

MOUSSAKA

**Moderne
Unsicherheits- und
Sensitivitätsanalysen
sowie Kernreaktor-
analysen**

MOUSSAKA

Moderne
Unsicherheits- und
Sensitivitätsanalysen
sowie Kernreaktor-
analysen

Alexander Aures
Jérémy Bousquet
Thomas Eisenstecken
Ekaterina Elts
Tanja Eraerds
Romain Henry
Sören Johst
Robert Kilger
Matthias Küntzel
Silvia Io Muzio
Yann Périn
Jonathan Zert
Winfried Zwermann

Juli 2025

Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrunde liegende Eigenforschungsvorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Umwelt, Klimaschutz, Naturschutz und nukleare Sicherheit (BMUKN) unter dem Förderkennzeichen RS1601 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 BMUKN übereinstimmen.

Deskriptoren

Kernsimulator, Nukleare Datenbibliotheken, Reaktorphysikalische Berechnungen, Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen

Kurzfassung

Im BMUKN-Forschungsvorhaben RS1601 „MOUSSAKA – Moderne Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen sowie Kernreaktoranalysen“ wurden Neu- und Weiterentwicklungen, Validierungen und Anwendungen von reaktorphysikalischen Berechnungsverfahren sowie von Methoden zu Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen bezüglich nuklearer Wirkungsquerschnittsdaten durchgeführt. Das Vorhaben war thematisch dreigeteilt.

Im ersten Teil wurden zur Verbesserung der Kernsimulator-Rechnungen von Druckwasserreaktoren westlicher und russischer Bauart sowie von Leichtwasser-modierten kleinen modularen Reaktoren Arbeiten an den Modulen zur Vorausrechnung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten, zur Durchführung der gekoppelten Ganzkernrechnungen sowie zur Ergebnisspeicherung und -visualisierung des Kernsimulators KMACS der GRS durchgeführt. Diese Arbeiten wurden mittels Nachrechnungen von Nulllast-Heiß Zuständen, Betriebszyklen und verschiedenen Anfahrtests verifiziert. Zudem wurde die Ankopplung und Anwendung des GRS-eigenen Neutronenkinetikcodes FENNECS zur Durchführung der Ganzkernrechnungen in KMACS erprobt.

Im zweiten Teil wurden nukleare Daten sowie entsprechende Methoden zu Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen behandelt. Zunächst wurden die nuklearen Datenbibliotheken ENDF/B-VII.1, ENDF/B-VIII.0, JEFF-3.1.2, JEFF-3.2 und JEFF-3.3 für Neutronentransportrechnungen von Reaktorsystemen mit einem thermischen Neutronenspektrum, z. B. Leichtwasserreaktoren, sowie von Reaktorsystemen mit einem schnellen Neutronenspektrum, z. B. Flüssigmetall-gekühlte Reaktoren, erprobt.

Das GRS-eigene Programm XSUSA für stichprobenbasierte Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen wurde um die Variation von kontinuierlichen Wirkungsquerschnittsdaten erweitert, um für Ergebnisse von Monte-Carlo-Neutronentransportrechnungen Unsicherheiten aufgrund der Unsicherheiten in den nuklearen Daten zu ermitteln. Für kritische Experimente wurden mittels direkter Variation Sensitivitätsprofile sowie mittels stichprobenbasierter Variation Unsicherheiten ermittelt und anhand der Ergebnisse von TSUNAMI (SCALE 6.2) und der Serpent-eigenen Methode zur Sensitivitätsanalyse verifiziert.

XSUSA wurde um das Verfahren der linearen Regressionsanalyse erweitert. Die Anwendung wurde an generischen Druckwasserreaktormodellen der Generation-III erprobt. Resultierende Unsicherheiten und Sensitivitäten aufgrund der Unsicherheiten in

den nuklearen Daten stimmten mit den Ergebnissen von TSUNAMI, das auf deterministischer linearer Störungstheorie beruht, überein.

Für das prompt überkritische Reaktivitätsexperiment *Test 43* des Forschungsreaktors SPERT III sowie für eine Steuerstabverfahrtransiente in einem natriumgekühlten, mit metallischem Brennstoff beladenen Benchmark-Kern wurde der Einfluss der Unsicherheiten in den nuklearen Daten mittels der stichprobenbasierten Variation nuklearer Daten durch XSUSA auf die jeweiligen Verläufe der Reaktivitätstransienten ermittelt. Die statistische Analyse der zeitabhängigen Ergebnisgrößen erfolgte mit dem Programm SUSA der GRS.

Da für Reaktorsysteme mit Brennstoff in doppelt heterogener Anordnung, wie gasgekühlte Hochtemperaturreaktoren, die Anwendung von TSUNAMI zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse nicht möglich ist, SCALE 6.2 jedoch alle notwendigen Module zur Resonanzbehandlung solcher Brennstoffanordnungen enthält, wurde eine Sequenz bestehend aus Einzelaufrufen der notwendigen Module aufgesetzt. Mit dieser wurden Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen für kritische Benchmark-Anordnungen durchgeführt und mit Ergebnissen von MCNP 6 verifiziert.

Im dritten Teil wurde die Eignung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten, die jeweils für Teilregionen eines Serpent-Ganzkernmodells ermittelt wurden, für den Einsatz in stationären und transienten Ganzkern-Diffusionsrechnungen mit DYN3D untersucht. Geeignete Diskontinuitätsfaktoren wurden auf Basis einer vereinfachten Implementierung der Methode zur Lösung der Diffusionsgleichung in DYN3D ermittelt, um gute Ergebnisse für den Neutronenmultiplikationsfaktor und für die Leistungsverteilung zu erhalten. Für einen Vergleich wurden Rechnungen mit Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten aus üblichen unendlichen Gittermodellen durchgeführt. In stationären Diffusionsrechnungen des C5G7-TD-Benchmarks und des TMI-1 Minikern-Benchmarks wurden gute Ergebnisse erzielt. In transienten Rechnungen von TMI-1 zeigten sich deutliche Unterschiede zwischen der Verwendung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten für Teilregionen eines Ganzkernmodells und der Verwendung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten aus unendlichen Gittermodellen.

Die in diesem Forschungsvorhaben durchgeführten Arbeiten und erzielten Ergebnisse zum Kernsimulator KMACS, den Methoden zu Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen sowie zur Verwendung von *Full-Scale*-Wirkungsquerschnitten in stationären und transienten Ganzkern-Diffusionsrechnungen führen zu einer Erhöhung der Aussagefähigkeit

bei nuklearen Sicherheitsanalysen von Druckwasserreaktoren westlicher und russischer Bauart sowie von Leichtwasser-moderierten kleinen modularen Reaktoren gemäß dem aktuellen Stand von Wissenschaft und Technik.

Abstract

In the BMUKN research project RS1601 „MOUSSAKA – Moderne Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen sowie Kernreaktoranalysen“, research and development efforts, validation tasks and applications of reactor physics calculation methods and of methods for uncertainty and sensitivity analyses with regard to nuclear cross section data were carried out. The project covered three topics.

The first topic was about enhancing the core simulator calculations of Western and Russian type pressurised water reactors as well as of light water-moderated small modular reactors. Work was carried out on the modules of GRS's own core simulator KMACS for the pre-calculation of few-group cross sections, for the coupled full-core calculations and for the storage and visualisation of the results. The enhancements were verified with core simulator calculations of hot zero power states, operating cycles and reactor physics startup tests. In addition, the application of GRS's own neutron kinetics code FENNECS for full-core calculations and its coupling to KMACS were tested.

The second topic dealt with nuclear data and methods for uncertainty and sensitivity analyses with regard to nuclear data. First, the performance of the nuclear data libraries ENDF/B-VII.1, ENDF/B-VIII.0, JEFF-3.1.2, JEFF-3.2 and JEFF-3.3 in neutron transport calculations for reactor systems with a thermal neutron spectrum, e. g. light water reactors, and for reactor systems with a fast neutron spectrum, e. g. liquid metal-cooled fast reactors, was investigated.

The XSUSA programme for random sampling-based uncertainty and sensitivity analyses developed by GRS was extended by the variation of continuous-energy cross section data in order to determine result uncertainties of Monte Carlo neutron transport calculations due to uncertainties in the nuclear data. For a series of critical experiments, sensitivity profiles were determined by direct perturbation and uncertainties by sample-based variation. Results were verified by comparison against results from TSUNAMI (SCALE 6.2) and Serpent's own sensitivity analysis method.

XSUSA was extended by an option of using linear regression analysis for uncertainty and sensitivity analyses regarding the uncertainties in the nuclear data. Its application was tested on Generation-III type generic pressurised water reactor models. The resulting uncertainties and sensitivities were in good agreement with those from TSUNAMI which applies deterministic linear perturbation theory.

For the prompt supercritical reactivity experiment *Test 43* of the SPERT III research reactor and for a control rod movement transient in a sodium-cooled benchmark core, loaded with metallic fuel, the influence of nuclear data uncertainties on the results of the respective transient calculations was investigated by the application of the random sampling-based method XSUSA. The statistical analyses of the time-dependent quantities of interest were carried out using GRS's software SUSAS.

For reactor systems with fuel in doubly heterogeneous arrangement like gas-cooled high-temperature reactors, the application of TSUNAMI of SCALE 6.2 for uncertainty and sensitivity analysis is not possible. Nevertheless, SCALE 6.2 offers all modules necessary for the self-shielding calculations of such arrangements, and therefore an appropriate calculation sequence comprised of standalone executions of the modules was set up manually. The calculation sequence was applied to critical experiments and the results were compared to results from MCNP 6 for the purpose of verification.

In the third topic, the performance of few-group cross sections determined for subregions of a Serpent full-scale model was examined in steady-state and transient DYN3D full-core diffusion calculations. For comparison, calculations were also done with few-group cross sections from infinite-lattice calculations. By application of appropriate discontinuity factors derived using an implementation of a simplified version of the neutron diffusion solver of DYN3D, good results in terms of the multiplication factor and the core power distribution of both the C5G7-TD benchmark core and the TMI-1 mini-core could be achieved. However, transient calculations of the TMI-1 mini-core revealed substantial discrepancies depending on whether few-group cross section from the full-scale model or few-group cross sections from the infinite-lattice models were used.

The work carried out and the results achieved in this research project on the core simulator KMACS, methods for uncertainty and sensitivity analysis, and on the use of full-scale cross sections in steady-state and transient full-core diffusion calculations lead to an increase of the reliability of nuclear safety analyses of Western and Russian type pressurised water reactors and light water-moderated small modular reactors in line with the state of the art of science and technology.

Inhaltsverzeichnis

	Kurzfassung	I
	Abstract.....	V
	Inhaltsverzeichnis	VII
1	Einleitung.....	1
2	Zielsetzung und Arbeitsprogramm.....	3
2.1	Weiterentwicklung, Validierung und Anwendung des GRS- Kernsimulators KMACS	3
2.2	Weiterentwicklung, Validierung und Anwendung von Methoden zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse.....	5
2.3	Beschreibung des Reaktorkernverhaltens mit der Monte-Carlo- Methode	6
3	Weiterentwicklung, Validierung und Anwendung des GRS- Kernsimulators KMACS.....	9
3.1	Verbesserung und Erweiterung des KMACS-Moduls zur Wirkungsquerschnittsvorausrechnung	9
3.1.1	Überarbeitung der Eingabedatenaufbereitung	9
3.1.2	Überarbeitung der Anbindung des Gittercodes SCALE-NEWT	17
3.1.3	Erweiterung der Anbindung des Gittercodes HELIOS	18
3.1.4	Anbindung des Monte-Carlo-Codes Serpent 2.2	20
3.2	Verbesserung und Erweiterung des KMACS-Moduls zur gekoppelten Neutronenkinetik-/Thermohydraulikrechnung	24
3.2.1	Überarbeitung des ATHLET-Moduls	25
3.2.2	Modellierung von heterogenen Steuerstäben	27
3.2.3	Modellierung von ATF-Brennstäben mit Hüllrohrbeschichtung	28
3.2.4	Verbesserung und Erweiterung der Funktionalität zu nachgeschalteten Unterkanalthermohydraulikrechnungen	32
3.2.5	Automatisierte Ermittlung von Ergebnisgrößen aus Anfahrtests.....	35
3.3	Anbindung des Finite-Elemente-Neutronendiffusionscodes FENNECS an KMACS	37

3.4	Überprüfung der Anwendbarkeit von KMACS auf LW-SMR	40
3.5	Verifikation und Validierung von KMACS	44
3.5.1	BEAVRS-Benchmark	44
3.5.2	X2-Benchmark	54
3.5.3	TVA Watts Bar Unit 1-Benchmark.....	61
3.6	Querschnittsaufgaben: Qualitätssicherung, Dokumentation, Vereinfachung der Benutzung	68
3.6.1	Implementierung einer Befehlszeilenschnittstelle	68
3.6.2	Eingabevalidierung.....	69
3.6.3	Erweiterung und Verbesserung der Plotfunktionen.....	72
3.6.4	Einführung optionaler Datenbankvariablen	74
3.6.5	Komprimierung der SCALE-Ausgabedateien.....	74
3.6.6	Verbesserung des Auslesens der SCALE-txtfile16-Datei	75
3.6.7	Umstellung des Dokumentationssystems auf eine einfachere technische Basis	75
3.6.8	Qualitätssicherung des Softwareentwicklungsprozesses.....	76
4	Weiterentwicklung, Validierung und Anwendung von Methoden zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse	79
4.1	Erprobung nuklearer Datenbibliotheken.....	80
4.1.1	Thermische Reaktorsysteme	80
4.1.2	Flüssigmetall-gekühlte Reaktorsysteme.....	87
4.2	Stichprobenbasierte Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen mit linearer Regression	98
4.3	Teilnahme an den UAM-LWR- und UAM-SFR-Benchmarks.....	108
4.3.1	Unsicherheitsanalyse der SPERT III-Reaktivitätstransiente Test 43	108
4.3.2	Steuerstabverfahrtransiente im SFR-Kern	114
4.4	Erweiterung von XSUSA zur Verwendung von Wirkungsquerschnittsdaten in kontinuierlicher Energiedarstellung	134
4.4.1	Analyse des ACE-Dateiformats und Erweiterung der Daten.....	136
4.4.2	Intervallweise Variation der ACE-Daten	138
4.4.3	XSUSA-CE Befehlszeilenschnittstelle.....	142
4.4.4	Testrechnungen auf Basis direkter Variation der nuklearen Daten.....	144
4.4.5	Testrechnungen zur Bestimmung von Unsicherheiten.....	157

4.5	Weiterentwicklung der Methodik zur Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalyse von doppelt heterogenen Systemen	163
4.5.1	Nominale Rechnungen.....	164
4.5.2	Methodik für Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen	173
4.5.3	Ergebnisse der Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen.....	176
5	Beschreibung des Reaktorkernverhaltens mit der Monte-Carlo-Methode	183
5.1	Studie zur Ermittlung geeigneter Diskontinuitätsfaktoren.....	184
5.1.1	Die vereinfachte AFEN/NEM-Methode.....	185
5.1.2	Verifikation berechneter Diskontinuitätsfaktoren in Diffusionsrechnungen verschiedener Kernanordnungen	190
5.2	Berechnung und Verwendung von <i>Full-Scale</i> -Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten in statischen und transienten Kernrechnungen .	197
5.2.1	TMI-1-Minikern	197
5.2.2	Rechnungen statischer Kernzustände	199
5.2.3	Transientenrechnungen	204
6	Zusammenfassung und Ausblick	209
6.1	Weiterentwicklung, Validierung und Anwendung des GRS-Kernsimulators KMACS	209
6.2	Weiterentwicklung, Validierung und Anwendung von Methoden zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse.....	213
6.3	Beschreibung des Reaktorkernverhaltens mit der Monte-Carlo-Methode	216
6.4	Ausblick.....	220
	Literaturverzeichnis	225
	Glossar	237
	Abbildungsverzeichnis	241
	Tabellenverzeichnis	249
A	Veröffentlichungen	253

1 **Einleitung**

In diesem Forschungsvorhaben wurden ausgewählte Themenschwerpunkte des Evaluierungsberichts *Nukleare Sicherheitsforschung – Neuorientierung an aktuellen energiepolitischen Rahmenbedingungen* /KVKT 13/, der Publikation 7. *Energieforschungsprogramm der Bundesregierung – Innovationen für die Energiewende* /BMWi 18/ sowie der Publikation *BMWi-Forschungsförderung zur nuklearen Sicherheit – Projektförderprogramm des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie zur Sicherheitsforschung für kerntechnische Anlagen 2021 – 2025* /BMWi 21/ adressiert und im Eigeninteresse der GRS weiterverfolgt. Diese Themenschwerpunkte sind im Detail:

- der sichere Weiterbetrieb der deutschen Kernkraftwerke bis zu deren endgültiger Abschaltung bei kontinuierlicher technisch-wissenschaftlicher Begleitung,
- die sichere Zwischen- und Endlagerung,
- die aktive Unterstützung im Rahmen der Sicherheitsertüchtigung ausländischer Anlagen, sowie
- die Fortentwicklung der technisch-wissenschaftlichen Grundlagen für die Beurteilung der Sicherheit nuklearer Anlagen im Ausland einschließlich neuer Anlagenkonzepte, wie GEN-IV und kleiner modularer Reaktoren, sowie die Mitarbeit und Einflussnahme in internationalen Gremien wie der OECD und IAEA.

Dazu wurden in diesem Forschungsvorhaben Neu- und Weiterentwicklungen sowie Anwendungen und Validierungen von deterministischen und stochastischen Rechenprogrammen für reaktorphysikalische Berechnungen, von Methoden zu Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen und zu nuklearen Daten durchgeführt. Diese Arbeiten betrafen die

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

Die in diesem Forschungsvorhaben durchgeführten Neu- und Weiterentwicklungen von Modellen sowie deren Implementierung und Dokumentation dienen dem nachhaltigen Kompetenzaufbau und -erhalt in der GRS in den Themenfeldern Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen sowie reaktorphysikalische und thermohydraulische Simulationen für Druckwasserreaktoren westlicher Bauart (DWR) und russischer Bauart (WWER) sowie für Leichtwasser-moderierte kleine modulare Reaktoren, LW-SMR (mit SMR engl. für Small Modular Reactors).

2 Zielsetzung und Arbeitsprogramm

Die folgenden Abschnitte legen die Zielsetzungen der in diesem Forschungsvorhaben durchgeführten Arbeiten dar.

2.1 Weiterentwicklung, Validierung und Anwendung des GRS-Kernsimulators KMACS

Für Sicherheitsanalysen von Kernreaktoren ist insbesondere die Kenntnis des Kernzustands zu Beginn eines zu analysierenden, postulierten Ereignisses notwendig. Der Kernzustand lässt sich anhand der Betriebsgeschichte des Kernreaktors z. B. mit einem Kernsimulator ermitteln. In der GRS wurde dazu in den letzten Jahren der Kernsimulator KMACS /ZIL 15/, /ZIL 18a/, /AUR 21a/ entwickelt und speziell für die Anwendung auf DWR und WWER verifiziert und validiert. KMACS folgt der für Kernsimulatoren üblichen Zweischritt-Methodik bestehend aus:

- 1) der Durchführung von Gitterrechnungen zur Ermittlung von räumlich-homogenisierten und energie-kondensierten Wirkungsquerschnitten (Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte) für die verschiedenen Brenn- und Reflektorelemente der Kernbeladung, und
- 2) der quasistationären Zyklusrechnung durch gekoppelte Ganzkern-Neutronenfluss-Thermohydraulikrechnungen im Wechsel mit Abbrandrechnungen.

KMACS umfasst für die Durchführung dieser Rechenschritte und zur Ergebnisspeicherung, -aufbereitung und -visualisierung die in Abb. 2.1 dargestellten Module.

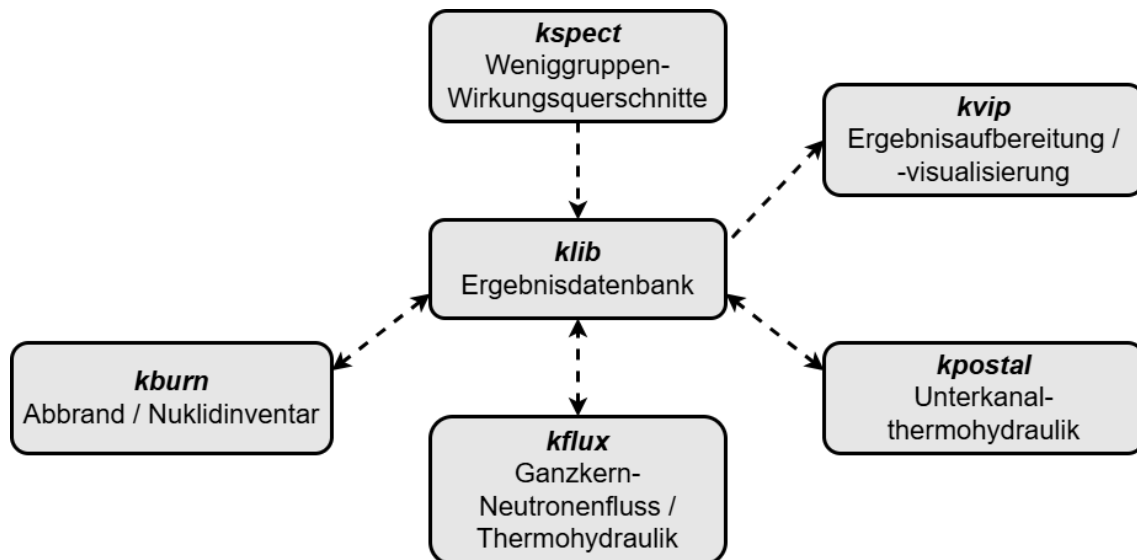


Abb. 2.1 Module des GRS-Kernsimulators KMACS

Die KMACS-Module *kspect*, *kflux*, *kburn*, *kpostal* steuern für einen durchzuführenden Rechenschritt einen entsprechenden Simulationscode an, z. B. NEWT aus SCALE 6.2 /REA 18/ für die Vorausrechnung der Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte und DYN3D /ROH 16/ für die Ganzkern-Neutronenfluss-Thermohydraulikrechnung. Auf Basis der KMACS-Eingabe erstellt KMACS für den jeweiligen Simulationscode die Eingabe, führt diesen aus, extrahiert die Ergebnisse und speichert sie in der Ergebnisdatenbank *klib*.

Um bei der Vorausrechnung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten flexibler zu sein, wird in diesem Forschungsvorhaben der Monte-Carlo-Code Serpent (Version 2.2) /LEP 15/ angebunden und die bestehende Anbindung des Gittercodes HELIOS (Version 2) /STU 11/ um die Modellierung von hexagonalen Brennelementgeometrien erweitert. Serpent erlaubt die Modellierung komplexer Brennelement- und Reflektorgeometrien in 3D und simuliert den Neutronentransport mit Wirkungsquerschnittsdaten in kontinuierlicher Energiedarstellung. Mit HELIOS kann im Vergleich zu den anderen Gittercodes ein erheblicher Geschwindigkeitsvorteil bei der Vorausrechnung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten erreicht werden.

Durch technische Überarbeitung der Module *kspect* und *kflux* wird unter anderem erreicht, dass Steuerstäbe, die in Längsrichtung aus verschiedenen Absorbermaterialien bestehen, z. B. bei WWER, in KMACS von der Vorausrechnung der Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte bis hin zur Ganzkernrechnung korrekt modelliert werden können. Die Überarbeitung von *kflux* umfasst eine flexiblere Eingabedatensatzerstellung für den Thermohydrauliksystemcode ATHLET /SCH 24/, um zukünftig einfacher neue Versionen

von ATHLET anzubinden und auch für eine Kopplung mit DYN3D die entsprechende ATHLET-Eingabe zu erstellen. In diesem Zuge wird das für KMACS-Rechnungen verwendete ATHLET-Modell verbessert und für die Simulation von Hüllrohren mit einer zusätzlichen Beschichtung flexibilisiert. Zur automatisierten Ermittlung von Stabwirksamkeiten und Reaktivitätskoeffizienten wird *kflux* eine neue Funktion bereitstellen, um die Fehleranfälligkeit durch den Anwender zu verringern.

Um mit KMACS perspektivisch innovative Reaktoren und SMR analysieren zu können, wird eine Anbindung des in der GRS neu entwickelten Neutronenkinetikcodes FENNECS /SEU 20/, /SEU 22/ realisiert und getestet. Ferner wird die Anwendbarkeit von KMACS für die Analyse von LW-SMR untersucht.

KMACS wird mittels DWR- und WWER-Rechnungen weiter qualifiziert und validiert.

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

Um die Aussagesicherheit von Berechnungsmethoden der gesamten nuklearen Berechnungssequenz quantitativ bewerten zu können, ist eine systematische Behandlung der Unsicherheiten in den Berechnungen erforderlich, die durch Unsicherheiten in den Eingangsgrößen verursacht werden. Dies gilt für den Einfluss der nuklearen Daten (Wirkungsquerschnitte) und deren Verarbeitung in den wesentlichen Berechnungsschritten Resonanzselbstabschirmungs- und Gitterberechnung, Bereitstellung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten und Berechnung des stationären und zeitabhängigen Kernverhaltens.

Im Vergleich zu Leichtwasserreaktoren, für die schon umfassende Erfahrung durch den Betrieb einer großen Anzahl von Anlagen über viele Jahre besteht, sind Unsicherheitsanalysen für Leistungsreaktoren mit schnellem Spektrum von noch größerer Bedeutung. Für diese ist erheblich geringere Betriebserfahrung vorhanden und es sind nur sehr wenige Betriebsdaten frei zugänglich. Die Ergebnisse von Simulationen können somit kaum durch Vergleich mit Messergebnissen validiert werden. Zur Einschätzung der Aussagesicherheit von Analysen, die zur Beurteilung neuer Reaktorkonzepte nötig sind, sind deshalb Unsicherheitsanalysen unumgänglich.

Im Rahmen dieses Forschungsvorhabens werden zunächst verschiedene Versionen der US-amerikanischen ENDF/B-Datenbibliothek und der europäischen Datenbibliothek JEFF in Kritikalitätsrechnungen von thermischen und Flüssigmetall-gekühlten Reaktorsystemen verwendet, um die Performanz einer jeden Datenbibliothek zur Bestimmung des Neutronenmultiplikationsfaktors abzuschätzen.

Der Einfluss von Unsicherheiten in den nuklearen Wirkungsquerschnittsdaten auf den Verlauf von Reaktivitätstransienten wird untersucht, indem Simulationen einer Steuerstabverfahrtransiente in einem Flüssigmetall-gekühlten Kern sowie Simulationen einer Steuerstabauswurftransiente in einem DWR-ähnlichen Forschungsreaktor auf Basis stichprobenbasiert variiertter Wirkungsquerschnitte durchgeführt werden.

Um bei Unsicherheitsanalysen zukünftig nicht mehr nur auf Multigruppen-Wirkungsquerschnittsdaten eingeschränkt zu sein und von den Vorteilen von Monte-Carlo-Neutronentransportrechnungen zu profitieren, wird XSUSA um ein Verfahren zur Variation von Wirkungsquerschnittsdaten in kontinuierlicher Energiedarstellung erweitert.

Das im Forschungsvorhaben RS1564 *MOMENTUS – Moderne Methoden zu Neutronentransport und Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen* /AUR 21a/ skizzierte Verfahren zu stichprobenbasierten Sensitivitätsanalysen mittels linearer Regression wird implementiert und an Ganzkernmodellen erprobt. Es erlaubt die Bestimmung von Sensitivitätsmaßen, die in ihrer Interpretation vergleichbar mit den Sensitivitätsmaßen basierend auf der deterministischen Störungstheorie sind. Ferner wird ein Verfahren aufgezeigt, das unter Verwendung verschiedener Module des SCALE-Programmpakets Sensitivitätsanalysen von Reaktorsystemen mit doppelter Heterogenität ermöglicht.

2.3 Beschreibung des Reaktorkernverhaltens mit der Monte-Carlo-Methode

Nachweisverfahren für die Einhaltung der Schutzziele im Betrieb, beim anomalen Betrieb sowie bei Stör- und Unfällen erfordern die Beschreibung von dynamischen Vorgängen in einem Reaktorkern. Dies beinhaltet speziell die zeit- und ortsabhängige Modellierung der neutronenphysikalischen und thermohydraulischen Vorgänge sowie deren Wechselwirkungen untereinander.

Üblicherweise werden für solche Simulationen heutzutage Neutronenkinetikcodes gekoppelt mit einem Thermohydraulikmodell eingesetzt. Zumeist auf brennelementgroßen

Rechenmaschinen löst der Neutronenkinetikcode die zeitabhängige Neutronendiffusionsgleichung auf der Basis von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten der Brenn- und Reflektorelemente. Diese werden zuvor mittels eines Gittercodes zumeist basierend auf einem deterministischen Transportverfahren ermittelt, wobei aufgrund des hohen Rechenbedarfs die dort eingesetzten Modelle sich entweder auf ein einzelnes Brennelement mit reflektierenden Randbedingungen oder ein Reflektorelement neben einem benachbarten Brennelement beschränken.

Der Monte-Carlo-Code Serpent bietet neben den üblichen Vorteilen des Monte-Carlo-Neutronentransports, nämlich Wirkungsquerschnittsdaten in kontinuierlicher Energiedarstellung zu verwenden und komplexe Geometrien darstellen zu können, auch die Funktionalität für verschiedene Regionen eines Rechenmodells jeweils Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte ermitteln zu können. Dies bedeutet, dass mittels eines größeren Rechenmodells, das mehrere Brennelemente oder sogar auch Reflektorelemente umfasst, Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte für jedes Brennelement unter dem Einfluss der jeweils benachbarten Brenn- oder Reflektorelemente ermittelt werden können und sich damit Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte ergeben, die zu genaueren Ergebnissen bei der anschließenden Neutronendiffusionsrechnung führen. Aufbauend auf Arbeiten im Forschungsvorhaben RS1564 /AUR 21a/ wird die Ermittlung solcher Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte mittels Serpent weiter erprobt und deren Einsatz in Neutronendiffusionsrechnungen getestet. Dabei wird insbesondere an der Ermittlung geeigneter Diskontinuitätsfaktoren gearbeitet, da diese Unstetigkeiten in der räumlichen Verteilung des homogenen Neutronenflusses erlauben und dadurch eine genauere Vorhersage der Leistungsverteilung erreicht werden kann.

3 Weiterentwicklung, Validierung und Anwendung des GRS-Kernsimulators KMACS

In diesem Forschungsvorhaben wurden verschiedene Weiterentwicklungen am Kernsimulator KMACS der GRS durchgeführt, um Verbesserungen bei den Kernsimulator-Rechnungen von Druckwasserreaktoren westlicher und russischer Bauart sowie von LW-SMR zu erreichen. Diese Arbeiten erfolgten wesentlich in den KMACS-Modulen für die Wirkungsquerschnittsvorausrechnung, die gekoppelten Ganzkernrechnungen sowie die Ergebnisspeicherung und -visualisierung. Weitere Arbeiten betrafen die Verifizierung und Validierung von KMACS, eine verbesserte Benutzung von KMACS und die Qualitätssicherung des Softwareentwicklungsprozesses.

3.1 Verbesserung und Erweiterung des KMACS-Moduls zur Wirkungsquerschnittsvorausrechnung

Das KMACS-Modul *kspect* zur Vorausrechnung von homogenisierten Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten für Brenn- und Reflektorelemente wurde zwecks einer einheitlichen Aufbereitung der Eingabedaten technisch überarbeitet und um die automatische Berücksichtigung der thermischen Ausdehnung von Brennelementgeometrien erweitert. Zudem wurde die Anbindung an den deterministischen Gittercode HELIOS /STU 11/ erweitert und die Anbindung an den auf der Monte-Carlo-Methode basierenden Gittercode Serpent /LEP 15/ ergänzt.

3.1.1 Überarbeitung der Eingabedatenaufbereitung

Um die Daten der Brennelemente und Reflektorelemente für die angebundenen Gittercodes NEWT aus dem SCALE-Programmsystem /REA 18/, Serpent und HELIOS einheitlich bereitstellen und Code-Duplikate vermeiden zu können, wurden die zur Verarbeitung der entsprechenden KMACS-Eingabe zuständigen Python-Module technisch überarbeitet. Aus dem Bereich der objektorientierten Programmierung wurden entsprechende Klassen implementiert. In Instanzen einer neuen Materialklasse werden die Daten der Brennelemente (z. B. Layout mit Gitterabständen der Brennelemente und Stäbe) und Reflektorelemente (z. B. schichtweise Materialabfolge) gespeichert. In Instanzen weiterer Klassen werden die Daten der zu einem Brennelement zugehörigen Abstandhalter, eingesetzten Brennstäbe, Führungsrohre sowie Steuerstäbe (z. B. radialer Aufbau) abgelegt und als Attribute dem jeweiligen Brennelement zugeordnet. Zudem wurde die vorherige Beschränkung auf ein einziges Absorbermaterial in den Steuerstäben

aufgehoben, damit Steuerstäbe, die in Längsrichtung aus unterschiedlichen Absorbermaterialien wie z. B. B_4C und $AgInCd$ bestehen, korrekt berücksichtigt werden können. Insgesamt bietet die Verwendung von Klassen den Vorteil, dass bei Bedarf die Menge an bereitgestellten Daten durch das Hinzufügen weiterer Variablen zu den Klassen einfach erweitert sowie der Zugriff auf bestimmte Daten eingeschränkt werden kann.

Ebenfalls wurde das Modul zur Verarbeitung der verschiedenen Eingabemöglichkeiten von Materialzusammensetzungen überarbeitet. Im Fall von UO_2 -Brennstoff hatte der Anwender bereits die Möglichkeit, die Materialzusammensetzung entweder über die Massendichte und die Anreicherung von U-235, über die Massendichte und die Gewichtsanteile der Uranisotope oder über die Atomzahldichten der Uran- und Sauerstoffisotope einzugeben. Das Modul hatte mittels hartkodierter nuklearer Daten, wie der molaren Masse und der natürlichen Isotopenhäufigkeiten, die entsprechende Materialzusammensetzung in Atomzahldichten zur Eingabe in den Spektralcode umgerechnet. Mit der Überarbeitung wurden die hartkodierten Daten in eine strukturierte Datei im YAML-Format /BEN 09/ ausgelagert, sodass der Anwender die Daten bei Bedarf einsehen und modifizieren kann. Für jede Eingabemöglichkeit wurde eine eigene Klasse implementiert, in der die jeweilige Umrechnung der eingegebenen Daten zu den Atomzahldichten implementiert und dokumentiert ist. Ergänzt wurde zudem die Berechnung der Moderatorzusammensetzung für eine gegebene Wasserdichte, Borkonzentration und Anreicherung von B-10, sodass vorherige Mehrfach-Implementierungen der gleichen Funktion an verschiedenen Stellen im Programmcode (Code-Duplikate) entfernt werden konnten. Die Klassen stellen neben den Atomzahldichten den Namen der Materialzusammensetzung, den axialen und radialen thermischen Ausdehnungskoeffizienten und im Fall von Brennstoff die Anreicherung von U-235 sowie die Schwermetалldichte bereit.

Modellierung der thermischen Ausdehnung

Im Allgemeinen werden die Geometrie- und Materialspezifikationen von Brennelementen und Reaktorkernen zu Raumtemperaturbedingungen vorgegeben. Für eine Berechnung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten zur Vorhersage von Borkurven und Leistungsverteilungen bei Teil- und Volllastzuständen ist es jedoch notwendig, die Geometrie- und Materialspezifikationen aufgrund der thermischen Ausdehnung entsprechend anzupassen. Um zum einen diese Anpassungen dem KMACS-Anwender einfach zu ermöglichen und zum anderen diese Anpassungen auch über alle KMACS-Simulationen hinweg zu vereinheitlichen und die Fehleranfälligkeit zu reduzieren, wurden Modelle zur thermischen Ausdehnung der Komponenten implementiert. Die

angepassten Geometrie- und Materialdaten werden in den Instanzen der Materialklasse eines jeden Brennelements abgelegt, sodass sie anschließend bei Erstellen der Modelle für die Gittercodes zur Vorausrechnung der Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte verwendet werden. Die implementierten Modelle zur thermischen Ausdehnung werden in den folgenden Abschnitten beschrieben.

Um die thermische Ausdehnung eines Materials in KMACS zu berücksichtigen, müssen vorab folgende Schritte und Annahmen beachtet werden:

- Die globale Variable `thermalExpansion` in der KMACS-Eingabe, die intern standardmäßig auf `false` gesetzt ist, muss explizit auf `true` gesetzt werden.
- Die thermische Ausdehnung wird nur für Brennelemente durchgeführt. Reflektoren werden nicht thermisch ausgedehnt.
- Für jede Materialzusammensetzung, für die eine thermische Ausdehnung berücksichtigt werden soll bzw. kann, müssen die thermischen Ausdehnungskoeffizienten in radialer und axialer Richtung in der KMACS-Eingabe angegeben werden. Fehlende Werte werden als Null interpretiert, somit wird keine Ausdehnung für diese Materialzusammensetzung vorgenommen. Eine Ausnahme ist der Gitterabstand der Brennelemente. Hier wird ein Standardwert für die Ausdehnung der Kernstützstruktur angenommen. Diese wird nicht explizit modelliert, sondern über eine Vergrößerung des Gitterabstands der Brennelemente dargestellt.
- Am Beispiel einer Materialdefinition von UO_2 ist die Eingabe von thermischen Ausdehnungskoeffizienten in Abb. 3.1 gezeigt.

```
uo2:
  type: uo2
  enrichment: 3.05
  density: !unit 10.1725 g/cm^3
  thermalExpansion:
    radial: 1.1E-05
    axial: 1.1E-05
```

Abb. 3.1 KMACS-Eingabe zur Definition einer Materialzusammensetzung mit der optionalen Angabe von thermischen Ausdehnungskoeffizienten

In KMACS wird die Temperaturabhängigkeit der thermischen Ausdehnung als linear angenommen und es werden folgende Größen berücksichtigt:

- Gitterabstand der Brennelemente (engl. assembly pitch),
- Gitterabstand der Brennstäbe (engl. pin pitch),
- Radien der Materialschichten der Brennstäbe,
- Dichtewerte der Materialien in den Stäben (Brennstoff, Absorber, Hüllrohr).

Bei der thermischen Ausdehnung werden derzeit die folgenden Eingabeparameter noch nicht berücksichtigt:

- aktive Länge der Brennelemente,
- lineare Dichtewerte der Abstandhalter (Spacer).

Letztere werden als lineare Massendichten in der KMACS-Eingabe angegeben. Abstandhalter werden bei den Gitterrechnungen nicht explizit modelliert, sondern dem Moderator material zugemischt. Sind zudem verschiedene Abstandhalter aus verschiedenen Materialien über die Länge eines Brennelements vorhanden, werden diese bei der Verarbeitung der Eingabe miteinander vermischt, sodass sie intern in einem einzigen künstlichen Abstandhaltermaterial beschrieben werden. Um die thermische Ausdehnung konsistent in KMACS einzubauen, müssen die Änderungen der linearen Massendichten der Abstandhalter ebenfalls berücksichtigt werden. Jedoch war es im Rahmen dieses Forschungsvorhabens nicht möglich, eine konsistente automatisierte Anpassung dieser Parameter zu implementieren, sodass sie nach wie vor in der Eingabedatei der Temperatur entsprechend angepasst werden müssen.

Für die Ausdehnung des Gitterabstands der Brennstäbe (pin pitch) wird der thermische Ausdehnungskoeffizient des Abstandhaltermaterials (Spacer) verwendet. Da, wie bereits erwähnt, das durch Vermischung erzeugte künstliche Abstandhaltermaterial aus mehreren Abstandhaltermaterialien bestehen kann, werden die Ausdehnungskoeffizienten der ursprünglichen Abstandhaltermaterialien über ihre jeweilige Dichte gemittelt, sodass das künstliche Abstandhaltermaterial mit einem einzigen Ausdehnungskoeffizienten beschrieben wird. Im Gegenzug dazu wird für den Ausdehnungskoeffizienten des Gitterabstands der Brennelemente (assembly pitch) ein vordefinierter Standardwert verwendet, der dem Ausdehnungskoeffizienten der Kernstützstruktur entspricht.

Für die Ausdehnung der Gitterabstände (pin pitch, assembly pitch) wird die Moderator-temperatur (T_{mod}) verwendet. Als Referenztemperatur wird die Raumtemperatur angenommen ($T_0 = 294K$), sodass mit $\Delta T = T_{mod} - T_0$ der veränderte Gitterabstand l' wie folgt berechnet wird:

$$l' = l(1 + \alpha\Delta T), \quad (3.1)$$

wobei α der jeweilige Ausdehnungskoeffizient des künstlichen Abstandhaltermaterials bzw. der Kernstützstruktur ist.

Für die Ausdehnung der Radien der Brennstäbe wird von innen nach außen vorgegangen. Radial aufeinanderfolgende Materialzusammensetzungen müssen, um in KMACS für die thermische Ausdehnung berücksichtigt zu werden, entweder denselben Ausdehnungskoeffizienten aufweisen (z. B. bei der Modellierung von Gadolinium-Ringen) oder durch einen Gasspalt (Gap) voneinander getrennt sein. Hiermit soll im Programmcode verhindert werden, dass das Brennstoffmaterial bei Fehlen eines Spalts eine Ausdehnung des Hüllrohrmaterials verursacht. Solche Druckspannungen und Verformungen werden hier nicht berücksichtigt. Bei Verletzung dieser Bedingung wird die Rechnung mit einer Fehlermeldung abgebrochen.

Die ausgedehnten Radien r'_n der jeweiligen radialen Zonen n eines Brennstabs werden nach Gl. (3.2) berechnet, wobei ΔL die sukzessiv aufaddierte, totale Verbreiterung aufgrund der thermischen Ausdehnung ist. Sie wird bis zum Auftreten des Gasspaltmaterials in der radialen Materialabfolge des Brennstabs aufaddiert. Als Folge dieses Ansatzes verliert der Gasspalt bei der thermischen Ausdehnung des Brennstoffs an Volumen.

$$\begin{aligned} \Delta l_n &= (r_n - r_{n-1})\alpha_n\Delta T_n \\ \Delta L &= \Delta L + \Delta l_n \\ r'_n &= r_n + \Delta L \end{aligned} \quad (3.2)$$

Die Temperaturdifferenz $\Delta T_n = T_n - T_0$ wird mittels der jeweiligen Materialtemperatur T_n und der Referenztemperatur T_0 berechnet. Zusätzlich zu den Radien werden die Dichten ρ_n der Materialzusammensetzungen wie folgt angepasst:

$$\rho'_n = \rho_n / (1 + \alpha_n \Delta T_n)^3 \quad (3.3)$$

Um die Funktionsfähigkeit der automatischen Berücksichtigung der thermischen Ausdehnung durch KMACS zu überprüfen, wurden Testrechnungen anhand eines KWU Vor-KONVOI Druckwasserreaktors /ZIL 18b/ durchgeführt und mit zur Verfügung stehenden Referenzergebnissen eines kommerziellen Codesystems verglichen. Dabei wurde von dem kommerziellen Codesystem ebenfalls eine thermische Ausdehnung der Geometrie- und Materialparameter automatisiert vorgenommen.

Der Reaktorkern ist mit 193 Brennelementen bestückt, deren Brennstäbe in einem 16×16 Gitter angeordnet sind. In dem betrachteten Zyklus sind Brennelemente mit den Brennstoffen UO_2 und $\text{UO}_2\text{-Gd}_2\text{O}_3$ vorhanden. Die Kernbeladung ist in Abb. 3.2 illustriert. Das Farbschema entspricht den beiden unterschiedlichen Brennelementtypen. Da der hier berechnete Zyklus nicht mit ausschließlich unbestrahlten Brennelementen startet, ergibt sich eine Abbrandverteilung zu Beginn des Zyklus. Diese ist in Abb. 3.2 in Einheiten von MWd/kg abgebildet.

Die Nodalisierung wurde so gewählt, dass in radialer Richtung jede Rechenmasche einem Brennelement entspricht. Die axiale Diskretisierung des Kerns wurde zu 17 gewählt. Die homogenisierten Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte wurden mit NEWT des SCALE 6.2-Programmsystems berechnet. Die Zyklusabbrandrechnung wurde mit ATHLET-Q/C durchgeführt. Hier wurde für den Abbrand das triviale Abbrandmodell /BOU 18/ von KMACS verwendet. Auf eine mikroskopische Abbrandrechnung wurde an dieser Stelle verzichtet.

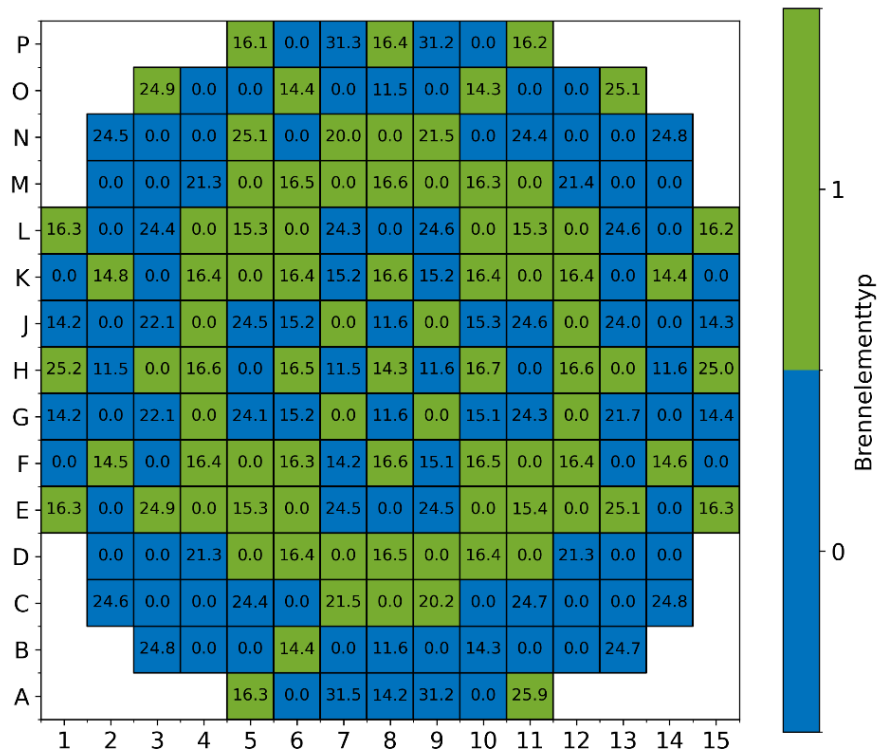


Abb. 3.2 Kernlayout mit zwei Brennelementtypen und Abbrandwerten zu Zyklusbeginn des betrachteten Vor-KONVOI-Reaktorkerns

Abb. 3.3 zeigt die Verläufe der kritischen Borkonzentration über den Zykluszeitraum der KMACS-Rechnung und der Referenzrechnung mit dem kommerziellen Codesystem. Des Weiteren ist die absolute Abweichung der KMACS-Rechnung von der Referenzrechnung aufgetragen. Mit Abweichungen zwischen 6 ppm und -26 ppm über den Verlauf des Zyklus ist KMACS mit der automatischen Berücksichtigung der thermischen Ausdehnung in guter Übereinstimmung mit dem kommerziellen Codesystem hinsichtlich der Vorhersage der kritischen Borkonzentration.

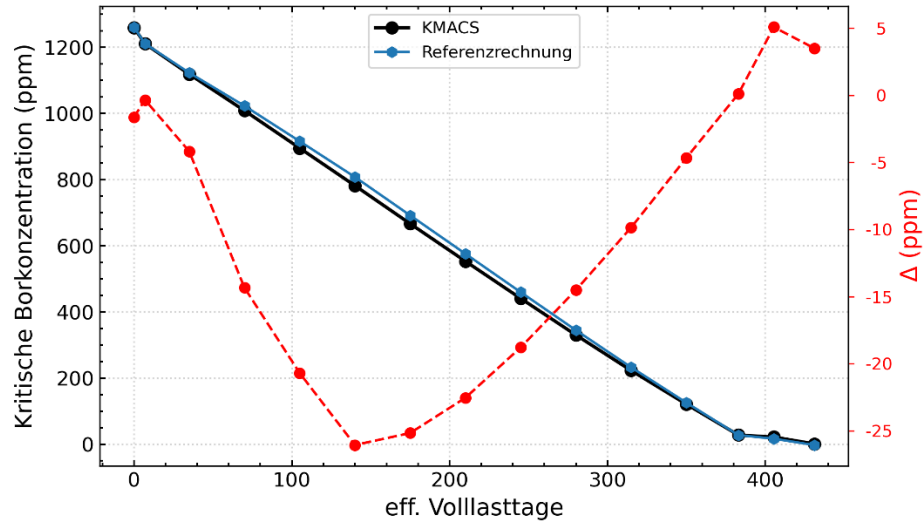


Abb. 3.3 Mit KMACS berechnete Borkurve (schwarz) im Vergleich zur Borkurve der Referenzrechnung (blau) und deren Differenz (rot)

In Abb. 3.4 sind die relativen Abweichungen der radialen Leistungsverteilungen der KMACS-Rechnung zur Referenzrechnung gezeigt, $\Delta P = (P_{KMACS} - P_{Ref})/P_{Ref} \times 10^2$.

Wie ersichtlich, liegt die maximale Abweichung bei ± 3 %.

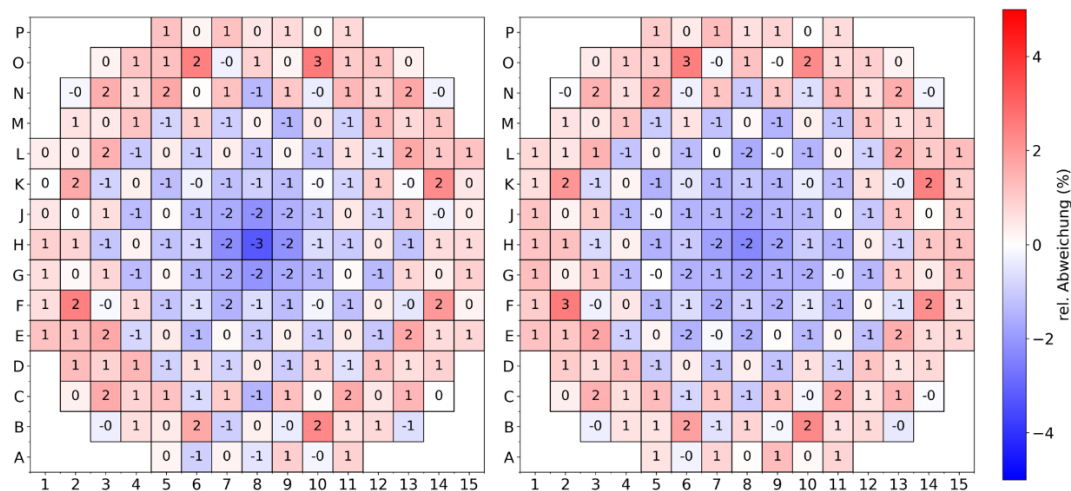


Abb. 3.4 Rel. Abweichung der radialen Leistungsverteilung nach 210 (links) und 383 (rechts) Volllasttagen im Vergleich zur Referenzrechnung

Mit der automatischen Berücksichtigung der thermischen Ausdehnung in KMACS werden ähnliche Ergebnisse wie mit einem kommerziellen Kernsimulatorsystem erzielt.

Die KMACS-Eingaben für die aktive Länge und die linearen Massendichten für die Abstandhalter werden zurzeit noch nicht bei der thermischen Ausdehnung berücksichtigt.

Eine entsprechende künftige Erweiterung des KMACS-Programmcodes ist geplant.

3.1.2 Überarbeitung der Anbindung des Gittercodes SCALE-NEWT

Um die überarbeitete KMACS-Eingabedatenaufbereitung, die in Kap. 3.1.1 beschrieben ist, bei der Erstellung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten mit dem Gittercode NEWT aus dem SCALE-Programmsystem zu übernehmen, wurde der Programmcode im KMACS-Modul *kspect* zur Anbindung von NEWT angepasst.

Hierbei wurden die Programmaufrufe `pre()` und `post()`, also das Erstellen von NEWT-Eingabedateien und das entsprechende Auslesen der Simulationsergebnisse aus den NEWT-Ausgabedateien, überarbeitet. Um den Programmcode übersichtlicher zu gestalten, wurden die beiden Aufrufe auf verschiedene Python-Module aufgetrennt: `scaleInput.py` zum Schreiben der Eingabedateien und `scaleOutput.py` zum Verarbeiten der Ergebnisdateien. In beiden Modulen wurden die entsprechenden, gleichnamigen Klassen implementiert.

Während des Programmablaufs werden der Klasse `ScaleInput` Instanzen der Materialklasse aus der KMACS-Eingabedatenaufbereitung sukzessive übergeben. Diese Klasse bereitet die Daten auf und schreibt die entsprechenden NEWT-Eingabedateien. Zusätzlich wurde die Möglichkeit geschaffen, mehr als ein Absorbermaterial für die Steuerstäbe zu modellieren, um für Steuerstäbe, die axial aus unterschiedlichen Absorbermaterialien bestehen, korrekte Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte für die Ganzkernrechnung bereitzustellen. An der grundlegenden Logik zur Berechnung der Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte wurden keine Änderungen vorgenommen: für jedes Brennstoffmaterial wird zunächst eine Abbrandrechnung unter Nominalbedingungen durchgeführt und zu jedem Abbrandzeitpunkt werden die entsprechenden Nukliddichten ausgegeben. Die Verzweigungsrechnungen, also die Berücksichtigung verschiedener Borkonzentrationen, Moderatorichten, Brennstofftemperaturen und Absorbermaterialien in den Steuerstäben zur Modellierung verschiedener instantaner Betriebszustände, werden für jeden Abbrandschritt vorgenommen. Hierfür werden die in der vorgelagerten Abbrandrechnung ermittelten Nukliddichten herangezogen.

Die Routinen zum Lesen und Interpretieren der SCALE-Ausgabedateien wurden ebenso überarbeitet: den verschiedenen SCALE-Ausgabedateien entsprechend wurden die Python-Module `scale16FileParser.py` und `scaleOutfileParser.py` implementiert und die regulären Ausdrücke zur Extraktion der Ergebnisparameter optimiert. Die von diesen Modulen bereitgestellten Routinen werden in der Klasse `ScaleOutput` aufgerufen und die Ergebnisdaten werden in die KMACS-Datenbank geschrieben. Die

größte Modifikation bei der Verarbeitung der Ergebnisdaten besteht darin, dass diese Daten, die zuvor in bis zu achtdimensionalen Datenfeldern zwischengespeichert wurden, nun direkt in den Puffer der Datenbank geschrieben und am Ende des Programmablaufs abgespeichert werden, sodass die Lesbarkeit und die Erweiterbarkeit des Programmcodes wesentlich erleichtert sind.

Die Funktionstüchtigkeit dieser Neu- und Weiterentwicklungen wurde mit den in Kap. 3.5 beschriebenen KMACS-Rechnungen erprobt.

3.1.3 Erweiterung der Anbindung des Gittercodes HELIOS

Die Anbindung des Gittercodes HELIOS /STU 11/ im KMACS-Modul *kspect* wurde dahingehend erweitert, dass mit KMACS HELIOS-Rechnungen zur Vorausrechnung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten für hexagonale Reaktorsysteme wie WWER durchgeführt werden können. Dem sind zunächst allgemeine Entwicklungsarbeiten vorausgegangen. Die Liste verfügbarer Nuklide konnte mit einer neuen Version der nuklearen Datenbibliothek in HELIOS von 290 auf 1.484 Nuklide vergrößert werden, sodass zumeist keine Substitution von nicht verfügbaren Nukliden für den HELIOS-Eingabedatensatz mehr durchgeführt werden muss. Zudem wurde die Anbindung um die Berücksichtigung von Steuerstäben zur Berechnung von Wirkungsquerschnitten für kontrollierte Zustände erweitert. Die in KMACS implementierten Programmaufrufe `pre()`, `run()` und `post()` zum Schreiben der HELIOS-Eingabe, zum Ausführen der HELIOS-Rechnungen und zum Auswerten der Ergebnisse wurden technisch überarbeitet, um den Programmcode übersichtlicher zu gestalten. Die Skripte zur Steuerung der HELIOS-Rechnungen auf dem Rechencluster wurden technisch überarbeitet, um für die Brenn- und Reflektorelemente die jeweiligen HELIOS-Rechnungen übersichtlicher auf den Knoten des Rechenclusters auszuführen und bei Rechenabbrüchen Zwischenergebnisse speichern zu können.

Für die Modellierung hexagonaler Brenn- und Reflektorelemente wurden entsprechende Routinen implementiert, um die Geometrie und Materialzusammensetzungen dieser Anordnungen in einem HELIOS-Modell abzubilden. Hexagonale Brennelementmodelle werden dabei in innere, seitliche und Eckzellen unterteilt, da sie im Gegensatz zu den Zellen eines quadratischen Brennelements unterschiedlich große Flächen aufweisen. Reflektierende Randbedingungen werden gesetzt, um ein Brennelement im unendlichen Gitter darzustellen. In Abb. 3.5 wird ein entsprechendes HELIOS-Modell am Beispiel des

Brennelements 30AV5 des in dem X2-Benchmark /BIL 20/ spezifizierten WWER-1000 Kerns gezeigt.

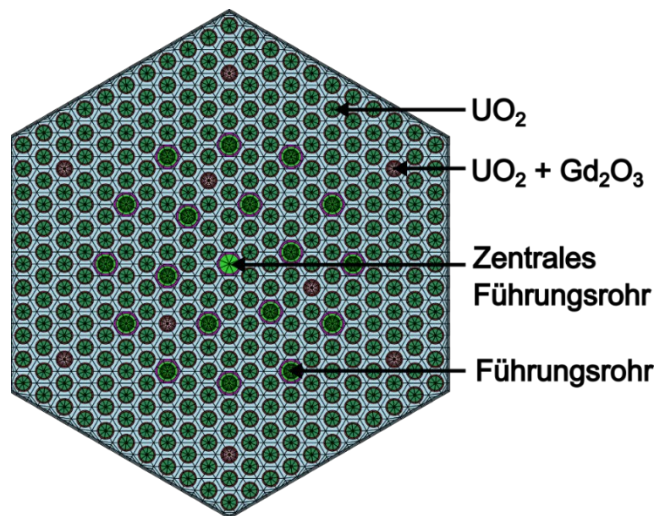


Abb. 3.5 HELIOS-Modell des Brennelements 30AV5 des X2-Benchmarks

Zur Berechnung von Wirkungsquerschnitten für eine Reflektorregion wird an einer Seite eines vorgegebenen Brennelements die reflektierende Randbedingung aufgehoben und die in der KMACS-Eingabe definierte Abfolge der Reflektormaterialien mit ihrer jeweiligen Schichtdicke modelliert. An der Stirnseite der Reflektorregion wird die Vakuum-Randbedingung und an den anderen fünf Seiten werden reflektierende Randbedingungen gesetzt. Abb. 3.6 zeigt das HELIOS-Modell eines radialen Reflektors mit einem benachbarten Brennelement aus dem X2-Benchmark.

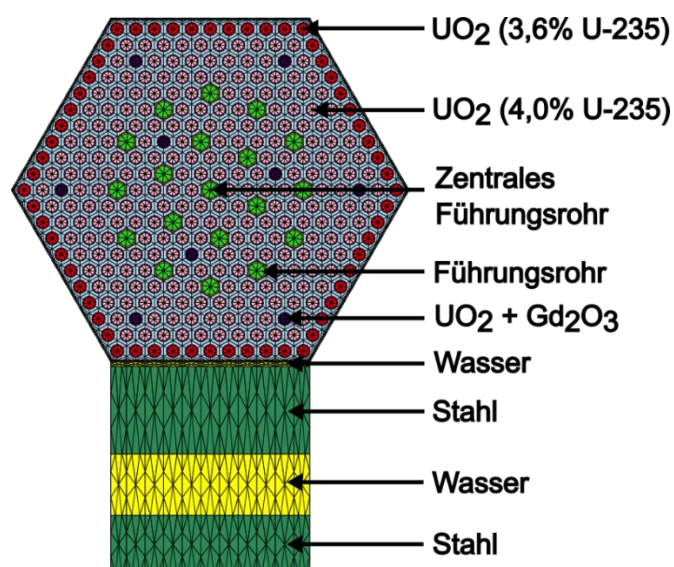


Abb. 3.6 HELIOS-Modell eines radialen Reflektors mit dem benachbarten Brennelement 39AWU des X2-Benchmarks

Ergebnisse einer HELIOS-Rechnung sind nur maschinenlesbar und müssen über das Modul ZENITH aus dem Programmpaket von HELIOS mittels einer dafür entsprechend erstellten Eingabe extrahiert werden. KMACS wurde um die Erstellung der Eingabe für ZENITH für hexagonale Geometrien erweitert. Da ZENITH zudem die Berechnung weiterer Ergebnisgrößen auf Basis der extrahierten Werte erlaubt, wurde die Berechnung von Diskontinuitätsfaktoren (engl. Discontinuity Factor, DF) für hexagonale Geometrien hinzugefügt. Ergebnisse von Ganzkernrechnungen unter Anwendung dieser Diskontinuitätsfaktoren sind jedoch noch nicht zufriedenstellend, sodass weiterer Handlungsbedarf bei der Modellentwicklung besteht.

Die Anwendung von HELIOS zur Berechnung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten von hexagonalen sowie von quadratischen Brennelementen für Kernsimulatorrechnungen mit KMACS ist in Kap. 3.5 dargestellt.

3.1.4 Anbindung des Monte-Carlo-Codes Serpent 2.2

Zusätzlich zu den bisher verwendeten deterministischen Gittercodes zur Berechnung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten wurde der Monte-Carlo-Code Serpent /LEP 15/ an KMACS angebunden. Mit Serpent können Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte, Diskontinuitätsfaktoren und Stableistungsfaktoren sowohl für quadratische als auch für hexagonale Brennelementgeometrien ermittelt werden.

Die Anbindung an KMACS wurde über das *kspect*-Modul durchgeführt. Analog zu den bereits angebotenen Gittercodes HELIOS sowie NEWT aus dem SCALE-Programmsystem wurde ein Serpent-Backendmodul implementiert, das basierend auf den Daten aus der KMACS-Eingabedatenaufbereitung (siehe Kap. 3.1.1) die entsprechenden Serpent-Eingabedateien für Brennelemente und Reflektorelemente erstellt, die Serpent-Rechnungen auf dem Rechencluster startet und die Serpent-Ergebnisse einliest und in die KMACS-Datenbank speichert.

Für jedes Material wird zunächst eine Abbrandrechnung entsprechend der KMACS-Konfiguration durchgeführt. Für die Verzweigungsrechnungen werden die Nukliddichten aus der Abbrandrechnung für den entsprechenden Abbrandpunkt geladen und Rechnungen mit den jeweiligen Verzweigungsparametern durchgeführt. Die Verzweigungsparameter können verschiedene Brennstofftemperaturen, Moderatordichten und Bor-konzentrationen umfassen. Zudem werden mögliche kontrollierte Zustände durch die Modellierung der Absorbermaterialien berücksichtigt.

Das Serpent-Backendmodul kann über die KMACS-Eingabe unter `xsGenerator`, wie in Abb. 3.7 exemplarisch gezeigt, über den Namen des `backend` ausgewählt werden.

```
xsGenerator:
  backend:
    name: serpent
    executable: sss2.2.0_intel2021
    cpus:
      depletion: 12
      branching: 4
    batchsize: 30
    branchCalcWalltimeInH: 6
```

Abb. 3.7 KMACS-Eingabeformat zur Ansteuerung des Serpent-Backendmoduls in KMACS

Zusätzlich können eine Vielzahl von Parametern, die das Rechnen auf Rechenclustern vereinfachen, modifiziert werden. Diese Parameter erlauben es, die ausführbare Datei des Serpent-Programms (*executable*) zu spezifizieren und die Anzahl an Rechenkernen (*cpu*) sowohl für die Abbrandrechnung (*depletion*) als auch der einzelnen Verzweigungsrechnungen (*branching*) zu definieren. Des Weiteren werden Verzweigungsrechnungen in Chargen zusammengefasst, falls mehr als 270 Verzweigungsrechnungen durchgeführt werden. Die Chargengröße wird über den Parameter *batchsize* spezifiziert. Dies dient dazu, das *Queueing*-System des Rechenclusters nicht zu überfordern, da Verzweigungsrechnungen viele tausende Serpent-Rechnungen umfassen können. Auch kann die erwartete Zeitdauer einer einzelnen Verzweigungsrechnung (*branchCalcWalltimeInH*) angegeben werden. Für Chargenrechnungen wird diese Zeitdauer mit der Anzahl an Jobs pro Charge multipliziert. Für die Rechnungen auf dem GRS-Rechencluster wurden darauf angepasste Skripte bereitgestellt, um die Rechnungen automatisiert laufen zu lassen.

Darüber hinaus können Programmparameter für Serpent, wie z. B. die Anzahl an Neutronenhistorien, definiert werden. Auf deren Auflistung wird hier jedoch verzichtet. Deren Standardwerte sind in der Konfigurationsdatei „*serpentParameters.yaml*“ für das Serpent-Backendmodul hinterlegt.

Die Modellierung der Brennelemente und Reflektorelemente mit Serpent ist im Wesentlichen ähnlich zu den deterministischen Codesystemen wie NEWT. Einige Unterschiede ergeben sich bei der Anwendung globaler Randbedingungen in Serpent. Für zweidimensionale Modelle, wie sie hier verwendet werden, sind die globalen Randbedingungen in Serpent auf einige wenige Oberflächentypen beschränkt: Quadrat, Rechteck und

regelmäßiges Hexagon. Zudem lassen sich die Randbedingungen ausschließlich in x-, y- und z-Richtung definieren, wobei zum Beispiel in x-Richtung sowohl für die links- als auch rechtsseitige Grenzfläche dieselben Randbedingungen gelten. Daher werden die Wirkungsquerschnitte der 1D-Reflektoren mit einem Sandwich-Modell /USH 17/ erzeugt, wie es in Abb. 3.8 für ein Beispiel dargestellt wird. Zentral befinden sich nebeneinander zwei identische Brennelemente, um an der Grenzfläche zwischen den Brennelementen näherungsweise reflektierende Randbedingungen nachzubilden. Die Brennelemente dienen als Neutronenquellen für den Reflektor. Links und rechts von den Brennelementen folgen die Materialschichten der Reflektorelemente. In y- und z-Richtung werden reflektierende Randbedingungen und in x-Richtung Vakuumrandbedingungen angewandt.

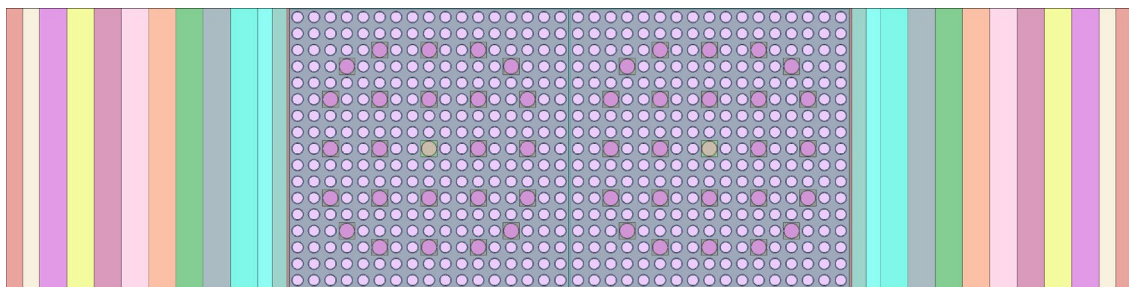


Abb. 3.8 Modellierung eines rechteckigen 1D-Reflektors in Serpent

Hexagonale Geometrien werden mit einem sogenannten *Y-type-Prisma*, also mit liegender Seitenfläche, modelliert, was der Darstellung in der KMACS-Eingabe entspricht. In Abb. 3.9 wird als Beispiel ein mit KMACS generiertes Serpent-Modell eines hexagonalen Brennelements mit reflektierenden Randbedingungen gezeigt.

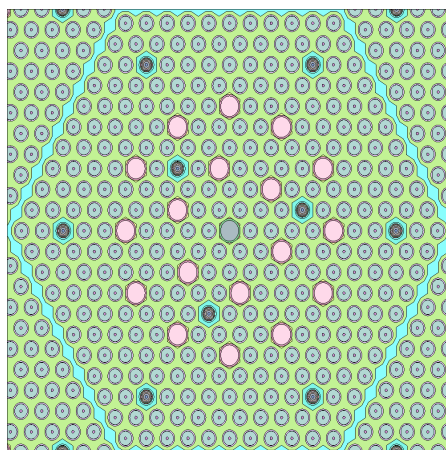


Abb. 3.9 Mit KMACS erstelltes Serpent-Modell eines hexagonalen Brennelements

Um für die hexagonale Brennelementgeometrie einen eindimensionalen Reflektor zu modellieren, wird analog zum quadratischen Brennelement das Sandwich-Modell angewandt. Ein Modell ist in Abb. 3.10 dargestellt. Eine Besonderheit dieser Berechnung ist, dass der Reflektor an der oberen, horizontalen Seitenfläche des Brennelements angebracht und das Brennelement vertikal an den Endpunkten der horizontalen Seitenflächen abgeschnitten wird.

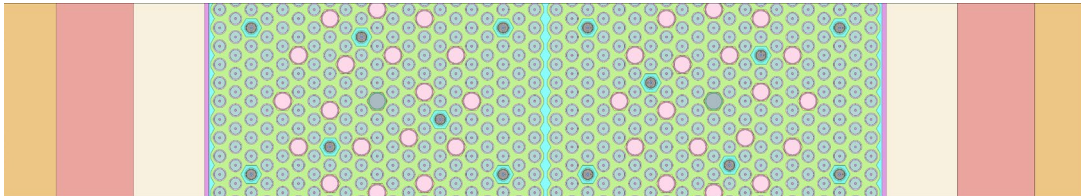


Abb. 3.10 Modellierung eines hexagonalen 1D-Reflektors in Serpent

Darstellung um 90° im Uhrzeigersinn gedreht.

Mit der Verwendung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten aus Serpent ist es noch nicht möglich, in KMACS das mikroskopische Abbrandverfahren mit dem Inventarcode VENTINA und die Wirkungsquerschnittskorrektur durchzuführen, da mikroskopische Wirkungsquerschnitte derzeit vom Serpent-Backendmodul nicht ausgelesen werden. Eine diesbezügliche Erweiterung ist grundsätzlich möglich und wird angestrebt.

Die Anbindung von Serpent zur Ermittlung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten für quadratische und hexagonale Kerngeometrien wurde mit verschiedenen Rechnungen in Kap. 3.5 verifiziert. Diese umfassen die Nachrechnung des Zustands Nulllast-Heiß und des ersten Betriebszyklus vom BEAVRS-Benchmark /HOR 18/ sowie die Nachrechnung des Zustands Nulllast-Heiß des X2-Benchmarks /BIL 20/.

Ein signifikanter Vorteil des Serpent-Codes gegenüber deterministischen Spektralcodes ist dessen flexibles Geometriepaket für die Modellierung komplexer Kernstrukturen. Nach /RAI 14a/ werden mit der Vorgehensweise der sogenannten *Full-Scale*-Homogenisierung zur Erzeugung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten im Vergleich zu einer Homogenisierung auf Brennelement-Level bessere Ergebnisse bei der Ganzkernrechnung erreicht. Da bei dieser Methode die gesamte Kerngeometrie berücksichtigt wird, stellt der für die spektrale Homogenisierung verwendete Neutronenfluss im Allgemeinen eine bessere Annäherung als jener bei Rechnungen im unendlichen Gitter dar. Da Ganzkernrechnungen mit der Monte-Carlo-Methode jedoch sehr rechenintensiv sind, wurde hier zunächst der im Vergleich dazu vereinfachte Ansatz verfolgt, Kernausschnitte, sogenannte Superzellen, zu modellieren, um bessere Wirkungsquerschnitte für

die Reflektoren zu erhalten. Hierbei werden Ausschnitte der radialen Kerngeometrie verwendet, um den räumlichen Verlauf und das Spektrum des Neutronenflusses realitätsnaher abzubilden. Ein Beispiel zur Berechnung der homogenisierten, radialen Reflektor-Wirkungsquerschnitte ist in Abb. 3.11 dargestellt. Aufgrund der Symmetrie des Kerns wird nur die Hälfte des Kernausschnitts abgebildet. Die Modellierung von Reflektor-Elementen anhand dieser Methode wurde mit der Nachrechnung des Zustands Nulllast-Heiß des BEAVRS-Benchmarks getestet (siehe Kap. 3.5).

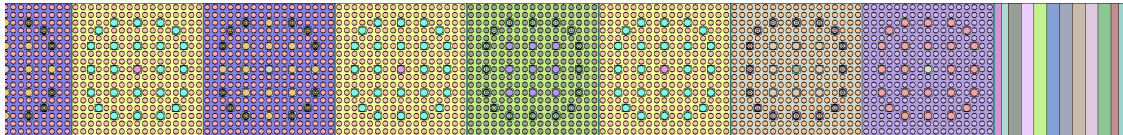


Abb. 3.11 Modellierung eines Reflektors mithilfe von Reaktorkernausschnitten in einem Superzellmodell mit Serpent

3.2 Verbesserung und Erweiterung des KMACS-Moduls zur gekoppelten Neutronenkinetik-/Thermohydraulikrechnung

Das KMACS-Modul *kflux* dient zur Durchführung von Ganzkernrechnungen mit oder ohne Berücksichtigung von thermohydraulischen Rückwirkungen sowie von nachgeschalteten Unterkanalthermohydraulikrechnungen. Dazu können je nach Problemstellung der Reaktordynamikcode DYN3D /ROH 16/, der Neutronenkinetikcode QUABOX/CUBBOX /LAN 77/, der Neutronenkinetikcode FENNECS /SEU 20/, /SEU 22/, der Thermohydrauliksystemcode ATHLET /SCH 24/ und der Unterkanalcode CTF /AVR 20/ angesteuert werden. Nachfolgend aufgeführte Arbeiten wurden durchgeführt, um das KMACS-Modul *kflux* zu verbessern und dessen Funktionsumfang zu erweitern.

3.2.1 Überarbeitung des ATHLET-Moduls

Maßnahmen zur Verbesserung der Wartbarkeit und Erweiterungsfähigkeit

In der vorigen Form erwies sich der Programmcode zur Ansteuerung von ATHLET im Laufe der Nutzung und Weiterentwicklung von KMACS als nicht ausreichend flexibel und wartbar. Verbesserungspotential der bisherigen Programmierung zeigte sich insbesondere

- in der Ansteuerung unterschiedlicher ATHLET-Versionen, bisher nicht nachhaltig gelöst durch Fallunterscheidungen,
- durch die fehlende Möglichkeit, mit geringem Aufwand Modelländerungen vornehmen zu können
- und bei den Komplikationen, die sich aus der Anforderung ergeben, weitere Neutronenflusslöser außer QUABOX/CUBBOX in KMACS mit ATHLET zu koppeln.

Das neue Konzept lagert die Definition der Struktur eines ATHLET-Modells in eine parametrisierbare YAML-Datei /BEN 09/ aus, in der Schablonen von Abschnitten des ATHLET-Eingabedatenformats vorgehalten werden. Zur Erstellung der ATHLET-Eingabedatei anhand des KMACS-Reaktormodells werden einzelne Abschnitte aus der YAML-Datei ausgelesen, mit Werten versehen und ausgeschrieben. Dadurch beschränken sich die Anpassungsarbeiten an KMACS bei Änderungen des ATHLET-Modells in Zukunft hauptsächlich auf die deklarative Modell-Datei. Die Notwendigkeit zur Überarbeitung des Codes wird dadurch erheblich reduziert.

Der gewählte Ansatz ermöglicht auf einfache Weise eine flexible Anpassung an die Anforderungen neuer ATHLET-Versionen ohne Fallunterscheidungen, indem für jede Version eine entsprechend benannte YAML-Datei bereitgestellt wird. Durch die fehlertolerante Datenversorgung der Schablonen mittels der Python-Routine `format()` und benannten Parametern ist gewährleistet, dass nicht benutzte Variablen aus älteren ATHLET-Versionen in neueren keine Probleme bereiten und umgekehrt.

Die technischen Anforderungen, die sich aus der gekoppelten Anwendung weiterer Neutronenflusslöser mit ATHLET in KMACS ergeben, ließen sich durch Einführung eines Parameter-Objekts erfüllen. Nach seiner programmspezifischen Instanziierung werden dessen Attribute dann ohne weitere Fallunterscheidungen verwendet.

Neben den genannten Maßnahmen zur Verbesserung der Flexibilität erfuhr das ATHLET-Modul auch eine technische Überarbeitung, die auf eine bessere Lesbarkeit und die Verwendung eines idiomatischen Python-Programmierstils abzielte. Durch die in diesem Zuge ebenfalls eingeführten Typ-Annotationen lässt sich der Code in Zukunft auf bestimmte Programmierfehler hin automatisch überprüfen. Weiterhin lässt sich nun einigen der dem Benutzer in der Konfiguration zugänglichen ATHLET-Variablen eine physikalische Einheit zuweisen.

Verbesserung des thermohydraulischen Modells

Auf der Grundlage des generalüberholten ATHLET-Moduls von KMACS wurden Änderungen an dem verwendeten thermohydraulischen Kernmodell vorgenommen, um es realitätsnäher zu gestalten und technische Unzulänglichkeiten zu beheben.

In seiner vorigen Version bestand das Modell aus parallelen, nichtkommunizierenden Thermofluidobjekten, denen als Randbedingung jeweils ein identischer Massenstrom aufgeprägt wurde. In der überarbeiteten Variante ist strömungstechnisch unterhalb der Füße der Kernkanäle ein unteres Plenum mit einem Einlass und oberhalb ein oberes Plenum mit einem Auslass geschaltet. Durch die Einführung der Plena modelliert mit ATHLET-"branch"-Objekten können die im Modell nicht querverbundenen Kernkanäle über Druckschwankungen in Wechselwirkung treten und sich der Gesamtmassenstrom auf die Kernkanäle aufteilen.

Eine Ungenauigkeit des bisherigen Modells bestand in der Definitionsreihenfolge der Thermofluidobjekte, die vom Kerneintritt startete, was zur Folge hatte, dass ATHLET aufgrund seiner Funktionsweise die angelegte Druckrandbedingung am Kernaustritt nur näherungsweise erfüllen konnte. Deshalb wurde diese Reihenfolge entsprechend abgeändert. Außerdem wurde die Anzahl der ATHLET-Fluidsysteme auf zwei reduziert, eines für die Kernkanäle und eines für die Kernumströmung ("bypass"). Durch die Anpassungen verringert sich auch die Zahl der für ATHLET benötigten GCSM-Signale erheblich. Zusätzlich eingeführte Parameter, die am Anfang des Eingabedatensatzes definiert und an anderen Stellen verwendet werden, sorgen für eine bessere Wartbarkeit und vermeiden Fehler bei Änderungen. Das überarbeitete ATHLET-Modell wurde in den in Kap. 3.5 dargestellten Kernsimulatorrechnungen mit KMACS angewendet.

Nutzung von ATHLET als Thermohydrauliklöser in DYN3D

Analog zum Ansprechen der Kopplung von QUABOX/CUBBOX und ATHLET wurde im Zuge der Überarbeitung des ATHLET-Moduls auch ein Ansprechen von DYN3D als Flusslöser gekoppelt mit ATHLET umgesetzt. Dazu waren dank der vorherigen Überarbeitung des ATHLET-Moduls von KMACS nur Anpassungen in geringerem Umfang an den ATHLET-Datensatz-Schablonen und dem Quellcode nötig.

Obwohl die generierten Eingabedatensätze für z. B. den Reaktorkern des BEAVRS-Benchmarks lauffähig sind, ist der entsprechende Entwicklungszweig noch nicht in der Freigabeversion integriert worden, weil das gekoppelte Codesystem einige benötigte Ausgabevariablen derzeit nicht in seiner Ausgabedatei bereitstellt und die Testphase noch nicht abgeschlossen ist.

3.2.2 Modellierung von heterogenen Steuerstäben

Einige Druckwasserreaktoren insbesondere vom Typ WWER, aber auch einige westliche Modelle (siehe z. B. das TVA Watts Bar Unit 1-Benchmark /ALB 25/), haben Steuerstäbe, die in axialer Richtung aus mehreren unterschiedlichen Absorbermaterialien bestehen. In KMACS wurde durch eine Erweiterung der Eingabedatensatzerstellung für den Flusslöser die Möglichkeit implementiert, diese Steuerstabtypen abzubilden. Weil QUABOX/CUBBOX nicht in der Lage ist, derartige Inhomogenitäten zu modellieren, beschränkt sich die Unterstützung in KMACS zurzeit auf DYN3D. Um Multi-Absorber-Steuerstäbe in KMACS einführen zu können, wurde die Namenskonvention für kontrollierte Materialien von `<material>(C)` auf `<material>@<absorber>` geändert. Als Nebeneffekt der Code-Überarbeitung lassen sich nun auch in QUABOX/CUBBOX mehrere homogene Steuerstabtypen verwenden.

Die KMACS-Eingabe für die Steuerstabbänke wurde überarbeitet. Anstelle einer Auflistung aller einzelnen Steuerstabbänke gibt der Benutzer jetzt Steuerstabtypen an. Die Konfiguration eines Typs umfasst eine Liste von Steuerstabbänken, die von diesem Typ sind, eine Liste der Absorbermaterialien und bei segmentierten Steuerstäben mit mehr als einem Absorbermaterial eine Liste von Segmentlängen. Außerdem wurde in der KMACS-Eingabe bei einer Materialdefinition der Abschnitt zu Steuerstäben durch einen Eintrag mit einer Liste von Steuerstabtypen ersetzt. Die genaue Spezifizierung der Zusammensetzung und Geometrie der Absorbermaterialien wurde in einen eigenen

Unterabschnitt in der Materialkonfiguration von KMACS ausgelagert. Ein Beispiel des neuen Formats findet sich in Abb. 3.12.

Die Modellierung von heterogenen Steuerstäben in DYN3D wurde in den Kernsimulatorrechnungen zum X2-Benchmark und zum TVA Watts Bar Unit 1-Benchmark in Kap. 3.5 eingesetzt.

```
core:
  controlRods:
    types:
      type1:
        banks: [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10]
        absorbers: [dy2o3tio2, b4c]
        deltas: [!unit 30.0 cm]

materials:
  absorber:
    b4c:
      compositions: [b4c, steel]
      temperatures: [moderator, moderator]
      radii: *controlRodRadii

    dy2o3tio2:
      compositions: [dy2o3tio2, steel]
      temperatures: [moderator, moderator]
      radii: *controlRodRadii
```

Abb. 3.12 Ausschnitt aus einer KMACS-Eingabe mit einem segmentierten Steuerstabtyp

3.2.3 Modellierung von ATF-Brennstäben mit Hüllrohrbeschichtung

Im Forschungsvorhaben RS1564 /AUR 21a/ wurden bei der automatisierten Erstellung des ATHLET-Eingabedatensatzes durch KMACS zusätzliche Anforderungen an die Modellierung von Hüllrohren mit einer zusätzlichen Beschichtung identifiziert. Solche Hüllrohrbeschichtungen sind vor allem für sogenannte *Accident-Tolerant Fuels* (ATF) von Bedeutung, da diese vom herkömmlichen Aufbau eines Brennstabs mit z. B. einer UO₂-Brennstofftablette in einem ausschließlich aus Zircaloy bestehenden Hüllrohr durch eine aus Chrom bestehende Zusatzschicht abweichen.

In diesem Forschungsvorhaben wurde die Eingabedatensatzerstellung für das ATHLET-Thermohydraulikmodell sowie die KMACS-Eingabe erweitert, um Brennstäbe mit einer zusätzlichen Hüllrohrbeschichtung in den gekoppelten Ganzkernrechnungen von KMACS modellieren zu können.

Im ATHLET-Modell von KMACS wird dazu das Wärmeleitobjekt eines ATF-Brennelements mit einer zusätzlichen, in zwei Knoten unterteilten Zone versehen ($N30=2$), die die Beschichtung abbildet. In Abb. 3.13 sind die Ausschnitte eines Datensatzes für Brennelemente mit und ohne Hüllrohrbeschichtung dargestellt.

K----	H_CORE1...									
-----	GEOMETRY...									
-----	HTCDEF									
@AIAL(1)	AIAL(2)	AIAL(3)	AIAL(4)							
DUMMY	HTCL	HTCL	HTCCALC							
@SHO	HTCL0(1)	HTCL0(2)	HTCL0(3)	HTCL0(4)	QTHRU0					
0.0	0.00000	6000.00	100000.	40000.0	0.00000					
-----	MATPROP									
@AMATL0(1)		AMATL0(2)	AMATL0(3)							
UO2		CLADDING	CPLCHROMIU							

K----	H_CORE6...									
-----	GEOMETRY...									
-----	HTCDEF									
@AIAL(1)	AIAL(2)	AIAL(3)	AIAL(4)							
DUMMY	HTCGAP	HTCCALC	DUMMY							
@SHO	HTCL0(1)	HTCL0(2)	HTCL0(3)	HTCL0(4)	QTHRU0					
0.0	0.00000	6000.00	40000.0	0.00000	0.00000					
-----	MATPROP									
@AMATL0(1)		AMATL0(2)	AMATL0(3)							
UO2		CLADDING	DUMMY							

Abb. 3.13 Modellierung der Wärmeleitung in einem Brennelement mit (links) und ohne (rechts) Hüllrohrbeschichtung im Abschnitt HEATCOND

Weil die in ATHLET implementierten Korrelationen der Spaltwärmeleitfähigkeit (Modell `HTCGAP` im unbeschichteten Brennelement) nur für zwei Zonen ausgelegt sind, muss sowohl diese Größe (`HTCL0(2)`) als auch der Wärmeübergangskoeffizient zwischen Hüllrohrmaterial und Beschichtung (`HTCL0(3)`) mit einer Konstanten (Modell `HTCL`) angenähert werden. Die Temperaturabhängigkeit von der Wärmekapazität (`CP`), der Wärmeleitfähigkeit (`WLF`) und der Dichte (`RHO`) des Beschichtungsmaterials werden in Form von Tabellen hinterlegt (Referenzierung in `AMATL0(3)`).

Die KMACS-Eingabe zur Definition der Materialzusammensetzungen `compositions` wurde, wie in Abb. 3.14 beispielhaft für Chrom (`chromium`) gezeigt, um den Eintrag `tables` erweitert, um für das Material der Hüllrohrbeschichtung die Wärmekapazität (`heatCapacity`), Wärmeleitfähigkeit (`heatTransferCoefficient`) und die Dichte (`density`) in Abhängigkeit der Temperatur vorgeben zu können, die dann in den ATHLET-Eingabedatensatz als Tabellen übernommen werden. Unter dem Eintrag `htcs` muss der Wärmeübergangskoeffizient vom Hüllrohrmaterial auf das Material der Hüllrohrbeschichtung vorgegeben werden (Eintrag `HTCL0(3)` in Abb. 3.13, links). Ferner müssen die mit einer Hüllrohrbeschichtung versehenen Brennelementmaterialien mit dem Eintrag `coated: True` versehen werden, sodass bei Erstellung des ATHLET-Modells für diese Brennelemente das Wärmeleitobjekt mit Hüllrohrbeschichtung definiert wird.

```

htcs:
  zirc4-chromium: 1e5

compositions:
  chromium:
    type: atomsPerBarnCm
    components:
      24050: 3.62328E-03
      24052: 6.98714E-02
      24053: 7.92286E-03
      24054: 1.97217E-03
    tables:
      heatCapacity:
        temperatures: [!unit 100 K, 200, 300, 400, 600, 800, 1000, 1200,
                          1500, 2000]
        values: [!unit 0.192 kJ/(kg*K), 0.384, 0.449, 0.484, 0.542,
                  0.581, 0.616, 0.682, 0.779, 0.937]
      heatTransferCoefficient:
        temperatures: [!unit 100 K, 200, 300, 400, 600, 800, 1000, 1200,
                          1500, 2000]
        values: [!unit 159 W/(m*K), 111, 93.7, 90.9, 80.7, 71.3, 65.4,
                  61.9, 57.2, 49.4]
      density:
        temperatures: [!unit 100 K, 200, 300, 400, 600, 800, 1000, 1200,
                          1500, 2000]
        values: [!unit 7224.27 kg/m^3, 7214.34, 7199.61, 7183.06,
                  7147.17, 7107.44, 7063.08, 7012.28, 6920.08, 6677.11]

```

Abb. 3.14 Format der zusätzlichen ATF-Konfigurationseinträge „htcs“, „tables“ in der KMACS-Eingabe

Um die erweiterte ATHLET-Eingabedatensatzerstellung zu erproben, wurde wie bereits bei früheren Kernsimulator-Rechnungen mit ATF-Brennstoffen /AUR 21a/ auf das BEAVRS-Benchmark /HOR 18/ zurückgegriffen und bei der Kernbeladung des ersten Zyklus bei 32 von 193 Brennelementen eine zusätzliche Hüllrohrbeschichtung aus Chrom angewendet. Dies betrifft Brennelemente mit UO_2 -Brennstoff mit einer U-235-Anreicherung von 3,1 Gew.-%. Die Positionen der modifizierten Brennelemente im Kernlayout werden in Abb. 3.15 dargestellt. Für die Hüllrohrbeschichtung wurde eine Dicke von 0,05 mm angewendet. Damit der Außendurchmesser des Hüllrohres erhalten bleibt, wurde die Dicke des eigentlichen Hüllrohrmaterials Zircaloy-4 entsprechend verringert.

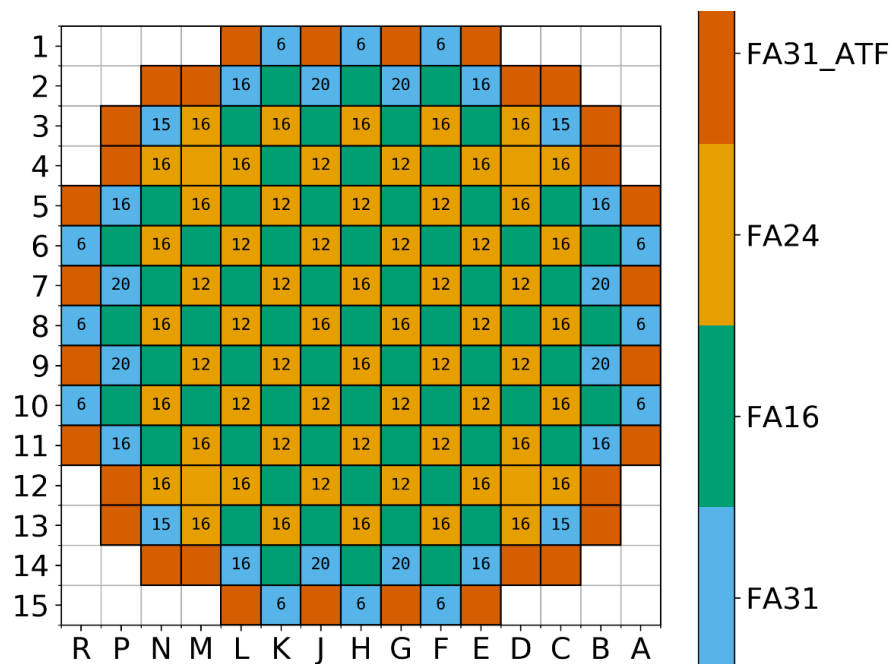


Abb. 3.15 Kernbeladung mit Verwendung einer Chrom-Hüllrohrbeschichtung bei Brennelementen auf roten FA31_ATF-Positionen

Die Verwendung der zusätzlichen Chrom-Hüllrohrbeschichtung führt zu einer kritischen Borkonzentration, die, wie in Abb. 3.16 gezeigt, über den gesamten Zyklus um Werte von 11 ppm bis zu 17 ppm unter der kritischen Borkonzentration der Kernbeladung ohne Hüllrohrbeschichtung liegt. Die Beobachtung einer geringeren Borkonzentration und folglich einer geringeren Überschussreaktivität für den Kern mit der Hüllrohrbeschichtung aus Chrom ist in Übereinstimmung mit Ergebnissen aus dem Forschungsvorhaben RS1564 /AUR 21a/: Brennelementrechnungen im unendlichen Gitter durchgeführt mit NEWT und Serpent ermittelten für das Brennelementmodell mit einer Chrom-Hüllrohrbeschichtung einen um etwa 1000 pcm geringeren Multiplikationsfaktor als für das Brennelementmodell ohne Hüllrohrbeschichtung. Ursache ist die geringfügig höhere Neutronenabsorption von elementarem Chrom gegenüber Zircaloy.

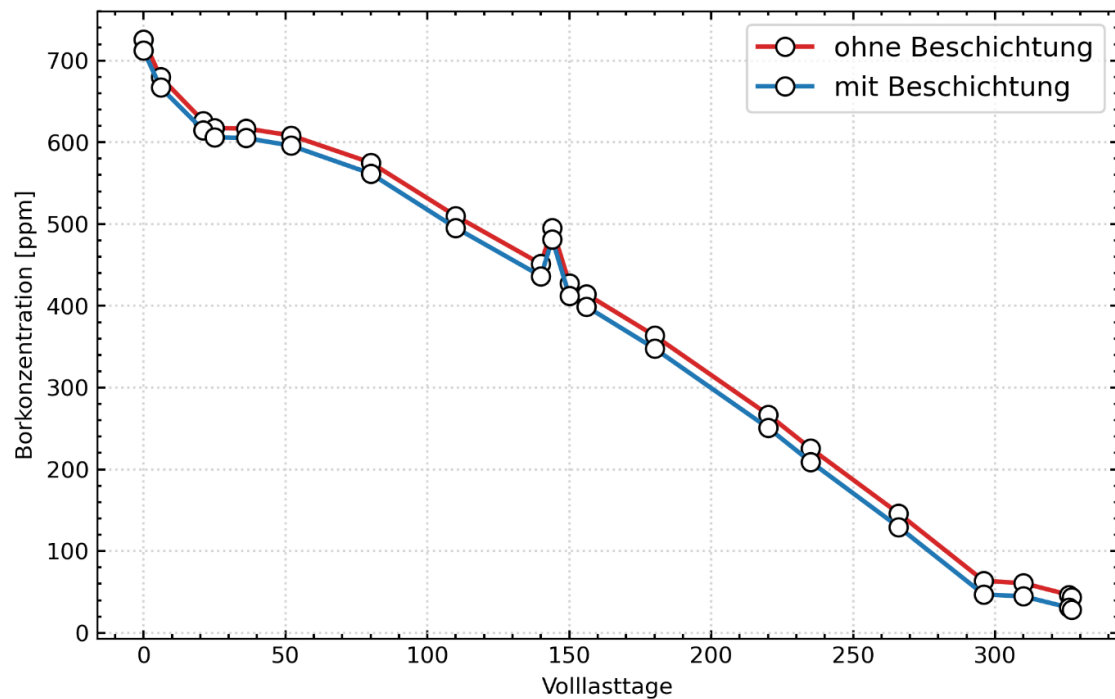


Abb. 3.16 Kritische Borkonzentration ohne Hüllrohrbeschichtung sowie mit einer Chrom-Hüllrohrbeschichtung bei 32 von 193 Brennelementen

3.2.4 Verbesserung und Erweiterung der Funktionalität zu nachgeschalteten Unterkanalthermohydraulikrechnungen

Im Forschungsvorhaben RS1564 /AUR 21a/ wurde das KMACS-Modul *kpostal* zur Ermittlung stabaufgelöster Werte des Abstands zum Filmsieden (engl. Departure from Nucleate Boiling Ratio, DNBR) für quadratische Brennelementgeometrien implementiert. Dazu erstellt *kpostal* unter Verwendung des auf Python basierenden Präprozessorpakets SubKit /SAL 19/ Eingabedatensätze für den Unterkanalthermohydraulikcode COBRA-TF (CTF) /SAL 20/. Anschließend führt *kpostal* die CTF-Rechnung aus, extrahiert die DNBR-Werte aus der CTF-Ausgabe und speichert diese in der KMACS-Datenbank.

Im Rahmen dieses Forschungsvorhabens wurde *kpostal* für die Durchführung von CTF-Rechnungen von hexagonalen Brennelementgeometrien erweitert. Im CTF-Codepaket steht ein auf Fortran basierender Präprozessor zur Erstellung von CTF-Eingabedatensätzen für hexagonale Brennelemente zur Verfügung. Da eine Schnittstelle zwischen dem Python-Code von KMACS und dem Fortran-Code des Präprozessors aufwendig instandzuhalten wäre, wurde auf die Implementierung einer solchen Schnittstelle verzichtet und in Anlehnung an SubKit ein eigener Präprozessor zur Erstellung von CTF-

Eingaben für hexagonale Brennelemente entwickelt. Entsprechend der in der KMACS-Eingabe vorgegebenen axialen Unterteilung für die Ganzkernrechnungen wird das Brennelement im CTF-Modell in gleiche axiale Ebenen unterteilt. Mit der Herangehensweise einer kanal-zentrierten Modellierung werden auf jeder axialen Ebene Teilumfänge benachbarter Brennstäbe an jeweils einen thermohydraulischen Kanal geknüpft. In Abb. 3.17 wird ein solches kanal-zentriertes CTF-Modell schematisch dargestellt.

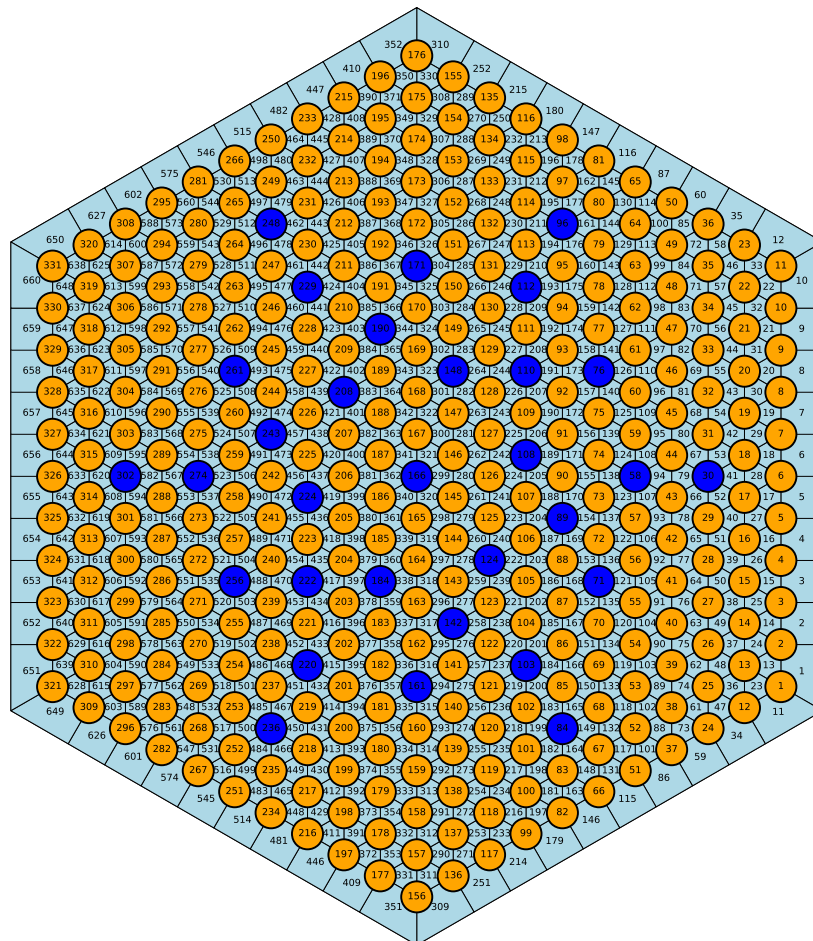


Abb. 3.17 Schematische Darstellung eines CTF-Modells für ein hexagonales Brennelement

Orange: Brennstäbe

Dunkelblau: Steuerstabführungsrohre

Hellblau: thermohydraulische Kanäle

Die Routinen zum Auslesen der stabaufgelösten DNBR-Werte wurden für hexagonale Brennelementmodelle entsprechend erweitert. Da in dem kanal-zentrierten CTF-Modell ein Brennstab je nach Position im Brennelement mit 4, 5 oder 6 Kanälen verknüpft ist und für jeden Teilumfang des Brennstabs ein eigener DNBR-Wert ermittelt wird, wird

über die Auswahl von Werten der minimale DNBR-Wert identifiziert und als Ergebnisgröße für den Brennstab in der KMACS-Datenbank gespeichert. Dies geschieht für jede axiale Ebene des Brennelementmodells.

Zur Ausführung der nachgelagerten Unterkanalanalysen wurde die Befehlszeilenschnittstelle um den Unterbefehl *analyse* erweitert, um das KMACS-Treiberprogramm (siehe Kap. 3.6.1) anzuweisen, entsprechende CTF-Rechnungen auszuführen. Der Benutzer gibt den Betriebszyklus, den Zykluszeitpunkt und das Brennelement an. Die Auswahl des Brennelements erfolgt dabei entweder explizit über seine Koordinaten oder implizit über den Bezeichner *hot*, wodurch KMACS das zu diesem Zeitpunkt höchstbelastete Brennelement auswählt.

Um die neuen Ergebnisgrößen zu visualisieren, wurde die Darstellung von stabaufgelösten Variablen für hexagonale Brennelemente im KMACS-Modul *kvip* nachgerüstet. Die neue Datenbankvariable *dnbr* wurde dafür eingeführt, die optional ist und nur bei Bedarf angelegt wird.

3.2.5 Automatisierte Ermittlung von Ergebnisgrößen aus Anfahrtests

Neben der Berechnung von Betriebszyklen werden Kernsimulatoren auch dazu verwendet, im Rahmen von Anfahrtests bei Nullleistung Vorhersagen zur kritischen Borkonzentration bei gegebenen Steuerstabstellungen, zur Wirksamkeit von Steuerstäben und zu Reaktivitätskoeffizienten, z. B. den Dopplerkoeffizienten, den isothermen Temperaturkoeffizienten und der differentiellen Borwirksamkeit zu treffen. Um die Berechnung dieser Größen mit KMACS zu ermöglichen, wurde zunächst die Definition eines Betriebszyklus in der KMACS-Eingabe um den optionalen Eintrag `reactivityStates` erweitert. Der beispielhafte Auszug aus einer KMACS-Eingabe in Abb. 3.18 zeigt, dass für den Betriebszyklus `hzbCycle1` zu Zyklusbeginn die jeweiligen Betriebsbedingungen, zu denen Kritikalitätsrechnungen durchgeführt werden, um über die resultierenden Multiplikationsfaktoren k_{eff} die Steuerstabwirksamkeiten oder Reaktivitätskoeffizienten zu berechnen:

- `ex1_a1`: Bestimmung von k_{eff} , um diesen mit einem Messwert oder Benchmarkwert bei einer kritischen Borkonzentration und ausgefahrenen Steuerstabbänken sowie vorgegebener Brennstofftemperatur und Moderatorichte vergleichen zu können,
- `ex1_a2`: Wie `ex1_a1` jedoch mit teils eingefahrenen Steuerstabbänken,
- `ex1_b`: Bestimmung des isothermen Temperaturkoeffizienten [pcm/K] mittels zweier Kritikalitätsrechnungen bei unterschiedlichen Brennstoff- und Moderatortemperaturen (implizit über Moderatorichte),
- `ex1_c1` ... `ex1_c10`: Kritikalitätsrechnungen zur Bestimmung der differentiellen Steuerstabwirksamkeit der D-Bank,
- `ex1_d`: Bestimmung der Borwirksamkeit mittels Kritikalitätsrechnungen bei zwei unterschiedlichen Borkonzentrationen,
- `ex1_e`: Bestimmung des Dopplerkoeffizienten mittels Kritikalitätsrechnungen bei zwei unterschiedlichen Brennstofftemperaturen.

```

hzipCycle1:
  layout: *layout1
  operation:
    effectiveFullPowerDays: [0]
    relativePower: [0.001]
    inletTemperature: [!unit 565 K]
    controlRodInsertion:
      D: [!unit 0.0 cm]
  reactivityStates:
    ex1_a1: # Steuerstabbaenke ausgefahren, k-eff bei krit. Borkonzentration
      branching:
        fuelTemperature: !unit 565 K
        moderatorDensity: !unit 0.743 g/cm^3
        boronConcentration: !unit 1291 ppmB

    ex1_a2: # A und D eingefahren, k-eff bei krit. Borkonzentration
      branching: &branchingEx1a3
        fuelTemperature: !unit 565 K
        moderatorDensity: !unit 0.743 g/cm^3
        boronConcentration: !unit 1170 ppmB
      controlRodInsertion:
        A: !unit 360.68 cm # voll eingefahren
        D: !unit 206.6925 cm # teilweise eingefahren

    ex1_b: # Bestimmung isothermer Temperaturkoeffizient
      branching:
        fuelTemperature: [!unit 560 K, 570]
        moderatorDensity: [!unit 0.752 g/cm^3, 0.733]
        boronConcentration: !unit 1291 ppmB

    ex1_c1: # Bestimmung differentielle Steuerstabwirksamkeit der Bank D
      branching: &branchingEx1f1
        fuelTemperature: !unit 565 K
        moderatorDensity: !unit 0.743 g/cm^3
        boronConcentration: !unit 1230 ppmB
      controlRodInsertion:
        D: !unit 360.68 cm # voll eingefahren

    ex1_c2:
      branching: *branchingEx1f1
      controlRodInsertion:
        D: !unit 323.1675 cm # teilweise eingefahren

    ex1_c3:
      branching: *branchingEx1f1
      controlRodInsertion:
        D: !unit 287.6550 cm # teilweise eingefahren

    ...
    ex1_c10:
      branching: *branchingEx1f1
      controlRodInsertion:
        D: !unit 0.0 cm # voll ausgefahren

    ex1_d: # Bestimmung Borwirksamkeit
      branching:
        fuelTemperature: !unit 565 K
        moderatorDensity: !unit 0.743 g/cm^3
        boronConcentration: [!unit 1170 ppmB, 1291]

    ex1_e: # Bestimmung Dopplerkoeffizient
      branching:
        fuelTemperature: [!unit 560 K, 570]
        moderatorDensity: !unit 0.752 g/cm^3
        boronConcentration: !unit 1291 ppmB

```

Abb. 3.18 KMACS-Eingabeformat zur Berechnung von Steuerstabwirksamkeiten und Reaktivitätskoeffizienten

Die derzeitige Implementierung in KMACS führt für die jeweils unter `reactivityStates` aufgeführten Betriebsbedingungen Kritikalitätsrechnungen durch und stellt die Werte für k_{eff} bereit. Die Berechnung der Reaktivitätskoeffizienten wird derzeit dem Anwender überlassen, da sich z. B. je nach Benchmark die Definition der Reaktivitätskoeffizienten unterscheiden kann. Am Beispiel des TVA Watts Bar Unit 1-Benchmarks wurde diese in KMACS neu implementierte Funktionalität erprobt. Entsprechende Ergebnisse werden in Kap. 3.5 vorgestellt.

3.3 Anbindung des Finite-Elemente-Neutronendiffusionscodes FENNECS an KMACS

Der von der GRS entwickelte Neutronenkinetikcode FENNECS /SEU 20/, /SEU 22/ löst die Neutronendiffusionsgleichung mittels einer Finite-Elemente-Methode. Durch die räumliche Diskretisierung der Kerngeometrie in endlich viele Elemente bietet FENNECS die Möglichkeit, komplexe oder irreguläre Kerngeometrien innovativer Reaktorsysteme darzustellen. Zur Diskretisierung einer Kerngeometrie und zur Eingabedatensatzerstellung für FENNECS steht der ebenfalls von der GRS entwickelte Code PEMTY (*Python External Meshing Tool for Yaml input*) zur Verfügung. Zur Modellierung thermohydraulischer Rückwirkungen auf die Neutronenkinetik ist FENNECS zudem mit dem Thermohydrauliksystemcode ATHLET /SCH 24/ gekoppelt /BOU 20/.

Um FENNECS sowie FENNECS-ATHLET für Ganzkernrechnungen in KMACS einsetzen zu können und dadurch das Anwendungsspektrum von KMACS zukünftig auf komplexe Reaktorgeometrien auszudehnen, wurde das KMACS-Modul *kflux* um eine entsprechende Schnittstelle zur Durchführung von FENNECS-Rechnungen erweitert. Die dafür implementierten Programmaufrufe `pre()` und `run()` rufen im Wesentlichen PEMTY auf, um auf Basis der KMACS-Eingabe die Eingaben für FENNECS zu erstellen und die FENNECS-Rechnung auszuführen. Im Fall einer gekoppelten Rechnung mit ATHLET wird zudem die entsprechende KMACS-Schnittstelle zur Erstellung des ATHLET-Modells aufgerufen. Dabei wurde von der Umstellung der ATHLET-Eingabedatensatzerstellung auf parametrisierte Schablonen des ATHLET-Eingabedatenformats profitiert (siehe Kap. 3.2.1), da die zur Kopplung mit FENNECS notwendigen Eingabewerte in der Schnittstelle zu ATHLET hinterlegt und im Fall einer FENNECS-ATHLET-Rechnung in den ATHLET-Eingabedatensatz eingetragen werden können. In die KMACS-Schnittstelle zu FENNECS wurde der Programmaufruf `post()` implementiert, um FENNECS-Ergebnisse auslesen und in der KMACS-Datenbank speichern zu

können. Handelt es sich um eine FENNECS-ATHLET-Rechnung, wird zudem die KMACS-Schnittstelle zu ATHLET angewiesen, auch die ATHLET-Ergebnisse auszulesen und zu speichern.

Zusätzlich zu den Arbeiten an KMACS wurden Erweiterungen an PEMTY und FENNECS vorgenommen. Zur Berücksichtigung einer dreidimensionalen Abbrandverteilung, die sich im Verlauf einer Zyklusrechnung einstellt, wurde PEMTY dahingehend erweitert, diese Verteilung aus der KMACS-Datenbank zu lesen und als Eingabedatei für FENNECS zu schreiben. In FENNECS wurde die Verarbeitung dieser Werte ergänzt, um mit diesen die Interpolation der homogenisierten Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte entsprechend den zu einem Zykluszeitpunkt gültigen Abbrandwerten vorzunehmen. Ferner wurde FENNECS um die diskontinuierliche Galerkin-Methode zur Lösung der Neutronendifusionsgleichung ergänzt. Mit dieser Methode ist es möglich, die Diskontinuitätsfaktoren aus der Vorausrechnung der Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte bei der Lösung der Neutronendifusionsgleichung zu verwenden, um insbesondere für Leichtwasserreaktoren eine bessere Vorhersage der Verteilung des homogenen Neutronenflusses und somit der Leistung zu erzielen.

Die Anwendung von FENNECS in KMACS wurde mittels stationärer Ganzkernrechnungen des Forschungsreaktors SPERT III /OLS 22a/ erprobt. Dieser Forschungsreaktor wurde in den 1960er Jahren in den USA zur Untersuchung des neutronenkinetischen Verhaltens bei Reaktivitätstransienten betrieben. Der Kern bestand aus 60 Brennelementen, jeweils mit 16 bzw. 25 Brennstäben mit UO_2 -Brennstoff bei einer U-235 Anreicherung von 4,8 Gew.-%. Der Gitterabstand der Brennelemente betrug 7,62 cm, der Gitterabstand der Brennstäbe 1,067 cm. Der Kern wies eine aktive Kernhöhe von 97,28 cm auf. Die Kritikalität wurde durch das Ausfahren einer Steuerelementgruppe bestehend aus acht Steuerelementen eingestellt, da der Reaktor ohne Zusatz von Bor im Moderator betrieben wurde. Der obere Teil der Steuerelemente bestand aus einem quadratischen Hohlprofil, gefertigt aus Edelstahl und versetzt mit B-10 als Neutronenabsorber. Der untere Teil beinhaltete ein Brennelement mit 16 Brennstäben, das je nach Einfahrtiefe der Steuerelemente aus dem aktiven Kernbereich nach unten herausragte. Die Reaktivitäts-transienten wurden durch Auswurf eines zentralen, kreuzförmigen Steuerstabs ausgelöst /AUR 21b/.

Auf der Basis von nominalen Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten, die mit NEWT im Rahmen der Unsicherheitsanalyse des SPERT III Reaktivitätsexperiments *Test 43* (siehe Kap. 4.3.1) bestimmt wurden, wurden FENNECS-Rechnungen an verschiedenen

Ausfahrhöhen der Steuerelementgruppe durchgeführt, um darüber die Wirksamkeit dieser Steuerstabgruppe zu ermitteln. Zum Vergleich wurde dies mit dem Reaktordynamikcode DYN3D /ROH 16/ wiederholt. Als Referenz dienten Ergebnisse von Monte-Carlo-Ganzkernrechnungen mit Serpent. Abb. 3.19 stellt für die drei Modelle die Verläufe der Multiplikationsfaktoren k_{eff} in Abhängigkeit der Ausfahrhöhe dar, wobei als Ausfahrhöhe die Distanz zwischen der Unterkante des aktiven Kernbereichs und dem Übergang vom unteren zum oberen Teil der Steuerelemente definiert ist. Bis zu einer Ausfahrhöhe von ca. 20 cm sagen FENNECS (grün) und DYN3D (orange) eine deutlich höhere Reaktivität des Kerns als das Serpent-Modell (blau) voraus, wobei dies im deutlich unterkritischen Bereich liegt. Vermutet wird, dass das Serpent-Modell die Absorptionswirkung der Steuerelementgruppe deutlich größer schätzt. Ab ca. 40 cm Ausfahrhöhe weisen die FENNECS-Ergebnisse eine gute Übereinstimmung mit den Ergebnissen von Serpent auf. DYN3D zeigt im Bereich um ca. 24 cm eine gute Übereinstimmung, unterschätzt jedoch bei weiterer Ausfahrhöhe das Serpent-Ergebnis.

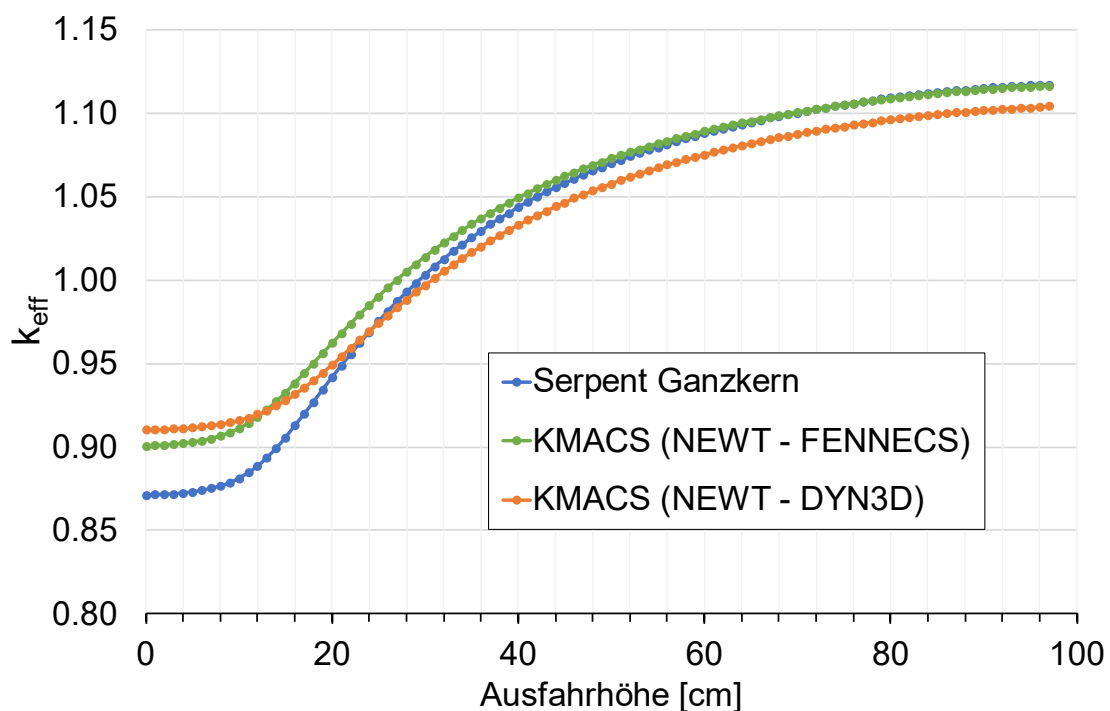


Abb. 3.19 Steuerstabwirksamkeit ermittelt mit NEWT-FENNECS und NEWT-DYN3D im Vergleich zu einer Serpent Monte-Carlo-Rechnung

Als zweiter Test wurde mittels einer Nachrechnung des ersten Betriebszyklus des BEAVRS-Benchmarks die Anwendung von FENNECS-ATHLET für gekoppelte Ganzkernrechnungen im Rahmen von Zyklusabbbrandrechnungen mit KMACS erprobt. In Abb. 3.20 wird die berechnete kritische Borkonzentration als Funktion der Volllasttage zusammen mit den Messergebnissen des Benchmarks gezeigt. Im ersten Drittel des Zyklus wird die Borkonzentration leicht unterschätzt. Ab etwa 100 Volllasttagen liegt sie in sehr guter Übereinstimmung mit den Messwerten. Über den gesamten Zyklus wird eine absolute Abweichung von 25 ppm nicht überschritten.

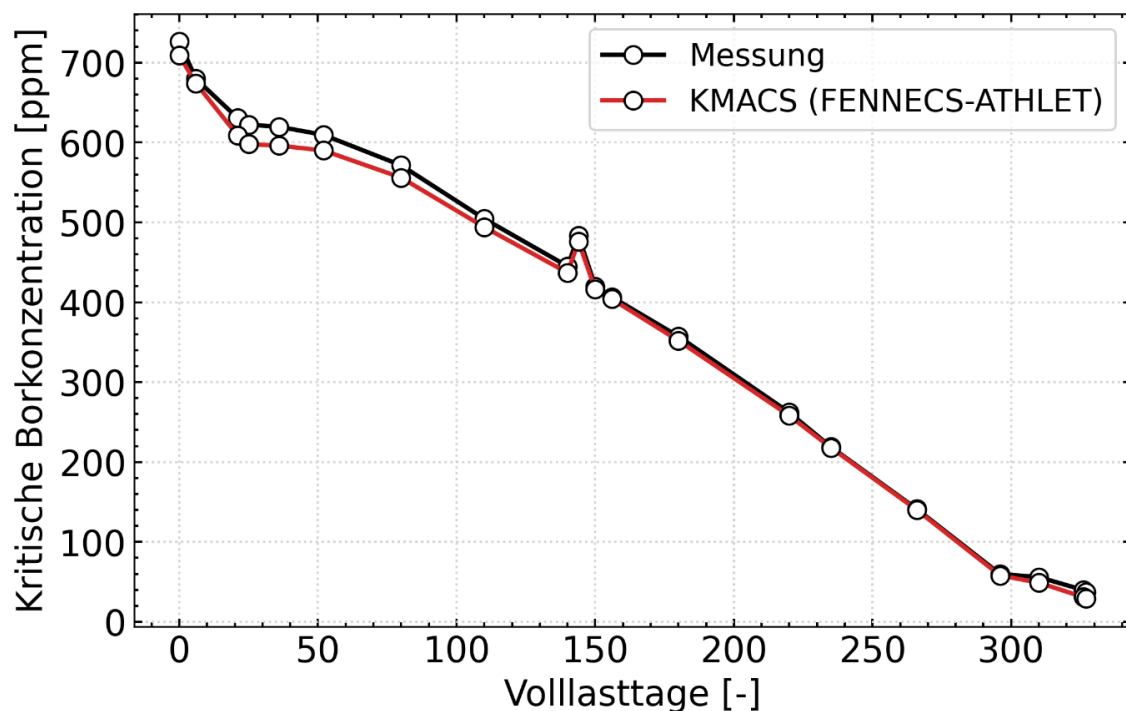


Abb. 3.20 Kritische Borkonzentration ermittelt mit FENNECS-ATHLET in KMACS im Vergleich zu Messwerten des BEAVRS-Benchmarks

Die FENNECS-Ergebnisse für SPERT III und die FENNECS-ATHLET-Ergebnisse für den ersten Betriebszyklus des BEAVRS-Benchmarks zeigen, dass FENNECS im Rahmen von Kernsimulatorrechnungen mit KMACS erfolgreich eingesetzt werden kann.

3.4 Überprüfung der Anwendbarkeit von KMACS auf LW-SMR

Zur Überprüfung der Anwendbarkeit von KMACS für Kernsimulatorrechnungen von LW-SMR wurde zunächst generell zu LW-SMR und auch konkret zum LW-SMR von NuScale Power LLC recherchiert. Jedoch sind die öffentlich verfügbaren Daten nicht in einem Detaillierungsgrad gegeben, um auf deren Grundlage einen KMACS-Eingabedatensatz

für die Vorausrechnung der Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte sowie für die anschließende Ganzkernrechnung zu erstellen. Schließlich wurde für die Modellierung in KMACS der in /FRI 23/ vorgeschlagene LW-SMR aufgegriffen, der für Vergleichsstudien im Bereich der stationären Neutronentransportrechnungen von LW-SMR dienen soll und ähnlich zum Reaktorkonzept von NuScale ist /FRI 23/.

Die Kernbeladung des NuScale-ähnlichen LW-SMR /FRI 23/ besteht aus 37 Brennelementen mit frischem UO_2 -Brennstoff, wobei sich diese auf sieben Brennelementtypen mit verschiedenen U-235-Anreicherungsstufen zwischen 1,5 Gew.-% und 4,55 Gew.-% aufteilen. Beim Brennelementtyp mit 4,55 Gew.-% U-235 sind zudem 16 Brennstäbe mit Gd_2O_3 als abbrennbares Neutronengift eingesetzt. Die Brennelemente haben eine aktive Länge von 200 cm. Der Kern ist von einem sogenannten „heavy“-Reflektor umgeben, einem massiven Reflektor aus Stahl mit Kühlkanälen für Wasser. In der vorliegenden Spezifikation wird dieser Reflektor als homogenisiertes Material mit 95,6 Vol.-% Stahl und 4,4 Vol.-% Wasser definiert.

Basierend auf dieser Spezifikation wurde der KMACS-Eingabedatensatz erstellt, um die Vorausrechnung der Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte mit NEWT und die Ganzkern-Flussrechnung mit DYN3D durchzuführen. Für die Vorausrechnung der Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte wurden sieben Brennelementtypen, sieben axiale Reflektortypen und ein radialer Reflektortyp modelliert. Abb. 3.21 zeigt das Kernlayout. Der spezifizierte Betriebszustand zeichnet sich durch eine Brennstofftemperatur von 900 K, eine Moderatortemperatur von 600 K, eine Moderatordichte von $0,752571 \text{ g/cm}^3$ und eine Borkonzentration von 1000 ppm aus. Mit der anschließenden DYN3D-Ganzkernrechnung wurden auf Basis der Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte die Leistungsverteilung und der Multiplikationsfaktor ermittelt. Zum Vergleich wurde für den Monte-Carlo-Code Serpent ein äquivalentes Ganzkernmodell erstellt und Referenzergebnisse für den Multiplikationsfaktor und die Leistungsverteilung wurden berechnet.

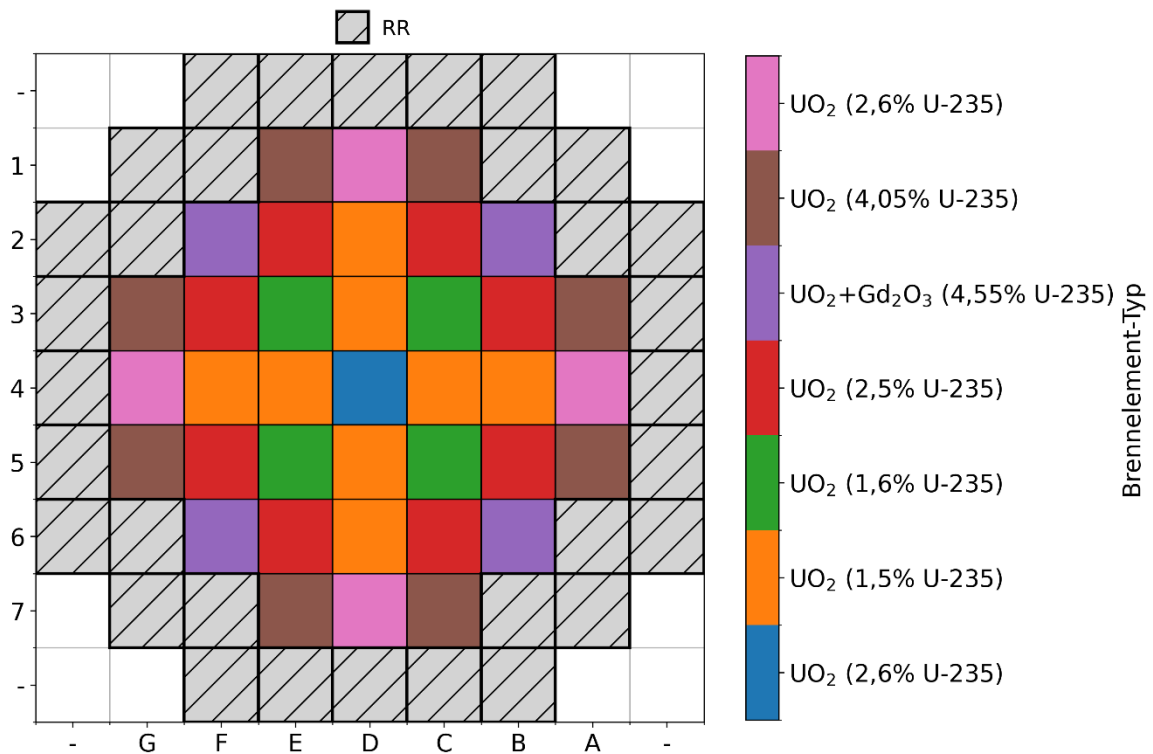


Abb. 3.21 Kernlayout des NuScale-ähnlichen LW-SMR nach /FRI 23/

Die DYN3D-Rechnung bestimmt einen Multiplikationsfaktor von 1,02733 und ist mit einer Reaktivitätsdifferenz von 134 pcm in guter Übereinstimmung mit dem Ergebnis von Serpent. Bei einem Vergleich der Leistungsverteilungen von DYN3D und Serpent, wie in Abb. 3.22 dargestellt, zeigt sich ebenfalls eine akzeptable Übereinstimmung. DYN3D unterschätzt die Leistung der äußeren Brennelemente um bis zu -1,88 % und überschätzt die Leistung an den inneren Positionen um bis zu 1,7 %.

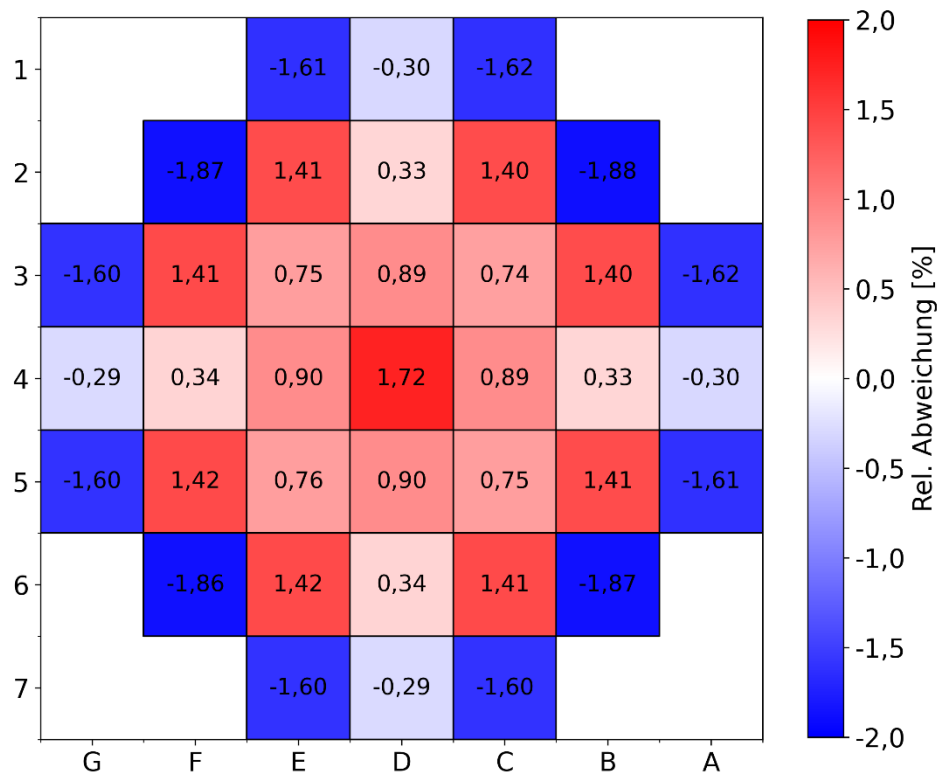


Abb. 3.22 Vergleich der Leistungsverteilungen zwischen KMACS (NEWT-DYN3D) und Serpent für den NuScale-ähnlichen LW-SMR, unkontrolliert

Plot erstellt mit dem KMACS-Modul *kvip*, das zum Vergleich von Ergebnissen auch externe Werte in eindimensionalen Listen, hier Ergebnisse von Serpent, verarbeiten kann.

In zukünftigen Rechnungen werden im KMACS- sowie im Serpent-Modell die verschiedenen Steuerstabbänke implementiert, um kontrollierte Zustände, wie sie in /FRI 23/ spezifiziert sind, ebenfalls zu analysieren.

Der betrachtete stationäre Betriebszustand dieses generischen LW-SMR kann mit dem aktuellen Ausbau von KMACS zufriedenstellend modelliert werden. Es ist allerdings nicht auszuschließen, dass Diskrepanzen auftreten, sobald eine zeitabhängige Zyklusabbbrandrechnung mit KMACS für einen LW-SMR durchgeführt wird. Dies kann insbesondere bei LW-SMR-Konzepten auftreten, die ohne Bor im Kühlmittel betrieben werden, wie beispielsweise der mPower von BWX Technologies, Inc., /IAEA 18/. Die Überschussreaktivität des Kerns wird dort nur durch eingefahrene Steuerstäbe kompensiert. Je nach Leistungsdichte kann dies zum Ausbrand des Absorbermaterials im Steuerstab führen, das – anders als im Moderator – lokal wie integral nicht von außen reguliert werden kann. Eine präzise Vorhersage der Steuerstabwirksamkeit wird in diesem Fall nur über die parallele, zeitabhängige Simulation des Ausbrands des Absorbermaterials möglich.

3.5 Verifikation und Validierung von KMACS

Zur Verifikation und Validierung der in den Kapiteln 3.1 und 3.2 beschriebenen Entwicklungsarbeiten an KMACS wurden Nachrechnungen des Zustands Nulllast-Heiß, des jeweils ersten Betriebszyklus des BEAVRS-Benchmarks /HOR 18/ und des X2-Benchmarks /BIL 20/, /LÖT 09/, /LÖT 10/ sowie von verschiedenen Anfahrtests des TVA Watts Bar Unit 1-Benchmarks /ALB 25/ durchgeführt und ausgewertet.

3.5.1 BEAVRS-Benchmark

Das BEAVRS-Benchmark spezifiziert zwei Betriebszyklen eines US-amerikanischen DWR. Es wurde bereits im Forschungsvorhaben RS1564 /AUR 21a/ betrachtet, um dort die KMACS-Rechensequenz für DWR westlicher Bauart, also für quadratische Brennelementgeometrien, mit QUABOX/CUBBOX zu verifizieren und zu validieren. Abb. 3.23 zeigt die Kernbeladung bestehend aus UO_2 -Brennelementen, die sich sowohl in der Anreicherung von U-235 (1,6 Gew.-%, 2,4 Gew.-% und 3,1 Gew.-%) als auch in der Anzahl an Borglasstäben (B_2O_3) als abbrennbares Neutronengift unterscheiden.

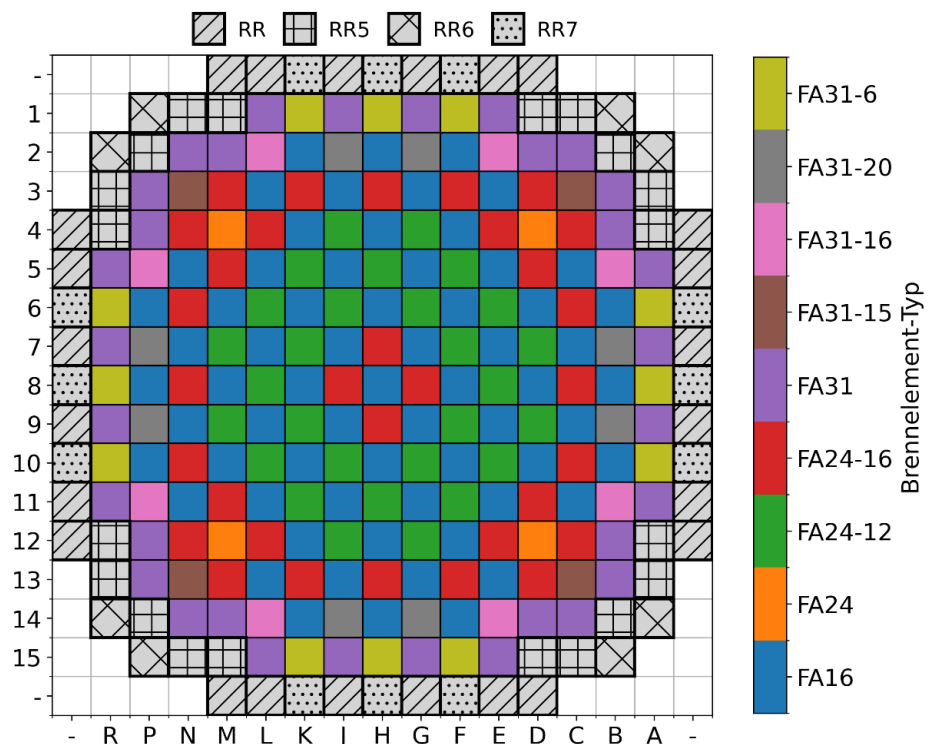


Abb. 3.23 BEAVRS-Benchmark: Modellierte Kernbeladung des ersten Zyklus

FA16: Brennelement mit 1,6 Gew.-% U-235

FA24: Brennelement mit 2,4 Gew.-% U-235

FA31-6: Brennelement mit 3,1 Gew.-% U-235 und 6 B_2O_3 -Stäben usw.

Zur Modellierung der vier Neutronenschilde außerhalb des Kernbehälters wurde wie im Forschungsvorhaben RS1564 /AUR 21a/ der radiale Reflektor aus unterschiedlichen Reflektorelementen modelliert, die sich in ihrer Abfolge der Wasser- und Stahlschichten jeweils unterscheiden.

Die Brennelementtypen FA31-6 und FA31-15 weisen eine asymmetrische Anordnung der Borglasstäbe auf, dargestellt in Abb. 3.24 und Abb. 3.25. Sie können mittels der KMACS-Eingabe je nach Position im Kern mit einer Rotation von 90°, 180° oder 270° versehen werden, um die Asymmetrie in den resultierenden Stableistungen und den seitenabhängigen Diskontinuitätsfaktoren abzubilden.

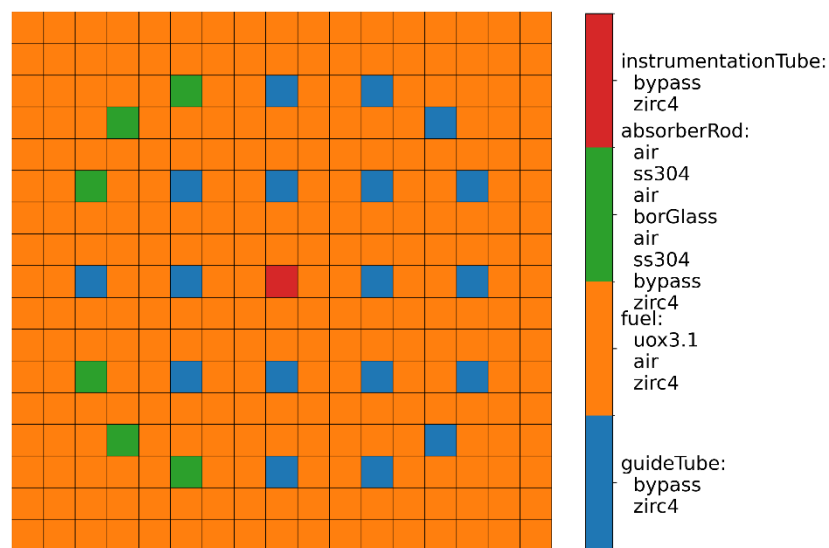


Abb. 3.24 BEAVRS-Benchmark: Layout des Brennelements FA31-6 und radialer Aufbau der verschiedenen Stabtypen

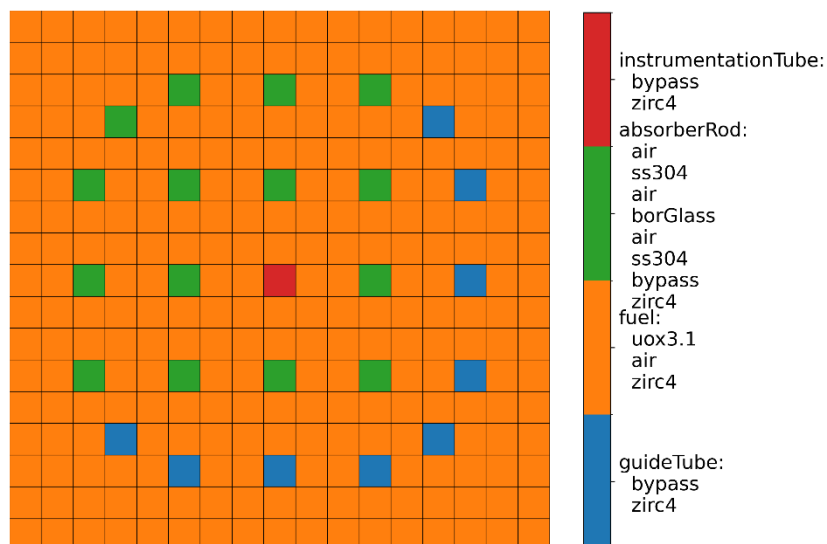


Abb. 3.25 BEAVRS-Benchmark: Layout des Brennelements FA31-15 und radialer Aufbau der verschiedenen Stabtypen

BEAVRS – Zustand Nulllast-Heiß

Für den Zustand Nulllast-Heiß, definiert bei einer Brennstofftemperatur von 566,5 K, einer Moderatorichte von 0,74 g/cm³ und einer Borkonzentration von 975 ppm, wurden mit den Gittercodes NEWT, HELIOS und Serpent jeweils Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte vorausgerechnet. Auf Basis dieser Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte wurden anschließend stationäre Ganzkern-Flussrechnungen mit DYN3D durchgeführt. In Tab. 3.1 werden die resultierenden Multiplikationsfaktoren k_{eff} vergleichend zu einem Referenzergebnis einer Rechnung mit dem Monte-Carlo-Code Serpent aufgeführt. Insgesamt wird mit allen Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten eine gute Übereinstimmung erzielt. Die Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte von NEWT erzielen die geringste Reaktivitätsdifferenz mit -70 pcm zum Referenzergebnis, die größte Differenz von -131 pcm ergibt sich mit den Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten von HELIOS.

Tab. 3.1 BEAVRS-Benchmark: Multiplikationsfaktoren k_{eff} für Nulllast-Heiß

Modell	k_{eff}	Reaktivitätsdifferenz [pcm]
Serpent Ganzkern	0,99987	-
KMACS (NEWT - DYN3D)	0,99917	-70
KMACS (Serpent - DYN3D)	0,99908	-79
KMACS (HELIOS - DYN3D)	0,99856	-131

Ferner wurden die resultierenden Leistungsverteilungen zur Leistungsverteilung der Ganzkernrechnung mit Serpent verglichen. Die linke Viertelkerndarstellung in Abb. 3.26 zeigt als Referenz die normierte Leistungsverteilung der Serpent-Rechnung. Die rechte Viertelkerndarstellung in Abb. 3.26 und die Darstellungen in Abb. 3.27 zeigen die relativen Abweichungen der Leistungsverteilungen aus NEWT-DYN3D, Serpent-DYN3D und HELIOS-DYN3D zur Referenz. Die beste Übereinstimmung liefern die Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte aus der Vorausrechnung mit Serpent. Die maximale Abweichung ist 3,4 % und wird an Kernpositionen mit dem Brennelementtyp FA31-6 beobachtet, der nur in zwei Vierteln des Layouts mit Borglasstäben besetzt ist (siehe Abb. 3.24). Die Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte von NEWT führen zu einer Unterschätzung der Leistung von bis zu -2,2 % im inneren Kernbereich und zu einer Überschätzung von bis zu 5,7 % am Kernrand. Im Fall der mit HELIOS berechneten Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte wird die Leistung im inneren Kernbereich mit bis zu 3,1 % überschätzt und am Kernrand mit bis zu -6,8 % unterschätzt.

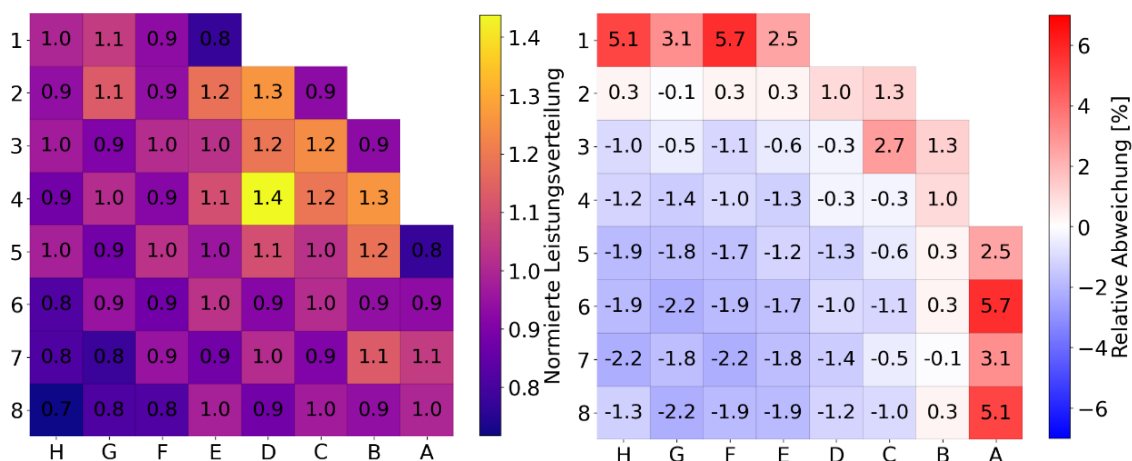


Abb. 3.26 BEAVRS-Benchmark: Serpent Monte-Carlo (links) und KMACS mit NEWT-DYN3D (rechts) (Viertelkernausschnitt)

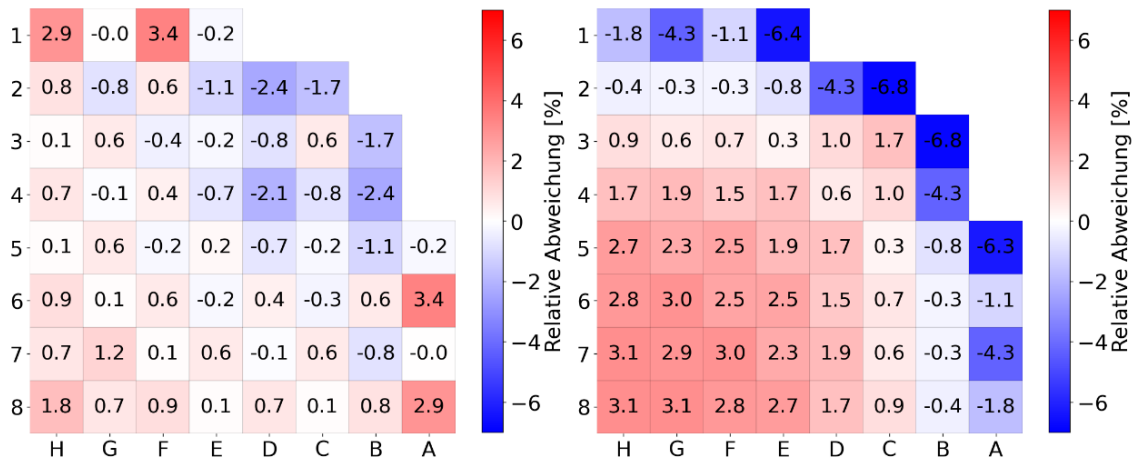


Abb. 3.27 BEAVRS-Benchmark: KMACS mit Serpent-DYN3D (links) und KMACS mit HELIOS-DYN3D (rechts) (Viertelkernausschnitt)

Die zuvor gezeigten Ergebnisse beruhen auf Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten, die mit Reflektormodellen berechnet wurden, bei denen zur Bereitstellung eines Neutronenflusses ein einzelnes Brennelement neben dem Reflektorelement modelliert wird und die Brennelementseite, die sich gegenüber vom Reflektorelement befindet, mit reflektierenden Randbedingungen zur Modellierung einer symmetrischen Geometrie versehen wird. Um bei der Berechnung der Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte der Reflektoren eine realitätsnähere Beschreibung des räumlichen Verlaufs und des Spektrums des Neutronenflusses zu erreichen, wurden mit Serpent Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte für den Reflektor mit einem wie in Abb. 3.11 dargestellten Superzellmodell ermittelt und in einer DYN3D-Rechnung erprobt. Es zeigte sich, dass diese Methode nur zu geringfügigen Änderungen führt. So ändert sich der Multiplikationsfaktor um lediglich 1 pcm im Vergleich zur Rechnung mit dem 1D-Reflektormodell. Auch die relativen Abweichungen der radialen Leistungsverteilung zum Referenzergebnis, also der Ganzkernrechnung mit Serpent, weisen bei den Brennelementen am Rand im Mittel bloß eine Änderung um wenige Promille auf, siehe dazu Abb. 3.28. Daher lässt sich aufgrund des höheren Rechenaufwands die Anwendung dieser Methode im Allgemeinen nicht rechtfertigen. Für große Reaktorkerne mit homogenen Neutronenflussverteilungen, wie es bei dieser Vergleichsstudie der Fall ist, ist das 1D-Reflektormodell dem Superzellmodell aus Gründen des geringeren Aufwands bei gleicher Ergebnisqualität vorzuziehen.

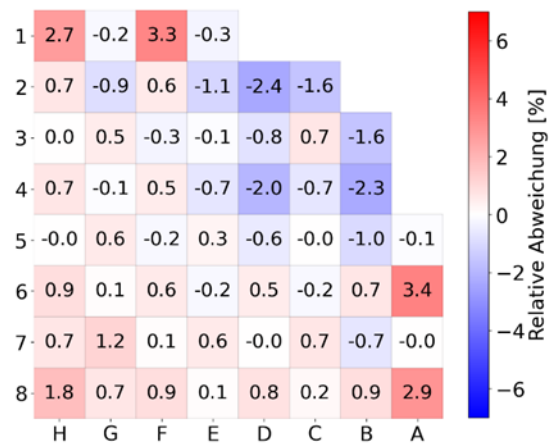


Abb. 3.28 BEAVRS-Benchmark: KMACS mit Serpent-DYN3D und Verwendung des Superzell-Reflektormodells (Viertelkernausschnitt)

BEAVRS – erster Betriebszyklus

Für die Nachrechnung des ersten Betriebszyklus des BEAVRS-Benchmarks wurden die thermische Reaktorleistung entsprechend der Abb. 3.29 und die Einfahrtiefe der Steuerstäbe der D-Bank entsprechend der Abb. 3.30 vorgegeben.

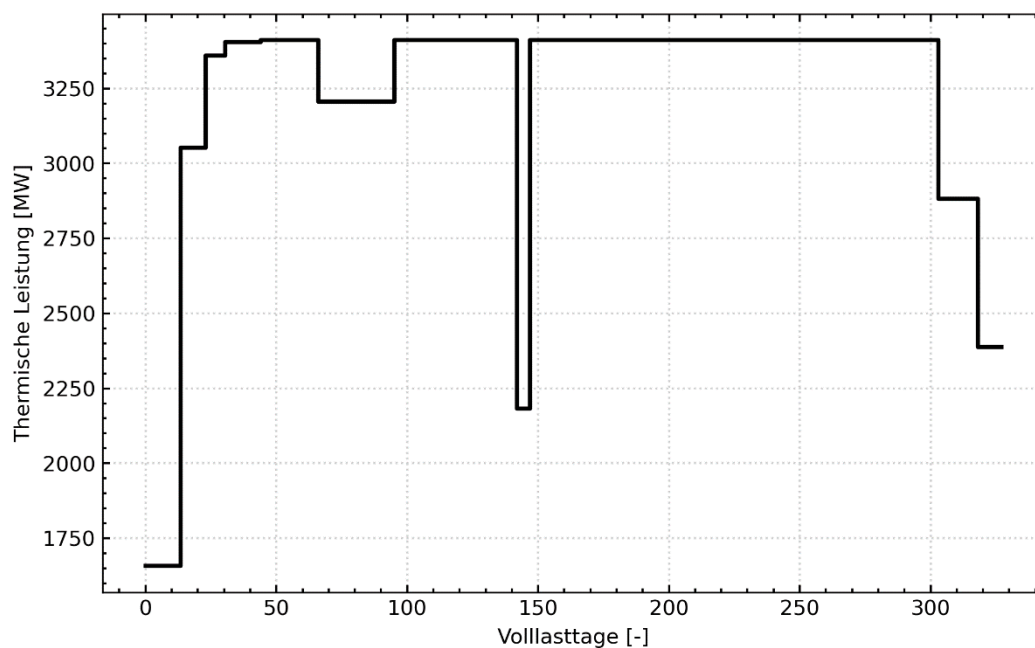


Abb. 3.29 BEAVRS-Benchmark: Thermische Reaktorleistung des ersten Zyklus

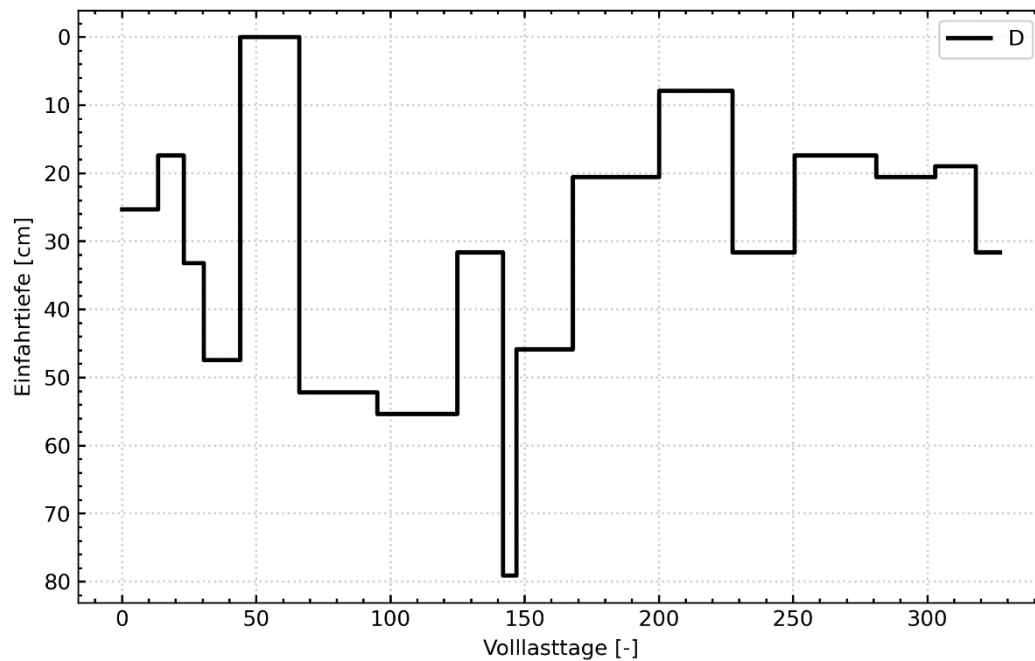


Abb. 3.30 BEAVRS-Benchmark: Einfahrtiefe der D-Bank für den ersten Zyklus

Die Vorausrechnung der Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte für die Zyklusabbrandrechnung erfolgte mit NEWT sowie mit Serpent. Die Vorausrechnung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten mit HELIOS für eine Zyklusabbrandrechnung war nicht möglich, da zum Zeitpunkt der Analysen die Schnittstelle zwischen KMACS und HELIOS zum einen nicht über eine Parametrisierung der Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte über den Abbrand und zum anderen nicht über die Berechnung der Neutronenvergiftung durch Xenon und Samarium verfügte.

Für die gekoppelten Ganzkernrechnungen wurden sowohl ATHLET gekoppelt mit dem Flusslöser QUABOX/CUBBOX (Q/C) als auch der Reaktordynamikcode DYN3D eingesetzt. Für die Berechnung des Brennstoffabbrands wurde entweder das triviale Abbrandmodul (Zunahme des Abbrands bei konstanter Leistung über den Zeitschritt ohne Berücksichtigung des veränderlichen Nuklidinventars) von KMACS /BOU 18/ oder der mikroskopische Inventarcode VENTINA verwendet. In Abb. 3.31 werden die auf Basis der NEWT-Wirkungsquerschnitte ermittelten kritischen Borkonzentrationen im Vergleich zu Messwerten gezeigt. Über den Verlauf des Zyklus wird von allen Code-Kombinationen eine gute Übereinstimmung mit den Messwerten erreicht. Der Unterschied zwischen den Ergebnissen mit dem trivialen Abbrandmodul und mit VENTINA beträgt hier einen vernachlässigbaren Unterschied von im Mittel 2 ppm. ATHLET-Q/C überschätzt im Mittel über alle Zykluszeitpunkte die Messwerte um 14 ppm, DYN3D um 21 ppm.

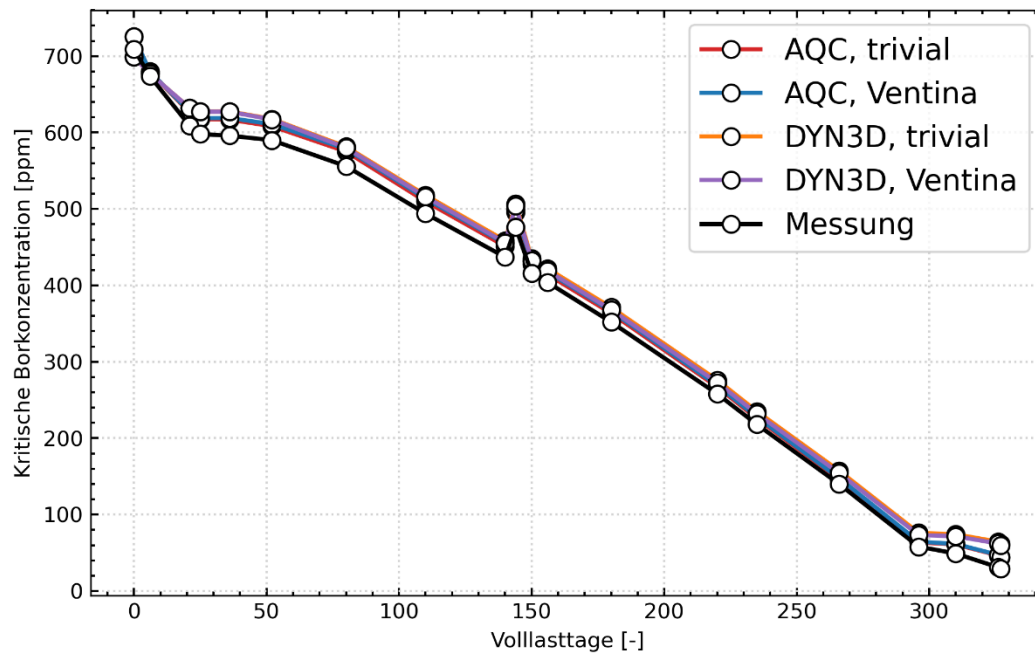


Abb. 3.31 BEAVRS-Benchmark: Berechnete kritische Borkonzentrationen im Vergleich zu Messwerten des Benchmarks

rot: ATHLET-QUABOX/CUBBOX mit trivialem Abbrand
blau: ATHLET-QUABOX/CUBBOX mit mikroskopischem Abbrand
orange: DYN3D mit trivialem Abbrand
violett: DYN3D mit mikroskopischem Abbrand
schwarz: Messwerte des Benchmarks

Die für die Zyklusabbrandrechnung mit Serpent ermittelten Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte wurden in DYN3D verwendet. Der resultierende Verlauf der kritischen Borkonzentration, dargestellt in Abb. 3.32, unterschätzt die Messwerte deutlich um bis zu -30 ppm. Untersuchungen ergaben, dass die Produktion des Neutronengiftes Samarium-149 deutlich erhöht ist, da die von Serpent ausgegebene kumulative Spaltproduktausbeute des Vorgängernuklids Promethium-149 im Vergleich zu den Werten von NEWT um zwei Größenordnungen höher ist. Bei Vernachlässigung der Neutronenvergiftung durch Samarium-149 wird eine gute Übereinstimmung mit den Messwerten bei einer mittleren Abweichung von 18 ppm erzielt. Die von NEWT ausgegebene kumulative Spaltproduktausbeute von Promethium-149 ist wiederum so gering, dass bei Vernachlässigung der Vergiftung durch Samarium-149 ein Verlauf der kritischen Borkonzentration resultiert, der für diesen Rechenfall praktisch keinen Unterschied zum Verlauf der Borkonzentration mit Vergiftung durch Samarium-149 aufzeigt. In zukünftigen Untersuchungen soll geklärt werden, wie die Neutronenvergiftung durch Samarium-149 bei

Zyklusabbrandrechnungen mit Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten aus Serpent möglichst korrekt modelliert werden kann.

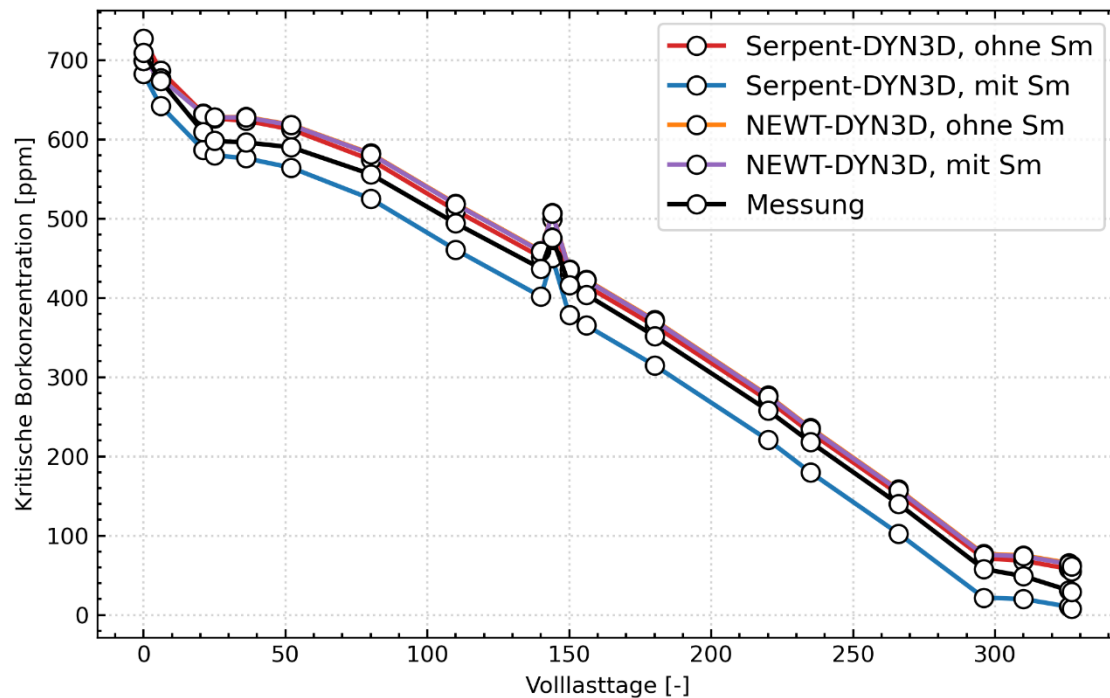


Abb. 3.32 BEAVRS-Benchmark: Berechnete Borkonzentrationen mit Serpent-DYN3D und NEWT-DYN3D im Vergleich zu Messwerten

rot: Serpent-DYN3D, trivialer Abbrand, ohne Samarium-Vergiftung
 blau: Serpent-DYN3D, trivialer Abbrand, mit Samarium-Vergiftung
 orange: NEWT-DYN3D, trivialer Abbrand, ohne Samarium-Vergiftung
 violett: NEWT-DYN3D, trivialer Abbrand, mit Samarium-Vergiftung
 schwarz: Messwerte des Benchmarks

Auf Basis der Zyklusabbrandrechnung mit NEWT-DYN3D und dem trivialen Abbrandmodul wurden mittels des KMACS-Moduls *kpostal* für den ersten und letzten Zykluszeitpunkt für die Brennelemente eines Viertelkernausschnitts sowie für das jeweils höchstbelastete Brennelement Unterkanalthermohydraulikrechnungen mit CTF durchgeführt. In Abb. 3.33 wird die stabweise Verteilung der DNBR-Werte auf mittlerer Kernhöhe für den ersten Zykluszeitpunkt gezeigt. Referenzwerte standen für einen Vergleich nicht zur Verfügung, jedoch werden die gezeigten DNBR-Werte als plausibel angesehen.

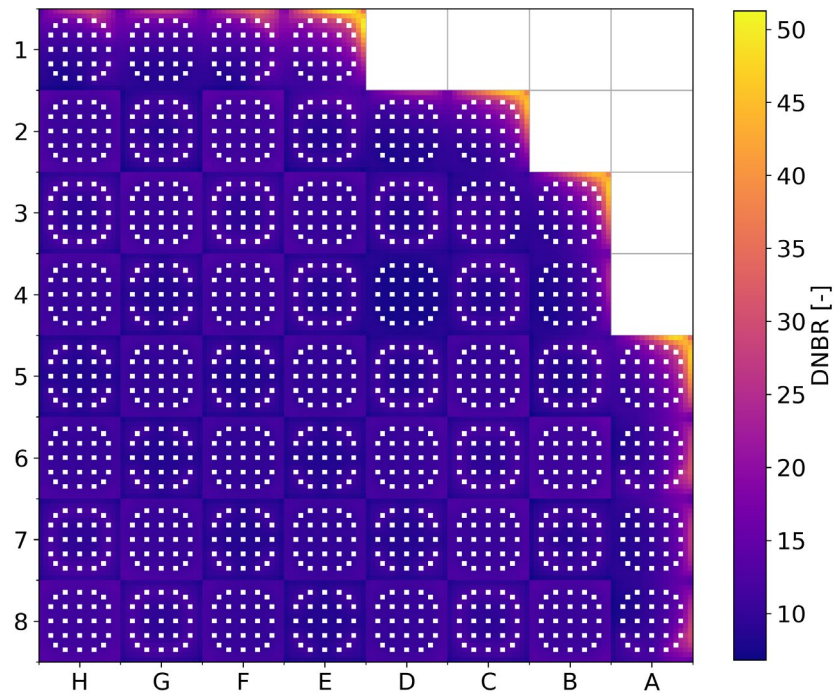


Abb. 3.33 BEAVRS-Benchmark: DNBR-Werte bei Ende des ersten Zyklus ermittelt mit CTF-Unterkanalrechnungen (Viertelkernausschnitt)

Für das zum ersten Zykluszeitpunkt höchstbelastete Brennelement und für das zum letzten Zeitpunkt höchstbelastete Brennelement zeigt Abb. 3.34 jeweils den axialen Verlauf der DNBR-Werte für den Brennstab, bei dem in Längsrichtung der geringste DNBR-Wert im Vergleich zu den anderen Brennstäben des Brennelements festgestellt wurde. Die nahezu symmetrische Verteilung der DNBR-Werte entlang der Längsachse zu Zyklusbeginn verändert sich zu Zyklusende in eine Verteilung, bei der der minimale DNBR-Wert im oberen Kerndrittel auftritt. Auch diese Verläufe werden als plausibel bewertet. Referenzwerte standen für einen Vergleich nicht zur Verfügung.

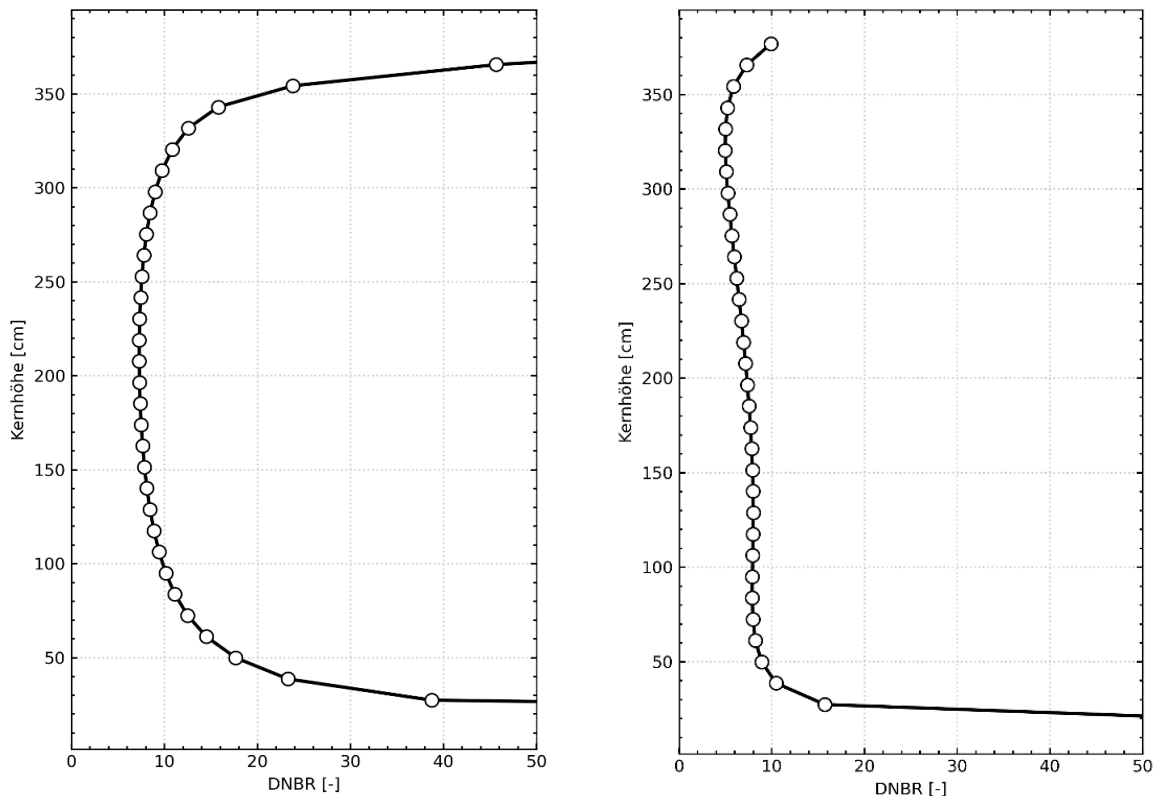


Abb. 3.34 BEAVRS-Benchmark: Verlauf des DNBR-Werts im höchstbelasteten Brennelement bei Beginn (links) und Ende (rechts) des ersten Zyklus

3.5.2 X2-Benchmark

Dem X2-Benchmark liegen Betriebsdaten des zweiten Blocks des Kernkraftwerks Chmelnyskyj NPP vom Typ WWER-1000 zugrunde. Die Spezifikation umfasst unter anderem den Nulllast-Heiß-Zustand sowie die ersten vier Betriebszyklen. Auf das X2-Benchmark wurde bereits im Forschungsvorhaben RS1564 /AUR 21a/ zurückgegriffen, um die damalige Weiterentwicklung von KMACS zur Nachrechnung von Reaktoren mit hexagonaler Brennelementgeometrie zu erproben.

Die Kernbeladung des ersten Zyklus, dargestellt in Abb. 3.35, besteht aus fünf Brennelementtypen mit UO_2 -Brennstoff. Die Anreicherung von U-235 variiert je nach Brennelement von 1,3 Gew.-% bis zu 4,4 Gew.-%. Die Brennelementtypen 30AV5, 39AWU, 390GO sind zudem mit neun bzw. sechs $\text{UO}_2 + \text{Gd}_2\text{O}_3$ -Brennstäben bestückt. Da der radiale Reflektor entlang des Kernumfangs ein variierendes Wasser-zu-Stahl-Verhältnis aufweist, wurden auch hier wie bereits im Vorhaben RS1564 /AUR 21a/ fünf radiale Reflektorelemente modelliert.

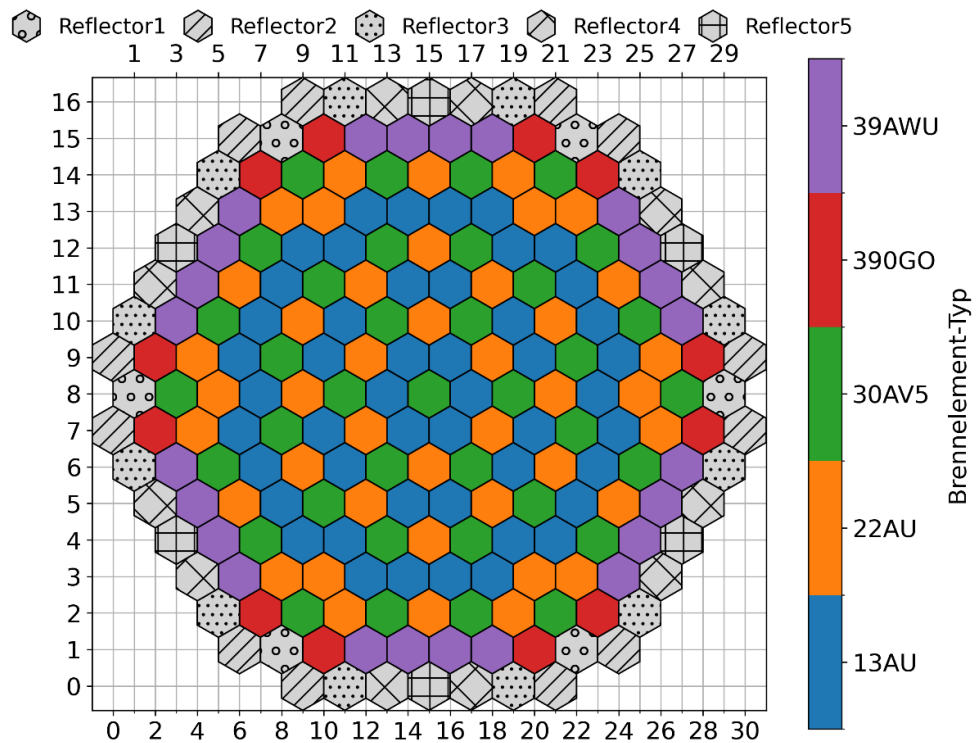


Abb. 3.35 X2-Benchmark: Modellierte Kernbeladung des ersten Zyklus

13AU: UO_2 mit 1,3 % U-235

22AU: UO_2 mit 2,2 % U-235

30AV5: UO_2 mit 3,3 % U-235, 9 Stäbe mit UO_2 mit 2,4 % U-235 und 5 % Gd_2O_3

390GO: 240 UO_2 -Stäbe mit 4 % U-235, 66 UO_2 -Stäbe mit 3,6 % U-235, 6 Stäbe mit UO_2 mit 2,4 % U-235 und 5 % Gd_2O_3

39AWU: 243 UO_2 -Stäbe mit 4 % U-235, 60 UO_2 -Stäbe mit 3,6 % U-235, 9 Stäbe mit UO_2 mit 3,3 % U-235 und 5 % Gd_2O_3

Abb. 3.36 zeigt die Kernpositionen der verschiedenen Steuerstabbänke. Nur Bank 10 ist im Zustand Nulllast-Heiß um 75 cm eingefahren. Diese wird zudem als einzige Bank während des ersten Betriebszyklus im Bereich zwischen 8 cm und 105 cm verfahren.

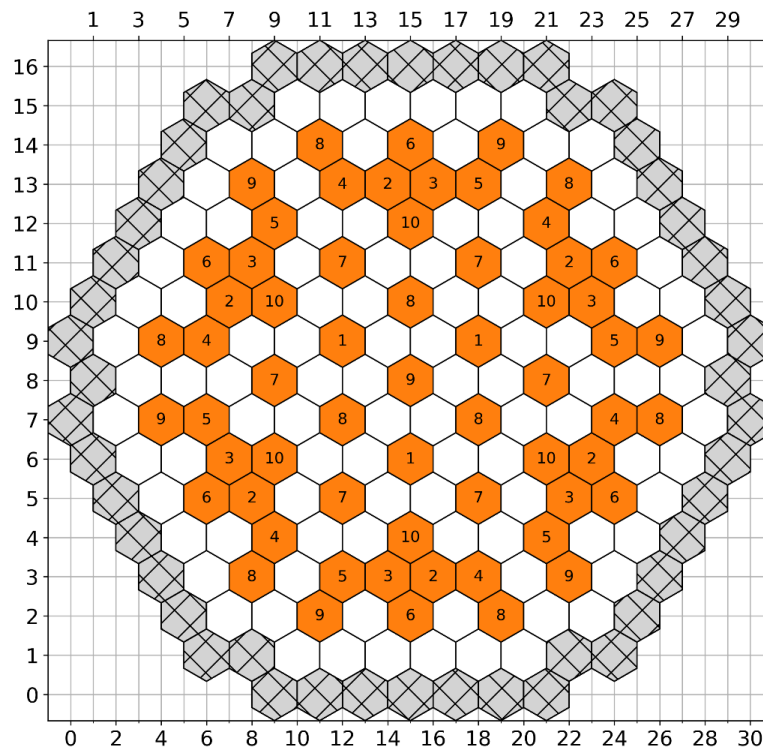


Abb. 3.36 X2-Benchmark: Anordnung der Steuerstabbänke 1 – 10

X2 – Zustand Nulllast-Heiß

Für den Zustand Nulllast-Heiß, definiert durch eine Brennstofftemperatur von 554 K, eine Moderatordichte von $0,7629 \text{ g/cm}^3$ und eine Borkonzentration von 1207 ppm, wurden jeweils mit NEWT, Serpent und HELIOS Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte für die Brenn- und Reflektorelemente ermittelt. Mit dem anschließenden Einsatz der Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte in stationären DYN3D-Ganzkern-Flussrechnungen wurden die in Tab. 3.2 aufgeführten Multiplikationsfaktoren k_{eff} berechnet. Zum Vergleich wird zusätzlich ein Referenzwert aus einer Serpent-Ganzkernrechnung /AUR 21a/ aufgeführt. Eine gute Übereinstimmung mit dem Referenzergebnis erzielt die Verwendung der Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte von Serpent. Die Reaktivitätsdifferenz beträgt lediglich 27 pcm. Die Wirkungsquerschnitte von HELIOS liefern eine gute Übereinstimmung von 105 pcm. Die Verwendung der NEWT-Wirkungsquerschnitte führt zu einer Unterschätzung des Referenzergebnisses von -283 pcm.

Tab. 3.2 X2-Benchmark: Multiplikationsfaktoren k_{eff} für Nulllast-Heiß

Modell	k_{eff}	Reaktivitäts-differenz [pcm]
Serpent Ganzkern	1,00016	-
KMACS (NEWT-DYN3D)	0,99734	-283
KMACS (Serpent-DYN3D)	1,00043	27
KMACS (HELIOS-DYN3D)	1,00121	105

Zudem wurden die resultierenden Leistungsverteilungen mit der Leistungsverteilung der Ganzkernrechnung mit Serpent verglichen. Diese sind in Abb. 3.37 und in Abb. 3.38 dargestellt. Die linke Viertelkerndarstellung in Abb. 3.37 zeigt die normierte Leistungsverteilung der Serpent-Ganzkernkernrechnung als Referenz. Die rechte Viertelkerndarstellung in Abb. 3.37 und die Darstellungen in Abb. 3.38 zeigen die relativen Abweichungen der Leistungsverteilungen aus NEWT-DYN3D, Serpent-DYN3D und HELIOS-DYN3D zur Referenz.

Die Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte von Serpent führen auch bei der Leistungsverteilung zur besten Übereinstimmung mit der Referenzlösung. Am Kernrand werden Abweichungen von bis zu 1,0 % beobachtet, im inneren Kernbereich sind es maximal -1,6 %. Die Wirkungsquerschnitte von NEWT liefern eine zufriedenstellende Übereinstimmung; lediglich am Rand werden Abweichungen von bis zu 3,5 % berechnet. Die Wirkungsquerschnitte von HELIOS führen am Kernrand zu ähnlichen Abweichungen im Bereich von 3 %, jedoch werden die Brennelementleistungen im inneren Kernbereich deutlich um bis zu -5,0 % unterschätzt. Dabei ist anzumerken, dass im Fall von HELIOS bei diesen Rechnungen keine Diskontinuitätsfaktoren verwendet wurden, da diese nicht von HELIOS bereitgestellt werden, sondern basierend auf Ergebnisgrößen der HELIOS-Rechnungen erst nachgeschaltet berechnet werden müssen. Die Schnittstelle zwischen KMACS und HELIOS wird in zukünftigen Entwicklungsarbeiten um die Berechnung dieser Faktoren für hexagonale Brenn- und Reflektorelemente erweitert, um dadurch im Vergleich mit der Referenzlösung verbesserte Ergebnisse zu erzielen.

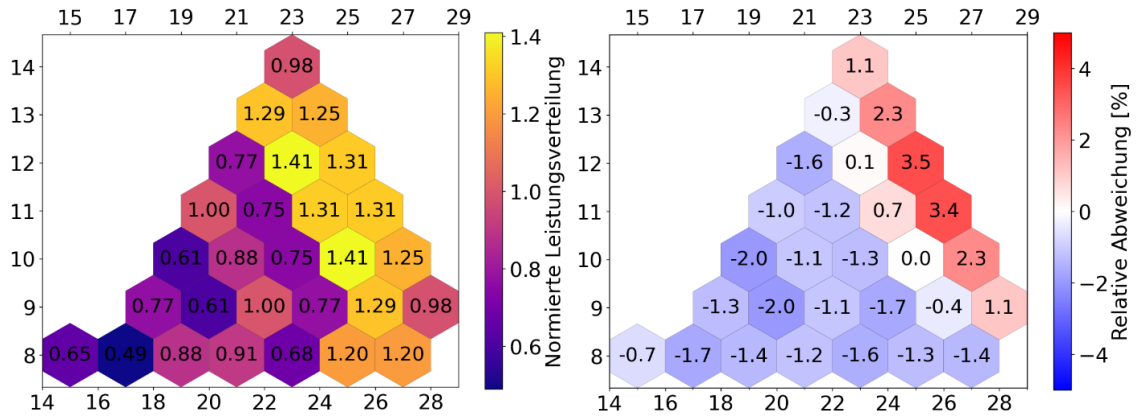


Abb. 3.37 X2-Benchmark: Serpent Monte-Carlo (links) und KMACS mit NEWT-DYN3D (rechts)

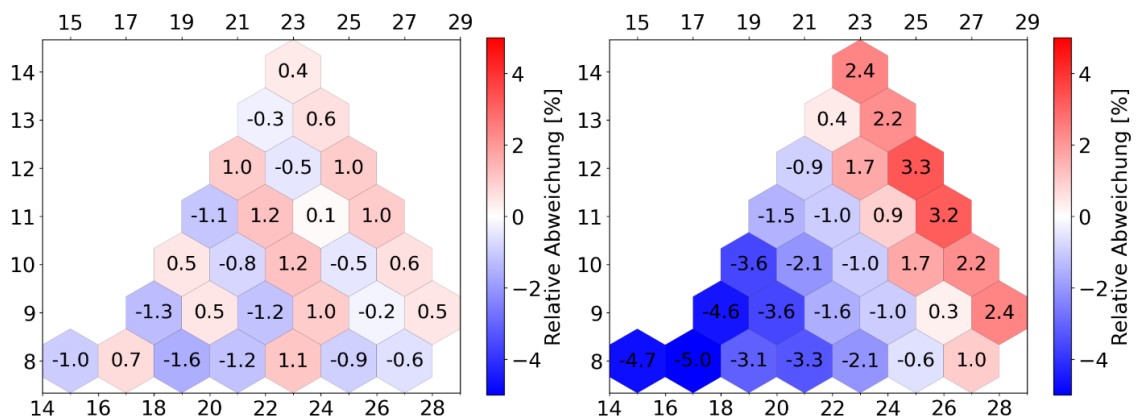


Abb. 3.38 X2-Benchmark: KMACS mit Serpent-DYN3D (links) und KMACS mit HELIOS-DYN3D (rechts)

X2 – erster Betriebszyklus

Für die Nachrechnung des ersten Betriebszyklus des X2 wurden Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte mit NEWT ermittelt und anschließend in den Ganzkernrechnungen mit DYN3D verwendet. Die Berechnung der Abbrandwerte erfolgte mit dem trivialen Abbrandmodul von KMACS. Die Übereinstimmung der berechneten kritischen Borkonzentration mit den Messwerten, dargestellt in Abb. 3.39, ist mit einer mittleren Abweichung von 4 ppm zufriedenstellend. Lediglich bei kurzzeitigen Steuerstabbewegungen, z. B. bei ca. 130 Volllasttagen, 185 Volllasttagen sowie zwischen 260 und 290 Volllasttagen treten größere Abweichungen um bis zu -94 ppm auf. Am Ende des Betriebszyklus überschätzt KMACS mit NEWT-DYN3D die kritische Borkonzentration um ca. 50 ppm.

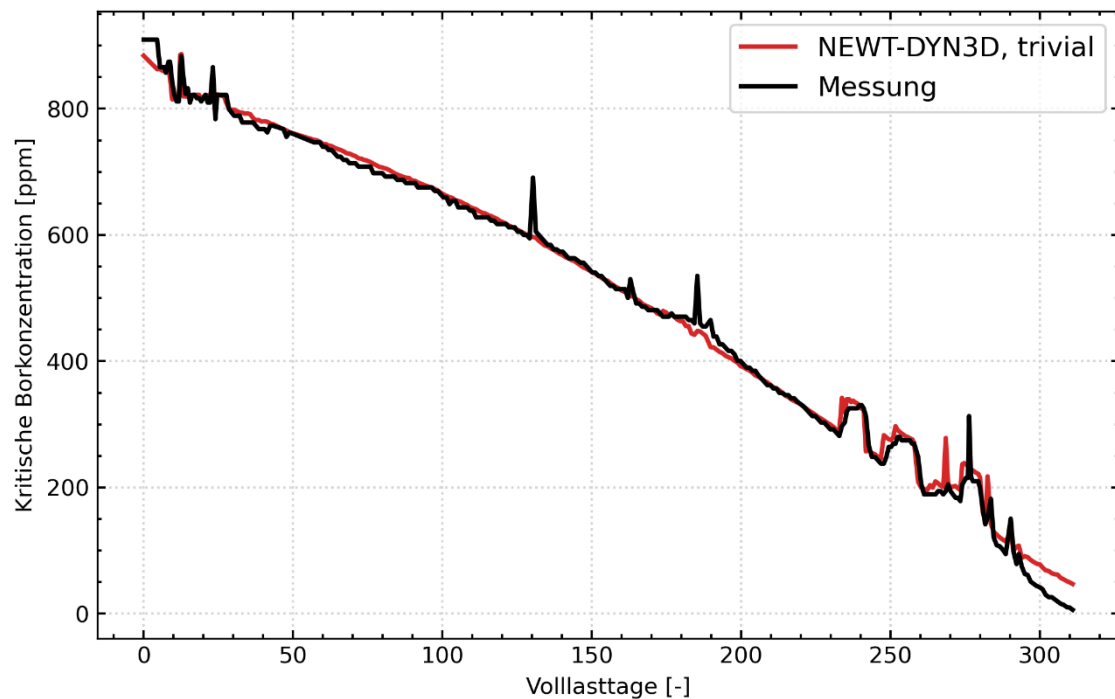


Abb. 3.39 X2-Benchmark: Berechnete kritische Borkonzentration im Vergleich zu Messwerten des Benchmarks

Da NEWT im Fall von hexagonalen Brennelementgeometrien keine Stableistungsfaktoren als Ergebnisgröße bereitstellt, diese aber von Serpent unabhängig von der Geometrie geliefert werden können, wurden für die Verzweigungsparameter der Zyklusabbrandrechnung Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte mit Serpent berechnet. Zur Reduzierung des Rechenaufwands erfolgte dies nur für frischen Brennstoff, also ohne Parametrisierung über Abbrandwerte. Mit diesen Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten wurde für den ersten Zykluszeitpunkt mit einer thermischen Reaktorleistung von 1490,7 MW eine Ganzkernrechnung mit DYN3D einschließlich Stableistungsrekonstruktion durchgeführt. Auf Basis der so ermittelten Stableistungen erfolgte für Brennelemente eines 60° Kernausschnitts die Unterkanalthermohydraulikrechnung mit CTF zur Ermittlung stabaufgelöster DNBR-Werte. Für diesen Kernausschnitt werden beispielhaft für die mittlere Kernebene in Abb. 3.40 die Stablängenleistungen und in Abb. 3.41 die DNBR-Werte dargestellt. Da für die DNBR-Werte keine Referenzwerte zur Verfügung standen, konnte kein Vergleich durchgeführt werden, jedoch werden die berechneten DNBR-Werte als plausibel eingestuft.

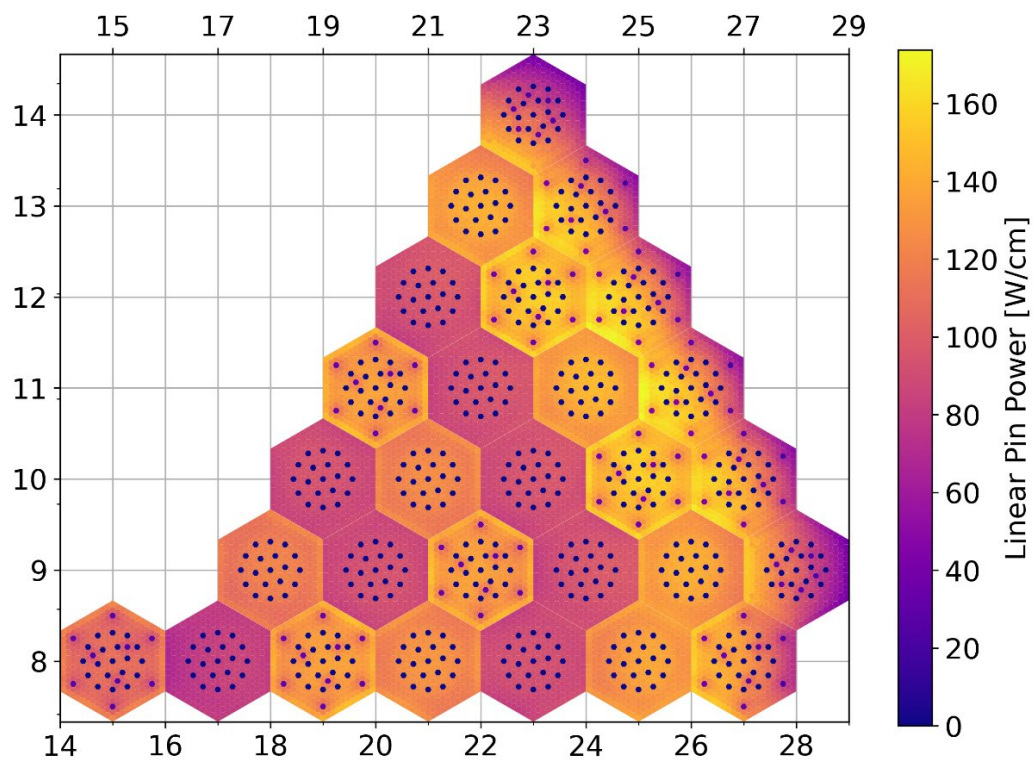


Abb. 3.40 X2-Benchmark: Stablängenleistung auf der mittleren Kernebene eines 60° Kernausschnitts

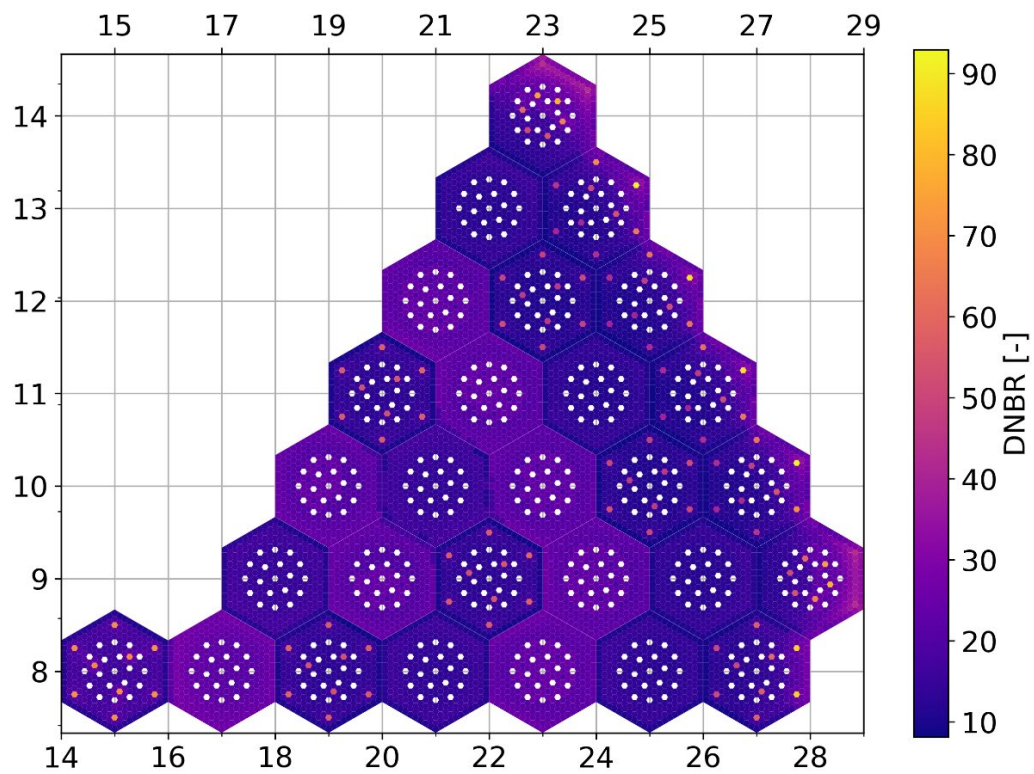


Abb. 3.41 X2-Benchmark: DNBR-Werte auf der mittleren Kernebene eines 60° Kernausschnitts

3.5.3 TVA Watts Bar Unit 1-Benchmark

Das TVA Watts Bar Unit 1-Benchmark der OECD/NEA basiert auf Betriebsdaten der ersten drei Betriebszyklen des US-amerikanischen DWR *Tennessee Valley Authority (TVA) Watts Bar Nuclear Unit 1*. Neben einer detaillierten Beschreibung der Betriebs-, Geometrie- und Materialdaten definiert das Benchmark sieben Aufgaben, die die Nachrechnung von Anfahrtests bei Nullleistung sowie die Nachrechnung der drei Betriebszyklen beinhalten. Ergebnisse können entweder in Code-zu-Code-Vergleichen miteinander verglichen werden oder, wenn verfügbar, mit Daten aus Messungen. Die in den nachfolgenden Abschnitten dargelegten Rechnungen mit KMACS unter Verwendung der Code-Kombinationen NEWT-DYN3D und HELIOS-DYN3D entsprechen den in der ersten Aufgabe dieses Benchmarks definierten Nachrechnungen von Anfahrtests bei Nullleistung des ersten Betriebszyklus.

Der Kern des ersten Betriebszyklus ist mit UO_2 -Brennelementen beladen, siehe dazu Abb. 3.42. Das U-235 im UO_2 -Brennstoff ist entweder zu 2,1 Gew.-%, 2,6 Gew.-% oder 3,1 Gew.-% angereichert. Die Brennelemente mit einer U-235-Anreicherung von 2,6 Gew.-% oder 3,1 Gew.-% sind teilweise mit 8, 12, 16, 20 oder 24 Borglasstäben bestückt. Zur Modellierung des radialen Reflektors wurden drei Reflektorelemente modelliert, die sich in der Abfolge der Stahl- und Wasserschichten unterscheiden.

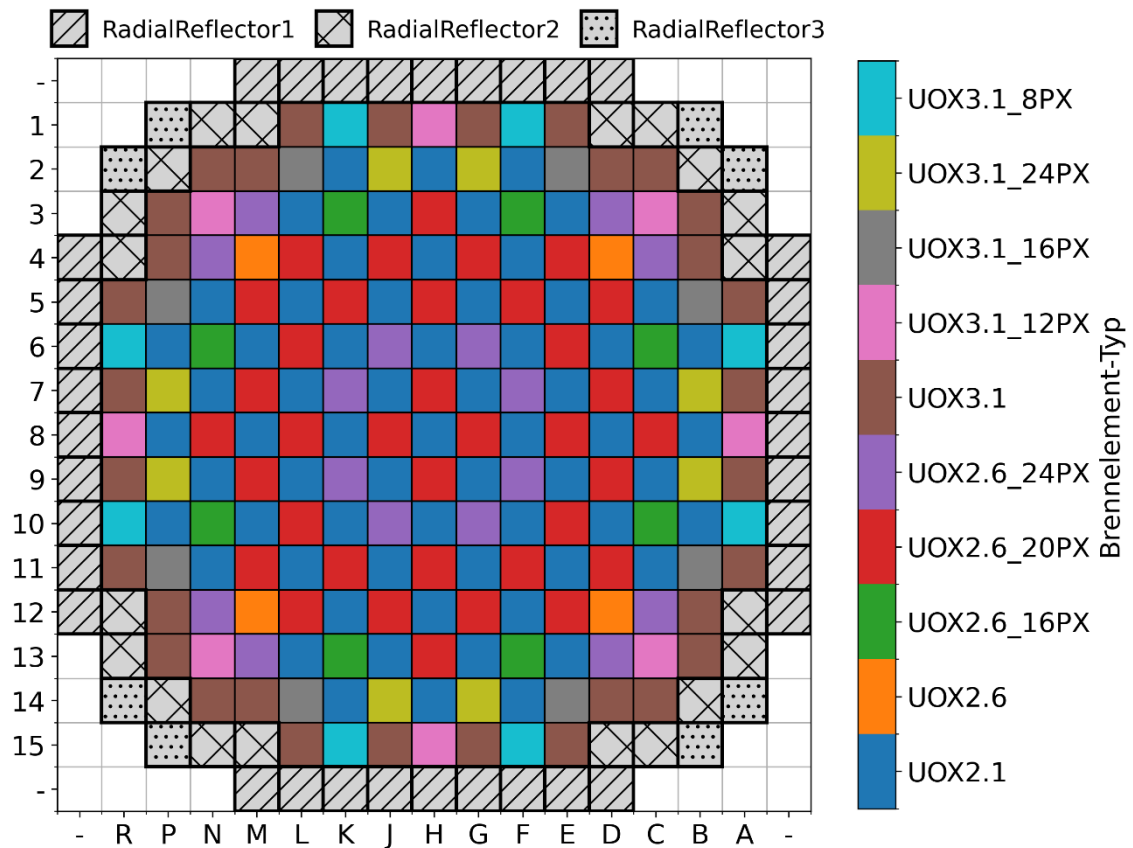


Abb. 3.42 TVA Watts Bar Unit 1-Benchmark: Beladung des ersten Betriebszyklus

UOX2.1: UO_2 mit 2,1 Gew.-% U-235

UOX2.6_16PX: UO_2 mit 2,6 Gew.-% U-235 und 16 Borglasstäbe

UOX3.1_12PX: UO_2 mit 3,1 Gew.-% U-235 und 12 Borglasstäbe usw.

In Abb. 3.43 wird die Anordnung der Steuerstabbänke A, B, C, D, SA, SB, SC und SD dargestellt.

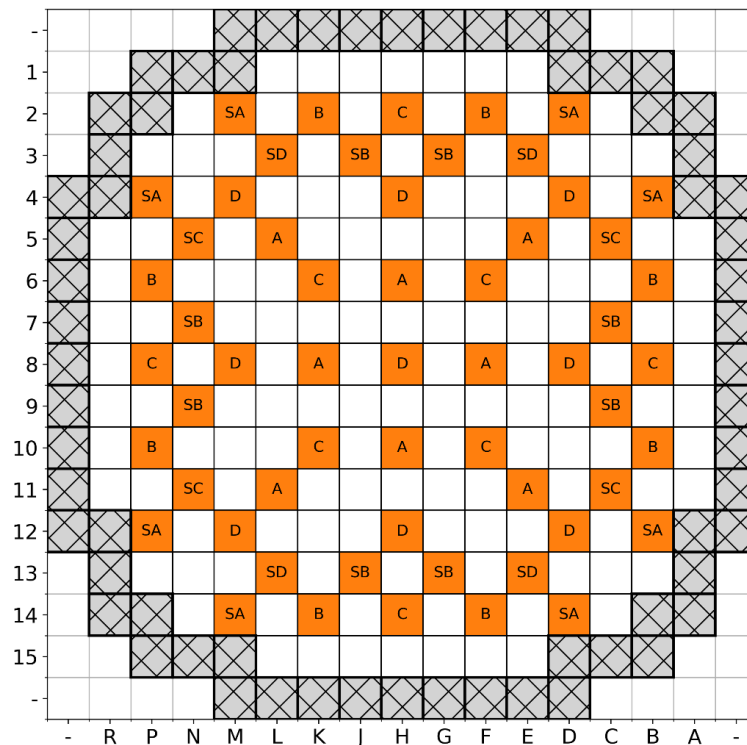


Abb. 3.43 TVA Watts Bar Unit 1-Benchmark: Anordnung der Steuerstabbänke

Zur Nachrechnung der Anfahrtests bei Nullleistung wurden mit den Gittercodes NEWT und HELIOS Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte für den Zustand Nulllast-Heiß berechnet, der durch eine Brennstofftemperatur von 565 K, eine Moderatordichte von $0,743 \text{ g/cm}^3$ und eine Borkonzentration von 1291 ppm definiert ist. Da die Nachrechnung der Anfahrtests eine Variation der Brennstofftemperatur, der Moderatordichte und der Borkonzentration erfordert, wurden zudem Wirkungsquerschnitte für die Brennstofftemperaturen 560 K und 570 K, die Moderatordichten $0,733 \text{ g/cm}^3$ und $0,752 \text{ g/cm}^3$ und die Borkonzentrationen 1170 ppm, 1230 ppm und 1285 ppm berechnet. Die stationären Ganzkern-Flussrechnungen wurden mit DYN3D durchgeführt.

Kritikalität bei teilweise eingefahrenen Steuerstabbänken

Für eine abwechselnd vollständig eingefahrene Steuerstabbank und einer jeweils dazu spezifizierten Einfahrtiefe der D-Bank sowie für den vollständig unkontrollierten Zustand wurde bei teils verschiedenen Borkonzentrationen jeweils der Multiplikationsfaktor ermittelt. Wie in Tab. 3.3 zu erkennen ist, sind NEWT-DYN3D und HELIOS-DYN3D in guter Übereinstimmung. Die größte Reaktivitätsdifferenz zeigt sich mit -105 pcm in dem Fall 6, bei dem lediglich die D-Bank nahezu vollständig eingefahren ist. Die geringste

Abweichung von 1 pcm tritt bei Fall 7 auf, bei dem die SA-Bank vollständig eingefahren und die D-Bank zu einem großen Teil eingefahren ist.

Tab. 3.3 Multiplikationsfaktoren berechnet mit NEWT-DYN3D und HELIOS-DYN3D bei unterschiedlich eingefahrenen Steuerstabbänken

TVA Watts Bar Unit 1-Benchmark Exercise 1a)

Fall	Bor [ppm]	Eingefahrene Bank	Einfahrtiefe D-Bank [cm]	NEWT-DYN3D k_{eff}	HELIOS-DYN3D k_{eff}	Reaktivitätsdifferenz [pcm]
1	1285	D	95,5675	0,99813	0,99739	-74
2	1291	-	-	0,99880	0,99793	-87
3	1170	A	206,6925	0,99631	0,99575	-56
4	1170	B	181,2925	0,99794	0,99764	-30
5	1170	C	171,7675	0,99709	0,99663	-47
6	1170	-	332,105	0,99811	0,99706	-105
7	1170	SA	251,1425	0,99683	0,99685	1
8	1170	SB	147,955	0,99792	0,99726	-66
9	1170	SC	247,9675	0,99717	0,99687	-30
10	1170	SD	247,9675	0,99717	0,99687	-30

Wirksamkeit der verschiedenen Steuerstabbänke

Für die Ermittlung der Wirksamkeit der verschiedenen Steuerstabbänke wurden bei einer Brennstofftemperatur von 565 K, einer Moderatorichte von 0,743 g/cm³ und einer Borkonzentration von 1170 ppm Ganzkernrechnungen für den vollständig unkontrollierten Zustand sowie mit abwechselnd vollständig eingefahrenen Steuerstabbänken durchgeführt. Mit den resultierenden Multiplikationsfaktoren wurde die Steuerstabwirksamkeit ρ nach Gl. (3.4) berechnet. Die Ergebnisse sind in Tab. 3.4 aufgeführt.

$$\rho = \left(\frac{1}{k_{\text{eingefahren}}} - \frac{1}{k_{\text{unkontrolliert}}} \right) * 10^5 \quad (3.4)$$

NEWT-DYN3D und HELIOS-DYN3D erzielen eine sehr gute Übereinstimmung bei den Steuerstabwirksamkeiten. Die größte Differenz zeigt sich mit -33 pcm bei der Berechnung der Wirksamkeit der SA-Bank. Die geringste Differenz ergibt sich mit -1 pcm für die SB-Bank.

Tab. 3.4 Wirksamkeiten der Steuerstabbänke berechnet mit NEWT-DYN3D und HELIOS-DYN3D

TVA Watts Bar Unit 1-Benchmark Exercise 1b) und 1c)

Fall	Eingefahrene Bank	NEWT-DYN3D k_{eff}	HELIOS-DYN3D k_{eff}	NEWT-DYN3D Wirksamkeit ρ [pcm]	HELIOS-DYN3D Wirksamkeit ρ [pcm]	Differenz Wirksamkeit [pcm]
1	-	1,01133	1,01017			
2	A	1,00233	1,00109	888	897	9
3	B	1,00337	1,00243	784	764	-21
4	C	1,00196	1,00087	925	920	-5
5	D	0,99821	0,99697	1300	1310	10
6	SA	1,00717	1,0063	408	375	-33
7	SB	1,00138	1,00026	982	981	-1
8	SC	1,00698	1,00588	427	422	-5
9	SD	1,00698	1,00588	427	422	-5

Isothermer Temperaturkoeffizient

Für eine Brennstoff- und Moderatortemperatur von 560 K bzw. eine Moderatordichte von 0,752 g/cm³ sowie für eine Brennstoff- und Moderatortemperatur von 570 K bzw. eine Moderatordichte von 0,733 g/cm³ wurden jeweils die Multiplikationsfaktoren ermittelt und anhand dieser mittels der Gl. (3.5) der isotherme Temperaturkoeffizient ITC berechnet.

$$\text{ITC} = \frac{\left(\frac{1}{k_{560}} - \frac{1}{k_{570}} \right)}{560 - 570} * 10^5 \quad (3.5)$$

Tab. 3.5 führt die mit NEWT-DYN3D und HELIOS-DYN3D ermittelten Multiplikationsfaktoren sowie die isothermen Temperaturkoeffizienten auf. Der mit NEWT-DYN3D ermittelte Wert von -4,74 pcm/K ist in guter Übereinstimmung mit -4,86 pcm/K, einem Ergebnis einer VERA-Kernsimulatorrechnung /PAL 19/, jedoch etwas größer als der Messwert von -3,96 pcm/K /PAL 19/. Der mit HELIOS-DYN3D bestimmte ITC-Wert von -6,85 pcm/K weicht dagegen deutlich ab.

Tab. 3.5 Isothermer Temperaturkoeffizient (ITC) im unkontrollierten Zustand berechnet mit NEWT-DYN3D und HELIOS-DYN3D

TVA Watts Bar Unit 1-Benchmark Exercise 1d) und 1e)

Fall	Bor [ppm]	Temperatur [K]	NEWT-DYN3D k_{eff}	HELIOS-DYN3D k_{eff}
1	1291	560	0,99900	0,99825
2	1291	570	0,99853	0,99757
ITC [pcm/K]			-4,74	-6,85

Wirksamkeit der Steuerstabbank D

Zur Ermittlung der Wirksamkeit der D-Bank wurden bei einer Brennstofftemperatur von 565 K, einer Moderatordichte von 0,743 g/cm³ und einer Borkonzentration von 1203 ppm auf Basis der NEWT-Wirkungsquerschnitte sowie der HELIOS-Wirkungsquerschnitte jeweils DYN3D-Ganzkernrechnungen bei verschiedenen Einfahrtiefen der D-Bank durchgeführt. Mittels der resultierenden Multiplikationsfaktoren und der Gl. (3.4) wurden die in Tab. 3.6 aufgeführten Wirksamkeiten berechnet. Bis auf den vollständig eingefahrenen Zustand ermittelt NEWT-DYN3D bei jeder anderen Einfahrtiefe die im Vergleich jeweils größere Wirksamkeit. Eine maximale Differenz von ca. 70 pcm zwischen NEWT-DYN3D und HELIOS-DYN3D wird bei einer Einfahrtiefe im unteren Kerndrittel beobachtet. Für den Zustand mit vollständig eingefahrener D-Bank liegen beide Code-Kombinationen bei der Berechnung der Wirksamkeit in guter Übereinstimmung.

Tab. 3.6 Wirksamkeit der D-Bank berechnet mit NEWT-DYN3D und HELIOS-DYN3D bei einer Borkonzentration von 1230 ppm

TVA Watts Bar Unit 1-Benchmark Exercise 1f)

Fall	Einfahrtiefe [cm]	NEWT-DYN3D k_{eff}	HELIOS-DYN3D k_{eff}	NEWT-DYN3D Wirksamkeit ρ [pcm]	HELIOS-DYN3D Wirksamkeit ρ [pcm]
1	360,68	0,99212	0,99104	-1299	-1308
2	323,1675	0,99203	0,99121	-1308	-1291
3	287,6550	0,99259	0,99212	-1251	-1198
4	251,1425	0,99506	0,99474	-1001	-932
5	214,63	0,99782	0,99740	-723	-664
6	178,1175	1,00044	0,99983	-460	-421
7	141,605	1,00221	1,00147	-284	-257
8	105,0925	1,00349	1,00265	-157	-140
9	68,58	1,00445	1,00352	-61	-53
10	32,0675	1,00488	1,00390	-19	-15
11	0,0	1,00507	1,00405	-	-

Differentielle Borwirksamkeit

Zur Bestimmung der differentiellen Borwirksamkeit wurden bei einer Brennstofftemperatur von 565 K und einer Moderatorichte von 0,743 g/cm³ auf Basis der NEWT- sowie der HELIOS-Wirkungsquerschnitte Ganzkernrechnungen bei den Borkonzentrationen 1170 ppm und 1291 ppm durchgeführt. Über die resultierenden Multiplikationsfaktoren und mittels der Gl. (3.6) wurde die differentielle Borwirksamkeit DBW berechnet.

$$DBW = \frac{\left(\frac{1}{k_{1170}} - \frac{1}{k_{1291}} \right)}{1291 - 1170} * 10^5 \quad (3.6)$$

Wie anhand der Werte in Tab. 3.7 zu erkennen ist, sagen beide Code-Kombinationen differentielle Borwirksamkeiten voraus, die in guter Übereinstimmung liegen. Auch liegen die Ergebnisse in guter Übereinstimmung mit dem Ergebnis einer VERA-Kernsimulatorrechnung mit -10,15 pcm/K sowie dem Messwert von -10,77 pcm/K /PAL 19/.

Tab. 3.7 Differentielle Borwirksamkeit (DBW) im unkontrollierten Zustand berechnet mit NEWT-DYN3D und HELIOS-DYN3D

TVA Watts Bar Unit 1-Benchmark Exercise 1g)

Fall	Bor [ppm]	Temperatur [K]	NEWT-DYN3D k_{eff}	HELIOS-DYN3D k_{eff}
1	1170	565	1,01133	1,01017
2	1291	565	0,99880	0,99793
DBW [pcm/ppm]			-10,25	-10,03

3.6 Querschnittsaufgaben: Qualitätssicherung, Dokumentation, Vereinfachung der Benutzung

3.6.1 Implementierung einer Befehlszeilenschnittstelle

Um die Anwendung von KMACS zu erleichtern und somit die Fehleranfälligkeit bei der Bedienung durch den Benutzer zu reduzieren, wurde eine Befehlszeilenschnittstelle (engl. *Command Line Interface*, CLI) implementiert, mit der es möglich ist, die verschiedenen KMACS-Rechenschritte über einfache Befehle auszuführen. Die Schnittstelle ist so aufgebaut, dass die Schritte von der Wirkungsquerschnittsvorausrechnung bis hin zur Zyklusabbrandrechnung für den Benutzer möglichst einfach gestaltet sind. Zusätzlich wurden einige Hilfsbefehle implementiert, die es dem Benutzer ermöglichen, wichtige Eingabeparameter einfach zu überprüfen oder aus der KMACS-Eingabe und der Datenbank zu lesen.

Im Folgenden werden die neun implementierten Basisbefehle für die Kommandozeile kurz vorgestellt und ihr Zweck erläutert.

- **validate-materials**: Validierung der KMACS-Eingabe bezüglich der Vorausrechnung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten.
- **validate-cycles**: Validierung der KMACS-Eingabe bezüglich der Zyklusabbrandrechnungen.
- **check**: Gemeinsame Durchführung der folgenden Tests:
 1. Auflisten der in der KMACS-Eingabe aufgeführten Simulationsprogramme, z. B. DYN3D, und testen, ob diese aufgerufen werden können.
 2. Validierung der gesamten KMACS-Eingabe durch gemeinsame Ausführung der Kommandos **validate-materials** und **validate-cycles**.

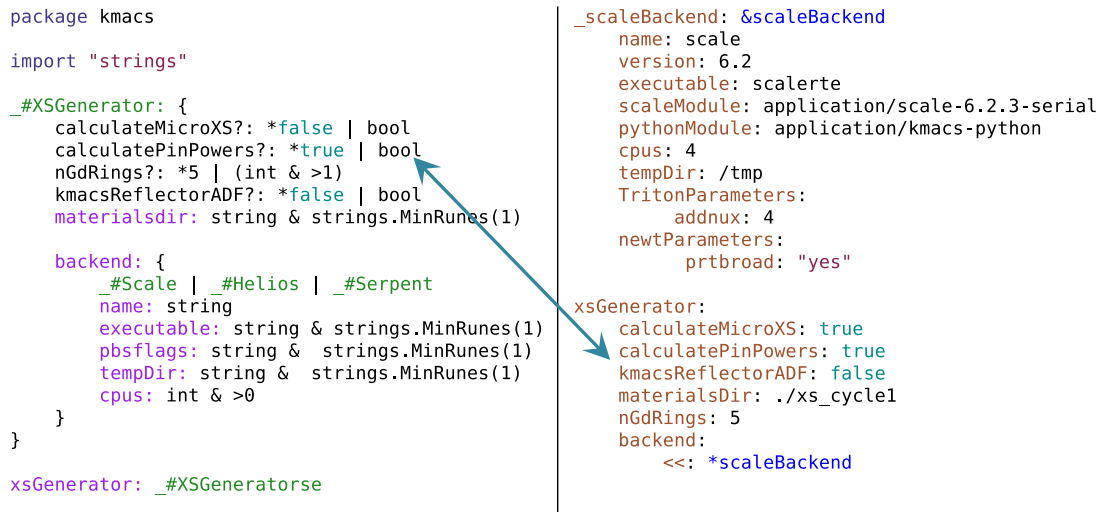
- **create-materials:** Vorausrechnung der Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte für alle oder eine Selektion der in der KMACS-Eingabe definierten Materialien.
- **store-materials:** Einlesen der Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte für alle oder eine Selektion der in der KMACS-Eingabe definierten Materialien in die KMACS-Datenbank. Voraussetzung ist, dass die Vorausrechnung der Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte abgeschlossen ist.
- **list-materials:** Hilfsbefehl, mit dem alle in der KMACS-Eingabe definierten Materialien aufgelistet werden. Materialien, die bereits in die Datenbank eingelesen wurden, werden markiert.
- **run-cycles:** Durchführung der in der KMACS-Eingabe definierten Zyklusabbrandrechnungen. Eine Auswahl ist über die Angabe der Zyklusnamen möglich.
- **list-cycles:** Hilfsbefehl, mit dem alle in der KMACS-Eingabe definierten Zyklen aufgelistet werden. Zyklen, die bereits in die Datenbank eingelesen wurden, werden markiert.
- **analyse:** Durchführung nachgelagerter Unterkanalthermohydraulik-Rechnungen zur Ermittlung von DNBR-Werten.

3.6.2 Eingabvalidierung

Als Dachanwendung für mehrere wissenschaftliche Simulationsprogramme, die Expertenwissen bei ihrer Anwendung voraussetzen, konfrontiert KMACS seine Benutzer mit umfangreichen Konfigurationsanforderungen. Obwohl der Kernsimulator oft bereits vereinheitlichte und vereinfachte Modellschnittstellen zu den Simulationsprogrammen bereitstellt, gibt es immer noch viele komplexe und manchmal untereinander inkompatible Optionen und Parameter, die einzustellen, und große Mengen an miteinander verknüpften Daten, die einzugeben sind. Weil einige Simulationsprogramme ihre Eingabedaten nur sporadisch überprüfen, können sich leicht Inkonsistenzen oder Inkorrektheiten einschleichen, die zu zeitaufwendig zu behebenden Laufzeitfehlern und im schlimmsten Fall ohne Anzeige eines Problems zu plausiblen, aber falschen Resultaten führen.

Um KMACS-Benutzer vor dem Starten von falsch konfigurierten Rechnungen zu bewahren, ist ein Validierungswerkzeug auf Basis der Schema-Sprache CUE /CUE 25/ erstellt und in Form von Unterbefehlen `validate-materials` und `validate-cycles` in den Treiber des Kernsimulators integriert worden. CUE ermöglicht es, den

Konfigurationsvariablen bestimmte Typen, zulässige Wertemengen und -bereiche sowie Vorgabewerte zuzuordnen. Im Gegensatz zu konkurrierenden Standards wie z. B. dem JSON-Schema /JSO 25/ ist es auch möglich, Abhängigkeiten und Randbedingungen zwischen zwei verschiedenen Variablen zu berücksichtigen. Ein CUE-Schema wird deklarativ definiert und enthebt den Autor dadurch von der Aufgabe, Abhängigkeiten in eine angemessene Reihenfolge zu bringen.



```

package kmacs

import "strings"

_XSGenerator: {
  calculateMicroXS?: *false | bool
  calculatePinPowers?: *true | bool
  nGdRings?: *5 | (int & >1)
  kmacsReflectorADF?: *false | bool
  materialsdir: string & strings.MinRunes(1)

  backend: {
    _#Scale | _#Helios | _#Serpent
    name: string
    executable: string & strings.MinRunes(1)
    pbsflags: string & strings.MinRunes(1)
    tempDir: string & strings.MinRunes(1)
    cpus: int & >0
  }
}

xsGenerator: _#XSGeneratorse
  
```

```

_scaleBackend: &scaleBackend
  name: scale
  version: 6.2
  executable: scalerte
  scaleModule: application/scale-6.2.3-serial
  pythonModule: application/kmacs-python
  cpus: 4
  tempDir: /tmp
  TritonParameters:
    addnux: 4
  newtParameters:
    prtbroad: "yes"

xsGenerator:
  calculateMicroXS: true
  calculatePinPowers: true
  kmacsReflectorADF: false
  materialsDir: ./xs_cycle1
  nGdRings: 5
  backend:
    <<: *scaleBackend
  
```

Abb. 3.44 Ausschnitt aus der KMACS-Schemabeschreibung mit CUE (links) und dem zugehörigen Teil einer KMACS-Eingabe (rechts)

Das Eingabeformat von KMACS wurde mit CUE formalisiert, wie in Abb. 3.44 exemplarisch dargestellt. In dem Ausschnitt weist das Fragezeichen hinter `calculateMicroXS` darauf hin, dass dieser Eintrag optional ist. Fehlt ein Eintrag, hat er den mit dem Stern gekennzeichneten Vorgabewert `false`. Mit dem Zeichen `|` (vertikaler Strich) werden Disjunktionen ausgedrückt, mit denen alternative Nebenbedingungen verknüpft werden. Im konkreten Fall muss `calculateMicroXS` auf jeden Fall ein Boolescher Wert sein. Der Vergleich zwischen dem Eintrag in der KMACS-Eingabe und dem Eintrag im CUE-Schema wird in Abb. 3.44 für `calculateMicroXS` mit einem Pfeil verdeutlicht. Die Definition von `nGdRings` zeigt einen Anwendungsfall für den Konjunktionsoperator `&`, der eine Schnittmenge erzeugt. An diesem Beispiel zeigt sich, dass die Operanden nicht nur Typen und Werte, sondern auch Wertebereiche (hier: `>1`) sein können.

Die Beschreibung mit CUE deckt die in der KMACS-Eingabe zurzeit optionalen physikalischen Einheiten mit ab, obwohl es keine explizite Unterstützung dafür in der Schema-Sprache gibt. Diese Anforderung ließ sich mit regulären Ausdrücken umsetzen. Der Benutzer kann separat die Konsistenz eines Modells im Hinblick auf die Vorausrchnung

und die Zyklusrechnung überprüfen. Bei der Entwicklung der Schema-Beschreibung diente ein KMACS-Validierungsdatensatz als Testumgebung.

3.6.3 Erweiterung und Verbesserung der Plotfunktionen

Im Laufe der Anwendung des KMACS-Moduls *kvip* für Postprozessierung und Visualisierung haben sich bestimmte Standard-Datenansichten und -Transformationen sowie Zusatzanforderungen herauskristallisiert, die sich aus diesem Forschungsvorhaben und weiterer Anwendungsfälle ergaben. Diesen Erfordernissen wurde durch die Implementierung der folgenden Funktionen und Zusatzoptionen Rechnung getragen.

Für einen einfachen Überblick über die Kernbeladung ist die Funktion `plotCoreLayout` vorgesehen. Sie zeigt die Brennelementtypen farbcodiert mit einer diskreten Farbskala. Die unterschiedlichen Reflektor-Elemente werden in grau und zur Typ-Unterscheidung mit unterschiedlicher Musterung dargestellt, verwendet u. a. in den Abb. 3.23, Abb. 3.35. Ihre Namen erscheinen deshalb nicht in der Farbskala, sondern über dem Plot in einer Legende. Jedes Brennelement kann mit einer Textannotation versehen werden, die den Wert einer statischen Variablen enthält, die für diese Kern-Untermenge definiert ist, z. B. Brennelement-Nummer, -Standzeit oder -Rotationswinkel.

Über den Aufruf von `plotControlLayout` erhält man eine farbcodierte Unterteilung der unkontrollierten und kontrollierten Brennelemente sowie der Reflektorelemente. Die kontrollierten Brennelemente werden mit den Bezeichnern der entsprechenden Steuerstabgruppen annotiert (siehe Abb. 3.43).

Die Funktion `plotLinearPinPowersOnLayer` berechnet die Stabileistungsdichten und stellt sie für die ausgewählte Schicht dar. Dahingegen zeigt `plotLinearPinPowers` die axial gemittelten Werte an. Die durchschnittlichen, auf den Mittelwert normierten integralen Brennelementleistungen werden von `plotNormalisedAssemblyPowers` bestimmt und geplottet.

Zur grafischen Dokumentation der in der KMACS-Konfiguration für einen Zyklus definierten Randbedingungen (Variablen: `relativePower`, `totalMassFlow`, `inletTemperature`, `controlRodInsertion`) ist die Funktion `plotOperationalVariable` vorgesehen. Für die Eingrenzung der dargestellten Daten der Variablen `controlRodInsertion` steht der Parameter `varSubset` zur Verfügung, dem dazu eine Liste von Steuerstabgruppen vom Anwender zuzuweisen ist. Bei Verwendung des `transform-Parameters`, dem eine Funktion zuzuweisen ist, werden die Werte vor der Darstellung transformiert, z. B. zur Darstellung in anderen Einheiten. Speziell für die Einheitenumrechnung aus einem dimensionslosen Verhältnis in eine dimensionsbehaftete

Größe steht für die Variable `relativePower` die Hilfsfunktion `relativeThermalPowerTo` bereit (Abb. 3.29).

In diesem Forschungsvorhaben wurde zur Visualisierung der von dem KMACS-Modul *kpostal* berechneten DNBR-Werte auch in Reaktoren mit hexagonalen Brennelementen die Generierung der stabaufgelösten Geometrie in 2D-Ansichten nachgerüstet (siehe Abb. 3.17). Die Kanten an den Brennelementgrenzen, die sich durch die nicht-flächen-deckende Unterteilung der Brennelemente in Unterhexagone in diesem Fall ergeben, lassen sich durch die binäre Option `smoothBorders` glätten. Wie auch für rechteckige Geometrie werden die Brennstäbe bei Bedarf alternativ mit Kreisen abgebildet.

Eine wiederkehrende Aufgabe in Analysen ist der Vergleich eines Modells mit experimentellen oder durch andere Programme berechneten Referenzwerten. Zu diesem Zweck wurde in den Funktionen `plotOnLayer`, `plotLinearPinPowers`, `plotLinearPinPowersOnLayer` und `plotNormalisedAssemblyPowers` der Parameter `comparisonValues` eingeführt. Auf die darüber übergebenen Daten kann in einer benutzerdefinierten Transformationsfunktion (Parameter `transform`) über den fest vorgegebenen Variablennamen `compVal` zugegriffen und mit dem KMACS-Wert an derselben Stelle verglichen werden (siehe Abb. 3.4, Abb. 3.22). Enthält die Transformationsfunktion außerdem den Parameter `node`, sind die Informationen über den entsprechenden lokalen Knoten, z. B. das Volumen, darüber zusätzlich verfügbar.

Im Fall einer axialen Rotationssymmetrie des Reaktorkerns ist es üblich, nur einen Ausschnitt daraus abzubilden (siehe Abb. 3.37). Dieser Effekt lässt sich mit der Funktion `azimuthalSlice` erreichen, die aus der Angabe eines Startwinkels (`phi0`) und des zu überstreichenden Winkels (`deltaPhi`) einen Knotenfilter generiert, der in vielen 2D-Plotroutinen an den Parameter `filter` übergeben werden kann.

Die Funktion `plotOnLayer` akzeptiert die genannten Winkelparameter dagegen direkt und ruft selbst `azimuthalSlice` auf. Sie kann, ebenso wie die mit ihr umgesetzten Routinen, in ihrer aktuellen Version neuerdings auch die logischen Koordinatenachsen und -bezeichner für hexagonale Reaktoren einzeichnen (siehe Abb. 3.35).

Im Zuge der Überarbeitung von *kvip* wurde der Code zur Ansteuerung der Plot-Bibliothek „Matplotlib“ von der API-Hauptversion 2 auf den Stand der aktuellen Version 3 gebracht.

3.6.4 Einführung optionaler Datenbankvariablen

Im Laufe der Entwicklung haben sich in der KMACS-Datenbank immer mehr Variablen angesammelt, die zwar initial bei der Rechnung angelegt, aber beim Deaktivieren entsprechender Modelle nicht beschrieben wurden. Dies betrifft optionale Funktionen wie die Stableistungsrekonstruktion, die Wirkungsquerschnittskorrektur und die nachgelagerte Zyklusanalyse im KMACS-Modul *kpostal*, bei der stabaufgelöste DNBR-Werte aus Unterkanalthermohydraulikrechnungen in der Datenbank gespeichert werden.

Um keine überflüssigen Variablen mehr vorzuhalten, wurde das Konzept von optionalen Datenbankvariablen eingeführt, deren Dimensionen und Form der Datenbank prinzipiell bekannt sind, die aber erst auf Anforderung aus den Modulen angelegt und dann von diesen beschrieben werden. Das Inhaltsverzeichnis der KMACS-Datenbank dokumentiert dadurch jetzt genauer die verwendeten Modelle und Nachverarbeitungsschritte.

3.6.5 Komprimierung der SCALE-Ausgabedateien

Die SCALE-Ausgaben bei der Vorausrechnung von homogenisierten Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten werden von dem SCALE-Programmpaket in Text-Dateien gespeichert. Diese zwar für Menschen unmittelbar lesbare, aber ineffiziente Kodierung führt dazu, dass die Vorausrechnung von Wirkungsquerschnitten einen hohen Speicherplatzbedarf erfordert, der mit der Anzahl der Brenn- und Reflektorelemente sowie mit der Menge an Verzweigungsparametern skaliert.

Bisher wurden die Ausgabedateien bei Bedarf manuell durch den Benutzer zu Archivierungszwecken komprimiert, nachdem die Wirkungsquerschnitte in die KMACS-Datenbank geschrieben worden waren. Zur Automatisierung dieses Prozesses wurde in das Ansteuerungsskript von KMACS für SCALE ein Befehl eingebaut, der die Ausgaben gesteuert durch die optionale KMACS-Eingabevariable `compressOutFiles` direkt komprimiert. Außerdem wurden die Einleseroutinen zum Speichern der Wirkungsquerschnitte in die Datenbank dahingehend geändert, dass das Lesen von komprimierten oder unkomprimierten SCALE-Ausgaben transparent erfolgt.

Der erzielbare Speicherplatzgewinn sei hier nur exemplarisch festgehalten: Für eine SCALE-out-Datei ergab sich eine Reduktion auf 8,5 %, für eine SCALE-txtfile16-Datei auf 25,6 % der ursprünglichen Größe. Die umgesetzte Maßnahme ermöglicht dem

Anwender einen deutlich einfacheren Umgang mit der anfallenden Datenmenge auf einem Rechencluster.

3.6.6 Verbesserung des Auslesens der SCALE-txtfile16-Datei

Die Einlese-Routinen für die SCALE-Ausgabedatei „txtfile16“ wurden grundlegend überarbeitet. Im Vergleich zu der alten Version ist der neue Code allgemeiner und ermöglicht damit z. B. die Behandlung von mehr als zwei Energiegruppen, mehreren Abbrandschritten und Verzweigungsparametern. Die eingelesenen Daten werden nicht wie früher in ein Python-„dictionary“ gespeichert, sondern in Attributen eines Ergebnisobjekts. Ein Attribut ist dabei sowohl unter seinem originalen Kurznamen in der SCALE-Nomenklatur als auch unter einem aussagekräftigeren Namen ansprechbar. Für Arrays sind zusätzlich ihre logischen Dimensionen verzeichnet. Im Gegensatz zur Vorversion stehen dem Anwender alle Daten und nicht nur eine Auswahl zur Verfügung. Sämtliche Funktionen und Attribute wurden zur Fehlervermeidung mit Typ-Annotationen versehen.

3.6.7 Umstellung des Dokumentationssystems auf eine einfachere technische Basis

Die ursprüngliche Entscheidung für R-Markdown als Format zur Erstellung der KMACS-Dokumentation hat sich im Rückblick als problematisch erwiesen. Die erhoffte Erleichterung durch eine einfachere Dokumentbeschreibung gegenüber der direkten Verwendung von LaTeX, in das R-Markdown als Zwischenschritt bei der Handbucherstellung automatisiert übersetzt wird, stellte sich nicht ein. Im Gegenteil erwies sich die zusätzliche Ebene von Werkzeugen, R und Pandoc inklusive der jeweiligen Zusatzpakete mit ihren Eigenheiten und Versionsanforderungen als fehleranfällig.

Als Konsequenz wurde die Dokumentation auf reines LaTeX umgestellt. Dazu wurde sie semi-automatisch übersetzt und nachbearbeitet. Verbesserungen finden sich insbesondere bei der Einbindung von Programmcode. Sprachen und Dateiformate wie Python und YAML, die Leerzeichen als syntaktisches Element einsetzen, stellen den Benutzer in PDF-Dokumenten vor das Problem, dass es keine wirklich stabile Möglichkeit zu geben scheint, Leerzeichen beim Kopieren von Programmcode zu erhalten. Diesem Problem wurde durch die Verwendung einer LaTeX-Erweiterung begegnet, die Dateianhänge mit Programmcodebeispielen ermöglicht. Ein weiteres LaTeX-Paket sorgt für Syntax-Hervorhebung und bei Bedarf Zeilen-Nummerierung in Programmcode-Abschnitten.

3.6.8 Qualitätssicherung des Softwareentwicklungsprozesses

Zur Qualitätssicherung des Softwareentwicklungsprozesses von KMACS wurden in der Softwareentwicklungsplattform GitLab /GIT 25/ verschiedene Integrationstests (engl. *Continuous Integration, CI*) implementiert. Die in den nachfolgenden Abschnitten beschriebenen Tests werden durch das Hochladen von geändertem Programmcode in das Softwareentwicklungsprojekt von KMACS automatisiert gestartet.

Für den Rechenschritt der Vorausrchnung von Wirkungsquerschnitten wurden bislang zwei Integrationstests implementiert. Für ausgewählte Brenn- und Reflektorelemente des BEAVRS-Benchmarks als Beispiel für quadratische Geometrie und des X2-Benchmarks für hexagonale Geometrie werden Eingabedateien für den Gittercode NEWT aus dem SCALE-Programmsystem erstellt und mit Referenz-Eingabedateien verglichen. Dies geschieht automatisiert mit einem Python-Skript, das zu allen Verzweigungsparametern die NEWT-Eingabedateien einsammelt, diese jeweils zeilenweise mit den Referenz-Eingabedateien vergleicht und bei Unterschieden die entsprechenden Zeilen anzeigt. Im zweiten Test werden Wirkungsquerschnittsdaten aus Referenz-Ausgabedateien von NEWT gelesen, in eine KMACS-Datenbank gespeichert und mittels eines Python-Skripts mit Einträgen in einer Referenz-Datenbank verglichen, um damit die Routinen zum Lesen und Speichern der Ergebnisse auf ihre Korrektheit hin zu überprüfen.

Im Bereich der Ganzkern-Flussrechnungen stellt ein weiterer Integrationstest die korrekte Durchführung von Ganzkernrechnungen mit DYN3D zur Bestimmung des Multiplikationsfaktors und der Leistungsverteilung sicher. Für den Zustand Nulllast-Heiß des BEAVRS-Benchmarks sowie des X2-Benchmarks werden jeweils automatisiert DYN3D-Ganzkernrechnungen basierend auf Referenz-Wirkungsquerschnittsdaten von NEWT durchgeführt. Ein Python-Skript extrahiert die resultierenden Multiplikationsfaktoren und Leistungsverteilungen und vergleicht diese mit Referenzergebnissen.

Zur Überprüfung von Zyklusabbrandrechnungen werden in einem weiteren Integrationstest der jeweils erste Zyklus des BEAVRS-Benchmarks und des X2-Benchmarks simuliert. Im Fall von BEAVRS werden auf der Basis von Referenz-Wirkungsquerschnittsdaten von NEWT folgende Programmkombinationen ausgeführt: DYN3D für die Ganzkern-Fluss-Thermohydraulikrechnungen und das triviale Abbrandmodul von KMACS /BOU 18/, DYN3D für die Ganzkern-Fluss-Thermohydraulikrechnungen und das mikroskopische Abbrandmodul VENTINA, ATHLET-QUABOX/CUBBOX für die Ganzkern-

Fluss-Thermohydraulikrechnungen und das triviale Abbrandmodul von KMACS. Für das X2-Benchmark wird die Kombination aus DYN3D und dem trivialen Abbrandmodul von KMACS angewendet. Die jeweils resultierenden kritischen Borkonzentrationen als Funktion der Volllasttage werden zum Vergleich mit Referenzergebnissen und, falls vorhanden, mit Messwerten in Plots dargestellt.

Die Anzahl an Integrationstests wird zukünftig erweitert werden, um auch andere Rechenschritte sowie andere Code-Kombinationen von KMACS abzudecken, insbesondere die Vorausrechnung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten mit Serpent und HELIOS.

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

Die Wahl der nuklearen Datenbibliothek hat einen deutlichen Einfluss auf die Ergebnisse von Neutronentransportrechnungen. Insbesondere zeigt sich dies, wie bereits in früheren Studien /AUR 15/, /ZWE 18/ dargelegt, bei Analysen von Flüssigmetall-gekühlten Reaktorsystemen. In diesem Forschungsvorhaben wurde dieser Sachverhalt mit früheren und aktuellen Versionen der US-amerikanischen ENDF/B-Datenbibliothek sowie der europäischen JEFF-Datenbibliothek umfassend an einer Vielzahl von thermischen und schnellen Benchmark-Anordnungen untersucht.

Neben den Wirkungsquerschnittsdaten selbst enthalten aktuelle nukleare Datenbibliotheken umfangreiche Datensätze zu Unsicherheiten dieser Wirkungsquerschnittsdaten. Diese Unsicherheiten wurden mittels eines Verfahrens basierend auf linearer Regression dazu verwendet, Sensitivitätsmaße und Unsicherheiten in stichprobenbasierten Unsicherheitsanalysen von DWR-Kernen zu bestimmen. Die so ermittelten Sensitivitätsmaße sind in ihrer Interpretation schließlich vergleichbar zu den Sensitivitätsmaßen aus der deterministischen Störungstheorie. Darüber hinaus wurde in stichprobenbasierten Unsicherheitsanalysen der Einfluss der Unsicherheiten der nuklearen Daten auf den Verlauf einer Steuerstabverfahrtransiente in einem Flüssigmetall-gekühlten Kern sowie auf den Verlauf einer Steuerstabauswurftransiente in dem DWR-ähnlichen Forschungsreaktor SPERT III (vgl. Kap. 3.3) untersucht.

Um bei stichprobenbasierten Unsicherheitsanalysen nicht mehr auf deterministische Neutronentransportrechnungen und Multigruppen-Wirkungsquerschnittsdaten eingeschränkt zu sein, wurde das Programm XSUSA der GRS um ein Verfahren erweitert, auch Wirkungsquerschnittsdaten in kontinuierlicher Energiedarstellung stichprobenbasiert zu variieren, um die Ermittlung von Ergebnisunsicherheiten bei Monte-Carlo-Neutronentransportrechnungen zu ermöglichen.

Zudem wurde eine Methodik entwickelt und erprobt, bei der durch manuelle Anwendung entsprechender SCALE-Module Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen für Reaktorsysteme mit Brennstoff in doppelt heterogener Anordnung, z. B. Hochtemperaturreaktorsysteme, durchgeführt werden können.

4.1 Erprobung nuklearer Datenbibliotheken

Die nuklearen Datenbibliotheken ENDF/B-VII.1 /CHA 11/, ENDF/B-VIII.0 /BRO 18/, JEFF-3.1.2 /NEA 16a/, JEFF-3.2 /NEA 16b/ und JEFF-3.3 /PLO 20/ wurden für Neutronentransportrechnungen von Reaktorsystemen mit einem thermischen Neutronenspektrum sowie von Reaktorsystemen mit einem schnellen Neutronenspektrum erprobt. Dazu wurden Benchmark-Anordnungen aus dem Handbuch zum *International Criticality Safety Benchmark Evaluation Project* (ICSBEP) /NEA 19a/ und dem Handbuch zum *International Reactor Physics Experiment Evaluation Project* (IRPhEP) /NEA 19b/ ausgewählt. Die verwendeten thermischen Benchmark-Anordnungen sind repräsentativ für Leichtwasserreaktoren, die ausgewählten Benchmark-Anordnungen mit einem schnellen Neutronenspektrum für Flüssigmetall-gekühlte Reaktorsysteme. Die Neutronentransportrechnungen erfolgten mit dem Monte-Carlo-Code MCNP 6.1 /PEL 13/. Im Folgenden wird das Vorgehen beschrieben und die aus den Neutronentransportrechnungen resultierenden Multiplikationsfaktoren mit den für die Benchmark-Anordnungen dokumentierten Multiplikationsfaktoren verglichen.

4.1.1 Thermische Reaktorsysteme

Die zur Erprobung der nuklearen Datenbibliotheken verwendeten Benchmark-Anordnungen mit einem thermischen Neutronenspektrum sind entweder als Reaktorphysikexperimente im IRPhEP-Handbuch in den Kategorien Leichtwasserreaktor (LWR) und Druckwasserreaktor (DWR) oder als Kritikalitätsexperimente im ICSBEP-Handbuch dokumentiert. Für einige Anordnungen konnten entsprechende MCNP 6.1-Modelle dem Handbuch entnommen werden, jedoch waren Anpassungen insbesondere bei der Nomenklatur zur Wahl der jeweiligen nuklearen Datenbibliothek notwendig. Im Folgenden werden die verwendeten Anordnungen mit ihrer IRPhEP- oder ICSBEP-Bezeichnung und einer kurzen Beschreibung aufgeführt. Für eine vollständige Beschreibung sei auf die jeweilige Dokumentation im IRPhEP- oder ICSBEP-Handbuch verwiesen.

- KRITZ-2:1 (IRPhEP KRITZ-LWR-RESR-002): Reguläre Gitteranordnung von niedrig-angereichten UO_2 -Brennstäben in H_2O .
- KRITZ-2:13 (IRPhEP KRITZ-LWR-RESR-003): Reguläre Gitteranordnung von niedrig-angereichten UO_2 -Brennstäben in H_2O .
- KRITZ-2:19 (IRPhEP KRITZ-LWR-RESR-001): Reguläre Gitteranordnung von MOX-Brennstäben in H_2O .

- VENUS-7, -7/1 und -7/3 (IRPhEP VENUS-PWR-EXP-004): Reguläre Gitteranordnungen ähnlich zu DWR mit MOX- und UO_2 -Brennstäben in H_2O .
- B&W SSCR (IRPhEP SSCR-PWR-EXP-001): Reguläre Gitteranordnung ähnlich zu DWR mit UO_2 -Brennstäben in H_2O .
- B&W Core XI (ICSBEP LEU-COMP-THERM-008): Kritische Gitteranordnung von UO_2 -Brennstäben und verschiedenen Absorberstäben in H_2O versetzt mit Borsäure.
- PRCF/PNL (ICSBEP MIX-COMP-THERM-002): Gitteranordnung von Brennstäben mit UO_2 / 2 Gew.-% PuO_2 (8 % ^{240}Pu) in H_2O .
- RAPSODIE-1 (ICSBEP MIX-COMP-THERM-011): Gitteranordnung von MOX-Brennstäben in H_2O und umgeben von einem H_2O -Reflektor.
- CREOLE (IRPhEP CREOLE-PWR-EXP-001): DWR-ähnliche Gitteranordnung von MOX-Brennstäben in H_2O .
- TCA Core I (ICSBEP LEU-COMP-THERM-006): Gitteranordnung von niedrigangereicherten UO_2 -Brennstäben in H_2O .
- TCA Core III (ICSBEP LEU-COMP-THERM-065): Gitteranordnung von zu 2,6 % in U-235 angereicherten UO_2 -Brennstäben und mit Bor versetzten Edelstahlplatten in H_2O .
- OTTO HAHN (IRPhEP OTTOHAHN-PWR-RESR-001): DWR-ähnliche UO_2 -Brennstäbe mit abbrennbarem Neutronenabsorber (Zweite Kernausslegung).
- IPEN/MB-01 Core I (ICSBEP LEU-COMP-THERM-006): Reguläre Gitteranordnung mit niedrigangereicherten UO_2 -Brennstäben in H_2O und umgeben von einem H_2O -Reflektor und einem Edelstahl-Kernbehälter.

Die Kritikalitätsrechnungen mit MCNP 6.1 wurden mit 50.000.000 aktiven Neutronenhistorien durchgeführt, um eine geringe statistische Unsicherheit von ungefähr 0,0001 für den Multiplikationsfaktor zu erreichen. Diese ist somit im Vergleich zu den für die Benchmark-Anordnungen dokumentierten Unsicherheiten von 0,0012 oder größer vernachlässigbar. Die nuklearen Datenbibliotheken wurden nicht selbst in das für MCNP notwendige Datenformat *A Compact ENDF* (ACE) /MAC 10/ prozessiert. Im Fall von ENDF/B-VII.1 konnte die Datenbibliothek aus der MCNP 6.1 Distribution verwendet werden. Die Datenbibliothek ENDF/B-VIII.0 konnte im ACE-Format von der Webseite des Brookhaven National Laboratory / National Nuclear Data Center (BNL / NNDC) /NNDC 25/ und die JEFF-Datenbibliotheken von der Webseite der OECD/NEA /NEA 22/ heruntergeladen werden. Zwecks Nachvollziehbarkeit, um welche ins ACE-Format prozessierte Datenbibliotheken es sich bei diesen Untersuchungen handelt, werden

nachfolgend die verwendeten Datenbibliotheken zusammen mit der in den ACE-formatierten Dateien enthaltenen Kopfzeile aufgeführt:

- ENDF/B-VII.1: ENDF71x (jlconlin) Ref. see jlconlin (ref 09/10/2012 10:00:53)
- ENDF/B-VIII.0: Lib80x (jlconlin) Reference LA-UR-18-24034 by Conlin, J.L., et al.
- JEFF-3.1.2: JEFF3.1.2, NJOY99.364, NEA_Dec2011
- JEFF-3.2: JEFF32, NJOY99.393, NEA_July2013
- JEFF-3.3: ACE file, NDEC - njoy 2016.42, at NEA on 2018-10-01

Für die verschiedenen Benchmark-Anordnungen werden die mit den verschiedenen Datenbibliotheken ermittelten Multiplikationsfaktoren zusammen mit dem jeweiligen Benchmark-Multiplikationsfaktor in Tab. 4.1 aufgelistet. Die zugehörigen Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren werden in der Einheit einer Standardabweichung (1σ) in Tab. 4.2 gegeben.

Tab. 4.1 Berechnete Multiplikationsfaktoren für thermische Benchmark-Anordnungen im Vergleich zum Benchmark-Multiplikationsfaktor

	Bench- mark	ENDF/B- VII.1	ENDF/B- VIII.0	JEFF- 3.1.2	JEFF-3.2	JEFF-3.3
KRITZ-2:1	1,00250	0,99681	0,99621	0,99711	0,99771	0,99888
KRITZ-2:13	1,00130	0,99920	0,99943	0,99958	0,99966	1,00055
KRITZ-2:19	1,00770	1,00209	0,99919	1,00052	1,00160	0,99990
VENUS-7	1,00075	0,99497	0,99388	0,99444	0,99358	0,99454
VENUS-7/1	0,99959	0,99595	0,99493	0,99552	0,99466	0,99602
VENUS-7/3	0,99830	0,99643	0,99557	0,99605	0,99547	0,99647
B&W SSCR	1,00080	1,00015	0,99924	1,00006	0,99918	1,00126
B&W Core XI-3	1,00070	0,99916	0,99938	0,99932	0,99897	1,00027
B&W Core XI-9	1,00070	0,99789	0,99752	0,99815	0,99798	0,99878
PRCF/PNL- 30	1,00240	1,00049	1,00004	0,99972	1,00075	1,00065
PRCF/PNL- 33	1,00240	1,00620	1,00521	1,00602	1,00638	1,00577
RAPSODIE- 1	1,00000	1,00099	1,00142	0,99977	1,00061	1,00124
CREOLE	1,00324	1,00309	1,00317	1,00292	1,00300	1,00362
TCA Core I- 1	1,00000	1,00001	0,99935	1,00015	0,99955	1,00090
TCA Core I- 14	1,00000	0,99966	1,00003	0,99991	0,99970	1,00006
TCA Core III-1	1,00000	1,00339	1,00295	1,00330	1,00261	1,00349
TCA Core III-13	1,00010	1,00233	1,00156	1,00275	1,00230	1,00266
OTTO HAHN	1,00000	0,99795	0,99786	0,99867	0,99892	1,00042
IPEN/MB- 01 Core I-3	1,00040	1,00364	1,00356	1,00373	1,00266	1,00369

Tab. 4.2 Unsicherheiten der ermittelten Multiplikationsfaktoren und des Benchmark-Multiplikationsfaktors (Standardabweichung, 1σ)

	Bench- mark	ENDF/B- VII.1	ENDF/B- VIII.0	JEFF- 3.1.2	JEFF-3.2	JEFF-3.3
KRITZ-2:1	0,00200	0,00010	0,00010	0,00010	0,00010	0,00009
KRITZ-2:13	0,00220	0,00009	0,00009	0,00009	0,00009	0,00009
KRITZ-2:19	0,00300	0,00009	0,00010	0,00009	0,00010	0,00009
VENUS-7	0,00163	0,00011	0,00011	0,00010	0,00011	0,00010
VENUS-7/1	0,00163	0,00010	0,00010	0,00011	0,00010	0,00010
VENUS-7/3	0,00163	0,00010	0,00010	0,00011	0,00011	0,00011
B&W SSCR	0,00150	0,00010	0,00011	0,00011	0,00010	0,00010
B&W Core XI-3	0,00120	0,00010	0,00009	0,00009	0,00009	0,00008
B&W Core XI-9	0,00120	0,00009	0,00010	0,00010	0,00010	0,00010
PRCF/PNL- 30	0,00600	0,00011	0,00010	0,00011	0,00010	0,00010
PRCF/PNL- 33	0,00240	0,00011	0,00010	0,00010	0,00010	0,00011
RAPSODIE- 1	0,00240	0,00012	0,00012	0,00012	0,00012	0,00012
CREOLE	0,00188	0,00010	0,00009	0,00010	0,00010	0,00009
TCA Core I- 1	0,00200	0,00010	0,00010	0,00010	0,00010	0,00010
TCA Core I- 14	0,00200	0,00009	0,00010	0,00009	0,00010	0,00010
TCA Core III-1	0,00140	0,00010	0,00010	0,00010	0,00010	0,00010
TCA Core III-13	0,00160	0,00010	0,00010	0,00010	0,00011	0,00010
OTTO HAHN	0,00510	0,00011	0,00011	0,00011	0,00012	0,00010
IPEN/MB- 01 Core I-3	0,00100	0,00011	0,00010	0,00010	0,00010	0,00010

In Abb. 4.1 werden die unter Verwendung der nuklearen Datenbibliotheken ermittelten Multiplikationsfaktoren und der Benchmark-Multiplikationsfaktor mit ihrer jeweiligen Standardabweichung (1σ) für die betrachteten Anordnungen dargestellt. Zudem werden für jede Benchmark-Anordnung die relativen Abweichungen in Abb. 4.2 sowie die Abweichungen in der Einheit einer Benchmark-Standardabweichung zwischen den

ermittelten Multiplikationsfaktoren und dem Benchmark-Multiplikationsfaktor in Abb. 4.3 dargestellt.

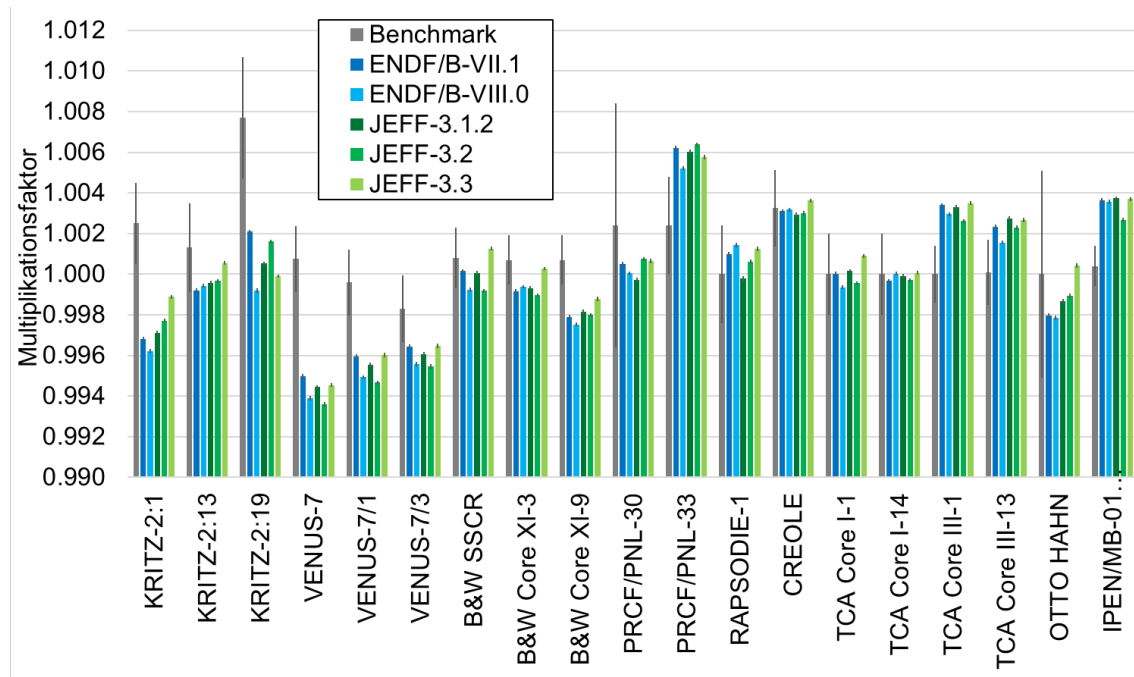


Abb. 4.1 Ermittelte Multiplikationsfaktoren für thermische Benchmark-Anordnungen im Vergleich zum Benchmark-Multiplikationsfaktor

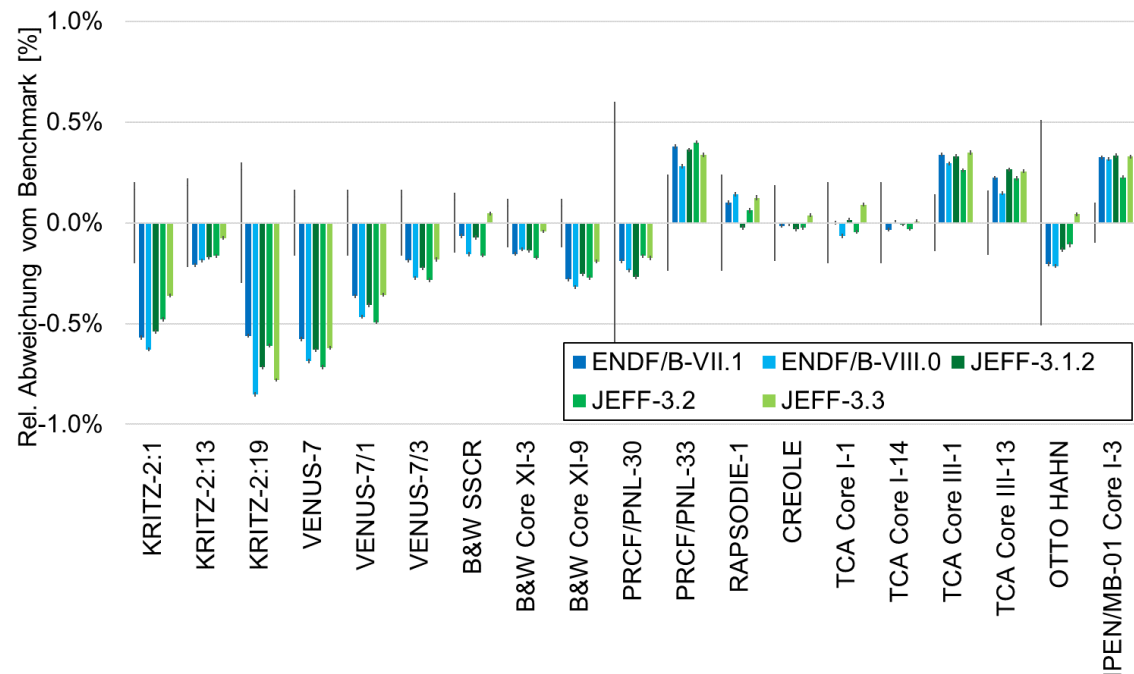


Abb. 4.2 Relative Abweichung zwischen den ermittelten Multiplikationsfaktoren und dem jeweiligen Benchmark-Multiplikationsfaktor

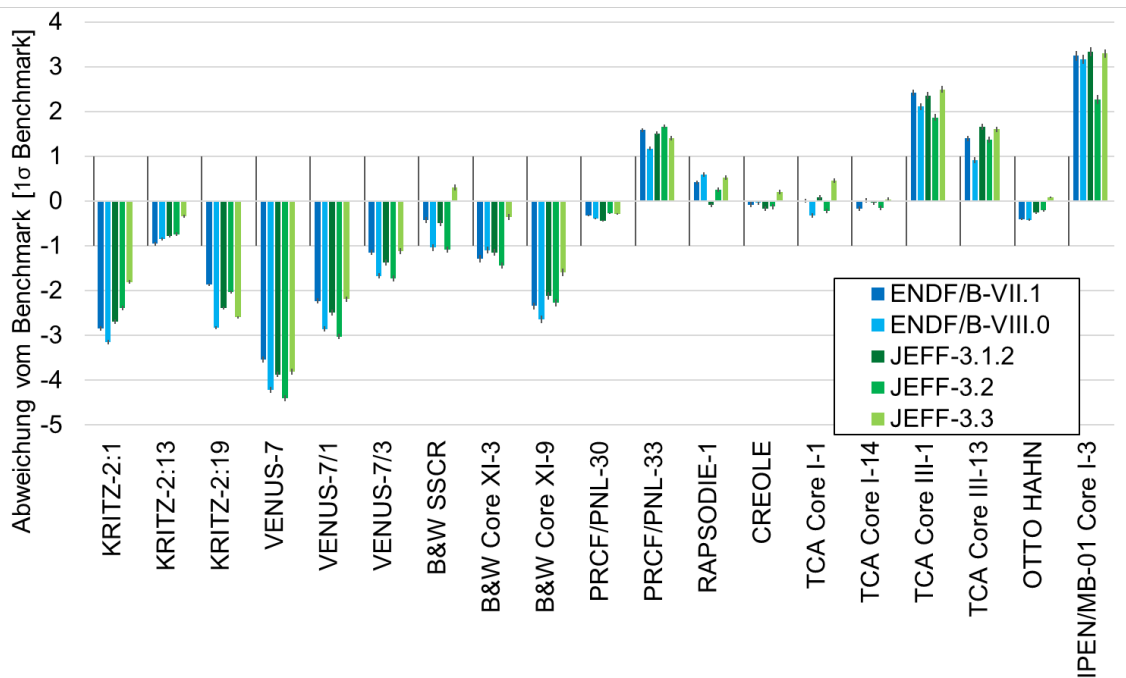


Abb. 4.3 Abweichung in der Einheit einer Benchmark-Standardabweichung zwischen den ermittelten Multiplikationsfaktoren und dem jeweiligen Benchmark-Multiplikationsfaktor

Die verwendeten nuklearen Datenbibliotheken liefern für die betrachteten Benchmark-Anordnungen eine zufriedenstellende Übereinstimmung zwischen den mit MCNP 6.1 ermittelten Multiplikationsfaktoren und dem Benchmark-Multiplikationsfaktor. Lediglich für VENUS-7 führen alle Datenbibliotheken zu einer deutlichen Abweichung von mehr als drei Benchmark-Standardabweichungen und im Fall von IPEN/MB-01 Core I-3 erzielt nur die JEFF-3.2 Datenbibliothek eine Abweichung von weniger als drei Benchmark-Standardabweichungen (siehe Abb. 4.3). Ferner ist bei keiner Datenbibliothek ein systematisches Über- bzw. Unterschätzen der Multiplikationsfaktoren über alle betrachteten Benchmark-Anordnungen hinweg zu erkennen.

Als zusammenfassende Größen wurden Mittelwerte, siehe Tab. 4.3, über die berechneten Abweichungen der betrachteten Benchmark-Anordnungen ermittelt: a) Mittelwert über die relativen, vorzeichenbehafteten Abweichungen, b) Mittelwert über die Absolutbeträge der relativen Abweichungen, c) Mittelwert über die vorzeichenbehafteten Abweichungen in der Einheit einer Benchmark-Standardabweichung, d) Mittelwert der Absolutbeträge der Abweichungen in der Einheit einer Benchmark-Standardabweichung. Für die betrachteten Benchmark-Anordnungen werden die geringsten Abweichungen zu den Benchmark-Multiplikationsfaktoren mit der Datenbibliothek JEFF-3.3 erzielt, dagegen führt die Datenbibliothek ENDF/B-VIII.0 zu den höchsten Abweichungen.

Tab. 4.3 Gemittelte relative Abweichungen und Abweichungen in der Einheit einer Benchmark-Standardabweichung (vorzeichenbehaftet und absolut) über betrachtete thermische Benchmark-Anordnungen

Datenbibliothek	(a)	(b)	(c)	(d)
ENDF/B-VII.1	-0,11 %	0,25 %	-0,45	1,40
ENDF/B-VIII.0	-0,16 %	0,28 %	-0,72	1,55
JEFF-3.1.2	-0,12 %	0,26 %	-0,50	1,44
JEFF-3.2	-0,14 %	0,26 %	-0,67	1,45
JEFF-3.3	-0,06 %	0,23 %	-0,20	1,29

4.1.2 Flüssigmetall-gekühlte Reaktorsysteme

Die zur Erprobung der nuklearen Datenbibliotheken verwendeten Benchmark-Anordnungen sind entweder als Reaktorphysikexperimente im IRPhEP-Handbuch in der Kategorie LMFR (*Liquid Metal Cooled Fast Reactor*) oder als Kritikalitätsexperimente im ICSBEP-Handbuch dokumentiert. Ein Auswahlkriterium der hier verwendeten Benchmarks war, dass eine detaillierte MCNP-Eingabedatei in den Handbüchern zur Verfügung stand. Für einige Anordnungen wurden gegebenenfalls Anpassungen an der MCNP-Eingabedatei vorgenommen, insbesondere im Hinblick auf die Nomenklaturen der verschiedenen Datenbibliotheken. Eine Ausnahme bilden die SNEAK-Experimente, für die eigene Eingabedateien bereits aus früheren Studien vorlagen. Die Experimente werden im Folgenden mit ihrer IRPhEP- und ggf. ICSBEP-Bezeichnung zusammen mit einer kurzen Beschreibung aufgeführt. Für eine vollständige Beschreibung sei jeweils auf die Dokumentation im IRPhEP- bzw. ICSBEP-Handbuch verwiesen.

- BFS-61-0 (BFS1-LMFR-EXP-002, MIX-MET-FAST-006): Experimentelle Anordnung eines bleigekühlten, schnellen Reaktors mit einem Kern aus metallischem Brennstoff mit Plutonium und abgereichertem Uran sowie verschiedenen Reflektoren. Der Kern von BFS-61-0 wies eine Höhe von ca. 85 cm und einen Durchmesser von ca. 90 cm auf. Dieser war von einem seitlichen Reflektor umgeben, der aus Schichten von Blei, Stahl und abgereichertem Uranoxid bestand.
- FFTF1 (FFTF-LMFR-RESR-001): Ein Prototyp eines schnellen, Flüssigmetall-gekühlten Brutreaktors der *Fast Flux Test Facility*. Der Reaktorkern bestand aus einer vertikalen Anordnung von 199 austauschbaren hexagonalen Brennelementen.

- EBR2 (EBR2-LMFR-RESR-001): Experiment 138b durchgeführt im Experimentellen Brutreaktor II, einem Prototyp eines schnellen, Flüssigmetall-gekühlten Brutreaktors. Der EBR-II bestand aus 637 vertikalen, sechseckigen, austauschbaren Brennelementen. Die Brennelemente waren in drei Bereiche unterteilt: den Kern und eine innere sowie eine äußere Hülle.
- SNEAK 7A and 7B (SNEAK-LMFR-EXP-001): Mit Plutonium betriebene kritische Anordnungen der *Karlsruhe Fast Critical Facility*. Die Brennelemente bestanden aus quadratischen Edelstahlhüllrohren gefüllt mit Brennstoffplatten sowie Platten aus Strukturmaterial in abwechselnder Reihenfolge.
- ZPPR-2, Loading 90 (ZPPR-LMFR-EXP-011, MIX-COMP-FAST-006): Ein zylindrisches Brennelement mit (Pu,U)-Oxid-Brennstoff und Natrium, umgeben von abgereichertem Uran, Natrium und Stahl als Reflektor. Der ZPPR-2-Kern bestand aus Brennelementen mit verschiedenen Platten aus abgereichertem U_3O_8 , Eisenoxid, Natrium und einer Pu-U-Mo-Legierung. Die Beladung 90 war die endgültige kritische Referenzkonfiguration.
- ZPPR-9 Loading 13 (ZPPR-LMFR-EXP-002): Ein natriumgekühlter, mit MOX-betriebener schneller Brutreaktor der 650-MWe-Klasse. Die Beladung 13 war die kritische Referenzkonfiguration.
- ZPPR-10A Loading 7 (ZPPR-LMFR-EXP-001): Ein natriumgekühlter, mit MOX-betriebener schneller Brutreaktor der 650-MWe-Klasse mit zwei Anreicherungs-zonen und 19 Steuerstabpositionen. Die Beladung 7 war die kritische Referenzkonfiguration.
- ZPPR-12 Loading 9 (ZPPR-LMFR-EXP-010): Modell des natriumgekühlten Clinch-River-Brutreaktors mit 400 MWe. Der ZPPR-12 hatte einen zylindrischen Ein-Zonen-Kern. Die Beladung 9 war die kritische Referenzkonfiguration.
- ZPPR13A Loading 24 (ZPPR-LMFR-EXP-007): Ein natriumgekühlter, mit MOX-betriebener, radial heterogener, schneller Brutreaktor der 650-MWe-Klasse. Der Kern wurde aus kleinen Platten aus abgereichertem Uran, Eisenoxid (Fe_2O_3), abgereichertem U_3O_8 , rostfreiem Stahl und Pu-U-Mo-Legierung zusammengesetzt. Die Beladung 24 war die kritische Referenzkonfiguration.
- ZPR6A7 Loading 41 (ZPR-LMFR-EXP-001, MIX-COMP-FAST-001): Ein schneller Reaktorkern mit (Pu,U)-Oxid-Brennstoff, Natrium als Kühlmittel und einem Reflektor aus abgereichertem Uranium. Die Beladung 41 war die kritische Referenzkonfiguration.

- ZPR6A7 Loading 99 (ZPR-LMFR-EXP-002, MIX-COMP-FAST-002): Ein Reaktorkern mit schnellem Neutronenspektrum mit (Pu,U)-Oxid-Brennstoff und einer zentralen Zone mit hohem ^{240}Pu -Gehalt. Die Beladung 99 war die kritische Referenzkonfiguration.

Die Kritikalitätsberechnungen wurden mit MCNP mit 25.000.000 aktiven Neutronenhistorien durchgeführt, um eine geringe statistische Unsicherheit von ungefähr 0,0001 für den Multiplikationsfaktor zu erreichen. Diese ist somit im Vergleich zu den für die Benchmark-Anordnungen dokumentierten Unsicherheiten von 0,0008 oder höher vernachlässigbar. Die Berechnungen wurden mit denselben nuklearen Datenbibliotheken durchgeführt, die bereits für die Neutronentransportrechnungen der thermischen Benchmark-Anordnungen in Kap. 4.1.1 verwendet wurden:

- ENDF/B-VII.1: ENDF71x (jlconlin) Ref. see jlconlin (ref 09/10/2012 10:00:53)
- ENDF/B-VIII.0: Lib80x (jlconlin) Reference LA-UR-18-24034 by Conlin, J.L., et al.
- JEFF-3.1.2: JEFF3.1.2, NJOY99.364, NEA_Dec2011
- JEFF-3.2: JEFF32, NJOY99.393, NEA_July2013
- JEFF-3.3: ACE file, NDEC - njoy 2016.42, at NEA on 2018-10-01

Die Ergebnisse für die Multiplikationsfaktoren im Vergleich zu den Benchmark-Werten sind in Tab. 4.4 und ihre zugehörigen Unsicherheiten (1σ) in Tab. 4.5 gegeben.

Tab. 4.4 Berechnete Multiplikationsfaktoren für LMFR-Benchmark-Anordnungen im Vergleich zum Benchmark-Multiplikationsfaktor

	Bench- mark	ENDF/B- VII.1	ENDF/B- VIII.0	JEFF- 3.1.2	JEFF-3.2	JEFF-3.3
BFS-61-0	1,00030	0,99613	0,99654	0,99830	0,99522	1,00551
FFTF1	0,99930	1,00130	0,99625	1,00454	0,99829	1,00132
EBR2	1,00927	1,00933	1,00888	1,01473	1,01545	1,00975
SNEAK7A	1,00100	1,00183	1,00091	1,00213	0,99817	1,00779
SNEAK7B	1,00160	0,99988	1,00089	1,00134	0,99821	1,00764
ZPPR2 L90	1,00050	1,00242	0,99956	1,00585	0,99951	1,00668
ZPPR9 L13	1,00080	0,99983	0,99776	1,00230	0,99554	1,00432
ZPPR10A L07	1,00110	1,00038	0,99804	1,00313	0,99618	1,00447
ZPPR12 L09	1,00080	0,99994	0,99784	1,00524	1,00010	1,00473
ZPPR13A L24	0,99960	1,00020	0,99848	1,00420	0,99828	1,00601
ZPR6A7 L41	1,00051	1,00032	0,99753	1,00377	0,99738	1,00588
ZPR6A7 L99	1,00080	0,99944	0,99680	1,00357	0,99673	1,00458
BFS-61-0	1,00030	0,99613	0,99654	0,99830	0,99522	1,00551
FFTF1	0,99930	1,00130	0,99625	1,00454	0,99829	1,00132
EBR2	1,00927	1,00933	1,00888	1,01473	1,01545	1,00975
SNEAK7A	1,00100	1,00183	1,00091	1,00213	0,99817	1,00779
SNEAK7B	1,00160	0,99988	1,00089	1,00134	0,99821	1,00764
ZPPR2 L90	1,00050	1,00242	0,99956	1,00585	0,99951	1,00668
ZPPR9 L13	1,00080	0,99983	0,99776	1,00230	0,99554	1,00432

Tab. 4.5 Unsicherheit der ermittelten Multiplikationsfaktoren und des Benchmark-Multiplikationsfaktors (Standardabweichung, 1σ)

	Bench- mark	ENDF/B- VII.1	ENDF/B- VIII.0	JEFF- 3.1.2	JEFF-3.2	JEFF-3.3
BFS-61-0	0,00290	0,00012	0,00011	0,00012	0,00012	0,00012
FFTF1	0,00210	0,00012	0,00011	0,00011	0,00011	0,00011
EBR2	0,00618	0,00014	0,00013	0,00013	0,00013	0,00011
SNEAK7A	0,00290	0,00012	0,00012	0,00011	0,00011	0,00011
SNEAK7B	0,00350	0,00010	0,00011	0,00010	0,00010	0,00010
ZPPR2 L90	0,00070	0,00005	0,00005	0,00007	0,00005	0,00005
ZPPR9 L13	0,00150	0,00009	0,00010	0,00010	0,00010	0,00009
ZPPR10A L07	0,00150	0,00009	0,00010	0,00009	0,00010	0,00010
ZPPR12 L09	0,00080	0,00011	0,00011	0,00012	0,00013	0,00012
ZPPR13A L24	0,00150	0,00011	0,00009	0,00010	0,00010	0,00010
ZPR6A7 L41	0,00087	0,00011	0,00010	0,00009	0,00010	0,00010
ZPR6A7 L99	0,00090	0,00011	0,00010	0,00010	0,00010	0,00010
BFS-61-0	0,00290	0,00012	0,00011	0,00012	0,00012	0,00012
FFTF1	0,00210	0,00012	0,00011	0,00011	0,00011	0,00011
EBR2	0,00618	0,00014	0,00013	0,00013	0,00013	0,00011
SNEAK7A	0,00290	0,00012	0,00012	0,00011	0,00011	0,00011
SNEAK7B	0,00350	0,00010	0,00011	0,00010	0,00010	0,00010
ZPPR2 L90	0,00070	0,00005	0,00005	0,00007	0,00005	0,00005
ZPPR9 L13	0,00150	0,00009	0,00010	0,00010	0,00010	0,00009

In Abb. 4.4 werden die unter Verwendung der nuklearen Datenbibliotheken ermittelten Multiplikationsfaktoren und der Benchmark-Multiplikationsfaktor mit ihrer jeweiligen Standardabweichung (1σ) für die betrachteten Anordnungen dargestellt. Zudem werden für jede Benchmark-Anordnung die relativen Abweichungen in Abb. 4.5 sowie die Abweichungen in der Einheit einer Benchmark-Standardabweichung zwischen den ermittelten Multiplikationsfaktoren und dem Benchmark-Multiplikationsfaktor in Abb. 4.6 dargestellt.

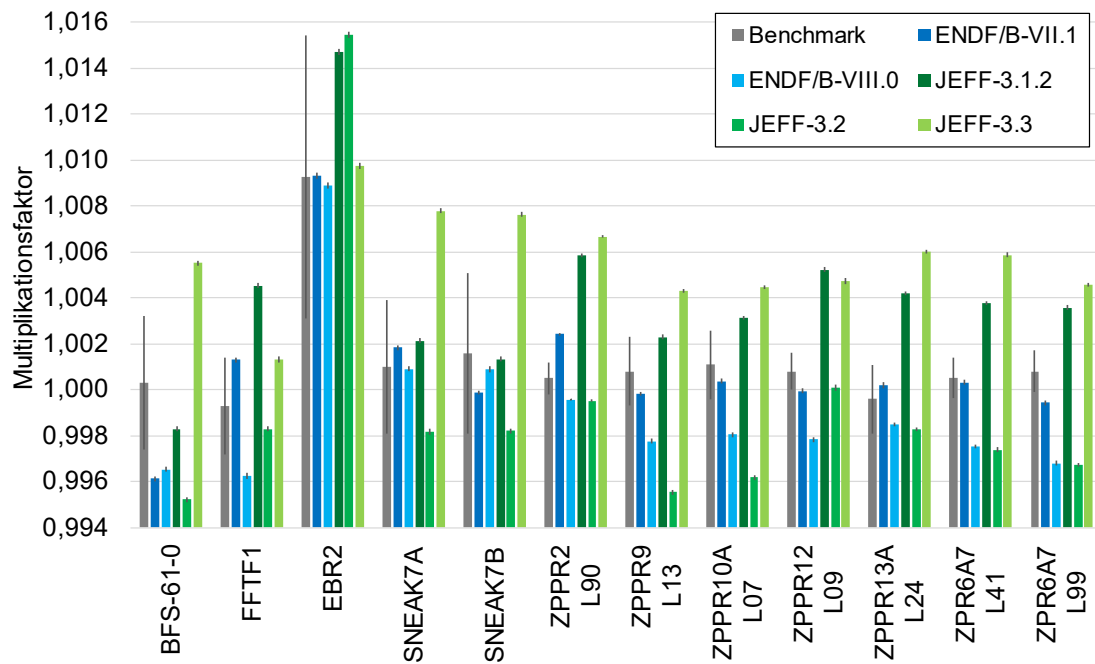


Abb. 4.4 Ermittelte Multiplikationsfaktoren für verschiedene LMFR-Anordnungen im Vergleich zum Benchmark-Multiplikationsfaktor

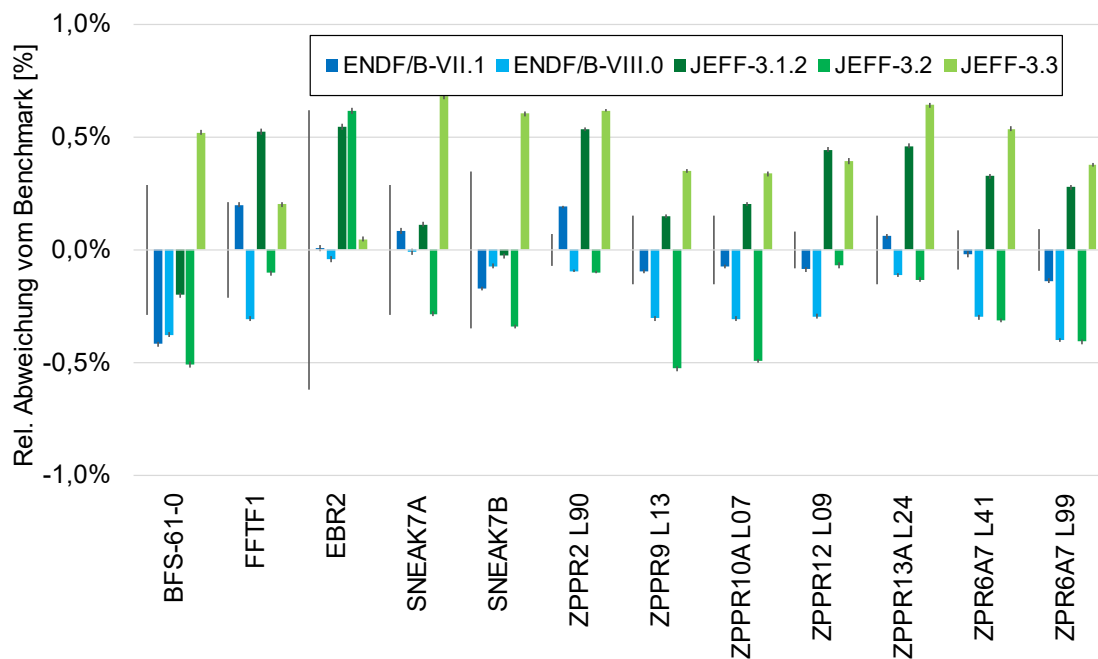


Abb. 4.5 Relative Abweichung zwischen den ermittelten Multiplikationsfaktoren und dem jeweiligen Benchmark-Multiplikationsfaktor

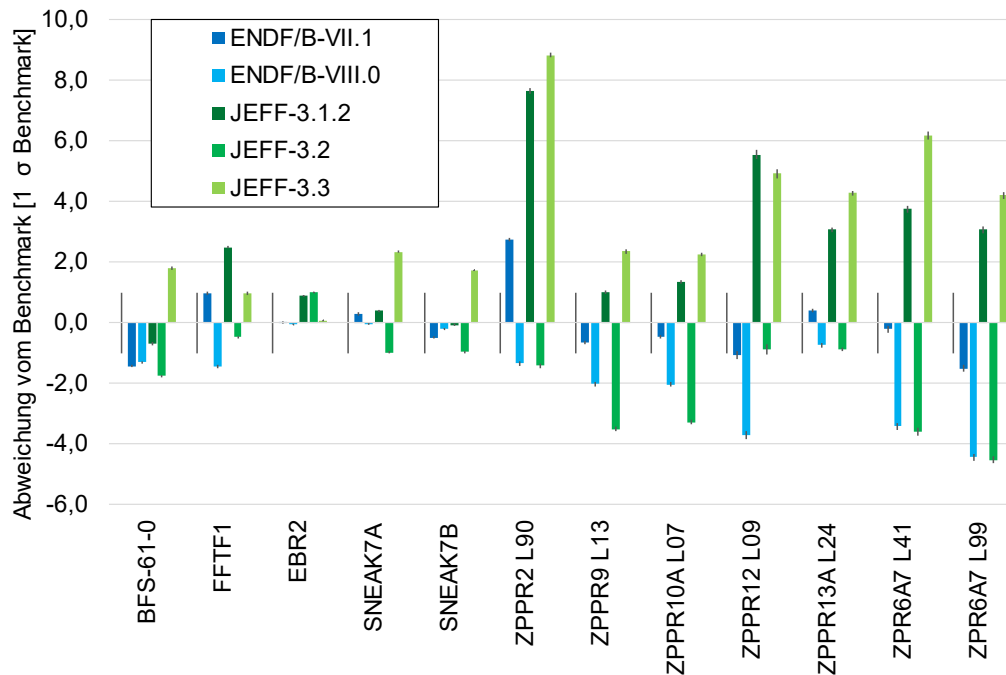


Abb. 4.6 Abweichung in der Einheit einer Benchmark-Standardabweichung zwischen den ermittelten Multiplikationsfaktoren und dem jeweiligen Benchmark-Multiplikationsfaktor

Wie aus Abb. 4.6 ersichtlich, liefern die verwendeten nuklearen Datenbibliotheken für die betrachteten Benchmark-Anordnungen teilweise stark abweichende Ergebnisse zwischen den mit MCNP ermittelten Multiplikationsfaktoren und dem Benchmark-Multiplikationsfaktor. Während die Ergebnisse, die mit ENDF/B-VII.1-Daten gewonnen wurden, eine sehr gute Übereinstimmung liefern und innerhalb von drei Benchmark-Standardabweichungen liegen, sind für ENDF/B-VIII.0 eine systematische Unterschätzung und Abweichungen von mehr als drei Benchmark-Standardabweichungen zu beobachten. Deutlich von den Benchmark-Ergebnissen abweichende Werte liefert die JEFF-3.1.2-Bibliothek. Hier werden die Benchmark-Ergebnisse um bis zu 7,6 Benchmark-Standardabweichungen systematisch überschätzt. Die mit JEFF-3.2 erhaltenen Ergebnisse wiederum verhalten sich ähnlich zu den mit ENDF/B-VIII.0 erhaltenen Ergebnissen; es werden Abweichungen von -4,5 Benchmark-Standardabweichungen beobachtet. Die größten Abweichungen werden mit JEFF-3.3 beobachtet, die sich qualitativ wie die JEFF-3.1.2-Ergebnisse verhalten, jedoch mit deutlich höheren Abweichungen von bis zu 8,8 Benchmark-Standardabweichungen.

Um die Gesamtabweichungen zu quantifizieren, wurden die folgenden Mittelwerte über die berechneten Abweichungen der betrachteten Benchmark-Anordnungen ermittelt: (a) der Mittelwert über die vorzeichenbehafteten Abweichungen zwischen berechneten und

Benchmark-Werten, (b) der Mittelwert der Absolutbeträge der Abweichungen, (c) der Mittelwert der vorzeichenbehafteten Abweichungen in der Einheit einer Benchmark-Standardabweichung, (d) der Mittelwert der Absolutbeträge der Abweichungen in der Einheit einer Benchmark-Standardabweichung. Die Ergebnisse sind in Tab. 4.6 aufgeführt. Sie zeigen deutliche Abweichungen der mit JEFF-3.1.2 sowie mit JEFF-3.3 ermittelten Werte von den Benchmark-Ergebnissen.

Tab. 4.6 Gemittelte relative Abweichungen und Abweichungen in der Einheit einer Benchmark-Standardabweichung (vorzeichenbehaftet und absolut) über betrachtete LMFR-Benchmark-Anordnungen

Datenbibliothek	(a)	(b)	(c)	(d)
ENDF/B-VII.1	-0,04 %	0,13 %	-0,12	0,85
ENDF/B-VIII.0	-0,22 %	0,22 %	-1,73	1,73
JEFF-3.1.2	0,28 %	0,32 %	2,37	2,50
JEFF-3.2	-0,22 %	0,32 %	-1,77	1,94
JEFF-3.3	0,44 %	0,44 %	-3,32	3,32

Um die Ursache der erhöhten Abweichungen der JEFF-3.3-Werte weiter zu untersuchen, wurde eine Sensitivitätsanalyse mit TSUNAMI-3D des SCALE 6.2.3-Programmpakets für die Anordnung SNEAK 7B und für die Anordnung ZPR6A7 Loading 41 durchgeführt. Für die TSUNAMI-Eingabedatei wurde ein detailliertes SNEAK 7B Modell verwendet, das zum MCNP-Modell identische Geometrie- und Materialdefinitionen aufweist. Für ZPR6A7 hingegen wurde ein vereinfachtes, zylindrisches Modell aus dem ICSBEP-Handbuch herangezogen. Es wurde beobachtet, dass sowohl SNEAK 7B als auch ZPR6A7 eine hohe Sensitivität bezüglich des inelastischen Wirkungsquerschnitts und des Neutroneneinfangquerschnitts mit Gamma-Emission von U-238 aufweisen. Die entsprechenden, resultierenden Sensitivitäten für ZPR6A7 sind in Abb. 4.7 und Abb. 4.8 dargestellt. Die Sensitivitäten für SNEAK 7B sind qualitativ ähnlich und werden daher hier nicht dargestellt.

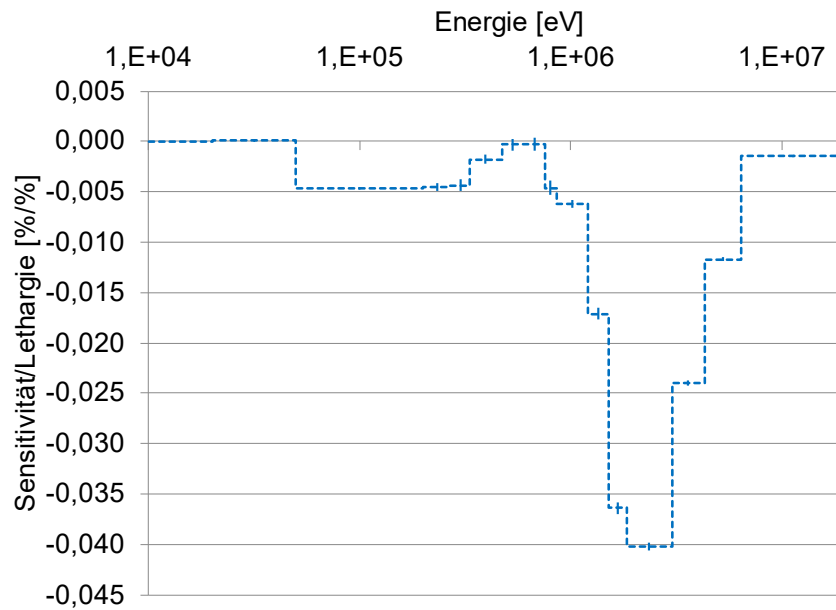


Abb. 4.7 Sensitivität des Multiplikationsfaktors bzgl. des inelastischen Wirkungsquerschnitts von U-238 für die Anordnung ZPR6A7 Loading 41

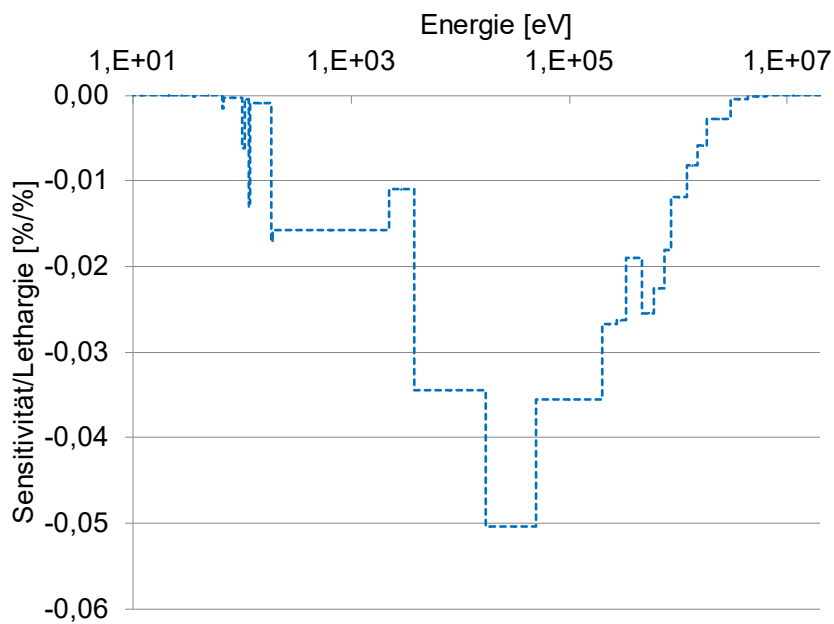


Abb. 4.8 Sensitivität des Multiplikationsfaktors bzgl. des Neutroneneinfangwirkungsquerschnitts mit Gamma-Emission von U-238 für die Anordnung ZPR6A7 Loading 41

Die ausgeprägten Sensitivitäten von bis zu -0,05 ließen darauf schließen, dass Unterschiede in den entsprechenden Reaktionen der jeweiligen Datenbibliotheken große Unterschiede des Multiplikationsfaktors verursachen können. Dies bestätigte sich bei der Gegenüberstellung des inelastischen Wirkungsquerschnitts und des Neutroneneinfangwirkungsquerschnitts von U-238 der JEFF-3.3-Bibliothek mit denen der ENDF/B-VII.1-Bibliothek. Wie in Abb. 4.9 für den inelastischen Wirkungsquerschnitt gezeigt, sind zwischen den Bibliotheken beträchtliche Unterschiede festzustellen.

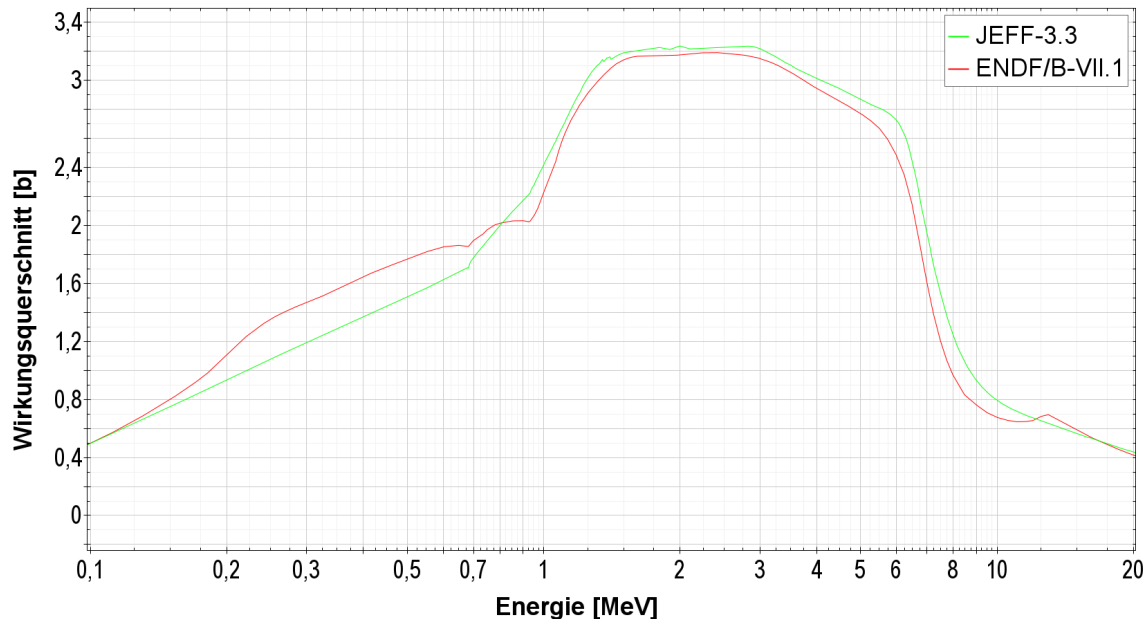


Abb. 4.9 Inelastischer Wirkungsquerschnitt ($MT = 4$) von U-238 aus den Datenbibliotheken JEFF-3.3 und ENDF/B-VII.1

Um zu überprüfen, ob die von ENDF/B-VII.1 stark abweichenden Wirkungsquerschnittsdaten für U-238 die erhöhten Werte des berechneten Multiplikationsfaktors verursachen, wurden zusätzliche Rechnungen mit JEFF-3.3 für die zuvor betrachteten Benchmark-Anordnungen durchgeführt. Dabei wurden die JEFF-3.3-Wirkungsquerschnittsdaten für U-238 mit den Daten von ENDF/B-VII.1 ersetzt. Die Ergebnisse sind in Abb. 4.10 dargestellt, wobei die resultierenden Multiplikationsfaktoren der Benchmark-Werte und die Rechenergebnisse mittels ENDF/B-VII.1, JEFF-3.3 und der Kombination beider Datenbibliotheken gezeigt werden. Die JEFF-3.3-Bibliothek mit den aus ENDF/B-VII.1 ersetzten Daten für U-238 liefert sehr gute Ergebnisse im Vergleich zu den Benchmark-Werten und führt somit zu weitaus besseren Ergebnissen als mit den originalen JEFF-3.3-Daten.

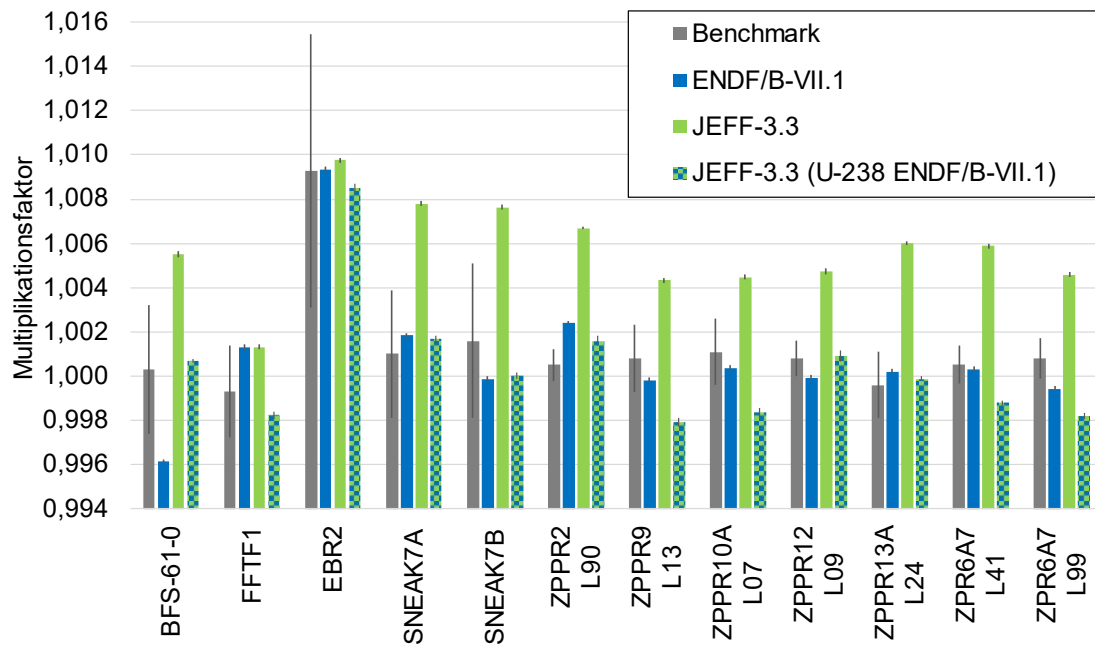


Abb. 4.10 Mit ENDF/B-VII.1, JEFF-3.3 und einer Kombination beider ermittelte Multiplikationsfaktoren für verschiedene LMFR-Anordnungen im Vergleich zum jeweiligen Benchmark-Multiplikationsfaktor

Um diese Beobachtungen weiter zu untersuchen, wurden weitere Kritikalitätsrechnungen für die FLATTOP-Anordnungen durchgeführt. Hierbei handelt es sich um FLATTOP-PU (auch POPSY genannt), FLATTOP-25 (TOPSY) und FLATTOP-23. Diese Metallkugelanordnungen bestehen, der vorherigen Reihenfolge entsprechend, vor allem aus Pu-239, U-235 und U-233. Jedes dieser Systeme ist mit einem Reflektor aus natürlichem Uran ummantelt. Die FLATTOP-Experimente werden häufig dazu verwendet, nukleare Datenbibliotheken zu validieren. Die resultierenden Multiplikationsfaktoren sind im Allgemeinen sehr sensitiv auf den inelastischen Wirkungsquerschnitt von U-238 und eignen sich daher, die zuvor beobachteten Abweichungen weiter zu untersuchen. In Abb. 4.11 sind die Ergebnisse für den Multiplikationsfaktor für die verschiedenen FLATTOP-Systeme unter Verwendung unterschiedlicher Datenbibliotheken gezeigt.

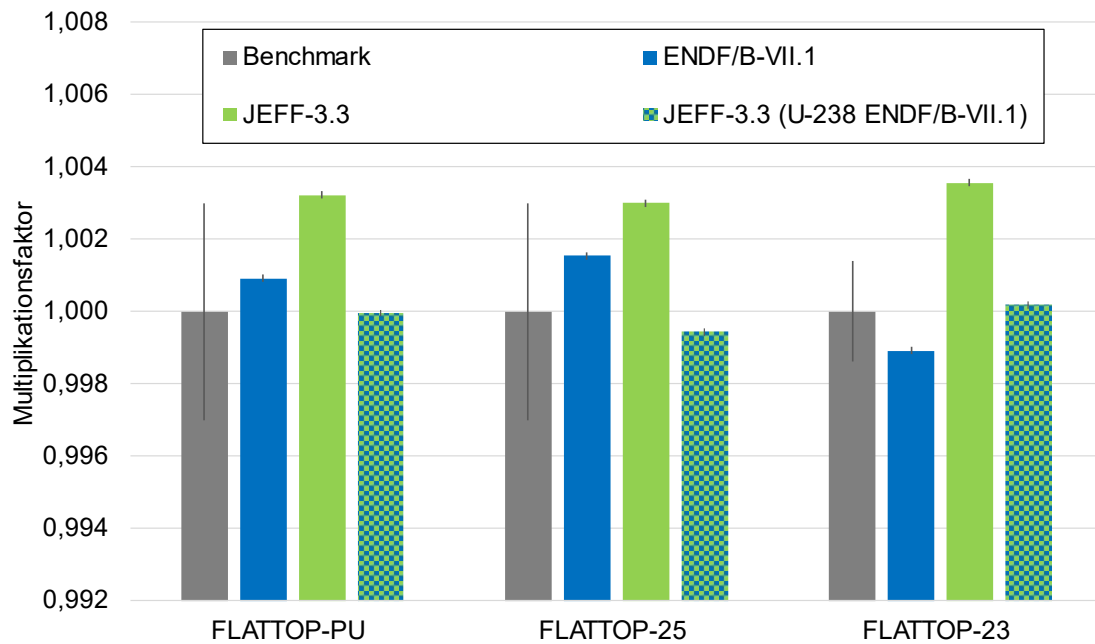


Abb. 4.11 Mit ENDF/B-VII.1, JEFF-3.3 und einer Kombination beider ermittelte Multiplikationsfaktoren für verschiedene FLATTOP-Anordnungen im Vergleich zum jeweiligen Benchmark-Multiplikationsfaktor

Die Unterschiede zu den Benchmark-Werten unter Verwendung der JEFF-3.3-Bibliothek sind hier weniger ausgeprägt als im Vergleich zu den zuvor betrachteten LMFR-Anordnungen, jedoch ist ein ähnlicher Trend beobachtbar. Unter Verwendung der JEFF-3.3-Daten in Kombination mit den U-238-Daten aus ENDF/B-VII.1 werden die beobachteten Abweichungen zu sowohl den Benchmark-Werten als auch den ENDF/B-VII.1-Werten deutlich geringer.

4.2 Stichprobenbasierte Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen mit linearer Regression

Bei stichprobenbasierten Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen werden üblicherweise der quadrierte multiple Korrelationskoeffizient R^2 oder der semipartielle multiple Korrelationskoeffizient als Sensitivitätsmaße ausgewertet. Diese dienen als Maße für die Bedeutung einzelner Gruppen unsicherer Parameter, hier typischerweise individueller Reaktionen einzelner Nuklide, zur ausgewerteten Ergebnisunsicherheit. Anhand der Rangfolge dieser Maße, der hier als Unsicherheits-„Breakdown“ bezeichnet wird, können die für die Ergebnisunsicherheit wesentlichen Nuklidreaktionen identifiziert werden. Diese Korrelationskoeffizienten haben eine andere Interpretation als die Sensitivitätsmaße, die mit der deterministischen linearen Störungstheorie ausgewertet werden, und

sind nicht direkt mit diesen vergleichbar. Um eine Vergleichbarkeit zu ermöglichen, wurde XSUSA um das Verfahren XSUSA(LR) erweitert, das mittels linearer Regressionsanalyse aus stichprobenbasierten Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen Kenngrößen ableitet, die denen aus der deterministischen linearen Störungstheorie entsprechen.

Das XSUSA(LR)-Verfahren wurde im Forschungsvorhaben RS1564 /AUR 21a/ detailliert beschrieben. Es basiert auf der Annahme, dass das betrachtete System linear von den unsicheren Eingangsparametern, hier den mikroskopischen Reaktionsdaten der Nuklide, abhängt, und beruht auf der Berechnung der Sensitivitätsvektoren mittels linearer Regression aus einer Ergebnisstichprobe. Die Sensitivitäten sind die Ableitungen der Ergebnisgröße in Bezug auf die Eingangsparameter. Im Rahmen der deterministischen linearen Störungstheorie und unter Verwendung mikroskopischer nuklearer Daten als unsichere Eingabeparameter werden die Sensitivitäten berechnet, indem die direkte und die adjungierte Transportgleichung gelöst und der Gradient der jeweiligen Ergebnisgröße in Bezug auf den interessierenden Parameter bestimmt wird.

Bei der stichprobenbasierten Methode kann der Sensitivitätsvektor aus der Eingangsparameterstichprobe und der entsprechenden Ergebnisstichprobe abgeschätzt werden. Da die Stichprobengröße begrenzt ist, sind die Sensitivitätsschätzungen mit entsprechenden statistischen Unsicherheiten behaftet. Die Sensitivitätsschätzungen werden ermittelt, indem die Kovarianzmatrix zwischen den unsicheren Eingabeparametern und der Ergebnisgröße unter der Annahme einer linearen Abhängigkeit verwendet wird /ZWE 20/. Dazu ist die Invertierung der Stichproben-Kovarianzmatrix erforderlich. Diese ist gewöhnlich hochgradig singular, also nicht invertierbar. Zur Lösung dieses Problems wird die Tatsache genutzt, dass die Sensitivitätsvektoren im Grenzfall einer unendlich großen Stichprobe unabhängig von der Kovarianzmatrix sind. Deshalb wird die ursprüngliche Kovarianzmatrix zur Erzeugung der Parameterstichprobe durch ihre Diagonalmatrix ersetzt. Dadurch wird sichergestellt, dass die entsprechende Matrix vollen Rang hat und streng positiv definit ist. Folglich hat die Stichproben-Kovarianzmatrix vollen Rang und ist streng positiv definit, sodass sie invertierbar ist, wenn der Stichprobenumfang die Anzahl der unsicheren Parameter übersteigt. Damit sind die Sensitivitätsvektoren, die denen aus der deterministischen linearen Störungstheorie entsprechen, in guter Näherung berechenbar. Die Gesamtunsicherheit und die individuellen Beiträge zur Gesamtunsicherheit ergeben sich durch Multiplikation der Sensitivitätsvektoren mit der Parameter-Kovarianzmatrix (sog. Sandwich-Formel), wobei hier die ursprüngliche Parameter-Kovarianzmatrix verwendet wird.

Aufgrund der Komplexität der Funktionale, die die einzelnen Unsicherheitsbeiträge darstellen, ist ein Ausdruck in geschlossener Form für die Konfidenzintervalle nicht möglich. Daher wird hier ein Resampling-Ansatz verwendet, der geeignete Schätzungen für Konfidenzintervalle liefert. Hier hat sich das Delete-1-Jackknife-Verfahren als geeignet erwiesen /EFR 81/. Die Jackknife-Methode besteht darin, die interessierenden Ergebnisgrößen neu zu berechnen, indem neue Stichproben aus der Originalstichprobe ohne Zurücklegen gezogen werden. Bei der Delete-1-Jackknife-Methode wird jede neue Stichprobe durch die Entfernung einer Beobachtung aus der Originalstichprobe ausgewählt. Wenn die ursprüngliche Stichprobengröße N ist, erhält man dadurch N Jackknife-Stichproben der Größe $N-1$. Schließlich sind die 95 %-Konfidenzintervalle für die betrachteten Ergebnisgrößen, wie z. B. für die Sensitivitäten und die Beiträge zum Unsicherheits-„Breakdown“, durch das ungefähr $\pm 1,96$ -fache der Jackknife-Standardabweichung gegeben.

Der oben beschriebene Ansatz bietet den Rahmen, Abschätzungen für die einzelnen Beiträge zum Unsicherheits-„Breakdown“ zu berechnen und die Abschätzungen für ihre 95 %-Konfidenzintervalle zu liefern. Außerdem bietet es gegenüber der deterministischen linearen Störungstheorie den entscheidenden Vorteil, dass damit auch die Sensitivitäten von Ergebnisgrößen berechnet werden können, für die dies mit deterministischer linearer Störungstheorie nicht oder nur schwer möglich ist, z. B. kinetische Parameter oder Leistungsverteilungen.

Zur Validierung der implementierten Methodik wurden hier Sensitivitätsvektoren, Unsicherheitsbeiträge und totale Ergebnisunsicherheiten von Multiplikationsfaktoren und radialen Leistungsverteilungen für zwei generische Generation-III-Reaktorkerne des UAM-LWR-Benchmarks mit XSUSA berechnet und mit den entsprechenden Ergebnissen aus deterministischer linearer Störungstheorie mit dem SCALE-Programm TSUNAMI /REA 11a/ verglichen.

Die einzelnen Transportberechnungen wurden mit dem Monte-Carlo-Code KENO-Va aus dem Codesystem SCALE 6.2 /REA 18/ durchgeführt, wobei die mit SCALE 6.2 verfügbare und auf ENDF/B-VII.1 basierende Bibliothek mit 252 Energiegruppen /CHA 11/ verwendet wurde. Das Stichprobenverfahren wurde an einem Satz von Kovarianzdaten mit 21 Energiegruppen durchgeführt; diese wurden durch eine Reduktion der 56-Gruppen-Kovarianzdaten von SCALE 6.2 mit Hilfe des ANGELO-Codes /KOD 90/ gewonnen. Diese Reduktion ist vorteilhaft, da die minimale Stichprobengröße von der Anzahl der unsicheren Parameter abhängt. Nur wenn die Stichprobengröße die Anzahl der

unsicheren Parameter überschreitet /AUR 21a/, ist sichergestellt, dass die Stichproben-Kovarianzmatrix positiv definit ist. Für die hier betrachteten Systeme ist ein Stichprobenumfang von 2.000 ausreichend, um die relevanten Nuklide in die Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalyse einzubeziehen.

Simulationsmodelle

Als Simulationsmodelle wurden Ganzkernmodelle von Druckwasserreaktoren, konkret zwei generische Ausführungen von Reaktoren der Generation-III, betrachtet, wie sie im Rahmen des UAM-LWR-Benchmarks /IVA 16/ spezifiziert sind. Die Kerne bestehen aus jeweils 241 Brennelementen, die von einem Stahlreflektor umgeben sind. Die Brennelemente mit einem 17×17 -Layout enthalten Brennstäbe aus UO_2 mit U-235-Anreicherungen von (1) 2,1 %, (2) 3,2 % mit zusätzlichen UO_2 +Gd-Brennstäben, (3) 4,2 % ohne oder mit zusätzlichen UO_2 +Gd-Brennstäben im Falle des LEU-Kerns. Im Fall des LEU/MOX-Kerns werden die Brennelemente mit der Anreicherung von 4,2 % U-235, die sich am Kernrand befinden, durch MOX-Brennelemente ersetzt, die aus drei Brennstabtypen (9,8 % Pu, 6,5 % Pu, 3,7 % Pu) aufgebaut sind /IVA 16/. Ein horizontaler Schnitt durch das KENO-Va-Kernmodell ist in Abb. 4.12 dargestellt.

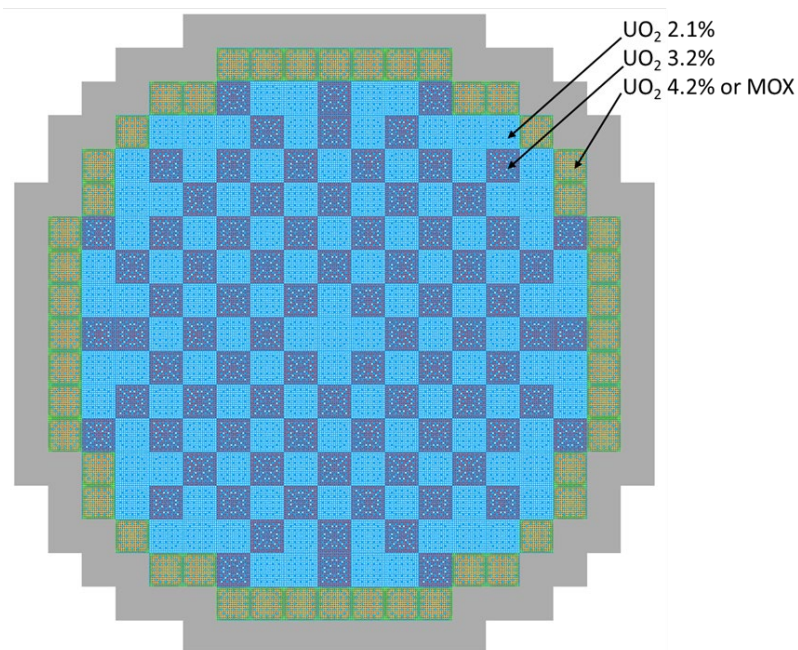


Abb. 4.12 KENO-Va-Modell eines generischen GEN-III-Kerns

Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen

Zunächst wurde eine Analyse für die Multiplikationsfaktoren durchgeführt, da in diesen Fällen ein Vergleich mit den TSUNAMI-Ergebnissen möglich ist, die mit der konventionellen linearen Störungstheorie erzielt wurden. Die Gesamtunsicherheiten und die Hauptbeiträge zu diesen Unsicherheiten sind in der Abb. 4.13 für den LEU-Kern und in Abb. 4.14 für den LEU/MOX-Kern dargestellt. Für die Reaktionen wurde die folgende Nomenklatur verwendet:

- el – elastischer Streuquerschnitt,
- n, n' – inelastischer Streuquerschnitt,
- fis – Spaltquerschnitt,
- n, g – Einfangquerschnitt,
- ν – mittlere Anzahl entstehender Neutronen pro Spaltung,
- χ – Spaltspektrum.

Es ist festzustellen, dass die Ergebnisse von TSUNAMI und XSUSA in sehr guter Übereinstimmung sind, ebenso wie die Ergebnisse für die Sensitivitätsvektoren. Einige relevante Sensitivitätsvektoren sind in Abb. 4.15 für den LEU-Kern dargestellt; für den LEU/MOX-Kern sind diese qualitativ sehr ähnlich. Beim Vergleich der Unsicherheitsbeiträge für beide Kerne stellt man fest, dass die Unsicherheit der Multiplikationsfaktoren von denselben Reaktionen dominiert werden und dass zudem die Plutonium-Unsicherheiten auch für den LEU/MOX-Kern keinen wesentlichen Einfluss auf die Unsicherheit des Multiplikationsfaktors haben.

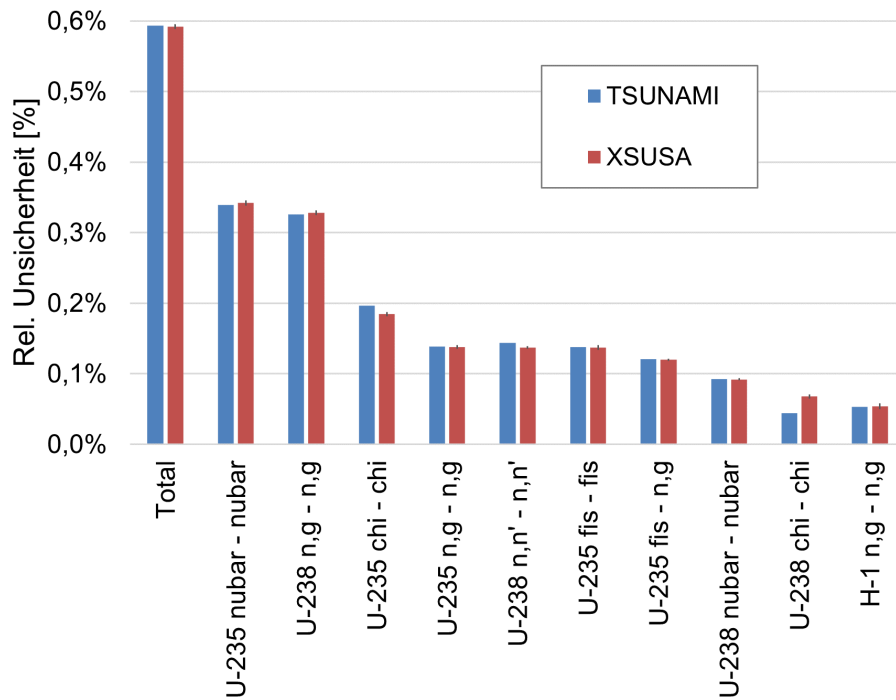


Abb. 4.13 Unsicherheits-„Breakdown“ für den Multiplikationsfaktor des LEU-Kerns

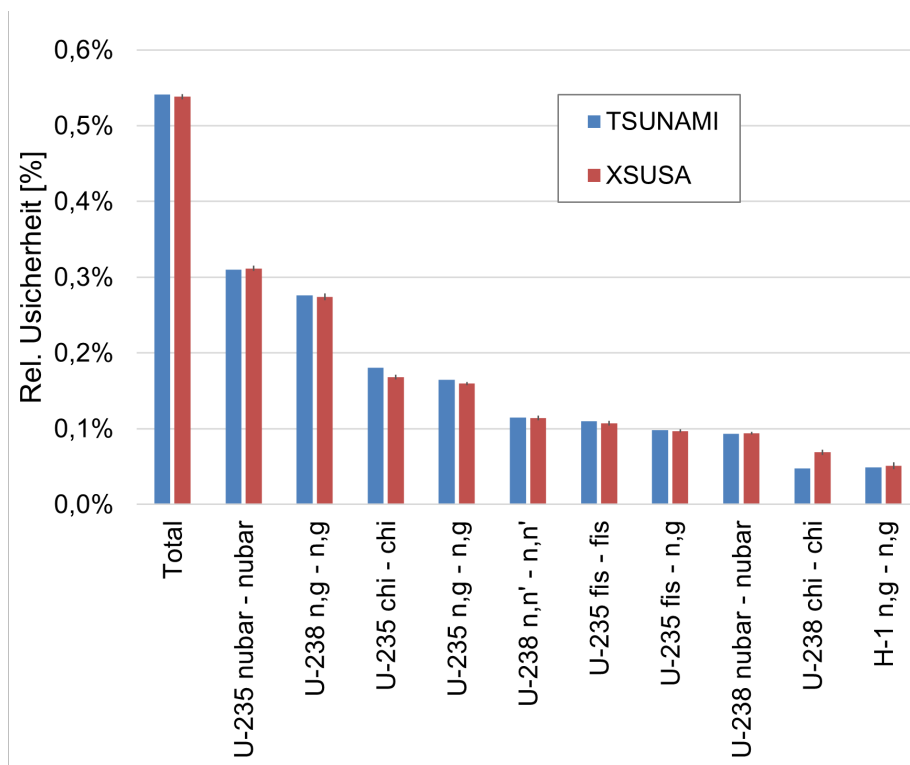


Abb. 4.14 Unsicherheits-„Breakdown“ für den Multiplikationsfaktor des LEU/MOX-Kerns

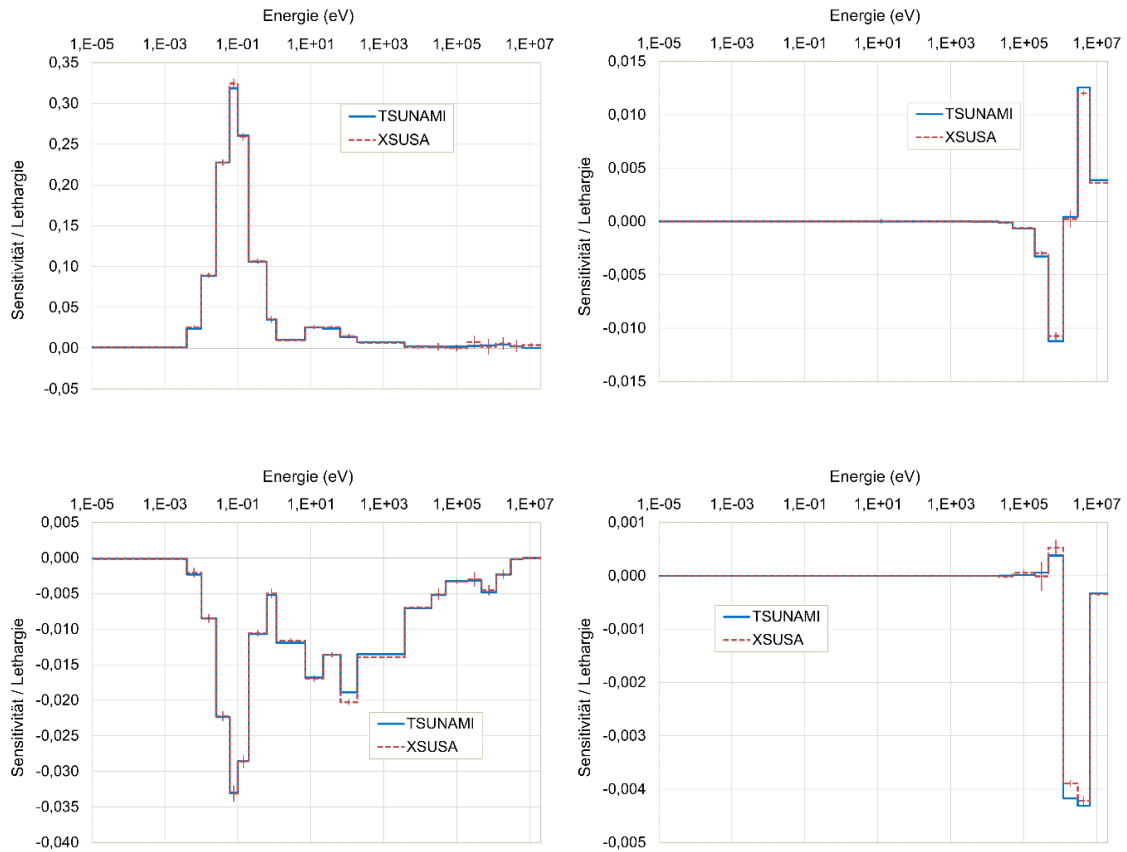


Abb. 4.15 Sensitivitätsprofile des Multiplikationsfaktors des LEU-Kerns

Oben links: U-235-Spaltneutronenausbeute; oben rechts: U-235-Spaltspektrum; unten links: U-238-Einfangquerschnitt; unten rechts: inelastischer Streuwirkungsquerschnitt von U-238.

In Abb. 4.16 sind die wichtigsten Ergebnisse der vorliegenden Studie dargestellt, nämlich die Unsicherheiten der radialen Leistungsverteilungen. Die größten Werte werden jeweils in den Kernzentren beobachtet, nämlich ca. 5 % beim LEU-Kern und 10 % beim LEU/MOX-Kern.

5,15%	5,16%	4,86%	4,11%	3,09%	1,82%	0,57%	0,95%	1,81%		9,99%	9,75%	8,86%	7,35%	5,19%	2,50%	0,75%	4,21%	7,47%
5,16%	5,11%	4,69%	3,96%	2,88%	1,65%	0,23%	1,20%	2,00%		9,75%	9,45%	8,60%	7,07%	4,97%	2,31%	0,97%	4,22%	7,37%
4,86%	4,69%	4,23%	3,40%	2,36%	1,09%	0,26%	1,60%	2,44%		8,86%	8,60%	7,73%	6,29%	4,29%	1,82%	1,19%	4,27%	7,27%
4,11%	3,96%	3,40%	2,59%	1,51%	0,29%	1,06%	1,96%	2,73%		7,35%	7,07%	6,29%	4,97%	3,16%	0,93%	1,84%	4,34%	7,09%
3,09%	2,88%	2,36%	1,51%	0,51%	0,84%	2,03%	2,73%			5,19%	4,97%	4,29%	3,16%	1,60%	0,84%	2,86%	5,45%	
1,82%	1,65%	1,09%	0,29%	0,84%	1,63%	2,62%	3,26%			2,50%	2,31%	1,82%	0,93%	0,84%	2,15%	3,93%	5,99%	
0,57%	0,23%	0,26%	1,06%	2,03%	2,62%	2,75%				0,75%	0,97%	1,19%	1,84%	2,86%	3,93%	5,42%		
0,95%	1,20%	1,60%	1,96%	2,73%	3,26%					4,21%	4,22%	4,27%	4,34%	5,45%	5,99%			
1,81%	2,00%	2,44%	2,73%							7,47%	7,37%	7,27%	7,09%					

Abb. 4.16 Relative Unsicherheiten für die radialen Leistungsverteilungen des LEU- (links) und LEU/MOX-Kerns (rechts)

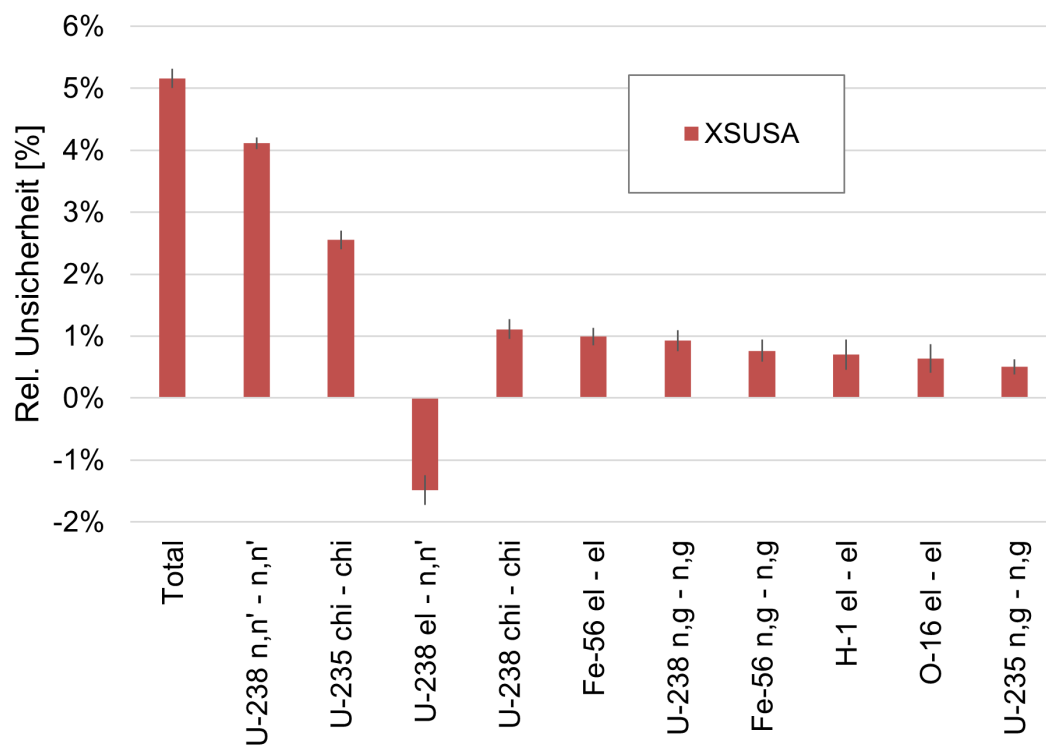


Abb. 4.17 Unsicherheits-„Breakdown“ für die Leistung im zentralen Brennelement des LEU-Kerns

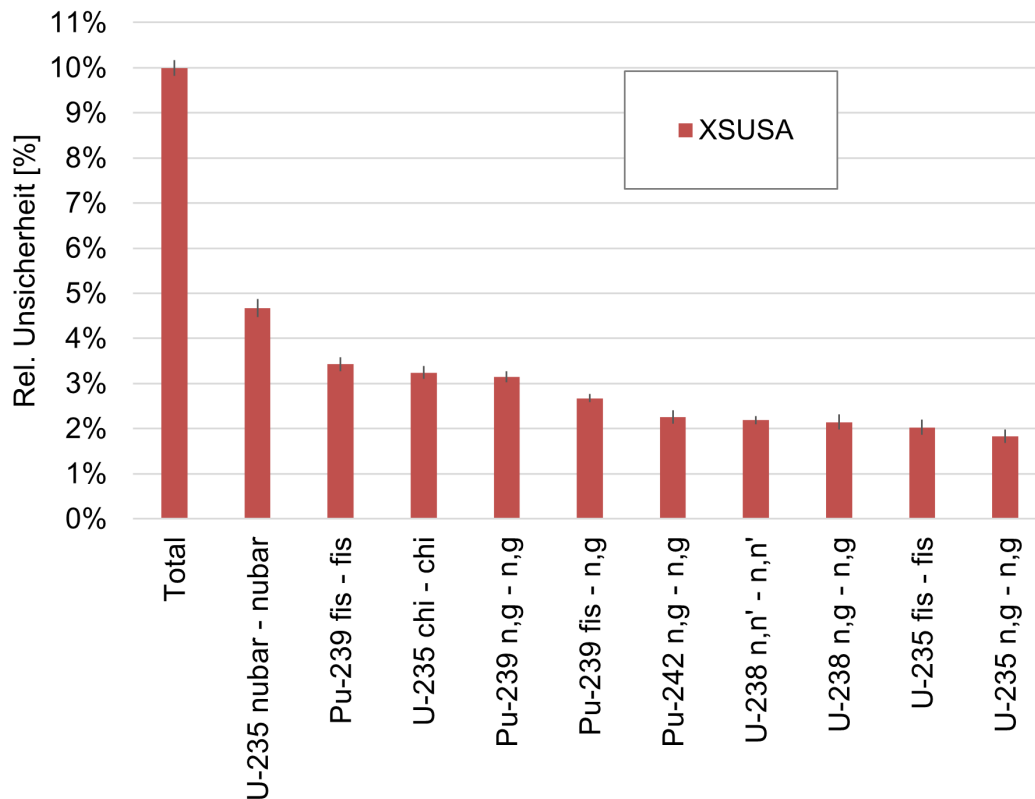


Abb. 4.18 Unsicherheits-„Breakdown“ für die Leistung im zentralen Brennelement des LEU/MOX-Kerns

Die Ergebnisse für die Leistung des zentralen Brennelements sind in Abb. 4.17 und Abb. 4.18 für den LEU- bzw. LEU/MOX-Kern dargestellt. Hier sind die Beiträge zur Unsicherheit für die beiden Kerne sehr unterschiedlich: während die Unsicherheit für den LEU-Kern von der inelastischen Streuung von U-238 und dem U-235-Spaltsspektrum dominiert wird, treten für den LEU/MOX-Kern ähnliche Beiträge von vielen Reaktionen auf, angeführt von der U-235-Spaltneutronenausbeute und dem Pu-239-Spaltquerschnitt. Der Vollständigkeit halber sind die Sensitivitäten in Bezug auf die Reaktionen, die die höchsten Unsicherheitsbeiträge verursachen, in Abb. 4.19 dargestellt.

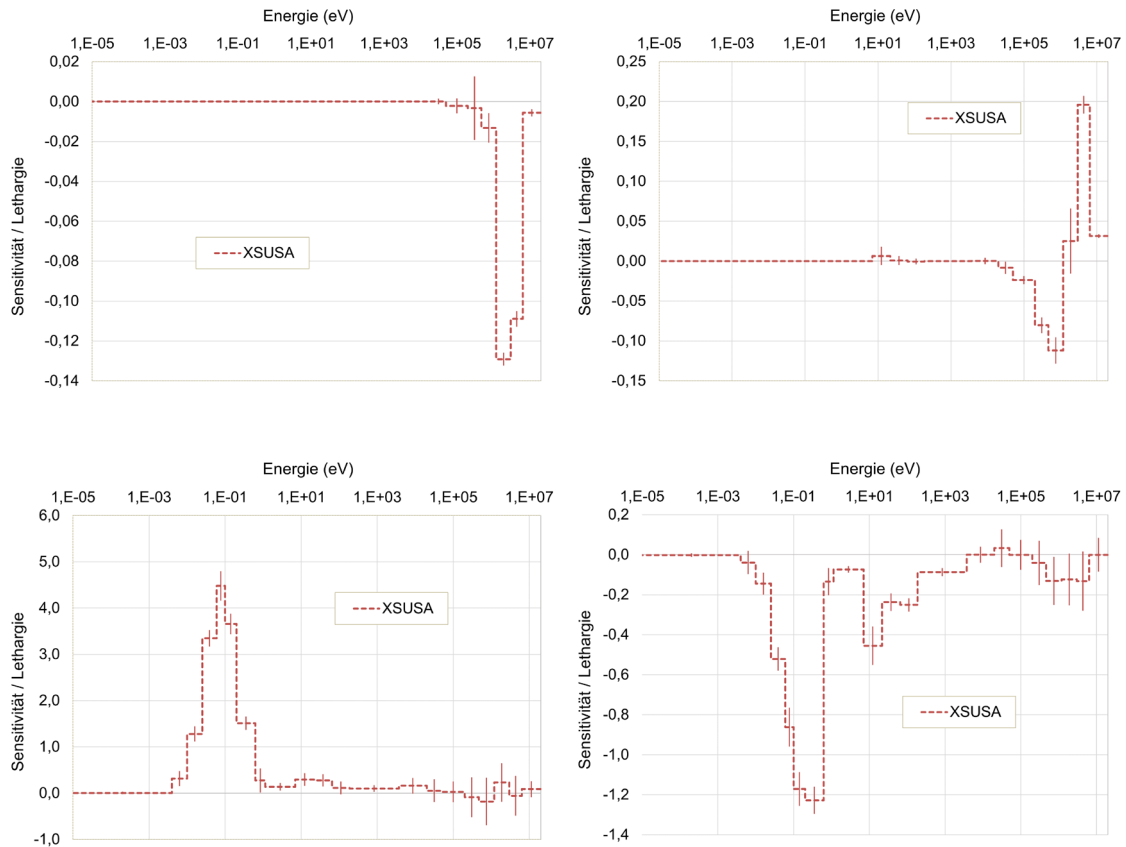


Abb. 4.19 Sensitivität der Leistung im zentralen Brennelement bzgl. der wichtigsten Reaktionen für den LEU- (oben) und LEU/MOX-Kern (unten)

Oben links: Querschnitt der inelastischen Streuung von U-238; oben rechts: U-235-Spaltsspektrum; unten links: U-235-Spaltneutronenausbeute; unten rechts: Pu-239-Spaltquerschnitt.

Zusammenfassung

Für stationäre Neutronentransportrechnungen von generischen Generation-III-DWR-Reaktorkernen wurden Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen für die Multiplikationsfaktoren und radialen Leistungsverteilungen durchgeführt. Die Sensitivitäten wurden dabei mit dem implementierten Verfahren XSUSA(LR) des Programmpakets XSUSA ermittelt. Dieses Verfahren basiert auf der linearen Regressionsanalyse von Ergebnisstichproben, denen Neutronentransportrechnungen mit variierten, mikroskopischen Wirkungsquerschnitten zugrunde liegen. Die Leistungsfähigkeit der Methode wurde durch eine vergleichende Untersuchung der Ergebnisse von XSUSA (stichprobenbasiert) und TSUNAMI (deterministische Störungstheorie) demonstriert. Die resultierenden Unsicherheiten sind beträchtlich und stimmen qualitativ mit früheren Ergebnissen überein. Mit dem implementierten Ansatz ist es möglich, analog zur Sensitivitätsanalyse,

die üblicherweise mit der deterministischen linearen Störungstheorie durchgeführt wird, Sensitivitätsvektoren abzuschätzen und aus diesen in Kombination mit den entsprechenden Kovarianzdaten der nuklearen Datenbibliotheken die Hauptbeiträge zu den Ergebnisunsicherheiten zu identifizieren. Dabei können Sensitivitäten und der Unsicherheits-„Breakdown“ für jede Ergebnisgröße einer Neutronentransportrechnung, z. B. Diffusionskoeffizienten oder Leistungsverteilungen, abgeschätzt werden, während dies mit TSUNAMI nur für eine begrenzte Auswahl von Ergebnisgrößen möglich ist; das sind i. W. Reaktivitätsdifferenzen und mikroskopische und makroskopische Wirkungsquerschnitte.

4.3 Teilnahme an den UAM-LWR- und UAM-SFR-Benchmarks

Um den Einfluss der Unsicherheiten in den nuklearen Wirkungsquerschnittsdaten auf den Verlauf einer Reaktortransiente und auf Ergebnisgrößen wie die Reaktorleistung zu untersuchen, wurden stichprobenbasierte Unsicherheitsanalysen für das Reaktivitätsexperiment *Test 43* des Leichtwasser-moderierten SPERT III-Forschungsreaktors und für eine Steuerstabverfahrtransiente in einem mittelgroßen SFR-Kern mit metallischem Brennstoff durchgeführt.

4.3.1 Unsicherheitsanalyse der SPERT III-Reaktivitätstransiente Test 43

Das UAM-LWR-Benchmark /HOU 21/ der OECD/NEA spezifiziert die Durchführung von Unsicherheitsanalysen für das Reaktivitätsexperiment *Test 43* /OLS 22b/, das in einer Serie von 80 Reaktivitätsexperimenten in den 1960er Jahren am Forschungsreaktor SPERT III E-core /OLS 22a/ durchgeführt worden ist. Für eine Beschreibung des Kerns sei auf Kap. 3.3 verwiesen. Im Experiment *Test 43* wurde im Nulllast-Kalt-Zustand des Kerns durch Auswurf eines kreuzförmigen Steuerstabs dem Kern 1,2 \$ Reaktivität zugeführt, was eine prompte Leistungsexkursion mit einer gemessenen maximalen Leistung von 280 ± 42 MW zur Folge hatte. Im Forschungsvorhaben RS1564 /AUR 21a/ wurde dieses Reaktivitätsexperiment mit DYN3D-ATHLET nachgerechnet und eine in sehr guter Übereinstimmung maximale Leistung von 286 MW ermittelt. Die zugehörigen Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte wurden in diesem Fall mit dem Monte-Carlo-Code Serpent berechnet.

In diesem Forschungsvorhaben wurde für die Unsicherheitsanalyse von *Test 43* der Einfluss von Unsicherheiten in den nuklearen Wirkungsquerschnittsdaten auf die Unsicherheit der zeitlich veränderlichen Reaktorleistung als Ergebnisgröße ermittelt. Dazu wurde auf die etablierte Anwendung der stichprobenbasierten Methode XSUSA in Kombination

mit dem deterministischen Gittercode NEWT aus dem SCALE-Programmsystem zurückgegriffen. Mit XSUSA erstellte Variationsparameter werden üblicherweise dazu verwendet, die Multigruppen-Wirkungsquerschnittsdaten zu variieren, die als Eingangsdaten für NEWT dienen. Durch die Variation dieser Eingangsdaten, sind die aus den NEWT-Rechnungen resultierenden Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte der betrachteten Geometrien ebenfalls variiert.

Zur Berechnung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten der Brenn- und Reflektorelemente des SPERT III-Kerns wurden unter Verwendung des Kernsimulators KMACS-Modelle für NEWT erstellt. Zur Berücksichtigung thermohydraulischer Rückwirkungen auf die Reaktivität wurden diese Modelle mit sechs Brennstofftemperaturen im Bereich von 294 K bis 1300 K und fünf Moderatorichten im Bereich von 0,95863 g/cm³ bis 0,99803 g/cm³ erstellt. Um den Rechenbedarf bei den stichprobenbasierten Unsicherheitsanalysen zu reduzieren, wurde auf die Kopplung mit ATHLET verzichtet und das eigene Thermohydraulikmodell von DYN3D verwendet.

Mit unvariierten (nominalen) Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten aus den NEWT-Rechnungen ermittelt DYN3D für den *Test 43* eine maximale Leistung von 306 MW. Dieser Wert übersteigt zwar den Messwert um 26 MW und den im Forschungsvorhaben RS1564 mit Serpent-DYN3D-ATHLET ermittelten Wert um 20 MW, dennoch liegt er im angegebenen Unsicherheitsintervall des Messwerts.

Für die Unsicherheitsanalyse wurden mit XSUSA 300 Sätze von Variationsparametern erstellt, um die den NEWT-Rechnungen zugrunde liegende 56-Gruppen-Wirkungsquerschnittsbibliothek zu variieren. Aus den NEWT-Rechnungen resultierten dann 300 variierte, über thermohydraulische Rückwirkungsparameter verzweigte Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte. Die Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte jeder Variation wurden jeweils zu einer Wirkungsquerschnittsbibliothek für DYN3D zusammengestellt. Da aufgrund der variierten Wirkungsquerschnitte für jede Variation die kritische Einfahrtiefe der acht Steuerelemente und der zum Erreichen einer Reaktivitätszufuhr von 1,2 \$ notwendige Auswurfweg des kreuzförmigen Steuerstabs jeweils unterschiedlich sind, wurden skriptgesteuert für jede Variation die Einfahrtiefe und der Auswurfweg über statische Reaktivitätsdifferenzen ermittelt /AUR 21a/. Dabei ist anzumerken, dass für alle Variationen dieselben kinetischen Parameter (Anteil verzögerter Neutronen und Zerfallskonstanten in sechs Zeitgruppen) aus einer Serpent-Ganzkernrechnung verwendet wurden, da es mit variierten und für jedes Brennelement individuellen kinetischen Parametern nicht möglich war, für jede Variation die Einfahrtiefen und den Auswurfweg so zu bestimmen,

dass jeweils eine Reaktivitätszufuhr von 1,2 \$ erreicht wurde. Mit den jeweils variierten Wirkungsquerschnittsbibliotheken, den ermittelten Einfahrtiefen und Auswurfwegen erfolgten schließlich 300 transiente DYN3D-Rechnungen.

Die statistische Auswertung der zeitabhängigen Ergebnisgrößen Reaktivität und thermische Reaktorleistung erfolgte mit dem GRS-Programm SUSAS (Software für Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen) /KLO 17/. Da DYN3D während einer transienten Rechnung eine Anpassung der Zeitschrittweite innerhalb definierter Grenzen vornimmt, wurden die 300 Zeitreihen der Reaktivität sowie der thermischen Reaktorleistung mittels Interpolation zunächst auf eine einheitliche Abfolge von Zeitpunkten transformiert. Abb. 4.20 zeigt für jeden dieser Zeitpunkte den Mittelwert, den Median, den minimalen und den maximalen Wert der Reaktivität. Der Verlauf des minimalen Werts erreicht ein Maximum von 1,203 \$, der Verlauf des maximalen Werts ein Maximum von 1,207 \$. Mittelwert und Median weisen beide ein Maximum von 1,205 \$ auf. Der geringe Unterschied im Maximum des minimalen und maximalen Werts ist auf die zuvor für jede Variation durchgeführte Ermittlung des notwendigen Verfahrenswegs des Steuerstabs zur Erreichung einer Reaktivitätszufuhr von 1,2 \$ zurückzuführen. Lediglich zum Ende des Anstiegs der Reaktivität sowie bei der Abnahme der Reaktivität durch die Rückwirkung aufgrund der Zunahme der Brennstofftemperatur ist jeweils ein sichtbarer Unterschied zwischen dem minimalen und maximalen Wert zu erkennen.

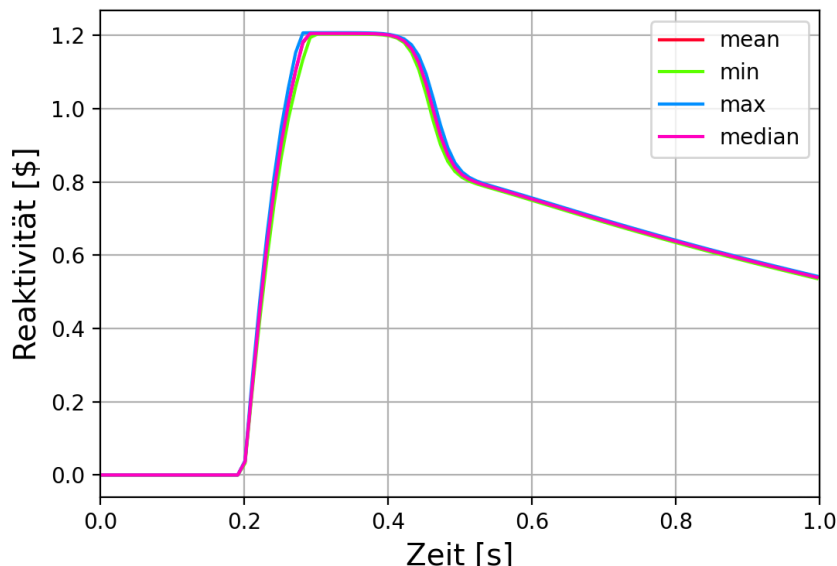


Abb. 4.20 SPERT III – *Test 43*: Statistische Auswertung der Reaktivität der 300 Variationen

Zu jedem Zeitpunkt wurden der Mittelwert (mean), der Median (median), der minimale Wert (min) und der maximale Wert (max) ausgewertet.

In Abb. 4.21 werden der Mittelwert, der Median, der minimale und der maximale Wert der thermischen Reaktorleistung dargestellt. Das Maximum des maximalen Werts beträgt 356 MW. Das Maximum des minimalen Werts ist 318 MW, dieser ist somit um 38 MW geringer als das Maximum des maximalen Werts. Mittelwert und Median weisen beide ein Maximum von 335 MW auf. Die Tatsache, dass das Maximum des Mittelwerts nicht größer als das Maximum des Medians ist, bedeutet, dass keine deutlichen Ausreißer unter den Variationen im Hinblick auf die Reaktorleistung vorhanden sind.

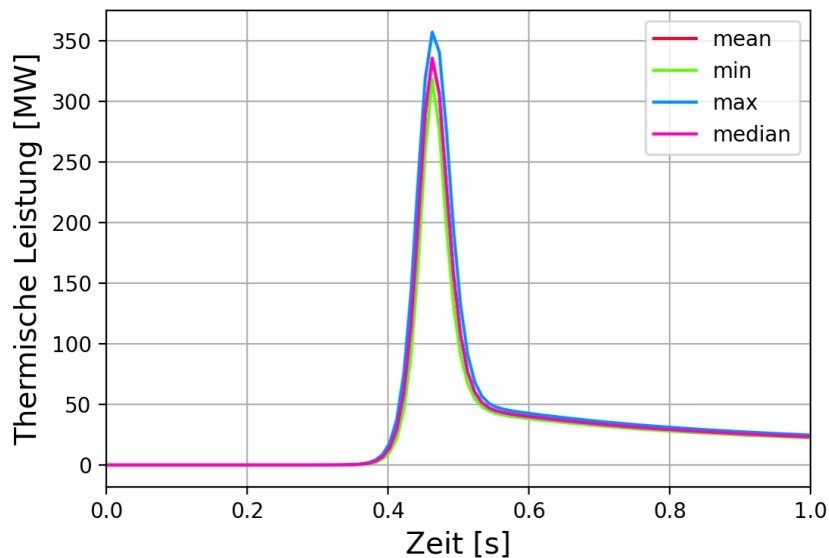


Abb. 4.21 SPERT III – Test 43: Statistische Auswertung der thermischen Reaktorleistung der 300 Variationen

Zu jedem Zeitpunkt wurden der Mittelwert (mean), der Median (median), der minimale Wert (min) und der maximale Wert (max) ausgewertet.

In Abb. 4.22 werden für die thermische Reaktorleistung das verteilungsfreie, einseitige, obere Toleranzlimit nach Wilks und das einseitige, obere Toleranzlimit bei Annahme normalverteilter Ergebnisgrößen dargestellt. Für beide Toleranzlimits wurde eine Abdeckungswahrscheinlichkeit β von 95 % bei einer statistischen Konfidenz γ von 95 % gewählt. Die Hypothese, dass die Ergebnisstichprobe der thermischen Reaktorleistung bei allen Zeitpunkten einer Normalverteilung folgt, kann anhand einer Auswertung des Kolmogorov-Smirnov-Tests für viele Zeitpunkte nicht aufrechterhalten werden. Dennoch weist in diesem Fall das Toleranzlimit auf Basis einer angenommenen Normalverteilung einen nahezu übereinstimmenden Verlauf mit dem verteilungsfreien Toleranzlimit nach Wilks auf. Das Toleranzlimit nach Wilks erreicht ein Maximum von 349 MW, das Toleranzlimit bei Annahme einer Normalverteilung ein Maximum von 346 MW.

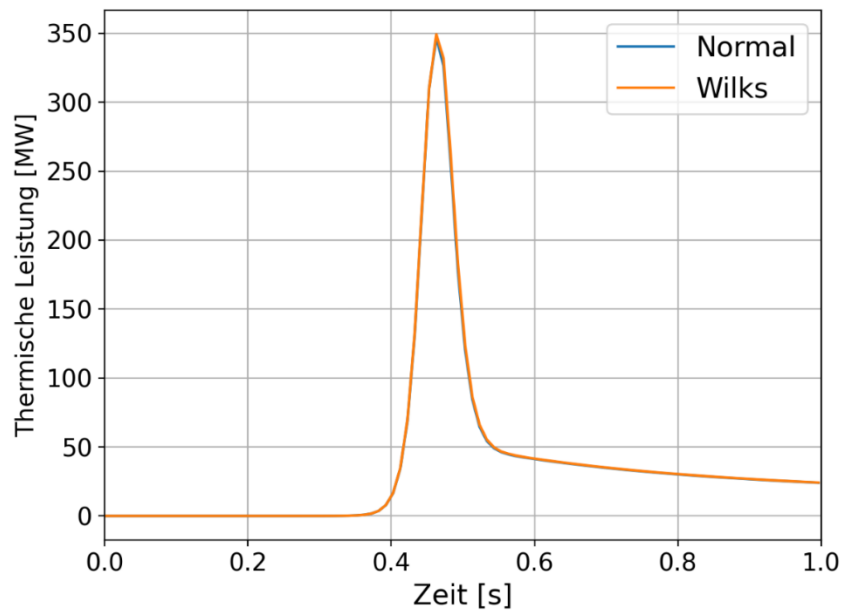


Abb. 4.22 SPERT III – *Test 43*: Einseitige, obere Toleranzlimits nach Wilks sowie bei Annahme normalverteilter Ergebnisgrößen

Zur Identifikation der Hauptbeiträge zur Ergebnisunsicherheit der thermischen Reaktorleistung wurde der quadrierte multiple Korrelationskoeffizient R^2 mit entsprechendem Konfidenzintervall und Signifikanzband ausgewertet. Für ausgewählte Nuklid-Reaktionspaare werden diese Größen für das Zeitintervall 0,2 s – 0,7 s in Abb. 4.23 dargestellt. Dabei wird der Koeffizient R^2 nur gezeigt, wenn dieser über dem entsprechenden Signifikanzband (gestrichelte Linie gleicher Farbe) liegt. Zu erkennen ist, dass die Ergebnisunsicherheit der thermischen Reaktorleistung von der Unsicherheit des elastischen Streuwirkungsquerschnitts (n, n) von U-238 (92238-2) und der Unsicherheit des inelastischen Streuwirkungsquerschnitts (n, n') von U-238 (92238-4) dominiert wird. Die Unsicherheiten der Einfangwirkungsquerschnitte (n, γ) von Gd-157 (64157-102), U-238 (92238-102) und U-241 (92241-102) sind größtenteils von untergeordneter Bedeutung mit einem R^2 -Wert nahe ihres jeweiligen Signifikanzbands und weisen nur einen größeren Beitrag während des Anstiegs und der Abnahme der Reaktorleistung auf. Allen gezeigten R^2 -Verläufen ist gemeinsam, dass sie etwa am Zeitpunkt der maximalen Reaktorleistung ein Minimum aufweisen. Dies deutet an, dass die Unsicherheit der Reaktorleistung unter dem Einfluss nicht-linearer Effekte steht.

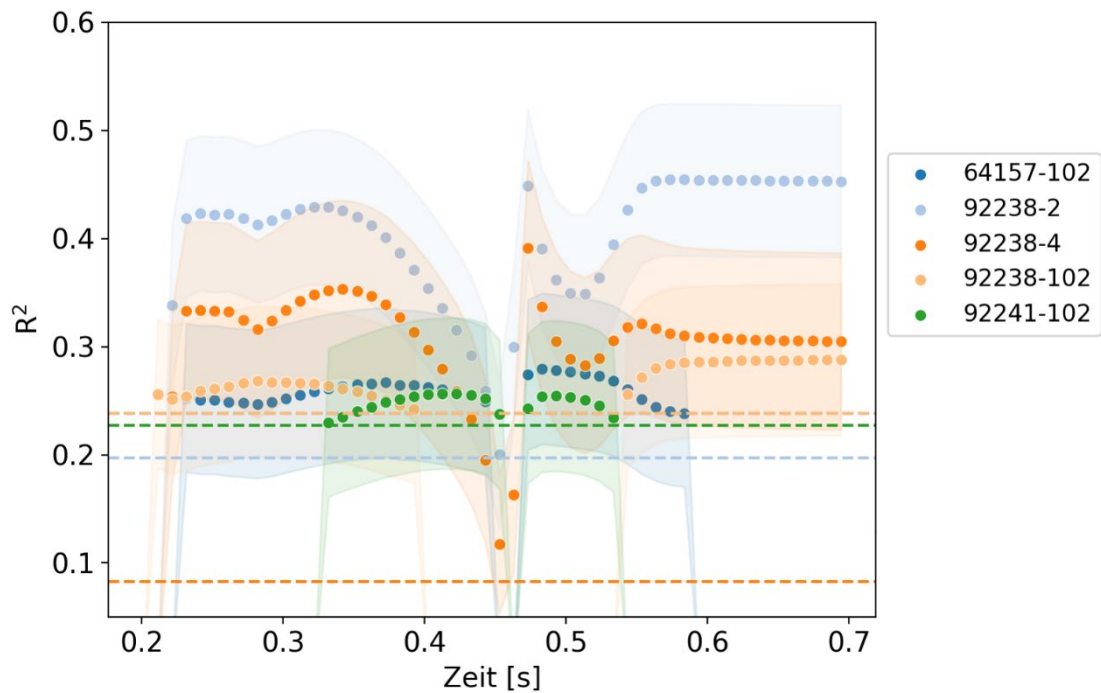


Abb. 4.23 SPERT III – *Test 43*: R^2 mit Konfidenzintervall und Signifikanzband von Beiträgen zur Ergebnisunsicherheit der thermischen Leistung

Nuklid-Reaktionspaare: 64157-102 = Gd-157 (n, γ); 92238-2 = U-238 (n, n);
 92238-4 = U-238 (n, n'); 92238-102 = U-238 (n, γ); 92241-102 = U-241 (n, γ)

Es ist zum einen anzumerken, dass die Materialzusammensetzungen der Benchmark-Spezifikation eigentlich kein Gd-157 enthalten. Dadurch, dass aber die Generierung der Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte mit NEWT unter Verwendung von KMACS erfolgte und dabei ein minimaler Abbrandschritt angewendet wurde, wurde zu einer sehr geringen Menge Gd-157 aufgebaut, die implizit in den Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten für die transienten Rechnungen enthalten ist. Zum anderen kann angemerkt werden, dass die Stichprobengröße von 300 für die Unsicherheitsanalyse zwar ausreichend, aber für die Identifikation der Hauptbeiträge zu gering ist. Mit einer größeren Stichprobe, z. B. 1.000, ist eine Reduktion der Signifikanzbänder und damit ein Auftreten statistisch signifikanter R^2 -Werte weiterer Nuklid-Reaktionspaare zu erwarten. Jedoch bedingt eine solche Stichprobengröße einen erheblichen Rechenaufwand, wovon ein erheblicher Teil auf die Generierung der variierten, parametrisierten Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte entfällt.

4.3.2 Steuerstabverfahrtransiente im SFR-Kern

Im Rahmen des UAM-SFR-Benchmarks der OECD/NEA /BUI 19/ werden Unsicherheitsanalysen für verschiedene Transienten in natriumgekühlten, schnellen Reaktoren (engl. sodium fast reactor, SFR) spezifiziert. Für die vorliegende Untersuchung wurde eine Steuerstabverfahrtransiente in einem mittelgroßen SFR-Kern ausgewählt, dessen Design auf dem Advanced Burner Reactor (ABR) /BLA 11/ mit metallischem Brennstoff und einer Leistung von 1000 MW_{th} basiert. Das Kernlayout, dargestellt in Abb. 4.24, umfasst innere und äußere Brennelemente, primäre und sekundäre Steuerelemente, Reflektorelemente und Abschirmelemente.

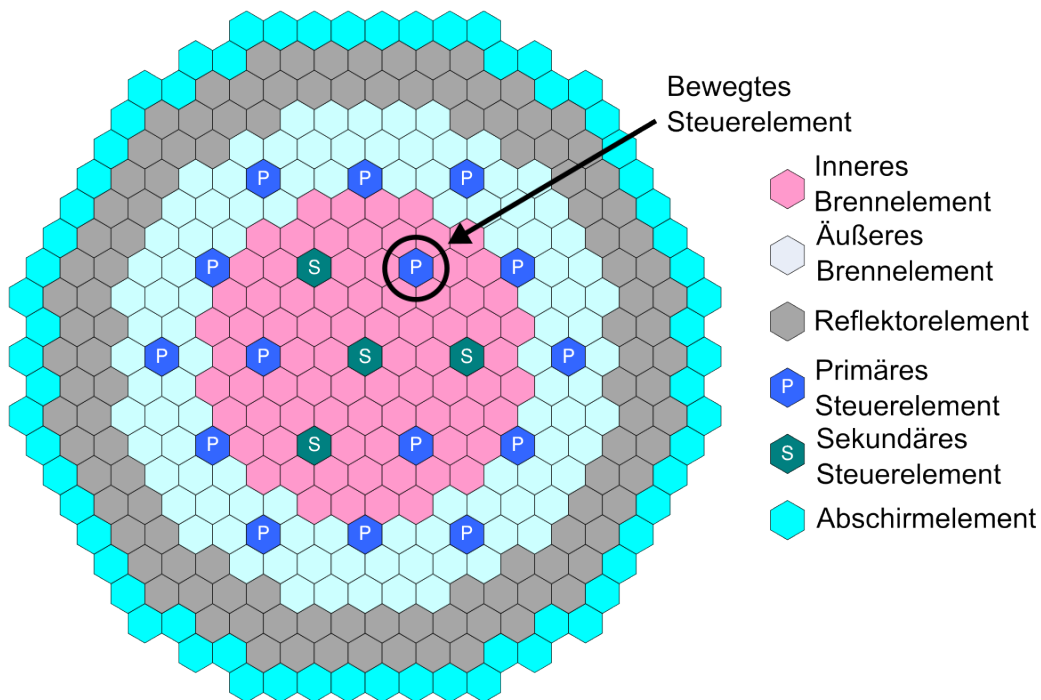


Abb. 4.24 Kernlayout des ABR-Kerns mit Position des bewegten Steuerelements während der Transiente (modifizierte Darstellung nach /BLA 11/)

Abb. 4.25 stellt die radialen Layouts der verschiedenen Elemente des ABR-Kerns auf Höhe des aktiven Kernbereichs bzw. bei den Steuerelementen auf Höhe des Absorberbereichs dar. Der aktive Kernbereich hat eine Höhe von 85,62 cm. Die Elemente haben eine gesamte Länge von 480,2 cm. Im Fall der Brennelemente ist das Stabsegment unter dem Kernbereich massiv als Reflektor ausgeführt. Das Stabsegment über dem aktiven Kernbereich enthält ein Natriumpolster, ein Helium-Gaspolster sowie einen oberen Strukturteil.

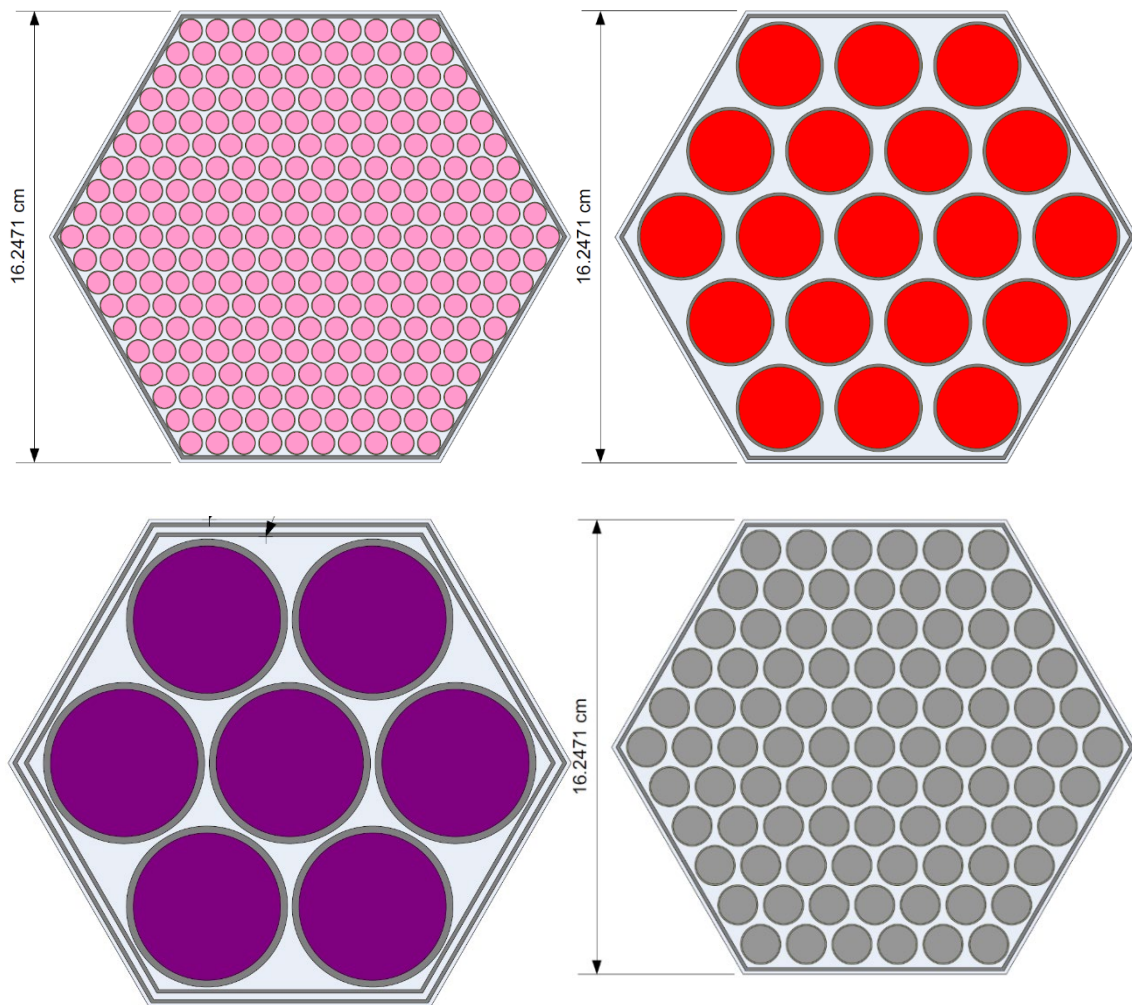


Abb. 4.25 Layout der Brenn-, Steuer- und Reflektorelemente des SFR-Kerns /BLA 11/

Links oben: inneres bzw. äußeres Brennelement mit 271 Brennstäben

rechts oben: Abschirmelement mit 19 Stäben aus B₄C in HT-9 Hüllrohren

links unten: Steuerelement mit 7 Stäben aus B₄C (65 % B-10) in HT-9 Hüllrohren

rechts unten: Reflektorelement mit 91 massiven HT-9 Stäben

Die durchgeführte Untersuchung unterteilt sich in zwei Teile. Im ersten Teil wurde zunächst das etablierte Vorgehen für Unsicherheitsanalysen mit XSUSA /ZWE 13/ verfolgt. Dafür wurden für die Elemente des Kerns makroskopische 4-Gruppen-Wirkungsquerschnitte mittels deterministischer Transportrechnungen und einer Multigruppen-Bibliothek berechnet und in anschließenden Ganzkernrechnungen erprobt. In diesem Forschungsvorhaben wurde auch die Erweiterung von XSUSA, genannt XSUSA-CE, entwickelt und zur Verfügung gestellt. XSUSA-CE ermöglicht die direkte Variation von Wirkungsquerschnitten in kontinuierlicher Energiedarstellung zur Durchführung von stichprobenbasierten Unsicherheitsanalysen von Monte-Carlo-Transportrechnungen (siehe Kap. 4.4). Die Vorteile von Monte-Carlo-Rechnungen, nämlich die Modellierung

komplexer Geometrien sowie die Verwendung kontinuierlicher Wirkungsquerschnittsdaten, stehen damit auch in Unsicherheitsanalysen zur Verfügung. Um in dieser Studie von diesen Vorteilen zu profitieren, wurden die Unsicherheitsanalysen der Steuerstabverfahrenstransiente schließlich in einem zweiten Teil unter Anwendung des Monte-Carlo-Codes Serpent 2.2 und der Erweiterung XSUSA-CE fortgesetzt.

Ermittlung und Erprobung von makroskopischen 4-Gruppen-Wirkungsquerschnitten mit SCALE

Zur Berechnung der makroskopischen 4-Gruppen-Wirkungsquerschnitte für die Elemente des SFR-Kerns wurde NEWT aus dem Programmpaket SCALE-6.2.3 /REA 18/ verwendet. Als Basis dieser Rechnungen diente eine von der GRS entwickelte, auf SFR-Systeme abgestimmte Feingruppenbibliothek mit 425 Energiegruppen basierend auf der nuklearen Datenbibliothek ENDF/B-VII.1 /CHA 11/, die bereits zuvor in Beiträgen für das UAM-SFR-Benchmark angewendet wurde. Es wurde gezeigt, dass damit Ergebnisse erzielt werden, die in guter Übereinstimmung mit Referenzwerten liegen, die mit dem Monte-Carlo-Code MCNP 6.1 /PEL 13/ unter Verwendung von kontinuierlichen Wirkungsquerschnittsdaten der ENDF/B-VII.1-Bibliothek berechnet wurden.

Das NEWT-Modell eines Brennelements wird in Abb. 4.26 gezeigt. Um die Rechengeschwindigkeit zu erhöhen, wurde die hexagonale Geometrie auf eine rechteckige Geometrie abgebildet, was in einem unendlich ausgedehnten Gitter eine exakte Transformation darstellt. Zur Erzeugung von homogenisierten Wirkungsquerschnitten für Elemente ohne Brennstoff, z. B. Steuerelemente, erstellt man üblicherweise Superzellanordnungen, bei denen das brennstofffreie Element von Brennelementen umgeben ist. Abb. 4.27 zeigt die Anordnung für ein Steuerelement. Auch bei diesem Modell wurde zur Erhöhung der Rechengeschwindigkeit eine Transformation auf eine rechteckige Geometrie vorgenommen.

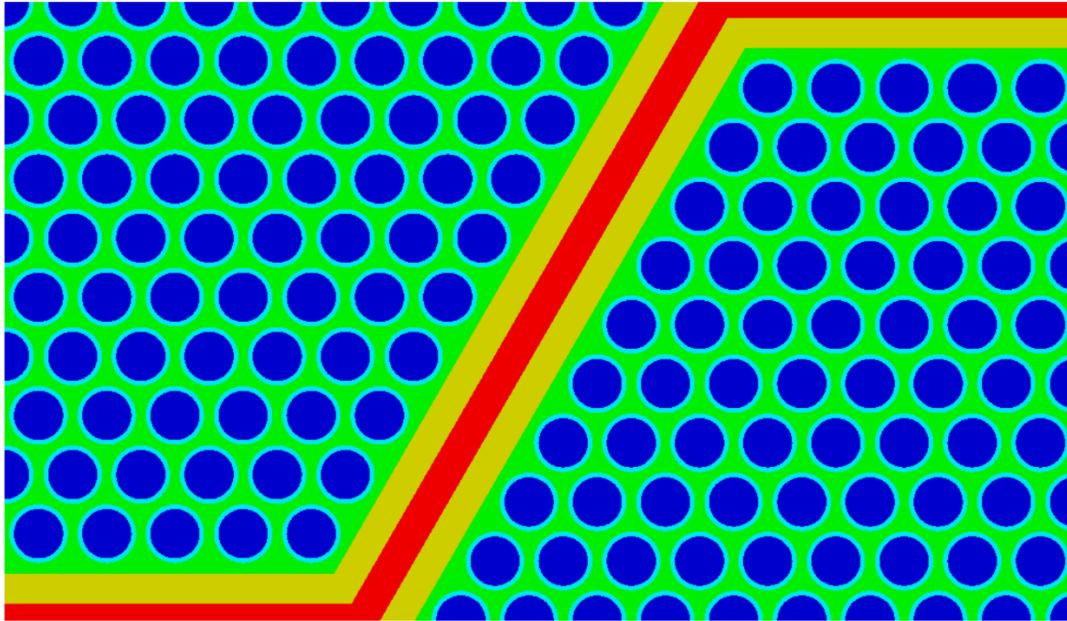


Abb. 4.26 NEWT-Modell eines SFR-Brennelements in einem unendlichen Gitter

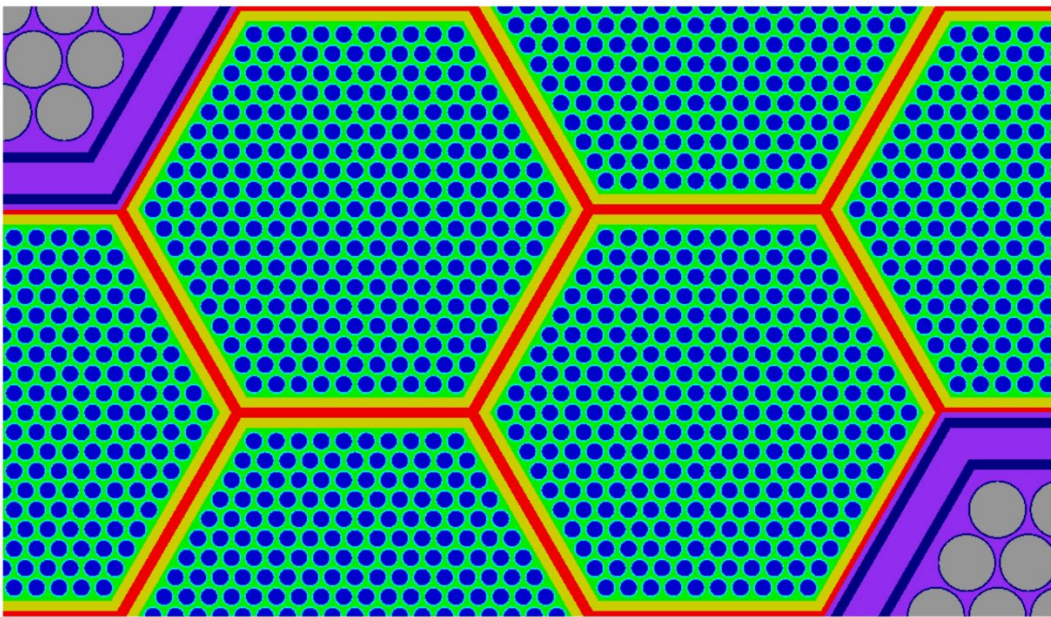


Abb. 4.27 NEWT-Modell eines SFR-Steuerelements umgeben von Brennelementen in einem unendlichen Gitter

Die Homogenisierung der Wirkungsquerschnitte auf Brennelementebene erfolgte mittels einer Fluss-Volumen-Wichtung. Für die Kondensation der Wirkungsquerschnitte auf vier Energiegruppen wurde die in Tab. 4.7 aufgeführte Gruppenstruktur verwendet, die an die im UAM-SFR-Benchmark /BUI 19/ verwendete Gruppenstruktur angelehnt ist.

Tab. 4.7 4-Energiegruppen-Struktur für nodale UAM-SFR-Rechnungen

Energiegruppen-Nr.	Energie-Intervallgrenze [eV]
1	2,0000E+07
2	8,2085E+05
3	1,1109E+05
4	1,5034E+04
	1,0000E-05

Der Prozess der Fluss-Volumen-Wichtung zur Erzeugung von Wirkungsquerschnitten für brennstofffreie Elemente mittels Superzellanordnungen, wie in Abb. 4.27 dargestellt, ist nicht reaktionsratenerhaltend. Die Verwendung homogener Wirkungsquerschnitte dieser Elemente führt dann zu beträchtlichen Abweichungen von der Referenzlösung. Dem kann durch die Verwendung von Korrekturfaktoren entgegengewirkt werden.

Zur Erprobung der makroskopischen 4-Gruppen-Wirkungsquerschnitte wurden für den Monte-Carlo-Code KENO-VI aus SCALE 6.2.3 Modelle für die Brennelementanordnungen, die Superzellanordnungen und für die Ganzkernanordnungen erstellt. Abb. 4.28 zeigt das stabaufgelöste KENO-Ganzkernreferenzmodell und Abb. 4.29 das nodale KENO-Ganzkernmodell, das mit den homogenisierten 4-Gruppen-Wirkungsquerschnitten verwendet wurde.

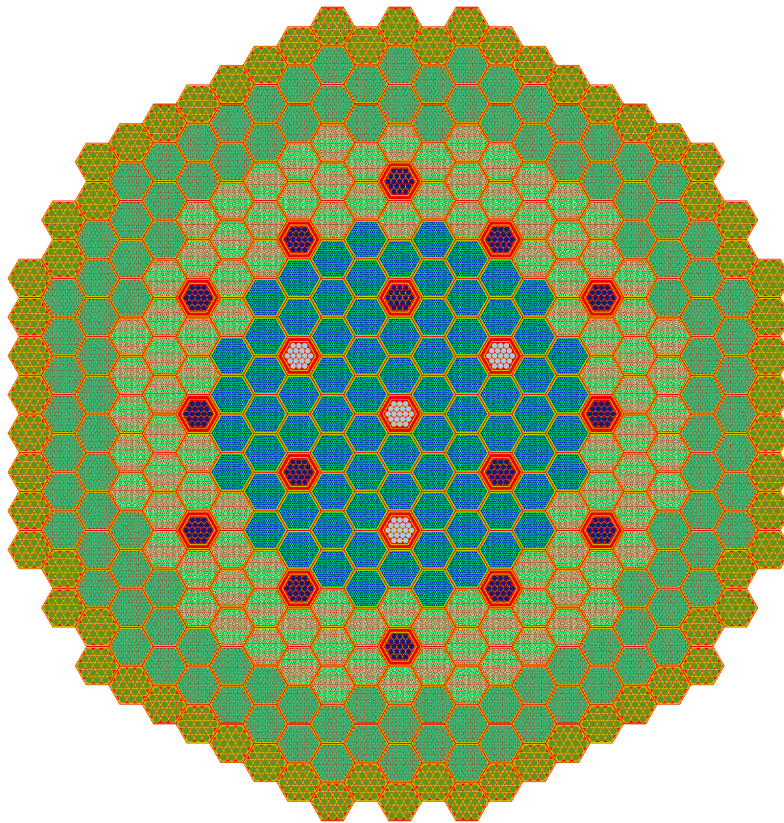


Abb. 4.28 Hochaufgelöstes KENO-VI-Modell des SFR-Kerns

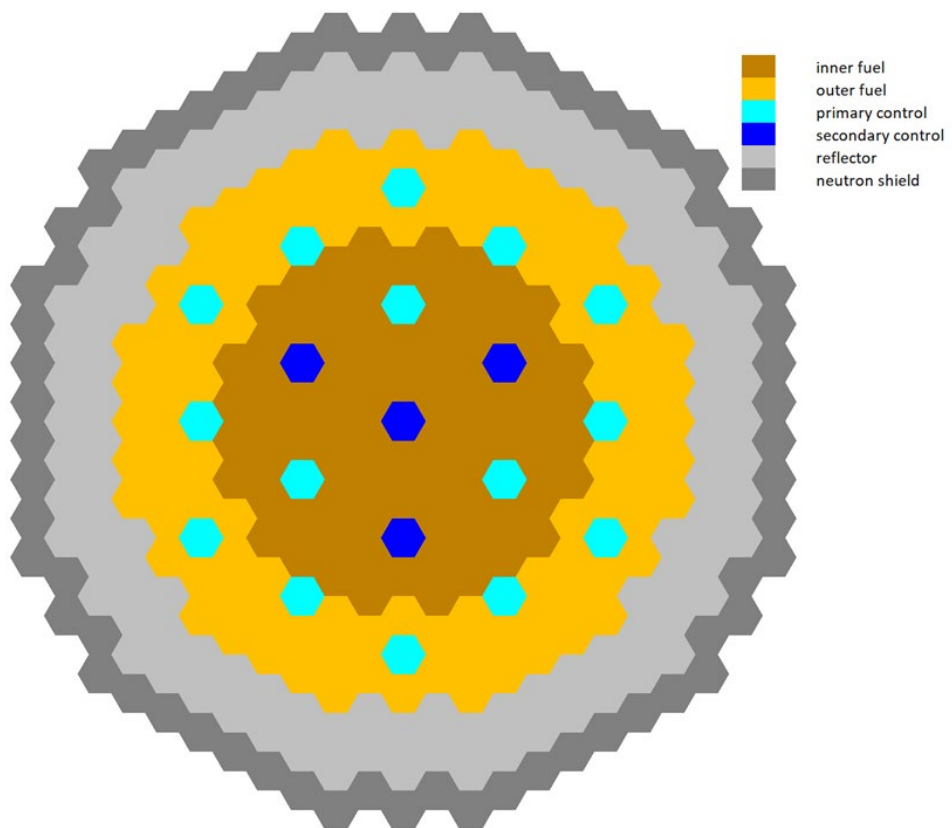


Abb. 4.29 KENO-VI-Modell des SFR-Kerns mit homogenisierten Regionen

In Tab. 4.8 werden für die Brennelementmodelle, die Superzellmodelle und die Ganzkernmodelle Multiplikationsfaktoren verglichen, die mit den makroskopischen 4-Gruppen-Wirkungsquerschnitten und mit den mikroskopischen 425-Gruppen-Wirkungsquerschnitten auf Basis eines räumlich hoch aufgelösten Modells ermittelt wurden. Für die Brennelementmodelle und Superzellmodelle entstammen die mit den 425-Gruppen-Wirkungsquerschnitten berechneten Multiplikationsfaktoren den NEWT-Rechnungen, die zuvor zur Berechnung der 4-Gruppen-Wirkungsquerschnitte durchgeführt worden sind. Eine gute Übereinstimmung ist anhand der geringen Reaktivitätsdifferenzen für die Brennelementmodelle und für das Superzellmodell mit leerem Führungsrohr zu erkennen. Für die Superzellmodelle mit eingefahrenen Steuerelementen bzw. mit dem Abschirmelement wurden Korrekturfaktoren auf die 4-Gruppen-Wirkungsquerschnitte angewendet, um die gezeigte gute Übereinstimmung zu erhalten. Die korrigierten 4-Gruppen-Wirkungsquerschnitte wurden ebenfalls für die nodalen KENO-Rechnungen des Ganzkernmodells angewendet. Für das unkontrollierte Ganzkernmodell ist eine gute Übereinstimmung zu erkennen, für das kontrollierte Modell wird eine deutliche Abweichung von -295 pcm beobachtet.

Tab. 4.8 Multiplikationsfaktoren für verschiedene SFR-Anordnungen ermittelt mit makroskopischen 4-Gruppen-Wirkungsquerschnitten und mikroskopischen 425-Gruppen-Wirkungsquerschnitten

	k_{eff} (Referenz 425g)	k_{eff} (homogenisiert 4g)	Abweichung [pcm]
Inneres Brennelement	1,27939	1,27915	-15
Äußeres Brennelement	1,44270	1,44258	-6
Superzelle mit leerem Führungsrohr	1,24988	1,25101	72
Superzelle mit Reflektor	1,23109	1,23151	28
Superzelle mit primären Steuerstäben	1,08382	1,08406	21
Superzelle mit sekundären Steuerstäben	0,99790	0,99862	72
Superzelle mit Abschirmelement	1,01437	1,01480	42
Kern mit ausgefahrenen Steuerstäben	1,01515	1,01413	-99
Kern mit voll eingefahrenen Steuerstäben	0,92139	0,91889	-295

Im Hinblick auf die Ganzkernrechnungen sind neben den Multiplikationsfaktoren auch radiale Spaltdichteverteilungen von besonderem Interesse. Diese Verteilungen wurden an einer Reihe von Brennelementen ausgewertet, die in Abb. 4.30 durch rote Punkte gekennzeichnet sind.

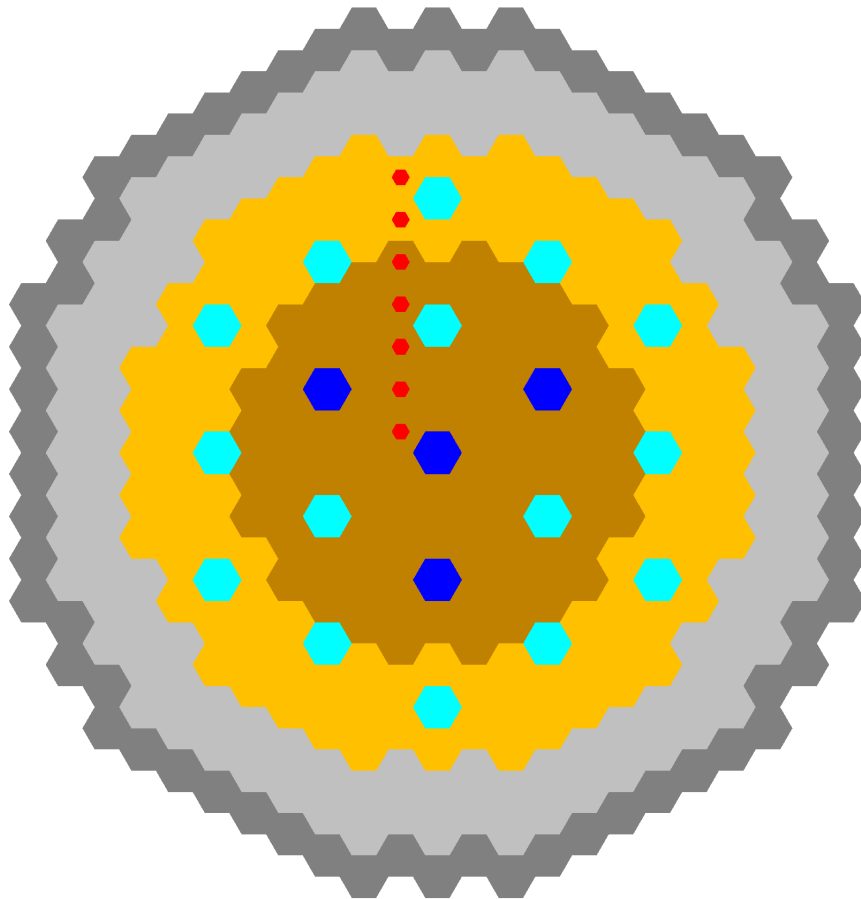


Abb. 4.30 Kennzeichnung der Brennelemente (rote Punkte), bei denen die Spaltdichte ermittelt wurde

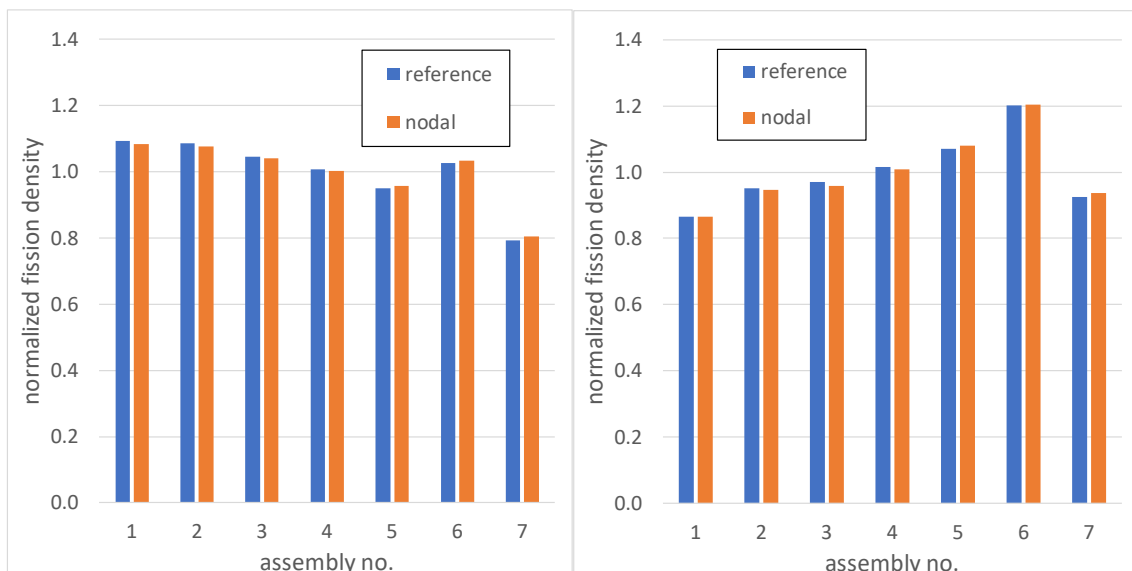


Abb. 4.31 Vergleich berechneter Spaltdichten mit dem räumlich aufgelösten Modell (reference) und dem nodalen Modell (nodal)

Links: unkontrollierter Zustand. Rechts: voll kontrollierter Zustand.

Die Ergebnisse sind in Abb. 4.31 für den unkontrollierten und den voll kontrollierten Zustand dargestellt. Die normierten Spaltdichten aus dem Modell mit den 425-Gruppen-Wirkungsquerschnittsdaten und hoher räumlicher Auflösung („reference“) sind in sehr guter Übereinstimmung mit den Werten aus dem nodalen KENO-Modell („nodal“) mit den 4-Gruppen-Wirkungsquerschnitten. Die relativen Abweichungen betragen weniger als 1,5 %.

Anwendung von XSUSA-CE mit Serpent und FENNECS-ATHLET

Das Vorgehen bei diesen Unsicherheitsanalysen besteht aus der Anwendung von XSUSA-CE zur stichprobenbasierten Variation von kontinuierlichen Wirkungsquerschnittsdaten. Mit dieser Stichprobe von variierten Wirkungsquerschnittsdaten können Monte-Carlo-Transportrechnungen mit dem Code Serpent durchgeführt werden. Die Ergebnisse der Serpent-Rechnungen können schließlich statistisch analysiert werden oder als Eingabedaten für weiterführende Rechnungen verwendet werden. So können zum Beispiel die resultierenden variierten, homogenisierten Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte als Eingangsdaten für eine Stichprobe von Ganzkernrechnungen mit FENNECS dienen.

Für die Analyse des SFR-Kerns wurde zunächst als Referenz ein Serpent-Ganzkernmodell auf Basis des ABR-Designs erstellt, das die folgenden vier Konfigurationen abdeckt: i) unkontrolliert (alle Steuerelemente ausgefahren), ii) vollständig kontrolliert: alle Steuerelemente eingefahren, iii) teilweise kontrolliert: primäre Steuerstabgruppe ein- und sekundäre Steuerstabgruppe ausgefahren, iv) teilweise kontrolliert: primäre Steuerstabgruppe aus- und sekundäre Steuerstabgruppe eingefahren. Für das Kühlmittel und die Strukturmaterialien wurde eine Temperatur von 705,65 K und für den Brennstoff eine Temperatur von 807 K angewendet.

Die Rechnungen wurden mit Wirkungsquerschnittsdaten der ENDF/B-VII.1-Bibliothek durchgeführt. Zum Erreichen einer geringen statistischen Unsicherheit der auf der Monte-Carlo-Methode basierenden Ergebnisse wurden 5.000 aktive Zyklen mit jeweils 1.000.000 Neutronenhistorien simuliert.

Zur Berechnung der homogenisierten Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte wurden, wie in /BOU 21/ vorgeschlagen, dreidimensionale Serpent-Modelle der Brennelemente mit reflektierenden Randbedingungen in radialer Richtung und Vakuum-Randbedingungen in axialer Richtung erstellt. Für die fünf axialen Zonen des Brennstoffbereichs, die sich

durch unterschiedliche Nuklidzusammensetzungen auszeichnen, konnten so jeweils Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte ermittelt werden. In gleicher Weise wurden dreidimensionale Modelle für die Abschirmelemente und Reflektorelemente erstellt. Aufgrund des fehlenden Brennstoffs wurden sie als Superzellmodell mit sechs umgebenden halben Brennelementen ausgeführt. Für die Steuerelemente wurden, wie in Abb. 4.32 gezeigt, gleiche Superzellmodelle jedoch in zwei Dimensionen erstellt. Mittels der *Super-Homogenization-Methode* (SPH), beschrieben in /BOU 21/, wurden die 8-Gruppen-Wirkungsquerschnitte der Steuerelemente korrigiert. Dafür wurde ein zum Serpent-Modell der Superzelle äquivalentes FENNECS-Modell erstellt. Die SPH-Faktoren zur Korrektur der Wirkungsquerschnitte sind schließlich das Verhältnis des Neutronenflusses aus Serpent zum homogenen Neutronenfluss aus FENNECS. Die Korrektur verläuft iterativ, bis die Differenz der SPH-Faktoren zwischen zwei Iterationen $< 1,0E-06$ ist.

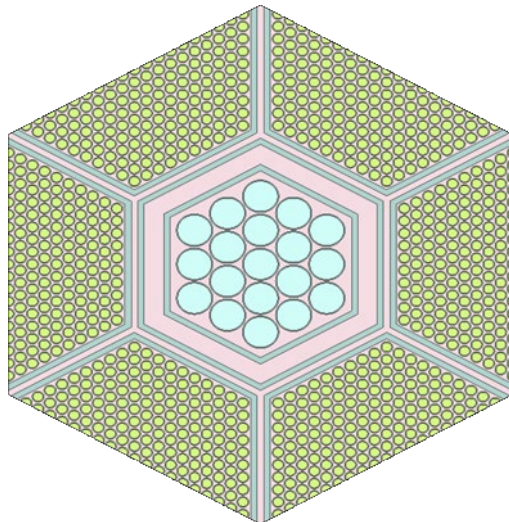


Abb. 4.32 Zweidimensionales Serpent-Superzellmodell zur Berechnung homogenisierter Wirkungsquerschnitte für das primäre Steuerelement

Die homogenisierten Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte wurden mit der in Tab. 4.9 gegebenen 8-Energiegruppenstruktur /WAL 12/ ermittelt. Zur Reduktion der durch die Monte-Carlo-Methode bedingten statistischen Unsicherheiten wurden für die Rechnungen zur Ermittlung der homogenisierten 8-Gruppen-Wirkungsquerschnitte 3.000 aktive Zyklen mit jeweils 200.000 Neutronenhistorien simuliert. Durch die insgesamt hohe Anzahl an Neutronenhistorien wurde erreicht, dass auch Neutronen in den niedrigen Energiebereichen auftraten. Jede Rechnung bedingte jedoch eine lange Simulationszeit von ca. 5 Stunden bei Verwendung von 48 Rechenkernen.

Tab. 4.9 8-Energiegruppen-Struktur für nodale UAM-SFR-Rechnungen /WAL 12/

Energiegruppen-Nr.	Energie-Intervallgrenze [eV]
1	2,0000E+07
2	2,2313E+06
3	8,2085E+05
4	3,0197E+05
5	1,1109E+05
6	4,0868E+04
7	1,5034E+04
8	7,4852E+02
	1,0000E-05

Zur Berücksichtigung von Rückwirkungen auf die Neutronenkinetik während einer Transiente müssen die 8-Gruppen-Wirkungsquerschnitte über sämtliche Rückwirkungsparameter parametrisiert werden. Für die hier untersuchte Transiente wurde die Rückwirkung durch eine Veränderung der Brennstofftemperatur ohne thermische Ausdehnung des Brennstoffs und die Rückwirkung durch eine Veränderung der Natriumdichte gewählt. Als Brennstofftemperaturen wurden 600 K, 807 K, 1200 K und 2500 K gewählt. Für die Kühlmitteldichte wurden $7,29207\text{E-}01 \text{ g/m}^3$, $8,50243\text{E-}01 \text{ g/m}^3$ und $9,45443\text{E-}01 \text{ g/m}^3$ gewählt. Die Berechnung eines mit diesen Rückwirkungsparametern parametrisierten Satzes von Wirkungsquerschnitten für alle im Kern vorhandenen Elemente benötigte 210 Stunden Simulationszeit unter Verwendung von 48 Rechenkernen.

Abb. 4.33 zeigt einen radialen Schnitt durch das für diese Analysen erstellte FENNECS-Modell. Jedes hexagonale Element ist in der radialen Ebene in sechs gleiche Dreiecke unterteilt. In axialer Richtung sind es 103 Maschen. Zur Berechnung der Neutronenflussverteilung wurde der Diffusionslöser von FENNECS verwendet.

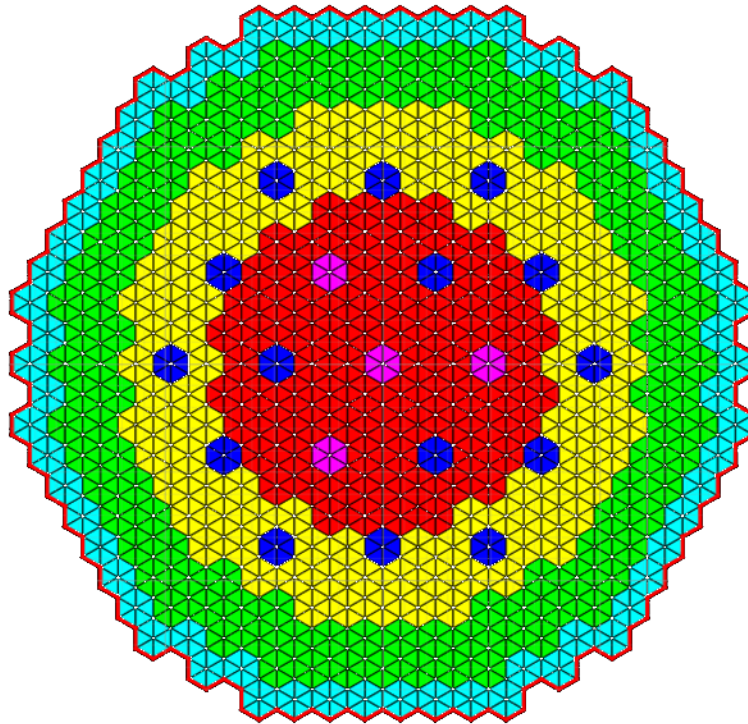


Abb. 4.33 Radialer Schnitt durch das FENNECS-Modell des SFR-Kerns zur Veranschaulichung des Rechengitters (Darstellung mit PEMTY erstellt)

Mit homogenisierten 8-Gruppen-Wirkungsquerschnitten, die bei gleicher Brennstoff- und Kühlmitteltemperatur wie beim Serpent-Ganzkernmodell bestimmt wurden, wurde das FENNECS-Modell gegen das Serpent-Ganzkernmodell verifiziert. Für den unkontrollierten Zustand wurde eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den Multiplikationsfaktoren mit einer Reaktivitätsdifferenz von lediglich -49 pcm erzielt. Für die kontrollierten Zustände ergaben sich größere Abweichungen mit Reaktivitätsdifferenzen von -190 pcm bis -467 pcm. Ferner ist zu erkennen, dass das FENNECS-Modell die Wirksamkeiten der Steuerstabgruppen im Vergleich zu dem Serpent-Modell um bis zu einige 100 pcm überschätzt.

Tab. 4.10 Multiplikationsfaktoren und Steuerelementwirksamkeiten ermittelt mit FENNECS im Vergleich zu Serpent-Referenzwerten

		Unkontrolliert	Kontrolliert	Primäre Gruppe eingefahren	Sekundäre Gruppe eingefahren
Serpent	k_{eff}	1,01661	0,92454	0,95921	0,98320
Wirksamkeit [pcm]			-9796	-5886	-3343
FENNECS	k_{eff}	1,01610	0,92057	0,95688	0,98136
Wirksamkeit [pcm]			-10213	-6091	-3484
Reaktivitätsdifferenz zu Serpent k_{eff} [pcm]		-49	-467	-254	-190

Für den unkontrollierten Zustand zeigt Abb. 4.34 die radiale Leistungsverteilung des Serpent-Modells und Abb. 4.35 die relativen Abweichungen zwischen der radialen Leistungsverteilung des FENNECS-Modells zu der des Serpent-Modells. FENNECS erzielt für den unkontrollierten Zustand insgesamt eine gute Übereinstimmung. Im inneren Kernbereich und bei der äußeren Brennelementreihe wird die Leistung um 0,84 % überschätzt, wohingegen sie in der zweiten und dritten Brennelementreihe von außen um -1,13 % unterschätzt wird.

Für den vollständig kontrollierten Zustand wird in Abb. 4.36 die radiale Leistungsverteilung des Serpent-Modells und in Abb. 4.37 die relativen Abweichungen der radialen Leistungsverteilungen des FENNECS-Modells zu der des Serpent-Modells dargestellt. Auch für diesen Zustand erzielt das FENNECS-Modell eine sehr gute Übereinstimmung mit dem Serpent-Modell mit relativen Abweichungen zwischen -1,02 % und 1,20 %.

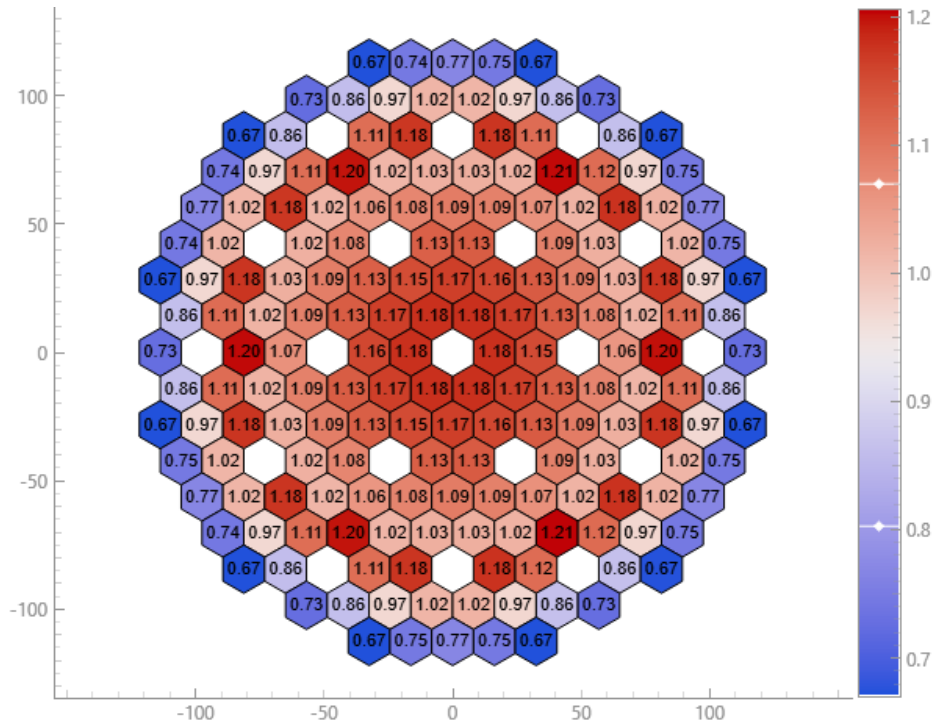


Abb. 4.34 Leistungsverteilung des Serpent-Modells für den unkontrollierten Zustand des ABR-Kerns

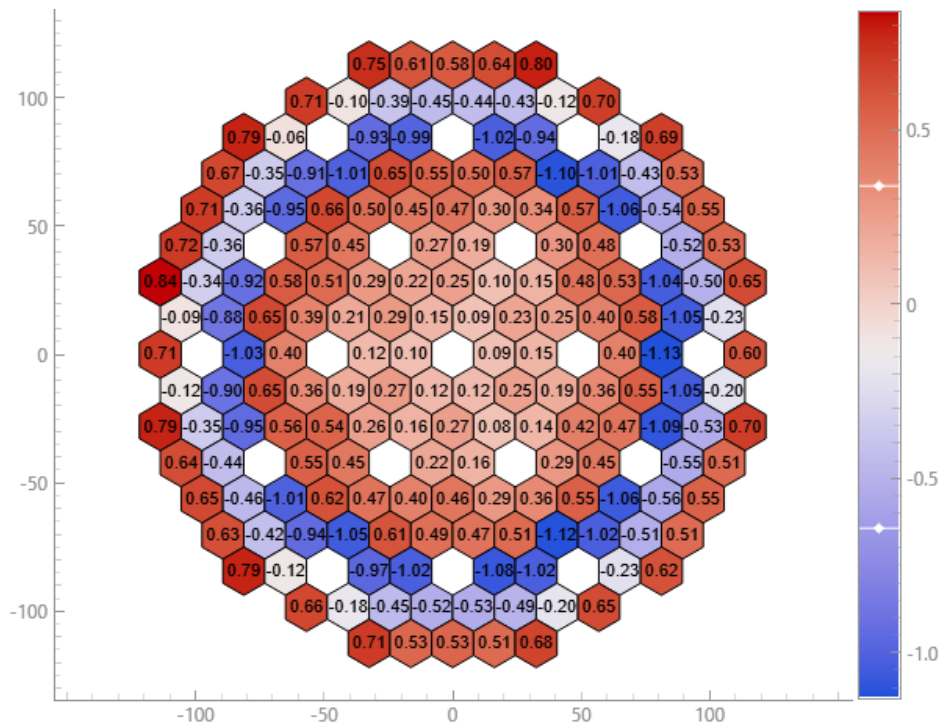


Abb. 4.35 Relative Abweichungen der Leistungsverteilungen zwischen FENNECS und Serpent für den unkontrollierten Zustand des ABR-Kerns

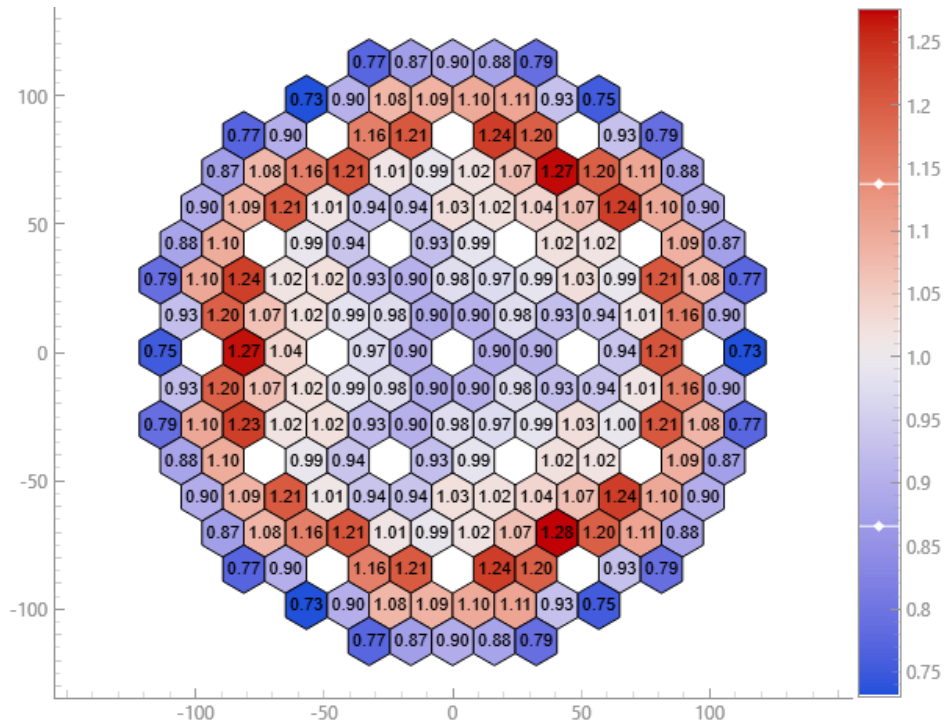


Abb. 4.36 Leistungsverteilung des Serpent-Modells für den kontrollierten Zustand des ABR-Kerns

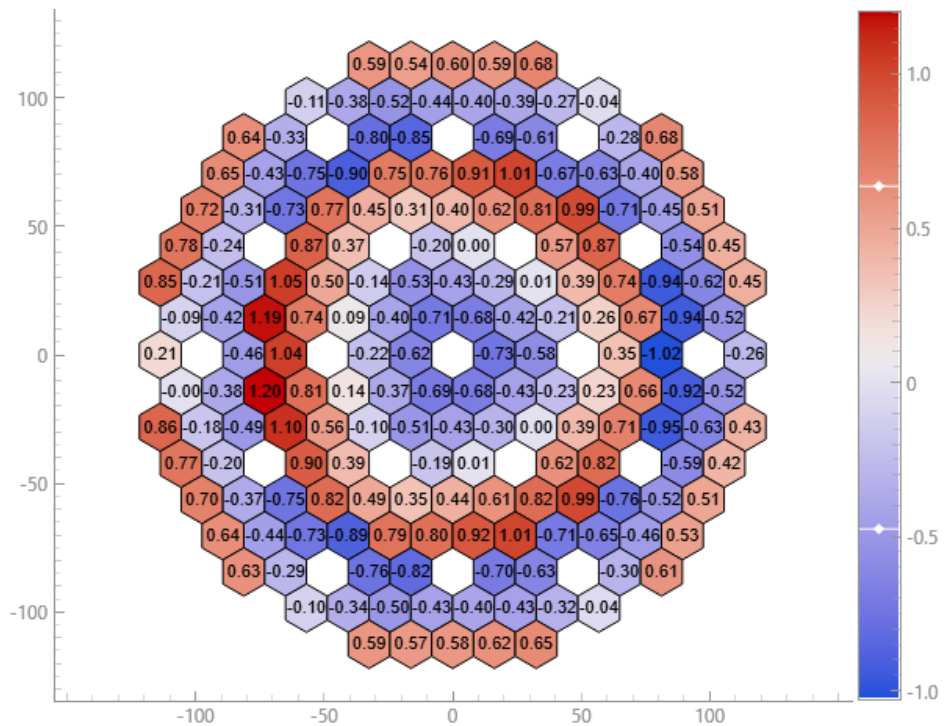


Abb. 4.37 Relative Abweichungen der Leistungsverteilungen zwischen FENNECS und Serpent für den kontrollierten Zustand des ABR-Kerns

Zum besseren Verständnis des reaktordynamischen Verhaltens wurde mittels des unkontrollierten FENNECS-Ganzkernmodells die Abhängigkeit des Multiplikationsfaktors von der Brennstofftemperatur untersucht. Im Vergleich zu Leichtwasser-moderierten Reaktoren zeigt sich ein deutlich geringerer Brennstofftemperaturkoeffizient von ca. -0,5 pcm/K im Temperaturbereich von 700 K bis 1200 K und von ca. -0,2 pcm/K im Bereich von 1200 K bis 1400 K, siehe Abb. 4.38.

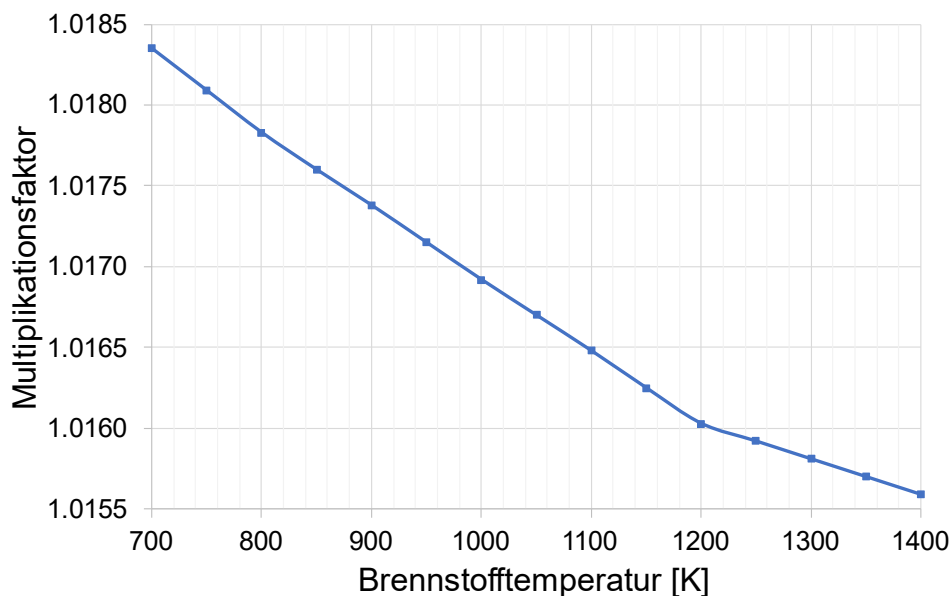


Abb. 4.38 Multiplikationsfaktor als Funktion der Brennstofftemperatur ermittelt mit dem FENNECS-Ganzkernmodell

Ferner wurde die Abhängigkeit des Multiplikationsfaktors in Abhängigkeit der Kühlmitteldichte untersucht. Dazu wurde die Kühlmitteldichte im Bereich von $8,21583 \times 10^{-1} \text{ g/cm}^3$ bis $8,69458 \times 10^{-1} \text{ g/cm}^3$ variiert, was einer Variation der Kühlmitteltemperatur von 818,15 K bis 618,15 K entspricht, siehe Abb. 4.39. Damit ergibt sich ein Kühlmitteldichtekoeffizient von ca. 0,4 pcm/K.

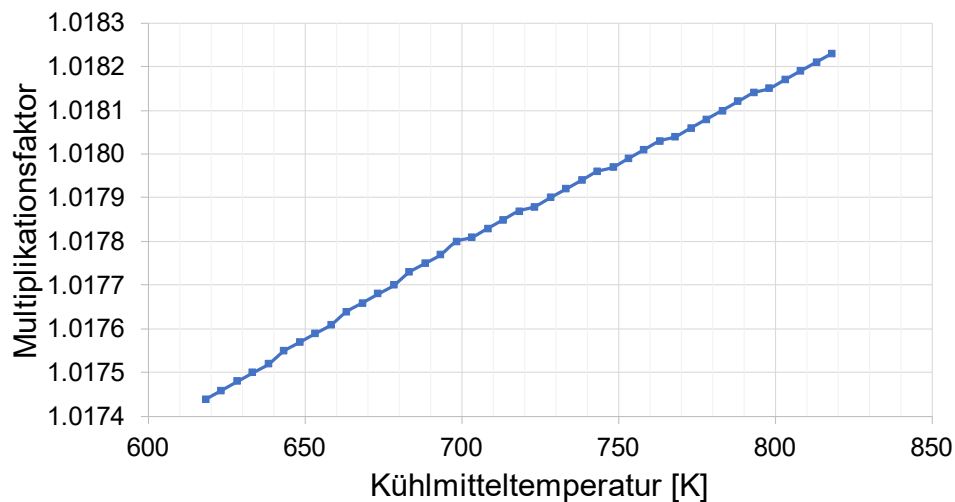


Abb. 4.39 Multiplikationsfaktor als Funktion der Kühlmitteltemperatur ermittelt mit dem FENNECS-Ganzkernmodell

Aufgrund des hohen Rechenbedarfs zur Erstellung der variierten 8-Gruppen-Wirkungsquerschnitte für alle Elemente des Kerns einschließlich der Parametrisierung über Brennstofftemperaturen und Kühlmitteldichten konnte statt des ursprünglich angestrebten Stichprobenumfangs von 300 nur ein Stichprobenumfang von 141 realisiert werden. Mit den variierten 8-Gruppen-Wirkungsquerschnitten wurden zunächst 141 stationäre FENNECS-Rechnungen für den unkontrollierten Zustand sowie die verschiedenen kontrollierten Zustände durchgeführt. Dabei wurde die Brennstoff- und Kühlmitteltemperatur fixiert und gleich zu den Werten der vorherigen Ganzkernrechnungen gewählt. Für die resultierenden Multiplikationsfaktoren wurden der Mittelwert und die relative Unsicherheit ausgewertet, die in Tab. 4.11 gegeben werden. Für alle Zustände ist der jeweilige Mittelwert um einige 100 pcm größer als der zugehörige nominale Multiplikationsfaktor. Für den unkontrollierten Zustand wird die geringste relative Unsicherheit mit einem Wert von 1,01 % berechnet, für den vollständig kontrollierten Zustand die größte relative Unsicherheit mit einem Wert von 1,11 %. Diese Unsicherheitswerte sind ähnlich zu Werten, die bereits für verschiedene Stabzell- und Brennelementanordnungen dieses ABR-Kerns in vorherigen Studien /AUR 16/, /ZWE 20/ beobachtet wurden.

Tab. 4.11 Nominaler Multiplikationsfaktor k_{eff} , Mittelwert und rel. Unsicherheit von k_{eff} bei einer Stichprobe von 141 Wirkungsquerschnittssätzen

	Unkontrolliert	Kontrolliert	Primäre Gruppe eingefahren	Sekundäre Gruppe eingefahren
Nominal k_{eff}	1,01610	0,92057	0,95688	0,98136
Mittelwert k_{eff}	1,01791	0,92265	0,95898	0,98311
Rel. Unsicherheit von k_{eff} [%]	1,01	1,11	1,09	1,02

Für die Steuerstabverfahrtransiente wird ein Steuerelement der primären Steuerelementgruppe auf einer Kernposition im inneren Kernbereich, dargestellt in Abb. 4.24, vorgefahren. Der Ausgangszustand der Transiente umfasst, dass die Steuerelemente der sekundären Gruppe vollständig ausgefahren und die Steuerelemente der primären Gruppe so weit eingefahren sind, dass die Distanz zwischen Unterkante des aktiven Kerns und eines Steuerelements 220 cm beträgt. Der transiente Vorgang wird ab einer Simulationszeit von 10 s durch das Ausfahren des Steuerelements gestartet. Dabei wird es bis zu 13 s um 1 cm ausgefahren, also mit ca. 0,33 cm/s. Auf Basis der nominalen 8-Gruppen-Wirkungsquerschnitte sowie der 141 Datensätze von variierten 8-Gruppen-Wirkungsquerschnitten wurden gekoppelte FENNECS-ATHLET-Rechnungen durchgeführt. Mit den nominalen Wirkungsquerschnitten ermittelt die Kopplung FENNECS-ATHLET für den Ausgangszustand einen Multiplikationsfaktor von 1,00273.

Abb. 4.40 zeigt die Verläufe der thermischen Reaktorleistung der FENNECS-ATHLET-Rechnungen mit nominalen Wirkungsquerschnitten sowie mit den variierten Wirkungsquerschnitten. Im Fall der nominalen Rechnung steigt die Leistung während der Reaktivitätszufuhr durch das Ausfahren des Steuerelements zunächst linear auf 103,5 % an, bevor dann ein weiterer langsamer Anstieg auf ca. 104 % erfolgt. Dieser Wert bleibt schließlich bis zu einer Zeit von 100 s bestehen. Der zugehörige Verlauf der mittleren Brennstofftemperatur, dargestellt in Abb. 4.41, weist einen moderaten Temperaturanstieg um wenige Kelvin auf. Im Fall der Rechnungen mit variierten Wirkungsquerschnitten werden viele Variationen beobachtet, die im Vergleich dazu kein plausibles Verhalten zeigen, da die jeweiligen Verläufe der Reaktorleistung Sprünge aufweisen. Dazu zählen Variationen, die eine prompte Leistungsexkursion, einen moderaten Anstieg der Leistung oder eine Verringerung der Leistung nach der Steuerstabbewegung erfahren. Bei Variationen mit zunehmender Leistung steigt die Leistung stufenförmig an. Bei Variationen mit abnehmender Leistung folgt auf eine stufenförmige Abnahme der Leistung meist nach einigen Sekunden wieder eine stufenförmige Zunahme der Leistung. Die Verläufe

der mittleren Brennstofftemperatur weisen dagegen keine Auffälligkeiten auf. Da die Ursache dieser unplausiblen, als numerische Artefakte interpretierten Verläufe im Rahmen des laufenden Forschungsvorhabens nicht aufgeklärt werden konnte, werden zukünftig weitere Untersuchungen geplant. Zum Beispiel können die Bereiche der betrachteten Rückwirkungsparameter größer gewählt werden und weitere Rückwirkungsparameter, wie die thermische Ausdehnung von Kernkomponenten, bei der Berechnung von homogenisierten Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten berücksichtigt werden.

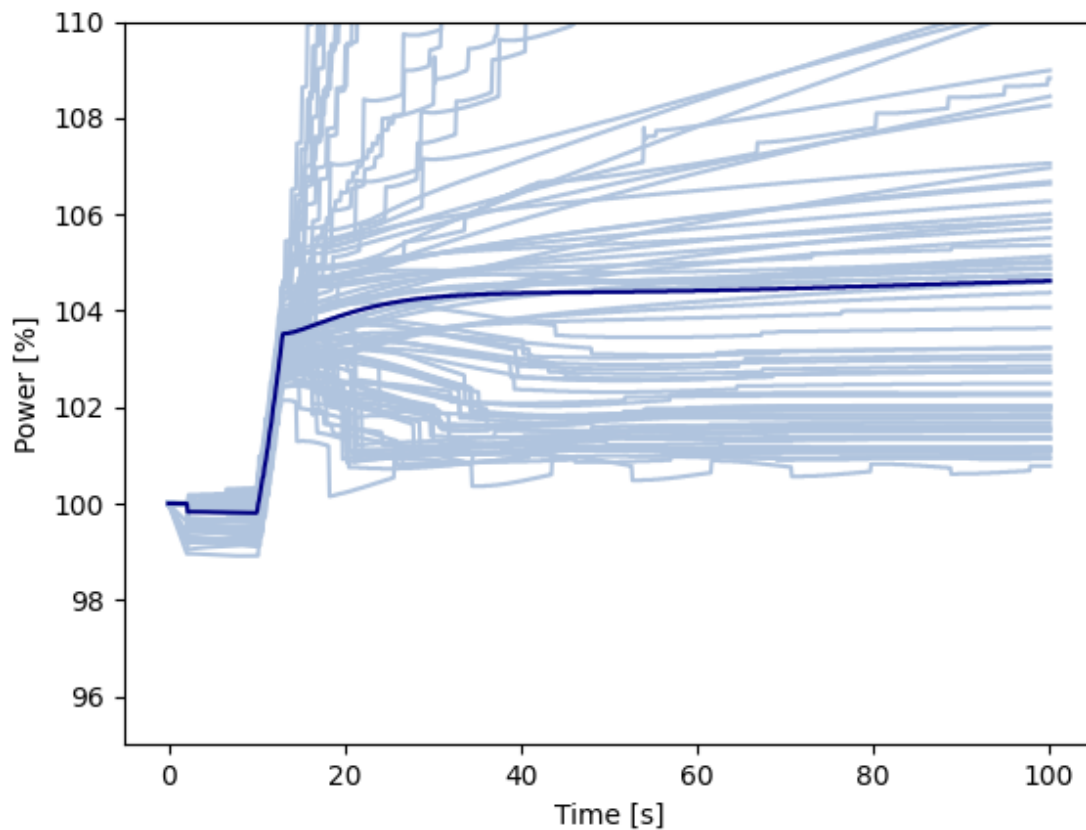


Abb. 4.40 Verlauf der Reaktorleistung mit nominalen (dunkelblau) und variierten Wirkungsquerschnitten (hellblau)

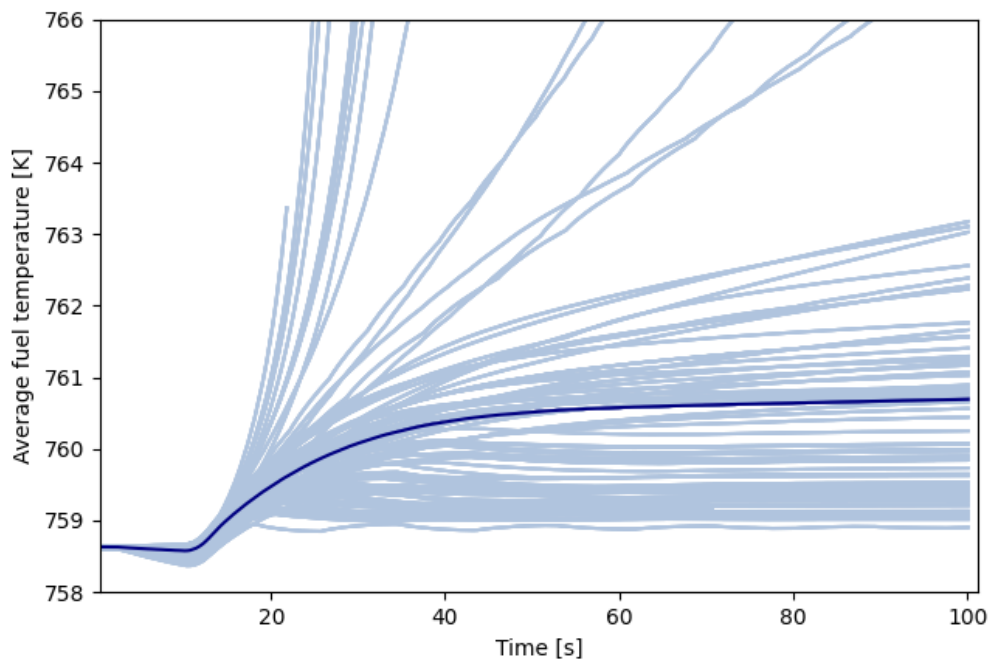


Abb. 4.41 Verlauf der mittleren Brennstofftemperatur mit nominalen (dunkelblau) und variierten Wirkungsquerschnitten (hellblau)

4.4 Erweiterung von XSUSA zur Verwendung von Wirkungsquerschnittsdaten in kontinuierlicher Energiedarstellung

Bislang war eine Verwendung von XSUSA ausschließlich mit Multigruppen-Wirkungsquerschnittsdaten möglich. Mit der vermehrten Verwendung von Monte-Carlo (MC) Neutronentransportcodes für die Berechnung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten oder auch für Ganzkernrechnungen wurde in der vorliegenden Untersuchung eine Methodik zur Quantifizierung der Unsicherheiten in MC-Rechenergebnissen aufgrund der Unsicherheiten der diesen Rechnungen zugrundeliegenden nuklearen Daten implementiert. Ein Vorteil dieser Methode ist die Elimination des Einflusses der sonst bei Multigruppen-Wirkungsquerschnitten notwendigen Resonanzbehandlung der Wirkungsquerschnitte auf Unsicherheitsanalysen. Dabei soll diese Methode vor allem in Verbindung mit dem MC-Code Serpent 2.2 /LEP 15/ verwendet werden. Da es sich um eine Erweiterung von XSUSA handelt, basiert die implementierte Methode auf dem Sampling-Ansatz und wird auf der Grundlage von ACE-Dateien (*A Compact ENDF*) /CON 19/, den nuklearen Eingangsdaten für MCNP- und Serpent-Rechnungen, konzipiert.

Der hier verfolgte Ansatz orientiert sich an dem Programmcode NUSS-SRS /ZHU 15/. Die Unsicherheiten in den nuklearen Daten, die in Form von Kovarianzmatrizen beim Generieren der Stichprobe verwendet werden, basieren im Gegensatz zu den kontinuierlichen ACE-Daten auf der Multigruppen-Darstellung. Dies erlaubt es, dieses Verfahren direkt mit bereits bewährten Methoden wie XSUSA, SCALE/SAMPLER /WIL 13/ und SCALE/TSUNAMI /REA 11b/ auf Basis derselben Kovarianzmatrizen zu vergleichen. Als Beispiel einer stichprobenbasierten Methode, die direkt mit ENDF-Daten arbeitet, sei das Programmpaket NUDUNA /BUS 11/ genannt. Eine weitere Methode, die bei der Variation von grundlegenden Modellparametern der nuklearen Daten ansetzt, ist die Total-Monte-Carlo-Methode /KON 08/. In den letzten Jahren wurden vermehrt auch Methoden zur Sensitivitätsanalyse auf Basis der sogenannten *Generalized Perturbation Theory* (GPT) für MC-Codes entwickelt /AUF 15/. Letztere Methoden setzen in der Regel Eingriffe in den Quellcode des MC-Codes voraus, während der stichprobenbasierte Ansatz, wie er hier implementiert wurde, den jeweiligen MC-Code als Blackbox verwendet.

Die Umsetzung der hier vorgestellten Methode umfasst mehrere Arbeitsschritte. Zunächst wurde das ACE-Dateiformat analysiert und Methoden zum Auslesen der ACE-Daten implementiert. Die kontinuierlichen Daten im ACE-Format, die hauptsächlich als Punktdaten vorliegen, die von den jeweiligen MC-Codes interpoliert werden, sind nicht für alle Nuklide in allen Energieintervallen der Kovarianzmatrizen vorhanden. Darum galt es sicherzustellen, dass in allen Multigruppen-Energieintervallen, die von den Kovarianzmatrizen bestimmt sind, entsprechende Datenpunkte vorhanden sind. Ansonsten können diese Energieintervalle nicht bei der Variation der Daten berücksichtigt werden und verzerren die Ergebnisse bezüglich Sensitivitätskoeffizienten und Unsicherheiten. Daher müssen die vorliegenden ACE-Daten, wie in Abschnitt 4.4.1 dargestellt, dahingehend erweitert werden, dass in jedem Energiegruppen-Intervall mindestens ein Datenpunkt liegt. Des Weiteren wurde eine Methode zum Variieren der ACE-Daten auf Basis der Multigruppen-Kovarianzmatrizen implementiert. Hierfür konnte auf die bereits in XSUSA implementierte Methodik zurückgegriffen werden. Die Modifikation der ACE-Daten hingegen musste neu entwickelt werden. Dabei war sicherzustellen, dass die Variationen konsistent an allen Daten vorgenommen werden. Schlussendlich wurden auch Funktionen zum Abspeichern solcher variierten ACE-Daten geschaffen, damit diese auch als Bibliotheken für MC-Rechnungen zur Verfügung stehen.

Zuletzt wird die implementierte Rechenkette anhand einfacher Testfälle mit Referenzlösungen verglichen und bewertet.

4.4.1 Analyse des ACE-Dateiformats und Erweiterung der Daten

Als Ausgangspunkt der Analysen wurden ACE-Dateien auf Basis der ENDF/B-VII.1-Datenbibliothek verwendet. Eine ACE-Datei hat einen definierten Aufbau, der anhand der ACE-Datei für U-235 beispielhaft in Abb. 4.42 illustriert ist. Eine ACE-Datei hat eine Kopfzeile und Felder für die Werte IZAW, NXS, JXS und XSS, wobei sich die eigentlichen nuklearen Daten im XSS-Feld befinden und die übrigen Felder den strukturellen Aufbau der ACE-Datei beschreiben. Eine detaillierte Beschreibung des ACE-Formats kann in /CON 19/ eingesehen werden.

1	2.0.0	92235.710nc	ENDFB-VII.1						
2	233.024800	2.5301E-08	12/19/12	3					
3	The next two lines are the first two lines of 'old-style' ACE.								
4	92235.80c	233.024800	2.5301E-08	12/19/12					
5	U235 ENDF71x (jlconlin) Ref. see jlconlin (ref 09/10/2012 10:00:53) mat9228								
6	0	0.	0	0.	0	0.	0	0.	
7	0	0.	0	0.	0	0.	0	0.	
8	0	0.	0	0.	0	0.	0	0.	
9	0	0.	0	0.	0	0.	0	0.	
10	839176	92235	76630	48	45	33	0	6	
11	0	92	235	0	0	0	0	0	
12	1	383151	383474	383522	383570	383618	383666	621373	
13	621419	686392	686437	759116	835746	835779	835812	837100	
14	837133	837133	837166	839173	833760	839176	747436	749285	
15	749300	749342	749348	0	0	0	0	0	
16	1.0000000000E-11	1.0003990000E-11	1.0312500000E-11	1.0625000000E-11					
17	1.0937500000E-11	1.1250000000E-11	1.1562500000E-11	1.1875000000E-11					
18	1.2187500000E-11	1.2500000000E-11	1.2812500000E-11	1.3125000000E-11					
19	1.3437500000E-11	1.3750000000E-11	1.4375000000E-11	1.5000000000E-11					
20	1.5625000000E-11	1.6250000000E-11	1.6875000000E-11	1.7500000000E-11					
21	1.8125000000E-11	1.8750000000E-11	1.9375000000E-11	2.0000000000E-11					
22	2.0582720000E-11	2.1165430000E-11	2.1748150000E-11	2.2330860000E-11					
23	2.2913580000E-11	2.3496290000E-11	2.4079010000E-11	2.4661720000E-11					
24	2.5827150000E-11	2.6992580000E-11	2.8158010000E-11	2.9323440000E-11					
25	3.0196200000E-11	3.1068950000E-11	3.1941710000E-11	3.2814460000E-11					
26	3.3687220000E-11	3.4559970000E-11	3.5432720000E-11	3.6305470000E-11					

Kopfdaten

IZAW Feld

NXS Feld

JXS Feld

XSS Feld

Abb. 4.42 Beispiel einer ACE-Datei für das Nuklid U-235

Als erster Schritt wurde ein Python-Modul implementiert, das das ACE-Format ausliest. Dies beinhaltet eine Indizierung der ACE-Datei, über die individuelle Blöcke darin ansteuerbar sind. Ein Problem stellte dabei die zum Teil geringe Abtastrate der Daten dar: Abhängig von der Anzahl an Energieintervallen der Multigruppen-Darstellung, können Fälle auftreten, bei denen in individuellen Energiegruppenintervallen keine Datenpunkte vorliegen. Dies ist in Abb. 4.43 für die Spaltneutronenausbeute von U-235 illustriert, wobei die blauen Punkte den Punktdaten der ACE-Datei entsprechen und die vertikalen Strichlinien den Energiegruppenintervallen der 56-Energiegruppenstruktur aus SCALE 6.2. In jenen Energiegruppen, in denen keine Datenpunkte vorkommen, ist es nicht möglich, eine Variation durchzuführen. Eine mögliche Lösung des Problems ist die Verwendung einer Energiegruppenstruktur mit geringerer Auflösung oder einer ACE-Datei mit einer hinreichend hohen Auflösung. Eine solche Vorgehensweise schränkt die Flexibilität der Methodik jedoch stark ein, da dies die Verwendung von verschiedenen

Energiegruppenstrukturen oder ACE-Dateien nicht möglich macht. Ein weiterer Ansatz ist die Erweiterung des Datensatzes, sodass in jedem Energiegruppenintervall mindestens ein Datenpunkt zu finden ist. Dieser Ansatz wurde für alle Reaktionen, die auf dem allgemeinen Energiegitter (*Unionized Energy Grid*) der ACE-Datei definiert sind, gewählt. Konkret wurden in jedem Energiegruppenintervall zwei zusätzliche Punkte nahe den Intervallgrenzen eingeführt und die Daten linear interpoliert. Dadurch können mithilfe dieser Datenpunkte scharfe Intervallgrenzen definiert werden. Jedoch muss die numerische Genauigkeit im ASCII-Ausgabeformat mitberücksichtigt sein, damit die Energiewerte der zusätzlich eingeführten Datenpunkte nicht überlappen.

Zusätzlich zu den Reaktionen, die auf dem allgemeinen Energiegitter definiert sind, wurde das Energiegitter der mittleren totalen Spaltausbeute auf das allgemeine Energiegitter erweitert. Von den zu variierenden Größen wurden lediglich das Spaltspektrum und die thermischen Streudaten, die sogenannten $S_{\alpha,\beta}$ -Daten, nicht mit dieser Methode erweitert. Der Grund hierfür liegt zum Teil am zweidimensionalen Charakter dieser Daten und dem dadurch stark erhöhten Aufwand, konsistente ACE-Dateien zu erzeugen. Andererseits zeigte sich auch, dass für die betrachteten Testfälle die geringe Abtastrate vom Spaltspektrum mit Regionen verschwindender Sensitivitäten und Unsicherheiten überlappt und sich die thermischen Streudaten größtenteils auf den Bereich der thermischen Energien beschränken, in dem die Diskretisierung der Energiegruppenstruktur in der Regel vergleichsweise breite Intervalle besitzt, d. h. wenig detailliert vorliegt.

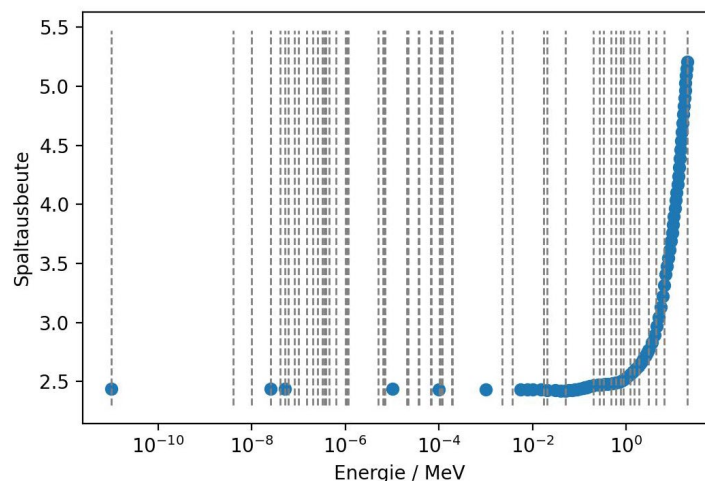


Abb. 4.43 Beispiel von ACE-Punktdaten der Spaltneutronenausbeute von U-235. Vertikale Linien entsprechen der 56-Energiegruppenstruktur

4.4.2 Intervallweise Variation der ACE-Daten

Es wird angenommen, dass die ACE-Punktdaten, die innerhalb eines Energiegruppenintervalls liegen, vollständig korreliert sind [WIL 13]. Somit können von einer Reaktion σ , z. B. der mikroskopische Spaltquerschnitt, die Datenpunkte $\vec{\sigma}_g$ innerhalb einer Energiegruppe g mit einem skalaren Variationsfaktor p multipliziert werden, um die variierten Datenpunkte $\vec{\sigma}_g'$ zu erhalten:

$$\vec{\sigma}_g' = p \vec{\sigma}_g \quad (4.1)$$

Bei einer durchgängigen Anwendung dieses Ansatzes kann es zu Inkonsistenzen kommen, da die Kovarianzen auf Energieintervallen, die ACE-Daten jedoch kontinuierlich definiert sind. Dies wird anhand des folgenden Beispiels illustriert.

In Abb. 4.44 ist die Spaltneutronenausbeute für einen kleinen Energiebereich von ca. 3,5 MeV bis 7,5 MeV abgebildet. Dabei handelt es sich bei diesem Energiebereich zwischen den beiden vertikalen Linien um die zweite Energiegruppe in der 56-Energiegruppenstruktur von SCALE 6.2. Die blauen Punkte entsprechen den originalen ACE-Datenpunkten und die orangen Punkte der Variation dieser Daten um +5 % innerhalb dieser Energiegruppe. Die verbindenden Linien stellen eine lineare Interpolation dar und entsprechen der Art und Weise, wie z. B. Serpent diese Daten interpretiert. Diese Variation beeinflusst somit auch Daten, die sich in benachbarten Energiegruppen befinden, anstatt sich auf das angesprochene Energieintervall zu beschränken. Wie aus der Darstellung weiterhin ersichtlich wird, führt dies hier für Energien größer als 6 MeV zu einer geringeren Variation der Daten im Vergleich zur idealen Variation, die mit der grünen Kurve illustriert wird.

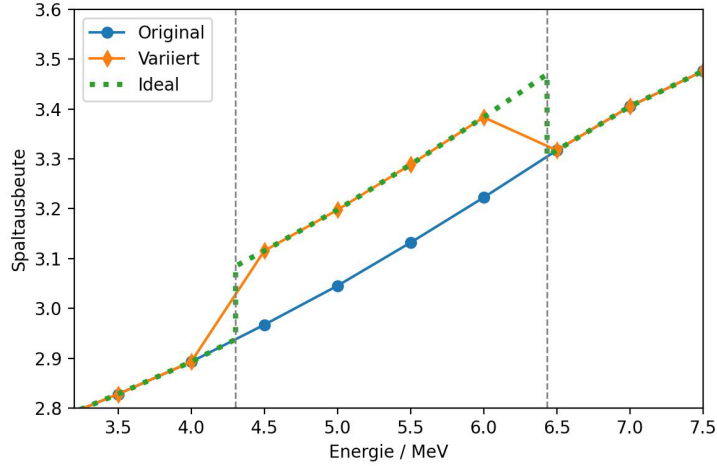


Abb. 4.44 Illustration einer angebrachten Variation an punktwisen ACE-Daten innerhalb eines Energiegruppenintervalls

Eine Möglichkeit, die Anbringung der intervallweisen Variation zu verbessern, ist die Einführung von zusätzlichen Datenpunkten an den Intervallgrenzen, um eine möglichst ideale Variation zu erreichen. Dies wird bereits für Reaktionen, die auf dem allgemeinen Energiegitter beruhen, durchgeführt. Eine andere Möglichkeit ist, den Variationsparameter p näherungsweise zu korrigieren. In unserem Ansatz wird auf Basis der idealen Variation zunächst der mittlere Funktionswert innerhalb der zu variierenden Energiegruppe bestimmt. Dies wird durch die Einführung von Pseudodatenpunkten an den Intervallgrenzen erreicht. Der mittlere ideale Funktionswert $\bar{f}_{id}$ wird anschließend über die Fläche und die Intervallbreite bestimmt. Zur Berechnung der idealen Fläche A_{id} wird die Trapezregel /GEL 03/ angewandt. Somit lautet der ideale mittlere Funktionswert:

$$\bar{f}_{id} = \frac{1}{x^{up} - x^{low}} A_{id}, \quad (4.2)$$

wobei x^{up} und x^{low} den Energiewerten der oberen und unteren Intervallgrenze entsprechen. Der mittlere Funktionswert $\bar{f}$, der aufgrund der Variation der tatsächlich vorhandenen Datenpunkte entsteht, kann analog berechnet werden, wobei $\hat{p}$ der korrigierte Variationsparameter ist und die Punkte 0 und N die einschließenden Punkte in den benachbarten Energiegruppenintervallen bezeichnen:

$$\bar{f} = \frac{1}{2(x_N - x_0)} \left((x_1 - x_0)(f(x_0) + \hat{p}f(x_1)) + \sum_{i=1}^{N-2} (x_{i+1} - x_i)(f(x_i) + f(x_{i+1})) + (x_N - x_{N-1})(\hat{p}f(x_{N-1}) + f(x_N)) \right). \quad (4.3)$$

Durch das Gleichsetzen der beiden Gleichungen und Auflösen nach $\hat{p}$ erhält man den korrigierten Variationsparameter.

Da für Reaktionen, deren Daten auf dem allgemeinen Energiegitter beruhen, bereits durch die Modifikation der Energiegitterdaten, also dem Hinzufügen zusätzlicher Datenpunkte an den Intervallgrenzen, eine deutliche Verbesserung erzielt werden konnte, wird der korrigierte Variationsparameter lediglich für das Spaltspektrum und die $S_{\alpha,\beta}$ -Daten angewandt. Des Weiteren ist dieser Ansatz numerisch sehr aufwendig. Vergleichsrechnungen mit TSUNAMI aus SCALE 6.2 zeigen eine deutliche Verbesserung gegenüber der unkorrigierten Variation auf.

Zusätzlich müssen für eine konsistente Variation der Wirkungsquerschnittsdaten die Summenregeln beachtet werden. In Abb. 4.45 ist ein Baumdiagramm verschiedener neutroneninduzierter Reaktionen eines Nuklids dargestellt. So setzt sich zum Beispiel der totale Wirkungsquerschnitt aus der Summe des elastischen und des nicht elastischen Wirkungsquerschnitts zusammen. Wenn Variationen am elastischen Wirkungsquerschnitt angebracht werden, so müssen diese Änderungen auch für den totalen Wirkungsquerschnitt übernommen werden. Analog verhält sich diese Relation in die andere Richtung, sodass Variationen an einer Reaktion an deren abhängigen partiellen Reaktionen weitergegeben werden müssen.

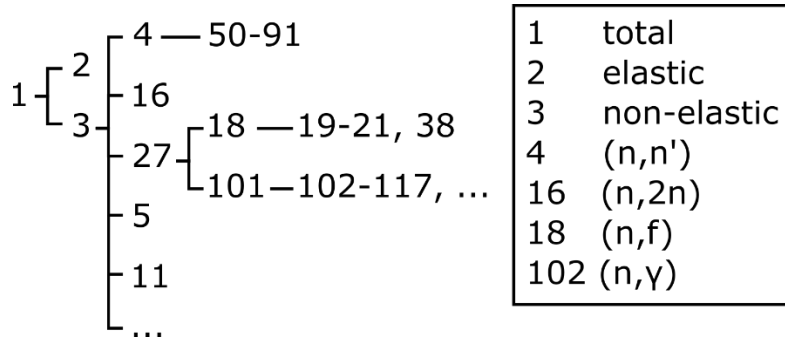


Abb. 4.45 Baumdiagramm zur Illustration der Summenregeln für verschiedene neutroneninduzierte Reaktionen eines Nuklids

Diese Summenregeln lassen sich nicht für die mittlere totale Spaltneutronenausbeute (MT = 452) und das Spaltspektrum (MT = 1018) anwenden. Jedoch wird in der aktuellen Implementierung lediglich die mittlere totale Spaltneutronenausbeute variiert. Die Variation der verzögerten und prompten Neutronen wird im Moment nicht durchgeführt. Beim Spaltspektrum wiederum handelt es sich im Grunde um zweidimensionale Daten, die für einlaufende und auslaufende Teilchenenergien parametrisiert sind. Für jede einlaufende Teilchenenergie liegt ein Energiegitter der auslaufenden Teilchen, eine Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion und eine kumulierte Verteilungsfunktion vor: $\mathbf{f} = [f_1, \dots, f_G]$, $\mathbf{c} = [c_1, \dots, c_G]$, wobei die Indizierung den Gitterpunkten der auslaufenden Energien entspricht. Nach Anbringung der Variationen ändert sich die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $\mathbf{f}' = [f'_1, \dots, f'_G]$, mit der Änderung $\Delta \mathbf{f} = \mathbf{f}' - \mathbf{f}$. Somit lautet die Änderung der kumulierten Verteilungsfunktion $\Delta \mathbf{c} = [\Delta f_1 \Delta E_1, \Delta f_1 \Delta E_1 + \Delta f_2 \Delta E_2, \dots, \sum_{i=1}^G \Delta f_i \Delta E_i] = [\Delta c_1, \dots, \Delta c_G]$ und folglich die kumulierte Verteilungsfunktion $\mathbf{c}' = \mathbf{c} + \Delta \mathbf{c}$. Letztendlich müssen die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion und eine kumulierte Verteilungsfunktion normiert werden, sodass $\mathbf{f}' \rightarrow \mathbf{f}' / (c_G + \Delta c_G)$ und $\mathbf{c}' \rightarrow \mathbf{c}' / (c_G + \Delta c_G)$. Wie bereits erwähnt, können diese Verteilungen für mehrere einlaufende Teilchenenergien vorliegen. Da die Kovarianzdaten für MT = 1018 oft sehr limitiert gegeben sind, werden für alle einlaufenden Teilchenenergien dieselben Variationen verwendet. Zusätzlich setzen wir hier voraus, dass die Spaltspektren mit dem sogenannten Gesetz 4 (siehe /CON 19/) abgebildet werden. Für andere Gesetze wird in der aktuellen Implementierung keine Variation des Spaltspektrums vorgenommen und lediglich eine Warnung ausgegeben.

4.4.3 XSUSA-CE Befehlszeilenschnittstelle

Um eine einheitliche und einfache Anwendung von XSUSA-CE zu ermöglichen, wurden eine Befehlszeilenschnittstelle (engl. *Command Line Interface*, CLI) und die Verwendung einer Eingabedatei, die Parameter für die verschiedenen Funktionen von XSUSA-CE enthält, implementiert. Die Schnittstelle wird verwendet, um mit XSUSA-CE

- 1) variierte ACE-Dateien zu generieren (CLI-Befehl `writeAce`),
- 2) Transportrechnungen mit dem Monte-Carlo-Code Serpent zu starten (CLI-Befehl `runContEnergy`), und
- 3) Ergebnisse der Transportrechnungen statistisch zu analysieren (CLI-Befehl `uncertaintyContEnergy`).

XSUSA-CE kann als Python-Paket installiert und mit dem Befehl `xsusa command [options]` ausgeführt werden. Die Parameter werden in einer Eingabedatei definiert, die über das optionale Argument `--input` angegeben wird, z. B.: `xsusa writeAce -input <path/name>`.

Der CLI-Befehl `writeAce` verwendet die mit XSUSA generierten Variationsparameter, um die veränderten ACE-Dateien zu erstellen. Für diesen Befehl werden die folgenden Parameter in der Eingabedatei angegeben, wobei nur die ersten zwei erforderlich und die restlichen optional sind:

1. `aceTablesFile`: Datei mit Pfadangaben zu nominalen ACE-Dateien,
2. `outputDir`: Verzeichnis, in dem variierte ACE-Dateien gespeichert werden,
3. `nuclideReactionsFile`: Datei mit Angabe von Nuklid-Reaktionspaaren, um Variation auf ausgewählte Nuklidreaktionen einzuschränken,
4. `serpentXsdataFile`: Verzeichnis, in dem Dateien abgelegt werden, die Pfadangaben zu den variierten ACE-Dateien enthalten,
5. `nProcesses`: Anzahl der parallelen Prozesse zur Variation der ACE-Dateien.

Der CLI-Befehl `runContEnergy` führt die Serpent-Transportrechnungen auf Basis der variierten Wirkungsquerschnittsdaten durch. Dabei kann der Anwender für das Monte-Carlo-Verfahren der Transportrechnungen entweder eine identische oder verschiedene Startzufallszahlen wählen. Bei Bedarf können die nicht erfolgreich abgeschlossenen Transportrechnungen wiederholt werden. Dafür wurde der Aufruf mit der

Option `--restart` ausgestattet. Der Anwender kann in der Eingabedatei bestimmen, für welche Variationen der Stichprobe die Rechnungen zu wiederholen sind.

Die Parameter, die für den `runContEnergy`-Befehl in der Eingabedatei stehen müssen, lauten:

1. `method`: Wahl, ob identische Startzufallszahl oder verschiedene Startzufallszahlen für die zu rechnende Stichprobe verwendet werden sollen,
2. `samples`: Liste mit Variationen, für die Transportrechnungen durchgeführt werden sollen,
3. `resultDirectory`: Verzeichnis, in dem die Ergebnisse der Transportrechnungen gespeichert werden,
4. `aceFilesDirectory`: Verzeichnis, in dem die variierten ACE-Dateien gespeichert sind,
5. `nominalInputDirectory`: Verzeichnis mit nominaler Serpent-Eingabedatei,
6. `mainInputName`: Name der Serpent-Eingabedatei,
7. `submitCommand`: Befehl zum Einreichen des Simulationsjobs auf den Rechencluster,
8. `jobScript`: Pfad zum Job-Skript für die Durchführung der Simulation auf dem Rechencluster,
9. `seed`: Liste von Startzufallszahlen; falls nicht angegeben, werden Startzufallszahlen automatisch generiert.

Diese Parameter ermöglichen es, die Monte-Carlo-Transportrechnungen mit den gewünschten Einstellungen und Eingabedateien auf dem Rechencluster durchzuführen.

Nach erfolgreicher Durchführung der Transportrechnungen kann die Stichprobe statistisch analysiert werden. Dafür steht dem Anwender der CLI-Befehl `uncertaintyContEnergy` zur Verfügung. Dabei werden der Mittelwert und die Standardabweichung vom Mittelwert samt deren Konfidenzintervalle für die vom Anwender geforderte Ergebnisvariable der Transportrechnung berechnet. Falls bei der Analyse in manchen Variationen der Stichprobe die geforderte Ergebnisvariable nicht gefunden wird, werden die entsprechenden Variationen zunächst aus der Analyse ausgelassen. Der Anwender wird darüber informiert und kann nach Bedarf die abgebrochenen Rechnungen wiederholen. Erforderliche Parameter für den CLI-Befehl `uncertaintyContEnergy` sind

1. `sampleSize`: Anzahl der zu analysierenden Variationen,
2. `resultDirectory`: Pfad zum Verzeichnis mit den Simulationsergebnissen,
3. `outputFilename`: Name der zu analysierenden Serpent-Ausgabedatei,
4. `propertyName`: Name der zu analysierenden Ergebnisvariablen.

4.4.4 Testrechnungen auf Basis direkter Variation der nuklearen Daten

Um den Ansatz zur Variation auf seine korrekte Implementierung hin zu untersuchen, wurden Testrechnungen mittels direkter Variation (engl. *Direct Perturbation*, DP) der nuklearen Daten durchgeführt und mit Referenzrechnungen verglichen. Bei den berechneten Testfällen handelt es sich um Godiva, eine hochangereicherte U-235-Metallkugel, Jezebel, eine hochangereicherte Pu-239-Metallkugel, LEU-SOL-THERM-002, eine niedrigangereicherte U-235-Lösung in Wasser /NEA 19a/, und um die TMI-1-Brennstabzelle /IVA 16/ mit U-235 als Brennstoff, Zircaloy als Hüllrohrmaterial und Wasser als Moderator. Dabei wurde die Sensitivität des Multiplikationsfaktors k_{eff} bezüglich folgender Reaktionen untersucht: der elastische Wirkungsquerschnitt (n, n) , der inelastische Wirkungsquerschnitt (n, n') , der Spaltwirkungsquerschnitt (n, f) , Neutroneneinfang mit Strahlungsemission (n, γ) , die totale mittlere Spaltneutronenausbeute ν und das Spaltspektrum χ . Die Testfälle und die variierten Reaktionen sind in Tab. 4.12 zusammengefasst.

Tab. 4.12 Betrachtete Nuklid-Reaktions-Variationen der Testfälle

Testfälle	(n, n)	(n, n')	(n, f)	(n, γ)	ν	χ
Godiva	U-235	U-235	U-235	U-235	U-235	U-235
Jezebel	Pu-239	Pu-239	Pu-239		Pu-239	Pu-239
LEU-SOL-THERM-002	H-1			U-238	U-235	U-235
TMI-Brennstab	H-1			U-238	U-235	U-235

Im Rahmen der direkten Variation der Reaktionsparameter wird die Sensitivität von k_{eff} aufgrund einer Variation in der Energiegruppe g wie folgt bestimmt:

$$S_k = \frac{\sigma}{k} \frac{dk}{d\sigma} = \frac{\sigma}{k(\sigma)} \frac{k(\sigma^+) - k(\sigma^-)}{\sigma^+ - \sigma^-}. \quad (4.4)$$

Unter Verwendung der 56-Energiegruppenstruktur von SCALE 6.2 bedeutet dies 113 einzelne MC-Simulationen. Eine Simulation wird für die Berechnung des ungestörten k durchgeführt, bei den übrigen 112 Simulationen wird jeweils in einer Energiegruppe die Reaktion um $\pm 5\%$ variiert. Die erhaltenen Sensitivitätsprofile werden mit Referenzrechnungen verglichen. Konkret handelt es sich bei den Referenzcodes um TSUNAMI aus SCALE 6.2 /WIL 08/ und Serpent /AUF 15/. In Abb. 4.46 bis Abb. 4.66 sind die Sensitivitätsprofile der verschiedenen Testfälle und Reaktionen gezeigt. Die Fehlerbalken der XSUSA-CE-Rechnungen ergeben sich aufgrund der statistischen Unsicherheiten des Neutronenmultiplikationsfaktors der MC-Rechnungen und werden anschließend mittels Gaußscher Fehlerfortpflanzung für die Sensitivitätskoeffizienten berechnet.

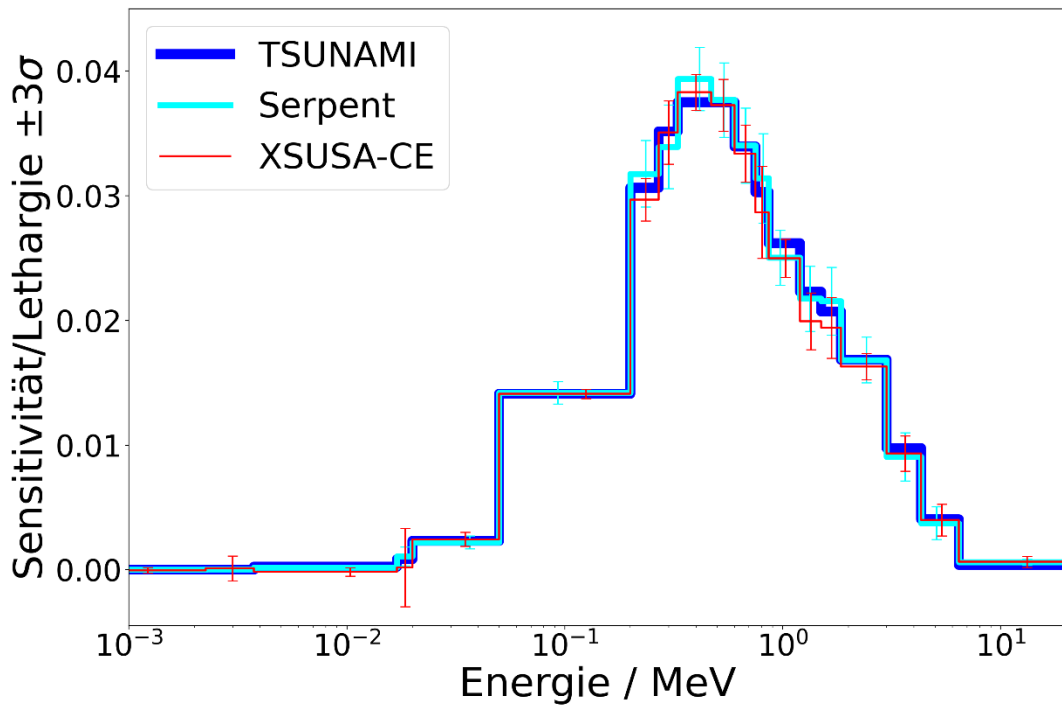


Abb. 4.46 Sensitivitätsprofile von k_{eff} für die elastische Streuung (n, n) von Neutronen in U-235 für den Testfall Godiva

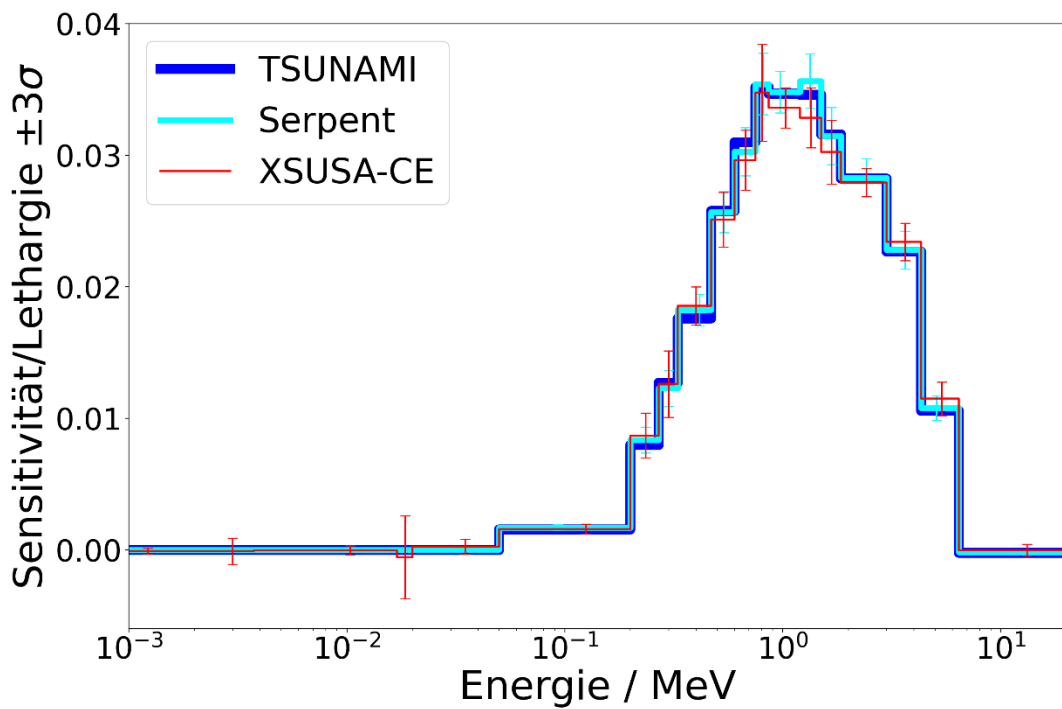


Abb. 4.47 Sensitivitätsprofile von k_{eff} für die inelastische Streuung (n, n') von Neutronen in U-235 für den Testfall Godiva

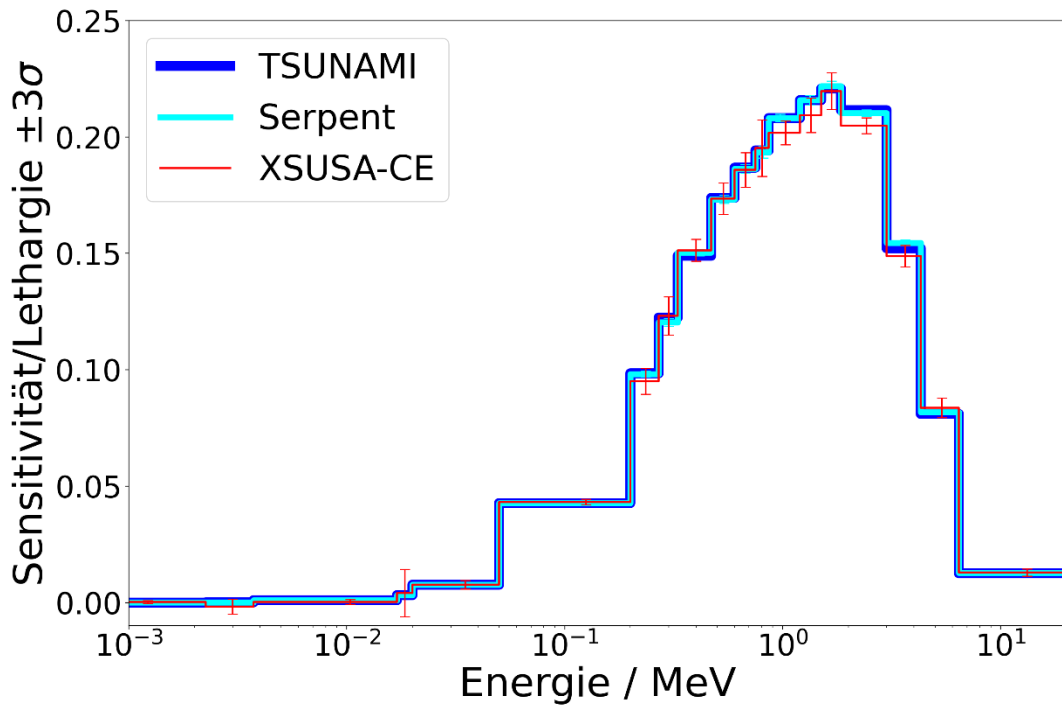


Abb. 4.48 Sensitivitätsprofile von k_{eff} für den Spaltwirkungsquerschnitt (n, f) von U-235 für den Testfall Godiva

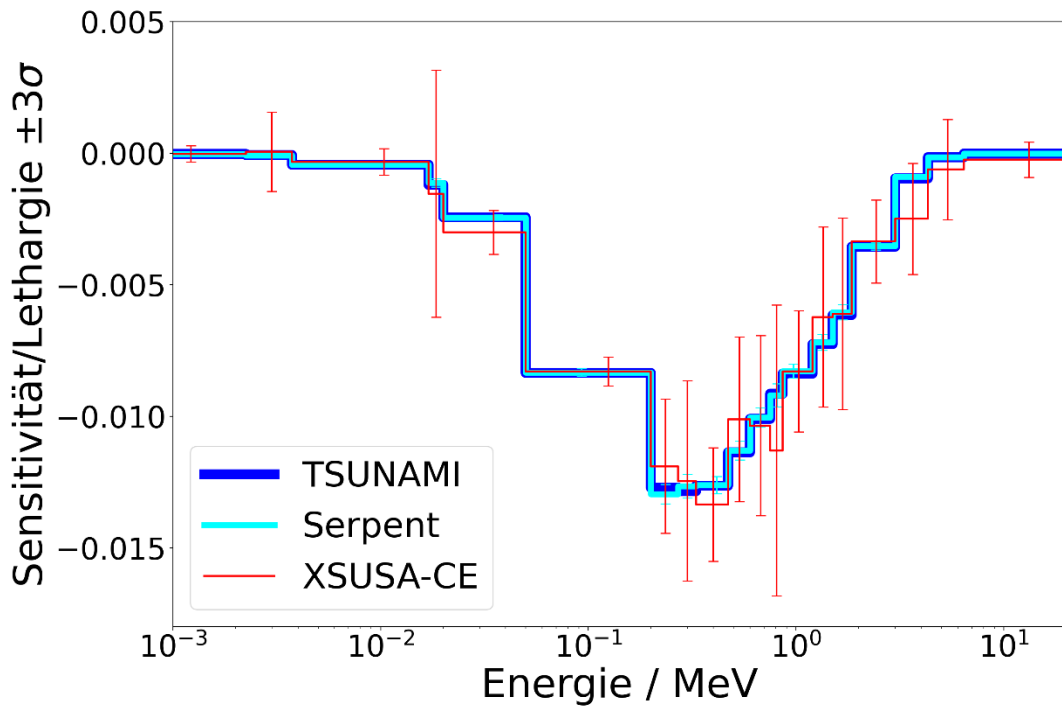


Abb. 4.49 Sensitivitätsprofile von k_{eff} für die (n, γ)-Reaktion in U-235 für den Testfall Godiva

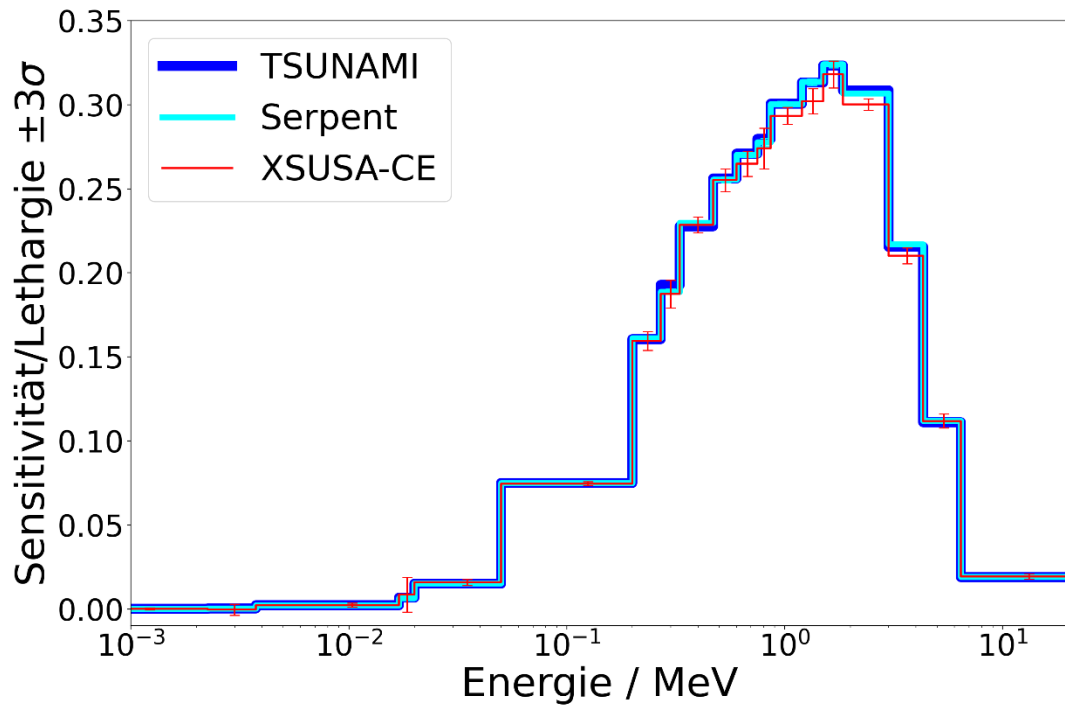


Abb. 4.50 Sensitivitätsprofile von k_{eff} für die Spaltneutronenausbeute von U-235 für den Testfall Godiva

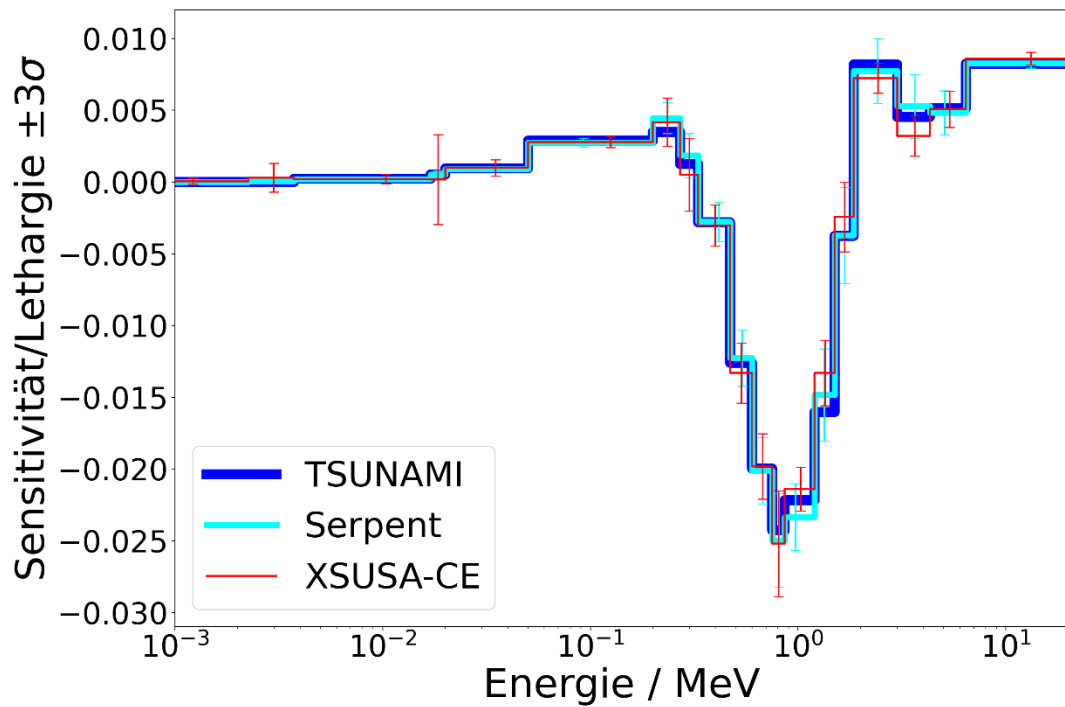


Abb. 4.51 Sensitivitätsprofile von k_{eff} für das Spaltspektrum von U-235 für den Testfall Godiva

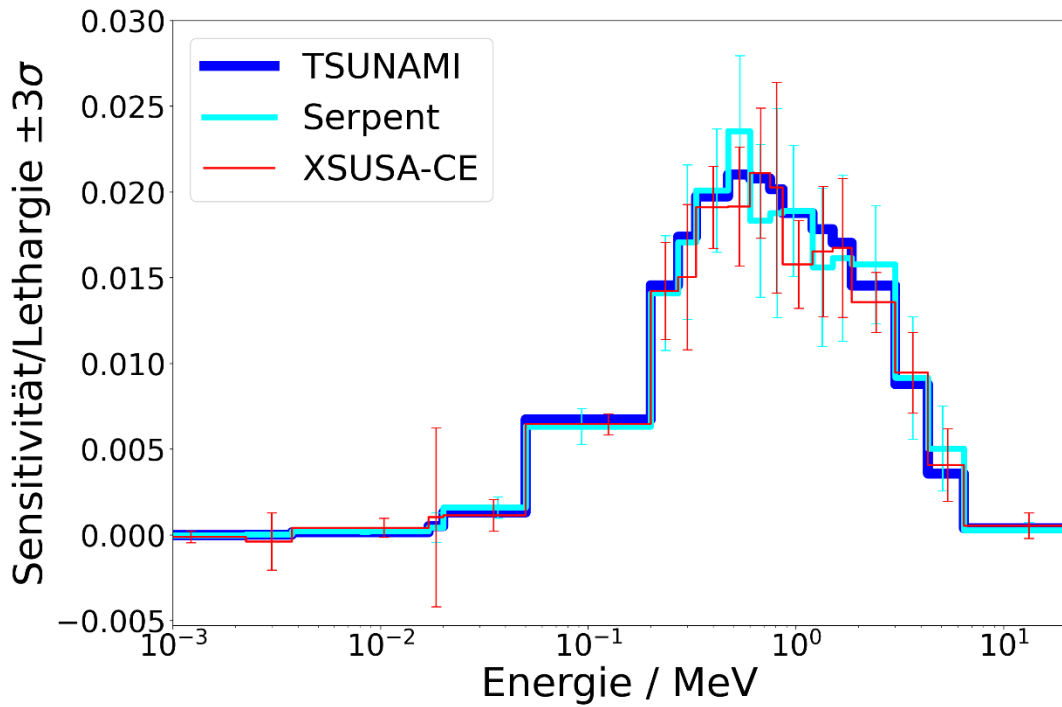


Abb. 4.52 Sensitivitätsprofile von k_{eff} für die elastische Streuung (n, n) von Neutronen in Pu-239 für den Testfall Jezebel

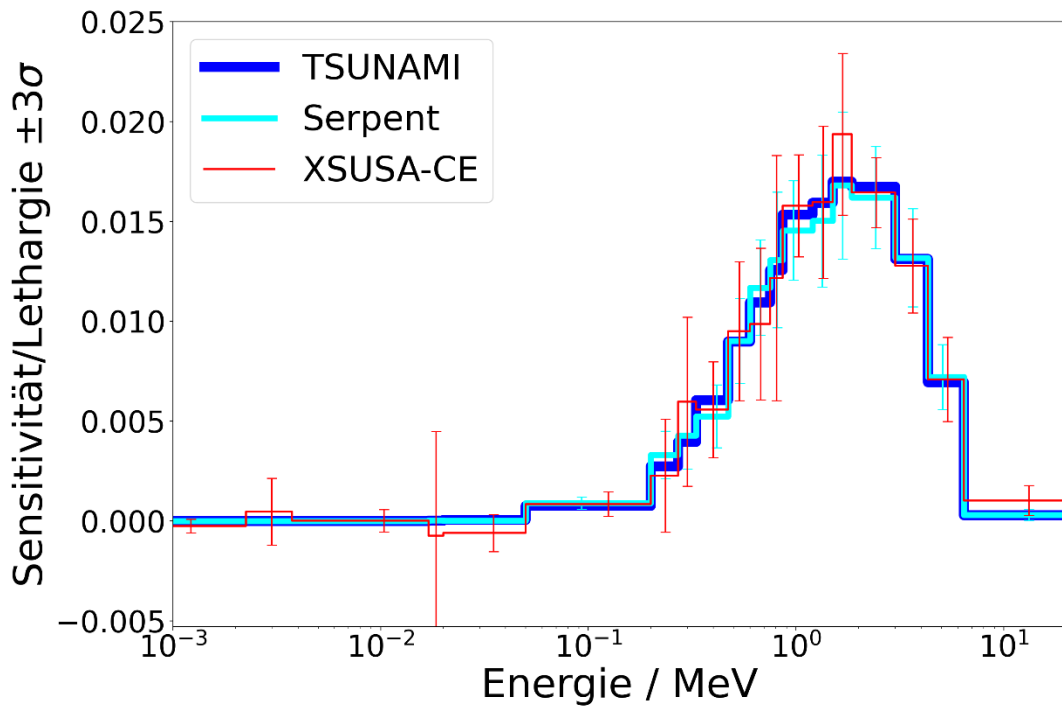


Abb. 4.53 Sensitivitätsprofile von k_{eff} für die inelastische Streuung (n, n') von Neutronen in Pu-239 für den Testfall Jezebel

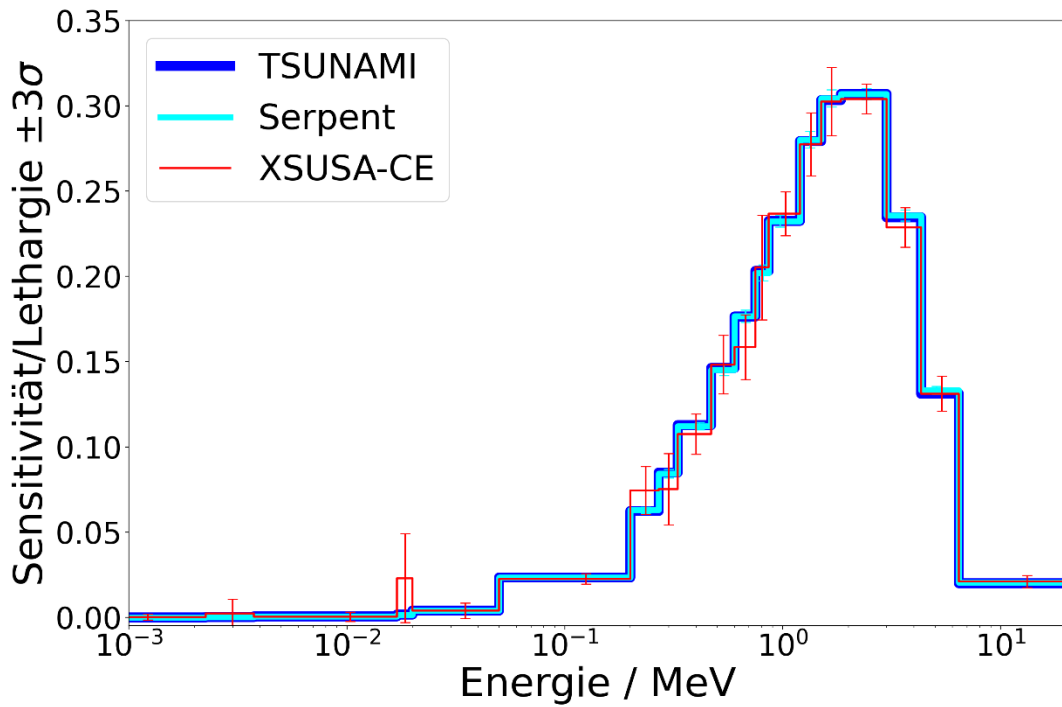


Abb. 4.54 Sensitivtsprofile von k_{eff} fr den Spaltwirkungsquerschnitt (n, f) von Pu-239 fr den Testfall Jezebel

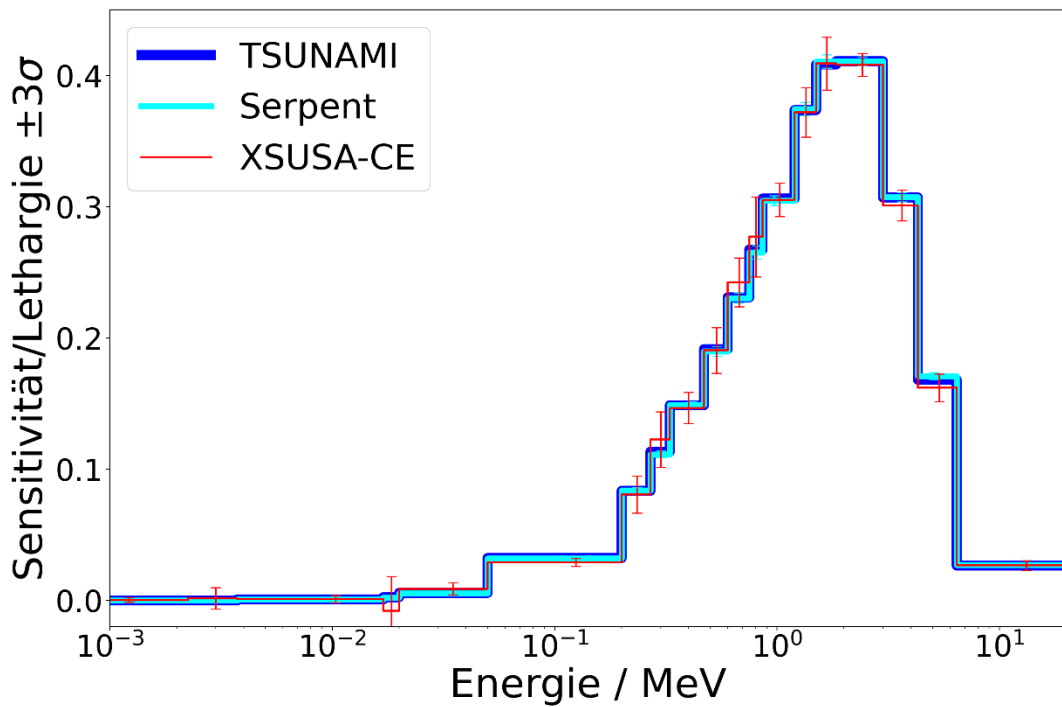


Abb. 4.55 Sensitivtsprofile von k_{eff} fr die Spaltneutronenausbeute von Pu-239 fr den Testfall Jezebel

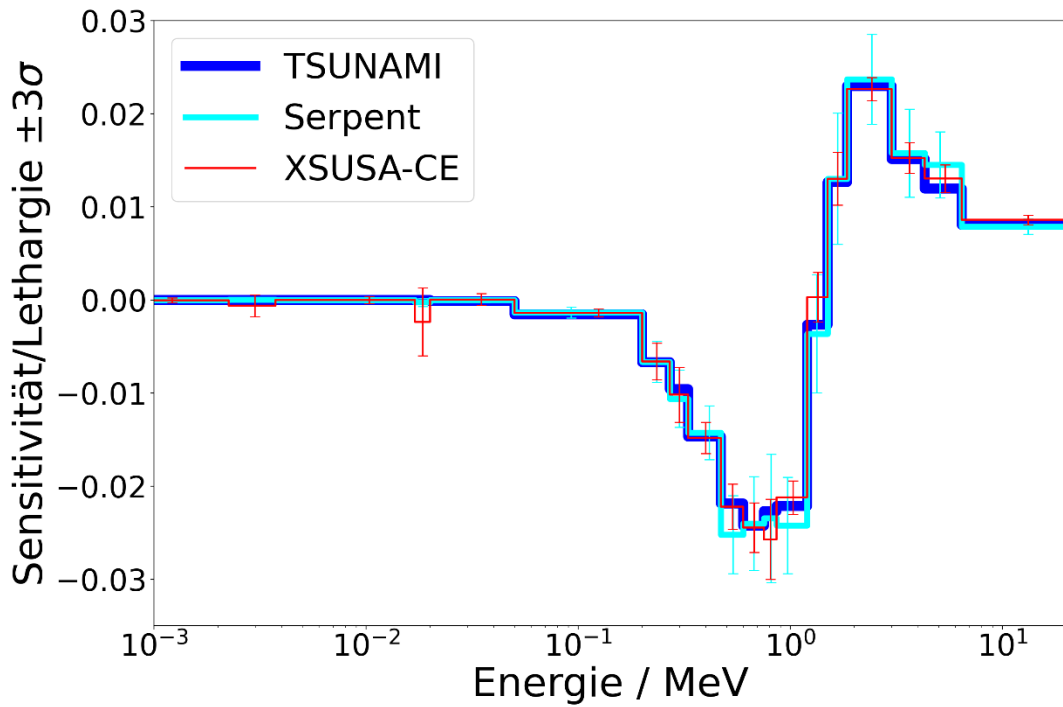


Abb. 4.56 Sensitivitätsprofile von k_{eff} für das Spaltspektrum von Pu-239 für den Testfall Jezebel

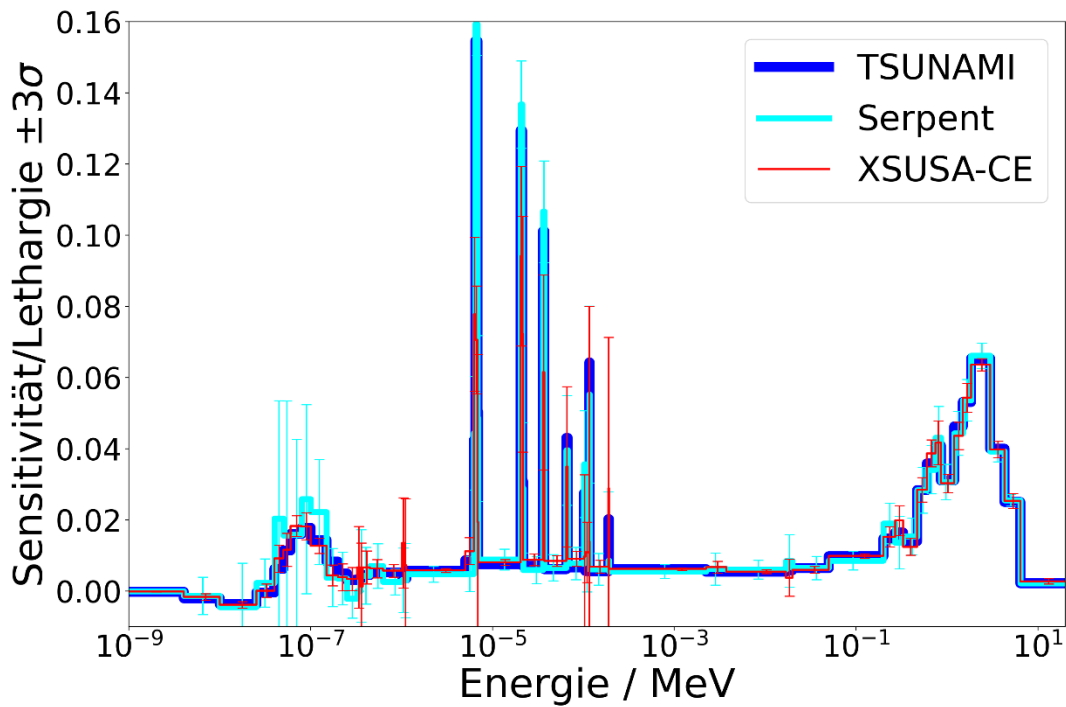


Abb. 4.57 Sensitivitätsprofile von k_{eff} für die elastische Streuung (n, n) von Neutronen in H-1 für die UO₂-Lösung in LEU-SOL-THERM-002

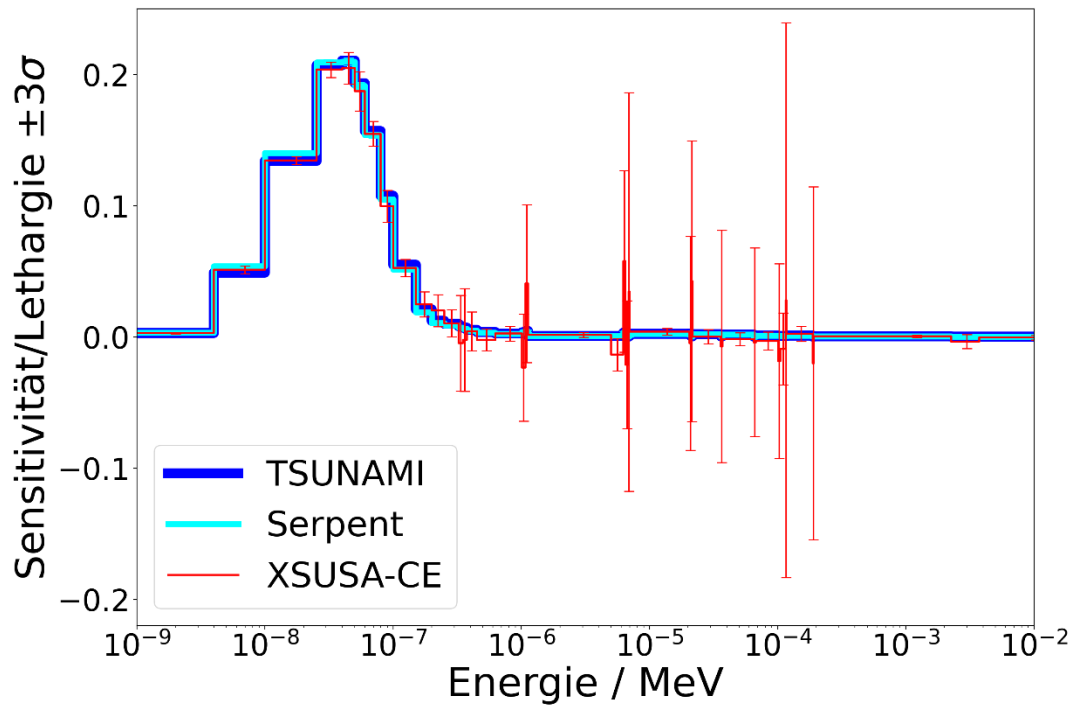


Abb. 4.58 Sensitivitätsprofile von k_{eff} für den Spaltwirkungsquerschnitt (n, f) von U-235 für die UO_2 -Lösung in LEU-SOL-THERM-002

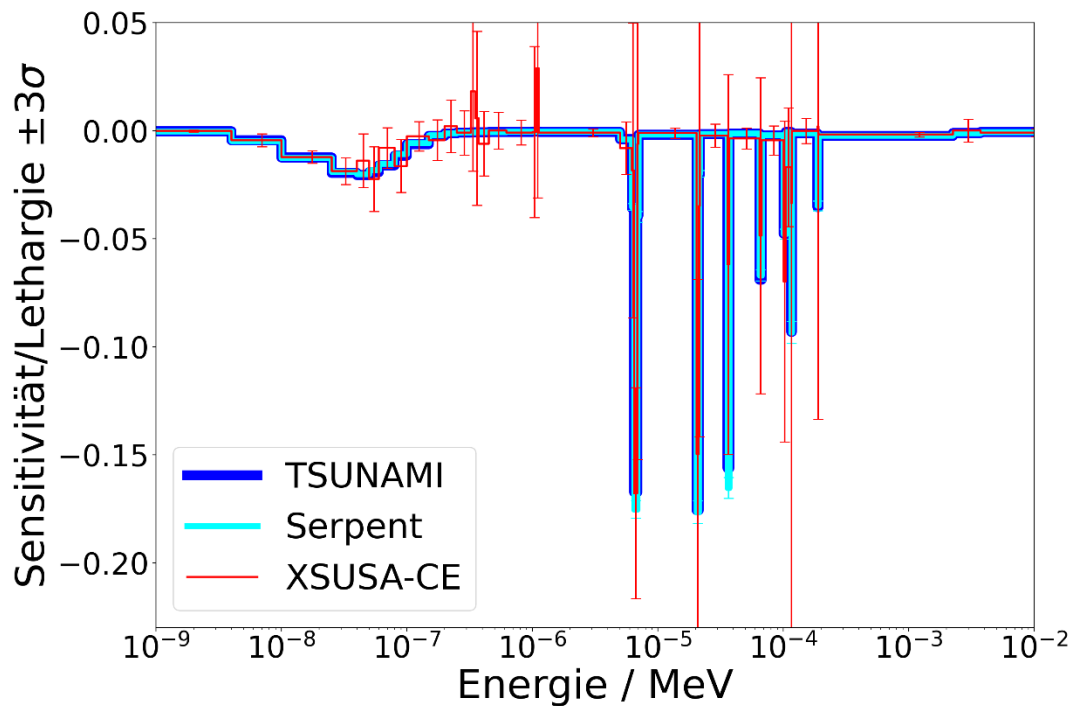


Abb. 4.59 Sensitivitätsprofile von k_{eff} für die (n, γ)-Reaktion in U-238 für die UO_2 -Lösung in LEU-SOL-THERM-002

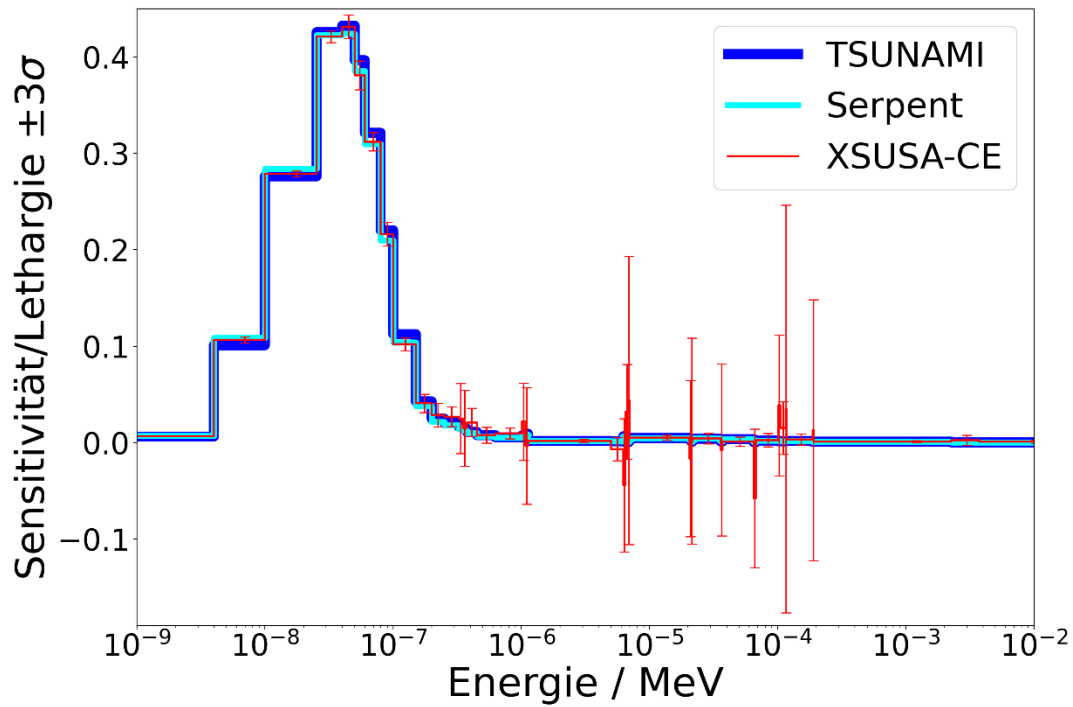


Abb. 4.60 Sensitivitätsprofile von k_{eff} für die Spaltausbeute von U-235 für die UO_2 -Lösung in LEU-SOL-THERM-002

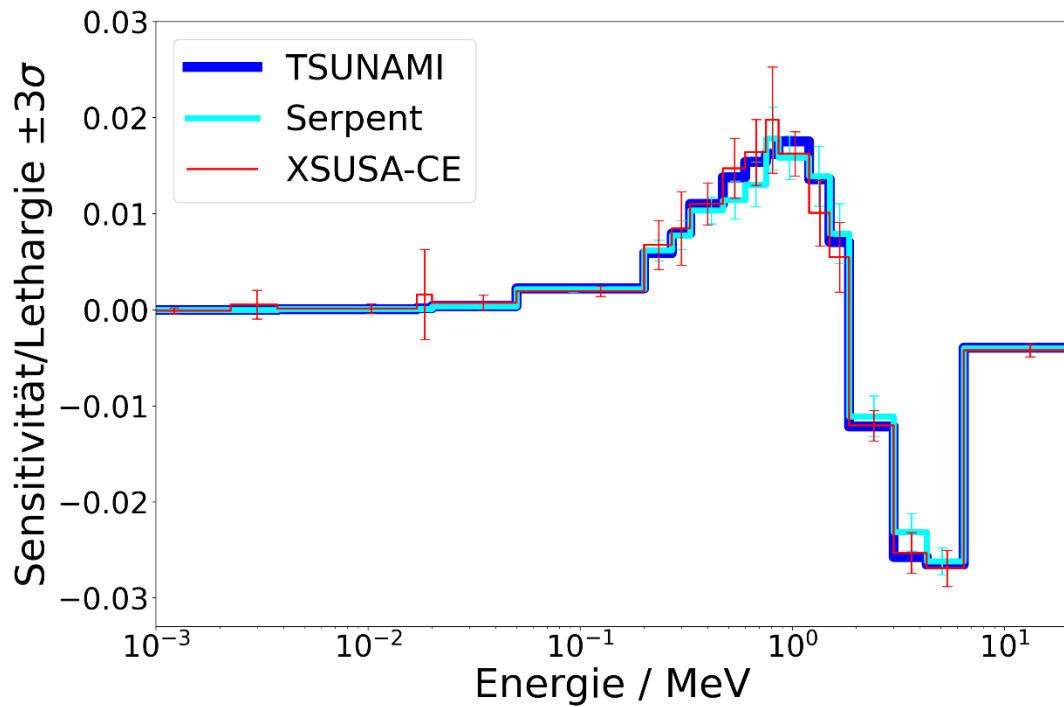


Abb. 4.61 Sensitivitätsprofile von k_{eff} für das Spaltspektrum von U-235 für die UO_2 -Lösung in LEU-SOL-THERM-002

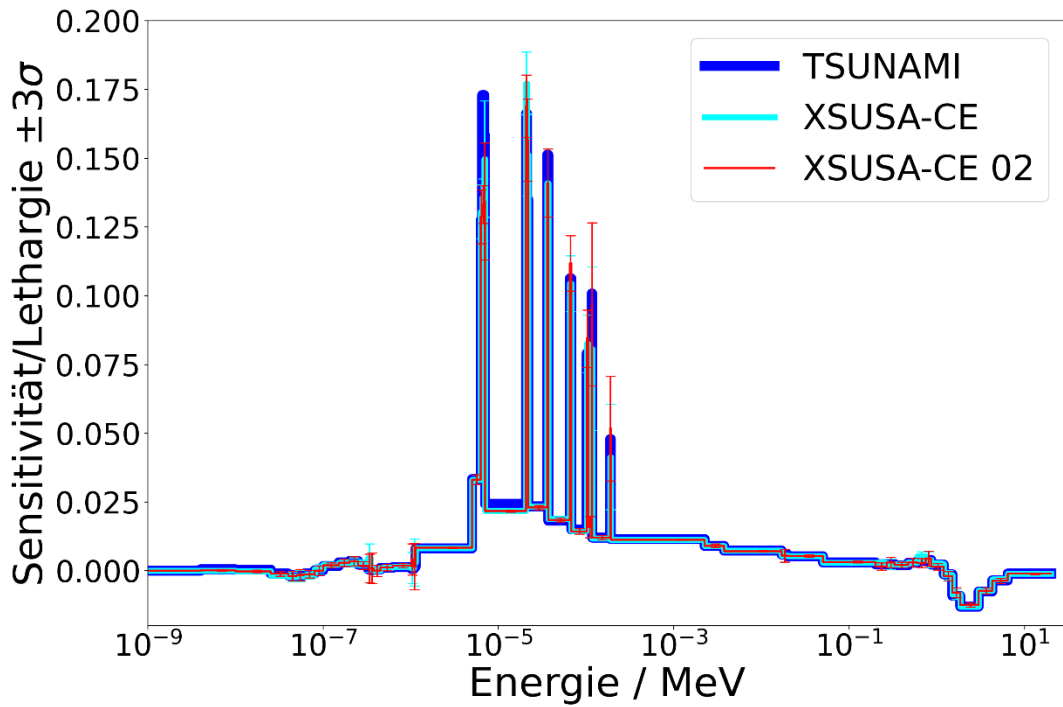


Abb. 4.62 Sensitivitätsprofile von k_{eff} für die elastische Streuung (n, n) von Neutronen in H-1 für die TMI-1-Brennstabzelle

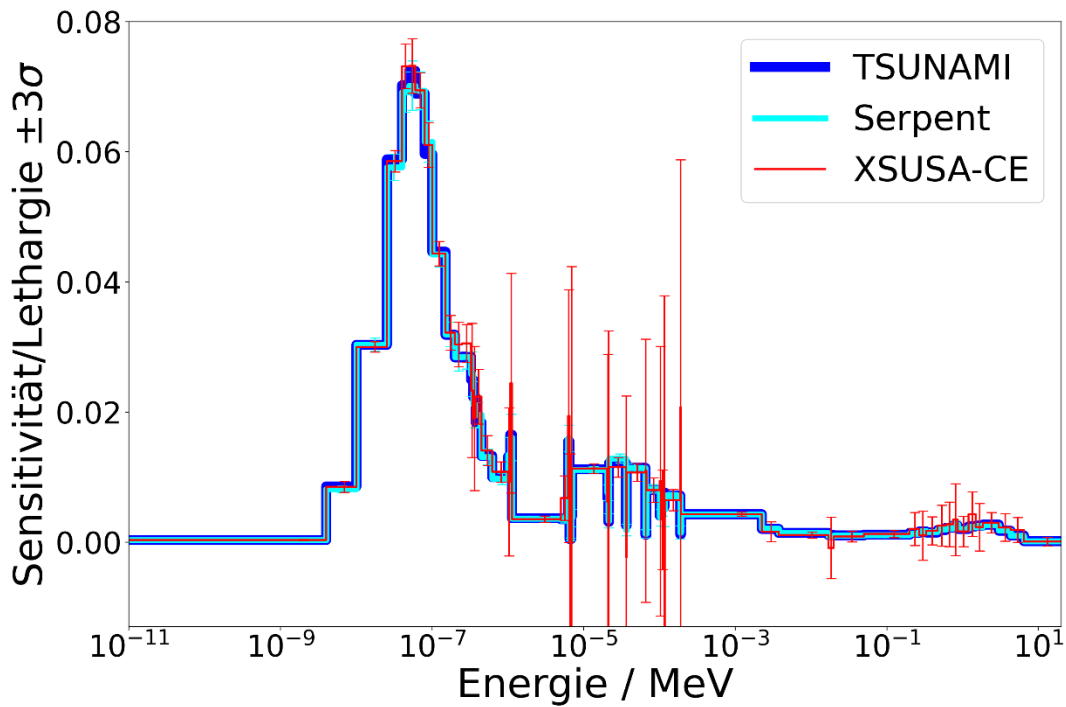


Abb. 4.63 Sensitivitätsprofile von k_{eff} für den Spaltwirkungsquerschnitt (n, f) von U-235 für die TMI-1-Brennstabzelle

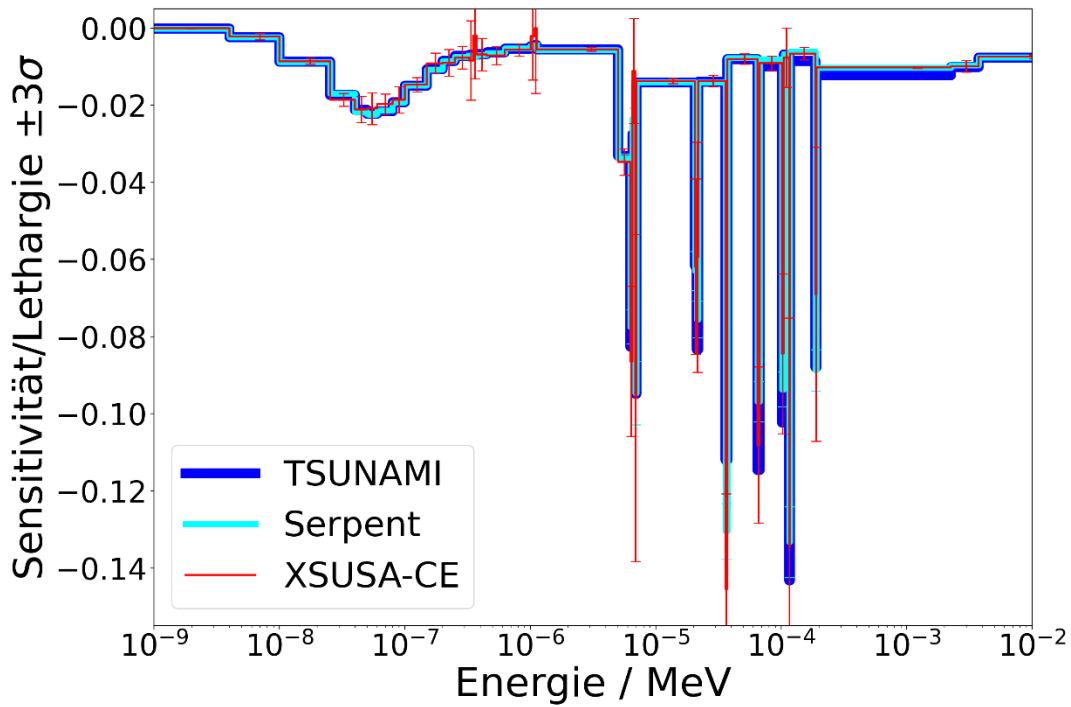


Abb. 4.64 Sensitivitätsprofile von k_{eff} für die (n, γ) -Reaktion in U-238 für die TMI-1-Brennstabzelle

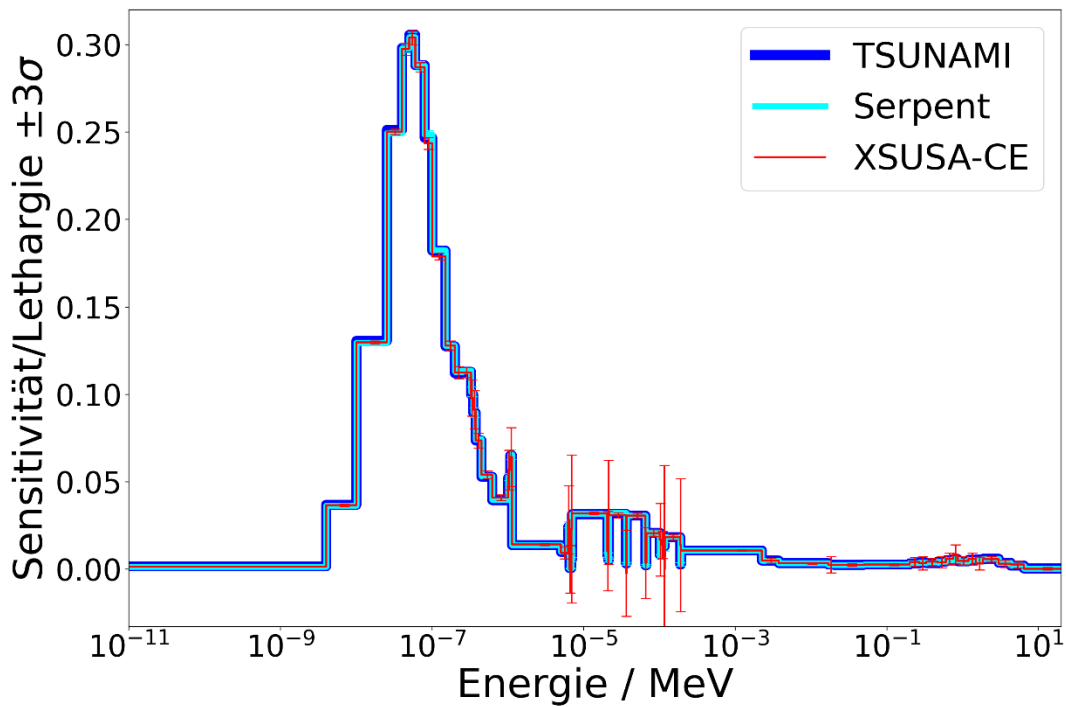


Abb. 4.65 Sensitivitätsprofile von k_{eff} für die Spaltausbeute von U-235 für die TMI-1-Brennstabzelle

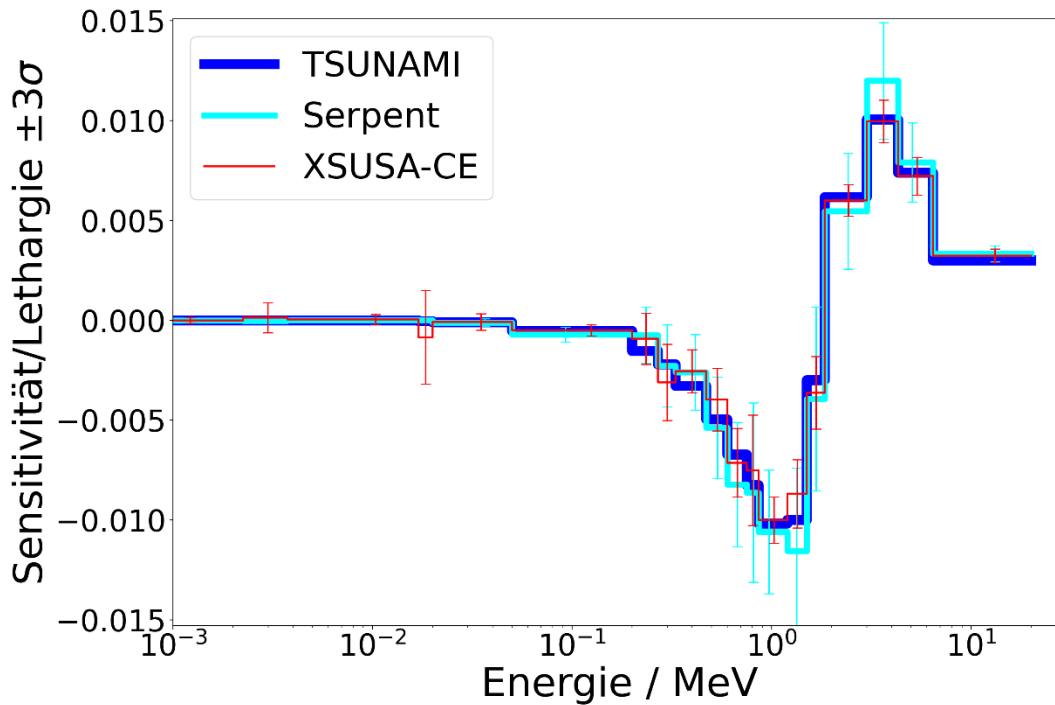


Abb. 4.66 Sensitivitätsprofile von k_{eff} für das Spaltspektrum von U-235 für die TMI-1-Brennstabzelle

Die erhaltenen Sensitivitätsprofile stimmen bis auf zwei Ausnahmen mit den Referenzergebnissen im Rahmen der Fehlergrenzen überein.

Für die elastische Streuung (n, n) von Neutronen an Wasserstoff bei thermischen Systemen wie der betrachteten Brennstabzelle oder der Uranlösung wird im Resonanzbereich unter 10^{-5} MeV systematische Abweichungen vom TSUNAMI- als auch vom Serpent-Referenzergebnis beobachtet. Der Grund hierfür ist, dass für thermische Systeme der für die XSUSA-CE-Methodik verwendete MC-Code Serpent im thermischen Energiebereich Stichproben des elastischen Wirkungsquerschnitts von den $S_{\alpha, \beta}$ -Daten zieht. Die $S_{\alpha, \beta}$ -Daten werden jedoch, wie bereits zuvor beschrieben, nicht erweitert, sodass es vorkommen kann, dass manche Energiegruppen-Intervalle keine Datenpunkte enthalten. Da in diesen konkreten Beispielen die thermischen Streudaten von in Wasser gebundenem Wasserstoff bis zu einem Energiebereich von ca. 10^{-5} MeV vorliegen, gibt es in diesem Energiebereich einige Energiegruppenintervalle, die ohne Datenpunkte vorliegen und somit zu falschen Sensitivitätskoeffizienten in den jeweiligen und den benachbarten Energieintervallen führen.

Des Weiteren wird beobachtet, dass für den Neutroneneinfang mit Strahlungsemission (n, γ) in U-238 für das Testbeispiel der TMI-1-Brennstabzelle eine systematische

Abweichung der XSUSA-CE-Ergebnisse von den TSUNAMI-Ergebnissen auftritt. Die mit Serpent erhaltenen Sensitivitätsprofile entsprechen den mit der XSUSA-CE-Methodik gefundenen Werten. Aufgrund der gewählten Normierung der Sensitivitätsprofile ist diese Abweichung in Abb. 4.64 optisch kaum ersichtlich. Die Abweichung beschränkt sich auf ein einziges Energiegruppenintervall im Bereich zwischen 10^{-4} MeV und 10^{-3} MeV. Die genaue Ursache dieser Abweichung von den TSUNAMI-Ergebnissen ist unbekannt.

Inwiefern sich die gefundenen Abweichungen in den Sensitivitätskurven auf die Unsicherheiten auswirken, wurde in weiterführenden Arbeiten untersucht. Dafür wurden die entwickelte Methodik an die bereits bestehende Schnittstelle von XSUSA angebunden und Testrechnungen zur Bestimmung der Unsicherheiten des Multiplikationsfaktors k_{eff} durchgeführt.

4.4.5 Testrechnungen zur Bestimmung von Unsicherheiten

Um die Unsicherheiten in Ergebnisgrößen aufgrund von Unsicherheiten in den nuklearen Daten zu bestimmen, wurde die Methodik zur Variation von Wirkungsquerschnitten in kontinuierlicher Energiedarstellung an die mit XSUSA erzeugten Störungsvektoren p gekoppelt. Der Programmablauf einer solchen Rechnung ist in Abb. 4.67 dargestellt. Mit XSUSA wird zunächst mithilfe von Kovarianzdaten ein Satz an Störungsvektoren erzeugt. Die Störungsvektoren werden mithilfe von XSUSA-CE an die originalen ACE-Daten angebracht und ein Satz an variierten ACE-Bibliotheken erzeugt.

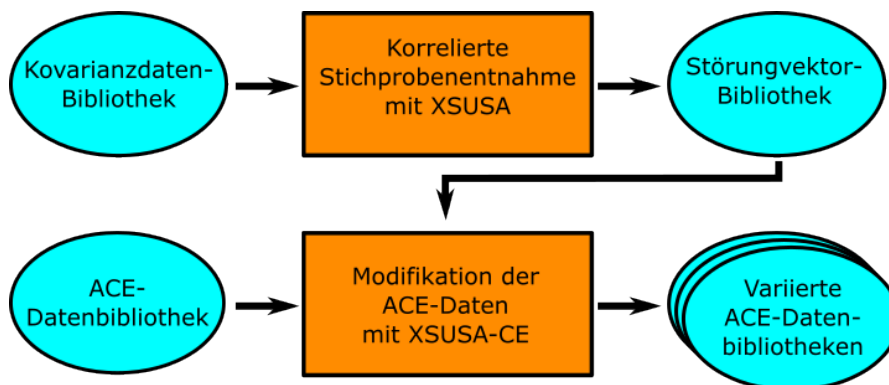


Abb. 4.67 Programmablauf zur Generierung von variierten ACE-Datenbibliotheken

Um XSUSA-CE zu verifizieren, wurden zunächst Unsicherheiten im resultierenden Multiplikationsfaktor für die zuvor betrachteten Systeme (Godiva, Jezebel, LEU-SOL-THERM-002 und TMI-1-Brennstabzelle) berechnet und mit TSUNAMI-Ergebnissen verglichen. Zur Berechnung der Gesamtunsicherheit des Multiplikationsfaktors wurden alle

Neutronenreaktionen, für die in der SCALE 6.2-Kovarianz-Datenbibliothek Daten vorliegen, bei der Erstellung der Störungsvektoren berücksichtigt.

Um individuelle Beiträge von Reaktionen bestimmen zu können, wurden zusätzlich variierte Datenbibliotheken erstellt, bei denen singulär die jeweilige zu betrachtende Reaktion gestört wurde. Es sei angemerkt, dass prinzipiell zur Bestimmung individueller Beiträge auch eine Sensitivitätsanalyse durchgeführt werden kann und somit auf die aufwendige Erzeugung zusätzlicher variierten Datenbibliotheken verzichtet werden könnte. Jedoch bietet die hier verwendete Vorgehensweise den Vorteil, die Erstellung von variierten Datenbibliotheken für individuelle Reaktionen testen zu können. Diese Ergebnisse werden direkt mit TSUNAMI-Ergebnissen verglichen. Für Godiva wurden die Reaktionen (n, f) , (n, γ) und (n, n') von U-235 betrachtet, für Jezebel die Reaktionen (n, f) , (n, γ) , (n, n') , (n, n) , χ und ν von Pu-239, für LEU-SOL-THERM-002 die Reaktionen (n, n) , (n, γ) von H-1, (n, n) von O-16 und (n, γ) von U-238, und für TMI-1 die Reaktionen (n, f) , χ , ν von U-235, (n, γ) und (n, n') von U-238 und (n, n) von H-1.

Bei der Berechnung der Gesamtunsicherheit (total) wird eine Stichprobengröße von tausend Variationen berücksichtigt. Bei der Bestimmung von individuellen Beiträgen hingegen wird eine Stichprobengröße von jeweils dreihundert Variationen verwendet, um die Rechenzeit zu reduzieren.

Im Anschluss an diese Rechnungen wurden sie statistisch ausgewertet. Hierbei wurden der Stichprobenmittelwert $\bar{y}$ und die Varianz s^2 berechnet,

$$\bar{y} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i \quad (4.5)$$

$$s^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2 \quad (4.6)$$

wobei N die Stichprobengröße ist. Da diese Werte über eine endliche Stichprobengröße gewonnen wurden, weisen sie selbst statistische Schwankungen auf. Unter der Annahme, dass die Ergebnisgrößen y_i normalverteilt sind, wurde für den Mittelwert folgendes Konfidenzintervall angenommen:

$$\left[\bar{y} + s \frac{t_{N-1,\alpha/2}}{\sqrt{N}}, \bar{y} + s \frac{t_{N-1,1-\alpha/2}}{\sqrt{N}} \right] \quad (4.7)$$

wobei $t_{N-1,\alpha/2}$ und $t_{N-1,1-\alpha/2}$ die kritischen Werte der Student-t-Verteilung mit $N - 1$ Freiheitsgraden und einem Konfidenzlevel $1 - \alpha = 0,95$ sind /SMI 02/. Analog dazu ergeben sich die Konfidenzintervalle für die Varianz

$$\left[s^2 \frac{N-1}{\chi_{N-1,\alpha/2}^2}, s^2 \frac{N-1}{\chi_{N-1,1-\alpha/2}^2} \right] \quad (4.8)$$

mit den kritischen Werten der Chi-Quadrat-Verteilung $\chi_{N-1,\alpha/2}^2$ und $\chi_{N-1,1-\alpha/2}^2$.

Es sei angemerkt, dass die berechnete Varianz im Allgemeinen aus zwei grundlegenden Beiträgen besteht, zum einen die Varianz aufgrund von Unsicherheiten in den nuklearen Daten s_{ND}^2 und zum anderen die Varianz aufgrund von statistischen Unsicherheiten der Monte-Carlo-Methode s_{MC}^2 . Somit kann die Näherung getroffen werden:

$$s^2 \approx s_{ND}^2 + s_{MC}^2 \quad (4.9)$$

Um den Beitrag von s_{MC}^2 möglichst klein zu halten, müssen die MC-Rechnungen mit einer hinreichenden Anzahl an Neutronenhistorien gerechnet werden.

Die Ergebnisse für die Gesamtunsicherheit und ausgewählter Beiträge sind in Abb. 4.68 für Godiva, in Abb. 4.69 für Jezebel, in Abb. 4.70 für LEU-SOL-THERM-002 und in Abb. 4.71 für die Brennstabzelle TMI-1 jeweils im Vergleich zu TSUNAMI-Ergebnissen dargestellt.

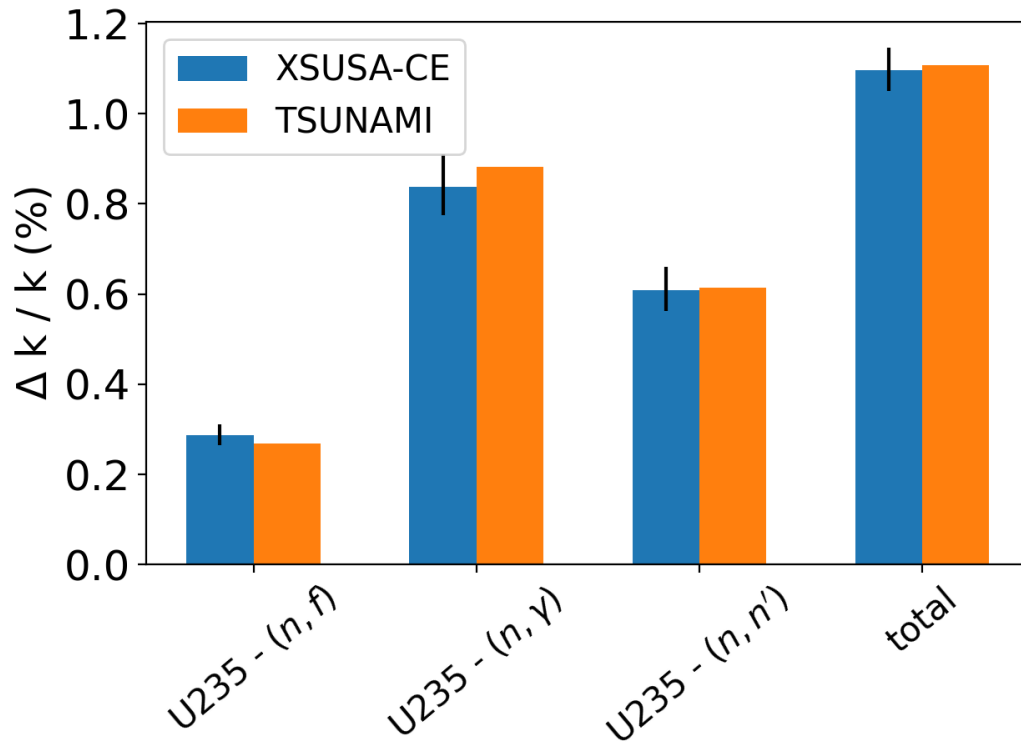


Abb. 4.68 Unsicherheitsbeiträge und totale Unsicherheit von k_{eff} für Godiva

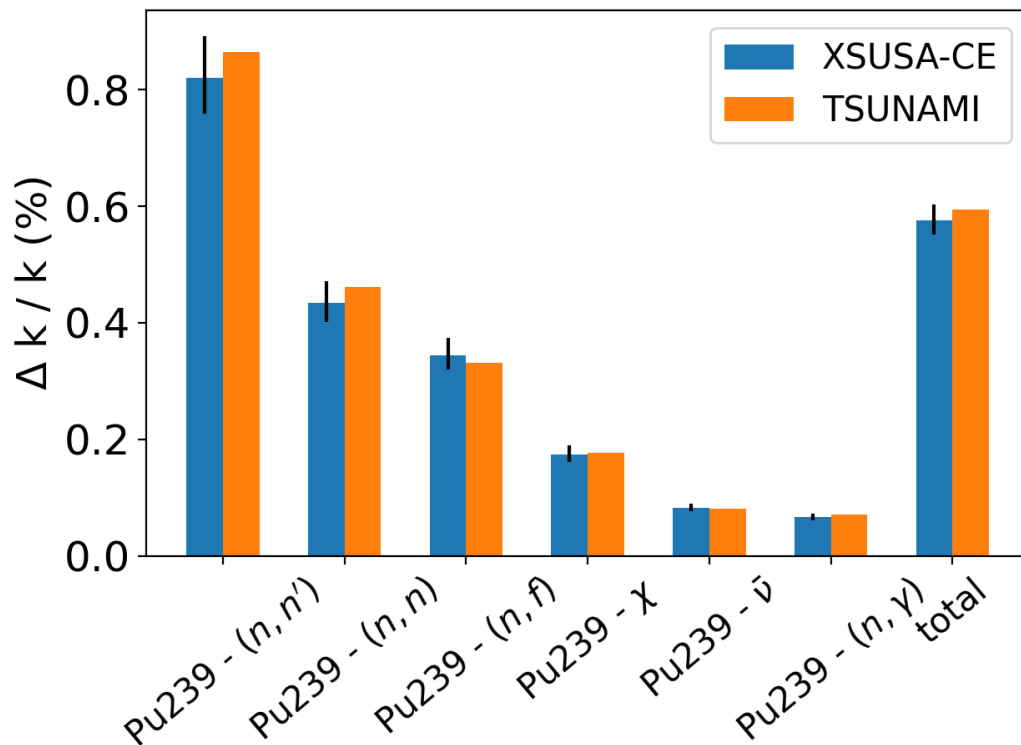


Abb. 4.69 Unsicherheitsbeiträge und totale Unsicherheit von k_{eff} für Jezebel

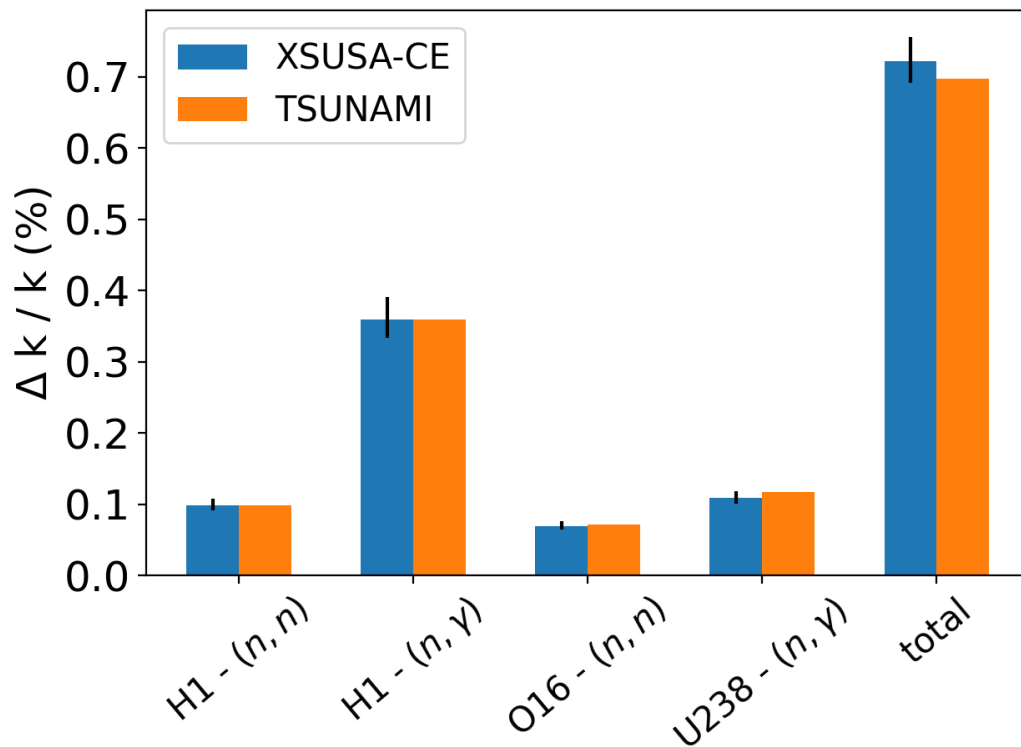


Abb. 4.70 Unsicherheitsbeiträge und totale Unsicherheit von k_{eff} für die UO_2 -Lösung in LEU-SOL-THERM-002

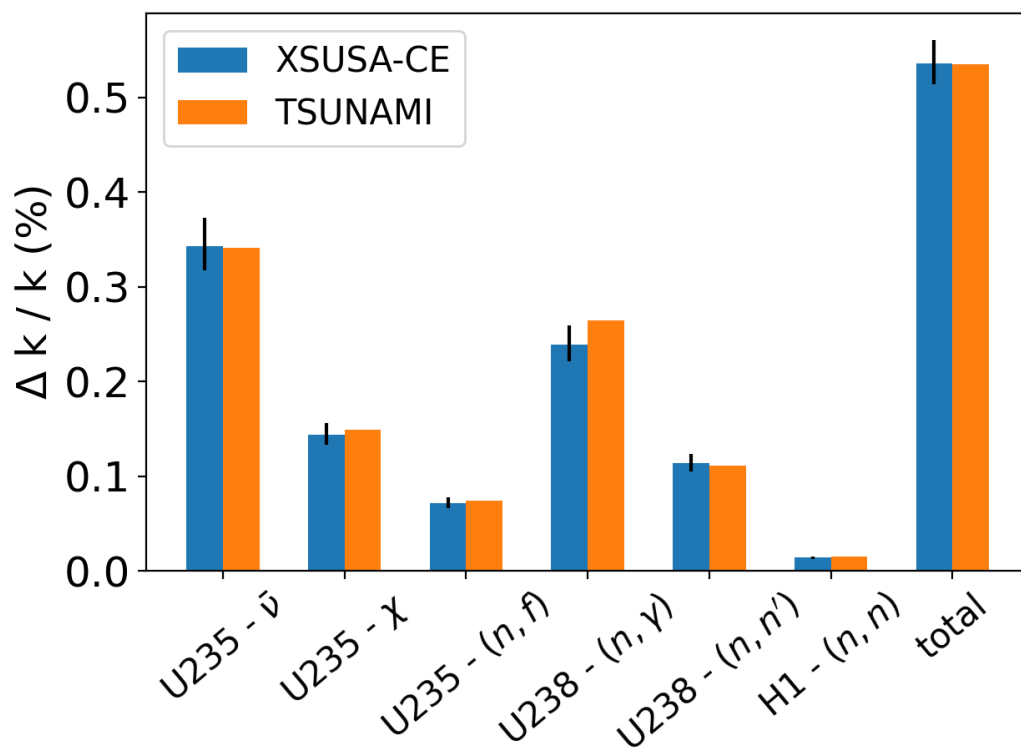


Abb. 4.71 Unsicherheitsbeiträge und totale Unsicherheit von k_{eff} für die TMI-1-Brennstabzelle

Im Allgemeinen stimmen die Werte zwischen XSUSA-CE und TSUNAMI innerhalb der Konfidenzintervalle überein. Lediglich bei der (n, γ) -Reaktion von U-238 für TMI-1 wird eine signifikante Abweichung vom TSUNAMI-Ergebnis beobachtet. Eine Abweichung für diese Reaktion konnte bereits bei der Bestimmung der Sensitivitätskurven beobachtet werden (siehe Abb. 4.64). Um das XSUSA-CE-Ergebnis weiter zu untersuchen, wurde die Unsicherheit zusätzlich mithilfe der Fehlerfortpflanzung erster Ordnung berechnet (*Sandwich Formula*)

$$s^2 = \mathbf{S} \mathbf{C} \mathbf{S}^T, \quad (4.10)$$

wobei $\mathbf{S}$ der Sensitivitätsvektor und $\mathbf{C}$ die Kovarianzmatrix der (n, γ) -Reaktion von U-238 sind. Zum einen wurde der Sensitivitätsvektor der DP-Rechnung herangezogen als auch der der Serpent-Rechnung. Die Ergebnisse sind in Tab. 4.13 aufgelistet. Die Ergebnisse zwischen XSUSA-CE und die mittels Fehlerfortpflanzung erster Ordnung (XSUSA-CE (DP) und Serpent) berechneten Unsicherheiten stimmen im Rahmen der Konfidenzintervalle sehr gut überein. Da für die XSUSA-CE- und die Serpent-Rechnungen die exakt selben nuklearen Datenbibliotheken verwendet werden, wurden die beobachteten Unterschiede zwischen TSUNAMI und XSUSA-CE den unterschiedlichen Neutronentransport-Lösungsmethoden als auch den zugrundeliegenden nuklearen Daten zugeschrieben.

Tab. 4.13 Unsicherheiten des Multiplikationsfaktors k_{eff} aufgrund der (n, γ) -Reaktion von U-238 der TMI-1-Brennstabzelle

Untere und obere Konfidenzintervalle für XSUSA-CE in Klammern angegeben.

Methoden	Rel. Unsicherheit (%)
XSUSA-CE	0,24 (0,22 / 0,26)
XSUSA-CE (DP)	0,24
Serpent	0,25
TSUNAMI	0,27

Testrechnungen anhand weiterer Modellsysteme

Um die Anwendung von XSUSA-CE weiter zu erproben, wurden zusätzliche Testfälle betrachtet. Hierfür wurden die kritischen Experimente Flattop23 (U233-MET-FAST-006), Popsy (PU-MET-FAST-006), U9 (IEU-MET-FAST-010) und die hochangereicherte

Uranlösung HEU-SOL-THERM-009 herangezogen. Für diese wurden jeweils dreihundert Rechnungen mit variierten Datenbibliotheken durchgeführt. Die mit XSUSA-CE resultierenden Unsicherheiten des Multiplikationsfaktors sind in Tab. 4.14 im Vergleich zu TSUNAMI-Ergebnissen aufgelistet. Zur Vollständigkeit und besseren Vergleichbarkeit wurden auch die numerischen Ergebnisse der bereits untersuchten Testfälle in die Tabelle aufgenommen.

Tab. 4.14 Mit TSUNAMI und XSUSA-CE berechnete relative Unsicherheiten (%) verschiedener Modellsysteme

Untere und obere Konfidenzintervalle für XSUSA-CE in Klammern angegeben.

Testfälle	TSUNAMI	XSUSA-CE
Godiva	1,11	1,10 (1,05 / 1,15)
Jezebel	0,59	0,58 (0,55 / 0,60)
LEU-SOL-THERM-002	0,70	0,72 (0,69 / 0,76)
TMI-1 Brennstab	0,53	0,54 (0,51 / 0,56)
Flatop23	0,89	0,86 (0,80 / 0,94)
Popsy	0,61	0,60 (0,56 / 0,66)
U9	2,81	2,62 (2,42 / 2,84)
HEU-SOL-THERM-009	1,16	1,06 (0,98 / 1,15)

Wie ersichtlich, stimmen die Unsicherheiten für die betrachteten Systeme mit Ausnahme von HEU-SOL-THERM-009 sehr gut überein. Die Ursache für die statistisch auffälligen Abweichungen für dieses System wird in zukünftigen Studien untersucht.

4.5 Weiterentwicklung der Methodik zur Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalyse von doppelt heterogenen Systemen

Gasgekühlte Hochtemperaturreaktoren weisen Brennstoff in doppelt heterogener Anordnung auf. Im Fall des Kugelhaufenreaktors ist der Reaktorkern mit Brennstoffkugeln beladen, bei denen Brennstoffpartikel in einer kugelförmigen Graphitmatrix eingebettet sind und diese Graphitmatrix wiederum von einer brennstofffreien Graphit-Kugelschale umgeben ist. Für die Beschreibung von Systemen mit Brennstoff in doppelt heterogener Anordnung steht in SCALE 6.2.3 /REA 18/ eine spezielle Berechnungssequenz zur Resonanzselbstabschirmung der Wirkungsquerschnitte zur Verfügung. Das SCALE-Modul TSUNAMI /REA 11a/ zur Durchführung von Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen mittels deterministischer linearer Störungstheorie und Multigruppen-

Wirkungsquerschnittsdaten bietet jedoch keine Möglichkeit zur Behandlung solcher Systeme, da die in TSUNAMI verwendete Methode zur Behandlung von impliziten Effekten nicht auf die Resonanzselbstabschirmungssequenz angewendet werden kann. Aus diesem Grund wurde ein Verfahren entwickelt, das stattdessen implizite Sensitivitäten durch direkte Variation der relevanten Eingangsparameter berechnet. Dieses Verfahren erlaubt in Kombination mit der traditionellen Methode der linearen Störungstheorie unter Verwendung direkter und adjungierter Transportrechnungen die Bestimmung der vollständigen Sensitivitäten und damit die Beiträge zu den Unsicherheiten der Ergebnisse auch für Systeme mit doppelter Heterogenität.

In Abschnitt 4.5.1 werden nominale Ergebnisse für ausgewählte, im IRPhEP-Handbuch /OEC 21/ beschriebene kritische Experimente für gasgekühlte Hochtemperaturreaktorsysteme (engl. *high-temperature gas-cooled reactor*, HTGR) vorgestellt, die mit dem Monte-Carlo-Code KENO-VI aus dem SCALE 6.2.3-Programmsystem unter Verwendung der 252-Gruppen-Bibliothek von SCALE durchgeführt wurden, um die Eignung dieser Bibliothek für HTGR-Anordnungen zu demonstrieren. Die Methoden, die zur Durchführung von Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen auf der Grundlage der in SCALE 6.2.3 verfügbaren Module entwickelt wurden, werden in Abschnitt 4.5.2 beschrieben. Sensitivitäts- und Unsicherheitsergebnisse für die ausgewählten Experimente sowie für Anordnungen aus dem HTR-CRP-Benchmark /IAEA 19/ der IAEA werden zusammen mit Referenzergebnissen des Monte-Carlo-Codes MCNP 6 /PEL 13/, /KIE 13/ in Abschnitt 4.5.3 vorgestellt.

4.5.1 Nominale Rechnungen

Validierungsrechnungen mit der SCALE-Multigruppenbibliothek mit 252 Energiegruppen basierend auf ENDF/B-VII.1 /CHA 11/ wurden zunächst für die kritischen Experimente durchgeführt. Die resultierenden Multiplikationsfaktoren wurden mit aus Messungen abgeleiteten Multiplikationsfaktoren verglichen. Für die Anordnungen des HTR-CRP-Benchmarks, für die keine Messwerte verfügbar sind, wurden die mit SCALE berechneten Multiplikationsfaktoren mit Multiplikationsfaktoren verglichen, die mit MCNP 6 unter Verwendung von kontinuierlichen ENDF/B-VII.1-Wirkungsquerschnittsdaten ermittelt wurden.

4.5.1.1 Kritische Experimente

Die zur Validierung der 252-Gruppen-Bibliothek ausgewählten reaktorphysikalischen Experimente sind im IRPhEP-Handbuch in der Kategorie GCR (engl. *gas-cooled reactors*) dokumentiert. Im Einzelnen handelt es sich dabei um (IRPhEP-Bezeichnungen in Klammern gegeben):

HTR-10 (HTR10-GCR-RESR-001): Heliumgekühlter Kugelhaufenreaktor mit niedrigangereichertem Urandioxid-Brennstoff und Graphit als Moderator- und Reflektormaterial.

HTTR (HTTR-GCR-RESR-001): Heliumgekühlter Reaktor mit prismatischen Brennelementen bestehend aus niedrigangereichertem Urandioxid und Graphit als Moderator- und Reflektormaterial.

VHTRC (VHTRC-GCR-EXP-001): Heliumgekühlter Reaktor mit prismatischen Brennelementen mit niedrigangereichertem Urandioxid und Graphit als Moderator- und Reflektormaterial, verschiedene Anordnungen mit teilweise erhöhten Temperaturen.

Während die Modellierung der prismatischen Anordnungen für Berechnungen mit dem Monte-Carlo-Code KENO-VI einfach durchführbar war, gestaltete sich die Modellierung des Kugelhaufenreaktors aufwendiger. Die Anordnung der Kugeln im Reaktorbehälter musste so gewählt werden, dass die Kugeln von der umgebenden Reaktorbehälterwand nicht abgeschnitten werden und dass das Verhältnis von Brennstoff zu Dummy-Kugeln (nur Graphit) korrekt ist. Die Brennstoffpartikel wurden in der Graphitmatrix so angeordnet, dass sie von der Wand der Brennstoffkugel beim Kugelhaufenreaktor bzw. der Wand des Brennstabs bei der prismatischen Ausführung nicht geschnitten werden und dass die richtige Anzahl von Partikeln eingehalten wird. Horizontale und vertikale Schnitte durch das HTR-10-Modell sind in Abb. 4.72 dargestellt, horizontale Schnitte durch die HTTR- und VHTRC-Modelle sind in Abb. 4.73 bzw. Abb. 4.74 dargestellt. Die KENO-VI-Modelle für HTR-10 und HTTR basieren teils auf den Angaben in /ILA 12/.

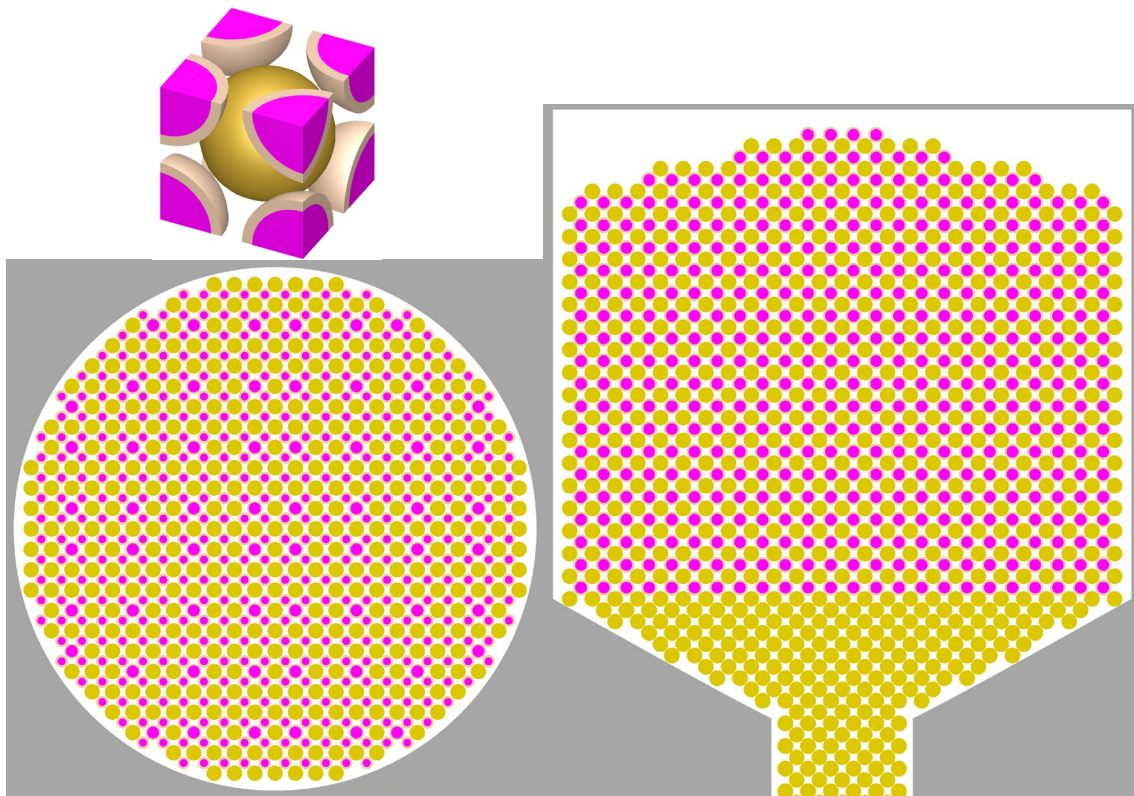


Abb. 4.72 KENO-VI-Modell des HTR-10, Einheitszelle (oben links), horizontaler Schnitt (unten links) und vertikaler Schnitt (rechts) des Kernmodells

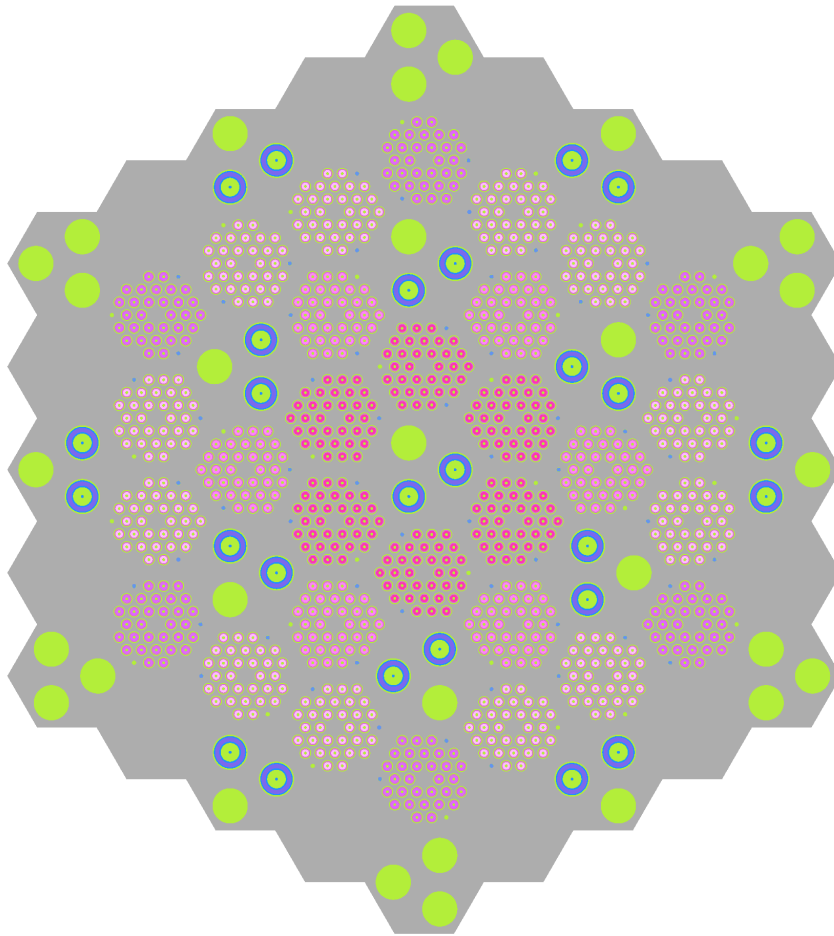


Abb. 4.73 KENO-VI-Modell des HTTR, horizontaler Schnitt

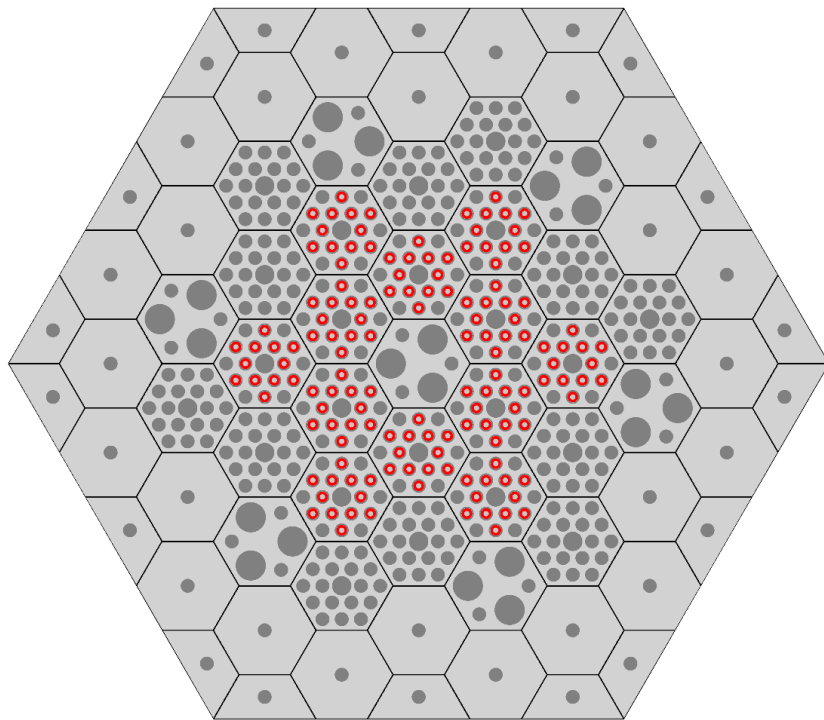


Abb. 4.74 KENO-VI-Modell einer VHTRC-Anordnung, horizontaler Schnitt

In Abb. 4.75 sind die Multiplikationsfaktoren für HTR-10, HTTR und vier der VHTRC-Anordnungen, wie sie mit KENO-VI unter Verwendung der 252-Gruppen-Bibliothek berechnet wurden, mit den aus den Messungen abgeleiteten Benchmark-Werten verglichen. Die Benchmark-Werte sind mit ihren 1σ -Unsicherheiten, die im Rahmen der IRPhEP-Auswertungen abgeschätzt wurden, durch die Fehlerbalken angegeben. Die statistischen 1σ -Unsicherheiten der Monte-Carlo-Ergebnisse, ebenfalls durch Fehlerbalken dargestellt, sind vernachlässigbar.

Die berechneten Multiplikationsfaktoren sind in guter Übereinstimmung mit den Benchmark-Werten. Bei lediglich zwei der VHTRC-Anordnungen wird eine Abweichung von ca. 1σ beobachtet, was darauf hindeutet, dass die ENDF/B-VII.1-basierte Multigruppen-Bibliothek mit 252 Energiegruppen von SCALE für HTGR-Kritikalitätsanwendungen geeignet ist.

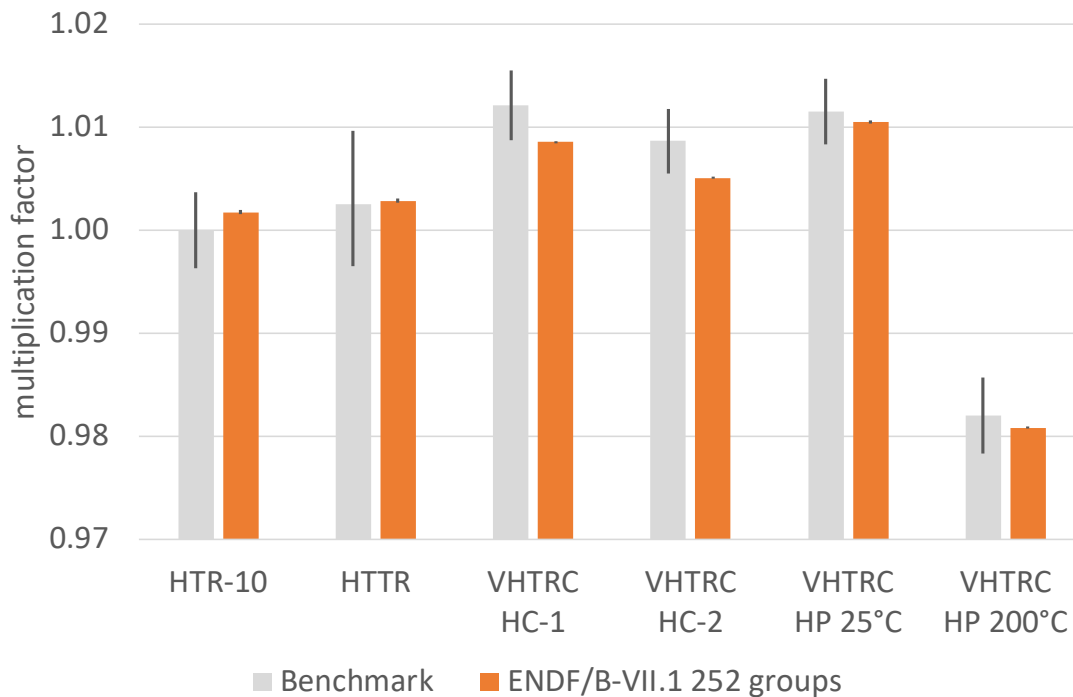


Abb. 4.75 Multiplikationsfaktoren von kritischen HTGR-Experimenten: Benchmark-Werte und Ergebnisse der KENO-VI-Berechnungen

4.5.1.2 Anordnungen des HTR-CRP-Benchmarks

Im Rahmen des IAEA HTR-CRP-Benchmarks werden verschiedene Anordnungen untersucht, die für HTGR-Systeme typische Teilelemente beschreiben. Die für die vorliegende Arbeit ausgewählten Teilelemente sind:

- eine Brennstoffkugel eines Kugelhaufenreaktors (engl. „pebble-bed reactor“, PBR) mit frischem und bestrahltem Brennstoff,
- ein Brennstoffzylinder in einem Graphitsechseck, repräsentativ für einen prismatischen modularen Reaktor (engl. „prismatic modular reactor“, PMR), Modell in Abb. 4.76 dargestellt,
- Erweiterte Einheitszelle mit PMR-Brennstoffzylinder und mit Helium gefüllte Hohlzylinder in hexagonaler Anordnung; Modell in Abb. 4.77 dargestellt,
- PMR-Brennstoffzylinder, mit Helium gefüllte Hohlzylinder und Absorberzylindern in den Ecken in einem sechseckigen Brennstoffblock mit frischem und bestrahltem Brennstoff, Viertelgeometrie in Abb. 4.78 dargestellt mit Andeutung der erweiterten Einheitszelle aus Abb. 4.77.

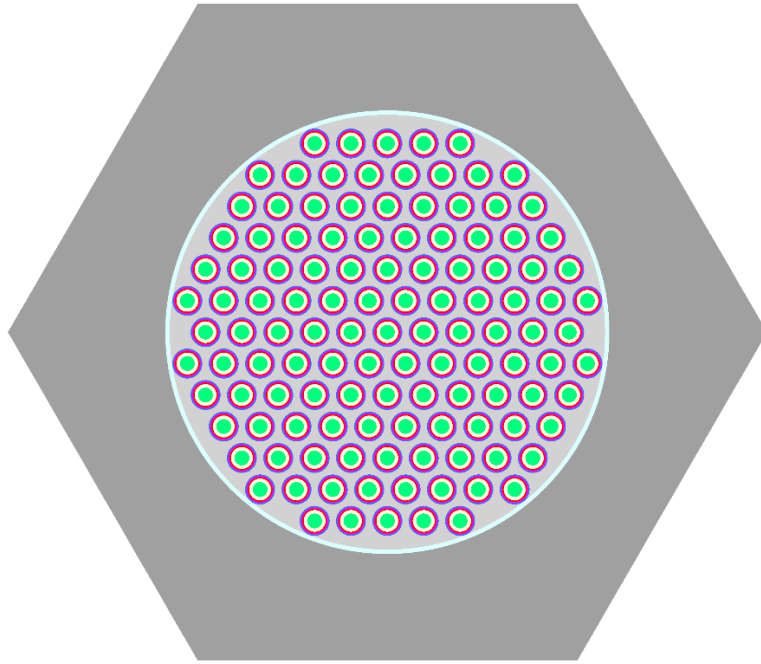


Abb. 4.76 Modell einer einfachen PMR-Brennstoffzelle

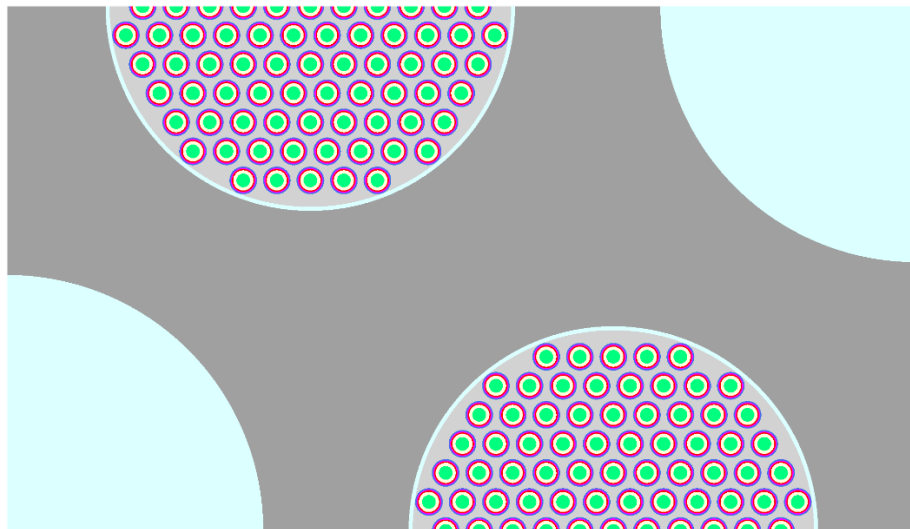


Abb. 4.77 Modell einer erweiterten PMR-Einheit (Brennstoff- und Heliumzylinder)

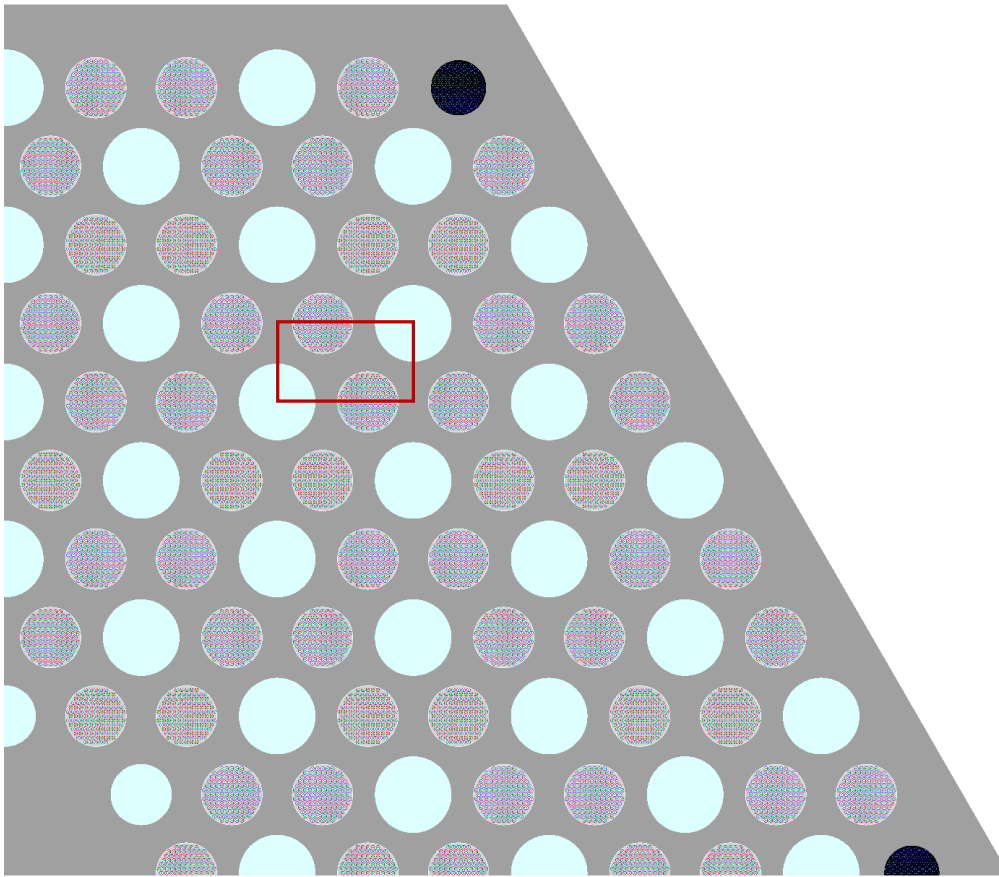


Abb. 4.78 Modell eines hexagonalen PMR-Brennstoffblocks (Viertelkernausschnitt)

Für den PMR-Brennstoffblock (siehe Abb. 4.78) war für die vorliegende Analyse eine Anpassung erforderlich. Die Absorberzylinder bestehen aus beschichteten B_4C -Partikeln in einer Graphitmatrix. Für die Referenzrechnungen mit einem Monte-Carlo-Code mit kontinuierlichen Wirkungsquerschnittsdaten konnten die Absorberzylinder so modelliert werden, wie sie tatsächlich aufgebaut sind, d. h. als eine Anordnung von in Graphit eingebetteten Partikeln. Für Berechnungen mit einem zweidimensionalen, deterministischen Transportcode mussten die Absorberzylinder jedoch als homogenisiertes Material modelliert werden. Der Nachteil ist, dass eine einfache Volumenhomogenisierung den Reaktivitätswert des Absorberstabs erheblich erhöht. Um dies zu beheben, wurde die Konzentration der B-10-Isotope reduziert. Zur Bestimmung der effektiven Konzentrationen wurden zusätzlich Monte-Carlo-Rechnungen mit homogenisierten Absorberstäben durchgeführt. Auf diese Weise konnte eine B-10-Konzentration gefunden werden, die zu einem Multiplikationsfaktor führt, der mit dem des Modells mit der expliziten Modellierung der B_4C -Partikel identisch ist. Diese Konzentration wird schließlich für die zweidimensionalen, deterministischen Transportrechnungen verwendet. Eine solche Anpassung war nur bei den HTR-CRP-Anordnungen mit frischem Brennstoff erforderlich. Bei den

Anordnungen mit bestrahltem Brennstoff ist das B-10 so weit ausgebrannt, dass die Absorptionswirkung des B_4C vernachlässigbar gering ist.

Die Ergebnisse für die betrachteten Teilelemente des HTR-CRP-Benchmarks sind in Abb. 4.79 dargestellt. Für alle Fälle zeigt sich eine sehr akzeptable Übereinstimmung zwischen den Multiplikationsfaktoren, die für die PBR-Fälle mit eindimensionalen XSDRN-Modellen bzw. für die PMR-Fälle mit zweidimensionalen NEWT-Modellen (beides mit 252-Gruppen-Wirkungsquerschnittsdaten) berechnet wurden, und den Multiplikationsfaktoren, die mit dreidimensionalen MCNP-Modellen (kontinuierliche Wirkungsquerschnittsdaten) ermittelt wurden. Für die meisten Fälle liegen die relativen Abweichungen unter 100 pcm und in allen betrachteten Fällen unter 250 pcm.

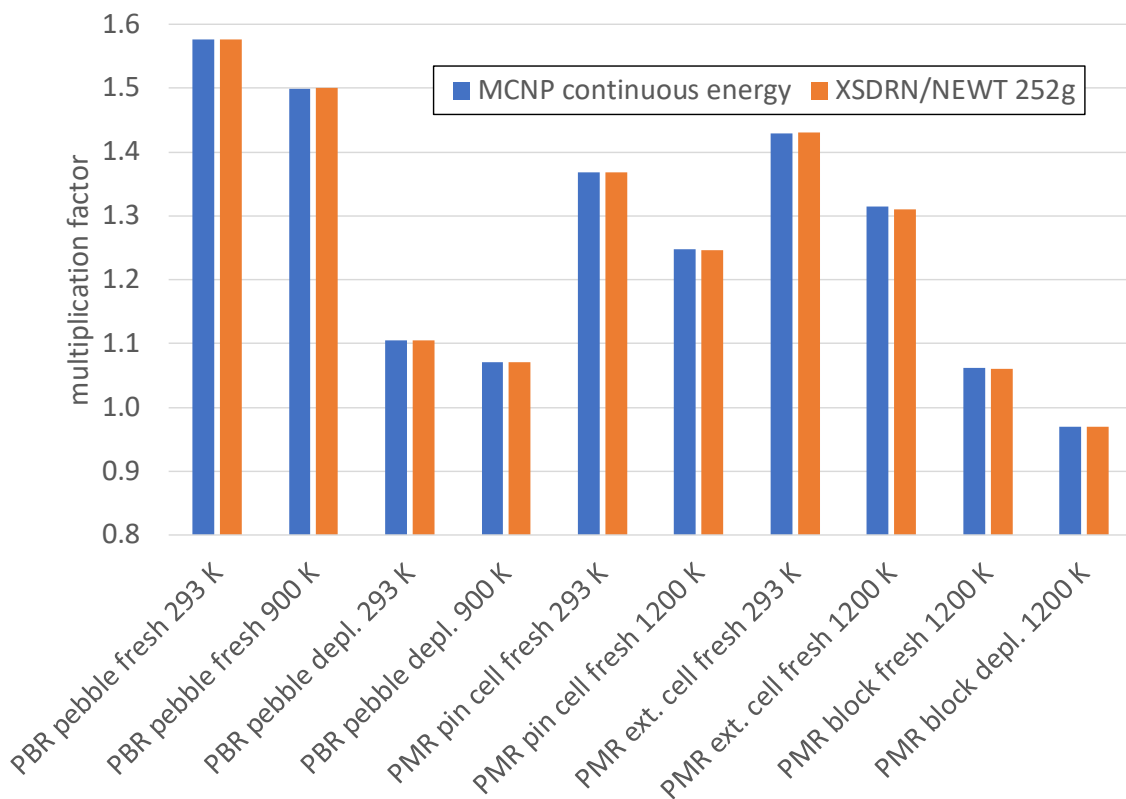


Abb. 4.79 Multiplikationsfaktoren für die HTR-CRP-Benchmark-Anordnungen

MCNP-Berechnungen mit kontinuierlichen Wirkungsquerschnittsdaten und deterministische XSDRN- bzw. NEWT-Berechnungen mit 252-Gruppen-Wirkungsquerschnittsdaten:

PBR pebble fresh / depl.: Brennstoffkugel mit frischem / bestrahltem Brennstoff

PMR pin cell fresh / depl.: PMR-Brennstoffzelle mit frischem / bestrahltem Brennstoff (Abb. 4.76)

PMR ext. cell fresh: erweiterte PMR-Einheitszelle (Abb. 4.77)

PMR block fresh / depl.: PMR-Brennstoffblock mit frischem / bestrahltem Brennstoff (Abb. 4.78)

4.5.2 Methodik für Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen

Im Prinzip bietet SCALE 6.2 alle Module, die zur Berechnung von Sensitivitäten durch lineare Störungstheorie auch für Systeme mit doppelter Heterogenität erforderlich sind. Jedoch wird die TSUNAMI-Sequenz nicht ausgeführt, wenn die Option der doppelten Heterogenität für die Resonanz-Selbstabschirmungs-Sequenz ausgewählt wird. Es ist jedoch möglich, die Selbstabschirmungsberechnung als eine Reihe von eigenständigen Modulen auszuführen. Daran anschließend können deterministische Vorwärts- und adjungierte Transportberechnungen oder Monte-Carlo-Berechnungen durchgeführt und schließlich die expliziten Sensitivitäten aus den mikroskopischen Wirkungsquerschnitten und den direkten und adjungierten Neutronenflüssen ermittelt werden. Dies wird zunächst im Folgenden beschrieben. Anschließend folgt eine Darstellung, wie die impliziten Beiträge zu den Sensitivitäten mit den in SCALE 6.2 enthaltenen Modulen berechnet werden können.

4.5.2.1 Explizite Sensitivitäten

Für HTGR-Sensitivitätsanalysen werden die SCALE-Module für die Selbstabschirmungsberechnung im Standalone-Modus ausgeführt, um die Wirkungsquerschnitte für nachfolgende Transportrechnungen vorzubereiten. Für ein Brennelement mit einem Brennstoffpartikeltyp ist die Abfolge der Module wie folgt (Beschreibung der SCALE-Module ist teilweise aus dem SCALE-Handbuch /REA 18/ übernommen):

- (1) CRAWDAD: Erzeugung einer Bibliothek mit kontinuierlichen Wirkungsquerschnittsdaten für die angeforderten Isotope, interpoliert auf die für jede Materialzusammensetzung vorgegebene Temperatur.
- (2) BONAMI: Durchführung von Bondarenko-Berechnungen zur Resonanz-Selbstabschirmung der Wirkungsquerschnittsdaten im unaufgelösten Energiebereich einer sogenannten Multigruppen-Masterwirkungsquerschnittsbibliothek, führt zu einer neuen Multigruppen-Masterbibliothek.
- (3) WORKER: Umwandlung der neuen Multigruppen-Masterbibliothek in eine Multigruppen-Arbeitsbibliothek.
- (4) CENTRM: Berechnung des Flussspektrums einer räumlichen Zelle mit der ersten Heterogenität, d. h. des Brennstoffpartikels in seiner umgebenden Matrix, unter Verwendung der Multigruppen-Arbeitsbibliothek aus (3) und der Bibliothek mit den kontinuierlichen Wirkungsquerschnittsdaten aus (1).

- (5) CHOPS: Berechnung der zellgemittelten Neutronenflüsse und der entsprechenden *flux-disadvantage*-Faktoren. Homogenisierte zellgemittelte mikroskopische Wirkungsquerschnitte werden unter Verwendung der *flux-disadvantage*-Faktoren berechnet. Eine neue Bibliothek mit kontinuierlichen Wirkungsquerschnittsdaten mit ausschließlich homogenisierten Wirkungsquerschnitten wird erstellt.
- (6) PMC: Modifizierung der Multigruppen-Master-Bibliothek für die erste Heterogenität unter Verwendung der Neutronenflüsse aus (4) und der homogenisierten zellgemittelten kontinuierlichen Wirkungsquerschnitte aus (5).
- (7) WORKER: Umwandlung der Multigruppen-Masterbibliothek in eine Multigruppen-Arbeitsbibliothek.
- (8) CAJUN: Kombination der homogenisierten Wirkungsquerschnittsbibliothek mit kontinuierlicher Energiedarstellung, die für die Zelle mit der ersten Heterogenität erstellt wurde, und der ursprünglichen Wirkungsquerschnittsbibliothek mit kontinuierlicher Energiedarstellung aus (1) zu einer neuen Bibliothek mit kontinuierlicher Energiedarstellung.
- (9) CENTRM: Berechnung des Neutronenfluss-Spektrums der Zelle mit der zweiten Heterogenität, d. h. dem Brennelement, unter Verwendung der Multigruppen-Arbeitsbibliothek aus (7) und der Bibliothek für Wirkungsquerschnitte in kontinuierlicher Energiedarstellung aus (8).
- (10) PMC: Modifikation der Multigruppen-Masterbibliothek aus (7) für die Zelle mit der zweiten Heterogenität unter Verwendung der Neutronenflüsse aus (9) und den kontinuierlichen Wirkungsquerschnittsdaten aus (9). Die modifizierten Multigruppenwirkungsquerschnitte sind nun zonengewichtet und resonanzkorrigiert für die doppelte Heterogenität.
- (11) WORKER: Umwandlung der Multigruppen-Masterbibliothek aus (10) in eine Multigruppen-Arbeitsbibliothek.

Die Wiederholung der obigen Schritte für alle Brennelemente im betrachteten System ergibt schließlich die Multigruppen-Arbeits-Wirkungsquerschnittsbibliothek, die als Eingabe für die anschließenden direkten und adjungierten Transportberechnungen benötigt wird. Die zugrundeliegende Multigruppen-Master-Wirkungsquerschnittsbibliothek wird für die Berechnung von Sensitivitäten benötigt. Dies wird durch das SAMS-Modul erreicht. Es ist erwähnenswert, dass dies nicht nur für Sensitivitäten von Multiplikationsfaktoren mittels der normalen linearen Störungstheorie durchgeführt werden kann, sondern auch in Bezug auf Sensitivitäten für Ergebnisgrößen wie Reaktionsraten oder Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte. Dies wird durch Anwendung der verallge-

meineren Störungstheorie mittels adjungierter Fixed-Source-Rechnungen, wie sie in den Codes XSDRN und NEWT des SCALE-Programmpakets implementiert sind, ermöglicht.

4.5.2.2 Implizite Sensitivitäten

Mit der im vorherigen Abschnitt beschriebenen Methode können explizite Sensitivitäten berechnet werden, d. h. die Änderung einer Ergebnisgröße in Bezug auf Änderungen der in den Transportcode eingehenden resonanzselbstabschirmten Wirkungsquerschnitte. Dabei wird nicht berücksichtigt, dass die Kovarianzdaten, die die Unsicherheiten der Wirkungsquerschnittsdaten beschreiben, für die grundlegenden, d. h. nicht abgeschirmten mikroskopischen Wirkungsquerschnitte ermittelt wurden. Für die Berechnung der vollständigen Ergebnisunsicherheiten ist es daher notwendig, auch die Änderungen der abgeschirmten gegenüber den nicht abgeschirmten Wirkungsquerschnitten zu berechnen. In der TSUNAMI-Sequenz von SCALE wird dies für Systeme mit einer einzigen räumlichen Heterogenität, wie z. B. Stabzell-Geometrien, durch automatische Differenzierung des BONAMI-Codes durchgeführt. Dabei wird BONAMI nicht nur für den unaufgelösten Resonanzbereich, sondern auch für den aufgelösten Resonanzbereich mit Hilfe von *Full-Range*-Bondarenko-Faktoren verwendet. Dies ersetzt die CENTRM-Berechnung zur Berechnung impliziter Sensitivitäten (üblicherweise werden zur Erzeugung von resonanzselbstabschirmten Wirkungsquerschnitten für die Transportrechnung sowohl BONAMI als auch CENTRM für den unaufgelösten und den aufgelösten Resonanzbereich verwendet). Für Systeme mit doppelter Heterogenität ist eine solche Substitution aufgrund der komplexeren Resonanzselbstabschirmungssequenz, wie zuvor in Kap. 4.5.2.1 beschrieben, nicht möglich.

Eine Methode, die für jede Art von Resonanzselbstabschirmungsrechnung verwendet werden kann, ist die direkte Störung der nicht abgeschirmten mikroskopischen Wirkungsquerschnitte. Das bedeutet, dass die Resonanzselbstabschirmungsrechnung mit einer bestimmten Reaktion, der nicht abgeschirmten Daten für ein bestimmtes Nuklid durchgeführt wird. Die Daten werden um einen kleinen Betrag variiert, um die Antworten der abgeschirmten Wirkungsquerschnittsdaten zu erhalten. Die Variation sollte zum einen so klein gewählt werden, dass die Systemantwort annähernd linear ist, und zum anderen so groß, dass die Antwort nicht durch numerische Ungenauigkeiten verfälscht wird.

Die Erfahrung zeigt, dass ein Wert von ca. 5 % für eine relative Variation in vielen Fällen ausreichend ist. Dabei ist zu beachten, dass die nicht abgeschirmten Wirkungsquerschnitte nicht für jede Energiegruppe einzeln variiert werden müssen; die Variation in einer Energiegruppe wirkt sich hauptsächlich auf die abgeschirmten Wirkungsquerschnitte derselben Energiegruppe aus, während der Einfluss auf die anderen Energiegruppen gering ist. Daher reicht es aus, die betrachtete Reaktion mit einem konstanten Faktor über den gesamten Energiebereich zu variieren. Die Durchführung von Resonanzselbstabschirmungsrechnungen für jede Reaktion eines jeden Nuklids im System wäre bei Anordnungen mit vielen Nukliden ein erheblicher Aufwand. Üblicherweise reicht es aus, nur relevante Reaktionen zu betrachten. In diesem Fall sind es im Wesentlichen die Einfangreaktion und die elastische Streuung von U-238 sowie die elastische Streuung von Graphit. Andere Reaktionen liefern vernachlässigbare Beiträge zu den impliziten Sensitivitäten. Die Variation der nicht abgeschirmten Wirkungsquerschnitte kann mit dem vom Oak Ridge National Laboratory und der GRS gemeinsam entwickelten Modul CLAROLPLUS durchgeführt werden, mit dem üblicherweise Wirkungsquerschnitte durch zufällig ausgewählte Parameter variiert werden /WIL 12/. Dabei werden die Datensätze mit der Zufallsstichprobe einfach durch Datensätze mit den gewünschten konstanten Variationen ersetzt.

Schließlich werden die expliziten und impliziten Sensitivitäten kombiniert, um die totalen Sensitivitäten zu erhalten. Mit diesen und den Kovarianzdaten können die Ergebnisunsicherheiten ermittelt werden.

4.5.3 Ergebnisse der Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen

Im Folgenden werden zunächst Ergebnisse von Sensitivitätsanalysen für HTGR-Anordnungen vorgestellt, die mit der Methodik aus Kap. 4.5.2 gewonnen wurden. Diese werden mit Ergebnissen aus Monte-Carlo-Berechnungen mit kontinuierlichen Wirkungsquerschnittsdaten verglichen. Dann werden die ermittelten Sensitivitäten dazu verwendet, für die Anordnungen der HTR-CRP-Benchmark-Anordnungen und die in Kap. 4.5.1.1 beschriebenen kritischen Experimente jeweils die totalen Sensitivitäten und die Hauptbeiträge zu den Ergebnisunsicherheiten zu ermitteln. Schließlich werden die Unsicherheiten von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten vorgestellt, die mittels Transportrechnungen für PMR-Brennstoffblöcke (siehe Abb. 4.78) gewonnen wurden.

4.5.3.1 Sensitivitäten

In den Abb. 4.80 und Abb. 4.81 sind beispielhaft für die einfache PMR-Brennstoffzelle (siehe Abb. 4.76) bei Raumtemperatur ermittelte Sensitivitäten des Multiplikationsfaktors zum mikroskopischen Einfangwirkungsquerschnitt von U-238 bzw. zum elastischen Streuwirkungsquerschnitt von Graphit dargestellt. Die Sensitivitäten werden in der 56-Energiegruppenstruktur der SCALE-Kovarianzdaten gezeigt.

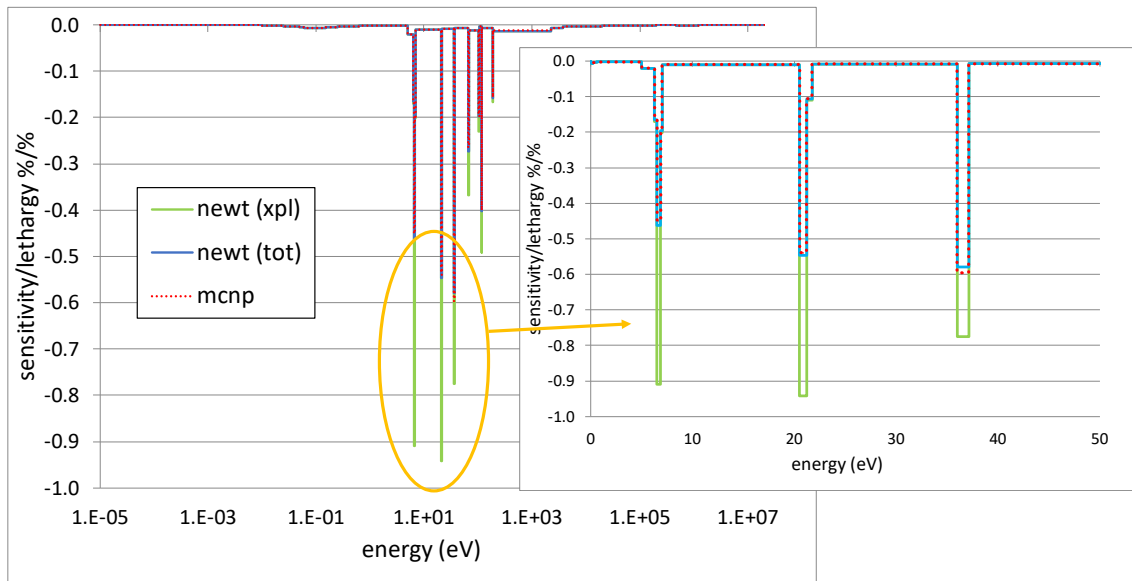


Abb. 4.80 Sensitivität des Multiplikationsfaktors zum U-238-Einfangwirkungsquerschnitt für die HTR-CRP-PMR-Stabzelle

Bedeutende Werte vergrößert dargestellt.

xpl: explizite Sensitivitäten mittels NEWT

tot: Kombination der impliziten und expliziten Sensitivitäten mittels NEWT

mcnp: mit MCNP ermittelte Sensitivitäten

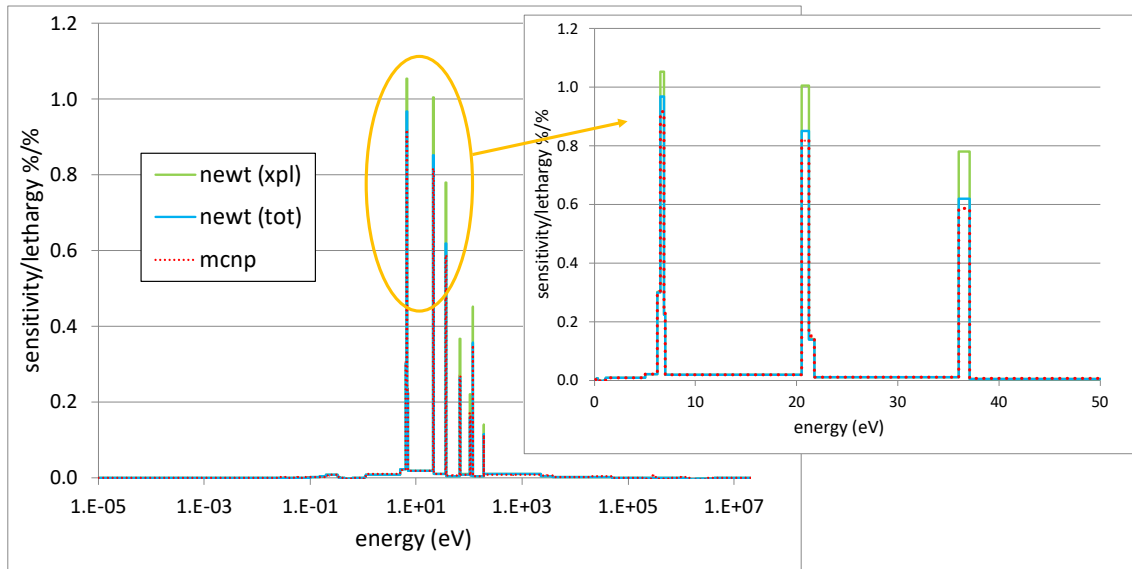


Abb. 4.81 Sensitivität des Multiplikationsfaktors zum elastischen Streuwirkungsquerschnitt von Graphit für die HTR-CRP-PMR-Stabzelle

Bedeutende Werte vergrößert dargestellt.

xpl: explizite Sensitivitäten mittels NEWT

tot: Kombination der impliziten und expliziten Sensitivitäten mittels NEWT

mcnp: mit MCNP ermittelte Sensitivitäten

Die Sensitivitäten, die sich aus den direkten und adjungierten NEWT-Berechnungen ergeben, werden mit denen verglichen, die mit MCNP berechnet wurden. MCNP wurde mit kontinuierlichen Wirkungsquerschnittsdaten ausgeführt; daher ist keine Resonanzbehandlung der Wirkungsquerschnitte erforderlich und die berechneten Sensitivitäten stellen somit direkt die totalen Sensitivitäten dar. Mit den direkten und adjungierten Neutronenflüssen aus den NEWT-Berechnungen wurden die expliziten Sensitivitäten ermittelt (in Abb. 4.80 und Abb. 4.81 mit „xpl“ bezeichnet). Diese werden mit den impliziten Sensitivitäten kombiniert, um die totalen Sensitivitäten zu erhalten (in Abb. 4.80 und Abb. 4.81 mit „tot“ bezeichnet). In diesem Fall wurden zwei Reaktionen ausgewählt, für die die impliziten Beiträge wichtig sind, nämlich der Einfangwirkungsquerschnitt von U-238 und der elastische Streuwirkungsquerschnitt von Graphit. Es ist eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den Sensitivitäten aus MCNP und den totalen Sensitivitäten aus NEWT zu beobachten. Wie jeweils in den vergrößerten Darstellungen in den Abb. 4.80 und Abb. 4.81 zu erkennen ist, zeigen sich bei den ausgeprägten Spitzenwerten teilweise starke Abweichungen zwischen den expliziten Sensitivitäten mittels NEWT zu den Sensitivitäten von MCNP.

4.5.3.2 Unsicherheiten

Der sogenannte Unsicherheits-„Breakdown“, d. h. die Identifikation der einzelnen Beiträge zur Gesamtunsicherheit, wurde für die einfache PMR-Stabzelle mittels der Sensitivitäten aus MCNP, der totalen Sensitivitäten aus NEWT und den expliziten Sensitivitäten aus NEWT ermittelt. Die Gesamtunsicherheit des Multiplikationsfaktors und die sechs größten Hauptbeiträge zu dieser Gesamtunsicherheit sind in Abb. 4.82 dargestellt. Es zeigt sich eine gute Übereinstimmung bei Verwendung der Sensitivitäten von MCNP und den totalen Sensitivitäten aus NEWT. Die Verwendung von ausschließlich expliziten Sensitivitäten führt bei der Gesamtunsicherheit und manchen Hauptbeiträgen zu geringfügigen Abweichungen.

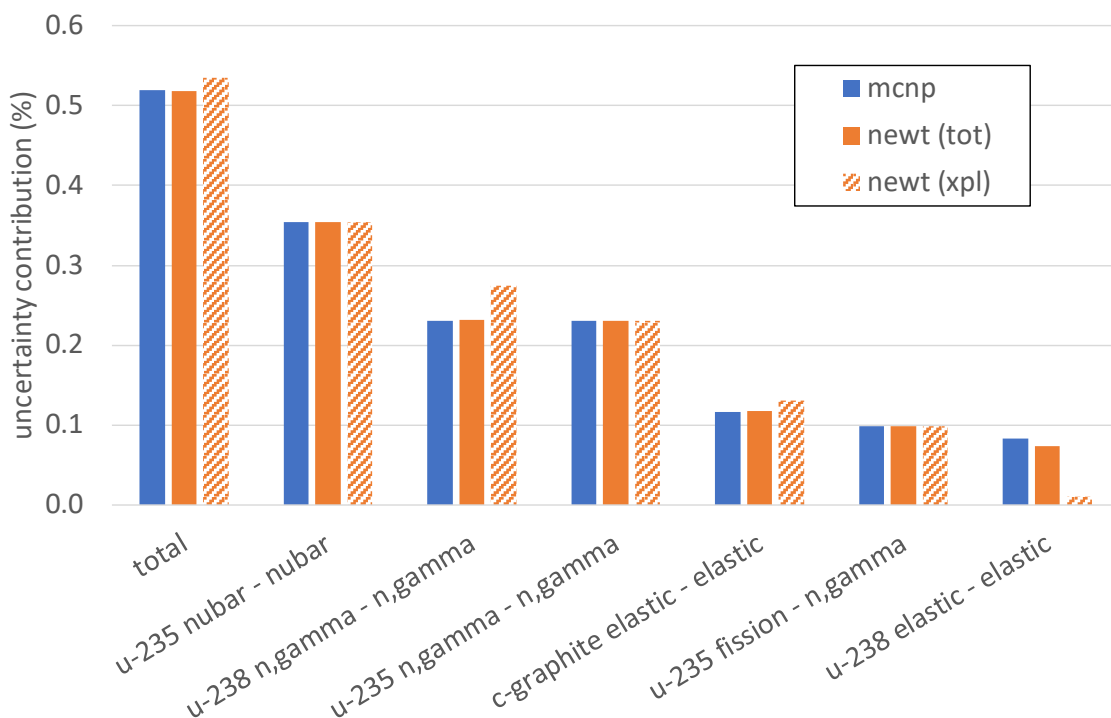


Abb. 4.82 Unsicherheit des Multiplikationsfaktors und Hauptbeiträge der HTR-CRP-PMR-Stabzelle

Die Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren für die Reihe der ausgewählten HTR-CRP-Benchmark-Anordnungen sind in Abb. 4.83 dargestellt. Die Ergebnisse sind alle qualitativ ähnlich: die relativen 1σ -Unsicherheiten liegen etwas über 0,5 %. Die mit den ausschließlich expliziten Sensitivitäten ermittelten Unsicherheiten sind etwas größer als die mit den totalen Sensitivitäten ermittelten Unsicherheiten. Diese wiederum sind in guter Übereinstimmung mit den entsprechenden MCNP-Ergebnissen.

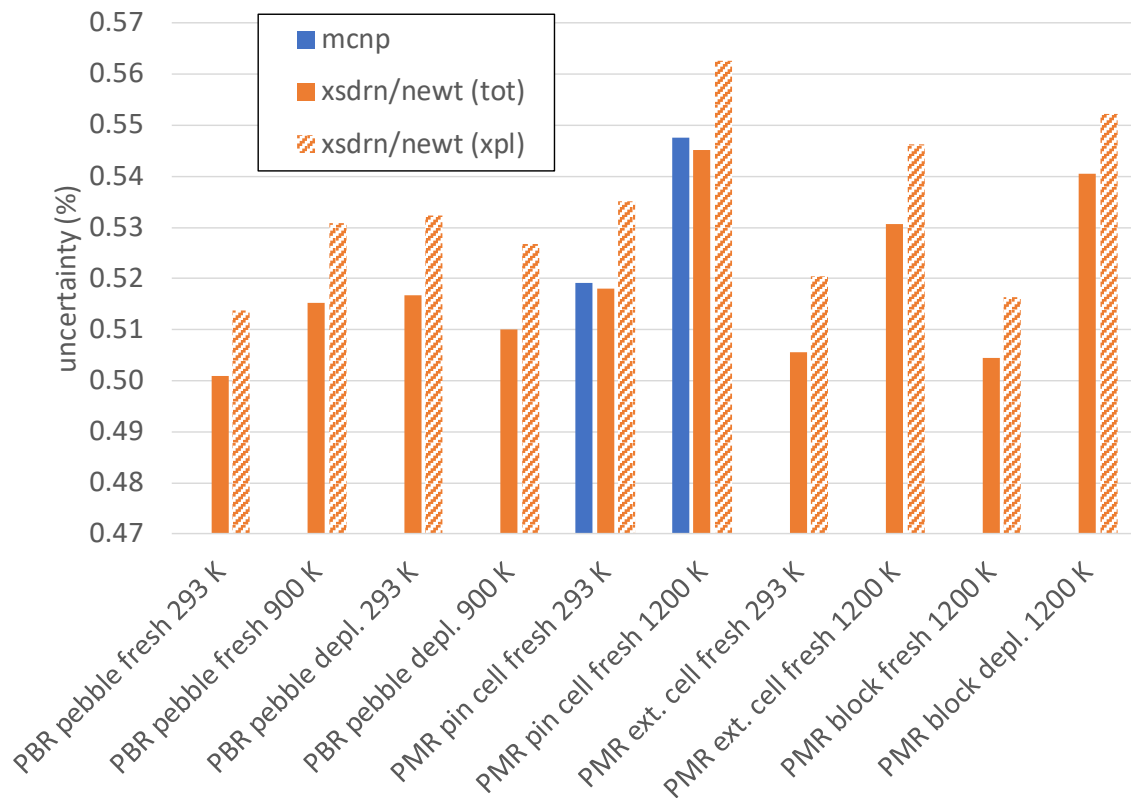


Abb. 4.83 Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren für ausgewählte Modelle des HTR-CRP-Benchmarks

Als weiterer Anwendungsfall wurden die Unsicherheiten von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten des PMR-Brennstoffblocks (frischer Brennstoff, 1200 K) berechnet. Die verwendete Energiegruppenstruktur für die Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte ist in Tab. 4.15 aufgeführt. Die ermittelten Unsicherheiten für den totalen Wirkungsquerschnitt, den Absorptionswirkungsquerschnitt und das in Diffusionsrechnungen häufig verwendete Produkt aus Spaltneutronenausbeute und Spaltwirkungsquerschnitt sind in Tab. 4.16 angegeben. Zu erkennen ist, dass die Unterschiede zwischen expliziten und totalen Unsicherheiten in den meisten Fällen vernachlässigbar sind, d. h. die impliziten Unsicherheiten sind in diesen Fällen gegenüber den expliziten nicht signifikant. Eine Ausnahme bildet der Absorptionswirkungsquerschnitt im Resonanzbereich des Spektrums (Energiegruppe 3), da in diesem Energiebereich der Einfangwirkungsquerschnitt von U-238 sehr bedeutend ist.

Tab. 4.15 6-Energiegruppenstruktur für Wirkungsquerschnitte des PMR-Brennstoffblocks

Gruppen-Nr.	Obere Energiegrenze (eV)
1	2,0000E+07
2	2,0000E+05
3	2,2500E+03
4	5,0000E+00
5	6,2500E-01
6	1,0000E-01
7	1,0000E-05

Tab. 4.16 Relative 1σ -Unsicherheiten (%) der 6-Gruppen-Wirkungsquerschnitte des PMR-Brennstoffblocks

Totaler Wirkungsquerschnitt			Absorptionswirkungsquerschnitt		Spaltneutronenausbeute $\times$ Spaltwirkungsquerschnitt	
	Total	Explizit	Total	Explizit	Total	Explizit
1	0,8233	0,8244	4,4472	4,4466	1,6569	1,6565
2	0,4969	0,4969	4,2114	4,2117	0,8110	0,8110
3	0,4999	0,4995	0,4012	0,4354	0,4310	0,4313
4	0,5028	0,5028	0,2370	0,2371	0,5982	0,5982
5	0,4936	0,4941	0,2116	0,2117	0,5245	0,5245
6	0,4695	0,4826	0,2398	0,2379	0,5180	0,5177

Schließlich wurden Unsicherheitsanalysen hinsichtlich der Unsicherheiten von nuklearen Daten für die kritischen Experimente aus dem IRPhEP-Handbuch durchgeführt. In Abb. 4.84 sind die Benchmark-Werte und die Berechnungsergebnisse, ergänzt um die Ergebnisunsicherheiten aufgrund der Unsicherheiten in den nuklearen Daten, dargestellt. Unter Berücksichtigung der Benchmark-Unsicherheiten, angegeben mit einer Standardabweichung, und der Ergebnisunsicherheiten durch die nuklearen Datenunsicherheiten ergibt sich eine gute Übereinstimmung zwischen den Rechenergebnissen und den Benchmark-Werten.

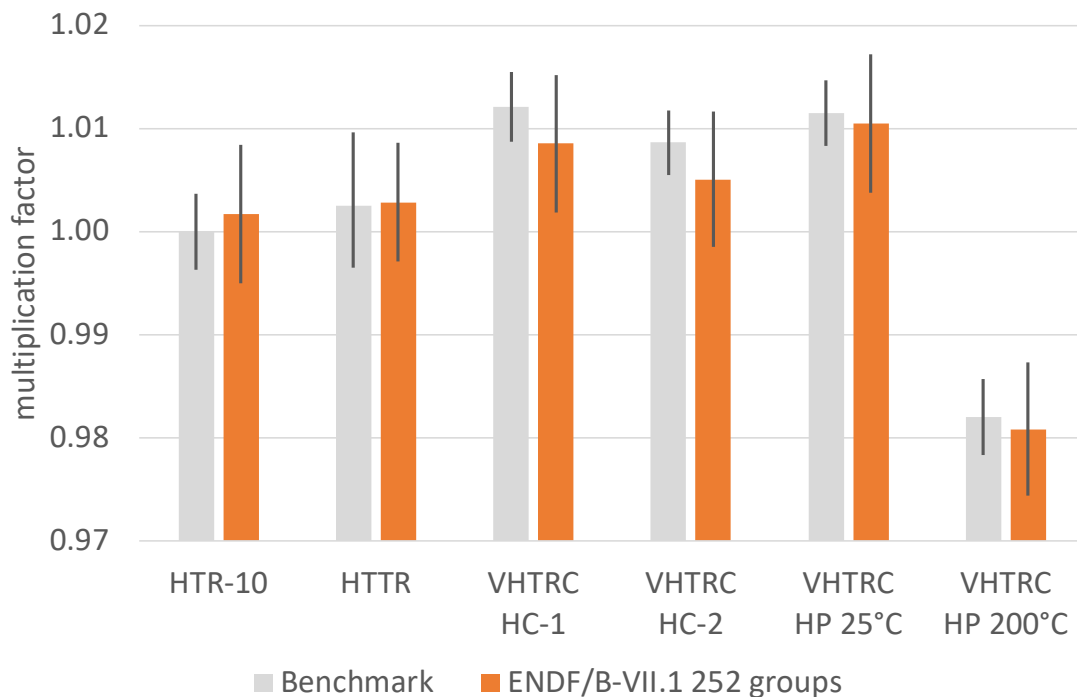


Abb. 4.84 Multiplikationsfaktoren kritischer HTGR-Experimente: Benchmark-Werte und Ergebnisse der KENO-VI-Berechnungen mit 252-Gruppen

Benchmark-Werte dargestellt mit der dokumentierten Unsicherheit in Größe einer Standardabweichung, KENO-VI-Werte dargestellt mit der Unsicherheit bedingt durch die Unsicherheiten in den nuklearen Daten

Es wurde gezeigt, dass die Module des SCALE 6.2.3-Programmsystems durch geeignete Kombination eingesetzt werden können, um auch Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen für Anordnungen mit doppelter Heterogenität, z. B. gasgekühlte Hochtemperaturreaktoren, durchführen zu können, obwohl diese Option nicht standardmäßig implementiert ist. Die Multigruppenbibliothek mit 252 Energiegruppen basierend auf der ENDF/B-VII.1-Datenbibliothek ist mit der in SCALE verfügbaren Resonanzselbstabschirmungsbehandlung für doppelt heterogenen Brennstoff gut für HTGR-Systeme geeignet. Zur Ermittlung von expliziten Sensitivitäten können die entsprechenden SCALE-Module in geeigneter Reihenfolge ausgeführt werden. Implizite Sensitivitäten können durch die direkte Variation der nicht abgeschirmten mikroskopischen Wirkungsquerschnitte bestimmt werden. Die sich daraus ergebenden Sensitivitäten und Unsicherheiten für den Multiplikationsfaktor stimmen gut mit den entsprechenden Ergebnissen aus Monte-Carlo-Rechnungen mit MCNP auf Basis kontinuierlicher Wirkungsquerschnittsdaten überein.

5 Beschreibung des Reaktorkernverhaltens mit der Monte-Carlo-Methode

Für stationäre und transiente Ganzkernrechnungen mit einem Neutronendiffusionscode werden zumeist deterministische Gittercodes wie NEWT aus dem SCALE 6.2-Programmpaket /REA 18/ oder HELIOS-2 /STU 11/ zur Vorausrechnung der erforderlichen Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte eingesetzt. Analog zu deren Anwendung kann auch der Monte-Carlo-Code Serpent 2.2 /LEP 15/ dazu eingesetzt werden, um Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte entweder für ein Brennelement in einem unendlichen Gittermodell oder für ein Reflektorelement in einem eindimensionalen Gittermodell zu berechnen (siehe Kap. 3.1.4). Alternativ dazu bietet Serpent auch die Funktionalität, Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte für Teilregionen eines zwei- oder dreidimensionalen Serpent-Ganzkernmodells zu berechnen, sog. *Full-Scale-Methode* /RAI 14b/. Im Gegensatz zu den unendlichen Gittermodellen wird bei dieser Vorgehensweise das von den Nachbarregionen des Brennelements, z. B. von einem kontrollierten Brennelement oder einer Reflektorregion, beeinflusste Neutronenflussspektrum in der Homogenisierung und Kondensierung der Wirkungsquerschnitte berücksichtigt.

Im Forschungsvorhaben RS1564 /AUR 21a/ wurde der Einsatz von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten für Teilregionen eines Ganzkernmodells für stationäre und transiente Ganzkern-Diffusionsrechnungen erprobt. Dabei zeigte sich für die stationären Rechnungen, dass trotz der Homogenisierung und Kondensierung in den Teilregionen eines Serpent-Ganzkernmodells eine gute Übereinstimmung in der Leistungsverteilung zwischen der Diffusions-Ganzkernrechnung und der Serpent-Ganzkernrechnung nur mit der zusätzlichen Verwendung von Diskontinuitätsfaktoren (engl. *discontinuity factors*, DF) erreicht werden kann. Da geeignete DF für die Teilregionen des Serpent-Ganzkernmodells in den Arbeiten von RS1564 noch nicht ermittelt werden konnten, wurden sie in diesen Arbeiten aus zusätzlich vorausgerechneten, unendlichen Gittermodellen abgeleitet und in den stationären als auch den transienten Diffusionsrechnungen verwendet.

Um zum einen die zusätzlichen Vorausrechnungen unendlicher Gittermodelle zum Erhalt von DF nicht durchführen zu müssen und zum anderen die Kombination von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten aus einem Ganzkernmodell mit DF aus wiederum unendlichen Gittermodellen vermeiden zu können, wurde in der hier vorliegenden Untersuchung zunächst eine Studie zur Ermittlung von DF aus Ganzkernmodellen durchgeführt. Anschließend wurde die Eignung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten zusammen mit DF, die für Teilregionen eines Serpent-Ganzkernmodells ermittelt

wurden, in Ganzkern-Diffusionsrechnungen erprobt. Im Fall der transienten Rechnungen wurde das im Forschungsvorhaben RS1564 vorgestellte Verfahren abgeändert. Die Serpent-Ganzkernrechnungen wurden nun für sämtliche Betriebszustände einschließlich des unkontrollierten sowie kontrollierten Zustands bereits vor der transienten Rechnung und nicht mehr währenddessen durchgeführt, um für die Teilregionen des Ganzkernmodells direkt Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte parametrisiert über Brennstofftemperaturen, Moderatorichten und Borkonzentrationen zu bestimmen. Damit konnte eine Bibliothek parametrisierter Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte durchweg von der Ermittlung des stationären Ausgangszustands, definiert durch eine kritische Borkonzentration und räumliche Verteilungen der Brennstofftemperatur und Moderatorichte, über den gesamten Verlauf der Transiente verwendet werden, wodurch sprunghafte Änderungen in der Reaktivität und Leistung vermieden werden konnten.

5.1 Studie zur Ermittlung geeigneter Diskontinuitätsfaktoren

Die Verwendung von DF in Ganzkernrechnungen mit DYN3D führt im Allgemeinen zu einer besseren Übereinstimmung in der Leistungsverteilung mit Referenzergebnissen. Serpent bietet die Möglichkeit, DF für zweidimensional jedoch nicht für dreidimensional modellierte Kernanordnungen zu berechnen. Die hierzu in Serpent implementierte Methodik umfasst einen homogenen Flusslöser /LEP 16/, der jedoch unterschiedlich zur der in DYN3D implementierten Methodik zur Lösung der nodalen Diffusionsgleichung ist. Wie in /HUR 16/ dargestellt, sollen bessere Ergebnisse erzielt werden können, wenn der homogene Neutronenfluss und somit die DF mit derselben Methodik berechnet werden, die auch zur Lösung der Neutronendiffusionsgleichung in der anschließenden Ganzkernrechnung eingesetzt wird. Aus diesem Grund wurde die Methodik, die in DYN3D angewandt wird, im Rahmen dieser Studie zwecks der Berechnung von DF in Serpent-Ganzkernmodellen untersucht. Dabei wurde sich auf den in DYN3D implementierten nodalen Diffusionslöser für kartesische Geometrien beschränkt. Um den in /HUR 16/ vorgestellten Ansatz zu implementieren, wird im Folgenden auf die in DYN3D implementierte Methodik eingegangen und dargelegt, wie mit den resultierenden Größen DF berechnet werden können.

5.1.1 Die vereinfachte AFEN/NEM-Methode

Bei der in DYN3D implementierten Diffusions-Lösungsmethode handelt es sich um die AFEN/NEM (*Analytic Function Expansion Nodal / Nodal Expansion Method*)-Methode, welche im Detail in /GRU 05/ beschrieben ist. Die nodale mehrdimensionale Diffusionsgleichung für den Neutronenfluss Φ im Knoten-Volumen (*Node Volume*) $V^i = a_u^i a_v^i a_w^i$ in kartesischen Koordinaten erhält man durch Integration der mehrdimensionalen Diffusionsgleichung über die Koordinaten v, w senkrecht zur betrachteten Koordinate $u \in \{x, y, z\}$:

$$-D_g^i \frac{\partial^2}{\partial u^2} \Phi_g^i(u) + \Sigma_{r,g}^i \Phi_g^i(u) = S_g^i(u) - L_g^i(u), \quad (5.1)$$

wobei der Index i den betrachteten Knoten und g den Gruppenindex beschreibt. D_g^i bezeichnet die Diffusionskonstante, $\Sigma_{r,g}^i$ den makroskopischen Removal-Querschnitt, S_g^i den Quellterm und L_g^i den transversalen Leakage-Term. Die letzten beiden sind gegeben durch:

$$S_g^i(u) = \frac{1}{k^i} \bar{\chi}_g^i \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{f,g}^i \Phi_{g'}^i(u) + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \Sigma_{s,gg'}^i \Phi_{g'}^i(u), \quad (5.2)$$

$$L_g^i(u) = -\frac{D_g^i}{a_v^i a_w^i} \int_{-a_v^i/2}^{a_v^i/2} \int_{-a_w^i/2}^{a_w^i/2} \left(\frac{\partial^2}{\partial v^2} + \frac{\partial^2}{\partial w^2} \right) \Phi_g^i(u, v, w) dv dw,$$

wobei k^i der Neutronenmultiplikationsfaktor des Knotens, $\bar{\chi}_g^i$ das mittlere Spaltspektrum, $\nu \Sigma_{f,g}^i$ der makroskopische Spaltwirkungsquerschnitt multipliziert mit der mittleren Anzahl von Spaltneutronen und $\Sigma_{s,gg'}^i$ der makroskopische Streuquerschnitt für die Streuung von der Energiegruppe g' nach der Energiegruppe g sind. Die Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte, D_g^i und $\Sigma_{r,g}^i$, werden in der heterogenen Ganzkern-Monte-Carlo-Rechnung bestimmt und dienen als Eingangsgrößen für die Berechnung des homogenen Flusses. Im Folgenden wird bis auf Weiteres auf die Indizierung des Knotenindex i verzichtet, da die durchzuführenden Rechenschritte für alle Knoten identisch sind.

Um die Differentialgleichung zu lösen, wird der Neutronenfluss als Kombination einer Polynomentwicklung zweiten Grades und Exponentialfunktionen dargestellt:

$$\Phi_g(u) = \sum_{k=0}^2 c_{g,k} w_k(u) + d_{g,+} e^{B_g u} + d_{g,-} e^{-B_g u}, \quad (5.3)$$

mit $B_g = \sqrt{\Sigma_{r,g}/D_g}$ und den orthogonalen Polynomen $w_0 = 1$, $w_1 = 2\sqrt{3}u/a_u$, $w_2 = 6\sqrt{5}((u/a_u)^2 - 1/12)$. Des Weiteren werden auch der Quell- und der Leckage-Term durch eine Polynomentwicklung dargestellt:

$$\begin{aligned} S_g(u) &= \sum_{k=0}^2 s_{g,k} w_k(u), \\ L_g(u) &= \sum_{k=0}^2 l_{g,k} w_k(u). \end{aligned} \quad (5.4)$$

Die insgesamt elf unbekannten Koeffizienten $c_{g,k}$, $s_{g,k}$, $l_{g,k}$, $d_{g,+}$ und $d_{g,-}$ müssen aus der Orthogonalität und den Randbedingungen bestimmt werden.

Durch Einsetzen der obigen Entwicklungen in die Differentialgleichung erhält man unter Verwendung der Orthogonalität der Polynomfunktionen folgende Beziehung zwischen den Koeffizienten:

$$\begin{aligned} c_{g,0} &= \frac{s_{g,0} - l_{g,0} + \frac{12\sqrt{5}D_g}{a_u^2} c_{g,2}}{\Sigma_{r,g}}, \\ c_{g,1} &= \frac{s_{g,1} - l_{g,1}}{\Sigma_{r,g}}, \\ c_{g,2} &= \frac{s_{g,2} - l_{g,2}}{\Sigma_{r,g}}. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Des Weiteren lassen sich die Quellterm-Koeffizienten wie folgt berechnen:

$$s_{g,k} = \frac{1}{a_u} \int_{-a_u/2}^{a_u/2} S_g(u) w_k(u) du, \quad (5.6)$$

wobei sich das Integral im Wesentlichen auf Integrale über den Neutronenfluss $\int_{-a_u/2}^{a_u/2} \Phi_g(u) w_k(u) du$ reduziert und diese wiederum analytisch berechnet werden können.

Zur Bestimmung der Leakage-Terme $l_{g,k}$ werden eine Reihe von Näherungen analog zu der in DYN3D implementierten Methodik vorgenommen. Zunächst wird für eine spätere Verwendung die mittlere Leakage in u -Richtung im Knoten i unter Verwendung des Fick'schen Diffusionsgesetzes und dem Gauß'schen Integralsatz berechnet:

$$\bar{L}_{g,u}^i = \frac{1}{a_u^i} \int_{-a_u^i/2}^{a_u^i/2} L_g^i(u) du = \sum_{\substack{u' \in \{x,y,z\} \\ u' \neq u}} \frac{1}{a_{u'}^i} (J_{g,+u'}^{net,i} + J_{g,-u'}^{net,i}), \quad (5.7)$$

wobei $J_{g,+u}^{net,i}$ der Nettostrom an der rechten bzw. unteren Grenzfläche und $J_{g,-u}^{net,i}$ der Nettostrom an der linken bzw. oberen Grenzfläche des Knotens ist. Hierbei ist der Nettostrom als Differenz des ausströmenden partiellen Neutronenstroms und des einströmenden partiellen Neutronenstroms parallel zur nach außen zeigenden Oberflächennormalen definiert. Die Nettoströme sind hier Eingangsparameter, die in der heterogenen Ganzkern-Monte-Carlo-Rechnung bestimmt werden.

Der nullte Leakage-Koeffizient lässt sich ohne Näherung bestimmen zu:

$$l_{g,0}^i = \frac{1}{a_u^i} \int_{-a_u^i/2}^{a_u^i/2} L_g^i(u) w_0(u) du = \frac{1}{a_u^i} \int_{-a_u^i/2}^{a_u^i/2} L_g^i(u) du = \bar{L}_{g,u}^i. \quad (5.8)$$

Für die höheren Ordnungen müssen einige Annahmen gemacht werden. Zunächst wird angenommen, dass die zweiten Ableitungen der Flüsse senkrecht zur betrachteten Richtung an den Materialgrenzen dieselben Stetigkeitsbedingungen erfüllen wie der Fluss selbst. Daraus ergibt sich für die Leckagen an den Grenzflächen /DÜR 13/:

$$\begin{aligned}\frac{L_{g,+u}^i}{D_g^i} &= \frac{L_{g,-u}^{i+1}}{D_g^{i+1}}, \\ \frac{\partial L_{g,+u}^i}{\partial u} &= \frac{\partial L_{g,-u}^{i+1}}{\partial u}.\end{aligned}\tag{5.9}$$

Des Weiteren wird die räumliche Ableitung der Leckagen mit der diskretisierten Form angenähert, wobei angenommen wird, dass die Leckage im Zentrum des Knotens der mittleren Leckage im Knoten entspricht:

$$\frac{\partial L_{g,+u}^i}{\partial u} \approx \frac{L_{g,+u}^i - \bar{L}_{g,u}^i}{\frac{a_u^i}{2}}, \quad \frac{\partial L_{g,-u}^{i+1}}{\partial u} \approx \frac{\bar{L}_{g,u}^{i+1} - L_{g,-u}^{i+1}}{\frac{a_u^{i+1}}{2}}.\tag{5.10}$$

Mit diesen Beziehungen lässt sich die Leckage an den Grenzflächen mithilfe der mittleren Leckagen in benachbarten Knoten ausdrücken:

$$\begin{aligned}L_{g,-u}^i &= \frac{\bar{L}_{g,u}^i + \bar{L}_{g,u}^{i-1} \frac{a_u^i}{a_u^{i-1}}}{1 + \frac{D_g^{i-1} a_u^i}{D_g^i a_u^{i-1}}} \\ L_{g,+u}^i &= \frac{\bar{L}_{g,u}^i + \bar{L}_{g,u}^{i+1} \frac{a_u^i}{a_u^{i+1}}}{1 + \frac{D_g^{i+1} a_u^i}{D_g^i a_u^{i+1}}}\end{aligned}\tag{5.11}$$

Zusätzlich ergibt sich die Leckage an den Grenzflächen durch Einsetzen der jeweiligen Randpunkte in die Polynomentwicklung:

$$\begin{aligned}L_{g,-u}^i &= l_{g,0} - \sqrt{3}l_{g,1} + \sqrt{5}l_{g,2} \\ L_{g,+u}^i &= l_{g,0} + \sqrt{3}l_{g,1} + \sqrt{5}l_{g,2}\end{aligned}\tag{5.12}$$

womit sich nun die höheren Ordnungen $l_{g,1}$ und $l_{g,2}$ als Funktion der mittleren Leckagen in benachbarten Knoten darstellen lassen.

Handelt es sich bei der Grenzfläche um eine äußere Grenzfläche, die mittels einer reflektierenden, Vakuum-, oder einer teilweise reflektierenden Randbedingung beschrieben wird, lauten die Randbedingungen für die Leckage:

$$\pm \frac{1}{2} (1 + \tau^i) \frac{\partial L_{g,\pm u}^i}{\partial u} = \frac{\tau^i - 1}{4D_g^i} L_{g,\pm u}^i \quad (5.13)$$

wobei $\tau^i = 1$ einer reflektierenden und $\tau^i = 0$ einer Vakuum-Randbedingung entspricht. Durch Einsetzen der Näherung der Ableitung erhält man:

$$L_{g,\pm u}^i = \frac{\bar{L}_{g,u}^i}{1 + \frac{a_u^i(1 - \tau^i)}{4D_g^i(1 + \tau^i)}} \quad (5.14)$$

Insgesamt wurden damit Relationen für die Leckage-Terme $l_{g,k}$, die Quellterme $s_{g,k}$ und die Polynomkoeffizienten $c_{g,k}$ gefunden. Um die beiden Terme $d_{g,+}$ und $d_{g,-}$ zu bestimmen, werden die Randbedingungen für den Nettostrom an den beiden Grenzflächen verwendet:

$$J_{g,\pm u}^{net} = -D_g \vec{n}_S \cdot \nabla \Phi_g \Big|_{u=\pm \frac{a_u^i}{2}} \quad (5.15)$$

Mithilfe dieser Beziehung erhält man ein geschlossenes Gleichungssystem für die Koeffizienten $c_{g,k}$, $s_{g,k}$, $l_{g,k}$, $d_{g,+}$ und $d_{g,-}$, das mit einem Computerprogramm leicht gelöst werden kann. Die somit berechneten homogenen und die aus der Monte-Carlo-Rechnung bestimmten heterogenen Grenzflächenflüsse können dazu verwendet werden, DF für jede betrachtete Grenzfläche zu bestimmen, $f_g^i = \Phi_{g,heter}^i / \Phi_{g,hom}^i$.

5.1.2 Verifikation berechneter Diskontinuitätsfaktoren in Diffusionsrechnungen verschiedener Kernanordnungen

Zur Verifikation der Methodik wurden unterschiedliche Testfälle auf Basis des C5G7-TD-Benchmarks /BOY 16/ betrachtet:

- 1) einfaches, eindimensionales Kernmodell mit nur zwei Brennelementen (UO_2 und MOX) und reflektierenden Randbedingungen,
- 2) 3×3 Minikernmodell bestehend aus UO_2 - und MOX-Brennelementen und reflektierenden Randbedingungen,
- 3) 3×3 Minikernmodell wie in 2) jedoch mit Wasserreflektor und Vakuum-Randbedingungen in radialer Richtung und reflektierenden Randbedingungen in axialer Richtung,
- 4) original C5G7-TD 4×4 Minikernmodell bestehend UO_2 - und MOX-Brennelementen im Wassertank mit Vakuumrandbedingungen in allen drei Raumrichtungen.

Für alle diese Betrachtungsfälle wurden Serpent-Rechnungen zur Bestimmung der homogenisierten Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte und der Oberflächennettoströme der Knoten durchgeführt und die radiale Leistungsverteilung mithilfe von Detektoren bestimmt. Des Weiteren wurden mit der in Serpent implementierten Methodik DF berechnet. Mithilfe der mit Serpent bestimmten Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte und der Oberflächennettoströme wurde mit der zuvor beschriebenen AFEN/NEM-Methodik ein weiteres Set von DF erzeugt. Anschließend wurden für jedes Kernmodell drei DYN3D-Rechnungen durchgeführt: eine ohne Verwendung von DF, eine unter Verwendung der mit Serpent berechneten DF und eine unter Verwendung der mit der AFEN/NEM-Methodik erzeugten DF. Als Ergebnisgrößen wurden jeweils der effektive Neutronenmultiplikationsfaktor k_{eff} und die radiale Leistungsverteilung der jeweiligen Rechnungen analysiert und mit den Serpent-Referenz-Ergebnissen verglichen.

Beispiel 1)

Zweidimensionales Kernmodell mit zwei Brennelementen und reflektierenden Randbedingungen

Der für Testrechnungen stark vereinfachte Kern besteht aus zwei Brennelementen, UO_2 und MOX, die in x-Richtung nebeneinanderstehen. An allen äußeren Randflächen gelten reflektierende Randbedingungen. Damit handelt es sich im Wesentlichen um ein eindimensionales Problem, bei dem die transversalen Leckagen keine Rolle spielen. Für diesen Fall werden nur DF für die Grenzfläche zwischen den beiden

Brennelementen benötigt. Wie im vorigen Abschnitt beschrieben, wurden insgesamt vier Rechnungen durchgeführt. Der resultierende Neutronenmultiplikationsfaktor k_{eff} für den Kern, die Reaktivitätsdifferenz $\Delta\rho$ im Vergleich zur Referenz und die auf die Anzahl an Brennelementen normierte Leistungsverteilung sind in Tab. 5.1 dargestellt. Während für die Rechnung ohne DF deutliche Abweichungen sowohl in k_{eff} als auch in der Leistungsverteilung beobachtet werden, stimmen die Ergebnisse bei Verwendung der Serpent-DF als auch der AFEN/NEM-DF gut mit den Referenzergebnissen überein.

Tab. 5.1 Rechenergebnisse für 2x1 Minikernmodell

	Serpent Referenz	DYN3D ohne DF	DYN3D DF: Serpent	DYN3D DF: AFEN/NEM
k_{eff}	1,26315	1,26150	1,26315	1,26318
$\Delta\rho$ (pcm)		-103	0	2
P_{UO_2}	1,25222	1,2273	1,2523	1,2524
P_{MOX}	0,74778	0,7727	0,7477	0,7476
ΔP_{UO_2} (%)		-1,99	0,01	0,01
ΔP_{MOX} (%)		3,33	-0,01	-0,02

Beispiel 2)

Zweidimensionales 3 × 3 Minikernmodell mit reflektierenden Randbedingungen

Das Layout des Kernmodells ist in Abb. 5.1 dargestellt. Es handelt sich um fünf identische UO_2 - und vier identische MOX-Brennelemente aus dem vorherigen Rechenbeispiel.

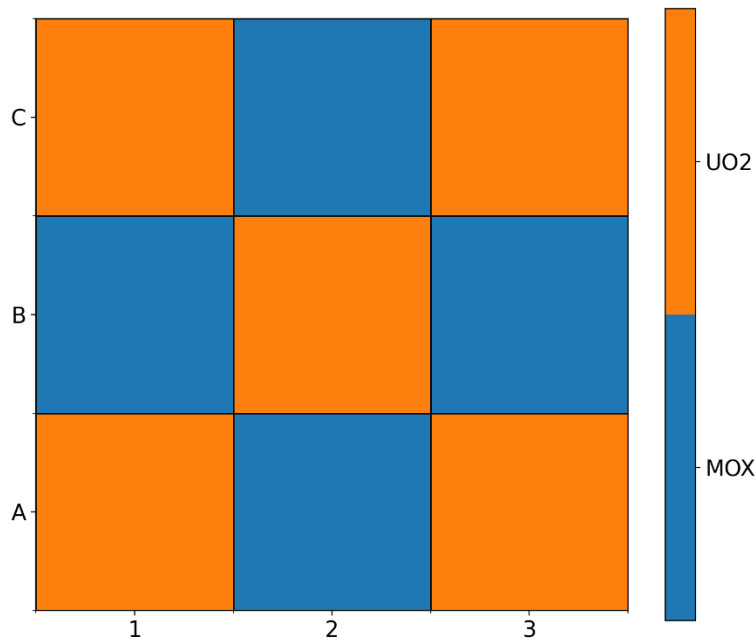


Abb. 5.1 Zweidimensionales 3 x 3 Kernlayout

Es gelten reflektierende Randbedingungen für alle drei Raumrichtungen, damit ergibt sich durch die reflektierende Randbedingung in z-Richtung ein zweidimensionales Modell. Durch die Wahl dieses Kernlayouts und der reflektierenden Randbedingungen stellt sich kein Schachbrettmuster ein. Das UO₂-Brennelement auf der Position B2 ist an allen vier Seiten von MOX-Brennelementen umgeben, wohingegen das UO₂-Brennelement auf der Position C1 von zwei UO₂-Brennelementen und zwei MOX-Brennelementen umgeben ist, wodurch sich unterschiedliche DF für die jeweiligen Seiten ergeben.

Wiederum wurden die vier Rechnungen wie im Beispiel zuvor durchgeführt. Die erhaltenen Werte des Neutronenmultiplikationsfaktors sind in Tab. 5.2 aufgeführt. Die Rechnung ohne DF liefert die größte Abweichung zum Referenzergebnis, während unter Verwendung sowohl der Serpent- als auch der AFEN/NEM-DF eine hervorragende Übereinstimmung mit dem Referenzwert zu beobachten ist.

Tab. 5.2 Ergebnisse für k_{eff} für das 3x3 Minikernmodell mit reflektierenden Randbedingungen

	Serpent Referenz	DYN3D ohne DF	DYN3D DF: Serpent	DYN3D DF: AFEN/NEM
k_{eff}	1,25982	1,25885	1,25991	1,25976
$\Delta\rho$ (pcm)		-61	6	-4

In Abb. 5.2 ist die relative Abweichung der radialen Leistungsverteilung vom Referenzergebnis für die drei Fälle (ohne DF, mit Serpent-DF und AFEN/NEM-DF) dargestellt. Auch hier zeigt die Rechnung ohne DF deutliche Abweichungen mit Werten bis zu 3,4 % von der Referenz-Leistungsverteilung, während für die anderen beiden Rechnungen jeweils eine gute Übereinstimmung mit Abweichungen von maximal 0,5 % zu erkennen ist. Die in Abb. 5.2 jeweils zu beobachtende geringfügige Asymmetrie resultiert aus der statistischen Unsicherheit der mit der Monte-Carlo-Methode berechneten Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte der Teilregionen und Oberflächenströme zur Bestimmung der DF.

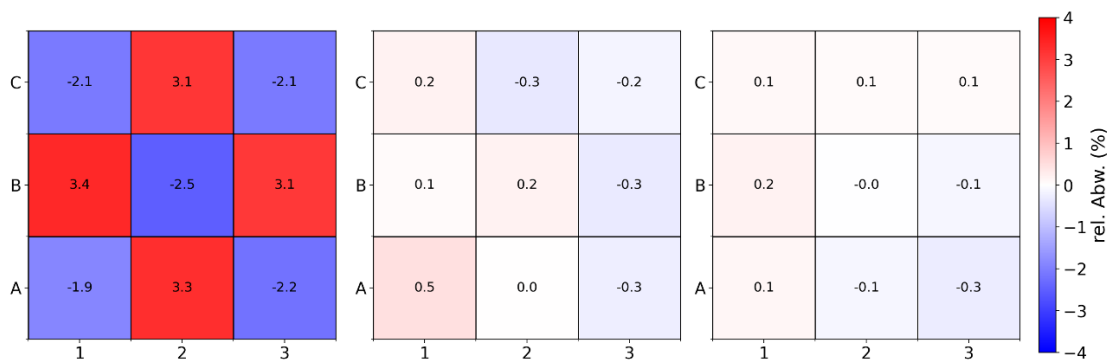


Abb. 5.2 Relative Abweichungen der Leistungsverteilungen von den Referenzwerten für Rechnungen ohne DF (links), mit Serpent-DF (Mitte) und AFEN/NEM-DF (rechts)

Beispiel 3)

Zweidimensionales 3 × 3 Minikernmodell mit Wasserreflektoren in radialer Richtung und reflektierenden Randbedingungen in axialer Richtung

Das Kernlayout ist nahezu identisch zum vorhergehenden Beispiel 2). Lediglich wurden am radialen Rand des Kerns Wasserreflektoren installiert, um eine bessere Näherung an einen realen Kernaufbau abzubilden. In axialer Richtung wurden die reflektierenden Randbedingungen beibehalten. Daher handelt es sich auch in diesem Fall erneut um ein zweidimensionales Problem. Die Ergebnisse für den Neutronenmultiplikationsfaktor sind in Tab. 5.3 dokumentiert.

Tab. 5.3 Ergebnisse für k_{eff} für das 3 x 3 Minikernmodell mit radialem Wasserreflektor und reflektierenden Randbedingungen in axialer Richtung

	Serpent Referenz	DYN3D ohne DF	DYN3D DF: Serpent	DYN3D DF: AFEN/NEM
k_{eff}	1,07293	1,05844	1,07241	1,07285
$\Delta\rho$ (pcm)		-1276	-45	-7

Hier ist zu beobachten, dass sowohl die Rechnung mit den Serpent-DF als auch mit den AFEN/NEM-DF beide gute Ergebnisse liefern, wobei in diesem Fall leicht bessere Ergebnisse durch die AFEN/NEM-DF zu beobachten sind. Dies lässt sich auch für die in Abb. 5.3 dargestellten relativen Abweichungen der Leistungsverteilung bestätigen.

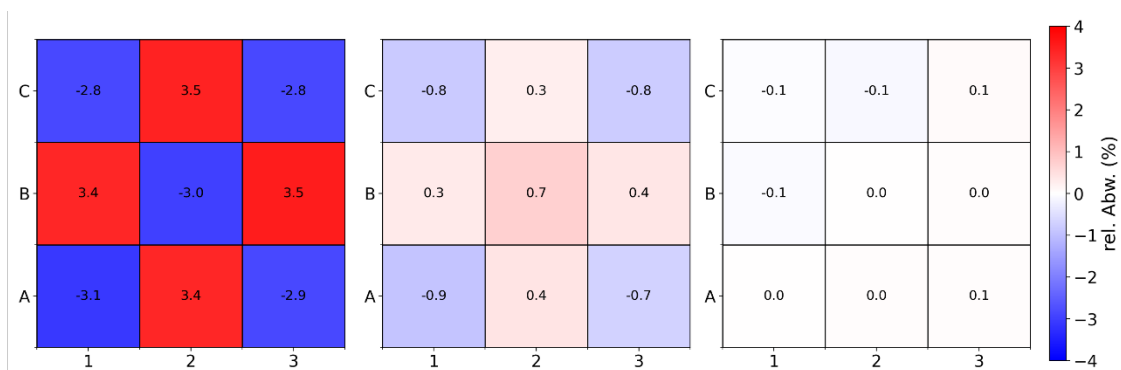


Abb. 5.3 Relative Abweichungen der Leistungsverteilungen von den Referenzwerten für Rechnungen ohne DF (links), mit Serpent-DF (Mitte) und AFEN/NEM-DF (rechts)

Beispiel 4)

Dreidimensionaler C5G7-TD-Kern mit Wasserreflektoren in radialer und axialer Richtung

Die bisher betrachteten Kernmodelle waren im Wesentlichen ein- oder zweidimensionale Kernkonfigurationen. Um eine dreidimensionale Kernkonfiguration zu analysieren, wurde hier der Kern des C5G7-TD-Benchmarks /BOY 16/ untersucht, der aus 4×4 Brennelementen mit UO_2 - und MOX-Brennstoff innerhalb eines Wasserreflektors besteht. In axialer Richtung wird der Kern in sechs Ebenen gleicher Höhe diskretisiert und ebenfalls von Wasserreflektoren umschlossen. Ein x-y-Schnitt durch den aktiven Kernbereich ist in Abb. 5.4 dargestellt.

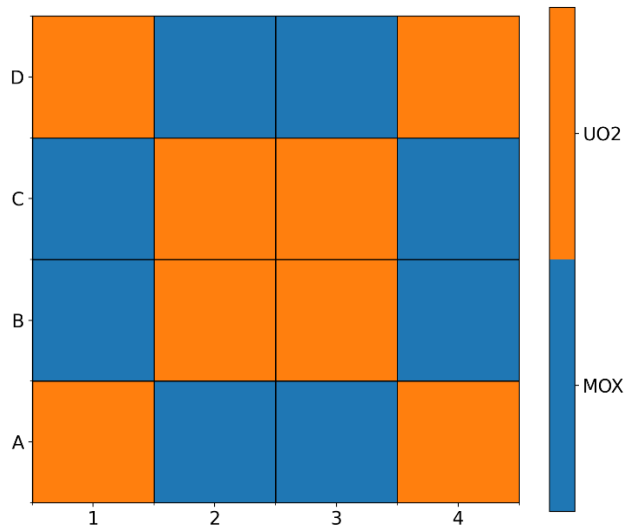


Abb. 5.4 Kernlayout des C5G7-TD Kerns

Zur Berechnung der homogenisierten Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte und der Referenzergebnisse wurde eine Serpent-Rechnung durchgeführt. Anschließend wurden zwei verschiedene DYN3D-Rechnungen durchgeführt, ohne DF und mit AFEN/NEM-DF. Da Serpent nur in ebenen aber nicht in dreidimensionalen Geometrien DF berechnen kann, wurde keine Diffusionsrechnung auf der Basis von Serpent-DF durchgeführt. Die resultierenden Neutronenmultiplikationsfaktoren und deren Reaktivitätsdifferenz zum Referenzwert sind in Tab. 5.4 aufgeführt.

Tab. 5.4 Ergebnisse für k_{eff} für den C5G7-TD-Kern mit radialem und axialem Wasserreflektor

	Serpent Referenz	DYN3D ohne DF	DYN3D DF: AFEN/NEM
k_{eff}	1,12794	1,11634	1,12580
$\Delta\rho$ (pcm)		-992	-169

Der Neutronenmultiplikationsfaktor liegt ohne die Verwendung von DF deutlich unterhalb des mit Serpent ermittelten Referenzwerts ($\Delta\rho = -992$ pcm). Durch die Verwendung der AFEN/NEM-DF lässt sich eine Verbesserung des Ergebnisses beobachten, jedoch beträgt die Reaktivitätsdifferenz noch -169 pcm. Die Übereinstimmung für das dreidimensionale Kernmodell erreicht auch unter Verwendung von AFEN/NEM-DF nicht die Qualität der zuvor diskutierten zweidimensionalen Anordnungen, da es mit der vorliegenden Version von DYN3D nicht möglich ist, DF auch in axialer Richtung vorzugeben. Dies spiegelt sich auch in den Vergleichen der Leistungsverteilungen wider. Während man für die radiale Leistungsverteilung mithilfe von DF eine verbesserte Übereinstimmung

mit den Referenzergebnissen erhält (siehe Abb. 5.5), übt die Verwendung von DF nur einen geringen Einfluss auf die radial gemittelte axiale Leistungsverteilung aus (siehe Abb. 5.6). Hierbei werden für beide Rechenfälle die größten axialen Abweichungen von den Referenzergebnissen unmittelbar an den Reflektoren sowie in der axialen Mitte beobachtet: An den Reflektoren wird die Leistung unterschätzt, während sie im axialen Mittelpunkt überschätzt wird.

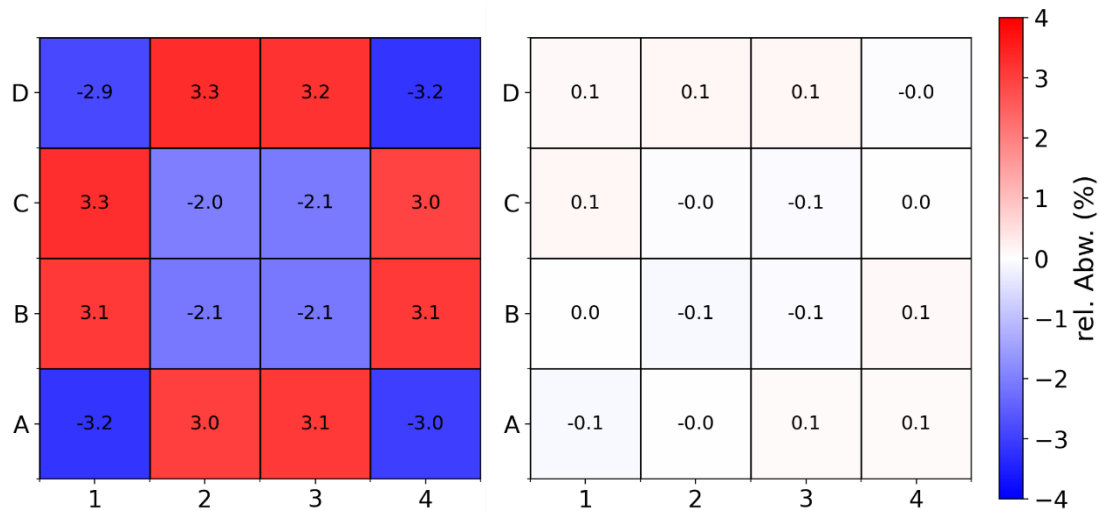


Abb. 5.5 Relative Abweichungen der radialen Leistungsverteilungen von den Referenzwerten für Rechnungen ohne DF (links) und AFEN/NEM-DF (rechts)

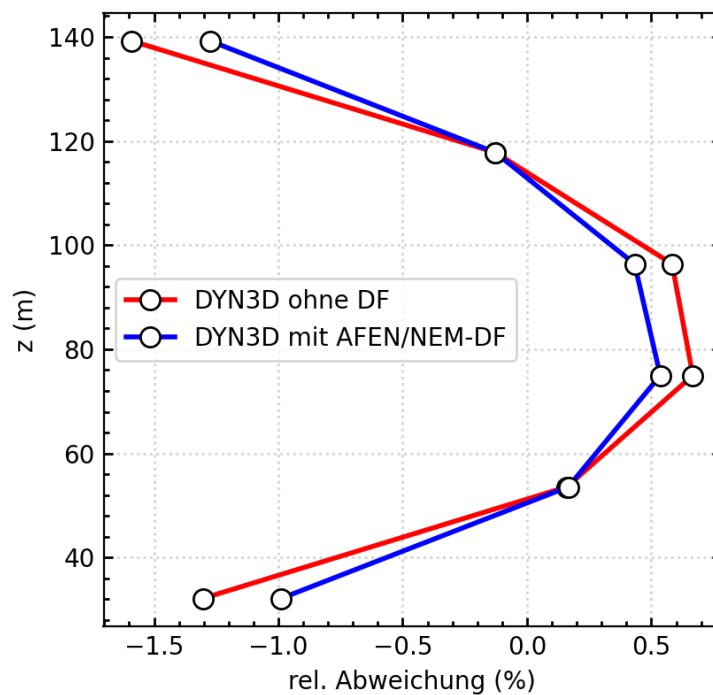


Abb. 5.6 Relative Abweichungen der axialen Leistungsverteilungen von den Referenzergebnissen

5.2 Berechnung und Verwendung von *Full-Scale-Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten* in statischen und transienten Kernrechnungen

Im Folgenden wird die Eignung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten, ermittelt für individuelle Teilregionen eines Monte-Carlo-Ganzkernmodells, zusammen mit AFEN/NEM-DF für den Einsatz in statischen und transienten Ganzkern-Diffusionsrechnungen dargelegt. Aufbauend auf den Untersuchungen im Forschungsvorhaben RS1564 /AUR 21a/ wurde dazu der TMI-1-Minikern aus Phase II des UAM-LWR-Benchmarks /HOU 21/ verwendet. Da jedoch dreidimensionale Monte-Carlo-Ganzkernrechnungen sehr rechenintensiv sind und die Berechnung von parametrisierten Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten viele Rechnungen bedingt, wurde diese Studie demgegenüber auf weit weniger rechenintensive zweidimensionale Monte-Carlo-Ganzkernrechnungen mit reflektierenden axialen Randbedingungen eingegrenzt (Serpent-2D). Die Ganzkern-Diffusionsrechnungen wurden dreidimensional durchgeführt.

5.2.1 TMI-1-Minikern

In Abb. 5.7 wird das Kernlayout des TMI-1-Minikerns gezeigt. Der wassermodierte Kern besteht aus neun identischen 15×15 Brennelementen mit jeweils 204 Brennstäben mit UO_2 , 4 Brennstäben mit $\text{UO}_2\text{-Gd}_2\text{O}_3$, 16 Führungsrohren und einem zentralen Instrumentierungsrohr. Im Fall des UO_2 beträgt die Anreicherung in U-235 4,85 %, beim $\text{UO}_2\text{-Gd}_2\text{O}_3$ Brennstoff ist es 4,12 % U-235 und 2 % Gd. Das zentrale Brennelement kann durch das Einfahren von Steuerstäben bis zur Unterkante des Kerns vollständig kontrolliert werden. Der aktive Kern wird von einem Kernbehälter aus Stahl umgeben. Auf den Kernbehälter folgt eine äußere Wasserschicht, die in ihrer Breite ähnlich zur Kantenlänge eines Brennelements ist. Der Kern hat eine aktive Länge von ca. 365 cm. Bei dieser Benchmark-Anordnung sind in axialer Richtung keine axialen Reflektoren, sondern nur Vakuum-Randbedingungen vorgesehen.

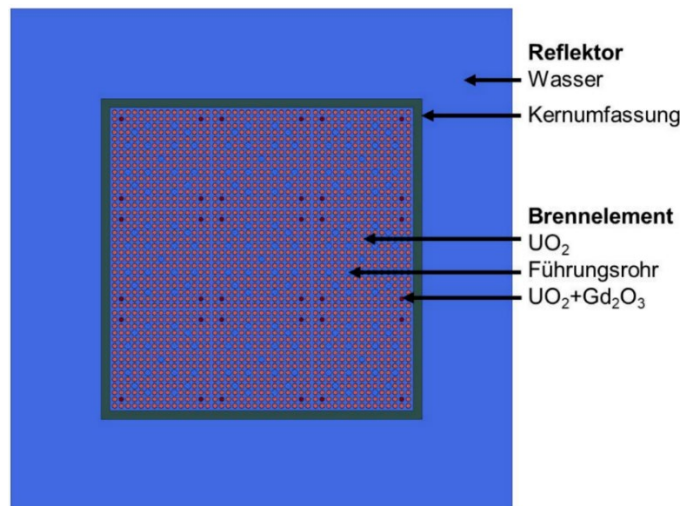


Abb. 5.7 Kernlayout des TMI-1-Minikerns mit 3×3 UO_2 -Brennelemente

Für die nodale Diffusionsrechnung mit DYN3D wurde der Kern inklusive der Reflektoren radial in ein 5×5 Gitter und axial in 16 Abschnitte unterteilt, sodass insgesamt 400 Rechenknoten verwendet wurden. Im erstellten DYN3D-Modell wurde jedes Brenn- und Reflektorelement individuell modelliert, sodass für den unkontrollierten Zustand entsprechend den 3×3 Brenn- und den 16 umgebenden Reflektorelementen ein Satz von 25 verschiedenen Wirkungsquerschnitten für die DYN3D-Wirkungsquerschnittsbibliothek bereitgestellt werden musste. Für die kontrollierten Zustände erhöht sich dieser Satz dementsprechend. Für die nominalen Betriebsbedingungen wurde eine Brennstofftemperatur von 560 K, eine Moderatorichte von $0,75206 \text{ g/cm}^3$ und eine Borkonzentration von 1000 ppm gewählt. In allen drei Raumrichtungen gelten Vakuumrandbedingungen.

In Vorausrechnungen wurden mit Serpent zu verschiedenen Betriebspunkten 2D-Ganzkernrechnungen (im Folgenden „Serpent-2D“) zur Erstellung einer Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsbibliothek durchgeführt. Diese sogenannten Verzweigungsrechnungen umfassten Brennstofftemperaturen von 560 K, 900 K und 1320 K, Moderatorichten von $0,66114 \text{ g/cm}^3$, $0,71187 \text{ g/cm}^3$ und $0,75206 \text{ g/cm}^3$ und Borkonzentrationen von 0 ppm, 1000 ppm und 2000 ppm. Zudem wurden für jeden dieser Betriebspunkte kontrollierte Zustände berechnet, bei denen im zentralen Brennelement des Kerns die Steuerstäbe eingefahren sind.

Kritikalitätsrechnungen mit DYN3D wurden unter nominalen Betriebsbedingungen durchgeführt. Diese Rechnungen wurden zum einen mit DF, die direkt vom Serpent-Code berechnet und ausgegeben wurden, als auch mit der in Kap. 5.1 vorgestellten AFEN/NEM-Methodik durchgeführt.

5.2.2 Rechnungen statischer Kernzustände

Die Serpent-2D-Methodik und die zur Verfügung stehenden DF wurden untereinander sowie mit konventionellen Methoden anhand von zwei- und dreidimensionalen Rechnungen statischer Kernzustände verglichen und getestet. Hierbei wurden, je nach Betrachtungsfall, folgende Rechenfälle zur Erzeugung der Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte und zur Berechnung von DF berücksichtigt:

- 1) Serpent-2D-Methodik unter Verwendung von AFEN/NEM-DF. In dieser Standardanwendung wurden für die umgebenden Brennelemente Wirkungsquerschnitte verwendet, die sich ergeben, wenn das zentrale Brennelement kontrolliert wird, um ebenfalls den Einfluss des zentralen, kontrollierten Brennelements auf die Wirkungsquerschnitte der umgebenden Brennelemente zu berücksichtigen.
- 2) Vereinfachte Serpent-2D-Methodik unter Verwendung von AFEN/NEM-DF. Hierbei wurden für die Brennelemente, die das zentrale, kontrollierte Brennelement umgeben, gänzlich unkontrollierte Wirkungsquerschnitte eingesetzt.
- 3) Vereinfachte Serpent-2D-Methodik (siehe 2)) unter Verwendung der von Serpent bereitgestellten DF (Serpent-DF).
- 4) Serpent-2D-Methodik unter Verwendung von Serpent-DF. Diese Vorgehensweise ist analog zu 1) jedoch mit anderen DF.
- 5) Mit Serpent im unendlichen Gitter berechnete Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte, wobei zur Kondensierung der Wirkungsquerschnitte das unendliche Neutronenspektrum verwendet wurde (Serpent Inf.). Hierbei wurden die von Serpent bereitgestellten DF verwendet.
- 6) Mit Serpent im unendlichen Gitter berechnete Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte, wobei zur Kondensierung der Wirkungsquerschnitte das mittels der B1-Methode Leakage-korrigierte Neutronenspektrum /FRI 12/ verwendet wurde (Serpent B1). Die von Serpent bereitgestellten DF wurden verwendet.
- 7) Mit SCALE im unendlichen Gitter berechnete Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte, wobei zur Kondensierung der Wirkungsquerschnitte das unendliche Neutronenspektrum verwendet wurde (SCALE Inf.). Hierbei wurden die von SCALE bereitgestellten DF verwendet.
- 8) Mit SCALE im unendlichen Gitter berechnete Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte, wobei zur Kondensierung der Wirkungsquerschnitte das mittels der B1-Methode Leakage-korrigierte Neutronenspektrum verwendet wurde (SCALE B1). Die von SCALE bereitgestellten DF wurden verwendet.

Zweidimensionales TMI-1-Minikernmodell

Um die mit der Serpent-2D-Methodik ermittelten Wirkungsquerschnitte auf ihre Eignung hin zu untersuchen, wurde mit DYN3D zunächst eine zweidimensionale Vereinfachung des TMI-1-Minikerns betrachtet. Die Ergebnisse des Neutronenmultiplikationsfaktors und der mittleren quadratischen relativen Abweichung der Leistungsverteilung sind in Tab. 5.5 aufgezeigt.

Tab. 5.5 Ergebnisse zweidimensionaler DYN3D-Rechnungen des unkontrollierten TMI-1 Minikerns

Rechnung	WQ-Generierung	DF	k_{eff}	Reaktivitätsdifferenz [pcm]	RMS (Rel. Abweichung Leistungsverteilung) [%]
Serpent 2D		-	1,08515	-	-
DYN3D 2D	Serpent-2D	AFEN/NEM-DF	1,08516	1	0,04
DYN3D 2D	Serpent-2D	Serpent-DF	1,08700	157	0,33
DYN3D 2D	Serpent Inf.	Serpent-DF	1,08293	-189	0,14

Wie zu erwarten, zeigt die DYN3D-Rechnung mit Wirkungsquerschnitten aus Serpent-2D unter Verwendung der AFEN/NEM-DF (Serpent-2D + AFEN/NEM) eine gute Übereinstimmung mit der Serpent-Referenzrechnung. Auch unter Verwendung der von Serpent direkt bereitgestellten DF (Serpent-2D + Serpent-DF) sind die Ergebnisse zufriedenstellend, wobei hier der Multiplikationsfaktor des Referenzmodells um eine Reaktivitätsdifferenz von 157 pcm überschätzt wird. Zum weiteren Vergleich wurden mit Serpent Wirkungsquerschnitte für das UO_2 -Brennelement und das Reflektorelement jeweils in zweidimensionalen Gittermodellen erzeugt. Hierfür wurde zur Kondensierung der Wirkungsquerschnitte das unendliche Neutronenspektrum (Serpent Inf.) eingesetzt. Auch in diesem Fall sind die Ergebnisse zufriedenstellend, wobei der Neutronenmultiplikationsfaktor um 189 pcm unterschätzt wird. Die beste Übereinstimmung der Leistungsverteilung mit der Referenzlösung wird mit der Serpent-2D-Methodik unter Verwendung von AFEN/NEM-DF erzielt, gefolgt von der Rechnung mit Serpent-Wirkungsquerschnitten im unendlichen Gitter.

Um die Serpent-2D-Methodik genauer zu testen, wurde die zweidimensionale DYN3D-Rechnung des TMI-1-Minikerns für den kontrollierten Zustand wiederholt. Die Ergebnisse sind in Tab. 5.6 gezeigt. Für die Wirkungsquerschnitte aus dem Serpent-2D-Ganzkernmodell wurde zusätzlich die vereinfachte Vorgehensweise betrachtet. Die beste Übereinstimmung mit dem Referenzergebnis wird wiederum mit der Serpent-2D-

Methodik unter Verwendung der AFEN/NEM-DF erzielt. Die vereinfachten Varianten dieser Methodik überschätzen jeweils den Neutronenmultiplikationsfaktor des kontrollierten zweidimensionalen Kerns, während die Rechnung mit Wirkungsquerschnitten, die im unendlichen Gitter erzeugt wurden, das Referenzergebnis unterschätzt.

Tab. 5.6 Ergebnisse zweidimensionaler DYN3D-Rechnungen des kontrollierten TMI-1-Minikerns

Rechnung	WQ-Generierung	DF	k_{eff}	Reaktivitätsdifferenz [pcm]	RMS (Rel. Abweichung Leistungsverteilung) [%]
Serpent 2D	-	-	1,02702	-	-
DYN3D 2D	Serpent-2D	AFEN/NEM-DF	1,02707	5	0,12
DYN3D 2D	Serpent-2D (vereinfacht)	AFEN/NEM-DF	1,02854	144	0,42
DYN3D 2D	Serpent-2D (vereinfacht)	Serpent-DF	1,03018	299	0,68
DYN3D 2D	Serpent Inf.	Serpent-DF	1,02595	-102	0,88

Dreidimensionales TMI-1-Minikernmodell

Im nächsten Schritt werden dreidimensionale Ganzkernrechnungen mit DYN3D durchgeführt. Als Referenzlösung wurde auf das dreidimensionale Serpent-Ganzkernmodell aus dem Forschungsvorhaben RS1564 /AUR 21a/ zurückgegriffen. Für diese Rechnungen ist der Steuerstab zunächst vollständig ausgefahren. Die Ergebnisse sind in Tab. 5.7 für die DYN3D-Rechnungen mit verschiedenen erzeugten Wirkungsquerschnitten und verschiedenen DF aufgezeigt.

Tab. 5.7 Ergebnisse dreidimensionaler DYN3D-Rechnungen des TMI-1-Minikerns mit vollständig ausgefahrenem Steuerstab

Rechnung	WQ-Generierung	DF	k_{eff}	Reaktivitätsdifferenz [pcm]	RMS (Rel. Abweichung Leistungsverteilung) [%]
Serpent 3D	-	-	1,08094	-	-
DYN3D 3D	Serpent-2D	AFEN/NEM	1,08116	19	0,05
DYN3D 3D	Serpent-2D	Serpent-DF	1,08298	174	0,35
DYN3D 3D	Serpent Inf.	Serpent-DF	1,07908	-159	0,12
DYN3D 3D	Serpent B1	Serpent-DF	1,06946	-993	0,40
DYN3D 3D	SCALE Inf.	SCALE	1,07442	-561	0,29
DYN3D 3D	SCALE B1	SCALE	1,06401	-1472	0,16

Wie bei den zweidimensionalen DYN3D-Rechnungen wird mit den Wirkungsquerschnitten aus den Serpent-2D-Ganzkernrechnungen und den AFEN/NEM-DF eine gute Übereinstimmung zum Referenzergebnis erreicht. Auch unter Verwendung von DF direkt aus der zweidimensionalen Serpent-Ganzkernrechnung können zufriedenstellende Ergebnisse erzielt werden. Wiederum wurden zum Vergleich Reflektor- und Brennelement-Wirkungsquerschnitte, die mit Serpent und zusätzlich mit SCALE im unendlichen Gitter erzeugt wurden, in der Ganzkernrechnung mit DYN3D eingesetzt. Für beide Rechnungen wurde zur Kondensierung der Wirkungsquerschnitte das unendliche als auch das B1-korrigierte Neutronenspektrum verwendet.

Mit Serpent werden mit den Wirkungsquerschnitten, die mit dem unendlichen Neutronenspektrum (Serpent Inf.) erzeugt werden, zufriedenstellende Ergebnisse erzielt, während mit SCALE (SCALE Inf.) bereits größere Abweichungen auftreten. Sowohl für die Serpent- als auch die SCALE-Wirkungsquerschnitte, die mit dem B1-korrigierten Neutronenspektrum erzeugt wurden, sind die Resultate nicht zufriedenstellend.

Des Weiteren wurden die Rechnungen sowohl mit dem vollständig in das zentrale Brennelement eingefahrenen Steuerstab als auch mit dem um 54 cm ausgefahrenen Steuerstab wiederholt und mit Serpent-3D-Ganzkernrechnungen als Referenz verglichen. Die Ergebnisse sind in Tab. 5.8 bzw. Tab. 5.9 aufgeführt. Im Allgemeinen werden sowohl für die mit den Serpent-2D-Ganzkernmodellen als auch die mit Serpent im unendlichen Gitter berechneten und mit dem unendlichen Neutronenspektrum kondensierten Wirkungsquerschnitte akzeptable Ergebnisse erzielt. Auch in diesen Fällen führen die SCALE-Wirkungsquerschnitte zu größeren Abweichungen.

Tab. 5.8 Ergebnisse dreidimensionaler DYN3D-Rechnungen des TMI-1-Minikerns mit vollständig eingefahrenem Steuerstab

Rechnung	WQ-Generierung	DF	k_{eff}	Reaktivitätsdifferenz [pcm]	RMS (Rel. Abweichung Leistungsverteilung) [%]
Serpent 3D	-	-	1,02320	-	-
DYN3D 3D	Serpent-2D	AFEN/NEM	1,02329	9	0,22
DYN3D 3D	Serpent-2D (vereinfacht)	AFEN/NEM	1,02479	152	0,48
DYN3D 3D	Serpent-2D (vereinfacht)	Serpent-DF	1,02641	306	0,75
DYN3D 3D	Serpent Inf.	Serpent-DF	1,02232	-85	0,84
DYN3D 3D	Serpent B1	Serpent-DF	1,01315	-970	0,77
DYN3D 3D	SCALE Inf.	SCALE	1,01782	-516	0,48
DYN3D 3D	SCALE B1	SCALE	1,00780	-1494	1,64

Für den vollständig eingefahrenen Steuerstab wird das beste Ergebnis mit dem Serpent-2D-Ganzkernmodell unter Verwendung der AFEN/NEM-DF erzielt.

Tab. 5.9 Ergebnisse dreidimensionaler DYN3D-Rechnungen des TMI-1-Minikerns mit teilweise ausgefahrenem Steuerstab

Rechnung	WQ-Generierung	DF	k_{eff}	Reaktivitätsdifferenz [pcm]	RMS (Rel. Abweichung Leistungsverteilung) [%]
Serpent 3D	-	-	1,03010	-	-
DYN3D 3D	Serpent-2D	AFEN/NEM	1,02894	-109	0,78
DYN3D 3D	Serpent-2D (vereinfacht)	AFEN/NEM	1,03000	-10	0,80
DYN3D 3D	Serpent-2D (vereinfacht)	Serpent-DF	1,03162	143	0,68
DYN3D 3D	Serpent Inf.	Serpent-DF	1,02801	-198	1,30
DYN3D 3D	Serpent B1	Serpent-DF	1,01838	-1118	0,56
DYN3D 3D	SCALE Inf.	SCALE	1,02354	-623	0,77
DYN3D 3D	SCALE B1	SCALE	1,01308	-1631	0,34

Für den teilweise ausgefahrenen Steuerstab werden sowohl für die Rechnung mit den im unendlichen Gitter mit Serpent erzeugten Wirkungsquerschnitten als auch den Serpent-2D-Ganzkernmodellen unter Verwendung der AFEN/NEM-DF die besten Ergebnisse erreicht.

Wie bereits für den unkontrollierten Zustand unterschätzen die Rechnungen, die mit den B1-korrigierten Wirkungsquerschnitten für den vollständig kontrollierten sowie teils kontrollierten Zustand durchgeführt wurden, die Multiplikationsfaktoren der jeweiligen Referenzrechnungen. Rechnungen auf Basis von B1-korrigierten Wirkungsquerschnitten wurden daher für die später durchgeführten Transientenrechnungen nicht berücksichtigt.

Zusammenfassung der statischen Ganzkern-Rechnungen

Die mit der Serpent-2D-Methode mit AFEN/NEM-DF erzeugten Wirkungsquerschnitte für die Verwendung in DYN3D-Ganzkernrechnungen liefern für statische Rechnungen eine gute Übereinstimmung mit den Referenzergebnissen. Für zweidimensionale DYN3D-Rechnungen sind die Ergebnisse wie zu erwarten nahezu identisch zu den Referenzwerten. Für dreidimensionale DYN3D-Rechnungen werden moderate Unterschiede in den Reaktivitätsdifferenzen beobachtet, die Leistungsverteilungen zeigen jedoch weiterhin eine gute Übereinstimmung zu den Referenzergebnissen auf. Rechnungen auf Basis von B1-korrigierten Wirkungsquerschnitten unterschätzen die Referenzergebnisse zum Teil inakzeptabel deutlich, sodass die Anwendung der B1-Korrektur für diese Art von statischen Ganzkern-Diffusionsrechnungen zur Bestimmung des Multiplikationsfaktors und der Leistungsverteilung nicht zu empfehlen ist. Die B1-korrigierten Wirkungsquerschnitte werden daher auch nicht weiter in den Transientenrechnungen verwendet.

Im Allgemeinen liefern alle hier angewandten Serpent-2D-Methoden (vereinfacht, AFEN/NEM-DF, Serpent-DF etc.) zur Erzeugung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten und die mit Serpent im unendlichen Gitter erzeugten Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte (Serpent Inf.) gute Ergebnisse. Die Resultate zwischen den verschiedenen Methoden weisen eine geringe Streuung auf. Im nächsten Abschnitt wurden auf Basis dieser Rechnungen Transientenrechnungen durchgeführt.

5.2.3 Transientenrechnungen

Für die in Kap. 5.2.2 diskutierten, akzeptablen Rechenmodelle wurden Steuerstabverfahrenstransienten gerechnet. Um den Rechenbedarf der Transientenrechnungen zu reduzieren, wurde auf die Kopplung mit ATHLET verzichtet und das eigene Thermohydraulikmodell von DYN3D verwendet.

Als Ausgangssituation wurden für den TMI-1-Minikern die kritischen Borkonzentrationen bei vollständig eingefahrenem Steuerstab für die jeweiligen Rechenfälle berechnet. Die resultierenden kritischen Borkonzentrationen sind in Tab. 5.10 aufgezeigt.

Tab. 5.10 Berechnete kritische Borkonzentrationen für die betrachteten Rechenfälle des TMI-1-Minikerns

WQ-Generierung	DF	Kritische Borkonzentration [ppm]
Serpent-2D	AFEN/NEM	1286
Serpent-2D (vereinfacht)	AFEN/NEM	1304
Serpent-2D (vereinfacht)	Serpent-DF	1324
Serpent Inf.	Serpent-DF	1273
SCALE Inf.	SCALE	1216

Betrachtet wurden davon ausgehend zwei verschiedene Transienten, die beide durch das Verfahren des Steuerstabs und somit durch eine Reaktivitätszufuhr ausgelöst wurden. Ausgangspunkt beider Transienten ist der kritische Kern mit vollständig eingefahrenem Steuerstab. Für beide Fälle beginnt das Verfahren des Steuerstabs nach 4 s.

In Transiente 1 wurde der Steuerstab über 10 s hinweg um 54 cm ausgefahren und anschließend über 20 s wieder vollständig in den Kern eingefahren. Hierbei ergab sich für alle Rechenfälle ein verzögert überkritischer Zustand.

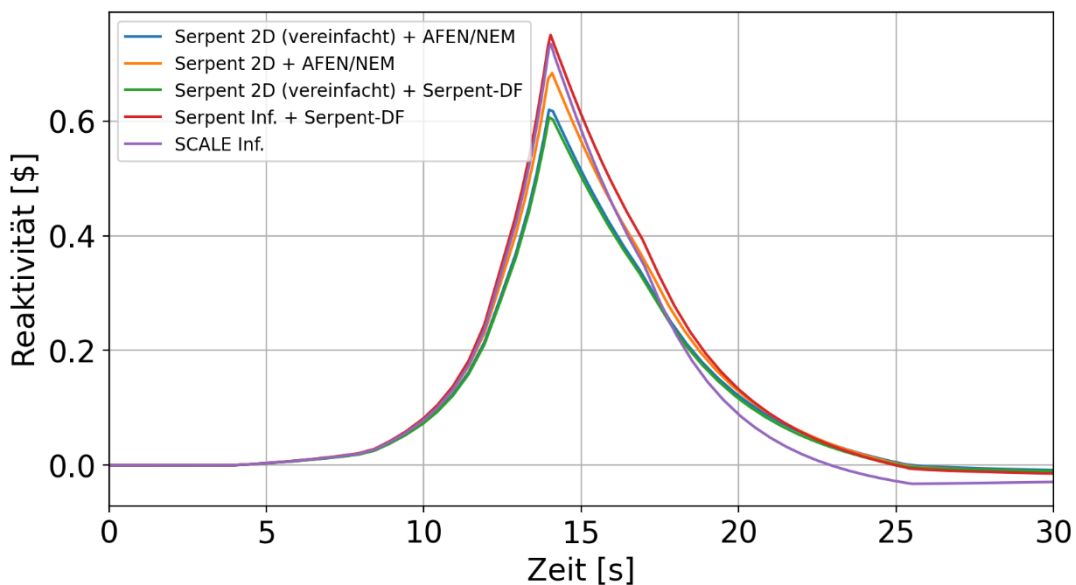


Abb. 5.8 Verlauf der Reaktivität während der Transiente 1

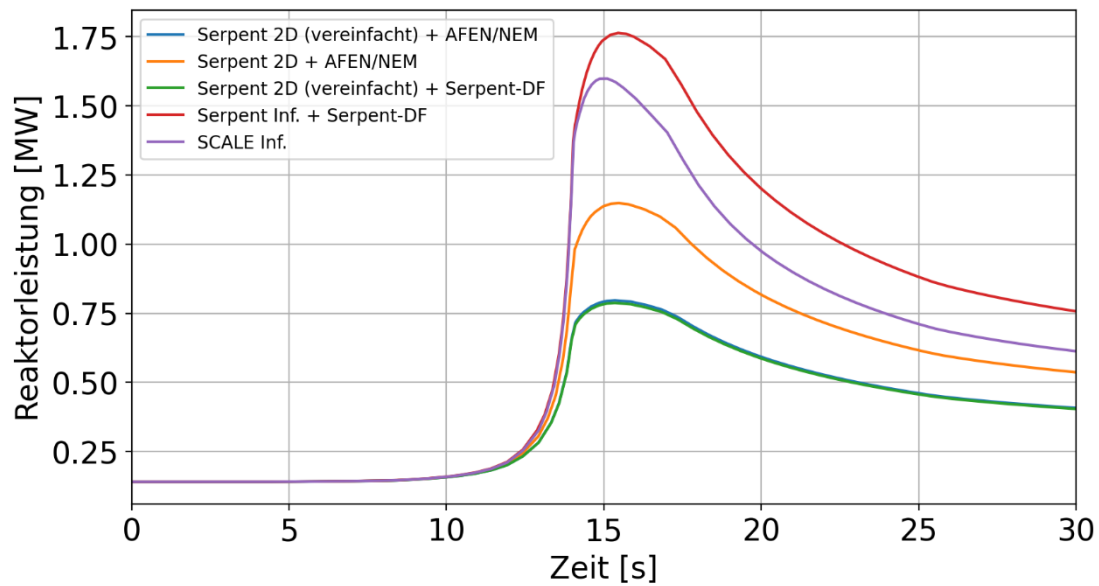


Abb. 5.9 Verlauf der Leistung während der Transiente 1

In Abb. 5.8 ist die Reaktivität und in Abb. 5.9 die Leistung über die Dauer der Transiente 1 dargestellt. Wie ersichtlich, ergeben sich für die verschiedenen Rechenmethoden unterschiedliche maximale Reaktivitäten und somit auch unterschiedliche maximale Werte für die Leistung. Dabei verhalten sich die Reaktivitäten der beiden Rechnungen basierend auf Wirkungsquerschnitten im unendlichen Gitter ähnlich (Serpent Inf. & SCALE Inf.). Beide zeigen eine deutlich größere Reaktivität und somit Leistung als die anderen Fälle auf. Ebenso verhalten sich die Reaktivitäten der vereinfachten Serpent-2D-Methoden ähnlich. Beide zeigen eine verringerte Reaktivität im Vergleich zu den anderen Fällen und somit kleinere Zunahmen der Leistung während der Transiente. Die Reaktivität der Rechnung basierend auf der Serpent-2D-Methodik unter Verwendung von AFEN/NEM-DF liegt zwischen beiden Grenzfällen.

In Transiente 2 wurde der Steuerstab innerhalb von 0,0145 s um 58 cm ausgefahren und verblieb dort für die Dauer der Simulation. Die Reaktivität und die Leistung über die Dauer der Transiente sind in Abb. 5.10 bzw. Abb. 5.11 aufgetragen.

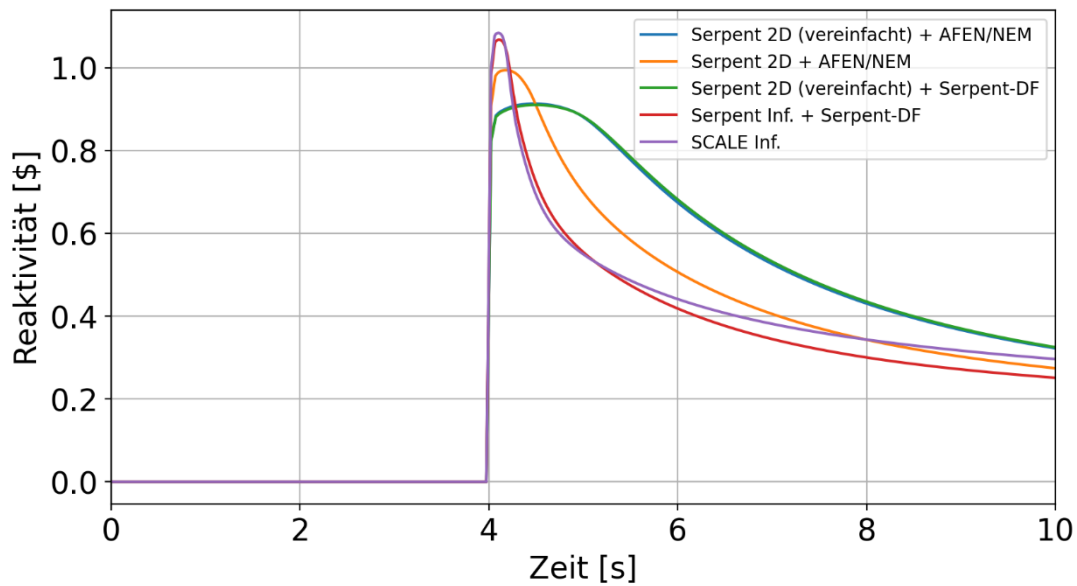


Abb. 5.10 Verlauf der Reaktivität während der Transiente 2

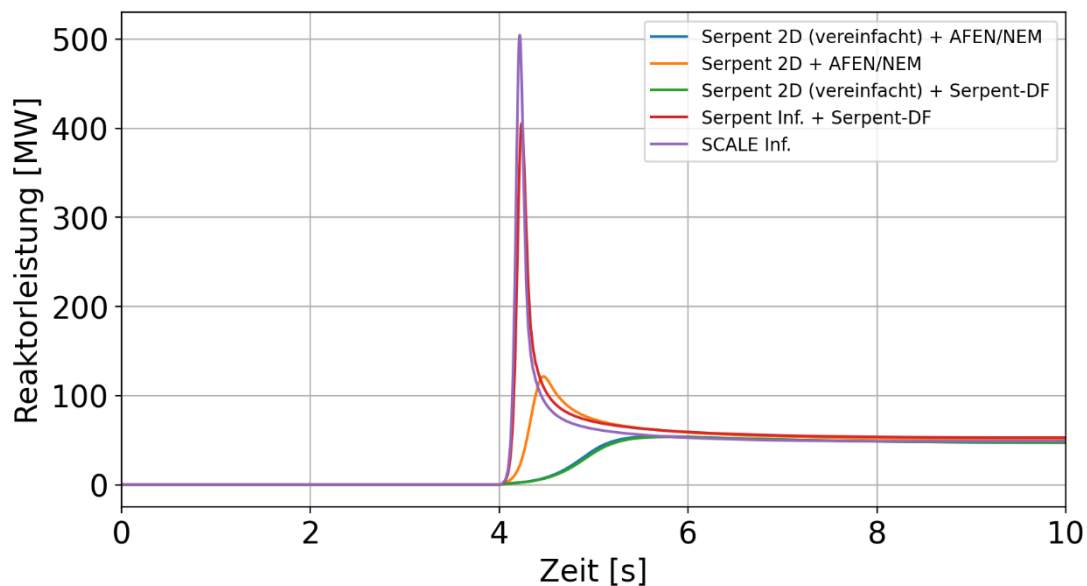


Abb. 5.11 Verlauf der Leistung während der Transiente 2

Wie ersichtlich unterscheidet sich das Verhalten für die verschiedenen Fälle deutlich. Die beiden Rechnungen basierend auf Wirkungsquerschnitten im unendlichen Gitter (Serpent Inf. & SCALE Inf.) sind prompt überkritisch, während die Rechnungen basierend auf der vereinfachten Serpent-2D-Methodik verzögert überkritisch sind. Die Rechnung basierend auf der Serpent-2D-Methodik mit AFEN/NEM-DF liegt wiederum zwischen diesen Grenzfällen. Entsprechend den Reaktivitäten verhalten sich auch die Leistungen während der Transienten.

Um die Abweichungen unter den Rechenfällen zu analysieren, wurde die Steuerstabwirksamkeit bei verschiedenen Einfahrtiefen bestimmt. Wie aus Tab. 5.11 ersichtlich, werden für alle Rechenfälle für die Steuerstabwirksamkeiten zwischen vollständig ein- und ausgefahrenem Steuerstab nur geringe Abweichungen von der dreidimensionalen Serpent-Referenzrechnung beobachtet. Die beste Übereinstimmung wird mit einer relativen Abweichung von 0,2 % mit dem Serpent-2D-Modell mit AFEN/NEM-DF erreicht, während das Modell mit im unendlichen Gitter bestimmten Wirkungsquerschnitten eine relative Abweichung von -1,4 %, und das vereinfachte Serpent-2D-Modell eine Abweichung von -2,5 % aufweist.

Tab. 5.11 Steuerstabwirksamkeit zwischen vollständig eingefahrenem und ausgefahrenem Steuerstab

Rechnung	WQ-Generierung	DF	Steuerstabwirksamkeit [pcm]
Serpent 3D	-	-	5221
DYN3D 3D	Serpent-2D	AFEN/NEM	5231
DYN3D 3D	Serpent-2D (vereinfacht)	AFEN/NEM	5088
DYN3D 3D	Serpent Inf.	Serpent-DF	5145

Betrachtet man die Steuerstabwirksamkeit zwischen dem vollständig eingefahrenen und dem um 54 cm ausgefahrenen Steuerstab, werden Abweichungen von der Serpent-Referenzrechnung beobachtet. Die Steuerstabwirksamkeiten sind in Tab. 5.12 aufgetragen. Zufriedenstellende Vergleichsergebnisse liefern die Rechnungen mit den im unendlichen Gitter berechneten Wirkungsquerschnitten und die Serpent-2D-Methodik, während das am deutlichsten abweichendes Ergebnis bei der vereinfachten Serpent-2D-Rechnung auftritt. Es wird vermutet, dass die beobachtete geringere Steuerstabwirksamkeit bei der vereinfachten Serpent-2D-Methode eine mögliche Ursache der deutlich geringeren Reaktivitätsspitzen bei den jeweiligen Transientenrechnungen ist.

Tab. 5.12 Steuerstabwirksamkeit zwischen vollständig eingefahrenem und teilweise ausgefahrenem (54 cm) Steuerstab

Rechnung	WQ-Generierung	DF	Steuerstabwirksamkeit [pcm]
Serpent 3D	-	-	655
DYN3D 3D	Serpent-2D	AFEN/NEM	537
DYN3D 3D	Serpent-2D (vereinfacht)	AFEN/NEM	494
DYN3D 3D	Serpent Inf.	Serpent-DF	541

Zusammenfassung der transienten Ganzkern-Rechnungen

Während für statische Rechnungen die Streuung zwischen der hier getroffenen Auswahl an Rechenmethoden vernachlässigbar war, treten bei Transientenrechnungen deutliche Abweichungen zwischen diesen Rechenmethoden auf. Da für den hier betrachteten TMI-1-Minikern keine Referenzdaten für Transienten vorliegen, ist keine eindeutige Bewertung der Ergebnisse möglich. Zur Einordnung der Methoden und Ergebnisse wäre eine Erweiterung dieser Studie auf z. B. den Kern des SPERT III-Forschungsreaktors erforderlich. Für diesen Kern liegen sowohl experimentelle Werte zu statischen Kernkonfigurationen als auch zu Reaktivitätsexperimenten vor, sodass dieser sich zu einer Überprüfung der hier angewendeten Rechenmethoden eignen würde. Jedoch ist der Kern des SPERT III mit 60 Brennelementen deutlich größer als der hier betrachtete TMI-1-Minikern. Äquivalente Studien lassen deshalb einen deutlich höheren Rechenaufwand zur Umsetzung der Serpent-2D-Methode erwarten.

6 Zusammenfassung und Ausblick

Im BMUKN-Forschungsvorhaben RS1601 „MOUSSAKA – Moderne Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen sowie Kernreaktoranalysen“ wurden Neu- und Weiterentwicklungen, Validierungen und Anwendungen von reaktorphysikalischen Berechnungsverfahren sowie von Methoden zu Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen bezüglich nuklearer Wirkungsquerschnittsdaten durchgeführt.

Die Arbeiten und erzielten Ergebnisse zum Kernsimulator KMACS, zur Eignungsprüfung nuklearer Datenbibliotheken, zu Methoden für Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen und zur Verwendung von *Full-Scale*-Wirkungsquerschnitten in stationären und transienten Ganzkern-Diffusionsrechnungen tragen zu einer Erhöhung der Aussagefähigkeit bei nuklearen Sicherheitsanalysen von DWR, WWER und LW-SMR nach aktuellem Stand von Wissenschaft und Technik bei.

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

6.1 Weiterentwicklung, Validierung und Anwendung des GRS-Kernsimulators KMACS

Das KMACS-Modul *kspect* zur Ansteuerung von Gittercodes zwecks der Vorausrechnung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten wurde technisch überarbeitet. Die für die Vorausrechnung notwendigen Eingabedaten wie der Geometrie von Brenn- oder Reflektorelementen sowie entsprechende Nuklidzusammensetzungen werden dadurch einheitlich für die Verwendung in den angebundenen Gittercodes aufbereitet und Inkonsistenzen zwischen den Modellen der Gittercodes vermieden. In dem Zuge wurden Modelle zur thermischen Ausdehnung implementiert, um die zumeist für Raumtemperatur gegebenen Geometrie- und Materialdaten der Brennelemente automatisiert für eine Betriebstemperatur anzupassen. Die korrekte Implementierung wurde mittels einer Zyklusabbrandrechnung eines Vor-KONVOI-Kerns mit zuvor vorausgerechneten Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten auf der Basis automatisiert ausgedehnter Eingabedaten verifiziert. Die resultierende kritische Borkonzentration wies akzeptable Abweichungen zwischen 6 ppm und -26 ppm zu Referenzergebnissen auf.

Die Anbindung des deterministischen Gittercodes NEWT aus dem SCALE 6.2-Programmsystem wurde überarbeitet, um von der Verbesserung und Weiterentwicklung des Moduls *kspect* bei der Erstellung von Eingabedatensätzen für NEWT zu profitieren. Dabei wurde insbesondere durch programmtechnische Änderungen und einer Erweiterung der KMACS-Eingabe die Beschränkung auf ein einziges Absorbermaterial aufgehoben, damit für Brennelemente, deren Steuerstäbe in Längsrichtung aus unterschiedlichen Absorbermaterialien bestehen, vollständige Datensätze von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten vorausgerechnet werden können.

Die Anbindung des deterministischen Gittercodes HELIOS-2 wurde um die Modellerstellung von hexagonalen Brennelement- und Reflektorgeometrien erweitert. Neben den deterministischen Gittercodes wurde zudem der auf der Monte-Carlo-Methode basierende Gittercode Serpent 2.2 an *kspect* angebunden. Damit können für quadratische als auch für hexagonale Brennelement- und Reflektorgeometrien basierend auf kontinuierlichen Wirkungsquerschnittsdaten anstelle von Multigruppen-Daten die Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte, Diskontinuitätsfaktoren und Stableistungsfaktoren ermittelt werden.

Das KMACS-Modul *kflux* zur Durchführung von Ganzkern-Flussrechnungen sowie gekoppelten Ganzkern-Fluss-Thermohydraulikrechnungen erfuhr an verschiedenen Stellen Überarbeitungen. Die Anbindung des Reaktordynamikcodes DYN3D wurde um die Modellierung von Steuerstäben, die in Längsrichtung aus mehreren Absorbermaterialien bestehen, erweitert, um die Wirksamkeit solcher Steuerstäbe in Ganzkernrechnungen westlicher DWR und WWER akkurater vorherzusagen.

Die Erstellung von Eingabedatensätzen für den Thermohydrauliksystemcode ATHLET durch *kflux* wurde auf Schablonen von Abschnitten des ATHLET-Eingabedatenformats umgestellt. Dies ermöglicht eine flexible Anpassung an die Anforderungen bestehender und neuer ATHLET-Versionen ohne Fallunterscheidungen. Gleichzeitig erfuhr das ATHLET-Modell Verbesserungen: Über die Einführung einer abwärtsgerichteten Definitionsreihenfolge der Thermofluidobjekte wird erreicht, dass die Druckrandbedingung am Kernaustritt eingehalten wird. Mit der Ergänzung eines unteren und eines oberen Plenums sind die Kernkanäle am Kerneintritt sowie am Kernaustritt miteinander verbunden. Die Aufteilung des gesamten Kühlmittelmassenstroms auf die Kernkanäle erfolgt damit nun simulativ durch ATHLET. Die Flexibilisierung der ATHLET-Modellerstellung ermöglicht zudem die Definition von Hüllrohren mit einer Hüllrohrbeschichtung. Plausible Ergebnisse wurden für eine exemplarische Zyklusabbrandrechnung erreicht, in der bei 32

von 193 Brennelementen eine Hüllrohrbeschichtung aus Chrom als Beispiel für ATF angenommen wurde.

Das KMACS-Modul *kpostal* zur Durchführung nachgeschalteter Unterkanal-Thermohydraulikrechnungen wurde um die Erstellung von CTF-Modellen von hexagonalen Brennelementen erweitert, um zu gewählten Zykluszeitpunkten für das höchstbelastete Brennelement oder eine Auswahl von Brennelementen den Abstand zum Filmsieden stabaufgelöst zu ermitteln. Um eine benutzerfreundliche Nachrechnung von Steuerstabwirksamkeiten und Reaktivitätskoeffizienten aus Anfahrtests zu ermöglichen, wurde die KMACS-Eingabe um optionale Eingabeparameter und KMACS um die entsprechende Funktionalität erweitert.

Im Rahmen von Querschnittsaufgaben wurden für eine erleichterte Anwendung von KMACS eine Befehlszeilenschnittstelle sowie eine Funktionalität zur Validierung des KMACS-Eingabedatensatzes implementiert. Neue Plotfunktionen im KMACS-Modul *kvip* erlauben eine vereinfachte Visualisierung sowohl von Teilen der KMACS-Eingabe, wie z. B. der Kernbeladung, Anordnung der Steuerstabbänke, Layout der Brennelemente, als auch von Ergebnissen wie z. B. der normierten Brennelementleistungsverteilung und der Verteilung der Stablängenleistung. Letztere Darstellungen lassen sich auch auf Ausschnitte des Kerns einschränken.

Zur Verifikation und Validierung der Entwicklungsarbeiten an KMACS wurden Nachrechnungen des Zustands Nulllast-Heiß und des ersten Betriebszyklus des BEAVRS-Benchmarks und des X2-Benchmarks sowie von verschiedenen Anfahrtests des TVA Watts Bar Unit 1-Benchmarks durchgeführt. Bei den Nachrechnungen der Nulllast-Heiß-Zustände erzielten die Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte von Serpent, gegenüber den mit NEWT und HELIOS erzeugten, die beste Übereinstimmung beim Multiplikationsfaktor und der Leistungsverteilung mit den Referenz-Ganzkernrechnungen des Monte-Carlo-Codes Serpent mit kontinuierlichen Wirkungsquerschnittsdaten. Reaktivitätsdifferenzen von weniger als 100 pcm und relative Abweichungen bei der Leistungsverteilung von weniger als 3,4 % wurden erzielt. Mit den Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten von NEWT oder HELIOS wurden größere Abweichungen bei der Leistungsverteilung mit Werten von ca. 6 % beobachtet.

Im Fall der Zyklusabbrandrechnung des BEAVRS-Benchmarks erzielten die Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte von NEWT mit ATHLET-Q/C oder DYN3D eine gute Übereinstimmung mit der gemessenen kritischen Borkonzentration. ATHLET-Q/C überschätzt

im Mittel über alle Zykluszeitpunkte die Messwerte um 14 ppm, DYN3D um 21 ppm. Die Verwendung des trivialen Abbrandmoduls von KMACS oder des mikroskopischen Inventarcodes VENTINA zur Berechnung der Abbrandverteilung bewirkte hier nur einen vernachlässigbaren Unterschied von im Mittel 2 ppm Bor. Die Verwendung der Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte führte zu einem Unterschätzen der Messwerte um bis zu -30 ppm. Dies konnte auf eine erhöhte Produktion des Neutronengiftes Sm-149 durch eine im Vergleich zu den Werten von NEWT höhere Spaltproduktausbeute von Pm-149 zurückgeführt werden. Der Umgang mit diesen Unterschieden wird in zukünftigen Studien untersucht werden. Bei der Zyklusabbrandrechnung des X2-Kerns erreichen die Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte von NEWT mit DYN3D eine mittlere Abweichung von 4 ppm zur gemessenen Borkonzentration. Lediglich bei kurzzeitigen Steuerstabbewegungen und am Ende des Zyklus werden größere Abweichungen beobachtet. Die Vorausrechnung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten mit HELIOS für den Einsatz in Zyklusabbrandrechnungen konnte aufgrund von Problemen bei der Modellerstellung bezüglich einer korrekten Erfassung der Neutronengifte Xe-135 und Sm-149 noch nicht umgesetzt werden. Dieses Problem soll in zukünftigen Entwicklungsarbeiten an KMACS gelöst werden.

Für die Anfahrtests des TVA Watts Bar Unit 1-Benchmarks wurden Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte mit NEWT sowie mit HELIOS berechnet und in DYN3D eingesetzt. Zwischen beiden sowie, soweit verfügbar, zu Referenzergebnissen und Messwerten zeigte sich eine zufriedenstellende Übereinstimmung.

Ferner wurde die Anbindung des von der GRS entwickelten Neutronenkinetikcodes FENNECS an KMACS erprobt, um diesen zukünftig neben Q/C und DYN3D einzusetzen. Stationäre Ganzkern-Fluss-Rechnungen des SPERT III-Forschungsreaktors mit Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten von NEWT lieferten eine gute Übereinstimmung bei der Steuerstabwirksamkeit im Vergleich zu einer Referenzrechnung mit Serpent. Für den ersten Zyklus des BEAVRS-Benchmarks erzielte FENNECS gekoppelt mit ATHLET eine gute Übereinstimmung mit der gemessenen Borkonzentration mit Abweichungen von weniger als 25 ppm über den gesamten Zyklus.

Auf Basis eines NuScale-ähnlichen LW-SMR mit 37 Brennelementen und einem *Heavy*-Reflektor wurde die Anwendbarkeit von KMACS für Kernsimulatorrechnungen von LW-SMR überprüft. Dazu erfolgte die Berechnung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten mit NEWT und die Ganzkern-Flussrechnung mit DYN3D. Der resultierende Multiplikationsfaktor und die Leistungsverteilung sind in zufriedenstellender Übereinstimmung

mit Ergebnissen eines für diesen Vergleich erstellten Serpent-Referenzmodells. Offensichtliche Defizite in der Modellierbarkeit eines solchen LW-SMR mit KMACS traten bislang nicht zutage. Unzulänglichkeiten sind jedoch künftig erwartbar, sobald eine Zyklusabbrandrechnung mit KMACS für ein LW-SMR durchgeführt wird, bei dem die Überschussreaktivität nicht durch Borsäure im Kühlmittel sondern ausschließlich durch verfahrbare Steuerstäbe kompensiert wird (sog. borfreier Kern). Hierfür werden wesentliche Modelländerungen und -erweiterungen in KMACS als erforderlich angesehen.

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

Die nuklearen Datenbibliotheken ENDF/B-VII.1, ENDF/B-VIII.0, JEFF-3.1.2, JEFF-3.2 und JEFF-3.3 wurden zur Nachrechnung von thermischen sowie Flüssigmetall-gekühlten Reaktorsystemen erprobt. Dazu wurden 19 thermische und 19 schnelle Benchmark-Anordnungen aus dem ICSBEP-Handbuch und dem IRPhEP-Handbuch unter Verwendung der Datenbibliotheken mit dem Monte-Carlo-Code MCNP 6.1 nachgerechnet. Im Fall der thermischen Benchmark-Anordnungen liefern alle Datenbibliotheken eine zufriedenstellende Übereinstimmung zwischen dem mit MCNP ermittelten Multiplikationsfaktor und dem Benchmark-Wert. Bei Betrachtung der über die Anordnungen gemittelten relativen absoluten Abweichung zeigte sich, dass JEFF-3.3 zu den geringsten Abweichungen mit einem Wert von 0,23 % und ENDF/B-VIII.0 zu den höchsten Abweichungen mit einem Wert von 0,28 % führt.

Für die betrachteten Anordnungen mit einem schnellen Neutronenspektrum zeigte sich, dass ENDF/B-VII.1 insgesamt zu einer guten Übereinstimmung mit den Benchmark-Werten führt. Die Verwendung von ENDF/B-VIII.0 führt zu einer systematischen Unterschätzung um bis zu drei Benchmark-Standardabweichungen. Im Vergleich dazu überschätzt JEFF-3.3 die Benchmark-Werte systematisch um bis zu 8,8 Benchmark-Standardabweichungen. Qualitativ ähnlich jedoch mit geringeren Abweichungen verhält sich JEFF-3.1.2. Bei Betrachtung der über die Anordnungen gemittelten relativen absoluten Abweichung zeigte sich, dass die Verwendung von ENDF/B-VII.1 zu den geringsten Abweichungen mit einem Wert von 0,13 % und JEFF-3.3 zu den größten Abweichungen mit einem Wert von 0,44 % führt. In einer weitergehenden Untersuchung wurde festgestellt, dass ein Austausch der Wirkungsquerschnittsdaten von U-238 in JEFF-3.3 mit entsprechenden Daten aus ENDF/B-VII.1 zu einer deutlich besseren Übereinstimmung mit den Benchmark-Werten im Vergleich zur Verwendung der unveränderten JEFF-3.3-Datenbibliothek führt.

XSUSA wurde um die Methodik zur linearen Regressionsanalyse, genannt XSUSA(LR), erweitert. Die Anwendung wurde an zwei generischen DWR-Kernen der Generation-III aus dem UAM-LWR-Benchmark der OECD/NEA erprobt. Dieses Verfahren ermöglicht die Bestimmung von Sensitivitätsmaßen, die in ihrer Interpretation vergleichbar mit denen aus der deterministischen linearen Störungstheorie sind. Für den ausschließlich mit UO_2 -Brennstoff beladenen Kern sowie für den mit UO_2 - und MOX-Brennstoff beladenen Kern wurde für die Unsicherheit des Multiplikationsfaktors und der Rangfolge der Hauptbeiträge zu dieser Unsicherheit eine gute Übereinstimmung zwischen dem XSUSA(LR)-Verfahren und dem auf Störungstheorie basierenden deterministischen Code TSUNAMI aus SCALE 6.2 beobachtet. Zudem wurde demonstriert, dass mit XSUSA(LR) über die Ermittlung entsprechender Sensitivitäten auch die Hauptbeiträge zu den Unsicherheiten von Brennelementleistungen bestimmt werden können. Dies ist mit dem störungstheoretischen Ansatz in TSUNAMI nicht möglich.

XSUSA wurde darüber hinaus um die Variation von Wirkungsquerschnittsdaten in kontinuierlicher Energiedarstellung erweitert, um den Einfluss der Unsicherheiten nuklearer Daten auf Rechenergebnisse von Monte-Carlo-Neutronentransportrechnungen zu erfassen. Mit dieser Erweiterung, genannt XSUSA-CE, wurden die Vorteile von Monte-Carlo-Neutronentransportrechnungen gegenüber deterministischen Verfahren, nämlich die Verwendung kontinuierlicher Wirkungsquerschnittsdaten und die Modellierung komplexer Kerngeometrien ohne wesentliche Näherungen, in Unsicherheitsanalysen zugänglich. Kontinuierliche Wirkungsquerschnittsdaten im für den Monte-Carlo-Code Serpent üblichen ACE-Format werden stichprobenbasiert auf der Basis von Multigruppen-Kovarianzdaten variiert. Dabei wird zuvor eine Erweiterung der ACE-Daten vorgenommen, um sicherzustellen, dass zwecks einer konsistenten Variation in jedem Energieintervall der Kovarianzdaten Datenpunkte vorhanden sind. Darüber hinaus werden die Summenregeln beachtet, d. h., dass z. B. eine Variation des elastischen Streuwirkungsquerschnitts eine Variation des totalen Wirkungsquerschnitts bedingt. Zur Erprobung des Verfahrens wurden für verschiedene kritische Experimente mittels direkter Variation der Wirkungsquerschnittsdaten Sensitivitätsprofile des Multiplikationsfaktors zu den jeweils variierten Wirkungsquerschnitten ermittelt. Die erhaltenen Sensitivitätsprofile sind in akzeptabler Übereinstimmung mit Referenzergebnissen von TSUNAMI und dem Serpent-eigenen Sensitivitätsberechnungsverfahren. Unter Verwendung der SCALE 6.2-Kovarianzdaten wurden schließlich mit XSUSA-CE Unsicherheitsanalysen für acht kritische Experimente durchgeführt. Mit Ausnahme des Experiments HEU-SOL-THERM-009 wurde eine gute Übereinstimmung der jeweils ermittelten Unsicherheiten für den Multiplikationsfaktor mit Referenzergebnissen von TSUNAMI erzielt.

Stichprobenbasierte Unsicherheitsanalysen wurden für das im UAM-LWR-Benchmark spezifizierte Reaktivitätsexperiment *Test 43* des Forschungsreaktors SPERT III durchgeführt, um den Einfluss der Unsicherheiten in den nuklearen Daten auf den Verlauf einer Steuerstabauswurftransiente mit einer prompt überkritischen Reaktivitätszufuhr zu untersuchen. XSUSA in Kombination mit NEWT wurde verwendet, um eine Stichprobe von 300 Datensätzen mit variierten Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten zu erstellen. Diese wurden dann in transienten DYN3D-Rechnungen eingesetzt. Um in jeder Variation der Querschnitte die im Benchmark spezifizierte Reaktivitätszufuhr von 1,2 \$ zu erreichen, ging jeder transienten Rechnung eine Kalibrierung der Steuerstabstellungen voraus. Die Analyse der Ergebnisstichprobe mittels SUSA zeigte, dass die maximale Leistung, die während der Transiente erreicht wird, in den 300 Variationen im Bereich von 318 MW bis 356 MW variiert. Der Mittelwert liegt bei 335 MW, während das einseitige obere Toleranzlimit nach Wilks ein Maximum von 349 MW aufweist. Die Ermittlung des quadrierten multiplen Korrelationskoeffizienten R^2 zeigte, dass die Unsicherheit der thermischen Leistung hier hauptsächlich durch den elastischen und inelastischen Streuwirkungsquerschnitt von U-238 dominiert wird.

Der Einfluss der Unsicherheiten der nuklearen Daten wurde zudem für eine Steuerstabverfahrtransiente in einem mittelgroßen, natriumgekühlten Reaktorkern basierend auf dem Design des Advanced Burner Reactor durchgeführt, das im UAM-SFR-Benchmark der OECD/NEA spezifiziert ist. XSUSA-CE in Kombination mit Serpent wurde zur Berechnung von variierten 8-Gruppen-Wirkungsquerschnitten für die verschiedenen Brenn- und Reflektorelemente des Kerns verwendet. Diese Wirkungsquerschnitte wurden zusätzlich über Brennstofftemperaturen und Kühlmitteldichten zur Abbildung von Reaktivitätsrückwirkungen parametrisiert. Aufgrund des enormen Rechenbedarfs konnte aus Zeitgründen lediglich eine Stichprobe mit 141 Datensätzen von variierten 8-Gruppen-Wirkungsquerschnitten realisiert werden. Auf Basis dieser Stichprobe erfolgten 141 transiente FENNECS-Rechnungen, in denen ein teils eingefahrenes Steuerelement innerhalb von 3 s um 1 cm ausgefahren wird. Im Fall der nominalen FENNECS-Rechnung mit unvariierten Wirkungsquerschnitten steigt die Leistung während der Reaktivitätszufuhr zunächst linear auf 103,5 % an, bevor sie verlangsamt bis auf ca. 104 % weitersteigt. Dieses Verhalten ist plausibel. Die Auswertung der Rechnungen mit variierten Wirkungsquerschnitten zeigte dagegen für viele Variationen ein unplausibles Verhalten, da in den Verläufen der Leistung stufenförmige Zu- und Abnahmen auftreten. Die Ursache konnte im Rahmen dieses Forschungsvorhabens nicht geklärt werden und soll in zukünftigen Studien detaillierter untersucht werden.

TSUNAMI mit seinem auf Störungstheorie basierenden Ansatz bietet keine Möglichkeit, Systeme mit Brennstoff in doppelt heterogener Anordnung zu behandeln. Um dennoch für solche Systeme Sensitivitäten und Unsicherheiten ermitteln zu können, wurde eine Methodik weitgehend auf Basis einer Sequenzierung vorhandener SCALE-Module mit eigenen Zwischensequenzen zur Parametervariation entwickelt. Dabei werden explizite Sensitivitäten durch manuelle Aufrufe verschiedener SCALE 6.2-Module zur Resonanzselbstabschirmungsberechnung ermittelt. Implizite Sensitivitäten folgen aus der geringfügigen Variation der nicht abgeschirmten mikroskopischen Wirkungsquerschnitte vor der Resonanzselbstabschirmungsberechnung. Explizite und implizite Sensitivitäten können zu totalen Sensitivitäten kombiniert werden, die zusammen mit den Kovarianzdaten die Ermittlung von Ergebnisunsicherheiten ermöglichen. An ausgewählten kritischen Experimenten von gasgekühlten Hochtemperaturreaktorsystemen aus dem IRPhEP-Handbuch und an Anordnungen aus dem HTR-CRP-Benchmark der IAEA wurde die Methodik erprobt. Ermittelte Sensitivitäten und Unsicherheiten für den Multiplikationsfaktor sind mit Ergebnissen aus MCNP-Rechnungen in guter Übereinstimmung.

6.3 Beschreibung des Reaktorkernverhaltens mit der Monte-Carlo-Methode

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde die Funktionalität des Monte-Carlo-Codes Serpent angewendet, um Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte für Teilregionen eines Serpent-Ganzkernmodells zu berechnen. Im Gegensatz zu der Ermittlung in einem unendlichen Gitter wird bei dieser *Full-Scale* genannten Methode der Einfluss der Nachbarregionen auf das zur Homogenisierung und Kondensierung der Wirkungsquerschnitte verwendete Neutronenflussspektrum berücksichtigt. Da Studien aus dem Forschungsvorhaben RS1564 zeigten, dass auch mit solchen Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten eine akzeptable Übereinstimmung insbesondere bei der Leistungsverteilung zwischen der stationären Ganzkern-Diffusionsrechnung und der Serpent-Ganzkernrechnung nur durch Verwendung geeigneter Diskontinuitätsfaktoren erreicht werden kann, wurde in dieser Untersuchung zunächst ein Verfahren zur Ermittlung geeigneter Diskontinuitätsfaktoren erprobt.

In Serpent ist ein eigener Diffusionslöser zur Ermittlung des zur Berechnung der Diskontinuitätsfaktoren notwendigen homogenen Neutronenflusses implementiert. Dazu wird in der Fachliteratur berichtet, dass Diskontinuitätsfaktoren, die mit einem homogenen Neutronenfluss aus der gleichen Methode ermittelt wurden, wie sie in dem nachgeschalteten Ganzkern-Diffusionscode verwendet wird, zu den besten Ergebnissen führen. Für die

stationären und transienten Diffusionsrechnungen wurde in der vorliegenden Arbeit der Reaktordynamikcode DYN3D verwendet. Dieser setzt zur Ermittlung des homogenen Neutronenflusses, anders als der Diffusionslöser in Serpent, die AFEN/NEM-Methode für die Lösung der Neutronendiffusionsgleichung für kartesische Geometrien ein. Deshalb wurde eine dementsprechende, vereinfachte Methode in die Rechenkette zur Ermittlung von homogenen Neutronenflüssen und auf deren Basis von Diskontinuitätsfaktoren implementiert. Anhand von Ganzkern-Diffusionsrechnungen von vereinfachten Kernanordnungen und der originalen Kernanordnung des C5G7-TD-Benchmarks mit UO_2 - und MOX-Brennelementen wurden die direkt mit Serpent sowie die mit der vereinfachten AFEN/NEM-Methode ermittelten Diskontinuitätsfaktoren erprobt. Dabei wurden für jede Kernanordnung die Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte der Teilregionen aus dem entsprechenden Serpent-Ganzkernmodell ermittelt, wobei dieses gleichzeitig auch als Referenzmodell diente.

Im Fall der vereinfachten zweidimensionalen Modelle mit reflektierenden Randbedingungen führt eine Vernachlässigung der Diskontinuitätsfaktoren in der Diffusionsrechnung zu Abweichungen von 100 pcm beim Multiplikationsfaktor und von bis zu ca. 3 % bei der Leistungsverteilung. Bei Verwendung der Diskontinuitätsfaktoren aus Serpent als auch aus der vereinfachten AFEN/NEM-Methode werden nahezu übereinstimmende Ganzkern-Diffusionslösungen hinsichtlich des Neutronenmultiplikationsfaktors und der Leistungsverteilung mit der Serpent-Ganzkernrechnung ermittelt. Beim zweidimensionalen Modell mit einem umgebenden Wasserreflektor führt die Vernachlässigung von Diskontinuitätsfaktoren zu einer Reaktivitätsdifferenz von -1276 pcm und zu Abweichungen bei der Leistung von bis zu 3,5 %. Mit der AFEN/NEM-Methode ermittelte Diskontinuitätsfaktoren führen dagegen zu einer guten Übereinstimmung mit der Referenzrechnung. Eine Reaktivitätsdifferenz von lediglich -7 pcm und Abweichungen bei der Leistungsverteilung von 0,1 % wurden beobachtet. Die mit Serpent ermittelten Diskontinuitätsfaktoren führen zu einer Reaktivitätsdifferenz von -45 pcm und Abweichungen bei der Leistungsverteilung von 0,9 %. Werden im Fall des dreidimensionalen 4×4 Minikernmodells mit Wasserreflektoren in axialer und radialer Richtung keine Diskontinuitätsfaktoren angewendet, werden ebenfalls deutliche Abweichungen zur Referenzrechnung mit -992 pcm und mit bis zu 3,3 % bei der Leistung beobachtet. Bei Verwendung von mit der AFEN/NEM-Methode ermittelten Diskontinuitätsfaktoren wird eine sehr gute Übereinstimmung bei der Leistungsverteilung mit Abweichungen von maximal 0,1 % zur Referenzrechnung erzielt. Die Reaktivitätsdifferenz fällt dagegen mit -169 pcm im Vergleich zu den Ergebnissen der vorherigen Anordnungen etwas größer aus.

Mit Serpent konnten für den dreidimensionalen Kern keine geeigneten Diskontinuitätsfaktoren berechnet werden, da die Diskontinuitätsfaktor-Berechnung in Serpent auf ebene Geometrien beschränkt ist. Ein Vorteil der in die Rechenkette implementierten AFEN/NEM-Methode ist dem gegenüber, dass sie für verschiedene Raumdimensionen flexibel einsetzbar ist.

Insgesamt zeigte sich, dass die Verwendung geeigneter Diskontinuitätsfaktoren in der Ganzkern-Diffusionsrechnung zu einer deutlich besseren Übereinstimmung beim Neutronenmultiplikationsfaktor und bei der radialen Leistungsverteilung gegenüber Rechnungen ohne Verwendung von Diskontinuitätsfaktoren führt. Weist die Kernanordnung Wasserreflektoren und Vakuum-Randbedingungen auf, führen die mit dem Zwischenschritt der AFEN/NEM-Methode aus Serpent-Neutronenflüssen ermittelten Diskontinuitätsfaktoren zu geringfügig besseren Ergebnissen als die direkt von Serpent ermittelten Diskontinuitätsfaktoren. Damit wurden in der Fachliteratur beschriebene Erkenntnisse weiter untermauert.

Für die dreidimensionale, aus 3×3 UO₂-Brennelementen und einem radialen Wasserreflektor bestehende TMI-1-Minikernanordnung des UAM-LWR-Benchmarks wurde die Verwendung von *Full-Scale*-Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten und geeigneten Diskontinuitätsfaktoren in stationären und transienten Ganzkern-Diffusionsrechnungen weiter erprobt. Die Anordnung zeichnet sich durch einen verfahrbaren Steuerstab im zentralen Brennelement aus. Um die transienten Diffusionsrechnungen direkt auf Basis von *Full-Scale*-Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten starten zu können, mussten diese Wirkungsquerschnitte parametrisiert über Brennstofftemperaturen, Moderatorichten, Borkonzentrationen und für den unkontrollierten sowie kontrollierten Zustand ermittelt werden. Um den Rechenbedarf zu limitieren, wurden zur Ermittlung dieser Wirkungsquerschnitte nur zwei- anstatt dreidimensionale Serpent-Ganzkernrechnungen durchgeführt.

Die stationären Ganzkern-Diffusionsrechnungen zu dem TMI-1-Minikern wurden für zwei- und dreidimensionale Anordnungen durchgeführt. Im Fall der zweidimensionalen Rechnungen ergibt sich mit den Diskontinuitätsfaktoren ermittelt mit der AFEN/NEM-Methodik für den unkontrollierten und den kontrollierten Zustand eine gute Übereinstimmung mit der Referenzrechnung. Eine Reaktivitätsdifferenz von 5 pcm und ein quadratischer Mittelwert für die Abweichungen bei der Leistungsverteilung von 0,12 % werden nicht überschritten. Bei den dreidimensionalen Ganzkern-Diffusionsrechnungen werden für den vollständig unkontrollierten und vollständig kontrollierten Zustand geringfügig

größere Abweichungen beobachtet: 19 pcm für die Reaktivitätsdifferenz und bis zu 0,22 % für den quadratischen Mittelwert der Abweichungen. Wird der Steuerstab um 54 cm ausgefahren, stellt sich auch für die mit der AFEN/NEM-Methode ermittelten Diskontinuitätsfaktoren eine größere Reaktivitätsdifferenz von -109 pcm ein, bei weiterhin akzeptablen Werten für die Abweichung bei der Leistungsverteilung. Die Verwendung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten aus unendlichen Gittermodellen mit Serpent liefern bei diesen Rechnungen ebenfalls zufriedenstellende Ergebnisse. Die größten Abweichungen mit einer Reaktivitätsdifferenz von -198 pcm und 1,3 % bei der Leistungsverteilung werden ebenfalls für die teilweise kontrollierte Anordnung beobachtet.

Für die TMI-1-Minikernanordnung wurden darüber hinaus zwei Transienten untersucht. In der ersten Transiente wird der Steuerstab innerhalb von 10 s um 54 cm von der vollständig eingefahrenen Position ausgefahren und anschließend innerhalb von 20 s wieder eingefahren. In der zweiten Transiente verfährt der vollständig eingefahrene Steuerstab innerhalb von 0,0145 s um 58 cm und verbleibt dort für die restliche Simulationszeit. Im Fall der stationären Ganzkernrechnungen führte die Verwendung von *Full-Scale-Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten* und AFEN/NEM-Diskontinuitätsfaktoren oder von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten aus unendlichen Gittermodellen mit Serpent-Diskontinuitätsfaktoren nicht zu substantiellen Abweichungen. Im Gegensatz dazu zeigt sich bei den Transientenrechnungen ein größerer Einfluss der Methoden zur Berechnung der Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte und Diskontinuitätsfaktoren. Die Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte aus den unendlichen Gittermodellen führen jeweils zu einer größeren Reaktivitätszufuhr und damit auch zu einer größeren maximalen Leistung. Insbesondere bei der zweiten Transiente erreicht das System mit diesen Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten den prompt überkritischen Zustand, wodurch sich eine deutlich größere Leistungsexkursion als auf Basis der *Full-Scale-Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte* errechnet. Da die Einordnung der erzielten Ergebnisse für die transienten Rechnungen des TMI-1-Minikerns aufgrund fehlender Referenzergebnisse nicht eindeutig möglich war, wäre eine mögliche Fortsetzung dieser Studien mit der Modellierung des SPERT III-Kerns sinnvoll. Damit könnten die mit den hier angewandten Methoden erzielten Ergebnisse mit den Messwerten der statischen Kernkonfigurationen als auch der Reaktivitätsexperimente verglichen werden. Jedoch ist der SPERT III-Kern mit 60 Brennelementen und verschiedenen Steuerelementen erheblich größer, was eine deutliche Steigerung des Rechenbedarfs gegenüber dem TMI-1-Minikern erfordert.

6.4 Ausblick

Bei geplanten Neubauten von Kernkraftwerken handelt es sich heute zumeist um LW-SMR. Diese weisen zum Teil erhebliche Unterschiede zu aktuellen westlichen DWR auf. Bei manchen LW-SMR-Konzepten wird auf den Einsatz von Borsäure verzichtet und die Überschussreaktivität ausschließlich durch eingefahrene Steuerstäbe kompensiert. Andere LW-SMR ähneln vom Konzept her einem Siedewasserreaktor (SWR). Um zukünftig unabhängige reaktorphysikalische Untersuchungen für solche LW-SMR durchführen zu können, wird der Kernsimulator KMACS der GRS entsprechend ertüchtigt werden. Um bei borfreien LW-SMR eine korrekte Vorhersage der Steuerstabwirksamkeit zu gewährleisten, wird KMACS um die Modellierung des Abbrands des Steuerstab-Absorbermaterials ergänzt. Für Untersuchungen von SWR-ähnlichen LW-SMR wird die Vorausrechnung der Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte in KMACS um die Modellierung von SWR-Komponenten erweitert, z. B. kreuzförmige Steuerstäbe (Steuerkreuze).

Neben der Ertüchtigung von KMACS für LW-SMR wird zudem die in diesem Vorhaben implementierte Anbindung des GRS-eigenen Neutronenkinetikcodes FENNECS an KMACS weiter ausgebaut, um FENNECS für Zyklusabbrandrechnungen insbesondere von LW-SMR standardmäßig einsetzen zu können. Für die Analyse von mit bereits bestrahlten Brennelementen beladenen Reaktorkernen, wird die Berücksichtigung von in der KMACS-Eingabe eingegebenen Abbrandverteilungen ermöglicht. Ferner wird die Verifikation und Validierung von KMACS anhand von Nachrechnungen von DWR-, WWER- und LW-SMR-Betriebszyklen kontinuierlich fortgeführt.

Um zukünftig im Sinne des *Best Estimate Plus Uncertainty* Ansatzes zu einem reaktorphysikalischen Rechenergebnis zusätzlich Unsicherheiten und die dafür verantwortlichen Beiträge mittels Sensitivitätsanalysen einfach ermitteln zu können, werden XSUSA und die in diesem Vorhaben implementierte Methode XSUSA-CE in einem Programmpaket zusammengefasst. Dieses Programmpaket wird stichprobenbasierte Unsicherheitsanalysen für deterministische Transportrechnungen sowie für Monte-Carlo-Transportrechnungen unter Berücksichtigung der für nukleare Daten gegebenen Unsicherheiten ermöglichen. Durch die Vereinheitlichung und Zusammenführung der verschiedenen Programmmodule von XSUSA und XSUSA-CE wird eine einfachere Instandhaltung und eine höhere Benutzerfreundlichkeit erreicht werden. Zur Gewährleistung von Unsicherheitsanalysen nach fortschreitendem Stand von Wissenschaft und Technik werden zudem neue Kovarianzdaten basierend auf der Datenevaluation ENDF/B-VIII.0 eingebunden und erprobt.

Da insbesondere bei den Unsicherheitsanalysen von Monte-Carlo-Transportrechnungen der Rechenbedarf hoch ist, wird der Einsatz von Methoden zu Maschinellern Lernen erprobt, um bei solchen Analysen eine deutliche Verringerung des Rechenbedarfs zu erreichen.

Die Teilnahmen am UAM-LWR- und UAM-SFR-Benchmark der OECD/NEA werden fortgesetzt, da die Nachrechnungen der in diesen Benchmarks definierten Anordnungen und der Vergleich der Ergebnisse mit experimentellen Daten und mit den Ergebnissen anderer Benchmark-Teilnehmer einen wertvollen Beitrag zur Verifikation und Validierung der eigenen Methoden leisten.

Literaturverzeichnis

- /ALB 25/ Albagami, T., Rouxelin, P., Abarca, A., Holler, D., Moloko, L., Avramova, M., Ivanov, K., Godfrey, A., Palmtag, S., Franceschini, F.: TVA Watts Bar Unit 1 Multi-Physics Multi-Cycle Depletion Benchmark, Specifications and Support Data, Version 2.3.5. OECD/NEA, NEA/EGMPEBV/DOC(2025), 2025.
- /AUF 15/ Aufiero, M., Bidaud, A., Hursin, M., Leppänen, J., Palmiotti, G., Pelloni, S., Rubiolo, P.: A collision history-based approach to sensitivity/perturbation calculations in the continuous energy Monte Carlo code SERPENT. *Annals of Nuclear Energy*, Bd. 85, S. 245–258, DOI 10.1016/j.anucene.2015.05.008, 2015.
- /AUR 15/ Aures, A., Bostelmann, F., Hannstein, V., Velkov, K., Zwermann, W., Guiliard, N., Lapins, J., Bernnat, W.: Depletion Calculation and Uncertainty/Sensitivity Analysis for a Sodium-cooled Fast Spectrum Fuel Assembly. In: American Nuclear Society (ANS) (Hrsg.): Joint International Conference on Mathematics and Computation (M&C), Supercomputing in Nuclear Applications (SNA) and the Monte Carlo (MC) Method. MC2015, Nashville, TN, 19. - 23. April 2015, 2015.
- /AUR 16/ Aures, A., Bostelmann, F., Zwermann, W., Velkov, K.: Impact of nuclear data on sodium-cooled fast reactor calculations. *EPJ Web of Conferences*, Bd. 111, DOI 10.1051/epjconf/201611111003, 2016.
- /AUR 21a/ 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) gGmbH (GRS), GRS-Bericht, Bd. 645, GRS-645, 235 S., ISBN 978-3-949088-34-6, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Köln, Garching b. München, Berlin, Braunschweig, Juni 2021.
- /AUR 21b/ Aures, A., Pautz, A., Zwermann, W.: Transient Calculations of SPERT III Experiments. *EPJ Web of Conferences*, Bd. 247, DOI 10.1051/epjconf/202124707017, 2021.

- /AVR 20/ Avramova, M.: Developments in thermal-hydraulic sub-channel modeling for whole core multi-physics simulations. Nuclear Engineering and Design, Bd. 358, S. 110387, DOI 10.1016/j.nucengdes.2019.110387, 2020.
- /BEN 09/ Ben-Kiki, O., Evans, C., Net, I.: YAML Ain't Markup Language (YAML™) Version 1.2, 3rd Edition. Erreichbar unter <https://yaml.org/spec/1.2/spec.html>, Stand von 2009.
- /BIL 20/ Bilodid, Y., Fridman, E., Lötsch, T.: X2 VVER-1000 benchmark revision: Fresh HZP core state and the reference Monte Carlo solution. Annals of Nuclear Energy, Bd. 144, S. 107558, DOI 10.1016/j.anucene.2020.107558, 2020.
- /BLA 11/ Blanchet, D., Buiron, L., Stauff, N., Kim, T. K., Taiwo, T.: Sodium Fast Reactor Core Definitions, Version 1.2. Hrsg.: OECD Nuclear Energy Agency (NEA), 2011.
- /BMWI 18/ Bundesministerium für Wirtschaft und Energie (BMWi): 7. Energieforschungsprogramm der Bundesregierung. Hrsg.: Bundesregierung (BR), 100 S., September 2018.
- /BMWI 21/ Bundesministerium für Wirtschaft und Energie (BMWi): BMWi-Forschungsförderung zur nuklearen Sicherheit, Projektförderprogramm des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie zur Sicherheitsforschung für kerntechnische Anlagen, 2021-2025. 2021.
- /BOU 18/ Bousquet, J., Zilly, M., Küntzel, M.: KMACS User Manual, Version 1.0. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), 2018.
- /BOU 20/ Bousquet, J., Seubert, A., Henry, R.: New finite element neutron kinetics coupled code system FENNECS/ATHLET for safety assessment of (very) Small and Micro Reactors. Journal of Physics: Conference Series, Bd. 1689, S. 12008, DOI 10.1088/1742-6596/1689/1/012008, 2020.
- /BOU 21/ Bousquet, J.: Development of advanced methods for safety assessment of sodium cooled fast reactors. Dissertation, 161 S., Fakultät für Maschinenwesen Institut für Energietechnik, Professur für Wasserstoff- und Kernenergietechnik, Technische Universität Dresden, 2021.

- /BOY 16/ Boyarinov, V., Fomichenko, P., Hou, J., Ivanov, K., Aures, A., Zwermann, W., Velkov, K.: Deterministic Time-Dependent Neutron Transport Benchmark without Spatial Homogenization (C5G7-TD), Version 1.6. OECD Nuclear Energy Agency (NEA), 2016.
- /BRO 18/ Brown, D. A., Chadwick, M. B., Capote, R., Kahler, A. C., Trkov, A., Herman, M. W., Sonzogni, A. A., Danon, Y., Carlson, A. D., Dunn, M., Smith, D. L., Hale, G. M., Arbanas, G., Arcilla, R., et al.: ENDF/B-VIII.0: The 8th Major Release of the Nuclear Reaction Data Library with CIELO-project Cross Sections, New Standards and Thermal Scattering Data. Nuclear Data Sheets, Nr. 148, S. 1–142, DOI 10.1016/j.nds.2018.02.001, 2018.
- /BUI 19/ Buiron, L., Rimpault, G., Sciora, P., Stauff, N., Kim, T. K., Taiwo, T., Bostelmann, F., Pautz, A., Trivedi, I., Ivanov, K., Keresztúri, A., Aures, A., Velkov, K., Zwermann, W., Mikityuk, K.: Benchmarks for Uncertainty Analysis in Modelling (UAM) for Design, Operation and Safety Analysis of SFRs, Version 1.6 - Draft. Hrsg.: OECD Nuclear Energy Agency (NEA), 2019.
- /BUS 11/ Buss, O., Hoefer, A., Neuber, J. C.: NUDUNA - Nuclear Data Uncertainty Analysis. In: OECD Nuclear Energy Agency (NEA) (Hrsg.): 9th International Conference on Nuclear Criticality Safety (ICNC 2011), Proceedings. Heriot-Watt University, ICNC 2011, Edinburgh, Scotland, 19. - 22. September 2011, informa ibc Energy, 2011.
- /CHA 11/ Chadwick, M. B., Herman, M. W., Obložinský, P., Dunn, M. E., Danon, Y., Kahler, A. C., Smith, D. L., Pritychenko, B., Arbanas, G., Arcilla, R., Brewer, R., Brown, D. A., Capote, R., Carlson, A. D., et al.: ENDF/B-VII.1 Nuclear Data for Science and Technology: Cross Sections, Covariances, Fission Product Yields and Decay Data. Nuclear Data Sheets, Bd. 112, Nr. 12, S. 2887–2996, DOI 10.1016/j.nds.2011.11.002, 2011.
- /CON 19/ Conlin, J. L., Romano, P.: A compact ENDF (ACE) format specification. Hrsg.: Los Alamos National Lab.(LANL), Los Alamos, NM (United States), No. LA-UR-19-29016.: Los Alamos NM, USA, 2019.
- /CUE 25/ ohne Autor: CUE Documentation. Stand vom 23. Mai 2025, erreichbar unter <https://cuelang.org/docs/>, abgerufen am 16. Juni 2025.

- /DÜR 13/ Dürigen, S.: Neutron Transport in Hexagonal Reactor Cores Modeled by Trigonal-Geometry Diffusion and Simplified P3 Nodal Methods. Dissertation, Department of Mechanical Engineering, Karlsruhe Institute of Technology (KIT): Karlsruhe, Mai 2013.
- /EFR 81/ Efron, B., Stein, C.: The Jackknife Estimate of Variance. The Annals of Statistics, Bd. 9, Nr. 3, DOI 10.1214/aos/1176345462, 1981.
- /FRI 12/ Fridman, E., Leppänen, J.: Revised Methods For Few-Group Cross Sections Generation in the Serpent Monte Carlo Code. In: American Nuclear Society (ANS) (Hrsg.): Proceedings of PHYSOR 2012. PHYSOR 2012: Advances in Reactor Physics Linking Research, Industry, and Education, Knoxville, Tennessee, USA, 15. - 20. April 2012: La Grange Park, Illinois, USA, 2012.
- /FRI 23/ Fridman, E., Bilodid, Y., Valtavirta, V.: Definition of the neutronics benchmark of the NuScale-like core. Nuclear Engineering and Technology, Bd. 55, Nr. 10, S. 3639–3647, DOI 10.1016/j.net.2023.06.029, 2023.
- /GEL 03/ Gellrich, R., Gellrich, C.: Mathematik - Ein Lehr- und Übungsbuch, Zahlenfolgen und -reihen, Einführung in die Analysis für Funktionen mit einer unabhängigen Variablen. Mathematik, Bd. 3, 2. Aufl., 430 S., ISBN 3-8171-1702-7, Wissenschaftlicher Verlag Harri Deutsch: Frankfurt am Main, 2003.
- /GIT 25/ GitLab Inc.: GitLab Web page. Erreichbar unter <https://about.gitlab.com/de/>, abgerufen am 16. Juni 2025.
- /GRU 05/ Grundmann, U., Rohde, U., Mittag, S., Kliem, S.: DYN3D Version 3.2, Code for Calculation of Transients in Light Water Reactors (LWR) with Hexagonal or Quadratic Fuel Elements, Description of Models and Methods. Forschungszentrum Rossendorf, FZR-434, 2005.
- /HOR 18/ Horelik, N., Herman, B. R., Ellis, M., Kumar, S., Liang, J., Forget, B., Smith, K.: Benchmark for Evaluation And Validation of Reactor Simulations (BEAVRS), Release rev. 2.0.2. MIT Computational Reactor Physics Group, 177 S., 2018.

- /HOU 21/ Blyth, T., Avramova, M., Ivanov, K., Royer, E., Cabellos, O., Sartori, E.: Benchmark for Uncertainty Analysis in Modelling (UAM) for Design, Operation and Safety Analysis of LWRs, Volume II: Specification and Support Data for the Core Cases (PHASE II), Version 1.0. Hrsg.: OECD Nuclear Energy Agency (NEA), NEA/NSC/DOC(2012)11, 24. Mai 2012.
- /HUR 16/ Hursin, M., Downar, T. J., Yoon, J. I., Joo, H. G.: Assessment of assembly homogenized two-steps core dynamic calculations using direct whole core transport solutions. *Annals of Nuclear Energy*, Bd. 87, S. 356–365, DOI 10.1016/j.anucene.2015.09.015, 2016.
- /IAEA 18/ International Atomic Energy Agency (IAEA): Advances in Small Modular Reactor Technology Developments, A Supplement to: IAEA Advanced Reactors Information System (ARIS) 2018 Edition. ARIS Status Reports: Vienna, 2018.
- /IAEA 19/ International Atomic Energy Agency (IAEA): High Temperature Gas Cooled Reactor Physics, Thermal-Hydraulics and Depletion Uncertainty Analysis, Final report of a coordinated research project 2013 - 2019, IAEA-TECDOC in preparation. 2019.
- /ILA 12/ Ilas, G., Ilas, D., Kelly, R. P., Sunny, E. E.: Validation of SCALE for High Temperature Gas-Cooled Reactor Analysis. United States Nuclear Regulatory Commission, NUREG/CR-, NUREG/CR-7107, ORNL/TM-2011/161: Oak Ridge, Tennessee, USA, Juli 2012.
- /IVA 16/ Ivanov, K., Avramova, M., Kamerow, S., Kodeli, I. A., Sartori, E., Ivanov, E., Cabellos, O.: Benchmark for Uncertainty Analysis in Modelling (UAM) for Design, Operation and Safety Analysis of LWRs, Volume I: Specification and Support Data for the Neutronics Cases (Phase I), Version 2.1. Hrsg.: OECD Nuclear Energy Agency (NEA), NEA/NSC/DOC(2012)10, 2016.
- /JSO 25/ ohne Autor: JSON Schema. Erreichbar unter <https://json-schema.org/>, abgerufen am 16. Juni 2025.

- /KIE 13/ Kiedrowski, B. C., Brown, F. B.: Adjoint-Based k-Eigenvalue Sensitivity Coefficients to Nuclear Data Using Continuous-Energy Monte Carlo. Nuclear Science and Engineering, Bd. 174, Nr. 3, S. 227–244, DOI 10.13182/NSE12-46, 2013.
- /KLO 17/ Kloos, M., Berner, N.: SUSAN Version 4.1 Manual of Methods. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-P-5 Vol. 2, 1. Aufl., 128 S., Dezember 2017.
- /KOD 90/ Kodeli, I. A., Sartori, E.: Neutron Cross-Section Covariance Data in Multigroup Form and Procedure for Interpolation to Users' Group Structures for Uncertainty Analysis Applications. In: Proceedings of PHYSOR 1990. Marseille, Frankreich, 1990.
- /KON 08/ Koning, A. J., Rochman, D. A.: Towards sustainable nuclear energy: Putting nuclear physics to work. Annals of Nuclear Energy, Bd. 35, Nr. 11, S. 2024–2030, DOI 10.1016/j.anucene.2008.06.004, 2008.
- /KVKT 13/ Kompetenzverbund Kerntechnik (KVKT): Nukleare Sicherheitsforschung; Neuorientierung an aktuellen energiepolitischen Rahmenbedingungen. März 2013.
- /LAN 77/ Langenbuch, S., Maurer, W., Werner, W.: Coarse-Mesh Flux-Expansion Method for the Analysis of Space-Time Effects in Large Light Water Reactor Cores. Nuclear Science and Engineering, Bd. 63, Nr. 4, S. 437–456, DOI 10.13182/NSE77-A27061, 1977.
- /LEP 15/ Leppänen, J., Pusa, M., Viitanen, T., Valtavirta, V., Kalliaisenaho, T.: The Serpent Monte Carlo Code, Status, Development and Applications in 2013. Annals of Nuclear Energy, Bd. 82, S. 142–150, DOI 10.1016/j.anucene.2014.08.024, 2015.
- /LEP 16/ Leppänen, J., Pusa, M., Fridman, E.: Overview of methodology for spatial homogenization in the Serpent 2 Monte Carlo code. Annals of Nuclear Energy, Bd. 96, S. 126–136, DOI 10.1016/j.anucene.2016.06.007, 2016.

- /LÖT 09/ Lötsch, T., Khalimonchuk, V., Kuchin, A.: Proposal of a benchmark for core burnup calculation of a VVER-1000 reactor core. In: Symposium of AER 2009. 19th Symposium of AER on VVER Reactor Physics and Reactor Safety, Bulgaria, 21. - 25. September 2009, 2009.
- /LÖT 10/ Lötsch, T., Khalimonchuk, V., Kuchin, A.: Corrections and additions to the proposal of a benchmark for core burnup calculations for a VVER-1000 reactor. In: Symposium of AER 2010. 20th Symposium of AER on VVER Reactor Physics and Reactor Safety, Hanasaari, Espoo, Finland, 20. - 24. September 2010, 2010.
- /MAC 10/ MacFarlane, R. E., Kahler, A. C.: Methods for Processing ENDF/B-VII with NJOY. Nuclear Data Sheets, Bd. 111, Nr. 12, S. 2739–2890, DOI 10.1016/j.nds.2010.11.001, 2010.
- /NEA 16a/ OECD Nuclear Energy Agency (NEA): JEFF-3.1.2 - Neutron Data. OECD/NEA, Stand von 2016, erreichbar unter https://www.oecd-nea.org/dbforms/data/eva/evatapes/jeff_31/JEFF312/, abgerufen am 12. Mai 2025.
- /NEA 16b/ OECD Nuclear Energy Agency (NEA): JEFF-3.2 evaluated data library. Hrsg.: OECD/NEA, Stand vom 10. März 2016, erreichbar unter https://www.oecd-nea.org/dbforms/data/eva/evatapes/jeff_32/, 2016.
- /NEA 19a/ OECD Nuclear Energy Agency (NEA) (Hrsg.): International Criticality Safety Benchmark Evaluation Project (ICSBEP), Handbook 2019. NEA/NSC/DOC(95)03, DOI 10.1787/e2703cd5-en: Paris, Juni 2019.
- /NEA 19b/ OECD Nuclear Energy Agency (NEA): International Reactor Physics Experiment Evaluation (IRPhE) Project. 2019.
- /NEA 22/ OECD Nuclear Energy Agency (NEA): Nuclear Data Service. OECD/NEA, Stand vom 21. Januar 2022, erreichbar unter <https://www.oecd-nea.org/dbdata/>, abgerufen am 12. Mai 2025.
- /NNDC 25/ Brookhaven National Laboratory (BNL), National Nuclear Data Center (NNDC): Evaluated Nuclear Data File (ENDF). Erreichbar unter <https://www.nndc.bnl.gov/endl/>, abgerufen am 12. Mai 2025.

- /OEC 21/ OECD Nuclear Energy Agency: International Handbook of Evaluated Reactor Physics Benchmark Experiments. Hrsg.: OECD Nuclear Energy Agency (NEA), OECD Nuclear Energy Agency, NEA, Bd. 7329, Nr. 7329, 1 S.: Paris, 2021.
- /OLS 22a/ Olson, A. P.: SPERT III E Core: Facility Specification. Hrsg.: International Atomic Energy Agency (IAEA), Argonne National Laboratory (ANL), Research Reactor Benchmarking Database: Facility Specification and Experimental Data, Technical Reports Series No. 480, 2022.
- /OLS 22b/ Olson, A. P.: SPERT III E Core: Experimental Results. Hrsg.: International Atomic Energy Agency (IAEA), Argonne National Laboratory (ANL), Research Reactor Benchmarking Database: Facility Specification and Experimental Data, Technical Reports Series No. 480, 2022.
- /PAL 19/ Palmtag, S., Godfrey, A.: VERA Results for Watts Bar 1 Cycles 1-3. Präsentation, TVA Watts Bar Unit 1 Benchmark, OECD/NEA: Oak Ridge National Laboratory, Mai 2019.
- /PEL 13/ Pelowitz, D. B.: MCNP6 User's Manual, Version 1.0, Manual Rev. 0. Los Alamos National Laboratory (LANL), LA-CP-13-00634, Rev. 0, 765 S., Mai 2013.
- /PLO 20/ Plompen, A. J. M., Cabellos, O., Saint Jean, C. de, Fleming, M., Algora, A., Angelone, M., Archier, P., Bauge, E., Bersillon, O., Blokhin, A., Cantargi, F., Chebboubi, A., Diez, C., Duarte, H., et al.: The Joint Evaluated Fission and Fusion Nuclear Data Library, JEFF-3.3. The European Physical Journal A, Bd. 56, Nr. 7, S. 1, DOI 10.1140/epja/s10050-020-00141-9, 2020.
- /RAI 14a/ Rais, A., Siefman, D., Girardin, G., Hursin, M., Pautz, A.: PARCS Few-group Homogenized Parameters Generation using Serpent Monte Carlo code at the CROCUS Reactor. In: IGORR (Hrsg.): International Group on Research Reactors (IGORR) 2014. IGORR Conference 2014, Bariloche, Argentina, November 2014, 2014.

- /RAI 14b/ Rais, A., Siefman, D., Hursin, M., Ward, A., Pautz, A.: Neutronics modeling of the CROCUS reactor with SERPENT and PARCS codes. In: American Nuclear Society (ANS) (Hrsg.): Proceedings of PHYSOR 2014. PHYSOR 2014: The Role of Reactor Physics toward a Sustainable Future, Kyoto, Japan, 28. September - 3. Oktober 2014, 2014.
- /REA 11a/ Rearden, B. T., Mueller, D. E.: Uncertainty quantification techniques of SCALE/TSUNAMI. Transactions of the American Nuclear Society, Bd. 104, 2011.
- /REA 11b/ Rearden, B. T., Williams, M. L., Jessee, M. A., Mueller, D. E., Wiarda, D. A.: Sensitivity and Uncertainty Analysis Capabilities and Data in SCALE. Nuclear Technology, Bd. 174, Nr. 2, S. 236–288, DOI 10.13182/NT174-236, 2011.
- /REA 18/ Rearden, B. T., Jessee, M. A. (Hrsg.): SCALE Code System, ORNL/TM-2005/39, Version 6.2.3. Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee, USA, Available from Radiation Safety Information Computational Center as CCC-834., März 2018.
- /ROH 16/ Rohde, U., Kliem, S., Grundmann, U., Baier, S., Bilodid, Y., Duerigen, S., Fridman, E., Gommlich, A., Grahn, A., Holt, L., Kozmenkov, Y., Mittag, S.: The reactor dynamics code DYN3D – models, validation and applications. Progress in Nuclear Energy, Bd. 89, S. 170–190, DOI 10.1016/j.pnucene.2016.02.013, 2016.
- /SAL 19/ Salko, R.: SubKit Documentation. Erreichbar unter <https://subkit.readthedocs.io/en/latest/#>, abgerufen am 17. Juni 2025.
- /SAL 20/ Salko, R., Avramova, M., Wysocki, A., Hu, J., Toptan, A., Porter, N., Blyth, T. S., Dances, C. A., Gomez, A., Jernigan, C., Kelly, J.: CTF User's Manual, Version 4.2. 14. September 2020.
- /SCH 24/ Schöffel, P. J., Di Nora, V. A., Dünne, N., Jacht, V., Junk, M., Skorek, T., von der Cron, D., Weyermann, F. C., Wielenberg, A.: Further Development of the AC² Code ATHLET for Evolutionary Reactors and Research Reactors (Phase A). Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-Bericht, GRS-795: Köln, August 2024.

- /SEU 20/ Seubert, A.: A 3-D finite element few-group diffusion code and its application to generation IV reactor concepts. In: American Nuclear Society (ANS) (Hrsg.): Proceedings of PHYSOR 2020 - International Conference on the Physics of Reactors. Transition to a Scalable Nuclear Future, Cambridge, United Kingdom, 29. März - 2. April 2020, ISBN 978-1-5272-6447-2, 2020.
- /SEU 22/ Seubert, A., Bousquet, J., Henry, R., Io Muzio, S.: Entwicklung eines modernen Neutronenkinetikcodes für unregelmäßige Geometrien für (v)SMRs und fortschrittliche sowie innovative Reaktorsysteme. GRS-Bericht, GRS-683, 115 S., 2022.
- /SMI 02/ Smithson, M.: Confidence Intervals. Quantitative Applications in the Social Sciences Ser, 1. Aufl., 190 S., ISBN 978-0-7619-2499-9, SAGE Publications Incorporated: Thousand Oaks, 2002.
- /STU 11/ Studsvik: HELIOS-2 Methods Manual, (Version 2.1). SSP-11/452 Rev 1, 16. Dezember 2011.
- /USH 17/ Usheva, K. I., Kuten, S. A., Khruschinsky, A. A., Babichev, L. F.: Generation of XS library for the reflector of VVER reactor core using Monte Carlo code Serpent. Journal of Physics: Conference Series, Bd. 781, DOI 10.1088/1742-6596/781/1/012029, 2017.
- /WAL 12/ Waltar, A. E., Todd, D. R., Tsvetkov, P. V. (Hrsg.): Fast Spectrum Reactors. ISBN 78-1-4419-9571-1, Springer-Verlag: New York, Dordrecht, Heidelberg, London, 2012.
- /WIL 08/ Williams, M. L., Rearden, B. T.: SCALE-6 Sensitivity/Uncertainty Methods and Covariance Data. Nuclear Data Sheets, Bd. 109, Nr. 12, S. 2796–2800, DOI 10.1016/j.nds.2008.11.012, 2008.
- /WIL 12/ Williams, M., Wiarda, D., Smith, H., Jessee, M. A., Rearden, B. T., Zwermann, W., Klein, M., Pautz, A., Krzykacz-Hausmann, B., Gallner, L.: Development Of A Statistical Sampling Method For Uncertainty Analysis With SCALE. In: American Nuclear Society (ANS) (Hrsg.): Proceedings of PHYSOR 2012. PHYSOR 2012: Advances in Reactor Physics Linking Research, Industry, and Education, Knoxville, Tennessee, USA, 15. - 20. April 2012: La Grange Park, Illinois, USA, 2012.

- /WIL 13/ Williams, M. L., Ilas, G., Jessee, M. A., Rearden, B. T., Wiarda, D., Zwermann, W., Gallner, L., Klein, M., Krzykacz-Hausmann, B., Pautz, A.: A Statistical Sampling Method for Uncertainty Analysis with SCALE and XSUSA. Nuclear Technology, Bd. 183, Nr. 3, S. 515–526, DOI 10.13182/NT12-112, 2013.
- /ZHU 15/ Zhu, T., Vasiliev, A., Ferroukhi, H., Pautz, A.: NUSS: A tool for propagating multigroup nuclear data covariances in pointwise ACE-formatted nuclear data using stochastic sampling method. Annals of Nuclear Energy, Bd. 75, S. 713–722, DOI 10.1016/j.anucene.2014.09.013, 2015.
- /ZIL 15/ Zilly, M., Aures, A., Hannstein, V., Küntzel, M., Pasichnyk, I., Périn, Y., Seubert, A., Velkov, K., Zwermann, W.: Erstellung und Qualifizierung eines nuklearen Kernsimulators für die Sicherheitsbewertung aktueller Reaktorkernbeladungen, Vorhaben 3612R01339. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-A-3805, 2015.
- /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., Périn, Y.: KMACS Validation Report, Version 1.0. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), 2018.
- /ZWE 13/ Zwermann, W., Gallner, L., Klein, M., Krzykacz-Hausmann, B., Pasichnyk, I., Pautz, A., Velkov, K.: Status of XSUSA for Sampling Based Nuclear Data Uncertainty and Sensitivity Analysis. EPJ Web of Conferences, Bd. 42, S. 3003, DOI 10.1051/epjconf/20134203003, 2013.
- /ZWE 18/ Zwermann, W., Aures, A., Bostelmann, F., Bousquet, J., Kilger, R., Krzykacz-Hausmann, B., Pasichnyk, I., Périn, Y., Sommer, F., Stuke, M., Velkov, K., Zilly, M.: Weiterentwicklung moderner Verfahren zu Neutronentransport und Unsicherheitsanalysen für Kernberechnungen. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-498, ISBN 978-3-946607-83-0, 2018.

/ZWE 20/ Zwermann, W., Berner, N., Aures, A., Velkov, K.: Sensitivity and uncertainty analysis for the UAM-SFR sub-exercises with linear regression from random sampling. Annals of Nuclear Energy, Bd. 149, DOI 10.1016/j.anucene.2020.107832, 2020.

Glossar

ABR	Design eines natriumgekühlten schnellen Reaktors (engl. Advanced Burner Reactor)
ACE	Kompaktes Format nuklearer Datenbibliotheken für MCNP und Serpent (engl. A Compact ENDF)
AFEN/NEM	Analytic Function Expansion Nodal / Nodal Expansion Method
ATF	Kernbrennstoffkonzepte zur verbesserten Störfallbeherrschung (engl. Accident-Tolerant Fuels)
ATHLET	Programm zur Analyse der Thermohydraulik von Lecks und Transienten (GRS)
BEAVRS	Benchmark For Evaluation And Validation Of Reactor Simulations
BMUKN	Bundesministerium für Umwelt, Klimaschutz, Naturschutz und nukleare Sicherheit
BMWi	Bundesministerium für Wirtschaft und Energie
CLI	Befehlszeilenschnittstelle (engl. Command Line Interface)
COBRA-TF	Programm zur Unterkanalthermohydraulikrechnung (engl. Coolant Boiling in Rod Arrays - Two Fluid)
CUE	Schema-Sprache zur Beschreibung einer Datenstruktur
DBW	Differentielle Borwirksamkeit
DF	Diskontinuitätsfaktoren (engl. Discontinuity Factors)
DNBR	Abstand zum Filmsieden (engl. Departure from Nucleate Boiling Ratio)
DP	Direkte Variation (engl. Direct Perturbation)
DWR	Druckwasserreaktor (westliche Bauart)
DYN3D	Reaktordynamikcode (HZDR)
ENDF/B	US-amerikanische evaluierte nukleare Datenbibliothek (engl. Evaluated Nuclear Data File)
FENNECS	Neutronenkinetikcode basierend auf der Finite Elemente Methode (engl. Finite Element Neutronics) (GRS)
GEN-IV	Generation-IV (Kategorie zur Einteilung von Reaktoren)
GRS	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH
HELIOS	Gitterneutronentransportcode (Studsvik)
HTGR	Gasgekühlter Hochtemperaturreaktor (engl. high-temperature gas-cooled reactor)

HTR-CRP	High Temperature Reactor - Coordinated Research Project (IAEA)
HZDR	Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf
IAEA	Internationale Atomenergie-Organisation (engl. International Atomic Energy Agency)
ICSBEP	International Criticality Safety Benchmark Evaluation Project
IRPhEP	International Reactor Physics Experiment Evaluation Project
ITC	Isothermer Temperaturkoeffizient (engl. Isothermal Temperature Coefficient)
JEFF	Europäische evaluierte nukleare Datenbibliothek (engl. Joint Evaluated Fission and Fusion)
JENDL	Japanische evaluierte nukleare Datenbibliothek (engl. Japanese Evaluated Nuclear Data Library)
kburn	KMACS-Modul für Ganzkern-Abbrandrechnungen
KENO-V.a	Monte-Carlo Neutronentransportcode in SCALE
kflux	KMACS-Modul für gekoppelte Ganzkernrechnungen
klib	KMACS-Modul zur Speicherung von Ergebnisdaten
KMACS	Kernsimulatorprogramm (GRS)
kpostal	KMACS-Modul für Unterkanalthermohydraulikrechnungen
kspect	KMACS-Modul zur Wirkungsquerschnittsvorausrechnung
kvip	KMACS-Modul zur Ergebnisaufbereitung und -visualisierung
LEU	Niedrigangereichertes Uran (engl. Low-Enriched Uranium)
LW-SMR	Leichtwasser-moderierte kleine modulare Reaktoren (mit SMR engl. für Small Modular Reactors)
MC-Codes	Monte-Carlo-Neutronentransportcodes
MCNP	Monte-Carlo N-Partikeltransportcode (Los Alamos National Laboratory)
MOX	Mischoxid-Kernbrennstoff
NEA	Institution innerhalb der OECD zur Förderung einer sicheren, umweltschonenden und wirtschaftlichen Nutzung der Kernenergie (engl. Nuclear Energy Agency)
NEWT	Gitterneutronentransportcode in SCALE
OECD	Organisation für wirtschaftliche Zusammenarbeit und Entwicklung (engl. Organisation for Economic Co-operation and Development)

PEMTY	Präprozessorprogramm für FENNECS (engl. Python External Meshing Tool for Yaml input) (GRS)
Q/C	QUABOX/CUBBOX Reaktorkinetikcode (GRS)
SCALE	Programmpaket für nukleare Simulationen (Oak Ridge National Laboratory)
Serpent	Monte-Carlo-Neutronentransportcode (VTT Technical Research Centre of Finland)
SFR	Natriumgekühlter Schneller Reaktor (engl. Sodium-cooled Fast Reactor)
Sm	Samarium
SPERT	Forschungsprogramm in den USA zur Sicherheit von Kernreaktoren (engl. Special Power Excursion Reactor Test Program)
SPH	Super-Homogenisierungs-Methode (engl. Super-Homogenization-Method)
SubKit	Präprozessorprogramm für COBRA-TF
SWR	Siedewasserreaktor
TSUNAMI	Unsicherheits-/Sensitivitätsanalysecode in SCALE
UAM-LWR	Benchmark for Uncertainty Analysis in Best-Estimate Modelling for Design, Operation and Safety Analysis of Light Water Reactors (OECD/NEA)
UAM-SFR	Benchmark for Uncertainty Analysis in Modelling for Design, Operation and Safety Analysis of Sodium-cooled Fast Reactors (OECD/NEA)
VENTINA	Nuklidinventarcode (GRS / Paul Scherrer Institut)
WWER	Wasser-Wasser-Energiereaktor (Druckwasserreaktor russischer Bauart)
XSUSA	Programm für Unsicherheitsanalysen unter Anwendung von Wirkungsquerschnitten und Unsicherheitswerten in Multigruppen-Energie-Darstellung (engl. Cross Section Uncertainty and Sensitivity Analysis) (GRS)
XSUSA(LR)	Erweiterung von XSUSA zur linearen Regressionsanalyse (engl. Cross Section Uncertainty and Sensitivity Analysis - Linear Regression) (GRS)
XSUSA-CE	Erweiterung von XSUSA zur Verwendung von kontinuierlichen Wirkungsquerschnitten (engl. Cross Section Uncertainty and Sensitivity Analysis - Continuous Energy) (GRS)

Abbildungsverzeichnis

Abb. 2.1	Module des GRS-Kernsimulators KMACS	4
Abb. 3.1	KMACS-Eingabe zur Definition einer Materialzusammensetzung mit der optionalen Angabe von thermischen Ausdehnungskoeffizienten.....	11
Abb. 3.2	Kernlayout mit zwei Brennelementtypen und Abbrandwerten zu Zyklusbeginn des betrachteten Vor-KONVOI-Reaktorkerns	15
Abb. 3.3	Mit KMACS berechnete Borkurve (schwarz) im Vergleich zur Borkurve der Referenzrechnung (blau) und deren Differenz (rot).....	16
Abb. 3.4	Rel. Abweichung der radialen Leistungsverteilung nach 210 (links) und 383 (rechts) Volllasttagen im Vergleich zur Referenzrechnung	16
Abb. 3.5	HELIOS-Modell des Brennelements 30AV5 des X2-Benchmarks	19
Abb. 3.6	HELIOS-Modell eines radialen Reflektors mit dem benachbarten Brennelement 39AWU des X2-Benchmarks	19
Abb. 3.7	KMACS-Eingabeformat zur Ansteuerung des Serpent-Backendmoduls in KMACS	21
Abb. 3.8	Modellierung eines rechteckigen 1D-Reflektors in Serpent	22
Abb. 3.9	Mit KMACS erstelltes Serpent-Modell eines hexagonalen Brennelements	22
Abb. 3.10	Modellierung eines hexagonalen 1D-Reflektors in Serpent	23
Abb. 3.11	Modellierung eines Reflektors mithilfe von Reaktorkernausschnitten in einem Superzellmodell mit Serpent.....	24
Abb. 3.12	Ausschnitt aus einer KMACS-Eingabe mit einem segmentierten Steuerstabtyp	28
Abb. 3.13	Modellierung der Wärmeleitung in einem Brennelement mit (links) und ohne (rechts) Hüllrohrbeschichtung im Abschnitt HEATCOND	29
Abb. 3.14	Format der zusätzlichen ATF-Konfigurationseinträge „htcs“, „tables“ in der KMACS-Eingabe	30
Abb. 3.15	Kernbeladung mit Verwendung einer Chrom-Hüllrohrbeschichtung bei Brennelementen auf roten FA31_ATF-Positionen.....	31
Abb. 3.16	Kritische Borkonzentration ohne Hüllrohrbeschichtung sowie mit einer Chrom-Hüllrohrbeschichtung bei 32 von 193 Brennelementen.....	32
Abb. 3.17	Schematische Darstellung eines CTF-Modells für ein hexagonales Brennelement.....	33

Abb. 3.18	KMACS-Eingabeformat zur Berechnung von Steuerstabwirksamkeiten und Reaktivitätskoeffizienten	36
Abb. 3.19	Steuerstabwirksamkeit ermittelt mit NEWT-FENNECS und NEWT-DYN3D im Vergleich zu einer Serpent Monte-Carlo-Rechnung.....	39
Abb. 3.20	Kritische Borkonzentration ermittelt mit FENNECS-ATHLET in KMACS im Vergleich zu Messwerten des BEAVRS-Benchmarks	40
Abb. 3.21	Kernlayout des NuScale-ähnlichen LW-SMR nach /FRI 23/	42
Abb. 3.22	Vergleich der Leistungsverteilungen zwischen KMACS (NEWT-DYN3D) und Serpent für den NuScale-ähnlichen LW-SMR, unkontrolliert.....	43
Abb. 3.23	BEAVRS-Benchmark: Modellierte Kernbeladung des ersten Zyklus	44
Abb. 3.24	BEAVRS-Benchmark: Layout des Brennelements FA31-6 und radialer Aufbau der verschiedenen Stabtypen	45
Abb. 3.25	BEAVRS-Benchmark: Layout des Brennelements FA31-15 und radialer Aufbau der verschiedenen Stabtypen	46
Abb. 3.26	BEAVRS-Benchmark: Serpent Monte-Carlo (links) und KMACS mit NEWT-DYN3D (rechts) (Viertelkernausschnitt)	47
Abb. 3.27	BEAVRS-Benchmark: KMACS mit Serpent-DYN3D (links) und KMACS mit HELIOS-DYN3D (rechts) (Viertelkernausschnitt)	48
Abb. 3.28	BEAVRS-Benchmark: KMACS mit Serpent-DYN3D und Verwendung des Superzell-Reflektormodells (Viertelkernausschnitt).....	49
Abb. 3.29	BEAVRS-Benchmark: Thermische Reaktorleistung des ersten Zyklus	49
Abb. 3.30	BEAVRS-Benchmark: Einfahrtiefe der D-Bank für den ersten Zyklus	50
Abb. 3.31	BEAVRS-Benchmark: Berechnete kritische Borkonzentrationen im Vergleich zu Messwerten des Benchmarks	51
Abb. 3.32	BEAVRS-Benchmark: Berechnete Borkonzentrationen mit Serpent-DYN3D und NEWT-DYN3D im Vergleich zu Messwerten	52
Abb. 3.33	BEAVRS-Benchmark: DNBR-Werte bei Ende des ersten Zyklus ermittelt mit CTF-Unterkanalrechnungen (Viertelkernausschnitt)	53
Abb. 3.34	BEAVRS-Benchmark: Verlauf des DNBR-Werts im höchstbelasteten Brennelement bei Beginn (links) und Ende (rechts) des ersten Zyklus.....	54
Abb. 3.35	X2-Benchmark: Modellierte Kernbeladung des ersten Zyklus	55
Abb. 3.36	X2-Benchmark: Anordnung der Steuerstabbänke 1 – 10	56

Abb. 3.37	X2-Benchmark: Serpent Monte-Carlo (links) und KMACS mit NEWT-DYN3D (rechts).....	58
Abb. 3.38	X2-Benchmark: KMACS mit Serpent-DYN3D (links) und KMACS mit HELIOS-DYN3D (rechts)	58
Abb. 3.39	X2-Benchmark: Berechnete kritische Borkonzentration im Vergleich zu Messwerten des Benchmarks	59
Abb. 3.40	X2-Benchmark: Stablängenleistung auf der mittleren Kernebene eines 60° Kernausschnitts.....	60
Abb. 3.41	X2-Benchmark: DNBR-Werte auf der mittleren Kernebene eines 60° Kernausschnitts.....	60
Abb. 3.42	TVA Watts Bar Unit 1-Benchmark: Beladung des ersten Betriebszyklus	62
Abb. 3.43	TVA Watts Bar Unit 1-Benchmark: Anordnung der Steuerstabbänke.....	63
Abb. 3.44	Ausschnitt aus der KMACS-Schemabeschreibung mit CUE (links) und dem zugehörigen Teil einer KMACS-Eingabe (rechts)	70
Abb. 4.1	Ermittelte Multiplikationsfaktoren für thermische Benchmark-Anordnungen im Vergleich zum Benchmark-Multiplikationsfaktor	85
Abb. 4.2	Relative Abweichung zwischen den ermittelten Multiplikationsfaktoren und dem jeweiligen Benchmark-Multiplikationsfaktor.....	85
Abb. 4.3	Abweichung in der Einheit einer Benchmark-Standardabweichung zwischen den ermittelten Multiplikationsfaktoren und dem jeweiligen Benchmark-Multiplikationsfaktor	85
Abb. 4.4	Ermittelte Multiplikationsfaktoren für verschiedene LMFR-Anordnungen im Vergleich zum Benchmark-Multiplikationsfaktor	92
Abb. 4.5	Relative Abweichung zwischen den ermittelten Multiplikationsfaktoren und dem jeweiligen Benchmark-Multiplikationsfaktor.....	92
Abb. 4.6	Abweichung in der Einheit einer Benchmark-Standardabweichung zwischen den ermittelten Multiplikationsfaktoren und dem jeweiligen Benchmark-Multiplikationsfaktor	93
Abb. 4.7	Sensitivität des Multiplikationsfaktors bzgl. des inelastischen Wirkungsquerschnitts von U-238 für die Anordnung ZPR6A7 Loading 41	95

Abb. 4.8	Sensitivität des Multiplikationsfaktors bzgl. des Neutroneneinfangwirkungsquerschnitts mit Gamma-Emission von U-238 für die Anordnung ZPR6A7 Loading 41	95
Abb. 4.9	Inelastischer Wirkungsquerschnitt (MT = 4) von U-238 aus den Datenbibliotheken JEFF-3.3 und ENDF/B-VII.1	96
Abb. 4.10	Mit ENDF/B-VII.1, JEFF-3.3 und einer Kombination beider ermittelte Multiplikationsfaktoren für verschiedene LMFR-Anordnungen im Vergleich zum jeweiligen Benchmark-Multiplikationsfaktor.....	97
Abb. 4.11	Mit ENDF/B-VII.1, JEFF-3.3 und einer Kombination beider ermittelte Multiplikationsfaktoren für verschiedene FLATTOP-Anordnungen im Vergleich zum jeweiligen Benchmark-Multiplikationsfaktor.....	98
Abb. 4.12	KENO-Va-Modell eines generischen GEN-III-Kerns	101
Abb. 4.13	Unsicherheits-„Breakdown“ für den Multiplikationsfaktor des LEU-Kerns	103
Abb. 4.14	Unsicherheits-„Breakdown“ für den Multiplikationsfaktor des LEU/MOX-Kerns	103
Abb. 4.15	Sensitivitätsprofile des Multiplikationsfaktors des LEU-Kerns.....	104
Abb. 4.16	Relative Unsicherheiten für die radialen Leistungsverteilungen des LEU- (links) und LEU/MOX-Kerns (rechts).....	105
Abb. 4.17	Unsicherheits-„Breakdown“ für die Leistung im zentralen Brennelement des LEU-Kerns	105
Abb. 4.18	Unsicherheits-„Breakdown“ für die Leistung im zentralen Brennelement des LEU/MOX-Kerns	106
Abb. 4.19	Sensitivität der Leistung im zentralen Brennelement bzgl. der wichtigsten Reaktionen für den LEU- (oben) und LEU/MOX-Kern (unten).....	107
Abb. 4.20	SPERT III – <i>Test 43</i> : Statistische Auswertung der Reaktivität der 300 Variationen	110
Abb. 4.21	SPERT III – <i>Test 43</i> : Statistische Auswertung der thermischen Reaktorleistung der 300 Variationen	111
Abb. 4.22	SPERT III – <i>Test 43</i> : Einseitige, obere Toleranzlimits nach Wilks sowie bei Annahme normalverteilter Ergebnisgrößen.....	112
Abb. 4.23	SPERT III – <i>Test 43</i> : R^2 mit Konfidenzintervall und Signifikanzband von Beiträgen zur Ergebnisunsicherheit der thermischen Leistung	113

Abb. 4.24	Kernlayout des ABR-Kerns mit Position des bewegten Steuerelements während der Transiente (modifizierte Darstellung nach /BLA 11/)	114
Abb. 4.25	Layout der Brenn-, Steuer- und Reflektorelemente des SFR-Kerns /BLA 11/	115
Abb. 4.26	NEWT-Modell eines SFR-Brennelements in einem unendlichen Gitter	117
Abb. 4.27	NEWT-Modell eines SFR-Steuerelements umgeben von Brennelementen in einem unendlichen Gitter	117
Abb. 4.28	Hochaufgelöstes KENO-VI-Modell des SFR-Kerns	119
Abb. 4.29	KENO-VI-Modell des SFR-Kerns mit homogenisierten Regionen	119
Abb. 4.30	Kennzeichnung der Brennelemente (rote Punkte), bei denen die Spaltdichte ermittelt wurde	122
Abb. 4.31	Vergleich berechneter Spaltdichten mit dem räumlich aufgelösten Modell (reference) und dem nodalen Modell (nodal).....	122
Abb. 4.32	Zweidimensionales Serpent-Superzellmodell zur Berechnung homogenisierter Wirkungsquerschnitte für das primäre Steuerelement.....	124
Abb. 4.33	Radialer Schnitt durch das FENNECS-Modell des SFR-Kerns zur Veranschaulichung des Rechengitters (Darstellung mit PEMTY erstellt)	126
Abb. 4.34	Leistungsverteilung des Serpent-Modells für den unkontrollierten Zustand des ABR-Kerns	128
Abb. 4.35	Relative Abweichungen der Leistungsverteilungen zwischen FENNECS und Serpent für den unkontrollierten Zustand des ABR- Kerns	128
Abb. 4.36	Leistungsverteilung des Serpent-Modells für den kontrollierten Zustand des ABR-Kerns	129
Abb. 4.37	Relative Abweichungen der Leistungsverteilungen zwischen FENNECS und Serpent für den kontrollierten Zustand des ABR- Kerns	129
Abb. 4.38	Multiplikationsfaktor als Funktion der Brennstofftemperatur ermittelt mit dem FENNECS-Ganzkernmodell	130
Abb. 4.39	Multiplikationsfaktor als Funktion der Kühlmitteltemperatur ermittelt mit dem FENNECS-Ganzkernmodell	131

Abb. 4.40	Verlauf der Reaktorleistung mit nominalen (dunkelblau) und variieren Wirkungsquerschnitten (hellblau)	133
Abb. 4.41	Verlauf der mittleren Brennstofftemperatur mit nominalen (dunkelblau) und variieren Wirkungsquerschnitten (hellblau)	134
Abb. 4.42	Beispiel einer ACE-Datei für das Nuklid U-235	136
Abb. 4.43	Beispiel von ACE-Punktdateien der Spaltneutronenausbeute von U- 235. Vertikale Linien entsprechen der 56-Energiegruppenstruktur	137
Abb. 4.44	Illustration einer angebrachten Variation an punkweisen ACE-Daten innerhalb eines Energiegruppenintervalls	139
Abb. 4.45	Baumdiagramm zur Illustration der Summenregeln für verschiedene neutroneninduzierte Reaktionen eines Nuklids	141
Abb. 4.46	Sensitivitätsprofile von k_{eff} für die elastische Streuung (n, n) von Neutronen in U-235 für den Testfall Godiva	146
Abb. 4.47	Sensitivitätsprofile von k_{eff} für die inelastische Streuung (n, n') von Neutronen in U-235 für den Testfall Godiva	146
Abb. 4.48	Sensitivitätsprofile von k_{eff} für den Spaltwirkungsquerschnitt (n, f) von U-235 für den Testfall Godiva	147
Abb. 4.49	Sensitivitätsprofile von k_{eff} für die (n, γ)-Reaktion in U-235 für den Testfall Godiva	147
Abb. 4.50	Sensitivitätsprofile von k_{eff} für die Spaltneutronenausbeute von U-235 für den Testfall Godiva	148
Abb. 4.51	Sensitivitätsprofile von k_{eff} für das Spaltspektrum von U-235 für den Testfall Godiva	148
Abb. 4.52	Sensitivitätsprofile von k_{eff} für die elastische Streuung (n, n) von Neutronen in Pu-239 für den Testfall Jezebel	149
Abb. 4.53	Sensitivitätsprofile von k_{eff} für die inelastische Streuung (n, n') von Neutronen in Pu-239 für den Testfall Jezebel	149
Abb. 4.54	Sensitivitätsprofile von k_{eff} für den Spaltwirkungsquerschnitt (n, f) von Pu-239 für den Testfall Jezebel	150
Abb. 4.55	Sensitivitätsprofile von k_{eff} für die Spaltneutronenausbeute von Pu-239 für den Testfall Jezebel	150
Abb. 4.56	Sensitivitätsprofile von k_{eff} für das Spaltspektrum von Pu-239 für den Testfall Jezebel	151

Abb. 4.57	Sensitivitätsprofile von k_{eff} für die elastische Streuung (n, n) von Neutronen in H-1 für die UO_2 -Lösung in LEU-SOL-THERM-002	151
Abb. 4.58	Sensitivitätsprofile von k_{eff} für den Spaltwirkungsquerschnitt (n, f) von U-235 für die UO_2 -Lösung in LEU-SOL-THERM-002	152
Abb. 4.59	Sensitivitätsprofile von k_{eff} für die (n, γ)-Reaktion in U-238 für die UO_2 -Lösung in LEU-SOL-THERM-002	152
Abb. 4.60	Sensitivitätsprofile von k_{eff} für die Spaltausbeute von U-235 für die UO_2 -Lösung in LEU-SOL-THERM-002	153
Abb. 4.61	Sensitivitätsprofile von k_{eff} für das Spaltspektrum von U-235 für die UO_2 -Lösung in LEU-SOL-THERM-002	153
Abb. 4.62	Sensitivitätsprofile von k_{eff} für die elastische Streuung (n, n) von Neutronen in H-1 für die TMI-1-Brennstabzelle	154
Abb. 4.63	Sensitivitätsprofile von k_{eff} für den Spaltwirkungsquerschnitt (n, f) von U-235 für die TMI-1-Brennstabzelle	154
Abb. 4.64	Sensitivitätsprofile von k_{eff} für die (n, γ)-Reaktion in U-238 für die TMI-1-Brennstabzelle	155
Abb. 4.65	Sensitivitätsprofile von k_{eff} für die Spaltausbeute von U-235 für die TMI-1-Brennstabzelle	155
Abb. 4.66	Sensitivitätsprofile von k_{eff} für das Spaltspektrum von U-235 für die TMI-1-Brennstabzelle	156
Abb. 4.67	Programmablauf zur Generierung von variierten ACE-Datenbibliotheken	157
Abb. 4.68	Unsicherheitsbeiträge und totale Unsicherheit von k_{eff} für Godiva	160
Abb. 4.69	Unsicherheitsbeiträge und totale Unsicherheit von k_{eff} für Jezebel	160
Abb. 4.70	Unsicherheitsbeiträge und totale Unsicherheit von k_{eff} für die UO_2 -Lösung in LEU-SOL-THERM-002	161
Abb. 4.71	Unsicherheitsbeiträge und totale Unsicherheit von k_{eff} für die TMI-1-Brennstabzelle	161
Abb. 4.72	KENO-VI-Modell des HTR-10, Einheitszelle (oben links), horizontaler Schnitt (unten links) und vertikaler Schnitt (rechts) des Kernmodells	166
Abb. 4.73	KENO-VI-Modell des HTTR, horizontaler Schnitt	167
Abb. 4.74	KENO-VI-Modell einer VHTRC-Anordnung, horizontaler Schnitt	168

Abb. 4.75	Multiplikationsfaktoren von kritischen HTGR-Experimenten: Benchmark-Werte und Ergebnisse der KENO-VI-Berechnungen.....	169
Abb. 4.76	Modell einer einfachen PMR-Brennstoffzelle	170
Abb. 4.77	Modell einer erweiterten PMR-Einheitszelle (Brennstoff- und Heliumzylinder)	170
Abb. 4.78	Modell eines hexagonalen PMR-Brennstoffblocks (Viertelkernausschnitt)	171
Abb. 4.79	Multiplikationsfaktoren für die HTR-CRP-Benchmark-Anordnungen	172
Abb. 4.80	Sensitivität des Multiplikationsfaktors zum U-238- Einfangwirkungsquerschnitt für die HTR-CRP-PMR-Stabzelle	173
Abb. 4.81	Sensitivität des Multiplikationsfaktors zum elastischen Streuwirkungsquerschnitt von Graphit für die HTR-CRP-PMR- Stabzelle	178
Abb. 4.82	Unsicherheit des Multiplikationsfaktors und Hauptbeiträge der HTR- CRP-PMR-Stabzelle	179
Abb. 4.83	Unsicherheiten der Multiplikationsfaktoren für ausgewählte Modelle des HTR-CRP-Benchmarks	180
Abb. 4.84	Multiplikationsfaktoren kritischer HTGR-Experimente: Benchmark- Werte und Ergebnisse der KENO-VI-Berechnungen mit 252-Gruppen ..	182
Abb. 5.1	Zweidimensionales 3 x 3 Kernlayout.....	192
Abb. 5.2	Relative Abweichungen der Leistungsverteilungen von den Referenzwerten für Rechnungen ohne DF (links), mit Serpent-DF (Mitte) und AFEN/NEM-DF (rechts)	193
Abb. 5.3	Relative Abweichungen der Leistungsverteilungen von den Referenzwerten für Rechnungen ohne DF (links), mit Serpent-DF (Mitte) und AFEN/NEM-DF (rechts)	194
Abb. 5.4	Kernlayout des C5G7-TD Kerns.....	195
Abb. 5.5	Relative Abweichungen der radialen Leistungsverteilungen von den Referenzwerten für Rechnungen ohne DF (links) und AFEN/NEM-DF (rechts)	196
Abb. 5.6	Relative Abweichungen der axialen Leistungsverteilungen von den Referenzergebnissen	196
Abb. 5.7	Kernlayout des TMI-1-Minikerns mit 3 × 3 UO ₂ -Brennelemente	198
Abb. 5.8	Verlauf der Reaktivität während der Transiente 1	205

Abb. 5.9	Verlauf der Leistung während der Transiente 1	206
Abb. 5.10	Verlauf der Reaktivität während der Transiente 2	207
Abb. 5.11	Verlauf der Leistung während der Transiente 2	207

Tabellenverzeichnis

Tab. 3.1	BEAVRS-Benchmark: Multiplikationsfaktoren k_{eff} für Nulllast-Heiß.....	47
Tab. 3.2	X2-Benchmark: Multiplikationsfaktoren k_{eff} für Nulllast-Heiß.....	57
Tab. 3.3	Multiplikationsfaktoren berechnet mit NEWT-DYN3D und HELIOS-DYN3D bei unterschiedlich eingefahrenen Steuerstabbänken	64
Tab. 3.4	Wirksamkeiten der Steuerstabbänke berechnet mit NEWT-DYN3D und HELIOS-DYN3D.....	65
Tab. 3.5	Isothermer Temperaturkoeffizient (ITC) im unkontrollierten Zustand berechnet mit NEWT-DYN3D und HELIOS-DYN3D	66
Tab. 3.6	Wirksamkeit der D-Bank berechnet mit NEWT-DYN3D und HELIOS-DYN3D bei einer Borkonzentration von 1230 ppm	67
Tab. 3.7	Differentielle Borwirksamkeit (DBW) im unkontrollierten Zustand berechnet mit NEWT-DYN3D und HELIOS-DYN3D	68
Tab. 4.1	Berechnete Multiplikationsfaktoren für thermische Benchmark-Anordnungen im Vergleich zum Benchmark-Multiplikationsfaktor	83
Tab. 4.2	Unsicherheiten der ermittelten Multiplikationsfaktoren und des Benchmark-Multiplikationsfaktors (Standardabweichung, 1σ)	84
Tab. 4.3	Gemittelte relative Abweichungen und Abweichungen in der Einheit einer Benchmark-Standardabweichung (vorzeichenbehaftet und absolut) über betrachtete thermische Benchmark-Anordnungen.....	87
Tab. 4.4	Berechnete Multiplikationsfaktoren für LMFR-Benchmark-Anordnungen im Vergleich zum Benchmark-Multiplikationsfaktor	90
Tab. 4.5	Unsicherheit der ermittelten Multiplikationsfaktoren und des Benchmark-Multiplikationsfaktors (Standardabweichung, 1σ)	91
Tab. 4.6	Gemittelte relative Abweichungen und Abweichungen in der Einheit einer Benchmark-Standardabweichung (vorzeichenbehaftet und absolut) über betrachtete LMFR-Benchmark-Anordnungen	94
Tab. 4.7	4-Energiegruppen-Struktur für nodale UAM-SFR-Rechnungen.....	118
Tab. 4.8	Multiplikationsfaktoren für verschiedene SFR-Anordnungen ermittelt mit makroskopischen 4-Gruppen-Wirkungsquerschnitten und mikroskopischen 425-Gruppen-Wirkungsquerschnitten.....	121
Tab. 4.9	8-Energiegruppen-Struktur für nodale UAM-SFR-Rechnungen /WAL 12/	125

Tab. 4.10	Multiplikationsfaktoren und Steuerelementwirksamkeiten ermittelt mit FENNECS im Vergleich zu Serpent-Referenzwerten	127
Tab. 4.11	Nominaler Multiplikationsfaktor k_{eff} , Mittelwert und rel. Unsicherheit von k_{eff} bei einer Stichprobe von 141 Wirkungsquerschnittssätzen	132
Tab. 4.12	Betrachtete Nuklid-Reaktions-Variationen der Testfälle.....	145
Tab. 4.13	Unsicherheiten des Multiplikationsfaktors k_{eff} aufgrund der (n, γ)-Reaktion von U-238 der TMI-1-Brennstabzelle	162
Tab. 4.14	Mit TSUNAMI und XSUSA-CE berechnete relative Unsicherheiten (%) verschiedener Modellsysteme	163
Tab. 4.15	6-Energiegruppenstruktur für Wirkungsquerschnitte des PMR-Brennstoffblocks.....	181
Tab. 4.16	Relative 1σ -Unsicherheiten (%) der 6-Gruppen-Wirkungsquerschnitte des PMR-Brennstoffblocks.....	181
Tab. 5.1	Rechenergebnisse für 2x1 Minikernmodell	191
Tab. 5.2	Ergebnisse für k_{eff} für das 3x3 Minikernmodell mit reflektierenden Randbedingungen	192
Tab. 5.3	Ergebnisse für k_{eff} für das 3 x 3 Minikernmodell mit radialem Wasserreflektor und reflektierenden Randbedingungen in axialer Richtung	194
Tab. 5.4	Ergebnisse für k_{eff} für den C5G7-TD-Kern mit radialem und axialem Wasserreflektor	195
Tab. 5.5	Ergebnisse zweidimensionaler DYN3D-Rechnungen des unkontrollierten TMI-1 Minikerns	100
Tab. 5.6	Ergebnisse zweidimensionaler DYN3D-Rechnungen des kontrollierten TMI-1-Minikerns.....	201
Tab. 5.7	Ergebnisse dreidimensionaler DYN3D-Rechnungen des TMI-1-Minikerns mit vollständig ausgefahrenem Steuerstab.....	202
Tab. 5.8	Ergebnisse dreidimensionaler DYN3D-Rechnungen des TMI-1-Minikerns mit vollständig eingefahrenem Steuerstab.....	203
Tab. 5.9	Ergebnisse dreidimensionaler DYN3D-Rechnungen des TMI-1-Minikerns mit teilweise ausgefahrenem Steuerstab	203
Tab. 5.10	Berechnete kritische Borkonzentrationen für die betrachteten Rechenfälle des TMI-1-Minikerns.....	205

Tab. 5.11	Steuerstabwirksamkeit zwischen vollständig eingefahrenem und ausgefahrenem Steuerstab.....	208
Tab. 5.12	Steuerstabwirksamkeit zwischen vollständig eingefahrenem und teilweise ausgefahrenem (54 cm) Steuerstab.....	209

A Veröffentlichungen

A. Aures, T. Eisenstecken, E. Elts, R. Kilger, Nuclear data uncertainty propagation in continuous-energy Monte Carlo calculations, *Annals of Nuclear Energy*, Vol. 211, 2025.

R. Henry, J. Bousquet, A. Seubert, Implementation of the discontinuous Galerkin method into FENNECS and other new improvements for LWR analysis, In *Proceedings of: PHYSOR 2024 – International Conference on Physics of Reactors*, San Francisco, California, USA, April 21 – 24, 2024.

Y. Périn, A. Aures, S. Palazzo, Integration of the Subchannel Code CTF in the KMACS Core Simulator and Offline Coupling to ATHLET-QUABOX/CUBBOX for BEPU Analysis, In *Proceedings of: M&C 2023 – The International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering*, Niagara Falls, Ontario, Canada, August 13 – 17, 2023.

A. Aures, N. Berner, J. Bousquet, K. Velkov, W. Zwermann, HELIOS-2/XSUSA sensitivity and uncertainty analyses with ENDF/B-VII.1 covariance data, *Annals of Nuclear Energy*, Vol. 167, 2022.

T. Eisenstecken, A. Aures, R. Henry, R. Kilger, Application of the GRS core simulator KMACS on Accident Tolerant Fuels, In *Proceedings of: INAC 2021 – International Nuclear Atlantic Conference*, Brazil, November 29 – December 2, 2021, (Virtual Conference).

**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

ISBN 978-3-911727-19-8