

Weiterentwicklung und  
Validierung von  
Neutronentransport-  
modellen mit thermo-  
hydraulischer Rück-  
wirkung

Vorhaben RS 1160

Abschlussbericht

## **Abschlussbericht/ Final Report**

Reaktorsicherheitsforschung-  
Vorhabens Nr.:/  
Reactor Safety Research-Project No.:  
RS 1160

Vorhabensitel / Project Title:  
Weiterentwicklung und Validie-  
rung von Neutronentransport-  
modellen mit thermohydrauli-  
scher Rückwirkung

Development and Validation of  
Neutron Transport Models with  
Thermal-Hydraulic Feedback

Autor / Author:  
S. Langenbuch  
A. Papukchiev  
A. Pautz  
A. Seubert  
K. Velkov  
W. Zwermann

Berichtszeitraum / Publication Date:  
November 2008

Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrunde lie-  
gende F&E-Vorhaben wurde im  
Auftrag des Bundesministeriums  
für Wirtschaft und Technologie  
(BMWi) unter dem Kennzeichen  
RS 1160 durchgeführt.

Die Verantwortung für den Inhalt  
dieser Veröffentlichung liegt beim  
Auftragnehmer.





## Kurzfassung

Im Rahmen des Projekts RS 1160 wurden deterministische und statistische Neutronentransportverfahren hinsichtlich ihres Einsatzes für 3D-Ganzkernrechnungen methodisch erweitert, mit geeigneten thermohydraulischen Rückwirkungsmodellen gekoppelt und anhand verschiedener Benchmarks validiert.

Der zeitabhängige deterministische Neutronentransportcode TORT-TD wurde für die Berechnung von LWR-Ganzkernanordnungen mit stabweiser Auflösung (*Pin-by-Pin*) ertüchtigt und mit dem GRS-Thermofluiddynamikcode ATHLET gekoppelt. Mit dem gekoppelten Rechenmodell können nun Transienten wie z. B. der Steuerstabauswurf im LWR für hoch aufgelöste 3D-Geometrien sowie in Multigruppen-Darstellung analysiert werden. In ähnlicher Weise wurde der 2D-Neutronentransportcode DORT-TD für die Berechnung zylindersymmetrischer Systeme am Beispiel von Hochtemperaturreaktoren vom Kugelhaufentyp erprobt und zu diesem Zweck mit einem geeigneten Thermohydraulikcode für gasgekühlte Reaktoren gekoppelt. Die gekoppelten transienten Neutronentransportcodes wurden anhand von Benchmark-Rechnungen validiert.

Weitere wesentliche Aspekte des Projekts waren die Erzeugung geeigneter Wenig-Gruppen-Querschnittsdaten für deterministische Transportrechnungen und deren Einsatz und Validierung für Anwendungsfälle. Außerdem wurde für 3D-Kernrechnungen verstärkt von Monte-Carlo-Analysen mit dem Code MCNP Gebrauch gemacht. Um zu einer möglichst realistischen Kernmodellierung zu gelangen, wurde eine Schnittstelle geschaffen, um MCNP mit räumlich variierenden thermohydraulischen Parametern zu versorgen. Darüber hinaus wurde MCNP eingesetzt, um den Einfluss der nuklearen Basisdaten auf die Ergebnisse von Kernberechnungen zu analysieren.

## Abstract

In the framework of the project RS 1160, both deterministic and stochastic neutron transport methods were extended towards their usage in 3D-coupled full core calculations. These methods were also coupled to suitable thermal-hydraulic feedback models and validated on several experimental and computational benchmarks.

The time-dependent deterministic neutron transport code TORT-TD was methodologically improved in order to treat LWR-full cores in pin-by-pin resolution, and was coupled to the GRS thermo-fluidynamics code ATHLET. With the coupled model, transients like e.g. control rod ejection in LWR can now be calculated for high-resolution 3D geometries and in multi-group representation by means of neutron transport theory. Similarly, the 2D transport code DORT-TD, which is mainly suitable for the simulation of cylindrically symmetric systems, was employed to model high-temperature reactors of pebble bed type. For that purpose, DORT-TD was coupled with a thermo-fluidynamics code suitable for gas-cooled reactors. Both coupled transport codes were validated on suitable benchmark exercises.

Another important aspect of the project was the generation of few-group cross sections suitable for deterministic transport calculations and their usage and validation for representative applications. Moreover, extensive usage was made of Monte-Carlo analyses by means of the code MCNP. In order to achieve a reactor core modeling as realistic as possible, an interface was invented which allows supplying spatially varying thermal hydraulic parameters to MCNP. Finally, MCNP was used to analyze the influence of nuclear base data libraries on the outcomes of full core calculations.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung.....</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Beschreibung der berechneten Benchmarks.....</b>	<b>4</b>
2.1	Die KRITZ-2-Benchmarks .....	4
2.2	Die VENUS-7-Benchmarks .....	4
2.3	Der DWR-MOX/VO <sub>2</sub> -Kerntransientenbenchmark .....	5
2.4	Der VVER-1000-Ganzkernbenchmark .....	5
2.5	Benchmark zur Quantifizierung der Genauigkeit von 3D- Transportmethoden .....	6
2.6	Der PBMR400 Transient Benchmark .....	7
<b>3</b>	<b>Weiterentwicklung der nuklearen Rechenmethodik.....</b>	<b>9</b>
3.1	Einführung.....	9
3.2	TORT-TD – zeitabhängige Erweiterung des dreidimensionalen stationären Diskrete-Ordinaten-Codes TORT .....	10
3.3	TORT-TD/ATHLET – Kopplung von TORT-TD mit dem GRS- Systemcode ATHLET.....	12
3.3.1	Kopplungsstrategie .....	13
3.3.2	Parametrisierte Wirkungsquerschnitts-Bibliotheken.....	14
3.3.3	Steuerung von TORT-TD und Präprozessor.....	15
3.3.4	Reduktion von Homogenisierungsfehlern durch Stabzell- Diskontinuitätsfaktoren .....	16
3.4	Anwendung von TORT-TD/ATHLET auf Testfälle .....	18
3.4.1	Generierung von Wirkungsquerschnitten und Daten der verzögerten Neutronen .....	18
3.4.2	Lokale Borkonzentrationsänderung in einem Brennelement: Untersuchung der Rückwirkungsmodellierung in TORT-TD/ATHLET .....	19
3.4.3	2x2-Brennelement-Anordnung.....	21
3.4.4	Steuerelementauswurf in einem DWR-Viertelkern.....	23
3.5	Untersuchungen zur Kopplung von TORT-TD mit einem CFD-Code .....	24

3.6	TORT-Berechnungen des Benchmark zur Quantifizierung der Genauigkeit von 3D-Transportmethoden .....	25
3.7	Zusammenfassung und Bewertung .....	26
<b>4</b>	<b>Stationäre Kernberechnungen mit Monte-Carlo- und deterministischen Neutronen-Transportprogrammen.....</b>	<b>28</b>
4.1	Einleitung .....	28
4.2	Bereitstellung von Weniggruppendaten für deterministische Transportrechnungen.....	29
4.2.1	Erzeugung von Weniggruppendaten für unkontrollierte Brennelemente..	30
4.2.2	Einsatz der Weniggruppendaten für unkontrollierte Brennelemente.....	32
4.2.3	Einsatz der Weniggruppendaten für eine unkontrollierte 2X2-Anordnung.....	33
4.2.4	Einsatz der Weniggruppendaten für den unkontrollierten Kern des DWR-MOX/ $\text{UO}_2$ -Kerntransientenbenchmarks .....	33
4.2.5	Erzeugung von Weniggruppendaten für kontrollierte Brennelemente.....	34
4.2.6	Einsatz der Weniggruppendaten für kontrollierte Brennelemente.....	36
4.2.7	Einsatz der Weniggruppendaten für eine kontrollierte 2X2-Anordnung ....	36
4.2.8	Einsatz der Weniggruppendaten für den kontrollierten Kern des DWR-MOX/ $\text{UO}_2$ -Kerntransientenbenchmarks .....	37
4.3	Monte-Carlo-Berechnungen mit thermohydraulischen Parametern.....	38
4.3.1	Berechnung des heißen KRITZ-2:13-Kerns.....	39
4.3.2	Berechnung einer 2X2-Anordnung mit gemittelten thermohydraulischen Parametern .....	41
4.3.3	Berechnung einer 2X2-Anordnung mit variablen thermohydraulischen Parametern .....	42
4.4	Einfluss nuklearer Daten auf Kernberechnungen.....	43
4.4.1	Nachrechnung der KRITZ-2-Benchmarks.....	43
4.4.2	Nachrechnung der VENUS-7-Benchmarks.....	44
4.4.3	Berechnung des DWR-MOX/ $\text{UO}_2$ - und des VVER-1000-Ganzkernbenchmarks .....	45
4.5	Zusammenfassung und Bewertung .....	47

<b>5</b>	<b>Der Einsatz von zeitabhängiger Neutronentransporttheorie für Hochtemperaturreaktoren vom Kugelhaufentyp.....</b>	<b>50</b>
5.1	Einleitung .....	50
5.2	Eigenschaften des Codes DORT-TD .....	52
5.3	Validierung des Codes DORT-TD .....	55
5.4	Stationäre Untersuchungen zum Modularen Hochtemperaturreaktor (PBMR) .....	56
5.5	Kopplung von DORT-TD an den Thermohydraulikcode THERMIX-DIREKT .....	58
5.6	Transientenstudien zum PBMR268-Design .....	59
5.6.1	Steuerstab-Fehlfahren mit maximal zulässiger Fahrgeschwindigkeit .....	60
5.6.2	Steuerstabauswurf .....	61
5.6.3	Unterkühlungstransiente: Einbruch von kaltem Helium in den Kern .....	61
5.7	Der PBMR400-Benchmark.....	62
5.8	Zusammenfassung.....	65
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung und Bewertung .....</b>	<b>66</b>
<b>7</b>	<b>Literaturverzeichnis .....</b>	<b>69</b>
<b>8</b>	<b>Tabellen.....</b>	<b>76</b>
<b>9</b>	<b>Abbildungen .....</b>	<b>84</b>
<b>10</b>	<b>Anhang A: Veröffentlichungen im Rahmen von RS1160.....</b>	<b>155</b>
<b>11</b>	<b>Verteiler .....</b>	

## Tabellenverzeichnis

Tabelle 2-1: Parameter der KRITZ-2-Anordnungen.....	76
Tabelle 2-2: Stabpositionen, bei denen in den KRITZ-2- Experimenten die stabweisen Spaltraten bestimmt wurden. ....	77
Tabelle 2-3: Parameter der Reaktorzustände beim WWER-1000-Ganzkernbenchmark. ....	78
Tabelle 3-1: Schema des NEMTAB-Formats für eine parametrisierte Wirkungsquerschnittsbibliothek in zwei Energiegruppen für TORT-TD... 79	
Tabelle 3-2: TORT-Ergebnisse für die 23 gesuchten Größen 1.b bis 3.m für den Fall $L = 1,0$ , $\sigma_1 = 0,1$ , $c_1 = 0,5$ , $\sigma_2 = 0,1$ und $c_2 = 0,5$ . Die Angaben in den Spalten „% Error“ sind die prozentualen Abweichungen zur MCNP-Lösung. ....	80
Tabelle 4-1: Energiegruppengrenzen (in eV) der 18-Gruppenbibliotheken aus der 44-Gruppen-ENDF/B-V- und der 292-Gruppen-JEF-2.2-Bibliothek.....	81
Tabelle 4-2: Berechnete Reaktivitätswerte aller Steuerstäbe beim DWR-MOX/UO <sub>2</sub> -Kerntransientenbenchmark, sowie der gezogenen Steuerstäbe eines Brennelementes im Viertelkern.....	82
Tabelle 4-3: Mit JEF-2.2 und JEFF-3.1 berechnete Multiplikationsfaktoren beim DWR-MOX/UO <sub>2</sub> -Kerntransientenbenchmark und beim WWER-1000-Ganzkernbenchmark. ....	82
Tabelle 5-1: Die von DORT-TD für den stationären PBMR268-Benchmark berechneten Eigenwerte für die Konfigurationen ARI (voll eingefahrene Steuerstäbe) und ARO (Steuerstäbe in Betriebsposition). Verglichen werden die Ergebnisse von Diffusionstheorie und P3S8-Transportrechnung. ....	83

Tabelle 5- 2: Die von DORT-TD/THERMIX-DIREKT für den gekoppelten Zustand des PBMR268 berechneten Eigenwerte für Diffusionstheorie und unterschiedliche Transportordnungen. ....	83
Tabelle 3-1: Schema des NEMTAB-Formats für eine parametrisierte Wirkungsquerschnittsbibliothek in zwei Energiegruppen für TORT-TD...	79
Tabelle 3-2: TORT-Ergebnisse für die 23 gesuchten Größen 1.b bis 3.m für den Fall $L = 1,0$ , $\sigma_1 = 0,1$ , $c_1 = 0,5$ , $\sigma_2 = 0,1$ und $c_2 = 0,5$ . Die Angaben in den Spalten „% Error“ sind die prozentualen Abweichungen zur MCNP-Lösung. ....	80
Tabelle 4-1: Energiegruppengrenzen (in eV) der 18-Gruppenbibliotheken aus der 44-Gruppen-ENDF/B-V- und der 292-Gruppen-JEF-2.2-Bibliothek. ....	81
Tabelle 4-2: Berechnete Reaktivitätswerte aller Steuerstäbe beim DWR-MOX/UO <sub>2</sub> -Kerntransientenbenchmark, sowie der gezogenen Steuerstäbe eines Brennelementes im Viertelkern.....	82
Tabelle 4-3: Mit JEF-2.2 und JEFF-3.1 berechnete Multiplikationsfaktoren beim DWR-MOX/UO <sub>2</sub> -Kerntransientenbenchmark und beim WWER-1000-Ganzkernbenchmark. ....	82
Tabelle 5-1: Die von DORT-TD für den stationären PBMR268-Benchmark berechneten Eigenwerte für die Konfigurationen ARI (voll eingefahrene Steuerstäbe) und ARO (Steuerstäbe in Betriebsposition). Verglichen werden die Ergebnisse von Diffusionstheorie und P <sub>3</sub> S <sub>8</sub> -Transportrechnung. ....	83
Tabelle 5- 2: Die von DORT-TD/THERMIX-DIREKT für den gekoppelten Zustand des PBMR268 berechneten Eigenwerte für Diffusionstheorie und unterschiedliche Transportordnungen. ....	83

## Abbildungsverzeichnis

Abb. 2-1: Horizontaler Querschnitt durch den KRITZ-Reaktor. ....	84
Abb. 2-2: Vertikaler Querschnitt durch den KRITZ-Reaktor. ....	85
Abb. 2-3: Horizontaler Querschnitt durch die VENUS-7-Anordnungen. ....	86
Abb. 2-4: Vertikaler Querschnitt durch die VENUS-7-Anordnungen. ....	87
Abb. 2-5: Kernanordnung und Brennelemente des DWR-MOX/UO <sub>2</sub> - Kerntransientenbenchmarks. Die gestrichelten Linien links kennzeichnen die Symmetrieachsen in radialer Richtung.....	88
Abb. 2-6: Kernanordnung des WWER-1000-Ganzkernbenchmarks. ....	89
Abb. 2-7: Geometrie des Benchmarks „Quantifizierung der Genauigkeit von 3D- Transportmethoden“ (links) und Ort der Einheits-Neutronenquelle (rechts). 90	
Abb. 2-8: Geometrie und Materialspezifikation des PBMR400 Transient Benchmarks. ....	91
Abb. 3-1: Drei verschiedene Arten, einen Thermohydraulik-Systemcode mit einem 3D-Neutronenkinetikcode zu koppeln. Für TORT-TD/ATHLET wurde die obere Variante realisiert. ....	92
Abb. 3-2: Mascheneinteilung für 1D-Transportproblem.....	93
Abb. 3-3: Modellierung des UO <sub>2</sub> -Brennelements mit ausgefahrenen Steuerstäben (links) und des MOX-Brennelements (rechts) in HELIOS. ....	93
Abb. 3-4: Stabzellenlayout des UO <sub>2</sub> - und MOX-Brennelements mit IFBA- bzw. WABA-Stabzellgeometrie.....	94

Abb. 3-5: UO <sub>2</sub> -Brennelement, in dem die rot umrandete Gruppe von 27 Stabzellen der unten dargestellten zeitlichen Änderung der Borkonzentration unterworfen wird.....	95
Abb. 3-6: Zeitlicher Verlauf der Gesamtleistung im Brennelement während der Transiente für die drei ATHLET-Modelle. Die Grafik unten zeigt einen vergrößerten Ausschnitt in der Umgebung des Leistungsmaximums.....	96
Abb. 3-7: Axiale Leistungsprofile in den thermohydraulischen Kanälen der Stabzellen 85 (rot) und 205 (blau) zum Zeitpunkt $t = 13$ sec. ....	97
Abb. 3-8: 2x2- Anordnung von UO <sub>2</sub> -Brennelementen. Oben: Radialer Querschnitt. Unten: Axialer Querschnitt in liegender Darstellung mit axialen Reflektoren.....	98
Abb. 3-9: Ergebnisse für die Steuerelementauswurf-Transiente in der 2x2-Brennelement-Anordnung von Abb. 3-8. Links: Stabzellenweise Leistungsverteilung unmittelbar vor Beginn der Transiente. Rechts: Zeitverlauf der Gesamtleistung während der Transiente. ....	98
Abb. 3-10: Axiale Profile der brennelementgemittelten zentralen Brennstofftemperatur für die Steuerelementauswurftransiente in der 2x2-Brennelement-Anordnung. Schwarze Kurven: Ausgangszustand. Rote Kurven: während der Transiente kurz vor dem Leistungsmaximum. Die Anordnung der vier Grafiken korrespondiert mit der Brennelement-Anordnung in Abb. 3-8. ....	99
Abb. 3-11: Wie Abb. 3-10, hier jedoch brennelementgemittelte axiale Leistungsprofile.....	100
Abb. 3-12: Über einzelne Brennelemente gemittelte axiale Leistungsprofile aus der TORT-TD/ATHLET-Rechnung im Vergleich zur MCNP-Lösung unter Verwendung nuklearer JEF-2.2-Punktdatei und der Verteilung der thermohydraulischen Parameter aus der TORT-TD/ATHLET-Analyse. (Beachte: Die Brennelemente A2 und B1 sind symmetrisch äquivalent.).	101
Abb. 3-13: Wie Abb. 3-12, jedoch oben für ausgewählte Stabzellen im Innenraum (Brennelement A1) und unten für die Zelle im rechten unteren Eck von	

Brennelement B2. Die senkrechten Balken sind ein Maß für die statistische Unsicherheit der Monte-Carlo-Lösung. ....	102
Abb. 3-15: Zeitlicher Verlauf der auf den Ausgangszustand normierten Gesamtleistung während der Steuerelementauswurf-Transiente im Viertelkern. ....	104
Abb. 3-16: Zeitverlauf der mittleren Brennstofftemperatur in Brennelement E5 (oben) und dem dazu benachbarten in Position E4 (unten) für ausgewählte axiale Maschen.....	105
Abb. 3-17: Axiale Profile der mittleren Brennstofftemperatur in Brennelement E5 (oben) und dem dazu benachbarten in Position E4 (unten) für ausgewählte Zeitpunkte. ....	106
Abb. 3-18: Ausschnitt aus der Vernetzung der Stabzelle in CFX. ....	107
Abb. 3-19: Axiales Leistungsprofil aus der gekoppelten TORT-TD/ATHLET-Rechnung für eine einzelne Stabzelle. ....	107
Abb. 3-20: Axialer Verlauf der Moderatorerdichte aus der CFX-Rechnung im Vergleich mit der ATHLET-Modellierung.....	108
Abb. 4-1: Multiplikationsfaktoren der unkontrollierten Brennelemente des DWR-MOX/VO <sub>2</sub> -Kerntransientenbenchmarks, berechnet mit MCNP und NEWT.....	108
Abb. 4-2: Multiplikationsfaktoren der unkontrollierten Brennelemente des DWR-MOX/VO <sub>2</sub> -Kerntransientenbenchmarks, berechnet mit NEWT und PARTISN.....	109
Abb. 4-3: Unterschiede zwischen den mit PARTISN und NEWT berechneten Leistungsverteilungen eines frischen unkontrollierten Uranbrennelements des DWR-MOX/VO <sub>2</sub> -Kerntransientenbenchmarks.....	110
Abb. 4-4: Unterschiede zwischen den mit PARTISN und NEWT berechneten Leistungsverteilungen eines frischen unkontrollierten MOX-Brennelements des DWR-MOX/VO <sub>2</sub> -Kerntransientenbenchmarks.....	111

Abb. 4-5: Unterschiede zwischen den mit PARTISN und MCNP berechneten Leistungsverteilungen einer 2X2-Anordnung aus frischen unkontrollierten Uranbrennelementen des DWR-MOX/UO <sub>2</sub> -Kerntransientenbenchmarks.	112
Abb. 4-6: Unterschiede zwischen den mit DANTSYS und MCNP berechneten Leistungsverteilungen für den unkontrollierten Kern des DWR-MOX/UO <sub>2</sub> -Kerntransientenbenchmarks. ....	113
Abb. 4-7: Unterschiede zwischen den mit DANTSYS und MCNP berechneten Stableistungsverteilungen für ein Brennelement des unkontrollierten Kerns des DWR-MOX/UO <sub>2</sub> -Kerntransientenbenchmarks. ....	114
Abb. 4-8: Unterschiede zwischen den mit PARCS und MCNP berechneten Leistungsverteilungen für den unkontrollierten Kern des DWR-MOX/UO <sub>2</sub> -Kerntransientenbenchmarks. ....	115
Abb. 4-9: Unterschiede zwischen mit KENO mit unterschiedlichen Gruppendaten und MCNP berechneten Leistungsverteilungen für den unkontrollierten Kern des DWR-MOX/UO <sub>2</sub> -Kerntransientenbenchmarks. ....	116
Abb. 4-10: Multiplikationsfaktoren der kontrollierten Brennelemente des DWR-MOX/UO <sub>2</sub> -Kerntransientenbenchmarks, berechnet mit MCNP und NEWT. ....	117
Abb. 4-11: Reaktivitätswerte der Absorberstäbe in den Brennelementen des DWR-MOX/UO <sub>2</sub> -Kerntransientenbenchmarks, berechnet mit NEWT und PARTISN. ....	118
Abb. 4-12: Unterschiede zwischen den mit PARTISN und NEWT berechneten Leistungsverteilungen eines frischen kontrollierten Uranbrennelements des DWR-MOX/UO <sub>2</sub> -Kerntransientenbenchmarks mit unkorrigierten und korrigierten homogenisierten Absorberwirkungsquerschnitten. ....	119
Abb. 4-13: Unterschiede zwischen den mit PARTISN und MCNP berechneten Leistungsverteilungen einer 2X2-Anordnung mit einem kontrollierten Eckbrennelement unter Verwendung von unkorrigierten und korrigierten homogenisierten Absorberwirkungsquerschnitten. ....	120

Abb. 4-14: Unterschiede zwischen den mit DANTSYS und MCNP berechneten Leistungsverteilungen für den kontrollierten Kern des DWR-MOX/UO <sub>2</sub> -Kerntransientenbenchmarks unter Verwendung von unkorrigierten und korrigierten homogenisierten Absorberwirkungsquerschnitten. ....	121
Abb. 4-15: Unterschiede zwischen den mit DANTSYS und MCNP berechneten Stableistungsverteilungen für ein kontrolliertes Brennelement des kontrollierten Kerns des DWR-MOX/UO <sub>2</sub> -Kerntransientenbenchmarks...	122
Abb. 4-16: Unterschiede zwischen den mit PARCS und MCNP berechneten Leistungsverteilungen für den kontrollierten Kern des DWR-MOX/UO <sub>2</sub> -Kerntransientenbenchmarks. ....	123
Abb. 4-17: Gemessene und mit MCNP und PARTISN berechnete radiale Spaltratenverteilungen im heißen KRITZ-2:13-Kern entlang zweier Achsen.	124
Abb. 4-18: Unterschied der mit PARTISN und MCNP berechneten radialen Spaltratenverteilungen im heißen KRITZ-2:13-Kern mit 2X2 und 1X1 Maschen pro Stabzelle.....	125
Abb. 4-19: Mit PARTISN und MCNP berechnete axiale Spaltratenverteilungen im heißen KRITZ-2:13-Kern.....	126
Abb. 4-20: Mit PARTISN und MCNP berechnete axiale Spaltratenverteilungen in einer 2X2-Anordnung von frischen Uran-Brennelementen mit konstanten thermohydraulischen Parametern. ....	127
Abb. 4-21: Unterschied der mit PARTISN und MCNP berechneten radialen Stableistungsverteilungen in einer 2X2-Anordnung von frischen Uran-Brennelementen mit konstanten thermohydraulischen Parametern. ....	128
Abb. 4-22: Mit TORT-TD/ATHLET und MCNP berechnete axiale Spaltratenverteilungen in einer 2X2-Anordnung von frischen Uran-Brennelementen mit ortsabhängigen thermohydraulischen Parametern. ....	129

- Abb. 4-23: Unterschied der mit TORT-TD/ATHLET und MCNP berechneten radialen Stableistungsverteilungen in einer 2X2-Anordnung von frischen Uran-Brennelementen mit ortsabhängigen thermohydraulischen Parametern. . 130
- Abb. 4-24: Multiplikationsfaktoren für die KRITZ-2-Anordnungen: Mit JEF-2.2 und JEFF-3.1 berechnete Werte im Vergleich zum Experiment. .... 131
- Abb. 4-25: Unterschiede der mit JEF-2.2-Daten berechneten und der gemessenen radialen Spaltratenverteilung für die KRITZ-2-Anordnungen. .... 131
- Abb. 4-26: Unterschied der mit JEFF-3.1 und JEF-2.2 berechneten radialen Spaltratenverteilungen für die kritische Anordnung KRITZ-2:13 (heiß). ... 132
- Abb. 4-27: Multiplikationsfaktoren für die VENUS-7-Anordnungen: Mit JEF-2.2 und JEFF-3.1 berechnete Werte im Vergleich zum Experiment. .... 132
- Abb. 4-28: Vergleich der mit JEF-2.2-Daten berechneten und der gemessenen radialen Spaltratenverteilung für die VENUS-7/1-Anordnung. .... 133
- Abb. 4-29: Unterschied der mit JEFF-3.1 und JEF-2.2 berechneten radialen Stableistungsverteilungen für die kritische Anordnung VENUS-7/1. .... 133
- Abb. 4-30: Unterschied der mit JEFF-3.1 und JEF-2.2 berechneten radialen Brennelementleistungsverteilungen für den unkontrollierten Zustand des DWR-MOX/UO<sub>2</sub>-Kerntransientenbenchmarks. .... 134
- Abb. 4-31: Unterschied der mit JEFF-3.1 und JEF-2.2 berechneten radialen Brennelementleistungsverteilungen für den Vollast-Betriebszustand des VVER-1000-Ganzkernbenchmarks. .... 134
- Abb. 4-32: Unterschied der mit JEFF-3.1 und JEF-2.2 berechneten radialen Brennelementleistungsverteilungen für den borfreien kontrollierten Zustand des VVER-1000-Ganzkernbenchmarks. .... 135
- Abb. 5-1: DORT-TD-Ergebnisse zur Nachrechnung des TWIGL-Benchmarks für einen Reaktivitätssprung (rot) und eine Reaktivitätsrampe (blau). Gezeigt sind die Ergebnisse von Diffusionsrechnung (durchgängige Linien) und

Transportrechnung (gestrichelte Linien) im Vergleich zu den Referenzergebnissen (durch Symbole gekennzeichnet) .....	136
Abb. 5-2 DORT-TD-Lösung für die verzögert überkritische Transiente des TIMEX-TDA-Benchmarks. In der Grafik wird mit den Referenzlösungen von TIMEX (blaue Symbole) und TDA (Time-Dependent ANISN, rote Symbole) verglichen.....	137
Abb. 5-3: DORT-TD-Lösung für die prompt überkritische Transiente des TIMEX-TDA-Benchmarks. In der Grafik wird mit den Referenzlösungen von TIMEX (blaue Symbole) und TDA (Time-Dependent ANISN, rote Symbole) verglichen.....	138
Abb. 5-4: DORT-TD-Lösung für den sog. Dodds-Benchmark. In der Grafik wird mit den Referenzlösungen von TRANZIT (siehe /ANL85/) verglichen. Transport- und Diffusionslösung liegen praktisch aufeinander und sind daher in der Grafik durch eine einzelne Kurve berücksichtigt.....	139
Abb. 5-5: Schematische Darstellung des PBMR268-Kugelhaufenreaktors, der als Basis für die Untersuchungen in Abschnitt 5.4 dient.....	140
Abb. 5-6: Axiale Leistungsverteilung für den PBMR268-Benchmark für die Konfigurationen ARO (durchgezogene Linien, alle Steuerstäbe in Betriebsposition ) und ARI (gestrichelte Linien, alle Steuerstäbe voll eingefahren). Gezeigt sind axiale Schnitte entlang der Innenkante (schwarz), Außenkante (blau) und Zentrallinie (rot) der aktiven Zone. ....	141
Abb. 5-7: Die zu Abb. 5-6 korrespondierenden relativen Abweichungen zwischen Diffusions- und Transporttheorie für die Leistungsverteilung des PBMR268-Benchmarks. ....	142
Abb. 5-8: Vergleich der schnellen Flüsse (0.1-10 MeV) für unterschiedliche axiale Positionen des PBMR268. Gezeigt sind die Flüsse für Diffusions- und Transporttheorie (gestrichelte/durchgezogene Linien) für die Oberkante (rot), Unterkante (schwarz) und Mittelebene (blau) der aktiven Zone des Reaktors.....	143

- Abb. 5-9: Die unterschiedlichen Gitternetze, die für die Kopplung DORT-TD und THERMIX-DIREKT verwendet werden. In der linken Abbildung sind die überlagerten Rechengitter der Neutronenkinetik und Thermohydraulik dargestellt, in der mittleren Abbildung das thermohydraulische Gitter mit dem sog. „Rückwirkungsgitter“, auf dem für jede Masche ein individueller Querschnittssatz erzeugt wird. Für die Projektion der neutronenkinetischen Leistungsverteilung auf die Thermohydraulik werden die Leistungsdichten des feinen Neutronenkinetik-Gitters auf den groben Maschen des Leistungsdichte-Gitters (gelbe Maschen in der rechten Abbildung) gemittelt..... 144
- Abb. 5-10: Das Prinzip der Zeitschrittweitensteuerung in DORT-TD/THERMIX-DIREKT. Der „große“ Zeitschritt wird stets von THERMIX ermittelt (entweder aus vom Anwender vorgegebenen Zeitschritten oder selbst-adaptiv im Code), DORT-TD wählt dann wenn erforderlich kleinere Unterzeitschritte. Die Synchronisation zwischen beiden Codes und der notwendige Datenaustausch erfolgt jeweils nur zu Anfang und Ende des „großen“ Zeitschritts..... 145
- Abb. 5-11: Verlauf der integralen Reaktorleistung für den PBMR268-Rechenfall „Simultanes Fehlfahren aller Steuerstäbe“. Im Vergleich sind die Ergebnisse von Diffusionstheorie (blau) und Transporttheorie (rot, P3S8) zu sehen.. 145
- Abb. 5-12: Verlauf der integralen Reaktorleistung für den PBMR268-Störfall „Auswurf aller Regelstäbe“. In der Grafik werden mehrere Transportansätze und Diffusionsapproximation miteinander verglichen..... 146
- Abb. 5-13: Die zu Abb. 5-12 korrespondierenden relativen Unterschiede zwischen den verschiedenen Lösungsansätzen. Der P3S8-Rechenfall wurde hier als „Quasi“-Referenz verwendet. .... 147
- Abb. 5-14: Verlauf der integralen Reaktorleistung für die PBMR268-Transiente „Einbruch von kaltem Helium“; gezeigt ist die relative Leistung für Diffusions- (schwarz) und Transport- (P1S4)-Lösung. Außerdem ist in blau die relative Abweichung zwischen Transport- und Diffusionslösung gezeigt..... 148

Abb. 5-15: Schematische Darstellung des PBMR400-Reaktordesigns. Diese Anordnung ist die Grundlage für die Definition des PBMR400-Transient-Benchmarks. ....	149
Abb. 5-16: Die für die erste PBMR400-Benchmark-Übung (nur Neutronik) berechnete axiale Leistungsdichteverteilung (radial gemittelt). Gezeigt sind die Ergebnisse von DORT-TD gemeinsam mit dem Benchmark-Mittelwert sowie dem Maximum/Minimum-Band der abweichenden Lösungen. ....	150
Abb. 5-17: Die für die erste PBMR400-Benchmark-Übung (nur Neutronik) berechnete radiale Leistungsdichteverteilung (axial gemittelt). Gezeigt sind die Ergebnisse von DORT-TD gemeinsam mit dem Benchmark-Mittelwert sowie dem Maximum/Minimum-Band der abweichenden Lösungen. ....	151
Abb. 5-18: Der im PBMR400-Benchmark berechnete stationäre axiale Leistungsdichteverlauf für die gekoppelte Übung (radial gemittelt). Gezeigt sind die Ergebnisse von DORT-TD (Diffusion und Transport) gemeinsam mit dem Benchmark-Mittelwert sowie dem Maximum/Minimum-Band der abweichenden Lösungen. ....	152
Abb. 5-19: Der im PBMR400-Benchmark berechnete stationäre radiale Leistungsdichteverlauf für die gekoppelte Übung (axial gemittelt). Gezeigt sind die Ergebnisse von DORT-TD (Diffusion und Transport) gemeinsam mit dem Benchmark-Mittelwert sowie dem Maximum/Minimum-Band der abweichenden Lösungen. ....	153
Abb. 5-20: Die für die gekoppelte Übung des PBMR400-Transient Benchmark berechneten Eigenwerte des stationären Ausgangszustandes des Reaktors (Vergleich aller Teilnehmer inklusive der DORT-TD Transport- und Diffusionslösungen).....	154

# 1 Einleitung

Der Inhalt des BMWi-Vorhabens RS 1160 zu Forschungs- und Entwicklungsarbeiten der GRS auf dem Gebiet der Reaktorphysik liegt einerseits in der Weiterentwicklung der nuklearen Rechenmethodik und andererseits in Kernberechnungen mit Monte-Carlo- und deterministischen Neutronen-Transportprogrammen.

Schwerpunkt der Arbeiten auf dem Gebiet der nuklearen Rechenmethodik war die Entwicklung des zeitabhängigen deterministischen Neutronentransportprogramms TORT-TD in 3D-Geometrie und dessen Kopplung mit dem Thermohydraulik-Systemcode ATHLET zur Einbeziehung thermohydraulischer Rückwirkungseffekte. Hintergrund ist die Erfahrung, dass die fortlaufende Optimierung der LWR-Beladestrategien mit immer heterogeneren Kernbeladungen zunehmend eine Herausforderung für die traditionellen nodalen Grobgitter-Diffusionsverfahren mit wenigen (meist nur zwei) Energiegruppen darstellen und zur Überprüfung lokaler sicherheitstechnisch relevanter Parameter zunehmend hochwertigere Referenzmodelle zur Bewertung in Betracht gezogen werden. Es ist daher zu erwarten, dass die bislang vorwiegend im Einsatz befindlichen Verfahren zur Stableistungsrekonstruktion aus nodalen Grobgitterwerten in naher Zukunft durch sog. 3D-Ganzkern-Analysen auf *Pin-by-Pin*-Basis abgelöst werden, wie es bei verschiedenen Brennelement- und Anlagenherstellern bereits angekündigt wurde oder sogar schon der Fall ist. Während solche Verfahren auch weiterhin vornehmlich auf der Diffusionsapproximation oder stark vereinfachten Neutronentransportansätzen wie z. B.  $SP_3$  beruhen werden, bietet TORT-TD die Möglichkeit, neutronenkinetische Vorgänge im Reaktorkern physikalisch prinzipiell exakter modelliert zu können. Durch die Kopplung von TORT-TD mit ATHLET ergibt sich ein gekoppeltes Programmsystem, das einerseits den gestiegenen Ansprüchen an die Störfallberechnung von Leichtwasserreaktoren gerecht werden kann, darüber hinaus aber auch für Störfallberechnungen von zukünftigen und innovativen Reaktorkonzepten einsetzbar ist.

Das gekoppelte Codesystem TORT-TD/ATHLET wurde erfolgreich an einer Reihe von Testfällen erprobt, die Reaktivitätsstörfälle (Steuerelementauswurf, Borverdünnung) sowohl in vereinfachten LWR-Anordnungen als auch in einem DWR-Viertelkern darstellen. Für einen stationären Testfall wurde ein Vergleich der TORT-TD/ATHLET-Lösung in 8 Energiegruppen mit einer Rechnung des Monte-Carlo-Programms MCNP mit Punktdaten durchgeführt, in die die räumliche Verteilung der mit TORT-TD/ATHLET

ermittelten thermohydraulischen Größen einfließt. Es konnte eine gute Übereinstimmung erzielt werden.

Auf dem Gebiet der Kernberechnungen stand die Erzeugung von Weniggruppendaten für deterministische Transportrechnungen mit Einsatz dieser Daten für Anwendungsfälle, die Durchführung von Monte-Carlo-Berechnungen mit räumlich variierenden thermohydraulischen Parametern und die Untersuchung des Einflusses nuklearer Daten auf die Ergebnisse von Kernberechnungen im Mittelpunkt. Es wurde stets großer Wert darauf gelegt, die Rechenergebnisse – wenn möglich – an Messergebnissen oder durch Vergleich der mit verschiedenen Methoden erzielten Lösungen zu überprüfen. Zur Erzeugung von stabzellgemittelten Weniggruppendaten für deterministische Transportrechnungen wurde das Programmsystem SCALE-5.1 verwendet. Zur geeigneten Beschreibung von Absorberstäben wurden effektive Zelldaten erzeugt. Beim Einsatz dieser Daten für 2D-Transportrechnungen einer DWR-Kernanordnung wurde für den unkontrollierten Zustand bei der Leistungsverteilung gute Übereinstimmung mit einer Monte-Carlo-Referenzlösung erzielt, die mit nodalen Lösungen vergleichbar ist; für den kontrollierten Zustand ist die Übereinstimmung mit der Monte-Carlo-Referenzlösung wesentlich besser als bei allen vorhandenen nodalen Lösungen. Zur Beschreibung von Kernanordnungen mit variablen thermohydraulischen Parametern wurden MCNP-Berechnungen mit feiner räumlicher Einteilung durchgeführt. Die Ergebnisse wurden mit Messungen aus einer Anordnung der KRITZ-2-Experimente und deterministischen Transportrechnungen verglichen. Es zeigt sich, dass die MCNP-Berechnungen für Kernanordnungen mittlerer Größe mit den verfügbaren Rechnerressourcen durchführbar sind; die Ergebnisse können als Referenzwerte für Berechnungen mit anderen Methoden dienen. Zur Bewertung des Einflusses nuklearer Daten wurden MCNP-Rechnungen mit JEF-2.2- und JEFF-3.1-Punktdateien für kompakte kritische Anordnungen und große Kernanordnungen durchgeführt. Im Vergleich zu kritischen Experimenten ergibt sich eine leichte Verbesserung der Ergebnisse für die Multiplikationsfaktoren mit JEFF-3.1. Für große Kernanordnungen ergeben sich im Fall gemischter  $\text{UO}_2/\text{MOX}$ -Kerne unerwartet große Unterschiede in der Leistungsverteilung. Gegenwärtig gibt es keine Möglichkeit zu bestimmen, mit welcher Datenbibliothek die Rechenergebnisse besser mit tatsächlichen Reaktorbetriebsdaten übereinstimmen.

Schließlich wurde der GRS-Code DORT-TD, also der zweidimensionale Vorläufer von TORT-TD, für den Einsatz von Multigruppen-Neutronentransporttheorie an Hochtemperaturreaktoren vom Kugelhaufentyp erprobt. Dieser Reaktortyp eignet sich deswe-

gen ausgezeichnet zur Simulation mit DORT-TD, da er in sehr guter Näherung in zylindersymmetrischer Geometrie dargestellt werden kann. Außerdem bietet DORT-TD die Möglichkeit, die Übereinstimmung bzw. die Abweichungen zwischen Diffusionsapproximation und Transporttheorie direkt zu überprüfen, da in diesem Codesystem auch ein Diffusionsmodul vorhanden ist. DORT-TD wurde darüber hinaus im Rahmen dieses Vorhabens mit dem HTR-Thermohydraulikcode THERMIX-DIREKT gekoppelt. Damit wird jetzt erstmals auch die Berechnung von gekoppelten Transienten mit Neutronentransporttheorie für Hochtemperaturreaktoren ermöglicht, ein Gebiet wo bis dato nur Erfahrung mit Weniggruppen-Diffusionscodes vorlag. Generell zeigen die Berechnungen, dass die Diffusionsapproximation zwar größtenteils brauchbare Resultate für stationäre und transiente Berechnungen liefert, es aber Fälle gibt, in denen die Anwendung von Neutronentransport die Genauigkeit entscheidend verbessert.

## **2 Beschreibung der berechneten Benchmarks**

In diesem Bericht werden Rechenergebnisse zu verschiedenen Benchmarks vorgestellt. Die verwendeten Benchmark-Anordnungen werden in diesem Kapitel beschrieben.

### **2.1 Die KRITZ-2-Benchmarks**

Der KRITZ-Reaktor wurde Anfang der 70er Jahre in Studsvik, Schweden, hauptsächlich zur Messung von Kritikalität und Spaltratenverteilungen leichtwassermoderierter Anordnungen betrieben. Die KRITZ-2-Anordnungen sind quadratische Stabgitter mit niedrig angereichertem Uran- oder MOX-Brennstoff. Ein horizontaler und ein vertikaler Querschnitt der KRITZ-Anlage sind in Abb. 2-1 bzw. Abb. 2-2 gezeigt. Die detaillierte Beschreibung der Anordnungen, deren Messergebnisse öffentlich zugänglich sind, ist in /KOZ06/, /NEA05/ zu finden. Dabei handelt es sich um zwei Uran-Stabgitter mit unterschiedlicher Gitterweite ("KRITZ-2:1" und "KRITZ-2:13" in der Bezeichnungsweise von /KOZ06/) und ein MOX-Stabgitter ("KRITZ-2:19"), jeweils im kalten Zustand und bei höherer Temperatur (~240 °C). Die Kritikalität wurde jeweils durch die Wahl einer geeigneten Borkonzentration und schließlich durch Einstellung des Wasserspiegels erreicht. Die wesentlichen Parameter der sechs Anordnungen sind in Tabelle 2-1 zusammengestellt. Gemessen wurden für fünf der sechs Anordnungen die radialen Spaltratenverteilungen an einigen ausgewählten Stabpositionen, die in Tabelle 2-2 aufgelistet sind.

### **2.2 Die VENUS-7-Benchmarks**

Der VENUS-7-Serie von kritischen Experimenten wurde bei SCK-CEN in Belgien durchgeführt. Die VENUS-7-Kernanordnungen sind quadratische Stabgitter bei Raumtemperatur, die ca. 900 Brennstäbe enthalten. Die Anordnungen unterscheiden sich durch ihre radiale Form; 7/0 und 7/1 sind näherungsweise zylindrisch, wohingegen es sich bei 7/3 um eine quadratische Anordnung handelt. Die Kerne bestehen aus einer inneren MOX- und einer äußeren UO<sub>2</sub>-Zone und sind leichtwassermoderiert und -reflektiert. Die wesentlichen gemessenen Größen sind die Multiplikationsfaktoren, Reaktivitätsdifferenzen bei Ersetzung oder Entfernung von Brennstäben und radiale stab-

weise Spaltratenverteilungen an ausgewählten Stabpositionen. Radiale und axiale Schnitte durch die Anordnungen sind in Abb. 2-3 und Abb. 2-4 skizziert. Das Moderationsverhältnis beträgt 1.52 für die Uran- und 1.24 für die MOX-Zone. Der Uranbrennstoff ist mit 4 % U-235 angereichert, der MOX-Brennstoff ist ein Gemisch aus  $\text{UO}_2$  mit 3 % Anreicherung und  $\text{PuO}_2$  mit einem Anteil an spaltbarem Plutonium von 1 %. Die aktive Höhe der Brennstäbe beträgt 50 cm. Eine detaillierte Beschreibung der Anordnung ist in der Benchmark-Spezifikation /MES05/ zu finden.

### **2.3 Der DWR-MOX/ $\text{UO}_2$ -Kerntransientenbenchmark**

Der DWR-MOX/ $\text{UO}_2$ -Kerntransientenbenchmark /KOZ06/ wurde von der U.S. NRC definiert; im Rahmen einer OECD/NEA-Arbeitsgruppe wurden Vergleichsrechnungen für stationäre Fälle und eine Steuerstabauswurf-Transiente durchgeführt. Die Spezifikation beschreibt einen Westinghouse-DWR-Kern mit einem MOX-Anteil an der Kernbeladung von ca. 30 %. Der Kern besteht aus 193 17X17-Brennelementen mit unterschiedlichen U-235-Anreicherungen und Pu-Gehalten, bei verschiedenen Abbrandzuständen bis zu maximal 37.5 GWd/t SM. Für stationäre Berechnungen kann der Kern in 2D-Geometrie mit 90°-Symmetrie dargestellt werden. Das Kernschema und die Brennelemente sind in Abb. 2-5 skizziert. Erste Ergebnisse mit den Programmen MCNP und DORT für den unkontrollierten Zustand wurden in /SEU06/, /LAN06/ /LAN06//LAN06/ /LAN07/ veröffentlicht.

### **2.4 Der VVER-1000-Ganzkernbenchmark**

Als Anwendung einer Ganzkernberechnung wurde im Rahmen einer OECD/NEA-Arbeitsgruppe ein Reaktivitätsbenchmark für einen zweidimensionalen WWER-Reaktorkern definiert /GOM05/. Das Kernschema ist in Abbildung 2-6 dargestellt. Der Reaktorkern ist mit Uran- und MOX-Brennelementen beladen, die jeweils Gadolinium-Brennstäbe enthalten. Das Uran-Brennelement besitzt Brennstäbe mit drei unterschiedlichen Brennstofftypen, das MOX-Brennelement mit vier unterschiedlichen Brennstofftypen. Diese Brennelemente sind in der Geometrie identisch zu den Brennelementen aus einem vorausgegangenen WWER-Brennelement-Abbrandbenchmark /NEA 02/. Für den Ganzkern-Benchmark werden Brennelemente in unterschiedlich abgebrannten Zuständen (bis 40 MWd/kg Schwermetall, siehe Abbildung 2-6) verwendet, deren Nuklidzusammensetzungen in der Spezifikation angegeben sind, wobei die Aktiniden und

wichtigen Spaltprodukte berücksichtigt sind. Es wird angenommen, dass die Brennstäbe mit demselben Brennstoff innerhalb eines Brennelements identisch abgebrannt sind. Insgesamt sind für die Berechnungen sechs unterschiedliche Reaktorzustände definiert, deren Parameter in Tabelle 2-3 zusammengestellt sind.

## **2.5            Benchmark zur Quantifizierung der Genauigkeit von 3D-Transportmethoden**

Vor dem Hintergrund des zunehmenden Einsatzes von 3D-Transportrechnungen stellt sich die grundsätzliche Frage nach systematischer Quantifizierung der Genauigkeit von Transportlösungen für praktische Anwendungen. Rein mathematische oder Rechen-Benchmarks stellen ein geeignetes Werkzeug dar, da sie gezielt auf die Validierung von Rechenmethoden und –algorithmen zugeschnitten werden können und die Qualifizierung nuklearer Daten zunächst ausgeklammert werden kann. Der im Rahmen der *NEA Expert Group on 3-D Radiation Transport Benchmarks* von der Pennsylvania State University entwickelte Benchmark *Benchmarking the Accuracy of Solution of 3-Dimensional Transport Codes and Methods over a Range in Parameter Space /AZM07/* verfolgt dieses Ziel.

Die numerische Lösung der deterministischen Transportgleichung setzt Diskretisierungen bezüglich der Energie (Energiegruppen), des Raumes (Maschenetz) und des Winkels (diskrete Ordinaten oder Legendre-Momente) voraus und ist daher zwangsläufig mit Diskretisierungsfehlern behaftet. Im Allgemeinen – jedoch nicht notwendigerweise – reduziert eine zunehmende Verfeinerung der Diskretisierungen (Modellverfeinerung – *model refinement*) die Diskretisierungsfehler. Entscheidend ist, ob sich die numerische Lösung bei fortschreitender Modellverfeinerung asymptotisch verhält, d. h. sich monoton einem Grenzwert nähert, nämlich der exakten oder analytischen Lösung des Problems (Referenzlösung). Da der Nachweis der Asymptotik durch schrittweise Modellverfeinerungen bei praktischen Anwendungsfällen infolge deren Komplexität i.a. nicht möglich ist, beschränkt sich der vorliegende Benchmark auf eine einfache Geometrie und vorgegebene Wirkungsquerschnitte in einer Energiegruppe. Als Referenzlösung dient eine mit MCNP durchgeführte Monte-Carlo-Rechnung, die von den Autoren dieses Benchmarks bereitgestellt wird.

Für die in Abb. 2-7 vorgegebene Geometrie sollen Lösungen der Transportgleichung unter Verwendung verschiedener Raum- und Winkeldiskretisierungen auf asymptotisches Verhalten überprüft und mit der Monte-Carlo-Referenz verglichen werden.

Das System besteht aus zwei ineinander verschachtelten Parallelepipeden und einem weiteren, im linken unteren Eck beim Ursprung des Koordinatensystems sitzenden Quader. Dieser enthält eine verteilte, räumlich konstante Einheits-Neutronenquelle. Es herrschen allseits Vakuum-Randbedingungen. Die Geometrie ist durch die Höhe  $L$  des äußeren Quaders und den Skalierungsfaktor  $\gamma$  des inneren Quaders parametrisiert. Die Ausdehnung des Quellquaders folgt dem äußeren und inneren Quader derart, dass sich die Ecken des inneren mit dem Quellquader berühren (siehe Abb. 2.7 rechts). Bezüglich der nuklearen Daten wird die Konfiguration durch den totalen Wirkungsquerschnitt  $\sigma_i$  und das Streuverhältnis  $c_i$  im Raum zwischen äußerem und innerem Quader (Index  $i = 1$ ) sowie im inneren Quader (Index  $i = 2$ ) spezifiziert. Geometrisch und nuklear ist die Anordnung somit durch 6 Parameter spezifiziert, von denen jeder einen von drei Werten annehmen kann, so dass insgesamt  $3^6 = 729$  verschiedene Konfigurationen zu betrachten sind. Je Konfiguration sind 23 Größen zu bestimmen, bei denen es sich um mittlere skalare Flüsse innerhalb bestimmter Volumina und Nettoströme durch ausgezeichnete Flächen handelt.

## 2.6 Der PBMR400 Transient Benchmark

Im Jahr 2005 wurde gemeinsam von der OECD/NEA und der südafrikanischen PBMR (*Pebble Bed Modular Reactor*) Pty Ltd. die Spezifikation zum PBMR400 Transient Benchmark freigegeben [REI05b]. Im Rahmen dieser (noch nicht abgeschlossenen) Benchmark-Aktivität werden neben verschiedenen neutronenphysikalischen und thermohydraulischen stationären Zuständen auch mehrere Transienten, Auslegungsstörfälle und hypothetische Szenarien für den Kugelhaufen-Hochtemperaturreaktor PBMR400 untersucht. Die Geometrie des Reaktors wurde für den Benchmark vereinfacht, so dass sie sich hinreichend genau in einem zweidimensionalen Modell mit einer vergleichsweise geringen Anzahl verschiedener Materialzonen darstellen lässt (siehe Abb. 2-8). Die sehr umfassende Spezifikation enthält detaillierte Angaben zur Modellierung der Nachwärme und der Xenodynamik, zu den zu verwendenden Wärmeleitungs- und Wärmeübergangskorrelationen, den thermodynamischen Eigenschaften des Kugelhaufens, zu den parametrisierten Wirkungsquerschnitten usw.

In der ersten Phase des Benchmarks wurde zunächst eine rein neutronische Aufgabe definiert, in der die Teilnehmer den Eigenwert und die stationären Leistungsverteilungen bei gegebenen Wirkungsquerschnitten bestimmen sollten. In einer zweiten Benchmarkübung wurde das rein thermohydraulische Verhalten des Reaktors bei vorgegebener nuklearer Leistungsverteilung untersucht. Die dritte Aufgabe stellte schließlich die Synthese der ersten beiden Übungen dar, in der ein gekoppeltes Modell aus Neutronenphysik und Thermohydraulik zur Bestimmung des stationären Zustandes des Reaktors verwendet werden sollte.

In der vierten, transienten Phase werden insgesamt sechs unterschiedliche Fälle untersucht, die einen wesentlichen Teil des Spektrums von betrieblichen Transienten über Kühlmittelverluststörfälle bis hin zu Reaktivitätstransienten abdecken und repräsentativ sind für diesen Reaktortyp. Ausgehend von dem in der dritten Phase ermittelten stationären Ausgangszustand sind dies im Einzelnen:

- Versagen der Zwangsumwälzung des Kühlmittels bei vollständiger Druckentlastung des Kerns mit und ohne Reaktorschnellabschaltung
- Versagen der Zwangsumwälzung des Kühlmittels bei teilweiser Druckentlastung des Kerns mit Reaktorschnellabschaltung
- Lastwechsel 100%-40%-100% mit anschließender Xenontransiente
- Simultanes Fehlfahren aller Steuerstäbe mit maximaler Geschwindigkeit
- Simultaner Auswurf aller Steuerstäbe
- Eintritt von kaltem Helium in den Kern

Der transiente Teil des Benchmarks war zum Zeitpunkt der Niederlegung dieses Berichts noch nicht abgeschlossen; die von der GRS mit dem Codesystem DORT-TD/THERMIX erzielten Ergebnisse zu dem stationären Benchmarkteil sind aber bereits in /PAU08/ veröffentlicht worden.

## 3 Weiterentwicklung der nuklearen Rechenmethodik

### 3.1 Einführung

Die GRS-Entwicklung TORT-TD ist eine Erweiterung des an den Oak Ridge National Laboratories (ORNL) entwickelten Diskrete-Ordinaten-Codes TORT, der die stationäre Transportgleichung in Multigruppendarstellung und 3D-Geometrie löst. Durch seine weite internationale Verbreitung gehört TORT zu den am umfassendsten validierten Programmen für stationäre Kritikalitätsberechnungen thermischer und schneller Systeme. Darüber hinaus definiert es den de-facto Standard im Bereich von Abschirm- und Fluenzberechnungen.

Die Behandlung zeitabhängiger 3D-Transport-Probleme wird in TORT-TD durch eine voll-implizite Integration der zeitabhängigen Transportgleichung bezüglich der Zeit erreicht. Dieser Ansatz gewährleistet unbedingte numerische Stabilität und erlaubt zudem eine robuste Kopplung an thermohydraulische Systemcodes. TORT-TD ermöglicht die Behandlung stationärer Probleme (Eigenwert- und *fixed-source*-Gleichung) sowie von Transienten mit einer beliebigen Anzahl Energiegruppen prompter und verzögerter Neutronen. Anisotrope Streuung wird durch Legendre-Entwicklung der Wirkungsquerschnitte berücksichtigt. Zur Simulation von Steuerstabbewegungen wurde ein geeignetes Programm-Modul entwickelt. Die Einbeziehung thermohydraulischer Rückwirkungen erfolgt durch Kopplung mit dem an der GRS entwickelten Thermohydraulik-Systemcode ATHLET.

Das folgende Kapitel 3.2 beschreibt die zeitabhängige Erweiterung TORT-TD in knapper Form. Im Anschluss daran werden in Kapitel 3.3 wichtige Aspekte zur Kopplung von TORT-TD mit dem Thermohydraulik-Systemcode ATHLET, insbesondere die Kopplungsstrategie und die Darstellung der Wirkungsquerschnitte als Funktion thermohydraulischer Größen, behandelt. In Kapitel 3.4 werden ausgewählte Testfälle für den gekoppelten Code TORT-TD/ATHLET dokumentiert. Über Untersuchungen und erste Ergebnisse zur Kopplung von TORT-TD mit dem Computational-Fluid-Dynamics-Code CFX wird in Kapitel 3.5 berichtet. In Kapitel 2.5 werden Arbeiten und Ergebnisse zur Lösung eines OECD-Benchmarks zur Evaluation der Genauigkeit deterministischer Transportmethoden zusammengefasst.

### 3.2 TORT-TD – zeitabhängige Erweiterung des dreidimensionalen stationären Diskrete-Ordinaten-Codes TORT

Der zeitabhängige Diskrete-Ordinaten-Code TORT-TD /SEU08a/, /SEU08b/ basiert auf dem an den Oak Ridge National Laboratories (ORNL) entwickelten Diskrete-Ordinaten-Codes TORT /RHO91/, /RHO97/, der die stationäre Transportgleichung in Multigruppendarstellung und 3D-Geometrie löst. Die grundlegenden Ideen dieser GRS-Entwicklung werden im Folgenden nur kurz skizziert. Details sind dem Technischen Bericht A-3237 /SEU04a/ sowie dem Abschlussbericht A-3238 /SEU04b/ zu entnehmen.

TORT-TD löst die dreidimensionale zeitabhängige Neutronentransportgleichung in Multigruppendarstellung

$$\left[ \frac{1}{v_g} \frac{\partial}{\partial t} + \hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} + \sigma_g^{tot}(\vec{r}) \right] \psi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) = q_g^{ex}(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) + \sum_{g'} \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \sigma_{gg'}(\vec{r}, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) \psi_{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}', t) + \chi_g (1 - \beta) \sum_{g'} v \sigma_{g'}^{fiss}(\vec{r}) \Phi_g(\vec{r}, t) + \sum_l \chi_{gl}^d \lambda_l c_l(\vec{r}, t)$$

sowie die Mutterkerngleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} c_l(\vec{r}, t) = \beta_l \sum_{g'} v \sigma_{fg'}(\vec{r}, E') \phi_{g'}(\vec{r}, t) - \lambda_l c_l(\vec{r}, t),$$

welche die Dynamik der verzögerten Neutronen durch zeitliche Änderung der räumlichen Mutterkernkonzentration  $c_l(\vec{r}, t)$  infolge von Bildung und Zerfall der Mutterkerne der Gruppe  $l$  beschreibt. Die Größe  $\Phi_g(\vec{r}, t)$  ist der skalare Fluss der Energiegruppe  $g$ , der sich aus Integration des Winkelflusses  $\psi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}, t)$  über alle Raumwinkel (diskrete Ordinaten) ergibt. In der Transportgleichung wird darüber hinaus mit  $q_g^{ex}(\vec{r}, \vec{\Omega}, t)$  ein zeitabhängiger externer, anisotroper Quellterm berücksichtigt.

Beide Gleichungen werden bezüglich der Zeit nach dem unbedingt stabilen voll-impliziten Verfahren integriert. Verglichen mit expliziten Verfahren ist dieser Ansatz zwar mit höherem Rechenaufwand verbunden, erlaubt aber die Berechnung von Transienten mit Zeitschritten, deren Größe im Wesentlichen von der Genauigkeit

(Diskretisierungsfehler) eines Verfahrens erster Ordnung und dem Konvergenzverhalten limitiert wird. Ist  $\Delta t$  die Größe eines Zeitschritts, die Größe

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

der modifizierte totale Wirkungsquerschnitt,

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

das modifizierte Spaltspektrum und

$$q_g^\tau(\vec{r}, \vec{\Omega}) = q_g^{ex}(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \frac{1}{v_g \Delta t} \psi_g^\tau(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \frac{1}{\Delta t} \sum_l \chi_{gl}^d \lambda_l \gamma_l \beta_l c_l^\tau(\vec{r}),$$

der modifizierte Quellterm, so erhält man unter Verwendung der ebenfalls implizit zeitdiskretisierten Mutterkerngleichung nach einigen algebraischen Umformungen die implizit zeitdiskretisierte Transportgleichung:

$$\left[ \hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} + \sigma'_g(\vec{r}) \right] \psi_g^{\tau+1}(\vec{r}, \vec{\Omega}) = q_g^\tau(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \sum_{g'} \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \sigma_{gg'}(\vec{r}, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) \psi_{g'}^{\tau+1}(\vec{r}, \vec{\Omega}') + \chi'_g \sum_{g'} \nu \sigma_{g'}^{fiss}(\vec{r}) \Phi_g^{\tau+1}(\vec{r})$$

Die Gleichung für den Zeitpunkt  $\tau + 1$  entspricht formal einem stationären Problem in einem multiplizierenden Medium mit einem externen Quellterm (*Fixed-Source*), welcher von der Flussverteilung des vorigen Zeitpunkts  $\tau$  abhängt. Die Lösung eines zeitabhängigen Transportproblems ist somit auf eine Sequenz formal stationärer *Fixed-Source*-Probleme mit zeitabhängigem Quellterm zurückgeführt. Mit den Neutronenflüssen des neuen Zeitpunkts  $\tau + 1$  hat man auch die neue räumliche Verteilung der Kon-

zentration der Mutterkerne zu diesem Zeitpunkt, denn mit  $\gamma_l = \frac{\Delta t}{1 + \lambda_l \Delta t}$  gilt:

$$c_l^{\tau+1}(\vec{r}) = \frac{1}{\Delta t} \gamma_l \lambda_l c_l^\tau(\vec{r}) + \gamma_l \beta_l \sum_{g'} \nu \sigma_{fg'}(\vec{r}) \Phi_{g'}^{\tau+1}(\vec{r}).$$

Der numerische Aufwand zur iterativen Lösung dieser Gleichung für einen Zeitschritt ist dem eines stationären Problems vergleichbar. Er hängt stark von einer geeigneten Schätzung  $\tilde{\psi}_g^{\tau+1}(\vec{r}, \vec{\Omega})$  für die gesuchte Flussverteilung  $\psi_g^{\tau+1}(\vec{r}, \vec{\Omega})$  des momentanen Zeitschritts ab. Nimmt man an, dass sich der Flussverlauf über die Reaktorperiode exponentiell mit der Zeit ändert, lässt sich eine gute Approximation aus der Extrapolation der Flussverteilung  $\psi_g^{\tau}(\vec{r}, \vec{\Omega})$  des vorigen Zeitschritts mittels der räumlich aufgelösten inversen Reaktorperiode  $\omega_g(\vec{r}, \vec{\Omega})$  gewinnen:

$$\tilde{\psi}_g^{\tau+1}(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \psi_g^{\tau}(\vec{r}, \vec{\Omega}) \cdot e^{\omega_g(\vec{r}, \vec{\Omega})\Delta t}.$$

Die inverse Reaktorperiode ist dabei gegeben durch

$$\omega_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{1}{\Delta t} \ln \frac{\psi_g^{\tau+1}(\vec{r}, \vec{\Omega})}{\psi_g^{\tau}(\vec{r}, \vec{\Omega})}.$$

Sie lässt sich darüber hinaus auch zur Abschätzung der maximalen Zeitschrittweite  $\Delta t$  nutzen, indem eine Abschätzung des numerischen Abschneidefehlers durchgeführt wird.

TORT-TD ermöglicht die Berechnung stationärer Probleme (Lösung der Eigenwert- und *Fixed-Source*-Gleichung) und von Transienten mit einer frei wählbaren Anzahl Energiegruppen prompter und verzögerter Neutronen. Anisotroper Streuung wird durch Legendre-Entwicklung der Wirkungsquerschnitte Rechnung getragen. Zur Simulation von Steuerstabbewegungen wurde ein geeignetes Programm-Modul entwickelt.

### 3.3 TORT-TD/ATHLET – Kopplung von TORT-TD mit dem GRS-Systemcode ATHLET

Zur Einbeziehung thermohydraulischer Rückwirkungen wurde TORT-TD mit dem an der GRS entwickelten Thermohydraulik-Systemcode ATHLET /LER98/ gekoppelt. Kopplung und Datenaustausch erfolgen über die universelle ATHLET-Schnittstelle /LAN96/.

### 3.3.1 Kopplungsstrategie

Von den drei in Abb. 3-1 dargestellten Kopplungsarten wurde die sog. *interne* Kopplung implementiert, bei der Fluidodynamik und Wärmeübertragungsprozesse in Reaktorkern, Kühlkreislauf und der gesamten Anlage von ATHLET und die Neutronenkinetik von TORT-TD behandelt werden. Seitens ATHLET bietet diese Strategie den Vorteil, die fluiddynamischen Gleichungen in geschlossener Form integrieren zu können. Dies ist insbesondere bei Transport von Temperatur- oder Dichteänderungen von Bedeutung oder wenn Strömungsumkehr auftritt.

Über die Schnittstelle erhält ATHLET die von TORT-TD berechnete räumliche Leistungsverteilung und liefert an TORT-TD die räumliche Verteilung der Parameter des momentanen thermohydraulischen Zustandes. Die Abbildung der Thermohydraulik auf die Neutronenkinetik und umgekehrt ist flexibel gestaltet: So kann die Zuordnung thermohydraulischer Kanäle zu einzelnen Stabzellen oder Brennelementen erfolgen. Die axiale Nodalisierung in ATHLET ist ebenfalls nicht an das Maschennetz von TORT-TD gebunden. Die universelle Auslegung der Schnittstelle wurde bereits durch Kopplung von ATHLET mit anderen 3D-Neutronenkinetikmodellen wie QUABOX/CUBBOX, BIPR-8, DYN3D, KIKO-3D, SADCO oder DORT-TD verifiziert.

Die Steuerung des Programmablaufs übernimmt ATHLET. Insbesondere veranlasst ATHLET die Ausführung der Neutronentransportrechnungen durch TORT-TD. Dies erforderte eine Modifikation von TORT-TD dahin gehend, dass es in Form eines Unterprogramms aufgerufen werden kann. Die erforderlichen Betriebsarten von TORT-TD – stationär oder transient einerseits und eigenständig oder in Kopplung mit ATHLET andererseits – werden dabei über zwei Unterprogramm-Parameter *iathl* und *key* gewählt. Sie haben folgende Bedeutung:

- *iathl* = 0: TORT-TD läuft eigenständig, also ohne Kopplung mit ATHLET. Der Wert von *key* ist in dieser Betriebsart ohne Bedeutung.
- *iathl* = 1: TORT-TD läuft in Kopplung mit ATHLET.
  - *key* = 0:  
Ausführung von Initialisierungsarbeiten (Lesen des Eingabedatensatzes und Speicherallokation)

- *ikey* = 1:  
Durchführung der stationären Rechnung. Setzt vorangegangene Ausführung des Modus *ikey* = 0 voraus.
- *ikey* = 2:  
Durchführung eines Zeitschritts der transienten Rechnung. Setzt vorangegangene Ausführung der Modi *ikey* = 1 oder – falls bereits mindestens ein Zeitschritt berechnet wurde – *ikey* = 2 voraus.

Für die Durchführung von Transientenrechnungen wird der folgende dreistufige Rechenprozess realisiert, der sich bereits in anderen Anwendungen gekoppelter Codes als zweckmäßig erwiesen hat:

1. Bestimmung des stationären Ausgangszustands des Systems vor Beginn der Transiente.
2. Durchführung einer so genannten *Nulltransiente*: An dem in Schritt 1 ermittelten Systemzustand werden keine Änderungen von außen vorgenommen, beide Codes arbeiten jetzt jedoch in ihrer jeweils transienten Betriebsart. Dieser Schritt gewährleistet ein stabiles Konvergenzverhalten zwischen Neutronenkinetik und Thermohydraulik.
3. Berechnung der eigentlichen Transiente.

### 3.3.2 Parametrisierte Wirkungsquerschnitts-Bibliotheken

Die Berücksichtigung thermohydraulischer Rückwirkungen erfordert die Bereitstellung nuklearer Wirkungsquerschnitte als Funktion thermohydraulischer Größen. Bei TORT-TD sind dies Moderator-dichte, Brennstofftemperatur und Borkonzentration. Die nukleare Beschreibung des thermohydraulischen Zustands jeder im Kern vorkommenden Materialmischung erfolgt durch parametrisierte Wirkungsquerschnittsbibliotheken. In einer solchen Bibliothek werden die Wirkungsquerschnitte für jede der drei thermohydraulischen Größen durch eine beliebige Anzahl frei wählbarer Stützstellen parametrisiert. Die Lage der Stützstellen ist dabei so zu wählen, dass sie den während der Transiente zu erwartenden Variationsbereich von Moderator-dichte, Brennstofftemperatur bzw. Borkonzentration abdecken. Zwischen benachbarten Stützstellen einer ther-

mohydraulischen Größe wird gemäß ihrem momentanen Wert interpoliert; eine Extrapolation ist nicht vorgesehen. Die Interpolation erfolgt mittels kubischer Spline-Funktionen. Dazu wurde ein Modul zur Spline-Interpolation dreidimensionaler Arrays entwickelt, das von TORT-TD immer dann automatisch aufgerufen wird, wenn ATHLET eine Aktualisierung des thermohydraulischen Systemzustands berechnet hat. Eine parametrisierte Bibliothek kann Wirkungsquerschnitte und Gruppendaten für verschiedene Abbrandzustände enthalten. Das Datenformat ist an NEMTAB angelehnt /IVA99/ und in Tabelle 3-1 für zwei prompte und sechs verzögerte Energiegruppen sowie  $P_1$ -Streuordnung schematisch dargestellt.

Für die hier beschriebenen Anwendungsfälle von TORT-TD sowie des gekoppelten Codesystems TORT-TD/ATHLET wurden Wirkungsquerschnitte in wenigen Energiegruppen mit dem Zell-Abbrand-Code HELIOS /CAS91/ berechnet. Jede parametrisierte Wirkungsquerschnitts-Bibliothek ist das Resultat mehrerer einzelner HELIOS-Rechnungen entsprechend den gewünschten Stützstellen der verschiedenen thermohydraulischen Größen. Ein speziell entwickeltes Transformationsprogramm führt die Ergebnisse mehrerer HELIOS-Rechnungen zusammen und generiert hieraus eine parametrisierte Wirkungsquerschnitts-Bibliothek.

### **3.3.3 Steuerung von TORT-TD und Präprozessor**

Der Ablauf von TORT-TD wird von einem Steuerungsmodul übernommen. Dieses umfasst u.a. einen Präprozessor zur Generierung des räumlichen Maschennetzes und der Materialkarte aus einer gegebenen Kern-Brennelementanordnung. Die Brennelemente ihrerseits werden durch ihr Stabzellen-Layout spezifiziert. Dabei kann angegeben werden, mit wie vielen Maschen die Stabzellen in x-y-Richtung nodalisiert werden sollen. Gemäß den in jeder einzelnen räumlichen Masche momentan herrschenden thermohydraulischen Bedingungen besorgt das Modul darüber hinaus die Zuordnung der passenden Wirkungsquerschnitte und greift hierzu auf das Spline-Interpolationsmodul zu. Basierend auf dem erzeugten Maschennetz werden Steuerstabbewegungen durch Modifikation der Materialkarte gemäß der momentanen Steuerstabstellung und gegebenenfalls durch Erzeugung von Mischungsmaterialien an den Steuerstabenden durch Fluss-Volumen-Gewichtung durchgeführt, falls das Steuerstabe zwischen zwei axialen Maschen liegt.

### 3.3.4 Reduktion von Homogenisierungsfehlern durch Stabzell-Diskontinuitätsfaktoren

Die Qualität von Neutronenkinetikrechnungen wird nicht allein durch die prinzipiell höhere Aussagegenauigkeit der 3D-Transportrechnung im Vergleich zur Diffusionsapproximation bestimmt. Das Potential der Rechenmethode ist vielmehr nur dann voll auszuschöpfen, wenn die nuklearen Gruppendaten hinreichend hohen Qualitätsanforderungen genügen. Dies betrifft die Kondensation und insbesondere die Homogenisierung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten. Während die Generierung nodaler Wirkungsquerschnitte durch vollständige Homogenisierung der heterogenen Struktur weitgehend standardisiert ist, besteht hinsichtlich der Berechnung von Stabzell-Daten durch Homogenisierung einer einzelnen Stabzelle bislang vergleichsweise wenig Erfahrung. So zeigt sich, dass die zur Erzeugung nodaler Wirkungsquerschnitte angewandte Methode der Fluss-Volumen-Gewichtung zu Ungenauigkeiten in der Berechnung individueller Stableistungen (Homogenisierungsfehler) führen kann (siehe hierzu auch Kapitel 4.2.5). Dies gilt insbesondere für Absorberzellen in der Umgebung von Brennstabzellen.

Die Ursache des Homogenisierungsfehlers liegt darin, dass die Fluss-Volumen-Gewichtung alleine nicht die Erhaltung der Reaktionsraten innerhalb des Homogenisierungsvolumens gewährleistet, es sei denn, der Nettostrom durch die Grenzflächen des Homogenisierungs-Volumens verschwindet. Genauere Betrachtungen der Transportgleichung auf einem feinen und gröberen Maschennetz (heterogene und homogenisierte Darstellung desselben Problems) zeigen nämlich, dass zusätzlich die Erhaltung des Nettostroms durch die Grenzflächen des Homogenisierungs-Volumens zu fordern ist /SMI86/.

Um für künftige Einsätze von TORT-TD den Genauigkeitsgewinn durch die direkte Lösung der Transportgleichung nicht durch Homogenisierungsfehler in Frage zu stellen, wurde das aus nodalen Methoden bekannte Konzept des Brennelement-Diskontinuitätsfaktors auf seine Anwendung für die Stabzell-Homogenisierung untersucht. Eigenschaft des Diskontinuitätsfaktors ist es, Reaktionsraten in und Nettoströme aus Homogenisierungsvolumina zu erhalten. Er kann zudem direkt (also nicht iterativ) aus Brennelement-Rechnungen bestimmt werden. Es wurden die wesentlichen Schritte der Einführung des Stabzell-Diskontinuitätsfaktors in die Diskrete-Ordinaten-Gleichungen und der Implementation in TORT-TD einerseits sowie die Bestimmung

von Stabzell-Diskontinuitätsfaktoren in HELIOS-Brennelement-Rechnungen andererseits ausgearbeitet.

Die Implementierung der Stabzell-Diskontinuitätsfaktoren in ein Diskrete-Ordinaten-Programm wie TORT-TD erfordert einen tiefen Eingriff in den Code bis in die Ebene der *Transport-Sweeping*-Routinen, in denen das 3D-Problem auf die Lösung der 1D-Transportgleichung für die in Abb. 3-2 gezeigte Mascheneinteilung zurückgeführt ist. Darin kennzeichnen die halbzahligen Maschenindizes die Zellgrenzen und die ganzzahligen Indizes die Zell-Mittelpunkte. Im Folgenden wird die Idee nur sehr knapp skizziert.

Integriert man die zu lösende 1D-Transportgleichung der Energiegruppe  $g$  und diskreten Ordinate  $n$ ,

$$\left[ \mu_n \frac{d}{dx} + \sigma_g(x) \right] \psi_{g,n}(x) = q_{g,n}(x),$$

über die Zelle  $i$ , so erhält man mit  $h_i = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}$ :

$$\mu_n [\hat{\psi}_{g,n,i}^+ - \hat{\psi}_{g,n,i}^-] + \sigma_{g,i} h_i \hat{\psi}_{g,n,i} = h_i q_{g,n,i}.$$

Darin ist  $\hat{\psi}_{g,n,i} = \hat{\psi}_{g,n}(x_i)$  der mittlere Zellfluss und  $\hat{\psi}_{g,n,i}^\pm = \hat{\psi}_{g,n}(x_{i\pm 1/2})$  sind die Zell-Randflüsse. Das Symbol  $\hat{\phantom{x}}$  kennzeichnet zellhomogenisierte Größen; im Übrigen wurde Standardnomenklatur verwendet (siehe z. B. /LEW84/). Der Zusammenhang zwischen Zell-Randflüssen und mittlerem Zellfluss wird etwa über die sog. *Diamond-Differencing-Beziehung*

$$\hat{\psi}_{g,n,i} = \frac{1}{2} (\hat{\psi}_{g,n,i}^+ + \hat{\psi}_{g,n,i}^-)$$

hergestellt. Kennzeichnet  $f_i^\pm$  den Diskontinuitätsfaktor für Zelle  $i$ , so ist für die Neutronenbewegungsrichtung von links nach rechts ( $\mu > 0$ ) der mittlere Zellfluss durch

$$\hat{\psi}_{g,n,i} = \frac{2\mu}{2\mu + \sigma_i h_i} \left( \psi_{g,n,i}^- / f_i^- + \frac{h_i}{2\mu} q_{g,n,i} \right)$$

gegeben. Für die Neutronenbewegungsrichtung von rechts nach links ( $\mu < 0$ ) folgt analog:

$$\hat{\psi}_{g,n,i} = \frac{2\mu}{2\mu - \sigma_i h_i} \left( \psi_{g,n,i}^+ / f_i^+ - \frac{h_i}{2\mu} q_{g,n,i} \right).$$

### 3.4 Anwendung von TORT-TD/ATHLET auf Testfälle

Das gekoppelte Codesystem TORT-TD/ATHLET wurde auf verschiedene Testfälle angewandt, die vom DWR-MOX/ $\text{UO}_2$ -Kerntransienten-Benchmark /KOZ06/ abgeleitet wurden. An diesem Benchmark wurde teilgenommen und DORT-Lösungen für den stationären Zustand unter Nulllast-Heiß-Bedingungen mit ausgefahrenen Steuerelementen eingereicht /LAN06/, /KOZ06/, /SEU06/. Für die wesentlichen Charakteristika dieses Benchmarks wird auf Kapitel 2.3 verwiesen; im Folgenden wird auf Besonderheiten nur insoweit eingegangen, wie es zum Verständnis der Testfälle notwendig ist.

#### 3.4.1 Generierung von Wirkungsquerschnitten und Daten der verzögerten Neutronen

Für die  $\text{UO}_2$ - und MOX-Brennelemente wurden mittels HELIOS Brennelement-Abbrandrechnungen zur Erzeugung stabzellhomogenisierter Wirkungsquerschnitte in 8 Energiegruppen und  $P_1$ -Streuordnung sowie 6 Gruppen verzögerter Neutronen durchgeführt. Wirkungsquerschnitte für das Baffle-Material wurden mittels RESMOD erzeugt. Abb. 3-3 zeigt die 2D-Modellierung des  $\text{UO}_2$ - und MOX-Brennelements in HELIOS. Dabei wurden alle Details der Integral-Fuel-Burnable-Absorber-Zellen (IFBA) im  $\text{UO}_2$ -Brennelement und der Wet-Annular-Burnable-Absorber-Zellen (WABA) im MOX-Brennelement berücksichtigt (siehe Abb. 3-4). Für das  $\text{UO}_2$ - und das MOX-Brennelement sind jeweils zwei Ausführungen zu betrachten, die sich in der  $^{235}\text{U}$ -Anreicherung im Brennstoff (4,2% und 4,5%) bzw. dem  $\text{Pu}_{\text{fiss}}$ -Gehalt im MOX-Brennstoff (4,0% und 4,3%) unterscheiden. Brennstäbe werden mit fünf, die übrigen Stäbe mit drei radialen Zonen dargestellt. Für jeden Stabzelltyp wurde eine parametrisierte Wirkungsquerschnittsbibliothek erstellt, in der der Wertebereich jedes der drei thermohydraulischen Parameter durch drei Stützstellen abgedeckt wurde. Die Werte der Stützstellen wurden gemäß der Benchmark-Spezifikation gewählt. Dazu waren 104

einzelne HELIOS-Rechnungen notwendig, die sich aus den  $3^3 = 27$  Kombinationen der thermohydraulischen Parameter für jeden der vier Brennelementtypen ergeben.

### **3.4.2 Lokale Borkonzentrationsänderung in einem Brennelement: Untersuchung der Rückwirkungsmodellierung in TORT-TD/ATHLET**

Der Einfluss der ATHLET-Rückwirkungsmodellierung auf das Ergebnis einer gekoppelten TORT-TD/ATHLET-Rechnung wurde für ein einzelnes  $\text{UO}_2$ -Brennelement mit 4,2% Anreicherung anhand einer asymmetrischen, lokalen Änderung der Borkonzentration am Kerneintritt untersucht. Das Brennelement ist oben und unten von einem Wasserreflektor abgeschlossen, dessen Höhe der Kantenlänge des Brennelementquerschnitts entspricht. Die Borkonzentrationsänderung betrifft nur die in Abb. 3-5 rot umrandete Gruppe von 27 der insgesamt 289 Stabzellen, für die der in Abb. 3-5 unten dargestellte abschnittsweise lineare zeitliche Verlauf der Borkonzentration definiert wird. In den übrigen 262 Stabzellen wird die Borkonzentration unverändert auf dem Wert von 1015 ppm gehalten, der im Ausgangszustand für alle Stabzellen gilt. Die Transiente beginnt nach Ablauf einer 3 Sekunden dauernden Null-Transiente. Die Brennelementleistung beträgt im Ausgangszustand 18,35 MW. Die Transiente wird durch einen Borpropfen der Masse 728,7 kg bewirkt.

Folgende drei thermohydraulische Modelle wurden untersucht:

1. *Heterogenes Modell mit 289 THC*: Das Brennelement wird durch 289 thermohydraulische Kanäle (THC – thermohydraulic channel) repräsentiert, d. h. jeder Stabzelle wird ein eigener thermohydraulischer Kanal zugeordnet.
2. *Homogenes Modell mit 1 THC*: Das Brennelement wird durch einen einzigen thermohydraulischen Kanal repräsentiert. Die Forderung nach gleicher Reaktivitätsänderung wie im heterogenen Modell verlangt die Definition eines äquivalenten, gleichmäßig auf alle Stabzellen verteilten Borpropfens mit einer effektiven Borkonzentration von 996,4 ppm.
3. *Heterogenes Modell mit homogener Borverteilung und 289 THC („uni“)*: Wie Modell 1, jedoch mit gleichmäßig über alle Stabzellen verteiltem Borpropfen mit der effektiven Borkonzentration aus Modell 2.

Die TORT-TD/ATHLET-Rechnung wurde mit niveausymmetrischer  $S_4$ -Quadratur und einer Zeitschrittweite von 15 msec ausgeführt. Der Stabzell-Querschnitt wurde in TORT-TD durch eine räumliche Masche nodalisiert. Für die Diskretisierung in axialer Richtung wurden 50 Maschen gewählt, von denen je 5 auf den oberen und unteren Reflektor und die übrigen 40 auf die aktive Zone entfallen.

Die zeitliche Änderung der Brennelement-Gesamtleistung während der Transiente ist für die drei ATHLET-Modelle in Abb. 3-6 oben gezeigt. Die zunächst absinkende Bor-konzentration bewirkt einen deutlichen Leistungsanstieg, der anschließend durch die negative Brennstofftemperaturrückwirkung (Doppler) begrenzt wird. Nach Erreichen der anfänglichen Borkonzentration am Ende der Transiente nähert sich die Leistung wieder dem ursprünglichen Wert.

Infolge der Definition des äquivalenten Borpropfens liegen die Leistungsverläufe der drei Rückwirkungsmodelle erwartungsgemäß eng beieinander. Unterschiede werden bei genauerer Betrachtung des Leistungsmaximums (siehe Abb. 3-6 unten) deutlich: Die Modelle 2 und 3 (homogene, d.h. nicht-lokale Modellierung der Borverteilung) führen zu einer – wenn auch geringfügigen – Unterschätzung des Leistungsmaximums. Offenbar ist die homogene Modellierung – unabhängig davon, ob das Brennelement thermohydraulisch durch einen THC oder jede Stabzelle durch einen individuellen THC repräsentiert wird – in diesem Fall nicht konservativ. Dies kann ein Hinweis darauf sein, dass die genaue Modellierung lokaler Effekte eine heterogene thermohydraulische Modellierung erfordert.

Die Asymmetrie infolge der lokalen Änderung der Borkonzentration wird offensichtlich bei Betrachtung des axialen Leistungsprofils in Stabzellen, die aus neutronenkinetischer Sicht zunächst als äquivalent anzusehen sind. Dies ist in Abb. 3-7 anhand der axialen Leistungsprofile in den Stabzellen 85 und 205 nach Ende der Transiente (Zeitpunkt  $t = 13$  sec) gezeigt, die nominell an symmetrisch äquivalenten Positionen liegen (siehe Abb. 3-5 oben) und identische neutronenphysikalische Eigenschaften (gleicher Brennstoff, gleiche Anreicherung, gleicher Abbrand) besitzen. Infolge der in Zelle 85 um 200 ppm niedrigeren Borkonzentration ist das Maximum in der von der Borkonzentrationsänderung betroffenen Zelle 85 höher als in der nominell symmetrisch äquivalenten Zelle 205. Der Unterschied ist in Anbetracht der Differenz von 200 ppm vergleichsweise gering. Die Ursache hierfür könnte in der neutronenphysikalisch engen Kopplung beider Zellen liegen.

### 3.4.3 2x2-Brennelement-Anordnung

Die im Folgenden dokumentierten Beispiele basieren auf der in Abb. 3-8 gezeigten 2x2-Anordnung von  $\text{UO}_2$ -Brennelementen ohne radialen Reflektor. Es werden halbseitig reflektierende bzw. Vakuum-Randbedingungen angenommen. Jedes Brennelement wird – wie in Kapitel 3.4.2 beschrieben – oben und unten von je einem Wasserreflektor mit Vakuum-Randbedingung abgeschlossen. Für diese Anordnung werden eine Steuerelementauswurf-Transiente (Abschnitt 3.4.3.1) sowie der stationäre Zustand mit ausgefahrenem Steuerelement (Abschnitt 3.4.3.2) untersucht. Die TORT-TD-Rechnung wurde mit niveausymmetrischer  $S_4$ -Quadratur und unter Verwendung der in Abschnitt 3.4.1 beschriebenen parametrisierten Wirkungsquerschnitte in  $P_1$ -Streuordnung und 8 Gruppen prompter sowie 6 Gruppen verzögerter Neutronen durchgeführt. Das Maschennetz umfasst 57800 Zellen, entsprechend einer Masche je Stabzelle in radialer und 50 Maschen in axialer Richtung. Jedem Brennelement ist ein thermohydraulischer Kanal zugeordnet. Der Ausgangszustand entspricht 22,9 MW thermischer Leistung bei einer Borkonzentration von 1015 ppm.

#### 3.4.3.1 Steuerelementauswurf-Transiente

Der Auswurf erfolgt im rechten unteren Brennelement (Position B2) innerhalb von 100 msec. Abb. 3-9 zeigt links die stabzellenweise Leistungsverteilung des Ausgangszustandes unmittelbar nach Ablauf einer 10 sec dauernden Nulltransiente. Aufgrund der reflektierenden Randbedingungen ist das Maximum in der linken oberen Ecke des Brennelements in Position A1. Der Einfluss des anfangs eingefahrenen Steuerelements ist an der lokal niedrigeren Leistung erkennbar. Die axialen Profile der brennelementgemittelten zentralen Brennstofftemperatur sind in Abb. 3-10 als schwarze Linien dargestellt. Deutlich ist die Verschiebung der Maxima in Richtung Brennelement-Unterseite infolge der dort höheren Moderatorichte zu erkennen. Ein qualitativ ähnlicher Effekt ist für die brennelementgemittelten axialen Leistungsprofile zu beobachten (schwarze Kurven in Abb. 3-10).

Der zeitliche Verlauf der Gesamtleistung während der Transiente ist in Abb. 3-9 rechts dargestellt. Nach Erreichen des Maximums bei etwa  $t = 10,1$  sec bewirkt die Brennstofftemperaturrückwirkung (Dopplereffekt) ein rasches Absinken der Leistung. Die roten Kurven in Abb. 3-10 und Abb. 3-11 zeigen die axialen Profile der brennelementge-

mittelten Brennstofftemperatur und Leistung zu einem Zeitpunkt kurz vor dem Leistungsmaximum.

### **3.4.3.2 Stationärer Zustand mit ausgefahrenem Steuerelement**

Für den stationären Zustand mit ausgefahrenem Steuerelement wurde das Ergebnis der gekoppelten TORT-TD/ATHLET-Analyse mit einer Monte-Carlo-Rechnung mit MCNP unter Verwendung nuklearer JEF-2.2-Punktdateien verglichen. Aus praktischen Gründen wurde der Abbrand des Brennelements B2 mit 0,15 GWd/t den anderen Brennelementen angeglichen.

Die Monte-Carlo-Lösung muss der von TORT-TD/ATHLET ermittelten räumlichen Verteilung der thermohydraulischen Parameter Rechnung tragen. Dazu wurde in den MCNP-Eingabedatensatz das räumliche Maschennetz des TORT-TD/ATHLET-Modells mit 34×34 Zellen in radialer und 40 Zellen in axialer Richtung entlang der aktiven Zone eingeführt. Die Moderatordichte in jeder Raumzelle kann im Eingabedatensatz direkt spezifiziert werden. Da nukleare Punktdateien nur auf einem relativ groben Temperaturnetz verfügbar sind, ist bezüglich der Brennstofftemperatur anders zu verfahren: So werden Brennstoffnuklide für spezifische Temperaturen durch lineare Interpolation zwischen Nukliddateien bei benachbarten Temperaturen erzeugt /ZWE99/. Das MCNP-Modell umfasst 120 räumliche Zellen mit unterschiedlichen thermohydraulischen Parametern und 20 verschiedene Nuklide je Brennstoffmaterial.

In Abb. 3-12 und Abb. 3-13 sind die Ergebnisse der TORT-TD/ATHLET-Lösung zusammen mit der MCNP-Rechnung dargestellt, welche auf der Auswertung von 200 Millionen Neutronenschicksalen basiert. Es werden jeweils axiale Leistungsprofile miteinander verglichen, wobei in Abb. 3-12 über einzelne Brennelemente und in Abb. 3-13 über ausgewählte Stabzellen gemittelt wurde. Wie zu erkennen, korrespondieren beide Rechnungen gut miteinander. Dies ist insofern bemerkenswert, als nicht nur grundsätzlich verschiedene Rechenmethoden zum Einsatz kommen; auch die nuklearen Daten – zellhomogenisierte Weniggruppen-Daten in der deterministischen und Punktdateien in der Monte-Carlo-Rechnung – sind unterschiedlich. Dies legt folgende Schlussfolgerungen nahe:

1. Deterministische  $P_1$ - $S_4$ -Transportrechnungen mit stabzellweise homogenisierten Wirkungsquerschnitten in wenigen Energiegruppen sind in ihrer Genauigkeit

mit Monte-Carlo-Rechnungen vergleichbar, die auf nuklearen Punktdaten und detaillierter Geometriedarstellung basieren.

2. Das vorliegende Beispiel demonstriert die Anwendbarkeit der Monte-Carlo-Methode auf stationäre Probleme unter Verwendung nuklearer Punktdaten in Verbindung mit einer räumlichen Verteilung thermohydraulischer Parameter.

#### **3.4.4 Steuerelementauswurf in einem DWR-Viertelkern**

Als praktisches Anwendungsbeispiel für TORT-TD/ATHLET wurde eine Steuerelementauswurf-Transiente in dem in Abb. 2-5 dargestellten DWR-Viertelkern untersucht. Im Ausgangszustand sind alle Steuerstab-Bänke (CR-A bis CR-D) eingefahren und alle Abschalt-Bänke (CR-SA bis CR-SD) ausgefahren. Es herrschen Nulllast-Heiß-Bedingungen, die durch eine Kühlmitteltemperatur von 560 K und einen Druck von 155 bar am Kerneintritt sowie eine thermische Gesamtleistung von  $10^{-4}\%$  der Nennleistung gegeben ist. Da ein Viertelkern betrachtet wird, wurde die Leistung mit 892 MW auf ein Viertel der Nennleistung von 3565 MW reduziert. Es wurde eine Borkonzentration von 1015 ppm gewählt. In ATHLET wurde jedem Brennelement ein eigener thermohydraulischer Kanal zugeordnet, der Reflektor wurde mit einem weiteren Kanal dargestellt. Die räumliche Diskretisierung in TORT-TD beruht auf 42 axialen Maschen, wovon 36 auf die aktive Kernregion und je 3 auf den oberen und unteren Reflektor entfallen. Wird jede Stabzelle in radialer Richtung durch eine Masche diskretisiert, entspricht dies insgesamt annähernd einer Million räumlicher Maschen und etwa ebenso vielen Materialien. Abb. 3-14 zeigt die Materialkarte eines radialen Schnitts durch den Viertelkern.

Der Steuerelementauswurf erfolgt an Kernposition E5 zum Zeitpunkt  $t = 1,0$  sec innerhalb von 100 msec. Es wurde eine 1 sec dauernden Nulltransiente berechnet. Die Rechnung wurde mit einer anfänglichen Zeitschrittweite von  $\Delta t = 2$  msec unter Verwendung der niveausymmetrischen  $S_4$ -Quadratur durchgeführt. Es ist zu beachten, dass als Folge der Viertelkern-Symmetrie mit reflektierenden Randbedingungen diese Rechnung den simultanen Steuerelementauswurf an äquivalenten Positionen in den anderen drei Kern-Vierteln simuliert. Die zugehörige Gesamt-Reaktivitätszufuhr liegt bei etwa  $\Delta\rho = 2\%$ . Wie in Abb. 3-15 zu erkennen, steigt die Gesamtleistung sehr steil an (entsprechend einer minimalen Reaktorperiode von etwa 1,2 msec) und erreicht ihr Maximum bei etwa  $t = 1,08$  sec.

Für das Brennelement E5 (Thermohydraulikkanal 22) und das dazu benachbarte in Position E4 (Thermohydraulikkanal 21) wurde die radial gemittelte Brennstofftemperatur untersucht, und zwar sowohl hinsichtlich ihres zeitlichen Verlaufs in ausgewählten axialen Maschen (Abb. 3-16) als auch ihres axialen Profils zu bestimmten Zeitpunkten (Abb. 3-17). Die Zeitpunkte entsprechen dem Anfangszustand ( $t = 1,0$  sec – rote Linie), kurz nach dem Maximum ( $t = 1,09$  sec – grüne Linie) und dem Ende des berechneten Zeitraums ( $t = 1,14$  sec – blaue Linie).

### **3.5 Untersuchungen zur Kopplung von TORT-TD mit einem CFD-Code**

Der durch die direkte Lösung der Transportgleichung erzielbare Genauigkeitsgewinn ist in vollem Umfang nur bei Harmonisierung von neutronenkinetischer und thermohydraulischer Rechenmethode auszuschöpfen. So ist eine hinreichend detaillierte Modellierung der Fluidodynamik anzustreben, um etwa die Strömungszustände unter Störfallbedingungen korrekt erfassen zu können. Dies kann durch Einsatz von Unterkanalmodellen mit Queraustausch wie COBRA-TF /THU82/ oder Computational-Fluid-Dynamics-Codes (CFD) erfolgen.

Ein solcher Ansatz wurde durch Modellierung einer einzelnen Brennstab-Zelle eines Druckwasserreaktor-Brennelements ( $\text{UO}_2$ -Element des in Kapitel 2.3 beschriebenen DWR-Kerntransienten-Benchmarks) im unendlichen Gitter unter Verwendung des CFD-Programms CFX /ANS01/ exemplarisch untersucht. Grundlage ist eine gekoppelte TORT-TD/ATHLET-Analyse, deren axiale Leistungsverteilung an das CFD-Modell übertragen wurde. Die mit CFX durchgeführte Rechnung umfasst sowohl die Fluidodynamik als auch die Wärmetransportprozesse im Brennstab. Dazu wurde der Stab mit annähernd 1,5 Millionen Knoten vernetzt; Abb. 3-18 zeigt einen Ausschnitt aus diesem Maschennetz.

In der hier realisierten Kopplung laufen TORT-TD/ATHLET und CFX jeweils unabhängig voneinander. Der Datenaustausch erfolgt über Dateien: TORT-TD/ATHLET legt die axiale Leistungsverteilung in einer Datei ab und CFX speichert in einer weiteren Datei das Ergebnis der CFD-Rechnung in Form der axialen Verteilung von Moderatorichte, Brennstofftemperatur und Borkonzentration. Das aus der gekoppelten TORT-TD/ATHLET-Rechnung ermittelte axiale Leistungsprofil entlang des Stabes ist in Abb. 3-19 dargestellt. Hieraus wurde mit CFX u.a. der axiale Verlauf der Moderatorichte entlang des Stabes berechnet. Da TORT-TD/ATHLET diese Größe

ebenfalls liefert, ist ein direkter Vergleich mit der CFD-Rechnung möglich. Wie Abb. 3-20 zeigt, ist die Übereinstimmung zwischen beiden Rechenmethoden sehr überzeugend: die relativen Unterschiede liegen bei weniger als 0,3%.

Die hier gezeigten Rechnungen und Ergebnisse dienen als erster Schritt zu einer Kopplung von TORT-TD mit einem CFD-Code.

### **3.6 TORT-Berechnungen des Benchmark zur Quantifizierung der Genauigkeit von 3D-Transportmethoden**

Die in Zusammenhang mit diesem Benchmark zu bewältigenden Herausforderungen liegen weniger in dessen geometrischer Komplexität als in der großen Anzahl der zu untersuchenden geometrischen und nuklearen Konfigurationen. Für die automatisierte Ausführung der 729 Rechenfälle wird daher ein Shell-Skript zur Verfügung gestellt. Dieses steuert u. a. einen Prä- und einen Postprozessor, der für jede einzelne Konfiguration den Eingabedatensatz erzeugt bzw. die Rechenergebnisse auswertet. Da beides codespezifisch ist, wurden für TORT je ein Prä- und ein Postprozessor entwickelt. Besonderes Augenmerk galt der Berechnung der Nettoströme durch Flächen im Raum, die TORT nicht direkt bereitstellt. Wichtige Komponente des Postprozessors ist daher ein Fortran-90-Modul, welches aus den von TORT gelieferten internen Randflüssen über Integration mittels des verwendeten Quadraturgesetzes ein- und auslaufende Neutronenströme berechnet.

Es wurden Rechnungen mit 40, 80 und 160 äquidistanten Maschen je Raumrichtung sowie  $S_8$ -,  $S_{16}$ -,  $S_{32}$ - und  $S_{48}$ -Quadratur durchgeführt. Dabei zeigte sich, dass die räumliche Diskretisierung einen geringeren Einfluss auf das Ergebnis hat als die Winkel-Diskretisierung. Insbesondere erweist sich die niveausymmetrische Quadratur für diesen Benchmark als wenig geeignet; akzeptable Ergebnisse konnten dagegen mit der Tschebyscheff-Legendre-Quadratur erzielt werden.

Tabelle 3-2 zeigt exemplarisch für 3 der 729 Konfigurationen die mit TORT erzielten Ergebnisse bei einer räumlichen Diskretisierung von 80 Maschen je Raumrichtung und  $S_{48}$ -Tschebyscheff-Legendre-Quadratur. Die Einträge in der Spalte *Item* bezeichnen die 23 zu bestimmenden Größen (siehe die Benchmark-Spezifikation /AZM07/). Die Spalte „% Error“ gibt für jede Größe den prozentualen Unterschied zwischen der TORT- und der MCNP-Lösung an. Von einigen Größen abgesehen, ist eine gute Über-

einstimmung zwischen TORT und MCNP festzustellen. Die Resultate sind jedoch als vorläufig zu betrachten, da u.a. die Arbeiten zur Erzeugung der MCNP-Referenzlösung derzeit noch nicht abgeschlossen sind; größere Abweichungen für einzelne der zu bestimmenden Größen sind momentan Gegenstand laufender Untersuchungen.

### 3.7 Zusammenfassung und Bewertung

Mit dem zeitabhängigen 3D-Neutronentransportcode TORT-TD und dessen Kopplung mit dem Thermohydraulik-Systemcode ATHLET wurde ein umfangreiches Rechenprogramm entwickelt, mit dem neutronenkinetische Vorgänge im Reaktorkern physikalisch wesentlich exakter modelliert werden können als es mit den traditionellen nodalen, auf der Diffusionsnäherung basierenden Grobgitterverfahren möglich ist. Die Rechenmethodik stellt gegenüber der heute üblichen Praxis in Kernauslegung und Störfallberechnung eine deutliche Verbesserung dar, welche maßgeblich auf folgenden Faktoren beruht:

- Lösung der Neutronen-Transportgleichung anstelle der Diffusionsapproximation. Dies ermöglicht u.a. die Berücksichtigung anisotroper Neutronenstreuung.
- Verwendung prinzipiell beliebig vieler Energiegruppen anstatt des bei LWR üblichen Zweigruppen-Ansatzes.
- Räumlich hochaufgelöste Berechnung auf Basis homogenisierter Stabzellen, im Unterschied zu nodalen Grobgitterverfahren mit Homogenisierung ganzer Brennelemente.

TORT-TD basiert auf der  $S_N$  oder Diskrete-Ordinaten-Methode, die sich gegenüber anderen Transportverfahren durch die hohe numerische Genauigkeit auszeichnet, was letztlich eine Konsequenz der expliziten Diskretisierung der Winkelvariablen ist. Dadurch können auch stark anisotrope Situationen, wie sie z. B. in der Umgebung von Absorberregionen oder bei gevoideten Zuständen auftreten, hinreichend genau erfasst werden. Hiervon ist ein Genauigkeitsgewinn für die Bestimmung lokaler Größen (Stableistungen, minimaler Abstand zu DNB etc.) gegenüber den heute gebräuchlichen Grobgitter-Diffusionsverfahren mit anschließender Rekonstruktion der Stableistungen zu erwarten. Mit TORT-TD können auch Gültigkeitsbereich bzw. Schwächen nodaler Diffusionsansätze mit üblicherweise nur wenigen Energiegruppen bewertet werden.

Das Kapitel zur Weiterentwicklung der nuklearen Rechenmethodik dokumentiert die Entwicklung von TORT-TD sowie dessen Kopplung mit dem Systemcode ATHLET. Das gekoppelte Codesystem TORT-TD/ATHLET wurde anschließend an einer Reihe von Testfällen erprobt, die Reaktivitätsstörfälle (Steuerelementauswurf, Borverdünnung) sowohl in vereinfachten LWR-Anordnungen als auch in einem DWR-Viertelkern darstellen. Für einen stationären Testfall wurde ein Vergleich der TORT-TD/ATHLET-Lösung in 8 Energiegruppen mit einer Rechnung des Monte-Carlo-Programms MCNP mit Punktdaten durchgeführt, in die die räumliche Verteilung der mit TORT-TD/ATHLET ermittelten thermohydraulischen Größen einfließt. Das Ergebnis der MCNP-Rechnung bestätigt die Qualität der stationären TORT-TD/ATHLET-Analyse.

## **4 Stationäre Kernberechnungen mit Monte-Carlo- und deterministischen Neutronen-Transportprogrammen**

### **4.1 Einleitung**

Gegenwärtig werden dreidimensionale LWR-Ganzkernberechnungen meistens mit Programmen durchgeführt, die auf der Diffusionsnäherung zur Lösung der Boltzmann-Transportgleichung beruhen, unter Verwendung von nuklearen Daten, die über große räumliche Bereiche (typischerweise über den Brennelementquerschnitt) homogenisiert und auf eine sehr geringe Anzahl von Energiegruppen (typischerweise zwei) kondensiert sind, die vorab mit Brennelementcodes erzeugt werden. Durch den Trend zu immer heterogeneren Beladungen heutiger Reaktorkerne hat man einerseits die Veranlassung, und mit den verfügbaren Ressourcen heutiger Computersysteme andererseits die Möglichkeit, solche Ganzkernberechnungen mit deterministischen Transportprogrammen ohne die Notwendigkeit der Diffusionsnäherung und mit viel feinerer Auflösung in Geometrie und Neutronenenergie, oder mit Monte-Carlo-Programmen mit nuklearen Punktdaten mit einer praktisch uneingeschränkt detaillierten Beschreibung der Kerngeometrie durchzuführen. Dennoch sind zur praktischen Durchführung von deterministischen Transportrechnungen in angemessener Rechenzeit bestimmte Vereinfachungen vorteilhaft. Dies sind die Mittelung der nuklearen Daten über kleine räumliche Bereiche (typischerweise über den Stabzellenquerschnitt) und die Kondensation auf eine geeignete Anzahl von Energiegruppen (typischerweise 10 – 20). Diese Reduktion der Ausgangsdaten wird ebenfalls mit Brennelementcodes durchgeführt. Diese Berechnungskette bis hin zur Ganzkernberechnung sollte durch Vergleich mit Referenzlösungen aus Monte-Carlo-Berechnungen überprüft werden.

Die Monte-Carlo-Methode zur Berechnung von Kernanordnungen wird bisher meist mit über große Bereiche der Anordnung konstanten thermohydraulischen Parametern durchgeführt. Will man Betriebszustände von Reaktoren realistisch beschreiben, hat man axial und radial veränderliche Werte der Brennstofftemperatur und der Moderator-dichte zu berücksichtigen. Damit ist für die Durchführung von Monte-Carlo-Berechnungen eine hohe Anzahl von thermohydraulischen Zonen, und damit effektiv verschiedenen Materialzonen zu berücksichtigen, die die Anzahl von Zonen in üblichen Berechnungen um Größenordnungen übersteigt. Dies bedeutet großen Aufwand bei der Erstellung der Eingabedatensätze, der praktisch nur softwareunterstützt bewältigt werden

kann, und stellt sehr hohe Anforderungen an die Rechnerressourcen. Ergebnisse solcher Berechnungen sind soweit möglich an Messdaten und durch Vergleiche mit deterministischen Transportlösungen zu überprüfen.

Auch wenn mit der Monte-Carlo-Methode nahezu keine Näherungen bei der Darstellung der Geometrie einer Anordnung und der Reduktion der nuklearen Daten nötig sind, liegt eine Unsicherheit der Rechenergebnisse in Unsicherheiten in den nuklearen Basisdaten selbst. Diese werden von den Kerndaten-Evaluierungsgruppen fortlaufend auf den neuesten Stand gebracht mit dem Ziel, die Übereinstimmung mit Messdaten zu verbessern. Die Qualität der Daten wird hauptsächlich durch die Berechnung von Multiplikationsfaktoren für eine große Anzahl von kritischen Experimenten bewertet. Dabei handelt es sich meist um kompakte Anordnungen bei Raumtemperatur. Die Multiplikationsfaktoren von kritischen Anordnungen sind auch im Wesentlichen Gegenstand von Unsicherheitsanalysen, bei denen der Einfluss der Unsicherheiten in den nuklearen Daten auf Rechenergebnisse quantitativ erfasst wird. Es sollte jedoch auch überprüft werden, wie Unsicherheiten in den nuklearen Daten sich auf Rechenergebnisse für Ganzkernanordnungen in Betriebszuständen auswirken.

Kapitel 2 gibt eine Übersicht über die kritischen Experimente und die für Benchmark-Vergleichsrechnungen definierten Anordnungen, die zur Anwendung für Monte-Carlo- und deterministische Berechnungen herangezogen werden. In Abschnitt 4.2 wird die Erzeugung von Weniggruppendaten für deterministische Transportrechnungen mit dem Programmsystem SCALE-5.1 beschrieben, sowie die Methode zur Erzeugung effektiver Absorberwirkungsquerschnitte, die für anschließende deterministische Kernberechnungen verwendet werden. In Abschnitt 4.3 wird die Durchführung von Monte-Carlo-Berechnungen mit örtlich veränderlichen thermohydraulischen Parametern beschrieben. In Abschnitt 4.4 wird der Einfluss von nuklearen Daten auf Kernberechnungen untersucht. In Abschnitt 4.5 wird eine Zusammenfassung und Bewertung der erzielten Ergebnisse gegeben.

#### **4.2           Bereitstellung von Weniggruppendaten für deterministische Transportrechnungen**

Bisher wurde in der GRS zur Erzeugung von Weniggruppendaten für deterministische Transportrechnungen neben dem Brennelementcode HELIOS /CAS91/ hauptsächlich das Spektralprogramm RESMOD mit JEF-2.2-Gruppendaten /BER94/ eingesetzt. Da-

bei handelt es sich um ein eindimensionales Programm, mit dem Zellrechnungen für zylindrisierte Brennstabzellen in einem Dreizonenmodell durchgeführt werden. Energiegruppenkondensation und Zellhomogenisierung erfolgten dann meist mit dem eindimensionalen  $S_N$ -Code XSDRN-PM aus dem Programmsystem SCALE /SCA06/. Diese Berechnungsmethode ist gut für Systeme geeignet, die im Wesentlichen durch Stabgitter ohne ausgeprägte Heterogenitäten darstellbar sind, wie dies häufig für kritische Experimente zutrifft. Inzwischen ist das SCALE-System, das gegenwärtig in der Version 5.1 verfügbar ist, so weit vervollständigt, dass Gruppendaten für Transportrechnungen nicht nur auf Stabzellenbasis erstellt werden können, sondern mit dem zweidimensionalen Transportprogramm NEWT in Brennelementgeometrie. Dieser Rechenweg wird erprobt. Zusätzlich können mit Hilfe der Programmsequenz TRITON Brennelement-Abbrandrechnungen durchgeführt werden, um die Gruppendaten bei unterschiedlichen Abbränden zu erhalten.

Als Testfall für die Einsetzbarkeit der Methode wird der stationäre Fall des "DWR-MOX/ $UO_2$ -Kerntransientenbenchmarks" /KOZ06/ herangezogen. Für die deterministischen Transportrechnungen wird der  $S_N$ -Code DANTSYS /ALC95 / bzw. dessen Nachfolgeversion PARTISN /ALC05/ verwendet. Jeder Berechnungsschritt von den Rechnungen für die einzelnen Brennelemente über eine Testanordnung mit  $2 \times 2$  Brennelementen bis zum Reaktorkern in  $\frac{1}{4}$ -Kern-Darstellung wird durch Vergleich mit Ergebnissen des Monte-Carlo-Programms MCNP-5 /X-503/ mit der in der GRS für Routineberechnungen eingesetzten JEF-2.2-Datenbibliothek /BER01/, /ZWE99/ sorgfältig überprüft.

#### **4.2.1 Erzeugung von Weniggruppendaten für unkontrollierte Brennelemente**

Die Erzeugung von Weniggruppendaten für die einzelnen Brennelemente erfolgt mit dem Modul NEWT aus dem SCALE-5.1-Programmsystem. Dabei handelt es sich um ein zweidimensionales  $S_N$ -Transportprogramm mit der Erweiterung auf irreguläre Geometrien, so dass die Stabzellgeometrie mit nahezu beliebiger Genauigkeit nachgebildet werden kann. NEWT ist über die Programmsequenz TRITON mit den Programmen BONAMI/NITAWL bzw. BONAMI/CENTRM/PCM gekoppelt, mit denen die Spektralrechnungen zur Resonanzselbstabschirmung für die individuellen Stabzellen durchgeführt werden. In TRITON ist außerdem die Möglichkeit vorgesehen, die mit NEWT bestimmten Neutronenflüsse im Brennelement an das Nuklidinventarprogramm ORIGEN

zu übergeben, um die Nukliddichten in jedem Brennstab zu jedem Abbrandschritt zu bestimmen. Von dieser Möglichkeit wird hier kein Gebrauch gemacht; vielmehr werden die Nukliddichten für jeden benötigten Abbrandwert, die mit dem Abbrandprogramm HELIOS /CAS91/ erzeugt und mit der Benchmark-Spezifikation mitgeliefert wurden, für die Brennelementberechnungen verwendet. Dies erfolgt aus Gründen der Konsistenz mit früheren MCNP-Berechnungen /SEU06/, /LAN07/, bei denen genauso verfahren wurde, und die zu Vergleichen herangezogen werden sollen. Dies stellt aber keine Einschränkung dar, da im Rahmen anderer Untersuchungen /HES07/ gezeigt wurde, dass TRITON zur Nuklidinventarbestimmung in Brennelement-Abbrandrechnungen geeignet ist und zu den etablierten Abbrandprogrammen CASMO, HELIOS und KENOREST vergleichbare Ergebnisse liefert.

Als Ausgangsdaten wird die in SCALE-5.1 enthaltene ENDF/B-V-Bibliothek mit 44 Energiegruppen verwendet. Die Bestimmung von stabzellhomogenisierten Weniggruppendaten erfolgt in mehreren Schritten. Im ersten Schritt werden mit BONAMI/NITAWL für jede im Brennelement vorhandene Stabzelle resonanzselbstabgeschirmte mikroskopische 44-Gruppen-Daten erzeugt. Mit diesen wird im zweiten Schritt eine Brennelementrechnung mit NEWT mit voller Auflösung der Brennstäbe und Steuerstabführungsrohre durchgeführt; aus Symmetriegründen ist es ausreichend, das Brennelement in  $\frac{1}{4}$ -Darstellung mit reflektierenden Randbedingungen zu berechnen. Dabei werden mittels Fluss-Volumen-Wichtung zellhomogenisierte makroskopische Wirkungsquerschnitte für jede Stabzelle erzeugt. Im dritten Schritt werden in einer weiteren Brennelementrechnung mit NEWT, bei der die zellhomogenisierten 44-Gruppen-Daten verwendet werden, die Wirkungsquerschnitte auf 18 Energiegruppen (davon sechs thermische Gruppen) herunterkondensiert. Als 18-Gruppenschema wird im Wesentlichen dasjenige verwendet, mit dem im Lauf der vergangenen Jahre zahlreiche Benchmarkberechnungen durchgeführt wurden, und das sich im Vergleich mit Monte-Carlo-Rechnungen und mit Berechnungen anderer Benchmarkteilnehmer ausnahmslos bewährt hat, was Ergebnisse für Multiplikationsfaktoren und Stableistungsverteilungen in kritischen Anordnungen betrifft. Der einzige Unterschied liegt im numerischen Wert der Gruppengrenzen, da einige Gruppengrenzen des normalerweise verwendeten Schemas in der 44-Gruppen-Bibliothek nicht vorhanden sind; für diese wurde die nächstgelegene Gruppengrenze verwendet. Die Gruppengrenzen sind in Tabelle 4.1 angegeben. Schließlich wird im vierten Schritt eine weitere Brennelementrechnung mit NEWT mit den 18-Gruppen-Daten durchgeführt; diese Rechnung ist für die Bereitstellung der

Weniggruppdaten nicht mehr nötig und dient nur der Überprüfung dieser Wirkungsquerschnitte.

Für jedes einzelne Brennelement wurden Kritikalitätsrechnungen mit MCNP durchgeführt (unter Berücksichtigung aller unterschiedlichen Abbrandzustände sind dies 17 verschiedene Brennelemente); mit diesen wurden die in den ersten NEWT-Rechnungen ermittelten Multiplikationsfaktoren verglichen. Die MCNP- und NEWT- Multiplikationsfaktoren sind in Abb. 4-1 dargestellt. Die Übereinstimmung ist durchwegs gut; Unterschiede sind hauptsächlich auf die verschiedenen nuklearen Basisdaten (JEF-2.2 für MCNP, ENDF/B-V für NEWT) zurückzuführen.

#### **4.2.2 Einsatz der Weniggruppdaten für unkontrollierte Brennelemente**

Zunächst werden die erzeugten makroskopischen 18-Gruppen-Wirkungsquerschnitte zur Berechnung aller unkontrollierten Brennelemente in 2D-Darstellung mit PARTISN eingesetzt. Die Berechnungen erfolgen in  $P_3S_8$ -Ordnung mit 2X2 Maschen je Stabzelle. In Abb. 4-2 werden die so berechneten Multiplikationsfaktoren mit denen aus den NEWT-Rechnungen mit 44-Gruppen-Daten und nicht homogenisierten Stabzellen (siehe Abb. 4-1) verglichen. Es ergibt sich sehr gute Übereinstimmung für alle Brennelemente in allen Abbrandzuständen.

Zusätzlich wurden für ein Uran- und ein MOX-Brennelement im frischen Zustand (0.15 GWd/t SM) die mit NEWT und PARTISN berechneten Stableistungsverteilungen verglichen. In Zuständen mit niedrigem Abbrand enthalten die Brennelemente Zellen mit abbrennbaren Absorbern (Beschichtung der Brennstofftabletten für bestimmte Brennstäbe in den Uranbrennelementen – "IFBA", Absorber an Steuerstabführungsrohrpositionen in den MOX-Brennelementen – "WABA"). In diesen Fällen war zu überprüfen, ob die durch Fluss-Volumen-Homogenisierung erzeugten zellhomogenisierten Wirkungsquerschnitte diese Zellen ausreichend genau beschreiben. In Abb. 4-3 und Abb. 4-4 werden die Verhältnisse der mit NEWT und PARTISN berechneten Stableistungsverteilungen dargestellt. Die Unterschiede sind derart gering, dass eine Sonderbehandlung der Zellen, die abbrennbare Absorber enthalten, nicht notwendig ist.

#### **4.2.3 Einsatz der Weniggruppendaten für eine unkontrollierte 2X2-Anordnung**

Als erster Anwendungsfall wird eine Anordnung von 2X2 Uranbrennelementen mit frischem Brennstoff im Zustand Nulllast heiß betrachtet. Für zwei Seiten werden reflektierende, für die jeweils gegenüberliegenden Seiten Vakuum-Randbedingungen verwendet, so dass diese Anordnung 4X4 von Vakuum umgebene Brennelemente repräsentiert. Die Berechnung mit PARTISN in  $P_3S_8$ -Ordnung mit 2X2 Maschen je Stabzelle erfolgt hier in 2D-Geometrie; eine Berechnung in 3D-Darstellung wird in Kapitel 3 vorgestellt. Der mit PARTISN berechnete Multiplikationsfaktor ist in sehr guter Übereinstimmung mit dem MCNP-Referenzwert (MCNP:  $1.00380 \pm 0.00005$ ; PARTISN: 1.00364). In Abb. 4-5 werden die mit MCNP und PARTISN berechneten Stableistungsverteilungen verglichen. Dargestellt sind die relativen Unterschiede zwischen der PARTISN- und der MCNP-Verteilung. Trotz der aufgrund der Vakuum-Randbedingungen stark gewölbten Verteilung ergibt sich eine hervorragende Übereinstimmung, mit relativen Unterschieden, die die Größe von 1 % nur an sehr wenigen Stellen erreichen. Es ist zu beachten, dass für diese Qualität des PARTISN-Ergebnisses die Beschreibung der Anordnung mit mindestens 2X2 Maschen je Stabzelle ausschlaggebend ist.

#### **4.2.4 Einsatz der Weniggruppendaten für den unkontrollierten Kern des DWR-MOX/ $UO_2$ -Kerntransientenbenchmarks**

Die 18-Gruppen-Wirkungsquerschnitte werden nun verwendet, um den unkontrollierten Kern des DWR-MOX/ $UO_2$ -Kerntransientenbenchmarks in  $\frac{1}{4}$ -Kern-Darstellung in 2D-Geometrie zu berechnen. Das Berechnungsschema weicht etwas von den Fällen der einzelnen Brennelemente und der 2X2-Anordnung ab, da sich aufgrund der Größe und Heterogenität der Anordnung Konvergenzschwierigkeiten ergaben. Die Berechnungen wurden daher mit DANTSYS in  $P_2S_8$ -Ordnung mit 2X2 Maschen je Stabzelle durchgeführt, wobei das Konvergenzverhalten unproblematisch war. Der mit DANTSYS berechnete Multiplikationsfaktor ist in guter Übereinstimmung mit dem MCNP-Referenzwert (MCNP:  $1.06065 \pm 0.00008$ ; DANTSYS: 1.06446).

In Abb. 4-6 werden die mit MCNP und DANTSYS berechneten Brennelementleistungsverteilungen für den Viertelkern verglichen. Dargestellt sind die relativen Unterschiede zwischen der DANTSYS- und der MCNP-Verteilung. Die Übereinstimmung ist zufrie-

denstellend, mit einer leichten Schiefelage im Verhältnis der Verteilungen zwischen Kernmitte und Kernrand, mit maximalen Abweichungen von 2.5 %. In Abb. 4-7 sind die relativen Unterschiede zwischen den mit DANTSYS und MCNP gerechneten Stableisungsverteilungen in einem Brennelement (Position E-5 in Abb. 2-5) dargestellt. Die Übereinstimmung ist ähnlich gut wie im Fall der 2X2-Anordnung. Ähnliche Unterschiede werden auch beim Vergleich mit Lösungen anderer Benchmarkteilnehmer /KOZ06/ beobachtet. Als Beispiel wird in Abb. 4-8 die nodale Lösung aus dem Code PARCS mit brennelementhomogenisierten 8-Gruppen-Daten mit der MCNP-Lösung verglichen.

Eine Reihe von Testrechnungen mit dem Monte-Carlo Code KENO-V aus dem SCALE-5.1-Programmsystem mit ENDF/B-V-Multigruppdaten mit unterschiedlicher Anzahl von Energiegruppen mit heterogener und homogenisierter Darstellung der Stabzellen hat gezeigt, dass sich die Unterschiede in den Verteilungen nicht eindeutig zuordnen lassen, sondern sich sowohl aus Unterschieden in den nuklearen Daten (ENDF/B-V gegenüber JEF-2.2) als auch in den einzelnen Schritten der Berechnungskette (zellhomogenisierte energiegruppenkondensierte Weniggruppdaten im Vergleich zu Punktdaten) ergeben. Dies wird in Abb. 4-9 veranschaulicht, wo die Verhältnisse der Leistungsverteilungen aus Berechnungen mit dem Monte-Carlo-Code KENO-Va zur MCNP-Leistungsverteilung abgebildet sind. Die KENO-Berechnungen wurden schrittweise durchgeführt, ausgehend von einer nicht zellhomogenisierten Rechnung mit der 238-Gruppen-ENDF/B-V-Bibliothek aus SCALE 5.1, bis hin zur zellhomogenisierten Rechnung mit der auf 18 Energiegruppen kondensierten Bibliothek, die auch für die DANTSYS-Berechnungen verwendet wurden. Während die Unterschiede zwischen der MCNP- und der KENO-Leistungsverteilung mit der 238-Gruppen-Bibliothek sehr gering sind, vergrößern sie sich bei jedem Schritt der Datenreduktion etwas.

#### **4.2.5 Erzeugung von Weniggruppdaten für kontrollierte Brennelemente**

Die Erzeugung von Weniggruppdaten für die einzelnen kontrollierten Brennelemente erfolgt mit dem Modul NEWT aus dem SCALE-5.1-Programmsystem völlig analog zur Vorgehensweise für unkontrollierte Brennelemente. Für jedes einzelne Brennelement wurden wieder Kritikalitätsrechnungen mit MCNP durchgeführt; mit diesen wurden die in den ersten NEWT-Rechnungen ermittelten Multiplikationsfaktoren verglichen. Die MCNP- und NEWT-Multiplikationsfaktoren für die kontrollierten Brennelemente sind in Abb. 4-10 dargestellt, wobei wieder durchwegs gute Übereinstimmung zu erkennen ist.

Bei der Erzeugung homogenisierter Wirkungsquerschnitte ist jedoch zu beachten, dass eine Zellhomogenisierung mittels Fluss-Volumen-Wichtung der Absorberstabzellen die Absorberwirksamkeit deutlich überschätzt /ROW78/. Dies wird beim Vergleich der Multiplikationsfaktoren aus NEWT-Rechnungen für die Brennelemente mit nichthomogenisierter Darstellung der Brenn- und Absorberstabzellen, und aus PARTISN-Rechnungen mit homogenisierten Stabzellen deutlich; die Wirksamkeit der Absorberstäbe für das frische Uranbrennelement mit 4.2 % Anreicherung wird mit den mittels Fluss-Volumen-Wichtung homogenisierten Wirkungsquerschnitten um ca. 2500 pcm überschätzt. Auch die Stableistungsverteilung im Brennelement wird deutlich verfälscht. Wie später noch gezeigt wird, ergeben sich auch bei den Leistungsverteilungen für die 2X2-Anordnung mit einem kontrollierten Brennelement und den kontrollierten Viertelkern drastische Unterschiede zur MCNP-Referenzverteilung, so dass die Verwendung unkorrigierter zellhomogenisierter Wirkungsquerschnitte nicht akzeptabel ist.

Die Korrektur erfolgt mittels Verwendung von effektiven Wirkungsquerschnitten für die Absorberstabzellen, die zur Verringerung der Wirksamkeit durch Mischung der Wirkungsquerschnitte für die Absorberzelle mit denen für eine Sterstabführungsrohrzelle erzeugt werden. Das Mischungsverhältnis wird dabei so angepasst, dass für das frische Uranbrennelement mit 4.2 % Anreicherung die Steuerstabwirksamkeiten in der NEWT-Rechnung mit heterogenen Stabzellen und der PARTISN-Rechnung mit homogenisierten Stabzellen übereinstimmt. Aus dieser Forderung ergibt sich eine effektive Absorberdichte von ca. 85 % des Nominalwertes. Diese Anpassung könnte im Prinzip für jedes Brennelement individuell vorgenommen werden; es zeigt sich jedoch, dass der einheitliche Wert von 85 % für alle kontrollierten Brennelemente zufriedenstellende Wirksamkeiten liefert.

Ein ganz ähnliches Verfahren wurde bereits früher zur Bereitstellung von zellhomogenisierten Wirkungsquerschnitten verwendet /ZWE04/; dabei wurde allerdings der effektive Durchmesser der Absorberstäbe reduziert. Mit dieser Methode konnten bei der Berechnung des ANS-DWR-Benchmarks und der beiden kritischen Anordnungen VENUS-1 und VENUS-2 ausgezeichnete Ergebnisse im Vergleich mit MCNP-Referenzrechnungen erzielt werden /ZWE08/.

#### **4.2.6 Einsatz der Weniggruppendaten für kontrollierte Brennelemente**

Zur ersten Überprüfung der Qualität der zellhomogenisierten 18-Gruppen-Wirkungsquerschnitte für die kontrollierten Brennelemente werden diese zur Brennelementberechnung mit PARTISN in 2D-Darstellung eingesetzt. Die Berechnungen erfolgen wieder in  $P_3S_8$ -Ordnung mit 2X2 Maschen je Stabzelle. In Abb. 4-11 werden die so berechneten Reaktivitätswerte mit denen aus den NEWT-Rechnungen mit 44-Gruppen-Daten und nicht homogenisierten Stabzellen verglichen. Es ergibt sich sehr gute Übereinstimmung für alle Brennelemente in allen Abbrandzuständen. Zum Vergleich sind für die Zustände mit dem niedrigsten und dem höchsten Abbrand die Reaktivitätswerte angegeben, die sich aus Berechnungen mit unkorrigierten Absorberwirkungsquerschnitten ("100 % Abs.") ergeben. Hier wird nochmals deutlich, welche wichtige Rolle die geeignete Korrektur der homogenisierten Absorberwirkungsquerschnitte spielt.

In Abb. 4-12 werden die Verhältnisse der mit NEWT und PARTISN berechneten Stableistungsverteilungen für das kontrollierte frische Uranbrennelement mit 4.2 % Anreicherung dargestellt. Während sich die Verteilungen bei der PARTISN-Rechnung mit unkorrigierten homogenisierten Absorberwirkungsquerschnitten deutlich unterscheiden (oben), ergibt sich bei Verwendung der korrigierten Absorberwirkungsquerschnitte eine erhebliche Verbesserung der Übereinstimmung (unten). Diese Übereinstimmung kann dadurch optimiert werden, dass zur Korrektur statt der einfachen Anpassung der Absorberkonzentration die SPH-Methode /HEB93/, /PAU05/ verwendet wird, bei der die Wirkungsquerschnitte aller Stäbe einzeln für jede Energiegruppe iteriert werden, so dass alle Reaktionsraten in den Brennelementrechnungen mit heterogenen und homogenisierten Stabzellen übereinstimmen. Zu welchen Verbesserungen in den  $S_N$ -Transportrechnungen für die 2X2-Anordnung und den Viertelkern dies führt, ist noch zu untersuchen.

#### **4.2.7 Einsatz der Weniggruppendaten für eine kontrollierte 2X2-Anordnung**

Für die Anordnung von 2X2 Uranbrennelementen mit frischem Brennstoff im Zustand Nulllast heißt aus Abschnitt 2.3 ein kontrollierter Zustand definiert. Dabei wird das Eckbrennelement mit Steuerstäben versehen, wodurch sich effektiv eine Anordnung von 4X4 Brennelementen mit kontrollierten Eckbrennelementen ergibt. Die Berechnung mit PARTISN erfolgt wieder in  $P_3S_8$ -Ordnung mit 2X2 Maschen je Stabzelle in 2D-Geometrie. Der mit PARTISN berechnete Reaktivitätswert der Steuerstäbe ist in sehr gu-

ter Übereinstimmung mit dem MCNP-Referenzwert unter der Voraussetzung, dass die korrigierten homogenisierten Absorberwirkungsquerschnitte verwendet werden (MCNP: 0.0108; PARTISN unkorrigiert: 0.0112; PARTISN korrigiert: 0.0107). In Abb. 4-13 werden die mit MCNP und PARTISN berechneten Stableistungsverteilungen verglichen. Dargestellt sind die relativen Unterschiede zwischen der PARTISN- und der MCNP-Verteilung. Während die Unterschiede bei Verwendung unkorrigierter homogenisierter Absorberwirkungsquerschnitte für die Stäbe im kontrollierten Brennelement völlig inakzeptabel sind (oben), wird durch die Korrektur mittels Verringerung der Absorberdichte eine wesentliche Verbesserung erzielt (unten).

#### **4.2.8 Einsatz der Weniggruppendaten für den kontrollierten Kern des DWR-MOX/ $\text{UO}_2$ -Kerntransientenbenchmarks**

Schließlich wird der kontrollierte Kern des DWR-MOX/ $\text{UO}_2$ -Kerntransientenbenchmarks in  $\frac{1}{4}$ -Kern-Darstellung in 2D-Geometrie mit den erzeugten 18-Gruppen-Wirkungsquerschnitten berechnet. Im vollständig kontrollierten Zustand enthalten die Brennelemente, die in Abb. 2-5 mit (CR-..) bezeichnet sind, Absorberstäbe. Die Berechnungen wurden wie für den unkontrollierten Fall mit DANTSYS in  $\text{P}_2\text{S}_8$ -Ordnung mit 2X2 Maschen je Stabzelle durchgeführt. Die mit DANTSYS berechneten Reaktivitätswerte sind in guter Übereinstimmung mit dem MCNP-Referenzwert unter der Voraussetzung, dass für die kontrollierten Brennelemente die korrigierten zellhomogenisierten Wirkungsquerschnitte verwendet werden. Die Werte sind in Tabelle 4-2 angegeben. Ebenfalls angegeben sind die Reaktivitätswerte für den Auswurf einer Steuerstabgruppe im Viertelkern (Position E-5 in Abb. 2-5). Auch hier wird sehr gute Übereinstimmung zwischen MCNP und DANTSYS erzielt.

In Abb. 4-14 werden die Brennelementleistungsverteilungen aus MCNP und DANTSYS verglichen. Dargestellt sind die relativen Unterschiede zwischen der DANTSYS- und der MCNP-Verteilung mit unkorrigierten (oben) und korrigierten (unten) zellhomogenisierte Absorberwirkungsquerschnitten. Bei Verwendung der unkorrigierten Wirkungsquerschnitte ergeben sich deutliche Unterschiede in den Leistungsverteilungen insbesondere an den Positionen der kontrollierten Brennelemente (gelb in Abb. 4-14 oben). Die Übereinstimmung ist sehr gut, wenn die korrigierten Absorberwirkungsquerschnitte verwendet werden. Ebenfalls sehr gute Übereinstimmung wird für die stabweise Leistungsverteilung in den Brennelementen erzielt; in Abb. 4-15 wird dies für das kontrollierte Brennelement an der Position E-5 in Abb. 2-5 gezeigt. Für den kontrollierten

Kern sind die Unterschiede zur MCNP-Referenzlösung deutlich geringer als mit allen anderen zum Benchmark eingereichten Lösungen /KOZ06/. Die deutliche Verbesserung gegenüber nodalen Methoden wird in Abb. 4-16 verdeutlicht, in der wieder die nodale Lösung aus dem Code PARCS mit brennelementhomogenisierten 8-Gruppen-Daten mit der MCNP-Lösung verglichen wird. Überraschenderweise weicht die Leistungsverteilung aus einer Berechnung mit dem Code DeCart, bei dem der Kern mit 47-Gruppen-Daten aus HELIOS stabweise ohne Zellhomogenisierung beschrieben wird, noch deutlicher von der MCNP-Lösung ab. Hinsichtlich der Stableistungsverteilung im Brennelement ist die Übereinstimmung zwischen der DeCart- und der MCNP-Lösung befriedigend. Hier zeigen sich sehr große Unterschiede zwischen nodalen Lösungen und der MCNP-Lösung mit maximalen relativen Abweichungen weit über 10 %; dies ist auf Schwierigkeiten bei der Stableistungsrekonstruktion für kontrollierte Brennelemente zurückzuführen /KOZ06/. Damit ist es erstmals gelungen, für den kontrollierten Fall des DWR-MOX/ $\text{UO}_2$ -Kerntransientenbenchmarks zufriedenstellende Übereinstimmung der Lösung eines deterministischen Rechenprogramms mit der MCNP-Lösung zu erzielen.

### **4.3 Monte-Carlo-Berechnungen mit thermohydraulischen Parametern**

Bisher wurden Monte-Carlo-Berechnungen von Kernanordnungen meist mit über große Bereiche konstanten thermohydraulischen Parametern (Brennstofftemperatur, Moderatordichte, Borkonzentration) durchgeführt. Damit lassen sich Kritikalitätsrechnungen für kritische Experimente und abgeschaltete Reaktorkerne sowie gekoppelte Monte-Carlo-/Abbrandrechnungen adäquat durchführen; für Reaktoren in Betriebszuständen sollte jedoch die örtliche Abhängigkeit der thermohydraulischen Bedingungen berücksichtigt werden. Die MCNP-Eingabedatensätze werden daher für ausgewählte Rechenfälle derart verallgemeinert, dass die Brennstoff- und Moderator-Materialzonen in viele Teilbereiche aufgeteilt werden, die unterschiedliche Temperaturen bzw. Dichten besitzen können. Diese thermohydraulischen Parameter können aus gekoppelten Neutronentransport-/Thermofluidynamik-Berechnungen übernommen werden; mit der Möglichkeit der Beschreibung der Ortsabhängigkeit der thermohydraulischen Parameter wird auch eine direkte Kopplung zwischen MCNP für den Neutronentransport im Reaktorkern und ATHLET für die Thermofluidynamik vorbereitet.

#### 4.3.1 Berechnung des heißen KRITZ-2:13-Kerns

Die KRITZ-2-Experimente wurden auch für heiße Kernzustände durchgeführt; einer dieser Zustände (2:13) wird ausgewählt, um eine erste Überprüfung einer MCNP-Rechnung mit JEF-2.2-Punktdateien mit einem Eingabedatensatz durchzuführen, bei dem ortsabhängige Brennstofftemperaturen und Moderatorichten zugelassen sind. Dabei wird jede Brennstabzelle als individueller thermohydraulischer Kanal zugelassen, wodurch sich bei 40X40 Brennstäben 820 thermohydraulische Kanäle ergeben (der Kern der KRITZ-2:13-Anordnung besitzt eine Symmetrieachse entlang einer Diagonalen). Mit einer Einteilung der moderierten Länge der Brennstäbe in acht axiale Knoten ergibt sich eine Gesamtanzahl von 6560 unterschiedlichen thermohydraulischen Zonen im moderierten Bereich des Kerns und 7380 Zonen insgesamt, wenn der unmoderierte Bereich als ein zusätzlicher axialer Abschnitt betrachtet wird, und damit zu einer eben solchen Zahl von unterschiedlichen Brennstoffmaterialien. Um bei dieser für Monte-Carlo-Rechnungen ungewöhnlich hohen Anzahl von individuellen räumlichen Bereichen ausreichend geringe statistische Unsicherheiten für die lokalen Spaltraten zu erreichen, wurde die Rechnung mit 200 Millionen Neutronenschicksalen durchgeführt. Da im Experiment die thermohydraulischen Parameter örtlich nicht variieren, sind in der Rechnung die formal unterschiedlich definierten Brennstoffgemische und Moderatorichten für alle Zonen identisch. Dennoch ist damit ein Eingabedatensatz verfügbar, der für eine Anordnung mit variablen thermohydraulischen Bedingungen repräsentativ ist, und der durch Vergleich der Rechenergebnisse mit Messungen validiert werden kann. Es zeigt sich, dass solche Berechnungen mit den verfügbaren Rechnerressourcen problemlos in akzeptabler Zeit durchführbar sind, insbesondere wenn Mehrprozessorsysteme für Parallelrechnungen benutzt werden. Zur Durchführung von Ganzkernberechnungen mit jeder Stabzelle als thermohydraulischem Kanal und einer vergleichbaren Anzahl von axialen Knoten ergäbe sich eine Anzahl von thermohydraulischen Zonen, die um einen Faktor 100 – 200 höher liegt. Ob Monte-Carlo-Berechnungen mit dieser räumlichen Auflösung mit verfügbarer Hardware durchführbar sind, muss noch erprobt werden. Zumindest sollten derartige Berechnungen auf massiv parallelen Rechnersystemen durchgeführt werden.

Die Ergebnisse der Monte-Carlo-Berechnungen werden mit Ergebnissen deterministischer Transportrechnungen mit PARTISN verglichen. Diese wurden in  $P_3S_8$ -Ordnung mit 2X2 Maschen pro Brennstabzelle in der x-y-Ebene durchgeführt; der moderierte Kernbereich wurde axial in 48 Maschen eingeteilt, was einer Maschenweite von 2.3 cm

entspricht. Die zellhomogenisierten makroskopischen Wirkungsquerschnitte wurden in der bewährten 18-Gruppen-Struktur in Stabzellberechnungen mit dem Programm RESMOD /BER94/ erstellt.

Die berechneten Multiplikationsfaktoren (MCNP:  $0.99569 \pm 0.00005$ ; PARTISN:  $0.99593$ ) sind in sehr guter Übereinstimmung, unterschätzen jedoch den Wert von  $1.0 \pm 0.0008$  aus dem Experiment etwas; diese Tendenz war bislang bei praktisch allen Rechnungen zu den  $\text{UO}_2$ -Kernen des KRITZ-2-Benchmarks vorhanden.

In Abb. 4-17 werden die mit MCNP und PARTISN berechneten axial integrierten radialen Spaltratenverteilungen entlang der x- und y-Achse des KRITZ-2.13-Kerns mit den gemessenen Werten verglichen (zur besseren Unterscheidung ist die Kurve, die die Verteilung entlang der y-Achse repräsentiert, um 0.1 versetzt). Die Übereinstimmung zwischen Rechnungen und Messwerten ist sehr gut, die Unregelmäßigkeit in den Messkurven scheint unphysikalisch und ist wahrscheinlich auf Messungenauigkeiten zurückzuführen, die höher sind als die in der Beschreibung der Experimente ausgewiesenen Werte von ca. 1 %. Insbesondere wird der Sprung in der Spaltratenverteilung in den am Kernrand liegenden Brennstäben ausgezeichnet wiedergegeben. Zu beachten ist auch die gute Übereinstimmung der mit der Monte-Carlo- und der deterministischen Methode berechneten radialen Spaltratenverteilungen; in der Darstellung von Abb. 4-17 sind diese praktisch nicht zu unterscheiden. Deshalb werden in Abb. 4-18 (oben) die axial integrierten radialen Spaltratenverteilungen aus MCNP und PARTISN über den gesamten Kern verglichen; dargestellt ist der relative Unterschied der PARTISN- von der MCNP-Verteilung. Die Differenzen für alle Stabpositionen sind sehr gering, mit Werten von typischerweise  $< 1$  %; der größte Wert von 1.9 % tritt an einer Ecke des Kerns auf. Die Standardabweichung zwischen der PARTISN- und der MCNP-Verteilung beträgt 0.33 %. An dieser Stelle wird darauf hingewiesen, wie wichtig die Verwendung von  $2 \times 2$  radialen Maschen pro Stabzelle in der deterministischen Transportrechnung ist; mit nur einer Masche sind die Unterschiede zur MCNP-Verteilung am Kernrand deutlich höher, wie aus Abb. 4-18 (unten) ersichtlich ist; die Standardabweichung steigt dann auf 0.80 % an.

Schließlich werden noch in Abb. 4-19 die über radiale Bereiche integrierten axialen Spaltratenverteilungen miteinander verglichen. Dabei ist radial über jeweils  $10 \times 10$  Stabzellen summiert, einmal in einer Ecke des Kerns, und einmal in der Kernmitte. Die Übereinstimmung zwischen PARTISN und MCNP ist sehr gut. Die relativen Abweichungen sind nicht größer als 1.1 %. Es hat sich gezeigt, dass es für eine gute Über-

einstimmung im unteren Kernabschnitt wichtig ist, die axiale Anordnung unterhalb der Brennstoffzone, die eine komplizierte Struktur aufweist, im PARTISN-Modell abschnittsweise (Brennstabendstücke/Wasser, Auflagesäulen/Wasser) nachzubilden, da bereits durch eine kleine Variation der axialen Struktur die Spaltratenverteilung am unteren Kernrand empfindlich beeinflusst wird.

#### **4.3.2 Berechnung einer 2X2-Anordnung mit gemittelten thermohydraulischen Parametern**

Als weiterer Vorbereitungsschritt für MCNP-Berechnungen mit thermohydraulischen Parametern wird eine 2X2-Anordnung aus frischen Uran-Brennelementen des DWR-MOX/ $\text{UO}_2$ -Kerntransientenbenchmarks betrachtet. Dabei handelt es sich im Wesentlichen um die in Abschnitt 4.2.3 beschriebene Anordnungen mit den Unterschieden, dass die Berechnung in 3D-Darstellung mit einer Höhe von 391.2 cm und einem Wasserreflektor am unteren und oberen Rand erfolgt, und dass sich die Brennstofftemperatur und Moderatorichte etwas vom Zustand Nulllast heiß unterscheiden. (Diese Parameter wurden als Mittelwerte der Verteilungen bestimmt, die sich aus einer gekoppelten TORT-TD/ATHLET-Rechnung ergeben, siehe nächster Abschnitt. Daraus ergibt sich eine Brennstofftemperatur von 653.4 K und eine Moderatorichte von 0.7401  $\text{g/cm}^3$ , im Vergleich zu den Werten 560 K und 0.7521  $\text{g/cm}^3$  im Zustand Nulllast heiß.) Die Anordnung ist in ihren Dimensionen in der x-y-Ebene ähnlich zur KRITZ-2:13-Anordnung, in der z-Richtung aber deutlich größer.

Mit obigen Werten für Brennstofftemperatur und Moderatorichte wurde für Vergleichsrechnungen mit PARTISN ein Satz von 18-Gruppen-Wirkungsquerschnitten mit NEWT erzeugt, wie in Abschnitt 4.2.1 beschrieben. Die PARTISN-Rechnungen wurden in  $\text{P}_3\text{S}_8$ -Ordnung durchgeführt, mit 2X2 Maschen pro Stabzelle in der x-y-Ebene. In z-Richtung wurde die Anordnung in 40 Grobmaschen eingeteilt, wobei die jeweils beiden Grobmaschen am oberen und unteren Rand in 10 Feinmaschen unterteilt wurden. Damit ergibt sich für den oberen und unteren Bereich der Brennstabzellen eine Maschenweite von ca. 1 cm, und von ca. 10 cm für den restlichen Bereich. Für den oberen und unteren Wasserreflektor wurde in der Nähe der Brennstabzellen ebenfalls eine Maschenweite von 1 cm gewählt. Diese feine Einteilung wurde zur Verbesserung der Übereinstimmung der deterministischen mit der Monte-Carlo-Lösung am oberen und unteren Rand der Anordnung vorgenommen.

Als unterschiedliche thermohydraulische Kanäle werden die Brennelemente gewählt, wodurch aus Symmetriegründen drei verschiedene Kanäle entstehen, die axial in 40 Abschnitte aufgeteilt werden. Damit erhält man 120 Sätze von thermohydraulischen Parametern, die im vorliegenden Fall natürlich alle identisch sind.

In Abb. 4-20 wird die axiale Abhängigkeit der mit MCNP und PARTISN berechneten Leistungsverteilungen in den drei thermohydraulischen Kanälen verglichen. Kanal 1 bezeichnet das Brennelement im Zentrum der Anordnung, Kanal 3 das Brennelement in der Ecke, und Kanal 2 repräsentiert die beiden aus Symmetriegründen identischen Randbrennelemente. Es ergibt sich ausgezeichnete Übereinstimmung, die relativen Unterschiede sind typischerweise deutlich kleiner als 1 %, mit Maximalwerten von weniger als 2 % am oberen und unteren Kernrand, was trotz der feinen Mascheneinteilung auf den Einfluss der axialen Reflektoren zurückzuführen ist. Die Übereinstimmung der axial integrierten radialen Stableistungen ist von derselben Qualität, die relativen Unterschiede, die in Abb. 4-21 dargestellt sind, überschreiten den Wert von 1 % nur an der Eckposition und zwei zueinander symmetrischen Randpositionen.

#### **4.3.3 Berechnung einer 2X2-Anordnung mit variablen thermohydraulischen Parametern**

Als letzte Anwendung für eine MCNP-Berechnung mit ortsabhängigen thermohydraulischen Parametern wird dieselbe Anordnung wie im vorherigen Abschnitt 4.3.2 betrachtet, wobei jetzt den 120 räumlichen Bereichen, bestehend aus 40 axialen Knoten in drei Brennelementen, tatsächlich unterschiedliche Brennstoffmaterialien, die unterschiedlichen Brennstofftemperaturen entsprechen, und unterschiedliche Moderatorichten zugewiesen werden. Diese Parameter wurden aus einer gekoppelten Rechnung mit dem  $S_N$ -Code TORT-TD und dem Anlagencode ATHLET bestimmt /SEU08a/, /SEU08b/. Für die TORT-TD/ATHLET-Rechnung wurden Wirkungsquerschnitte in 8 Energiegruppen und  $P_1$ -Streuordnung mit dem Programm HELIOS erzeugt. Die axiale Mascheneinteilung in der TORT-TD/ATHLET-Rechnung entspricht den 40 axialen thermohydraulischen Knoten, in der x-y-Ebene wurde mit einer Masche pro Stabzelle gerechnet.

In Abb. 4-22 werden die axialen Profile der mit TORT-TD/ATHLET und MCNP berechneten Leistungsverteilungen in den drei thermohydraulischen Kanälen verglichen. Die Kurven sind in sehr guter Übereinstimmung, insbesondere die durch die Ortsabhängigkeit der thermohydraulischen Parameter entstandene Asymmetrie bezüglich der axia-

len Mitte. Die Unterschiede am oberen und unteren Kernrand sind vermutlich auf die relativ große axiale Maschenweite in diesen Bereichen zurückzuführen. In Abb. 4-23 sind die relativen Unterschiede der axial integrierten Stableistungsverteilungen aus der TORT-TD/ATHLET- und der MCNP-Rechnung dargestellt. Insbesondere am Rand der Anordnung ergeben sich für einige Stabpositionen deutliche Unterschiede. Diese ließen sich vermutlich durch eine Einteilung von 2X2 Maschen pro Stabzelle in der x-y-Ebene verringern. Ob es noch weitere Ursachen für die Unterschiede gibt, ist noch zu klären.

#### **4.4 Einfluss nuklearer Daten auf Kernberechnungen**

In der GRS wurde bisher für Routinerechnungen mit MCNP eine auf JEF-2.2-Daten basierende Punktdatenbibliothek verwendet, die in einem gemeinsamen Projekt vom IKE Stuttgart erzeugt worden ist, und die seither durch Berechnung zahlreicher Benchmark-Anordnungen umfassend validiert wurde /BER01/, /ZWE99/. Seit einiger Zeit ist die Nachfolgebibliothek JEFF-3.1 verfügbar; die Verwendung dieser Version wird von der JEFF-Gruppe empfohlen. Bei der NEA-Datenbank ist auch eine im ACE-Format prozessierte JEFF-3.1-Punktdatenbibliothek zur Verwendung mit MCNP erhältlich. Durch Nachrechnung von kritischen Anordnungen und Ganzkern-Benchmarks soll der Einfluss der nuklearen Daten ermittelt und überprüft werden, ob in Zukunft JEFF-3.1 als Standarddatenbibliothek verwendet werden soll.

##### **4.4.1 Nachrechnung der KRITZ-2-Benchmarks**

Die in Abschnitt 2.1 beschriebenen kritischen Anordnungen KRITZ-2 wurden mit MCNP-5 und JEFF-3.1-Daten berechnet; frühere MCNP-4C-Rechnungen mit JEF-2.2-Daten /BER02/ wurden mit MCNP-5 und einer höheren Anzahl von Neutronenschicksalen wiederholt. In Abb. 4-24 sind die berechneten Multiplikationsfaktoren dargestellt. Die Multiplikationsfaktoren in den Experimenten sind 1.0 für alle Anordnungen. Die Messungenauigkeit ist in der Dokumentation der Experimente als  $\pm 80$  pcm angegeben; die eingezeichneten Fehlerbalken entsprechen dem doppelten Wert. Mit den JEF-2.2-Daten wurden die Multiplikationsfaktoren für alle Anordnungen deutlich unterschätzt. Für die Uran-Anordnungen ergibt sich, insbesondere im kalten Zustand, eine Verbesserung bei Verwendung der JEFF-3.1-Daten. Für die MOX-Anordnungen führt die

Verwendung von JEFF-3.1 zu einer deutlichen Überschätzung der Multiplikationsfaktoren.

In Abb. 4-25 sind die Abweichungen zwischen mit JEF-2.2-Daten berechneten und gemessenen Werten der Spaltraten an bestimmten radialen Positionen (siehe Tabelle 2-2) dargestellt. Die eingezeichneten Fehlerbalken entsprechen den statistischen  $2\sigma$ -Unsicherheiten der Monte-Carlo-Werte; die abgeschätzte Messungenauigkeit ist in der Dokumentation der Experimente als ca.  $\pm 1\%$  angegeben, was allerdings etwas optimistisch erscheint (siehe auch Abb. 4-17), so dass die Lage der meisten C/E-Werte innerhalb eines Bandes von  $\pm 2\%$  als zufriedenstellend angesehen werden kann. In Abb. 4-26 sind die Unterschiede in der radialen Spaltratenverteilung für die Anordnung 2:13 heiß zwischen MCNP-Lösungen mit JEFF-3.1- und JEF-2.2-Daten dargestellt. Die Unterschiede sind sehr gering und im Wesentlichen statistischer Natur; die Standardabweichung zwischen der JEFF-3.1- und JEF-2.2-Verteilung beträgt  $0.34\%$ . Damit wird klar, dass hinsichtlich der Spaltratenverteilung die Lösungen mit beiden nuklearen Datenbibliotheken gleichwertig sind, da die Abweichungen untereinander erheblich geringer sind als die Unterschiede zu gemessenen Werten (siehe Abb. 4-25).

#### **4.4.2 Nachrechnung der VENUS-7-Benchmarks**

Die in Abschnitt 2.2 beschriebenen kritischen Anordnungen VENUS-7 wurden im Rahmen von Vergleichsrechnungen innerhalb einer OECD/NEA-Arbeitsgruppe mit MCNP-5 und JEF-2.2- sowie JEFF-3.1-Daten berechnet. In Abb. 4-27 sind die berechneten Multiplikationsfaktoren für alle VENUS-7-Anordnungen, bei denen die kritischen Zustände aus Messungen bekannt sind, dargestellt. Für die Anordnung 7/0 sind nur die gemessenen Reaktivitätsdifferenzen bei Austausch von jeweils 16 Brennstäben in der Kernmitte dokumentiert; der Wert des Multiplikationsfaktors wurde deshalb als 1.0 angenommen. Die Anordnung 7/1 ist leicht überkritisch und die Anordnung 7/3 leicht unterkritisch. Messunsicherheiten in den Multiplikationsfaktoren sind nicht dokumentiert. Mit den JEF-2.2-Daten wurden die Multiplikationsfaktoren für alle Anordnungen deutlich unterschätzt. Bei Verwendung der JEFF-3.1-Daten ergibt sich eine leichte Verbesserung. Dies ist verträglich mit den Beobachtungen für die KRITZ-2-Benchmarks, die von den Abmessungen her mit den VENUS-7-Kernen vergleichbar sind. Bemerkenswert ist, dass die Unterschiede in den nuklearen Daten für Plutonium, die bei den KRITZ-2-MOX-Anordnungen zu einem deutlichen Anstieg in den errechneten Multiplikationsfaktoren führen, bei VENUS-7 eine geringe Rolle spielen. Dies kann darauf zu-

rückzuführen sein, dass der MOX-Brennstoff in den VENUS-7-Kernen sich aus mit 3 % angereichertem Uran und nur 1 % spaltbarem Plutonium zusammensetzt, was spektral zu reinem Uran wesentlich ähnlicher ist als üblicher MOX-Brennstoff mit abgereichertem Uran, wie er auch für die KRITZ-2:19-Messungen verwendet wurde.

In Abb. 4-28 werden die in der MOX-Zone des VENUS7/1-Kerns in zwei Richtungen gemessenen und mit MCNP und JEF-2.2-Daten berechneten radialen Spaltratenverteilungen gezeigt. Die Fehlerbalken stellen die Messunsicherheiten dar; die statistischen Unsicherheiten der Monte-Carlo-Werte sind im Vergleich dazu vernachlässigbar klein. Die Übereinstimmung zwischen berechneten und gemessenen Werten ist zufriedenstellend. Leider ist der gemessene Bereich auf die MOX-Zone beschränkt; beim UO<sub>2</sub>-MOX-Mischkern VENUS-2 hatten sich eine deutliche radiale Abhängigkeit des C/E-Verhältnisses der Spaltratenverteilung ergeben /ZWE08/. In Abb. 4-29 sind die Unterschiede in der radialen Spaltratenverteilung für die Anordnung 7/1 zwischen MCNP-Lösungen mit JEFF-3.1- und JEF-2.2-Daten dargestellt. Die Unterschiede sind noch geringer als im Fall der KRITZ-2:13-Berechnungen; die Standardabweichung zwischen der JEFF-3.1- und JEF-2.2-Verteilung beträgt 0.19 %. Dies kommt daher, dass aus Symmetriegründen bei den VENUS-7-Anordnungen eine ¼-Kern-Darstellung ausreichend ist, wobei bei vergleichbarer Anzahl von Brennstäben und mit derselben Anzahl von Neutronenschicksalen eine wesentlich geringere statistische Unsicherheit erreicht werden kann. Damit ergibt sich eine ähnliche Situation wie bei KRITZ-2: hinsichtlich der Spaltratenverteilung sind die Lösungen mit beiden nuklearen Datenbibliotheken gleichwertig.

#### **4.4.3 Berechnung des DWR-MOX/UO<sub>2</sub>- und des VVER-1000-Ganzkernbenchmarks**

Zur Untersuchung des Einflusses nuklearer Daten auf die Ergebnisse von Kritikalitätsrechnungen für große Leistungsreaktoren wurden die beiden in Abschnitt 2.3 und 2.4 beschriebenen Ganzkernanordnungen mit MCNP-5 und JEF-2.2- sowie JEFF-3.1-Daten berechnet. Die Berechnungen mit JEF-2.2-Daten für den DWR-MOX/UO<sub>2</sub>-Benchmark wurden bereits in Kapitel 3 beschrieben. In Tabelle 4-3 werden die mit beiden Datenbibliotheken berechneten Multiplikationsfaktoren für den DWR-MOX/UO<sub>2</sub>-Benchmark und fünf der sechs definierten Ganzkernzustände verglichen. Während sich die Werte für die WWER-Zustände nur unwesentlich unterscheiden (0 – 0.0014), liegen für den DWR-Kern die JEFF-3.1-Werte deutlich unterhalb der JEF-2.2-Werte

(um ca. 0.0035). Zusammen mit den KRITZ-2- und VENUS-7-Benchmarks beobachtet man also Reaktivitätsänderungen beim Übergang von JEF-2.2 zu JEFF-3.1 für leichtwassermoderierte Stabgitter zwischen ca. +500 pcm für reine MOX-Gitter und ca. -350 pcm für gemischte UO<sub>2</sub>/MOX-Systeme. Dabei hängen die Größe und das Vorzeichen der Differenzen offenbar unter anderem auch von der Temperatur und der Größe der Anordnung ab. Dies muss noch genauer systematisch untersucht werden.

Deutlichere Änderungen ergeben sich für die berechneten Brennelement-Leistungsverteilungen. Für den unkontrollierten Nulllast-heiß-Zustand des DWR-Benchmarks und den unkontrollierten Vollast-Zustand des WWER-Benchmarks ergibt sich eine Schiefelage des Verhältnisses der berechneten Leistungen von der Kernmitte zum Kernrand mit Maximalwerten von ca. 5 % Unterschied, Abb. 4-30 und Abb. 4-31. Dabei ist das Verhältnis für den DWR- und den WWER-Kern umgekehrt. Geht man zum kontrollierten WWER-Kern über, erhält man noch wesentlich drastischere Diskrepanzen, mit einer relativen Abweichung von bis zu 10 % in der Kernmitte, siehe Abb. 4-32.

Als Hauptursache für die Unterschiede wurde U-235 identifiziert. Dies wurde durch Austausch des U-235-Querschnittssatzes in den JEFF-3.1-Rechnungen durch die JEF-2.2-Daten überprüft; dadurch verringern sich die Unterschiede deutlich /LAN08/. Beim Übergang von JEF-2.2 zu JEFF-3.1 wurde in den evaluierten Kerndaten das U-235-Resonanzintegral um ca. 6 % angehoben. Damit wird das unterschiedliche Vorzeichen in der Schiefelage des Leistungsverhältnisses zwischen DWR- und WWER-Kernberechnungen zumindest qualitativ plausibel: Beide Kerne besitzen eine ungleichmäßige U-235-Verteilung, wobei beim DWR-Kern das U-235 eher zur Kernmitte orientiert ist, und beim WWER-Kern deutlich zum Kernrand. Im kontrollierten Zustand des WWER-Kerns werden fast alle UO<sub>2</sub>-Brennelemente, außer denen am Kernrand, abgeschaltet, so dass U-235 effektiv fast nur noch am Kernrand wirksam ist. Zusätzlich ergeben sich noch Unterschiede durch geänderte Plutonium-Daten und geänderte U-238-Daten, die sich insbesondere am Kernrand auswirken, da U-238 praktisch homogen über den Kern verteilt ist. Damit ist es schwierig, die Einzeleffekte klar zu separieren. Eine Überprüfung an Messdaten erscheint zum jetzigen Zeitpunkt nicht möglich, so dass man gegenwärtig nicht in der Lage ist zu entscheiden, welcher nukleare Datensatz zuverlässigere Ergebnisse liefert. Es erscheint daher zu früh, in der GRS für Standardberechnungen nur noch JEFF-3.1-Daten einzusetzen. Zur Klärung sollten möglichst viele eigene Vergleichsrechnungen durchgeführt, sowie die weitere Entwicklung bei den internationalen Datenevaluierungsgruppen beobachtet werden.

## 4.5 Zusammenfassung und Bewertung

Dieser Abschnitt dokumentiert stationäre Kernberechnungen, die im Rahmen des BMWI-Vorhabens RS 1160 mit dem Monte-Carlo-Programm MCNP und deterministischen Neutronentransportprogrammen durchgeführt wurden. Die wesentlichen Arbeitspunkte umfassen die Erprobung eines geschlossenen Rechenweges zur Erzeugung von Weniggruppensdaten für deterministische Transportrechnungen mit dem Programmsystem SCALE-5.1 und den Einsatz der so erzeugten Daten für Anwendungsfälle, die Durchführung von Monte-Carlo-Berechnungen mit örtlich veränderlichen thermohydraulischen Parametern, und die Untersuchung des Einflusses nuklearer Daten auf die Ergebnisse von Kernberechnungen beim Übergang von der bisher für Routineberechnungen eingesetzten JEF-2.2 Bibliothek zur aktuellen Evaluierung JEFF-3.1.

Mit dem 2D-Transportprogramm NEWT aus dem SCALE-5.1-Programmsystem wurden aus der auf ENDF/B-V-Daten basierenden 44-Gruppen-Bibliothek, die ebenfalls Bestandteil von SCALE-5.1 ist, zellhomogenisierte Daten in 18 Energiegruppen, hauptsächlich zur Verwendung mit dem  $S_N$ -Code DANTSYS/ PARTISN für Kernberechnungen, erzeugt. Geometrie und Nuklidichten basieren auf den Parametern des DWR-MOX/ $UO_2$ -Kerntransientenbenchmarks. Alle Berechnungsschritte wurden durch Vergleich mit MCNP-Referenzlösungen überprüft. Zur Erzeugung von Absorber-Gruppenkonstanten wurde ein Verfahren verwendet, bei dem die effektive Absorberkonzentration reduziert wird. Mit diesen zellhomogenisierten Wirkungsquerschnitten wurden Ergebnisse für Multiplikationsfaktoren und Leistungsverteilungen von Brennelementen,  $2 \times 2$ - und  $1/4$ -Kern-Anordnungen erzielt, die in sehr guter Übereinstimmung mit den MCNP-Referenzlösungen sind. Die Übereinstimmung der Brennelement-Leistungsverteilungen für den unkontrollierten Kern ist vergleichbar mit der, die in einigen nodalen Verfahren erzielt wurde. Für den kontrollierten Kern ist die  $S_N$ -Lösung unter Verwendung der 18-Gruppen-Daten mit korrigierten Absorber-Wirkungsquerschnitten nodalen Lösungen deutlich überlegen. Für Ende 2008 ist die Freigabe von SCALE in der Version 6 angekündigt. Dann ist zu überprüfen, welche Verbesserungen sich bei den Rechenmethoden und Kerndaten ergeben haben, und ob dies zu einer weiteren Verbesserung bei der Erzeugung von Weniggruppensdaten führt.

Zur Berechnung von Kernanordnungen mit variablen thermohydraulischen Parametern mit der Monte-Carlo-Methode wurden MCNP-Eingabedatensätze erzeugt, in denen unterschiedliche Brennstofftemperaturen und Moderatorichten in axialen Abschnitten thermohydraulischer Kanäle, deren Größe in der x-y-Ebene als Stabzell- oder Brenn-

elementfläche gewählt wurde, zugelassen sind. Die Ergebnisse für die Stableistungsverteilungen der MCNP-Berechnungen wurden für die heiße 2:13-Anordnung der KRITZ-2-Experimente mit Messwerten und Ergebnissen aus einer PARTISN-Rechnung verglichen, wobei sehr gute Übereinstimmung erzielt wurde. Ebenfalls sehr gut ist die Übereinstimmung zwischen MCNP und PARTISN für eine 2X2-Anordnung des DWR-MOX/ $\text{UO}_2$ -Kerntransientenbenchmarks mit mittleren thermohydraulischen Parametern. Beim Vergleich zwischen MCNP und TORT-TD/ATHLET mit axial variablen thermohydraulischen Parametern für jedes Brennelement zeigen sich Unterschiede in der radialen Stableistungsverteilung, die am Rand der Anordnung an einigen Positionen Werte von deutlich über 5 % erreichen, und deren Ursprung noch aufgeklärt werden sollte. Insgesamt stellt sich heraus, dass MCNP-Berechnungen für Kernanordnungen mittlerer Größe mit stabzellweise und axial variablen thermohydraulischen Parametern mit den verfügbaren Rechnerressourcen durchführbar sind und zuverlässige Ergebnisse liefern, die als Referenzwerte für Rechnungen mit anderen Methoden dienen können.

Zur Bewertung des Einflusses nuklearer Daten auf Kernberechnungen wurden MCNP-Berechnungen mit nuklearen Punktdaten, die auf den beiden JEF-Evaluierungen JEF-2.2 und JEFF-3.1 basieren, durchgeführt. Es wurden berechnete Multiplikationsfaktoren und Spaltraten- bzw. Leistungsverteilungen für kritische Anordnungen und Reaktorkerne untereinander und wenn möglich mit Messungen verglichen. Bei den beiden Serien von kritischen Experimenten KRITZ-2 und VENUS-7 ergibt sich hinsichtlich des Multiplikationsfaktors eine leichte Verbesserung mit den JEFF-3.1-Daten gegenüber JEF-2.2. Bezüglich radialer Spaltratenverteilungen liefern die Berechnungen mit beiden Datenbibliotheken praktisch gleichwertige Ergebnisse. Bei Ganzkernberechnungen für  $\text{UO}_2$ /MOX-Mischkerne ist die Situation deutlich anders. Während die mit JEF-2.2 und JEFF-3.1 berechneten Multiplikationsfaktoren noch in akzeptabler Übereinstimmung sind, ergeben sich für die brennelementweisen Leistungsverteilungen unerwartet deutliche Unterschiede, die zu einem großen Teil auf die verschiedenen U-235-Daten in den beiden Evaluierungen zurückzuführen sind. Diese Unterschiede in den Leistungsverteilungen können je nach Kernbeladung 5 % oder mehr betragen. Gegenwärtig ist es nicht möglich zu bestimmen, mit welcher Datenbibliothek die Ergebnisse besser mit tatsächlichen Reaktorbetriebsdaten übereinstimmen. Der Vergleich von berechneten und gemessenen Daten für kritische Anordnungen kann bestenfalls Indizien liefern, welche Basisdaten für Ganzkernberechnungen besser geeignet sind. Zur endgültigen Klärung sollte der Vergleich mit Messdaten aus dem Reaktorbetrieb ange-

strebt werden. Vorerst erscheint es zu früh, in der GRS für Standardberechnungen nur noch JEFF-3.1-Daten einzusetzen. Die weitere Entwicklung bei den internationalen Datenevaluierungsgruppen, insbesondere JEFF und ENDF/B, sollte aufmerksam beobachtet werden.

## 5 Der Einsatz von zeitabhängiger Neutronentransporttheorie für Hochtemperaturreaktoren vom Kugelhaufentyp

### 5.1 Einleitung

In gekoppelten Transienten- und Störfallanalysen wird bis heute praktisch ausschließlich von Rechenverfahren Gebrauch gemacht, die zur Beschreibung der Neutronenflussverteilung im Reaktorkern die Diffusionsapproximation in wenigen (häufig nur zwei) Energiegruppen verwenden. Das in diesem Forschungsvorhaben weiterentwickelte Rechenprogramm TORT-TD /SEU04a/, /SEU08b/ für dreidimensionale Probleme und dessen Vorläufer DORT-TD /PAU03/ für zwei Raumdimensionen gehören zu den wenigen verfügbaren Neutronentransportcodes, die in der Lage sind, die zeitabhängige Neutronentransportgleichung mit thermohydraulischen Rückwirkungseffekten für realistische Reaktoranwendungen zu lösen. Dabei liegt der Schwerpunkt der Entwicklungen für den Code TORT-TD in erster Linie auf der Bereitstellung geeigneter Rechenverfahren für fortgeschrittene LWR-Analysen, während sich DORT-TD vor allem für zylindersymmetrische Systeme, wie z. B. den Forschungsreaktor FRM-II bewährt hat /PAU03a/. Kapitel 3 hat sich ausführlich mit der Anwendung von TORT-TD auf Reaktivitätstransienten von Druckwasserreaktoren (insbesondere dem Stabauswurf) beschäftigt, wobei gezeigt werden konnte, dass hochauflösende stabweise Multigruppen-Transportrechnungen (sog. *Pin-by-Pin*-Analysen), wenn auch mit erheblichem numerischen Aufwand, bereits mit den heute verfügbaren Rechenkapazitäten möglich sind. Darüber hinaus konnte durch die Kopplung von TORT-TD mit ATHLET ein gekoppeltes Programmsystem bereitgestellt werden, das aufgrund der fortgeschrittenen Rechenmethodik Referenzcharakter besitzt /SEU08a/, /SEU08b/.

Im vorliegenden Kapitel werden die Arbeiten geschildert, die gemeinsam von GRS und Pennsylvania State University (Abk.: PSU) zur Thematik gekoppelter zeitabhängiger Neutronentransportrechnungen durchgeführt wurden. Im Rahmen eines Promotionsprojektes /TYO07/ an der PSU wurde dort der GRS-Transportcode DORT-TD mit dem Thermohydraulikcode THERMIX-DIREKT /STR99/ für gasgekühlte Hochtemperaturreaktoren (Abk.: HTR) vom Kugelhaufentyp gekoppelt. Damit steht erstmals ein Codesystem zur Verfügung, das Transienten dieses Reaktortyps auch mit Hilfe von Neutronentransporttheorie simulieren kann; alle für HTR verfügbaren Codesysteme verwendeten bislang ausschließlich Weniggruppen-Diffusionsmethoden. Insgesamt ist festzu-

stellen, dass der Entwicklungsstand neutronenphysikalischer und thermohydraulischer Programmsysteme für HTR weit hinter dem Entwicklungsstand für Leichtwasserreaktoren zurückgeblieben ist: aktuell verfügbare Codesysteme für HTR vom Kugelhaufentyp stammen vorwiegend aus den 70er und 80er Jahren und wurden in Deutschland z. B. für den AVR in Jülich oder den THTR-300 in Hamm-Uentrop entwickelt. Diese Programmsysteme erfahren derzeit wieder verstärktes Interesse, da Südafrika und China aktuell in die Weiterentwicklung von Kugelhaufenreaktoren investieren. Es sind daher Anstrengungen im Gange, diese traditionellen Codesysteme durch moderne Rechenverfahren aufzuwerten. So hat die südafrikanische Firma PBMR (Pebble Bed Modular Reactor (Pty) Ltd.) die am Forschungszentrum Jülich (Abk.: FZJ) entstandenen Codesysteme VSOP /TEU80/ und TINTE /REI05a/ erworben und für die Entwicklung des *Pebble Bed Modular Reactors* PBMR400 /PBM08/ weiterentwickelt. Methodische Verbesserungen sind insbesondere deswegen notwendig, da es sich beim PBMR400 um einen Reaktorprototypen handelt, für den praktisch keine experimentellen Daten vorliegen und der gegenüber AVR oder THTR-300 über ein erheblich fortgeschrittenes Design verfügt.

Ziel der an der PSU durchgeführten Arbeiten war es, die Gültigkeit der Diffusionsnäherung für HTR vom Kugelhaufentyp zu hinterfragen und durch die Nachrechnung mit Neutronentransportprogrammen die Fehler zu quantifizieren, die mit dieser Approximation einhergehen. Da sich dieser HTR-Typ in guter Näherung in zweidimensionaler zylindersymmetrischer Geometrie darstellen lässt, erwies sich im Rahmen einer an der PSU durchgeführten Machbarkeitsstudie DORT-TD als geeigneter Code für diese vergleichenden Untersuchungen. In diesem Kapitel werden daher zunächst die wesentlichen Eigenschaften von DORT-TD kurz umrissen und der Validierungsstatus dieses Codes kurz kommentiert. Im Anschluss daran werden zunächst Ergebnisse stationärer Kernberechnungen ohne thermohydraulische Rückwirkungen mit DORT-TD vorgestellt und mit den Ergebnissen von Diffusionsrechnungen verglichen. Im folgenden Schritt wird die Kopplung des Transportcodes DORT-TD mit dem Thermohydraulik-Code THERMIX-DIREKT beschrieben und einige transiente Studien für einen HTR-Benchmark (den PBMR268-Benchmark, /TYO04/) gezeigt. Schließlich werden vorläufige Ergebnisse zum derzeit stattfindenden OECD/NEA PBMR400 Transient Benchmark vorgestellt, an dem GRS und PSU gemeinsam mit dem Codesystem DORT-TD/THERMIX teilnehmen. Zum Zeitpunkt der Verfassung des vorliegenden Berichts war lediglich die stationäre Phase dieses Benchmarks abgeschlossen, transiente Ergebnisse liegen daher in diesem Bericht noch nicht vor.

## 5.2 Eigenschaften des Codes DORT-TD

Ähnlich wie für TORT-TD liegt auch dem Code DORT-TD ein stationärer Code (DORT im Fall von DORT-TD, TORT im Fall von TORT-TD) zugrunde. Die zeitabhängige Erweiterung von TORT-TD wurde im Vorgängervorhaben RS1128 und dem aktuellen Vorhaben an der GRS, der transiente Ausbau von DORT-TD in einem Promotionsprojekt an der TU München (BMW 1501214, siehe /PAU02/) durchgeführt. Einer der wesentlichen Vorteile der Codes DORT/TORT ist ihre Flexibilität: zwar sind beide Codes auf reguläre Geometrien beschränkt, allerdings kann die Anzahl der Energiegruppen, die Quadraturordnung sowie die Ordnung der Legendre-Entwicklung der Streuquellen frei gewählt werden. Darüber hinaus verfügen beide Codes über effiziente Beschleunigungsmechanismen, z. B. das sog. *Coarse Mesh Rebalancing* (Abk.: CMR) und die Spaltquellenextrapolation.

Die zeitabhängige Erweiterung von DORT-TD erforderte wesentliche Eingriffe in den Code. Grundsätzlich kann die Lösung des transienten Neutronentransportproblems auf eine Serie von stationären *Fixed-Source*-Problemen zurückgeführt werden, wenn die Zeitvariable implizit diskretisiert wird. In DORT-TD wurde (genauso wie in TORT-TD) ein voll implizites Zeitdiskretisierungsschema gewählt. Dieses hat zwar den grundsätzlichen Nachteil, dass es nur bis zur Ordnung  $O(\Delta t)$  genau ist, wodurch zunächst der maximale zulässige Zeitschritt beschränkt ist. Andererseits verfügt es über den großen Vorteil unbedingter Stabilität und ist darüber hinaus vergleichsweise einfach zu implementieren. Tatsächlich zeigt sich, dass der maximal mögliche Zeitschritt im Allgemeinen nicht durch den numerischen Approximationsfehler, sondern durch das Konvergenzverhalten des Codes bei großen Zeitschritten diktiert wird.

Die Implementierung der zusätzlichen, aus der Zeitdiskretisierung resultierenden Terme in der Neutronentransportgleichung sowie der Vorläufergleichungen wurde in DORT-TD in derselben Weise gelöst wie für den Code TORT-TD (siehe Abschnitt 3.1) und wird daher hier nicht wiederholt. Daneben mussten aber folgende für die Transientenberechnungen von HTR unerlässlichen Eigenschaften in DORT-TD nachgerüstet werden:

- Erstellung einer Schnittstelle für die Kopplung mit Thermohydraulikcodes: im Rahmen der Entwicklung von DORT-TD wurde eine solche Schnittstelle bereits für den ATHLET-Code zur Verfügung gestellt. In den Arbeiten zum HTR konn-

ten wesentliche Teile dieser Schnittstelle für die Anbindung an THERMIX-DIREKT verwendet werden.

- Bereitstellung mehrdimensionaler Wirkungsquerschnittsinterpolation: Für jeden Rechenknoten müssen die Wirkungsquerschnitte in Transienten für jeden Zeitschritt aus den lokalen thermohydraulischen Größen wie Brennstoff- oder Moderatortemperatur errechnet werden. In DORT-TD wurde neben der bereits vorhandenen dreidimensionalen B-Spline-Interpolation ein zusätzlicher fünfdimensionaler linearer Interpolationsmodul nachgerüstet.
- Berechnung des sog. thermischen und schnellen *Bucklings*: in HTR-Analysen stellt sich insbesondere für die Erzeugung von Weniggruppen-Querschnitten eine Abhängigkeit der Querschnitte von den Leckagebedingungen der Spektralrechnung ein, die aufgrund der großen mittleren freien Weglängen der Neutronen im HTR deutlich ausgeprägter ist als in LWR-Analysen. Um diese Leckageeffekte bei der Querschnittsberechnung zu berücksichtigen, werden die Querschnitte zusätzlich zu den thermohydraulischen Größen auch über die schnelle und thermische Leckage parametrisiert.
- Xenon-Gleichgewichtsoption und Xenodynamik: um mit DORT-TD auch langsame Xenontransienten berechnen zu können, wurden die entsprechenden Gleichungen für Xenongleichgewicht und Xenodynamik in DORT-TD implementiert. Dabei wird für jede räumliche Masche die Xenonkonzentration individuell errechnet. Sowohl für HTR als auch LWR ist die lokale Xenonkonzentration außerdem ein zusätzlicher Parameter, über den die Wirkungsquerschnitte parametrisiert werden.
- Der HTR verfügt durch seine hohe thermische Trägheit, d.h. aufgrund der hohen Wärmekapazität der Kugelhaufenschüttung, über ein erhebliches Maß an inhärenter Sicherheit, die ihn insbesondere robust machen gegen Kühlmittelverlust- oder *Loss-of-Flow*-Störfälle. Zur korrekten Simulation solcher Störfälle ist eine genaue Kenntnis der Nachwärmeentwicklung im Reaktorkern notwendig. Die zugehörigen Gleichungen nach DIN25485-Standard wurden in DORT-TD implementiert.
- Schließlich werden moderne HTR-Konzepte wie der PBMR400 durch im Außenreflektor angeordnete Steuerstäbe geregelt und ggf. abgeschaltet. Diese

Steuerstäbe können in einer zylindersymmetrischen Darstellung des Reaktorkerns nur azimuthal homogenisiert als sog. „grauer Vorhang“ (*Grey Curtain*) wiedergegeben werden. In DORT-TD wurde ein Algorithmus zur quasi-kontinuierlichen, vertikalen Bewegung dieses *Grey Curtain* eingebaut, womit ein simultanes Verfahren aller Steuerstäbe simuliert werden kann; asymmetrisches Steuerstabverfahren oder der Auswurf einzelner Stäbe kann natürlich auf diese Art und Weise nicht wiedergegeben werden. Dazu wäre ein 3D-Rechenmodell, also z. B. TORT-TD, erforderlich.

Im Rahmen der Entwicklung wurde DORT-TD um ein zweidimensionales Multigruppen-Diffusionsmodul erweitert, das die Diffusionsgleichungen mit einem effizienten Präkonditionierten Konjugierte-Gradienten-Algorithmus löst (unter Verwendung der sog. Unvollständigen Cholesky-Zerlegung ICCG, *Incomplete Cholesky Conjugate Gradient*). Der wesentliche Vorteil dieses zusätzlichen Moduls ist es, dass Vergleiche zwischen Diffusion und Transport innerhalb desselben Codesystems unter Verwendung der identischen Wirkungsquerschnittsbasis durchgeführt werden können. Dadurch können potentielle Unterschiede in der Wirkungsquerschnittserzeugung von Unsicherheiten der Rechenmethoden separiert werden. Darüber hinaus benötigt das Diffusionsmodul im Vergleich zum Transportmodul mindestens eine Größenordnung weniger Rechenzeit (bei identischer Modellnodalisierung), so dass es sich insbesondere für schnelle Vorausrechnungen und Parameterstudien eignet, sofern der Gültigkeitsbereich der Diffusionsapproximation nicht verlassen wird.

Die Implementierung der kinetischen Gleichungen wurde mit maximaler Flexibilität in DORT-TD erweitert. So war es ursprünglich in DORT-TD nicht vorgesehen gewesen, die Neutronengeschwindigkeiten und die Anteile der verzögerten Neutronen für jede individuelle Rechenmasche vorgeben zu können, sondern es wurden kerngemittelte Größen angesetzt. Da diese Größen allerdings stark abbrandabhängig sind, war eine Berücksichtigung räumlich variierender Neutronengeschwindigkeiten für jede Materialkomposition bzw. verzögerter Neutronenanteile für den HTR notwendig.

Schließlich kann der adjungierte Modus von DORT-TD dazu verwendet werden, mit DORT-TD die punktkinetischen Parameter „effektiver Anteil verzögerter Neutronen“  $\beta_{\text{eff}}$  und „Lebensdauer der prompten Neutronen“  $\Lambda$  zu erzeugen. Dabei wird die adjungierte Lösung für die sog. *Importance*-Wichtung verwendet, die generell als bestmögliches Wichtungsverfahren zur Erstellung dieser Parameter gilt /PAU03/.

### 5.3 Validierung des Codes DORT-TD

Experimente zur Validierung zeitabhängiger Neutronentransportcodes für Reaktorwendungen sind in der Literatur praktisch nicht vorhanden. Umso wichtiger ist die Validierung solcher Codes in sog. *Code-to-Code-Comparisons*, bei denen die Ergebnisse unterschiedlicher Rechencodes für ein wohldefiniertes Benchmarkproblem miteinander verglichen werden. Für die Validierung von DORT-TD wurden dabei insbesondere drei Benchmarks herangezogen /ANL85/:

- Der TWIGL-Benchmark, ein 2D-LWR-Benchmark mit gegebenen Wirkungsquerschnitten und einer zeitlich vorgeschriebenen Änderung des thermischen Absorptionsquerschnitts. Simuliert werden für eine 2x2-Brennelementanordnung eine sprunghafte Reaktivitätsänderung sowie eine Reaktivitätsrampe. Dieser Benchmark war ursprünglich vorgesehen, nodale Diffusionscodes zu verifizieren und dient damit in erster Linie der Überprüfung des Diffusionsmoduls von DORT-TD. Tatsächlich sind aber die Resultate von Neutronentransportrechnungen den Diffusionsergebnissen aber sehr ähnlich (siehe Abb. 5-1).
- Im TIMEX/TDA-Benchmark wird ein schnelles 1D-System in *Slab*-Geometrie untersucht. Simuliert werden eine verzögert überkritische und eine prompt überkritische Leistungsexkursion. Zum Vergleich stehen Referenzdaten der Rechenprogramme TIMEX und TDA (*Time-Dependent ANISM*) zur Verfügung (siehe Abb. 5-2 und Abb. 5-3).
- Der *Dodds*-2D-Benchmark: In diesem Benchmark wird eine verzögert kritische Reaktivitätstransiente eines Schwerwasserreaktors untersucht. Auch hier sind die Wirkungsquerschnitte und die zeitliche Änderung des thermischen Absorptionsquerschnitts einer bestimmten Materialzone (zur Simulation eines Steuerstabauswurfs) vorgegeben. Die Modellgeometrie ist zylindersymmetrisch und eignet sich daher ausgezeichnet zur Simulation mit DORT-TD. Die Ergebnisse von Neutronendiffusion und Neutronentransport sind praktisch identisch und stimmen gut mit den mit dem Rechencode TRANZIT erzeugten Lösungen überein (siehe Abb. 5-4).

In Abb. 5-1 bis Abb. 5-4 werden die von DORT-TD berechneten integralen Leistungsentwicklungen dieser drei Systeme gezeigt. Zum Vergleich sind in jedem der Graphen

die Referenzergebnisse für einige diskrete Punkte ausgewiesen. Generell ist festzuhalten, dass DORT-TD die Referenzergebnisse sehr gut reproduziert und die Unterschiede zwischen Diffusions- und Transporttheorie für den TWIGL-Benchmark sehr klein sind und für den *Dodds*-Benchmark praktisch verschwinden.

#### **5.4 Stationäre Untersuchungen zum Modularen Hochtemperaturreaktor (PBMR)**

Um die Eignung von DORT-TD für HTR vom Kugelhaufentyp zu untersuchen, wurde in einem ersten Schritt der modulare Kugelhaufenreaktor PBMR268 als Prototyp ausgewählt. Die Daten für den Reaktor sind einem Benchmarkvorschlag der PSU entnommen worden /TYO04/. In Abb. 5-5 ist der Aufbau des Reaktors schematisch dargestellt. Verschiedene Vereinfachungen wurden in der Benchmark-Spezifikation eingeführt, z. B. eine Ebnung des Kugelhaufens an der Oberkante der Kugelschüttung sowie eine Abflachung des konischen Kugelabzugschachtes. Durch diese Maßnahmen und die Verschmierung der Steuerstäbe über den Außenreflektor wird das Problem auf zwei Dimensionen (Zylindersymmetrie) reduziert. Die Wirkungsquerschnitte wurden für eine typische Abbrand-Gleichgewichtsverteilung mit dem am Paul-Scherrer-Institut (Abk.: PSI) entwickelten Spektralcode MICROX-2 /MAT97/ von der PSU erzeugt. Es wurden unterschiedliche Diskretisierungsstudien zu Aspekten wie optimaler Energiegruppenstruktur, zu wählender Quadraturordnung und räumlicher Mascheneinteilung durchgeführt /TYO05/. Im Rahmen des vorliegenden Berichts sollen aber insbesondere die Unterschiede zwischen Diffusions- und Transportergebnissen diskutiert werden.

Für den PBMR268-Testfall wurden Wirkungsquerschnitte in 7 Energiegruppen und  $P_3$ -Streueordnung von MICROX übernommen; diese hatten sich im Rahmen der o.g. Studien als hinreichend akkurat erwiesen. Während MICROX-2 alle für die Transporttheorie benötigten Wirkungsquerschnitte bereitstellt, müssen für Diffusionsrechnungen zusätzliche Annahmen zur Berechnung von Diffusionskoeffizienten und zur Behandlung der Voidregion (siehe auch Abb. 5-5) oberhalb der Kugelschüttung gemacht werden. Für die Brennstoff- und Reflektormaterialien wurde der folgende Standardansatz für die Gruppen-Diffusionskoeffizienten  $D_g$  gewählt, in den neben dem totalen Wirkungsquerschnitt auch das erste Legendre-Moment des *Selbststreu*-Wirkungsquerschnitts eingeht:

$$D_g = \frac{1}{3(\Sigma_g^{total} - \Sigma_{g \rightarrow g}^{s,P_1})}$$

Für die Voidregionen wurden die von Gerwin und Scherrer vorgeschlagenen richtungsabhängigen Diffusionskoeffizienten /GER87/ angesetzt. So kann z. B. der axiale Diffusionskoeffizient einer zylindrischen Voidregion mit dem Verhältnis  $H$  von Höhen zu Durchmesser wie folgt berechnet werden:

$$D_z = R \frac{\sqrt{H^2 + 4}^3 - 8 - 6H - H^3}{6H(H - \sqrt{H^2 + 4})}$$

Mit diesen Definitionen können Diffusions- und Transporttheorie (hier: für  $P_3S_8$ ) für den ausgewählten Reaktorzustand verglichen werden. So ergeben sich für den PBMR268 für die Konfiguration ARI (*All Rods In* = Steuerstäbe voll eingefahren) und ARO (*All Rods Out* = Steuerstäbe in Betriebsposition, etwa 150 cm unterhalb der Oberkante der Kugelschüttung) die in Tabelle 5-1 gegebenen Eigenwerte sowie die in Abbildung Abb. 5-6 gezeigten axialen Leistungsverteilungen entlang der Innenkante, Außenkante und Zentrallinie des Brennstoffbereiches. Um die Unterschiede zwischen Diffusions- und Transportlösung genauer herauszuarbeiten, sind in Abb. 5-7 die relativen Unterschiede zwischen den Leistungsverteilungen dargestellt. Es zeigt sich, dass die größten Unterschiede zwischen Diffusions- und Transportlösung an der Oberkante der Kugelschüttung (also am Übergang zur Voidregion) und in der Nähe des Steuerstabs auftreten. Dies entspricht der generellen Erfahrung, dass die Diffusionsapproximation insbesondere in der Nähe von Voidregionen und starken Absorbern ihre Gültigkeit verliert. Nichtsdestotrotz sind die Unterschiede mit maximal 3% relativ gering. Größere Abweichungen findet man für die Flüsse insbesondere in den äußeren Bereichen des Reaktors, also z. B. im Druckbehälter oder im Außenreflektor. Der schnelle Fluss ist hier relevant, da er unmittelbaren Einfluss auf die Fluenz des Druckbehälters hat. In Abb. 5-8 sind die schnellen Flussverteilungen an Oberkante, Unterkante und Mittelebene des Kerns radial aufgetragen. In den Außenbereichen (jenseits von  $r=200$  cm) stellen sich Unterschiede zwischen den Diffusions- und Transportflüssen von nahezu einer Größenordnung ein. Dies entspricht dem wohlbekanntem Ergebnis, dass die Diffusionsapproximation für Fluenzberechnungen nicht geeignet ist. Ein großer Vorteil von DORT-TD ist daher darin zu sehen, dass sowohl die Leistungsverteilung im Reaktor-

kern als auch die Flussverteilung in kernfernen Regionen akkurat beschrieben werden können.

## **5.5 Kopplung von DORT-TD an den Thermohydraulikcode THERMIX-DIREKT**

Die Behandlung von Transienten für den HTR erfordert die Kopplung der Neutronenkinetik mit einem geeigneten Thermohydraulikmodell. Für diesen Zweck wurde der am FZJ entwickelte Code THERMIX-DIREKT ausgewählt, der sowohl den konvektiven Wärmeübergang zwischen Brennstoff und Kühlmittel als auch die Wärmeleitungsphänomene innerhalb der Brennstoffkugeln berechnet. Der Code THERMIX-DIREKT ist umfassend in /STR99/ dokumentiert.

Für die Kopplung wurde wie bei den stationären Rechnungen zum PBMR268 im vorigen Abschnitt die Energiegruppenanzahl auf 7 festgelegt (Kopplung auf 7 Gruppen fixiert?); die transporttheoretischen Rechnungen wurden in den meisten Fällen mit  $P_1S_4$ - oder  $P_3S_8$ -Quadratur- und Streuordnung durchgeführt. Zur Bestimmung der Rückwirkungen des Reaktorkerns wurden parametrisierte Wirkungsquerschnittsbibliotheken für unterschiedliche Brennstofftemperaturen, Moderatortemperaturen und Xenonkonzentrationen erzeugt. Es wurden drei Stützstellen für die Xenonkonzentration (Xenon = 0, typisches Xenon-Gleichgewicht und maximales Xenon nach Abschaltung), vier Stützstellen für die Brennstofftemperatur (300K, 800K, 1400K, 2400K) und sechs Stützstellen für die Moderatortemperatur ausgewählt (300K, 800K, 1100K, 1400K, 1800K, 2400K); diese Werte decken praktisch jeden Betriebszustand des Reaktors ab.

Die Transientenanalyse im gekoppelten Programmsystem DORT-TD/THERMIX-DIREKT startet stets mit einer Kritikalitätsrechnung, oder falls gewünscht, mit einer Kritikalitätssuche, z. B. durch Steuerstabverfahren. Dabei wird ggf. mehrfach zwischen Neutronenkinetik und Thermohydraulik iteriert. Von einem konvergierten stationären Zustand wird anschließend eine sog. Nulltransiente gestartet, die sicherstellt, dass die stationäre Lösung auch nach dem Übergang vom stationären in den transienten Rechenmodus stabil bleibt. Nach dieser Nulltransiente kann dann ein beliebiges Ereignis wie ein Pumpenausfall oder eine Reaktivitätstransiente initiiert werden. Der Datenaustausch zwischen Thermohydraulik und Neutronenkinetik findet auf vier unterschiedlichen Gitternetzen statt, die in Abb. 5-9 schematisch dargestellt sind. Das (im Allgemeinen feinste) Neutronenphysik-Gitter ist zunächst dem Thermohydraulikgitter überlagert,

wobei sich letzteres üblicherweise über einen größeren räumlichen Bereich erstreckt als das neutronenkinetische Gitter. Die von der Thermohydraulik errechneten Größen werden dann über die Maschen des sog. „Rückwirkungsgitters“ gemittelt, das in seiner Mascheneinteilung typischerweise den unterschiedlichen Materialzonen des Reaktors entspricht. Die Neutronenkinetik errechnet aus diesen gemittelten Größen die materialabhängigen Wirkungsquerschnitte und daraus die ortsabhängige Leistungsdichte. Diese wird dann wiederum über ein innerhalb von THERMIX einzugebendes Leistungsdichtegitter gemittelt und an die Thermohydraulik übergeben. Die Zeitschrittweitensteuerung wird von THERMIX übernommen, dergestalt dass stets THERMIX den maximalen Zeitschritt vorgibt (in THERMIX können entweder feste Zeitschritte vorgegeben oder während der Rechnung vom Code selbst-adaptiv bestimmt werden). DORT-TD berechnet während der Iteration den maximal zulässigen neutronenkinetischen Zeitschritt und unterteilt ggf. den thermohydraulischen Schritt in mehrere Unterschritte (siehe Abb. 5-10). So ist gewährleistet, dass weder Neutronenkinetik noch Thermohydraulik unzulässig große Zeitschritte ausführen.

## **5.6 Transientenstudien zum PBMR268-Design**

Die Transientenstudien zum PBMR268-Benchmark wurden ebenfalls vergleichend für Diffusions- und Transporttheorie durchgeführt. Es wurden drei unterschiedliche Transienten simuliert:

- Ein simultanes Ausfahren aller Regelstäbe mit der maximal zulässigen Geschwindigkeit von 1cm/s aus der normalen Betriebsstellung heraus (150 cm unterhalb der oberen Voidregion über einen Zeitraum von 200 Sekunden).
- Eine schnelle, prompt überkritische Transiente durch Auswurf aller Steuerstäbe innerhalb einer Zeitspanne von 100 Millisekunden. Dieser Vorgang führt zu einer extremen Leistungsexkursion, die schließlich durch den negativen Brennstofftemperatur- (Doppler-)Effekt begrenzt wird.
- Eine Unterkühlungstransiente, bei der der Einbruch von kaltem Helium in den Kern simuliert wird. Diese Transiente kann zum Beispiel durch das fehlerhafte Öffnen eines Bypass-Ventils ausgelöst werden. Im vorliegenden Modell wird dies durch die Vorgabe zeitlicher Randbedingungen am Kerneintritt erreicht.

Die Transienten werden aus dem Xenon-freien, stationären Vollastzustand gestartet. In Tabelle 5- 2 sind die Eigenwerte dieses gekoppelten stationären Zustand für unterschiedliche Transportapproximationen ( $P_1S_2$ ,  $P_1S_4$ ,  $P_1S_8$ ,  $P_3S_8$ ) und Diffusionstheorie gezeigt. Die Übereinstimmung zwischen den verschiedenen Rechnungen ist ausgezeichnet, die Unterschiede zwischen den Eigenwerten liegen unterhalb von 30 pcm.

### 5.6.1 Steuerstab-Fehlfahren mit maximal zulässiger Fahrgeschwindigkeit

Für die erste Modelltransiente wird das Verfahren aller Steuerstäbe über einen Zeitraum von 200 Sekunden von ihrer betrieblichen Position (150 cm unterhalb der Oberkante der Kugelschüttung) auf eine Endposition von 50 cm oberhalb der Kugelschüttung untersucht. Die Reaktivitätszufuhr beträgt etwa 2\$. Die Entwicklung der integralen Reaktorleistung ist in Abb. 5-11 gezeigt. Die Leistung steigt zunächst auf etwa 150% der Nominalleistung und stabilisiert sich nach Beendigung der Stabbewegung auf einem Leistungsniveau von etwa 125%, bedingt durch den stark negativen Dopplereffekt des HTR. In Abb. 5-11 werden Diffusionsrechnung und  $P_3S_8$ -Transportrechnung miteinander verglichen; um diesen Vergleich zu objektivieren, wurde für die Diffusionsrechnung die Steuerstabgeschwindigkeit so angepasst, dass die stationäre Netto-Reaktivitätszufuhr für den Diffusions- und den Transportrechenfall identisch ist. Folgerichtig erreichen auch beide Rechnungen nach Beendigung der Transiente dasselbe Leistungsniveau. Allerdings erkennt man, dass der zeitliche Verlauf erheblich anders ist, was mit der für Transport- und Diffusionstheorie unterschiedlichen differentiellen Steuerstabwirksamkeit zusammenhängt; die Voidregion spielt hierbei eine erhebliche Rolle, da Steuerstabbewegungen in der Nähe von Brennstoff- und Voidzone durch die Diffusionsnäherung nur sehr schlecht erfasst werden können. Der Einsatz von Neutronentransporttheorie ist offenbar gerade dann geboten, wenn Steuerstabbewegungen für den HTR simuliert werden sollen. Gegebenenfalls muss eine diffusionstheoretische Rechnung an eine Transportlösung entsprechend angepasst werden, um auch die differentielle Stabwirksamkeit hinreichend korrekt wiedergeben zu können. Auf jeden Fall ist aber ein Transport-Referenzmodell wie DORT-TD erforderlich.

Wie man in Abb. 5-11 erkennt, treten wellen- bzw. sägezahnartige Verläufe der Leistung auf, sog. *Cusping*-Effekte. Diese sind auf ein derzeit noch unzulängliches Steuerstab-Modell zurückzuführen. Zwar kann die Amplitude dieser „Wellen“ durch ein verfeinertes axiales Gitter weiter minimiert werden; mittelfristig ist hier aber ein verbessertes Steuerstabmodell mit einem Fluss-Volumenwichtungsansatz anzustreben.

### 5.6.2 Steuerstabauswurf

Als zweite Transiente wurde der Auswurf aller Steuerstäbe innerhalb von 100 Millisekunden simuliert. Diese Transiente führt zu einer Reaktivitätszufuhr von 1600 pcm (entsprechend 2\$) und somit zu einer prompt überkritischen Leistungsexkursion. Diese Rechnung wurde ebenfalls vergleichend für die Diffusionsapproximation und unterschiedliche Quadraturen in der Transportrechnung durchgeführt, nämlich für  $P_1S_2$ ,  $P_1S_4$ ,  $P_1S_8$  und  $P_3S_8$ . Aus der integralen Reaktorleistung in Abb. 5-12 ist zu erkennen ist, dass die Reaktorleistung um etwa einen Faktor 140 innerhalb von etwa 350 Millisekunden ansteigt. Der anschließende, durch den Dopplereffekt bedingte Abfall der Leistung geht allerdings vergleichbar schnell vonstatten, so dass der tatsächliche Energieeintrag in den Reaktor gering bleibt.

Aus Abb. 5-12 erkennt man, dass recht gute Übereinstimmung zwischen den verschiedenen Näherungen herrscht. Um die Unterschiede genauer studieren zu können, wurden in Abb. 5-13 anstelle der Absolutwerte der Leistung die relativen Abweichungen zur  $P_3S_8$ -Lösung betrachtet, die als Referenz genommen wird. Während die Diffusionslösung innerhalb der ersten 0.2 Sekunden eine Abweichung von beinahe 10% aufweist, kommen die höheren Transportlösungen der  $P_3S_8$ -Lösung mit zunehmender Verfeinerung immer näher. Dieses mit der Modellverfeinerung einhergehende asymptotische Verhalten kann als sehr befriedigendes Ergebnis betrachtet werden.

### 5.6.3 Unterkühlungstransiente: Einbruch von kaltem Helium in den Kern

In der letzten untersuchten Transiente wird das Öffnen eines Bypassventils durch eine Rampe der Kühlmiteleintrittstemperatur simuliert: diese fällt innerhalb von 10 Sekunden von ihrem Nominalwert von 500 °C auf 450 °C. Nach 300 Sekunden wird das Bypassventil wieder geschlossen und die Temperaturrampe in entgegengesetzter Richtung durchlaufen.

Bedingt durch die negativen Moderator- und Brennstofftemperaturrückwirkung führt eine Unterkühlungstransiente zu einer positiven Reaktivitätszufuhr und damit zu einer Leistungsexkursion. Diese ist in Abb. 5-14 gezeigt: die Leistung steigt auf etwa 107% der Ausgangsleistung, um nach dem Schließen des Bypassventils wieder zu ihrem Ausgangswert zurückzukehren. Die Abweichungen zwischen Diffusions- und  $P_1S_4$ -Transportrechnung sind in diesem Fall minimal und übersteigen zu keinem Zeitpunkt

einen Relativwert von 0,05%. Für Transienten, in denen keine Steuerstabbewegungen stattfinden, liefert die Diffusionsapproximation offenbar sehr akkurate Lösungen, wie hier am Beispiel des PBMR268 gezeigt werden konnte.

## 5.7 Der PBMR400-Benchmark

Im Rahmen des Forschungsprojekts RS1160 haben GRS und PSU mit dem gekoppelten System DORT-TD/THERMIX-DIREKT auch an den Aktivitäten zum OECD/NEA PBMR400 Transient Benchmark teilgenommen /REI05b/. Der Benchmark besteht aus einem stationären und einem transienten Teil; die stationären Fälle sind in drei Phasen aufgliedert: in der ersten, rein neutronischen Phase soll mit vorgegebenen Wirkungsquerschnitten die Leistungsverteilung eines PBMR400-Kern berechnet werden, ganz ähnlich zu den PBMR268-Berechnungen aus Abschnitt 5.4. In einer zweiten Phase wird das thermohydraulische Verhalten des Kerns bei vorgegebener nuklearer Leistungsdichteverteilung bestimmt, während in der dritten Phase eine gekoppelte stationäre Rechnung durchzuführen ist. Die stationäre Phase des Benchmarks befand sich zum Zeitpunkt der Niederlegung dieses Berichts kurz vor dem Abschluss; die transiente Phase fällt dagegen nicht mehr in den Berichtszeitraum, daher beschränken sich die folgenden Ausführungen auf den stationären Teil des Benchmarks; die Ergebnisse wurden im Rahmen der Konferenz Physor 2008 vorgestellt /PAU08/.

Der PBMR400 (siehe Abb. 5-15) besitzt im Gegensatz zum PBMR268 eine sog. statische zentrale Reflektorsäule aus Graphit. Darüber hinaus besitzt er größere axiale (Höhe der aktiven Zone 1050 cm anstatt 875 cm) Dimensionen und eine größere Voidregion (50 cm statt 25 cm hoch). Für den ersten, rein neutronischen Benchmarkteil wurden mit dem Codesystem VSOP 2-Gruppen-Wirkungsquerschnitte für Diffusionsprogramme erzeugt; somit konnte hier nur das Diffusionsmodul von DORT-TD getestet werden. Zu ermitteln sind der Reaktoreigenwert sowie die (gemittelten) axialen und radialen Leistungsprofile. Mit DORT-TD wurde ein  $k_{\text{eff}}$  von 1.00462 errechnet, ein Wert, der etwa 200 pcm oberhalb des Benchmark-Durchschnitts von 1.00244 liegt (bei etwa 15 Teilnehmern in der ersten Benchmarkphase). Während des weiteren Verlaufs der Benchmarkaktivitäten stellte sich allerdings heraus, dass der Reaktoreigenwert extrem sensitiv auf die Gittereinteilung reagiert; tatsächlich wurde von mehreren Teilnehmern ein nicht ausreichend feines Rechengitter verwendet. Die Teilnehmer, die daraufhin entsprechende neue Lösungen generiert hatten, fanden praktisch durchgängig einen Eigenwert, der nur um  $\pm 20$  pcm von dem von DORT-TD errechneten differiert. Eben-

falls gute Übereinstimmung wurde gefunden für die axialen und radialen Leistungsverteilungen, die in Abb. 5-16 und Abb. 5-17 gezeigt sind. Die relativ großen Schwankungen liegen daran, dass auch solche Teilnehmer mit in den Vergleich aufgenommen wurden, die mit einem nicht geeigneten Maschennetz gearbeitet hatten.

Der zweite, rein thermohydraulische Benchmarkteil wurde allein von der PSU ohne Beteiligung der GRS durchgeführt und wird daher an dieser Stelle nicht weiter erläutert. Insgesamt ergab sich eine ausgezeichnete Übereinstimmung zwischen den abgegebenen Lösungen, was allerdings auch wesentlich damit zusammenhängt, dass die meisten Teilnehmer mit dem Rechencode THERMIX oder einem seiner Abkömmlinge (THERMIX-KONVEK, THERMIX-DIREKT, DIREKT) gerechnet haben. Die Ergebnisse sind in /REI08/ dokumentiert.

Der anspruchsvollste Benchmarkteil der stationären Phase ist die gekoppelte neutronenkinetisch-thermohydraulische Rechnung. An dieser Übung nahmen lediglich 8 Teilnehmer teil. Die Geometrie ist identisch mit jener aus den ersten beiden Teilen, allerdings werden hier parametrisierte 2-Gruppen-Wirkungsquerschnittsdaten zur Verfügung gestellt, die in Abhängigkeit von der Brennstofftemperatur, der Moderatortemperatur, der Xenonkonzentration sowie dem schnellen und thermischen Buckling erzeugt wurden. Zur Bestimmung der Wirkungsquerschnitte wird eine 5-dimensional lineare Interpolationsroutine bereitgestellt, die von allen Teilnehmern zu verwenden war, um identische Ausgangsbedingungen für die Wirkungsquerschnittsdarstellung zu garantieren. Auch in diesen Rechnungen wird nach dem Reaktoreigenwert sowie den axialen und radialen Leistungsverteilungen gefragt; darüber hinaus sind die thermohydraulischen Kenngrößen des Kerns anzugeben. In Abb. 5-18 und Abb. 5-19 werden die mit DORT-TD errechneten Leistungsverteilungen im Vergleich mit dem Benchmarkdurchschnitt und der maximalen und minimalen Lösung dargestellt. Die Übereinstimmung von DORT-TD mit den Benchmarkmittelwerten ist ausgezeichnet. Auch der mit dem Transportmodul von DORT-TD berechnete Eigenwert (siehe Abb. 5-20) ist nur 29 pcm vom Benchmarkdurchschnitt entfernt.

Neben der Diffusionslösung wurden auch Transportlösungen mit DORT-TD erzeugt; während in der ersten, rein neutronischen Phase nur Wirkungsquerschnitte für Diffusionsrechnungen bereitgestellt wurden, wurden für die gekoppelte Phase auch totale und *Selbststreu-Wirkungsquerschnitte* generiert, so dass mit Transporttheorie gerechnet werden konnte. Wie man aus Abb. 5-20 ersieht, liegt der mit Neutronentransport

berechnete Eigenwert annähernd 700 pcm unter dem Ergebnis der Diffusionsrechnung und auch die Leistungsverteilung zeigt signifikante Unterschiede gegenüber der Diffusionsapproximation. Tatsächlich sind diese Unterschiede jedoch nicht auf einen grundlegenden methodischen Unterschied zwischen Diffusions- und Transporttheorie zurückzuführen, sondern auf die unzulängliche Erzeugung von Wirkungsquerschnitten mit VSOP, das ursprünglich nicht für die Produktion von Wirkungsquerschnitten für Transportrechnungen vorgesehen war. Es ist davon auszugehen, dass die Abweichungen zwischen Diffusion und Transport unter Verwendung korrekt erzeugter Wirkungsquerschnitte mit einem geeigneten Codesystem wie MICROX-2 für diesen Reaktor in einer ähnlichen Größenordnung liegen wie für die oben diskutierten PBMR268-Untersuchungen für sieben Energiegruppen.

Es ist beabsichtigt, mit dem gekoppelten Codesystem DORT-TD/THERMIX-DIREKT auch an der transienten Phase des Benchmarks teilzunehmen. Hier sollen insgesamt sechs unterschiedliche Fälle untersucht werden:

- Versagen der Zwangsumwälzung des Kühlmittels bei vollständiger Druckentlastung des Kerns mit und ohne Reaktorschnellabschaltung
- Versagen der Zwangsumwälzung des Kühlmittels bei teilweiser Druckentlastung des Kerns mit Reaktorschnellabschaltung
- Lastwechsel 100%-40%-100% mit anschließender Xenontransiente
- Simultanes Fehlfahren aller Steuerstäbe mit maximaler Geschwindigkeit
- Simultaner Auswurf aller Steuerstäbe
- Eintritt von kaltem Helium in den Kern

Diese Ereignisse decken einen wesentlichen Teil des Spektrums von betrieblichen Transienten über Kühlmittelverluststörfälle bis hin zu Reaktivitätstransienten ab und sind repräsentativ für diesen Reaktortyp. Ein Teil dieser Transienten konnte bereits am PBMR268 demonstriert werden; verschiedene reaktorspezifische Erweiterungen von DORT-TD für diesen Benchmark müssen aber noch durchgeführt werden.

## 5.8 Zusammenfassung

Mit dem gekoppelten Codesystem DORT-TD/THERMIX-DIREKT steht erstmals ein Codesystem zur Verfügung mit dem Transienten- und Störfallanalysen für HTR vom Kugelhaufentyp auch mit einem neutronentransporttheoretischen Ansatz durchgeführt werden können. Darüber hinaus besteht auch keinerlei prinzipielle Beschränkung bei der Anzahl der Energiegruppen. Anhand des PBMR268-Benchmarks konnte die Funktionsfähigkeit des Codesystems für stationäre gekoppelte Rechnungen sowie für einen ausgewählten Satz von Transienten bereits gezeigt werden. Die Übereinstimmung zwischen Neutronentransport und Diffusionsapproximation ist dabei generell gut, es gibt aber einige Aspekte wie die Modellierung des Steuerstabes und die Behandlung der Voidregion, die den Einsatz von Neutronentransport rechtfertigen. Um das gekoppelte Gesamtsystem zu validieren, nehmen GRS und PSU derzeit am PBMR400 Transient Benchmark teil, in dem ein breites Spektrum von Störfällen des PBMR400 untersucht wird.

## 6 Zusammenfassung und Bewertung

Mit dem zeitabhängigen 3D-Neutronentransportcode TORT-TD und dessen Kopplung mit dem Thermohydraulik-Systemcode ATHLET wurde im Rahmen des Vorhabens RS1160 ein umfangreiches Rechenprogramm entwickelt, mit dem neutronenkinetische Vorgänge im Reaktorkern physikalisch wesentlich exakter modelliert werden können als es mit den traditionellen nodalen, auf der Diffusionsnäherung basierenden Grobgitterverfahren bislang möglich war. Die Rechenmethodik stellt gegenüber der heute üblichen Praxis in Kernausslegung und Störfallberechnung eine deutliche Verbesserung dar, welche maßgeblich auf folgenden Faktoren beruht:

- Lösung der Neutronen-Transportgleichung anstelle der Diffusionsapproximation. Dies ermöglicht u.a. die Berücksichtigung anisotroper Neutronenstreuung.
- Verwendung prinzipiell beliebig vieler Energiegruppen anstatt des bei LWR üblichen Zweigruppen-Ansatzes.
- Räumlich hochaufgelöste Berechnung auf Basis homogenisierter Stabzellen, im Unterschied zu nodalen Grobgitterverfahren mit Homogenisierung ganzer Brennelemente.

Das gekoppelte Codesystem TORT-TD/ATHLET wurde an einer Reihe von Testfällen erprobt, die Reaktivitätsstörfälle (Steuerelementauswurf, Borverdünnung) sowohl in vereinfachten LWR-Anordnungen als auch in einem DWR-Viertelkern darstellen. Für einen stationären Testfall wurde ein Vergleich der TORT-TD/ATHLET-Lösung in 8 Energiegruppen mit einer Rechnung des Monte-Carlo-Programms MCNP mit Punktdaten durchgeführt, in die die räumliche Verteilung der mit TORT-TD/ATHLET ermittelten thermohydraulischen Größen einfließt. Das Ergebnis der MCNP-Rechnung bestätigt die Qualität der stationären TORT-TD/ATHLET-Analyse.

Darüber hinaus wurde in RS1160 das gekoppelte Rechenprogramm DORT-TD/THERMIX-DIREKT zur Verfügung gestellt, mit dem erstmals Transienten- und Störfallanalysen für Hochtemperaturreaktoren vom Kugelhaufentyp auch mit einem neutronentransporttheoretischen Ansatz durchgeführt werden können. Anhand des PBMR268-Benchmarks konnte die Funktionsfähigkeit des Codesystems für stationäre gekoppelte Rechnungen sowie für einen ausgewählten Satz von Transienten bereits

gezeigt werden. Die Übereinstimmung zwischen Neutronentransport und Diffusionsapproximation ist dabei generell gut, es gibt aber einige Aspekte wie die Modellierung von Steuerstäben und die Behandlung großer Voidregionen, die den Einsatz von Neutronentransport rechtfertigen. Um das gekoppelte Gesamtsystem zu validieren, nimmt die GRS gemeinsam mit der Penn State University derzeit am PBMR400 Transient Benchmark teil, in dem ein breites Spektrum von Transienten und Störfällen des PBMR400-Kugelhaufenreaktors untersucht wird, der sich derzeit in Südafrika in der Genehmigungsphase befindet.

Schließlich wurden im Rahmen von RS1160 stationäre LWR-Kernberechnungen mit dem Monte-Carlo-Programm MCNP und verschiedenen deterministischen Neutronentransportprogrammen durchgeführt. Die wesentlichen Arbeitspunkte umfassen die Erprobung eines geschlossenen Rechenweges zur Erzeugung von Weniggruppendaten für deterministische Transportrechnungen mit dem Programmsystem SCALE-5.1 und den Einsatz der so erzeugten Daten für Anwendungsfälle, die Durchführung von Monte-Carlo-Berechnungen mit örtlich veränderlichen thermohydraulischen Parametern und die Untersuchung des Einflusses nuklearer Daten auf die Ergebnisse von Kernberechnungen beim Übergang von der bisher für Routineberechnungen eingesetzten JEF-2.2 Bibliothek zur aktuellen Evaluierung JEFF-3.1.

So wurden mit dem 2D-Transportprogramm NEWT aus dem SCALE-5.1-Programmsystem zellhomogenisierte Daten in 18 Energiegruppen hauptsächlich zur Verwendung mit dem  $S_N$ -Code DANTSYS/ PARTISN für Kernberechnungen erzeugt. Geometrie und Nuklidichten basieren auf den Parametern des DWR-MOX/UO<sub>2</sub>-Kerntransientenbenchmarks. Alle Berechnungsschritte wurden durch Vergleich mit MCNP-Referenzlösungen überprüft. Zur Erzeugung von Absorber-Gruppenkonstanten wurde ein Verfahren verwendet, bei dem die effektive Absorberkonzentration reduziert wird. Mit diesen zellhomogenisierten Wirkungsquerschnitten wurden Ergebnisse für Multiplikationsfaktoren und Leistungsverteilungen von Brennelementen, 2X2- und ¼-Kern-Anordnungen erzielt, die in sehr guter Übereinstimmung mit den MCNP-Referenzlösungen sind.

Zur Berechnung von Kernanordnungen mit variablen thermohydraulischen Parametern mit der Monte-Carlo-Methode wurden MCNP-Eingabedatensätze erzeugt, in denen unterschiedliche Brennstofftemperaturen und Moderatorordichten in axialen Abschnitten thermohydraulischer Kanäle, deren Größe in der x-y-Ebene als Stabzell- oder Brennelementfläche gewählt wurde, zugelassen sind. Die Ergebnisse für die Stableistungs-

verteilungen der MCNP-Berechnungen wurden für die KRITZ-2-Experimente mit Messwerten und Ergebnissen aus einer PARTISN-Rechnung verglichen, wobei sehr gute Übereinstimmung erzielt werden konnte. Ebenfalls sehr gut ist die Übereinstimmung zwischen MCNP und PARTISN für eine 2X2-Anordnung des DWR-MOX/ $UO_2$ -Kerntransientenbenchmarks mit mittleren thermohydraulischen Parametern. Insgesamt stellt sich heraus, dass MCNP-Berechnungen für Kernanordnungen mittlerer Größe mit stabzellweise und axial variablen thermohydraulischen Parametern mit den verfügbaren Rechnerressourcen durchführbar sind und zuverlässige Ergebnisse liefern, die als Referenzwerte für Rechnungen mit anderen Methoden dienen können.

Zur Bewertung des Einflusses nuklearer Daten auf Kernberechnungen wurden schließlich MCNP-Berechnungen mit nuklearen Punktdaten, die auf den beiden JEF-Evaluierungen JEF-2.2 und JEFF-3.1 basieren, durchgeführt. Es wurden berechnete Multiplikationsfaktoren und Spaltraten- bzw. Leistungsverteilungen für kritische Anordnungen und Reaktorkerne untereinander und soweit möglich mit Messungen verglichen. Bei den beiden Serien von kritischen Experimenten KRITZ-2 und VENUS-7 ergibt sich hinsichtlich des Multiplikationsfaktors eine leichte Verbesserung mit den JEFF-3.1-Daten gegenüber JEF-2.2. Bei Ganzkernberechnungen für  $UO_2$ /MOX-Mischkerne ist die Situation dagegen deutlich anders. Während die mit JEF-2.2 und JEFF-3.1 berechneten Multiplikationsfaktoren noch in akzeptabler Übereinstimmung sind, ergeben sich für die brennelementweisen Leistungsverteilungen unerwartet deutliche Unterschiede, die zu einem großen Teil auf die unterschiedlichen U-235-Daten in den beiden Evaluierungen zurückzuführen sind. Diese Unterschiede in den Leistungsverteilungen können je nach Kernbeladung 5 % oder mehr betragen. Gegenwärtig ist es nicht möglich zu bestimmen, mit welcher Datenbibliothek die Ergebnisse besser mit tatsächlichen Reaktorbetriebsdaten übereinstimmen. Zur endgültigen Klärung sollte der Vergleich mit Messdaten aus dem Reaktorbetrieb angestrebt werden. Die weitere Entwicklung bei den internationalen Datenevaluierungsgruppen, insbesondere JEFF und ENDF/B, sollte aufmerksam beobachtet werden.

## 7 Literaturverzeichnis

- /ALC05/ R.E. Alcouffe, R.S. Baker, J.A. Dahl, S.A. Turner, R.C. Ward, "PARTISN: A Time-Dependent, Parallel Neutral Particle Transport Code System", LA-UR-05-3925 (2005).
- /ALC95 / R.E. Alcouffe, R.S. Baker, F.W. Brinkley, D.R. Marr, R.D. O'Dell, W.F. Walters, "DANTSYS: A Diffusion Accelerated Neutral Particle Transport Code System", LA-12969-M (1995).
- /ANS01/ AEA, CFX 4.4, Dokumentation, CFX International, AEA Technology plc, Oxfordshire, United Kingdom, 2001
- /ANL85/ ANL Benchmark Problem Book, 1985. ANL-Report ANL-7416, Supplement 2 and 3.
- /AZM07/ Y. Y. Azmy, "Benchmarking the Accuracy of Solution of 3-Dimensional Transport Codes and Methods over a Range in Parameter Space", NEA/NSC/DOC(2007)1/REV1
- /BER01/ W. Bernnat, S. Langenbuch, M. Mattes, W. Zwermann, "Validation of Nuclear Data Libraries for Reactor Safety and Design Calculations", Intl. Conference on Nuclear Data for Science and Technology, Tsukuba, Japan, September 2001
- /BER02/ W. Bernnat, E. Kiefhaber, S. Langenbuch, M. Mattes, W. Zwermann, "KRITZ-2 Benchmark Calculations Based on Different Nuclear Data with MCNP and THREEDANT", Jahrestagung Kerntechnik, Stuttgart, 2002
- /BER94/ W. Bernnat, D. Lutz, J. Keinert, M. Mattes, "Erstellung und Validierung von Wirkungsquerschnittsbibliotheken im SCALE-Format auf Basis der evaluierten Dateien JEF-2 und ENDF/B-VI für Kritikalitäts- und Reaktorauslegungsrechnungen sowie Störfallanalysen", IKE 6-189 (1994)

- /CAS91/ J. J. Casal, R. J. J. Stamm'ler, E. A. Villarino, A. A. Ferri, "HELIOS: Geometric Capabilities of a New Fuel-Assembly Program", Intl. Topical Meeting on Advances in Mathematics, Computations, and Reactor Physics, Pittsburgh, USA, 1991.
- /GER87/ Gerwin, H., Scherer, G.: "Treatment of the Upper Cavity in a Pebble Bed High Temperature Gas cooled Reactor by Diffusion Theory", Nuclear Science and Engineering, vol. 97, pp. 9-19, (1987)
- /GOM05/ E. Gomin, M. Kalugin, D. Oleynik, "VVER-1000 MOX Core Computational Benchmark – Specification and Results", NEA/NSC/DOC(2005)17
- /HEB93/ A. Hebert, "A Consistent Technique for the Pin-by-Pin Homogenization of a Pressurized Water Reactor Assembly", Nuclear Science and Engineering, 113, S. 227-238 (1993)
- /HES07/ U. Hesse, S. Langenbuch, W. Zwermann, D. Porsch, W. Bernnat, "Comparison of Burn-up Calculations for a UO<sub>2</sub> PWR Fuel Assembly", Jahrestagung Kerntechnik, Karlsruhe, 2007
- /IVA99/ K. N. Ivanov, T. M. Beam, A. J. Baratta, "PWR Main Steam Line Break (MSLB) Benchmark, Volume I: Final Specifications," NEA/NSC/DOC(99)8
- /JOH90/ E. Johansson, "Data and Results for KRITZ Experiments on Regular H<sub>2</sub>O/Fuel Pin Lattices at Temperatures up to 245°C", STUDSVIK/NS-90/133 (1990). Auch als JEF-Dokument verfügbar:  
[http://www.nea.fr/html/dbdata/nds\\_jefreports/jefreport-17/JEF\\_DOC/jefdoc-329.pdf](http://www.nea.fr/html/dbdata/nds_jefreports/jefreport-17/JEF_DOC/jefdoc-329.pdf)
- /KOZ06/ T. Kozlowsky, T. J. Downar, "Pressurized water reactor MOX/UO<sub>2</sub> core transient benchmark", Final Report, NEA/NSC/DOC(2006)20
- /LAN07/ S. Langenbuch, A. Seubert, W. Zwermann, "High Accuracy Large Scale Monte Carlo and Deterministic Transport Calculations for Critical Systems", Joint Intl. Topical Meeting on Mathematics & Computation and Supercomputing in Nuclear Applications, Monterey, USA, April 2007

- /LAN96/ S. Langenbuch, M. Lizorkin, U. Rohde, K. Velkov, "3D Neutronic Codes coupled with Thermal-Hydraulic System Codes for PWR, BWR and VVER Reactors. OECD/CSNI Workshop on Transient Thermal-Hydraulic and Neutronic Codes Requirements", Annapolis, Md., U.S.A., Nov. 5-8, 1996
- /LAN06/ S. Langenbuch, A. Seubert, W. Zwermann, "Solution of the stationary state of the PWR MOX/UO<sub>2</sub> Core Transient Benchmark", Jahrestagung Kerntechnik, Aachen, 2006
- /LAN08/ S. Langenbuch, A. Pautz, W. Zwermann, W. Bernnat, M. Mattes, "Effect of Nuclear Data on Core Calculations", UAM-2 Workshop, Garching, Mai 2008
- /LER98/ G. Lerchl, H. Austregesilo, "ATHLET Mod 1.2 Cycle A, User's Manual", GRS-P-1/Vol. 1, Rev.1, 1998.
- /LEW84/ E. E. Lewis, W. F. Miller, "Computational Methods of Neutron Transport", Wiley-Interscience, New York (1984)
- /MAT97/ D. Mathews, "An Improved Version of the MICROX-2 Code", Paul-Scherrer-Institut, Schweiz, PSI-Bericht Nr. 97-11, (1997)
- /MES05/ N. Messaoudi, P. Baeten, B.-C. Na, "Benchmark on the VENUS Plutonium Recycling Experiments – Configuration 7", NEA/NSC/DOC(2005)11
- /NEA02/ "A VVER-1000 LEU and MOX Assembly Computational Benchmark - Specification and Results", NEA/NSC/DOC(2002)10, 2002
- /NEA05/ "Benchmark on the KRITZ-2 LEU and MOX Critical Experiments - Final Report", NEA/NSC/DOC(2005)24
- /PAU02/ A. Pautz, A. Birkhofer: "Rechenmodellentwicklung für die Analyse von Reaktivitätsstörfällen mit Neutronentransporttheorie und gekoppelter Thermofluidodynamik und die Anwendung auf Hochfluss-Forschungsreaktoren", Abschlussbericht zum BMWi-Vorhaben BMWi1501214, TU München, April 2002.

- /PAU03/ A. Pautz, A. Birkhofer: "DORT-TD: A Transient Neutron Transport Code with Fully Implicit Time Integration". Nuclear Science and Engineering, Vol. 145, pp. 299-319, (2003)
- /PAU03a/ A. Pautz, A. Birkhofer: "Coupling of time-dependent neutron transport theory with the thermal hydraulics code ATHLET and Application to the Research Reactor FRM-II". In Nuclear Science and Engineering, Vol. 145, pp 167-180.
- /PAU05/ A: Pautz, "Improved Strategies for Fuel Assembly, Pin Cell and Reflector Cross Section Generation Using the Discrete Ordinates Code DORT", PHYSOR 2006, Vancouver, Canada, September 2006
- /PAU08/ A. Pautz, B. Tyobeka, K. Ivanov: „Application of Time-Dependent Transport Theory for High Temperature Reactors of Pebble Bed Type“, Physor 2008, Interlaken, Schweiz, September 14-19, (2008)
- /PBM08/ PBMR Pty (Ltd.), See the webpages of Pebble Bed Modular Reactor (Pty) Ltd., 2008: [www.pbmr.com](http://www.pbmr.com)
- /REI05a/ F. Reitsma, H.J. Rütten, W. Scherer, „An Overview of the FZJ-Tools for HTR Core Design and Reactor Dynamics. The Past, Present and Future“, M&C 2005, Avignon, France, September 12-15, (2005)
- /REI05b/ F. Reitsma: „OECD/NEA/NSC PBMR Coupled Neutronics/Thermal hydraulics Transient Benchmark Specification“, OECD Workshop, Paris, 2005
- /REI08/ Reitsma, F.:” The OECD/NEA/NSC PBMR400 MW coupled neutronics thermal hydraulics transient benchmark– Steady-state results and status“, Physor 2008, Interlaken, Schweiz, September 15-19, (2008)
- /RHO91/ W. A. Rhoades, R. L. Childs, “The TORT Three-dimensional Discrete Ordinates Neutron/Photon Transport Code“, (ORNL-6268), Nucl. Sci. Eng. 107 (1991) 397

- /RHO97/ W. A. Rhoades, D. B. Simpson, "The TORT Three-dimensional Discrete Ordinates Neutron/Photon Transport Code (TORT Version 3)", ORNL/TM-13221 (1997)
- /ROW78/ J. Rowlands, C. Eaton, "The Spatial Averaging of Cross-Sections for Use in Transport Theory Calculations, with an Application to Control Rod Fine Structure Homogenisation", Proc. Specialists' Meeting on Homogenization Methods in Reactor Physics, Lugano, 1978.
- /SCA06/ "SCALE: A Modular Code System for Performing Standardized Computer Analyses for Licensing Evaluation, Version 5.1", ORNL/TM-2005/39 (2006)
- /SEU04a/ A. Seubert, S. Langenbuch, W. Zwermann, „Entwicklung des zeitabhängigen 3D-SN-Neutronen-Transportcodes TORT-TD“, GRS-A-3237, Nov. 2004
- /SEU04b/ A. Seubert, S. Langenbuch, W. Zwermann, „Weiterentwicklung von Neutronentransportmodellen für Anwendungen in der nuklearen Kernausslegung und die Analyse von Reaktivitätsstörfällen“, GRS-A-3238, Nov. 2004
- /SEU06/ A. Seubert, S. Langenbuch, W. Zwermann, "Solution of the Stationary State of the PWR MOX/UO<sub>2</sub> Core Transient Benchmark“, PHYSOR 2006, Vancouver, Canada, September 2006
- /SEU08a/ A. Seubert, S. Langenbuch, K. Velkov, W. Zwermann, "Deterministic and Monte Carlo Transport Models with Thermal-Hydraulic Feedback“, Jahrestagung Kerntechnik, Hamburg, 2008
- /SEU08b/ A. Seubert, K. Velkov, S. Langenbuch, „The time-dependent 3D discrete ordinates code TORT-TD with thermal-hydraulic feedback by ATHLET models“, Physor 2008, Interlaken, Schweiz, September 14-19, (2008)
- /SMI86/ K. S. Smith, "Assembly homogenization techniques for light water reactor analysis", Prog. Nucl. Energy. **17**, No. 3 (1986) 303

- /STR99/ S. Struth.: "DIREKT—A Computer Programme for non-steady, two-dimensional simulation of thermo-hydraulic transients", Forschungszentrum Jülich, Report: JÜL-1702, (1999)
- /TEU80/ E. Teuchert, U. Hansen, K. Haas: „VSOP – Computer Code System for Reactor Physics and Fuel Cycle Simulation“, Kernforschungsanlage Jülich, JÜL-1649, March 1980
- /THU82/ M. J. Thurgood et al., COBRA-TRAC: "A Thermal-Hydraulic Code for Transient Analysis of Nuclear Reactor Vessels and Primary Coolant Systems", NUREG-CR-3046 (PNL-4385), Volumes 1-5, March 1982
- /TYO04/ Tyobeka, B., Ivanov, K.: "Analysis of the PBMR-268 benchmark transient cases with the NEM-THERMIX coupled code", Transactions of the ANS Winter Meeting, Nov. 2004, Washington DC, USA.
- /TYO05/ Tyobeka, B., Pautz, A., Ivanov, K.: "Preliminary Investigations on the Importance of Using Transport Methods for the Analysis of the PBMR", ANS Winter Meeting, Washington DC, November 13-17, (2005)
- /TYO07/ B. Tyobeka, PhD-Thesis: "Advanced Multi-Dimensional Deterministic Transport Computational Capability for Safety Analysis of Pebble-Bed Reactors", Penn State University, (2007)
- /X-503/ X-5 Monte Carlo Team, "MCNP – A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5", LA-UR-03-1987 (2003)
- /ZWE99/ W. Zwermann, S. Langenbuch, "Bereitstellung von JEF-2-Punktdateien für MCNP und Nachrechnung kritischer Experimente", GRS-A-2734 (1999)
- /ZWE04/ W. Zwermann, S. Langenbuch, A. Seubert, "Berechnungen von Uran- und MOX-Kritikalitätsexperimenten und –Benchmarks mit deterministischen und Monte-Carlo-Neutronentransportprogrammen", GRS-A-3223 (2004)

/ZWE08/ W. Zwermann, S. Langenbuch, A. Alander, P. Magat, W. Timm, "Comparison of Modern Lattice Codes, MCNP and Other Transport Codes for the VENUS-1 and VENUS-2 Cores", Jahrestagung Kerntechnik, Hamburg, 2008

## 8 Tabellen

**Tabelle 2-1: Parameter der KRITZ-2-Anordnungen.**

	KRITZ-2:1		KRITZ-2:13		KRITZ-2:19	
	kalt	heiß	kalt	heiß	kalt	heiß
Brennstoff	UO <sub>2</sub>		UO <sub>2</sub>		MOX	
Anreicherung	1.86 % U-235		1.86 % U-235		1.5 % PuO <sub>2</sub> , 92 % Pu-fiss	
Gitterweite bei 20 °C	14.85 mm		16.35 mm		18.0 mm	
Gitter	44x44		40x40		25x24	
Höhe des Wasserspiegels	65.28 cm	105.52 cm	96.17 cm	110.96 cm	66.56 cm	100.01 cm
Temperatur	19.7 °C	248.5 °C	22.1 °C	243.0 °C	21.1 °C	235.9 °C
Bor-konzentration	217.9 ppm	26.2 ppm	451.9 ppm	280.1 ppm	4.8 ppm	5.2 ppm
Buckling-Höhe	81.80 cm	125.66 cm	111.00 cm	128.47 cm	77.65 cm	113.22 cm

**Tabelle 2-2: Stabpositionen, bei denen in den KRITZ-2- Experimenten die stabweisen Spaltraten bestimmt wurden.**

	KRITZ-2:1		KRITZ-2:13		KRITZ-2:19	
	X	Y	X	Y	X	Y
1	1	23	1	1	1	13
2	1	44	1	21	2	13
3	2	23	1	40	4	13
4	2	43	2	21	6	13
5	3	42	6	21	8	13
6	4	23	8	21	10	13
7	6	6	11	21	12	13
8	6	23	14	21	13	5
9	6	39	17	21	13	7
10	8	23	20	6	13	9
11	9	36	20	9	13	11
12	12	23	20	12	13	13
13	15	30	20	15	13	14
14	17	23	20	18	13	16
15	20	23	20	21	13	18
16	22	23	20	24	13	20
17	23	22	20	27	13	21
18	27	18	20	30	13	22
19	33	12	20	33	15	13
20	39	6	20	35	17	13
21	39	39	20	39	19	13
22			20	40	21	13
23			21	20	22	13
24			23	21	24	13
25			26	21	25	13
26			29	21		
27			32	21		
28			35	21		
29			40	1		
30			40	40		

**Tabelle 2-3: Parameter der Reaktorzustände beim WWER-1000-Ganzkernbenchmark.**

		Brennstoff T (K)	Moderator T (K)	Bor (ppm)	Steuer- stäbe
S1	Volllast-Betriebszustand	1027	575	1300	-
S2	Nulllast heiß, unkontrolliert	575	575	1300	-
S3	kalt, unkontrolliert, hoher Borgehalt	300	300	2800	-
S4	Volllast-Betriebszustand, unboriert	1027	575	0	-
S5	Nulllast heiß, unkontrolliert, unboriert	575	575	0	-
S6	Nulllast heiß, kontrolliert, unboriert	553	553	0	eingefahren

**Tabelle 3-1: Schema des NEMTAB-Formats für eine parametrisierte Wirkungsquerschnittsbibliothek in zwei Energiegruppen für TORT-TD.**

```

Mod Dens      Boron ppm      Fuel Temp
      3              3              3
661.14        711.87         752.06
  0.00        1000.00        2000.00
560.00         900.00        1320.00
*
* -----
* BURNUP 0.15
* -----
*
* Transport XSEC Table
*
* GROUP 1
XS(D1,B1,F1) XS(D2,B1,F1) XS(D3,B1,F1)
XS(D1,B2,F1) XS(D2,B2,F1) XS(D3,B2,F1)
XS(D1,B3,F1) XS(D2,B3,F1) XS(D3,B3,F1)
XS(D1,B1,F2) XS(D2,B1,F2) XS(D3,B1,F2)
XS(D1,B2,F2) XS(D2,B2,F2) XS(D3,B2,F2)
XS(D1,B3,F2) XS(D2,B3,F2) XS(D3,B3,F2)
XS(D1,B1,F3) XS(D2,B1,F3) XS(D3,B1,F3)
XS(D1,B2,F3) XS(D2,B2,F3) XS(D3,B2,F3)
XS(D1,B3,F3) XS(D2,B3,F3) XS(D3,B3,F3)
* GROUP 2
...
*
* Absorption XSEC Table
...
*
* Nu-Fission XSEC Table
...
*
* Kappa-Fission XSEC Table
...
*
* P0 Scattering XSEC Table
*
* GROUP 1 -> 2
...
* GROUP 2 -> 1
...
*
* P1 Scattering XSEC Table
*
* GROUP 1 -> 2
...
* GROUP 2 -> 1
...
*
* ADF Table
...
*
* Fission Spectrum
*
* GROUP      1      2
      CHI(G1) CHI(G2)
*
* Inverse Velocity
*
* GROUP      1      2
      IVEL(G1) IVEL(G2)
*
* Delay Neutron Decay Constant (Lambda)
*
* GROUP      1      2      3      4      5      6
      LAMBDA(G1) LAMBDA(G2) LAMBDA(G3) LAMBDA(G4) LAMBDA(G5) LAMBDA(G6)
*
* Delay Neutron Fraction (Beta)
*
* GROUP      1      2      3      4      5      6
      BETA(G1)  BETA(G2)  BETA(G3)  BETA(G4)  BETA(G5)  BETA(G6)
*
* -----
* BURNUP 17.50
* -----
...

```

**Tabelle 3-2: TORT-Ergebnisse für die 23 gesuchten Größen 1.b bis 3.m für den Fall  $L = 1,0$ ,  $\sigma_1 = 0,1$ ,  $c_1 = 0,5$ ,  $\sigma_2 = 0,1$  und  $c_2 = 0,5$ . Die Angaben in den Spalten „% Error“ sind die prozentualen Abweichungen zur MCNP-Lösung.**

Item	$\gamma = 0,1$		$\gamma = 0,5$		$\gamma = 0,9$	
	Value	% Error	Value	% Error	Value	% Error
1.a	4,28201E-01	0,02	3,60948E-01	0,06	3,52328E-01	1,42
1.b	4,00195E-01	0,23	2,02390E-01	0,09	1,45190E-01	0,3
2.a	-2,51324E-01	0,01	-2,72738E-01	0,02	-2,89784E-01	0,13
2.b	7,48413E-02	0,08	5,48619E-02	0,17	3,97948E-02	1,88
2.c	-2,51377E-01	0,04	-2,72813E-01	0,05	-2,90332E-01	0,33
2.d	7,43467E-02	0,75	5,47804E-02	0,33	4,04265E-02	0,34
2.e	2,04441E-03	0,16	2,17993E-02	0,15	3,73486E-02	0,79
2.f	2,06413E-03	1,12	2,17742E-02	2	3,62576E-02	2,72
2.g	2,04324E-03	0,26	2,18021E-02	0,13	3,78109E-02	2,02
2.h	2,06202E-03	1,15	2,17383E-02	1,82	3,58220E-02	1,46
3.a	2,21163E+00	0,01	7,16813E+00	0,03	1,78187E+02	0,62
3.b	5,10299E-01	0,6	4,53240E-01	0,01	5,09172E-01	0,27
3.c	3,23794E-01	0,36	1,04064E-01	0,59	5,26748E-02	4,14
3.d	1,41627E-01	0,28	5,26353E-02	0,53	2,67130E-02	0,84
3.e	1,72590E-01	0,19	1,13195E-01	0,73	4,94476E-02	37,3
3.f	8,68782E-02	0,05	5,55189E-02	0,21	7,39542E-04	98,05
3.g	1,72812E-01	0,01	1,13841E-01	0,23	4,06080E-02	49,06
3.h	8,69394E-02	0,03	5,55408E-02	0,22	6,36824E-03	83,42
3.i	5,75385E-02	0,23	3,65386E-02	0,52	2,46237E-02	1,45
3.j	4,23284E-01	0,38	2,13990E-01	0,04	1,25926E-01	0,9
3.k	3,66213E-01	0,02	1,40107E-01	0,23	7,45755E-02	2,43
3.l	4,22874E-01	0,36	2,13694E-01	0,1	1,25604E-01	1,18
3.m	3,65906E-01	0	1,40017E-01	0,17	7,38204E-02	1,41

**Tabelle 4-1: Energiegruppengrenzen (in eV) der 18-Gruppenbibliotheken aus der 44-Gruppen-ENDF/B-V- und der 292-Gruppen-JEF-2.2-Bibliothek.**

ENDF/B-V	JEF-2.2
2.00E+07	1.96E+07
3.00E+06	3.01E+06
1.40E+06	1.42E+06
9.00E+05	9.07E+05
4.00E+05	4.08E+05
1.00E+05	9.80E+04
1.70E+04	1.50E+04
3.00E+03	3.04E+03
5.50E+02	5.83E+02
1.00E+02	1.01E+02
3.00E+01	2.90E+01
1.00E+01	1.07E+01
3.00E+00	3.06E+00
1.00E+00	4.00E-01
4.00E-01	1.00E-01
1.00E-01	5.00E-02
5.00E-02	3.00E-02
1.00E-02	1.75E-02
1.00E-05	1.00E-05

**Tabelle 4-2: Berechnete Reaktivitätswerte aller Steuerstäbe beim DWR-MOX/ $UO_2$ -Kerntransientenbenchmark, sowie der gezogenen Steuerstäbe eines Brennelementes im Viertelkern**

	Alle Steuerstäbe	Steuerstäbe im Brennelement E-5
MCNP	0.0706	-0.0057
DANTSYS (unkorrigiert)	0.0742	-0.0061
DANTSYS (korrigiert)	0.0710	-0.0057

**Tabelle 4-3: Mit JEF-2.2 und JEFF-3.1 berechnete Multiplikationsfaktoren beim DWR-MOX/ $UO_2$ -Kerntransientenbenchmark und beim WWER-1000-Ganzkernbenchmark.**

	JEF-2.2	JEFF-3.1	Differenz
DWR, Nulllast heiß, unkontrolliert	1.0606	1.0572	0.0034
DWR, Nulllast heiß, kontrolliert	0.9900	0.9864	0.0036
WWER, S1: Volllast-Betriebszustand	1.0377	1.0370	0.0007
WWER, S2: Nulllast heiß, unkontrolliert	1.0512	1.0498	0.0014
WWER, S3: kalt, unkontrolliert, hoher Borgehalt	0.9341	0.9341	0.0000
WWER, S4: Volllast-Betriebszustand, unboriert	1.1386	1.1382	0.0004
WWER, S6: Nulllast heiß, kontrolliert, unboriert	1.0474	1.0464	0.0010

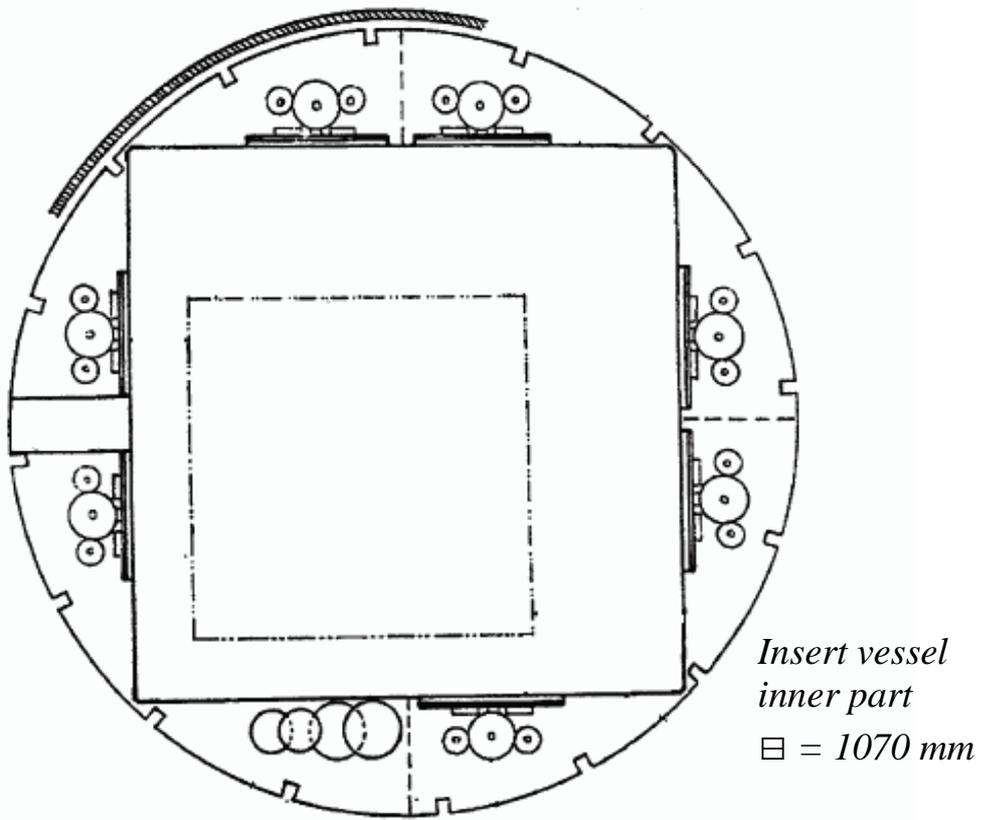
**Tabelle 5-1:** Die von DORT-TD für den stationären PBMR268-Benchmark berechneten Eigenwerte für die Konfigurationen ARI (voll eingefahrene Steuerstäbe) und ARO (Steuerstäbe in Betriebsposition). Verglichen werden die Ergebnisse von Diffusionstheorie und  $P_3S_8$ -Transportrechnung.

	<b>Diffusion</b>	<b>Transport (<math>P_3S_8</math>)</b>
<b>“All rods in” (ARI)</b>	0.924659	0.924765
<b>“All rods out” (ARO)</b>	1.059132	1.058873

**Tabelle 5- 2:** Die von DORT-TD/THERMIX-DIREKT für den gekoppelten Zustand des PBMR268 berechneten Eigenwerte für Diffusionstheorie und unterschiedliche Transportordnungen.

<b>Verwendete Approximation</b>	<b>Eigenwert</b>
<b>Diffusion</b>	1.03659
<b><math>P_1S_2</math></b>	1.03695
<b><math>P_1S_4</math></b>	1.03668
<b><math>P_1S_8</math></b>	1.03672
<b><math>P_3S_8</math></b>	1.03671

9      **Abbildungen**



**Abb. 2-1:**      **Horizontaler Querschnitt durch den KRITZ-Reaktor.**

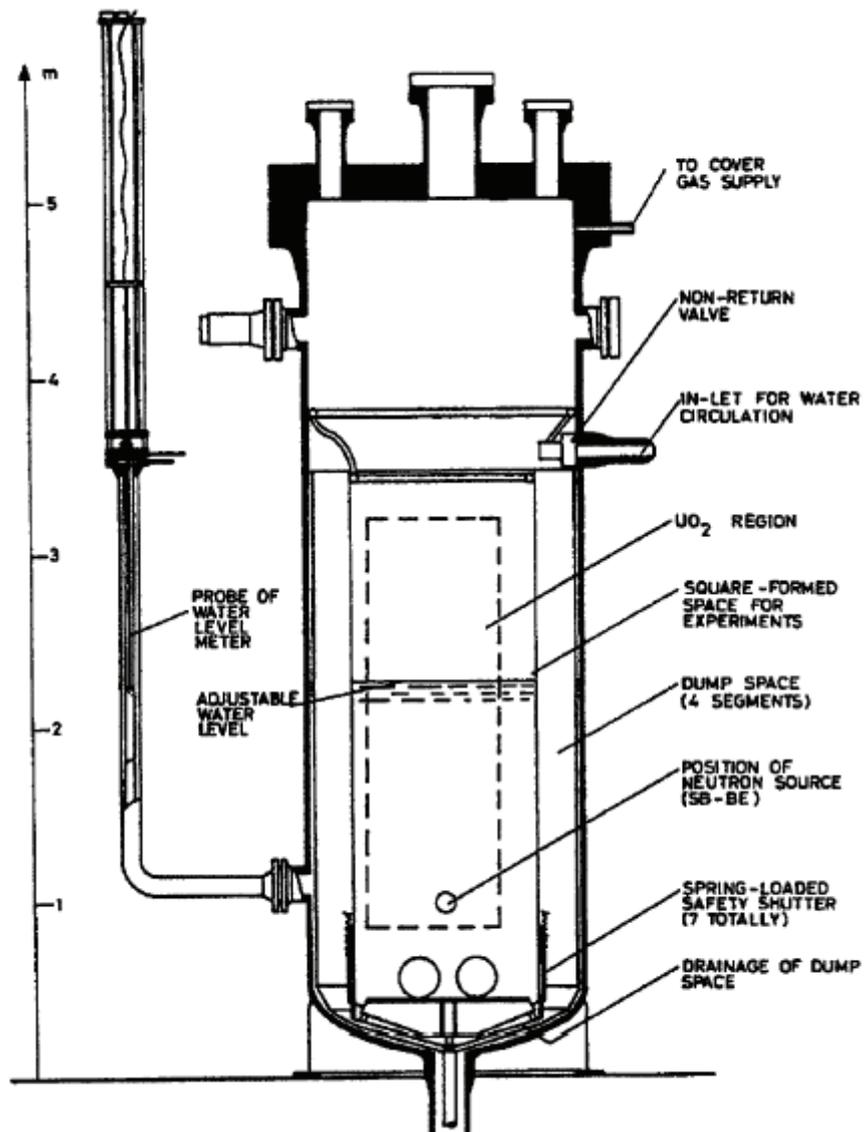


Abb. 2-2: Vertikaler Querschnitt durch den KRITZ-Reaktor.

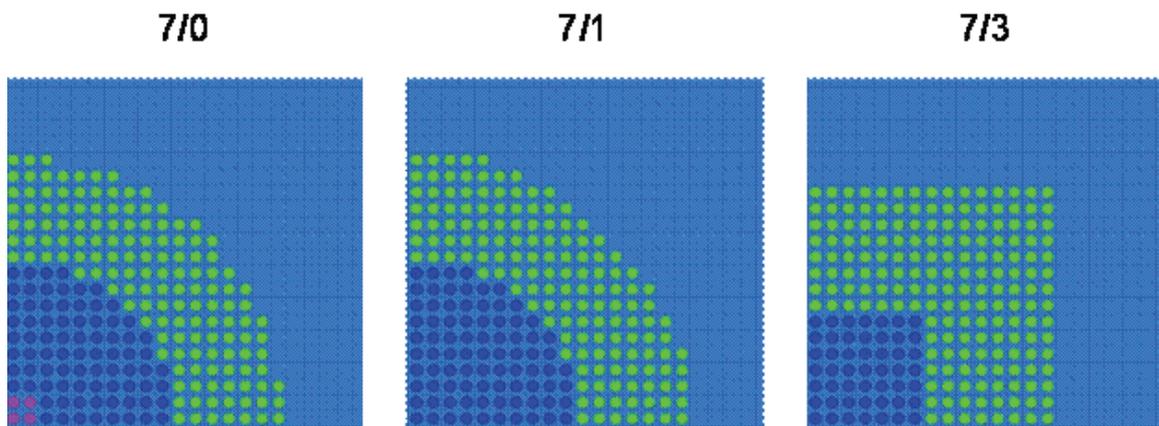
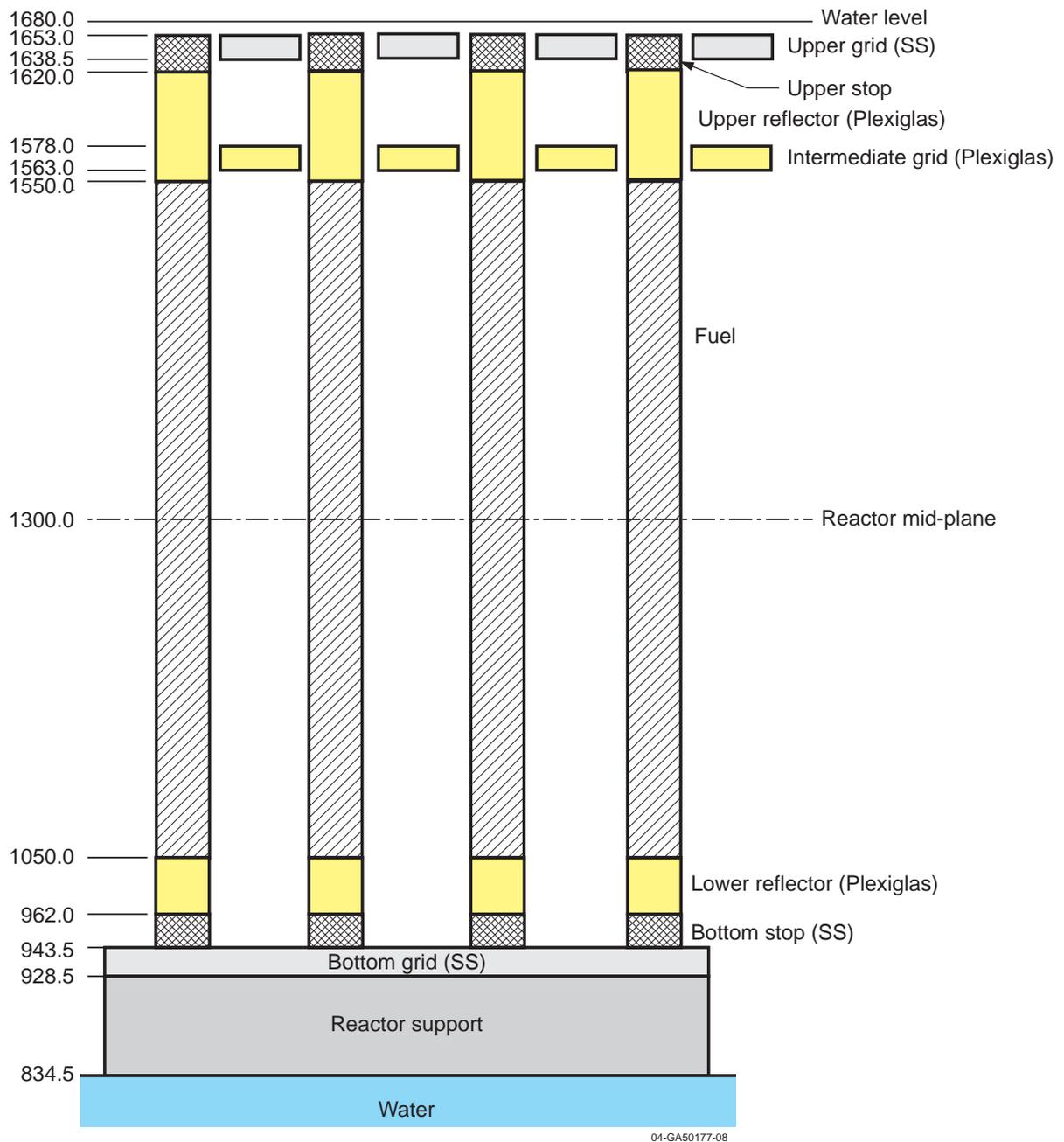
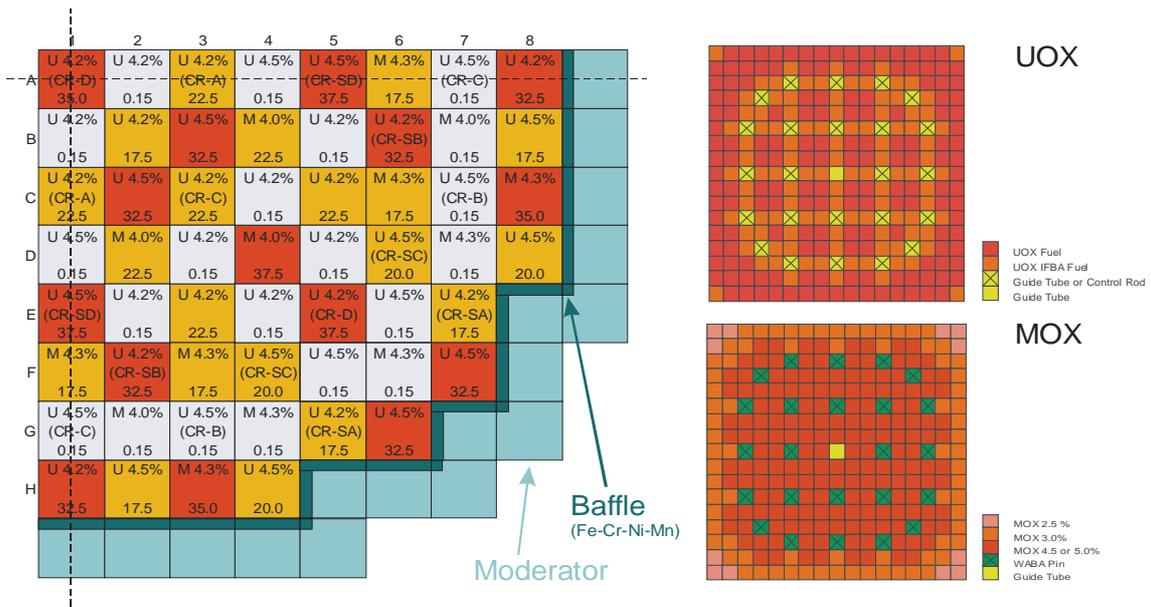


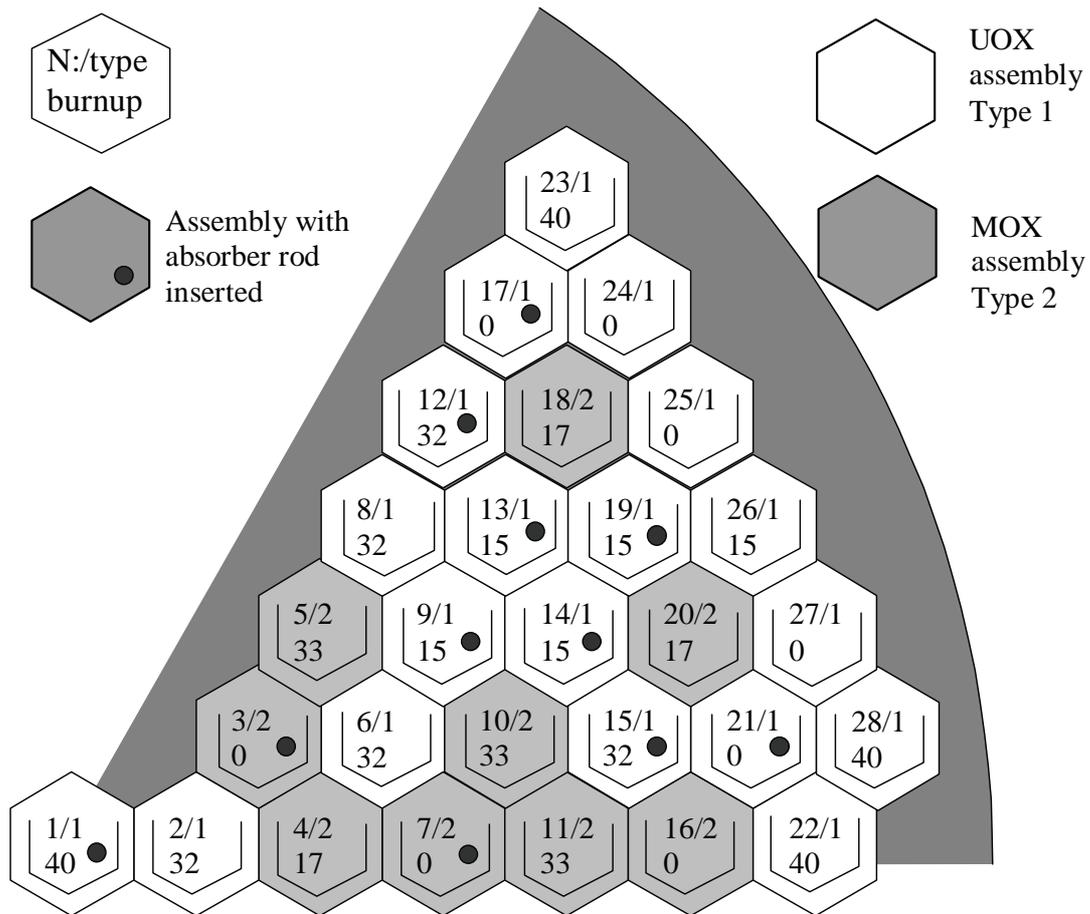
Abb. 2-3: Horizontaler Querschnitt durch die VENUS-7-Anordnungen.



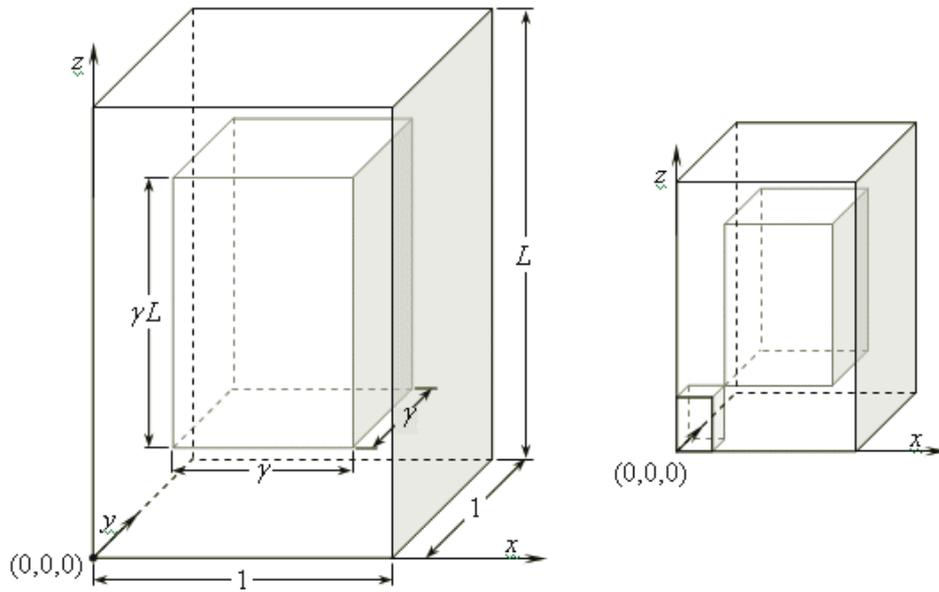
**Abb. 2-4: Vertikaler Querschnitt durch die VENUS-7-Anordnungen.**



**Abb. 2-5: Kernanordnung und Brennelemente des DWR-MOX/ $\text{UO}_2$ -Kerntransientenbenchmarks. Die gestrichelten Linien links kennzeichnen die Symmetrieachsen in radialer Richtung.**



**Abb. 2-6: Kernanordnung des WWER-1000-Ganzkernbenchmarks.**



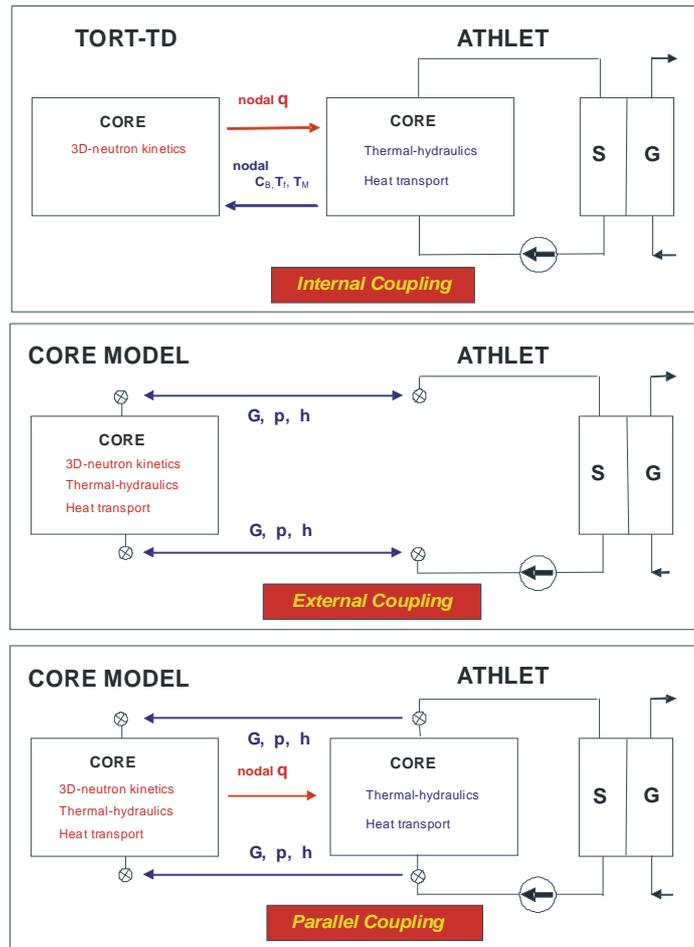
**Abb. 2-7: Geometrie des Benchmarks „Quantifizierung der Genauigkeit von 3D-Transportmethoden“ (links) und Ort der Einheits-Neutronenquelle (rechts).**

0	10	41	73.6	80.55	92.05	100	117	134	151	168	185	192.95	204.45	211.4	225	243.6	260.6	275	287.5	292.5	310	328	462	463			
-235	10	31	32.6	6.95	11.5	7.95	17	17	17	17	17	7.95	11.5	6.95	13.6	18.6	17	14.4	12.5	5	17.5	18	134	1			
-200	35	TP	TP	TP	TP	TP	TP	TP	TP	TP	TP	TP	TP	TP	TP	TP	TP	TP	TP	TP	TP	He	CB	He	RPV	Air	RCCS
-150	50	CC	CC	CC	CC	RSS	CC	TR	TR	TR	TR	TR	SR	RCS	SR	SR	SR	SR	SR	SR	He	CB	He	RPV	Air	RCCS	
-100	50	CC	CC	CC	CC	RSS	CC	TR	TR	TR	TR	TR	SR	RCS	SR	SR	SR	SR	SR	SR	He	CB	He	RPV	Air	RCCS	
-50	50	CC	CC	CC	CC	RSS	CC	TR	TR	TR	TR	TR	SR	RCS	SR	SR	SR	SR	SR	SR	He	CB	He	RPV	Air	RCCS	
0	50	CC	CC	CC	CC	RSS	CC	V	V	V	V	V	SR	RCS	SR	SR	SR	SR	SR	SR	He	CB	He	RPV	Air	RCCS	
50	50	CC	CC	CC	CC	RSS	CC	F	F	F	F	F	IP	RCS	IP	IP	IP	RC	SR	He	CB	He	RPV	Air	RCCS		
100	50	CC	CC	CC	CC	RSS	CC	F	F	F	F	F	SR	RCS	SR	SR	SR	RC	SR	He	CB	He	RPV	Air	RCCS		
150	50	CC	CC	CC	CC	RSS	CC	F	F	F	F	F	SR	RCS	SR	SR	SR	RC	SR	He	CB	He	RPV	Air	RCCS		
200	50	CC	CC	CC	CC	RSS	CC	F	F	F	F	F	SR	RCS	SR	SR	SR	RC	SR	He	CB	He	RPV	Air	RCCS		
250	50	CC	CC	CC	CC	RSS	CC	F	F	F	F	F	SR	RCS	SR	SR	SR	RC	SR	He	CB	He	RPV	Air	RCCS		
300	50	CC	CC	CC	CC	RSS	CC	F	F	F	F	F	SR	RCS	SR	SR	SR	RC	SR	He	CB	He	RPV	Air	RCCS		
350	50	CC	CC	CC	CC	RSS	CC	F	F	F	F	F	SR	RCS	SR	SR	SR	RC	SR	He	CB	He	RPV	Air	RCCS		
400	50	CC	CC	CC	CC	RSS	CC	F	F	F	F	F	SR	RCS	SR	SR	SR	RC	SR	He	CB	He	RPV	Air	RCCS		
450	50	CC	CC	CC	CC	RSS	CC	F	F	F	F	F	SR	RCS	SR	SR	SR	RC	SR	He	CB	He	RPV	Air	RCCS		
500	50	CC	CC	CC	CC	RSS	CC	F	F	F	F	F	SR	RCS	SR	SR	SR	RC	SR	He	CB	He	RPV	Air	RCCS		
550	50	CC	CC	CC	CC	RSS	CC	F	F	F	F	F	SR	RCS	SR	SR	SR	RC	SR	He	CB	He	RPV	Air	RCCS		
600	50	CC	CC	CC	CC	RSS	CC	F	F	F	F	F	SR	RCS	SR	SR	SR	RC	SR	He	CB	He	RPV	Air	RCCS		
650	50	CC	CC	CC	CC	RSS	CC	F	F	F	F	F	SR	RCS	SR	SR	SR	RC	SR	He	CB	He	RPV	Air	RCCS		
700	50	CC	CC	CC	CC	RSS	CC	F	F	F	F	F	SR	RCS	SR	SR	SR	RC	SR	He	CB	He	RPV	Air	RCCS		
750	50	CC	CC	CC	CC	RSS	CC	F	F	F	F	F	SR	RCS	SR	SR	SR	RC	SR	He	CB	He	RPV	Air	RCCS		
800	50	CC	CC	CC	CC	RSS	CC	F	F	F	F	F	SR	RCS	SR	SR	SR	RC	SR	He	CB	He	RPV	Air	RCCS		
850	50	CC	CC	CC	CC	RSS	CC	F	F	F	F	F	SR	RCS	SR	SR	SR	RC	SR	He	CB	He	RPV	Air	RCCS		
900	50	CC	CC	CC	CC	RSS	CC	F	F	F	F	F	SR	RCS	SR	SR	SR	RC	SR	He	CB	He	RPV	Air	RCCS		
950	50	CC	CC	CC	CC	RSS	CC	F	F	F	F	F	SR	RCS	SR	SR	SR	RC	SR	He	CB	He	RPV	Air	RCCS		
1000	50	CC	CC	CC	CC	RSS	CC	F	F	F	F	F	SR	RCS	SR	SR	SR	RC	SR	He	CB	He	RPV	Air	RCCS		
1050	50	CC	CC	CC	CC	RSS	CC	F	F	F	F	F	SR	RCS	SR	SR	SR	RC	SR	He	CB	He	RPV	Air	RCCS		
1100	50	CC	CC	CC	CC	RSS	CC	F	F	F	F	F	SR	RCS	SR	SR	SR	RC	SR	He	CB	He	RPV	Air	RCCS		
1150	50	CC	CC	CC	CC	RSS	CC	BR	BR	BR	BR	BR	SR	RCS	SR	SR	SR	RC	SR	He	CB	He	RPV	Air	RCCS		
1200	50	CC	CC	CC	CC	RSS	CC	BR	BR	BR	BR	BR	SR	RCS	SR	SR	SR	RC	SR	He	CB	He	RPV	Air	RCCS		
1250	50	CC	CC	CC	CC	RSS	CC	BR	BR	BR	BR	BR	SR	RCS	SR	SR	SR	RC	SR	He	CB	He	RPV	Air	RCCS		
1300	50	CC	CC	CC	CC	CC	CC	BR	BR	BR	BR	BR	SR	SR	SR	SR	SR	IP	SR	He	CB	He	RPV	Air	RCCS		
1350	50	CC	CC	CC	CC	CC	CC	BR	BR	BR	BR	BR	SR	SR	SR	SR	SR	SR	SR	He	CB	He	RPV	Air	RCCS		
1400	50	CC	CC	CC	CC	CC	CC	OP	OP	OP	OP	OP	SR	SR	SR	SR	SR	SR	SR	He	CB	He	RPV	Air	RCCS		
1450	50	CC	CC	CC	CC	CC	CC	BR	BR	BR	BR	BR	SR	SR	SR	SR	SR	SR	SR	He	CB	He	RPV	Air	RCCS		
1500	50	CC	CC	CC	CC	CC	CC	BR	BR	BR	BR	BR	SR	SR	SR	SR	SR	SR	SR	He	CB	He	RPV	Air	RCCS		
1535	35	BP	BP	BP	BP	BP	BP	BP	BP	BP	BP	BP	BP	BP	BP	BP	BP	BP	BP	BP	BP	BP	BP	BP	BP	BP	

**CORE LAYOUT DEFINITIONS**

F	REACTOR CORE CONTAINING THE FUEL
V	HELIUM GAP BETWEEN FUEL AND TOP REFLECTOR: VOID
CC	CENTRAL REFLECTOR: GRAPHITE
TR	TOP REFLECTOR: GRAPHITE
BR	BOTTOM REFLECTOR: GRAPHITE
SR	SIDE REFLECTOR: GRAPHITE
RCS	REACTOR CONTROL SYSTEM CHANNEL : GRAPHITE / GREY CURTAIN AREA
RSS	RESERVE SHUTDOWN SYSTEM CHANNEL : GRAPHITE / GREY CURTAIN AREA
IP	INLET PLENUM TOP / BOTTOM : GRAPHITE
RC	RISER CHANNEL IN SIDE REFLECTOR : GRAPHITE
OP	OUTLET PLENUM BOTTOM : GRAPHITE
He	STAGNANT HELIUM
TP	TOP PLATE : IRON : ADIABATIC BOUNDARY
BP	BOTTOM PLATE : IRON : ADIABATIC BOUNDARY
CB	CORE BARREL : IRON
RPV	REACTOR PRESSURE VESSEL : IRON
Air	STAGNANT AIR
RCCS	REACTOR CAVITY COOLING SYSTEM : 20C TH BOUNDARY
---	NEUTRONIC BOUNDARY BONDITIONS

**Abb. 2-8: Geometrie und Materialspezifikation des PBMR400 Transient Benchmarks.**



**Abb. 3-1:** Drei verschiedene Arten, einen Thermohydraulik-Systemcode mit einem 3D-Neutronenkinetikcode zu koppeln. Für TORT-TD/ATHLET wurde die obere Variante realisiert.

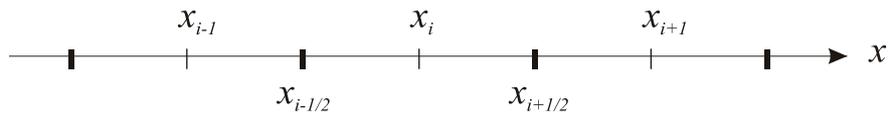


Abb. 3-2: Mascheneinteilung für 1D-Transportproblem.

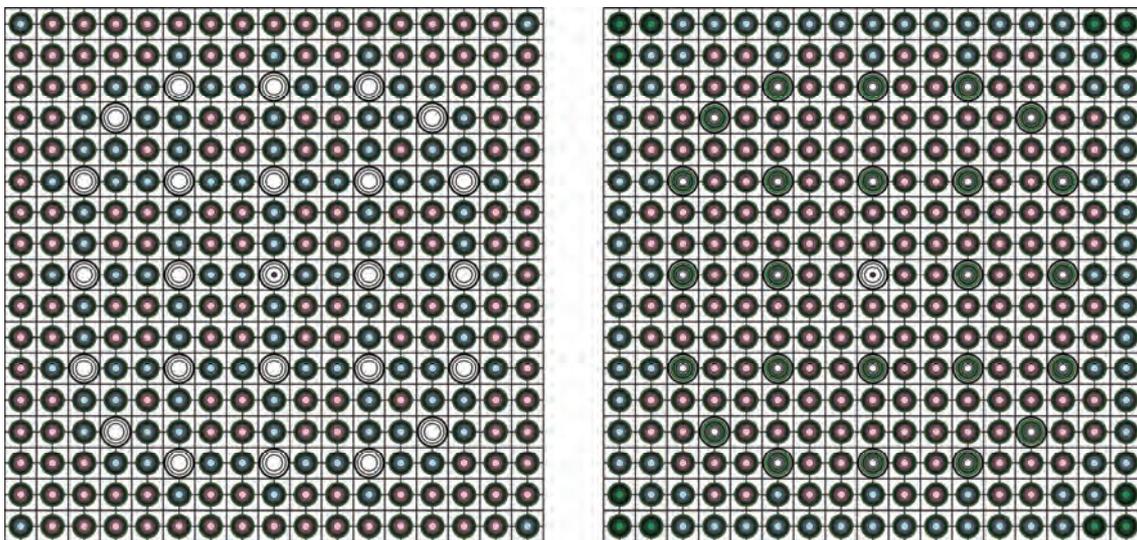
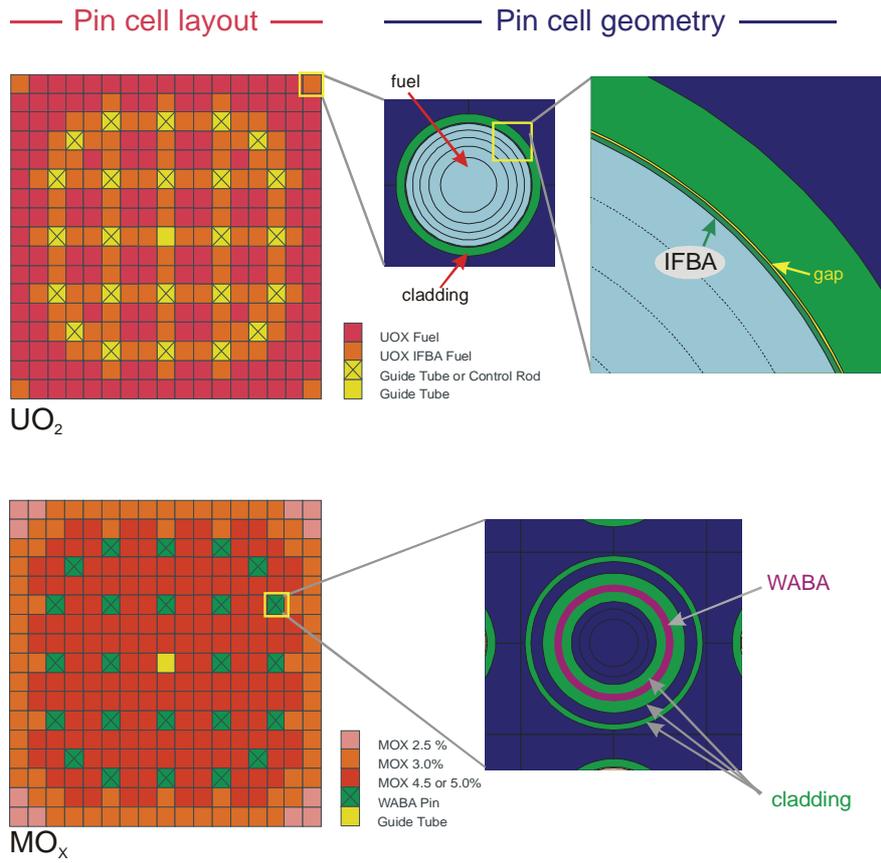


Abb. 3-3: Modellierung des  $\text{UO}_2$ -Brennelements mit ausgefahrenen Steuerstäben (links) und des MOX-Brennelements (rechts) in HELIOS.



**Abb. 3-4: Stabzellenlayout des UO<sub>2</sub>- und MOX-Brennelements mit IFBA- bzw. WABA-Stabzellgeometrie.**

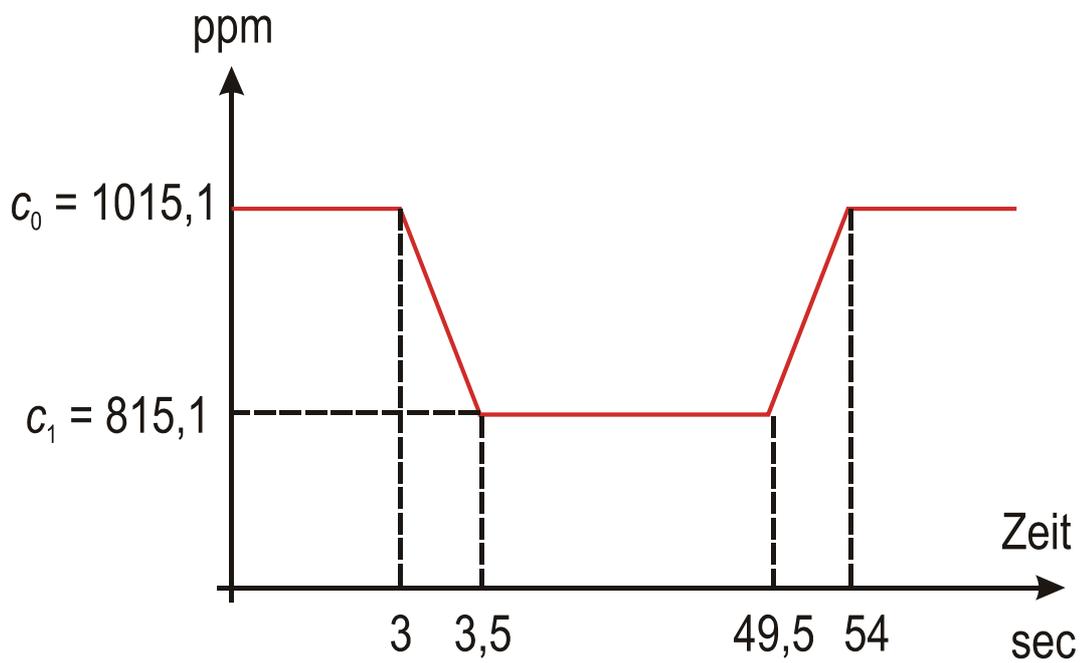
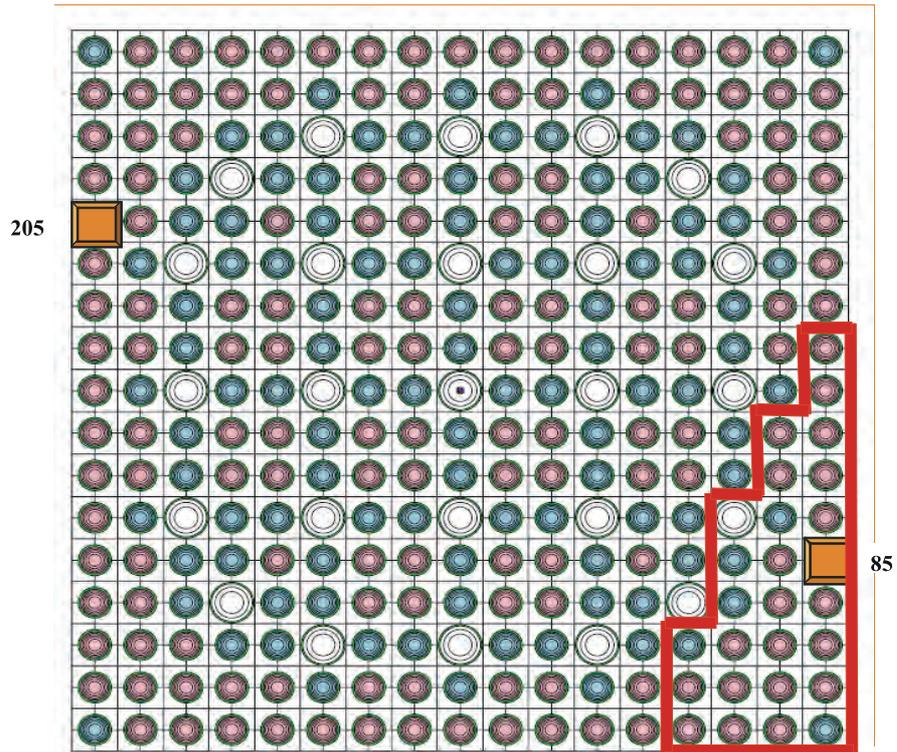
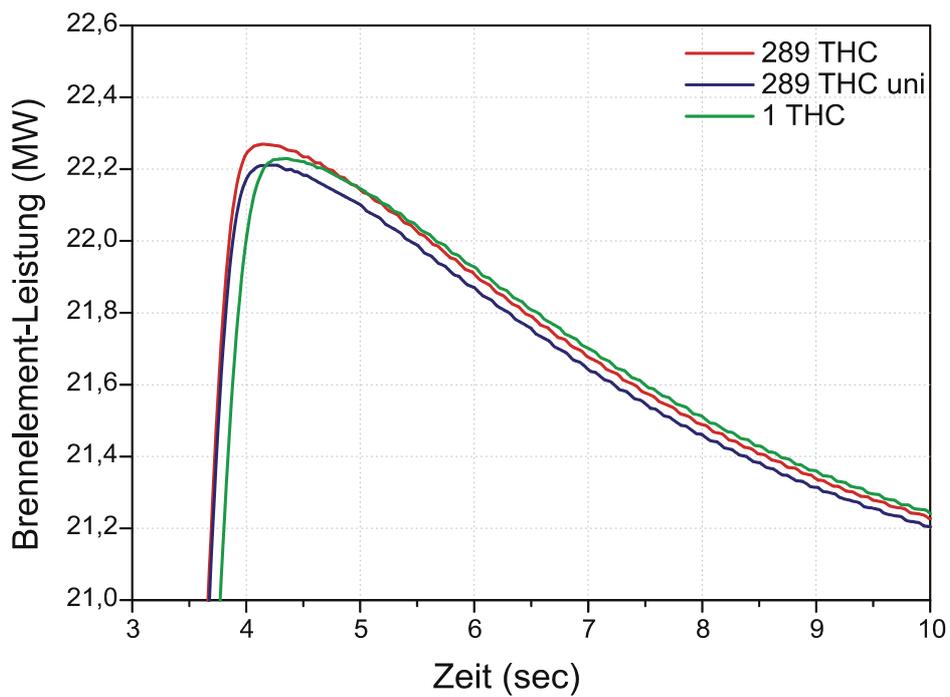
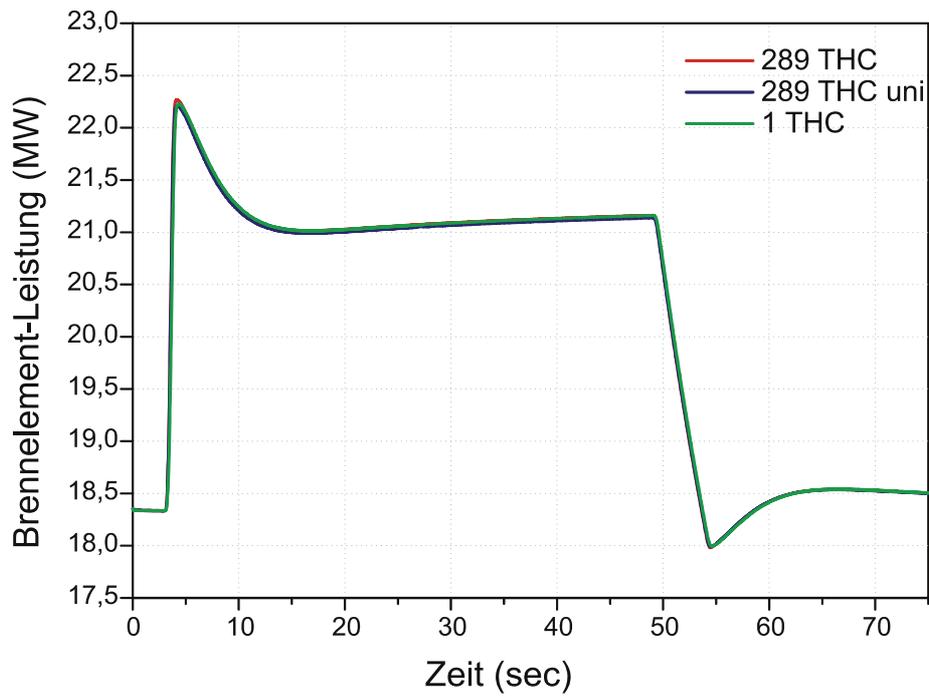


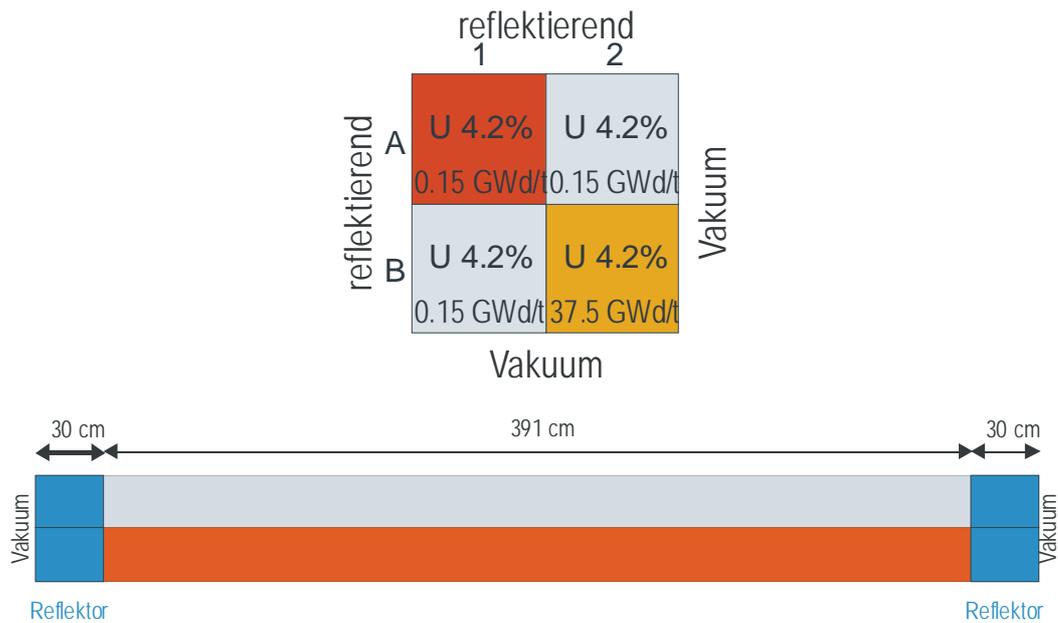
Abb. 3-5:  $\text{UO}_2$ -Brennelement, in dem die rot umrandete Gruppe von 27 Stabzellen der unten dargestellten zeitlichen Änderung der Bor-konzentration unterworfen wird.



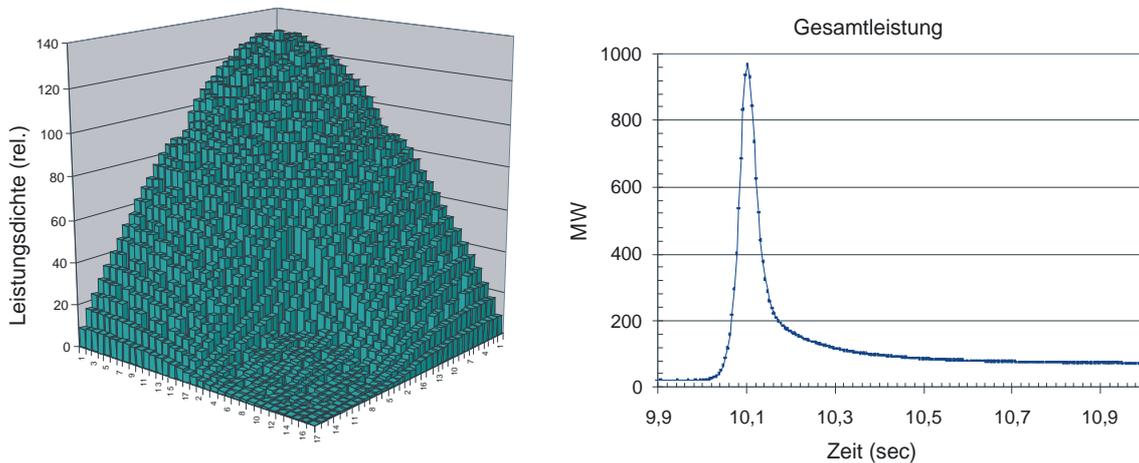
**Abb. 3-6:** Zeitlicher Verlauf der Gesamtleistung im Brennelement während der Transiente für die drei ATHLET-Modelle. Die Grafik unten zeigt einen vergrößerten Ausschnitt in der Umgebung des Leistungsmaximums.



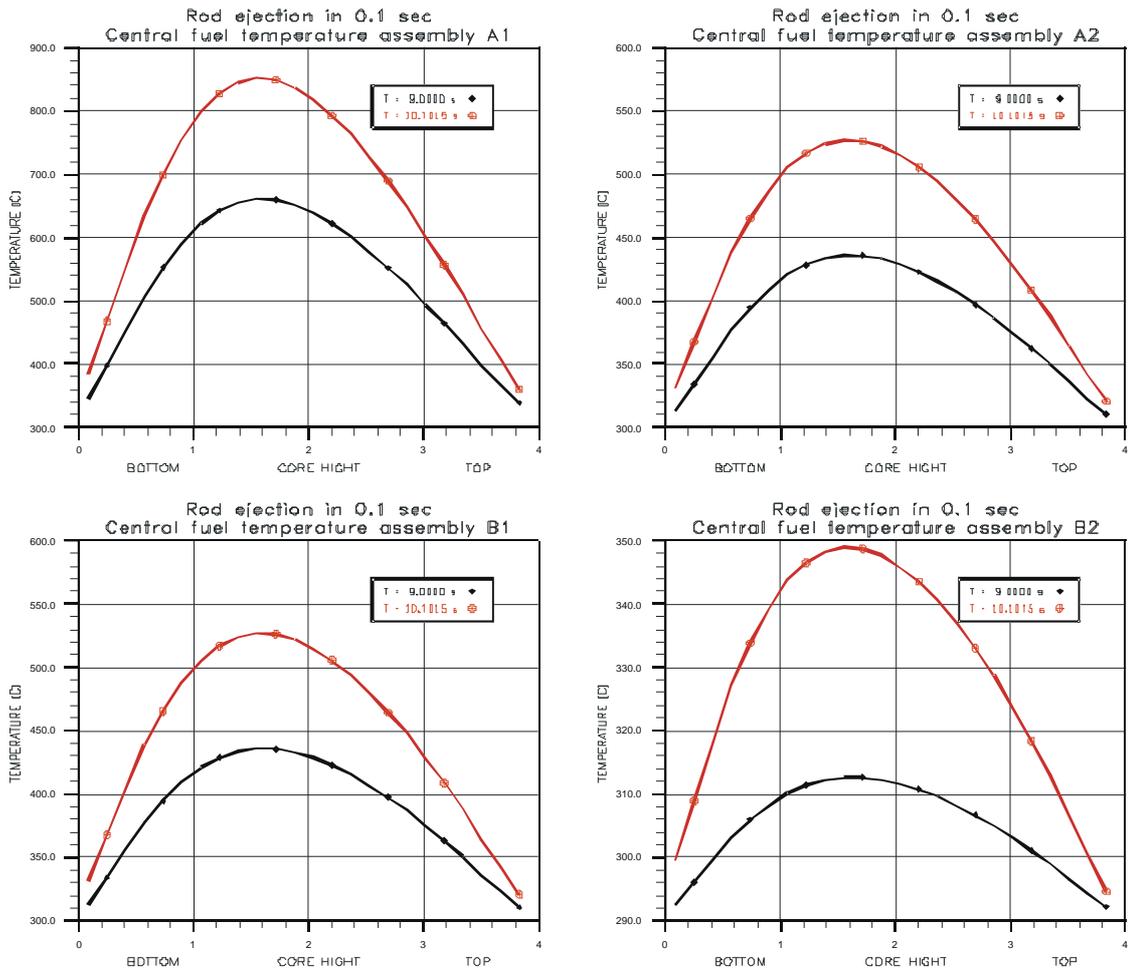
**Abb. 3-7:** Axiale Leistungsprofile in den thermohydraulischen Kanälen der Stabzellen 85 (rot) und 205 (blau) zum Zeitpunkt  $t = 13$  sec.



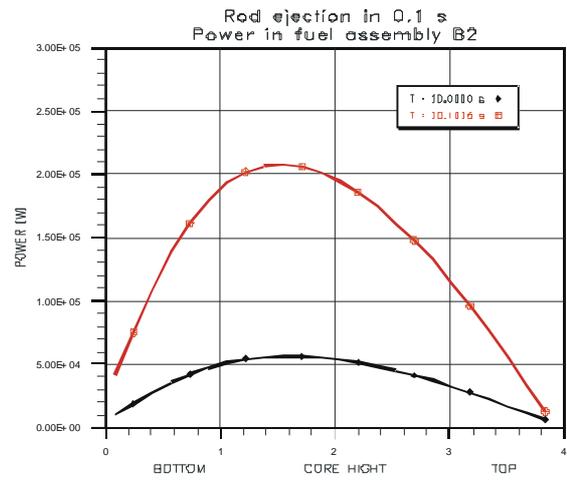
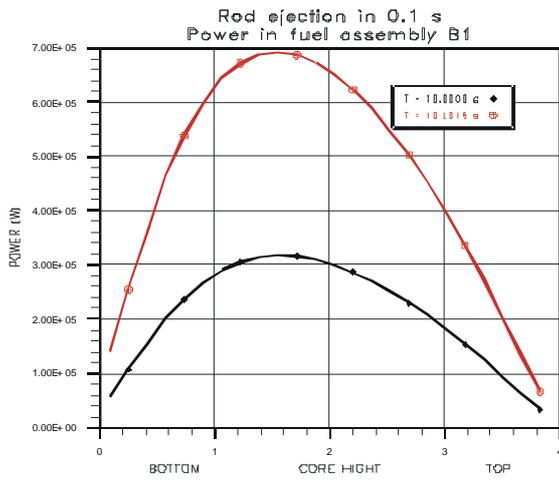
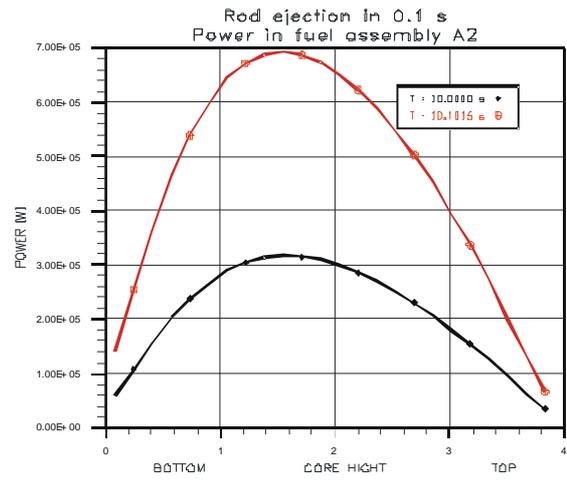
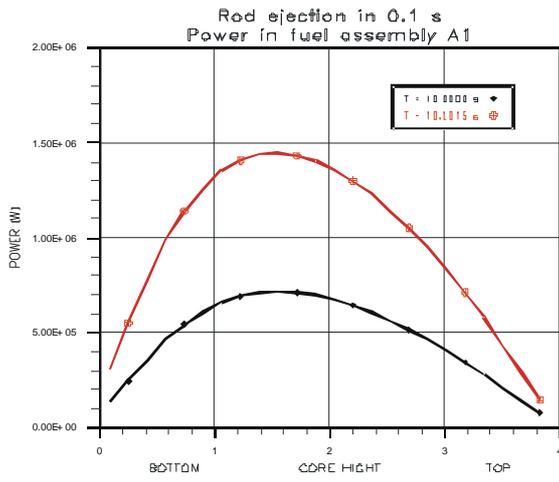
**Abb. 3-8:** 2x2- Anordnung von UO<sub>2</sub>-Brennelementen. Oben: Radialer Querschnitt. Unten: Axialer Querschnitt in liegender Darstellung mit axialen Reflektoren.



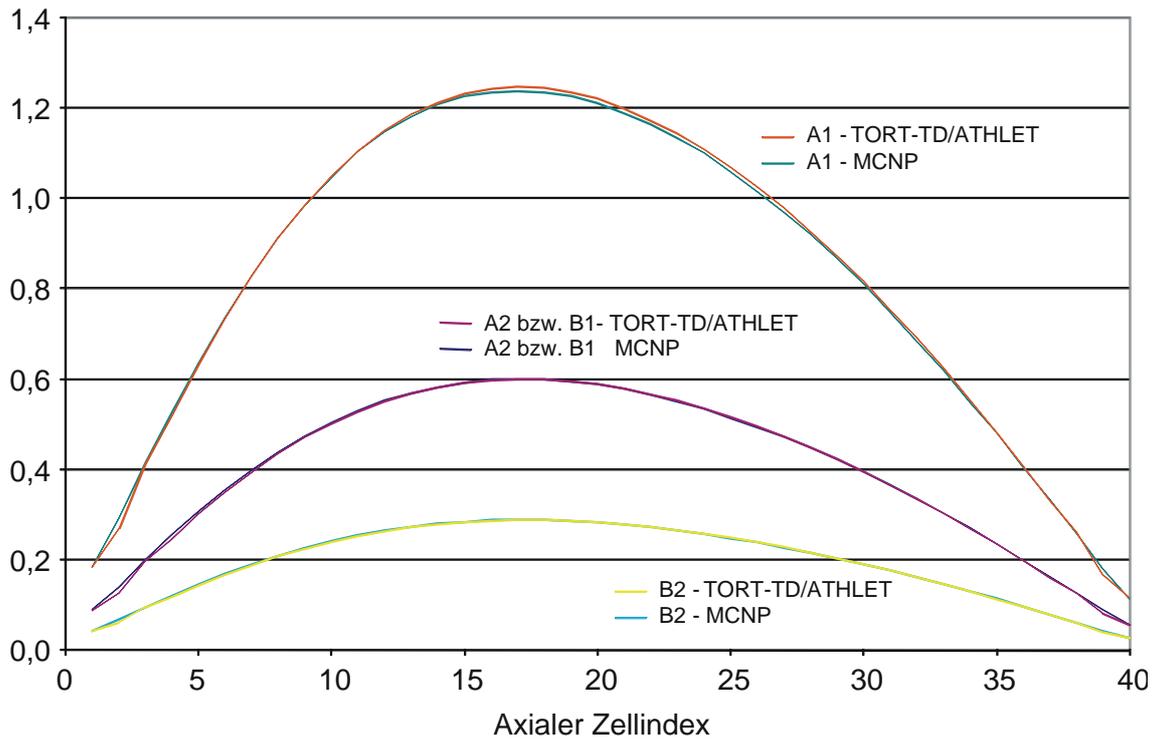
**Abb. 3-9:** Ergebnisse für die Steuerelementauswurf-Transiente in der 2x2-Brennelement-Anordnung von Abb. 3-8. Links: Stabzellenweise Leistungsverteilung unmittelbar vor Beginn der Transiente. Rechts: Zeitverlauf der Gesamtleistung während der Transiente.



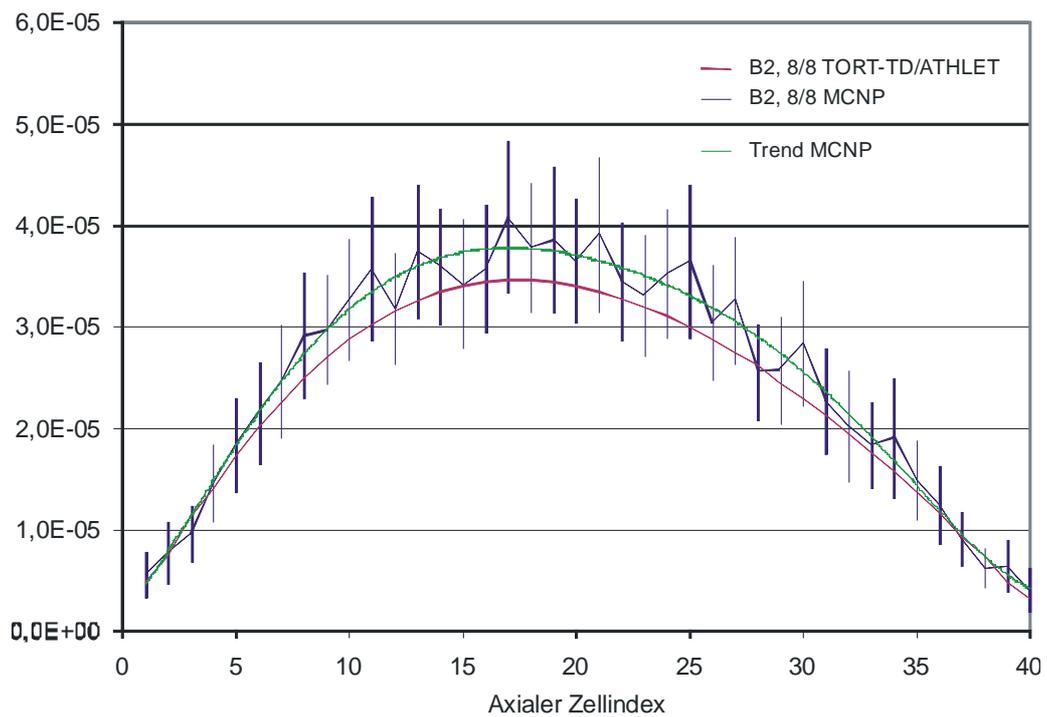
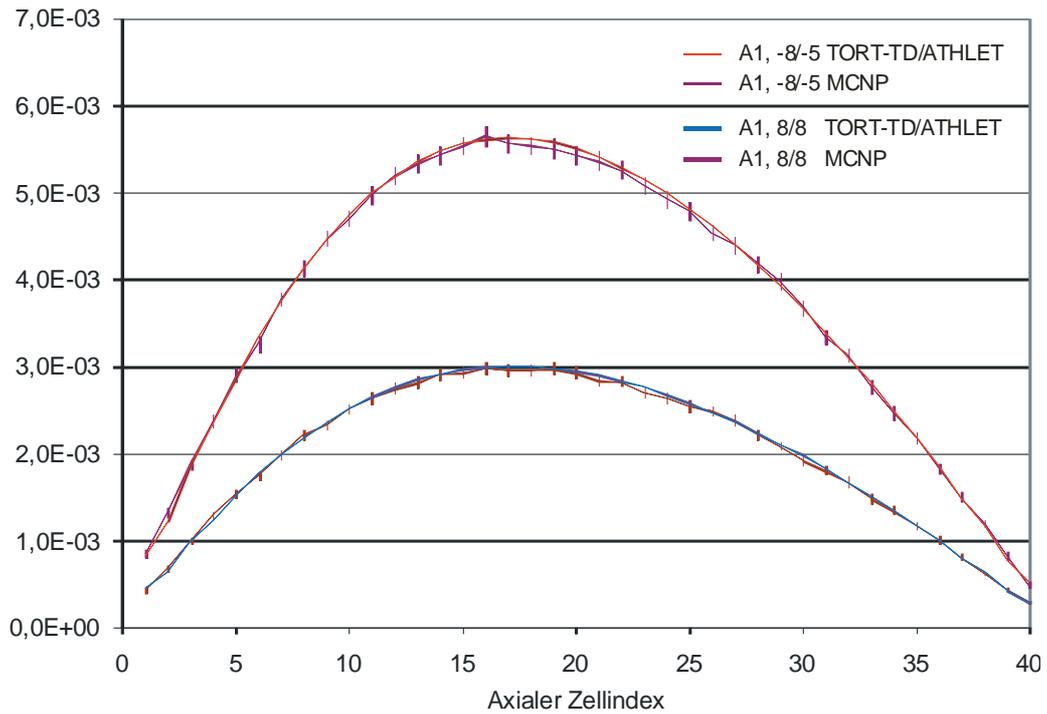
**Abb. 3-10: Axiale Profile der Brennelementgemittelten zentralen Brennstofftemperatur für die Steuerelementauswurftransiente in der 2x2-Brennelement-Anordnung. Schwarze Kurven: Ausgangszustand. Rote Kurven: während der Transiente kurz vor dem Leistungsmaximum. Die Anordnung der vier Grafiken korrespondiert mit der Brennelement-Anordnung in Abb. 3-8.**



**Abb. 3-11:** Wie Abb. 3-10, hier jedoch brennelementgemittelte axiale Leistungsprofile.



**Abb. 3-12: Über einzelne Brennelemente gemittelte axiale Leistungsprofile aus der TORT-TD/ATHLET-Rechnung im Vergleich zur MCNP-Lösung unter Verwendung nuklearer JEF-2.2-Punktdaten und der Verteilung der thermohydraulischen Parameter aus der TORT-TD/ATHLET-Analyse. (Beachte: Die Brennelemente A2 und B1 sind symmetrisch äquivalent.)**



**Abb. 3-13:** Wie Abb. 3-12, jedoch oben für ausgewählte Stabzellen im Innenraum (Brennelement A1) und unten für die Zelle im rechten unteren Eck von Brennelement B2. Die senkrechten Balken sind ein Maß für die statistische Unsicherheit der Monte-Carlo-Lösung.

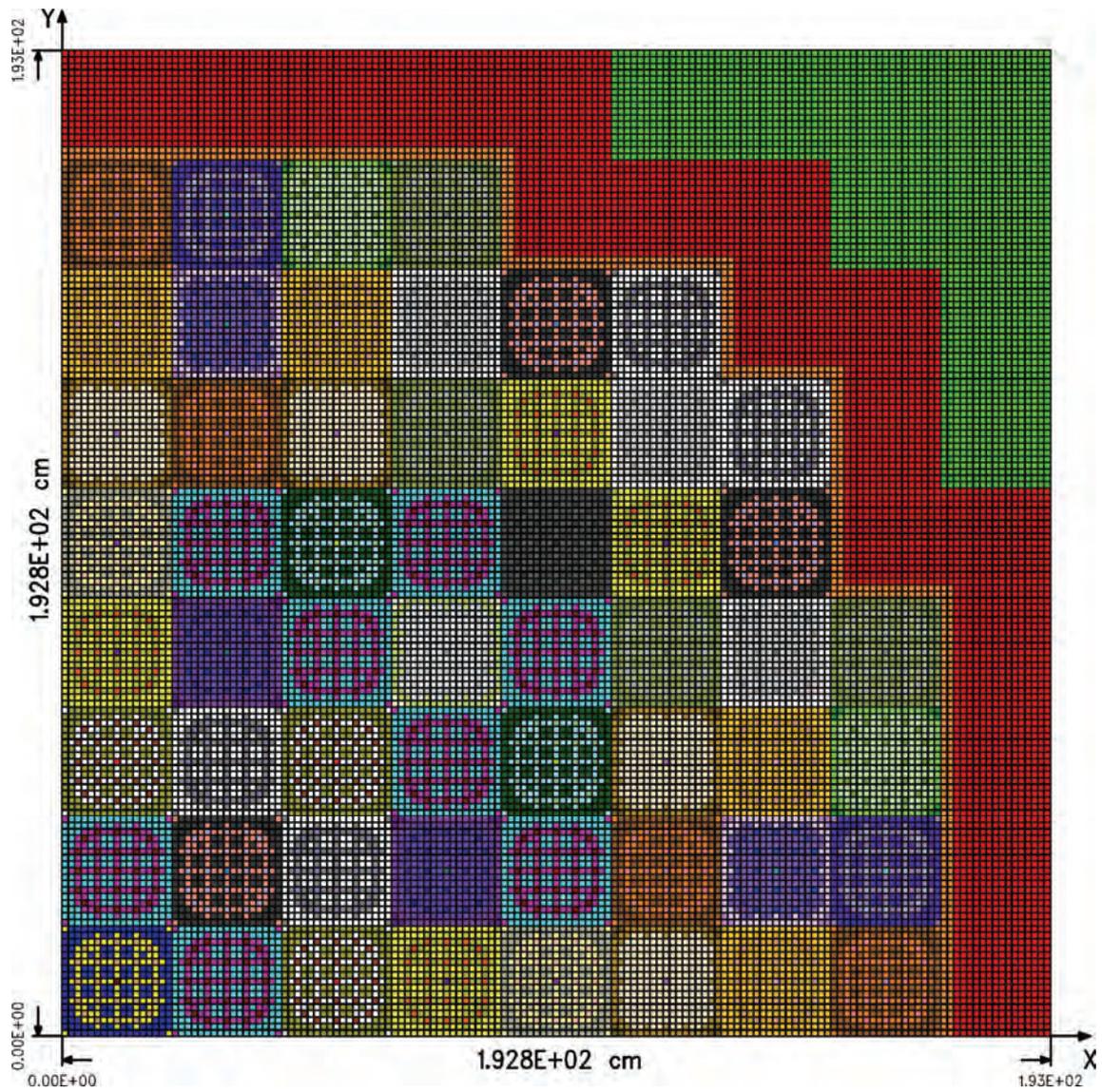
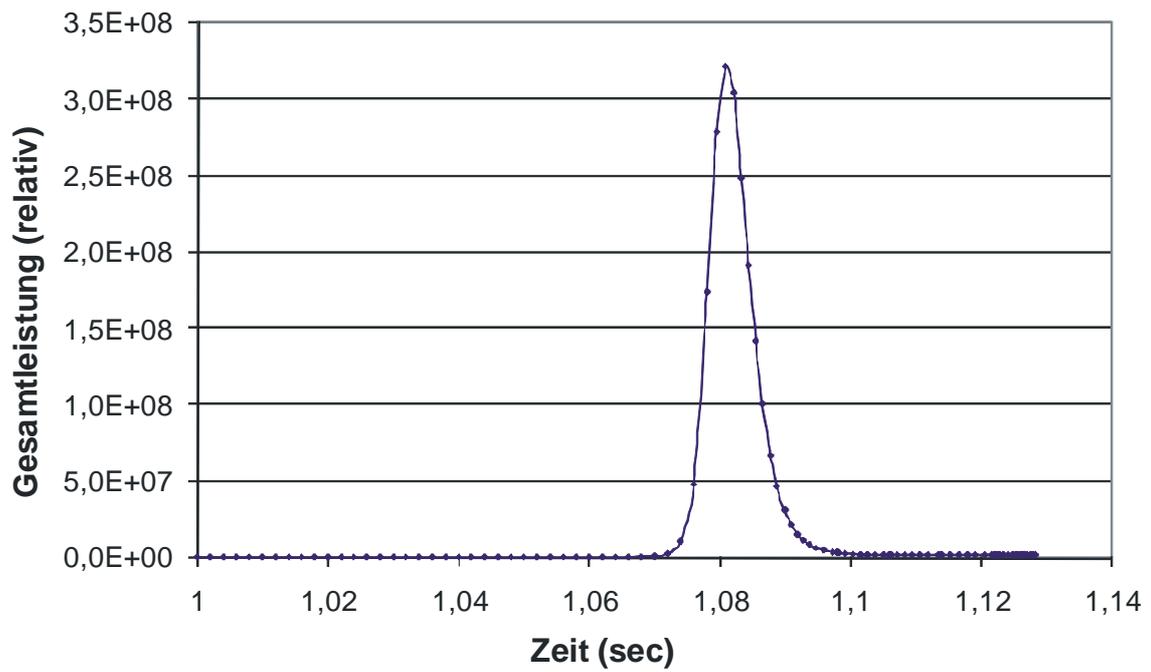
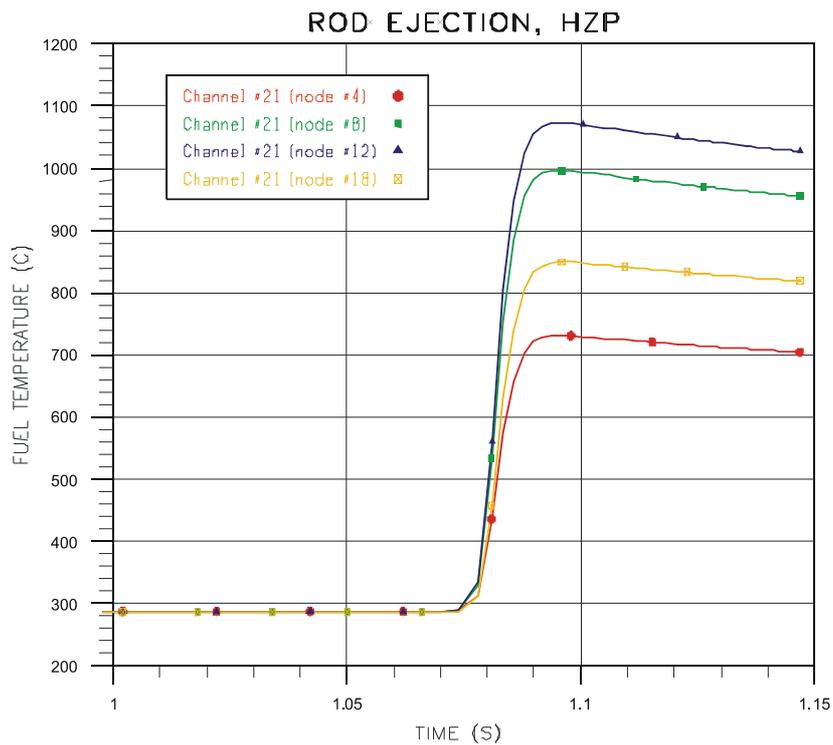
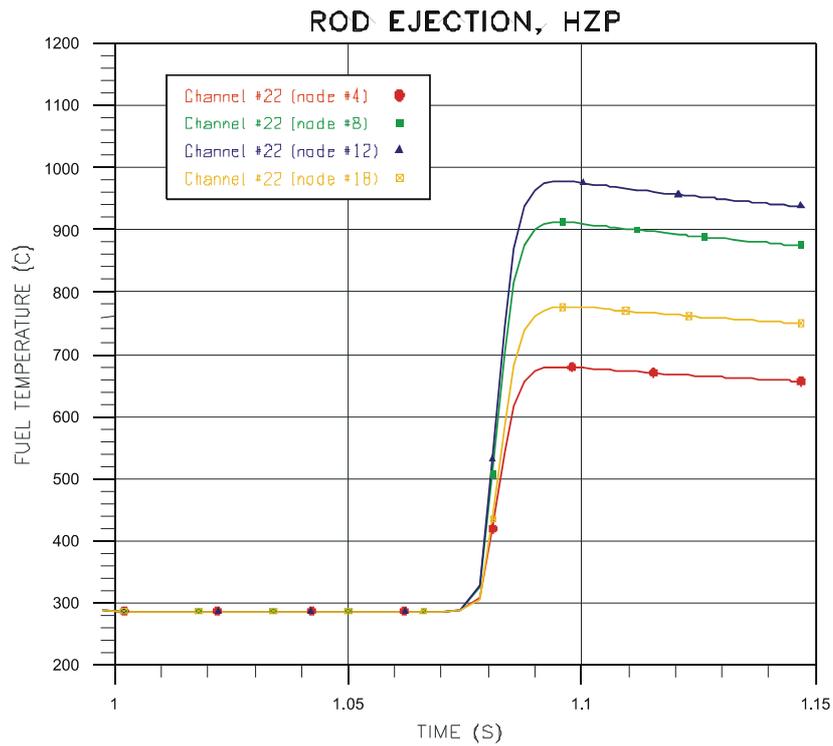


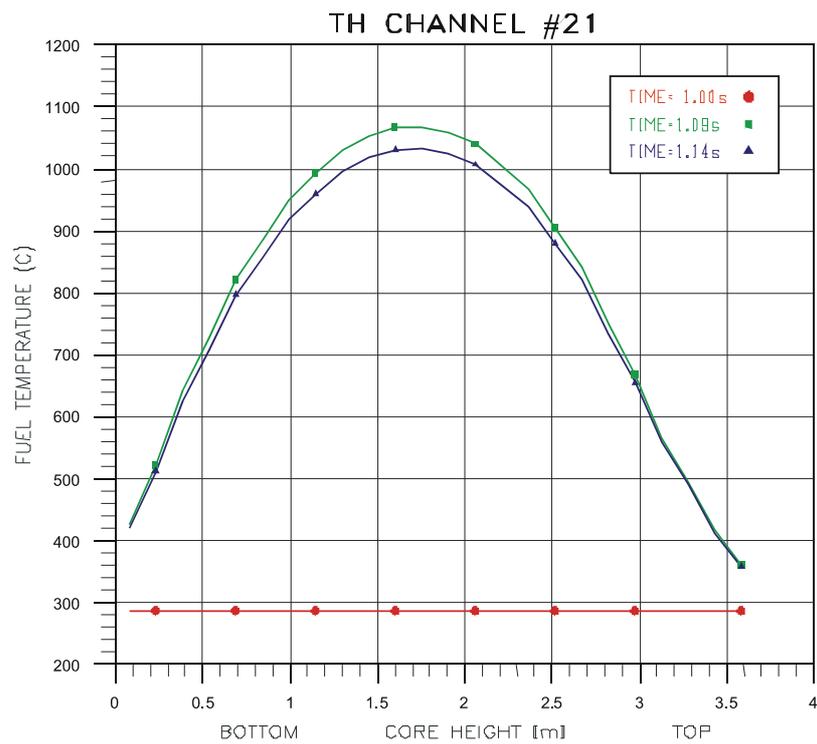
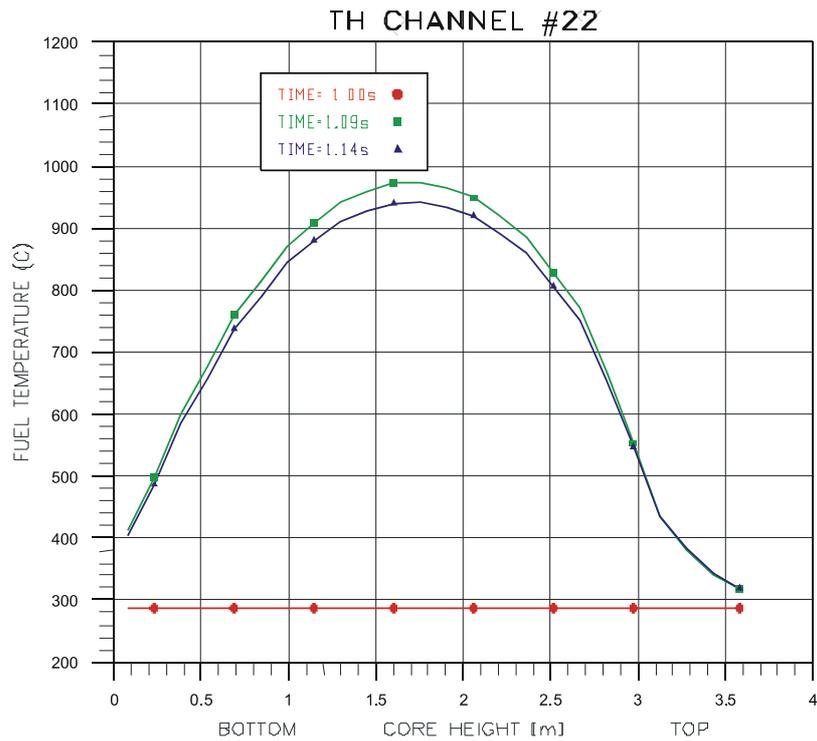
Abb. 3-14: Materialkarte des Purdue-Viertelkerns in TORT-TD.



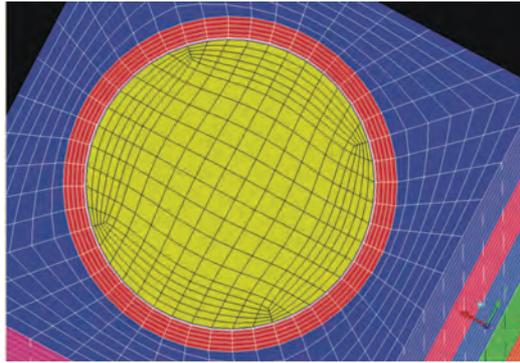
**Abb. 3-15:** Zeitlicher Verlauf der auf den Ausgangszustand normierten Gesamtleistung während der Steuerelementauswurf-Transiente im Viertelkern.



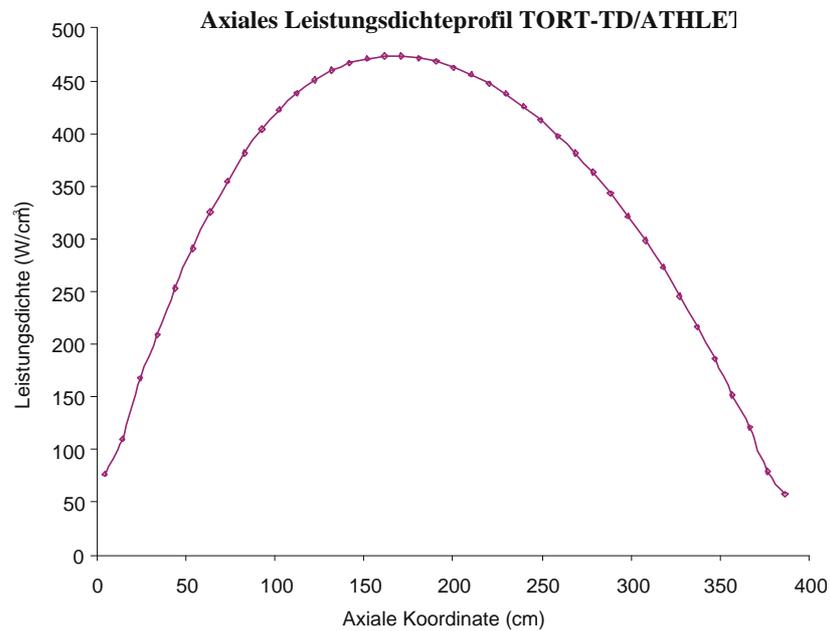
**Abb. 3-16: Zeitverlauf der mittleren Brennstofftemperatur in Brennelement E5 (oben) und dem dazu benachbarten in Position E4 (unten) für ausgewählte axiale Maschen.**



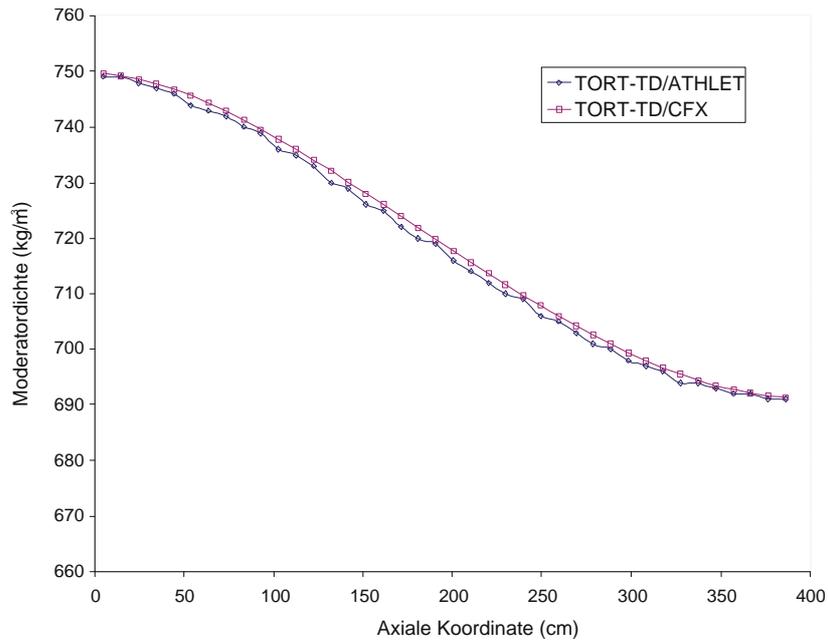
**Abb. 3-17: Axiale Profile der mittleren Brennstofftemperatur in Brennelement E5 (oben) und dem dazu benachbarten in Position E4 (unten) für ausgewählte Zeitpunkte.**



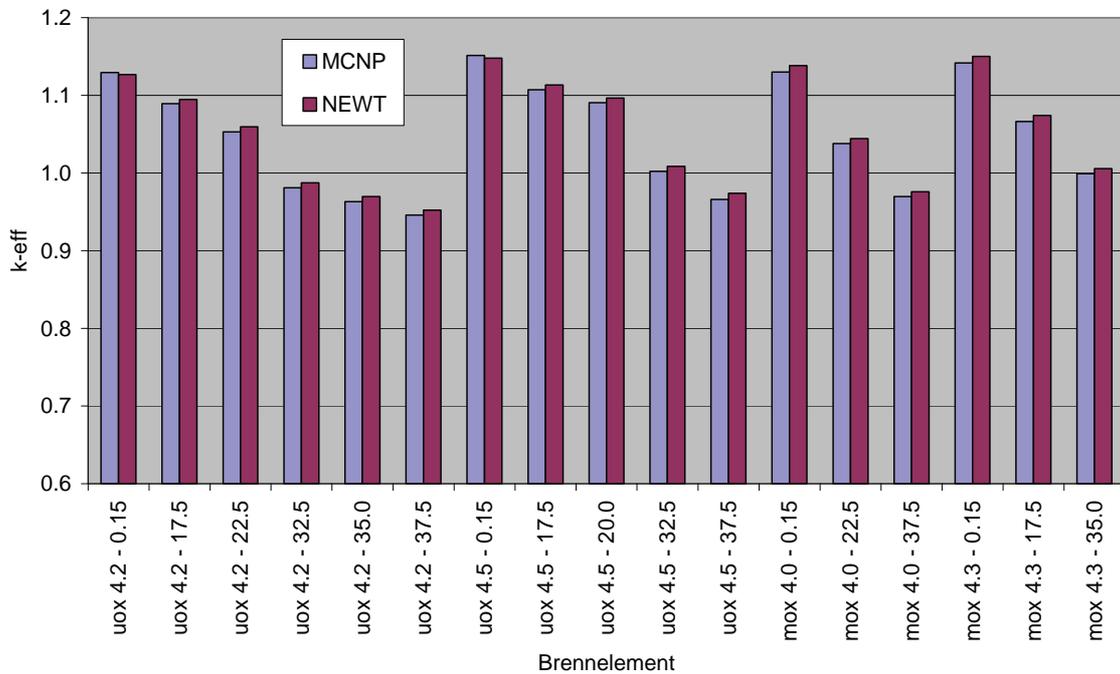
**Abb. 3-18:** Ausschnitt aus der Vernetzung der Stabzelle in CFX.



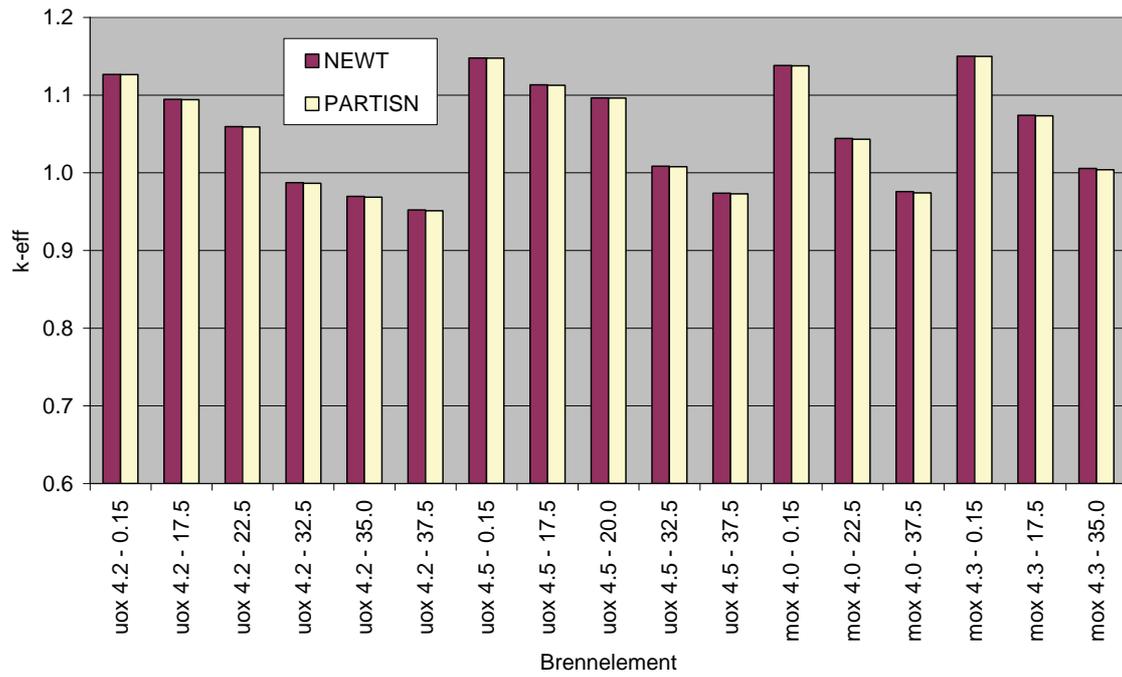
**Abb. 3-19:** Axiales Leistungsprofil aus der gekoppelten TORT-TD/ATHLET-Rechnung für eine einzelne Stabzelle.



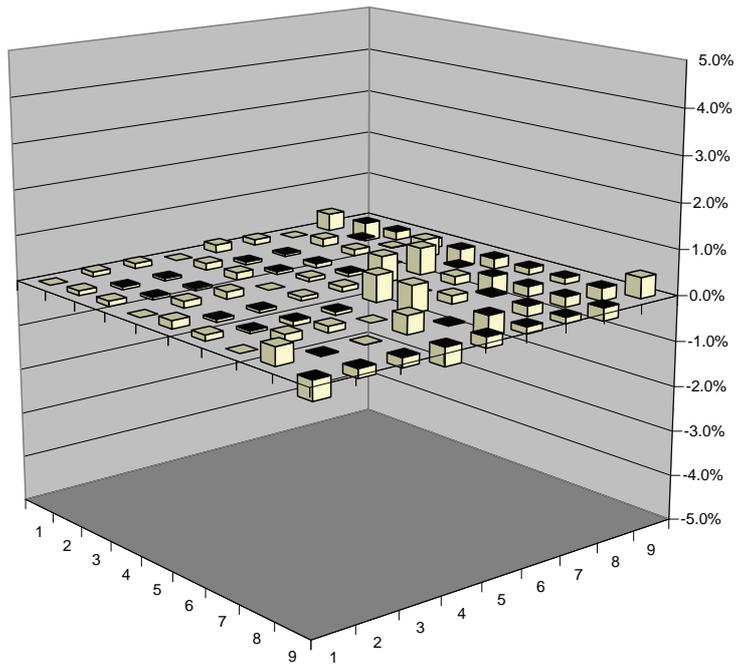
**Abb. 3-20: Axialer Verlauf der Moderatorordichte aus der CFX-Rechnung im Vergleich mit der ATHLET-Modellierung.**



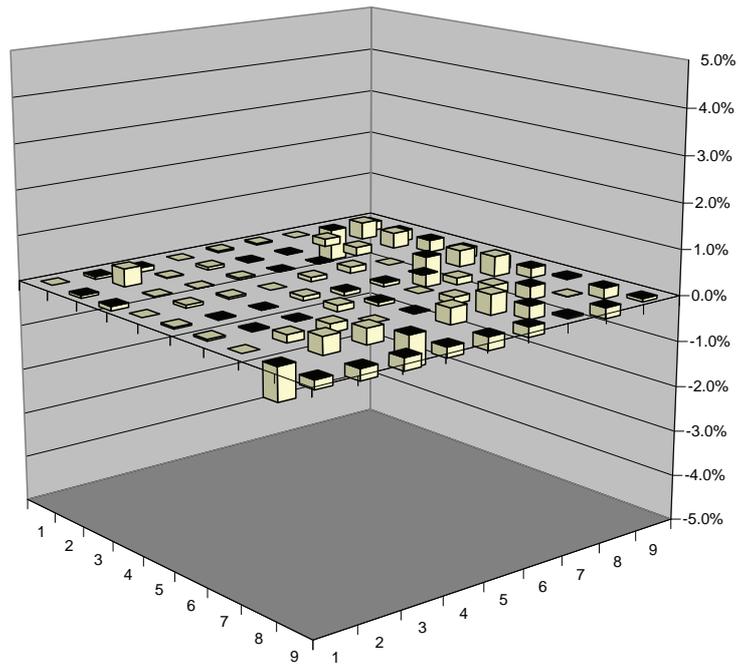
**Abb. 4-1: Multiplikationsfaktoren der unkontrollierten Brennelemente des DWR-MOX/ $UO_2$ -Kerntransientenbenchmarks, berechnet mit MCNP und NEWT.**



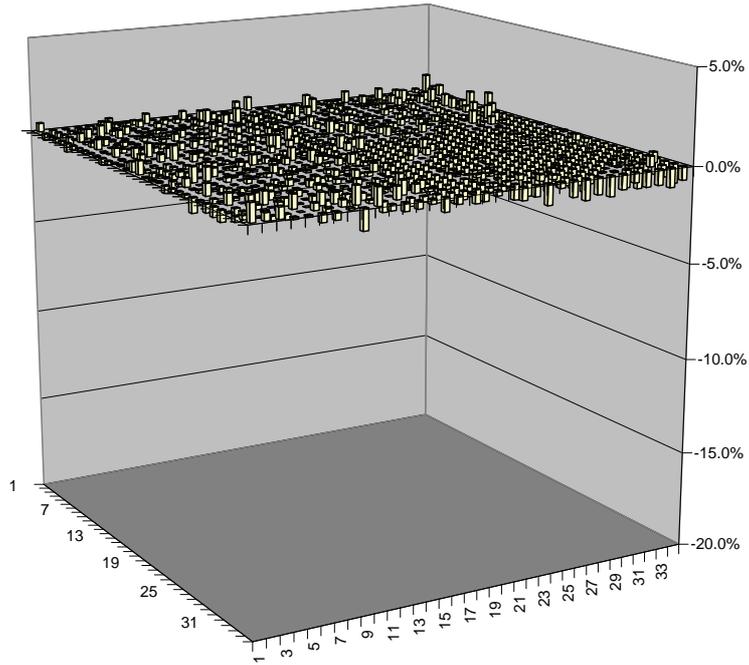
**Abb. 4-2: Multiplikationsfaktoren der unkontrollierten Brennelemente des DWR-MOX/ $UO_2$ -Kerntransientenbenchmarks, berechnet mit NEWT und PARTISN.**



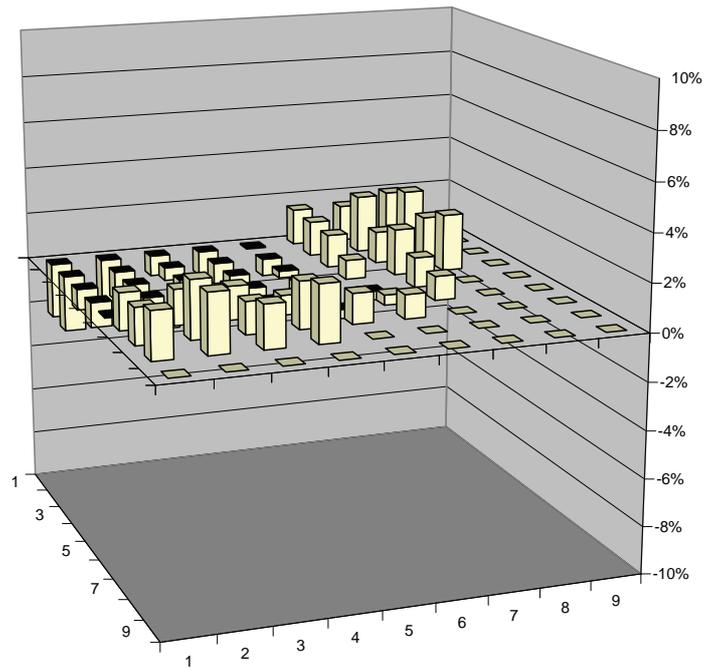
**Abb. 4-3: Unterschiede zwischen den mit PARTISN und NEWT berechneten Leistungsverteilungen eines frischen unkontrollierten Uranbrennelements des DWR-MOX/ $\text{UO}_2$ -Kerntransientenbenchmarks.**



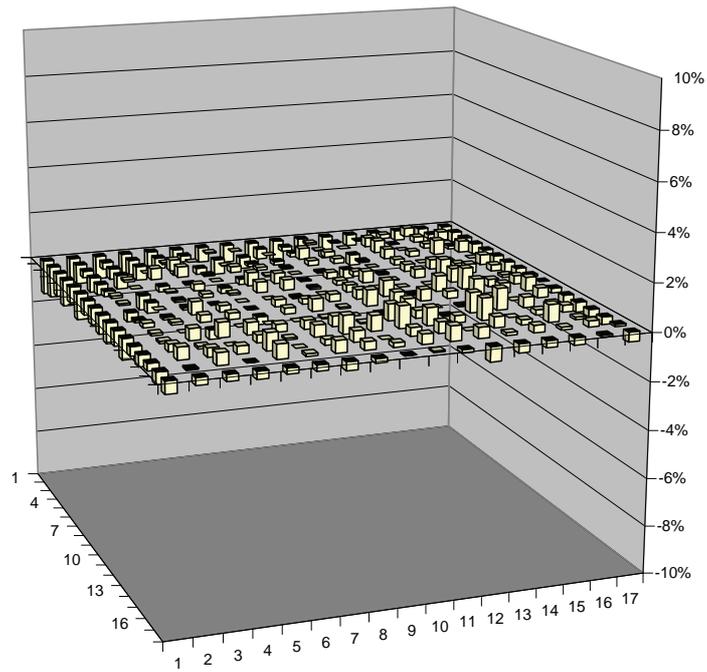
**Abb. 4-4: Unterschiede zwischen den mit PARTISN und NEWT berechneten Leistungsverteilungen eines frischen unkontrollierten MOX-Brennelements des DWR-MOX/UO<sub>2</sub>-Kerntransientenbenchmarks.**



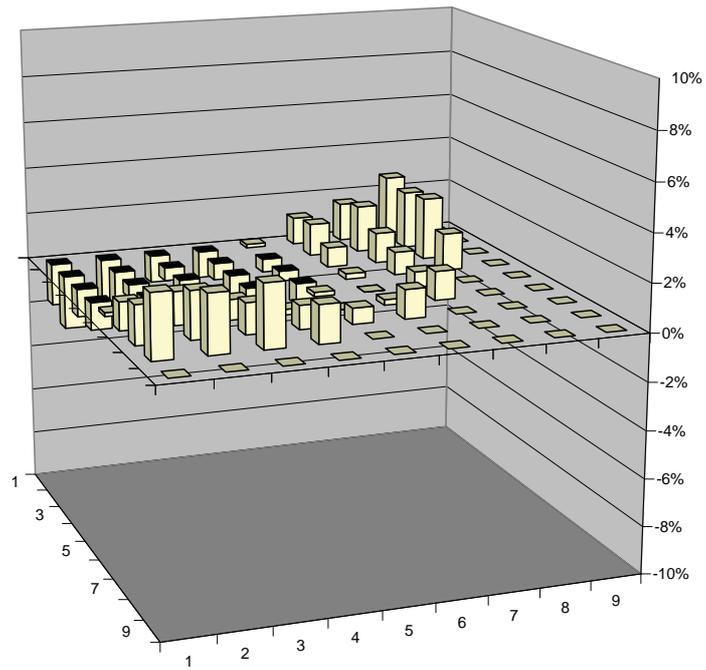
**Abb. 4-5: Unterschiede zwischen den mit PARTISN und MCNP berechneten Leistungsverteilungen einer 2X2-Anordnung aus frischen unkontrollierten Uranbrennelementen des DWR-MOX/ $\text{UO}_2$ -Kerntransientenbenchmarks.**



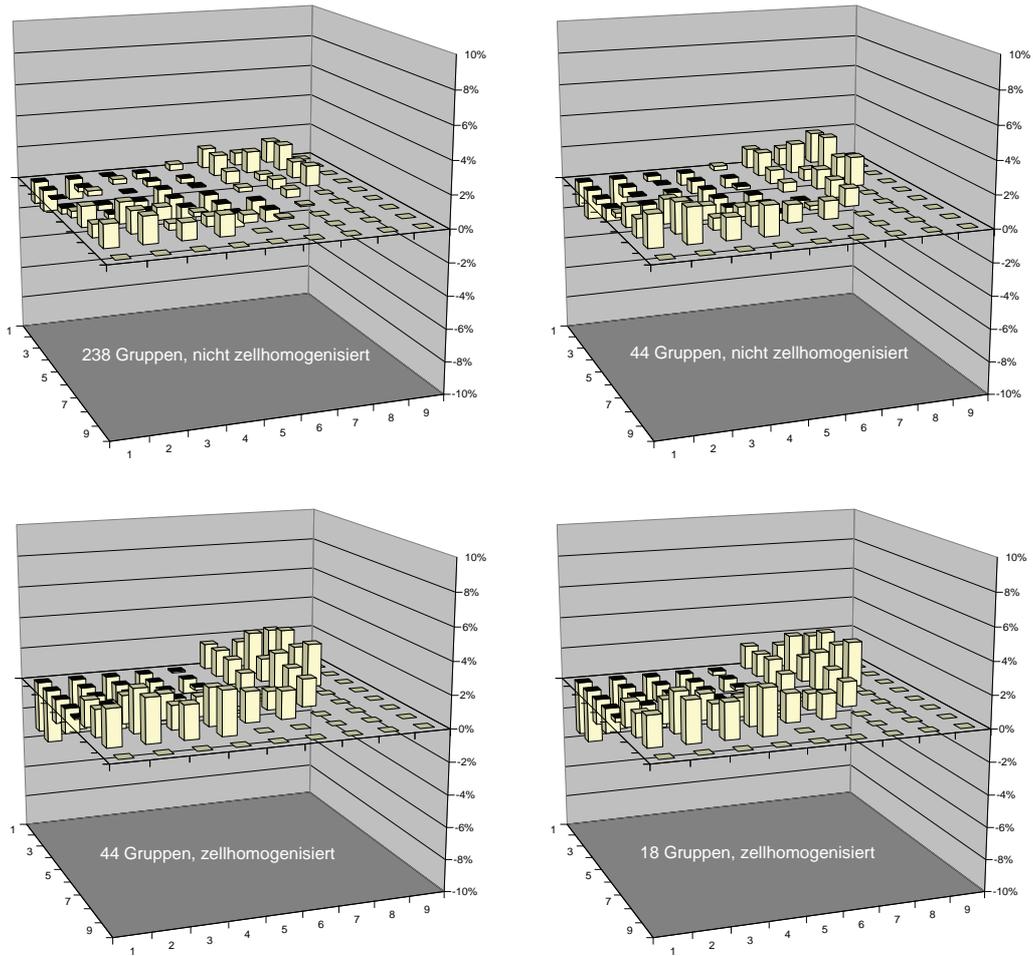
**Abb. 4-6: Unterschiede zwischen den mit DANTSYS und MCNP berechneten Leistungsverteilungen für den unkontrollierten Kern des DWR-MOX/UO<sub>2</sub>-Kerntransientenbenchmarks.**



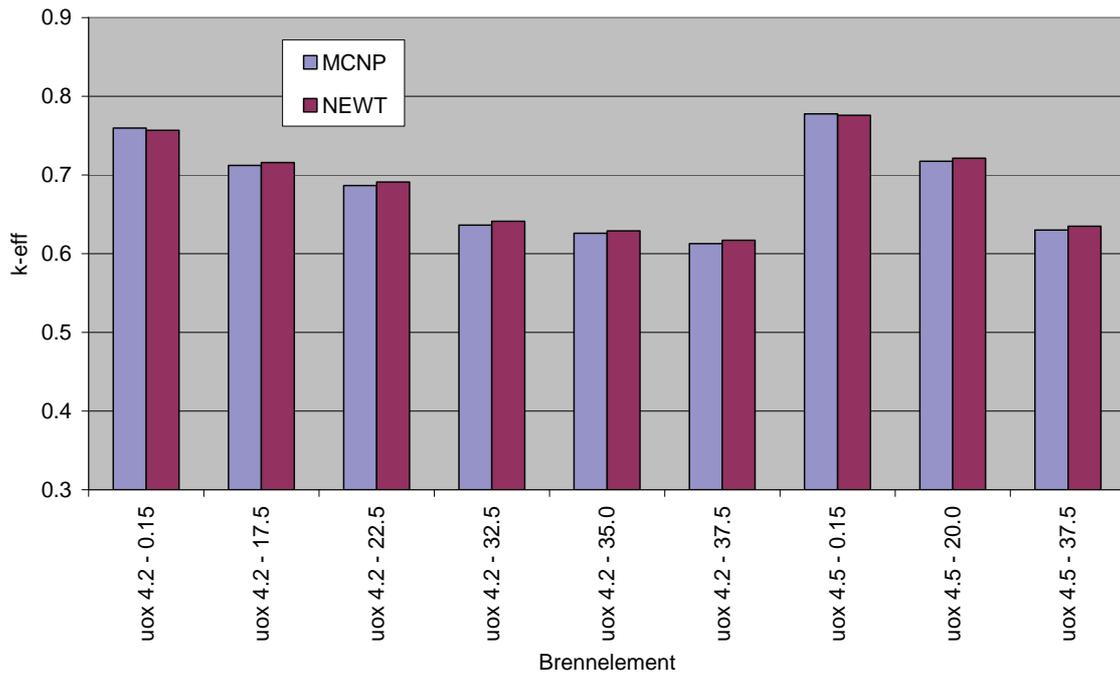
**Abb. 4-7: Unterschiede zwischen den mit DANTSYS und MCNP berechneten Stableistungsverteilungen für ein Brennelement des unkontrollierten Kerns des DWR-MOX/UO<sub>2</sub>-Kerntransientenbenchmarks.**



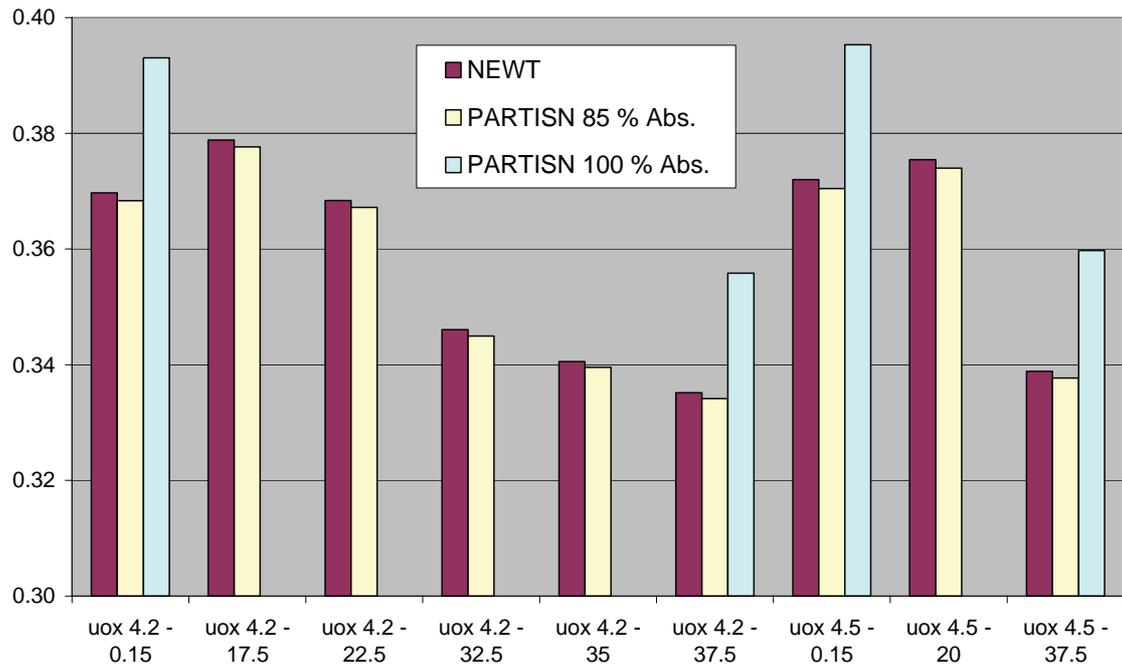
**Abb. 4-8: Unterschiede zwischen den mit PARCS und MCNP berechneten Leistungsverteilungen für den unkontrollierten Kern des DWR-MOX/UO<sub>2</sub>-Kerntransientenbenchmarks.**



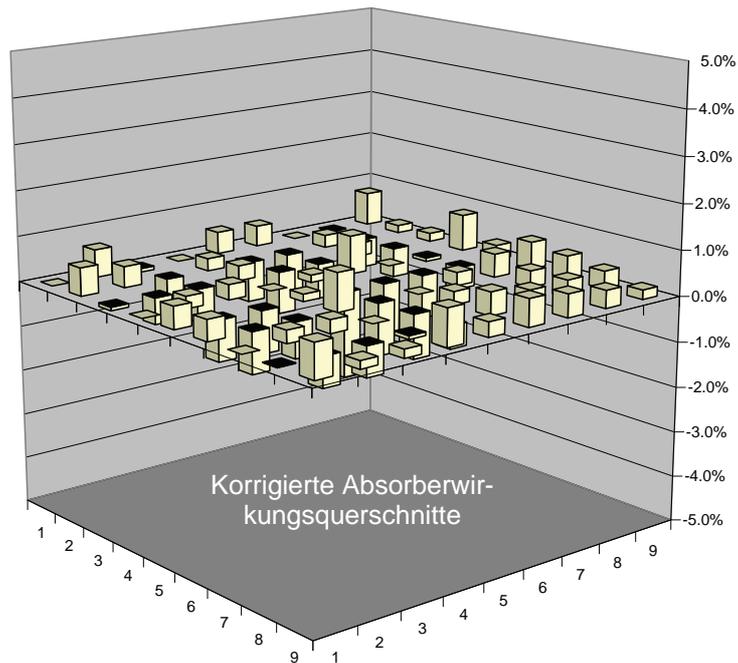
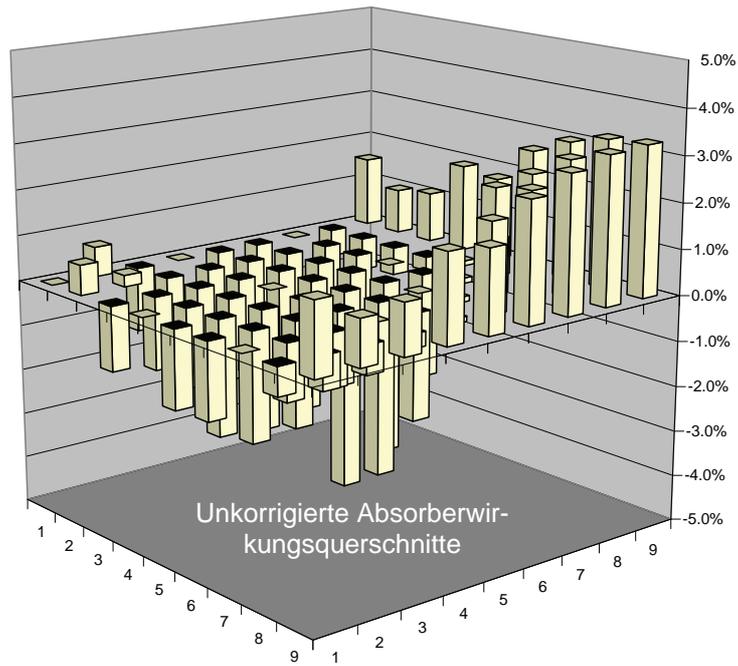
**Abb. 4-9: Unterschiede zwischen mit KENO mit unterschiedlichen Gruppendaten und MCNP berechneten Leistungsverteilungen für den unkontrollierten Kern des DWR-MOX/UO<sub>2</sub>-Kerntransientenbenchmarks.**



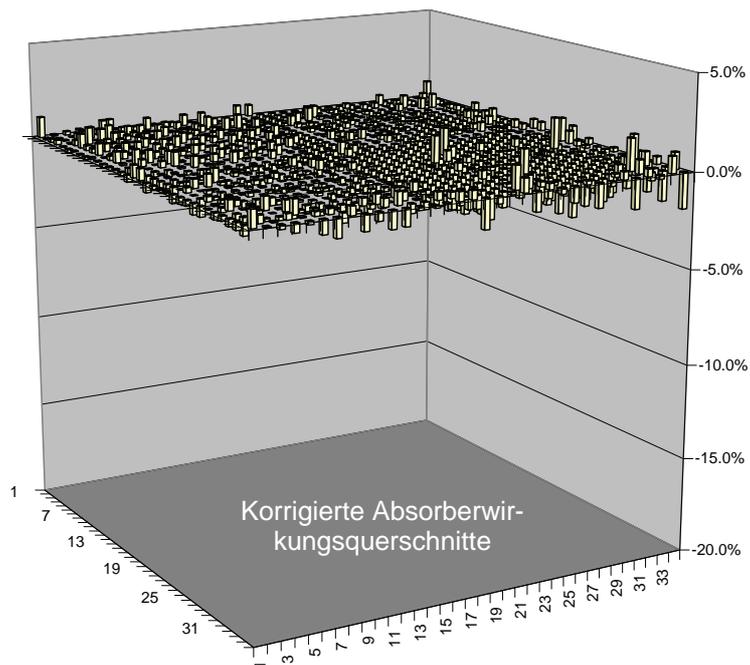
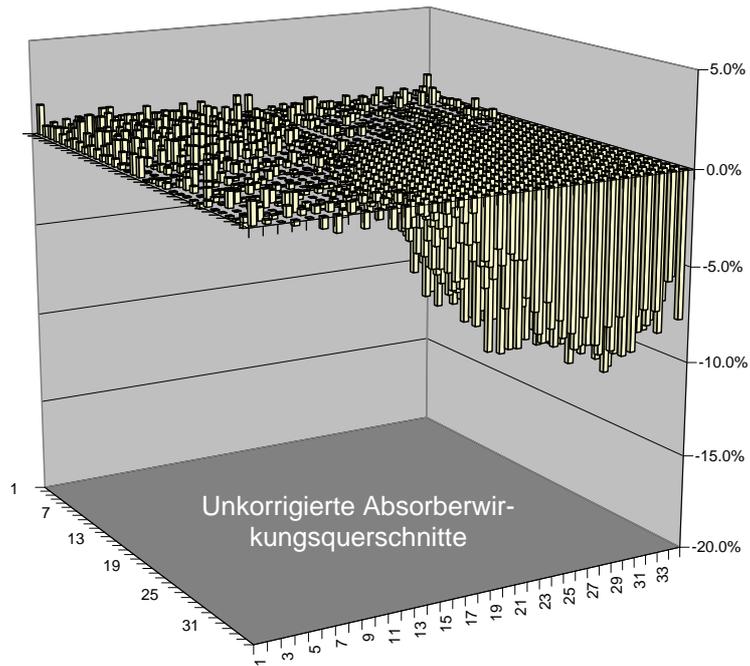
**Abb. 4-10: Multiplikationsfaktoren der kontrollierten Brennelemente des DWR-MOX/ $UO_2$ -Kerntransientenbenchmarks, berechnet mit MCNP und NEWT.**



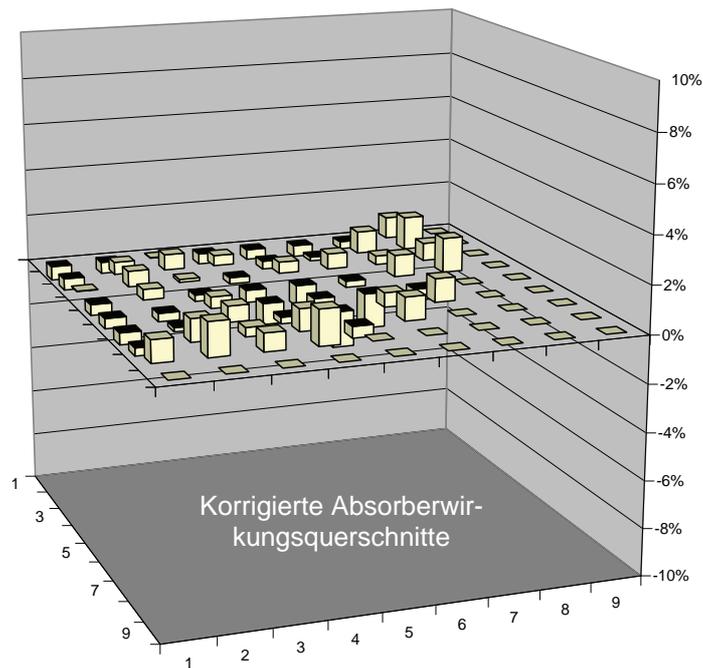
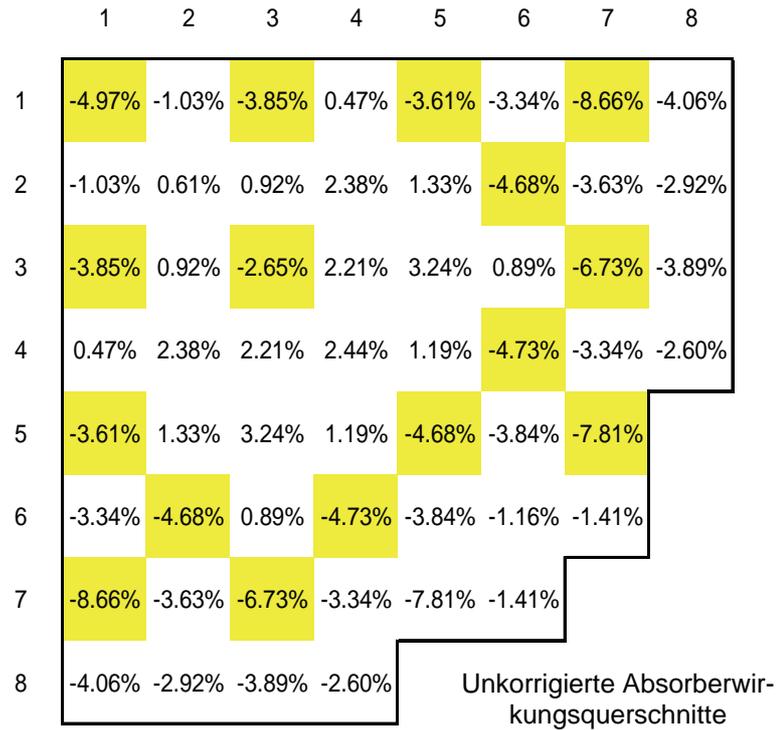
**Abb. 4-11: Reaktivitätswerte der Absorberstäbe in den Brennelementen des DWR-MOX/EO<sub>2</sub>-Kerntransientenbenchmarks, berechnet mit NEWT und PARTISN.**



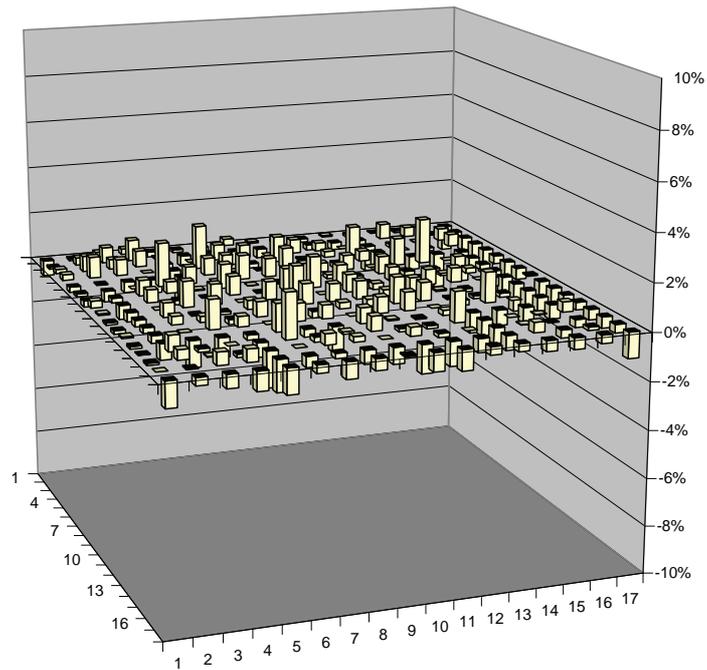
**Abb. 4-12: Unterschiede zwischen den mit PARTISN und NEWT berechneten Leistungsverteilungen eines frischen kontrollierten Uranbrennelements des DWR-MOX/ $\text{UO}_2$ -Kernt transientenbenchmarks mit unkorrigierten und korrigierten homogenisierten Absorberwirkungsquerschnitten.**



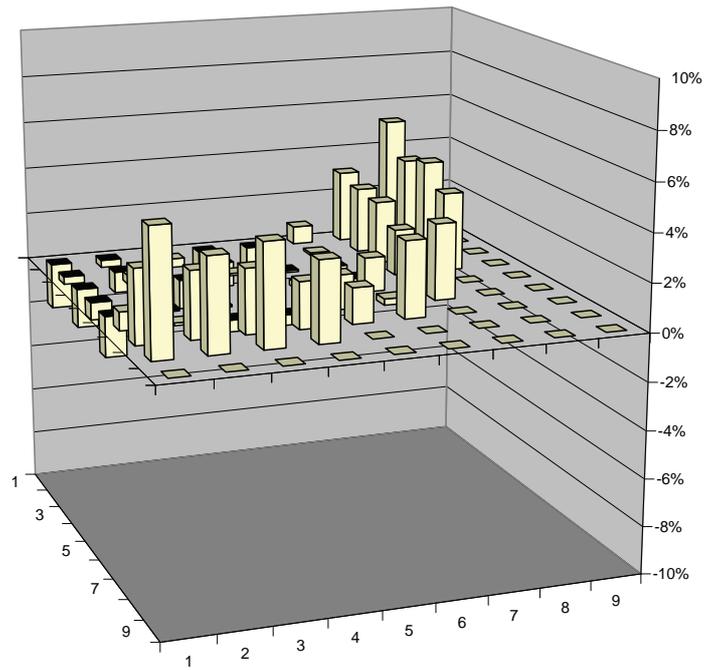
**Abb. 4-13:** Unterschiede zwischen den mit PARTISN und MCNP berechneten Leistungsverteilungen einer 2X2-Anordnung mit einem kontrollierten Eckbrennelement unter Verwendung von unkorrigierten und korrigierten homogenisierten Absorberwirkungsquerschnitten.



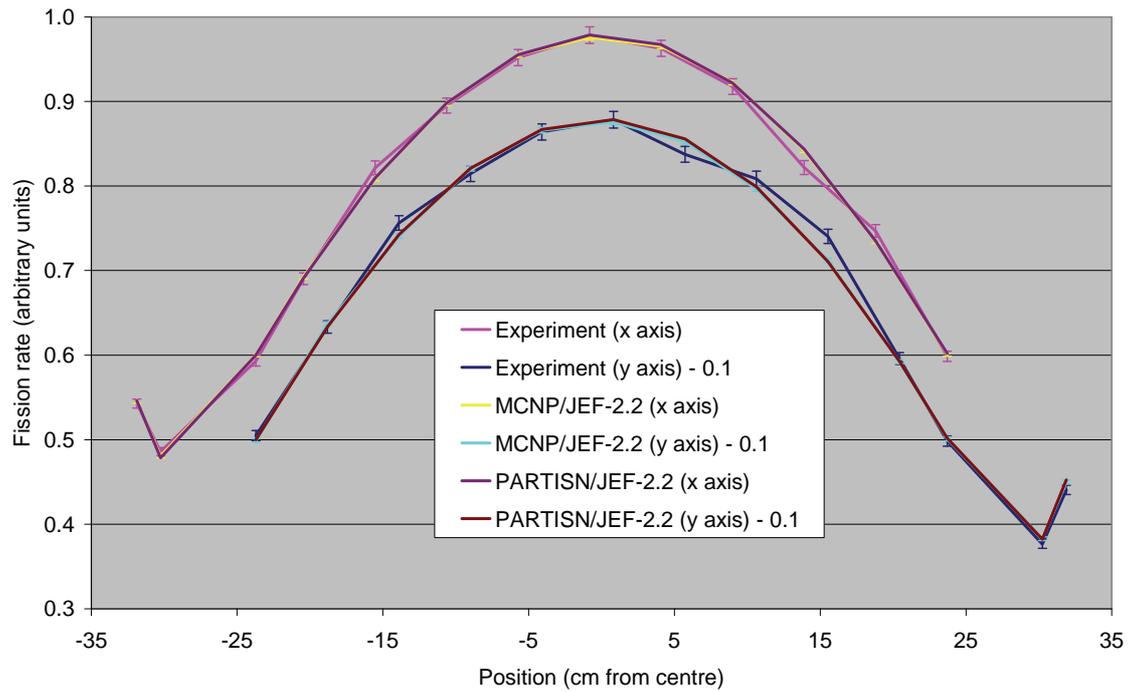
**Abb. 4-14:** Unterschiede zwischen den mit DANTSYS und MCNP berechneten Leistungsverteilungen für den kontrollierten Kern des DWR-MOX/UO<sub>2</sub>-Kerntransientenbenchmarks unter Verwendung von unkorrigierten und korrigierten homogenisierten Absorberwirkungsquerschnitten.



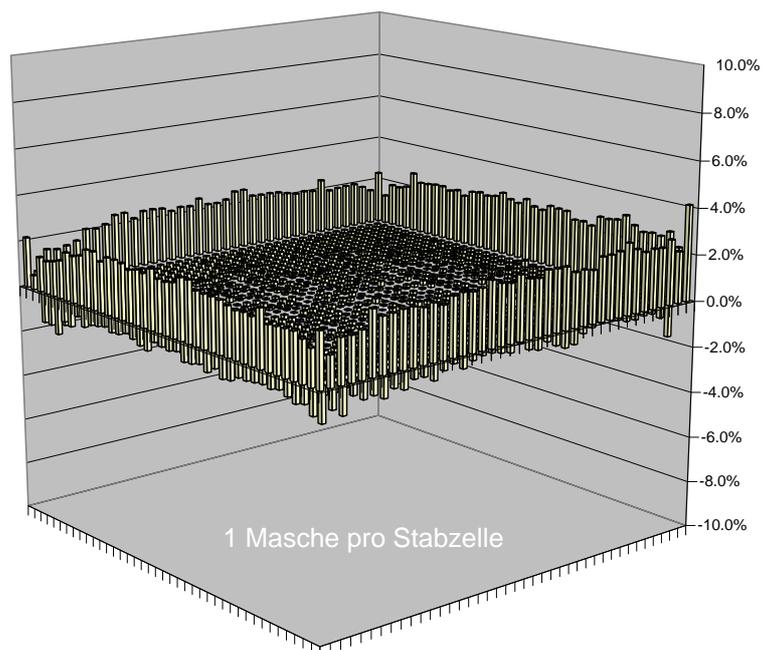
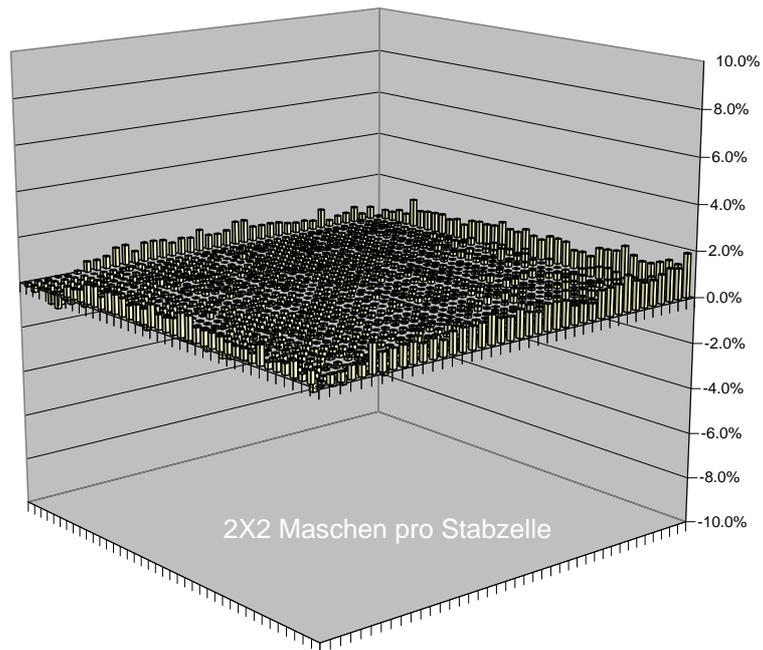
**Abb. 4-15: Unterschiede zwischen den mit DANTSYS und MCNP berechneten Stable Leistungsverteilungen für ein kontrolliertes Brennelement des kontrollierten Kerns des DWR-MOX/UO<sub>2</sub>-Kerntransientenbenchmarks.**



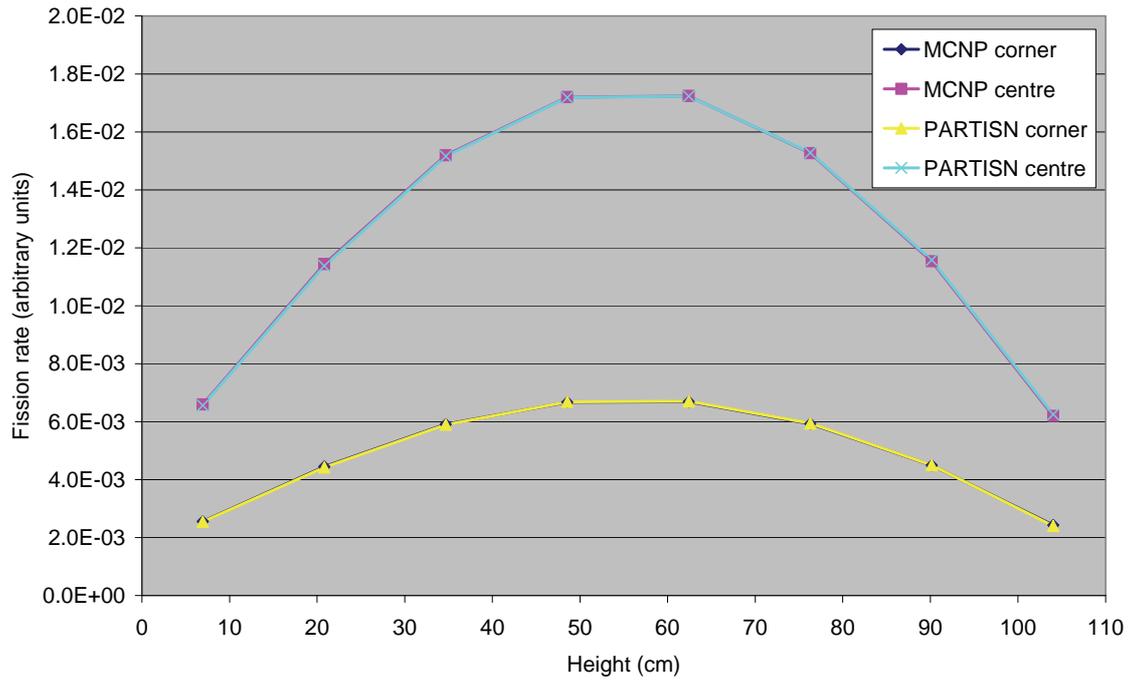
**Abb. 4-16: Unterschiede zwischen den mit PARCS und MCNP berechneten Leistungsverteilungen für den kontrollierten Kern des DWR-MOX/UO<sub>2</sub>-Kerntransientenbenchmarks.**



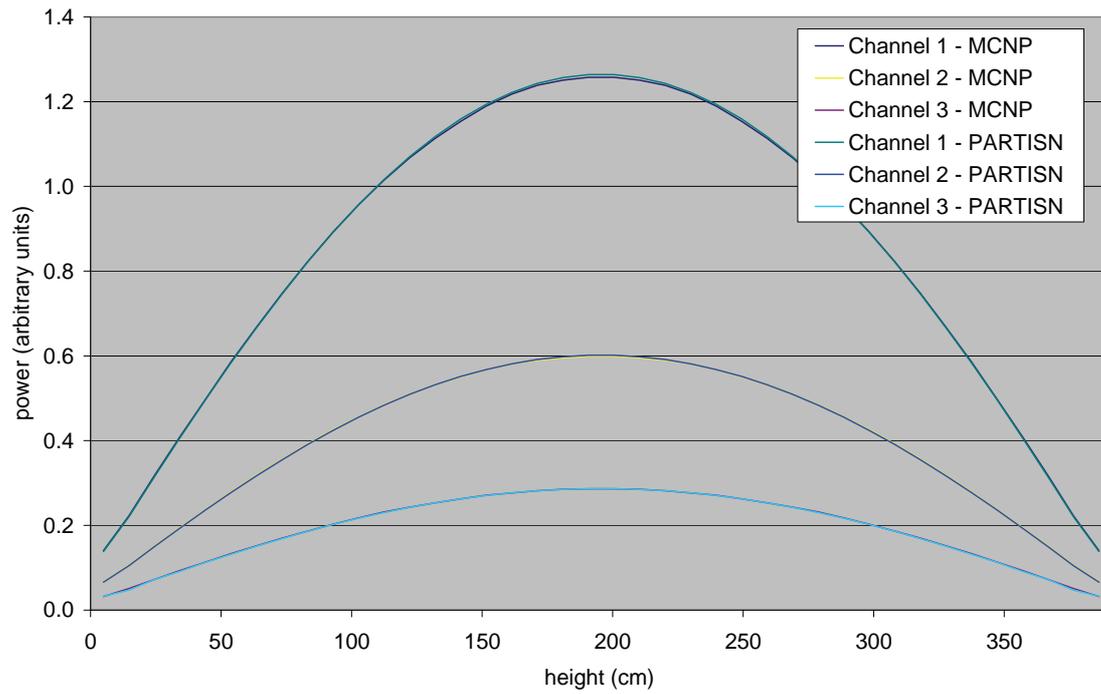
**Abb. 4-17: Gemessene und mit MCNP und PARTISN berechnete radiale Spaltratenverteilungen im heißen KRITZ-2:13-Kern entlang zweier Achsen.**



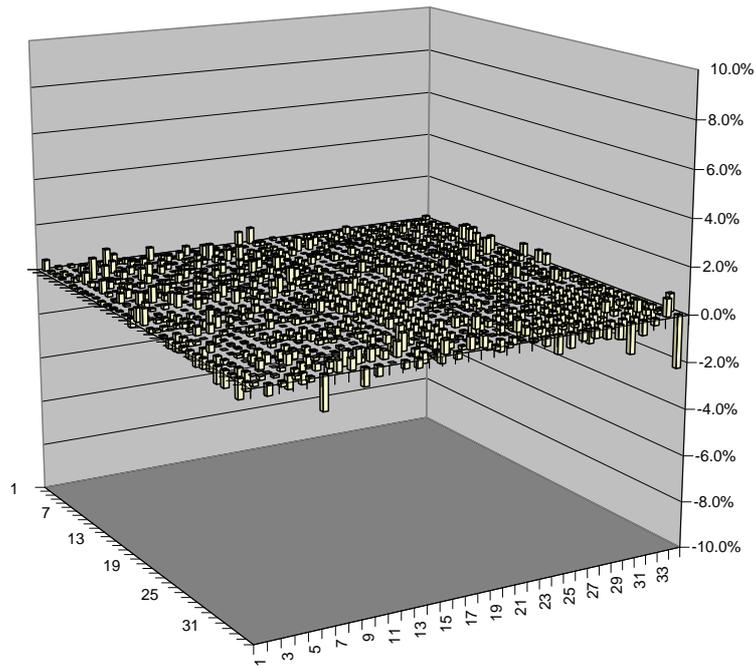
**Abb. 4-18: Unterschied der mit PARTISN und MCNP berechneten radialen Spaltratenverteilungen im heißen KRITZ-2:13-Kern mit 2X2 und 1X1 Maschen pro Stabzelle.**



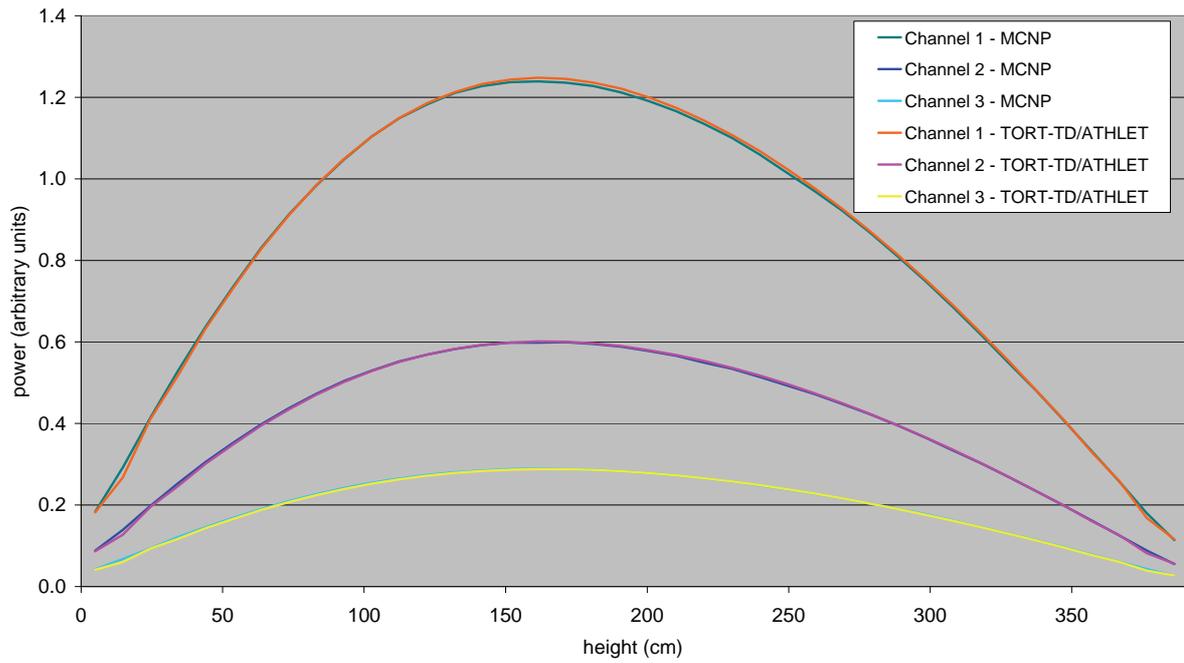
**Abb. 4-19: Mit PARTISN und MCNP berechnete axiale Spaltratenverteilungen im heißen KRITZ-2:13-Kern.**



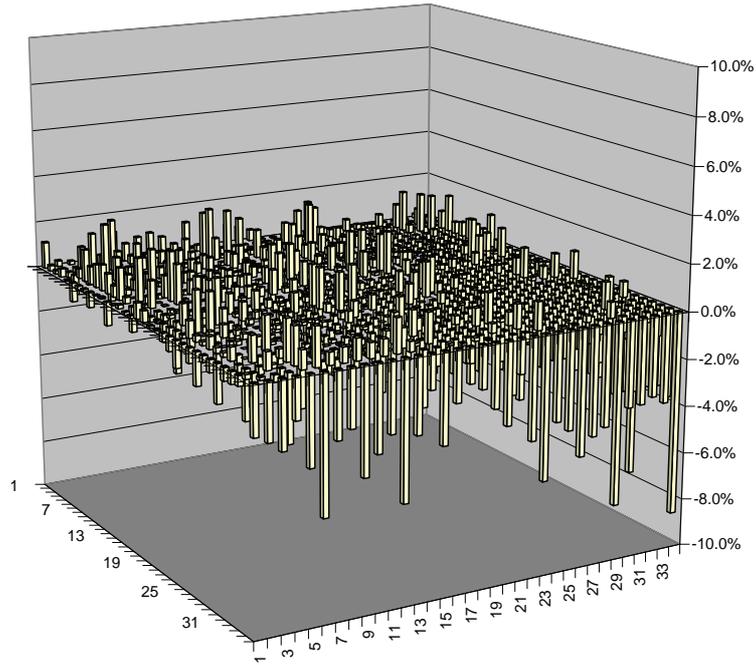
**Abb. 4-20: Mit PARTISN und MCNP berechnete axiale Spaltratenverteilungen in einer 2X2-Anordnung von frischen Uran-Brennelementen mit konstanten thermohydraulischen Parametern.**



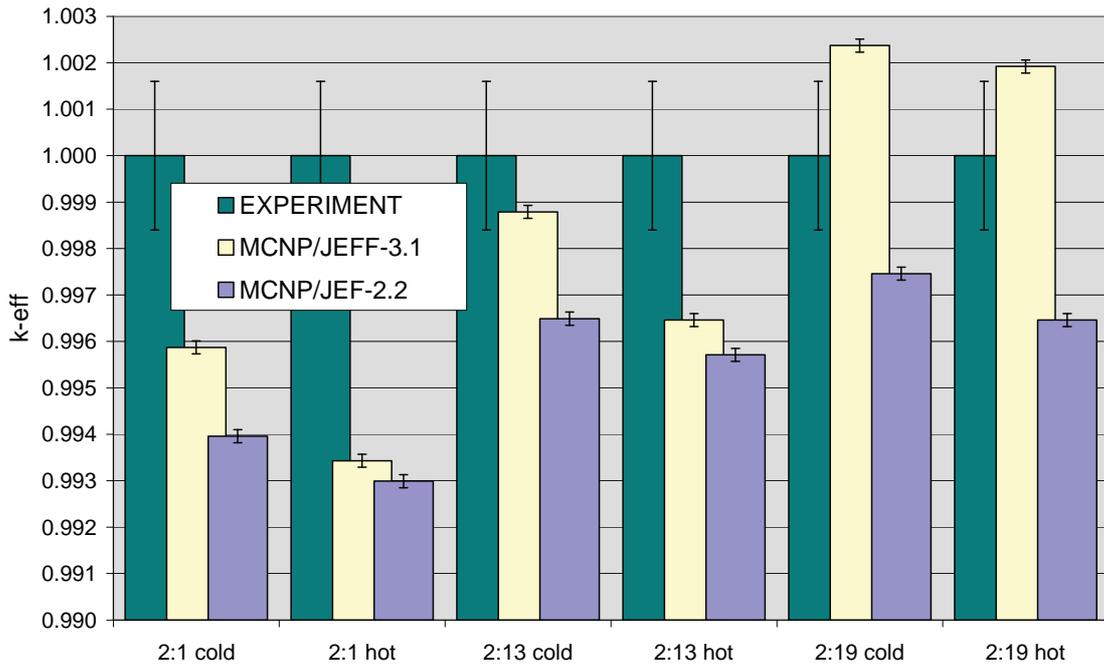
**Abb. 4-21: Unterschied der mit PARTISN und MCNP berechneten radialen Stableistungsverteilungen in einer 2X2-Anordnung von frischen Uran-Brennelementen mit konstanten thermohydraulischen Parametern.**



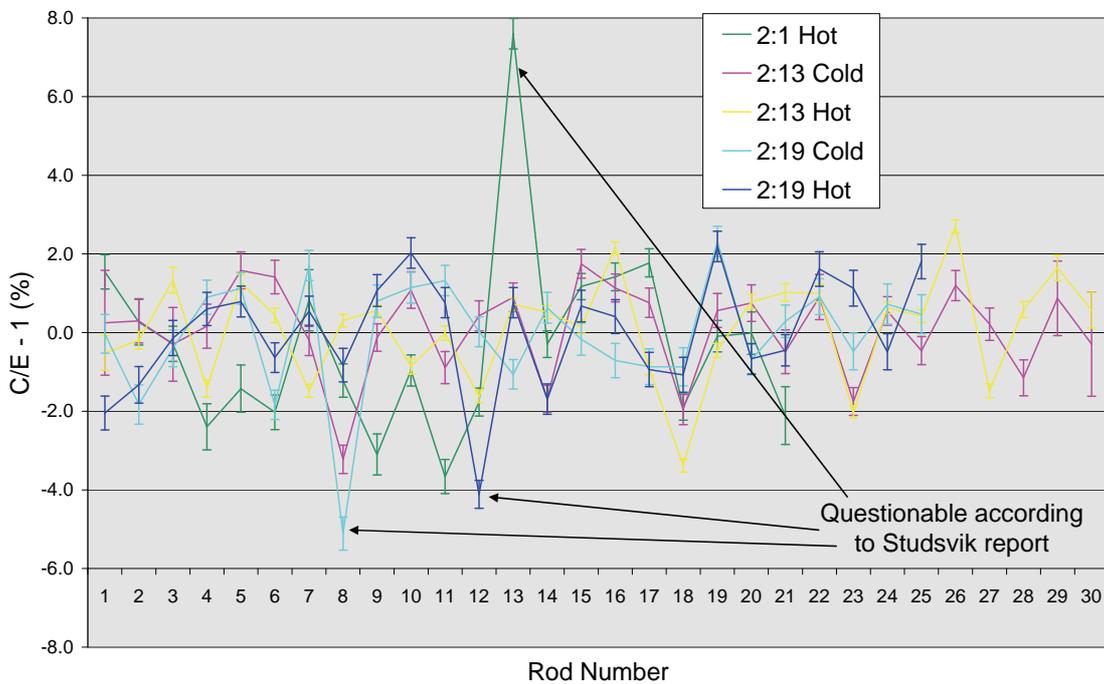
**Abb. 4-22:** Mit TORT-TD/ATHLET und MCNP berechnete axiale Spaltratenverteilungen in einer 2X2-Anordnung von frischen Uran-Brennelementen mit ortsabhängigen thermohydraulischen Parametern.



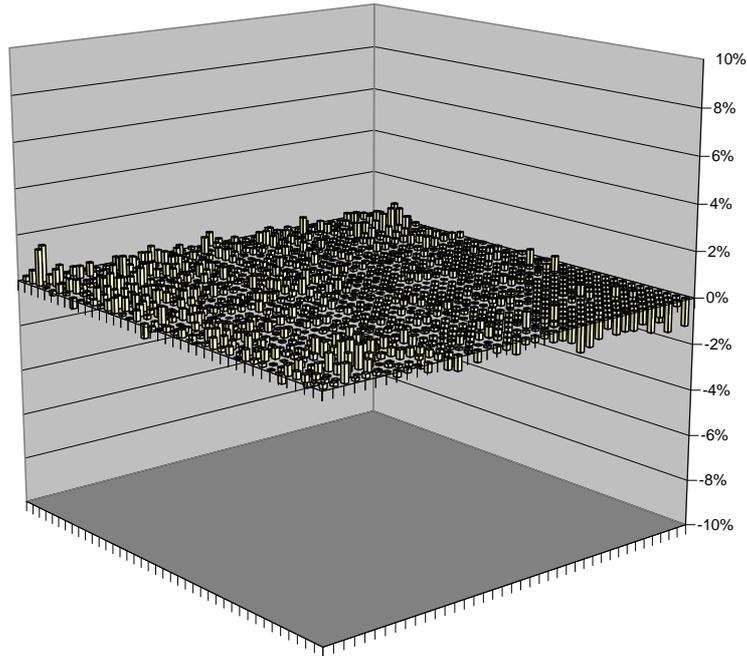
**Abb. 4-23: Unterschied der mit TORT-TD/ATHLET und MCNP berechneten radialen Stableistungsverteilungen in einer 2X2-Anordnung von frischen Uran-Brennelementen mit ortsabhängigen thermohydraulischen Parametern.**



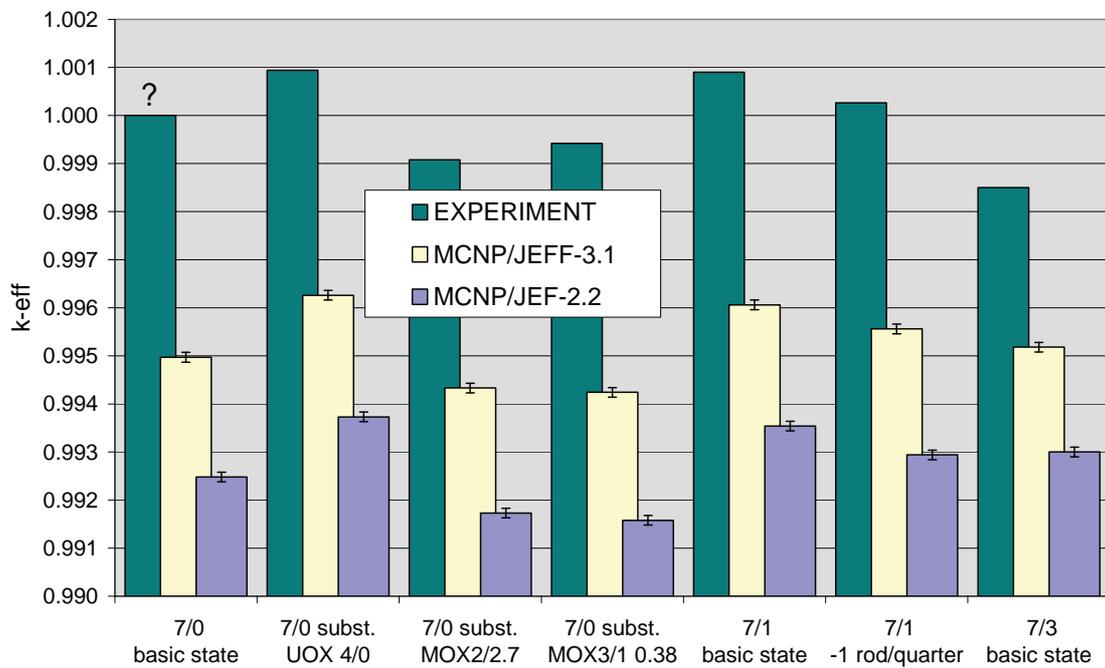
**Abb. 4-24: Multiplikationsfaktoren für die KRITZ-2-Anordnungen: Mit JEF-2.2 und JEFF-3.1 berechnete Werte im Vergleich zum Experiment.**



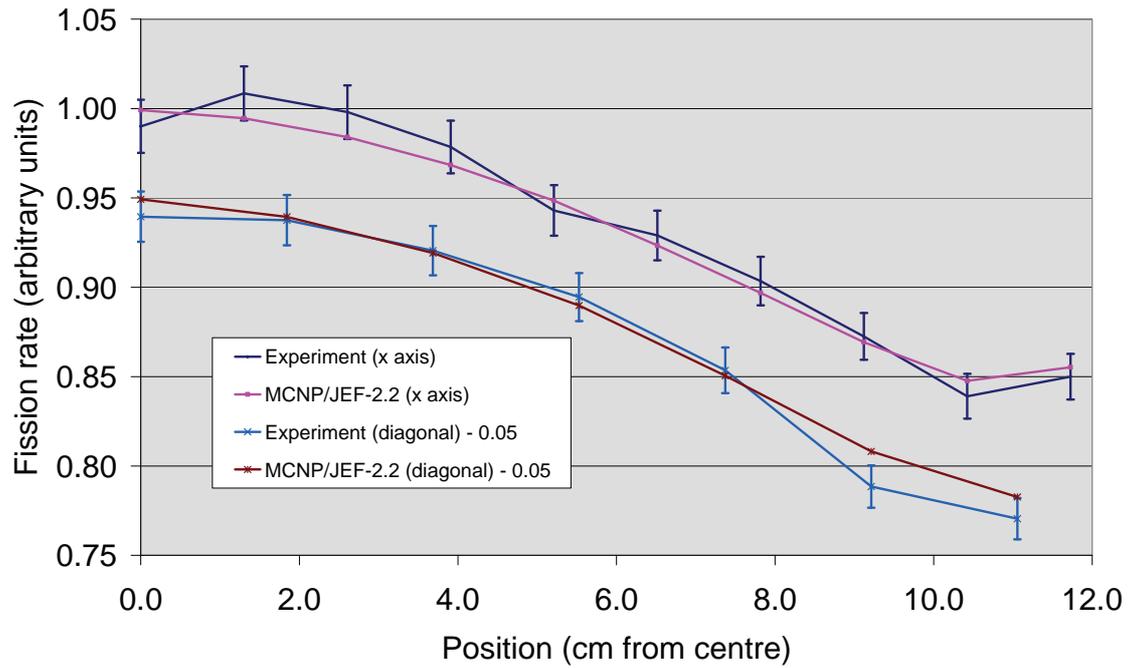
**Abb. 4-25: Unterschiede der mit JEF-2.2-Daten berechneten und der gemessenen radialen Spaltratenverteilung für die KRITZ-2-Anordnungen.**



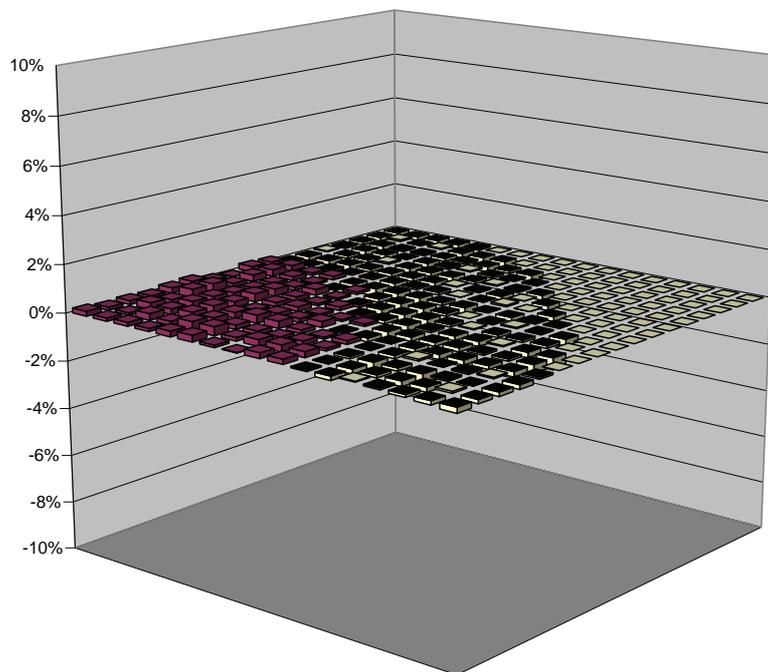
**Abb. 4-26: Unterschied der mit JEFF-3.1 und JEF-2.2 berechneten radialen Spaltratenverteilungen für die kritische Anordnung KRITZ-2:13 (heiß).**



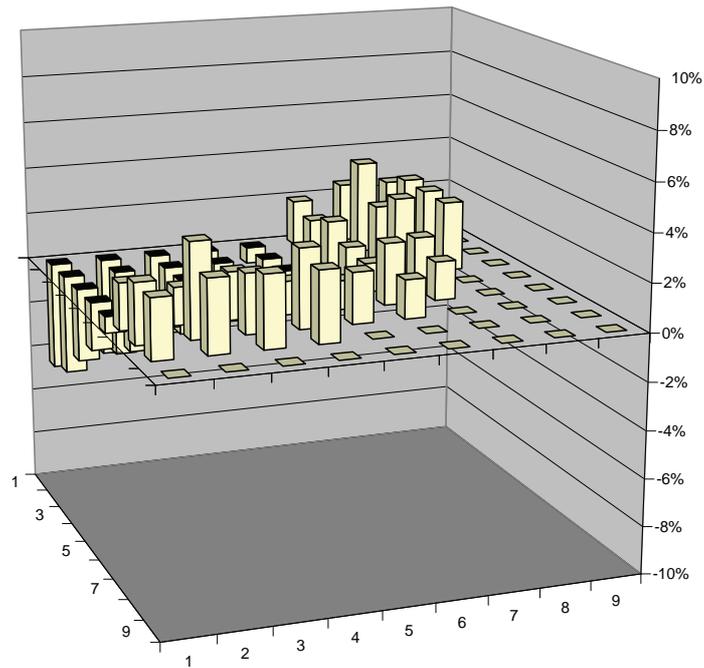
**Abb. 4-27: Multiplikationsfaktoren für die VENUS-7-Anordnungen: Mit JEF-2.2 und JEFF-3.1 berechnete Werte im Vergleich zum Experiment.**



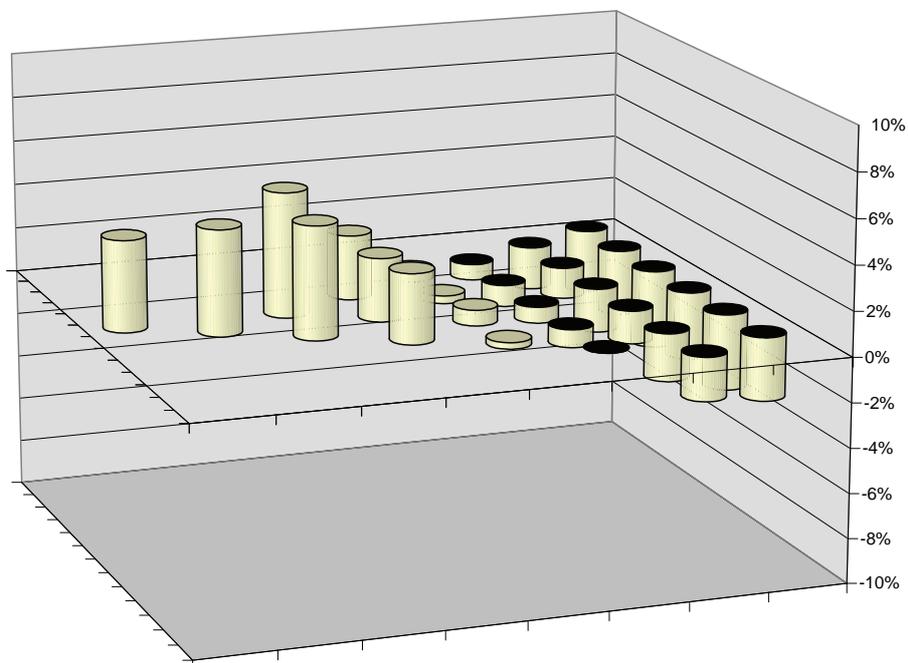
**Abb. 4-28: Vergleich der mit JEF-2.2-Daten berechneten und der gemessenen radialen Spaltratenverteilung für die VENUS-7/1-Anordnung.**



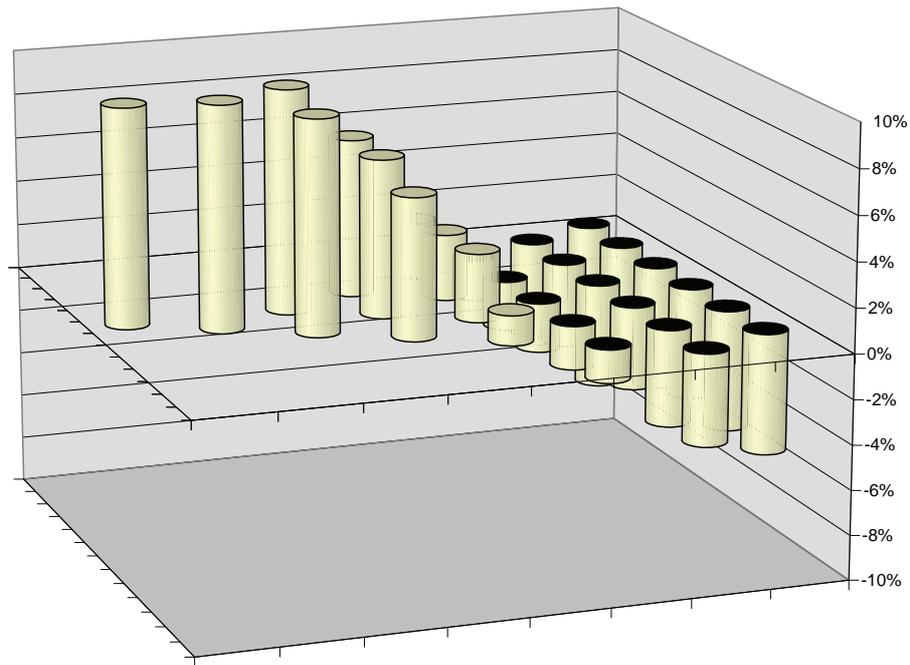
**Abb. 4-29: Unterschied der mit JEFF-3.1 und JEF-2.2 berechneten radialen Stableistungsverteilungen für die kritische Anordnung VENUS-7/1.**



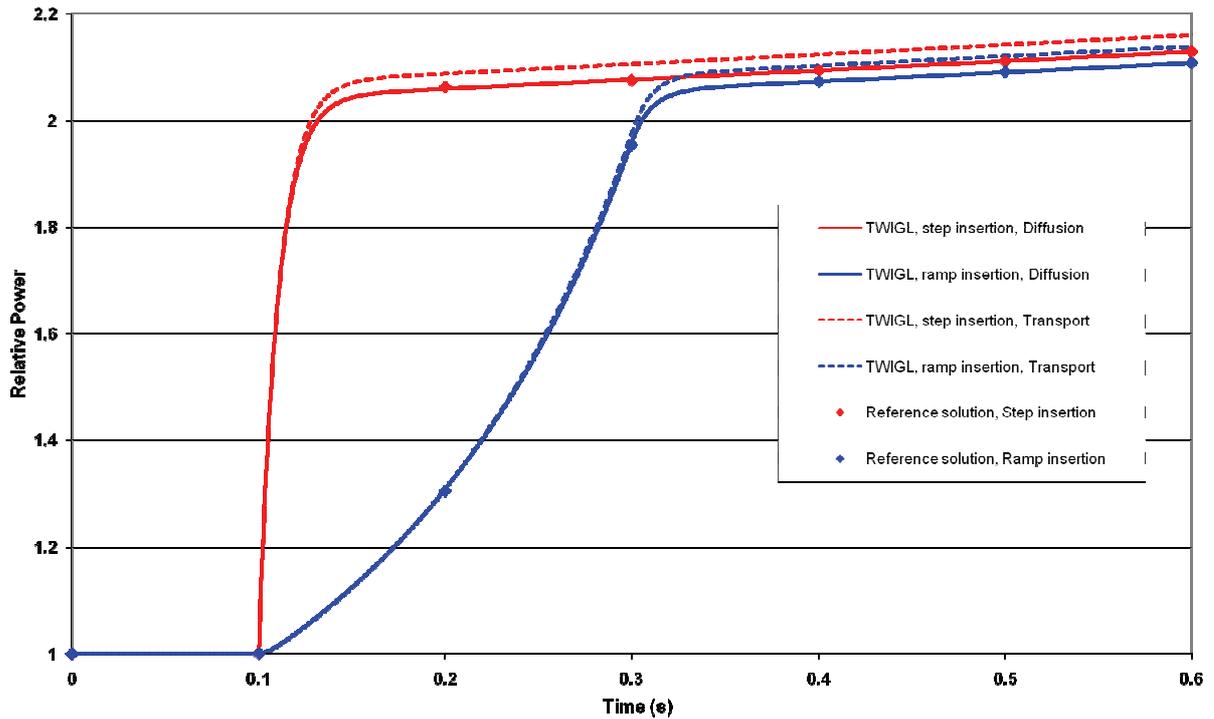
**Abb. 4-30:** Unterschied der mit JEFF-3.1 und JEF-2.2 berechneten radialen Brennelementleistungsverteilungen für den unkontrollierten Zustand des DWR-MOX/UO<sub>2</sub>-Kerntransientenbenchmarks.



**Abb. 4-31:** Unterschied der mit JEFF-3.1 und JEF-2.2 berechneten radialen Brennelementleistungsverteilungen für den Vollast-Betriebszustand des VVER-1000-Ganzkernbenchmarks.



**Abb. 4-32: Unterschied der mit JEFF-3.1 und JEF-2.2 berechneten radialen Brennelementleistungsverteilungen für den borfreien kontrollierten Zustand des VVER-1000-Ganzkernbenchmarks.**



**Abb. 5-1:** DORT-TD-Ergebnisse zur Nachrechnung des TWIGL-Benchmarks für einen Reaktivitätssprung (rot) und eine Reaktivitätsrampe (blau). Gezeigt sind die Ergebnisse von Diffusionsrechnung (durchgängige Linien) und Transportrechnung (gestrichelte Linien) im Vergleich zu den Referenzergebnissen (durch Symbole gekennzeichnet)

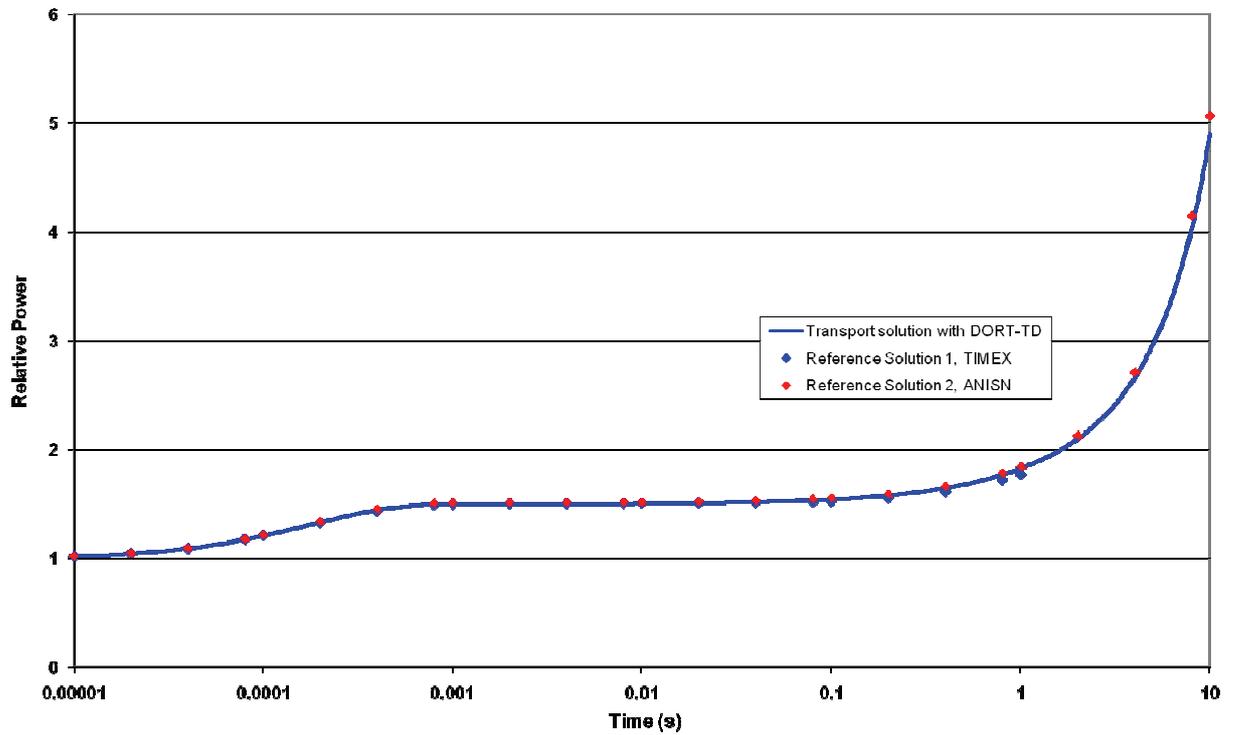
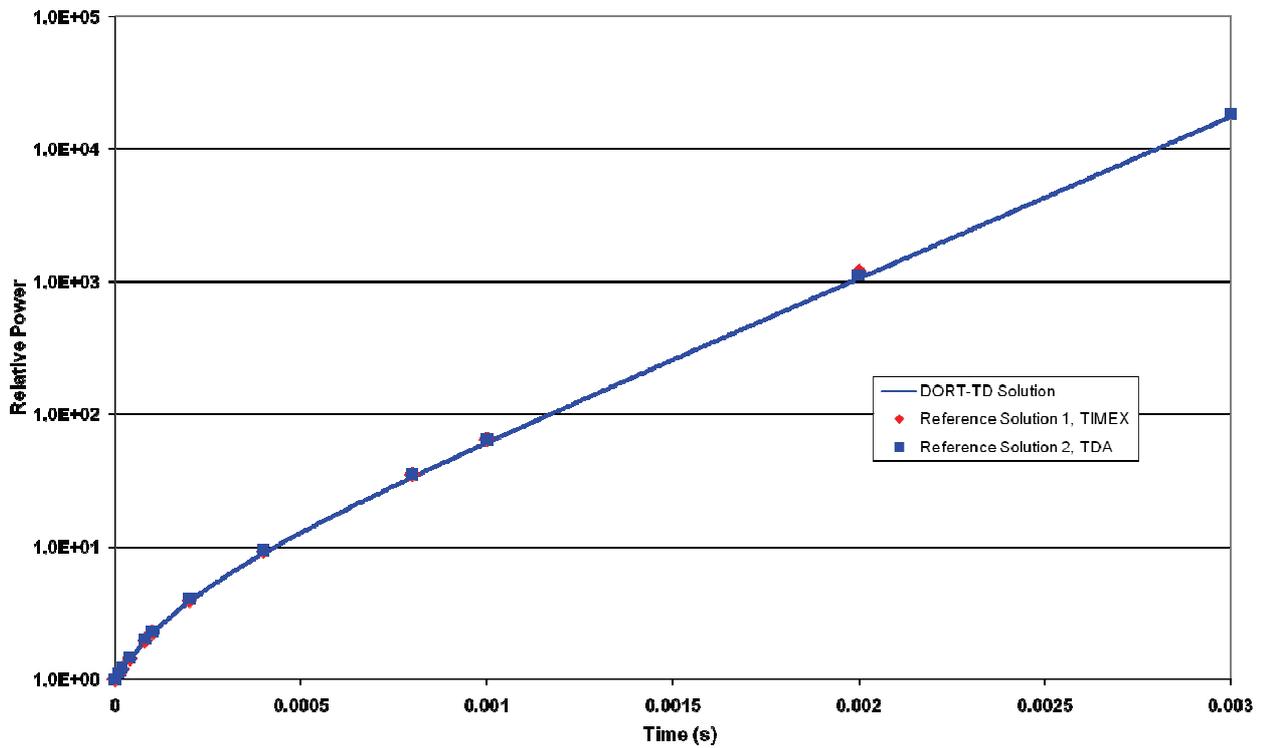


Abb. 5-2 DORT-TD-Lösung für die verzögert überkritische Transiente des TIMEX-TDA-Benchmarks. In der Grafik wird mit den Referenzlösungen von TIMEX (blaue Symbole) und TDA (*Time-Dependent ANISN*, rote Symbole) verglichen.



**Abb. 5-3:** DORT-TD-Lösung für die prompt überkritische Transiente des TIMEX-TDA-Benchmarks. In der Grafik wird mit den Referenzlösungen von TIMEX (blaue Symbole) und TDA (*Time-Dependent ANISN*, rote Symbole) verglichen.

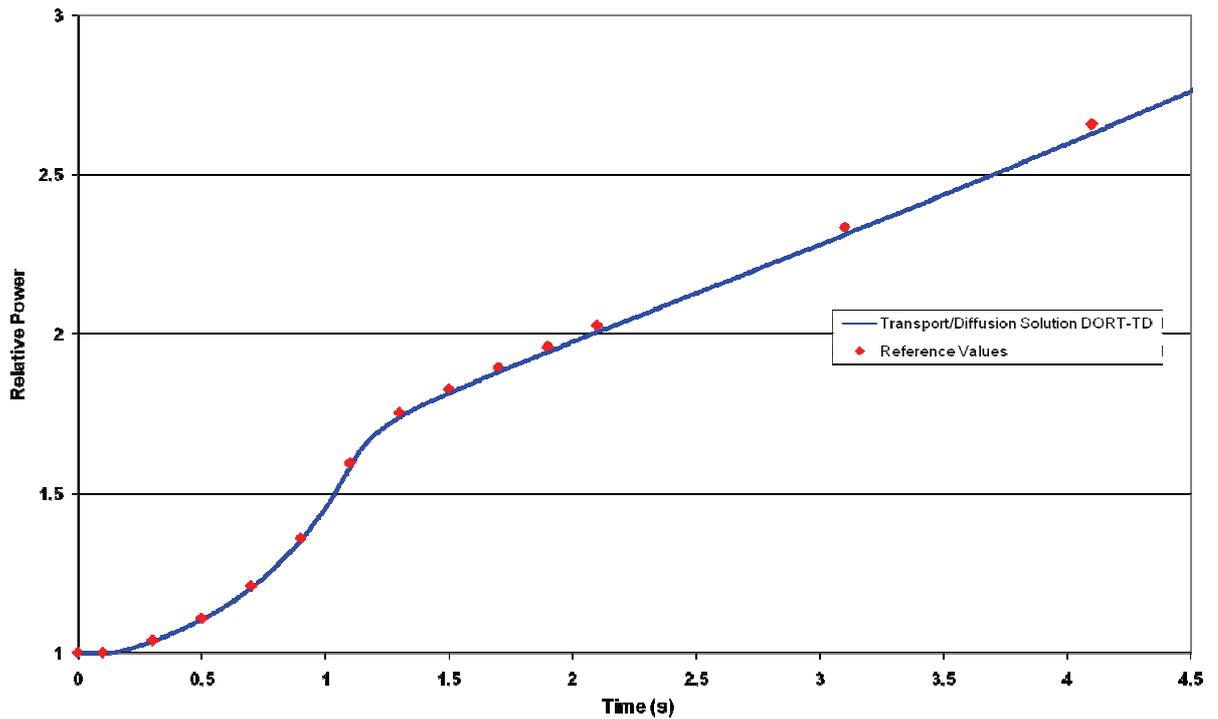
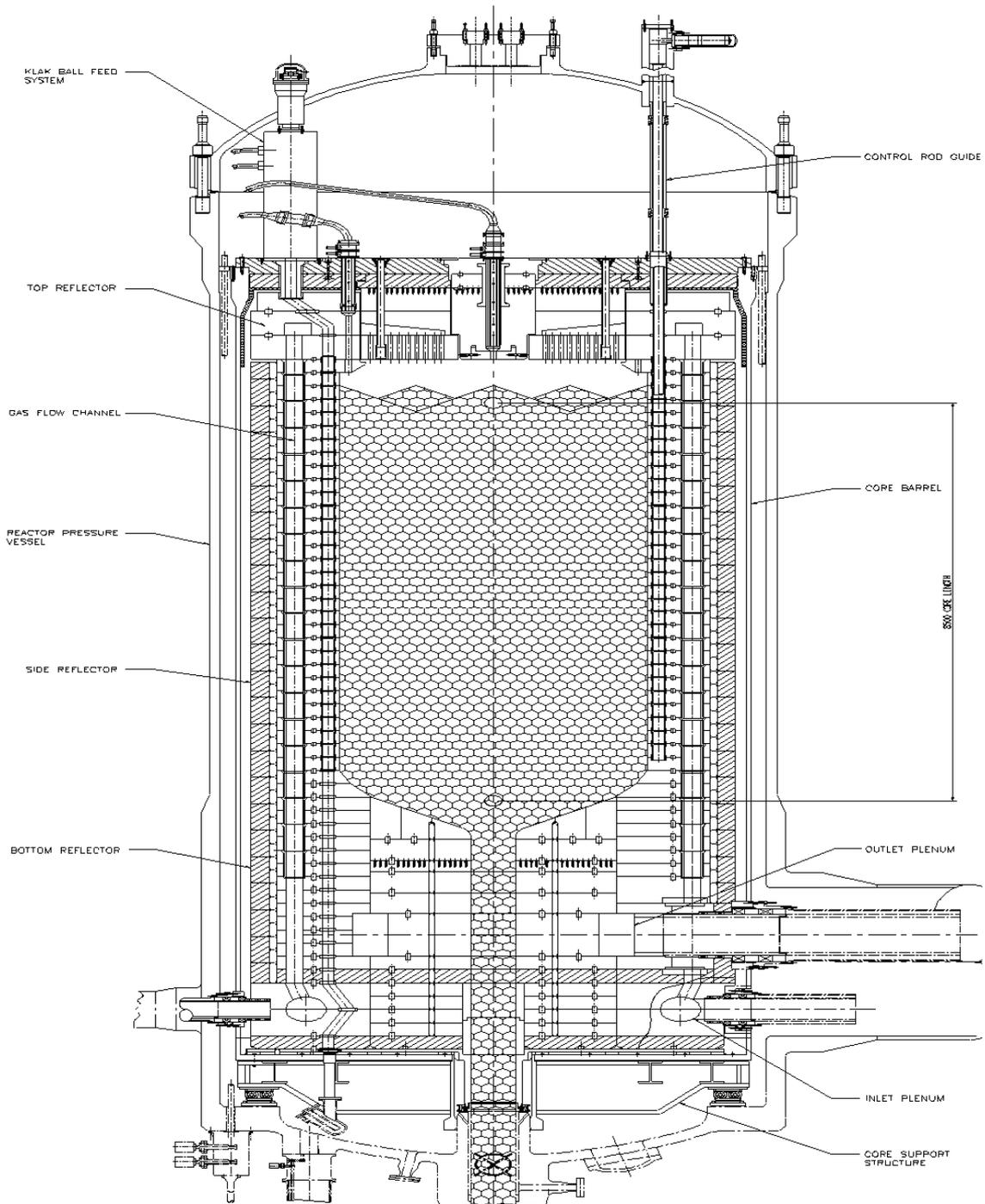
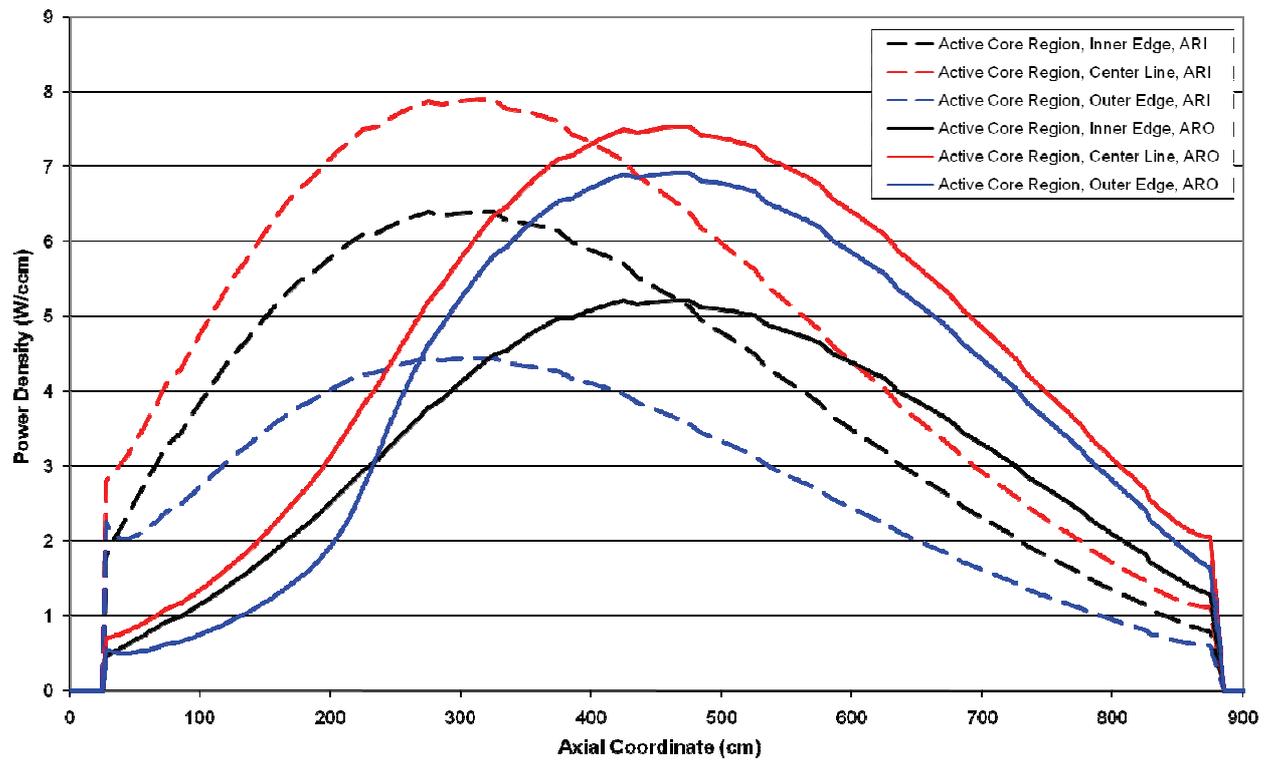


Abb. 5-4: DORT-TD-Lösung für den sog. *Dodds*-Benchmark. In der Grafik wird mit den Referenzlösungen von TRANZIT (siehe /ANL85/) verglichen. Transport- und Diffusionslösung liegen praktisch aufeinander und sind daher in der Grafik durch eine einzelne Kurve berücksichtigt.



**Abb. 5-5:** Schematische Darstellung des PBMR268-Kugelhaufenreaktors, der als Basis für die Untersuchungen in Abschnitt 5.4 dient.



**Abb. 5-6:** Axiale Leistungsverteilung für den PBMR268-Benchmark für die Konfigurationen ARO (durchgezogene Linien, alle Steuerstäbe in Betriebsposition) und ARI (gestrichelte Linien, alle Steuerstäbe voll eingefahren). Gezeigt sind axiale Schnitte entlang der Innenkante (schwarz), Außenkante (blau) und Zentrallinie (rot) der aktiven Zone.

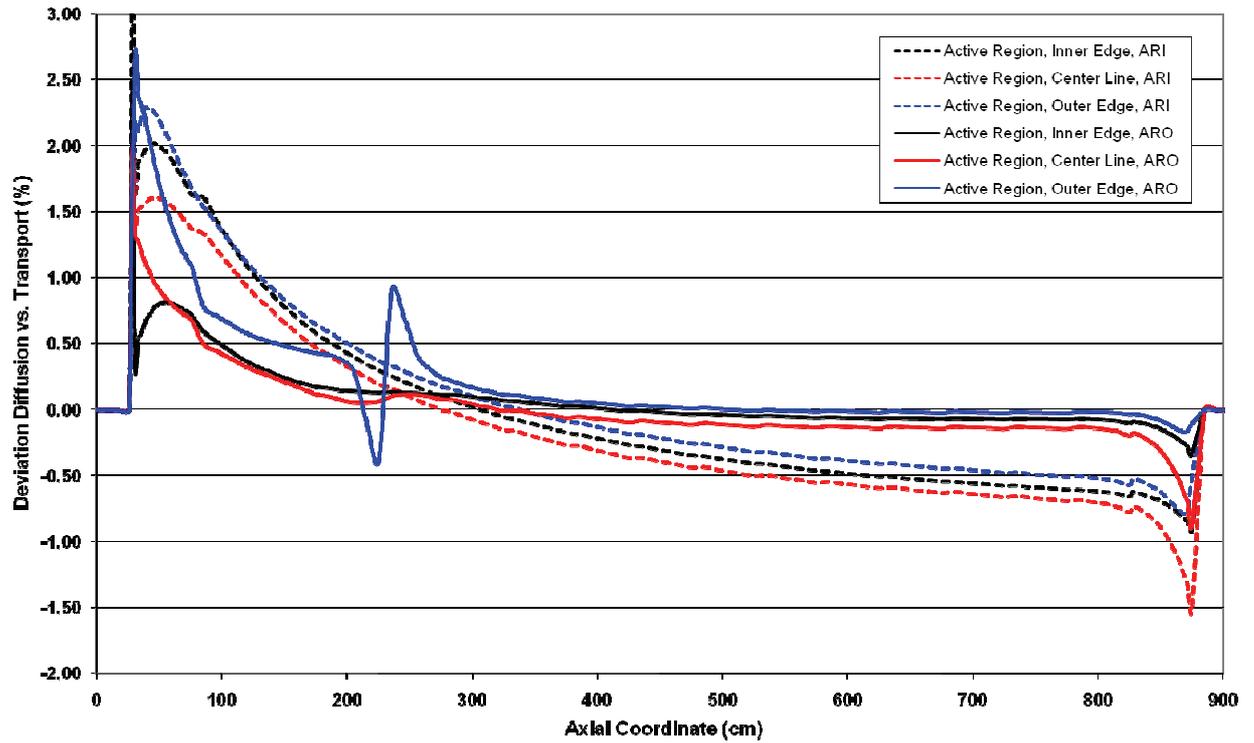


Abb. 5-7: Die zu Abb. 5-6 korrespondierenden relativen Abweichungen zwischen Diffusions- und Transporttheorie für die Leistungsverteilung des PBMR268-Benchmarks.

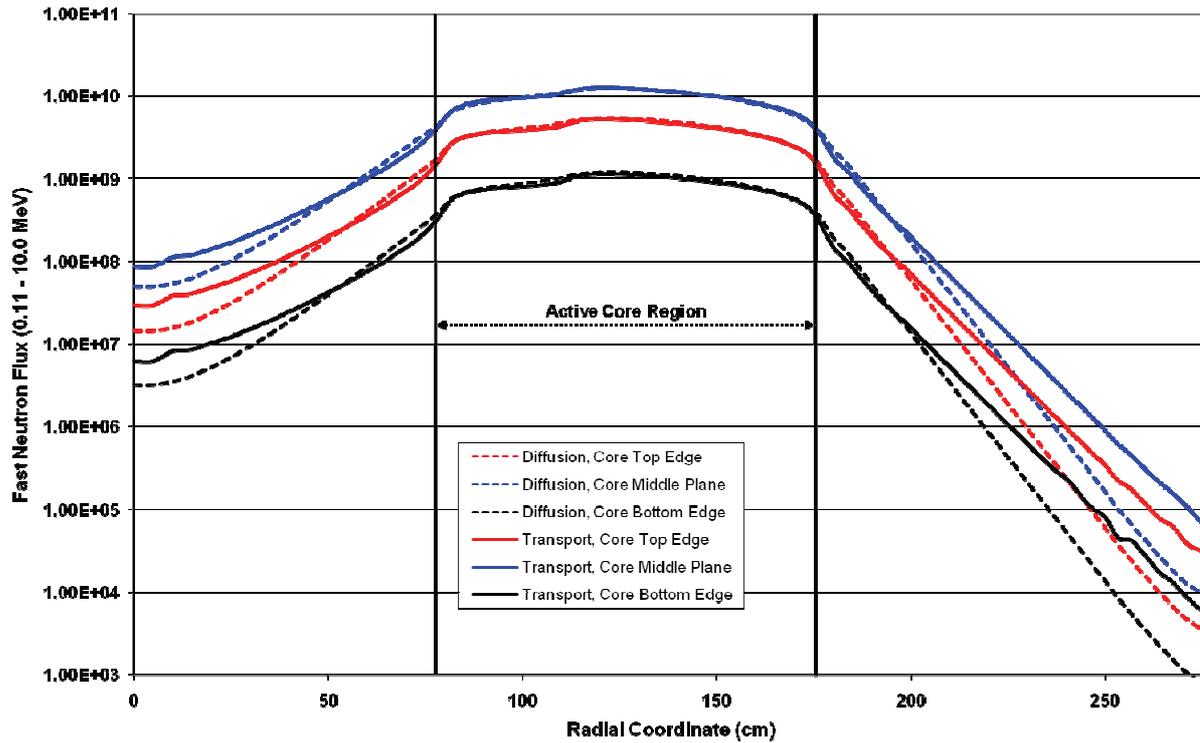
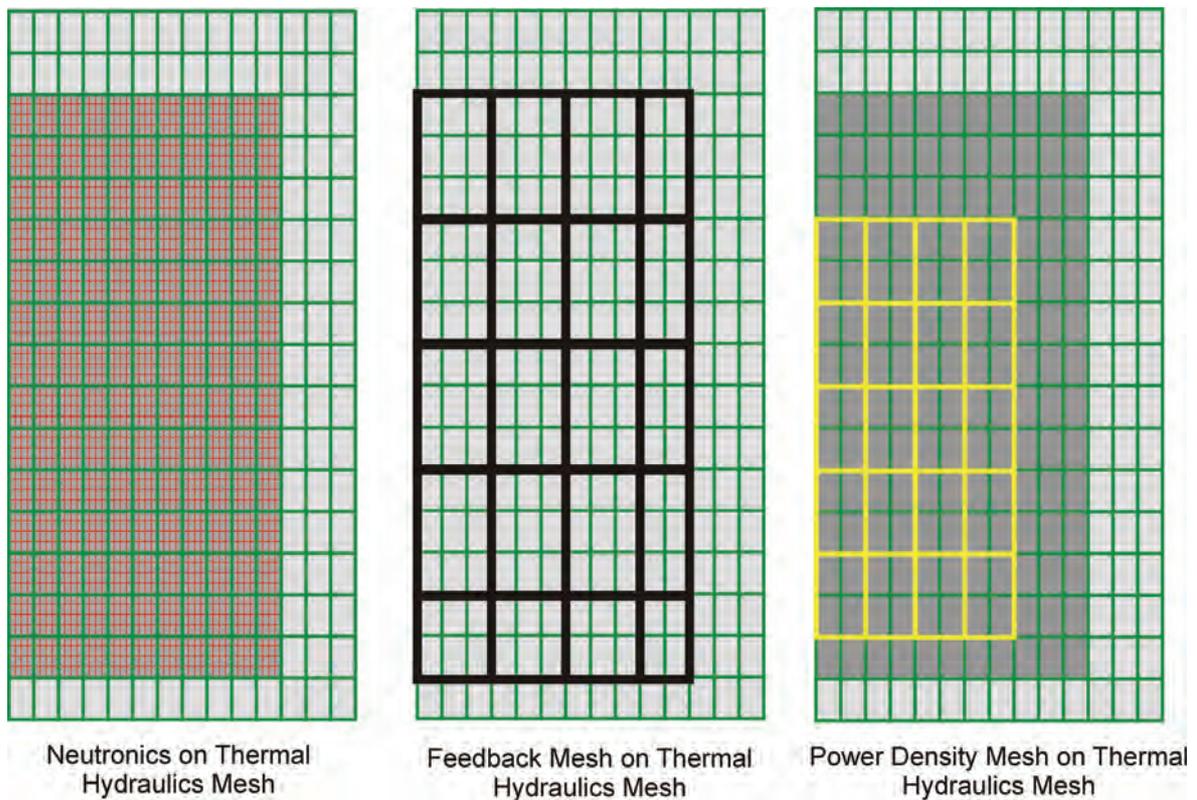
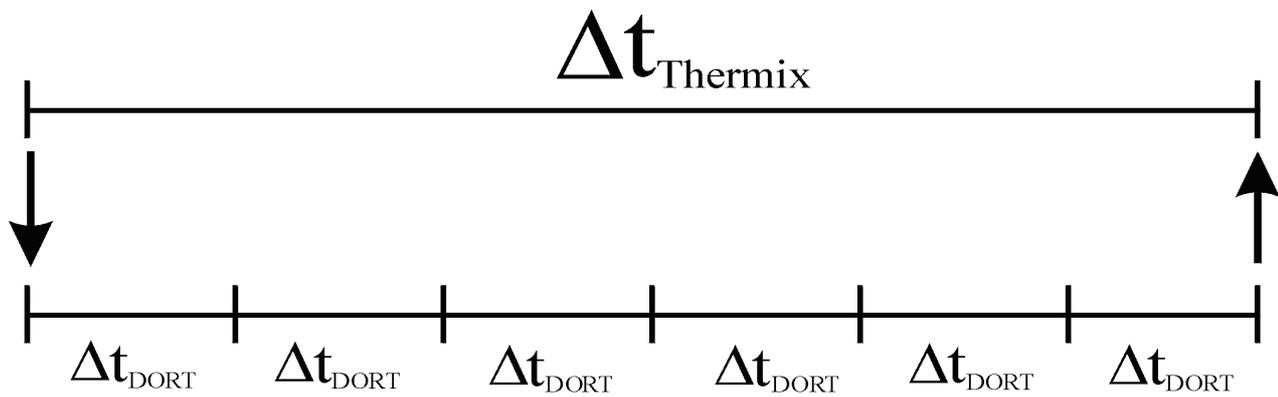


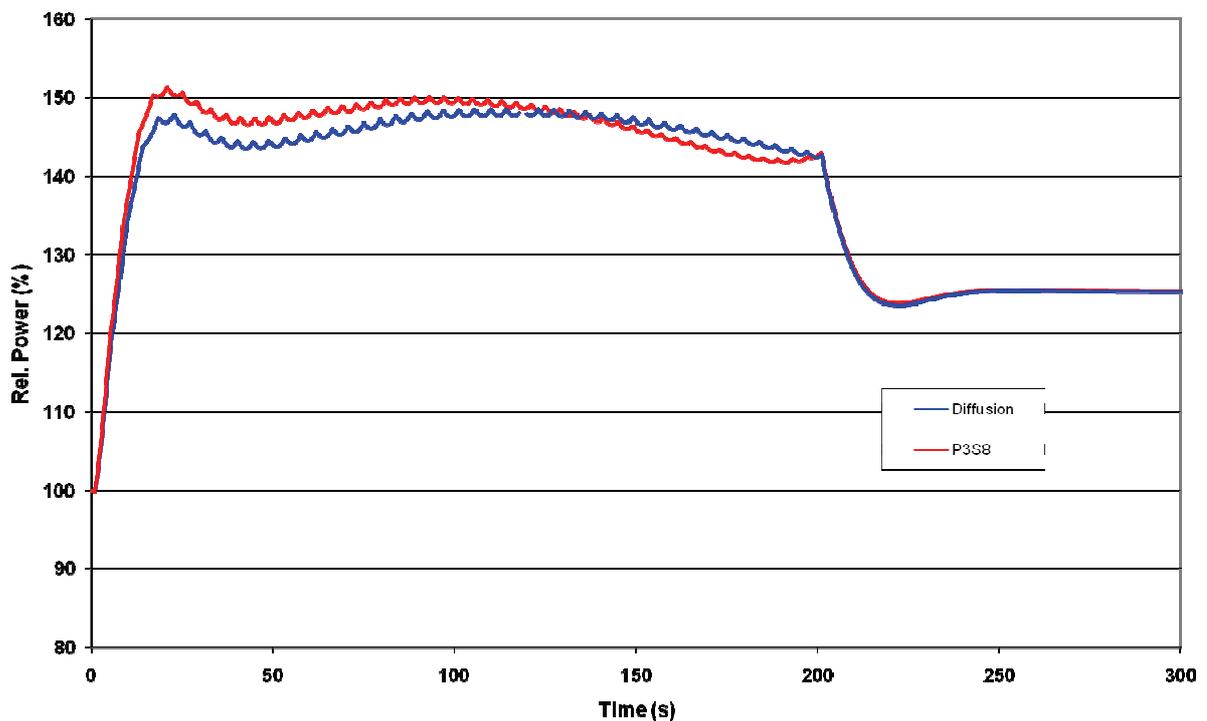
Abb. 5-8: Vergleich der schnellen Flüsse (0.1-10 MeV) für unterschiedliche axiale Positionen des PBMR268. Gezeigt sind die Flüsse für Diffusions- und Transporttheorie (gestrichelte/durchgezogene Linien) für die Oberkante (rot), Unterkante (schwarz) und Mittelebene (blau) der aktiven Zone des Reaktors.



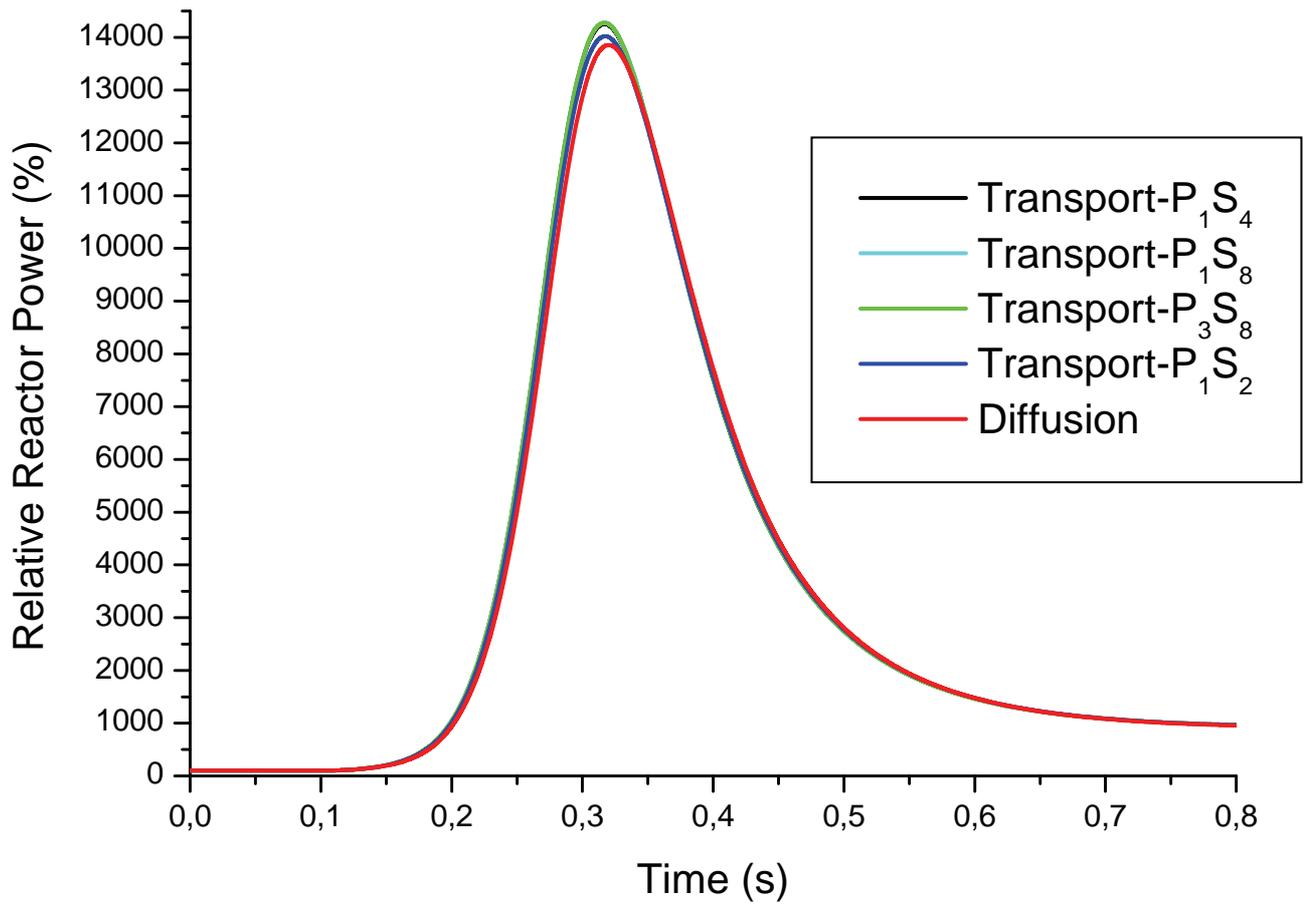
**Abb. 5-9:** Die unterschiedlichen Gitternetze, die für die Kopplung DORT-TD und THERMIX-DIREKT verwendet werden. In der linken Abbildung sind die überlagerten Rechengitter der Neutronenkinetik und Thermohydraulik dargestellt, in der mittleren Abbildung das thermohydraulische Gitter mit dem sog. „Rückwirkungsgitter“, auf dem für jede Masche ein individueller Querschnittssatz erzeugt wird. Für die Projektion der neutronenkinetischen Leistungsverteilung auf die Thermohydraulik werden die Leistungsdichten des feinen Neutronenkinetik-Gitters auf den groben Maschen des Leistungsdichte-Gitters (gelbe Maschen in der rechten Abbildung) gemittelt.



**Abb. 5-10:** Das Prinzip der Zeitschrittwertensteuerung in DORT-TD/THERMIX-DIREKT. Der „große“ Zeitschritt wird stets von THERMIX ermittelt (entweder aus vom Anwender vorgegebenen Zeitschritten oder selbst-adaptiv im Code), DORT-TD wählt dann wenn erforderlich kleinere Unterzeitschritte. Die Synchronisation zwischen beiden Codes und der notwendige Datenaustausch erfolgt jeweils nur zu Anfang und Ende des „großen“ Zeitschritts.



**Abb. 5-11:** Verlauf der integralen Reaktorleistung für den PBMR268-Rechenfall „Simultanes Fehlfahren aller Steuerstäbe“. Im Vergleich sind die Ergebnisse von Diffusionstheorie (blau) und Transporttheorie (rot,  $P_3S_8$ ) zu sehen.



**Abb. 5-12:** Verlauf der integralen Reaktorleistung für den PBMR268-Störfall „Auswurf aller Regelstäbe“. In der Grafik werden mehrere Transportansätze und Diffusionsapproximation miteinander verglichen.

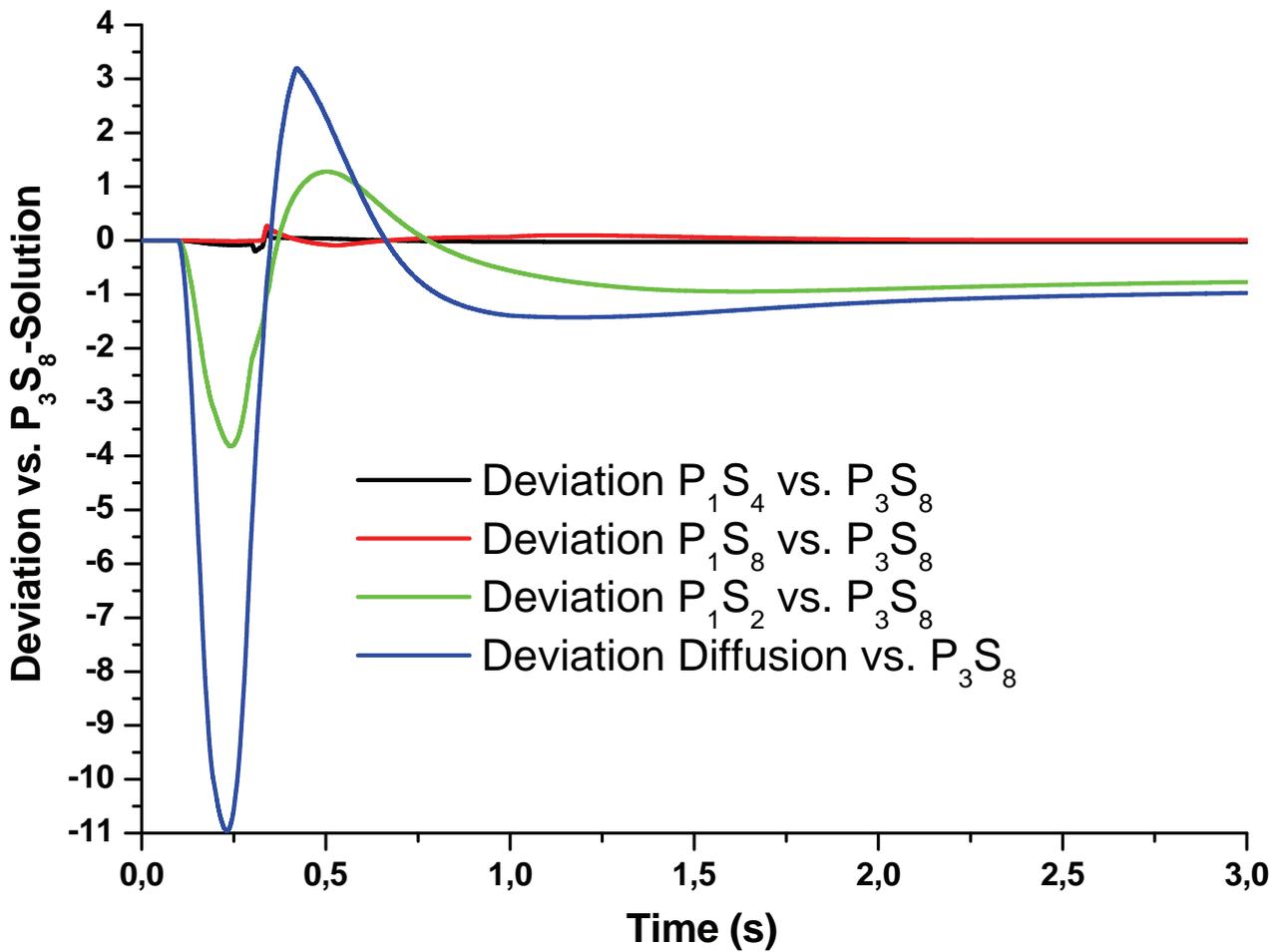


Abb. 5-13: Die zu Abb. 5-12 korrespondierenden relativen Unterschiede zwischen den verschiedenen Lösungsansätzen. Der  $P_3S_8$ -Rechenfall wurde hier als „Quasi“-Referenz verwendet.

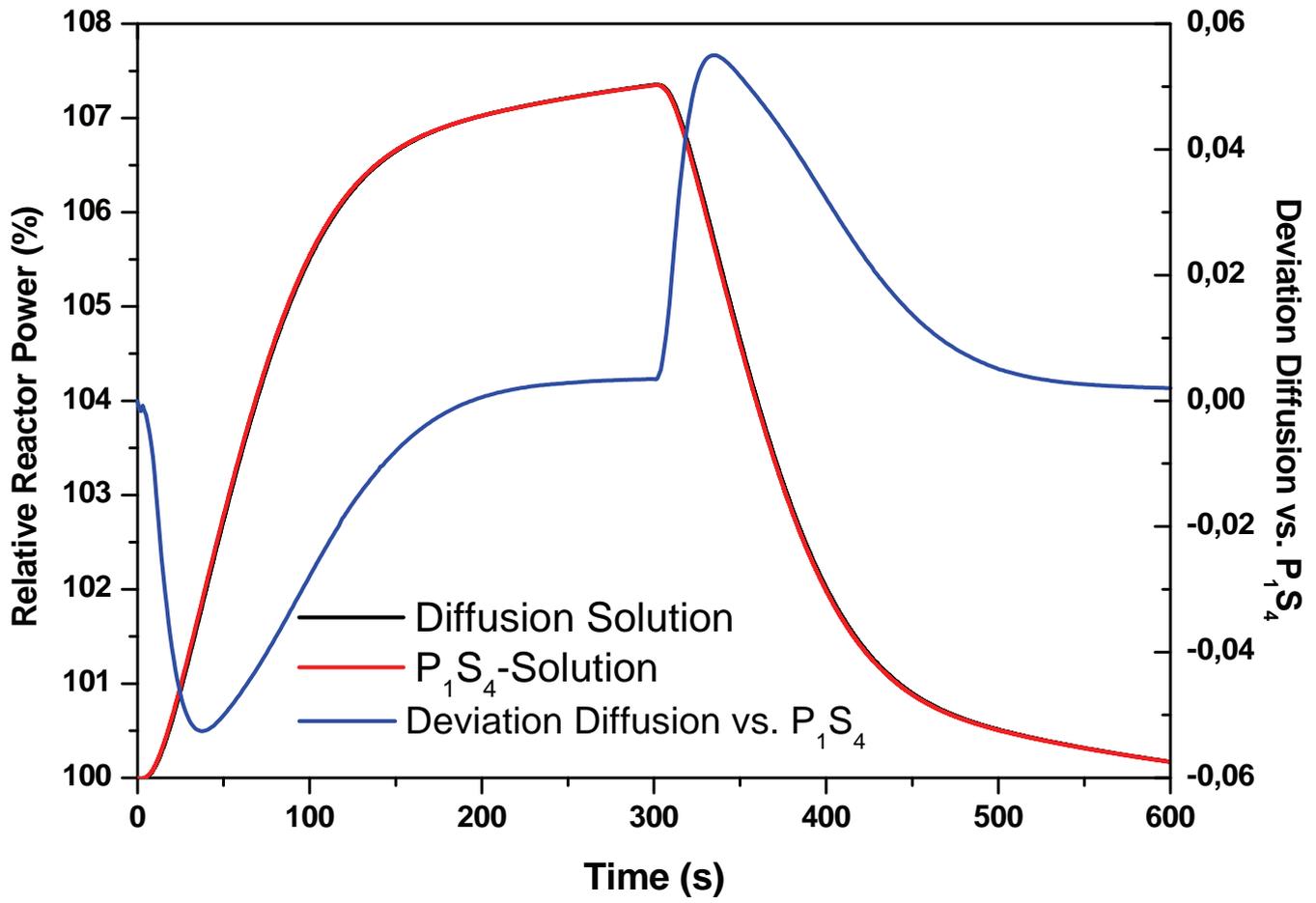
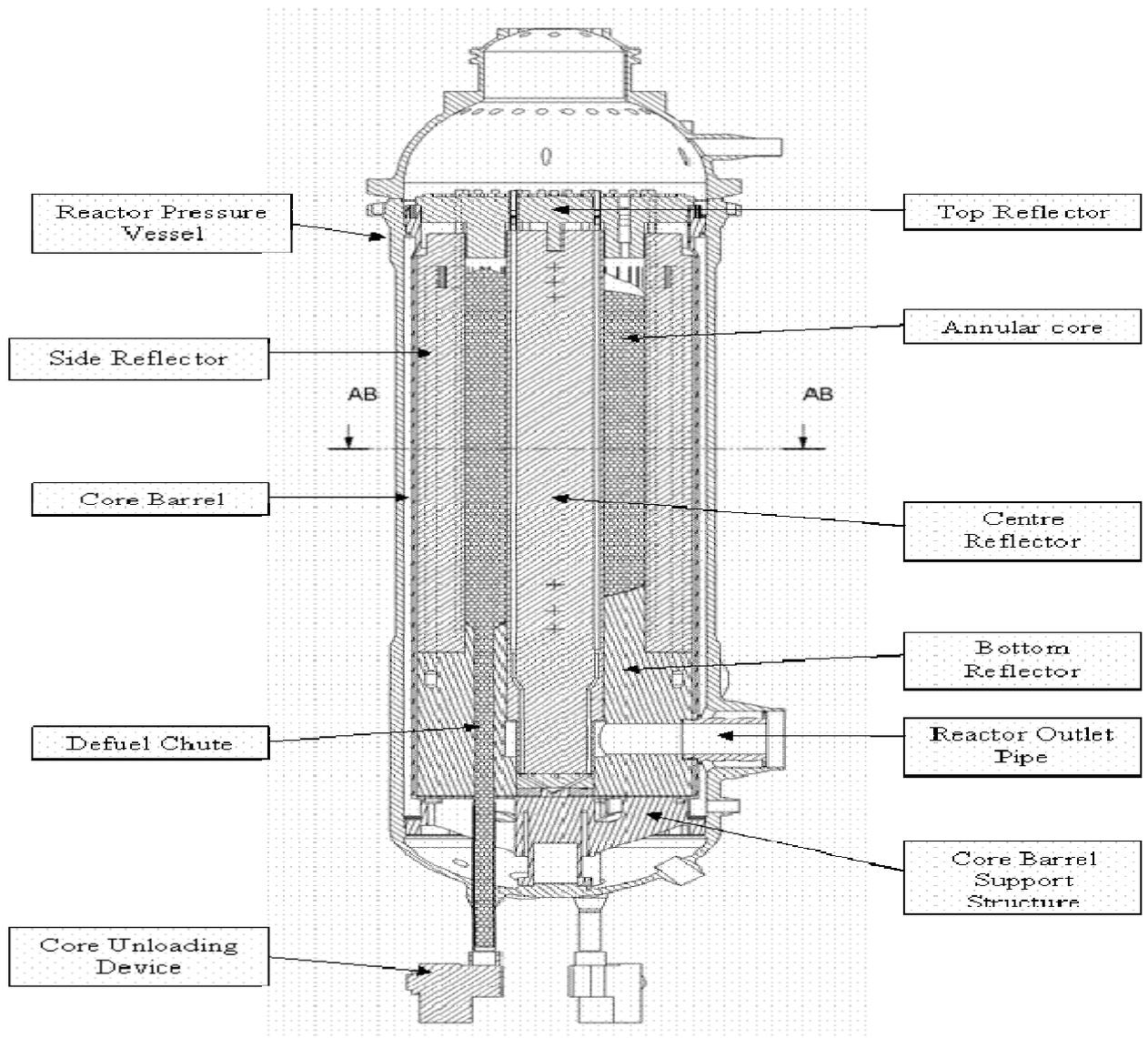


Abb. 5-14: Verlauf der integralen Reaktorleistung für die PBMR268-Transiente „Einbruch von kaltem Helium“; gezeigt ist die relative Leistung für Diffusions- (schwarz) und Transport- (P<sub>1</sub>S<sub>4</sub>)-Lösung. Außerdem ist in blau die relative Abweichung zwischen Transport- und Diffusionslösung gezeigt.



**Abb. 5-15:** Schematische Darstellung des PBMR400-Reaktordesigns. Diese Anordnung ist die Grundlage für die Definition des PBMR400-Transient-Benchmarks.

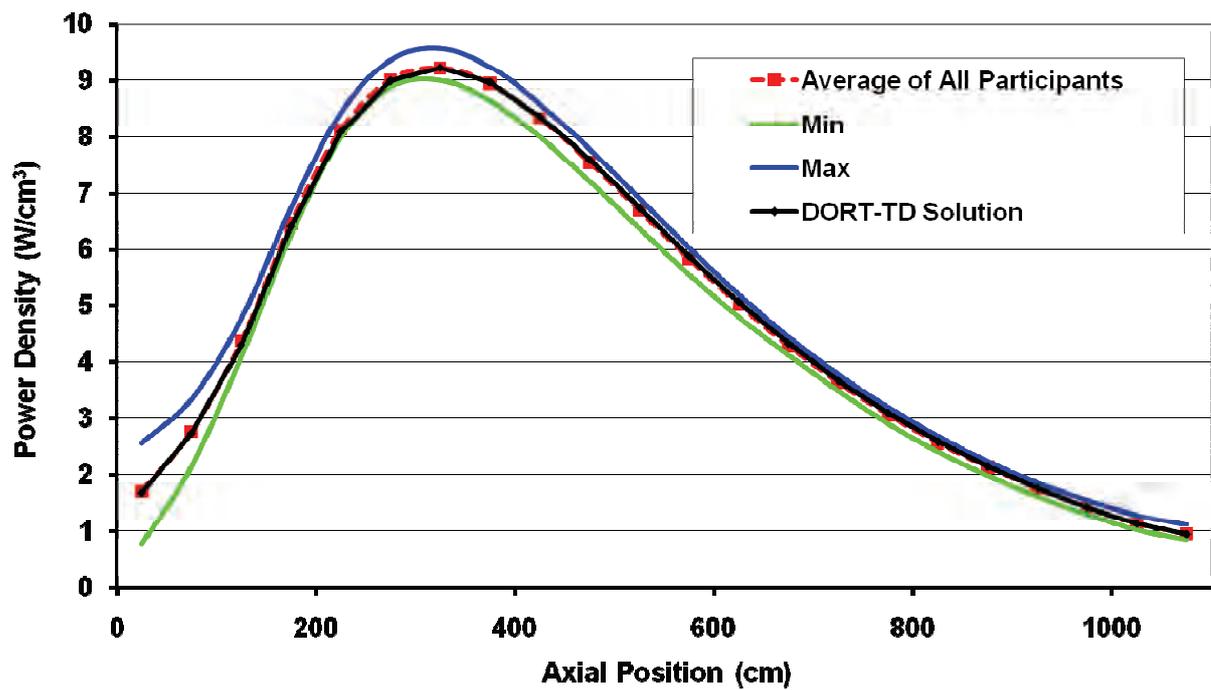


Abb. 5-16: Die für die erste PBMR400-Benchmark-Übung (nur Neutronik) berechnete axiale Leistungsdichteverteilung (radial gemittelt). Gezeigt sind die Ergebnisse von DORT-TD gemeinsam mit dem Benchmark-Mittelwert sowie dem Maximum/Minimum-Band der abweichenden Lösungen.

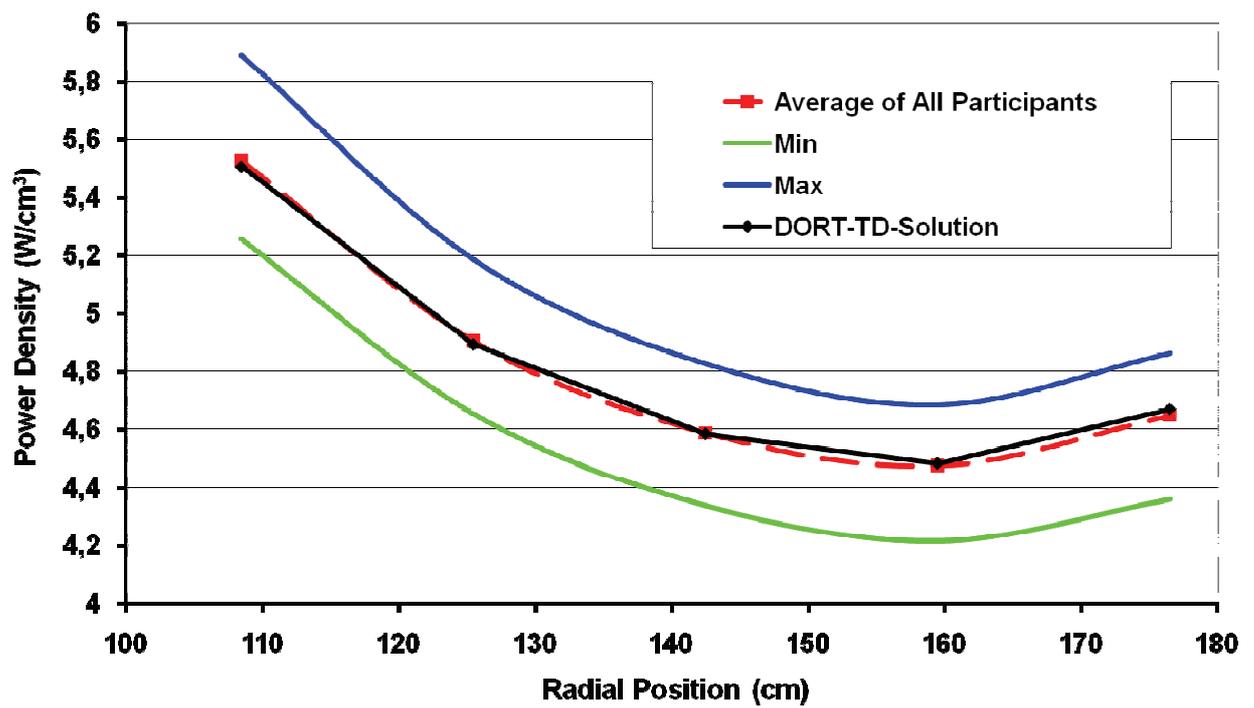


Abb. 5-17: Die für die erste PBMR400-Benchmark-Übung (nur Neutronik) berechnete radiale Leistungsdichteverteilung (axial gemittelt). Gezeigt sind die Ergebnisse von DORT-TD gemeinsam mit dem Benchmark-Mittelwert sowie dem Maximum/Minimum-Band der abweichenden Lösungen.

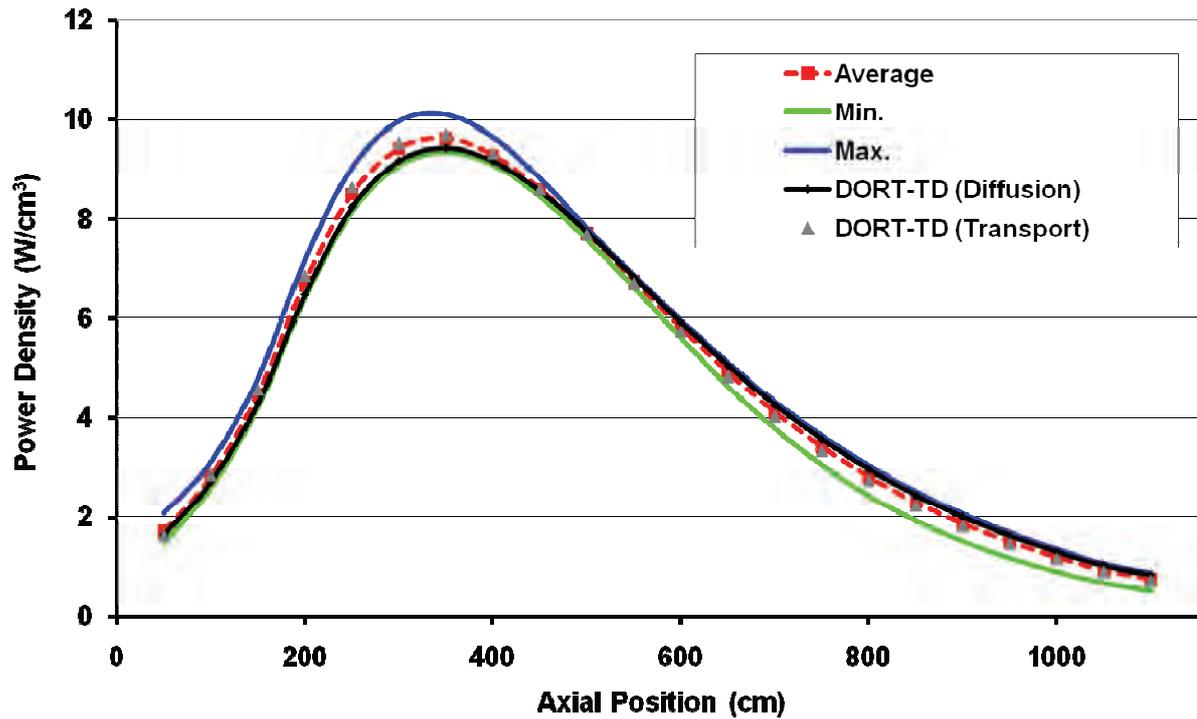


Abb. 5-18: Der im PBMR400-Benchmark berechnete stationäre axiale Leistungsdichteverlauf für die gekoppelte Übung (radial gemittelt). Gezeigt sind die Ergebnisse von DORT-TD (Diffusion und Transport) gemeinsam mit dem Benchmark-Mittelwert sowie dem Maximum/Minimum-Band der abweichenden Lösungen.

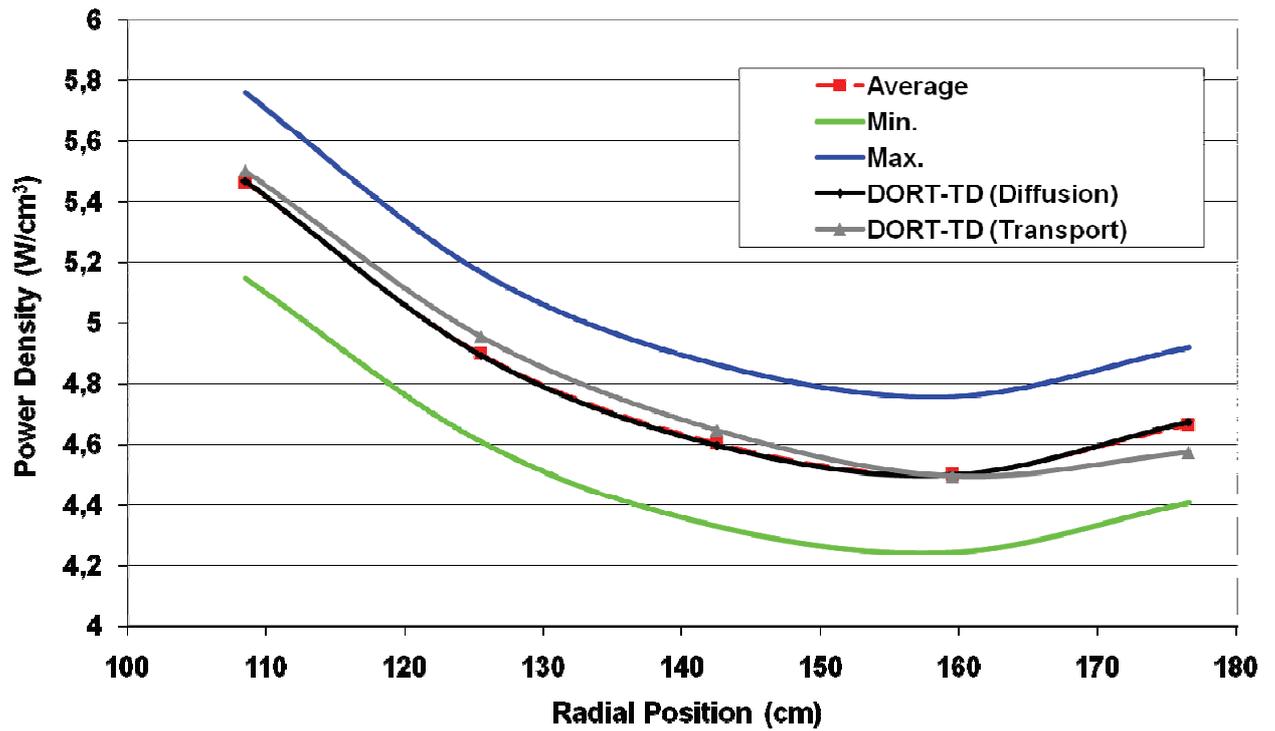
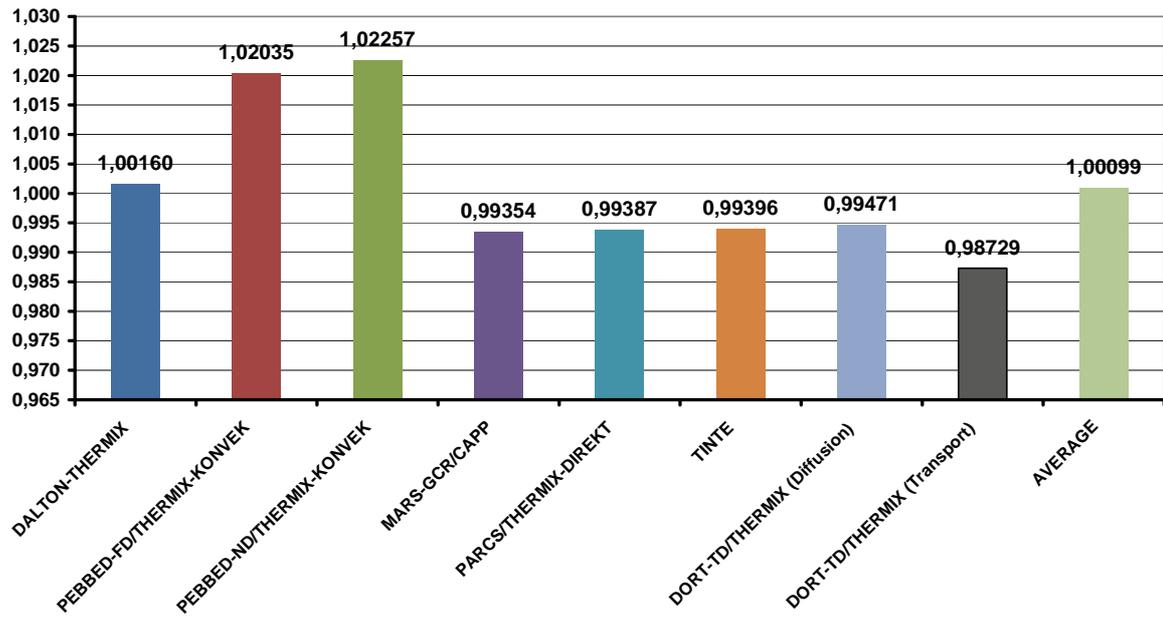


Abb. 5-19: Der im PBMR400-Benchmark berechnete stationäre radiale Leistungsdichteverlauf für die gekoppelte Übung (axial gemittelt). Gezeigt sind die Ergebnisse von DORT-TD (Diffusion und Transport) gemeinsam mit dem Benchmark-Mittelwert sowie dem Maximum/Minimum-Band der abweichenden Lösungen.



**Abb. 5-20:** Die für die gekoppelte Übung des PBMR400-Transient Benchmark berechneten Eigenwerte des stationären Ausgangszustandes des Reaktors (Vergleich aller Teilnehmer inklusive der DORT-TD Transport- und Diffusionslösungen).

## 10      **Anhang A: Veröffentlichungen im Rahmen von RS1160**

In diesem Anhang sind die Veröffentlichungen aufgelistet, die im Rahmen von RS1160 durch die GRS angefertigt wurden. Im Einzelnen sind dies:

- /LAN06/    S. Langenbuch, A. Seubert, W. Zwermann, "Solution of the stationary state of the PWR MOX/UO<sub>2</sub> Core Transient Benchmark", Jahrestagung Kerntechnik, Aachen, 2006.
  
- /LAN07/    S. Langenbuch, A. Seubert, W. Zwermann, "High Accuracy Large Scale Monte Carlo and Deterministic Transport Calculations for Critical Systems", Joint Intl. Topical Meeting on Mathematics & Computation and Supercomputing in Nuclear Applications, Monterey, USA, April 2007.
  
- /LAN08/    S. Langenbuch, A. Pautz, W. Zwermann, W. Bernnat, M. Mattes, "Effect of Nuclear Data on Core Calculations", UAM-2 Workshop, Garching, Mai 2008.
  
- /LAN08b/   S. Langenbuch, A. Pautz, A. Seubert, K. Velkov, K. Ivanov, „International Activities of Development and Validation of Coupled Codes and their Significances for Realistic Accident Analyses“, Jahrestagung Kerntechnik, Hamburg, 2008.
  
- /PAU08/    A. Pautz, B. Tyobeka, K. Ivanov: „Application of Time-Dependent Transport Theory for High Temperature Reactors of Pebble Bed Type“, Physor 2008, Interlaken, Schweiz, September 14-19, (2008).
  
- /SEU06/    A. Seubert, S. Langenbuch, W. Zwermann, "Solution of the Stationary State of the PWR MOX/UO<sub>2</sub> Core Transient Benchmark“, PHYSOR 2006, Vancouver, Canada, September 2006.
  
- /SEU08a/   A. Seubert, S. Langenbuch, K. Velkov, W. Zwermann, "Deterministic and Monte Carlo Transport Models with Thermal-Hydraulic Feedback“, Jahrestagung Kerntechnik, Hamburg, 2008.

- /SEU08b/ A. Seubert, K. Velkov, S. Langenbuch,, "The time-dependent 3D discrete ordinates code TORT-TD with thermal-hydraulic feedback by ATHLET models ", Physor 2008, Interlaken, Schweiz, September 14-19, (2008).
- /ZWE07/ W. Zwermann, S. Langenbuch, „Monte Carlo Calculations with Nuclear Point Data Based on JEF-2.2 and JEFF-3.1 for the VENUS-7 Critical Benchmarks“, Int. Conf. Nuclear Data for Science and Technology, Nice, France, 22-27 April, 2007.
- /ZWE08/ W. Zwermann, S. Langenbuch, A. Alander, P. Magat, W. Timm, "Comparison of Modern Lattice Codes, MCNP and Other Transport Codes for the VENUS-1 and VENUS-2 Cores“, Jahrestagung Kerntechnik, Hamburg, 2008.
- /ZWE08b/ W. Zwermann, S. Langenbuch, Byung-Chan Na, Enrico Sartori, U. Wehmann, „Summary of Results for the VENUS-7 Benchmark“, Physor 2008, Interlaken, Schweiz, September 14-19, (2008).

## 11 Verteiler

### BMWi

Referat III B 4 1 x

### GRS-PT/B

Internationale Verteilung 40 x

Projektbegleiter (seh) 3 x

### GRS

Geschäftsführung (hah, stj) je 1 x

Bereichsleiter (erv, lim, prg, tes, rot, zir) je 1 x

Abteilungsleiter (gls, poi, bea, paa, som) je 1 x

Projektleiter (paa) 1 x

Projektbetreuung (kgl) 1 x

Informationsverarbeitung (nit) 1 x

Autoren (paa, pap, seu, vek, zww) je 1 x

Bibliothek (Garching, Köln) je 1 x

**Gesamtauflage 67 Exemplare**