

**Weiterentwicklung des
Neutronenkinetikcodes
FENNECS
für unregelmäßige
Geometrien für
SMRs und MMRs
sowie fortschrittliche
und innovative
Reaktorsysteme**

**Weiterentwicklung des
Neutronenkinetikcodes
FENNECS
für unregelmäßige
Geometrien für
SMRs und MMRs
sowie fortschrittliche
und innovative
Reaktorsysteme**

Abschlussbericht

Armin Seubert
Jérémy Bousquet
Ekaterina Elts
Romain Henry
Silvia Io Muzio

Juli 2026

Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrunde liegende Eigenforschungsvorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Umwelt, Klimaschutz, Naturschutz und nukleare Sicherheit (BMUKN) unter dem Förderkennzeichen UMRS1612 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

FENNECS, Mikroreaktoren, Neutronenkinetik, PEMTY, SMR, unregelmäßige Geometrie

Kurzfassung

Das Ziel dieses Eigenforschungsvorhabens besteht in der Weiterentwicklung des im Rahmen des BMWi-Projekts RS1576 (AGeNT) entstandenen 3D-Neutronenkinetik-codes FENNECS (*Finite ElemeNt NEutroniCS*), dem das flexible Vernetzungswerkzeug PEMTY (*Python External Meshing Tool with Yaml input*) zur Geometrievernetzung zur Seite gestellt wird. Zu den Anwendungsbereichen zählen die Simulation kleiner modularer und Mikroreaktoren (*Small Modular and Micro Modular Reactors*, SMRs und MMRs) mit ihren unregelmäßigen Geometrien, aber auch Konzepte der Generation IV sowie LWR. Schwerpunkte bilden dabei die Verifizierung und Validierung, die Weiterentwicklung des vereinfachten SP_3 -Transportlösers von stationären auf zeitabhängige Probleme, Weiterentwicklung von PEMTY und konvergenzbeschleunigende numerische Verfahren.

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

- Weitere Entwicklung und Verifikation der SP_3 -Transportmethode von FENNECS, insbesondere für zeitabhängige Berechnungen.
- Weiterentwicklung der Konvergenzbeschleunigungsverfahren in FENNECS.
- Weiterentwicklung und Verbesserung der Rechenmodelle in FENNECS, insbesondere bezüglich der substanziellen Weiterentwicklung des Modells rotierender Steuerstäbe in Mikroreaktoren, der Dynamik der Spaltproduktvergiftung, der Simulation der Nachzerfallsleistungsentwicklung, der Implementierung eines Suchverfahrens für die kritische Borkonzentration bei SMRs mit Boreinspeisesystem.
- Weiterentwicklung des Vernetzungswerkzeugs PEMTY, insbesondere bezüglich der Verbesserung des Polygonvernetzungsalgorithmus.
- Verifizierung und Validierung, insbesondere durch Vergleiche mit Monte-Carlo-Referenzmodellen und durch Code-zu-Code-Vergleiche, hier speziell mit dem nodalen Code FRENETIC der NEMO-Gruppe des Politecnico di Torino anhand von flüssigmetallgekühlten Reaktorkonzepten.
- Verfolgung internationaler Trends der Neutronenphysik unregelmäßiger Geometrien; hieraus ging insbesondere die Erweiterung von FENNECS um den

Discontinuous-Galerkin-Ansatz hervor, der den Einsatz von Brennelement-Diskontinuitätsfaktoren (Assembly Discontinuity Factors, ADF) ermöglicht.

Abstract

The objective of this research project is the further development of the 3D neutron kinetics code FENNECS (*Finite ElemeNt NEutroniCS*) originally developed within the framework of the BMWi project RS1576 (AGeNT) which is complemented by the flexible geometry meshing tool PEMTY (*Python External Meshing Tool with Yaml input*). Areas of application include the simulation of Small Modular and Micro Modular Reactors (SMRs and MMRs), characterized by their – especially for MMRs – irregular geometries, as well as Generation IV concepts and Light Water Reactors (LWRs). The focus is on the verification and validation, the extension of the simplified SP_3 transport solver from steady-state to time-dependent problems, the further development of PEMTY, and the implementation of numerical methods designed to accelerate convergence. The present report details the research and development activities conducted regarding the following topics:

- Further development and verification of the FENNECS SP_3 transport method, particularly for time-dependent calculations.
- Further development of convergence acceleration techniques within FENNECS.
- Further development and improvement of the computational models in FENNECS, specifically regarding the substantial advancement of the model for rotating control rods in micro-reactors, fission product poisoning dynamics, the simulation of decay heat evolution, and the implementation of a search algorithm for determining the critical boron concentration in SMRs equipped with a boron injection system.
- Further development of the PEMTY meshing tool, specifically regarding improvements to the polygonal meshing algorithm.
- Verification and validation, particularly through comparisons with Monte Carlo reference models and through code-to-code comparisons, specifically with the nodal code FRENETIC, developed by the NEMO Group at the Politecnico di Torino, at the example of liquid-metal-cooled reactor concepts.
- Pursuing international trends in the neutron physics of irregular geometries; this effort notably resulted in the extension of FENNECS to incorporate the

Discontinuous Galerkin approach, thereby enabling the use of Assembly Discontinuity Factors (ADF).

Inhaltsverzeichnis

	Kurzfassung.....	I
	Abstract.....	III
1	Einleitung und Zielsetzung	1
1.1	Übergeordnete Zielsetzung	1
1.2	Einzelzielsetzungen.....	1
2	Darstellung des Standes von Wissenschaft und Technik	3
3	Weitere Entwicklung und Verifikation der SP₃-Transport- methode von FENNECS (Arbeitspaket 1).....	7
3.1	Implementierung der zeitabhängigen SP ₃ -Gleichungen für Transientensimulationen	7
3.1.1	Transiente SP ₃ -Gleichungen	7
3.1.2	Galerkin-Darstellung der transienten SP ₃ -Gleichungen	14
3.1.3	Implementierung der transienten SP ₃ -Methode in FENNECS.....	18
3.2	Weiterentwicklung des stationären SP ₃ -Lösers.....	22
3.3	Anpassung der Konvergenzbeschleunigungsverfahren von FENNECS an den SP ₃ -Löser	23
3.4	Erweiterung zur Lösung der adjungierten SP ₃ -Gleichungen	24
3.5	Überprüfung anhand von Testfällen.....	24
4	Konvergenzbeschleunigungsverfahren in FENNECS (Arbeitspaket 2)	27
4.1	Optimierung existierender und Entwicklung neuer Konvergenzbeschleunigungsverfahren.....	27
4.1.1	Inverse Vektoriteration nach Wielandt	27
4.1.2	Graue Approximation.....	31
4.2	Modellreduktion	35
4.2.1	Evaluation moderner Trends im Bereich Reduced Order Modeling (ROM)	36

4.2.2	Implementierung eines ausgewählten ROM	36
4.2.3	Überprüfung anhand von Testfällen.....	50
5	Weiterentwicklung und Verbesserung der neutronenphysikalischen Rechenmodelle in FENNECS (Arbeitspaket 3)	59
5.1	Implementierung der I/Xe- und Pm/Sm-Gleichungen.....	59
5.2	Erweiterungen zur Berechnung der Nachzerfallsleistungsentwicklung	62
5.3	Implementierung eines Suchverfahrens für die kritische Borkonzentration bei SMRs mit Boreinspeisesystem.....	64
5.4	Weiterentwicklung des Modells rotierender Steuerstäbe	65
5.4.1	Problemstellung.....	65
5.4.2	Finite-Elemente-Ansatz in FENNECS.....	67
5.4.3	Projektionsbasiertes Steuerstabmodell.....	69
5.5	Überprüfung anhand von Testfällen.....	73
5.5.1	Verifikation des verbesserten Steuerstabmodells	73
5.5.2	Überprüfung der Nachzerfallsleistungsentwicklung.....	80
6	Weiterentwicklung des Vernetzungswerkzeugs PEMTY (Arbeitspaket 4)	83
6.1	Anpassungen gemäß spezifischen MMR- und SMR-Anforderungen	83
6.1.1	Implementierung der Delaunay-Vernetzungs-Funktionalität für Polygone in PEMTY	83
6.1.2	Erweiterte Polygonkonzepte (nestedPolygon, polygonSet, annulusPolygon) und Effizienzoptimierungen	85
6.2	Anpassungen aufgrund der SP ₃ -Methode.....	86
7	Verifizierung und Validierung (Arbeitspaket 5)	91
7.1.1	Anwendung der neuen PEMTY-Funktionalitäten am Beispiel des Special Purpose Reactors	91
7.2	Kompensierte Transienten und Vergleiche mit FRENETIC.....	93

7.2.1	Kompensierte Transiente in einem Reaktor mit thermischem Neutronenspektrum	94
7.2.2	Kompensierte Transiente in einem Reaktor mit schnellem Neutronenspektrum	99
7.3	Kernberechnungen für ein bleigekühltes Reaktorkonzept und Vergleiche mit FRENETIC	104
7.3.1	Das bleigekühlte Reaktorkonzept ALFRED LEADER	104
7.3.2	Wirkungsquerschnitte für ALFRED LEADER	106
7.3.3	Modellierung und Simulation des ALFRED LEADER mit FENNECS	106
7.4	Kernberechnungen für ein natriumgekühltes Konzept und Vergleiche mit Serpent und FRENETIC	109
7.4.1	Der Advanced Burner Reactor (ABR)	109
7.4.2	Generierung der Monte-Carlo-Referenzlösung und von Wirkungsquerschnittsdaten	109
7.4.3	Modell des ABR in FENNECS und Resultate	110
8	Verfolgung internationaler Trends der Neutronenphysik unregelmäßiger Geometrien (Arbeitspaket 6)	115
8.1	Diskontinuitätsfaktoren – Discontinuous-Galerkin-Ansatz	116
9	Zusammenfassung	119
9.1	Weitere Entwicklung und Verifikation der SP ₃ -Transportmethode von FENNECS, insbesondere für zeitabhängige Berechnungen ..	119
9.2	Weiterentwicklung der Konvergenzbeschleunigungsverfahren in FENNECS	119
9.3	Weiterentwicklung und Verbesserung der Rechenmodelle in FENNECS	120
9.4	Weiterentwicklung des Vernetzungswerkzeugs PEMTY	120
9.5	Verifizierung und Validierung	120
9.6	Verfolgung internationaler Trends der Neutronenphysik unregelmäßiger Geometrien	121
9.7	Erreichter Stand und weitere notwendige Schritte	121

A	Anhang.....	123
A.1	Veröffentlichungen	123
A.2	Glossar.....	124
	Abbildungsverzeichnis	125
	Tabellenverzeichnis	129
	Literaturverzeichnis	131

1 Einleitung und Zielsetzung

1.1 Übergeordnete Zielsetzung

Ziel des Eigenforschungsvorhabens war die Weiterentwicklung des im Rahmen des BMWi-Projekts RS1576 (AGeNT) entwickelten Softwarepakets, bestehend aus dem 3D-Neutronenkinetikcode FENNECS (*Finite ElemeNt NEutroniCS*) und dem flexiblen Vernetzungswerkzeug PEMTY (*Python External Meshing Tool with Yaml input*), zur Simulation kleiner modularer und Mikroreaktoren (*Small Modular and Micro Modular Reactors*, SMRs und MMRs) mit ihren unregelmäßigen Geometrien. Schwerpunkte bildeten dabei die Verifizierung und Validierung, die Weiterentwicklung des vereinfachten SP_3 -Transportlösers und konvergenzbeschleunigende numerische Verfahren.

1.2 Einzelzielsetzungen

Die Schwerpunkte des vorliegenden Forschungsvorhabens waren:

- **Weitere Entwicklung und Verifikation der SP_3 -Transportmethode von FENNECS**

Der bereits existierende Prototyp eines Löser für die stationären SP_3 -Gleichungen in FENNECS war weiterzuentwickeln und zu erproben. Dazu zählen ferner die Implementierung der zeitabhängigen SP_3 -Gleichungen für Transientensimulationen, die Anpassung der Konvergenzbeschleunigungsverfahren von FENNECS an den SP_3 -Löser und die Erweiterung zur Lösung der adjungierten SP_3 -Gleichungen.

- **Konvergenzbeschleunigungsverfahren in FENNECS**

Der Rechenaufwand (3D, mehrere Energiegruppen, komplexe Geometrien) erfordert den Einsatz konvergenzbeschleunigender Verfahren zur effizienten Lösung der stationären und zeitabhängigen Diffusions- bzw. SP_3 -Transportgleichung. Dazu werden geeignete Konvergenzbeschleunigungsverfahren identifiziert, in FENNECS implementiert und getestet, sowohl für die Diffusionsnäherung als auch die SP_3 -Methode. Vor dem Hintergrund der international verfolgten, vielversprechend erscheinenden Modellreduktionsansätze soll zudem in Erfahrung gebracht werden, welche Reduced Order Modelle (ROM) für FENNECS in Frage kommen könnten, und ein ausgewähltes implementiert werden.

- **Weiterentwicklung und Verbesserung der Rechenmodelle in FENNECS**

Entwicklungsbedarf besteht z. B. bezüglich der Dynamik der Spaltproduktvergiftung, der Simulation der Nachzerfallsleistungsentwicklung, der Implementierung eines Suchverfahrens für die kritische Borkonzentration bei SMRs mit Boreinspeisesystem oder der Weiterentwicklung des Modells rotierender Steuerstäbe in Mikroreaktoren.

- **Weiterentwicklung des Vernetzungswerkzeugs PEMTY**

Je nach vorliegender SMR- bzw. MMR-Kernauslegung wird es erforderlich sein, die in PEMTY bereits vorhandenen geometrischen Grundformen – z. B. zur Vernetzung von sog. *Control Drums* – geeignet zu ergänzen. Außerdem ist die in PEMTY realisierte Superhomogenisierungs-Methode (SPH) so anzupassen, dass neueste Erkenntnisse zu dieser Methode wie etwa jene in /LAB 19/ berücksichtigt und auch für anisotrope Streuquerschnitte angewandt können.

- **Verifizierung und Validierung**

Die genannten Weiterentwicklungen und Erweiterungen von FENNECS sind durch Nachrechnung geeigneter Testfälle und Benchmarks bzw. durch Vergleich mit Monte-Carlo-Referenzrechnungen zu erproben und zu überprüfen. Dies erfordert neben der jeweiligen Modellerstellung insbesondere die Generierung geeigneter parametrisierter Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsbibliotheken.

- **Verfolgung internationaler Trends der Neutronenphysik unregelmäßiger Geometrien**

Neben der Finite-Elemente-Methode existieren eine Reihe weiterer gebräuchlicher und auch modernerer Methoden, die für 3D-Reaktorkernberechnungen innovativer Systeme mit komplexen und unregelmäßigen Geometrien in Frage kommen können, wie unstetige (*discontinuous*) Galerkin-Verfahren für FEM, Lattice-Boltzmann-Verfahren oder sog. gitterfreie Ansätze (*mesh-free methods*). Ziel ist es, diesbezüglich die relevanten internationalen Entwicklungstrends zu verfolgen, um diese ggfs. in Zukunft nutzbar machen zu können.

2 Darstellung des Standes von Wissenschaft und Technik

2.1 Allgemein

Zum Zeitpunkt der Planung dieses Eigenforschungsvorhabens gab es weltweit zahlreiche Aktivitäten zur Modellierung und Simulation von SMRs und MMRs. Beispielhaft genannt seien hier die Publikation *Thermal-hydraulic analysis of a new conceptual heat pipe cooled small nuclear reactor system* /WAN 20/, der LANL-Bericht *Evaluation of M&S (Modeling & Simulation) tools for micro-reactor concepts* /MAT 19/, der ANL-Bericht *Multi-Physics Simulations of Heat Pipe Micro Reactor* /HU 19/, die Publikation *Conceptual Design of the Transformational Challenge Reactor* /BET 22/ oder die Präsentation zur MOOSE-Plattform (Multiphysics Object-Oriented Simulation Environment) mit dem Titel *DireWolf: MOOSE-based Multiphysics Simulator for Megawatt Scale Micro-Reactor* /MAR 19/.

Neben dem in diesem Vorhaben betrachteten Finite-Elemente-Lösungsverfahren der Neutronendiffusions- und Transportgleichung existieren eine Reihe weiterer gebräuchlicher und auch moderner Methoden, die für 3D-Reaktorkernberechnungen innovativer Systeme mit komplexen und unregelmäßigen Geometrien in Frage kommen können. Gebräuchlich sind u. a. die Finite-Volumen-Methode, unstetige (discontinuous) Galerkin-Verfahren für FEM, Lattice-Boltzmann-Verfahren und sog. gitterfreie Ansätze (Mesh-free methods). Auch an Monte-Carlo-Verfahren für zeitabhängige Kernberechnungen – auch in Kopplung mit thermohydraulischen Modellen – wird international zunehmend geforscht, wie etwa in Form des Codes Serpent /LEP 13/, /LEP 15/.

Im Bereich der hochauflösenden gekoppelten transienten Monte-Carlo-Simulationen sind bemerkenswerte Fortschritte erzielt worden. So wird in /FER 20/ von gekoppelten stab- und unterkanalaufgelösten stationären und transienten Simulationen mit Serpent/SUBCHANFLOW berichtet. Demonstriert wird dies am Beispiel des SPERT-III-Reaktors, eines SMR in Form eines DWR mit 40 MW thermischer Leistung. Allerdings sind die Anforderungen an die HPC-Ressourcen, die mit 1000 Prozessoren angegeben werden, beträchtlich. Selbst damit beträgt die Rechenzeit für die Simulation einer 1 Sekunde dauernden Transiente etwa 10 Stunden. Dennoch kann davon ausgegangen werden, dass zumindest langfristig die Monte-Carlo-Methode – u. a. aufgrund ihrer Fähigkeit zur exakten geometrischen Modellierung ohne Diskretisierung oder die Verwendung nuklearer Punktdaten einschließlich Kovarianzdaten anstelle problembezogener

Wirkungsquerschnitte – die deterministischen Verfahren zur 3D-Kernberechnung anwendungsfallbezogen ersetzt werden.

2.2 GRS-interner Stand von Wissenschaft und Technik

Die in diesem Bericht beschriebenen Arbeiten und Ergebnisse bauen auf dem erreichten Stand von Wissenschaft und Technik nach Abschluss des vorangegangenen Eigenforschungsvorhabens RS1576 auf. Wesentliche Resultate von RS1576 sind der Neutronenkinetikcode FENNECS und das dazugehörige Geometrievernetzungswerkzeug PEMTY. Der Entwicklungsstand von FENNECS und PEMTY lässt sich folgendermaßen zusammenfassen:

3D-Neutronenkinetikcode FENNECS – Finite Element NEutroniCS

FENNECS löst die stationäre und die zeitabhängige 3D-Diffusionsgleichung in mehreren Energiegruppen nach der Finite-Elemente-Methode (FEM) mittels eines Galerkin-Weighted-Residual-Ansatzes. Als Finite Elemente dienen Dreiecks-Prismen mit linearen Basisfunktionen. Darin liegt die große geometrische Flexibilität begründet, die für den Einsatz von FENNECS über Reaktorkonzepte mit regelmäßigen Brennelement-Gitteranordnungen hinaus entscheidend ist, also insbesondere für SMR und MMR. Die zeitabhängige Diffusionsgleichung wird dem numerisch unbedingt stabilen voll-impliziten Zeitintegrationsverfahren gelöst. Zur Simulation thermohydraulischer Rückwirkungen ist FENNECS mit dem GRS-Systemcode ATHLET gekoppelt. Hervorzuheben sind darüber hinaus die Entwicklung eines Modells zur Simulation rotierender Steuerstabtrommeln (control drums), wie sie bei MMRs anzutreffen sind, sowie die Implementierung einer vereinfachten Transportnäherung (SP3-Methode) für stationäre Simulationen. Letztere wurde von einer Doktorandin der GRS vorgenommen, die im Juli 2024 an der TU München promoviert wurde.

PEMTY – Python External Meshing Tool with Yaml input

PEMTY ist das Geometrievernetzungswerkzeug, das die für FENNECS benötigte räumliche Diskretisierung in Form von Knoten- und Elementkonnektivitäts-Daten bereitstellt. Im Gegensatz zum in FENNECS integrierten Vernetzungswerkzeug, welches auf regelmäßige Gitterstrukturen (hexagonal oder kartesisch) beschränkt ist, ermöglicht PEMTY die Vernetzung auch komplizierter Geometrien, wie sie insbesondere bei MMR vorzufinden sind. Das modulare Konzept von PEMTY bietet verschiedene Geometrieelemente (u.a. Control Drums) und erlaubt bedarfsgemäße, flexible Erweiterungen. Darüber

hinaus bietet PEMTY einige weitere Funktionalitäten, etwa die Superhomogenisierungs-(SPH-)Methode, kann Wirkungsquerschnitte verarbeiten, die vom Monte-Carlo-Code Serpent generiert wurden oder ermöglicht quantitative Vergleiche von Leistungsverteilungen von FENNECS und Serpent.

Erste Verifikations- und Validierungsarbeiten erfolgten anhand eines Heat Pipe Micro Reactors (HPMR), einer gekoppelten Simulation einer Transiente des natriumgekühlten Konzepts ASTRID mit FENNECS/ATHLET, von Simulationen des China Experimental Fast Reactors (CEFR) und Vergleich mit Messungen und der Berechnung eines WWER-1000 (Anlage Chmelnyzkyj/Ukraine, Block 2).

3 Weitere Entwicklung und Verifikation der SP₃-Transportmethode von FENNECS (Arbeitspaket 1)

Bereits zur Laufzeit des Vorgänger-Eigenforschungsvorhabens wurde ein Prototyp zur Lösung der stationären SP₃-Gleichungen in FENNECS entwickelt. Dieser wurde im vorliegenden Eigenforschungsvorhaben weiterentwickelt und erprobt. Dazu zählten unter anderem auch die Implementierung der zeitabhängigen SP₃-Gleichungen für Transientensimulationen, Anpassungen der Konvergenzbeschleunigungsverfahren von FENNECS an das SP₃-Verfahren oder die Erweiterung zur Lösung der adjungierten SP₃-Gleichungen.

3.1 Implementierung der zeitabhängigen SP₃-Gleichungen für Transientensimulationen

Auch für die Implementierung des transienten SP₃-Lösers wurden, wie für den stationären Fall, zunächst die transienten SP₃-Gleichungen aus der Transportgleichung hergeleitet. Danach wurden die Gleichungen in den Finite-Elemente-Methode-Formalismus umgeschrieben unter Berücksichtigung der Randbedingungen. Anschließend wurden diese in FENNECS implementiert.

3.1.1 Transiente SP₃-Gleichungen

Ausgangspunkt ist die eindimensionale transiente Transportgleichung mit verzögerten Neutronen in Energiegruppendarstellung sowie die Gleichung der Dichte der verzögerten Neutronenvorläufer. Diese lauten wie folgt:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{v_g(x)} \frac{\partial}{\partial t} \Psi_g(x, \mu, t) + \mu \frac{\partial}{\partial x} \Psi_g(x, \mu) + \Sigma_{t,g}(x) \Psi_g(x, \mu) \\ &= \frac{1}{4\pi} \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} \sum_{g'=1}^G \Sigma_{s,g'g}(x, \mu_0) \Psi_{g'}(x, \mu', t) d\omega' d\mu' + S_g(x, \mu, t) \end{aligned} \quad (3.1)$$

$$\begin{aligned}
S_g(x, \mu, t) = & \frac{\chi_{p,g}(x)}{4\pi} \sum_{g'=1}^G \left((1 - \beta_{g'}) \bar{v}_{p,g'}(x) \phi_{0,g'}(x, t) \Sigma_{f,g'}(x) \right) \\
& + \sum_{h=0}^6 \chi_{h,g}(x) \lambda_h R_h(x, t)
\end{aligned} \tag{3.2}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} R_h(x, t) + \lambda_h R_h(x) = \sum_{g'=1}^G \beta_{h,g'} \bar{v}_{g'}(x) \Sigma_{f,g'}(x) \phi_{0,g'}(x, t) \tag{3.3}$$

Wie in /SEU 22/ gezeigt wurde, werden die Terme der drei Gleichungen, die vom Winkel μ abhängig sind, nach Legendre-Polynomen entwickelt. Durch Umformungen, ähnlich zu /SEU 22/, ergibt sich die transiente P_N -Gleichung:

$$\begin{aligned}
\sum_{m=0}^M \left(\frac{m+1}{2m+1} \frac{\partial}{\partial x} \phi_{m+1,g}(x, t) + \frac{m}{2m+1} \frac{\partial}{\partial x} \phi_{m-1,g}(x, t) \right. \\
+ \frac{1}{v_g(x)} \frac{\partial}{\partial t} \phi_{m,g}(x, t) \\
+ \frac{1}{v_g(x)} \frac{\partial}{\partial t} \phi_{m,g}(x, t) \left(\Sigma_{t,g}(x) - \Sigma_{s,m,gg}(x) \right. \\
\left. \left. + \frac{1}{v_{g'}} \right) \right) = \sum_{m=0}^M \tilde{\Sigma}_{m,g}(x, t), \forall m \in N
\end{aligned} \tag{3.4}$$

$$\begin{aligned}
\tilde{\Sigma}_{m,g}(x, t) = & \sum_{g'=1, g' \neq g}^G \Sigma_{s,m,g'g}(x) \phi_{m,g'}(x, t) \\
& + \chi_{p,g}(x) \sum_{g'=1}^G \left((1 \right. \\
& \left. - \beta_{g'}) \bar{v}_{p,g'}(x) \phi_{0,g'}(x, t) \Sigma_{f,g'}(x) \right) \\
& + \sum_{h=0}^6 \chi_{h,g}(x) \lambda_h R_h(x, t)
\end{aligned} \tag{3.5}$$

Daraus lassen sich die P₃-Gleichungen herleiten, indem man $m = 0, 1, 2, 3$ einsetzt. Dabei wird zusätzlich angenommen, dass anisotrope Streuung nur innerhalb einer Energiegruppe, nicht aber zwischen verschiedenen Energiegruppen stattfindet. Diese ist eine bereits von Brentley und Larsen in /BRA 00/ als in der Mehrgruppen-Diffusionstheorie gerechtfertigte übliche Annahme. Somit lautet das Gleichungssystem wie folgt:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v_g(x)} \frac{\partial}{\partial t} \phi_{0,g}(x, t) + \frac{\partial \phi_{1,g}(x, t)}{\partial x} \\ + \phi_{0,g}(x, t) \left(\Sigma_{t,g}(x) - \Sigma_{s,0,gg}(x) \right) = \tilde{S}_{0,g}(x, t) \end{aligned} \quad (3.6)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{v_g(x)} \frac{\partial}{\partial t} \phi_{1,g}(x, t) + \frac{2}{3} \frac{\partial \phi_{2,g}(x, t)}{\partial x} + \frac{1}{3} \frac{\partial \phi_{0,g}(x, t)}{\partial x} \\ + \phi_{1,g}(x, t) \left(\Sigma_{t,g}(x) - \Sigma_{s,1,gg}(x) \right) = 0 \end{aligned} \quad (3.7)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{v_g(x)} \frac{\partial}{\partial t} \phi_{2,g}(x, t) + \frac{3}{5} \frac{\partial \phi_{3,g}(x, t)}{\partial x} + \frac{2}{5} \frac{\partial \phi_{1,g}(x, t)}{\partial x} \\ + \phi_{2,g}(x, t) \left(\Sigma_{t,g}(x) - \Sigma_{s,1,gg}(x) \right) = 0 \end{aligned} \quad (3.8)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{v_g(x)} \frac{\partial}{\partial t} \phi_{3,g}(x, t) + \frac{3}{7} \frac{\partial \phi_{2,g}(x, t)}{\partial x} \\ + \phi_{3,g}(x, t) \left(\Sigma_{t,g}(x) - \Sigma_{s,1,gg}(x) \right) = 0 \end{aligned} \quad (3.9)$$

$$\begin{aligned} \tilde{S}_{0,g}(x, t) = \sum_{g'=1, g' \neq g}^G \Sigma_{s,0,g'g}(x) \phi_{0,g'}(x, t) \\ + \chi_{p,g}(x) \sum_{g'=1}^G \left((1 \right. \\ \left. - \beta_{g'}) \bar{v}_{p,g'}(x) \phi_{0,g'}(x, t) \Sigma_{f,g'}(x) \right) \\ + \sum_{h=0}^6 \chi_{h,g}(x) \lambda_h R_h(x, t) \end{aligned} \quad (3.10)$$

Wie bei den stationären SP₃-Gleichungen lauten die zwei Diffusionskoeffizienten:

$$D_{0,g}(x) = \frac{1}{3 \left(\Sigma_{t,g}(x) - \Sigma_{s,1,gg}(x) \right)} \quad (3.11)$$

$$D_{1,g}(x) = \frac{3}{7 \left(\Sigma_{t,g}(x) - \Sigma_{s,3,gg}(x) \right)} \quad (3.12)$$

Ein Ausdruck für die ungeraden Flüsse bekommt man durch Umformungen der zweiten und vierten Gleichung, also Gl. (3.7) und (3.9):

$$\phi_{1,g}(x, t) = -D_{0,g}(x) \frac{3}{v_g(x)} \frac{\partial}{\partial t} \phi_{1,g}(x, t) - D_{0,g}(x) \frac{\partial}{\partial x} F_{0,g}(x, t) \quad (3.13)$$

$$\phi_{3,g}(x, t) = -D_{1,g}(x) \frac{7}{3v_g(x)} \frac{\partial}{\partial t} \phi_{3,g}(x, t) - D_{1,g}(x) \frac{\partial}{\partial x} F_{1,g}(x, t) \quad (3.14)$$

Hier sind $F_{0,g}$ und $F_{1,g}$ wie in /SEU 22/ definiert (siehe auch /BAB 20/). Durch Einsetzen dieser Ausdrücke in die erste und dritte Gleichung, also Gl. (3.6) und (3.8), und durch weitere Umformungen ergibt sich die die P₃-Näherung:

$$\begin{aligned} & \frac{3}{v_g(x)} \frac{\partial}{\partial t} F_{0,g}(x, t) - \frac{2}{v_g(x)} \frac{\partial}{\partial t} F_{1,g}(x, t) \\ & - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{0,g}(x) \frac{\partial}{\partial x} F_{0,g}(x, t) \right) \\ & + F_{0,g}(x, t) \left(\Sigma_{t,g}(x) - \Sigma_{s,0,gg}(x) \right) \\ & - 2F_{1,g}(x, t) \left(\Sigma_{t,g}(x) - \Sigma_{s,0,gg}(x) \right) = \tilde{S}_{0,g}(x, t) \end{aligned} \quad (3.15)$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{2}{3} \frac{1}{v_g(x)} \frac{\partial}{\partial t} F_{0,g}(x, t) + \frac{3}{v_g(x)} \frac{\partial}{\partial t} F_{1,g}(x, t) \\
& - \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{1,g}(x) \frac{\partial}{\partial x} F_{0,g}(x, t) \right) \\
& - \frac{2}{3} F_{0,g}(x, t) \left(\Sigma_{t,g}(x) - \Sigma_{s,0,gg}(x) \right) \\
& + \frac{1}{3} F_{1,g}(x, t) \left(4 \left(\Sigma_{t,g}(x) - \Sigma_{s,0,gg}(x) \right) \right. \\
& \left. + 5 \left(\Sigma_{t,g}(x) - \Sigma_{s,2,gg}(x) \right) \right) = -\frac{2}{3} \tilde{S}_{0,g}(x, t)
\end{aligned} \tag{3.16}$$

mit den folgenden Ausdrücken für $\tilde{S}_{0,g}(x, t)$ und $R_h(x, t)$:

$$\begin{aligned}
\tilde{S}_{0,g}(x, t) = & \sum_{g'=1, g' \neq g}^G \Sigma_{s,0,g'g}(x) \left(F_{0,g'}(x, t) - 2F_{1,g'}(x, t) \right) \\
& + \chi_{p,g}(x) \sum_{g'=1}^G \left((1 \right. \\
& \left. - \beta_{g'}) \bar{v}_{p,g'}(x) \Sigma_{f,g'}(x) \left(F_{0,g'}(x, t) - 2F_{1,g'}(x, t) \right) \right) \\
& + \sum_{h=0}^6 \chi_{h,g}(x) \lambda_h R_h(x, t)
\end{aligned} \tag{3.17}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} R_h(x, t) + \lambda_h R_h(x) \\
& = \sum_{g'=1}^G \beta_{h,g'} \bar{v}_{g'}(x) \Sigma_{f,g'}(x) \left(F_{0,g'}(x, t) \right. \\
& \left. - 2F_{1,g'}(x, t) \right)
\end{aligned} \tag{3.18}$$

Aus diesen eindimensionalen SP_3 -Gleichungen lassen sich die entsprechenden Gleichungen in drei Raumdimensionen herleiten. Dafür wird die zweite Ableitung durch den Laplace-Operator und die Raumkoordinate x durch den Ortsvektor $\vec{r}$ ersetzt. Somit bekommt man die folgenden dreidimensionalen SP_3 -Gleichungen:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{1}{v_g^e} \frac{\partial}{\partial t} - D_{0,g}^e \Delta + (\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,0,gg}^e) \right) F_{0,g}(\vec{r}, t) - 2 \left(\frac{1}{v_g^e} \frac{\partial}{\partial t} + \right. \\ & \left. (\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,0,gg}^e) \right) F_{1,g}(\vec{r}, t) = \tilde{S}_{0,g}(\vec{r}, t), \forall \vec{r} \in e \end{aligned} \quad (3.19)$$

$$\begin{aligned} & - \frac{2}{3} \left(\frac{1}{v_g^e} \frac{\partial}{\partial t} + (\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,0,gg}^e) \right) F_{0,g}(\vec{r}, t) + \left(-D_{1,g}^e \Delta + \frac{3}{v_g^e} \frac{\partial}{\partial t} + \right. \\ & \left. \frac{1}{3} (4(\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,0,gg}^e) + 5(\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,2,gg}^e)) \right) F_{1,g}(\vec{r}, t) = \\ & - \frac{2}{3} \tilde{S}_{0,g}(\vec{r}, t), \forall \vec{r} \in e \end{aligned} \quad (3.20)$$

$$\begin{aligned} \tilde{S}_{0,g}(\vec{r}, t) = & \sum_{g'=1, g' \neq g}^G \Sigma_{s,0,g'g}^e (F_{0,g'}(\vec{r}, t) - 2F_{1,g'}(\vec{r}, t)) \\ & + \chi_{p,g}^e \sum_{g'=1}^G \left((1 - \beta_{g'}) \bar{v}_{f,g'}^e \Sigma_{f,g'}^e (F_{0,g'}(\vec{r}, t) \right. \\ & \left. - 2F_{1,g'}(\vec{r}, t)) \right) + \sum_{h=0}^6 \chi_{h,g}^e \lambda_h R_h(\vec{r}, t), \forall \vec{r} \in e \end{aligned} \quad (3.21)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} R_h(\vec{r}, t) + \lambda_h R_h(\vec{r}, t) = & \sum_{g'=1}^G \beta_{h,g'} \bar{v}_{g'}^e \Sigma_{f,g'}^e (F_{0,g'}(\vec{r}, t) - \\ & 2F_{1,g'}(\vec{r}, t)), \forall \vec{r} \in e \end{aligned} \quad (3.22)$$

Zur numerischen Lösung ist neben der Raumdiskretisierung eine Zeitdiskretisierung notwendig. Dazu werden die Gleichungen über einen Zeitschritt $\Delta t = t_{\tau+1} - t_{\tau}$ integriert. Die Zeitableitungen (Differentialquotienten) der Flüsse durch Differenzenquotienten approximiert:

$$\frac{\partial}{\partial t} F_{n,g}(\vec{r}, t) = \frac{F_{n,g}^{\tau+1}(\vec{r}) - F_{n,g}^{\tau}(\vec{r})}{\Delta t} \quad (3.23)$$

Wie bereits bei der Lösung der zeitabhängigen Diffusionsgleichungen wird auch bei den zeitabhängigen SP₃-Gleichungen das voll-implizite Zeitdiskretisierungsverfahren angewandt, welches den Vorteil der unbedingten numerischen Stabilität bietet. Dazu werden die Integrale über einen Zeitschritt den jeweiligen Integranden am Ende des Integrationsintervalls, multipliziert mit dem Zeitschritt Δt , approximiert:

$$\int_{\tau}^{\tau+1} F_{n,g}(\vec{r}, t) dt = \Delta t F_{n,g}^{\tau+1}(\vec{r}) \quad (3.24)$$

Somit lassen sich die zeitdiskretisierten SP₃-Gleichungen folgendermaßen schreiben:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{1}{v_g^e \Delta t} - D_{0,g}^e \Delta + (\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,0,gg}^e) \right) F_{0,g}^{\tau+1}(\vec{r}) + \frac{1}{v_g^e \Delta t} F_{0,g}^{\tau}(\vec{r}) - \\ & 2 \left(\frac{1}{v_g^e \Delta t} + (\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,0,gg}^e) \right) F_{1,g}^{\tau+1}(\vec{r}) + \frac{2}{v_g^e \Delta t} F_{1,g}^{\tau}(\vec{r}) = \tilde{S}_{0,g}^{\tau+1}(\vec{r}), \forall \vec{r} \in e \end{aligned} \quad (3.25)$$

$$\begin{aligned} & -\frac{2}{3} \left(\frac{1}{v_g^e \Delta t} + (\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,0,gg}^e) \right) F_{0,g}^{\tau+1}(\vec{r}) + \frac{2}{3v_g^e \Delta t} F_{0,g}^{\tau}(\vec{r}) + \\ & \frac{1}{3} \left(-3D_{1,g}^e \Delta - \frac{9}{v_g^e \Delta t} + 4(\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,0,gg}^e) + 5(\Sigma_{t,g}^e - \right. \\ & \left. \Sigma_{s,2,gg}^e) \right) F_{1,g}^{\tau+1}(\vec{r}) - \frac{3}{v_g^e \Delta t} F_{1,g}^{\tau}(\vec{r}) = -\frac{2}{3} \tilde{S}_{0,g}^{\tau+1}(\vec{r}), \forall \vec{r} \in e \end{aligned} \quad (3.26)$$

$$\begin{aligned} \tilde{S}_{0,g}^{\tau+1}(\vec{r}) = & \sum_{g'=1, g' \neq g}^G \Sigma_{s,0,g'g}^e \left(F_{0,g'}^{\tau+1}(\vec{r}) - 2F_{1,g'}^{\tau+1}(\vec{r}) \right) \\ & + \chi_{p,g}^e \sum_{g'=1}^G \left((1 - \beta_{g'}) \bar{v}_{f,g'}^e \Sigma_{f,g'}^e \left(F_{0,g'}^{\tau+1}(\vec{r}) \right. \right. \\ & \left. \left. - 2F_{1,g'}^{\tau+1}(\vec{r}) \right) \right) + \sum_{h=0}^6 \chi_{h,g}^e \lambda_h R_h^{\tau+1}(\vec{r}), \forall \vec{r} \in e \end{aligned} \quad (3.27)$$

$$R_h^{\tau+1}(\vec{r}) = \frac{1}{1+\lambda_h \Delta t} R_h^{\tau}(\vec{r}) + \frac{\Delta t}{1+\lambda_h \Delta t} \sum_{g'=1}^G \beta_{h,g'} \bar{v}_{g'}^e \Sigma_{f,g'}^e \left(F_{0,g'}^{\tau+1}(\vec{r}) - 2F_{1,g'}^{\tau+1}(\vec{r}) \right), \forall \vec{r} \in e \quad (3.28)$$

Zu Beginn der Transiente, also bei $t = 0$, ergibt sich die räumliche Verteilung der verzögerten Neutronenvorläufer zu

$$R_h^{\tau=0}(\vec{r}) = \frac{1}{\lambda_h} \sum_{g'=1}^G \beta_{h,g'} \bar{v}_{g'}^e \Sigma_{f,g'}^e \left(F_{0,g'}^{\tau=0}(\vec{r}) - 2F_{1,g'}^{\tau=0}(\vec{r}) \right), \forall \vec{r} \in e \quad (3.29)$$

Anhand von diesem Ausdruck kann die Dichte der verzögerten Neutronenvorläufer im nächsten Zeitschritt iterativ ausgerechnet werden.

3.1.2 Galerkin-Darstellung der transienten SP₃-Gleichungen

Für die Implementierung der transienten SP₃-Methode in FENNECS war es notwendig, die hergeleiteten Gleichungen in den FEM-Formalismus zu bringen. Hierfür werden, wie in /SEU 20/ und /SEU 22/ beschrieben, die Gleichungen mit den Testfunktionen $\varphi^T(\vec{r}) = (\varphi_1(\vec{r}), \dots, \varphi_6(\vec{r}))^T$ multipliziert. Im Anschluss wird über das Finite Element integriert, also über Γ^e . Dann wird mit Hilfe des Satzes von Gauß partiell integriert, welcher einen Term mit einem Oberflächenintegral über den Rand des Problemgebiets $\partial\Gamma^e$ liefert, über das die Randbedingungen vom Neumann-Typ eingehen:

$$\begin{aligned} D_{k,g}^e \int_{\Gamma^e} \vec{\varphi}(\vec{r}) \Delta F_{k,g}^{\tau+1}(\vec{r}) dV^e &= -D_{k,g}^e \int_{\Gamma^e} \nabla \vec{\varphi}(\vec{r}) \nabla F_{k,g}^{\tau+1}(\vec{r}) dV^e \\ &+ D_{k,g}^e \int_{\partial\Gamma^e} \vec{\varphi}(\vec{r}) \nabla F_{k,g}^{\tau+1}(\vec{r}) dA^e \end{aligned} \quad (3.30)$$

Der letzte Term ist das Oberflächenintegral, über das die Randbedingungen eingehen. Auch hier wird mit $\partial\Gamma^e$ der Rand des Finiten Elements e bezeichnet. Dieses hat immer 5 Flächen, da in FENNECS die Geometrie mit Dreiecksprismen diskretisiert wird. Wie

bei der Diffusionsnäherung sind auch bei der SP₃-Methode folgende vier Arten von Randbedingungen möglich:

- Innenfläche-Randbedingung,
- Vakuum-Randbedingung,
- Reflektierende Randbedingung und
- Null-Fluss-Randbedingung.

Die Randbedingung lassen sich, analog zur Diffusionsnäherung, in folgender Form angeben:

$$D_{k,g}^e \nabla F_{k,g}^{\tau+1}(\vec{r}) = -\frac{1}{\gamma_k(\vec{r})} [\beta_k(\vec{r}) F_{k,g}^{\tau+1}(\vec{r}) + \alpha_k(\vec{r}) F_{k,g}^{\tau+1}(\vec{r})] \quad (3.31)$$

Für jeden der vier Fälle haben die Faktoren γ_k , β_k und α_k die in Tab. 3.1 angegebenen Werte.

Tab. 3.1 Werte von $\frac{1}{\gamma_h^e}$, $\beta_{0,h}^e$, $\beta_{1,h}^e$, $\alpha_{0,h}^e$ und $\alpha_{1,h}^e$ je nach Randbedingung.

Näheres siehe Text.

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

Werden Terme $F_{k,g}(\vec{r})$ nach den Testfunktionen entwickelt, lauten die Gleichungen folgendermaßen:

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{v_g^e \Delta t} \vec{f}_{0,g}^{e,\tau} \int_{\Gamma^e} \vec{\varphi}(\vec{r}) \vec{\varphi}^T(\vec{r}) dV^e \\
& + \vec{f}_{0,g}^{e,\tau+1} \int_{\Gamma^e} \left[\left(\frac{1}{v_g^e \Delta t} \right. \right. \\
& + \left. \left. (\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,0,gg}^e) \right) \vec{\varphi}(\vec{r}) \vec{\varphi}^T(\vec{r}) \right. \\
& + \left. D_{0,g}^e \nabla \vec{\varphi}(\vec{r}) \nabla \vec{\varphi}^T(\vec{r}) \right] dV^e \\
& + \sum_{\eta=1}^5 \frac{1}{\gamma_0^{e,\eta}} \left(\vec{f}_{0,g}^{e,\tau+1} \beta_0^{e,\eta} \int_{\partial \Gamma^e} \vec{\varphi}(\vec{r}) \vec{\varphi}^T(\vec{r}) dA^{e,\eta} \right. \\
& + \left. \vec{f}_{1,g}^{e,\tau+1} \alpha_0^{e,\eta} \int_{\partial \Gamma^e} \vec{\varphi}(\vec{r}) \vec{\varphi}^T(\vec{r}) dA^{e,\eta} \right) \\
& + \frac{2}{v_g^e \Delta t} \vec{f}_{1,g}^{e,\tau} \int_{\Gamma^e} \vec{\varphi}(\vec{r}) \vec{\varphi}^T(\vec{r}) dV^e \\
& - 2 \left(\frac{1}{v_g^e \Delta t} \right. \\
& + \left. (\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,0,gg}^e) \right) \vec{f}_{1,g}^{e,\tau+1} \int_{\Gamma^e} \vec{\varphi}(\vec{r}) \vec{\varphi}^T(\vec{r}) dV^e \\
& = \int_{\Gamma^e} \tilde{S}_{0,g}^{\tau+1}(\vec{r}) \vec{\varphi}^T(\vec{r}) dV^e, \forall \vec{r} \in e
\end{aligned} \tag{3.32}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{2}{3v_g^e \Delta t} \vec{f}_{0,g}^{e,\tau} \int_{\Gamma^e} \vec{\varphi}(\vec{r}) \vec{\varphi}^T(\vec{r}) dV^e \\
& - \frac{2}{3} \vec{f}_{0,g}^{e,\tau+1} \int_{\Gamma^e} \left(\frac{1}{v_g^e \Delta t} \right. \\
& \left. + (\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,0,gg}^e) \right) \vec{\varphi}(\vec{r}) \vec{\varphi}^T(\vec{r}) dV^e \\
& - \frac{3}{v_g^e \Delta t} \vec{f}_{1,g}^{e,\tau} \int_{\Gamma^e} \vec{\varphi}(\vec{r}) \vec{\varphi}^T(\vec{r}) dV^e \\
& + \vec{f}_{1,g}^{e,\tau+1} \int_{\Gamma^e} \left[\frac{1}{3} \left(\frac{9}{v_g^e \Delta t} + \frac{4}{3} (\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,0,gg}^e) \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{5}{3} (\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,2,gg}^e) \right) \vec{\varphi}(\vec{r}) \vec{\varphi}^T(\vec{r}) \right. \\
& \left. + D_{1,g}^e \nabla \vec{\varphi}(\vec{r}) \nabla \vec{\varphi}^T(\vec{r}) \right] dV^e \\
& + \sum_{\eta=1}^5 \frac{1}{\gamma_1^{e,\eta}} \left(\vec{f}_{0,g}^{e,\tau+1} \beta_1^{e,\eta} \int_{\partial \Gamma^e} \vec{\varphi}(\vec{r}) \vec{\varphi}^T(\vec{r}) dA^{e,\eta} \right. \\
& \left. + \vec{f}_{1,g}^{e,\tau+1} \alpha_1^{e,\eta} \int_{\partial \Gamma^e} \vec{\varphi}(\vec{r}) \vec{\varphi}^T(\vec{r}) dA^{e,\eta} \right) \\
& = -\frac{2}{3} \int_{\Gamma^e} \tilde{S}_{0,g}^{\tau+1}(\vec{r}) \vec{\varphi}^T(\vec{r}) dV^e, \forall \vec{r} \in e
\end{aligned} \tag{3.33}$$

$$\begin{aligned}
& \int_{\Gamma^e} \tilde{S}_{0,g}^{\tau+1}(\vec{r}) \vec{\varphi}(\vec{r}) dV^e \\
&= \sum_{g'=1, g' \neq g}^G \Sigma_{s,0,g'g}^e (\vec{f}_{0,g}^{e,\tau+1} \\
&\quad - 2\vec{f}_{1,g}^{e,\tau+1}) \int_{\Gamma^e} \vec{\varphi}(\vec{r}) \vec{\varphi}^T(\vec{r}) dV^e \\
&\quad + \chi_{p,g}^e \sum_{g'=1}^G \left((1 - \beta_{g'}) \bar{v}_{f,g'}^e \Sigma_{f,g'}^e (\vec{f}_{0,g}^{e,\tau+1} \right. \\
&\quad \left. - 2\vec{f}_{1,g}^{e,\tau+1}) \right) \int_{\Gamma^e} \vec{\varphi}(\vec{r}) \vec{\varphi}^T(\vec{r}) dV^e \\
&\quad + \sum_{h=0}^6 \chi_{h,g}^e \lambda_h \int_{\Gamma^e} R_h^{\tau+1}(\vec{r}) \vec{\varphi}(\vec{r}) dV^e, \forall \vec{r} \in e
\end{aligned} \tag{3.34}$$

Das Gleiche wird für die Dichte der verzögerten Neutronenvorläufer und für dessen zeitliche Randbedingung gemacht:

$$\begin{aligned}
& \int_{\Gamma^e} R_h^{\tau+1}(\vec{r}) \vec{\varphi}(\vec{r}) dV^e = \frac{1}{1+\lambda_h \Delta t} \int_{\Gamma^e} R_h^{\tau}(\vec{r}) \vec{\varphi}(\vec{r}) dV^e + \\
& \frac{\Delta t}{1+\lambda_h \Delta t} \sum_{g'=1}^G \beta_{h,g'} \bar{v}_{g'}^e \Sigma_{f,g'}^e (\vec{f}_{0,g}^{e,\tau+1} - 2\vec{f}_{1,g}^{e,\tau+1}) \int_{\Gamma^e} \vec{\varphi}(\vec{r}) \vec{\varphi}^T(\vec{r}) dV^e, \\
& \forall \vec{r} \in e
\end{aligned} \tag{3.35}$$

$$\begin{aligned}
& \int_{\Gamma^e} R_h^{\tau+1}(\vec{r}) \vec{\varphi}(\vec{r}) dV^e = \frac{\Delta t}{1+\lambda_h \Delta t} \sum_{g'=1}^G \beta_{h,g'} \bar{v}_{g'}^e \Sigma_{f,g'}^e (\vec{f}_{0,g}^{e,\tau+1} - \\
& 2\vec{f}_{1,g}^{e,\tau+1}) \int_{\Gamma^e} \vec{\varphi}(\vec{r}) \vec{\varphi}^T(\vec{r}) dV^e, \forall \vec{r} \in e
\end{aligned} \tag{3.36}$$

3.1.3 Implementierung der transienten SP₃-Methode in FENNECS

Analog zur stationären SP₃-Methode führen die nach Galerkin diskretisierten transienten SP₃-Gleichungen auf folgende lineare Gleichungssysteme:

$$A_{k,g}^e \vec{f}_{k,g}^{e,\tau+1} = \vec{b}_{k,g}^{e,\tau+1} + T_{k,g}^e, k = (0, 1) \tag{3.37}$$

$$\begin{aligned}
& \left[D_{0,g}^e B^e + \left(\frac{1}{v_g^e \Delta t} + (\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,0,gg}^e) \right) C^e \right. \\
& \quad \left. - \left(- \sum_{\eta=1}^5 \frac{\beta_0^{e,\eta}}{\gamma_0^{e,\eta}} \right) H^e \right] \vec{f}_{0,g}^{e,\tau+1} \\
& = \sum_{g'=1, g' \neq g}^G \Sigma_{s,0,g'g}^e (\vec{f}_{0,g}^{e,\tau+1} - 2\vec{f}_{1,g}^{e,\tau+1}) C^e \\
& \quad + \chi_{p,g}^e \sum_{g'=1}^G \left((1 - \beta_{g'}) \bar{v}_{f,g'}^e \Sigma_{f,g'}^e (\vec{f}_{0,g}^{e,\tau+1} \right. \\
& \quad \left. - 2\vec{f}_{1,g}^{e,\tau+1}) \right) C^e \\
& \quad + \sum_{h=0}^6 \left[\frac{\lambda_h \chi_{h,g}^e}{1 + \lambda_h \Delta t} \int_{\Gamma^e} R_h^{\tau}(\vec{r}) \vec{\varphi}(\vec{r}) dV^e \right. \\
& \quad + \frac{\Delta t}{1 + \lambda_h \Delta t} \sum_{g'=1}^G \beta_{h,g'} \bar{v}_{g'}^e \Sigma_{f,g'}^e (\vec{f}_{0,g}^{e,\tau+1} \\
& \quad \left. - 2\vec{f}_{1,g}^{e,\tau+1}) C^e \right] + \frac{1}{v_g^e \Delta t} \vec{f}_{0,g}^{e,\tau} C^e - \frac{2}{v_g^e \Delta t} \vec{f}_{1,g}^{e,\tau} C^e \\
& \quad + 2 \left(\frac{1}{v_g^e \Delta t} + (\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,0,gg}^e) \right) \vec{f}_{1,g}^{e,\tau+1} C^e \\
& \quad + \left(- \sum_{\eta=1}^5 \frac{\alpha_0^{e,\eta}}{\gamma_0^{e,\eta}} \right) H^e, \forall \vec{r} \in e
\end{aligned} \tag{3.38}$$

$$\begin{aligned}
& \left[D_{1,g}^e B^e + \left(\frac{3}{v_g^e \Delta t} \right. \right. \\
& \quad \left. \left. + \frac{1}{3} \left(4(\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,0,gg}^e) + 5(\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,2,gg}^e) \right) \right) C^e \right. \\
& \quad \left. - \left(- \sum_{\eta=1}^5 \frac{\alpha_1^{e,\eta}}{\gamma_1^{e,\eta}} \right) H^e \right] \vec{f}_{1,g}^{e,\tau+1} \\
& = \frac{2}{3} \left\{ \sum_{g'=1, g' \neq g}^G \Sigma_{s,0,g'g}^e (\vec{f}_{0,g}^{e,\tau+1} - 2\vec{f}_{1,g}^{e,\tau+1}) C^e \right. \\
& \quad + \chi_{p,g}^e \sum_{g'=1}^G \left((1 - \beta_{g'}) \bar{v}_{f,g'}^e \Sigma_{f,g'}^e (\vec{f}_{0,g}^{e,\tau+1} \right. \\
& \quad \left. - 2\vec{f}_{1,g}^{e,\tau+1}) \right) C^e \\
& \quad + \sum_{h=0}^6 \left[\frac{\lambda_h \chi_{h,g}^e}{1 + \lambda_h \Delta t} \int_{\Gamma^e} R_h^T(\vec{r}) \vec{\varphi}(\vec{r}) dV^e \right. \\
& \quad + \frac{\Delta t}{1 + \lambda_h \Delta t} \sum_{g'=1}^G \beta_{h,g'} \bar{v}_{g'}^e \Sigma_{f,g'}^e (\vec{f}_{0,g}^{e,\tau+1} \\
& \quad \left. - 2\vec{f}_{1,g}^{e,\tau+1}) C^e \right] \left. \right\} + \frac{2}{3 v_g^e \Delta t} \vec{f}_{0,g}^{e,\tau} C^e \\
& \quad + \left[- \frac{2}{3} \left(\frac{1}{v_g^e \Delta t} + (\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,0,gg}^e) \right) \right. \\
& \quad \left. + \left(- \sum_{\eta=1}^5 \frac{\beta_1^{e,\eta}}{\gamma_1^{e,\eta}} \right) \right] C^e \vec{f}_{0,g}^{e,\tau+1} + \frac{3}{v_g^e \Delta t} \vec{f}_{1,g}^{e,\tau} C^e, \forall \vec{r} \\
& \in e
\end{aligned} \tag{3.39}$$

Tab. 3.2 gibt die Ausdrücke für die in Gl. (3.37) verwendeten Größen an.

Tab. 3.2 Terme für die erste und die zweite Gleichung in Matrix-Vektor-Notation

Terme	k=0	k=1
$A_{k,g}^e$	$D_{0,g}^e B^e + \left(\frac{1}{v_g^e \Delta t} + (\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,0,gg}^e) \right) C^e$ $- \left(- \sum_{\eta=1}^5 \frac{\beta_0^{e,\eta}}{\gamma_0^{e,\eta}} \right) H^e$	$D_{1,g}^e B^e + \left(\frac{3}{v_g^e \Delta t} \right.$ $+ \frac{1}{3} (4(\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,0,gg}^e)$ $+ 5(\Sigma_{t,g}^e$ $- \Sigma_{s,2,gg}^e)) \left. \right) C^e$ $- \left(- \sum_{\eta=1}^5 \frac{\alpha_1^{e,\eta}}{\gamma_1^{e,\eta}} \right) H^e$
$\vec{f}_{k,g}^{e,\tau+1}$	$\vec{f}_{0,g}^{e,\tau+1}$	$\vec{f}_{1,g}^{e,\tau+1}$
$\vec{b}_{k,g}^{e,\tau+1}$	$\sum_{g'=1, g' \neq g}^G \Sigma_{s,0,g'g}^e (\vec{f}_{0,g}^{e,\tau+1} - 2\vec{f}_{1,g}^{e,\tau+1}) C^e$ $+ \chi_{p,g}^e \sum_{g'=1}^G \left((1 - \beta_{g'}) \bar{v}_{f,g'}^e \Sigma_{f,g'}^e (\vec{f}_{0,g}^{e,\tau+1} \right.$ $- 2\vec{f}_{1,g}^{e,\tau+1}) \left. \right) C^e$ $+ \sum_{h=0}^6 \left[\frac{\lambda_h \chi_{h,g}^e}{1 + \lambda_h \Delta t} \int_{\Gamma^e} R_h^T(\vec{r}) \vec{\varphi}(\vec{r}) dV^e \right.$ $+ \frac{\Delta t}{1 + \lambda_h \Delta t} \sum_{g'=1}^G \beta_{h,g'} \bar{v}_{g',\Sigma_{f,g'}}^e (\vec{f}_{0,g}^{e,\tau+1}$ $- 2\vec{f}_{1,g}^{e,\tau+1}) C^e \left. \right]$	$\frac{2}{3} \left\{ \sum_{g'=1, g' \neq g}^G \Sigma_{s,0,g'g}^e (\vec{f}_{0,g}^{e,\tau+1} \right.$ $- 2\vec{f}_{1,g}^{e,\tau+1}) C^e$ $+ \chi_{p,g}^e \sum_{g'=1}^G \left((1 - \beta_{g'}) \bar{v}_{f,g'}^e \Sigma_{f,g'}^e (\vec{f}_{0,g}^{e,\tau+1} \right.$ $- 2\vec{f}_{1,g}^{e,\tau+1}) \left. \right) C^e$ $+ \sum_{h=0}^6 \left[\frac{\lambda_h \chi_{h,g}^e}{1 + \lambda_h \Delta t} \int_{\Gamma^e} R_h^T(\vec{r}) \vec{\varphi}(\vec{r}) dV^e \right.$ $+ \frac{\Delta t}{1 + \lambda_h \Delta t} \sum_{g'=1}^G \beta_{h,g'} \bar{v}_{g',\Sigma_{f,g'}}^e (\vec{f}_{0,g}^{e,\tau+1}$ $- 2\vec{f}_{1,g}^{e,\tau+1}) C^e \left. \right\}$
$T_{k,g}^e$	$\frac{1}{v_g^e \Delta t} \vec{f}_{0,g}^{e,\tau} C^e - \frac{2}{v_g^e \Delta t} \vec{f}_{1,g}^{e,\tau} C^e$ $+ 2 \left(\frac{1}{v_g^e \Delta t} \right.$ $+ (\Sigma_{t,g}^e$ $- \Sigma_{s,0,gg}^e) \left. \right) \vec{f}_{1,g}^{e,\tau+1} C^e$ $+ \left(- \sum_{\eta=1}^5 \frac{\alpha_0^{e,\eta}}{\gamma_0^{e,\eta}} \right) H^e$	$\frac{2}{3 v_g^e \Delta t} \vec{f}_{0,g}^{e,\tau} C^e$ $+ \left[- \frac{2}{3} \left(\frac{1}{v_g^e \Delta t} + (\Sigma_{t,g}^e - \Sigma_{s,0,gg}^e) \right) \right.$ $+ \left(- \sum_{\eta=1}^5 \frac{\beta_1^{e,\eta}}{\gamma_1^{e,\eta}} \right) \left. \right] C^e \vec{f}_{0,g}^{e,\tau+1}$ $+ \frac{3}{v_g^e \Delta t} \vec{f}_{1,g}^{e,\tau} C^e$

3.2 Weiterentwicklung des stationären SP₃-Lösers

Im Rahmen der Implementierung der transienten SP₃-Methode wurde das Iterationsverfahren verbessert. Davon profitierte auch das Verfahren zur Lösung der stationären SP₃-Methode.

Im bisherigen Algorithmus wurden zunächst die linke und die rechte Seite der beiden SP₃-Gleichungen für alle Energiegruppen aufgestellt. Dann wurden beide Gleichungen energiegruppenweise nach $\vec{f}_{0,g}^e$ und $\vec{f}_{1,g}^e$ aufgelöst. Im Anschluss wurden diese Terme gespeichert und daraus der skalare Fluss bestimmt. Dabei wurden eventuelle negative Werte zu Null gesetzt. Dieser Prozess wurde bis zur Spaltquellenkonvergenz wiederholt.

Durch die neue Version vom Algorithmus konnte sowohl das Konvergenzverhalten als auch die Rechenzeit verbessert werden. Der weiterentwickelte Algorithmus sieht jetzt folgendermaßen aus: Wie zuvor, werden die Linke und die rechte Seite der beiden Gleichungen aufgestellt. Im Anschluss werden die folgenden Terme jedoch in der Reihenfolge bestimmt:

1. $\vec{f}_{0,g}^e$
2. $\vec{b}_{0,g}^e$ und $\vec{b}_{1,g}^e$
3. $T_{0,g}^e$ und $T_{1,g}^e$
4. $\vec{f}_{1,g}^e$
5. $\vec{b}_{0,g}^e$ und $\vec{b}_{1,g}^e$
6. $T_{0,g}^e$ und $T_{1,g}^e$

Dann werden $\vec{f}_{0,g}^e$ und $\vec{f}_{1,g}^e$ gespeichert und daraus der skalare Fluss ermittelt. Auch hier werden etwaige negative Werte zu Null gesetzt. Das und die davor erfolgten sechs Rechenschritte werden für alle Energiegruppen wiederholt. Die Ursache für die Rechenzeiteinsparung liegt daran, dass die Lösung der einen SP₃-Gleichung von der während der Iteration sich verbessernden Größen der jeweils anderen SP₃-Gleichung $\vec{f}_{0,g}^e$ und $\vec{f}_{1,g}^e$ profitiert. Das wirkt sich zudem positiv auf das Konvergenzverhalten aus und beseitigt die genannten Konvergenzprobleme.

3.3 Anpassung der Konvergenzbeschleunigungsverfahren von FENNECS an den SP₃-Löser

Von den Konvergenzbeschleunigungsverfahren ist besonders die inverse Vektoriteration nach Wielandt von Anpassungsbedarf infolge der SP₃-Methode betroffen. Diese ist ursprünglich auf die Diffusionsnäherung ausgelegt und arbeitet daher zunächst nicht zusammen mit der SP₃-Methode. Daher mussten geeignete Anpassungsarbeiten durchgeführt werden, da die Eigenwertverschiebung jetzt simultan auf die beide SP₃-Gleichungen anzuwenden ist. Hierdurch konvergiert das Wielandt-Verfahren, allerdings nicht exakt zum korrekten Eigenwert. Bis zum Zeitpunkt der Berichterstellung konnte die Ursache nicht eindeutig identifiziert werden. Das Problem wird künftig weiter untersucht.

3.4 Erweiterung zur Lösung der adjungierten SP_3 -Gleichungen

Gegenstand dieser Arbeiten waren notwendige Weiterentwicklungen von FENNECS zur Lösung der adjungierten SP_3 -Gleichungen. Eingehende Untersuchungen ergaben, dass die Erweiterungen in Verbindung mit dem SP_3 -Löser sich auf die Transponierung der Streumatrizen höherer Legendre-Ordnungen der Streuwirkungsquerschnitte beschränkten. Dies wurde in FENNECS erfolgreich durchgeführt und getestet und bildet eine wichtige Vorarbeit für die in anschließenden Vorhaben geplante Berechnung punktkinetischer Parameter wie der Reaktivität.

3.5 Überprüfung anhand von Testfällen

Um die Implementierung insbesondere der zeitabhängigen SP_3 -Methode zu testen, wurden Vergleiche mit der Diffusionsnäherung von FENNECS gemacht. Hierfür wurden die mit HELIOS generierten Wirkungsquerschnitte des OECD-NEA-Benchmarks C5G7 /SMI 03/ verwendet, die im Rahmen von /LOM 22/ berechnet wurden.

Für den Zweck der Verifikation wurde das UO_2 -Brennelement genutzt. Dieses 50 cm hoch und wird in FENNECS mit einer axialen Diskretisierung von 5 cm dargestellt. Das Modell enthält nur ein einziges Brennelement dieser Art. Dieses ist radial von Leichtwasser als Moderator umgeben, an dessen Außenrand dann Vakuum-Randbedingungen definiert werden. Axial werden ebenfalls Vakuum-Randbedingungen genutzt. Abb. 3.1 zeigt Materialverteilung und Diskretisierung des Modells; darin entspricht die rote Fläche dem Moderator, die blaue den UO_2 -Brennstäben und die hellblaue den Positionen der Steuerstäbe.

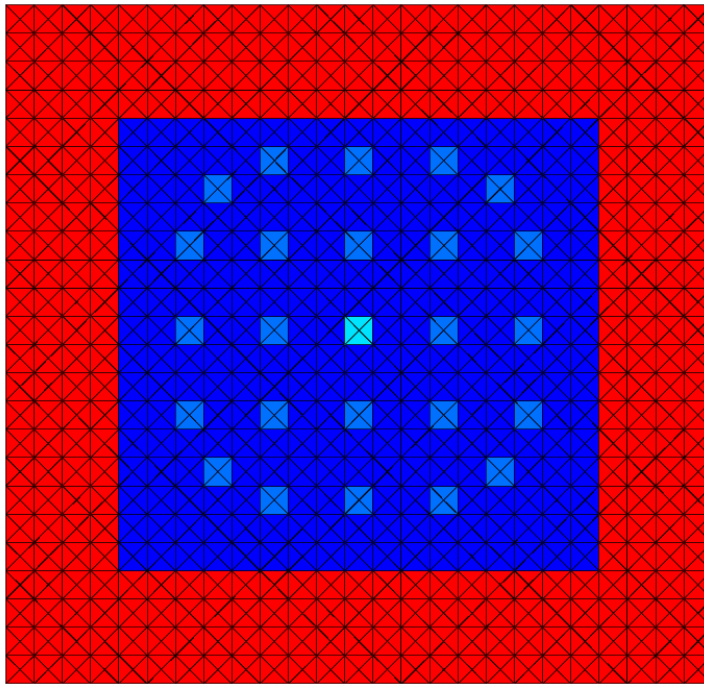


Abb. 3.1 Modell mit C5G7-UO₂-Brennelement zur Verifikation der transienten SP₃-Methode

Mit diesem Modell wurde die folgende Transiente simuliert: Zu Beginn ($t = 0$ s) befinden sich die Steuerstäbe 5 cm von oben in den Kern eingefahren. Zwischen $t = 1$ s und $t = 4$ s werden diese um weitere 5 cm eingefahren. Der in Abb. 3.2 dargestellte Leistungsverlauf, der mit dem SP₃-Solver gerechnet wurde, zeigt eine gute Übereinstimmung mit demjenigen, der mit dem Diffusionslöser gerechnet wurde. Das demonstriert die Funktionalität der neu implementierten zeitabhängigen SP₃-Methode in FENNECS. Gewisse Unterschiede sind in der Kurve zu erkennen, wobei davon auszugehen ist, dass der SP₃-Löser gegenüber der Diffusionsnäherung grundsätzlich die akkuratere Rechenmethode ist.

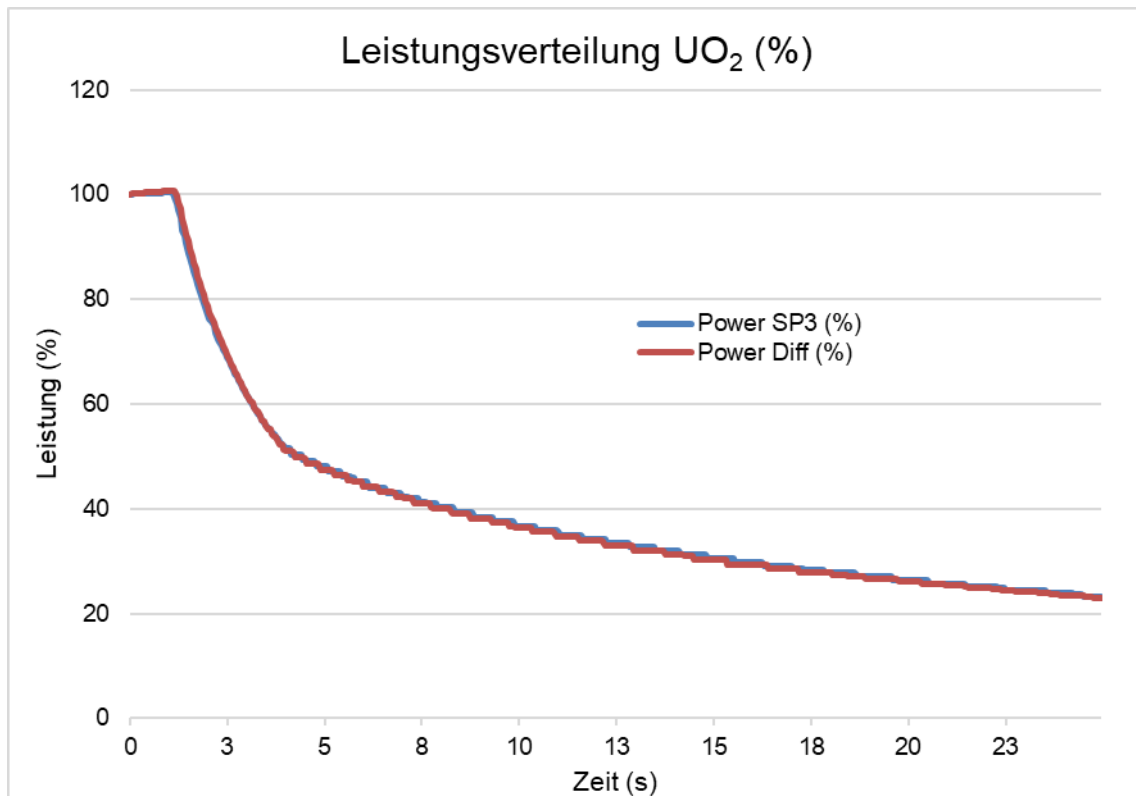


Abb. 3.2 Leistungsverlauf, während der C5G7-Transiente, ermittelt mit der SP_3 -Methode und der Diffusionsnäherung

4 Konvergenzbeschleunigungsverfahren in FENNECS (Arbeitspaket 2)

Das Streben nach größerer Aussagegenauigkeit bei gleichzeitigen Forderungen nach höherer räumlicher, zeitlicher und energetischer Auflösung hat hohen Rechenaufwand zur Folge. Bei der Neutronentransportgleichung handelt es sich um eine hochdimensionale Integro-Differentialgleichung, die auch in der Diffusionsnäherung beträchtliche Anforderungen an die Rechenkapazität stellen kann, insbesondere bei mehreren Energiegruppen, Aufwärtsstreuung und größerer räumlicher Auflösung. Auch ungünstig konditionierte Koeffizientenmatrizen der für jede Energiegruppe zu lösenden linearen Gleichungssysteme können zu schlechtem Konvergenzverhalten führen. Erstrebenswert sind daher einerseits numerische Verfahren, die die Konvergenz beschleunigen, und andererseits Ansätze, um die Dimensionalität des Problems zu reduzieren, sog. Modellreduktionsansätze. Diese Themen sind Gegenstand dieses Kapitels. Dabei war es das Ziel dieses Arbeitspaketes, die über den Rahmen des Vorgängervorhabens RS1576 hinaus in FENNECS implementierten Konvergenzbeschleunigungsverfahren bezüglich ihrer Effizienz zu bewerten und daraus Weiterentwicklungs- und Optimierungsbedarf abzuleiten. Darüber hinaus sollen zusätzliche Konvergenzbeschleunigungsverfahren identifiziert und in FENNECS implementiert und getestet werden. Kap. 4.2 widmet sich den Modellreduktionsansätzen, speziell der *Proper Generalized Decomposition (PGD)*.

4.1 Optimierung existierender und Entwicklung neuer Konvergenzbeschleunigungsverfahren

4.1.1 Inverse Vektoriteration nach Wielandt

4.1.1.1 Standardverfahren

Die inverse Vektoriteration nach Wielandt führt zu einer Verringerung des Dominanzverhältnisses und somit zu weniger äußeren Iterationen als bei der Potenzmethode.

Bei der inversen Vektoriteration nach Wielandt wird der Anteil $s_g^W(\vec{r})$ der Spaltquelle zum gegenüber k_{eff} verschobenen Eigenwert $k_s = k_{eff} + \Delta k$ mit $\Delta k > 0$ von beiden Seiten der Diffusionsgleichung subtrahiert. Die Galerkin-Darstellung des verschobenen Eigenwertproblems lautet somit:

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} d^3r [D_g(\vec{r}) \vec{\nabla} \Phi_i(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla} f_g(\vec{r}) + \sigma_g^{tot}(\vec{r}) f_g(\vec{r}) \Phi_i(\vec{r}) - \Phi_i(\vec{r}) s_g^W(\vec{r})] \\
& = \\
& = \int_{\Omega} d^3r s_g(\vec{r}) \Phi_i(\vec{r}) + \oint_{\partial\Omega} d^2r D_g(\vec{r}) \Phi_i(\vec{r}) g_n \\
& - \int_{\Omega} d^3r s_g^W(\vec{r}) \Phi_i(\vec{r})
\end{aligned} \tag{4.1}$$

Darin ist

$$s_g^W(\vec{r}) = \frac{\chi_g}{k_s} \sum_{g'} v \sigma_{g'}^{fiss}(\vec{r}) f_{g'}(\vec{r}) \tag{4.2}$$

der Anteil der Spaltquelle zum gegenüber k_{eff} verschobenen Eigenwert k_s . Bei Gleichung (4.1) handelt es sich also um ein Eigenwertproblem für den verschobenen Eigenwert $\frac{1}{k_{eff}} - \frac{1}{k_s}$. Bezeichnet $k^{(2)}$ den nächsthöheren gegenüber dem fundamentalen Eigenwert k_{eff} , so liegt durch die Eigenwertverschiebung nach Wielandt $k^{(2)}$ weniger nahe bei k_{eff} als beim nicht verschobenen Eigenwertproblem, was zu geringerem Dominanzverhältnis und damit zu schnellerer Konvergenz des äußeren Iterationsverfahrens führt.

$$\frac{k_s^{(2)}}{k_s} = \frac{\left(\frac{1}{k^{(2)}} - \frac{1}{k_s} \right)^{-1}}{\left(\frac{1}{k_{eff}} - \frac{1}{k_s} \right)^{-1}} = \frac{\frac{1}{k_{eff}} - \frac{1}{k_s}}{\frac{1}{k^{(2)}} - \frac{1}{k_s}} \tag{4.3}$$

Mit zunehmender Annäherung von k_s an k_{eff} , also mit geringer werdender Eigenwertverschiebung, wird der Zähler von Gl. (4.3) kleiner, strebt also gegen null. Die inverse Vektoriteration bewirkt also eine größere Trennung von k_{eff} und $k^{(2)}$ und erklärt damit das bessere Konvergenzverhalten des verschobenen Eigenwertproblems. Die Implementierung des Wielandt-Verfahrens in FENNECS führt zu deutlich

verringerten Anzahlen von äußeren Iterationen, insbesondere bei Reaktorkonfigurationen mit thermischem Neutronenspektrum, die durch zwei Energiegruppen dargestellt werden können (siehe auch Tab. 4.2 in Abschnitt 4.1.2).

4.1.1.2 Wielandt-Verfahren mit lokaler Eigenwertverschiebung

Bei dem im vorigen Abschnitt beschriebenen Verfahren nach Wielandt handelt es sich um das Standardverfahren der inversen Vektoriteration mit global konstantem verschobenem Eigenwert k_s . Darüber hinaus gibt es Versuche, das Verfahren dadurch weiter zu optimieren, dass der verschobene Eigenwert räumlich variieren kann, d. h. dass $k_s = k_s(\vec{r})$. Aus mathematischer Sicht handelt es sich dadurch strenggenommen nicht mehr um ein Eigenwertproblem, denn Eigenwerte sind konstante und nicht ortsabhängige Größen. Jedoch haben Arbeiten der vergangenen Jahre gezeigt, dass durch räumlich abhängige Eigenwertverschiebungen die Effizienz des Wielandt-Verfahrens gesteigert werden kann [YEE 17]. Dabei wird von lokalen Eigenwerten Gebrauch gemacht, die sich aus der Lösung des lokalen Eigenwertproblems an jedem räumlichen Punkt – im Beispiel von FENNECS an jedem finiten Element – mit spaltbarem Material gewonnen werden. Die Randbedingungen werden dabei so gewählt, dass jeweils ein in den drei Raumdimensionen unendlich ausgedehntes, homogenes Problem gelöst wird. Im Verfahren nach Wielandt tritt an die Stelle des globalen verschobenen Eigenwerts k_s der lokale verschobene Eigenwert $k_s(\vec{r})$. Dieser errechnet sich aus der Lösung des folgenden lokalen Eigenwertproblems:

$$\begin{aligned} \sigma_g^{tot}(\vec{r})\phi_g^\infty(\vec{r}) - \sum_{g'} \sigma_{g'}^{scatt}(\vec{r})\phi_{g'}^\infty(\vec{r}) \\ = \frac{1}{k^\infty(\vec{r})} \chi_g(\vec{r}) \sum_{g'} \nu \sigma_{g'}^{fiss}(\vec{r})\phi_{g'}^\infty(\vec{r}) \end{aligned} \quad (4.4)$$

Bei n_g Energiegruppen lässt sich Gl. (4.4) wie folgt in Matrix-Vektor-Notation schreiben:

$$\begin{aligned}
& \left(\sigma^{tot}(\vec{r}) - \sigma^{scatt}(\vec{r}) \right) \cdot \overrightarrow{\phi^\infty}(\vec{r}) \\
& = \frac{1}{k^\infty(\vec{r})} \vec{\chi}(\vec{r}) \cdot \left(\overrightarrow{v\sigma^{fiss}}(\vec{r}) \right)^T \cdot \overrightarrow{\phi^\infty}(\vec{r})
\end{aligned} \tag{4.5}$$

Darin ist $\sigma^{tot}(\vec{r})$ die Diagonalmatrix mit den totalen Wirkungsquerschnitten der n_g Energiegruppen, $\sigma^{scatt}(\vec{r})$ die Streumatrix, $\overrightarrow{\phi^\infty}(\vec{r})$ der Spaltenvektor der Neutronenflüsse der n_g Energiegruppen, $\vec{\chi}(\vec{r})$ der Spaltenvektor des Gruppen-Spaltsspektrums und $\left(\overrightarrow{v\sigma^{fiss}}(\vec{r}) \right)^T$ der Zeilenvektor der gruppenweisen Spalt-Produktions-Wirkungsquerschnitte. Gl. (4.5) lässt sich mittels Matrixinversion nach $\frac{1}{k^\infty(\vec{r})}$ auflösen:

$$k^\infty(\vec{r}) = \left(\overrightarrow{v\sigma^{fiss}}(\vec{r}) \right)^T \cdot \left(\sigma^{tot}(\vec{r}) - \sigma^{scatt}(\vec{r}) \right)^{-1} \cdot \vec{\chi}(\vec{r}) \tag{4.6}$$

Aus Gl. (4.4), (4.5) und (4.6) ist ersichtlich, dass ein von Null verschiedener lokal verschobener Eigenwert nur an Orten mit spaltbarem Material existiert; an allen anderen Orten ist $k^\infty(\vec{r}) = 0$:

$$k_s(\vec{r}) = \begin{cases} k^\infty(\vec{r}) & \text{für Orte } \vec{r} \text{ mit spaltbarem Material} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \tag{4.7}$$

Das Wielandt-Verfahren mit lokaler Eigenwertverschiebung wurde an drei verschiedenen Reaktorkonfigurationen, die jeweiligen Benchmark-Spezifikationen entnommen sind, getestet. Der erste Fall (LMW) ist ein kleiner DWR-Reaktorkern mit zwei Energiegruppen /LAN 77/, der zweite Fall (BEAVRS) der Kern eines 4-Loop-Westinghouse-DWR /HOR 18/ und der dritte Fall (Takeda-4) ein kleiner natriumgekühlter Reaktorkern /TAK 91/. Letzterer ist durch Wirkungsquerschnitte in 4 Energiegruppen spezifiziert, die anderen beiden Fälle durch Zwei-Gruppen-Daten.

Alle drei Fälle wurden mit der Potenzmethode sowie dem Wielandt-Verfahren mit globalem und lokalen Eigenwertverschiebungen gerechnet. Die Ergebnisse sind in Tab. 4.1 zusammengefasst. Für die DWR-Fälle in zwei Energiegruppen liefert das Wielandt-Verfahren erheblich besseres Konvergenzverhalten mit um bis zu 78 % weniger äußeren Iterationen. Die lokale Eigenwertverschiebung verringert demgegenüber die Zahl der äußeren Iterationen um weitere 9 % bis 16 %. Der dritte Fall (Takeda-4) profitiert hingegen nicht von der inversen Vektoriteration.

Tab. 4.1 Konvergenzverhalten des Wielandt-Verfahrens mit globaler und lokaler Eigenwertverschiebung

Angegeben sind die prozentualen Einsparungen an Iterationen gegenüber der Potenzmethode bzw. gegenüber der globalen Eigenwertverschiebung (zweite Prozentangabe in Zeile vier).

	LMW	BEAVRS	Takeda-4
Potenzmethode (Vektoriteration)	149	212	18
Wielandt mit globaler Verschiebung	32 (–78 %)	112 (–47 %)	20 (+11 %)
Wielandt mit lokaler Verschiebung	27 (–32 % bzw. –16 %)	102 (–52 % bzw. –9 %)	21 (+17 % bzw. +5 %)

4.1.2 Graue Approximation

Die im Folgenden beschriebene sogenannte „Graue Approximation“ (engl. *grey approximation*) ist ein Beispiel für einen einfachen Mehrgitteransatz bezüglich der Energie. Im Allgemeinen erfordern Reaktoren ohne thermisches Spektrum, wie z. B. flüssigmetallgekühlte Konzepte, die Berücksichtigung von mehr als zwei Energiegruppen. Typischerweise sind Weniggruppen-Darstellungen mit etwa 10 bis 20 Gruppen notwendig. Mit zunehmender Anzahl an Energiegruppen steigt auch der Rechenaufwand, nicht nur aufgrund der Bemühungen, die Transportgleichung innerhalb der Gruppen für zusätzliche Energiegruppen zu lösen, sondern auch aufgrund der verschiedenen Streuprozesse zwischen unterschiedlichen Energiegruppen, insbesondere Aufwärtsstreuprozesse. Daher ist es wünschenswert, den Rechenaufwand durch geeignete numerische Methoden zu begrenzen. In der Literatur hat sich der sogenannte Graue-Diffusions-Ansatz als nützlich erwiesen, um Weniggruppenprobleme zu beschleunigen. Die Grundidee besteht darin, die Neutronendaten der Weniggruppen-Darstellung – d. h. makroskopische Wirkungsquerschnitte, Diffusionskoeffizienten usw. – nach einer geringen Anzahl anfäng-

licher konventioneller Weniggruppen-Iterationen auf nur eine – die sogenannte Graue-Gruppe – zu reduzieren (zu „kondensieren“) und das resultierende Graue-Problem im gesamten dreidimensionalen Raum zu lösen.

Die Kondensierung von G Gruppen auf eine (graue) Gruppe ist wie folgt definiert:

$$\sigma_0 = \frac{1}{\phi_0} \sum_{g=1}^G \sigma_g \phi_g \quad (4.8)$$

Darin ist G die Anzahl der Energiegruppen des Weniggruppenproblems, 0 ist der Index der grauen Gruppe, ϕ_g und σ_g der Neutronenfluss bzw. makroskopische Wirkungsquerschnitt der Gruppe g und $\phi_0 = \sum_{g=1}^G \phi_g$ der kondensierte graue Neutronenfluss. Unter Verwendung der Informationen über die räumliche Weniggruppen-Flussverteilung, die durch einige wenige erste Iterationen des Weniggruppenproblems erhalten wurden, ϕ_g^{init} , der Grauen-Flussverteilungen nach den ersten Iterationen, ϕ_0^{init} , und des konvergierten Grauen Problems, ϕ_0^{new} , kann eine geeignete Schätzung ϕ_g^{new} für die tatsächliche Weniggruppen-Flussverteilung wie folgt erhalten werden:

$$\frac{\phi_g^{new}}{\phi_g^{init}} = \frac{\phi_0^{new}}{\phi_0^{init}} \Leftrightarrow \phi_g^{new} = \frac{\phi_0^{new}}{\phi_0^{init}} \phi_g^{init} \quad (4.9)$$

Dies kann die Konvergenz des Weniggruppen-Flusslösers infolge des geringeren Rechenaufwands beschleunigen.

Der Ansatz der grauen Diffusion wurde am Beispiel des Kerns des europäischen natriumgekühlten schnellen Reaktors (European Sodium-cooled Fast Reactor, ESFR) /MIK 17/ (siehe Abb. 4.1) getestet, für den makroskopische Wirkungsquerschnitte in 10 Energiegruppen mit dem Monte-Carlo-Code Serpent /LEP 25/ generiert wurden. Insgesamt wurden sechs verschiedene stationäre Simulationen mit FENNECS durchgeführt (siehe Tab. 4.2). Die erste Simulation dient als Referenzfall und verwendet weder den Grauen-Ansatz noch die Wielandt-verschobene Potenziteration. Die vierte Spalte von Tab. 4.2 dokumentiert die maximale Leistungsdichte jedes Falls als einfaches Maß für die Genauigkeit. Der Graue-Ansatz (Fall 2) mit nur drei anfänglichen Weniggruppeniterationen reduziert die endgültige Anzahl der Weniggruppeniterationen von 158 auf

129. Die Verwendung der Wielandt- statt der Potenziteration (Fall 3) reduziert die Gesamtzahl der Iterationen geringfügig. Die Kombination des Grauen-Ansatzes mit der Wielandt-verschobenen Potenziteration (Fälle 4 bis 6) reduziert die Anzahl der endgültigen Weniggruppeniterationen weiter auf 21, wenn die adaptive PARCS-Eigenwertverschiebung /DOW 02/

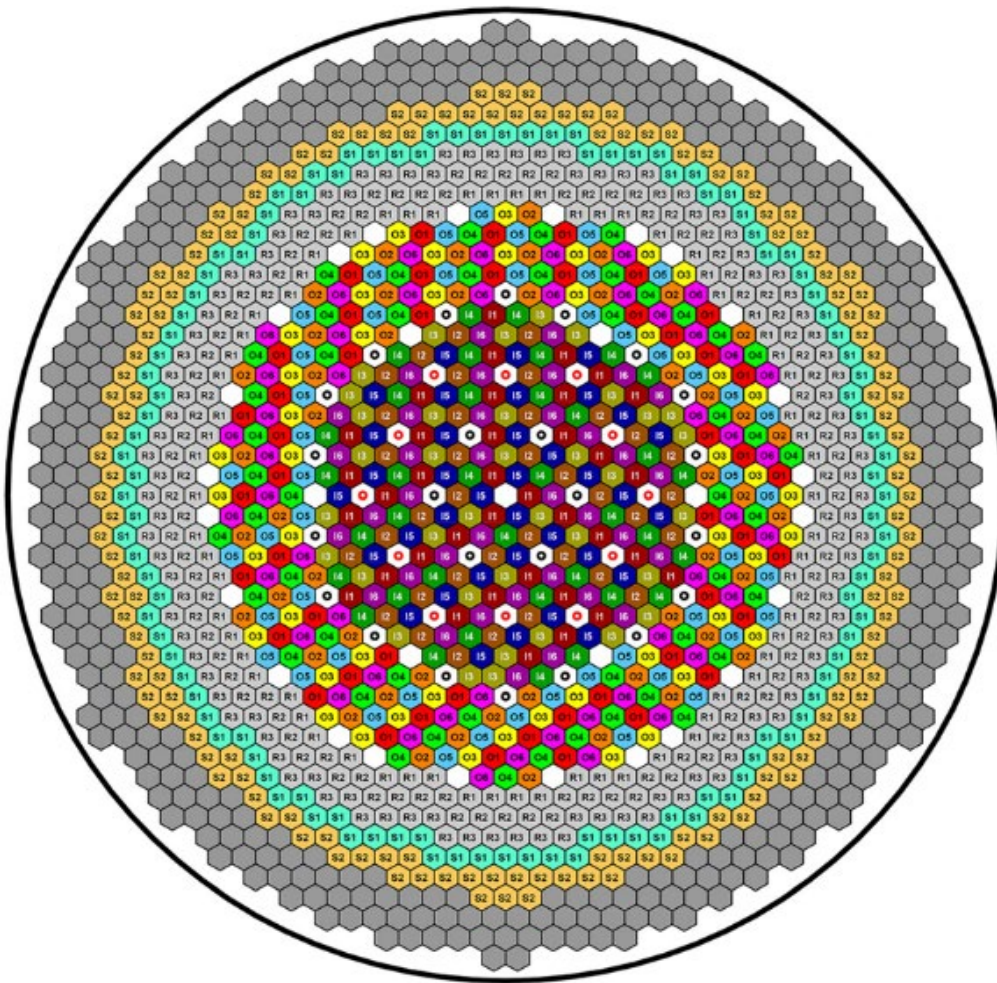
$$\Delta k_n^{PARCS} = \max\left(k_n - 10 \cdot |k_n - k_{n-1}| - 0.025, \frac{1}{3}\right) \quad (4.10)$$

berücksichtigt wird, wobei n den Index der äußeren Iteration bezeichnet.

Tab. 4.2 Graue Approximation am Beispiel des ESFR-Reaktorkerns

Fall	Grau	Wielandt-Verfahren	Max. Leistungsdichte (W/cm ³) und Abweichung von Referenz	Weniggruppeniterationen zu Beginn	Graue Iterationen	Weniggruppeniterationen am Ende
1 (ref.)	Nein	Nein	309.057 -	0	0	158
2	Ja	Nein	309.097 0.01%	3	84	129
3	Nein	Ja	309.303 0.08%	0	0	141
4	Ja	Ja	308.964 -0.03%	10	51	96
5	Ja	Ja	308.972 -0.03%	15	51	94
6	Ja	Ja (PARCS-Verschiebung)	309.214 0.05%	15	27	21

Abb. 4.2 zeigt die relativen Abweichungen der axial integrierten Leistungsverteilung der Baugruppe, ermittelt mit der Grauwertmethode für Fall 6 – vor Beginn der letzten Iterationen mit wenigen Gruppen – im Vergleich zur Referenz (Fall 1). Wie ersichtlich, beträgt die maximale Abweichung etwa 5 %, d. h. die Grauwertlösung liegt bereits relativ nahe am tatsächlichen Ergebnis der Iterationen mit wenigen Gruppen.



	Inner fuel	6 batches×36 = 216
	Outer fuel	6 batches×48 = 288
	CSD / DSD	24 / 12
	1 st / 2 nd / 3 rd reflector ring	66 / 96 / 102
	Spent Inner / Outer fuel storage	3 batches×36 = 108
	Spent Inner / Outer fuel storage	3 batches×48 = 144
	Corium discharge tubes	31

Abb. 4.1 Kernanordnung des ESFR (Resultat des EU-Projekts ESFR-SMART /MIK 17/)

und der etwa doppelte Rechenaufwand infolge zweier simultan zu lösender Gleichungssysteme), auf ein niedriger dimensionales Modell, ohne dabei nennenswerte Genauigkeitseinbußen in den Ergebnisgrößen hinnehmen zu müssen.

4.2.1 Evaluation moderner Trends im Bereich Reduced Order Modeling (ROM)

Gängige Verfahren zur Modellordnungsreduktion lassen sich grob in fünf Klassen gliedern:

- Methoden der orthogonalen Zerlegung (engl. Proper Orthogonal Decomposition, POD).
- Methoden mit reduzierter Basis (Reduced basis methods).
- Ausgleichsmethoden (Balancing methods).
- Vereinfachte Physik oder operationelle Reduktionsmethoden.
- Methoden zur Reduktion nichtlinearer und Mannigfaltigkeitsmodelle.

Die Proper Orthogonal Decomposition /HAR 24/, die Methode der reduzierten Basis /BOY 10/ sowie Balancing-Verfahren fallen in die Kategorie der sogenannten projektionsbasierten Reduktion. Die projektionsbasierte Reduktion beruht auf der Projektion entweder der Modellgleichungen oder der Lösung auf eine Basis, deren Dimension im Vergleich zur ursprünglichen Modelldimension bzw. zum ursprünglichen Lösungsraum reduziert ist. Ein verbreitetes Verfahren, das in diese Klasse fällt, ist die sogenannte *Proper Generalized Decomposition (PGD)* /CHI 11a/. Daneben existieren noch weitere Methoden, die der Kategorie der projektionsbasierten Reduktion zuzuordnen sind, wie etwa Matrix-Interpolation, Transfer-Function-Interpolation, stückweise tangentielle Interpolation, Loewner-Verfahren oder Krylov-Unterraum-Methoden.

4.2.2 Implementierung eines ausgewählten ROM

Die Modellreduktion nach der Proper Generalized Decomposition (PGD) /CHI 11a/, /CHI 11b/, /CHI 14/ gehört zur Klasse der projektionsbasierten Separationsansätze und ist eine iterative numerische Methode zur Lösung von Randwertproblemen, d. h. von partiellen Differentialgleichungen, denen Randbedingungen aufgeprägt sind, wie etwa die Poisson-Gleichung, die Laplace-Gleichung oder auch die Diffusionsgleichung.

Separationsansätze werden häufig zur Lösung partieller Differentialgleichungen herangezogen, indem die gesuchte Funktion mehrerer unabhängiger Variablen als Produkt von Funktionen dargestellt wird, die jeweils nur von einer Variablen abhängen. Dadurch wird die ursprüngliche partielle Differentialgleichung auf einfachere gewöhnliche Differentialgleichungen reduziert, die durch Diskretisierungsansätze in lineare Gleichungssysteme überführt und dadurch numerisch gelöst werden können.

Das PGD-Verfahren berechnet eine Näherung der Lösung des Randwertproblems durch sukzessive Anreicherung (engl. enrichment). Das bedeutet, dass in jeder Iteration ein neuer Term (auch neue Mode genannt) berechnet und der Näherung hinzugefügt wird. Dabei gilt, dass die exakte Lösung des Randwertproblems umso besser approximiert wird, je mehr Modi ermittelt werden. Man spricht von Anreicherung und nicht von Verbesserung der Lösung, da durch eine einzelne neu hinzukommende Mode die PGD-Lösung sich auch verschlechtern kann. Im Gegensatz zu den Hauptmoden der POD-Methode sind die PGD-Modi nicht notwendigerweise orthogonal zueinander. Durch die Auswahl der relevantesten PGD-Moden erhält man ein reduziertes Modell der Lösung; das PGD-Verfahren ist also eine Methode zur Reduktion der Dimension. Die folgenden Ausführungen zeigen das PGD-Verfahren am Beispiel der Diffusionsnäherung der Neutronentransportgleichung bis hin zu wichtigen Schritten für die numerische Lösung.

Die schwache Formulierung der Diffusionsgleichung in einer Energiegruppe lautet:

$$\begin{aligned} \int d^2r \left(D \vec{\nabla} u^*(x, y) \cdot \vec{\nabla} u(x, y) + \sigma^{tot} u^*(x, y) u(x, y) \right) \\ = \int d^2r s(x, y) u^*(x, y) \end{aligned} \quad (4.11)$$

Darin ist $u(x, y)$ die PGD-Entwicklung des Neutronenflusses:

$$u(x, y) = \sum_{i=1}^n F^i(x) G^i(y) + R(x) S(y) \quad (4.12)$$

mit bereits bekannten Funktionen $F^i(x)$ und $G^i(y)$, $i = 1, \dots, n$, und noch zu bestimmen den Funktionen $R(x)$ und $S(y)$. Außerdem gilt:

$$u^*(x, y) = R^*(x)S^*(y) \quad (4.13)$$

Der Übersichtlichkeit halber wird hier und im Folgenden der Energiegruppenindex g weggelassen. Zudem wird davon ausgegangen, dass die Diffusionskonstante D , der totale Wirkungsquerschnitt σ^{tot} und Quellterm $s(x, y)$ jeweils in separierter Darstellung vorliegen.

$$D(x, y) = \sum_{k=1}^{n_D} D_x^k(x) D_y^k(y)$$

$$\sigma^{tot}(x, y) = \sum_{k=1}^{n_\sigma} \sigma_{tx}^k(x) \sigma_{ty}^k(y) \quad (4.14)$$

$$s(x, y) = \sum_{k=1}^{n_s} s_x^k(x) s_y^k(y)$$

Darin sind n_D , n_σ und n_s die Anzahlen der jeweiligen Terme der Entwicklungen von D , σ^{tot} und s . Liegen diese Größen nicht in separierter Darstellung vor, können mittels Singulärwertzerlegung separierte Darstellungen errechnet werden. Näheres hierzu an anderer Stelle weiter unten. Einsetzen von Gl. (4.12) in Gl. (4.11) liefert:

$$\begin{aligned}
& \int d^2r D \vec{\nabla} u^* \cdot \vec{\nabla} (R(x) S(y)) \\
& + \int d^2r u^* \sigma^{tot} R(x) S(y) \\
& = \int d^2r u^* \sigma^{tot} s(x, y) \\
& - \sum_{i=1}^n \int d^2r D \vec{\nabla} u^* \cdot \vec{\nabla} (F^i(x) G^i(y)) \\
& - \sum_{i=1}^n \int d^2r u^* \sigma^{tot} F^i(x) G^i(y)
\end{aligned} \tag{4.15}$$

Gl. (4.15) enthält fünf verschiedene Integrale, die nachfolgend der Reihe nach mit I_1 bis I_5 bezeichnet und nach Einsetzen von Gl. (4.13) berechnet werden können. Zunächst wird Integral I_1 ausgewertet:

$$\begin{aligned}
I_1 &:= \int d^2r D \vec{\nabla} u^* \cdot \vec{\nabla} (R(x) S(y)) \\
&= \int dx \int dy D \left(S^* \frac{\partial R^*}{\partial x} \quad R^* \frac{\partial S^*}{\partial y} \right) \cdot \begin{pmatrix} S \frac{\partial R}{\partial x} \\ \frac{\partial S}{\partial y} \\ R \frac{\partial S}{\partial y} \end{pmatrix} \\
&= \int dx \int dy D \left(S^* S \frac{\partial R^*}{\partial x} \frac{\partial R}{\partial x} + R^* R \frac{\partial S^*}{\partial y} \frac{\partial S}{\partial y} \right)
\end{aligned} \tag{4.16}$$

Durch Einsetzen der separierten Darstellung Gl. (4.14) der Diffusionskonstante gelingt es, zweidimensionale Integrale in ein Produkt aus zwei eindimensionalen Integralen zu schreiben:

$$\begin{aligned}
I_1 = \sum_k \left(\int dx D_x^k \frac{\partial R^*}{\partial x} \frac{\partial R}{\partial x} \int dy D_y^k S^* S \right. \\
\left. + \int dx D_x^k R^* R \int dy D_y^k \frac{\partial S^*}{\partial y} \frac{\partial S}{\partial y} \right)
\end{aligned} \tag{4.17}$$

Zur numerischen Auswertung der Terme in Gl. (4.17) müssen die darin auftretenden Funktionen und deren Ableitungen diskretisiert werden. Dazu wird ein eindimensionaler Finite-Elemente-Ansatz verwendet:

$$R(x) = \sum_j N(x) R_j = {}^t \vec{N} \cdot \vec{R} \tag{4.18}$$

Darin sind $N(x)$ die linearen Basisfunktionen und R_j die diskreten Werte der gesuchten Funktion $R(x)$. In Gl. (4.18) wird die Summe als Skalarprodukt aus Zeilenvektor ${}^t \vec{N}$ und Spaltenvektor $\vec{R}$ ausgedrückt; mit dieser Schreibweise gelingt im Folgenden die Formulierung des PGD-Verfahrens in übersichtlicherer Matrixnotation. Für $S(y)$ lautet der Diskretisierungsansatz analog:

$$S(y) = \sum_j M(y) S_j = {}^t \vec{M} \cdot \vec{S} \tag{4.19}$$

Mittels Gl. (4.18) und Gl. (4.19) lassen sich folgende, immer wieder in dieser oder ähnlicher Form auftretende Integrale berechnen:

$$\begin{aligned}
\int dx \frac{\partial R^*}{\partial x} \frac{\partial R}{\partial x} &= \vec{R}^{t*} \cdot \left(\int dx \overrightarrow{dN} \cdot \overrightarrow{dN}^t \right) \cdot \vec{R} = \vec{R}^{t*} \cdot A \cdot \vec{R} \\
\int dy \frac{\partial S^*}{\partial y} \frac{\partial S}{\partial y} &= \vec{S}^{t*} \cdot \left(\int dy \overrightarrow{dM} \cdot \overrightarrow{dM}^t \right) \cdot \vec{S} = \vec{S}^{t*} \cdot B \cdot \vec{S} \\
\int dx R^* R &= \vec{R}^{t*} \cdot \left(\int dx \vec{N} \cdot \vec{N}^t \right) \cdot \vec{R} = \vec{R}^{t*} \cdot C \cdot \vec{R}
\end{aligned} \tag{4.20}$$

$$\int dy S^* S = \vec{S}^{t*} \cdot \left(\int dy \vec{M} \cdot M^t \right) \cdot \vec{S} = \vec{S}^{t*} \cdot D \cdot \vec{S}$$

Dyadische Produkte der Form $\vec{a} \cdot \vec{b}^t$ ergeben eine Matrix, in Gl. (4.20) ist beispielsweise $\vec{dN} \cdot \vec{dN}^t = A$ mit der Matrix A . Setzt man Gl. (4.20) in Gl. (4.17) ein, ergibt sich für das Integral I_1 :

$$\begin{aligned} I_1 = \sum_k & \left((\vec{R}^{t*} \cdot A(D_x^k) \cdot \vec{R}) (\vec{S}^{t*} \cdot D(D_y^k) \cdot \vec{R}) \right. \\ & \left. + (\vec{R}^{t*} \cdot C(D_x^k) \cdot \vec{R}) (\vec{S}^{t*} \cdot B(D_y^k) \cdot \vec{R}) \right) \end{aligned} \quad (4.21)$$

Dabei gibt $A(D_x^k)$ an, dass die Matrix A vom Diffusionskoeffizienten D_x^k abhängt; für die Matrizen B , C und D gilt dies analog. In ähnlicher Weise werden die übrigen Integrale berechnet. Es ergeben sich folgende Ausdrücke für I_2 , I_3 , I_4 und I_5 :

$$I_2 := \int d^2r u^* \sigma^{tot} R(x) S(y) = \sum_k (\vec{R}^{t*} \cdot C(\sigma_{tx}^k) \cdot \vec{R}) (\vec{S}^{t*} \cdot D(\sigma_{ty}^k) \cdot \vec{R})$$

$$I_3 := \int d^2r u^* \sigma^{tot} s(x, y) = \sum_k (\vec{R}^{t*} \cdot \vec{n}(s_x^k)) (\vec{S}^{t*} \cdot \vec{m}(s_y^k)) \quad (4.22)$$

$$\begin{aligned} I_4 &:= \int d^2r D \vec{\nabla} u^* \cdot \vec{\nabla} (F^i(x) G^i(y)) \\ &= \sum_k \left((\vec{R}^{t*} \cdot A(D_x^k) \cdot \vec{F}^i) (\vec{S}^{t*} \cdot D(D_y^k) \cdot \vec{G}^i) \right. \\ &\quad \left. + (\vec{R}^{t*} \cdot C(D_x^k) \cdot \vec{F}^i) (\vec{S}^{t*} \cdot B(D_y^k) \cdot \vec{G}^i) \right) \end{aligned}$$

$$I_5 := \int d^2r \ u^* \sigma^{tot} F^i(x) G^i(y) = \sum_k (\vec{R}^{t*} \cdot C(\sigma_{tx}^k) \cdot \vec{F}^i) (\vec{S}^{t*} \cdot D(\sigma_{ty}^k) \cdot \vec{G}^i)$$

Im Ausdruck für I_3 gilt $\vec{n}(s_x^k) = \int dx s_x^k(x) \vec{N}(x)$ und $\vec{m}(s_y^k) = \int dy s_y^k(y) \vec{M}(y)$. Setzt man Gl. (4.21) und Gl. (4.22) in Gl. (4.15) ein, erhält man folgende Gleichung:

$$\begin{aligned} & \sum_k^{n_D} \left((\vec{R}^{t*} \cdot A(D_x^k) \cdot \vec{R}) (\vec{S}^{t*} \cdot D(D_y^k) \cdot \vec{R}) \right. \\ & \quad \left. + (\vec{R}^{t*} \cdot C(D_x^k) \cdot \vec{R}) (\vec{S}^{t*} \cdot B(D_y^k) \cdot \vec{R}) \right) \\ & \quad + \sum_k^{n_\sigma} (\vec{R}^{t*} \cdot C(\sigma_{tx}^k) \cdot \vec{R}) (\vec{S}^{t*} \cdot D(\sigma_{ty}^k) \cdot \vec{R}) \\ & = \sum_k^{n_S} \left(\vec{R}^{t*} \cdot \vec{n}(s_x^k) \right) \left(\vec{S}^{t*} \cdot \vec{m}(s_y^k) \right) \tag{4.23} \\ & \quad - \sum_i^{n_D} \sum_k \left((\vec{R}^{t*} \cdot A(D_x^k) \cdot \vec{F}^i) (\vec{S}^{t*} \cdot D(D_y^k) \cdot \vec{G}^i) \right. \\ & \quad \left. + (\vec{R}^{t*} \cdot C(D_x^k) \cdot \vec{F}^i) (\vec{S}^{t*} \cdot B(D_y^k) \cdot \vec{G}^i) \right) \\ & \quad - \sum_i^{n_\sigma} \sum_k (\vec{R}^{t*} \cdot C(\sigma_{tx}^k) \cdot \vec{F}^i) (\vec{S}^{t*} \cdot D(\sigma_{ty}^k) \cdot \vec{G}^i) \end{aligned}$$

Die gesuchten Funktionen $\vec{R}(x)$ und $\vec{S}(y)$ werden sukzessive nach dem zweischrittigen impliziten Verfahren der alternierenden Richtungen (Alternating-Direction Implicit method, ADI) ermittelt. Im ersten Schritt (erster ADI-Halbschritt) wird $\vec{S}(y)$ als bekannt vorausgesetzt und $\vec{R}(x)$ berechnet, im zweiten Schritt (zweiter ADI-Halbschritt) wird umgekehrt $\vec{R}(x)$ als bekannt vorausgesetzt und $\vec{S}(y)$ berechnet. Dieses Verfahren wird so lange fortgesetzt, bis $\vec{R}(x)$ und $\vec{S}(y)$ ein vorgegebenes Konvergenzkriterium erfüllen. Die konvergierten Lösungen für $\vec{R}(x)$ und $\vec{S}(y)$ stellen dann den neuen Term $(n+1)$ in Gl. (4.12) dar, d. h. es wird $F^{n+1}(x) = \vec{R}(x)$ und $G^{n+1}(y) = \vec{S}(y)$ gesetzt und n um 1 erhöht. Beide ADI-Schritte führen auf jeweils ein lineares Gleichungssystem:

Erster ADI-Schritt: Berechne $\vec{R}(x)$ unter der Annahme, dass $\vec{S}(y)$ bekannt ist. Dann gilt $\vec{S}^* = \vec{S}$ und man erhält folgendes lineares Gleichungssystem:

$$\begin{aligned} & \sum_k \left(a_k A(D_x^k) + b_k C(D_x^k) + c_k C(\sigma_{tx}^k) \right) \cdot \vec{R} \\ &= \sum_k^{n_s} d_k \vec{n}(s_x^k) - \sum_i \sum_k^{n_D} \left(e_{ki} A(D_x^k) + f_{ki} C(D_x^k) \right) \\ & \quad \cdot \vec{F}^i - \sum_i \sum_k^{n_\sigma} \left(g_{ki} C(\sigma_{tx}^k) \right) \cdot \vec{F}^i \end{aligned} \quad (4.24)$$

mit den folgenden Abkürzungen:

$$a_k := \vec{S}^t \cdot D(D_y^k) \cdot \vec{S}$$

$$b_k := \vec{S}^t \cdot B(D_y^k) \cdot \vec{S}$$

$$c_k := \vec{S}^t \cdot D(\sigma_y^k) \cdot \vec{S}$$

$$d_k := \vec{S}^t \cdot \vec{m}(s_y^k) \quad (4.25)$$

$$e_{ki} := \vec{S}^t \cdot D(D_y^k) \cdot \vec{G}^i$$

$$f_{ki} := \vec{S}^t \cdot B(D_y^k) \cdot \vec{G}^i$$

$$g_{ki} := \vec{S}^t \cdot D(\sigma_y^k) \cdot \vec{G}^i$$

Das Gleichungssystem Gl. (4.25) wird numerisch nach dem Verfahren der konjugierten Gradienten gelöst.

Zweiter ADI-Schritt: Berechne $\vec{S}(y)$ unter der Annahme, dass $\vec{R}(x)$ bekannt ist. Dann gilt $\vec{R}^* = \vec{R}$ und man erhält folgendes lineares Gleichungssystem für $\vec{S}(y)$, das formal jenem des ersten ADI-Schritts ähnelt:

$$\begin{aligned}
& \sum_k \left(\hat{a}_k D(D_y^k) + \hat{b}_k B(D_y^k) + \hat{c}_k D(\sigma_{ty}^k) \right) \cdot \vec{S} \\
&= \sum_k^{n_s} \hat{d}_k \vec{m}(s_y^k) - \sum_i \sum_k^{n_D} \left(\hat{e}_{ki} D(D_y^k) + \hat{f}_{ki} B(D_y^k) \right) \\
&\quad \cdot \vec{G}^i - \sum_i \sum_k^{n_\sigma} \left(\hat{g}_{ki} D(\sigma_{ty}^k) \right) \cdot \vec{G}^i
\end{aligned} \tag{4.26}$$

mit den folgenden Abkürzungen:

$$\begin{aligned}
\hat{a}_k &:= \vec{R}^t \cdot A(D_x^k) \cdot \vec{R} \\
\hat{b}_k &:= \vec{R}^t \cdot C(D_x^k) \cdot \vec{R} \\
\hat{c}_k &:= \vec{R}^t \cdot C(\sigma_x^k) \cdot \vec{R} \\
\hat{d}_k &:= \vec{R}^t \cdot \vec{n}(s_x^k) \\
\hat{e}_{ki} &:= \vec{R}^t \cdot A(D_x^k) \cdot \vec{F}^i \\
\hat{f}_{ki} &:= \vec{R}^t \cdot C(D_x^k) \cdot \vec{F}^i \\
\hat{g}_{ki} &:= \vec{R}^t \cdot C(\sigma_x^k) \cdot \vec{F}^i
\end{aligned} \tag{4.27}$$

Um die Gleichungssysteme Gl. (4.24) und Gl. (4.26) aufstellen und lösen zu können, benötigt man explizite Darstellungen der Basisfunktionen $\vec{N}(x)$ und $\vec{M}(y)$ und muss die Randbedingungen vom Typ Neumann einbringen.

Wahl der Basisfunktionen

Für das PGD-Verfahren wurden der Einfachheit halber lineare Basisfunktionen gewählt, die so beschaffen sind, dass sie an den Knotenpunkten den Wert eins annehmen und ansonsten verschwinden, d. h. $N_i(x) = 1$ für $x = x_i$ und $N_j(x) = 0$ für $j \neq i$; analoges gilt für

$M_i(y)$. Wird in x-Richtung eine Diskretisierung in n_x äquidistante Intervalle der Breite h_x vorgenommen, so lassen sich die Basisfunktionen $\vec{N}(x)$ wie folgt schreiben:

$$N_i(x) = \begin{cases} \frac{1}{h_x}(x - x_{i-1}), & x_{i-1} \leq x \leq x_i, i > 1 \text{ und } i < n_x \\ \frac{1}{h_x}(x_{i+1} - x), & x_i < x \leq x_{i+1}, i > 1 \text{ und } i < n_x \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$N_1(x) = \begin{cases} \frac{1}{h_x}(x_2 - x), & x_1 \leq x \leq x_2 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.28)$$

$$N_{n_x}(x) = \begin{cases} \frac{1}{h_x}(x - x_{n-1}), & x_{n-1} \leq x \leq x_n \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Daraus ergeben sich die ersten Ableitungen nach x:

$$\frac{dN_i(x)}{dx} = \begin{cases} \frac{1}{h_x}, & x_{i-1} \leq x \leq x_i, i > 1 \text{ und } i < n_x \\ -\frac{1}{h_x}, & x_i < x \leq x_{i+1}, i > 1 \text{ und } i < n_x \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$\frac{dN_1(x)}{dx} = \begin{cases} -\frac{1}{h_x}, & x_1 \leq x \leq x_2 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.29)$$

$$\frac{dN_{n_x}(x)}{dx} = \begin{cases} \frac{1}{h_x}, & x_{n-1} \leq x \leq x_n \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Für $\vec{M}(y)$ gelten analoge Darstellungen.

Neumann-Randbedingungen

Die Randbedingungen nach Neumann ergeben sich aus dem Randterm, der durch partielle Integration der Diffusionsgleichung in schwacher Formulierung entsteht:

$$\int d^3r \phi(\vec{r}) \Delta f(\vec{r}) = - \int d^3r \phi(\vec{r}) \varrho(\vec{r}) \quad (4.30)$$

Darin steht $f(\vec{r})$ für den Neutronenfluss und $\phi(\vec{r})$ für eine geeignete Testfunktion. Definiert man den Vektor $\vec{v} := \phi(\vec{r}) \vec{\nabla} f(\vec{r})$, so gilt:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{v} \equiv \vec{\nabla} \cdot (\phi(\vec{r}) \vec{\nabla} f(\vec{r})) = \vec{\nabla} \phi(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla} f(\vec{r}) + \phi(\vec{r}) \Delta f(\vec{r}) \quad (4.31)$$

Der zweite Summand der rechten Seite von Gl. (4.31) entspricht dem Integranden der linken Seite von Gl. (4.30). Für das räumliche Problemgebiet Ω und dessen Rand $\partial\Omega$ gilt nach dem Satz von Gauß.

$$\int_{\Omega} d^3r \vec{\nabla} \cdot \vec{v} = \oint_{\partial\Omega} d\vec{A} \cdot \vec{v} \quad (4.32)$$

Einsetzen von Gl. (4.31) in Gl. (4.32) liefert:

$$\int_{\Omega} d^3r \phi(\vec{r}) \Delta f(\vec{r}) = \oint_{\partial\Omega} \phi(\vec{r}) d\vec{A} \cdot \vec{\nabla} f(\vec{r}) - \int_{\Omega} d^3r \vec{\nabla} \phi(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla} f(\vec{r}) \quad (4.33)$$

Darin gehen über das Oberflächenintegral über den Rand des Problemgebiets die Neumann-Randbedingungen ein. Setzt man Gl. (4.33) in Gl. (4.30) ein, erhält man die partiell integrierte Diffusionsgleichung, in der Ableitungen erster statt zweiter Ordnung mitsamt dem Randterm auftreten:

$$\int_{\Omega} d^3r \vec{\nabla} \phi(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla} f(\vec{r}) = \int_{\Omega} d^3r \phi(\vec{r}) \rho(\vec{r}) + \oint_{\partial\Omega} \phi(\vec{r}) \vec{dA} \cdot \vec{\nabla} f(\vec{r}) \quad (4.34)$$

Auf den Randterm (Oberflächenintegral) von Gl. (4.34) werden nun dieselben PGD-Ansätze Gl. (4.12) und Gl. (4.13) angewandt.

$$\begin{aligned} \oint_{\partial\Omega} u^* \vec{ds} \cdot \vec{\nabla} u &= \oint_{\partial\Omega} R^*(x) S^*(y) \vec{ds} \cdot \vec{\nabla} (R(x) S(y)) \\ &+ \sum_i \oint_{\partial\Omega} R^*(x) S^*(y) \vec{ds} \cdot \vec{\nabla} (F^i(x) G^i(y)) \end{aligned} \quad (4.35)$$

Das geschlossene Oberflächen- bzw. Linienintegral (zwei Raumdimensionen) erstreckt sich über die vier Seitenränder des in Abb. 4.4 skizzierten Problemgebiets:

$$\begin{aligned} \oint_{\partial\Omega_1} R^*(x) S^*(y) \vec{ds} \cdot \vec{\nabla} [R(x) S(y)] \\ &= \oint_{\partial\Omega_1} R^*(x) S^*(y_0) \left[dx S(y_0) \frac{\partial R(x)}{\partial x} \right. \\ &\quad \left. + dy R(x) \frac{\partial S(y_0)}{\partial y} \right] \\ &= S^*(y_0) S(y_0) \int_{x_0}^{x_1} dx R^*(x) \frac{\partial R(x)}{\partial x} \end{aligned} \quad (4.36)$$

Mit Hilfe der Basisfunktion Gl. (4.18) kann das Integral in Gl. (4.36) wie folgt geschrieben werden:

$$\begin{aligned}
& \oint_{\partial\Omega_1} R^*(x)S^*(y) \overrightarrow{ds} \cdot \vec{\nabla}[R(x)S(y)] \\
& = S^*(y_0)S(y_0)\vec{R}^{t*} \cdot \int_{x_0}^{x_1} dx (\vec{N} \cdot \overrightarrow{dN}^t) \cdot \vec{R}
\end{aligned} \tag{4.37}$$

Da der Rand $\partial\Omega_3$ parallel zu $\partial\Omega_1$ verläuft, jedoch in Gegenrichtung zu durchlaufen ist (Minuszeichen), ergibt sich das Integral über $\partial\Omega_3$ sofort aus Gl. (4.37):

$$\begin{aligned}
& \oint_{\partial\Omega_3} R^*(x)S^*(y) \overrightarrow{ds} \cdot \vec{\nabla}[R(x)S(y)] \\
& = -S^*(y_1)S(y_1)\vec{R}^{t*} \cdot \int_{x_0}^{x_1} dx (\vec{N} \cdot \overrightarrow{dN}^t) \cdot \vec{R}
\end{aligned} \tag{4.38}$$

Analog erhält man für die Ränder $\partial\Omega_2$ und $\partial\Omega_4$:

$$\begin{aligned}
& \oint_{\partial\Omega_2} R^*(x)S^*(y) \overrightarrow{ds} \cdot \vec{\nabla}[R(x)S(y)] \\
& = R^*(x_1)R(x_1)\vec{S}^{t*} \cdot \int_{y_0}^{y_1} dy (\vec{M} \cdot \overrightarrow{dM}^t) \cdot \vec{S}
\end{aligned} \tag{4.39}$$

$$\begin{aligned}
& \oint_{\partial\Omega_4} R^*(x)S^*(y) \overrightarrow{ds} \cdot \vec{\nabla}[R(x)S(y)] \\
& = -R^*(x_0)R(x_0)\vec{S}^{t*} \cdot \int_{y_0}^{y_1} dy (\vec{M} \cdot \overrightarrow{dM}^t) \cdot \vec{S}
\end{aligned}$$

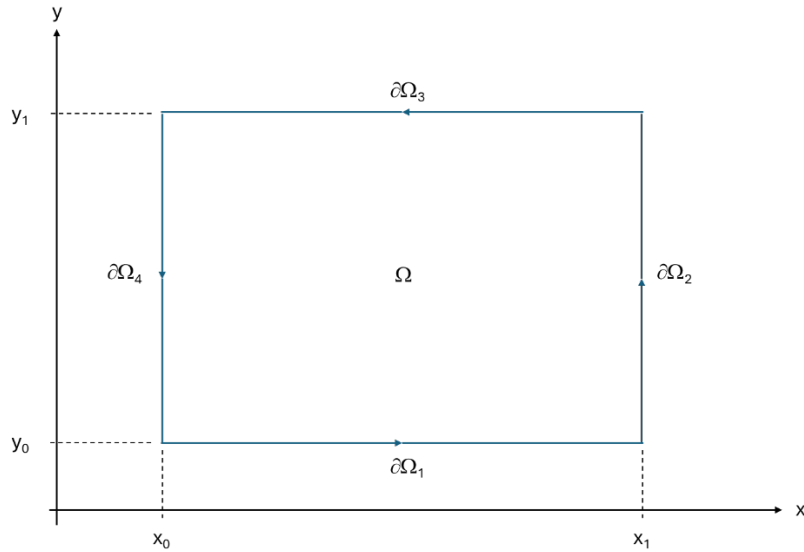


Abb. 4.4 Ränder $\partial\Omega_1$, $\partial\Omega_2$, $\partial\Omega_3$ und $\partial\Omega_4$ des Problemgebiets Ω

Berechnung separierter Darstellungen mittels Singulärwertzerlegung

Die Überführung mehrdimensionaler Integrale über Funktionen mehrerer Veränderlicher in Produkte eindimensionaler Integrale erfordert eine separierte Darstellung der zu integrierenden Funktionen. In zwei Raumdimensionen kann dies über eine Singulärwertzerlegung (engl. Singular Value Decomposition, SVD) erfolgen. Ist A eine beliebige $n \times m$ -Matrix, dann existiert für A die folgende Zerlegung in ein Produkt aus einer $m \times n$ -Matrix U , einer $p \times p$ -Diagonalmatrix D ($p = \min(m, n)$) und einer $n \times n$ -Matrix V :

$$A = U \cdot D \cdot V^t \quad (4.40)$$

Diese Produktdarstellung ist die Singulärwertzerlegung der Matrix A . Dabei sind U und V jeweils orthogonale Matrizen, d. h. die jeweilige Inverse ist gleich der Transponierten, und die Diagonalelemente von D sind die Singulärwerte. Definiert man mit U_j die Spalten der Matrix U und mit V_j die Spalten der Matrix V , so lässt sich die Matrix A als die folgende, mit den r von null verschiedenen Singulärwerten d_j gewichtete Summe darstellen:

$$A = \sum_{j=1}^r A_j = \sum_{j=1}^r d_j \cdot U_j \cdot V_j^t \quad (4.41)$$

Diese Zerlegung kann man also heranziehen, um für eine gegebene zweidimensionale Funktion $f(x, y)$ eine separierte Darstellung $f(x, y) = \sum_j F_j(x)G_j(y)$ zu finden, denn $F_j(x) = d_j \cdot U_j$ und $G_j(y) = V_j$ für $d_j \neq 0$. Zur Lösung des ROM werden daher alle zweidimensionalen Funktionen (Wirkungsquerschnitte, Quellterme etc.) mittels Singulärwertzerlegung in eine jeweilige separierte Darstellung überführt. Dabei werden Singulärwerte, deren Betrag unterhalb einer kleinen Schranke liegen (bewährt hat sich $1 \cdot 10^{-8}$), als null interpretiert. Für dreidimensionale Funktionen tritt an die Stelle der SVD die tensorielle (oder *higher-order*) SVD, denn solche Funktionen können als Tensor dritter Stufe aufgefasst werden. Entsprechend besteht die PGD-Entwicklung der gesuchten Funktion dreier unabhängiger Veränderlicher aus Produkten mit drei Faktoren und erweitert damit den zweidimensionalen Ansatz von Gl. (4.12) zu

$$u(x, y, z) = \sum_{i=1}^n F^i(x)G^i(y)G^i(z) + R(x)S(y)T(z) \quad (4.42)$$

4.2.3 Überprüfung anhand von Testfällen

4.2.3.1 LMW-Testfall homogen

Zunächst wurde das PGD-Verfahren anhand eines homogenen Testfalls unter Verwendung der auf eine Energiegruppe kondensierten Wirkungsquerschnitte von Brennstoff-Typ 1 des LMW-Benchmarks (näheres hierzu in Abschnitt 5.5.1.1, siehe auch /LAN 77/) getestet. Das Problemgebiet ist ein Quadrat mit einer Seitenlänge von 22 cm, welches in x- und y-Richtung in jeweils 23 Zellen diskretisiert wird. Abb. 4.5 zeigt die mit der PGD-Methode berechnete Flussverteilung, die nicht erkennbar von der in Abb. 4.6 dargestellten FENNECS-Lösung abweicht. In der Tat sind die relativen Abweichungen sehr gering, wie aus Abb. 4.7 hervorgeht. Das PGD-Verfahren konvergiert nach 9 äußeren Iterationen, wobei die PGD-Entwicklung

$$u(x, y) = \sum_{i=1}^n F^i(x)G^i(y) \quad (4.43)$$

aufgrund der Einfachheit dieses Testfalls aus nur einem Term ($n = 1$) besteht; der Term $F^1(x)$ und der Term $G^1(y)$ ist in Abb. 4.8 bzw. Abb. 4.9 dargestellt. Hierfür wurde eine

CPU-Zeit von 8 ms benötigt. Die FENNECS benötigt für diesen Testfall 78 äußere Iterationen, verbunden mit einer Rechenzeit von 0,4 s. Das PGD-Verfahren erfordert in diesem Fall also nur 2 % der Rechenzeit von FENNECS.

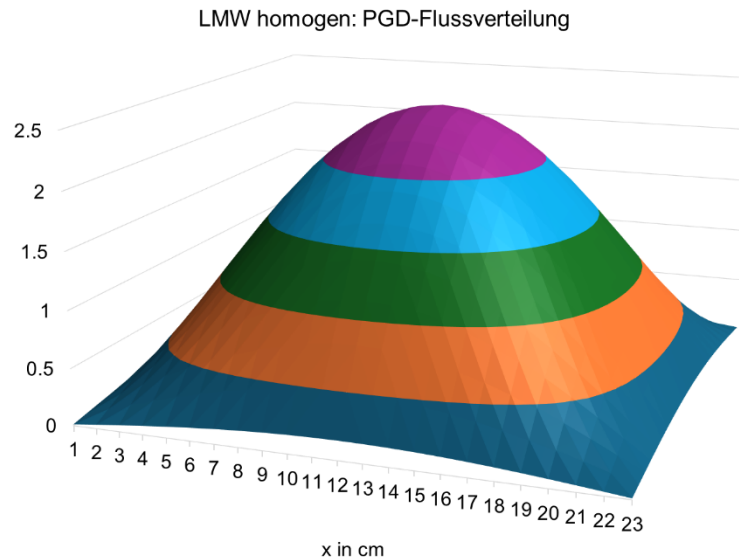


Abb. 4.5 Mit der PGD-Methode berechnete Flussverteilung des homogenen LMW-Testfalls

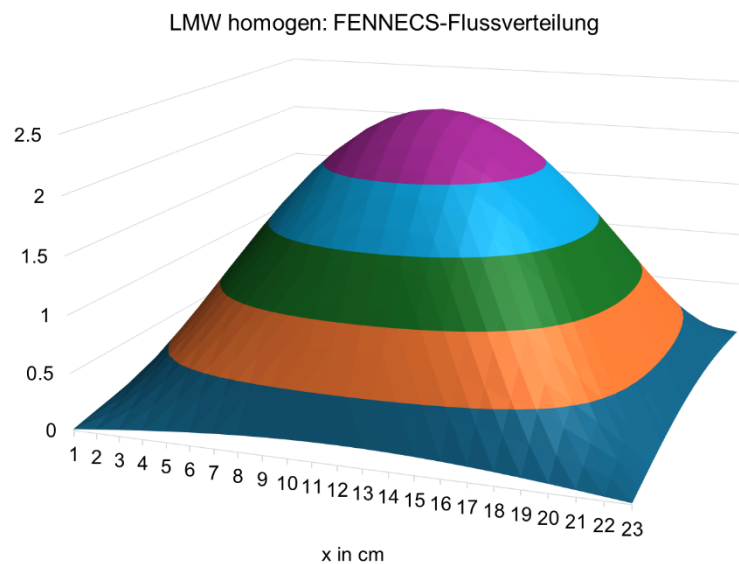


Abb. 4.6 Mit FENNECS berechnete Flussverteilung des homogenen LMW-Testfalls

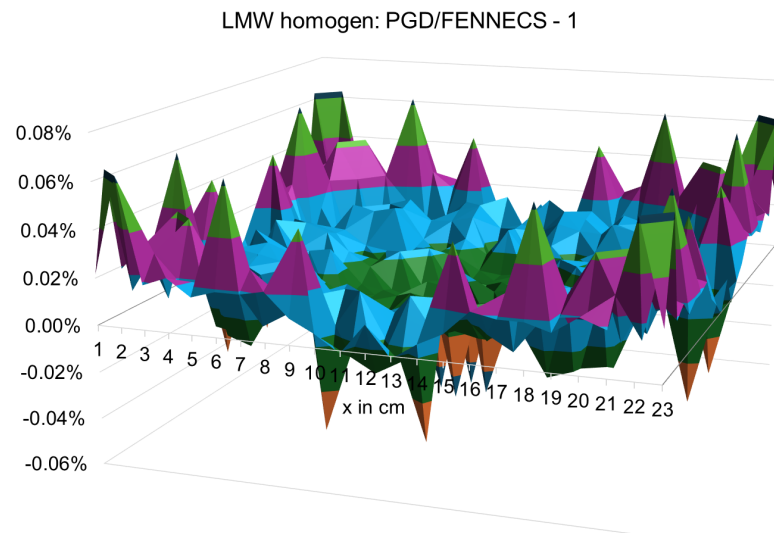


Abb. 4.7 Relative Abweichungen (in %) der PGD-Lösung für die Flussverteilung des homogenen LMW-Testfalls gegenüber der FENNECS-Lösung

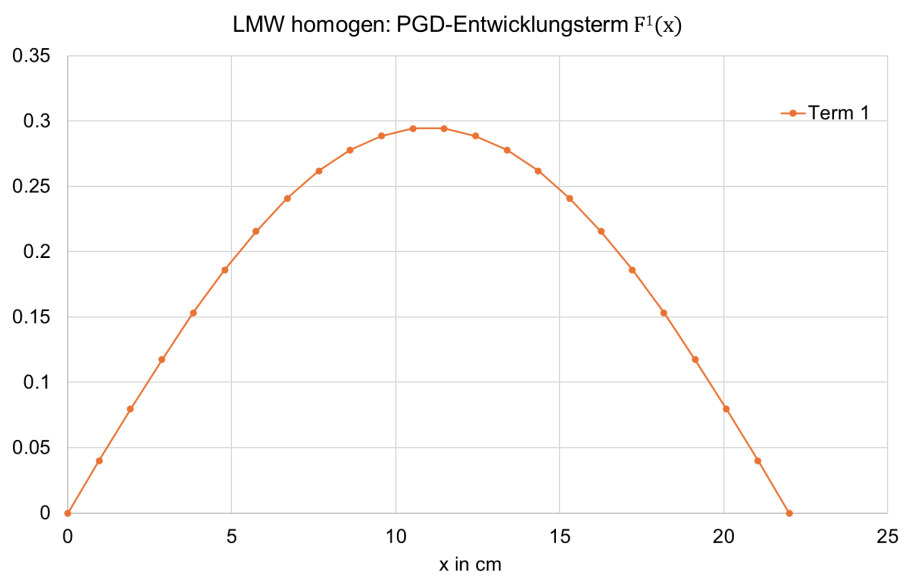


Abb. 4.8 Graphische Darstellung des PGD-Entwicklungsterms $F^1(x)$ bzgl. der x-Koordinate

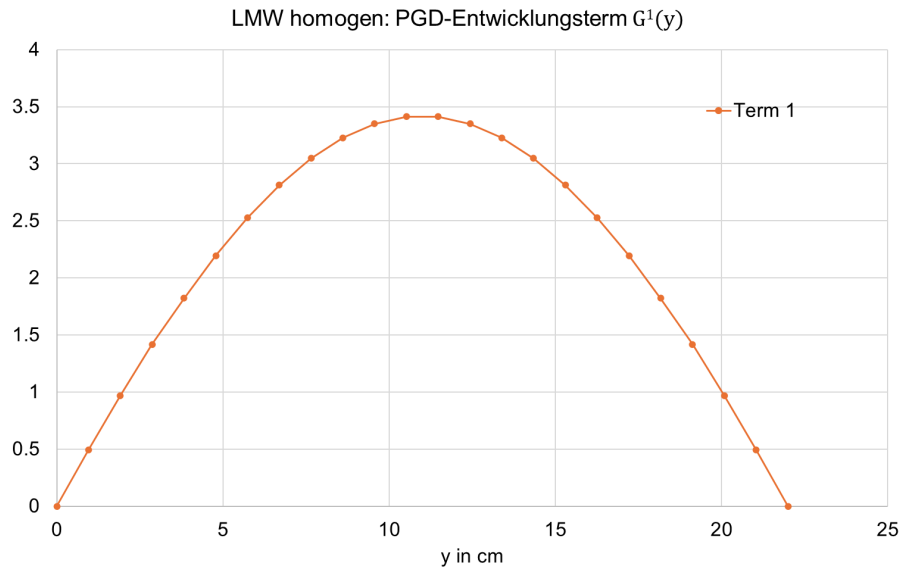


Abb. 4.9 Graphische Darstellung des PGD-Entwicklungsterms $G^1(y)$ bzgl. der y-Koordinate

4.2.3.2 LMW-Testfall heterogen

Im Gegensatz zum vorigen Testfall wurde nun die in Abb. 4.10 dargestellte heterogene Materialverteilung verwendet; die Abbildung ist die Visualisierung des FENNECS-Modells, das zum Vergleich herangezogen wurde. Das Problemgebiet ist auch hier ein Quadrat mit einer Seitenlänge von 22 cm, welches in x- und y-Richtung in jeweils 23 Zellen diskretisiert wird.

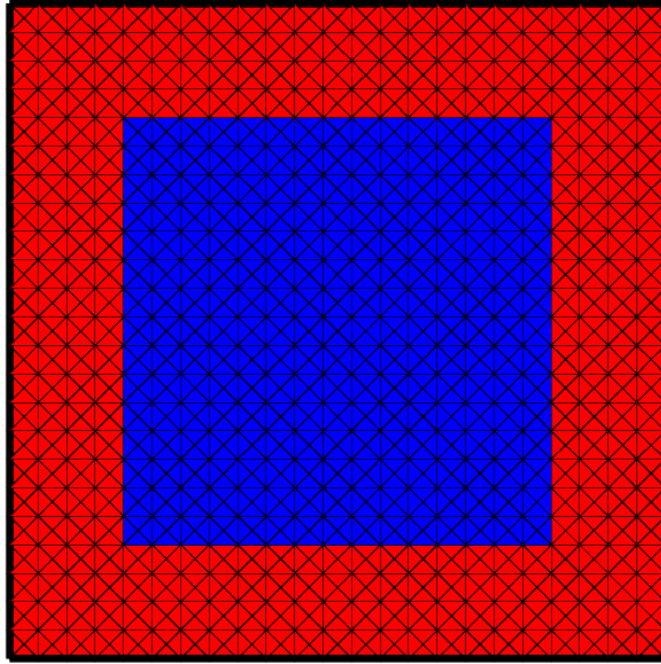


Abb. 4.10 Materialverteilung des heterogenen LMW-Testfalls (blau: Brennstoff-Typ 1, rot: Brennstoff-Typ 2)

Das PGD-Verfahren konvergiert nach 9 äußeren Iterationen, wobei die PGD-Entwicklung

$$u(x, y) = \sum_{i=1}^n F^i(x) G^i(y) \quad (4.44)$$

jetzt aus $n = 3$ Termen besteht. Dafür wurde eine CPU-Zeit von 45 ms CPU-Zeit benötigt. Abb. 4.11 zeigt die normierte Flussverteilung der PGD-Lösung.

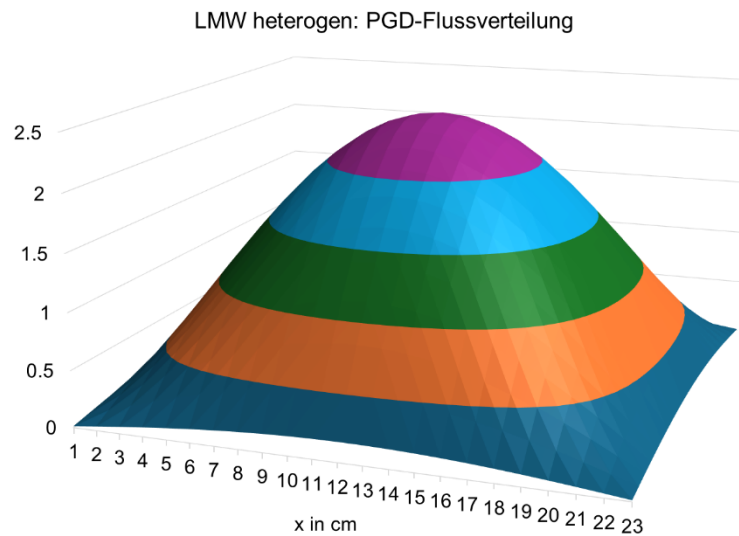


Abb. 4.11 Mit der PGD-Methode berechnete Flussverteilung des heterogenen LMW-Testfalls

Zur Überprüfung wurde der heterogene Testfall in FENNECS modelliert. FENNECS konvergiert nach 85 äußeren Iterationen und benötigt dazu 0,5 s CPU-Zeit, also fast die zehnfache Rechenzeit. Abb. 4.12 zeigt die von FENNECS berechnete Flussverteilung; ein Unterschied der PGD- von der FENNECS-Lösung ist anhand dieser beiden Abbildungen nicht zu erkennen.

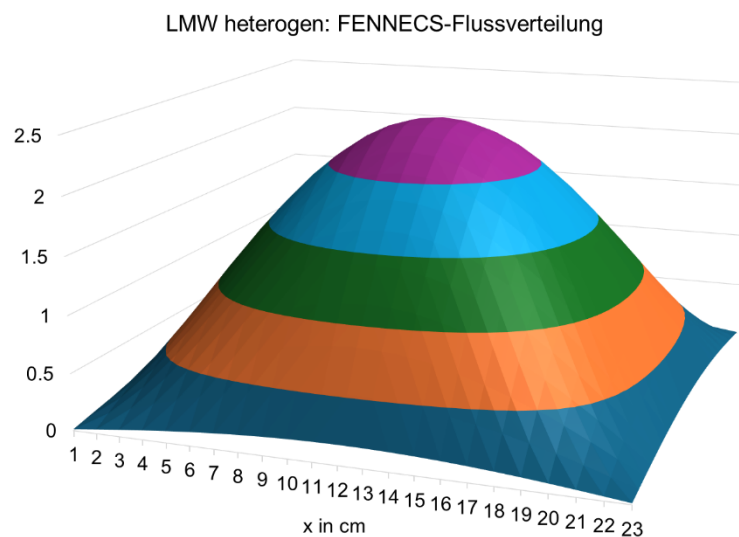


Abb. 4.12 Mit FENNECS berechnete Flussverteilung des heterogenen LMW-Testfalls

Abb. 4.13 zeigt für diese drei PGD-Terme die Funktionen $F^i(x)$ bezüglich der x-Koordinate. Deutlich erkennbar ist, dass der erste orange dargestellte Term bereits die Grundform der Flussverteilung in x-Richtung vorgibt. Die beiden anderen Terme (blau und grün) können als Korrekturen dieser Grundform interpretiert werden. Das trifft für $G^i(y)$ in ähnlicher Weise zu (siehe Abb. 4.14), denn auch hier gibt der orange dargestellte Term $G^1(y)$ die Grundform der Flussverteilung in y-Richtung vor. Die höheren beiden Terme $G^2(y)$ und $G^3(y)$ sind jedoch wesentlich kleiner als im Falle der x-Richtung; um sie vom ersten Term unterscheiden zu können, gilt für $G^2(y)$ und $G^3(y)$ die rechte Ordinate in Abb. 4.14. Abb. 4.15 zeigt die relative Abweichung der PGD-Lösung vom FENNECS-Ergebnis. Wiederum sind die Abweichungen mit höchstens etwa 0,6 % sehr gering.

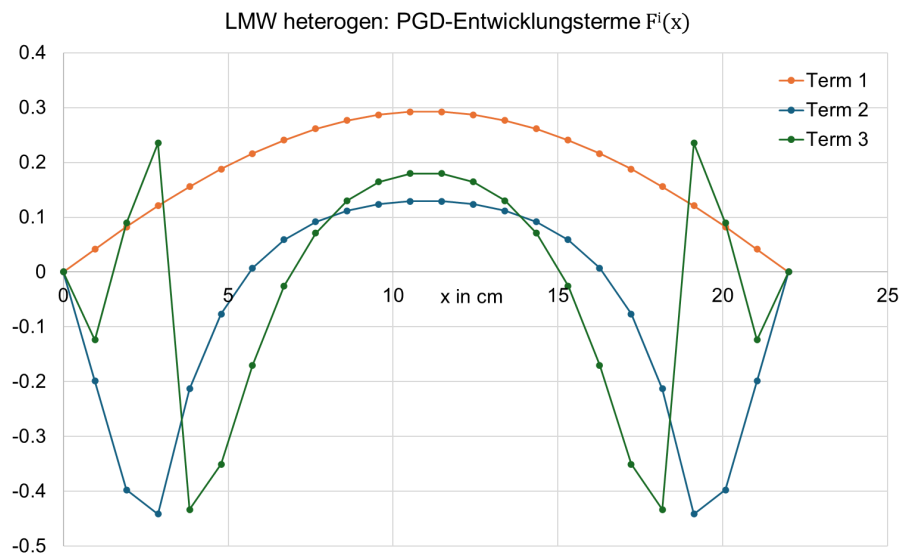


Abb. 4.13 Graphische Darstellung der 3 PGD-Entwicklungsterme $F^i(x)$ bzgl. der x-Koordinate. Term i bedeutet $F^i(x)$, $i = 1, \dots, 3$

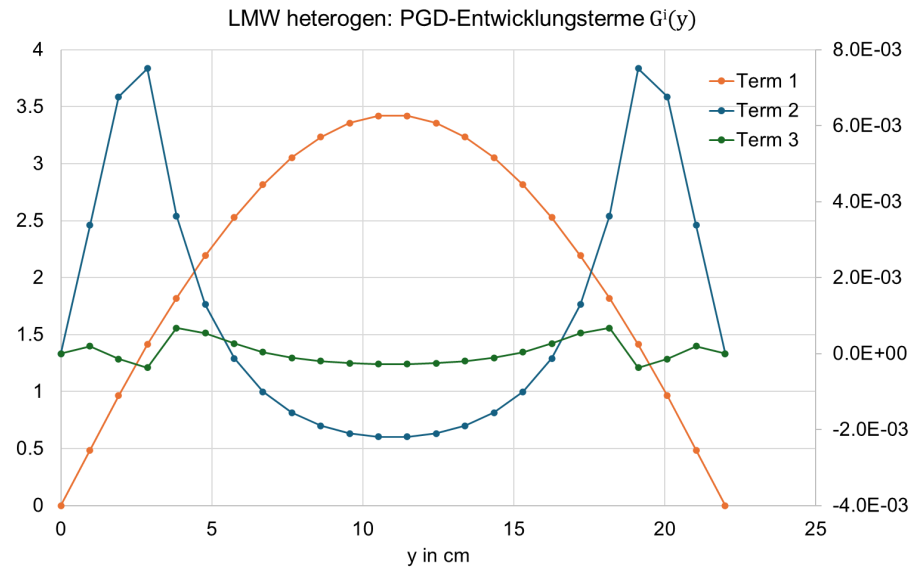


Abb. 4.14 Graphische Darstellung der 3 PGD-Entwicklungsterme $G^i(y)$ bzgl. der y-Koordinate. Term i bedeutet $G^i(y)$, $i = 1, \dots, 3$. Für Terme 2 und 3 gilt die rechte Ordinate

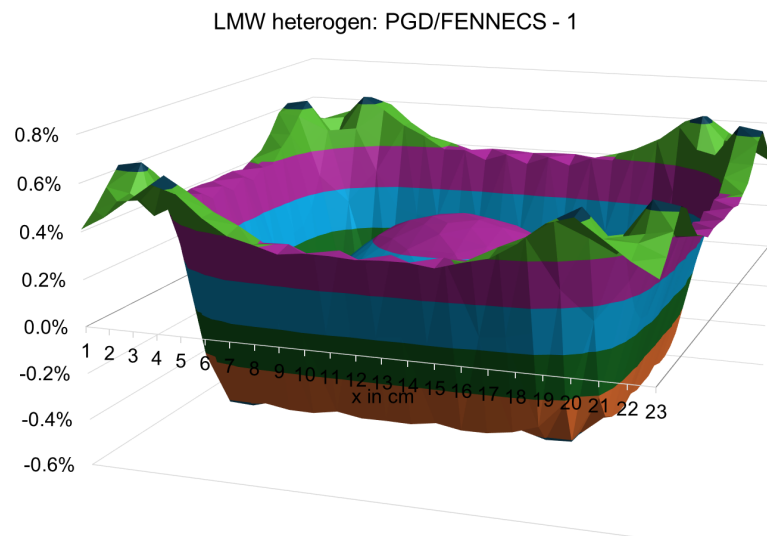


Abb. 4.15 Relative Abweichung (in %) der PGD-Lösung vom FENNECS-Ergebnis

5 Weiterentwicklung und Verbesserung der neutronenphysikalischen Rechenmodelle in FENNECS (Arbeitspaket 3)

5.1 Implementierung der I/Xe- und Pm/Sm-Gleichungen

Die Simulation betrieblicher Transienten, wie etwa des Lastfolgebetriebs oder Wiederanfahren des Reaktors, erfordert die Berücksichtigung der Iod-Xenon- und Xenon-Samarium-Dynamik. Das Isotop ^{135}Xe mit seinem großen thermischen (mikroskopischen) Absorptionswirkungsquerschnitt von etwa $3,6 \cdot 10^6$ barn (nachfolgend mit $\hat{\sigma}_g^{aX}$ bezeichnet) entsteht mit einer Ausbeute von ca. 0,3 % sowohl direkt bei der Kernspaltung als auch – mit wesentlich größerer Ausbeute von ca. 5,6 % – nach zweistufigem β^- -Zerfall über ^{135}I aus dem direkten Spaltprodukt ^{135}Te . Infolge der kurzen Halbwertszeit von ^{135}Te kann man jedoch in guter Näherung annehmen, dass ^{135}I instantan entsteht. Die zeitliche Änderung der Jod- und Xenon-Konzentrationen $J(t)$ bzw. $X(t)$ durch Aufbau und Zerfall, wird mit den folgenden beiden gekoppelten Differentialgleichungen beschrieben:

$$\begin{aligned} \frac{dJ(t)}{dt} &= \gamma_J \sum_g \sigma_g^f \phi_g(t) - \lambda_J J(t) \\ \frac{dX(t)}{dt} &= \gamma_X \sum_g \sigma_g^f \phi_g(t) - \lambda_X X(t) + \lambda_J J(t) - X(t) \cdot \sum_g \hat{\sigma}_g^{aX} \phi_g(t) \end{aligned} \quad (5.1)$$

Darin sind γ_J und γ_X die Jod- bzw. Xenon-Ausbeuten, λ_J und λ_X die jeweiligen Zerfallskonstanten und $\hat{\sigma}_g^{aX}$ der mikroskopische Xenon-Absorptionswirkungsquerschnitt der Energiegruppe g . Mit den Abkürzungen $F(t) := \sum_g \sigma_g^f \phi_g(t)$ für die Spaltrate und $\lambda_2 := \lambda_X + \sum_g \hat{\sigma}_g^{aX} \phi_g(t)$ folgt daraus:

$$\begin{aligned} \frac{dJ(t)}{dt} + \lambda_J J(t) &= \gamma_J F(t) \\ \frac{dX(t)}{dt} + \lambda_2 X(t) &= \gamma_X F(t) + \lambda_J J(t) \end{aligned} \quad (5.2)$$

Im stationären Zustand verschwinden die Zeitableitungen, d. h. für die Jod- und Xenon-Konzentrationen gilt im stationären Fall, wenn mit F_0 die stationäre Spaltrate bezeichnet wird:

$$J_0 = \frac{\gamma_J}{\lambda_J} F_0$$

$$X_0 = \frac{\gamma_X F_0 + \gamma_J J_0}{\lambda_2}$$
(5.3)

In FENNECS werden die zeitabhängigen Jod- und Xenon-Konzentrationen aus Gl. (5.3) durch voll-implizite Zeitintegration berechnet. Bezeichnet $\Delta t := t_{\tau+1} - t_\tau$ das Zeitintervall zwischen dem nächsten Zeitpunkt $t_{\tau+1}$ und dem vorigen Zeitpunkt t_τ , so folg aus Gl. (5.3):

$$J_{\tau+1} - J_\tau = - \int_{t_\tau}^{t_{\tau+1}} dt \lambda_J J(t) + \gamma_J \int_{t_\tau}^{t_{\tau+1}} dt F(t)$$

$$X_{\tau+1} - X_\tau = - \int_{t_\tau}^{t_{\tau+1}} dt \lambda_2 X(t) + \gamma_X \int_{t_\tau}^{t_{\tau+1}} dt F(t) + \gamma_J \int_{t_\tau}^{t_{\tau+1}} dt J(t)$$
(5.4)

Die voll-implizit zeitdiskretisierte Form erhält man, indem man die Integrale durch die jeweiligen Integranden zum Zeitpunkt $t_{\tau+1}$, multipliziert und mit dem Integrationsintervall Δt , ersetzt:

$$J_{\tau+1} = \frac{1}{1 + \lambda_J \Delta t} (J_\tau + \gamma_J F_{\tau+1} \Delta t)$$

$$X_{\tau+1} = \frac{1}{1 + \lambda_{2,\tau+1} \Delta t} (X_\tau + \gamma_X F_{\tau+1} \Delta t + \lambda_J \Delta t J_{\tau+1})$$
(5.5)

Der gesamte makroskopische Absorptionswirkungsquerschnitt von ^{135}Xe ergibt sich aus der Summe aus dem makroskopischen Absorptionswirkungsquerschnitt ohne Xenon-Beitrag und dem mit der momentanen Xenonkonzentration $X(t)$ (bzw. $X_{\tau+1}$ aus Gl. (5.5)) multiplizierten mikroskopischen Xenon-Absorptionswirkungsquerschnitt $\hat{\sigma}_g^{aX}$:

$$\sigma_g^a = \sigma_g^{a0} + X(t) \hat{\sigma}_g^{aX} \quad (5.6)$$

Neben der Jod-Xenon- ist die Promethium-Samarium-Dynamik von Bedeutung für den Reaktorbetrieb. Wie Jod und Xenon sind Promethium und Samarium in der Reaktordynamik eng miteinander verknüpft, da ^{149}Pm direkt zu dem stark neutronenabsorbierenden ^{149}Sm zerfällt, einem Neutronengift wie ^{135}Xe . ^{149}Pm entsteht durch β -Zerfall aus dem Spaltprodukt ^{149}Nd mit einer Halbwertszeit von 2 Stunden. ^{149}Pm seinerseits geht per β -Zerfall in ^{149}Sm über, wobei die Halbwertszeit für diesen Zerfallsprozess mit 54 Stunden deutlich länger ist als die für den Zerfall von ^{149}Nd in ^{149}Pm . Daher kann in guter Näherung angenommen werden, dass ^{149}Pm instantan entsteht.

Die Promethium-Samarium-Dynamik folgt den nachstehenden beiden gekoppelten Differentialgleichungen:

$$\begin{aligned} \frac{dP(t)}{dt} &= \gamma_P \sum_g \sigma_g^f \phi_g(t) - \lambda_P P(t) \\ \frac{dS(t)}{dt} &= \lambda_P P(t) - S(t) \cdot \sum_g \hat{\sigma}_g^{aS} \phi_g(t) \end{aligned} \quad (5.7)$$

Darin sind γ_P und γ_S die Promethium- bzw. Samarium-Ausbeuten, λ_P und λ_S die jeweiligen Zerfallskonstanten und $\hat{\sigma}_g^{aS}$ der mikroskopische Samarium-Absorptionswirkungsquerschnitt der Energiegruppe g . Aus Gl. (5.7) folgen für die stationären Pm- und Sm-Konzentrationen:

$$\begin{aligned} P_0 &= \frac{\gamma_P}{\lambda_P} \sum_g \sigma_g^f \phi_g(t) = \frac{\gamma_P}{\lambda_P} F_0 \\ S_0 &= \frac{\lambda_P P_0}{\sum_g \hat{\sigma}_g^{aS} \phi_g(t)} \end{aligned} \quad (5.8)$$

Dieses Verfahren wurde in Analogie zur Iod-Xenon-Dynamik in FENNECS implementiert.

5.2 Erweiterungen zur Berechnung der Nachzerfallsleistungsentwicklung

Nachdem ein Reaktor abgeschaltet wurde, zerfallen die radioaktiven Stoffe, die zum Zeitpunkt des Abschaltens noch im Reaktor vorhanden sind, weiter und setzen Energie frei. Daher fällt die Leistung nicht sofort auf null ab. Die unmittelbar nach dem Abbruch der neutroneninduzierten Kettenreaktion im Reaktor erzeugte Nachzerfallsleistung beträgt etwa 6 % der thermischen Betriebsleistung. Die freigesetzte Wärmemenge hängt von den Konzentrationen der Spaltprodukte und damit von der Betriebsgeschichte des Reaktors ab.

Eine rigorose Berechnung der zeitabhängigen Nachzerfallsleistungsfreisetzung kann durch die Lösung eines Systems gekoppelter Differentialgleichungen für die hunderte an Spaltprodukten und deren Tochternuklide durchgeführt werden, ist aber sehr rechenintensiv. Um diese Berechnung zu vereinfachen, wurde in FENNECS eine andere Methode ausgewählt, bei der eine gemessene Nachzerfallsleistungskurve an eine Reihe von Zerfallswärmegruppen (Analog zu den verzögerten Neutronengruppen) angepasst wird, wie es auch in Codes PARCS und TORT-TD realisiert wurde.

Die gesamte volumetrische Leistungsdichte $P(\vec{r}, t)$ einschließlich der Beiträge der Nachzerfallsleistung wird durch folgende Gleichung gegeben:

$$P(\vec{r}, t) = (1 - \alpha) \sum_g \kappa \sigma_g^{fiss} \phi_g(\vec{r}, t) + \sum_{n=1}^N \zeta_n D_n(\vec{r}, t) \quad (5.9)$$

wobei $D_n(\vec{r}, t)$ die Konzentration der Vorläufer der Nachzerfallsleistungsgruppe n ist, ζ_n die Zerfallskonstante der Nachzerfallsleistungsgruppe n ist, $\alpha = \sum_{n=1}^N \alpha_n$ den Gesamtanteil der Spaltenergie darstellt, der als Nachzerfallsleistung erscheint, N die Anzahl der Nachzerfallsleistungsgruppen bezeichnet und α_n den Anteil der gesamten Spaltenergie repräsentiert, der als Nachzerfallsleistung für die Gruppe n anfällt.

Die zeitliche Entwicklung der Konzentration der Vorläufer der Nachzerfallsleistungsgruppe n , $D_n(\vec{r}, t)$, wird durch eine lineare Differentialgleichung erster Ordnung beschrieben, die sowohl die Erzeugung der Vorläufer proportional zur Spaltleistung als auch deren radioaktiven Zerfall berücksichtigt:

$$\frac{\partial D_n(\vec{r}, t)}{\partial t} = \alpha_n \sum_g \kappa \sigma_g^{fiss}(\vec{r}) \phi_g(\vec{r}, t) - \varsigma_n D_n(\vec{r}, t) \quad (5.10)$$

Formal entspricht diese Gleichung der Vorläufergleichung für verzögerte Neutronen aus der klassischen Reaktorkinetik /DUD 76/.

Diese Gleichung kann numerisch gelöst werden. Nach Integration über das Zeitintervall $\Delta t = t_{\tau+1} - t_\tau$ und Approximation der auftretenden Integrale durch die jeweiligen Integranden am oberen Integrationslimit erhält man:

$$\begin{aligned} D_n^{\tau+1}(\vec{r}) - D_n^\tau(\vec{r}) &= \alpha_n \sum_g \kappa \sigma_g^{fiss}(\vec{r}) \int_{t_\tau}^{t_{\tau+1}} dt \phi_g(\vec{r}, t) \\ &\quad - \varsigma_n \int_{t_\tau}^{t_{\tau+1}} dt D_n(\vec{r}, t) \end{aligned} \quad (5.11)$$

Gemäß der voll-impliziten Zeitintegration werden die Integrale durch die Integranden am Ende des Zeitschritts, multipliziert mit der Zeitschrittweite Δt , ersetzt, d.h. $\int_{t_\tau}^{t_{\tau+1}} dt \phi_g(\vec{r}, t)$ und $\int_{t_\tau}^{t_{\tau+1}} dt D_n(\vec{r}, t)$ durch $\phi_g^{\tau+1}(\vec{r}) \Delta t$ bzw. $D_n^{\tau+1}(\vec{r}) \Delta t$. Damit folgt:

$$D_n^{\tau+1}(\vec{r})(1 + \varsigma_n \Delta t) - D_n^\tau(\vec{r}) = \Delta t \alpha_n \sum_g \kappa \sigma_g^{fiss}(\vec{r}) \phi_g^{\tau+1}(\vec{r}) \quad (5.12)$$

$$D_n^{\tau+1}(\vec{r}) = \frac{1}{1 + \varsigma_n \Delta t} D_n^\tau(\vec{r}) + \frac{\Delta t}{1 + \varsigma_n \Delta t} \alpha_n \sum_g \kappa \sigma_g^{fiss}(\vec{r}) \phi_g^{\tau+1}(\vec{r}) \quad (5.13)$$

Die stationäre (Gleichgewichts-) Konzentration der Vorläufer der Nachzerfallsleistungsgruppe n ergibt sich aus der ursprünglichen Bilanzgleichung (5.9) indem die zeitliche Ableitung gleich null gesetzt und die Gleichung nach der Vorläuferkonzentration aufgelöst wird:

$$\frac{\partial D_n(\vec{r}, t)}{\partial t} = 0 \Leftrightarrow D_n^0(\vec{r}) = \frac{\alpha_n}{\zeta_n} \sum_g \kappa \sigma_g^{fiss}(\vec{r}) \phi_g^0(\vec{r}) = \frac{\alpha_n}{\zeta_n} P_{fiss} \quad (5.14)$$

Damit folgt für die Nachzerfallsleistung im stationären Grenzfall aus der Bilanzgleichung unmittelbar:

$$P_{decay}^0 = \sum_{n=1}^N \zeta_n D_n(\vec{r}, 0) = \sum_{n=1}^N \zeta_n \frac{\alpha_n}{\zeta_n} P_{fiss} = \alpha P_{fiss} \quad (5.15)$$

Die Summe der Zerfallswärmeanteile α stellt somit den theoretischen Grenzwert der Nachzerfallsleistung bezogen auf die stationäre Reaktorleistung dar.

Für die Berechnungen in FENNECS werden die Parameter N (Anzahl der Nachzerfallsleistungsgruppen), α_n (Anteil der gesamten Spaltenergie, der der Nachzerfallsleistungsgruppe n zugeordnet ist) und ζ_n (die Zerfallskonstante der Nachzerfallsleistungsgruppe n) benötigt, diese sind in der Eingabedatei anzugeben.

5.3 Implementierung eines Suchverfahrens für die kritische Borkonzentration bei SMRs mit Boreinspeisesystem

Der in FENNECS implementierte Suchalgorithmus nach der kritischen Borkonzentration macht sich die Tatsache zunutze, dass der Einfluss von Bor auf die Neutronenmultiplikation in erster Näherung als linear betrachtet werden kann. Sind somit zwei Eigenwerte zu unterschiedlichen Borkonzentrationen bekannt, lässt sich mittels linearer Interpolation eine gute Näherung für den kritischen Zustand ermitteln. Der erste Schritt des Algorithmus besteht somit in der Durchführung zweier stationärer Kernberechnungen, um einen unter- und einen überkritischen effektiven Multiplikationsfaktoren (k_{eff}) zu bestimmen, der sich jeweils aus dem höchsten bzw. dem niedrigsten Borkonzentrationswert der Wirkungsquerschnitts-Bibliotheken ergeben. Daraus lässt sich die erste Näherung für die kritische Konzentration c_{crit} folgendermaßen ermitteln:

$$c_{crit} = c_{subcrit} + (c_{supcrit} - c_{subcrit}) \frac{1 - k_{subcrit}}{k_{supcrit} - k_{subcrit}} \quad (5.16)$$

Die so ermittelte Näherung c_{crit} für die kritische Borkonzentration wird nun in einer nachfolgenden stationären Kernberechnung mit FENNECS verwendet. Je nachdem, ob der daraus sich ergebende Eigenwert kleiner oder größer als eins ist, ersetzt die ermittelte Konzentration den unter- bzw. überkritischen Multiplikationsfaktor $k_{subcrit}$ bzw. $k_{supcrit}$ ¹. Anschließend wird gemäß Gleichung (5.16) eine neue Näherung für die kritische Borkonzentration bestimmt. Dieser iterative Prozess wird so oft wiederholt, bis auf ± 1 pcm ein k_{eff} -Wert von eins erreicht ist. Um den Prozess zu beschleunigen, wird zu Beginn eine nicht voll konvergierte Lösung herangezogen (durch Abschwächung des Flusskonvergenzkriteriums auf 10^{-3}). Im weiteren Verlauf des Iterationsverfahrens werden dieses Konvergenzkriterium dann auf den vom Anwender vorgegebenen Wert verschärft. Das gesamte Verfahren wurde erfolgreich getestet und ist auch Bestandteil der Continuous-Integration-Testmatrix von FENNECS.

5.4 Weiterentwicklung des Modells rotierender Steuerstäbe

5.4.1 Problemstellung

Im Vorgänger-Vorhaben RS1576 wurde in FENNECS ein Modell zur Rotation von Steuertrommeln implementiert [SEU 22]. Stationäre Verifikationsrechnungen anhand des Heat Pipe-cooled Micro Reactors (HPMR) zeigten einen ausgeprägt sägezahnförmigen und damit unphysikalischen Verlauf des Multiplikationsfaktors als Funktion des Drehwinkels (Abb. 5.1). Dieses Phänomen ist als sog. Cusping-Effekt bekannt und hat seine Ursache darin, dass es je nach Rotationswinkel sein kann, dass die Materialgrenze des Absorbers in der Steuertrommel innerhalb eines finiten Elements zu liegen kommt, sie also nicht mit dessen Begrenzung zusammenfällt. Für solche teilweise kontrollierten finiten Elemente muss ein geeigneter Wirkungsquerschnittsdatensatz bestimmt werden, der die aktuelle Stellung der Steuertrommel neutronenphysikalisch korrekt wiedergibt.

¹ Voraussetzung dafür ist trivialerweise, dass die Parametrisierung der Wirkungsquerschnitte nach der Borkonzentration einen unter- und einen überkritischen Multiplikationsfaktor zulässt. Ansonsten wird das Verfahren mit einer Fehlermeldung beendet, da eine kritische Borkonzentration nicht existiert.

Die üblicherweise angewandte Fluss-Volumen-Gewichtung führt bei Steuertrommeln zu keinem befriedigenden Ergebnis, u. a. deswegen, weil – im Gegensatz zu Steuerstäben – Anfang und Ende der Absorbersektion flächenmäßig einen wesentlich größeren Anteil an der gesamten Absorberregion haben als bei Steuerstäben. Um das Problem eines teilweise kontrollierten Elements anzugehen, wurde im Rahmen dieses Vorhabens das Steuertrommel- bzw. -stabmodell verbessert.

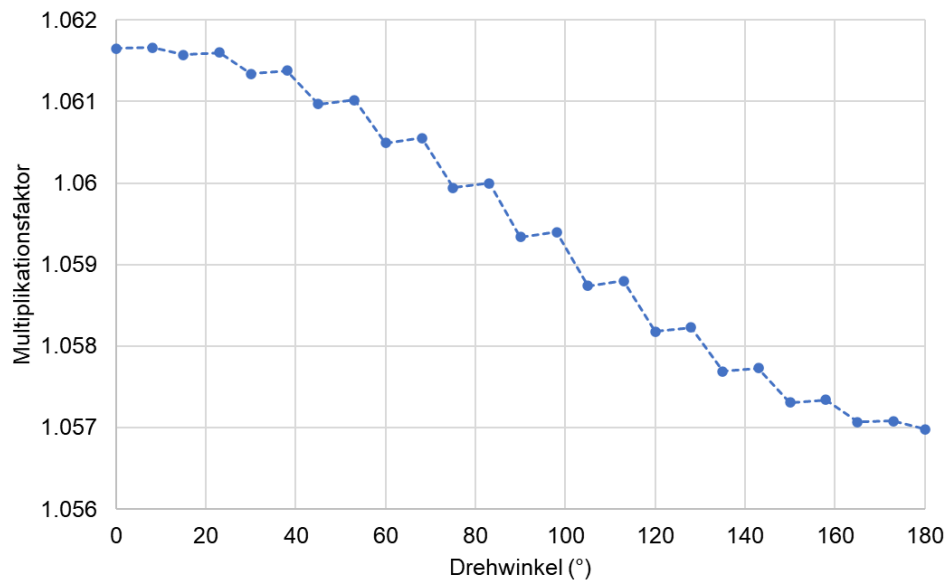


Abb. 5.1 Multiplikationsfaktor als Funktion des Rotationswinkels einer Steuertrommel

0° entspricht voll ausgefahren, 180° entspricht voll eingefahren. Aus /SEU 22/.

In der Literatur gibt es eine Reihe verschiedener Ansätze zur Behebung des Cusping-Effekts. Ein neuerer und vielversprechender Ansatz ist das in /SCH 19/ beschriebene Verfahren, das zur Klasse der Homogenisierungsverfahren gehört und die Materialgrenzflächen in finiten Elementen durch die Definition eines repräsentativen, homogenisierten Wirkungsquerschnittsdatensatz behandelt. Im Gegensatz zum oben erwähnten Homogenisierungsansatz, bei dem ein effektiver Wirkungsquerschnittsdatensatz partiell kontrollierter finiter Elemente durch Fluss-Volumen-Gewichtung bestimmt wird, beruht das neue Verfahren darauf, Terme, die in der Variationsform der Transport- oder Diffusionsgleichung über gemischte Materialelemente auftreten, exakt zu integrieren. Dies wird erreicht, indem stetig variierende Wirkungsquerschnitte in Elementen definiert werden, die Materialgrenzen überspannen. Diese stückweise stetig variierenden Wirkungsquerschnitte werden durch Projektion der stückweise definierten Wirkungsquerschnitte auf die Menge der Legendre-Polynome bis zu einer endlichen Ordnung errechnet.

5.4.2 Finite-Elemente-Ansatz in FENNECS

Ausgangspunkt für die folgenden Überlegungen ist die stationäre Diffusionsgleichung der Energiegruppe g :

$$\vec{\nabla} \cdot [D_g(\vec{r}) \vec{\nabla} f_g(\vec{r})] - \sigma_g^{tot}(\vec{r}) f_g(\vec{r}) + s_g(\vec{r}) = 0 \quad (5.17)$$

Darin ist $f_g(\vec{r})$ die räumliche Neutronenflussverteilung, $D_g(\vec{r})$ der Diffusionskoeffizient, $\sigma_g^{tot}(\vec{r})$ der makroskopische totale Wirkungsquerschnitt und

$$s_g(\vec{r}) = \frac{\chi_g}{k_{eff}} \sum_g \nu \sigma_g^{fiss}(\vec{r}) f_g(\vec{r}) + \sum_{g'} \sigma_{gg'}^{scatt}(\vec{r}) f_{g'}(\vec{r}) \quad (5.18)$$

Spalt- und Streuquellterm jeweils für Energiegruppe g , wobei $\nu \sigma_g^{fiss}(\vec{r})$ der Spalt-Produktionsquerschnitt und $\sigma_{gg'}^{scatt}(\vec{r})$ die Matrix der Streuwirkungsquerschnitte ist.

Gemäß /SEU 20/ lautet die schwache Formulierung von Gl. (5.17):

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} d^3r [D_g(\vec{r}) \vec{\nabla} \Phi_i(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla} f_g(\vec{r}) + \sigma_g^{tot}(\vec{r}) \Phi_i(\vec{r}) f_g(\vec{r}) - \Phi_i(\vec{r}) s_g(\vec{r})] \\ = \oint_{\partial\Omega} d^2r D_g(\vec{r}) \Phi_i(\vec{r}) g_n \end{aligned} \quad (5.19)$$

Wobei $\partial\Omega$ den Rand des Problemgebiets Ω bezeichnet und $g_n := \vec{\nabla} f(\vec{r}) \cdot \vec{n}(\vec{r})$ die Neumann-Randbedingung ist. Nach Galerkin sind die Testfunktionen $\Phi_i(\vec{r})$ gleich den Basisfunktionen, nach denen der Neutronenfluss entwickelt wird:

$$f(\vec{r}) = \sum_{j=1}^N f_j \Phi_j(\vec{r}) \quad (5.20)$$

In FENNECS werden die folgenden linearen Basisfunktionen, gegeben durch baryzentrische Koordinaten, verwendet:

$$\phi_1(r, s, t) = r \cdot \frac{1}{2}(1 - t)$$

$$\phi_2(r, s, t) = s \cdot \frac{1}{2}(1 - t)$$

$$\phi_3(r, s, t) = (1 - r - s) \cdot \frac{1}{2}(1 - t)$$

(5.21)

$$\phi_4(r, s, t) = r \cdot \frac{1}{2}(1 + t)$$

$$\phi_5(r, s, t) = s \cdot \frac{1}{2}(1 + t)$$

$$\phi_6(r, s, t) = (1 - r - s) \cdot \frac{1}{2}(1 + t)$$

r , s und t bezeichnen die Koordinaten des in Abb. 5.2 dargestellten prismatischen Finiten Elements im Referenz-Koordinatensystem.

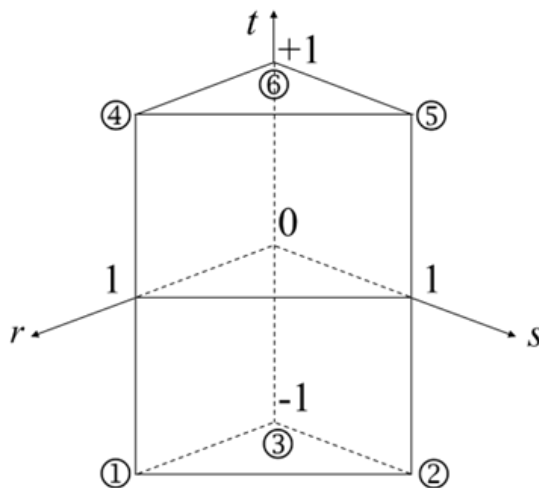


Abb. 5.2 Gerades Dreiecksprisma im Referenzkoordinatensystem. Die Eckpunkte entsprechen den Indizes der Basisfunktionen in Gl. (5.21)

5.4.3 Projektionsbasiertes Steuerstabmodell

Das in FENNECS implementierte projektionsbasierte Steuerstabmodell in Anlehnung an /SCH 19/ ist ausführlich in /HEN 25a/ dokumentiert; nachfolgend werden die wichtigsten Aspekte hervorgehoben, und zwar der besseren Übersicht wegen am Beispiel sich axial bewogender Steuerstäbe (Richtung t in Abb. 5.2). Die wesentliche Idee besteht darin, den eigentlich als konstant angenommenen Wirkungsquerschnitt innerhalb eines teilweise kontrollierten finiten Elements durch einen stetig variierenden zu ersetzen. Um dies zu erreichen, wird für die Basisfunktionen folgender Produktansatz gewählt, dessen Faktoren entweder die radiale oder die axiale Abhängigkeit beschreiben:

$$\phi_i(r, s, t) = g_i(r, s)h_i(t) \quad (5.22)$$

Setzt man die Neutronenflussentwicklung (5.20) in die Diffusionsgleichung (5.19) ein, so sind Terme der Form

$$\int_{\Omega_e} d^3r \sigma(\vec{r}) \phi_i(\vec{r}) \phi_j(\vec{r}) \quad (5.23)$$

mit einem Wirkungsquerschnitt σ und der Form

$$\int_{\Omega_e} d^3r D(\vec{r}) \vec{\nabla} \phi_i(\vec{r}) \vec{\nabla} \phi_j(\vec{r}) \quad (5.24)$$

mit einem Diffusionskoeffizienten D zu berechnen. Da das finite Element partiell kontrolliert sein kann, sind σ und D explizit vom Ort abhängig. Ω_e bezeichnet das räumliche Gebiet des finiten Elements e .

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega_e} d^3r \, \sigma(\vec{r}) \Phi_i(\vec{r}) \Phi_j(\vec{r}) \\
&= \det J \int_0^1 dr \int_0^{1-r} ds \, g_i(r,s) g_j(r,s) \int_{-1}^1 dt \, \sigma(t) h_i(t) h_j(t)
\end{aligned} \tag{5.25}$$

$\det J$ ist die Determinante der Jacobi-Matrix für die Transformation des finiten Elements ins Referenzkoordinatensystem. Im diesem liegt die Materialgrenze infolge partiell eingefahrenen Steuerstabs axial am Ort t_{int} , d. h. für das Integral über dt gilt:

$$\int_{-1}^1 dt \, \sigma(t) h_i(t) h_j(t) = \sigma_1 \int_{-1}^{t_{int}} dt \, h_i(t) h_j(t) + \sigma_2 \int_{t_{int}}^1 dt \, h_i(t) h_j(t) \tag{5.26}$$

Um das Integral auf der linken Seite von Gl. (5.26) auswerten zu können, wird $\sigma(t)$ nach Legendre-Polynomen auf dem Intervall $[-1, 1]$ entwickelt, die eine orthogonale und vollständige Basis bilden. Da es sich bei $h_i(t)$ und $h_j(t)$ um lineare (Basis-)Funktionen handelt, ist der Integrand ein Polynom zweiten Grades; die Entwicklung nach Legendre-Polynomen bricht daher nach dem dritten Glied ab:

$$\sigma(t) = \sum_{l=0}^2 \sigma_l P_l(t) \tag{5.27}$$

$$h_i(t) h_j(t) = \sum_{l=0}^2 \alpha_{ijl} P_l(t)$$

Setzt man Gl. (5.27) in Gl. (5.26) ein, so erhält man:

$$\begin{aligned}
\sum_{l=0}^2 \sigma_l \sum_{m=0}^2 \alpha_{ijm} \int_{-1}^1 dt P_l(t) P_m(t) \\
= \sum_{l=0}^2 \alpha_{ijl} \left(\sigma_1 \int_{-1}^{t_{\text{int}}} dt P_l(t) + \sigma_2 \int_{t_{\text{int}}}^1 dt P_l(t) \right)
\end{aligned} \tag{5.28}$$

Wegen der Orthogonalitätsrelation

$$\int_{-1}^1 dt P_l(t) P_m(t) = \frac{2}{2l+1} \delta_{lm} \tag{5.29}$$

vereinfacht sich Gl. (5.28) zu

$$\sigma_l = \frac{1}{2} (2l+1) \left(\sigma_1 \int_{-1}^{t_{\text{int}}} dt P_l(t) + \sigma_2 \int_{t_{\text{int}}}^1 dt P_l(t) \right) \tag{5.30}$$

Hiermit lässt sich das Integral auf der linken Seite von Gl. (5.26) wie folgt auswerten:

$$\int_{-1}^1 dt \sigma(t) h_i(t) h_j(t) = 2 \sum_{l=0}^2 \frac{1}{2l+1} \sigma_l \alpha_{ijl} \tag{5.31}$$

Mit Hilfe von Gl. (5.31) lässt sich nun Gl. (5.25) berechnen, nachdem man Gl. (5.25) zuvor noch formal wie folgt umgestellt hat:

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega_e} d^3r \, \sigma(\vec{r}) \Phi_i(\vec{r}) \Phi_j(\vec{r}) \\
&= \det J \int_0^1 dr \int_0^{1-r} ds \, g_i(r,s) g_j(r,s) \int_{-1}^1 dt \, h_i(t) h_j(t) \frac{\int_{-1}^1 dt \, \sigma(t) h_i(t) h_j(t)}{\int_{-1}^1 dt \, h_i(t) h_j(t)} \quad (5.32) \\
&= M_{ij} \frac{\int_{-1}^1 dt \, \sigma(t) h_i(t) h_j(t)}{\int_{-1}^1 dt \, h_i(t) h_j(t)} =: M_{ij} C_{ij}
\end{aligned}$$

Darin ist M_{ij} die von FENNECS bereits bekannte Matrix und die Matrix C_{ij} ein Faktor, der die Cusping-Korrektur bewirkt. Nach einigen algebraischen Umformungen erhält man für C_{ij} :

$$C_{ij} = \begin{pmatrix} a & a & a & c & c & c \\ a & a & a & c & c & c \\ a & a & a & c & c & c \\ c & c & c & b & b & b \\ c & c & c & b & b & b \\ c & c & c & b & b & b \end{pmatrix}$$

$$a = \sigma_0 - \frac{1}{2} \sigma_1 + \frac{1}{10} \sigma_2 \quad (5.33)$$

$$b = \sigma_0 + \frac{1}{2} \sigma_1 + \frac{1}{10} \sigma_2$$

$$c = \sigma_0 - \frac{1}{5} \sigma_2$$

Mit Termen der Form (5.24) wird analog verfahren; der interessierte Leser sei hierbei auf Referenz /HEN 25a/ verwiesen. Das gesamte Verfahren wurde in FENNECS sowohl für axial verschiebbare als auch in der radialen Ebene rotierbare Steuertrommeln implementiert. In diesem Fall ist der Wirkungsquerschnitt statt von der axialen Koordinate t nun von den radialen Koordinaten r und s abhängig:

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega_e} d^3r \, \sigma(\vec{r}) \Phi_i(\vec{r}) \Phi_j(\vec{r}) \\
&= \det J \int_0^1 dr \int_0^{1-r} ds \, \sigma(r,s) g_i(r,s) g_j(r,s) \int_{-1}^1 dt \, h_i(t) h_j(t)
\end{aligned} \tag{5.34}$$

Die Vorgehensweise ist analog zum axialen Fall und ist in Referenz /HEN 25a/ im Einzelnen nachzulesen.

5.5 Überprüfung anhand von Testfällen

5.5.1 Verifikation des verbesserten Steuerstabmodells

Verifikationsrechnungen des verbesserten Steuerstabmodells wurden sowohl für axial verschiebbare Steuerstäbe anhand eines DWR-Testfalls als auch für Steuertrommeln anhand eines Mikroreaktor (HPMR) durchgeführt.

5.5.1.1 Verifikation für Steuerstäbe anhand eines DWR-Modellproblems

Beim DWR-Testfall handelt es sich um einen als LMW-Benchmarkproblem (nach den Autoren Langenbuch, Maurer und Werner benannt) bekannten DWR-Reaktorkern, ein dreidimensionales transientes Problem unter Vernachlässigung thermohydraulischer Rückwirkungseffekte /LAN 77/, das in der Literatur Verbreitung gefunden hat zur Verifizierung von dreidimensionalen Neutronenkinetikcodes. Es wird mit zwei Neutronenenergiegruppen und sechs verzögerten Vorläuferfamilien modelliert. Der Aufbau dieses LMW-Reaktorkerns ist in Abb. 5.3 dargestellt. Der Reaktorkern besteht aus zwei Brennelementtypen mit Gitterweiten von je 20 cm, axialen und radialen Reflektoren (Breite ebenfalls 20 cm) sowie zwei Steuerstabgruppen. Die Kernhöhe beträgt 200 cm, d. h. jede der 10 axialen Zonen in Abb. 5.3 ist 20 cm hoch. Die makroskopischen Wirkungsquerschnitte der verschiedenen Materialien sind in /LAN 77/ angegeben.

Um den Cusping-Effekt und dessen Ursache zu verdeutlichen, wurden zunächst stationäre Rechnungen durchgeführt, bei denen die Steuerstabgruppe 1 vom eingefahrenen Zustand (Oberkante des unteren Reflektors, $z = 20$ cm) in einen teilweise ausgefahrenen Zustand ($z = 90$ cm) in Schritten von 10 cm verschoben wird. Das bedeutet, dass

bei jedem zweiten Schritt das Steuerstabende mit der Grenze einer der 10 axialen Zonen zusammenfällt und mit jedem Schritt dazwischen genau mittig in einer dieser Zonen zu liegen kommt, es also partiell kontrollierte Zonen gibt.

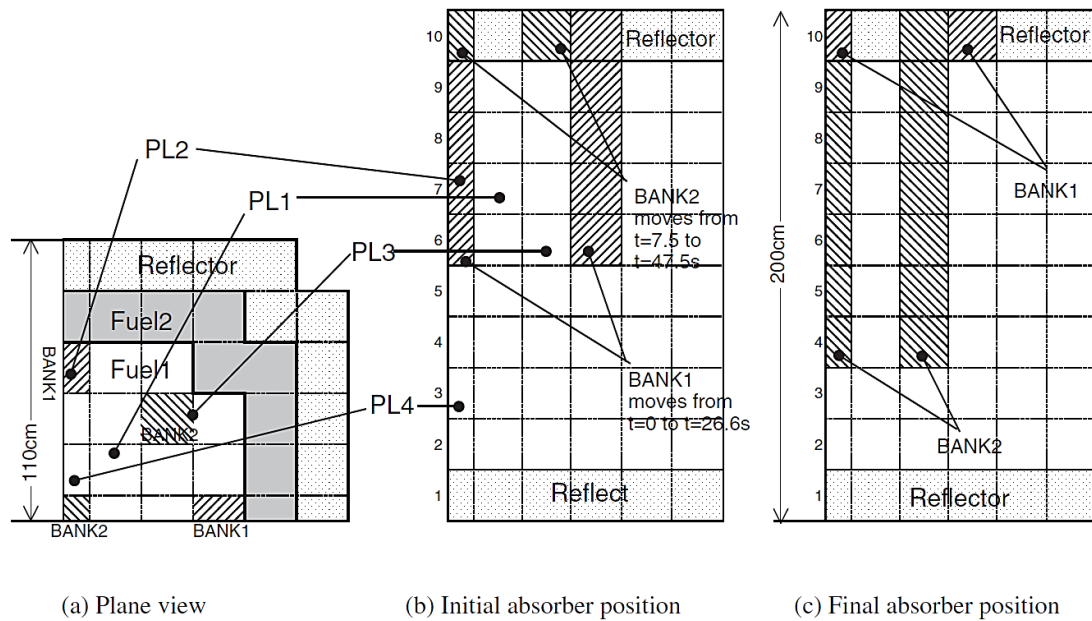


Abb. 5.3 Kernkonfiguration des DWR-Testfalls „LMW“ nach Langenbuch, Maurer und Werner /LAN 77/

Im ersten Schritt wurde mit FENNECS die differentielle Steuerstabwirksamkeit der Steuerstabgruppe 1 berechnet, und zwar mit zwei unterschiedlichen axialen Diskretisierungen, nämlich $\Delta z_1 = 10 \text{ cm}$ (Fall A) und $\Delta z_2 = 20 \text{ cm}$ (Fall B). Die Steuerstabgruppe 1 wurde, beginnend beim eingefahrenen Zustand, nach jeder Rechnung um weitere 10 cm ausgefahren. Hierdurch treten bei Fall A niemals partiell kontrollierte axiale Zonen und somit auch kein Cusping-Effekt auf, wie die in Abb. 5.4 als Referenz bezeichneten blauen Datenpunkte zeigen. Bei Fall B hingegen kommt bei jedem zweiten Schritt das Steuerstabende genau mittig in einer dieser axialen Zonen zu liegen, was bei der Fluss-Volumen-Gewichtung einen ausgeprägten Cusping-Effekt ergibt (rote Punkte in Abb. 5.4).

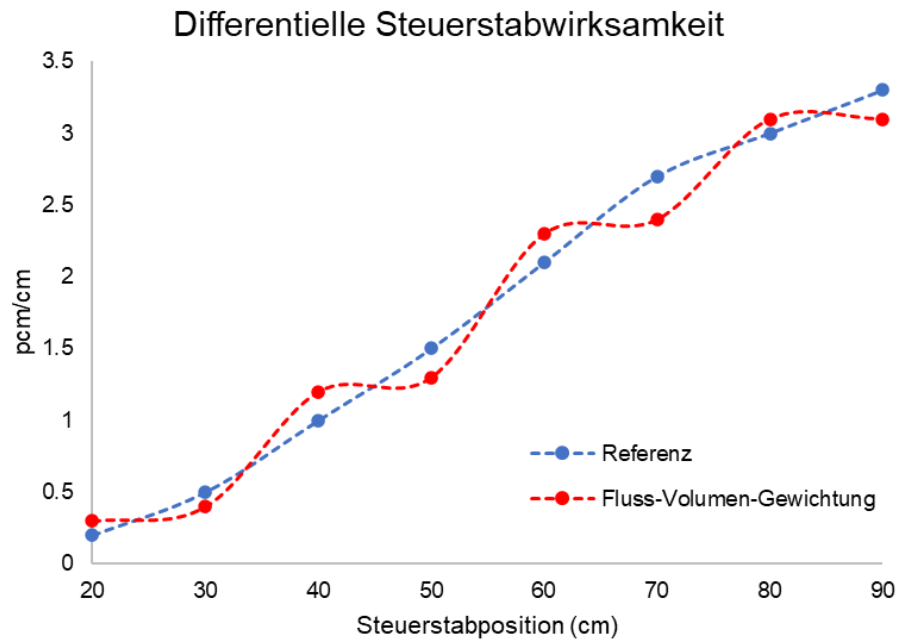


Abb. 5.4 Differentielle Steuerstabwirksamkeit für den LMW-Testfall

Zur Verifizierung des verbesserten Steuerstabmodells wird mittels FENNECS zunächst die Wirksamkeit der Steuerstabgruppe 1 näher anhand von zwei verschiedenen axialen Diskretisierungen untersucht. Die eine stellt mit einer feinen axialen Diskretisierung von 1 cm das Referenzmodell dar. Die andere axiale Diskretisierung beträgt 10 cm. Mit der größeren Modellierung wird die Steuerstabwirksamkeit sowohl mit der Fluss-Volumen-Gewichtung als auch mit der Projektionsmethode berechnet.

Abb. 5.5 zeigt die Kurven der Steuerstabwirksamkeiten, wie sie von FENNECS für die Referenz-Diskretisierung (blaue Punkte) und die gröbere Diskretisierung (orange Punkte) errechnet wurde. Die Deckungsgleichheit beider Ergebnisse verifiziert die Implementierung der Projektionsmethode in FENNECS. Dass die Projektionsmethode auch den Cusping-Effekt behebt, wird durch zusätzliche Darstellung des Ergebnisses, das durch Fluss-Volumen-Gewichtung erhalten wird, und Betrachtung eines Ausschnitts von Abb. 5.5 deutlich. Wie aus Abb. 5.6 hervorgeht, weicht die mittels Fluss-Volumen-Gewichtung berechnete Steuerstabwirksamkeit deutlich von den Ergebnissen ab (Cusping-Effekt), die mittels Projektionsmethode anhand der Referenz- und größeren axialen Diskretisierung erzielt wird. Erwartungsgemäß verschwinden die Abweichungen nur dort, wo das Steuerstabende mit dem Rand eines finiten Elements zusammenfällt (Pfeile in Abb. 5.6).

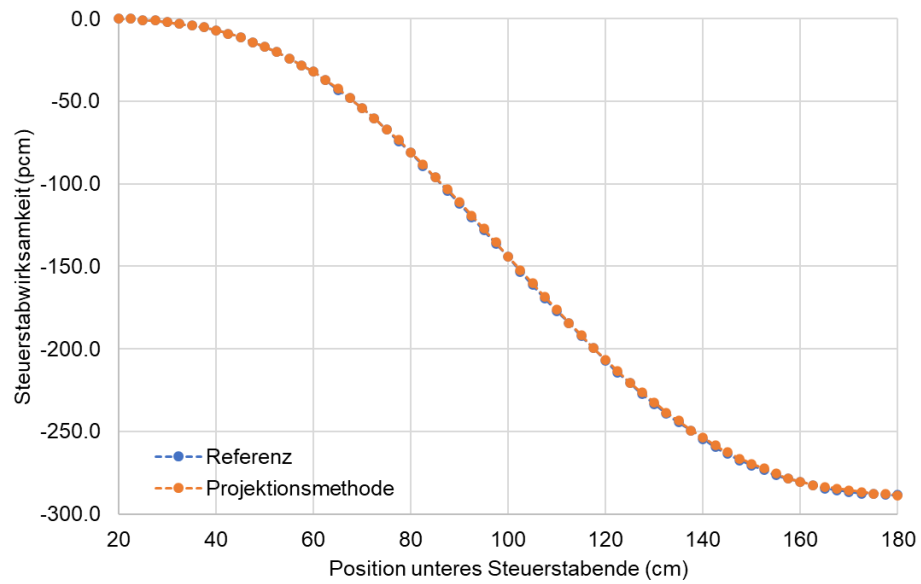


Abb. 5.5 Mit FENNECS berechnete Steuerstabwirksamkeit der Steuerstabgruppe 1

(blau: Referenz, orange: Projektionsmethode).

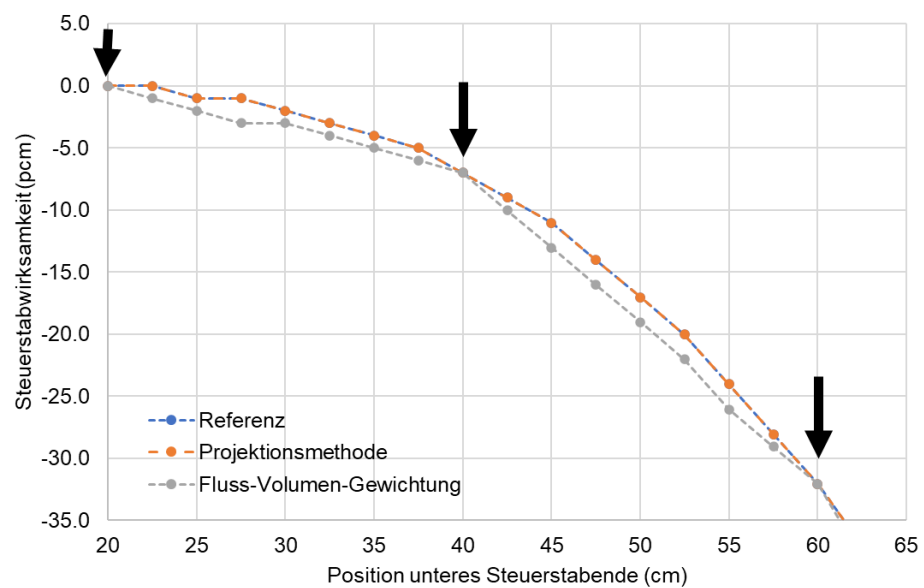


Abb. 5.6 Ausschnitt aus Abb. 5.5 mit zusätzlicher Darstellung der mit Fluss-Volumen-Gewichtung errechneten Wirksamkeit

(grau, siehe Text).

Zur Verifikation der Projektionsmethode bei zeitabhängigen Rechnungen wird eine Transiente untersucht, die durch Ausfahren der Steuerstabgruppe um 80 cm, beginnend bei voll eingefahrener Position ($z = 20$ cm), innerhalb von 8 s initiiert wird. Wie beim

stationären Fall werden auch hier die Referenz- und die gröbere axiale Diskretisierung zusammen mit der Projektionsmethode verwendet.

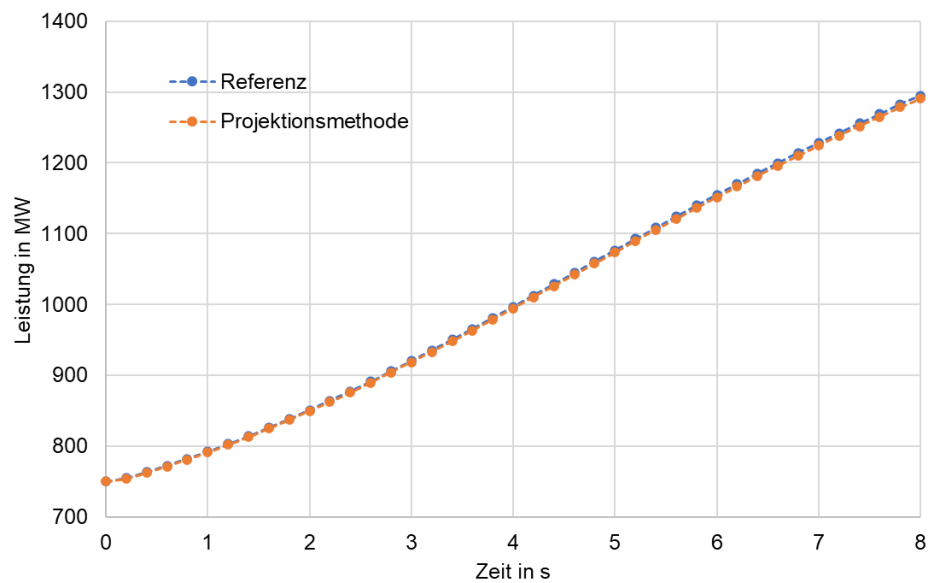


Abb. 5.7 Leistungsverlauf während der Transienten, berechnet mit Referenz- (blau) sowie größerer axialer Diskretisierung und Projektionsmethode (orange)

In Analogie zu Abb. 5.5 zeigt Abb. 5.7, dass die Projektionsmethode auch bei zeitabhängigen Rechnungen korrekt implementiert ist. Zudem ist die Abweichung des Leistungsverlaufs mit der Projektionsmethode geringer als mit Fluss-Volumen-Gewichtung, wie aus Abb. 5.8 hervorgeht.

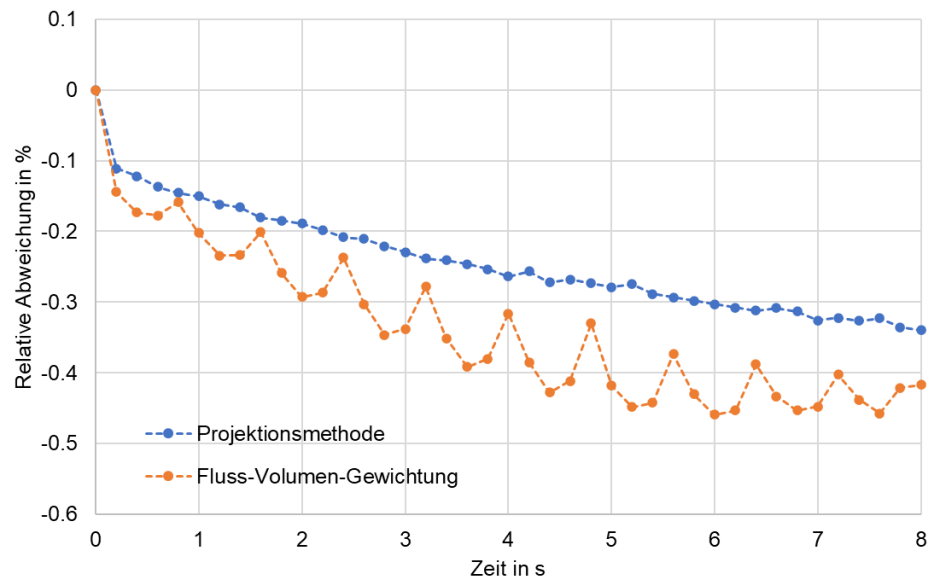


Abb. 5.8 Relative Abweichungen des zeitlichen Leistungsverlaufs von der Referenz für Fluss-Volumen-Gewichtung (orange) und Projektionsmethode (blau)

5.5.1.2 Verifikation für Steuertrommeln anhand des Mikroreaktors HPMR

Beim Mikroreaktor-Testfall handelt es sich um den Heat Pipe Micro Reactor (HPMR). Der Kern des HPMR besteht aus 192 hexagonalen, kaliumgekühlten Wärmerohr-(Heat-Pipe-)Brennstoff-Einheiten, die von sechs Steuertrommeln umgeben sind /HU 19/. Abb. 5.9 zeigt die von PEMTY generierte Geometrievernetzung und Materialverteilung des HPMR in FENNECS /BOU 20/.

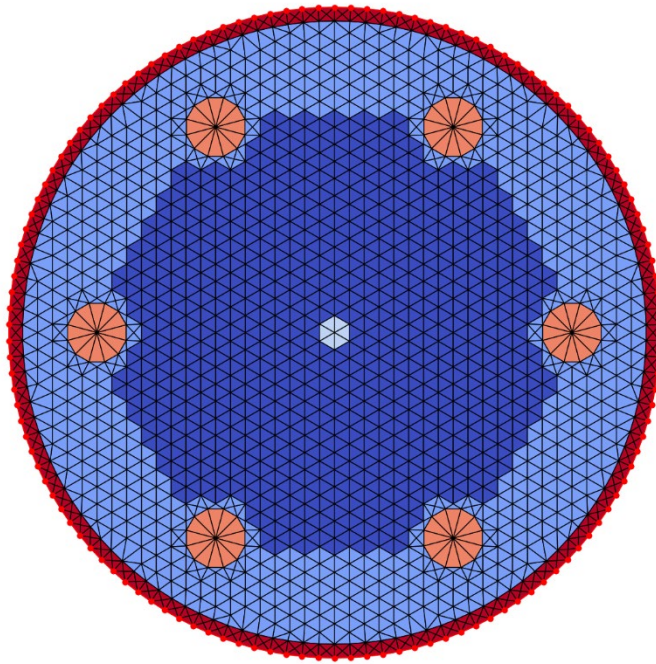


Abb. 5.9 Modell des Mikroreaktors HPMR in FENNECS /BOU 20/

Zunächst wurde mit FENNECS der Multiplikationsfaktor des HPMR in Abhängigkeit des Drehwinkels der Steuertrommeln ermittelt. Dabei wurde der Drehwinkel schrittweise immer so weit geändert, dass die Begrenzung der Absorberzone der Steuertrommeln stets mit der Begrenzung eines finiten Elements zusammenfällt, es also keine partiell kontrollierten finiten Elemente gibt. Entsprechend fein muss die Diskretisierung der Steuertrommeln sein, in diesem Fall in 360 finite Elemente in der radialen Ebene bei einer Drehschrittweite von 1° . Wie schon im Fall der Steuerstäbe kommt es auf diese Weise nicht zu einem Cusping-Effekt, wie aus Abb. 5.10 ersichtlich ist.

Bei zwei weiteren Rechnungen mit FENNECS, die die in Abb. 5.9 gezeigte Diskretisierung der Steuertrommeln zeigt, kommt es bei der Drehwinkelschrittweite der Steuertrommeln von 1° zu partiell kontrollierten finiten Elementen. Die eine Rechnung verwendet die Volumen-Gewichtung, die andere die neue Projektionsmethode. In Abb. 5.11 ist die relative Abweichung des drehwinkelabhängigen Multiplikationsfaktors von der Referenzlösung in Abb. 5.10 sowohl für die Volumen-Gewichtung als auch für die neue Projektionsmethode dargestellt. Offensichtlich liefert die Projektionsmethode deutlich geringere Abweichungen, während die Volumen-Gewichtung einen deutlichen Cusping-Effekt aufweist.

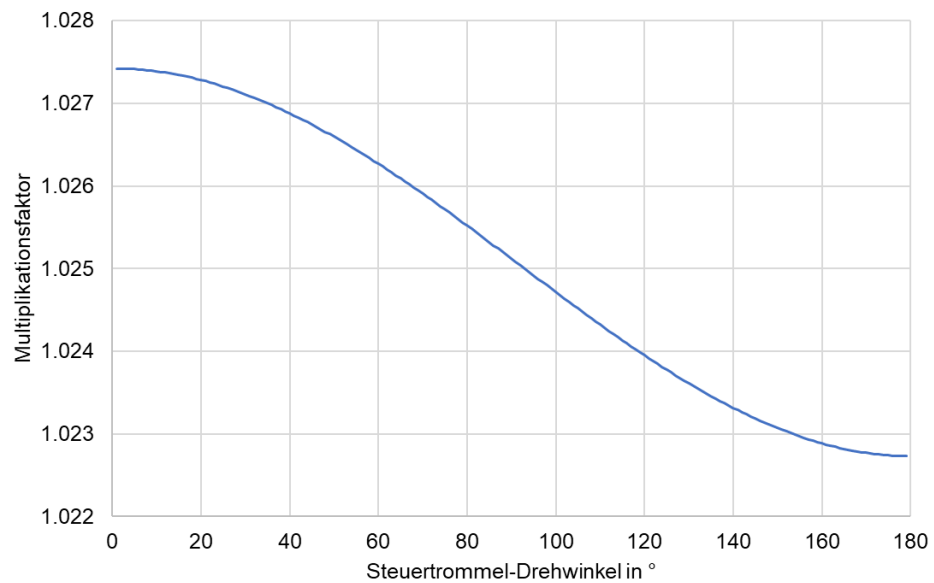


Abb. 5.10 Referenzlösung für den Multiplikationsfaktor als Funktion des Drehwinkels der Steuertrommeln

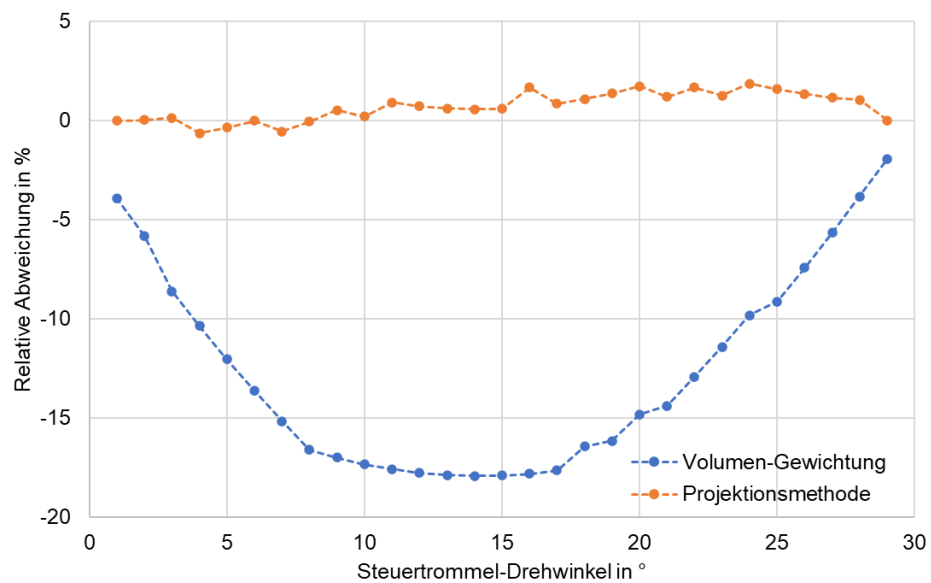


Abb. 5.11 Relative Abweichungen des Multiplikationsfaktors der Steuertrommeln, berechnet mit Volumen-Gewichtung (blau) und Projektionsmethode (orange), von der Referenzlösung

5.5.2 Überprüfung der Nachzerfallsleistungsentwicklung

Zur Verifikation, der in FENNECS implementierten Simulation der Nachzerfallsleistung, wird der zeitabhängige Betrieb des oben beschriebenen LMW-Reaktorkerns zunächst

stationär bei einer thermischen Leistung von 750 MW untersucht. Die Neutronik wird mit der Diffusionsgleichung unter Verwendung von zwei Energiegruppen modelliert, zusätzlich werden sechs verzögerte Neutronengruppen sowie sechs Nachzerfallswärmegruppen berücksichtigt. Die Transiente wird durch eine zeitlich gestaffelte, partielle Einfahrt von zwei Steuerstabbänken eingeleitet, wodurch die Reaktivität kontinuierlich reduziert wird. Das Szenario beschreibt einen Reaktorabschaltung, indem alle Steuerstäbe eingefahren wurden.

Infolge der fortschreitenden Steuerstabeinfahrt nimmt die fissionsgetriebene Leistung kontinuierlich ab und geht im weiteren Verlauf der Transiente praktisch gegen null. Die Gesamtleistung wird zunehmend durch die Nachzerfallswärme bestimmt, die aus dem zuvor aufgebauten Inventar der Spaltprodukte resultiert. Der Verlauf der Gesamtleistung und der Nachzerfallswärme ist in Abb. 5.12 dargestellt. Im stationären Ausgangszustand beträgt die Nachzerfallsleistung exakt dem Wert, der durch die Summe der verwendeten Zerfallswärmeanteile $\alpha = \sum_{n=1}^N \alpha_n$ gegeben ist und im vorliegenden Fall etwa 0,07016 (entsprechend 7,016 %) beträgt. Im weiteren Verlauf nimmt die Nachzerfallswärme infolge des radioaktiven Zerfalls der Spaltprodukte langsam ab. Die zeitlichen Verläufe von Gesamt- und Nachzerfallsleistung sind physikalisch plausibel, insbesondere nähert sich die Gesamtleistung P_{tot} mit fortschreitender Zeit immer weiter der Nachzerfallsleistung P_{decay} an, wobei stets $P_{\text{decay}} < P_{\text{tot}}$ gilt.

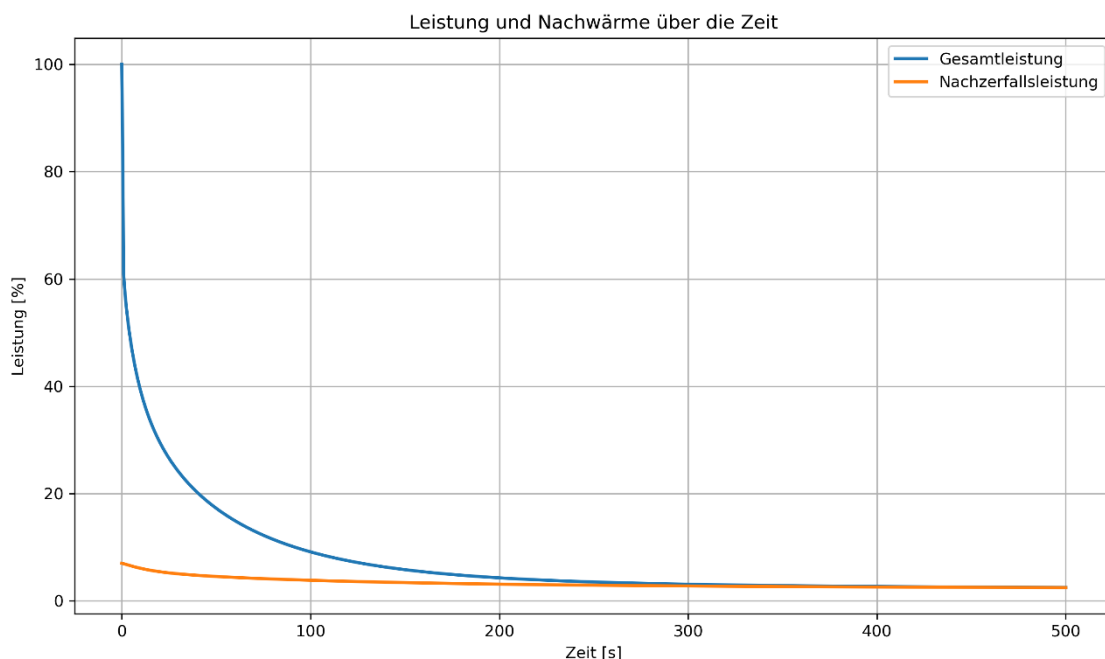


Abb. 5.12 LMW-Reaktor, auslegungsbegrenzender Betriebsstörfall ohne SCRAM

6 Weiterentwicklung des Vernetzungswerkzeugs PEMTY (Arbeitspaket 4)

6.1 Anpassungen gemäß spezifischen MMR- und SMR-Anforderungen

Mikro- und Small-Modular-Reaktoren (MMR/SMR) weisen im Vergleich zu konventionellen Reaktoren stärker segmentierte und dichter gepackte Kernkonfigurationen auf - mit zahlreichen Heat Pipes, rotierenden Control Drums, ringförmigen Reflektorzonen und heterogenen Materialbereichen. Klassische, starre Gitter (z. B. rein hexagonal) stoßen hier schnell an Grenzen: Geometrische Details lassen sich nur mit hohem manuellem Aufwand und vielen Einzelelementen abbilden, was die Modellkomplexität, den Rechenaufwand und die Fehleranfälligkeit erhöht.

Die implementierte Constrained Delaunay-Triangulation (siehe Abschnitt 6.1.1) sowie die erweiterten Konzepte für nestedPolygon, polygonSet und annulusPolygon (siehe Abschnitt 6.1.2) adressieren diese Lücke: Sie erlauben hierarchische, rekursiv geschachtelte sowie ring-/sektorbasierte Geometrien mit konsistenter Vernetzung, reduzieren die Zahl der Objekte deutlich und erzeugen robuste, gleichmäßige Netze, auch bei nicht-konvexen Formen und Polygonen mit Löchern. Für die Kopplung FENNECS/ATHLET bedeutet dies kürzere Laufzeiten bei gleichbleibender physikalischer Qualität sowie eine stabilere Konvergenz.

6.1.1 Implementierung der Delaunay-Vernetzungs-Funktionalität für Polygone in PEMTY

Die Delaunay-Triangulation /BER 08/ ist ein Verfahren zur Zerlegung einer Punktmenge in nicht überlappende Dreiecke. Sie bildet das Gegenstück zur Voronoi-Tessellation und zeichnet sich durch eine charakteristische geometrische Eigenschaft aus: Für jedes Dreieck der Delaunay-Triangulation gilt, dass kein anderer Punkt der Punktmenge innerhalb des Umkreises dieses Dreiecks liegt. Dies führt zu Dreiecken mit möglichst großen Innenwinkeln und somit zu qualitativ hochwertigen Netzen.

PEMTY wurde um die Erzeugung von Polygon-Triangulationen mittels Constrained Delaunay Triangulation (CDT) /SLO 93/ erweitert. Die Constrained-Delaunay-Variante erlaubt zusätzlich die Einhaltung vorgegebener Randkanten, damit die Polygone mit schwierigen Randverläufen, nicht-konvexe Gebiete und Polygone mit Löchern fehlerfrei

trianguliert werden können. Die Implementierung erfolgte über die Bibliothek *condeltri* (<https://pypi.org/project/condeltri/>), die Python-Bindings für die C++-Implementierung CDT (<https://github.com/artem-ogre/CDT>) bereitstellt. Beide Bibliotheken sind unter der MPL-2.0-Lizenz verfügbar. Die Polygonkanten werden als Zwangsbedingungen für die Triangulation berücksichtigt. Zur Erzeugung der zusätzlichen Stützpunkte im Inneren des Polygons wurde die Poisson-Disk-Sampling Methode [BRI 07] implementiert. Diese dient als Grundlage für die Punktverteilung, die anschließend in die CDT überführt wird. In PEMTY stehen zwei Varianten der Delaunay-Vernetzung zur Verfügung:

- Reguläre Delaunay-Vernetzung
- Adaptive Delaunay-Vernetzung

Die Meshgröße (*meshSize*) für die Delaunay-Triangulation kann vom Benutzer vorgegeben werden. Bei regulärer Vernetzung wird die angegebene *meshSize* als maximal zulässiger Punktabstand entlang der Polygongrenzen und Innerhalb des Polygons verwendet. Das Poisson-Disk-Sampling erzeugt dabei eine gleichmäßige Punktdichte über die gesamte Fläche. Der Mindestabstand zwischen Punkten bleibt konstant, unabhängig vom Abstand zur Polygongrenze. Dadurch entsteht ein homogenes Punktfeld, das zu einer gleichmäßig aufgelösten Delaunay-Triangulation führt.

Bei adaptiver Vernetzung passt das Poisson-Disk-Sampling den lokalen Punktabstand dynamisch an die Entfernung zur Polygongrenze oder vorhandenen Löchern an: für randnahe Bereiche werden kleinere Punktabstände genommen ($\text{minOffset} = \text{meshSize} / 2$) und damit eine erhöhte Punktdichte erstellt, für die Innenbereiche verwendet man größere Punktabstände und reduziert damit die Punktzahl und den Rechenaufwand. Das Ziel dieser Methode ist eine feinere Auflösung in Grenznähe und eine effiziente, gröber aufgelöste Vernetzung-Struktur im inneren Polygonbereich.

Falls die Meshgröße nicht gesetzt ist, wird sie automatisch als Hälfte der Länge der kleinsten Polygonkante bestimmt. Dies stellt sicher, dass mindestens eine sinnvolle innere Punktgenerierung möglich ist. Wenn die angegebene *meshSize* größer als die charakteristische Polygonbreite ist, werden beim Poisson-Disk-Sampling keine inneren Punkte erzeugt. In diesem Fall werden ausschließlich die Randpunkte des Polygons für die Constrained Delaunay Triangulation verwendet und das resultierende Mesh besteht dann nur aus einer Triangulation des Randpolygons ohne zusätzliche Innenauflösung.

6.1.2 **Erweiterte Polygonkonzepte (nestedPolygon, polygonSet, annulusPolygon) und Effizienzoptimierungen**

Die Funktionalität für geschachtelte Polygone (nestedPolygon) wurde erweitert, sodass ein äußeres Polygon nicht nur ein einzelnes inneres Polygon, sondern mehrere innere Polygone enthalten kann. Die beinhaltet einfache Polygone, Polygon-Sets (polygonSet), die mehrere Einzelpolygone zu einem zusammenhängenden Objekt zusammenfassen, sowie rekursiv geschachtelte Polygone (nestedPolygon). Derzeit ist diese Funktion nur verfügbar, wenn das äußere Polygon mithilfe des regulären oder adaptiven Delaunay-Meshings vernetzt wird.

Für geschachtelte Polygone und Polygon-Sets (polygonSet) wurde zudem das Mapping für Steuerstabbänke (crBank) implementiert, wodurch jede Bank-ID einer Liste von Polygonen oder einem einzelnen Polygon zugeordnet werden können.

Das AnnulusPolygon-Typ, der einen ringförmigen Bereich um einen frei wählbaren Mittelpunkt beschreibt, wurde um ein *layout* erweitert, das eine sektorielle Belegung des Rings als Liste von Sektoren ermöglicht. Jeder Eintrag verweist auf Assembly-Nummern, die in der globalen assemblies-Liste definiert sind. Auf diese Weise wird die ringförmige Zone in Sektoren unterteilt und jeweils einer Assembly zugeordnet, beispielweise für die Modellierung der Steuerdrum-Sektoren.

Zur Steigerung der Recheneffizienz und zur Reduzierung des Aufwands bei der Vernetzung komplexer Geometrien wurden verschiedene Optimierungsstrategien implementiert. Für die Kollinearitätsprüfung wurde beispielsweise das Kreuzprodukt verwendet, da es numerisch stabiler ist als die Steigungsberechnung und keine Sonderfälle für vertikale oder horizontale Linien erfordert. Redundante Geometrieprüfungen wurden entfernt, um unnötige Berechnungen bei wiederholten Auswertungen zu vermeiden. Eingebaute Python-Funktionen wurden bevorzugt gegenüber NumPy-Äquivalenten für skalare Operationen eingesetzt, um den Funktionsaufruf-Overhead zu minimieren. Darüber hinaus wurden einfache Hilfsmethoden direkt in den Code integriert, anstatt sie als separate Funktionen aufzurufen, wodurch Rechenzeit eingespart und die Codeklarheit verbessert wurden. Diese Maßnahmen führten insgesamt zu einer höheren Ausführungsgeschwindigkeit und verbesserten die Wartbarkeit der Software. Zusätzlich wurde die Betriebsumgebung von Debian 10 auf Debian 12 aktualisiert, da Debian 10 das End-of-Lifecycle erreicht hat. Dies gewährleistet die fortlaufende Bereitstellung von Sicherheitsupdates sowie die Kompatibilität mit aktuellen Bibliotheken.

6.2 Anpassungen aufgrund der SP₃-Methode

Für die Berechnung eines ganzen Reaktorkerns benötigt FENNECS parametrisierte makroskopische Wirkungsquerschnittsbibliotheken, die üblicherweise mit hochauflösenden Transportrechnungen, z. B. unter Verwendung des Monte-Carlo-Codes Serpent oder deterministischer Zell-Abbrand-Codes wie HELIOS /CAS 91/, NEWT oder Polaris, letztere beide in den Programmpaket SCALE /WIE 24/, erzeugt werden. Diese Bibliotheken ermöglichen effiziente stationäre sowie zeitabhängige Simulationen mit FENNECS bzw. ATHLET-FENNECS. Die Erfahrung zeigt jedoch, dass ihre direkte Verwendung in Kernrechnungen zu relevanten Abweichungen bei der Berechnung des Eigenwertes (Multiplikationsfaktor k_{eff}) sowie der Leistungsverteilung insbesondere für schnelle Reaktoren führen kann.

Ursache hierfür ist der Homogenisierungsprozess bei der Erzeugung der makroskopischen Wirkungsquerschnitte, bei dem die räumliche Korrelation zwischen Neutronenfluss und Materialeigenschaften nicht vollständig erhalten bleibt und damit die Reaktionsrate verfälscht. Auch die Annahme reflektierender oder periodischer Randbedingungen spiegelt die tatsächliche Umgebung eines Brennelements im Reaktorkern nicht korrekt wider, was zu Abweichungen in den Reaktionsraten führen kann. Zur Reduktion dieser Homogenisierungsfehler wird beispielsweise die Superhomogenisierungsmethode (SPH) eingesetzt. Dabei werden die makroskopischen Wirkungsquerschnitte mit Korrekturfaktoren versehen, sodass die Reaktionsraten zwischen einer hochaufgelösten Referenzlösung und dem homogenisierten Modell übereinstimmen. Der zugrunde liegende Ansatz wurde von /HÉB 93/ entwickelt und in jüngerer Zeit weiter verfeinert (/LAB 19/). Untersuchungen bei der GRS haben gezeigt, dass die SPH-Methode insbesondere für Anwendungen in schnellen Reaktoren von großer Bedeutung ist, da dort ausgeprägte Heterogenitäten und spektrale Effekte zu erhöhten Homogenisierungsfehlern führen.

Die SPH-Methode ist ein iteratives Verfahren und ist bereits im Geometrievernetzungs-werkzeug PEMTY implementiert. Frühere Arbeiten haben gezeigt, dass für Anwendungen in schnellen Reaktoren SPH-Korrekturen makroskopischer Wirkungsquerschnitte erforderlich sind – insbesondere in stark absorbierenden Bereichen wie Steuerstäben, um eine zufriedenstellende Übereinstimmung mit Referenzlösungen (typischerweise aus Monte-Carlo-Rechnungen mit Serpent) zu erzielen. Insbesondere die genaue Vorhersage des effektiven Multiplikationsfaktors k_{eff} sowie der Leistungsverteilung hängt maßgeblich von der Verwendung SPH-korrigierter Wirkungsquerschnitte ab.

Die bisherige Implementierung der SPH-Methode in PEMTY war auf die Diffusionsnäherung von FENNECS beschränkt, da die SP_3 -Transportmethode zunächst noch nicht zur Verfügung stand. Erste Untersuchungen zur Anwendung der bestehenden SPH-Implementierung in Kombination mit der SP_3 -Methode von FENNECS wurden durchgeführt. Dabei traten deutliche Konvergenzprobleme auf, die in einzelnen Fällen zum Abbruch der Rechnung führten. Diese Ergebnisse verdeutlichten die Einschränkungen des bestehenden Ansatzes und zeigten den Bedarf einer Weiterentwicklung der SPH-Implementierung, um eine robuste und konsistente Anwendung sowohl für die Diffusions- als auch die SP_3 -Methode zu ermöglichen.

Die Erweiterung der SPH-Implementierung in PEMTY im Hinblick auf die Anwendung mit dem SP_3 -Löser erfordert zunächst eine Anpassung der zugrunde liegenden Datenbasis. Während der Diffusionslöser ausschließlich die isotrope Streumatrix (P_0) verwendet, benötigt der SP_3 -Löser zusätzlich Streumatrizen höherer Legendre-Entwicklungsordnungen (P_1, P_2, P_3).

Vor diesem Hintergrund konzentriert sich ein erster Entwicklungsschritt auf die Erweiterung von PEMTY zur Verarbeitung dieser zusätzlichen makroskopischen Wirkungsquerschnitte. Die entsprechenden Streumatrizen höherer Ordnungen stehen bereits in den von Serpent erzeugten Ausgabedateien zur Verfügung und müssen in die bestehende Datenstruktur integriert werden.

Aufgrund der modularen Struktur von PEMTY konnten die erforderlichen Anpassungen gezielt in den entsprechenden Modulen umgesetzt werden. Dies umfasst das Einlesen der Streumatrizen höherer Ordnungen aus den Serpent-Ausgabedaten, deren Speicherung in den internen Datenstrukturen sowie die anschließende Weitergabe im NEMTAB-Format zur Verwendung in FENNECS. Damit wird die Grundlage geschaffen, sowohl die Transportrechnung mit der SP_3 -Methode als auch die darauf aufbauende Weiterentwicklung der SPH-Methode konsistent zu unterstützen.

Zu Test- und Validierungszwecken wurde parallel eine neue Einlese-Schnittstelle entwickelt. Diese ermöglichen es PEMTY, Wirkungsquerschnittsdaten nicht nur aus Serpent-Ausgaben, sondern auch aus Lattice-Codes wie HELIOS, NEWT und Polaris einzulesen. Diese Erweiterung bietet zusätzliche Flexibilität für Benchmarking- und Validierungsuntersuchungen unter Verwendung unterschiedlicher Transportcodes und Datenbereitstellungswege.

Im Rahmen dieses Eigenforschungsvorhabens besteht die Zielsetzung darin, die bestehende SPH-Implementierung in PEMTY so zu erweitern, dass sie konsistent in Verbindung mit der SP₃-Methode von FENNECS eingesetzt werden kann. Hierzu ist sowohl eine Anpassung des iterativen SPH-Verfahrens als auch eine Erweiterung der zugrunde liegenden Daten- und Solverstrukturen erforderlich.

Das SPH-Verfahren wird durch den folgenden iterativen Ablauf beschrieben:

- Aufbau eines äquivalenten homogenisierten Modells in FENNECS auf Basis der in PEMTY definierten Geometrie.
- Durchführung einer FENNECS-Rechnung zur Bestimmung der Neutronenflussverteilung in jeder Region.
- Berechnung der SPH-Faktoren in Energiegruppe g gemäß:

$$\mu_g = \frac{\phi_g^{\text{ref}}}{\phi_g^{\text{FENNECS}}}$$

- Skalierung aller makroskopischen Wirkungsquerschnitte in jeder Energiegruppe und Region mit den entsprechenden SPH-Faktoren zur Erzeugung einer aktualisierten Wirkungsquerschnittsbibliothek.
- Erneute Durchführung der FENNECS-Rechnung unter Verwendung der korrigierten Wirkungsquerschnitte.
- Iteration dieses Verfahrens bis zum Erreichen der vom Nutzer vorgegebenen Konvergenzkriterien.

Dieses Vorgehen stellt sicher, dass die Reaktionsraten zwischen Referenz- und homogenisierter Rechnung identisch sind (im Rahmen der Konvergenzkriterien).

Die Einführung der SP₃-Methode in FENNECS erfordert im Vergleich zum Diffusionsansatz zusätzliche physikalische Größen. Insbesondere werden im Rahmen der SP₃-Formulierung zwei zusätzliche diffusionsartige Koeffizienten $D_{0,g}$ und $D_{1,g}$ (siehe Gl. (3.11) und Gl. (3.12)) eingeführt, die aus den Streumatrizen höherer Legendre-Entwicklungsordnung abgeleitet werden und für die Beschreibung anisotroper Transporteffekte notwendig sind.

Diese Koeffizienten müssen konsistent bestimmt, verarbeitet und an FENNECS übergeben werden. Darüber hinaus ist sicherzustellen, dass die SPH-Korrektur auch auf diese erweiterten Größen angewendet wird.

Aus den oben genannten Anforderungen ergab sich ein gezielter Entwicklungsbedarf sowohl in PEMTY als auch in FENNECS. Die im Rahmen dieser Arbeit umgesetzten Erweiterungen lassen sich wie folgt zusammenfassen:

- Erweiterung von PEMTY zur Unterstützung der SP_3 -Methode, einschließlich der Implementierung einer Python-Schnittstelle zur Berechnung der zusätzlichen SP_3 -spezifischen Koeffizienten.
- Konsistente Erweiterung der SPH-Methodik, sodass die SPH-Korrektur auf alle für die SP_3 -Formulierung relevanten Größen angewendet wird.
- Ausbau der Datenverarbeitung in PEMTY, um die Verarbeitung und Weitergabe höhergeordneter Streuinformationen sicherzustellen.
- Anpassung von FENNECS, sodass die zusätzlichen SP_3 -Koeffizienten eingelesen und im Rechenprozess berücksichtigt werden können.

Als erstes Anwendungsbeispiel diene der Advanced-Burner-Reaktor (ABR), ein natriumgekühltes Konzept mit schnellem Neutronenspektrum. An diesem Beispiel wurde bereits zuvor die SPH-Methode erfolgreich eingesetzt, jedoch in Verbindung mit der Diffusionsnäherung von FENNECS. Der ABR wird im Kapitel Verifizierung und Validierung näher beschrieben; der Leser sei daher auf Kapitel 7.3.1 verwiesen.

Tab. 6.1 zeigt die mit FENNECS berechneten Multiplikationsfaktoren für verschiedene Zustände des ABR – Steuerstäbe aus- bzw. eingefahren – im Vergleich mit entsprechenden Referenzergebnissen des Monte-Carlo-Codes Serpent. Bei der Diffusionsnäherung von FENNECS zeigt sich, dass die SPH-Methode insbesondere bei Zuständen mit eingefahrenen Steuerstäben signifikante Verbesserungen der Multiplikationsfaktoren liefert. Dagegen hat die SPH-Methode im Falle ausgefahrener Steuerstäbe wenig Einfluss. Dies bestätigt die obige Feststellung, dass Heterogenitäten besonders große Homogenisierungsfehler hervorrufen, die durch die SPH-Methode erfolgreich korrigiert werden können. Verwendet man die SP_3 -Methode von FENNECS, erhält man bereits ohne Einsatz der SPH-Methode näher an der Monte-Carlo-Referenz liegende Multiplikations-

faktoren, wiederum besonders bei eingefahrenen Steuerstäben. Das liegt daran, dass anisotrope Streueffekte – etwa infolge von Materialheterogenitäten, wie sie durch die Neutronenabsorberstrukturen der Steuerstäbe eingebracht werden, durch die SP₃-Methode besser als mit der Diffusionsmethode erfasst werden können. Setzt man jetzt zusätzlich die weiterentwickelte SPH-Methode ein, führt dies bei eingefahrenen Steuerstäben zu weiteren Verbesserungen, d.h. Annäherungen an die Monte-Carlo-Referenzwerte. Wie Tab. 6.1 zeigt, sind die Abweichungen zu Serpent vernachlässigbar gering.

Tab. 6.1 Multiplikationsfaktoren für verschiedene Zustände des ABR, errechnet mit FENNECS (Diffusion und SP₃) mit und ohne SPH-Methode, im Vergleich mit Serpent-Referenz

ARO: All Rods Out, ARI: All Rods In, bank i: Nur Bank i eingefahren.

Steuerstabbank-Position		ARO	ARI	bank1	bank2
k _{eff} Serpent		1.01667	0.924601	0.959232	0.983284
Abweichung FENNECS gegenüber Serpent in pcm (1/ k _{eff} _Serpent-1/k _{eff} _FENNECS)					
FENNECS Diffusion	ohne SPH- Korrektur	39	-1167	-518	-464
FENNECS Diffusion	mit SPH- Korrektur	112	-295	-198	-179
FENNECS SP ₃	ohne SPH- Korrektur	439	-320	56	158
FENNECS SP ₃	mit SPH- Korrektur	462	-295	-55	-82

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass die in PEMTY bereits vorhandene, auf die Diffusionsapproximation von FENNECS zugeschnittene SPH-Methode erfolgreich für den Einsatz in Verbindung mit der SP₃-Methode von FENNECS weiterentwickelt werden konnte. Das ist ein wichtiger Baustein für die produktive Anwendung von FENNECS, die durch Integration in das GRS-Programmpaket AC² künftig (voraussichtlich in der Version AC² 2027) dessen Anwendern zur Verfügung stehen wird. Als weiterer Anwendungsfall wird derzeit das ebenfalls natriumgekühlte Konzept ESFR betrachtet (nähere Einzelheiten hierzu in Abschnitt 4.1.2).

7 Verifizierung und Validierung (Arbeitspaket 5)

7.1.1 Anwendung der neuen PEMTY-Funktionalitäten am Beispiel des Special Purpose Reactors

Der Special Purpose Reactor (SPR) /STE 17/, auch bekannt als „MegaPower“-Reaktor des Los Alamos National Laboratory (LANL), ist ein Konzept eines schnellen Reaktors mit einer thermischen Leistung von 5 MW. Das System weist eine kompakte Bauform, intrinsisch sichere Betriebsbedingungen und eine vollständig gekapselte Geometrie auf, wodurch es als sofort einsatzfähige Energiequelle für abgelegene Standorte oder kleine Gemeinden geeignet ist. Ein zentrales Merkmal dieses Konzepts ist der Einsatz zahlreicher im Reaktorkern integrierter Wärmeleitungen (Heat Pipes), die eine vollständig passive Wärmeabfuhr ohne primären Kühlkreislauf ermöglichen. Dadurch werden Störfallszenarien wie ein Verlust der erzwungenen Kühlung ausgeschlossen, während die Vielzahl der Heat Pipes gleichzeitig eine hohe Redundanz sicherstellt.

Im Rahmen des vom BMFTR geförderten Projekts MISHA („Modellierung von Innovativen Micro Modular Reactors mit Kalium Heat Pipes mit der nuklearen Rechenkette der GRS“) wurde ein detailliertes Modell des SPR in FENNECS entwickelt. Dafür wurden die Modellierungsfunktionen von PEMTY erweitert, um beliebige Polygone über definierte Eckpunkte abzubilden. Das prismatische Netzwerk innerhalb dieser Polygone sowie die Anbindung an umgebende Strukturen wird dabei automatisch generiert.

Ein besonderer Schwerpunkt lag auf der Modellierung der komplexen polygonalen Geometrie des SPR-Kerns, in dem zahlreiche Heat Pipes, Brennstoffzonen und strukturelle Komponenten in engem räumlichem Zusammenhang abgebildet werden müssen. Durch die Kombination aus Delaunay-Triangulation und dem erweiterten Nested-Polygons-Konzept konnten stabile, gut geformte und numerisch robuste Netze erzeugt werden (siehe Abb. 7.1). Diese Methodik ermöglicht es, stark heterogene und geometrisch anspruchsvolle Kernkonfigurationen präzise und effizient zu vernetzen.

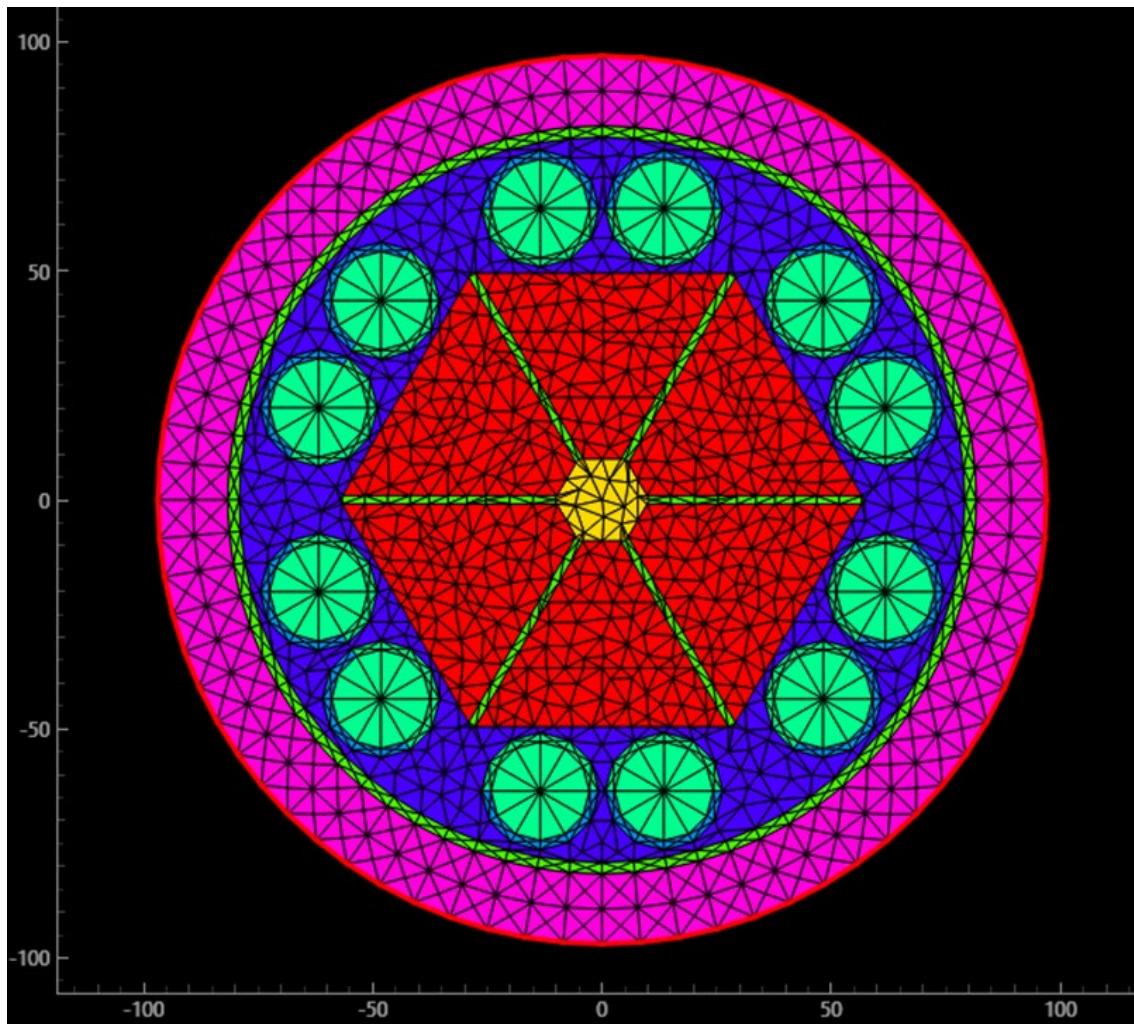


Abb. 7.1 Delaunay-Vernetzung für das SPR-Modell

Im Vergleich zum ursprünglichen hexagonalen Netz konnte die Modellkomplexität durch den Einsatz von Delaunay-Triangulation und Nested-Polygons deutlich reduziert werden. Zentral waren dabei zwei Maßnahmen:

1. NestedPolygon mit mehreren internen Polygon-Sets
Der radiale Reflektor, der zuvor aus insgesamt 53 separaten Objekten bestand, kann nun, als ein einziges Objekt modelliert werden.
2. Annulus-Polygone mit Layouts zur Beschreibung der rotierenden Control Drums
Jede Control Drum wurde ursprünglich als 12 einzelne Objekte abgebildet. Mit dem neuen Layout genügt nun ein Annulus-Polygon pro Control Drum.

Durch diese strukturelle Vereinfachung reduziert sich die Gesamtzahl der Objekte im SPR-Modell von etwa 240 auf 55. Gleichzeitig konnte die Maschengröße erhöht und

über das gesamte Modell deutlich gleichmäßiger gewählt werden, was die Netzqualität weiter verbesserte.

Die Kombination aus geringerer Objektanzahl und homogenerem Netz führte zu erheblichen Effizienzgewinnen in den FENNECS-Standalone-Simulationen. Die Rechenzeit sank um rund 62 % von 6291 s auf 2370 s, ohne signifikanten Einfluss auf die Ergebnisse. Die berechneten Reaktivitätswerte bestätigen das (siehe Tab. 7.1). Für die ATHLET-Kopplung wird aufgrund der geringeren Objektanzahl ebenfalls eine deutliche Reduktion der Rechenzeit erwartet.

Tab. 7.1 Vergleich von SPR-Modellen – mit hexagonaler Vernetzung (alt) und mit Delaunay-Vernetzung und erweitertem NestedPolygon-Konzept

Modell	k-eff	Anzahl der Objekte	Rechenzeit (s)	Anzahl äußerer Iterationen
Bisheriges Modell	1.00154	240	6291	5171
Neues Modell	1.00068	55	2370	3462

7.2 Kompensierte Transienten und Vergleiche mit FRENETIC

Im Folgenden werden Code-zu-Code-Vergleiche mit dem 3D-Neutronenkinetikcode FRENETIC (Fast REactor NEutronics/Thermal hydraulICs) durchgeführt, der am Politecnico Torino entwickelt wird. Es handelt sich um einen Code, der für Zeitdiskretisierung die quasistatische Methode verwendet. Dabei wird ein Separationsansatz für die räumlich-zeitliche Neutronenflussverteilung angenommen, der es erlaubt, die zeitliche Komponente (sogenannte Amplitudenfunktion) mittels Punktkinetik zu behandeln. Damit ist FRENETIC gegenüber dem impliziten Verfahren von FENNECS weniger rechenaufwendig, es können durch diese Näherung aber Abweichungen entstehen, insbesondere bei räumlich sich stark ändernden Flussverteilungen. Für weitergehende Informationen sei der interessierte Leser auf einschlägige Veröffentlichungen verwiesen, etwa /CAR 16/.

Für die nachfolgend beschriebenen Code-zu-Code-Vergleiche zwischen FENNECS und FRENETIC wird eine besondere Klasse von Transienten betrachtet, sogenannten kompensierten Transienten. Sie werden durch eine instantane Änderung der Reaktorkonfiguration durch Materialaustausch ausgelöst, die – konstruktionsbedingt – den Kritikalitätszustand aufrechterhält. Obwohl ein solches Ereignis weder physikalisch realisierbar noch betrieblich sinnvoll ist, stellt es aus Modellierungssicht einen besonders

anspruchsvollen Testfall dar, da es eine abrupte Änderung der dynamischen Reaktivität des Systems aufgrund der Diskrepanz zwischen Neutronenflussverteilung und modifizierter Reaktorkernkonfiguration mit sich bringt.

Statisch betrachtet bleibt der Multiplikationsfaktor – und damit die statische Reaktivität – unverändert. Der plötzliche Materialaustausch verändert jedoch die räumliche Verteilung der Wirkungsquerschnitte und beeinflusst dadurch sowohl die dynamische Reaktivität als auch die Leistungsentwicklung. Infolgedessen entwickeln sich die räumlichen Verteilungen von Neutronenfluss und verzögerten Neutronenvorläufern dynamisch hin zu einem neuen Gleichgewichtszustand, der mit der aktualisierten Reaktorkonfiguration konsistent ist. Dabei werden die radialen und axialen Flussverteilungen im Vergleich zum Ausgangszustand einfach vertauscht.

Diese Klasse von Transienten ist besonders relevant, da sie signifikante räumliche Verzerrungen des Neutronenflusses hervorruft, die mit Punktkinetikmodellen oder quasistatischen Ansätzen u.U. nicht erfasst werden können. In FRENETIC wird daher nicht die quasistatische, sondern die ebenfalls implementierte implizite Methode eingesetzt.

7.2.1 Kompensierte Transiente in einem Reaktor mit thermischem Neutronenspektrum

Der in diesem Abschnitt betrachtete Reaktor mit thermischem Neutronenspektrum wurde aus /CAR 16/ übernommen und ist in Abb. 1 dargestellt. Er besteht aus einem regelmäßigen Gitter von 37 hexagonalen Brennelementen, die in drei Ringen um ein zentrales Brennelement angeordnet sind. Der Gitterabstand beträgt 20 cm, die axiale Ausdehnung des Kerns 80 cm. Der Kern wird durch nur zwei (Spaltstoff-)Materialien repräsentiert, deren Daten in Tab. 7.2 aufgeführt sind. Es wird nur eine Familie verzögerter Neutronenvorläufer berücksichtigt. Axial ist der Kern in zwei gleich große Bereiche unterteilt: Der untere besteht aus Material 1, der obere aus Material 2. In radialer Richtung besteht die eine Hälfte der Brennelemente aus Material 1, die andere Hälfte aus Material 2, mit Ausnahme des zentralen Brennelements, das axial homogen ist und nur aus Material 1 besteht. An allen äußeren Reaktorgrenzen werden Vakuum-Randbedingungen (d. h. kein einfallender Neutronenfluss) angewendet. Abb. 7.3 zeigt die Vernetzung und Materialverteilung in FENNECS. Für einen ersten Vergleich der Codes wird eine relativ grobe und konstante Zeitschrittweite von $\Delta t = 0,01$ s gewählt. Die gesamte Problemzeit der Transiente beträgt 1,5 s und erfordert somit 150 Zeitschritte. Die Problemzeit wird in drei gleich lange Zeitintervalle von jeweils 0,5 s unterteilt. Im ersten Drittel der

transienten Berechnung bleibt der Reaktorzustand unverändert. Im nächsten Zeitschritt, d. h. bei $t = 0,5 \text{ s} + \Delta t$, erfolgt der instantane Materialtausch, d. h. die Materialien 1 und 2 werden gegeneinander vertauscht. Anschließend folgt das zweite Drittel der Transienten ohne weitere Änderungen des Reaktorzustands. Bei $t = 1,0 \text{ s} + \Delta t$ findet ein zweiter Materialtausch statt, wodurch der Reaktor in seinen Ausgangszustand zurückkehrt. Im letzten Drittel der transienten Berechnung treten keine weiteren Änderungen des Reaktorzustands auf. Tab. 7.3 fasst den Ablauf der Ereignisse zusammen; Abb. 7.4 gibt die Ereignisabfolge anschaulich wieder. Der Materialaustausch wurde in FENNECS mit Hilfe des Steuerstabmodells realisiert; vollständiges Ein- bzw. Ausfahren der Steuerstäbe in einem einzigen Zeitschritt bewirkt den Materialaustausch.

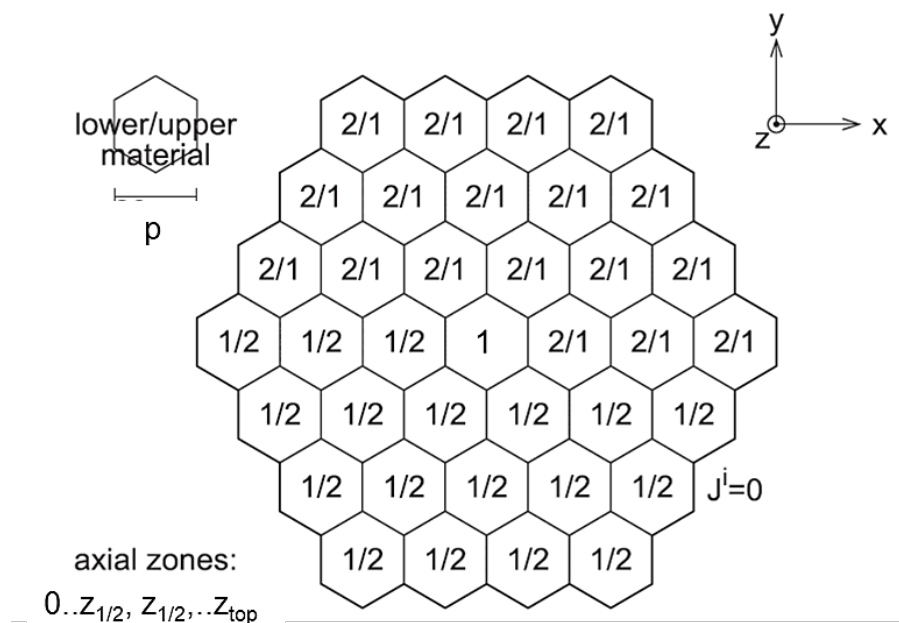


Abb. 7.2 Ausgangskonfiguration des Reaktors

Bezeichnungen der Form u/o mit $u, o \in \{1, 2\}$ geben das Material an, das der unteren (u) und oberen (o) axialen Zone jedes Brennelements zugeordnet ist, mit Ausnahme des zentralen Brennelements, das ausschließlich aus Material 1 besteht.

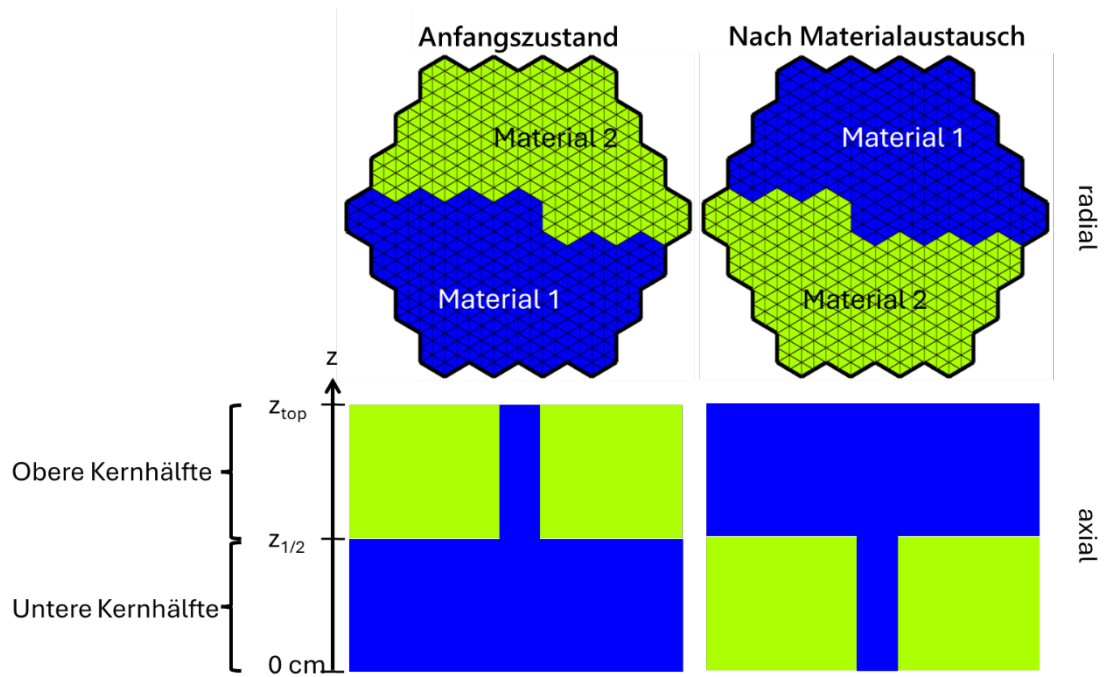


Abb. 7.3 Verteilung von Material 1 und 2 im Anfangszustand sowie nach dem Materialaustausch. Die radiale Darstellung zeigt auch die Geometrievernetzung

Tab. 7.2 Gruppenkonstanten für den Reaktor mit thermischem Spektrum. $\lambda = 0,08$ 1/s, $\beta = 0,0075$. Strich über Ziffer: periodischer Dezimalbruch

Material	Gruppe g	v_g (cm/s)	D_g (cm)	$\nu\Sigma_{fg}$ (1/cm)	χ_g	$\Sigma_{g \rightarrow 1}$ (1/cm)	$\Sigma_{g \rightarrow 1}$ (1/cm)
1	1	$1,0 \cdot 10^7$	1,5	0,01	1,0	$0,196\bar{2}$	0,015
	2	$3,0 \cdot 10^5$	0,5	0,2	0,0	0,0	$0,48\bar{6}$
2	1	$1,0 \cdot 10^7$	1,5	0,05	1,0	$0,31\bar{3}$	0,01
	2	$3,0 \cdot 10^5$	0,5	0,099	0,0	0,0	$0,58\bar{6}$

Tab. 7.3 Ereignisablauf im Reaktor mit thermischem und schnellem Neutronenspektrum

Thermisches Spektrum: $t_1 = 0,5$ s, $t_2 = 1,0$ s, $t_3 = 1,5$ s, $\Delta t = 0,01$ s.

Schnelles Spektrum: $t_1 = 0,001$ s, $t_2 = 0,002$ s, $t_3 = 0,003$ s, $\Delta t = 1,0 \cdot 10^{-7}$ s.

Zeitpunkt bzw. -intervall	Ereignis
$0 \text{ s} \leq t \leq t_1$	Reaktorzustand unverändert
$t_1 + \Delta t$	Instantaner Materialaustausch
$t_1 + \Delta t < t \leq t_2$	Reaktorzustand unverändert
$t_2 + \Delta t$	Instantaner Materialaustausch
$t_2 + \Delta t < t \leq t_3$	Reaktorzustand unverändert

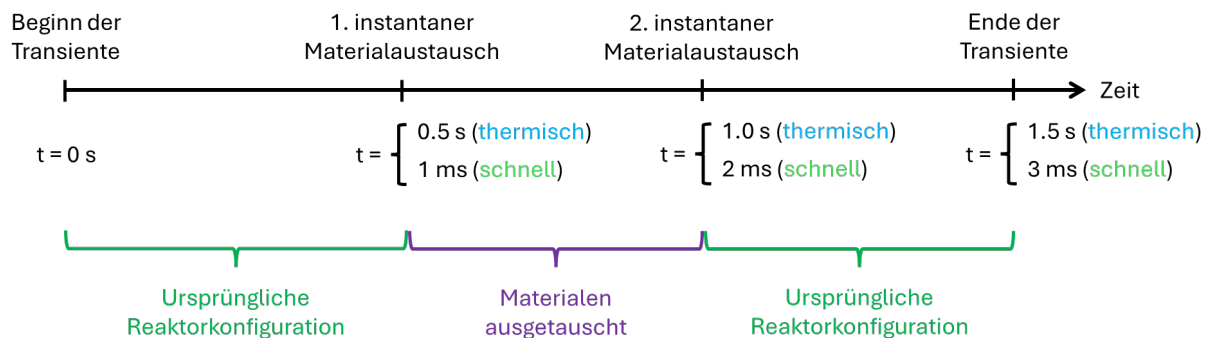


Abb. 7.4 Ereignisabfolge bei den kompensierten Transienten

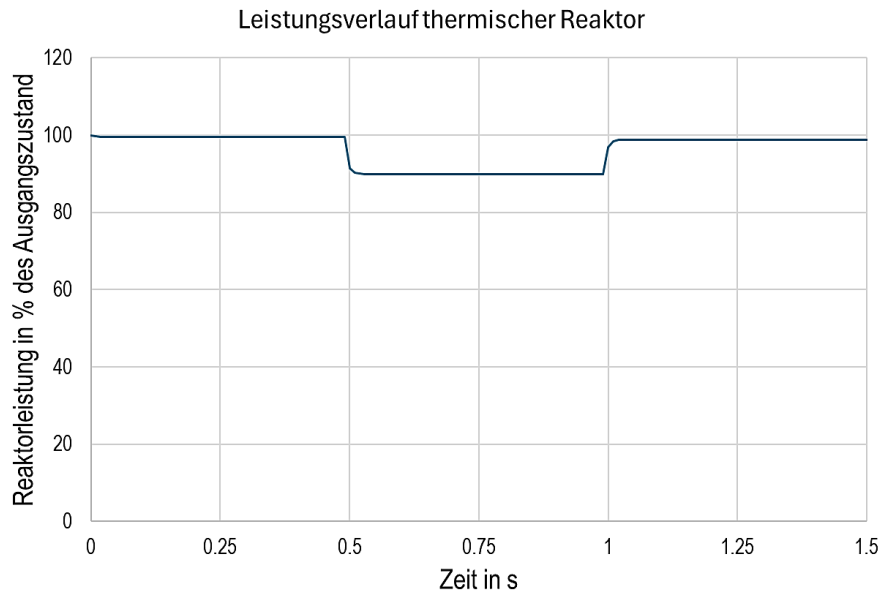


Abb. 7.5 Leistungsverlauf der kompensierten Transiente im thermischen Reaktor

Im Folgenden werden die axialen Neutronenflussprofile an den in Abb. 7.6 markierten vier Brennelementpositionen ausgewertet. Abb. 7.7 zeigt diese Flussprofile für beide Energiegruppen vor dem ersten Materialaustausch. Diese sind in guter Übereinstimmung mit den in /CAR 16/ veröffentlichten Ergebnissen (dort Fig. 4); geringfügige Abweichungen sind darauf zurückzuführen, dass im vorliegenden Kernmodell das zentrale Brennelement axial homogen ist.

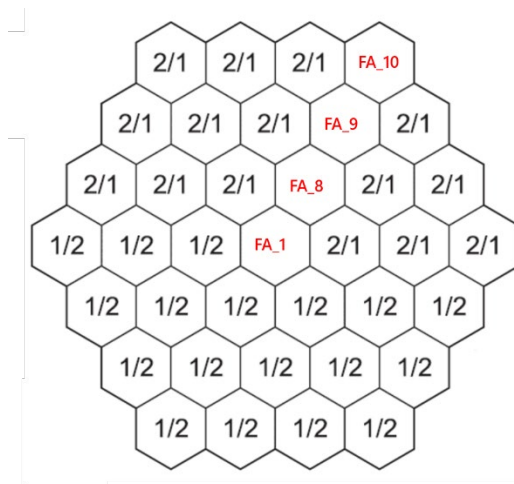


Abb. 7.6 Axiale Flussprofile werden an den rot markierten Brennelementpositionen FA_1, FA_8, FA_9 und FA_10 ausgewertet

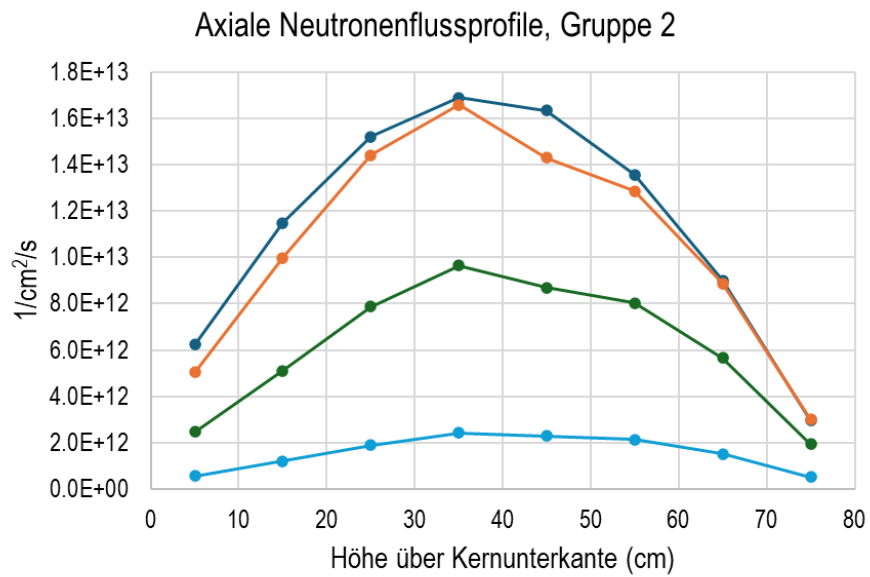
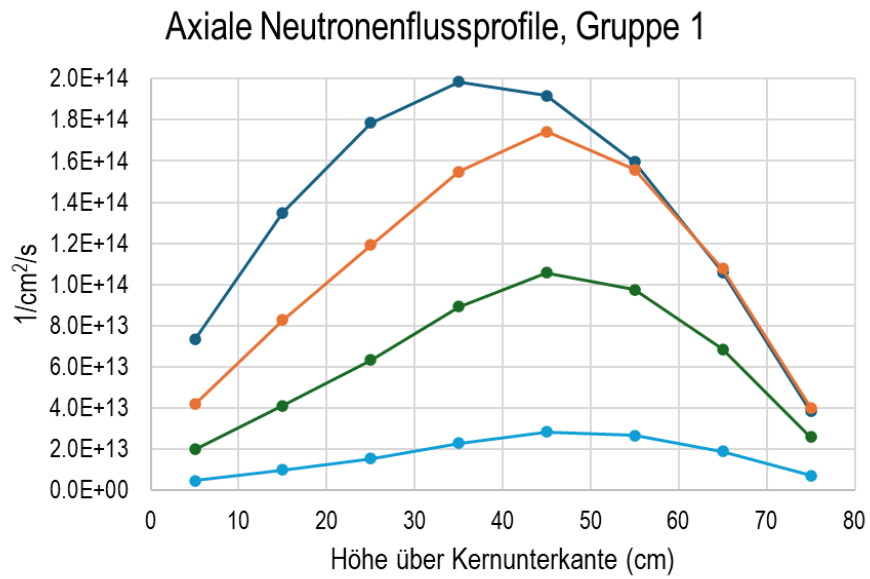


Abb. 7.7 Axiale Neutronenflussprofile vor Beginn der Transiente im thermischen Reaktor. Dunkelblau: FA_1, orange: FA_8, grün: FA_9, hellblau: FA_10

7.2.2 Kompensierte Transiente in einem Reaktor mit schnellem Neutronenspektrum

Die Reaktorkernkonfiguration für die Simulation der kompensierten Transiente mit schnellem Neutronenspektrum entspricht im Wesentlichen der Geometrie in Abb. 7.2. Die beiden Materialien werden durch Wirkungsquerschnittsdaten in 6 Energiegruppen

repräsentiert, die vom Politecnico di Torino (NEMO-Gruppe) bereitgestellt wurden und der inneren bzw. äußeren radialen Brennstoffzone des LEADER-Designs des bleigekühlten Reaktorkonzepts ALFRED entstammen. Um hiermit mit FENNECS einen kritischen Zustand zu erreichen, wurde der Gitterabstand auf 21,51 cm und die axiale Ausdehnung des Kerns auf 100 cm erhöht.

Anders als beim thermischen Fall wurde eine wesentlich kleinere Zeitschrittweite von $\Delta t = 0,1 \mu s$ gewählt. Die gesamte Problemzeit der Transiente beträgt 3 ms und erfordert somit 30 000 Zeitschritte. Der Grund für die Wahl dieser kleineren Zeitschrittweite besteht darin, die Neutronendynamik auflösen zu können, die durch eine Neutronengenerationszeit von etwa $4 \cdot 10^{-7} s$ bestimmt wird – ein für flüssigmetallgekühlte Reaktoren typischer Wert. Die Problemzeit wird in drei gleich lange Zeitintervalle von jeweils 1,0 ms unterteilt. Abb. 7.4 gibt die Ereignisabfolge anschaulich wieder. Der Materialaustausch wurde in FENNECS wiederum mit Hilfe des Steuerstabmodells realisiert; vollständiges Ein- bzw. Ausfahren der Steuerstäbe in einem einzigen Zeitschritt bewirkt den Materialaustausch.

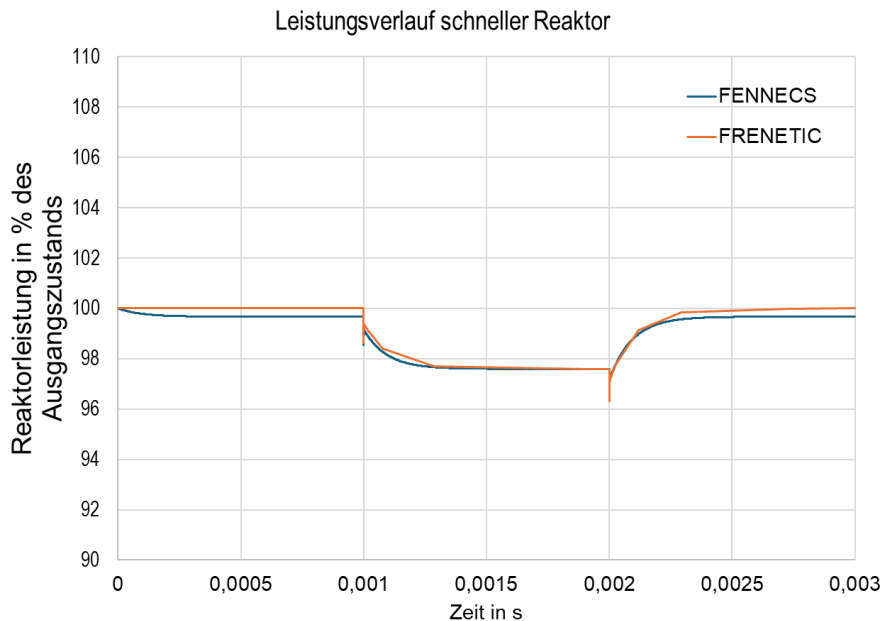


Abb. 7.8 Leistungsverlauf der kompensierten Transiente im schnellen Reaktor

Abb. 7.8 zeigt die zeitliche Entwicklung der Reaktorleistung. Im Gegensatz zum thermischen Fall sieht man aufgrund der kurzen Zeitskala, dass die Neutronendynamik dem schlagartigen Materialaustausch mit zeitlicher Verzögerung folgt. Nach Beginn der Transiente bleibt das Leistungsniveau nicht exakt bei 100 %, sondern fällt geringfügig (etwa

0,3%) ab. Es zeigt sich, dass dieser Abfall mit zunehmender Verfeinerung der räumlichen Diskretisierung geringer wird. Bei Ausschaltung der verzögerten Neutronen bleibt das Leistungsniveau hingegen exakt bei 100%, und zwar unabhängig von der räumlichen Diskretisierung. Eine mögliche Ursache könnte darin liegen, dass die Konzentration der Vorläuferkerne (Precursor) als Mittelwert über dem finiten Element definiert ist, nicht – wie der Neutronenfluss – an den Ecken (Knoten) des finiten Elements. Durch Verfeinerung der Diskretisierung nimmt die Knotendichte zu, wodurch der Mittelungseffekt geringer wird.

Wie beim thermischen Fall, wurden auch wieder die axialen Neutronenflussprofile an den in Abb. 7.6 markierten Brennelementpositionen ausgewertet. Die Resultate vor dem ersten Materialaustausch sind in Abb. 7.9 dargestellt. Da die Profile der Energiegruppen 2 bis 5 qualitativ denen der Gruppe 1 ähnlich sind, werden nur die Profile der Gruppe 1 gezeigt. Das Flussniveau der Gruppe 6 ist absolut gesehen gegenüber den anderen Gruppen zwar am niedrigsten; deren axiale Profile weisen aber eine stärkere Strukturierung auf. Die direkten Vergleiche mit Simulationen von FRENETIC (gestrichelte Linien) zeigen gute Übereinstimmungen. Nach dem ersten Materialaustausch und nachdem sich die Kernleistung auf den neuen, etwas niedrigeren Wert stabilisiert hat, erhält man spiegelbildliche Flussprofile, wie sie Abb. 7.10 zeigt und die der umgekehrten Materialverteilung (besonders deutlich in Gruppe 6) geschuldet ist. Nach dem zweiten Materialaustausch, der zur ursprünglichen Materialverteilung führt, ergeben sich axiale Flussprofile, die jenen des Ausgangszustands entsprechen, wie Abb. 7.11 zu entnehmen ist.

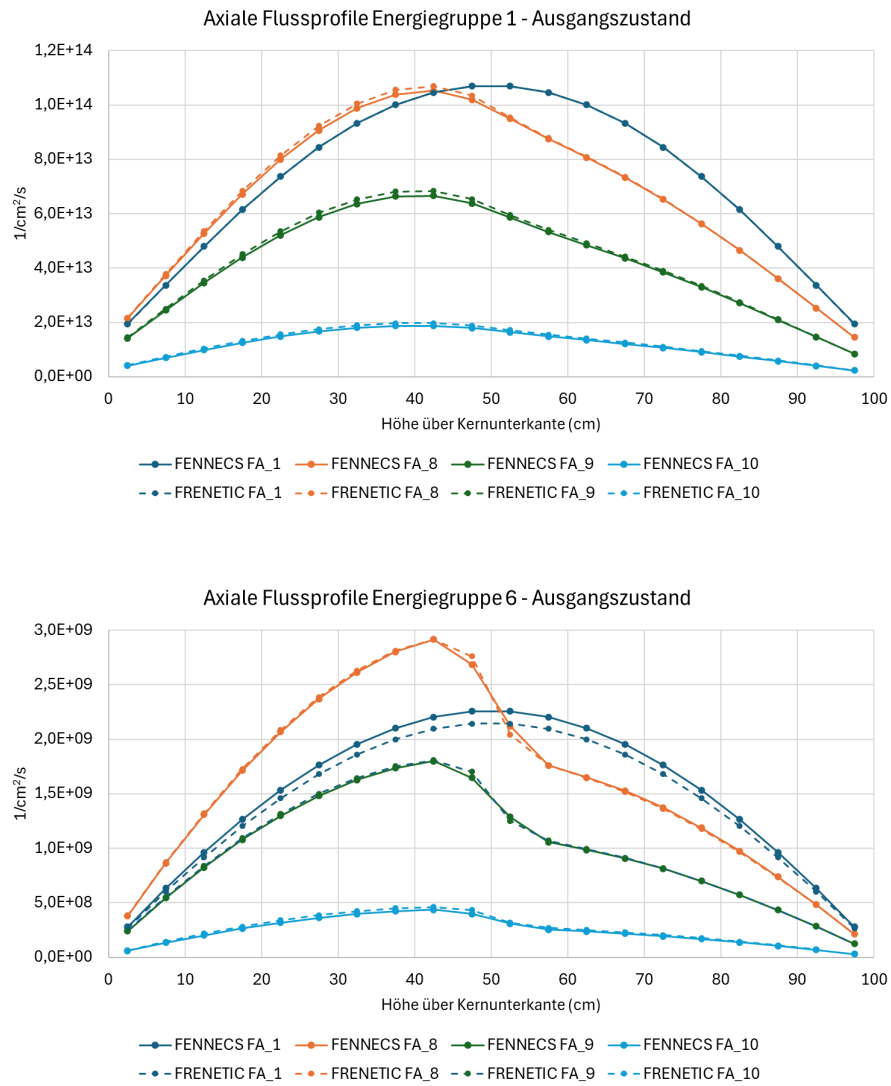


Abb. 7.9 Axiale Neutronenflussprofile der Energiegruppen 1 und 6 von FENNECS und FRENETIC an den vier Brennelementpositionen im Ausgangszustand

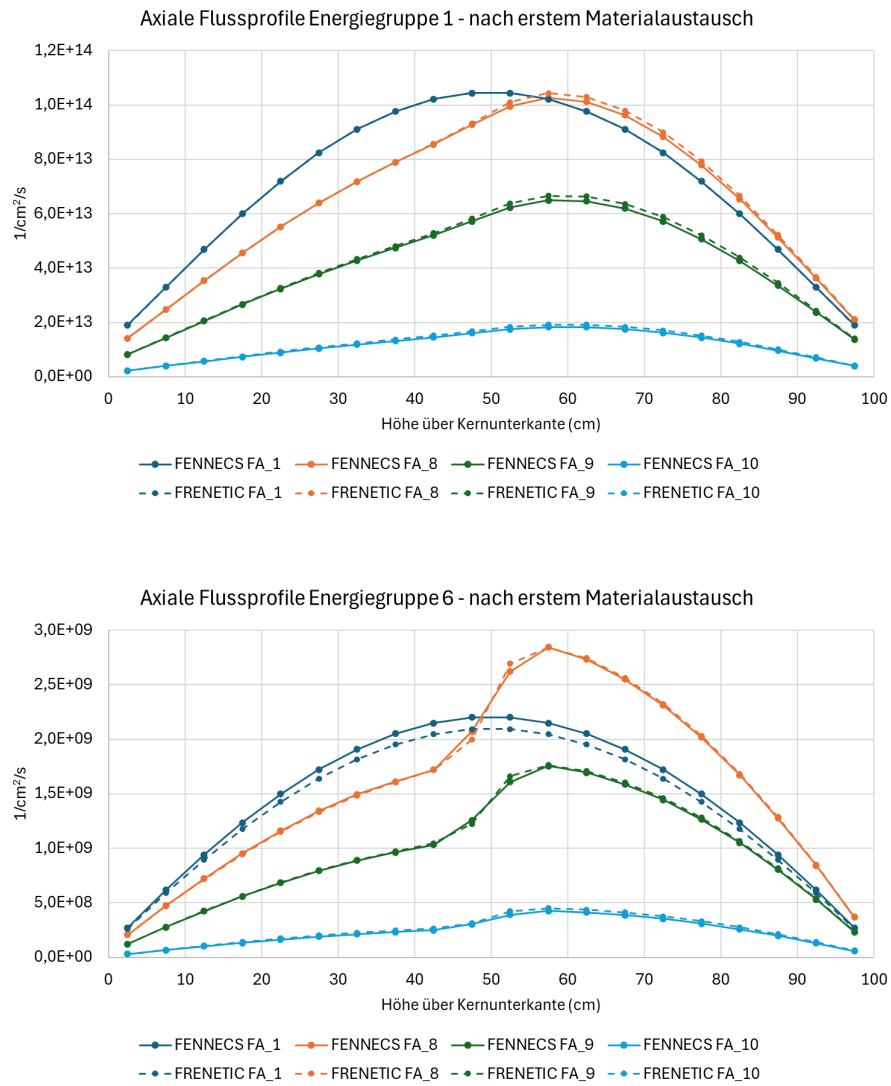


Abb. 7.10 Axiale Neutronenflussprofile der Energiegruppen 1 und 6 von FENNECS und FRENETIC an den vier Brennelementpositionen nach erstem Materialaustausch

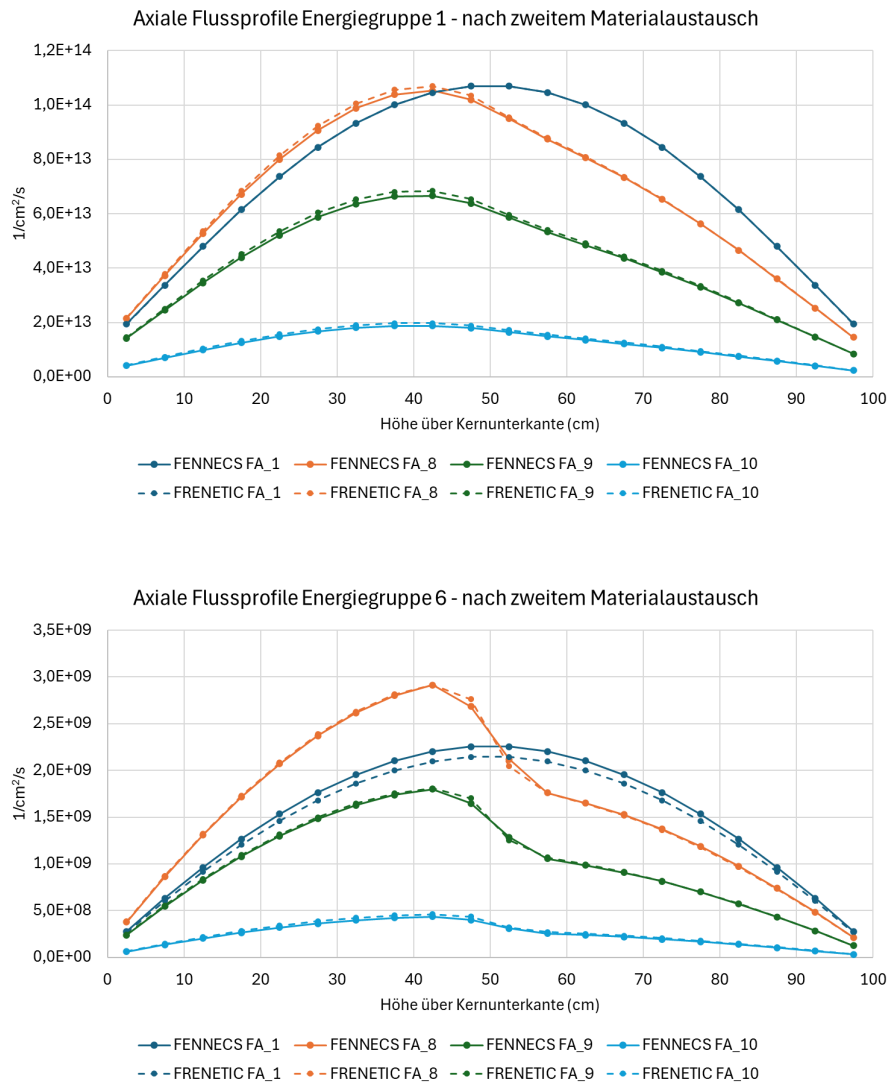


Abb. 7.11 Axiale Neutronenflussprofile der Energiegruppen 1 und 6 von FENNECS und FRENETIC an den vier Brennelementpositionen nach zweitem Materialaustausch

7.3 Kernberechnungen für ein bleigekühltes Reaktorkonzept und Vergleiche mit FRENETIC

7.3.1 Das bleigekühlte Reaktorkonzept ALFRED LEADER

Der Advanced Lead-Fast REactor Demonstrator (ALFRED) ist eines der wichtigsten europäischen Projekte zur Entwicklung von Blei-Schnellreaktoren der Generation IV (Gen-IV). ALFRED ist als Poolreaktor-Prototyp mit einer thermischen Leistung von 300 MW konzipiert und soll die technologische Reife von bleigekühlten Reaktoren mit schnellem Neutronenspektrum (LFR, Lead-cooled Fast Reactor) sowie die Machbarkeit

von LFR-SMRs (Small Modular Reactors) demonstrieren. Der hier betrachtete Reaktorkern, dargestellt in Abb. 7.12 und Abb. 7.13, ist das Ergebnis des EU-Projekts LEADER /GRA 14/. Er umfasst 171 Brennelemente (Fuel Assemblies, FA), vier Sicherheitsstäbe (Safety Rods, SR) und zwölf Steuerstabgruppen (Controls Rods, CR, bzw. Safety Rods, SR) zur Reaktivitätskontrolle im Normal- und Störfallbetrieb. Radial ist der Kern von Blindelementen (Dummy Elements, DE), dem Reaktorkern (Barrel, BA) und externen Bleielementen (External Lead, EL) umgeben. Axial ist der zentrale Bereich des Kerns (mit FA, CR und SR) unten und oben mit je einer Reflektorzone abgeschlossen. Im konkreten Beispiel wird vereinfachend angenommen, dass der gesamte Kern eine einheitliche Temperatur von 400 °C aufweist und die Materialzusammensetzung derjenigen zu Beginn des Zyklus (Begin of Cycle, BoC) entspricht.

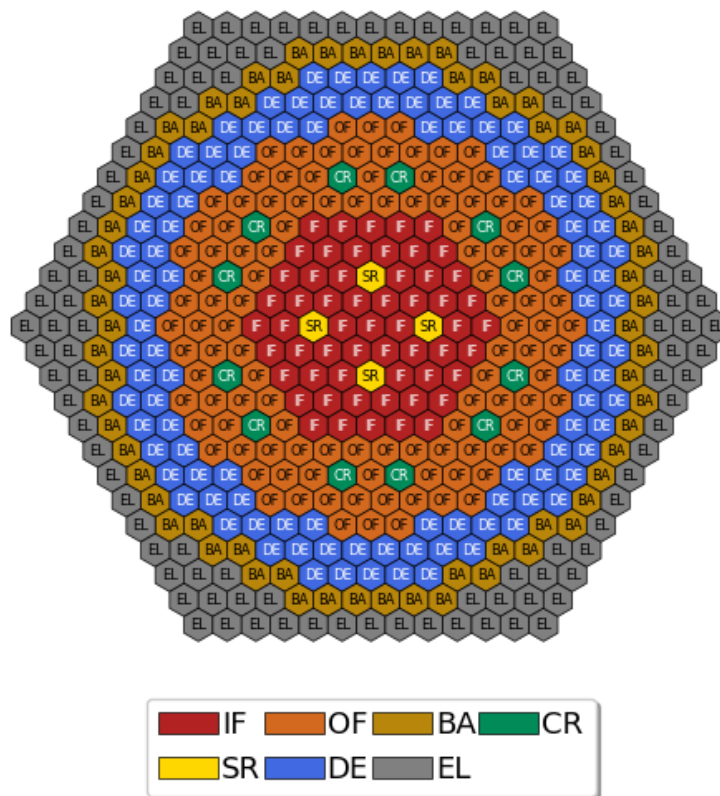
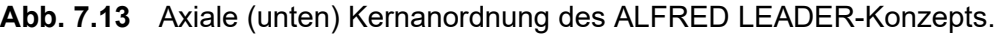


Abb. 7.12 Radiale Kernanordnung des ALFRED LEADER-Konzepts.



Die Wirkungsquerschnitte für ALFRED LEADER wurden mit dem Monte-Carlo-Code Serpent generiert. Darüber hinaus wurde Serpent eingesetzt, Referenzergebnisse für den effektiven Multiplikationsfaktor und die brennelementweise Leistungsverteilung zum Vergleich mit FENNECS und FRENETIC zu gewinnen. Alle Serpent-Berechnungen wurden vom Politecnico Toriono mit der Kerndatenbibliothek ENDF-B/VIII.0 durchgeführt, wobei für die Wirkungsquerschnitte sechs Energiegruppen gewählt wurde. Jede axiale Zone der homogenisierten hexagonalen Anordnungen, die in Abb. 7.12 und Abb. 7.13 in verschiedenen Farben dargestellt sind, ist durch eine Wirkungsquerschnittsbibliothek charakterisiert. Die Simulationsparameter umfassen 200 inaktive und 300 aktive Zyklen mit jeweils 10^6 Neutronen, was zu einer Unsicherheit von weniger als 5 pcm Multiplikationsfaktor führt.

Der ALFRED-Reaktorkern besteht aus neun verschiedenen hexagonalen Bündeln, darunter auch Brennelemente und Steuerelemente. In beiden Programmen wird der

Reaktor axial mit demselben Netz diskretisiert (Details siehe /ABR 25/), um sicherzustellen, dass für die Berechnungen derselbe Satz von Gruppenkonstanten verwendet wird. Die beiden deterministischen Modelle unterscheiden sich geringfügig in der radialen Diskretisierung: Während FENNECS jedes hexagonale Bündel mit (mindestens) sechs finiten Elementen darstellt, wird dieselbe Struktur in FRETIC durch eine einzige hexagonale repräsentiert. Abb. 7.14 zeigt die radiale Diskretisierung in FENNECS zusammen mit der durch unterschiedliche Farben angegebenen Materialverteilung.

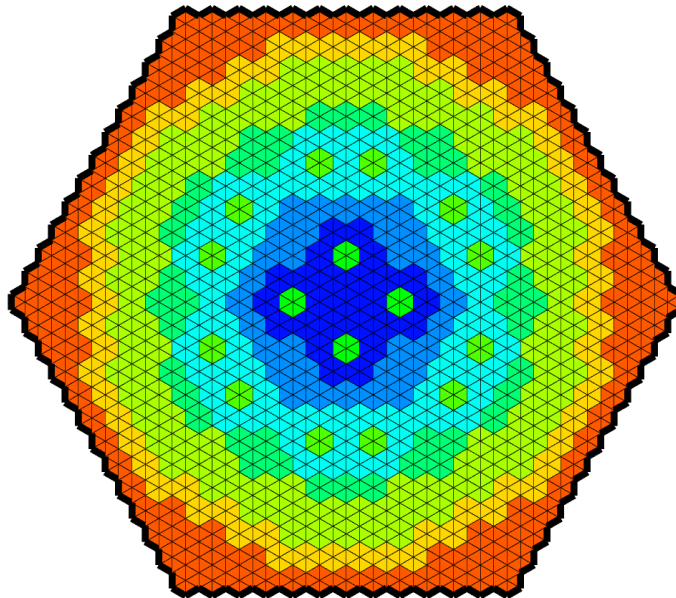


Abb. 7.14 Modell des ALFRED LEADER in FENNECS. Die einzelnen Farben zeigen die verschiedenen Materialien

Tab. 7.4 zeigt die Werte des effektiven Multiplikationsfaktors k_{eff} für zwei Kernkonfigurationen. Im Zustand ARO (All Rods Out) sind alle Absorberstäbe aus dem Reaktorkern ausgefahren, im Zustand ARI (45 cm) (All Rods In) sind alle Absorberstäbe 45 cm in den Kern eingefahren, wodurch ein nahezu kritischer Zustand vorliegt. Für diesen zweiten Zustand wurden die relativen Abweichungen der Brennelement-Leistungsverteilung zwischen FENNECS und Serpent ermittelt. Wie Abb. 7.15 Relative Abweichung (in %) der mit FENNECS berechneten Leistungsverteilung von der Monte-Carlo-Referenz (Serpent) /ABR 25/ zeigt, treten die größten Abweichungen im Bereich der Steuerstäbe auf; es ist zu erwarten, dass durch geeignete Maßnahmen wie die Superhomogenisierungsmethode (SPH-Methode) sich die Abweichungen reduzieren lassen.

Tab. 7.4 Mit FENNECS berechnete Multiplikationsfaktoren im Vergleich mit Serpent und FRENETIC

	Serpent	FENNECS		FRENETIC	
	k_{eff}	k_{eff}	Δk_{eff} vs. Serpent	k_{eff}	Δk_{eff} vs. Serpent
ARO	1.07616	1,07620	-4	1,07935	-318
ARI (45 cm)	1.00002	0,99075	926	0,99827	175

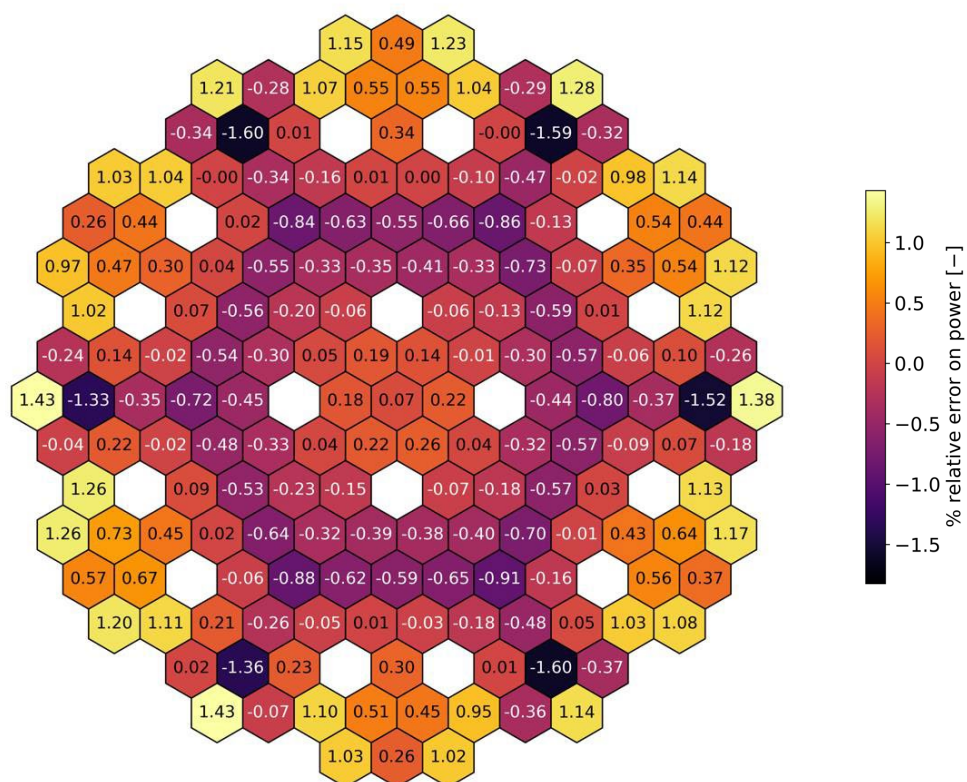


Abb. 7.15 Relative Abweichung (in %) der mit FENNECS berechneten Leistungsverteilung von der Monte-Carlo-Referenz (Serpent) /ABR 25/

7.4 Kernberechnungen für ein natriumgekühltes Konzept und Vergleiche mit Serpent und FRENETIC

7.4.1 Der Advanced Burner Reactor (ABR)

Der Auslegung des hier betrachteten natriumgekühlten schnellen Reaktors mit metallischem Brennstoff liegt die Spezifikation des 1000-MWt-Advanced-Burner-Reaktors (ABR) zugrunde und ist in /BLA 11/ beschrieben. Der Reaktorkern besteht aus 180 Brennelementen – radial unterteilt in eine innere und eine äußere Kernzone mit je 78 bzw. 102 Brennelementen –, 114 radialen Reflektor-, 66 radialen Abschirmungs- und 19 Steuerelementen. Es kommen zwei unabhängige Systeme zur sicherheitstechnischen Reaktivitätsregelung zum Einsatz: das primäre Regelsystem (Primary Control) (15 Bündel zum Ausgleich des Reaktivitätsverlusts während des Zyklus) und das sekundäre Regelsystem (Secondary Control) (vier Bündel als Sicherheitssteuerstäbe). Die Kernanordnung ist in Abb. 7.16 dargestellt. Die Brennelement-Gitterweite beträgt 16,2471 cm bei einer Gesamtlänge von 480,20 cm. Die Spaltzone ist 85,82 cm hoch. Die Eintritts- und mittlere Austrittstemperatur des Kühlmittels betragen 355 °C bzw. 510 °C. Der Einfachheit halber werden für das Kühlmittel, die Strukturmaterialien und den Brennstoff einheitliche Temperaturwerte von 432,5 °C, 432,5 °C bzw. 534,0 °C angenommen. Die Brennstoffzusammensetzung entspricht jener am Zyklusende (EOC). Im Rahmen des Benchmarks wurden einige Vereinfachungen vorgenommen: Der aktive Kern ist axial in fünf Zonen unterteilt (was insgesamt zehn verschiedene Brennstoffzusammensetzungen ergibt), und die Spaltprodukte werden durch natürliches Molybdän repräsentiert.

7.4.2 Generierung der Monte-Carlo-Referenzlösung und von Wirkungsquerschnittsdaten

Für den ABR wurde sowohl ein Ganzkernmodell des ABR als auch Einzelbrennelementmodelle zur Generierung von Wirkungsquerschnittsdaten in acht Energiegruppen mit dem Monte-Carlo-Code Serpent entwickelt. Für sämtliche Materialien, die in den Brennelementbündeln (sowohl der inneren als auch der äußeren radialen Kernzone) enthalten sind, wird ein 3D-Modell mit radial reflektierenden Randbedingungen verwendet. Für den radialen Reflektor sowie die radialen Abschirmungen besteht das 3D-Modell aus dem jeweiligen Bündel, das von sechs benachbarten, halben äußeren Brennelementen mit radial reflektierenden Randbedingungen umgeben ist. Für die Materialien in den Steuerelementen – d. h. für die Materialien der Steuerstäbe sowie für die Führungsrohre – wird

hingegen ein 2D-Modell herangezogen, das aus einem Bündel besteht, welches von sechs benachbarten, halben inneren Core-Brennelementbündeln umgeben ist. Letzteres ist deswegen erforderlich, da die beim ABR eingesetzte SPH-Methode auf zwei Dimensionen basiert.

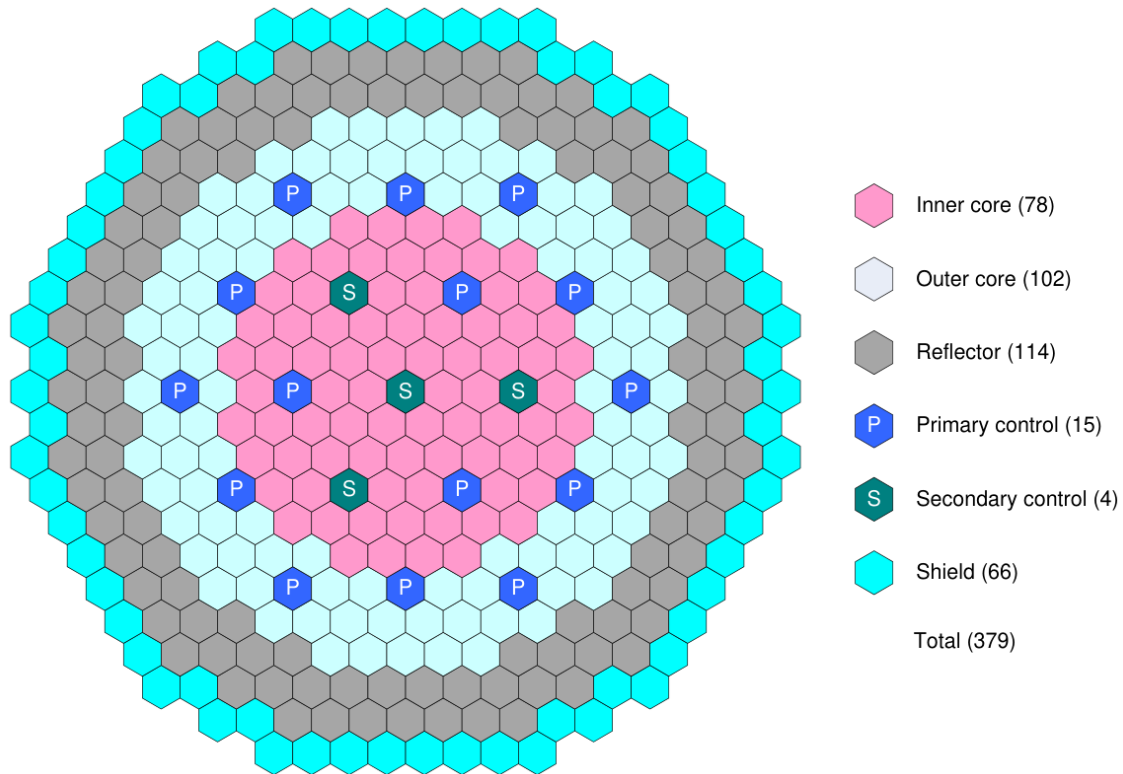


Abb. 7.16 Radiale Kernanordnung des natriumgekühlten ABR

7.4.3 Modell des ABR in FENNECS und Resultate

Die von PEMTY bereitgestellte räumliche Vernetzung besteht aus sechs Prismen pro Brennelement in radialer Richtung, mit einer maximalen axialen Maschenweite von 5,0 cm, was 103 axialen Maschen entspricht. Insgesamt bilden 125.528 Knoten 234.222 finite Elemente.

Im Gegensatz zum LWR ist der Beitrag von $(n,2n)$ - und $(n,3n)$ -Streu-Multiplikationsreaktionen bei flüssigmetallgekühlten Reaktoren nicht vernachlässigbar. Diesem Aspekt wird hier explizit am Beispiel des ABR-Reaktors behandelt, wobei Vergleiche durchgeführt werden, die diese Beiträge in FENNECS wahlweise berücksichtigen oder ausschließen. Wie in /LEP 16/ erläutert, lässt sich die Streu-Multiplikation in gängigen Transport- und Diffusionslösern dadurch abbilden, dass der standardmäßige Streuquerschnitt σ_s durch den Streu-Multiplikationsquerschnitt σ_s^p und der Absorptionsquerschnitt σ_a durch den

reduzierten Absorptionsquerschnitt σ_a^{red} ersetzt wird. Hiermit wurden die folgenden verschiedenen Zustände des ABR simuliert:

- Alle Steuerstäbe ausgefahren – All Rods Out (ARO)
- Alle Steuerstäbe eingefahren – All Rods In (ARI)
- Alle Steuerstäbe des primären Abschaltsystems eingefahren, während alle Steuerstäbe des sekundären Abschaltsystems ausgefahren sind – Primary Control system In, Secondary Control system Out (PCI-SCO)
- Alle Steuerstäbe des primären Abschaltsystems ausgefahren, während alle Steuerstäbe des sekundären Abschaltsystems eingefahren sind – Primary Control system Out, Secondary Control system In (PCO-SCI)

Tab. 7.5 zeigt die mit FENNECS berechneten Multiplikationsfaktoren im Vergleich mit jenen von Serpent bei Berücksichtigung der (n, xn)-Streuprozesse. Tab. 7.6 zeigt die entsprechenden Ergebnisse, wenn die (n, xn)-Streuprozesse nicht berücksichtigt werden. Es zeigt sich, dass – wenn Steuerstäbe in den Reaktorkern eingefahren sind – bei Anwendung SPH-korrigierter Gruppenkonstanten; die von FENNECS berechneten Multiplikationsfaktoren näher an der Monte-Carlo-Referenz liegen. Die Verwendung der multiplizierenden Streumatrix in Verbindung mit dem reduzierten Absorptionswirkungsquerschnitt verbessert die Multiplikationsfaktoren ebenfalls signifikant – allerdings nur dann, wenn die Steuerstäbe eingefahren sind. Der Grund dafür, weshalb sich der effektive Multiplikationsfaktor im ARO-Fall verschlechtert, ist bislang unklar. Eine mögliche Erklärung könnte darin liegen, dass der von Serpent unter Verwendung der Ausstreu-Approximation berechnete Diffusionskoeffizient inkonsistent ist, wenn (n, xn)-Reaktionen explizit berücksichtigt werden, da er die multiplizierende Streuung nicht einbezieht. Dieser Sachverhalt bedarf weiterer Untersuchungen.

Tab. 7.5 Vergleiche der Multiplikationsfaktoren von FENNECS mit jenen von Serpent für den ABR mit (n, xn)-Streuprozessen

		Ohne SPH		Mit SPH	
	Serpent k_{eff}	FENNECS k_{eff}	Abweichung (pcm)	FENNECS k_{eff}	Abweichung (pcm)
ARO	1,01661	1,01701	39	1,01778	113
ARI	0,92454	0,91471	-1162	0,92215	-280
PCI-SCO	0,95921	0,95444	-521	0,95870	-56
PCO-SCI	0,98320	0,97877	-460	0,98252	-70

Tab. 7.6 Vergleiche der Multiplikationsfaktoren von FENNECS mit jenen von Serpent für den ABR ohne (n, xn)-Streuprozesse

		Ohne SPH		Mit SPH	
	Serpent k_{eff}	FENNECS k_{eff}	Abweichung (pcm)	FENNECS k_{eff}	Abweichung (pcm)
ARO	1,01661	1,01519	-138	1,01596	-63
ARI	0,92454	0,91316	-1348	0,92058	-465
PCI-SCO	0,95921	0,95277	-705	0,95702	-239
PCO-SCI	0,98320	0,97706	-639	0,98080	-248

Abb. 7.17 und Abb. 7.18 zeigen die Abweichungen der von FENNECS berechneten brennelementweisen Leistungsverteilung von der mit Serpent generierten Referenzlösung für den Zustand ARO bzw. ARI.

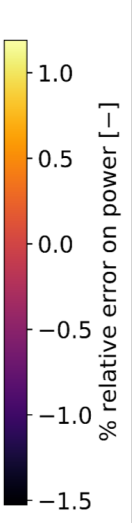


Abb. 7.17 Relative Abweichungen (in %) zwischen FENNECS und Serpent für ABR-Kern im Zustand ARO /ABR 25/

8 Verfolgung internationaler Trends der Neutronenphysik unregelmäßiger Geometrien (Arbeitspaket 6)

In diesem Arbeitspaket werden internationale Entwicklungstrends zur Lösung der Neutronentransportgleichung für unregelmäßige Geometrien verfolgt, die für die weitere Entwicklung von FENNECS und PEMTY relevant sein könnten.

Besonderes Augenmerk wurde dabei dem Thema Diskontinuitätsfaktoren gewidmet, die insbesondere bei LWR erforderlich sein können und daher weit verbreitet sind. In einem ersten Schritt wurde daher der Frage nachgegangen, wie Diskontinuitätsfaktoren, beispielsweise Brennelement-Diskontinuitätsfaktoren (engl. Assembly Discontinuity Factors, ADF), im Rahmen des Galerkin-Formalismus von FENNECS anwendbar gemacht werden könnten. Die Überlegungen führten auf den sog. Discontinuous Galerkin Approach (DCG) /HES 08/, /SCH 17/, welcher Unstetigkeiten des homogenen Neutronenflusses zwischen benachbarten Homogenisierungsregionen (also typischerweise zwischen benachbarten Brennelementen) bei gleichzeitiger Sicherstellung der Stetigkeit des heterogenen Flusses an diesen Stellen zulässt. Diese (Un-/)Stetigkeitsforderungen könnten durch ADF erreicht werden. Die Erweiterung von FENNECS, welches auf dem Continuous Galerkin (CG) Approach beruht, um die DCG-Methode wird daher als eine vielversprechende Option gesehen und umgesetzt, siehe nachfolgenden Abschnitt 8.1.

Vom 01. bis zum 04. Oktober 2024 fand in Ottawa, Kanada, die Konferenz "Fifth International Conference on Generation IV and Small Reactors (G4SR-5)" statt, die von der Canadian Nuclear Society organisiert wurde und an der ein Experte der GRS mit eigener Präsentation teilnahm. Hintergrund der Teilnahme war – neben der Vorstellung aktueller Ergebnisse des vorliegenden Vorhabens – die Verfolgung internationaler Entwicklungen zu SMRs und MMRs und zugehöriger Simulationsmethoden. Ein Beispiel ist der Beitrag "Development of a LWSMR dry containment CFD model with containmentFOAM "von Vázquez-Rodríguez, der über den aktuellen Stand der Entwicklung eines LW-SMR-Trockencontainmentmodells berichtet. Dabei wird das am Forschungszentrum Jülich entwickelte Codesystem containmentFOAM verwendet, ein CFD-Paket, das auf Containment-Sicherheitsanalysen zugeschnitten ist und auf OpenFOAM 9 basiert. Ziel der Entwicklung von containmentFOAM ist es u. a., die Eignung der für Containmentsimulationen üblicherweise eingesetzten Lumped-Parameter-Codes hinsichtlich der erwarteten höheren Drücke und Dampfkonzentrationen (Fluideigenschaften, Kondensationsregime usw.) von LW-SMR zu bewerten. Ferner waren auch Beiträge zu SMR-Konzepten mit Flüssigsalz-Brennstoff zu finden, beispielsweise "MSR_B4 - A New, Scale Based, Fuel

Burnup and Fission Product Removal Tool for the IMSR" von Robinson oder "Comprehensive Simulation of the Integral Molten Salt Reactor (IMSR) Using a Lumped 3D Modeling Approach" von Crawford. Dabei handelt es sich um Beiträge, die sich mit der Simulation von Salzschnmelzereaktorkonzepten, speziell dem Integral Molten Salt Reactor (IMSR), befassen. Der erstgenannte Vortrag stellt das Simulationswerkzeug MSR_B4 vor, welches Brennstoffabbau und Spaltproduktverhalten im IMSR berechnet. Die zweite Präsentation informiert über Simulationsansätze mit Hilfe von Lumped-Parameter-Codes (Methode der konzentrierten Parameter) zur Simulation von MSR am Beispiel des IMSR. Unter anderem diese Entwicklungstendenzen trugen zur Motivation bei, im Nachfolgevorhaben zu diesem vorliegenden Eigenforschungsvorhaben die Erweiterung von FENNECS zur Simulation von Reaktorkonzepten mit flüssigem Brennstoff zu planen.

8.1 Diskontinuitätsfaktoren – Discontinuous-Galerkin-Ansatz

Der Continuous-Galerkin-Ansatz (CG-Ansatz) impliziert Stetigkeit des homogenen Neutronenflusses zwischen benachbarten finiten Elementen. Diese Annahme ist jedoch nicht immer gerechtfertigt, denn die Stetigkeitsbedingung gilt genau genommen nur für den heterogenen Fluss. Dies bedeutet, dass der homogene Fluss zwischen benachbarten finiten Elementen unstetig sein kann. Dieser Sachverhalt lässt sich jedoch mit dem CG-Ansatz nicht darstellen, was zu signifikanten Fehlern in der Neutronenflussverteilung und folglich auch in der Leistungsdichteverteilung führen kann. Derartige Probleme sind bereits bei nodalen Verfahren hinlänglich bekannt und können durch die Einführung von Diskontinuitätsfaktoren – den sogenannten Assembly Discontinuity Factors (ADFs) – behoben werden. Auch im FEM-Code FENNECS lassen sich ADFs unter Verwendung des Discontinuous Galerkin-Formalismus (DG) einführen. Dieser Abschnitt gewährt dem Leser Einblicke in die Implementierung des DG-Formalismus und von ADFs in FENNECS; eine ausführliche Darstellung findet sich in /HEN 25b/.

ADFs sind als Verhältnis des heterogenen (ϕ_{het}) zum homogenen Neutronenfluss (ϕ_{hom}) definiert:

$$f := \frac{\phi^{het}}{\phi^{hom}} \quad (8.1)$$

Die Stetigkeit des heterogenen Neutronenflusses an der gemeinsamen Oberfläche s zwischen zwei benachbarten finiten Elementen e_1 und e_2 bedeutet, dass entlang s die heterogenen Flüsse gleich sind:

$$\phi_1^{het} = \phi_2^{het} \quad (8.2)$$

Unter Benutzung dieser Stetigkeitsbedingung und der Definition der Diskontinuitätsfaktoren erhält man folgende Stetigkeitsbedingung für den homogenen Neutronenfluss zwischen den beiden finiten Elementen e_1 und e_2 :

$$f_1 \phi_1^{hom} = f_2 \phi_2^{hom} \quad (8.3)$$

Für $f_1 \neq f_2$ folgt hieraus die Unstetigkeit des homogenen Neutronenflusses. Es gilt also

$$f_1 \phi_1^{hom} - f_2 \phi_2^{hom} = [f\phi] = 0 \quad (8.4)$$

mit dem Differenzoperator $[]$. Diese Unstetigkeitsbedingung ermöglicht die Einführung eines sog. *Penalty-Terms* P_s , der zur schwachen Form (weak form) der Diffusionsgleichung in FENNECS hinzugefügt wird und die Unstetigkeit der Flüsse an der Grenzfläche s schwach erzwingt:

$$P_s \oint_s d\vec{A} [f\phi] [u] \quad (8.5)$$

Der Wert des Penalty-Parameters P_s hängt von der Größe der benachbarten finiten Elemente und deren Neutronendiffusionskoeffizienten (D_1, D_2) ab:

$$P_s = \frac{2(D_1 + D_2)}{\sqrt{(x_{21} + x_{31})^2 + (y_{21} + y_{31})^2}} \quad (8.6)$$

Durch Einführung des folgenden Symmetrisierungsterms wird eine Stabilisierung des Konvergenzverhaltens erreicht:

$$T_{sym} = \theta \sum_{s \in \Gamma_{int}} \oint d\vec{A} [f\phi] \{D\vec{\nabla}u\} \quad (8.7)$$

Der Symmetrisierungsparameter θ definiert – abhängig von seinem Wert – verschiedene Klassen von DG-Verfahren. In FENNECS ist das sog. unsymmetrische Interior-Penalty-Verfahren implementiert, repräsentiert durch $\theta = 1$; für jeden nichtnegativen Penalty-Parameter lässt sich nachweisen, dass stets Konvergenz erreicht wird. Die beiden zusätzlichen Oberflächenterme (8.5) und (8.7) werden der Systemmatrix des linearen Gleichungssystems der Diffusionsnäherung hinzugefügt und von FENNECS gelöst. Die ADFs werden von Rechenprogrammen wie KMACS, Serpent oder HELIOS berechnet und in die dafür bereits vorbereitete Datenstruktur der NEMTAB-Bibliotheken eingefügt. Eine entsprechend angepasste und erweiterte Version von PEMTY bewerkstelligt die richtige Zuordnung der ADFs zu den finiten Elementen der Geometrievernetzung.

9 Zusammenfassung

Die Zielsetzung des Eigenforschungsvorhabens war die Weiterentwicklung des 3D-Weniggruppen-Neutronenkinetikcodes FENNECS zur Durchführung von Sicherheitsanalysen von SMRs und MMRs sowie fortschrittlichen und innovativen Reaktorsystemen mit komplexen und unregelmäßigen Geometrien und des dazugehörigen Geometrievernetzungswerkzeugs PEMTY. Die Arbeiten bauen auf den Ergebnissen des Vorgängervorhabens RS1576 auf, in welchem seinerseits substanzielle Entwicklungsarbeiten von FENNECS und PEMTY durchgeführt worden waren. Im Ergebnis dieses Vorhabens steht ein umfangreich weiterentwickelter und verifizierter Neutronenkinetikcode FENNECS zur Verfügung, ebenso eine in verschiedener Hinsicht erweiterte und verbesserte Version von PEMTY. Dieses Softwarepaket ist Bestandteil von AC²-2025; die Fortschritte kommen damit allen Anwendern von AC² zugute.

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

9.1 Weitere Entwicklung und Verifikation der SP₃-Transportmethode von FENNECS, insbesondere für zeitabhängige Berechnungen

Hierzu zählt zunächst die Implementierung der zeitabhängigen SP₃-Gleichungen für Transientensimulationen sowie die Weiterentwicklung und Verbesserung der stationären SP₃-Methode von FENNECS. Diese Arbeiten wurden von einer Nachwuchswissenschaftlerin der GRS durchgeführt und führten zu ihrer Promotion an der TU München im Juli 2024 /LOM 24/. Weitere wichtige Arbeiten betreffen die Anpassung der Konvergenzbeschleunigungsverfahren von FENNECS an den SP₃-Löser, die Erweiterung von FENNECS zur Lösung der adjungierten SP₃-Gleichungen, jeweils begleitet von Überprüfungen anhand von Testfällen.

9.2 Weiterentwicklung der Konvergenzbeschleunigungsverfahren in FENNECS

Schwerpunkte der Arbeiten unter diesem Gesichtspunkt betreffen die Optimierung des Verfahrens der inversen Vektoriteration durch Einführung lokaler Eigenwertverschiebungen, was zu einer weiteren Verringerung der Anzahl äußerer Iterationen führen kann. Ferner wurde die sogenannte *Graue Approximation* eingeführt, ein einfaches

Mehrgitterverfahren bezüglich der Energiediskretisierung, bei dem der eigentlichen Weniggruppen-Rechnung eine Rechnung mit auf nur eine (graue) Energiegruppe kondensierten Wirkungsquerschnittsdaten vorangeschaltet ist. Mit dieser effizienten grauen Approximation liegt bereits eine relativ gut konvergierte räumliche Flussverteilung vor, von der die anschließende Weniggruppen-Rechnung profitiert. Ein weiterer Aspekt betrifft die Einführung von Modellreduktionen. Von verschiedenen Modellreduktionsansätzen wurde der Ansatz *Proper Generalized Decomposition* (PGD) ausgewählt und für zweidimensionale Anwendungen implementiert und erfolgreich getestet.

9.3 Weiterentwicklung und Verbesserung der Rechenmodelle in FENNECS

Die hier durchgeführten Arbeiten erweiterten FENNECS um die Simulation der Spaltproduktvergiftung infolge der I/Xe- und Pm/Sm-Dynamik, um die Berechnung Nachzerfallsleistungsentwicklung, um ein Suchverfahren für die kritische Borkonzentration bei SMRs mit Boreinspeisesystem und die substanzielle Verbesserung des Modells rotierbare Steuerstäbe. Mit der bei Letzterem implementierten Projektionsmethode gelang es, den sogenannten Cusping-Effekt weitgehend zu eliminieren. Die Projektionsmethode wurde nicht nur für rotierbare, sondern auch für konventionelle Steuerstäbe implementiert.

9.4 Weiterentwicklung des Vernetzungswerkzeugs PEMTY

Zu den Highlights der Weiterentwicklung von PEMTY zählt die Verbesserung des Polygonvernetzungsalgorithmus durch Einführung der *eingeschränkten Delaunay-Triangulierung* (engl. *constrained Delaunay triangulation*), die nicht nur zu einer wesentlich besseren Gitterqualität, sondern auch zu verbesserter Genauigkeit und Recheneffizienz von FENNECS führt. Ferner wurden erweiterte Polygonkonzepte (nestedPolygon, polygonSet, annulusPolygon) eingeführt und Effizienzoptimierungen vorgenommen sowie Anpassungen der SPH-Methode (Superhomogenisierung) von PEMTY für das SP₃-Verfahren durchgeführt.

9.5 Verifizierung und Validierung

Die Arbeiten zur Verifizierung und Validierung gliedern sich in vier Schwerpunkte. Zunächst wurden die Weiterentwicklungen und Optimierungen von PEMTY ausführlich anhand des Special-Purpose-Mikroreaktors erprobt; hieraus ergaben sich wertvolle

Synergieeffekte sowohl für das vom BMFTR geförderte Verbundprojekt MISHA als auch das EU-Vorhaben EVEREST. Der zweite Schwerpunkt lag auf Code-zu-Code-Vergleichen der zeitabhängigen Diffusionsmethode in FENNECS. Dazu wurden und werden umfangreiche Vergleiche mit dem nodalen Code FRENETIC der NEMO-Gruppe des Politecnico di Torino anhand sogenannter *kompensierter Transienten* (engl. *compensated transients*) durchgeführt, sowohl für ein thermisches als auch ein schnelles Reaktormodell. Vergleiche zwischen FENNECS und FRENETIC für das bleigekühlte Reaktorkonzept ALFRED-LEADER der Generation IV bildeten den dritten Schwerpunkt. Der vierte und letzte Schwerpunkt lag auf Code-zu-Code-Vergleichen FENNECS und FRENETIC anhand des natriumgekühlten *Advanced-Burner-Reaktors* (ABR).

9.6 Verfolgung internationaler Trends der Neutronenphysik unregelmäßiger Geometrien

Hier wurde u.a. der Frage nachgegangen, wie Diskontinuitätsfaktoren, beispielsweise Brennelement-Diskontinuitätsfaktoren (engl. Assembly Discontinuity Factors, ADF) im Rahmen des Galerkin-Formalismus von FENNECS anwendbar gemacht werden könnten. Die Überlegungen führten auf den sog. *Discontinuous-Galerkin*-(DG-)Ansatz für die stationäre Diffusionsnäherung, der in FENNECS erfolgreich implementiert werden konnte. Erste Erfahrungen zeigten, dass insbesondere bei grober radialer Diskretisierung der DG-Ansatz zu einem deutlichen Genauigkeitsgewinn ohne signifikante zusätzliche Rechenzeit führt.

9.7 Erreichter Stand und weitere notwendige Schritte

Die im Rahmen dieses Eigenforschungsvorhabens durchgeführten und im vorliegenden Bericht dokumentierten Arbeiten und Ergebnisse demonstrieren die Einsatzfähigkeit des aus FENNECS und PEMTY bestehenden Softwarepakets für Mikroreaktoren und verschiedene Reaktortypen und -konzepte anderer Bauart, insbesondere innovativer Systeme. Neben dem in Kapitel 3.3 erwähnten Gesichtspunkt betreffen notwendige weitere Arbeiten u. a. folgende Aspekte:

- Weitere Verbesserungen und Entwicklungen von FENNECS zur Durchführung von Sicherheitsanalysen von SMRs, MMRs, LWRs und Generation IV.
- Erweiterung von FENNECS zur Simulation von Salzschmelzekonzepten.

- Weiterentwicklung und Pflege der Kopplung von FENNECS mit thermohydraulischen Modellen.
- Weitere Maßnahmen zur Steigerung der Effizienz von FENNECS.
- Weiterentwicklung des Vernetzungswerkzeugs PEMTY sowie
- Weiterführung der Verifizierung und Validierung.

Die genannten Themenfelder werden zur Bearbeitung in einem Anschlussvorhaben bereits angeboten.

A Anhang

A.1 Veröffentlichungen

Im Rahmen des vorliegenden Eigenforschungsvorhabens UMRS1612 entstanden folgende Veröffentlichungen bzw. Präsentationen für Konferenzen, in Fachzeitschriften und für Fachgespräche:

S. Io Muzio, A. Seubert, *Validation of the FENNECS SP_3 solver with control Rod Insertion Simulations of the ESFR using Serpent cross sections*, 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. Seubert, J. Bousquet, R. Henry, S. Muzio, *AC²/FENNECS - a Finite Element Diffusion and SP_3 - based Coupled Code System for the Safety Assessment of SMRs, AMRs and Advanced Nuclear Systems*, SNETP Forum 2023, May 16th, 2023, Gothenburg, Sweden.

R. Henry, J. Bousquet, A. Seubert, *Implementation of the discontinuous Galerkin method into FENNECS and other new improvements for LWR analysis*, PHYSOR 2026 - The International Conference on Physics of Reactors, San Francisco, CA, April 21–24, 2024.

R. Henry, J. Bousquet, A. Seubert, *Implementation of a projection-based control rod decoupling method in the Finite Element Neutronic Code FENNECS*, Annals of Nuclear Energy **230** (2026) 112116.

A. Seubert, N. Abrate, S. Io Muzio, A. Costantino, *Benchmarking FRENETIC and FENNECS in the Simulation of Compensated Reactor Transients*, PHYSOR 2026 - The International Conference on Physics of Reactors, Torino, Italy, April 19 – 23, 2026.

A. Seubert, S. Io Muzio, E. Elts, J. Bousquet, *The Neutron Kinetics Code FENNECS for the Safety Assessment of MMRs, SMRs and Innovative Reactor Concepts*, PHYSOR 2026 - The International Conference on Physics of Reactors, Torino, Italy, April 19 – 23, 2026.

A.2 Glossar

ABR	Advanced Burner Reactor
AGeNT	Adaptive Geometry Neutron Transport
ALFRED	Advanced Lead-cooled Fast Reactor European Demonstrator
ARI	All Rods In
ARO	All Rods Out
ATHLET	Analyse der THERmohydraulik von LEcks und Transienten
DWR	Druck-Wasser-Reaktor
ESFR	European Sodium-cooled Fast Reactor
FENNECS	Finite ElemeNt NEutroniCS code
HPMR	Heat Pipe-cooled Micro Reactor
LMW	Langenbuch, Maurer, Werner
LWR	Ligh Water-cooled Reactor
MMR	Micro Modular Reactor
PARCS	Purdue Advanced Reactor Core Simulator
PEMTY	Python External Meshing Tool with Yaml input
SFR	Sodium-cooled Fast neutron spectrum Reactor
SMR	Small Modular Reactor
SP ₃	Simplified P ₃ Transport Method
SPH	SuPer Homogenisation method
SPR	Special Purpose Reactor

Abbildungsverzeichnis

Abb. 3.1	Modell mit C5G7-UO ₂ -Brennelement zur Verifikation der transienten SP ₃ -Methode	25
Abb. 3.2	Leistungsverlauf während der C5G7-Transiente, ermittelt mit der SP ₃ -Methode und der Diffusionsnäherung	26
Abb. 4.1	Kernanordnung des ESFR (Resultat des EU-Projekts ESFR-SMART /MIK 17/)	34
Abb. 4.2	Abweichung der axial integrierten Brennelement-Leistungsverteilung von einem Viertel des ESFR-Reaktorkerns, ermittelt mit der grauen Approximation.....	35
Abb. 4.3	Abweichung der axial integrierten Brennelement-Leistungsverteilung von einem Viertel des ALFRED-Reaktorkerns, ermittelt mit der grauen Approximation.....	35
Abb. 4.4	Ränder $\partial\Omega_1$, $\partial\Omega_2$, $\partial\Omega_3$ und $\partial\Omega_4$ des Problemgebiets Ω	49
Abb. 4.5	Mit der PGD-Methode berechnete Flussverteilung des homogenen LMW-Testfalls.....	51
Abb. 4.6	Mit FENNECS berechnete Flussverteilung des homogenen LMW-Testfalls	51
Abb. 4.7	Relative Abweichungen (in %) der PGD-Lösung für die Flussverteilung des homogenen LMW-Testfalls gegenüber der FENNECS-Lösung.....	52
Abb. 4.8	Graphische Darstellung des PGD-Entwicklungsterms $F1(x)$ bzgl. der x-Koordinate	52
Abb. 4.9	Graphische Darstellung des PGD-Entwicklungsterms $G1(y)$ bzgl. der y-Koordinate	53
Abb. 4.10	Materialverteilung des heterogenen LMW-Testfalls (blau: Brennstoff-Typ 1, rot: Brennstoff-Typ 2)	54
Abb. 4.11	Mit der PGD-Methode berechnete Flussverteilung des heterogenen LMW-Testfalls.....	55
Abb. 4.12	Mit FENNECS berechnete Flussverteilung des heterogenen LMW-Testfalls	55
Abb. 4.13	Graphische Darstellung der 3 PGD-Entwicklungsterme $F_i(x)$ bzgl. der x-Koordinate. Term i bedeutet $F_i(x)$, $i = 1, \dots, 3$	56

Abb. 4.14	Graphische Darstellung der 3 PGD-Entwicklungsterme $G_i(y)$ bzgl. der y-Koordinate. Term i bedeutet $G_i(y)$, $i = 1, \dots, 3$. Für Terme 2 und 3 gilt die rechte Ordinate.....	57
Abb. 4.15	Relative Abweichung (in %) der PGD-Lösung vom FENNECS-Ergebnis	57
Abb. 5.1	Multiplikationsfaktor als Funktion des Rotationswinkels einer Steuertrommel	66
Abb. 5.2	Gerades Dreiecksprisma im Referenzkoordinatensystem. Die Eckpunkte entsprechen den Indizes der Basisfunktionen in Gl. (5.21).....	68
Abb. 5.3	Kernkonfiguration des DWR-Testfalls „LMW“ nach Langenbuch, Maurer und Werner /LAN 77/	74
Abb. 5.4	Differentielle Steuerstabwirksamkeit für den LMW-Testfall	75
Abb. 5.5	Mit FENNECS berechnete Steuerstabwirksamkeit der Steuerstabgruppe 1	76
Abb. 5.6	Ausschnitt aus Abb. 5.5 mit zusätzlicher Darstellung der mit Fluss-Volumen-Gewichtung errechneten Wirksamkeit	76
Abb. 5.7	Leistungsverlauf während der Transiente, berechnet mit Referenz- (blau) sowie gröberer axialer Diskretisierung und Projektionsmethode (orange).....	77
Abb. 5.8	Relative Abweichungen des zeitlichen Leistungsverlaufs von der Referenz für Fluss-Volumen-Gewichtung (orange) und Projektionsmethode (blau)	78
Abb. 5.9	Modell des Mikroreaktors HPMR in FENNECS /BOU 20/	79
Abb. 5.10	Referenzlösung für den Multiplikationsfaktor als Funktion des Drehwinkels der Steuertrommeln	80
Abb. 5.11	Relative Abweichungen des Multiplikationsfaktors der Steuertrommeln, berechnet mit Volumen-Gewichtung (blau) und Projektionsmethode (orange), von der Referenzlösung	80
Abb. 5.12	LMW-Reaktor, auslegungsbegrenzender Betriebsstörfall ohne SCRAM	81
Abb. 7.1	Delaunay-Vernetzung für das SPR-Modell.....	92
Abb. 7.2	Ausgangskonfiguration des Reaktors.....	95

Abb. 7.3	Verteilung von Material 1 und 2 im Anfangszustand sowie nach dem Materialaustausch. Die radiale Darstellung zeigt auch die Geometrievernetzung	96
Abb. 7.4	Ereignisabfolge bei den kompensierten Transienten.....	97
Abb. 7.5	Leistungsverlauf der kompensierten Transiente im thermischen Reaktor	98
Abb. 7.6	Axiale Flussprofile werden an den rot markierten Brennelementpositionen FA_1, FA_8, FA_9 und FA_10 ausgewertet.....	98
Abb. 7.7	Axiale Neutronenflussprofile vor Beginn der Transiente im thermischen Reaktor. Dunkelblau: FA_1, orange: FA_8, grün: FA_9, hellblau: FA_10.....	99
Abb. 7.8	Leistungsverlauf der kompensierten Transiente im schnellen Reaktor...	100
Abb. 7.9	Axiale Neutronenflussprofile der Energiegruppen 1 und 6 von FENNECS und FRENETIC an den vier Brennelementpositionen im Ausgangszustand	102
Abb. 7.10	Axiale Neutronenflussprofile der Energiegruppen 1 und 6 von FENNECS und FRENETIC an den vier Brennelementpositionen nach erstem Materialaustausch	103
Abb. 7.11	Axiale Neutronenflussprofile der Energiegruppen 1 und 6 von FENNECS und FRENETIC an den vier Brennelementpositionen nach zweitem Materialaustausch	104
Abb. 7.12	Radiale Kernanordnung des ALFRED LEADER-Konzepts.	105
Abb. 7.13	Axiale (unten) Kernanordnung des ALFRED LEADER-Konzepts.....	106
Abb. 7.14	Modell des ALFRED LEADER in FENNECS. Die einzelnen Farben zeigen die verschiedenen Materialien	107
Abb. 7.15	Relative Abweichung (in %) der mit FENNECS berechneten Leistungsverteilung von der Monte-Carlo-Referenz (Serpent) /ABR 25/	108
Abb. 7.16	Radiale Kernanordnung des natriumgekühlten ABR	110
Abb. 7.17	Relative Abweichungen (in %) zwischen FENNECS und Serpent für ABR-Kern im Zustand ARO /ABR 25/	113
Abb. 7.18	Relative Abweichungen (in %) zwischen FENNECS und Serpent für ABR-Kern im Zustand ARI /ABR 25/	114

Tabellenverzeichnis

Tab. 3.1	Werte von $1\gamma_{he}$, $\beta 0, he$, $\beta 1, he$, $\alpha 0, he$ und $\alpha 1, he$ je nach Randbedingung. Näheres siehe Text.....	15
Tab. 3.2	Terme für die erste und die zweite Gleichung in Matrix-Vektor-Notation	21
Tab. 4.1	Konvergenzverhalten des Wielandt-Verfahrens mit globaler und lokaler Eigenwertverschiebung	31
Tab. 4.2	Graue Approximation am Beispiel des ESFR-Reaktorkerns	33
Tab. 6.1	Multiplikationsfaktoren für verschiedene Zustände des ABR, errechnet mit FENNECS (Diffusion und SP_3) mit und ohne SPH-Methode, im Vergleich mit Serpent-Referenz.....	90
Tab. 7.1	Vergleich von SPR-Modellen – mit hexagonaler Vernetzung (alt) und mit Delaunay-Vernetzung und erweitertem NestedPolygon-Konzept	93
Tab. 7.2	Gruppenkonstanten für den Reaktor mit thermischem Spektrum. $\lambda = 0,08$ 1/s, $\beta = 0,0075$. Strich über Ziffer: periodischer Dezimalbruch	97
Tab. 7.3	Ereignisablauf im Reaktor mit thermischem und schnellem Neutronenspektrum	97
Tab. 7.4	Mit FENNECS berechnete Multiplikationsfaktoren im Vergleich mit Serpent und FRENETIC	108
Tab. 7.5	Vergleiche der Multiplikationsfaktoren von FENNECS mit jenen von Serpent für den ABR mit (n, xn)-Streuprozessen	112
Tab. 7.6	Vergleiche der Multiplikationsfaktoren von FENNECS mit jenen von Serpent für den ABR ohne (n, xn)-Streuprozesse	112

Literaturverzeichnis

- /ABR 25/ Abrate, N., Bousquet, J., Dulla, S., Lo Muzio, S., Seubert, A., Vita, C.: The Neutronics Codes FENNECS and FRENETIC: Code-to-code Benchmarking on Lead and Sodium-cooled Fast Reactors. In: International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering (M&C 2025). Denver, CO, USA, 27. - 30. April 2025, S. 2123–2132, 2025.
- /BAB 20/ Babcsány, B., Bartók, T., Kis, D. P.: Finite element solution of the time-dependent SP3 equations using an implicit integration scheme. Kerntechnik, Bd. 2020, Nr. 85, 2020.
- /BER 08/ Berg, M., Cheong, O., Kreveld, M., Overmars, M.: Computational Geometry Algorithms and Applications. 3. Aufl., ISBN 978-3540779735, Springer, 2008.
- /BET 22/ Betzler, B. R., Ade, B. J., Jain, P. K., Wysocki, A. J., Chesser, P. C., Kirkland, W. M., Cetiner, M. S., Bergeron, A., Heidet, F., Terrani, K. A.: Conceptual Design of the Transformational Challenge Reactor. Nuclear Science and Engineering, S. 1–26, DOI 10.1080/00295639.2021.1996196, 2022.
- /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.
- /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.
- /BOY 10/ Boyavala, S., Le Bris, C., Lelièvre, T., Maday, Y., Nguyen, N. C., Patera, A.: Reduced basis techniques for stochastic problems. Computational Methods in Engineering, Bd. 2010, Nr. 17, S. 434–454, 2010.

- /BRA 00/ Brantley, P. S., Larsen, E. W.: The Simplified P3 Approximation. Nuclear Science and Engineering, Bd. 134, Nr. 1, S. 1–21, DOI 10.13182/NSE134-01, 2000.
- /BRI 07/ Bridson, R.: Fast Poisson disk sampling in arbitrary dimensions. SIGGRAPH sketches, Bd. 10, Nr. 1, S. 1, 2007.
- /CAR 16/ Caron, D., Dulla, S., Ravetto, P.: New aspects in the implementation of the quasi-static method for the solution of neutron diffusion problems in the framework of a nodal method. Annals of Nuclear Energy, Bd. 87, S. 34–48, DOI 10.1016/j.anucene.2015.02.035, 2016.
- /CAS 91/ Casal, J. J., Stamm'ler, R., Villarino, E. A., Ferri, A. A.: HELIOS: Geometric Capabilities of a New Fuel-assembly Program. Proc. Int. Topl. Mtg. Advances in Mathematics, Computations, and Reactor Physics, Vol. II, Sect. 10.2.1, pp. 1-13: Pittsburgh, PA, USA, 28. April 1991.
- /CHI 11a/ Chinesta, F., Ladevèze, P., Cueto, E.: A Short Review in Model Order Reduction Based on Proper Generalized Decomposition. Computational Methods in Engineering, Nr. 18, S. 395–404, 2011.
- /CHI 11b/ Chinesta, F., Ladeveze, P., Cueto, E.: A Short Review on Model Order Reduction Based on Proper Generalized Decomposition. Archives of Computational Methods in Engineering, Bd. 18, Nr. 4, S. 395–404, DOI 10.1007/s11831-011-9064-7, 2011.
- /CHI 14/ Chinesta, F., Keunings, R., Leygue, A.: The Proper Generalized Decomposition for Advanced Numerical Simulations. 127 S., ISBN 978-3-319-02864-4, DOI 10.1007/978-3-319-02865-1, Springer International Publishing: Cham, 2014.
- /DOW 02/ Downar, T., Barber, D., Miller, M., Lee, C.-H., Kozłowski, T., Lee, D., Xu, Y., Gan, J., Joo, H. G., Cho, J.-Y., Lee, K., Ulses, A.: PARCS: Purdue advanced reactor simulator. In: Proceedings of the PHYSOR 2002. 2002.
- /DUD 76/ Duderstadt, J. J., Hamilton, L. J.: Nuclear Reactor Analysis. ISBN 978-0-471-22363-4, John Wiley & Sons, 1976.

- /FER 20/ Ferraro, D., García, M., Valtavirta, V., Imke, U., Tuominen, R., Leppänen, J., Sánchez Espinoza, V. H.: Serpent/SUBCHANFLOW pin-by-pin coupled transient calculations for the SPERT-IIIE hot full power tests. *Annals of Nuclear Energy*, Bd. 142, DOI 10.1016/j.anucene.2020.107387, 2020.
- /GRA 14/ Grasso, G., Petrovich, C., Mattioli, D., Artioli, C., Sciora, P., Gugiu, D., Bandini, G., Bubelis, E., Mikityuk, K.: The core design of ALFRED, a demonstrator for the European lead-cooled reactors. *Nuclear Engineering and Design*, Bd. 278, S. 287–301, DOI 10.1016/j.nucengdes.2014.07.032, 2014.
- /HAR 24/ Hardy, Z. K., Morel, J. E.: Proper Orthogonal Decomposition Mode Coefficient Interpolation: A Non-Intrusive Reduced-Order Model for Parametric Reactor Kinetics. *Nuclear Science and Engineering*, Bd. 198, Nr. 4, S. 832–852, DOI 10.1080/00295639.2023.2218581, 2024.
- /HÉB 93/ Hébert, A., Mathonnière, G.: Development of a Third-Generation Superhomogénéisation Method for the Homogenization of a Pressurized Water Reactor Assembly. *Nuclear Science and Engineering*, S. 129–141, 1993.
- /HEN 25a/ Henry, R., Bousquet, J., Seubert, A.: Implementation of a Projection-based Control Rod De-Cusping Method in the Finite Element Neutronic Code FENNECS. *Annals of Nuclear Energy*, 2025.
- /HEN 25b/ Henry, R., Bousquet, J., Seubert, A.: Extending the finite elements neutronic code FENNECS to the Discontinuous Galerkin method. *Annals of Nuclear Energy*, Bd. 211, DOI 10.1016/j.anucene.2024.110927, 2025.
- /HES 08/ Hesthaven, J. S., Warburton, T.: *Nodal Discontinuous Galerkin Methods, Algorithms, Analysis, and Applications*. Springer-Verlag, 2008.
- /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.
- /HU 19/ Hu, G., Hu, R., Kelly, J. M., Ortensi, J.: *Multi-Physics Simulations of Heat Pipe Micro Reactor*. Argonne National Laboratory (ANL), September 2019.

- /LAB 19/ Labouré, V., Wang, Y., Ortensi, J., Schunert, S., Gleicher, F., DeHart, M., Martineau, R.: Hybrid super homogenization and discontinuity factor method for continuous finite element diffusion. *Annals of Nuclear Energy*, Bd. 128, S. 443–454, DOI 10.1016/j.anucene.2019.01.003, 2019.
- /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 13/ Leppänen, J.: DEVELOPMENT OF A DYNAMIC SIMULATION MODE IN SERPENT 2 MONTE CARLO CODE. In: *M&C 2013, International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering*. Sun Valley, ID, USA, 5. - 9. Mai 2013, 2013.
- /LEP 15/ Leppänen, J., Pusa, M., Viitanen, T., Valtavirta, V., Kaltiaisenaho, T.: The Serpent Monte Carlo Code, Status, Development and Applications in 2013. *Annals of Nuclear Energy*, Bd. 82, S. 142–150, DOI 10.1016/j.anucene.2014.08.024, 1. August 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.
- /LEP 25/ Leppänen, J., Valtavirta, V., Rintala, A., Tuominen, R.: Status of Serpent Monte Carlo code in 2024. *EPJ Nuclear Sciences & Technologies*, Bd. 11, S. 3, DOI 10.1051/epjn/2024031, 2025.
- /LOM 24/ Lo Muzio, S.: Implementation of the SP3 approximation for the neutron transport equation in FENNECS, Dissertation. 128 S.: TUM School of Engineering and Design, Lehrstuhl für Nukleartechnik, 2024.
- /LOM 22/ Io Muzio, S., Seubert, A.: Verification of the SP3 Solver in FENNECS with C5G7 Test Cases using HELIOS Cross Sections. *ETSON Conference in Munich*, 2022.

- /MAR 19/ Martineau, R. C.: DireWolf: MOOSE-based Multiphysics Simulator for Megawatt Scale Micro-Reactor. Präsentation, Idaho National Laboratory (INL), GAIN-EPRI-NEI US NIC Micro-Reactor Workshop 2-3 April 2019, 2019.
- /MAT 19/ Matthews, C., Wilkerson, B., Johns, R., Trelue, H., Martineau, R. C.: ARPA-E MEITNER eVinci Resource Team, Task 1: Evaluation of M&S tools for micro-reactor concepts, Los Alamos National Laboratory, LA-UR-19-222. 2019.
- /MIK 17/ Mikityuk, K.: ESFR-SMART: new Horizon-2020 project on SFR safety, International conference on fast reactors (FR17). 2017.
- /SCH 17/ Schunert, S., Wang, Y., Gleicher, F., Ortensi, J., Baker, B., Laboure, V., Wang, C., DeHart, M., Martineau, R.: A Flexible Nonlinear Diffusion Acceleration Method for the SN Transport Equations Discretized with Discontinuous Finite Elements. 2017.
- /SCH 19/ Schunert, S., Wang, Y., Ortensi, J., Laboure, V., Gleicher, F., DeHart, M., Martineau, R.: Control rod treatment for FEM based radiation transport methods. Annals of Nuclear Energy, Bd. 127, S. 293–302, DOI 10.1016/j.anucene.2018.11.054, 2019.
- /SEU 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.
- /SLO 93/ Sloan, S. W.: A fast algorithm for generating constrained Delaunay triangulations. Computers & Structures, Bd. 47, Nr. 3, S. 441–450, 1993.

- /SMI 03/ Smith, M. A., Lewis, E. E., Мысвииков, А.: Benchmark on Deterministic Transport Calculations Without Spatial Homogenisation, A 2-D/3-D MOX Fuel Assembly Benchmark. Nuclear Energy Agency of the OECD (NEA), 147 S., 2003.
- /STE 17/ Sterbentz, J. W., Werner, J. E., McKellar, M. G., Hummel, A. J., Kennedy, J. C., Wright, R. N., Biersdorf, J. M.: Special Purpose Nuclear Reactor (5 MW) for Reliable Power at Remote Sites, Assessment Report. Idaho National Laboratory (INL), INL/EXT-16-40741, April 2017.
- /TAK 91/ Takeda, T., Ikeda, H.: 3-D Neutron Transport Benchmarks, NEACRP-L-330. Hrsg.: OECD/NEA Committee on Reactor Physics (NEACRP), 103 S., März 1991.
- /WAN 20/ Wang, C., Sun, H., Tang, S., Tian, W., Qiu, S., Su, G.: Thermal-hydraulic analysis of a new conceptual heat pipe cooled small nuclear reactor system. Nuclear Engineering and Technology, Bd. 52, Nr. 1, S. 19–26, DOI 10.1016/j.net.2019.06.021, 2020.
- /WIE 24/ Wieselquist, W. A., Lefebvre, R. A., Eds.: SCALE 6.3.2 User Manual. ORNL/TM-2024/3386, Oak Ridge National Laboratory (ORNL): UT-Battelle, erreichbar unter <https://scale-manual.ornl.gov/index.html>, abgerufen am 15. Dezember 2024.
- /YEE 17/ Yee, B. C., Kochunas, B., Larsen, E. W., Xu, Y.: Space-Dependent Wielandt Shifts for Multigroup Diffusion Eigenvalue Problems. Nuclear Science and Engineering, Bd. 188, Nr. 2, S. 140–159, DOI 10.1080/00295639.2017.1350001, 2017.

**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 978-3-911727-67-9