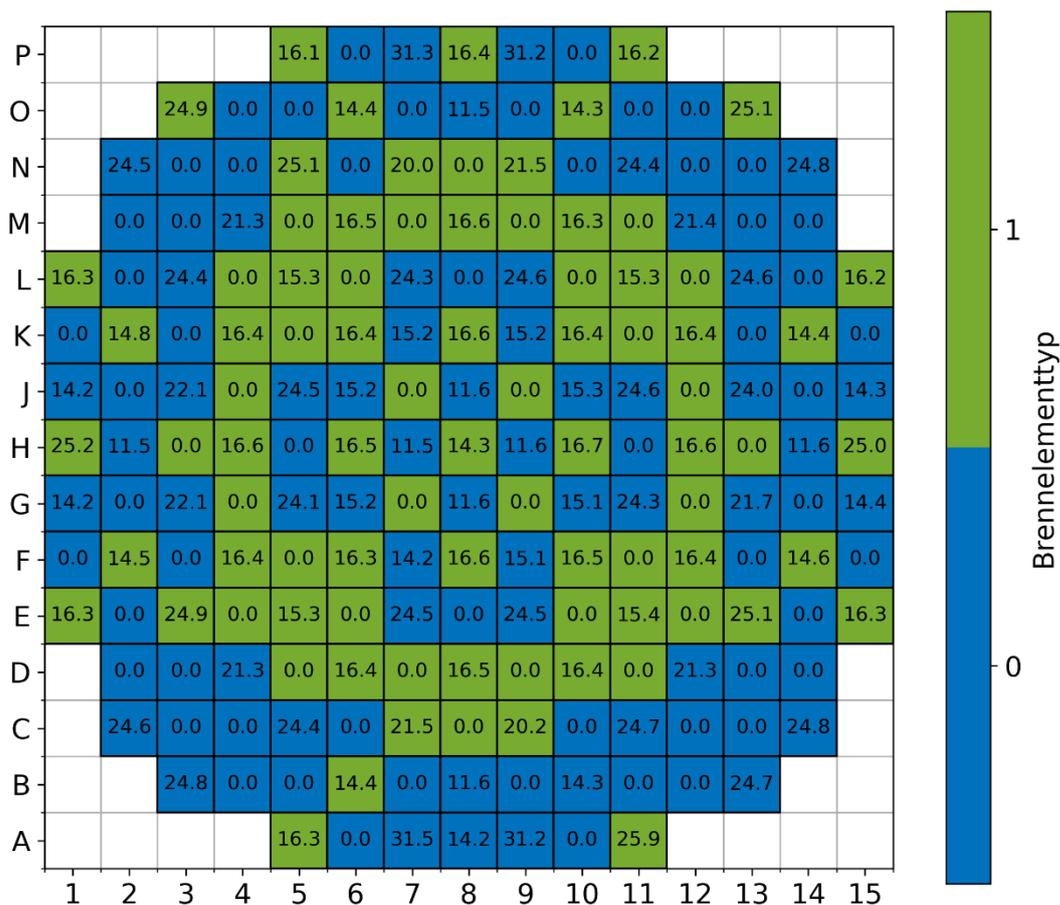


Abb. 3.12 Kernlayout und Abbrandwerte zum Zyklusbeginn

In Abb. 3.13 ist der Verlauf der kritischen Borkonzentration in Abhängigkeit der Volllasttage für die KMACS-Rechnung ohne Wirkungsquerschnittskorrektur (schwarz), mit Wirkungsquerschnittskorrektur (grün) und eine Referenzkurve, die mittels eines kommerziellen Kernsimulators berechnet wurde (blau) dargestellt. Des Weiteren ist die absolute Abweichung der KMACS-Rechnung mit Wirkungsquerschnittskorrektur (violett gestrichelt) und der KMACS-Rechnung ohne Wirkungsquerschnittskorrektur (rot gestrichelt)

von der Referenzrechnung eingetragen. Wie ersichtlich, weicht die Borkonzentration der wirkungsquerschnittskorrigierten Rechnung konstant zwischen -24 und -33 ppm von der Referenzrechnung ab. Die Borkonzentration der nicht korrigierten Rechnung weist Abweichungen von -5 bis -43 ppm und somit eine höhere Streuung auf.

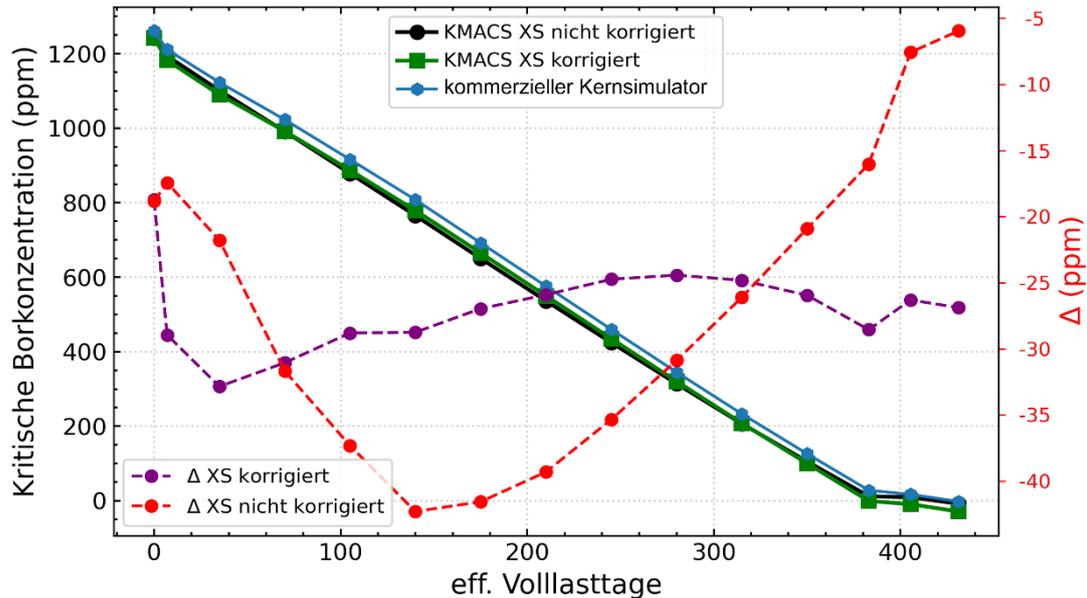


Abb. 3.13 Borkurve für verschiedene Rechnungen: KMACS-Rechnung ohne XS-Korrektur (schwarz), KMACS-Rechnung mit XS-Korrektur (grün) und Referenzrechnung mit einem kommerziellen Kernsimulator (blau)

Gestrichelte Linien entsprechen den Abweichungen zwischen den KMACS-Rechnungen und der Referenzrechnung.

In Abb. 3.14 ist die relative Abweichung der radialen Leistungsverteilung der KMACS-Rechnungen von der Referenzrechnung aufgezeigt, $\Delta P = (P_{KMACS} - P_{ref}) \times 10^2 / P_{ref}$. Die linke Spalte entspricht der Abweichung nach 210 Volllasttagen und die rechte Spalte der Abweichung nach 383 Volllasttagen, wobei die obere Reihe den Rechnungen mit Wirkungsquerschnittskorrektur und die untere Reihe den Rechnungen ohne Wirkungsquerschnittskorrektur entsprechen. Die Wurzel der mittleren quadratischen Abweichung über alle Brennelemente (RMSD) entspricht nach 210 Volllasttagen im Fall mit Wirkungsquerschnittskorrektur $RMSD = 0,89 \%$ und im Fall ohne Wirkungsquerschnittskorrektur $RMSD = 1,16 \%$. Nach 383 Volllasttagen entspricht die Wurzel der mittleren quadratischen Abweichung $RMSD = 1,02 \%$ für die Rechnung mit Korrektur und $RMSD = 1,14 \%$ für die Rechnung ohne Korrektur. Die Zahlenwerte in den Abbildungen

entsprechen den jeweiligen relativen Leistungsabweichungen und werden zusätzlich durch das Farbschema hervorgehoben.

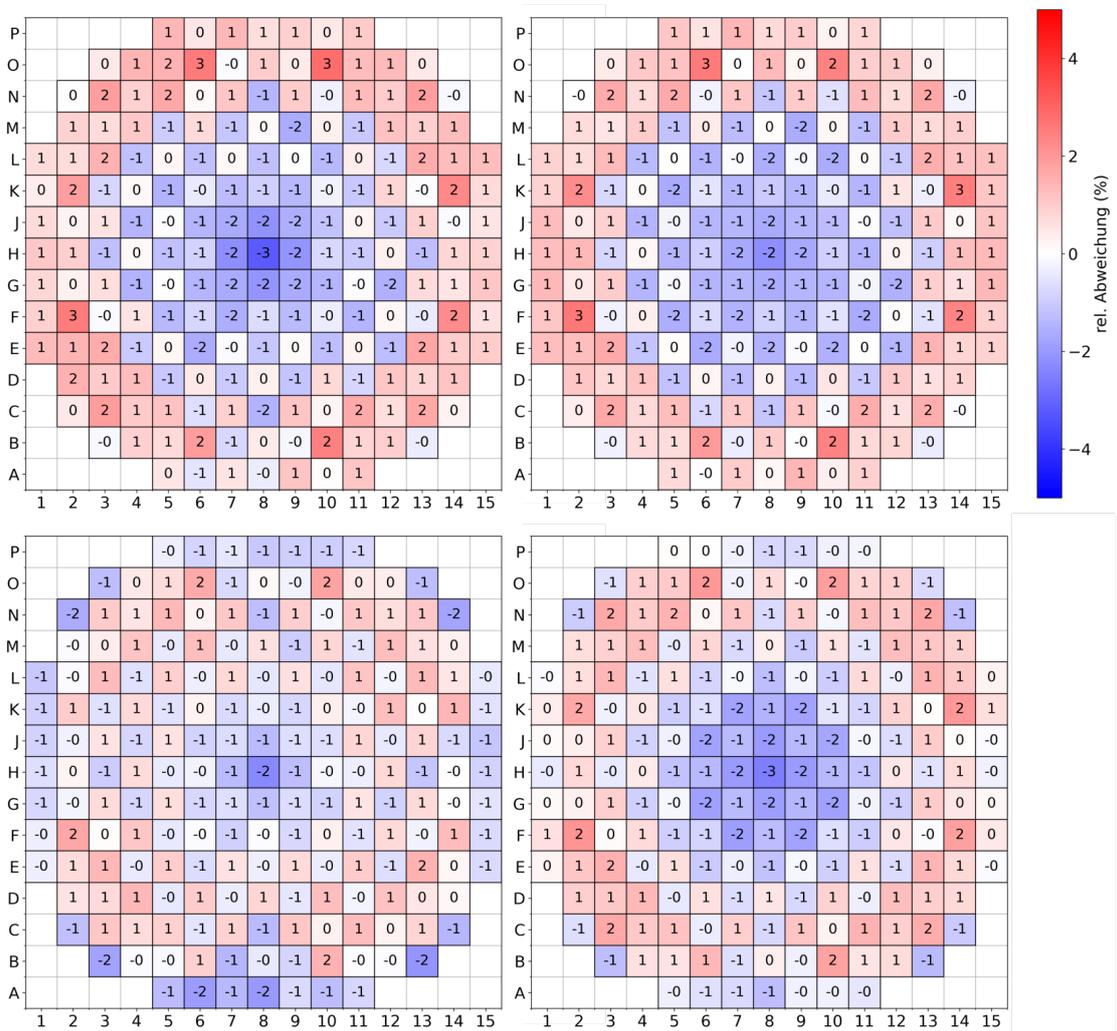


Abb. 3.14 Relative Abweichung der radialen Leistungsverteilung nach 210 Voll-lasttagen (linke Spalte) und nach 383 Volllasttagen (rechte Spalte) für die unkorrigierte Rechnung (oben) und die wirkungsquerschnittskorrigierte Rechnung (unten)

Einerseits zeigen diese Rechnungen die Durchführbarkeit der Wirkungsquerschnittskorrektur bei der Simulation realistischer Reaktorkerne auf, andererseits wird auch klar, dass die Wirkungsquerschnittskorrektur bei Rechnungen, bei denen die Betriebsbedingungen nur geringfügig von den kerngemittelten (nominellen) Bedingungen abweichen, kaum zu Unterschieden im Ergebnis führen. Ein möglicher Einsatzbereich der Wirkungsquerschnittskorrektur sind jedoch Zyklusrechnungen bei denen bereits bestrahlte

Brennelemente nach einer längeren Stillstandzeit im Abklingbecken wieder in den Reaktorkern eingesetzt werden.

Zur näherungsweise korrekten Berechnung des Gadoliniumausbrands wurde ein Verfahren auf Basis der in /WEI 90/ vorgestellten Methode in Prototypform implementiert. Hierzu werden die Gadolinium-Isotope ^{155}Gd bis ^{158}Gd zu einem einzigen effektiven Gadolinium-Nuklid zusammengefasst und ein effektiver Wirkungsquerschnitt definiert. Die Teilchendichte ($N_{Gd^{eff}}$) und der mikroskopische Absorptionswirkungsquerschnitt ($\sigma_{Gd^{eff}}$) werden wie folgt definiert:

$$N_{Gd^{eff}} = 4N_{Gd^{155}} + 3N_{Gd^{156}} + 2N_{Gd^{157}} + N_{Gd^{158}}, \quad (3.2)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{Gd^{eff}} \\ = \frac{N_{Gd^{155}}\sigma_{Gd^{155}} + N_{Gd^{156}}\sigma_{Gd^{156}} + N_{Gd^{157}}\sigma_{Gd^{157}} + N_{Gd^{158}}\sigma_{Gd^{158}}}{N_{Gd^{eff}}}. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Der effektive Absorptionswirkungsquerschnitt $\sigma_{Gd^{eff}}$ wird als Funktion der Teilchendichte $N_{Gd^{eff}}$ parametrisiert. Hier gilt es zu beachten, dass die Wirkungsquerschnitte Σ^{hom} und σ_i im Allgemeinen als Funktion des Abbrandes und anderer instantanen Betriebsparametern parametrisiert sind. Für die korrekte Einbindung des effektiven Gadolinium-Isotops wird daher die Wirkungsquerschnittskorrektur in mehrere Terme aufgespalten und lautet für einen konkreten Abbrandpunkt bu :

$$\begin{aligned} \Sigma^{actual}(bu, \dots) \\ = \Sigma^{hom}(bu, \dots) \\ + \sum_{i \neq Gd^{eff}} \sigma_i(bu, \dots)(N_i^{actual} - N_i^{pre}) \\ - \sigma_{Gd^{eff}}(N_{Gd^{eff}}^{pre}, \dots)N_{Gd^{eff}}^{pre} \\ + \sigma_{Gd^{eff}}(N_{Gd^{eff}}^{actual}, \dots)N_{Gd^{eff}}^{actual}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Die Summe erstreckt sich über alle zu korrigierenden Nuklide mit Ausnahme des Pseudonuklids des effektiven Gadoliniums. Die letzten beiden Terme behandeln den Einfluss des effektiven Gadoliniums und bedeuten, dass zu einem bestimmten Abbrandpunkt der Anteil, entsprechend den Gadolinium-Isotopen der Vorausrechnung abgezogen wird und der Wert, der sich aufgrund der aktuellen Gadolinium-Konzentration ergibt, hinzuaddiert wird. Dabei ist es im Subtrahenden belanglos, ob die Parametrisierung nach $N_{Gd^{eff}}^{pre}$ oder bu verwendet wird, da sie für die Vorausrechnung identisch sind.

Analog zu den obigen Rechnungen eines Brennelements mit 17x17 Brennstäben wurden Testrechnungen mit einem Brennelement, das Gadolinium-Brennstäbe enthält, durchgeführt. Dabei wurden in der Brennstabanordnung acht UO_2 -Brennstäbe mit Gadoliniumbrennstäben mit einer ^{235}U -Anreicherung von 2,7 % ausgetauscht. Die Generierung der Wirkungsquerschnitte wurde unter den folgenden nominellen Bedingungen durchgeführt: eine Moderatordichte von $0,7 \text{ g/cm}^3$, eine Brennstofftemperatur von 900 K. Weiterhin wurde eine Borkonzentration von 0 ppm verwendet. Es wurde eine thermische Reaktorleistung pro Brennelement von 15 MW angenommen. Des Weiteren wurde als Verzweigungspunkt eine Moderatordichte von $0,6 \text{ g/cm}^3$ gewählt. Die Nachrechnung des Neutronenmultiplikationsfaktors der nominalen Abbrandkurve für dieselbe Zeitauflösung zeigt eine gute Übereinstimmung mit den mit SCALE/T-NEWT berechneten Referenzergebnissen. Dies zeigt die Konsistenz der nominalen Kernsimulatorrechnung mit der Vorausrechnung. Allerdings erzielt man deutliche Abweichungen von den Referenzergebnissen, sobald eine gröbere Zeitauflösung gewählt wird und somit eine Interpolation zwischen den nominalen Abbrandpunkten erfolgen muss.

Zusätzlich wurde eine Testrechnung mit einer von den nominellen Parametern abweichende Moderatordichte von $0,65 \text{ g/cm}^3$ durchgeführt. Hier zeigt sich eine gute Übereinstimmung mit den Referenzergebnissen, sofern die Abbrandpunkte so gewählt werden, dass sie den nominellen Abbrandpunkten entsprechen. Für abweichende Abbrandpunkte treten wiederum Differenzen zu den Referenzergebnissen auf. Eine schlüssige Erklärung dieser Diskrepanzen wurde bislang nicht gefunden. Ein wesentlicher Unterschied zwischen der vorliegenden Implementierung und Implementierungen in anderen Codesystemen ist die Parametrisierung der Wirkungsquerschnitte anhand mehrerer Einflussfaktoren der Bestrahlungshistorie, während in KMACS der Abbrand als einziger solcher Einfluss berücksichtigt wird. So werden zum Beispiel Änderungen in der Moderatordichte oder der Brennstofftemperatur in KMACS als instantan angenommen. Jedoch sei darauf hingewiesen, dass für Nachrechnungen des Normalbetriebs, wo nur

geringfügige Änderungen von den nominellen Betriebsparametern zu erwarten sind, keine großen Abweichungen aufgrund des Gadoliniums auftreten. Dies ist bereits im obigen Beispiel des kommerziellen Reaktorkerns mit Gadolinium-Brennstäben illustriert. Die Voraussetzung für solche Rechnungen mit Gadolinium-Brennstäben ist vielmehr ein hinreichend aufgelöstes Zeitgitter bei der Erstellung der homogenisierten Wirkungsquerschnitte.

3.2.2 Anbindung von VENTINA an ATHLET-CD

Um den Inventarberechnungsprogramm VENTINA, das bisher nur als eigenständiges Programm existierte, allgemein als Programmbibliothek „BND“ (engl. Akronym: *burnup 'n decay*) und speziell für den Ersatz von OREST/FIPISO im Programmsystem AC² der GRS, speziell ATHLET-CD und COCOSYS, verwenden zu können, wurde ein Programmrahmen für VENTINA in Fortran 2008 geschrieben. Dieser stellt als Schnittstelle für Abbrand- und Zerfallsrechnungen jeweils eine Prozedur plus jeweils zwei zusätzliche Routinen zum Aufsetzen und Bereinigen der Laufzeitumgebung bereit.

Als Eingabe für die Abbrandrechnung dienen eine Datenbank mit vorprozessierten, über Moderatorordichte, Anreicherung und Abbrand parametrisierten, mikroskopischen nuklearen Daten für verschiedene Brennelementtypen in Form einer HDF5-Datei und eine Konfiguration, die jedem abzubrennenden Brennelement einen Typ und Werte für Anreicherung, Brennstoffdichte und Volumen, sowie die Leistungs- und Moderatorordichtenhistorie zuordnet.

Zur Erzeugung dieser Datenbank wurde eine Option in MOTIVE integriert, die es erlaubt die entsprechenden Parameter (Name des Brennelementtyps, Anfangsanreicherung, Moderatorordichte) für die Datenbank zu erstellen und diese dann automatisiert anhand aufeinanderfolgender Rechenläufe mit den, während der Abbrandrechnung erzeugten mikroskopischen Wirkungsquerschnittsdaten zu füllen. Unter Verwendung dieser Option wurde eine erste Datenbank zum Einsatz bei ATHLET-CD erstellt, die zunächst Daten für typische DWR-Brennelemente enthält. Es ist vorgesehen, diese nach erfolgreichem Abschluss der Integration von VENTINA in AC² um weitere Brennelementtypen zu erweitern und so das Einsatzspektrum von ATHLET-CD und COCOSYS möglichst vollständig abzudecken.

Für den Abbrand ist zunächst der initiale Nuklidvektor eines Brennelements zu bestimmen. Danach werden in einer Zeitschleife die Brennelementtyp spezifischen Werte für den Neutronenfluss und die Wirkungsquerschnitte für die konfigurierten Auswahlnuklide aus der Datenbank durch multidimensionale lineare Interpolation für den jeweils aktuellen nuklearen Zustand der Brennelementhistorie bestimmt. BND übermittelt diese Werte an VENTINA und initiiert einen Lösungsschritt.

Für die reine Zerfallsrechnung erzeugt man über die Bibliothek eine separate Löserinstanz, übermittelt für jeden Zeitschritt das Zeitintervall und die Nukliddichten und schreibt den Lösungsvektor wieder zurück. Um den Anforderungen von ATHLET-CD zu genügen, kann der Lösungsvektor nicht nur die Nukliddichten der konfigurierten Brennelemente, sondern auch zusätzliche Rechenknoten mit radioaktivem Material enthalten. Mit Hilfe einer ebenfalls an die Zerfallsprozedur übergebenen Maske lässt sich kontrollieren, welche Rechenknoten durch den Löser aktualisiert werden.

Die Bibliothek BND wurde im Programmpaket AC² bereitgestellt, nachdem ihre Funktionsfähigkeit mit einem Beispielprogramm getestet worden war, dass der GRS in Zukunft als Basis für eine eigenständige Applikation für schnelle Abbrandrechnungen mit optional anschließendem Zerfall dienen wird.

Zum Einsatz von VENTINA in AC² wurde zusätzlich ein dedizierter Nuklidsatz aufgebaut, der darauf ausgelegt ist, die Anzahl der berücksichtigten Nuklide zu reduzieren, ohne die Rechengenauigkeit zu beeinträchtigen. Hierzu wurde ein iteratives Verfahren angewendet, bei dem ausgehend von einem Mindestnuklidsatz sukzessive Nuklide hinzugefügt wurden, bis die Zerfallsleistung nur noch unwesentlich von der Rechnung mit einem kompletten Nuklidsatz abwich. Für den finalen Nuklidsatz wurden, die für VENTINA benötigten, Zerfallsketten- und Spaltproduktausbeutendatensätze erzeugt und in die BND-Bibliothek integriert.

3.2.3 Implementierung einer Schnittstelle zur Aktivierungsberechnung mit MCNP und VENTINA

Zur Berechnung der Aktivierung von Reaktorkomponenten innerhalb und außerhalb des Reaktordruckbehälters und allgemein von Materialien, die einem Neutronenfluss ausgesetzt sind, ist eine Kopplung eines Programms zur Berechnung des Neutronentransports an ein Programm zur Inventarberechnung notwendig. In der GRS wurde hierzu zuletzt eine Kopplung von MCNP an das Aktivierungsprogramm GRSAKTIV-II /HES 95/

verwendet. Aufgrund von Defiziten des zweidimensionalen GRSAKTIV-II in Hinblick auf Flexibilität einerseits und basierend auf der veralteten Codestruktur eingeschränkten Aktualisierbarkeit der verwendeten nuklearen Daten andererseits, sowie zur Vereinheitlichung und Vereinfachung der Codelandschaft der GRS war es als sinnvoll, mittels einer Kopplung von VENTINA an MCNP /WER 17/ die Werkzeuge der GRS zur Aktivierungsberechnung zu modernisieren.

Da VENTINA bisher in erster Linie für Abbrandrechnungen verwendet wurde, waren einige Anpassungen in Hinblick auf die Eingabedatenstruktur und die verfügbaren Reaktionskanäle notwendig. Diese Anpassungen sind in den Kapiteln 3.1.3 und 3.3.1 beschrieben. Insbesondere wird für die Aktivierungsrechnungen eine problemunabhängige Multigruppen-Wirkungsquerschnittsbibliothek benötigt. Im Rahmen der Implementierung wurde hierfür eine Bibliothek in der weit verbreiteten *Vitamin-J* Gruppenstruktur (siehe beispielsweise /BAI 21/) erzeugt.

Grundvoraussetzung für eine Aktivierungsrechnung ist hier die Erstellung eines geeigneten MCNP-Modells für den problemabhängigen Strahlungstransport. Dies ist jeweils für das zu untersuchende Problem fallgenau zu erstellen. Die Kopplung von VENTINA an MCNP erfolgt durch zwei sogenannte Mesh-Tallies, die jeweils aus einem kartesischen Gitter bestehen, das über das MCNP-Modell gelegt wird. Mit einem Mesh-Tally wird der Neutronenfluss in jeder Masche des Gitters bestimmt. Das andere Mesh-Tally dient der Diskretisierung der Geometrie und Materialzusammensetzung des MCNP-Modells. Auf diese Weise kann jeder Zelle des Gitters für die Materialzusammensetzung ein Wert des Neutronenflusses zugewiesen werden. Das Gitter für die Flussberechnung kann dabei im Allgemeinen gröber als das Gitter für die Materialzusammensetzung sein, da sich häufig der Neutronenfluss nur wenig von einer zur nächsten Materialzelle ändert. Ein gröberes Gitter für die Flussbestimmung hat den Vorteil, dass weniger Neutronen für die Konvergenz der Flusswerte benötigt werden. Die geeignete Wahl der Mesh-Tallies liegt dabei in der Verantwortung des Nutzers.

Für die Bestimmung der Materialzusammensetzung im Mesh-Tally wird auf ein in im Paket ADVANTG /MOS 15/ bereitgestelltes Ray-Tracing-basiertes Verfahren zurückgegriffen. Dieses ermittelt für jede Gitterzelle die dort vorkommenden Materialgemische mit ihrem jeweiligen Volumenanteil. Mit diesen Daten können die vorkommenden Materialien volumengemittelt zu einem homogenen Zellmaterial zusammengemischt werden. Um eine größere Flexibilität des neuen Werkzeugs zu erreichen und zum Zwecke der Verifizierung der Implementierung wurde mit dem beschriebenen Verfahren neben

VENTINA als alternatives Werkzeug zur Inventarberechnung auch an FISPACT-II /SUB 17/ gekoppelt.

Die Implementierung der Kopplung wurde anhand eines einfachen Modellsystems getestet, für das für Vergleichszwecke eine analytischen Referenzlösung bestimmt werden kann. Die Geometrie dieses Modells ist in Abb. 3.15 dargestellt. Es handelt sich um vier auf einer gemeinsamen Rotationsachse angeordneten Zylinder unterschiedlicher Dicke mit unterschiedlichen Materialdefinitionen. Während zwei Zylinder von einem einzigen Material homogen ausgefüllt sind, setzen sich die anderen beiden Zylinder aus jeweils zwei Zonen mit unterschiedlichen Materialdefinitionen zusammen.

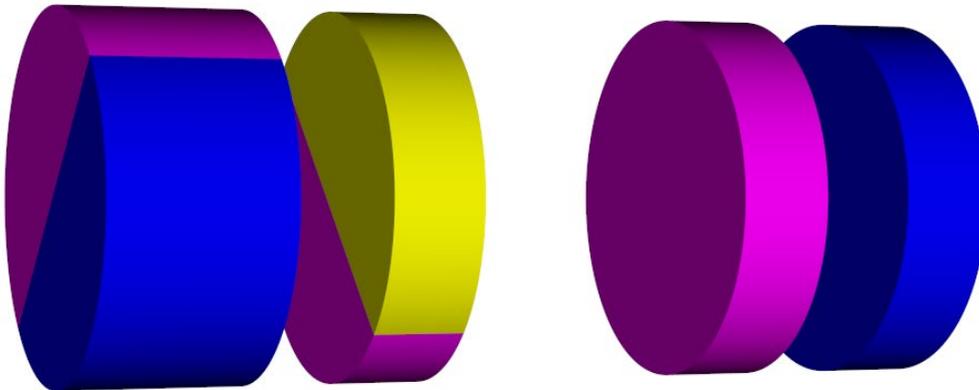


Abb. 3.15 Visualisierung des für Testzwecke der Aktivierungsrechnungen eingesetzten Modellsystems

Als Quelle für den Neutronenfluss wurde eine rechteckige Fläche unterhalb der Zylinder definiert, wobei der Neutronenfluss parallel zur Grundfläche der Zylinder nach oben gerichtet ist. Die Quelle ist in vier Abschnitte unterschiedlicher Quellstärke eingeteilt, wobei das Flussspektrum jeweils einen separaten Energiebereich in Form einer Stufenfunktion abdeckt. Die vier Materialdefinitionen weisen jeweils eine sehr geringe Dichte auf, um eine möglichst geringe Änderung des Flusses beim Durchgang durch die Zylinder zu erreichen. Um die Anzahl der entstehenden Nuklide zu begrenzen, wurden in den Materialdefinitionen die Wasserstoff-Isotope ^1H und ^2H und die Lithium-Isotope ^6Li und ^7Li sowie Mischungen aus beiden verwendet.

Zur Verifizierung der Implementierung wurden anhand dieses Modells für verschiedene Zwischenschritte die analytischen Ergebnisse mit den in der Kopplung berechneten numerischen Werten verglichen. Zusätzlich wurden die mit aus der Kopplung berechneten Eingruppen-Wirkungsquerschnitte für die Nuklidinventarberechnung mit Werten verglichen, die direkt in MCNP anhand von geeigneten Tallies bestimmt wurden. Ein Beispiel eines solchen Vergleichs ist in Tab. 3.1 für die Kopplung zu FISPACT-II /SUB 17/ gezeigt. In den meisten Fällen stimmen beide Werte gut überein. In den Fällen, in denen größere Abweichungen zu sehen sind, lässt sich dies durch Unterschiede in den jeweils verwendeten Wirkungsquerschnittsbibliotheken begründen. Die Werte mit Abweichungen $> 5\%$ sind in der Tabelle fett markiert. Die unterschiedlichen Werte für gleiche Reaktionskanäle in den beiden Materialzonen werden durch die unterschiedlichen Flussspektren verursacht.

Tab. 3.1 Vergleich der in FISPACT-II und der direkt in MCNP berechneten Eingruppen-Wirkungsquerschnitte für verschiedenen Materialzonen

Nuklid	Reaktion	WQ MCNP	WQ FISPACT	Verhältnis FISPACT / MCNP
Zone 0				
H1	n,γ	1,42E-03	1,42E-03	1,0036
H2	n,γ	2,16E-06	2,17E-06	1,0043
He3	n,γ	3,31E-06	3,31E-06	0,9988
He3	n,p	2,15E+01	2,16E+01	1,0036
Li6	n,γ	1,65E-04	1,65E-04	1,0034
Li6	n,t	4,01E+00	4,03E+00	1,0041
Li7	n,γ	1,98E-04	1,98E-04	1,0031
Zone 3				
H1	n,γ	3,17E-05	3,17E-05	1,0001
H2	n,2n	1,21E-01	1,28E-01	1,0532
H2	n,γ	1,01E-05	1,01E-05	1,0001
H3	n,2n	2,88E-02	2,72E-02	0,9421
He3	n,γ	3,83E-05	3,83E-05	1,0001
He3	n,p	2,22E-01	2,10E-01	0,9463
He3	n,d	5,77E-02	5,77E-02	1,0001
Li6	n,γ	1,03E-05	7,38E-05	7,1327
Li6	n,p	1,13E-02	1,13E-02	0,9997
Li6	n,t	4,70E-02	4,70E-02	1,0006
Li6	n,2nα	5,21E-02	5,20E-02	0,9998
Li7	n,γ	4,22E-06	4,22E-06	1,0006
Li7	n,d	5,44E-03	5,44E-03	1,0005
Li7	n,2nα	1,19E-02	2,98E-02	2,5105
Li7	n,2n	1,69E-02	2,98E-02	1,7673

3.3 Verbesserung und Erweiterung der Verarbeitung der nuklearen Daten in MOTIVE und VENTINA

3.3.1 Weiterentwicklung des Werkzeugs NuGra zur Zerfallsdatenprozessierung

Für die Bereitstellung und Aufbereitung von Zerfallsdaten und Nuklidketteninformationen für die Verwendung in MOTIVE und VENTINA wurde in der GRS das Prozessierungswerkzeug NuGra entwickelt /BEH 18a/. Diese ermöglicht das Einlesen von Wirkungsquerschnittsdatenbibliotheken im ENDF-6-Format. Die eingelesenen Daten werden zur vereinfachten Bearbeitung in einem mathematischen Graphen gespeichert und weiterverarbeitet und schließlich in Bibliotheksdateien für MOTIVE und VENTINA geschrieben.

Im vorliegenden Vorhaben wurde NuGra um die Fähigkeit erweitert, Spontanspaltungsdaten einzulesen und Reaktionskettendaten in die Eingabedateien von VENTINA und MODENA zu schreiben. Des Weiteren warnt das Programm den Benutzer nun davor, wenn die Summe der Verzweigungsverhältnisse aller Zerfallsprozesse eines Nuklids ungleich eins ist, was zu einem Massenverlust in auf diesen Daten beruhenden Programmen führt. Dieser Fall tritt z. B. dann auf, wenn Reaktionsprodukte von interessierenden Nukliden nicht in der benutzerdefinierten Auswahlliste enthalten sind. Abgesehen vom Massenverlust ist dieser Zustand insbesondere dann unerwünscht, wenn mögliche Folge-Zerfallsprodukte wiederum berücksichtigt werden sollen. Das einfachste Beispiel ist der Zerfall von kurzlebigen, angeregten Nukliden in den Grundzustand durch isomere Zustandsänderung. Um dieses Problem zu behandeln, wurde NuGra mit zwei zusätzlichen Optionen versehen.

Der neue Schalter "--decay-unselected-nuclides" bewirkt, dass unberücksichtigte Nuklide daraufhin untersucht werden, ob sich ihre direkten Nachkommen durch radioaktiven Zerfall in Auswahlnuklide verwandeln, die dann an deren Stelle in den Zerfallsgraphen eingefügt werden. Für Einfang- (Kanal (n,γ)) und Transferreaktionen (z. B. $(n,2n)$, (n,α) , etc.) wird dafür außer bei abschließenden Spontanzerfällen der ursprüngliche Reaktionskanal verwendet. Ebenso wird mit isomeren Zustandsänderungen verfahren, wohingegen die restlichen mehrstufigen Zerfallsreaktionen entweder einem der in VENTINA und MOTIVE vordefinierten Kanäle entsprechen und ansonsten einem generischen Zerfallskanal zugeordnet werden.

Der Massenverlust durch vernachlässigte Reaktionsprodukte lässt sich durch die neue Kommandozeilenoption "--conserve-mass" vermeiden. Sie bewirkt, dass alle unberücksichtigten Nuklide, falls sie nicht direkt in Auswahlnuklide zerfallen, unter drei künstlichen und stabilen Sammelnukliden subsumiert werden, jeweils eins für die Produkte von Einfang-/Transferreaktionen, Spontanspaltungen und weitere Zerfallsreaktionen.

Weiterhin wurde der von NuGra erzeugte Graph zur Zwischenspeicherung und Prozessierung der Reaktionskettendaten in zwei separate Graphen aufgetrennt, einen für die Zerfallsreaktionen und einen für die Neutronenreaktionen. Auf diese Art und Weise können jetzt doppelt auftretende Pfade, d. h. solche für die es sowohl einen Zerfallskanal als auch einen Reaktionskanal gibt, geeignet berücksichtigt werden. Dies ermöglicht die Betrachtung zusätzlicher Reaktionskanäle wie zum Beispiel die (n,p)-Reaktion, die bisher vernachlässigt wurde. Damit können diese Kanäle jetzt auch in VENTINA berücksichtigt werden.

NuGra erfuhr außerdem einige Detail- und Fehlerverbesserungen. So werden nun Nuklide, deren Halbwertszeit kleiner als die vom Benutzer vorgegebene Halbwertszeitschwelle sind, nicht mehr im Zerfallsgraphen aufgeführt. Außerdem wurden Unzulänglichkeiten beim Auslesen und Speichern von Energiespektren von Zerfallsreaktionen entdeckt und behoben. Das Programm behandelt jetzt auch einen Mehrfachzerfall mit abschließender Spontanspaltung, wie er bei Fermium-246 in JEFF-Evaluationen vorkommt, konsistent. Zur Verwendung in MOTIVE liest NuGra jetzt auch die mittlere Anzahl der Neutronen pro Spaltung $\bar{\nu}_{tot}$ ein und speichert sie in der HDF5-Eingabedatei des Simulationsprogramms. Des Weiteren bietet das Programm nun die Möglichkeit, benutzergesteuert Reaktionen von den prozessierten Reaktionsketten auszunehmen.

Zur Erzeugung von Eingabedaten für AC², das im Rahmen des Austausches seines Abbrand- und Zerfallslösers nukleare Daten zur Bestimmung der Nachzerfallswärme benötigt, wurde neben den bestehenden "ventura"- und "motive"-Befehlen ein weiteres Unterkommando "ac2" einprogrammiert, das die erforderlichen Werte erzeugt und in Dateiform bereitstellt.

3.3.2 Adjungierte Lösung der Batemangleichung

Eine effiziente Methode zur Berechnung von Unsicherheiten in nuklearen Daten ist die Anwendung der linearen Störungstheorie auf Basis von adjungierten Lösungen. Im Gebiet der Kritikalitätssicherheit findet diese Methode bereits ein breites Anwendungsfeld.

Für die Analyse von zeitabhängigen Abbrand- und Zerfallsrechnungen hat diese Technik erst in den letzten Jahren eine vermehrte Anwendung gefunden /GAU 17/. Die Lösungen der adjungierten Bateman-Gleichungen wurden zuerst bereits 1975 von Gandini /GAN 75/ veröffentlicht und von Williams und Weisbin im Detail diskutiert /WIL 78/.

Im Rahmen der linearen Störungstheorie und unter Vernachlässigung der Kopplung zwischen dem Neutronenfluss und dem Nuklidvektor erhält man die absolute Sensitivität für ein Antwortsignal R bei einer Variation des nuklearen Datenelements α als:

$$S_{\alpha}^R = \langle \mathbf{N}_R^*(t) \frac{\partial \mathbf{A}(\alpha)}{\partial \alpha} \mathbf{N}^T(t) \rangle, \quad (3.5)$$

wobei \mathbf{N}^T der transponierte Nuklidvektor, \mathbf{N}_R^* die Lösung der adjungierten Bateman-Gleichung zum Antwortsignal R und \mathbf{A} die Koeffizienten-Matrix ist. Die partielle Ableitung der Koeffizienten-Matrix resultiert in einer Matrix mit lauter Nullelementen an den Stellen, an denen das Datenelement α keinen Beitrag liefert. Die Mittelung wird über das Zeitintervall $t = (0, T_f)$ durchgeführt, wobei T_f der Endzeitpunkt des zu analysierenden Zeitintervalls ist. Der Nuklidvektor $\mathbf{N}(t)$ ist über die Bateman-Gleichung und der dazugehörigen Anfangsbedingung bestimmt:

$$\frac{d\mathbf{N}(t)}{dt} = \mathbf{A}\mathbf{N}(t), \quad t \in (0, T_f), \quad \mathbf{N}(0) = \mathbf{N}_0 \quad (3.6)$$

Zur Lösung der obigen Vorwärtsgleichung wird hier die Chebyshev Rational Approximation Method (CRAM) /PUS 10/ verwendet. Der adjungierte Nuklidvektor $\mathbf{N}^*(t)$ ist über die adjungierte Bateman-Gleichung bestimmt:

$$-\frac{d\mathbf{N}^*(t)}{dt} = \mathbf{A}^T \mathbf{N}^*(t), \quad t \in (T_f, 0), \quad \mathbf{N}^*(T_f) = \mathbf{N}_f^* \quad (3.7)$$

Die adjungierte Form der Bateman-Gleichung ist im Allgemeinen der Vorwärtsgleichung sehr ähnlich, mit der Ausnahme, dass es sich um ein Endwertproblem handelt, das Vorzeichen der Zeitableitung vertauscht ist, und der transponierten Koeffizienten-Matrix \mathbf{A}^T .

Die adjungierte Lösung kann über eine einfache Koordinatentransformation, $\tau = T_f - t$, umgeschrieben werden:

$$\frac{d\mathbf{N}^*(\tau)}{d\tau} = \mathbf{A}^T \mathbf{N}^*(\tau), \quad \mathbf{N}^*(0) = \mathbf{N}_f^* \quad (3.8)$$

Wie ersichtlich unterscheidet sich diese transformierte Gleichung formal nur aufgrund der transponierten Koeffizienten-Matrix von der Vorwärtsgleichung. Somit kann derselbe Lösungsalgorithmus wie bei der Vorwärtsgleichung verwendet werden; lediglich die Matrix \mathbf{A} muss transponiert werden und, sollten mehrere Zeitschritte betrachtet werden, müssen die Zeitintervalle rückwärts in der Zeit abgearbeitet werden. Der adjungierte Nuklidvektor $\mathbf{N}^*(t)$ ergibt sich anschließend durch die Koordinaten-Rücktransformation //ISO 15/.

Diese Rechenschritte wurden in den Rechencode implementiert und mittels eines Beispiels verifiziert. Gezeigt wird zunächst der radioaktive Zerfall zweier gekoppelter Nuklide, wobei zum Startzeitpunkt lediglich Nuklide des Typs 1 vorhanden sind. Das Gleichungssystem lautet dann:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} N_1 \\ N_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\lambda_1 & 0 \\ \lambda_1 & -\lambda_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N_1 \\ N_2 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} N_1(0) \\ N_2(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} N_1^0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

und dessen Lösung:

$$\begin{pmatrix} N_1(t) \\ N_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} N_1^0 e^{-\lambda_1 t} \\ N_1^0 \frac{\lambda_1}{\lambda_1 - \lambda_2} (e^{-\lambda_2 t} - e^{-\lambda_1 t}) \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

Da die Auswirkungen von Störungen in der Zerfallskonstante λ_1 auf das Nuklid 2 interessieren, lautet das adjungierte Gleichungssystem:

$$-\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} N_1^* \\ N_2^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\lambda_1 & \lambda_1 \\ 0 & -\lambda_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N_1^* \\ N_2^* \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} N_1^*(T_f) \\ N_2^*(T_f) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

und dessen Lösung:

$$\begin{pmatrix} N_1^*(t) \\ N_2^*(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\lambda_1}{\lambda_1 - \lambda_2} (e^{-\lambda_2(T_f-t)} - e^{-\lambda_1(T_f-t)}) \\ e^{-\lambda_2(T_f-t)} \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

Für den Sensitivitätskoeffizienten ergibt sich somit:

$$S_{\lambda_1}^{N_2} = \int_0^{T_f} dt (N_1^* \quad N_2^*) \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N_1 \\ N_2 \end{pmatrix} = \quad (3.13)$$

$$N_1^0 \left(\frac{e^{-\lambda_2 T_f} - e^{-\lambda_1 T_f}}{\lambda_1 - \lambda_2} + \frac{\lambda_1}{\lambda_1 - \lambda_2} \left(T_f e^{-\lambda_1 T_f} - \frac{e^{-\lambda_2 T_f} - e^{-\lambda_1 T_f}}{\lambda_1 - \lambda_2} \right) \right)$$

Es werden nun verschiedene Grenzfälle betrachtet: für den Fall $\lambda_1 \gg \lambda_2$, also einer sehr viel größeren Halbwertszeit des Tochternuklids im Vergleich zum Mutternuklid für Beobachtungszeiten die in der Größenordnung oder kleiner als die Halbwertszeit von Nuklid 1 sind, erhält man $S_{\lambda_1}^{N_2} \approx N_1^0 T_f e^{-\lambda_1 T_f}$. Für diese Beobachtungszeiten ergibt sich somit ein stets positiver Sensitivitätskoeffizient. Dies bedeutet, dass eine positive Störung in der Zerfallskonstanten λ_1 eine Zunahme der Nuklidkonzentration des Tochternuklids verursacht. Das System verhält sich ähnlich, als wäre das Tochternuklid stabil.

Im Gegensatz dazu erhält man für den anderen Fall $\lambda_2 \gg \lambda_1$ für Beobachtungszeiten in der Größenordnung der Halbwertszeit von Nuklid 1 einen Sensitivitätskoeffizienten von $S_{\lambda_1}^{N_2} \approx N_1^0 (1 - \lambda_1 T_f) e^{-\lambda_1 T_f} / \lambda_2$. Dies bedeutet, dass in diesem Fall der Sensitivitätskoeffizient für Beobachtungszeiten $T_f > \lambda_1$ negativ wird. Dies lässt sich dadurch verstehen, dass für solch lange Beobachtungszeitpunkte die Nuklidkonzentration eines instabilen Tochternuklids negativ durch eine Vergrößerung der Zerfallskonstante des Mutternuklids beeinflusst wird. Da im Vergleich zu Nuklid 1 das Nuklid 2 sehr schnell zerfällt, wirkt es sich negativ auf die Konzentration von Nuklid 2 aus, wenn sich die Zerfallskonstante von Nuklid 1 vergrößert und somit zu einem schnelleren Zerfall von Nuklid 1 führt, was für den späten Beobachtungszeitpunkt folglich auch zu einer geringeren

Nuklidichte von Nuklid 2 zum Zeitpunkt T_f führt. Hingegen ist für kleine Beobachtungszeitpunkte ein positiver Sensibilitätskoeffizient zu beobachten.

Zur Demonstration der implementierten Methode werden die ersten beiden Nuklide der ^{230}Th -Zerfallskette betrachtet. ^{230}Th besitzt eine Halbwertszeit von ca. $2,38\text{e}+12$ Sekunden und das Tochternuklid ^{226}Ra eine Halbwertszeit von ca. $5,05\text{e}+10$ Sekunden. Die variierte Größe ist die Zerfallskonstante von ^{230}Th und als Antwortsignal wird die Nuklidkonzentration von ^{226}Ra analysiert. Die analytische Lösung liefert für eine Anfangskonzentration von $1\text{e}+14 \text{ cm}^{-3}$ ^{230}Th und dem Endzeitpunkt $T_f=1\text{e}+13$ s einen Sensibilitätskoeffizienten von $S_a=-7,642\text{e}+23 \text{ s/cm}^3$. Die in den Rechencode implementierte Methode liefert $S_c=-7,641\text{e}+23 \text{ s/cm}^3$. Für einen Endzeitpunkt von $T_f=1\text{e}+7$ s liefert die analytische Methode $S_a=9,992\text{e}+21 \text{ s/cm}^3$ und die numerische Lösung $S_c=9,992\text{e}+21 \text{ s/cm}^3$. Wie ersichtlich stimmen die numerisch bestimmten Werte gut mit den analytischen Referenzlösungen überein. Es sei hier festgehalten, dass die Genauigkeit des Integrals über das Zeitintervall $(0, T_f)$ stark von der Anzahl an Zwischenschritten im jeweiligen Beobachtungszeitraum abhängt.

Mithilfe der adjungierten Lösung kann auch Pfadanalyse betrieben werden. Die Funktion $N^*(t)N^T(t)$ kann für einzelne Nuklide ausgewertet werden und zeigt zum Zeitpunkt t den Beitrag des jeweiligen Nuklids zum Antwortsignal. Zur Demonstration wurde die Zerfallskette von ^{230}Th mit dem Programmcode nachgerechnet und die adjungierte Lösung an denselben Zeitschritten bestimmt. Zum Startzeitpunkt wurden alle Nuklidkonzentrationen in der Zerfallskette außer Thorium auf null gesetzt. Als Antwortsignal wurde die Nuklidkonzentration des stabilen Bleiisotops ^{206}Pb gewählt. Abb. 3.16 illustriert den Beitrag von einigen ausgewählten Vorgängernukliden zur Endkonzentration von ^{206}Pb als Funktion der Zeit. Für dieses Beispiel liefern die Nuklide mit den größten Halbwertszeiten zunächst die höchsten Beiträge. Nuklide mit kleineren Beiträgen werden in der Grafik nicht gezeigt. Zu späteren Zeitpunkten erklärt sich die zu T_f vorkommende ^{206}Pb Konzentration vor allem durch die bereits an ^{206}Pb vorhandene Konzentration.

Die hier vorgestellte Methode kann zusätzliche Einblicke in komplexe Zusammenhänge zwischen nuklearen Daten und Nuklidinventaren liefern und ermöglicht es, sie qualitativ und quantitativ zu interpretieren.

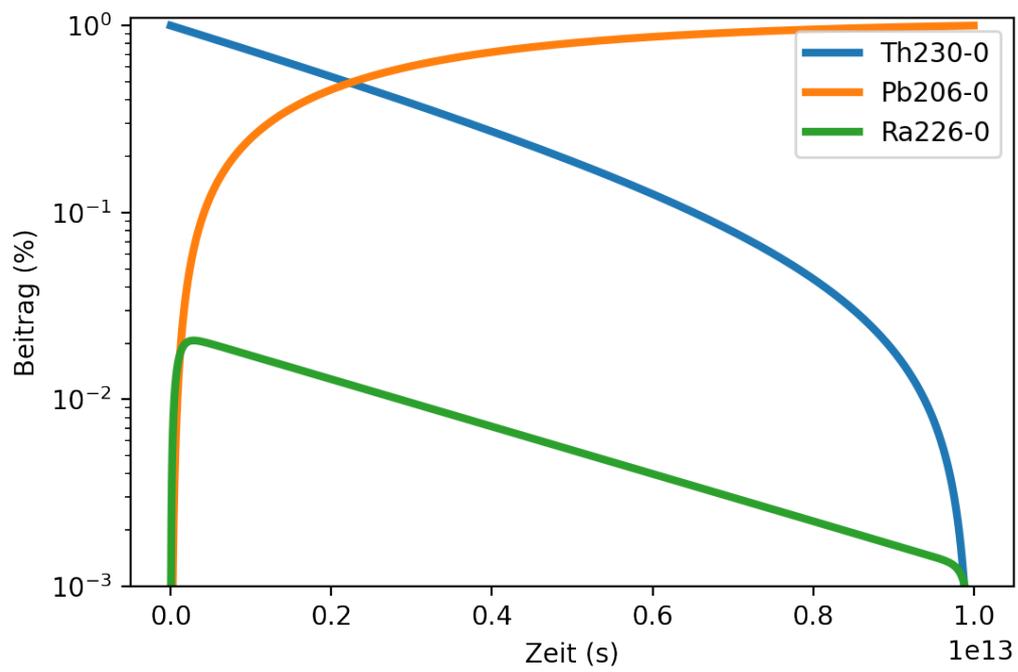


Abb. 3.16 Anwendung der adjungierten Lösung zur Analyse der Pfadbeiträge

4 AP2: Validierung MOTIVE/VENTINA und Anwendung auf spezifische Problemstellungen im Bereich Abbrandrechnung

4.1 Modellierung zusätzlicher Siedewasser-Brennelementtypen

In MOTIVE wird zur Berechnung verschiedener Brennelementtypen die Philosophie verfolgt, die jeweilig benötigten Parameter per Schlüsselwörter anzugeben, während die codespezifischen Details der Eingabedateien für die Flussberechnung für das jeweilige Brennelement im Vorhinein im Code definiert werden. Diese Definitionen wurden um die Siedewasser-Brennelementtypen SVEA-100 und SVEA-96 erweitert.

4.1.1 SVEA-100 und SVEA-64

Die Definitionen für der Berechnung von SVEA-100 Brennelementen wurden in MOTIVE implementiert. Abb. 4.1 zeigt die Geometrie der durch MOTIVE erzeugten KENO-VI Eingabedatei zur Flussberechnung. Bei diesem Brennelement-Typ werden die 10×10 Brennstäbe in vier 5×5 Brennstabbündel aufgeteilt, die durch ein zentrales Moderator-Kreuz voneinander getrennt sind. Dieses hat in der Mitte abgerundete Ecken, ist zum Rand hin eingeschnürt und besitzt ganz am Rand jeweils einen dreieckigen Flügel. Zusätzlich ist das Brennelement von einem Metallkasten umgeben, dessen Ecken abgerundet sind. In dem Moderator-Material außerhalb dieses Kastens und innerhalb des Kreuzes und der Flügel kommt es im Normalbetrieb nicht zum Sieden (kein void), sodass sich die Dichte aus Druck und Temperatur des Kühlmittels ergibt.

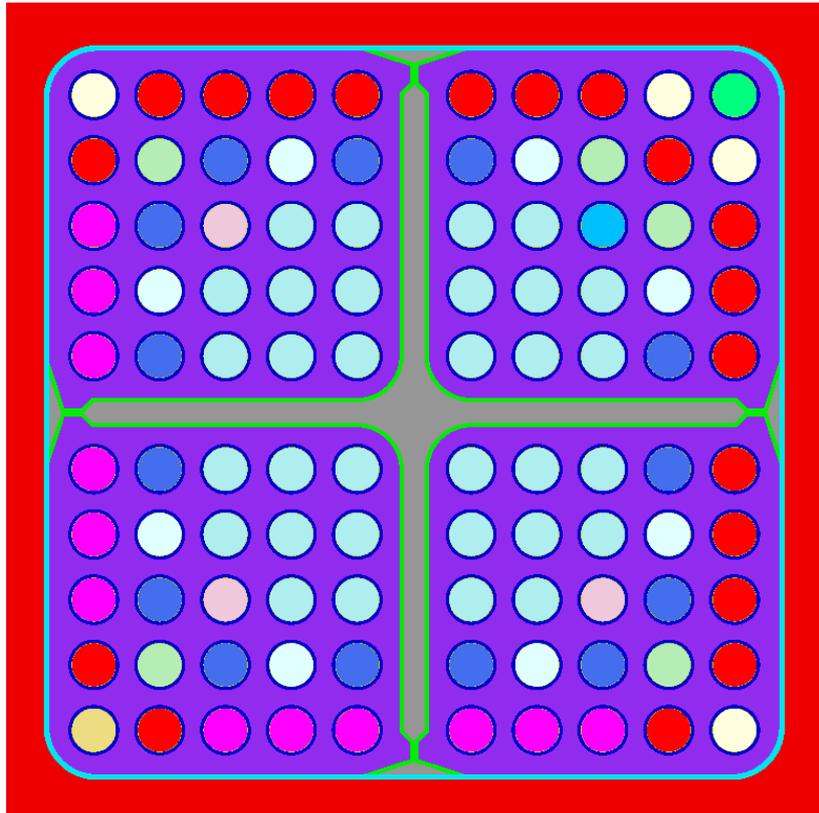


Abb. 4.1 KENO-VI Geometrie des SVEA-100 Brennelements, erzeugt mit MOTIVE v1.0.6

Das Brennelement wurde modular gestaltet, sodass die exakte Geometrie auf einfache Art und Weise über zusätzliche Schlüsselwörter in der MOTIVE Eingabedatei geändert werden kann. In Tab. 4.1 sind die Parameter und deren Erläuterung aufgelistet, die für das SVEA-100 Brennelement zusätzlich zu den möglichen Schlüsselwörtern für Siedewasserreaktoren möglich sind. Außerdem sind die jeweiligen Standardwerte angegeben, die auf öffentlich zugänglichen Informationen zum Forsmark-Brennelement 14595 beruhen /ZWI 08/. Die Werte für die Einschnürungen an den äußeren Enden des Wasserkreuzes wurden dabei aus der Abbildung 3 in der Referenz /TÖR 11/ ausgemessen. Die unterschiedlichen Farben der Brennstäbe in Abb. 4.1 entsprechen unterschiedlichen Anfangsanreicherungen im eingesetzten Brennstoff.

Da SVEA 64 Brennelemente von der Geometrie sehr ähnlich zu SVEA-100 Brennelementen sind, statt 5 x 5 werden 4 x 4 Brennelementbündel verwendet, wurde auf Grundlage des SVEA-100 Modells zusätzlich ein SVEA-64 Modell mit identischen Parametern und Standardwerten erstellt.

Tab. 4.1 SVEA-100 Parameter mit generischen Standardwerten

Parameter	Erklärung	Standardwert
box_corner_inner_radius [cm]	Innerer Radius des äußeren BE-Kastens	0,9
waterblade_corner_inner_radius [cm]	Innerer Radius des Kühlwasser-Kreuz	0,8
waterblade_wall_thickness [cm]	Dicke der Wandung des Moderator-Kreuz	0,08
waterblade_material	Materialbezeichnung des Moderator-Kreuz	-
waterblade_moderator_material	Materialbezeichnung des Moderators im Moderator-Kreuz	moderator
waterblade_thickness_moderator [cm]	Dicke der Moderator-Schicht im Moderator-Kreuz	0,4
waterblade_triangle_base_length [cm]	Äußere Länge der Basis des dreieckigen Flügels des Moderator-Kreuzes	1,92
waterblade_triangle_angle [°]	Winkel des dreieckigen Flügels des Moderator-Kreuzes	18
waterblade_neck_out_angle [°]	Winkel der äußeren Einschnürung des Moderator-Kreuzes	45
waterblade_neck_out_distance_to_box [cm]	Abstand zwischen der äußeren Ecke der äußeren Einschnürung des Moderator-Kreuzes von der Innenseite des äußeren BE-Kastens	0,7956
watergap_sub_bundle_inner [cm]	Wasserspalt zwischen 5x5 Brennstabbündel und innerem Moderator-Kreuz	0,173
watergap_sub_bundle_outer [cm]	Wasserspalt zwischen 5x5 Brennstabbündel und äußerem BE-Kasten	0,217
fr_shift_x; fr_shift_y [cm]	Array mit x- und y-Werten der Verschiebung jedes Brennstabs im Brennelement	0, ..., 0

4.1.2 SVEA-96

Die Definitionen für der Berechnung von SVEA-96 Brennelementen wurden in MOTIVE implementiert. Dieser Brennelementtyp ähnelt sehr dem SVEA-100. Abb. 4.1 zeigt die Geometrie der durch MOTIVE erzeugten KENO-VI Eingabedatei zur Flussberechnung. Auch bei diesem Brennelement-Typ werden die 10×10 (-4) Brennstäbe in vier 5×5 (-1) Brennstabbündel aufgeteilt, die durch ein zentrales Moderator-Kreuz voneinander getrennt sind. Dieses hat in der Mitte einen um 45° gedrehten Wasserkasten, der in jedem Quadranten den innersten Brennstab verdrängt. Zusätzlich

zu der Einschnürung zum Rand hin und den dreieckigen Flügeln ganz am Rand besitzt dieser Brennelementtyp eine zusätzliche Einschnürung des Moderator-Kreuzes zum zentralen Wasserkasten hin. Zusätzlich ist das Brennelement von einem Metallkasten umgeben, dessen Ecken abgerundet sind. In dem Moderator-Material außerhalb dieses Kastens und innerhalb des zentralen Wasserkastens, des Kreuzes und der Flügel kommt es im Normalbetrieb nicht zum Sieden (kein void), sodass sich die Dichte aus Druck und Temperatur des Kühlmittels ergibt.

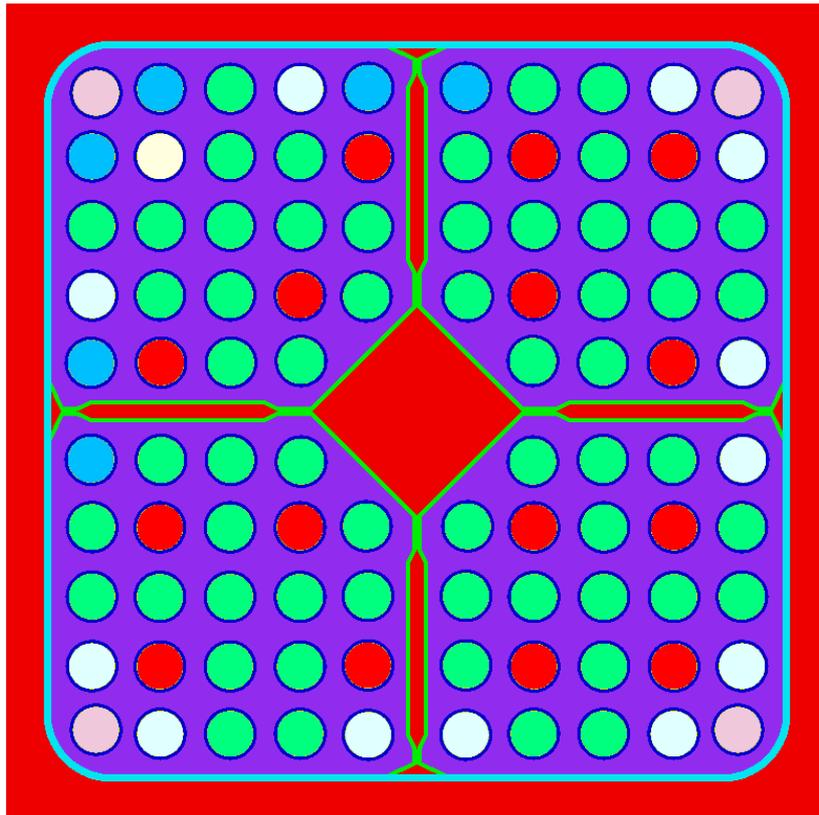


Abb. 4.2 KENO-VI Geometrie des SVEA-96 Brennelements, erzeugt mit MOTIVE v1.0.6

Das Brennelement wurde modular gestaltet, sodass die exakte Geometrie auf einfache Art und Weise über zusätzliche Schlüsselwörter in der MOTIVE Eingabedatei geändert werden kann. Dabei sind zahlreiche Schlüsselwörter identisch mit den Schlüsselwörtern für das SVEA-100 Brennelement, allerdings mit teils unterschiedlichen Standardwerten, siehe Tab. 4.2.

Tab. 4.2 SVEA-96 Parameter mit generischen Standardwerten

Parameter	Erklärung	Standardwert
waterblade_central_channel_size [cm]	Innere Abmessung des zentralen Wasserkastens	2,7
waterblade_neck_in_angle [°]	Winkel der inneren Einschnürung des Moderator-Kreuzes	65
waterblade_neck_in_distance_to_box [cm]	Abstand zwischen der äußeren Ecke der inneren Einschnürung des Moderator-Kreuzes von der Innenseite des äußeren BE-Kastens	3,97
box_corner_inner_radius [cm]	Innerer Radius des äußeren BE-Kastens	0,9
waterblade_wall_thickness [cm]	Dicke der Wandung des Moderator-Kreuzes	0,08
waterblade_material	Materialbezeichnung des Moderator-Kreuz	-
waterblade_moderator_material	Materialbezeichnung des Moderators im Moderator-Kreuz	moderator
waterblade_thickness_moderator [cm]	Dicke der Moderator-Schicht im Moderator-Kreuz	0,2
waterblade_triangle_base_length [cm]	Äußere Länge der Basis des dreieckigen Flügels des Moderator-Kreuzes	1,1
waterblade_triangle_angle [°]	Winkel des dreieckigen Flügels des Moderator-Kreuzes	25
waterblade_neck_out_angle [°]	Winkel der äußeren Einschnürung des Moderator-Kreuzes	65
waterblade_neck_out_distance_to_box [cm]	Abstand zwischen der äußeren Ecke der äußeren Einschnürung des Moderator-Kreuzes von der Innenseite des äußeren BE-Kastens	0,72
watergap_sub_bundle_inner [cm]	Wasserspalt zwischen 5x5 Brennstabbündel und innerem Moderator-Kreuz	0,173
watergap_sub_bundle_outer [cm]	Wasserspalt zwischen 5x5 Brennstabbündel und äußerem BE-Kasten	0,217
fr_shift_x, fr_shift_y [cm]	Array mit x- und y-Werten der Verschiebung jedes Brennstabs im Brennelement	0, ..., 0

4.2 Erweiterung der Validierungsdatenbasis von MOTIVE

4.2.1 Nachbestrahlungsanalyseproben

Als Ergänzung der bestehenden Validierungsdatenbasis wurden verschiedene Nachbestrahlungsanalyseproben nachgerechnet, die bisher noch nicht berücksichtigt werden konnten. Die Probennachrechnungen umfassen sowohl Siedewasserreaktor- als auch Druckwasserreaktor-Brennelementproben. Es wurden Proben aus den japanischen Druckwasserreaktoren Mihama-3 und Genkai-1 und Proben aus den japanischen Siedewasserreaktoren Fukushima Daini-1 und -2 sowie aus dem schwedischen SWR Forsmark-3 nachgerechnet. Die nachgerechneten Proben und deren wesentliche Eigenschaften sind in Tab. 4.3 aufgelistet. Die Modellierung dieser Proben und die Ergebnisse der Nachrechnungen sind in einem separaten Bericht ausführlich dokumentiert /BEH 23/.

Tab. 4.3 Zusammenstellung der im Vorhaben nachgerechneten Nachbestrahlungsanalyseproben

Reaktor	Typ	Brennstoffart	Anreicherung (Gew.% ²³⁵ U)	Anzahl Stäbe	Anzahl Proben	Abbrand [GWd/tHM]
Mihama-3	DWR	UO ₂	3,2	5	9	6,7 – 33,4
Genkai-1	DWR	UO ₂	3,4	2	2	38,1; 38,7
Forsmark-3	SWR	UO ₂	3,97	1	1	60,7
Fukushima Daini-1	SWR	UO ₂	2,1; 3,0; 4,9	5	13	27,9 – 68,4
Fukushima Daini-2	SWR	UO ₂	3,4; 4,5	11	26	9,4 – 59,1
			Summe	24	51	

4.2.2 Validierungsrechnungen zur Zerfallswärmeleistung von LWR-Brennelementen

Zur Validierung der im Vorhaben RS1542 implementierten Berechnung der Zerfallswärmeleistung bestrahlter Brennstoffproben wurden erstmalig entsprechende experimentelle Daten nachgerechnet. Im Hinblick auf den Anwendungsschwerpunkt von MOTIVE und die Datenlage wurden hierfür kalorimetrische Messungen an bestrahlten LWR-Brennelementen herangezogen. Diese Messungen stammen aus zwei Quellen. Zunächst wurden Messungen an DWR- und SWR-Brennelementen, die am zentralen Zwischenlager CLAB in Schweden durchgeführt wurden, verwendet /SKB 06/. Diese

umfassen Abklingzeiten zwischen 11 und 26 Jahren und wurden an Brennelementen mit Abbränden zwischen etwa 7 und 59 GWd/tSM durchgeführt. Ergänzt wurden diese um Messungen an SWR-Brennelementen aus dem US-amerikanischen Kernkraftwerk Cooper, die bei GE Morris durchgeführt wurden /STR 82/. Diese weisen deutlich geringere Standzeiten und deutlich geringere Abbrände auf und erweitern daher den abgedeckten Parameterbereich. Insgesamt wurden 154 Proben nachgerechnet. Die untersuchten Messdaten sind in Tab. 4.4 zusammengefasst. Die Modellierung der Proben und die Ergebnisse der Nachrechnungen sind in /BEH 23/ ausführlich dokumentiert.

Tab. 4.4 Zusammenstellung der nachgerechneten kalorimetrischen Messungen an bestrahlten DWR- und SWR-Brennelementen

Labor	Reaktor	Brennelement-Typ	# Proben	Lagerzeit [a]	Abbrand [GWd/tHM]
CLAB, DWR	Ringhals-2	15x15	16	16,0 – 23,2	39,6 – 58,9
	Ringhals-3	17x71	15	15,9 – 20,0	18,7 – 46,5
CLAB, SWR	Ringhals-1	8x8	15	12,6 – 18,3	7,2 – 44,0
	Oskarshamn-2	8x8, SVEA-64	9	12,4 – 26,7	21,8 – 38,9
	Oskarshamn-3	8x8	3	12,5 -15,4	54,0
	Barsebäck-1/2	8x8, SVEA-100	5	11,4 – 15,2	52,4
	Forsmark-1	8x8, 9x9	6	11,4 – 13,4	21,5 – 38,5
	Forsmark-2	8x8, SVEA-64	4	12,4 - 15,4	14,3 – 47,3
	Forsmark-3	SVEA-100	2	13,3 – 13,4	22,8 – 55,7
GE Morris, SWR	Cooper	7x7	79	2,3 -6,7	11,7 – 28,0
		Summe	154		

4.3 Brennstofftemperaturberechnung und Modelle zur effektiven Brennstofftemperatur

In diesem Unterarbeitspunkt werden verschiedene Modelle zur effektiven Brennstofftemperatur untersucht. Ein Überblick der in der Literatur verwendeten Modelle kann in den Referenzen /GRA 10/ und /TOM 13/ eingesehen werden.

Im Grunde lässt sich ein Großteil der Modelle zur Berechnung der effektiven Temperatur unter folgender Form zusammenfassen:

$$T_{eff} = aT_{ave} + bT_c + cT_s, \quad (4.1)$$

wobei $T_{ave} = \int rTdr / \int r dr$ die volumengemittelte Temperatur ist, T_c die Temperatur im Zentrum und T_s die äußere Temperatur des Brennstabs. Die Koeffizienten a , b und c für die hier betrachteten Modelle für Zylinder-Geometrien sind in Tab. 4.5 aufgelistet. Ein anderer, verbreiteter Ausdruck wurde von Goltsev et al. /GOL 03/ vorgeschlagen, wobei die effektive Temperatur dort wie folgt berechnet wird: $T_{eff} = \int \sqrt{T} dr / \int 1/\sqrt{T} dr$.

Tab. 4.5 Koeffizienten für effektive Temperaturberechnung

Formel	a	b	c
Volumengemittelt	1	0	0
Rowlands /ROW 62/	0	4/9	5/9
Kozłowski & Downar (NEA) /KOZ 07/	0	3/10	7/10

Diese Methoden wurden durch verschiedene theoretische und empirische Überlegungen und Ansätze bestimmt. Um die Belastbarkeit der verschiedenen Modelle zur effektiven Temperaturberechnung zu untersuchen, wurden die in Tab. 4.5 aufgelisteten Modelle und der Ansatz von Goltsev et al. (hier als GDTL bezeichnet) in MOTIVE implementiert. Insgesamt betrachtet man somit vier verschiedene Ansätze, wobei die volumengemittelte Temperatur als Standardmethode für MOTIVE festgelegt wird. Für die jeweiligen Modelle wird die effektive Temperatur mithilfe der in MOTIVE bereits implementierten Methode zur Berechnung der Temperaturverteilung bestimmt.

Um eine Aussage über die Güte der effektiven Temperaturmodelle treffen zu können werden zwei Rechenbeispiele betrachtet: eine Brennstabzelle mit Uranoxid als Brennstoff und ein MOX-Brennelement.

Im ersten Beispiel untersuchen wir zunächst ein hochdetailliertes Brennstabmodell mit einer Feineinteilung des Pellets in fünfzehn Ringzonen und verwenden die in MOTIVE implementierte, automatische Brennstofftemperaturberechnung für die einzelnen Ringzonen. Dieses Modell dient uns anschließend im Vergleich mit den verschiedenen effektiven Brennstofftemperaturmodellen als Referenzmodell.

Die Brennstabzelle, die aus einem realen Anwendungsfall abgeleitet wurde, beinhaltet Uranoxid Brennstoff mit einer ^{235}U Anreicherung von 4 % und einer Brennstoffhülle aus einer Zirkoniumlegierung. Der Brennstoffradius beträgt 0,411 cm und der Radius der Brennstoffhülle 0,475 cm. Der Heliumspalt wird in diesem Modell vernachlässigt. Der Brennstababstand beträgt 1,272 cm und als Moderator wird boriertes Wasser mit einem Borgehalt von 500 ppm, einer Temperatur von 600 K und einem Druck von 158 bar verwendet. Die spezifische Leistung beträgt über den gesamten Zeitraum 36,36 W/g. Des Weiteren werden zusätzliche Rechnungen mit einer um 25 % geringeren spezifischen Leistung und einer um 25 % höheren spezifischen Leistung. Im Weiteren werden diese Fälle als Fall 1-3 bezeichnet. In allen Raumrichtungen werden reflektierende Randbedingungen angewandt. Es wird eine Abbrandrechnung bis 1150 Vollasttage durchgeführt. Als Neutronenflusslöser wird hier der Monte Carlo Code OpenMC 0.10.0 mit $5e+4$ Teilchen und einer minimalen Standardabweichung für den Neutronenmultiplikationsfaktor k_{inf} von $5e-4$ verwendet. Zur Berechnung des Nuklidinventars wird der Abbrandcode VENTINA /MAL 18/ verwendet. Wie aus Tab. 4.6 ersichtlich, verteilen sich für Fall 1 die Temperaturen innerhalb der Brennstoff-Ringzonen zwischen ca. 1100 K in der innersten Zone und 800 K in der äußersten Zone. Das Temperaturprofil ändert sich nur wenig über die verschiedenen Abbrandschritte hinweg, jedoch lässt sich eine leichte Abflachung über die Zeit beobachten.

Tab. 4.6 Temperaturverteilung in Kelvin für verschiedene Zonen innerhalb der Brennstoffzelle für einige ausgewählte Abbrand-Zeitpunkte für Fall 1

Zonen	Abbrandtage				
	0,0	5,0	100,0	500,0	1100,0
Zone 1	1121	1112	1107	1096	1085
Zone 2	1094	1086	1082	1072	1062
Zone 3	1069	1062	1058	1049	1040
Zone 4	1044	1038	1035	1028	1021
Zone 5	1020	1015	1012	1005	998
Zone 6	996	992	989	983	977
Zone 7	972	969	967	961	956
Zone 8	949	947	945	940	936
Zone 9	927	925	923	920	916
Zone 10	905	903	902	899	896
Zone 11	883	882	881	879	877
Zone 12	861	861	860	858	857
Zone 13	840	840	839	838	838
Zone 14	819	819	819	819	818
Zone 15	799	799	799	799	798

Für die Rechnungen mit verschiedenen effektiven Temperaturberechnungsmethoden werden im Grunde zu der vorhergehenden Rechnung identische Rechenläufe durchgeführt. Der einzige Unterschied besteht darin, dass der Brennstab mit nur einer Ringzone diskretisiert ist.

In Tab. 4.7 sind die resultierenden Temperaturen, die aus den verschiedenen Modellen hervorgehen für die verschiedenen Rechenfälle aufgelistet. Wie ersichtlich, weisen die Standardmethode und die Methode nach Rowlands sehr ähnliche Temperaturen auf, während das NEA-Modell im Allgemeinen eine kleinere und das GDTL-Modell eine höhere Temperatur als das Standardmodell aufweist.

Tab. 4.7 Resultierende effektive Temperaturen aufgrund der verschiedenen Modelle

Modell	Volumengemittelt	NEA	Rowlands	GDTL
Temperatur Fall 1 (K)	955	894	945	1009
Temperatur Fall 2 (K)	868	824	860	907
Temperatur Fall 3 (K)	1052	972	1039	1122

Für jede Rechnung wird der Neutronenmultiplikationsfaktor k ausgewertet und mit der jeweiligen Referenzlösung verglichen. Die Reaktivitätsdifferenz $\Delta\rho = (k_x - k_{ref}) / (k_x k_{ref})$ zwischen den Modellen und der Referenzlösung ist in Abb. 4.3 als Funktion des Abbrands illustriert, wobei k_x hierbei die effektiven Multiplikationsfaktoren bezeichnet, die man bei Anwendung der vier unterschiedlichen Temperaturberechnungsverfahren erhält. Wie ersichtlich, weisen die Standardmethode und die Methode nach Rowlands einen sehr ähnlichen Verlauf auf und zeigen eine gute Übereinstimmung mit der Referenzrechnung.

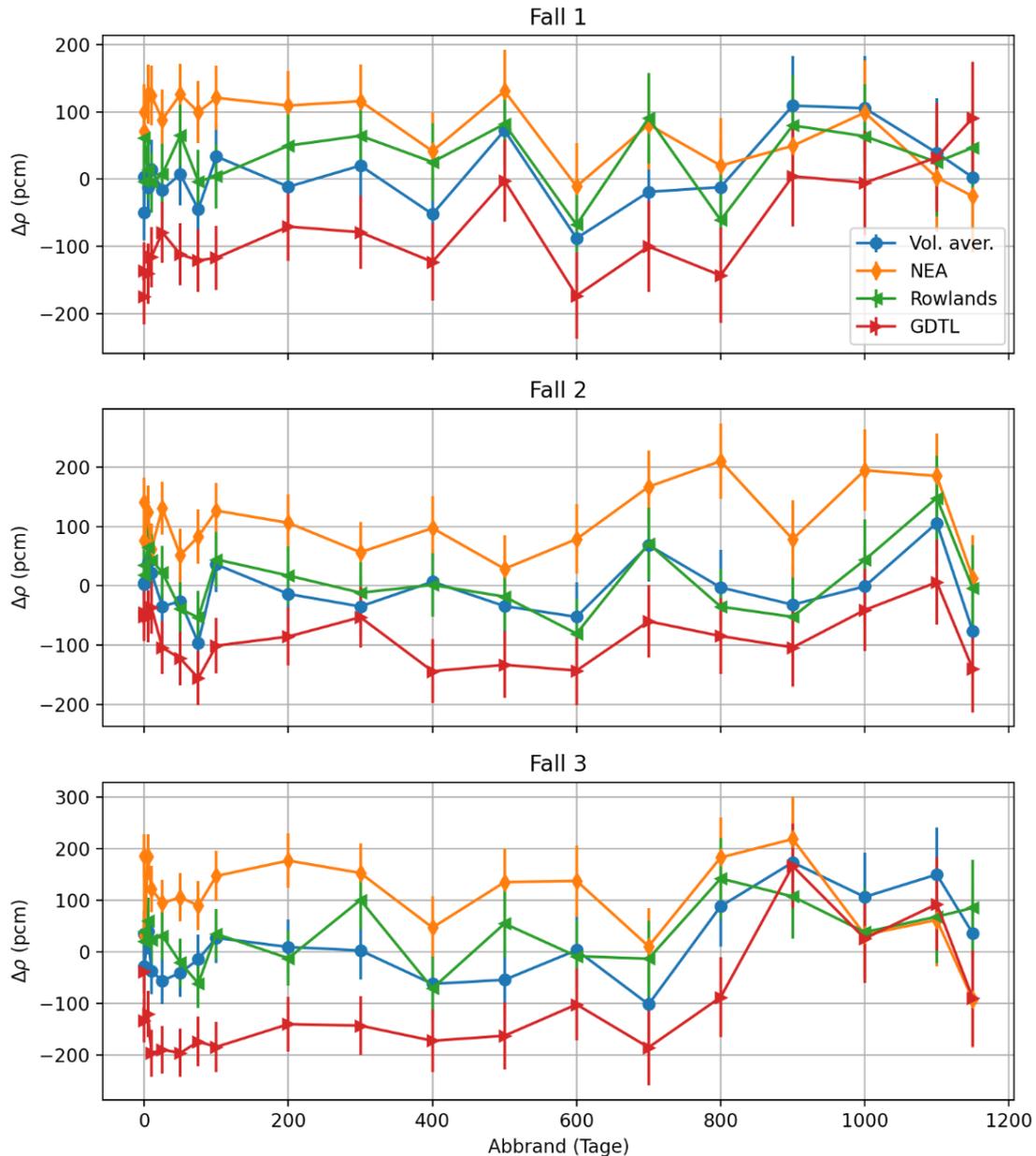


Abb. 4.3 Reaktivitätsdifferenz zwischen den Modellen und der Referenzrechnung als Funktion des Abbrands für die verschiedenen berechneten Fälle: Fall 1 mit 36.36 W/g, Fall 2 mit 27.27 W/g und Fall 3 mit 45.45 W/g

Das NEA-Modells resultiert über einen großen Zeitraum hinweg in einen leicht überschätzen Neutronenmultiplikationsfaktor. Beim GDTL-Modell verhält es sich genau umgekehrt. Der Grund hierfür ist die niedrigere Temperatur beim NEA-Modell, bzw. die höhere Temperatur beim GDTL-Modell. Bei höheren Temperaturen kommt es aufgrund der stärkeren Dopplerverbreiterung der epithermischen Einfangresonanzen v. a. im ^{238}U und z. T. auch ^{240}Pu zu einer erhöhten Neutronenabsorption während des Abbremsprozesses von schnellen zu thermischen Neutronen und folglich zu weniger Spaltprozessen

durch ^{235}U . Für niedrigere Temperaturen tritt der entgegengesetzte Effekt auf und es kommt zu mehr ^{235}U Spaltprozessen. Somit ist die Reaktivität bei niedrigeren Temperaturen zunächst höher. Lediglich für die Fälle 1 und 3 mit einer höheren spezifischen Leistung werden die Unterschiede zwischen den Modellen für sehr hohe Abbrände geringer.

Im Allgemeinen beobachtet man, dass die effektiven Temperaturmodelle für die stationären Probleme, wie sie hier betrachtet wurden, Temperaturunterschiede von ungefähr $\pm 60\text{ K}$ zur Folge hatten. Als Konsequenz beobachtet man, dass die Unterschiede zwischen den verschiedenen effektiven Temperaturmodellen einen geringen Einfluss auf die Reaktivität haben und sich Unterschiede von maximal etwa 200 pcm ergeben. Dabei überschätzt das NEA-Modell den Multiplikationsfaktor gegenüber der Referenzrechnung leicht, während das GDTL-Modell den Multiplikationsfaktor leicht unterschätzt.

Im zweiten Beispiel wird ein MOX-Brennelement betrachtet. Konkret handelt es sich um die Probe BM5' des Brennelements M308 aus dem schweizerischen Reaktor Beznau-I, welche im Rahmen des ARIANE-Programms radiochemisch untersucht wurde. Den genaueren Aufbau des Brennelements sowie die Reaktordaten, Bestrahlungsgeschichte und die materielle Zusammensetzung sind in dem GRS-Bericht GRS-529 /BEH 18b/ beschrieben bzw. referenziert. Für die Nachrechnungen mit MOTIVE wurden dieselben Parameter wie im erwähnten Bericht aufgelistet verwendet. Lediglich die Brennstofftemperatur wurde hier mit den in MOTIVE implementierten Modellen zur Bestimmung der effektiven Brennstofftemperatur berechnet und nicht mittels Eingabeparameter vorgegeben. Wiederum wurden das NEA-, GDTL-Modell und die Standardmethode, die auf einer Volumenmittelung beruht, verwendet. Auf die Methode nach Rowlands wurde hier verzichtet, da diese sehr ähnliche Resultate liefert wie die Standardmethode. Zusätzlich wurde eine Rechnung, in der jeder Brennstab in drei Ringzonen unterteilt ist, durchgeführt. Die Rechnungen wurden mit den experimentellen Werten verglichen. Die Ergebnisse sind in Abb. 4.4 in graphischer Form dargestellt. Wiederum liefern alle effektiven Temperaturmodelle sehr ähnliche Resultate. Lediglich bei dem Plutoniumisotop ^{239}Pu liefert das NEA-Modell im Vergleich mit den experimentellen Daten signifikant bessere Ergebnisse als die anderen effektiven Temperaturmodelle. Hingegen liefert das NEA-Modell bei ^{235}U abweichendere Ergebnisse als das GDTL-Modell.

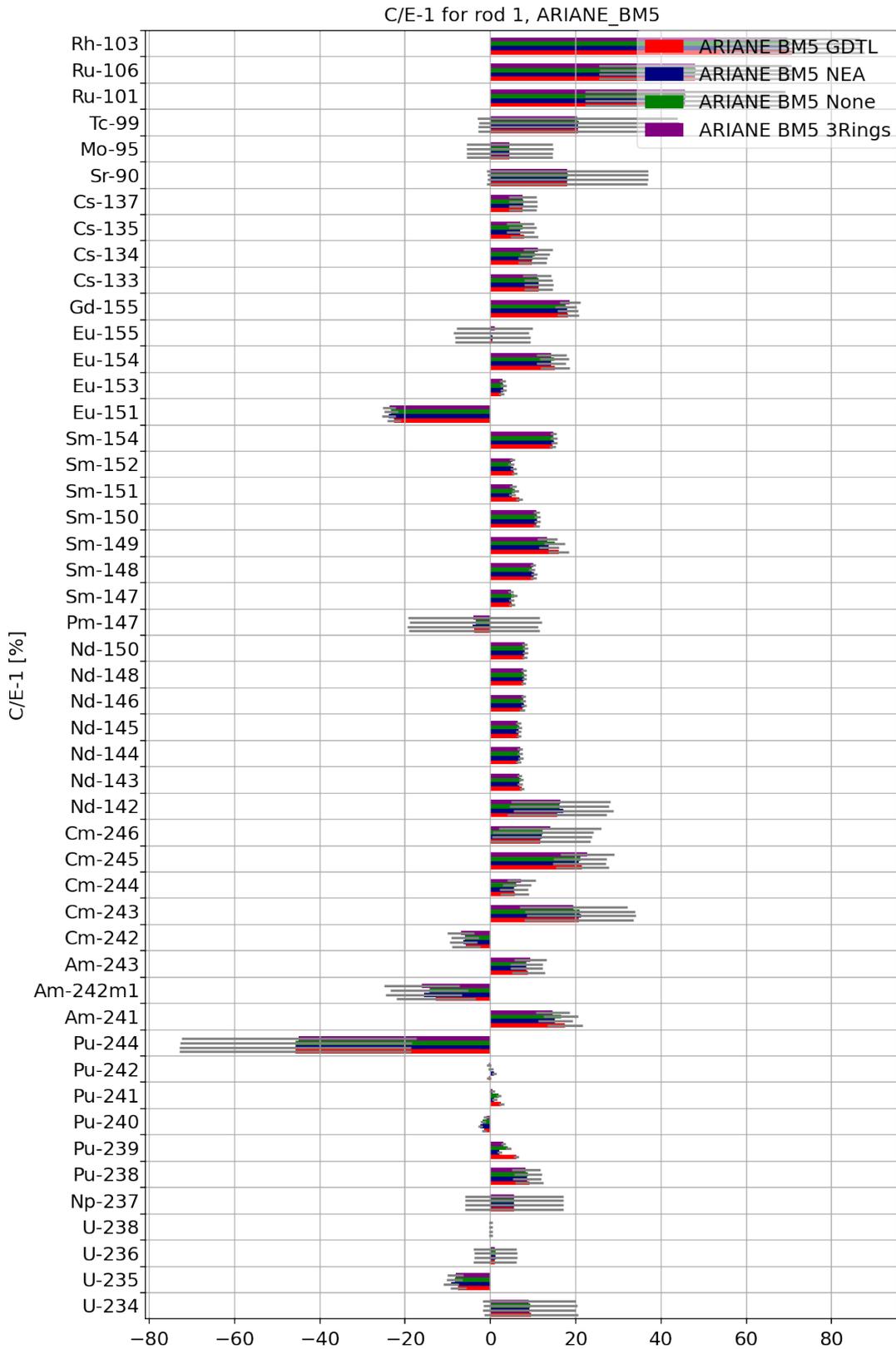


Abb. 4.4 Vergleich zwischen Rechnungen mit verschiedenen Temperaturmodellen und experimentellen Daten dargestellt als C/E-1 in Prozent

Beide Rechenbeispiele zeigen einen geringen Einfluss der verwendeten effektiven Temperaturmodelle sowohl auf den Neutronenmultiplikationsfaktor als auch auf die Nuklid-dichten. Dies lässt sich dadurch erklären, dass hier stationäre Probleme betrachtet werden. Es ist zu erwarten, dass für größere Leistungsschwankungen und folglich auch Temperaturschwankungen oder invertierte Temperaturprofile wie sie typischerweise in Transienten vorkommen, dieser Effekt weitaus stärker ausfallen kann.

4.4 Aktivierungsrechnungen zu neuartigen Hüllrohrmaterialien

In den letzten Jahren wurden neuartige Hüllrohrmaterialien entwickelt, mit dem Ziel eine höhere Widerstandsfähigkeit gegen Störfälle, insbesondere gegen Kühlmittelverlust, zu erreichen. Diese Hüllrohrmaterialien werden auch als *Accident-Tolerant Fuel* (ATF) bezeichnet. Typischerweise bestehen diese Materialien aus Zircaloy mit einer Beimischung, Dotierung oder Beschichtung, oder aus anderen Metallen wie zum Beispiel Eisen, Chrom und Aluminium (FeCrAl). Da diese Zusätze typischerweise einen höheren Neutroneneinfangwirkungsquerschnitt als Zirkonium aufweisen liegt es nahe, die Auswirkungen dieser Modifikationen auf die Eigenschaften nach Bestrahlung, also das Verhalten während des Abbrands näher zu untersuchen.

Erste Arbeiten wurden im Vorhaben RS1564 (MOMENTUS) unternommen. Dort wurde zunächst die grundlegende Eignung der in der GRS verwendeten Codes zur Abbrandrechnung bei ATF-Hüllrohren untersucht. Hierzu wurden die T-NEWT Sequenz aus dem SCALE-Paket und der GRS-Code MOTIVE getestet. Nach Verifizierung der Eignung wurden vergleichende Inventarberechnungen zum Brennstoff durchgeführt.

Gegenstand der Untersuchungen im vorliegenden Vorhaben ist die Eignung von MOTIVE für die Berechnung der Hüllrohraktivierung und darüber hinaus die Frage, ob die Aktivierung und insbesondere ob sich dadurch Änderungen in den chemischen Eigenschaften der Materialien ergeben könnten.

Bereits im MOMENTUS-Vorhaben wurden vier repräsentative Modellsysteme definiert und für Abbrandrechnungen verwendet. Es handelt sich dabei um ein typisches DWR Brennelement in einer 17×17 Stabgeometrie. Für dieses wurden vier Varianten definiert und weiter untersucht. Ein Brennelement mit ausschließlich Zircaloy-4 als Hüllrohrmaterial als Referenz-Brennelement, ein Brennelement mit einem Brennstab mit FeCrAl-Hüllrohr in einer Zircaloy-4 Brennstabmatrix, ein Brennelement mit einem Brennstab mit

Zircaloy-Hüllrohr in einer Matrix aus Brennstäben mit FeCrAl-Hüllrohren und ein Brennelement mit ausschließlich FeCrAl-Hüllrohren. Für die vorliegenden Untersuchungen wurden die letztere Konfiguration und das Zircaloy-4 Referenzbrennelement herangezogen. Bei der FeCrAl-Materialzusammensetzung handelt es sich dabei um das Material Sandvik „Kanthal® D“ (siehe /AUR 21/). Zum Test der Hüllrohraktivierung mit MOTIVE wurden entsprechende Rechnungen durchgeführt und mit den T-NEWT-Ergebnissen aus RS1564 verglichen. In einem zweiten Schritt wurden die mit MOTIVE erzielten Nuklidzusammensetzungen näher analysiert.

Der Vergleich der mit T-NEWT und mit MOTIVE berechneten Nuklidzusammensetzungen für das FeCrAl-Brennelement ist in Abb. 4.5 gezeigt. Es handelt sich dabei um die nach einem Abbrand von 55 GWd/tHM durch Aktivierung errechneten Nuklidzusammensetzung des Hüllrohrmaterials. In Abb. 4.6 ist für die gleichen Rechnungen die relative Abweichung zwischen den Ergebnissen von MOTIVE und T-NEWT gezeigt.

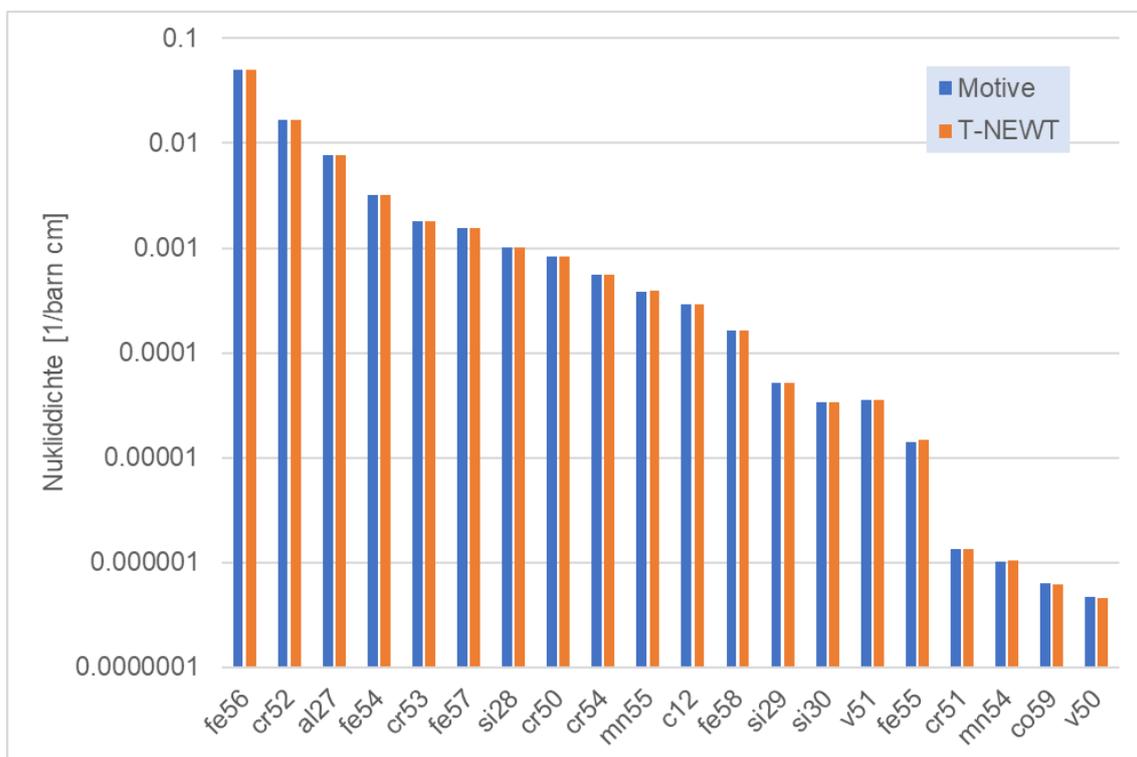


Abb. 4.5 Nuklidkonzentration der häufigsten Bestandteile im FeCrAl-Hüllrohr nach einem BE-Abbrand von 55 GWd/tHM

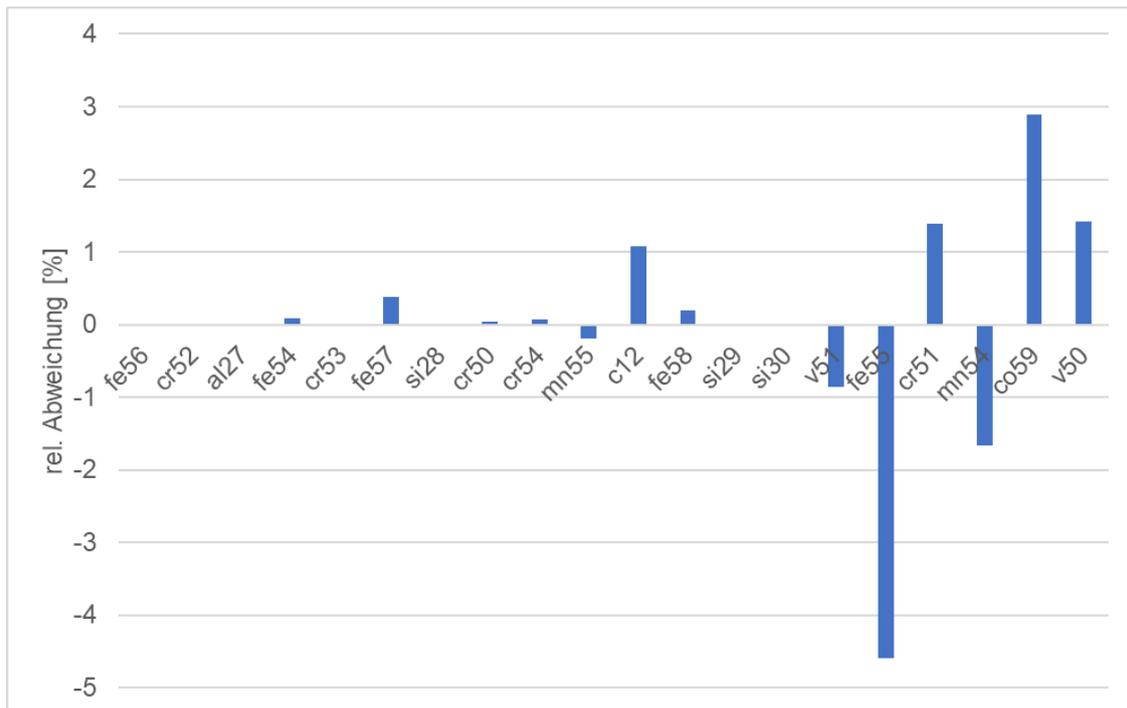


Abb. 4.6 Relative Abweichungen in den Nuklidkonzentrationen zwischen MOTIVE (M) und T-NEWT (T), berechnet als $M/T-1$ in Prozent

Man erkennt, dass beide Rechnungen gut übereinstimmen. Bei den in geringerer Konzentration auftretenden Nukliden sind Abweichungen im Bereich einiger Prozent zu erkennen. Es handelt sich hierbei vornehmlich um Nuklide, die durch die Aktivierung neu entstanden sind und im unbestrahlten Material noch nicht vorhanden waren. Die Abweichungen sind auf Unterschiede in den verwendeten Wirkungsquerschnittsdaten zurückzuführen. Die Differenz bei ^{12}C ist auf eine unterschiedliche Materialdefinition beim unbestrahlten Hüllrohr zurückzuführen. Im Fall der SCALE-Rechnung wurde Kohlenstoff in natürlicher Zusammensetzung verwendet, bei der MOTIVE-Rechnung ausschließlich ^{12}C . Der in der natürlichen Zusammensetzung vorhandene ^{13}C -Anteil wurde dabei dem ^{12}C zugeschlagen, was zu den beobachteten Konzentrationsunterschieden führt. Aufgrund des geringen Einfangquerschnitts bleiben die ursprünglichen Konzentrationen praktisch unverändert. Auch wenn ein direkter Vergleich mit experimentellen Daten im vorliegenden Fall nicht möglich ist, erhöht die Konsistenz zwischen beiden Rechnungen das Vertrauen in die Korrektheit der Analysen und zeigt, dass MOTIVE grundsätzlich für entsprechende Aktivierungsanalysen geeignet ist.

Da durch die Aktivierung der Hüllrohre sich grundsätzlich die elementweise Zusammensetzung des Hüllrohrmaterials ändern kann, ist es denkbar, dass sich die chemischen bzw. material-physikalischen Eigenschaften des Materials ändern könnten. Aufgrund der

im Vergleich zu Zirkonium relativ großen Einfangquerschnitte einiger Isotope von Eisen und Chrom erscheint es angebracht, die entstehende Materialzusammensetzung unter diesem Aspekt zu analysieren. Um diese Frage näher zu untersuchen, wurde das oben betrachtete Brennelementmodell mit ausschließlicher Verwendung von Hüllrohren aus FeCrAl verwendet und bis 80 GWd/tHM abgebrannt, um rein rechnerisch einen möglichst großen Effekt zu erzielen. Dann wurde die entstehende Nuklidzusammensetzung elementweise aufsummiert, um die für chemische Fragestellungen relevante Elementzusammensetzung in Form von Atomen pro cm^3 zu erhalten. Die am häufigsten auftretenden Elemente wurden in Form von relativen Häufigkeiten mit der Zusammensetzung im unbestrahlten Hüllrohr verglichen.

Die Ergebnisse sind in Tab. 4.8 gezeigt. Es ist zu erkennen, dass sich die Elementzusammensetzung durch die Aktivierung nur unwesentlich ändert. Es treten zwar signifikante Änderungen an einzelnen Nukliden auf, dies passiert allerdings im Wesentlichen innerhalb des gleichen Elements, so dass es auf Ebene der Elemente nur sehr geringfügige Verschiebungen gibt. Der jeweilige Anteil der im unbestrahlten Hüllrohr bereits vorhandenen Elemente bleibt fast unverändert. Die größte relative Änderung tritt bei Mangan mit einer etwa dreiprozentigen Abnahme des Anteils an der Gesamtteilchenzahl auf. Die beiden neu auftretenden Elemente mit dem größten Anteil sind Vanadium und Kobalt, deren Anteil an der Gesamtatomzahl aber jeweils deutlich unter einem Promille liegt.

Auch wenn in Legierungen häufig bereits geringe Beimischungen von zusätzlichen chemischen Elementen bzw. geringe Änderungen in der bestehenden Zusammensetzung zu relevanten Änderungen insbesondere der mechanischen Eigenschaften führen kann, sind die hier beobachteten Konzentrationsänderungen so gering, dass ein Einfluss auf physikalische oder chemische Eigenschaften auf den ersten Blick nicht zu erwarten ist. Die Aktivierung des FeCrAl-Hüllrohrs bleibt damit im Wesentlichen relevant in Hinblick auf die entstehende Aktivität. Dies Fragestellung war aber nicht Gegenstand der vorliegenden Untersuchung.

Tab. 4.8 Elementweise Zusammensetzung des FeCrAl-Hüllrohrs vor Bestrahlung und nach einem Brennelementabbrand von 80 GWd/tHM

Elemente Anteil in %	Unbestrahltes Hüllrohr	Hüllrohr nach 80 GWd/tHM Abbrand
C	0,34	0,34
Al	9,21	9,20
Si	1,29	1,30
V	0,00	0,07
Cr	23,40	23,33
Mn	0,47	0,46
Fe	65,28	65,30
Co	0,00	1.4E-03

5 AP3: Numerische Optimierungen, Benutzerfreundlichkeit und Maßnahmen zur Qualitätssicherung

5.1 Arbeiten zur Parallelisierung von MOTIVE

MOTIVE wurde bisher als serieller Programmcode ausgeführt, der jedoch parallelisierte Flusslöser wie OpenMC oder Abbrandlöser wie VENTINA ansteuert. Da im Regelfall für die Flussberechnung und die Abbrandrechnung mehrere CPU-Kerne verwendet werden, ist es zweckmäßig, auch die Datenaufbereitung für diese Simulationscodes und die Nachbearbeitung durch MOTIVE zu parallelisieren. Dies wurde in Form einer Parallelisierung mit OpenMP umgesetzt.

Um die Verwendung von OpenMP in MOTIVE zu vereinfachen wurde der Programmcode überarbeitet. Zu den Maßnahmen gehören die vermehrte Verwendung von konstanten Funktionsparametern und die explizite Deklaration von konstanten Memberfunktionen, sofern keine Klassenvariablen verändert werden. Anhand der Analyse des Rechenaufwands der einzelnen ProgrammROUTINEN wurden die Funktionen zum Aufbereiten von kondensierten Wirkungsquerschnitten als auch die Nachbearbeitung der Ergebnisse parallelisiert. Die resultierenden Laufzeiten für ein rechenintensives Beispiel mit siebzig Materialien, das auf einer unterschiedlichen Anzahl an CPUs (Intel® Xeon® Gold 5220R CPU @ 2.20GHz) gerechnet wurde, ist in Tab. 5.1 aufgelistet. Wie ersichtlich, lässt sich für dieses Beispiel mittels OpenMP-Parallelisierung mit zwanzig Rechenkernen ca. 45 Sekunden pro Abbrandpunkt einsparen. Abhängig von der Anzahl an zu berechnenden Materialien und Abbrandschritten ist somit eine deutliche Verkürzung der Rechenzeit von MOTIVE zu beobachten.

Tab. 5.1 Rechenzeit der Routine zum Kondensieren der Wirkungsquerschnitte in Abhängigkeit der verwendeten CPU-Kerne.

Rechenzeit 1 CPU-Kern (s)	Rechenzeit 2 CPU-Kerne (s)	Rechenzeit 6 CPU-Kerne (s)	Rechenzeit 10 CPU-Kerne (s)	Rechenzeit 20 CPU-Kerne (s)
51,0	28,5	11,8	7,4	4,5

Des Weiteren wurde das Prozessieren der Ausgabedaten optimiert. Das Resultat dieser Optimierung wurde anhand eines Beispiels aufgezeigt. Dieses Beispiel umfasst ein Brennelement mit 7×7 Brennstäben, wobei vier dieser Brennstäbe Gadolinium enthielten. Die Gadolinium-Brennstäbe wurden jeweils in zehn Ringzonen unterteilt, um den Effekt der Selbstabschirmung besser zu modellieren. Die restlichen Brennstäbe waren

Standard-Brennstäbe mit Urandioxid als Brennstoff und einer Zirkoniumlegierung als Hüllmaterial. Diese kamen mit verschiedenen ^{235}U -Anreicherungen im Brennelement vor. Für dieses Beispiel wurden 62 Abbrandschritte berechnet. Für die Ausgabe wurde zusätzlich zur Nuklidichte in jedem Brennstab auch die Nuklidichte über das ganze Brennelement gemittelt ausgegeben, was wiederum einen erhöhten Rechenaufwand bedeutet. Wie in Tab. 5.2 ersichtlich wurde für das Prozessieren der Ausgabedaten für den nicht optimierten, seriellen Programmcode 34 Minuten gemessen. Für den mit OpenMP optimierten Programmcode, der auf zwanzig CPU-Kernen gerechnet wurde, wurden sechs Minuten Rechenzeit gemessen.

Tab. 5.2 Rechenzeit für die Routinen zum Prozessieren der Ausgabedaten in Abhängigkeit der verwendeten CPU-Kerne.

Rechenzeit 1 CPU-Kern (min)	Rechenzeit 4 CPU-Kerne (min)	Rechenzeit 20 CPU-Kerne (min)
34	19	6

Es sei hier angemerkt, dass in der Regel die Fluss- und Abbrandlöser weitaus mehr Rechenzeit beanspruchen als die MOTIVE-Routinen selbst. Dennoch gibt es Anwendungsfälle, wie in diesen Beispielen demonstriert, bei denen die MOTIVE-Routinen einen signifikanten Anteil an der Rechenzeit haben und die Optimierung von MOTIVE mit OpenMP zweckmäßig ist. In diesen Fällen wurde somit eine bessere Ausnutzung der beanspruchten Ressourcen erzielt.

5.2 Grafische Benutzeroberfläche zur Auswertung von MOTIVE-Rechenergebnissen

Um die Auswertung von MOTIVE-Rechenergebnissen, insbesondere von Nachrechnungen von radiochemischen Analysenproben zu erleichtern, wurde eine graphische Benutzeroberfläche (englisch: *Graphical User Interface*, GUI) auf Basis eines Jupyter Notebooks entwickelt. Diese GUI ermöglicht die graphische Darstellung von mit MOTIVE berechneten Nuklidinventaren und deren Abweichung von hinterlegten experimentellen Inventaren bzw. der Abweichungen von verschiedenen Rechenläufen beispielsweise mit unterschiedlichen Bibliotheksdaten. Weiterhin besteht die Möglichkeit, interaktiv Anpassungen an den erzeugten Diagrammen vorzunehmen und weitergehende Analysen durchzuführen.

Anhand des Beispiels der im Vorhaben durchgeführten Nachrechnung der Genkai-1 Daten (siehe /BEH 23/) wird im folgenden die Benutzung der GUI vorgestellt. Zunächst wird eine Konfigurationsdatei aufgerufen, in der unter anderem hinterlegt ist, welche Proben im Plot berücksichtigt werden sollen, in welchem Verzeichnispfad die Rechenergebnisse und die experimentellen Daten abgelegt sind, welcher Abklingschritt aus der Rechnung dargestellt werden soll und welche Nuklide zu berücksichtigen sind. Über eine Menüauswahl kann eine Konfigurationsdatei geladen werden. Daraufhin wird zunächst automatisch eine graphische Darstellung erzeugt. Wie in Abb. 5.1 zu sehen, kann dann durch Anklicken ausgewählt werden, welche Rechenläufe und welche Nuklide dargestellt werden sollen. Über die unter der Grafik befindlichen Bedienflächen kann der Plot interaktiv angepasst werden. Insbesondere kann der Plotbereich verkleinert oder vergrößert werden.

Über das in Abb. 5.2 gezeigte Menü können interaktiv verschiedene Einstellungen vorgenommen werden. Dies betrifft die Achsenskalierung, die Beschriftung der Achsen, die Positionierung der Legende, die Schriftgröße der Textelemente und das Einfügen von Überschriften. Zusätzlich kann die Sprache zwischen Deutsch und Englisch gewechselt werden. Falls entsprechende Daten hinterlegt sind, können auch Fehlerbalken zur Darstellung der experimentellen Unsicherheiten eingeblendet werden.

Die mit der GUI erzeugten graphischen Darstellungen können als PDF-, PNG- oder EPS-Dateien abgespeichert werden und so für die Verwendung in Berichten und anderen Veröffentlichungen bereitgestellt werden. Ebenso kann auch eine Textdatei erstellt werden, in der die relativen Abweichungen zwischen Rechnung und Experiment tabellarisch aufgeführt sind.

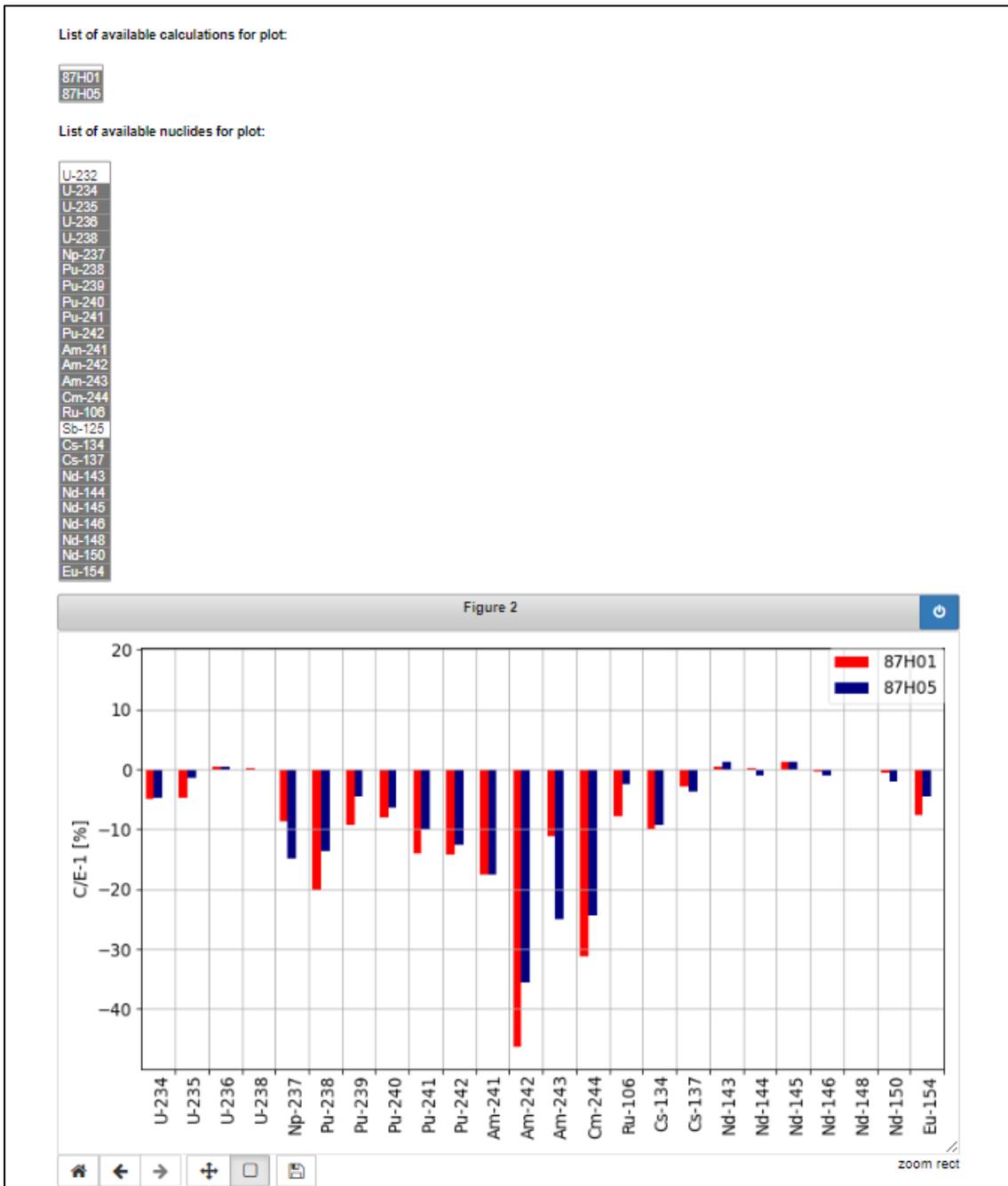


Abb. 5.1 GUI: Proben- und NuklidAuswahl und graphische Darstellung der Ergebnisse

Weiterhin ermöglicht die GUI die Berechnung von Skalierungsfaktoren zur Normierung der Leistungsgeschichte (siehe Abbildung Abb. 5.3.) Dies kann nützlich sein, wenn in einer Rechnung nicht ein bestimmter Abbrandwert in g/tHM erreicht werden soll, sondern die Konzentration eines Abbrandindikators einen festen Wert erreichen soll. Dies kann iterativ durch eine Wiederholung der Rechnung mit einer Leistungsgeschichte erreicht werden, die um den in der GUI berechneten Faktor skaliert wurde. Beispielsweise ist das

Standardvorgehen bei den Validierungsrechnungen für MOTIVE die Normierung auf die ^{148}Nd -Konzentration. Da MOTIVE aktuell nur eine Normierung auf einen brennelementgemittelten Zielabbrand ermöglicht, kann der Skalierungsfaktor für den Probenabbrand analog verwendet werden, um einen vorgegebenen Probenabbrand zu erreichen.

Die im Vorhaben gemachten Erfahrungen zeigen, dass die GUI hilft, die Auswertung von Validierungsrechnungen effizienter zu gestalten. Ein weiterer Ausbau der Funktionalitäten ist für die Zukunft geplant.

Interactive Plot

`gui.showInteractivePlot()`

Language of plot: English German ; font size labels: ; font size legend: ; corner legend (0-10):

Range C/E-1: -

Show title: ; show legend: ; show error bars: ; transpose axes:

Filename for export:

Status Information plot:

Abb. 5.2 GUI: Menü zur interaktiven Anpassung der Graphik

Factors for depletion calculation

In [4]: `gui.showFactorNds()`

Choose nuclide to calculate scaling factor for depletion calculation:

▼

Factors for nuclide Nd-148:
 exp JPNNG1PWR-1_87H01, rod 1: 1.000331
 exp JPNNG1PWR-2_87H05, rod 94: 0.999163

min and max of all cases: 0.999163, 1.000331
 average of all cases: 0.999747

Factors for burnup:
 exp JPNNG1PWR-1_87H01, rod 1: 0.925717
 exp JPNNG1PWR-2_87H05, rod 1: 0.925659

min and max of all cases: 0.925659, 0.925717
 average of all cases: 0.925688

Abb. 5.3 GUI: Berechnung von Skalierungsfaktoren

5.3 Weitergehende Maßnahmen zur Qualitätssicherung

Das Build-System von VENTINA wurde auf CMake /KIT 23/ umgestellt, das sich zu einem *de facto* Standard entwickelt hat. Für MOTIVE wurde ebenfalls eine CMake-Steuerdatei zur Programmerstellung geschrieben. Dadurch ist neben der Konfiguration und Ausführung der Kompilierung auch optional die automatische Generierung der API-Konfiguration mit Doxygen möglich. Mit einem Skript können die externen Bibliotheken, von denen MOTIVE abhängt (HDF5, Boost, H5PP, OpenBLAS), in definierten Versionen heruntergeladen, kompiliert und installiert werden.

6 Zusammenfassung

Der vorliegende Bericht gibt die Ergebnisse des Eigenforschungsvorhabens RS1582 MODENA wieder. Ziel dieses Vorhabens war die Umsetzung von Verbesserungen und Erweiterungen des Abbrandprogrammsystems MOTIVE und des Inventarberechnungsprogramms VENTINA sowie deren Einbindung in andere Programmsysteme der GRS. Weiterhin wurden Verbesserungen bei der Bereitstellung der notwendigen nuklearen Datenbasis durchgeführt. Darüber hinaus waren weitere Ziele die Erweiterung der Validierungsdatenbasis durch die Nachrechnung von weiteren radiochemischen Analysenproben und von Experimenten zur Zerfallsleistung von bestrahlten Brennelementen.

Durch die Implementierung einer hybriden Berechnungsoption für die Reaktionsraten zur Nuklidumwandlung konnte die bisher fehlende Berücksichtigung der sogenannten nicht-aufgelösten Resonanzen in den Wirkungsquerschnittsdaten für relevante Nuklide erreicht werden. Durch repräsentative Vergleichsrechnungen konnte gezeigt werden, dass der Einfluss der nicht-aufgelösten Resonanzen auf die Berechnung des Nuklidinventars für praktische Anwendungen im Allgemeinen klein ist. Hierzu wurde unter anderem ein Benchmark der OECD/NEA für eine Abbrandrechnung an einem Brennelement für einen Natrium-gekühlten schnellen Reaktor nachgerechnet. Zur Vorbereitung dieser Rechnung wurden ein Brennelementmodell sowie angepasste Daten für Neutronenreaktionen und Spaltproduktausbeuten in MOTIVE integriert. Mit dieser Nachrechnung wurde erstmals die Eignung von MOTIVE für Systeme mit schnellem Neutronenspektrum demonstriert.

Im Bereich der Inventarberechnung wurden dedizierte Zerfalls- und Aktivierungsmodi in das Programm integriert. Diese verbessern einerseits die numerischen Fähigkeiten von VENTINA in diesen Anwendungsbereichen und vereinfachen außerdem die Bedienung in Hinblick auf die Eingabeschnittstelle. Weiterhin wurde eine Erweiterung der CRAM-Methodik in Hinblick auf eine Lösung der inhomogenen Batemangleichung, d. h. der Inventarberechnung mit externer Quelle, umgesetzt. Dies wird künftig bei der Inventarberechnung von Systemen helfen, bei denen ein Zu- oder Abfluss von Nukliden aus dem System besteht. Dies ist zum Beispiel bei Salzschnmelzereaktoren der Fall, bei denen die Spaltprodukte aus der Brennstofflösung während des Betriebs absepariert werden. Für künftige Anwendungen im Bereich der störungstheoretischen Unsicherheitsanalyse wurde außerdem ein Verfahren zur Lösung der adjungierten Batemangleichung realisiert.

Für MOTIVE wurden Modelle für die Siedewasserreaktor-Brennelementtypen SVEA64, SVEA-96 und SVEA-100 sowie für ein Brennelement für einen schnellen Natrium-gekühlten Reaktor entwickelt und integriert.

Zudem wurden Untersuchungen zur verbesserten Integration von VENTINA in den Kernsimulator KMACS der GRS zur Wirkungsquerschnittskorrektur auf Basis einer Nuklidinventarberechnung durchgeführt. Dies betrifft die Berücksichtigung von abbrennbaren Neutronenabsorbern und zur verbesserten Berechnung von Brennelementen, die nach einer Standzeit von einem oder mehreren Zyklen im Lagerbecken erneut in den Reaktorkern eingesetzt werden. Weiterhin wurden unterstützende Arbeiten für die im Vorhaben RS1574 vorgesehene Integration von VENTINA in die GRS-Programme ATHLET-CD und COCOSYS durchgeführt.

Das Werkzeug NuGra zur Zerfallsdaten- und Nuklidkettenprozessierung wurde für das Auslesen zusätzlicher Reaktionskanäle und in Hinblick auf eine konsistentere Datenprozessierung erweitert und verbessert.

Zur Erweiterung der Validierungsdatenbasis wurden 51 zusätzliche radiochemische Analyseproben nachgerechnet. Von diesen sind sieben Druckwasserreaktor-(DWR)-Brennelementproben und 44 Siedewasserreaktor-(SWR)-Brennelementproben, so dass das zuvor bestehende Ungleichgewicht in Hinblick auf nachgerechnete DWR und SWR-Proben verringert werden konnte. Zusätzlich wurden erstmalig auch experimentelle Daten zur Zerfallsleistung von bestrahlten Brennelementen zur Validierung herangezogen. Hierzu wurden insgesamt 154 (31 DWR, 123 SWR) kalorimetrische Messungen an ganzen Brennelementen nachgerechnet. Es konnte gezeigt werden, dass MOTIVE die gemessenen Zerfallsleistungen mit einer Abweichung bis auf wenige Prozent genau berechnen kann und damit im Bereich anderer etablierter Rechenverfahren liegt.

Neben den Entwicklungsarbeiten und Validierungsrechnungen wurden zusätzlich Untersuchungen zur Aktivierung von neuartigen Hüllrohrmaterialien durchgeführt und Untersuchungen zum Einfluss verschiedener effektiver Brennstofftemperaturmodelle auf die Inventarberechnung durchgeführt.

Weiterhin wurden verschiedene Maßnahmen zur Qualitätssicherung bei der Codeentwicklung und zur Benutzerfreundlichkeit umgesetzt. Hier sind insbesondere die Erstellung einer graphischen Benutzeroberfläche für die Auswertung von Rechenergebnissen und Arbeiten zur Parallelisierung der Datenprozessierung in MOTIVE zu betonen.

Literaturverzeichnis

- /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 21/ Aures, A., Behler, M., Berner, N., Bousquet, J., Eisenstecken, T., Hannstein, V., Henry, R., Kilger, R., Küntzel, M., Périn, Y., Velkov, K., Zilly, M., Zwermann, W.: MOMENTUS - Moderne Methoden zu Neutronentransport und Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit, GRS-, Bd. 645, Nr. 645, 235 S., ISBN 978-3-949088-34-6, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Köln, Garching b. München, Berlin, Braunschweig, Juni 2021.
- /AUS 22/ Austregesilo, H., Schöffel, P., von der Cron, D., Weyermann, F., Wielenberg, A., Wong, K. W.: ATHLET 3.3.1 User's Manual, GRS-P-1/Vol. 1 Rev. 10. Hrsg.: Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, Oktober 2022.
- /BAH 05/ Bahadir, T., Lindahl, S.-Ö., Palmtag, S. P.: SIMULATE-4 Multigroup Nodal Code with Microscopic Depletion Model. In: American Nuclear Society (ANS) (Hrsg.): Mathematics and Computation, Supercomputing, Reactor Physics and Nuclear and Biological Applications. M&C 2005, Avignon, 12. - 15. September 2005, 2005.
- /BAI 21/ Bailey, G., Foster, D., Kanth, P., Gilbert, M.: The FISPACT-II User Manual. UKAEA, CCFE-RE(21)02, 260 S., Oktober 2021.
- /BEH 18a/ Behler, M., Bostelmann, F., Hannstein, V., Küntzel, M., Sommer, F., Zwermann, W.: Weiterentwicklungen moderner Verfahren im Bereich Abbrandberechnung. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-528, ISBN 978-3-947685-13-4: Garching, September 2018.

- /BEH 18b/ Behler, M., Hannstein, V., Sommer, F.: Nachrechnung radiochemischer Analyseproben mit dem Abbrandprogramm MOTIVE. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-529, 272 S., ISBN 978-3-947685-14-1, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, 2018.
- /BEH 23/ Behler, M., Hannstein, V., Henry, R., Sommer, F.: Nachrechnung experimenteller Daten zur erweiterten Validierung des Abbrandprogramms MOTIVE. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-711, ISBN 978-3-910548-02-2, 2023.
- /BIL 15/ Bilodid, Y., Kotlyar, D., Shwageraus, E., Fridman, E., Kliem, S.: Accounting For Spectral History Effects With Improved Microscopic Depletion In Dyn3d Code. In: AER Symposium. 2015.
- /BIL 16/ Bilodid, Y., Kotlyar, D., Shwageraus, E., Fridman, E., Kliem, S.: Hybrid microscopic depletion model in nodal code DYN3D. *Annals of Nuclear Energy*, Bd. 92, S. 397–406, DOI 10.1016/j.anucene.2016.02.012, 2016.
- /BOS 22/ Bostelmann, F., Wiarda, D., Arbanas, G., Wieselquist, W. A.: Extension of SCALE/Sampler's sensitivity analysis. *Annals of Nuclear Energy*, Bd. 165, S. 108641, DOI 10.1016/j.anucene.2021.108641, 2022.
- /BUI 18/ Buiron, L., Rimpault, G.: NEA SFR Subassembly Benchmark: Sensitivity/Uncertainty Propagation With Depletion. In: ANS (Hrsg.): Best Estimate Plus Uncertainty International Conference, BEPU. American Nuclear Society (ANS), Lucca, 13. - 19. Mai 2018, 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.
- /GAN 75/ Gandini, A.: Time-dependent generalized perturbation methods for burn-up analysis. No. CNEN-RT/FI--75-4. Comitato Nazionale per l'Energia Nucleare, 1975.

- /GAU 17/ Gauld, I. C., Williams, M. L., Michel-Sendis, F., Martinez, J. S.: Integral nuclear data validation using experimental spent nuclear fuel compositions. *Nuclear Engineering and Technology*, Bd. 49, Nr. 6, S. 1226–1233, DOI 10.1016/j.net.2017.07.002, 2017.
- /GEO 13/ George, N. M., Terrani, K. A., Powers, J. J.: Neutronic analysis of candidate accident-tolerant iron alloy cladding concepts. 21 S., DOI 10.2172/1080251, 2013.
- /GOL 03/ Goltsev, A. O., Davidenko, V. D., Tsibulsky, V. F., Lekomtsev, A. A.: The influence of a non-uniform radial temperature distribution in the fuel on the results of calculation of transients. *Annals of Nuclear Energy*, Bd. 30, Nr. 11, S. 1135–1153, DOI 10.1016/S0306-4549(03)00042-2, 2003.
- /GOO 12/ Goorley, T., James, M., Booth, T., Brown, F., Bull, J., Cox, L. J., Durkee, J., Elson, J., Fensin, M., Forster, R. A., Hendricks, J., Hughes, H. G., Johns, R., Kiedrowski, B., et al.: Initial MCNP6 Release Overview. *Nuclear Technology*, Bd. 180, Nr. 3, S. 298–315, DOI 10.13182/NT11-135, 2012.
- /GRA 10/ Grandi, G., Smith, K., Xu, Z., Rhodes, J.: Effect of CASMO-5 cross-section data and Doppler temperature definitions on LWR reactivity initiated accidents. *Advances in Reactor Physics to Power the Nuclear Renaissance (PHYSOR 2010)*, 2010.
- /HAN 17/ Hannstein, V., Behler, M., Sommer, F.: MOTIVE - A New Modular Burn-up Code. In: *American Nuclear Society (ANS): International Conference on Mathematics & Computational Methods Applied to Nuclear Science & Engineering. M&C 2017, Jeju, Korea, 16. - 20. April 2017*, ISBN 978-1-5108-5645-5, Curran Associates, Inc.: Red Hook, NY, USA, 2017.
- /HES 95/ Hesse, U., Gewehr, K.: GRSAKTIV; Ein Programm zur Berechnung der Aktivierung von Brennelement- und Core-Bauteilen. *Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH, GRS-A-2249*: Garching, 1995.

- /ISO 15/ Isotalo, A. E., Wieselquist, W. A.: A method for including external feed in depletion calculations with CRAM and implementation into ORIGEN. *Annals of Nuclear Energy*, Bd. 85, S. 68–77, DOI 10.1016/j.anucene.2015.04.037, 2015.
- /KIL 22/ Kilger, R., Boldt, F., Kolbasseff, A., Sappl, J.: ACTOFAN Sicherheitstechnische Entwicklungen und Analysen zu "Accident-tolerant Fuels". GRS -, Bd. 692, ISBN 978-3-949088-83-4, 2022.
- /KIT 23/ Kitware: CMake Web page. Erreichbar unter <https://cmake.org/>, abgerufen am 2. Februar 2023.
- /KOZ 07/ Kozlowski, T.: PWR MOX/UO₂ Core Transient Benchmark, Final Report, NEA - NSC - WPRS. Nr. NEA/NSC/DOC(2006)20, 2007.
- /LAN 78/ Langenbuch, S., Maurer, W., Werner, W.: QUABOX/CUBBOX - Version 02, Ein Grobgitterverfahren zur Lösung der Neutronendiffusionsgleichungen, Programmbeschreibung. GRS-A-, Nr. 160, Juli 1978.
- /MAL 18/ Mala, P.: Pin-by-Pin Treatment of LWR Cores with Cross Section Equivalence Procedures and Higher-Order Transport Methods. PhD Thesis, DOI 10.5075/epfl-thesis-8913, EPFL: Lausanne, 2018.
- /MOS 15/ Mosher, S. W., Johnson, S. R., Bevill, A. M., Ibrahim, A. M., Daily, C. R., Evans, T. M., Wagner, J. C., Johnson, J. O., Grove, R. E.: ADVANTG—An Automated Variance Reduction Parameter Generator. Oak Ridge National Lab. (ORNL), Oak Ridge, TN (United States), ORNL/TM-2013/416, 109 S., August 2015.
- /PUS 10/ Pusa, M., Leppänen, J.: Computing the Matrix Exponential in Burnup Calculations. *Nuclear Science and Engineering*, Bd. 164, Nr. 2, S. 140–150, DOI 10.13182/NSE09-14, 2010.
- /REA 17/ Rearden, B. T., Jessee, M. A. (Hrsg.): SCALE Code System. Oak Ridge National Laboratory (ORNL), ORNL/TM-2005/39, Version 6.2.2, 2747 S.: Oak Ridge, Tennessee, Februar 2017.

- /ROM 15/ Romano, P. K., Horelik, N. E., Herman, B. R., Nelson, A. G., Forget, B., Smith, K.: OpenMC, A state-of-the-art Monte Carlo code for research and development. *Annals of Nuclear Energy*, Bd. 82, S. 90–97, DOI 10.1016/j.anucene.2014.07.048, 2015.
- /ROW 62/ Rowlands, G.: Resonance absorption and non-uniform temperature distributions. *Journal of Nuclear Energy. Parts A/B. Reactor Science and Technology*, Bd. 16, Nr. 4, S. 235–236, DOI 10.1016/0368-3230(62)90294-X, 1962.
- /SKB 06/ Svensk Kärnbränslehantering AB: Measurements of decay heat in spent nuclear fuel at the Swedish interim storage facility, Clab. SKB, SKB Rapport R-05-62, 253 S., Dezember 2006.
- /STR 82/ Strickler, H. R., Doman, J. W.: In-plant test measurements for spent-fuel storage at Morris Operation. Volume 3. Fuel bundle heat generation rates. General Electric Co., San Jose, CA (USA). Nuclear Fuel and Services Div, NEDG-24922-3, DOI 10.2172/5365095, 1982.
- /SUB 17/ Sublet, J.-C., Eastwood, J. W., Morgan, J. G., Gilbert, M. R., Fleming, M., Arter, W.: FISPACT-II: An Advanced Simulation System for Activation, Transmutation and Material Modelling. *Nuclear Data Sheets*, Bd. 139, S. 77–137, DOI 10.1016/j.nds.2017.01.002, 2017.
- /TOM 13/ Tomatis, D.: Heat conduction in nuclear fuel by the Kirchhoff transformation. *Annals of Nuclear Energy*, Bd. 57, S. 100–105, DOI 10.1016/j.anucene.2013.01.048, 2013.
- /TÖR 11/ Töre, C.: Evaluation of Forsmark F3F6 Experiments, A contribution to Expert Group on Assay Data for Spent Nuclear Fuel, Draft Version. SFCOMPO PROJECT, 62 S., September 2011.
- /WEI 90/ Weiss, Z.: A Consistent Definition Of The Number Density Of Pseudo-Isotopes. *Annals of Nuclear Energy*, Bd. 17, Nr. 3, S. 153–156, 1990.

- /WER 17/ Werner, C. J. (Hrsg.): MCNP, User's Manual Code Version 6.2. Los Alamos National Laboratory (LANL), La-UR-17-29981, 746 S.: Los Alamos, NM, USA, 2017.
- /WIE 20/ Wieselquist, W. A., Lefebvre, R. A., Jessee, M. A. (Hrsg.): SCALE Code System, ORNL/TM-2005/39, Version 6.2.4. Oak Ridge National Laboratory (ORNL): Oak Ridge, TN, USA, 2020.
- /WIL 78/ Williams, M. L., Weisbin, C. R.: Sensitivity and uncertainty analysis for functionals of the time-dependent nuclide density field. [ORIGEN-A]. DOI 10.2172/5010833, 1978.
- /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. und Périn, Y.: KMACS Validation Report, Version 1.0. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Köln, 2018.
- /ZIL 19/ 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, Bd. 448, Nr. 1-3, S. 374–379, DOI 10.1016/j.jnucmat.2013.12.005, 2014.
- /ZWE 14/ Zwermann, W., Aures, A., Gallner, L., Hannstein, V., Krzykacz-Hausmann, B., Velkov, K., Martínez, J. S.: Nuclear Data Uncertainty And Sensitivity Analysis With Xsusa For Fuel Assembly Depletion Calculations. Nuclear Engineering and Technology, Bd. 46, Nr. 3, S. 343–352, DOI 10.5516/NET.01.2014.711, 2014.

/ZWI 08/ Zwicky, H.-U.: ISOTOPIC DATA OF SAMPLE F3F6 FROM A ROD
IRRADIATED IN THE SWEDISH BOILING WATER REACTOR
FORSMARK 3. Zwicky Consulting GmbH, ZC-08/001, 37 S., 25. September 2008.

Abbildungsverzeichnis

Abb. 3.1	Abweichung im Nuklidinventar für ausgewählte Spaltprodukte zwischen Rechnungen mit Tally-basierter und Multigruppen-basierter Reaktionsratenberechnung.....	12
Abb. 3.2	Abweichung im Nuklidinventar für ausgewählte Aktinoide zwischen Rechnungen mit Tally-basierter und Multigruppen-basierter Reaktionsratenberechnung.....	13
Abb. 3.3	Abweichung zwischen Rechnung und Experiment für die vier durchgeführten Rechnungen	14
Abb. 3.4	MOX3600-Brennelement mit oxydischem Brennstoff.....	15
Abb. 3.5	Verlauf des Multiplikationsfaktors über die Bestrahlungsdauer für die Referenzrechnungen mit Serpent und MCNP und für die neu durchgeführten MOTIVE-Rechnungen.....	17
Abb. 3.6	Relative Abweichungen im Nuklidinventar im Vergleich zum Mittelwert der MOTIVE-Rechnungen	17
Abb. 3.7	Relative Abweichung der Spalt- und Absorptionsraten für ²³⁹ Pu und ²⁴¹ Pu mit und ohne Berücksichtigung der unaufgelösten Resonanzen	18
Abb. 3.8	Relativer Fehler zwischen der numerischen und der analytischen Lösung in Abhängigkeit der Zeit für die beiden betrachteten Nuklide	22
Abb. 3.9	Reaktivitätsdifferenz zwischen Q/C-Rechnung und SCALE/T-NEWT Referenzrechnung ohne (blau) und mit (orange) durchgeführter Wirkungsquerschnittskorrektur für Rechnung mit vom nominellen Zustand abweichender Moderatorichte	27
Abb. 3.10	Reaktivitätsdifferenz zwischen Q/C-Rechnung und SCALE/T-NEWT Referenzrechnung ohne (blau) und mit (orange) durchgeführter Wirkungsquerschnittskorrektur für Rechnung mit vom nominellen Zustand abweichender Brennstofftemperatur	28
Abb. 3.11	Reaktivitätsdifferenz zwischen Q/C-Rechnung und SCALE/T-NEWT Referenzrechnung ohne (blau) und mit (orange) durchgeführter Wirkungsquerschnittskorrektur für Rechnung mit vierjähriger Stillstandzeit	29
Abb. 3.12	Kernlayout und Abbrandwerte zum Zyklusbeginn	30

Abb. 3.13	Borkurve für verschiedene Rechnungen: KMACS-Rechnung ohne XS-Korrektur (schwarz), KMACS-Rechnung mit XS-Korrektur (grün) und Referenzrechnung mit einem kommerziellen Kernsimulator (blau)	31
Abb. 3.14	Relative Abweichung der radialen Leistungsverteilung nach 210 Volllasttagen (linke Spalte) und nach 383 Volllasttagen (rechte Spalte) für die unkorrigierte Rechnung (oben) und die wirkungsquerschnittskorrigierte Rechnung (unten)	32
Abb. 3.15	Visualisierung des für Testzwecke der Aktivierungsrechnungen eingesetzten Modellsystems	38
Abb. 3.16	Anwendung der adjungierten Lösung zur Analyse der Pfadbeiträge	47
Abb. 4.1	KENO-VI Geometrie des SVEA-100 Brennelements, erzeugt mit MOTIVE v1.0.6	50
Abb. 4.2	KENO-VI Geometrie des SVEA-96 Brennelements, erzeugt mit MOTIVE v1.0.6	52
Abb. 4.3	Reaktivitätsdifferenz zwischen den Modellen und der Referenzrechnung als Funktion des Abbrands für die verschiedenen berechneten Fälle: Fall 1 mit 36.36 W/g, Fall 2 mit 27.27 W/g und Fall 3 mit 45.45 W/g	60
Abb. 4.4	Vergleich zwischen Rechnungen mit verschiedenen Temperaturmodellen und experimentellen Daten dargestellt als C/E-1 in Prozent	62
Abb. 4.5	Nuklidkonzentration der häufigsten Bestandteile im FeCrAl-Hüllrohr nach einem BE-Abbrand von 55 GWd/tHM	64
Abb. 4.6	Relative Abweichungen in den Nuklidkonzentrationen zwischen MOTIVE (M) und T-NEWT (T), berechnet als M/T-1 in Prozent	65
Abb. 5.1	GUI: Proben- und Nuklidauswahl und graphische Darstellung der Ergebnisse	72
Abb. 5.2	GUI: Menü zur interaktiven Anpassung der Graphik	73
Abb. 5.3	GUI: Berechnung von Skalierungsfaktoren	73

Tabellenverzeichnis

Tab. 3.1	Vergleich der in FISPACT-II und der direkt in MCNP berechneten Eingruppen-Wirkungsquerschnitte für verschieden Materialzonen.....	40
Tab. 4.1	SVEA-100 Parameter mit generischen Standardwerten.....	51
Tab. 4.2	SVEA-96 Parameter mit generischen Standardwerten	53
Tab. 4.3	Zusammenstellung der im Vorhaben nachgerechneten Nachbestrahlungsanalyseproben.....	54
Tab. 4.4	Zusammenstellung der nachgerechneten kalorimetrischen Messungen an bestrahlten DWR- und SWR-Brennelementen	55
Tab. 4.5	Koeffizienten für effektive Temperaturberechnung.....	56
Tab. 4.6	Temperaturverteilung in Kelvin für verschiedene Zonen innerhalb der Brennstoffzelle für einige ausgewählte Abbrand-Zeitpunkte für Fall 1	58
Tab. 4.7	Resultierende effektive Temperaturen aufgrund der verschiedenen Modelle.....	59
Tab. 4.8	Elementweise Zusammensetzung des FeCrAl-Hüllrohrs vor Bestrahlung und nach einem Brennelementabbrand von 80 GWd/tHM.....	67
Tab. 5.1	Rechenzeit der Routine zum Kondensieren der Wirkungsquerschnitte in Abhängigkeit der verwendeten CPU-Kerne.....	69
Tab. 5.2	Rechenzeit für die Routinen zum Prozessieren der Ausgabedaten in Abhängigkeit der verwendeten CPU-Kerne.....	70

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

Schwertnergasse 1
50667 Köln

Telefon +49 221 2068-0

Telefax +49 221 2068-888

Boltzmannstraße 14

85748 Garching b. München

Telefon +49 89 32004-0

Telefax +49 89 32004-300

Kurfürstendamm 200

10719 Berlin

Telefon +49 30 88589-0

Telefax +49 30 88589-111

Theodor-Heuss-Straße 4

38122 Braunschweig

Telefon +49 531 8012-0

Telefax +49 531 8012-200

www.grs.de