

**Fortschrittliche  
Rechenmethoden  
zum Kernverhalten bei  
Reaktivitätsstörfällen**



## **Abschlussbericht/ Final Report**

Reaktorsicherheitsforschung-  
Vorhabens Nr.: /  
Reaktor Safety Research-Project No.:  
RS1183

Vorhabensitel / Project Title:  
Fortschrittliche Rechen-  
methoden zum Kernverhalten  
bei Reaktivitätsstörfällen

Advanced Computational Methods  
for the Assessment of Reactor  
Core Behaviour During  
Reactivity Initiated Accidents

Autoren / Authors:  
A. Pautz, Y. Perin, I. Pasichnyk,  
K. Velkov, W. Zwermann,  
A. Seubert, M. Klein, L. Gallner  
B. Krzycacz-Hausmann

Berichtszeitraum / Publication Date:  
Mai 2012

### **Anmerkung:**

Das diesem Bericht zugrunde liegende F&E-Vorhaben wurde im Auftrag des Bundesministeriums für Wirtschaft und Technologie (BMWi) unter dem Kennzeichen RS1183 durchgeführt.

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Auftragnehmer.



## **Kurzfassung**

Der vorliegende Bericht dokumentiert den Abschluss der Arbeiten im F&E-Vorhaben RS1183 „Fortschrittliche Rechenmethoden zum Kernverhalten bei Reaktivitätsstörfällen“. Diese Arbeiten widmeten sich der Entwicklung, Validierung und Anwendung fortschrittlicher Rechenmethoden zur Simulation von Transienten- und Störfallabläufen, die neben dem Verhalten der Gesamtanlage insbesondere das reaktorphysikalische, thermohydraulische und thermomechanische Verhalten des Reaktorkerns detailliert abbilden. Das übergeordnete Ziel des Projekts war die Bereitstellung einer modernen nuklearen Rechenkette, die neben fortgeschrittenen transporttheoretischen Werkzeugen zur gekoppelten 3D-Ganzkernanalyse auch geeignete Codes zur Multigruppen-Wirkungsquerschnittenerzeugung sowie Monte-Carlo-Modelle zur Verifikation der nuklearen Basisdaten und der einzelnen Berechnungsschritte umfasst. Diese Rechenkette sollte in erster Linie für Leichtwasserreaktoren, darüber hinaus aber auch für innovative Reaktorkonzepte einsetzbar sein und musste daher entsprechend umfassend an Benchmarks und kritischen Experimenten validiert werden. Schließlich sollten geeignete Verfahren zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse evaluiert und eingesetzt werden, um die methodischen und datenbezogenen Unsicherheiten zu quantifizieren und deren Propagation durch die Rechenkette systematisch zu untersuchen.

## **Abstract**

The document at hand serves as the final report for the reactor safety research project RS1183 “Advanced Computational Methods for the Assessment of Reactor Core Behavior During Reactivity-Initiated Accidents”. The work performed in the framework of this project was dedicated to the development, validation and application of advanced computational methods for the simulation of transients and accidents of nuclear installations. These simulation tools describe in particular the behavior of the reactor core (with respect to neutronics, thermal-hydraulics and thermal mechanics) at a very high level of detail. The overall goal of this project was the deployment of a modern nuclear computational chain which provides, besides advanced 3D tools for coupled neutronics/thermal-hydraulics full core calculations, also appropriate tools for the generation of multi-group cross sections and Monte Carlo models for the verification of the individual calculational steps. This computational chain shall primarily be deployed for light water reactors (LWR), but should beyond that also be applicable for innovative reactor concepts. Thus, validation on computational benchmarks and critical experiments was of paramount importance. Finally, appropriate methods for uncertainty and sensitivity analysis were to be integrated into the computational framework, in order to assess and quantify the uncertainties due to insufficient knowledge of data, as well as due to methodological aspects.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung: „RS1183: Fortschrittliche Rechenmethoden zum Kernverhalten bei Reaktivitätsstörfällen“ .....</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Aufgabenstellung und Zielsetzung.....</b>	<b>5</b>
2.1	Weiterentwicklung der zeitabhängigen Neutronentransportprogramme DORT/TORT-TD in 2D- und 3D-Geometrie .....	5
2.2	Anwendungsfälle für die deterministischen Neutronentransportprogramme DORT-TD und TORT-TD.....	6
2.3	Einsatz des Monte Carlo Programms MCNP für Kernberechnungen .....	6
2.4	Methoden zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse .....	7
<b>3</b>	<b>Planung und Ablauf des Vorhabens.....</b>	<b>8</b>
3.1	Ausgangssituation und Stand von Wissenschaft und Technik bei Beginn des Vorhabens .....	10
3.2	Zusammenarbeit mit anderen Forschungsstellen.....	15
<b>4</b>	<b>AP 1: Weiterentwicklung der von der GRS bereitgestellten gekoppelten Rechencodes TORT-TD/ATHLET .....</b>	<b>16</b>
4.1	AP 1.1: Adaptive Modellierung mit homogenen und heterogenen Kernbereichen .....	16
4.1.1	Räumliche Kopplung.....	17
4.1.2	Winkelkopplung .....	18
4.1.3	Testproblem.....	19
4.2	AP 1.2: Erzeugung konsistenter Multigruppen-Wirkungsquerschnitte für Neutronentransportrechnungen .....	20
4.2.1	Stabzell-Diskontinuitätsfaktoren in der Diskrete-Ordinaten-Transportgleichung in Kartesischer Geometrie .....	22
4.2.2	Die SPH-Methode.....	32
4.2.3	Die Methode der effektiven Absorber-Wirkungsquerschnitte.....	41
4.3	AP 1.3: Kopplung des Neutronentransportcodes TORT-TD mit einem thermohydraulischen Unterkanalmodell .....	47

4.3.1	COBRA-TF Beschreibung.....	49
4.3.2	Anbindung von COBRA-TF an die Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse des GRS-Codes SUSAS.....	50
4.3.3	Implementierung eines sogenannten „Boron Tracking“-Modells.....	50
4.3.4	Kopplung des Neutronentransportcodes TORT-TD mit dem thermohydraulischen Unterkanalmodell COBRA-TF .....	51
4.3.5	COBRA-TF/TORT-TD DWR-Validierungsfälle .....	54
4.3.6	COBRA-TF/TORT-TD SWR-Validierungsfälle .....	56
4.3.7	Kopplung des Diffusionscodes QUABOX/CUBBOX mit dem thermohydraulischen Unterkanalmodell COBRA-TF .....	58
4.4	AP 1.4: Auswertung von Ansätzen zur Behandlung mit unstrukturierten Gittern.....	59
4.4.1	Herleitung der FEM-Grundgleichungen.....	59
4.4.2	Assemblierung des Gleichungssystems.....	64
4.4.3	Entwicklung eines 2D-FEM-Solvers für die Diffusionsgleichung in mehreren Energiegruppen .....	64
4.4.4	Strategie zur Implementierung von Transportlösern auf unstrukturierten Gittern .....	66
<b>5</b>	<b>AP 2: Validierung der zeitabhängigen deterministischen Transportmodelle in DORT-TD und TORT-TD anhand geeigneter Experimente und Benchmarks .....</b>	<b>67</b>
5.1	AP 2.1: LWR-Testfälle.....	67
5.2	AP 2.2: PBMR-Testfall .....	73
5.2.1	Der „PBMR 400 MW Transient Benchmark“ .....	74
5.2.2	Fall: Ausfall der Zwangskühlung im drucklosen Zustand (Depressurised Loss of Forced Cooling - DLOFC).....	77
5.2.3	Fall: 100-40-100 %-Lastfolgebetrieb .....	79
5.2.4	Fall: Steuerstabausfahren.....	82
5.2.5	Fall: Einströmen von kaltem Helium.....	83
5.3	AP 2.3: Testfall für eine unterkritische Anordnung .....	85
5.3.1	Rechenverfahren und Implementierung .....	86
5.3.2	Anwendung auf das unterkritische System YALINA-Thermal.....	88



5.3.3	Geometrische Modellierung von YALINA-Thermal in TORT-TD.....	89
5.3.4	TORT-TD-Analysen des stationären Zustands von YALINA-Thermal und der Antwort auf eine gepulste Neutronenquelle.....	91
<b>6</b>	<b>AP 3: Ganzkernrechnungen mit Monte Carlo-Methoden .....</b>	<b>93</b>
6.1	AP 3.1: Bereitstellung von NJOY zur Erstellung von Punktdaten und Mehrgruppendaten .....	93
6.2	AP 3.2: Überprüfung der neuen Datenbibliotheken durch Nachrechnung kritischer Experimente und von Kernanordnungen.....	95
6.3	AP 3.3: Methodenentwicklung zur Beschleunigung der Monte Carlo Berechnungen für große Kernanordnungen.....	102
6.4	AP3.4: Volle Integration der thermohydraulischen Rückwirkungen in MCNP Berechnungen.....	104
<b>7</b>	<b>AP4: Quantifizierung der methodischen Unsicherheiten und der Unsicherheiten in den nuklearen Basisdaten .....</b>	<b>110</b>
7.1	AP 4.1: Einsatz von Methoden zur Unsicherheitsanalyse für Zell- Spektralrechnungen und Brennelementrechnungen .....	110
7.2	AP 4.2: Einsatz von Methoden zur Unsicherheitsanalyse für Kerntransienten .....	121
<b>8</b>	<b>Zusammenfassung der Ergebnisse und Verwertungsplan.....</b>	<b>126</b>
8.1	AP 1: Weiterentwicklung der gekoppelten Rechencodes TORT- TD/ATHLET und TORT-TD/COBA-TF .....	126
8.2	AP2: Validierung der zeitabhängigen deterministischen Transportmodelle in DORT-TD und TORT-TD.....	129
8.3	AP3: Ganzkernrechnungen mit Monte Carlo-Methoden.....	131
8.4	AP4: Quantifizierung der methodischen Unsicherheiten und der Unsicherheiten in den nuklearen Basisdaten .....	133
8.5	Weitere Verwertung und Veröffentlichungen im Rahmen von RS1183 ..	134
<b>9</b>	<b>Literaturverzeichnis.....</b>	<b>140</b>
<b>10</b>	<b>Verteiler .....</b>	<b>153</b>

## Abbildungsverzeichnis

Abb. 3-1:	Projektablaufplan des RS-Forschungsprojekts RS1183.....	9
Abb. 4-1	Zweidimensionale Projektion zwischen einem groben 2x2-Gitter (rot) und einem feinen 3x3-Gitter (grün). $g(i,j)$ und $r(i,j)$ sind die Volumina der Masche $(i, j)$ auf dem groben bzw. feinen Gitter, aus denen sich die Gewichtungsfaktoren errechnen. ....	17
Abb. 4-2	Zur Transformation zwischen einer $S_8$ -Quadratur (grün) auf eine $S_{10}$ -Quadratur (rot).....	18
Abb. 4-3	LMW-Benchmark.....	19
Abb. 4-4	Leistungsverlauf der LMW-Transiente, berechnet mit QUABOX/CUBBOX (blau) sowie TORT-TD im $S_N$ -Modus (rot) bzw. im Diffusionsmodus (grün). ....	20
Abb. 4-5	Darstellung des homogenisierten Winkelflusses innerhalb aneinandergrenzender Rechenzellen. ....	23
Abb. 4-6	OECD/NEA- und US-NRC-PWR-MOX/ $UO_2$ -Kerntransienten-Benchmark mit vollständig eingefahrenen Steuerelementen. Links: Viertelkern-Brennelement-Anordnung. Rechts: Stabzell-Anordnungen der $UO_2$ - und MOX-Brennelemente mit Geometrien ausgewählter Stabzellen.....	27
Abb. 4-7	Verteilung der Stabzell-Diskontinuitätsfaktoren im Viertelkern des ARI-Zustands (alle Steuerelemente eingefahren) für die schnelle (links) und thermische (rechts) Energiegruppe.....	29
Abb. 4-8	Relative Unterschiede zwischen der TORT-TD-Brennelement-Leistungsverteilung zur Monte-Carlo-Lösung mit nuklearen Punktdaten: Links ohne PDFs, rechts nach der GET-Methode (mit PDFs). ....	30
Abb. 4-9	Relative Unterschiede zwischen der stabzellweisen TORT-TD-Leistungsverteilung im Brennelement an Position E5 zur DeCART-Lösung	

in 47 Energiegruppen: Links ohne PDFs, rechts nach der GET-Methode (mit PDFs). 1.2.5.....	31
Abb. 4-10 Brennelementkonfigurationen des C5G7-Kerns.....	34
Abb. 4-11 Horizontaler (links) und vertikaler (rechts) Schnitt durch den C5G7-Kern mit Reflektor. ....	35
Abb. 4-12 Darstellung der Brennelementgeometrie mit Nummerierung der einzelnen Stabzellen.....	36
Abb. 4-13 Relativer Fehler der Diffusionsrate in der schnellen Energiegruppe (UOX- Brennelement). ....	36
Abb. 4-14 Relativer Fehler der Diffusionsrate in der thermischen Energiegruppe (UOX-Brennelement). ....	37
Abb. 4-15 Relativer Fehler der Produktionsrate in der schnellen Energiegruppe (UOX-Brennelement). ....	37
Abb. 4-16 Relativer Fehler der Produktionsrate in der thermischen Energiegruppe (UOX-Brennelement). ....	38
Abb. 4-17 Relative Abweichungen der QUABOX/CUBBOX-Rechnungen (oben: ohne SPH-Korrektur, unten: mit SPH-Korrektur) von der KENO-VI- Referenzlösung. ....	39
Abb. 4-18 Relative Abweichungen der QUABOX/CUBBOX-Rechnungen ohne SPH- Korrektur von der KENO-VI-Referenzlösung.....	40
Abb. 4-19 Relative Abweichungen der QUABOX/CUBBOX-Rechnungen mit SPH- Korrektur von der KENO-VI-Referenzlösung.....	40
Abb. 4-20 Relative Unterschiede zwischen der PARTISN-Brennelement- Leistungsverteilung zur Monte-Carlo-Lösung mit JEF-2.2-Daten: Links mit unkorrigierten, rechts mit effektiven homogenisierten Absorber- Wirkungsquerschnitten. ....	42

Abb. 4-21	Relative Unterschiede zwischen der stabzellenweisen $S_N$ -Transportlösung für die Leistungsverteilung im Brennelement E5 und der MCNP-Referenzlösung. Links: TORT-TD mit PDFs nach der GET-Methode. Rechts: PARTISN mit effektiven homogenisierten Absorber-Wirkungsquerschnitten. ....	44
Abb. 4-22	Kernanordnung und Brennelement mit Absorberstäben aus der Benchmark-Serie LEU-COMP-THERM-008.....	45
Abb. 4-23	Axiale Borkonzentrationsverteilung im 2x2-Minikern während einer Borpfropfen-Transiente .....	51
Abb. 4-24	Interne Kopplungsmethode.....	52
Abb. 4-25	„Staggered time step“ Schema .....	53
Abb. 4-26	2x2-UO <sub>2</sub> -Brennelementanordnung für die Steuerstabauswurf-Simulation	54
Abb. 4-27	Zeitablauf der Kernleistung während eines Steuerstabauswurfs – Vergleich zwischen grobmaschigen und feinmaschigen TH-Modellen .....	55
Abb. 4-28	Zeitablauf der mittleren Kern-Brennstofftemperatur während eines Steuerstabauswurfs – Vergleich zwischen grobmaschigen und feinmaschigen TH-Modellen .....	55
Abb. 4-29	Axiale Leistungsverteilung am Vollast Zustand – Vergleich zwischen COBRA-TF/TORT-TD und COBRA-TF/NEM .....	56
Abb. 4-30	Leistungsverteilung während der <i>Pseudo Steady-State</i> Konvergenz vor der Implementierung einer Konvergenzbeschleunigungsmethode .....	57
Abb. 4-31	Leistungsverteilung während der <i>Pseudo Steady-State</i> Konvergenz nach der Implementierung einer Konvergenzbeschleunigungsmethode .....	57
Abb. 4-32	Zeitablauf der Kernleistung während einer Kühlmitteldichteveriation am Kerneintritt - Vergleich zwischen COBRA-TF/QUABOX-CUBBOX und ATHLET/QUABOX-CUBBOX Ergebnisse .....	58

Abb. 4-33:	Affin-lineare Transformation eines allgemeinen Dreiecks (links) auf ein isoparametrisches Standarddreieck (rechts) .....	62
Abb. 4-34	2D-FEM-Lösung der Diffusionsgleichung mit konstantem Quellterm für $0 < x, y < 1$ auf einer regelmäßigen Triangulierung. Randbedingungen: Bei $y = 0$ und $y = 1$ Dirichlet ( $f = 1,0$ ), bei $x = 0$ und $x = 1$ Neumann ( $df/dr = 1,0$ ). .....	65
Abb. 5-1	Untersucher DWR-Kern. Links: Brennelementanordnung im Viertelkern. Mitte: Die drei radialen Ringzonen für die Bortransiente. Der gelbe äußere Ring stellt den Reflektor dar. Rechts: Stabzellkonfiguration der $UO_2$ - und MOX-Brennelemente .....	67
Abb. 5-2	Lineare Absenkung der Borkonzentrationen am Kerneintritt der radialen Zonen 1 und 2 .....	68
Abb. 5-3	Vergleich der Brennelement-Leistungsverteilungen des stationären Zustands.....	70
Abb. 5-4	Integrale Leistungsverläufe für die Borverdünnungstransiente (links: Fall 1, rechts: Fall 2).....	71
Abb. 5-5	Axiales Leistungsprofil im Brennelement 83 für Fall 2 zum Zeitpunkt des integralen Leistungsmaximums.....	71
Abb. 5-6	Mit KENO Va berechnete Leistungsverteilung des DWR MOX/UOX-Kerns (links) und relative Abweichung der QUABOX/CUBBOX-Lösung für den gleichen Kern (rechts).....	72
Abb. 5-7	DORT-TD-Ergebnisse der „PBMR 400 MW Transient Benchmark“-Übung zur axialen Leistungsverteilung für den stationären Zustand.....	76
Abb. 5-8	DORT-TD-Ergebnisse der „PBMR 400 MW Transient Benchmark“-Übung zum Ausfall der Zwangskühlung im drucklosen Zustand (Depressurised Loss of Forced Cooling - DLOFC). In der oberen rechten Ecke ist eine vergrößerte Ansicht des Bereichs im gestrichelten Rechteck dargestellt. 78	

Abb. 5-9	Vergleich der durchschnittlichen und der maximalen Kerntemperatur der „PBMR 400 MW Transient Benchmark“-Übung zum Ausfall der Zwangskühlung im drucklosen Zustand (Depressurised Loss of Forced Cooling - DLOFC). Durchgezogene Linien: DORT-TD-Ergebnisse .....	79
Abb 5-10	„PBMR 400 MW Transient Benchmark“-Übung zu Reaktorleistung und Steuerstabsposition während des 100-40-100 %-Lastfolgebetriebs. Es sind die mit drei verschiedenen Codes erzielten Ergebnisse zu den Steuerstabspositionen dargestellt (durchgezogene Linie: DORT-TD-Werte).....	80
Abb. 5-11	Relative über den Kern gemittelte und lokale Xenonkonzentrationen der „PBMR 400 MW Transient Benchmark“-Übung zum Lastfolgebetrieb. Die Linien ohne Symbole zeigen die durchschnittliche Xenonkonzentration, während die Linien mit Symbolen die lokale Xenonkonzentration etwa 100 cm unterhalb der Oberkante des Kugelhaufenreaktorkerns zeigen. ....	82
Abb. 5-12	Vergleich der Ergebnisse für die Reaktorleistung der „PBMR 400 MW Transient Benchmark“-Übung zum Steuerstabsausfahren. Durchgezogene Linien: DORT-TD-Ergebnisse (sowohl für Diffusion als auch Transport) ..	83
Abb. 5-13	Vergleich der Leistungsexkursion der „PBMR 400 MW Transient Benchmark“-Übung zum Einströmen von kaltem Helium. Die DORT-TD-Lösung wird als durchgezogene Linie dargestellt.....	84
Abb. 5-14:	Schematische Darstellung des YALINA-Thermal-Systems mit 280 EK-10-Brennstäben. Links: axialer Schnitt, rechts: radialer Schnitt.....	88
Abb. 5-15:	Die verschiedenen Möglichkeiten der Darstellung einer Stabzelle in TORT-TD .....	89
Abb. 5-16:	Maschengenerierung in TORT-TD für unterschiedlich große Stabzellen, Stabdurchmesser und Ringzonen.....	90
Abb. 5-17	Radialer (links) und axialer Querschnitt (rechts) durch das TORT-TD-Modell von YALINA-Thermal .....	90

Abb. 5-18	Zeitabhängige Simulation der Antwort von YALINA-Thermal auf eine Sequenz zweier Rechteckimpulse von 5 $\mu\text{sec}$ bzw. 40 $\mu\text{sec}$ Dauer (5 $\mu\text{sec}$ Pause). Links: Gesamt-Spaltrate, rechts: Reaktorperiode. Es sind zwei Rechnungen mit verschiedenen Zeitschritten ( $\Delta t = 1 \mu\text{sec}$ bzw. $\Delta t = 2 \mu\text{sec}$ ) dargestellt. ....	91
Abb. 6-1	MCNP-Ergebnisse für die radialen Stableistungsverteilungen der VENUS-7/1-Anordnung mit unterschiedlichen JEF/JEFF-Daten .....	98
Abb. 6-2	MCNP-Ergebnisse für die radialen Brennelementleistungsverteilungen des DWR-UO <sub>2</sub> /MOX-Kerntransientenbenchmarks mit unterschiedlichen JEF/JEFF-Daten .....	100
Abb. 6-3	MCNP-Ergebnisse für die radialen Brennelementleistungsverteilungen des VVER-1000-Ganzkernbenchmark mit unterschiedlichen Punkt- und Multigruppen-Daten. Links: Nulllast heiß unkontrolliert, rechts: Nulllast heiß kontrolliert, ohne Bor.....	101
Abb. 6-4	Relative Differenz der Leistung in drei Brennelementen des WWER-1000-Ganzkernbenchmarks vom Endwert nach einer Milliarde Neutronenschicksale, berechnet mit MCNP und JEFF 3.1-Daten. ....	103
Abb. 6-5	MCNP-Geometriemodell für den DWR-MOX/UO <sub>2</sub> -Kerntransientenbenchmark.....	106
Abb. 6-6	Flussdiagramm für die MCNP/ATHLET-Kopplung .....	107
Abb. 6-7	Axiale Leistungsverteilung für den Volllast-Heiß-Zustand .....	108
Abb. 6-8	Relative Differenz zwischen QC und der MCNP/ATHLET-Lösung für die axial gemittelte Brennelement-Leistung .....	109
Abb. 7-1	Vergleich von Eingruppen-Querschnitten und ihren Unsicherheiten für die SWR-Stabzelle des OECD UAM-Benchmarks. Die Fehlerbalken symbolisieren ein 95 %-Konfidenzintervall.....	115

Abb. 7-2	Eingruppen-Querschnitt für $1H(n, n)$ aufgetragen gegen $235U(n, f)$ für $N = 500$ Rechenläufe.....	117
Abb. 7-3	Darstellung eines Viertel des DWR-Brennelements des OECD UAM-Benchmarks.....	118
Abb. 7-4	Histogramm der statistischen Werte von $k_{eff}$ verglichen mit einer Normalverteilung.....	120
Abb. 7-5	Mittelwert der Leistungsverteilung (links) und Unsicherheiten (rechts) des DWR-Brennelements des OECD UAM-Benchmarks bei Nulllast heiß ...	120
Abb. 7-6	Spaltratenverteilung und deren Unsicherheiten für eine Reihe von Brennelementen des DWR MOX/UO <sub>2</sub> Kerns. (Mittelwerte: blau, Unsicherheiten: schwarz, Extremwerte rot).....	123
Abb. 7-7	Unsicherheiten in der nodalen Leistungsverteilung des untersuchten DWR-Kerns. Auf der linken Seite sind die berechneten Standardabweichungen von XSUSA/KENO auf der rechten Seite die berechneten Werte von XSUSA/NEWT/QC gezeigt .....	125



# **1 Einleitung: „RS1183: Fortschrittliche Rechenmethoden zum Kernverhalten bei Reaktivitätsstörfällen“**

Die Entwicklung fortgeschrittener Neutronentransportverfahren sowie die Bereitstellung einer konsolidierten nuklearen Rechenkette mit integrierter Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse waren Hauptgegenstand des Reaktorsicherheitsforschungsvorhabens RS1183 der GRS. Der vorliegende Bericht dokumentiert den erreichten Stand der Arbeiten zum Abschluss des Projektes nach drei Jahren und zwei Monaten Projektlaufzeit.

Die Forschungs- und Entwicklungsvorhaben der GRS widmen sich der Entwicklung, Validierung und Anwendung fortschrittlicher Rechenmethoden zur Simulation von Transienten- und Störfallabläufen, die neben dem Verhalten der Gesamtanlage insbesondere das reaktorphysikalische, thermohydraulische und thermomechanische Verhalten des Reaktorkerns detailliert abbilden. Der Modellumfang solcher gekoppelter Simulationscodes, wie sie standardmäßig im industriellen Umfeld oder Genehmigungs- bzw. Aufsichtsverfahren eingesetzt werden, umfasst üblicherweise eine diffusionstheoretische Beschreibung der neutronenphysikalischen Prozesse sowie eine auf der Lösung der Erhaltungsgleichungen für Masse, Energie und Impuls basierende Berechnung der ein- und mehrphasigen Kühlmittelzustände.

Die primär für Leichtwasserreaktoren (LWR) entwickelten nodalen Grobgitter-Diffusionsverfahren mit wenigen (meist sogar nur zwei) Energiegruppen erweisen sich allerdings aufgrund der fortlaufenden Optimierung der Beladestrategien und immer heterogenerer Kernbeladungen als zunehmend unzureichend für die Berechnung lokaler, sicherheitstechnisch relevanter Parameter. So ist für die Bewertung von LWR-Reaktivitätsstörfällen eine genaue Kenntnis der stabweisen Leistungsverteilung und des minimalen DNB-Verhältnisses notwendig, um verlässliche Aussagen zu Sicherheitsmargen, Brennstabintegrität und Kernkühlbarkeit machen zu können. Die traditionellen Verfahren zur Stabileistungsrekonstruktion aus nodalen Grobgitterwerten werden daher 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. Allerdings werden solche Verfahren auch weiterhin vornehmlich auf der Diffusionsapproximation oder stark vereinfachten Neutronentransportansätzen wie z. B.  $SP_3$  beruhen.

Um ein „State-of-the-Art“-Rechenmodell mit Referenzcharakter bereitstellen zu können, entwickelt die GRS die zeitabhängigen Multigruppen-Neutronentransportcodes DORT-TD und TORT-TD in der Kopplung mit verschiedenen Thermohydraulikcodes, z. B. dem GRS-Systemcode ATHLET. Diese Neutronentransportcodes implementieren die sog.  $S_N$ -Methode („Diskrete Ordinaten“), die im Gegensatz zu Diffusions- und vereinfachten Transportansätzen ohne weitere Approximationen zur Neutronentransportgleichung auskommt und damit über LWR-Stabgitter hinaus praktisch universell einsetzbar ist. So können mit der Diskrete-Ordinaten-Methode auch größere Void- oder Absorberregionen zwanglos beschrieben werden, die einer Behandlung mit Diffusions- oder  $SP_N$ -Methoden nur schwer zugänglich sind. Darüber hinaus verfügt die  $S_N$ -Methode über das Potential, extrem schnelle neutronenphysikalische Prozesse mit Wellenausbreitungscharakter zu erfassen, die in der herkömmlichen Diffusionsapproximation überhaupt nicht berücksichtigt werden können. Somit steht die  $S_N$ -Methode für innovative Reaktorkonzepte (z. B. für Hochtemperaturreaktoren oder beschleunigergetriebene Anordnungen) praktisch uneingeschränkt auch dort zur Verfügung, wo traditionelle Verfahren versagen oder zumindest durch Referenzmodelle intensiv verifiziert werden müssen.

Die mit den deterministischen Transportcodes DORT-TD und TORT-TD erreichbare hohe Vorhersagegenauigkeit ist durch die Teilnahme an verschiedenen internationalen Benchmarks sowie durch Vergleiche mit Ganzkern-Monte-Carlo-Rechnungen in RS1183 und dem Vorgängervorhaben RS1160 hinreichend demonstriert worden. Allerdings wird die Qualität der Rechenergebnisse nicht allein durch die Güte der 3D-Transportrechnung bestimmt, sondern auch durch die in der nuklearen Rechenkette vorgelagerten Rechenschritte zur Wirkungsquerschnittserzeugung und die zugrunde liegenden Basisdatenbibliotheken (z. B. JEFF3.1, ENDF/B-VII). Tatsächlich hat sich bei den Arbeiten in RS1160 und verstärkt in RS1183 herausgestellt, dass der Übergang zu einer kompletten 3D-„Pin-by-Pin“-Analyse nur dann sinnvoll und zielführend ist, wenn die Rechenprogramme zur Erzeugung von stabweisen „Pin-by-Pin“-Wirkungsquerschnitten einen ähnlich hohen Entwicklungs- und Validierungsstatus erreichen wie jene Spektralcodes, die derzeit die Wirkungsquerschnitte für nodale Anwendungen generieren. Insofern ist es unabdingbar, dass die Fortschritte bei den 3D-Ganzkernrechnungen durch entsprechend erweiterte Querschnittserzeugungsverfahren vervollständigt werden, um den gewünschten Genauigkeitsgewinn voll ausschöpfen zu können. In den in RS1183 durchgeführten Arbeiten kommt daher einer geschlossenen, konsistenten nuklearen Rechenkette eine zentrale Bedeutung zu.

Eine stabweise neutronenphysikalische Beschreibung muss durch ein ähnlich detailliertes thermohydraulisches Modell des Reaktorkerns ergänzt werden. Mit den Arbeiten zu COBRA-TF schließt sich die GRS internationalen Trends an, die verstärkt in Richtung sog. Unterkanalmodelle mit Queraustauschmodellierung und auf den Einsatz von „Computational Fluid Dynamics“ (CFD) weisen. Eine verbesserte Modellierung mehrdimensionaler Effekte ist insbesondere in Störfallsituationen relevant, wo z. B. auch in Druckwasserreaktoren Voidbildung in hoch belasteten Kanälen auftreten kann. Hier sind im Rahmen des aktuellen Vorhabens RS1183 bereits wesentliche Verbesserungen durch die Kopplung des 3D-Kernmodells an höherwertige thermohydraulische Verfahren (sowohl mit Unterkanal- als auch mit CFD-Verfahren) erreicht worden.

Neben den deterministischen Neutronentransportverfahren kommt den stochastischen Transportansätzen, also den sog. Monte-Carlo-Methoden, immer stärkere Bedeutung zu. Ihr wesentlicher Vorteil liegt zum einen in der fast uneingeschränkten geometrischen Flexibilität, zum anderen in der Verwendung einer kontinuierlichen Energieskala, in der die Wirkungsquerschnitte als Punktdaten vorliegen. Damit sind sie den deterministischen  $S_N$ -Neutronentransportcodes überlegen, die immer auf den Zwischenschritt der Erzeugung problemabhängiger Querschnittsbibliotheken in Energiegruppenstruktur angewiesen sind. Monte-Carlo-Rechenprogramme wie der Code MCNP, der sich als de-facto-Standard etabliert hat, sind daher als Referenzrechenmodelle anzusehen, die wesentlich zur Verifizierung deterministischer Verfahren beitragen können. Allerdings ist ihr Einsatz sehr rechenzeitaufwändig und außerdem derzeit auf stationäre Berechnungen beschränkt; Transienten- und Störfallanalysen werden auf lange Sicht eine Domäne der deterministischen Rechenverfahren bleiben.

Die GRS verfolgt aus diesem Grund in der Reaktorphysik eine zweigleisige Strategie, die die beiden komplementären Lösungsansätze für die Neutronentransportgleichung gleichermaßen berücksichtigt. Die korrekte Erzeugung von Multigruppen-Querschnittsbibliotheken und die Absicherung des stationären Ausgangszustandes deterministischer Rechnungen kann somit jederzeit durch ein entsprechendes Monte-Carlo-Modell verifiziert werden. Im Rahmen des Vorhabens wurde auch die Berücksichtigung thermohydraulischer Rückwirkungen in MCNP implementiert, wodurch die Modellierung von 3D-LWR-Stabgittern in Leistungszuständen möglich wird.

Die GRS beteiligt sich intensiv an Aktivitäten zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse, die international zusehends an Bedeutung gewinnen und mittelfristig auch in die Genehmigungspraxis einfließen werden. Zweck solcher Analysen ist die

Quantifizierung des Einflusses von Unsicherheiten z. B. in den nuklearen Basisdaten oder Fertigungsgrößen auf die Ergebnisse von Kernauslegungsrechnungen oder Störfallanalysen. Eine besondere Herausforderung besteht darin, die Propagation solcher Unsicherheiten durch die mehrstufige nukleare Rechenkette korrekt nachzuvollziehen. Mit den GRS-Werkzeugen SUSAs und XSUSAs hat die GRS derzeit eine Vorreiterrolle bei der Quantifizierung von Unsicherheiten in reaktorphysikalischen Rechenmodellen eingenommen.

Eine deutliche Steigerung der Vorhersagegenauigkeit in Störfallanalysen kann nach Ansicht der GRS nur durch eine enge Verzahnung aller oben angeführten Aktivitäten erreicht werden. Im Vorhaben RS1183 wurden daher die notwendigen Weiterentwicklungen der deterministischen und stochastischen Rechenverfahren zur 3D-Ganzkernanalyse ebenso durchgeführt wie die Erzeugung konsistenter Querschnittsdaten für räumlich hochaufgelöste Gitter und die Kopplung neutronenphysikalischer Verfahren mit geeigneten thermohydraulischen Unterkanal-Programmen. Die verbleibenden methodischen oder Datenunsicherheiten in der nuklearen Rechenkette können nun durch geeignete Verfahren systematisch quantifiziert werden. Schließlich wurden die universelle Anwendbarkeit und das erhebliche Potential von Neutronentransportverfahren auch an innovativen Reaktorkonzepten wie unterkritischen Anordnungen und Hochtemperaturreaktoren demonstriert.

Kapitel 2 umreißt nochmals in etwas mehr Detail die Aufgabenstellung und Zielsetzung des Vorhabens RS1183. In Kapitel 3 werden die Projektstruktur, die wissenschaftliche Ausgangssituation und der Stand von Wissenschaft und Technik sowie die wichtigsten Partner in der Zusammenarbeit dargestellt. Die Kapitel 4, 5, 6 und 7 dokumentieren in kompakter Form die zu den jeweiligen Arbeitspaketen bzw. den untergeordneten Arbeitspunkten durchgeführten Arbeiten. Aus dem Projekt RS1183 hat sich eine große Anzahl von Veröffentlichungen in Konferenzbeiträgen und wissenschaftlichen Journalen ergeben, die im Kapitel zu Ergebnissen und Verwertungsplan (Kapitel 8) aufgelistet sind.

## **2 Aufgabenstellung und Zielsetzung**

Eine der wesentlichen Aufgabenstellungen der GRS in der Reaktorsicherheitsforschung ist die Bereitstellung einer modernen nuklearen Rechenkette, die neben fortgeschrittenen transporttheoretischen Werkzeugen zur gekoppelten 3D-Ganzkernanalyse auch geeignete Codes zur Multigruppen-Wirkungsquerschnittenerzeugung sowie Monte-Carlo-Modelle zur Verifikation der nuklearen Basisdaten und der einzelnen Berechnungsschritte umfasst. Diese Rechenkette sollte in erster Linie für Leichtwasserreaktoren, darüber hinaus aber auch für innovative Reaktorkonzepte einsetzbar sein und muss daher entsprechend umfassend an Benchmarks und kritischen Experimenten validiert werden. Schließlich sollten geeignete Verfahren zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse zum Einsatz kommen, um die methodischen und datenbezogenen Unsicherheiten zu quantifizieren und deren Propagation durch die Rechenkette systematisch zu untersuchen. Aus dieser allgemeinen Formulierung der Aufgabenstellung ergaben sich die in den folgenden Unterabschnitten ausgeführten Projektziele für das Vorhaben RS1183 „Fortschrittliche Rechenmethoden zum Kernverhalten bei Reaktivitätsstörfällen“.

### **2.1 Weiterentwicklung der zeitabhängigen Neutronentransportprogramme DORT/TORT-TD in 2D- und 3D-Geometrie**

Eines der wichtigsten Ziele von RS1183 war die Weiterentwicklung der Neutronentransportprogramme DORT-TD und TORT-TD durch geeignete Vereinfachungen wie eine Zerlegung des räumlichen Gebietes („Domain Decomposition“) mit adaptiver Gittereinteilung oder der Kombination von homogenisierten und fein aufgelösten Teilbereichen mit Lösung der Transportmodelle („Embedded Calculations“). Solche Lösungsansätze würden dann problemangepasst eine wesentliche Beschleunigung der Berechnung mit Erhaltung der Genauigkeit für die sicherheitstechnisch relevanten Parameter wie die maximale Brennstableistung oder den minimalen Abstand zu kritischen Siedezuständen erlauben. Die Vereinfachungen der Modellierung waren als Alternativen bzw. zusätzliche Option zur Standardrechnung mit einer vollständigen brennstabweisen Neutronentransportmodellierung des gesamten Reaktorkerns vorgesehen. Durch diese erweiterten Modellansätze sollte eine wesentliche Beschleunigung der 3D-Ganzkernrechnungen erreicht werden. Für die Neutronentransportrechnungen für brennstabweise oder homogenisierte Modellierung sollten zudem konsistente Wirkungsquerschnittsdaten mit geeigneten Spektralcodes bereitgestellt werden. Des Wei-

teren sollte die thermohydraulische Modellierung zusätzlich zum ATHLET-Modell durch ein Unterkanalmodell erweitert werden, um die neutronenphysikalische und thermohydraulische Modellierung zu harmonisieren.

Um Einschränkungen in der Lösung der Neutronentransportgleichungen durch die Vorgabe regulärer Gittereinteilungen aufzuheben, sollten außerdem verschiedene Transportansätze ausgewertet werden, die geeignet wären, räumlich heterogene Strukturen durch flexible und unstrukturierte Gittereinteilungen zu beschreiben. Dabei sollten weitgehend aus der Literatur und aktuellen internationalen Forschungsaktivitäten bekannte Methoden eingesetzt werden.

## **2.2 Anwendungsfälle für die deterministischen Neutronentransportprogramme DORT-TD und TORT-TD**

Das Programmsystem TORT-TD und das gekoppelte Programmsystem TORT-TD/ATHLET bzw. TORT-TD/COBRA-TF sollten durch Nachrechnung von Benchmarks und anderen zu definierenden 3D-Kernanordnungen für Störfallberechnungen qualifiziert werden. Die Anwendungsfälle bezogen sich einerseits auf LWR-Probleme, andererseits sollten auch die in RS1160 begonnenen Aktivitäten im Bereich HTR-Anwendungen fortgesetzt werden. Darüber hinaus sollte der Einsatz für unterkritische Systeme erprobt werden. Zu diesen Zwecken war es von Anbeginn des Vorhabens vorgesehen, dass die GRS eng mit anderen wissenschaftlichen Institutionen, z. B. im Rahmen des Kompetenzverbundes Kerntechnik zusammenarbeiten würde.

## **2.3 Einsatz des Monte Carlo Programms MCNP für Kernberechnungen**

Darüber hinaus war für das beantragte Vorhaben die Implementierung der neuesten Basisdatenbibliotheken in die nukleare Rechenkette der GRS geplant, wie z. B. die angekündigte JEFF-3.1.1-Version und das aktuellste Release von ENDF/B-VII. Zudem sollte die Bereitstellung von Punkt- und Mehrgruppendedatenbibliotheken an der GRS durch Einbeziehung des Querschnittsprozessierungssystems NJOY vervollständigt werden. Für die Durchführung umfangreicher 3D-Ganzkernanalysen mit Monte-Carlo-Methoden war es vorgesehen, Verfahren zur Konvergenzverbesserung zu implementieren, um eine substantielle Beschleunigung für große Kernanordnungen zu erreichen. Die neuen nuklearen Datenbibliotheken sollten weiterhin durch Nachrechnung kritischer Experimente und Kernanordnungen qualifiziert werden. Außerdem sollten Monte

Carlo Berechnungen mit MCNP zur Überprüfung und Verifikation der Modellentwicklungen für DORT-TD und TORT-TD dienen.

#### **2.4 Methoden zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse**

Im Rahmen des Projektvorhabens RS1183 war insbesondere eine Beteiligung an den internationalen Aktivitäten zur Behandlung der Unsicherheitsanalyse von Modellen (UAM) für die nuklearen Berechnungsverfahren eingeplant. Es sollten Methoden zur systematischen Behandlung von Unsicherheiten evaluiert und ggf. auch entwickelt werden; zu Projektstart bot sich somit der Einsatz des GRS-Programmpakets SUSANA auch für die Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen von nuklearen Daten an. Darüber hinaus war ein erheblicher Erfahrungsaustausch mit internationalen Arbeitsgruppen auf diesem wichtigen Arbeitsgebiet zur Qualitätssicherung nuklearer Berechnungen vorgesehen.

### 3 Planung und Ablauf des Vorhabens

Aus den o. g. Zielsetzungen und Aufgabenstellungen wurde die folgende grobe Projektstruktur für RS1183 mit insgesamt vier umfangreichen Arbeitspaketen abgeleitet:

- **Arbeitspaket 1:** Weiterentwicklung der von der GRS bereitgestellten gekoppelten Rechencodes TORT-TD/ATHLET hinsichtlich der Optimierung der Rechenzeiten, der Generierung konsistenter „Pin-by-Pin“-Wirkungsquerschnitte und Kopplung eines geeigneten thermohydraulischen Unterkanalmodells für die stabweise Beschreibung von Leichtwasserreaktorkernen.
- **Arbeitspaket 2:** Validierung der zeitabhängigen deterministischen Transportmodelle in DORT-TD und TORT-TD anhand geeigneter Experimente und Benchmarks, z. B. dem OECD-/NEA-Benchmark MOX-UO<sub>2</sub>-LWR-Benchmark und dem PBMR400-Transient Benchmark zum Hochtemperatur-Kugelhaufenreaktor. Darüber hinaus ist die Nachrechnung des unterkritischen Experiments YALINA vorgesehen.
- **Arbeitspaket 3:** Erstellung nuklearer Basisbibliotheken mit Punkt- und Multigruppennennungen mit Hilfe des Codes NJOY zur Querschnittsbehandlung und Qualifizierung der nuklearen Daten anhand von umfangreichen Monte-Carlo (MCNP-) und deterministischen Rechnungen für kritische Experimente, Benchmarks und 3D-Ganzkerne. Verifikation der stationären Ausgangszustände der deterministischen Transportmodelle mit MCNP als Referenzcode. Erweiterung und Beschleunigung der thermohydraulisch gekoppelten Monte-Carlo-Modelle, insbesondere hinsichtlich hochaufgelöster 3D-Ganzkernrechnungen.
- **Arbeitspaket 4:** Quantifizierung der methodischen Unsicherheiten und der Unsicherheiten in den nuklearen Basisdaten unter Zuhilfenahme geeigneter Werkzeuge zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse. Teilnahme an entsprechenden internationalen Benchmark-Aktivitäten.



### 8.3 Zeitplan

Arbeitspakete	2008				2009				2010				2011			
	I	II	III	IV	I	II	III	IV	I	II	III	IV	I	II	III	IV
<b>Arbeitspaket 1</b>											Z					
Arbeitspunkt 1.1																
Arbeitspunkt 1.2																
Arbeitspunkt 1.3																
Arbeitspunkt 1.4																
<b>Arbeitspaket 2</b>											Z					
Arbeitspunkt 2.1																
Arbeitspunkt 2.2																
Arbeitspunkt 2.3																
<b>Arbeitspaket 3</b>											Z					
Arbeitspunkt 3.1																
Arbeitspunkt 3.2																
Arbeitspunkt 3.3																
Arbeitspunkt 3.4																
<b>Arbeitspaket 4</b>											Z					
Arbeitspunkt 4.1																
Arbeitspunkt 4.2																
<b>Erstellung des Abschlussberichtes</b>																A

P = Projektgespräch      A = A-Bericht oder Abschlussbericht      S = Sonstiges      Z = Zwischenbericht

†

Abb. 3-1: Projektablaufplan des RS-Forschungsprojekts RS1183

Diese Arbeitspakete unterteilen sich dann wie folgt weiter in die folgenden Arbeitspunkte:

- **AP 1.1:**  
Adaptive Modellierung mit homogenen und heterogenen Kernbereichen
- **AP 1.2:**  
Erzeugung konsistenter Multigruppen-Wirkungsquerschnitte für Neutronen-transportrechnungen
- **AP 1.3:**  
Kopplung des Neutronentransportcodes TORT-TD mit einem thermohydraulischen Unterkanalmodell
- **AP 1.4:**  
Auswertung von Ansätzen zur Behandlung mit unstrukturierten Gittern
- **AP 2.1:**  
LWR – Testfälle
- **AP 2.2:**  
PBMR – Testfall
- **AP 2.3:**  
Testfall für eine unterkritische Anordnung

- **AP 3.1:**  
Bereitstellung von NJOY zur Erstellung von Punktdaten und Mehrgruppendaten
- **AP 3.2:**  
Überprüfung der neuen Datenbibliotheken durch Nachrechnung kritischer Experimente und von Kernanordnungen
- **AP 3.3:**  
Methodenentwicklung zur Beschleunigung der Monte Carlo Berechnungen für große Kernanordnungen
- **AP 3.4:**  
Volle Integration der thermohydraulischen Rückwirkungen in MCNP Berechnungen
- **AP 4.1:**  
Einsatz von Methoden zur Unsicherheitsanalyse für Zell-Spektralrechnungen und Brennelementrechnungen
- **AP 4.2:**  
Einsatz von Methoden zur Unsicherheitsanalyse für Kerntransienten

Das Projekt war auf eine Dauer von drei Jahre ausgelegt; diese wurde in etwa eingehalten. Auch dem Projektablaufplan, wie in Abbildung 3-1 dargestellt, wurde im Wesentlichen beibehalten, es kam zu keinen nennenswerten Verzögerungen oder Änderungen des Projektinhalts bzw. der Projektziele.

Im folgenden Abschnitt wird die Ausgangssituation bei Beginn des Projekts RS1183 im August 2008 kurz dargelegt. Die in den einzelnen Arbeitspaketen durchgeführten Arbeiten und erreichten Ziele (untergliedert in die o. g. Arbeitspunkte) werden dann umfassend in den Kapiteln 4 bis 7 erläutert.

### **3.1 Ausgangssituation und Stand von Wissenschaft und Technik bei Beginn des Vorhabens**

Mit den Neutronentransportcodes DORT-TD und TORT-TD hat die GRS nach Abschluss des RS-Vorhabens RS1160 ein umfangreiches Rechenprogrammsystem zur Verfügung gestellt, mit dem neutronenkinetische Vorgänge im Reaktorkern physikalisch wesentlich exakter modelliert werden können als es mit den traditionellen nodalen

Grobitterverfahren in Diffusionsnäherung bis dahin möglich war. Aus der Kopplung von DORT/TORT-TD mit Thermofluiddynamikcodes, z. B. dem Systemcode ATHLET, resultierte so ein gekoppeltes Programmsystem, das einerseits den gestiegenen Ansprüchen an die Störfallberechnung von Leichtwasserreaktoren gerecht wurde, darüber hinaus aber auch für Störfall- und Transientenanalysen von zukünftigen und innovativen Reaktorkonzepten eingesetzt werden konnte.

Die GRS-Entwicklungen DORT-TD/TORT-TD sind zeitabhängige Erweiterungen der stationären Neutronentransportcodes DORT und TORT, die ursprünglich an den Oak Ridge National Laboratories (ORNL) entwickelt wurden. Durch ihre weite internationale Verbreitung gehören DORT und TORT zu den am umfassendsten validierten Programmen für stationäre Kritikalitätsberechnungen thermischer und schneller Systeme; darüber hinaus definieren sie den de-facto Standard im Bereich von Abschirm- und Fluenzberechnungen mit deterministischen Codes.

DORT/TORT-TD verwenden die sog.  $S_N$ - (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. Außerdem bieten die Rechenprogramme volle Flexibilität bei der Wahl der Energiegruppenstruktur (Multigruppen-Fähigkeit) und der Streuordnung ( $P_N$ -Ordnung). Deshalb können mit DORT und TORT die Gültigkeit bzw. die Schwächen nodaler Diffusionsansätze mit üblicherweise nur wenigen Energiegruppen umfassend bewertet werden.

Die zeitabhängige Erweiterung von TORT in 3D-Geometrie wurde bereits im Vorgängervorhaben zu RS1183, dem Vorhaben RS1160 durch eine voll implizite Diskretisierung der Zeitvariablen erreicht, wodurch die unbedingte Stabilität des Schemas gewährleistet werden konnte. Diese Eigenschaft gestattete zudem eine robuste Kopplung an thermohydraulische Rechencodes. Die zeitabhängigen Gleichungen inklusive der Dynamik der verzögerten Neutronen wurden mit maximaler Flexibilität implementiert, so dass z. B. eine explizite ortsabhängige Angabe verzögerter Neutronenspektren, der Precursor-Zerfallskonstanten und Precursor-Anteile sowie der Neutronengeschwindigkeiten möglich ist. Für die Transientenanalyse unerlässliche Eigenschaften wie Steuerstab-Fahrprogramme, Xenodynamik und Nachzerfallswärmeberechnung wurden in DORT-TD und TORT-TD ebenfalls berücksichtigt.

Eines der potentiellen Haupteinsatzgebiete von Neutronentransportcodes ist die 3D-Analyse von Leichtwasser-Reaktorkernen mit erhöhtem räumlichem Detail bis hin zur expliziten Modellierung der einzelnen Brennstabzelle. Von diesen sog. „Pin-by-Pin“-Rechenprogrammen verspricht man sich einen erheblichen Genauigkeitsgewinn bei der Bestimmung lokaler Größen (Stableistungen, minimaler Abstand zu DNB etc.) gegenüber den heute üblichen Grobgitter-Diffusionsverfahren mit anschließender Rekonstruktion der Stableistungen. Der Einsatz von Neutronentransportverfahren ist bei einer solch detaillierten Auflösung notwendig, da die Diffusionsapproximation bei expliziter Modellierung von Steuerstäben und gevoideten Unterkanälen ihre Gültigkeit verliert.

Die höhere Flexibilität und die verbesserte Vorhersagegenauigkeit solcher „Pin-by-Pin“-Transportmethoden erfordern allerdings einen erheblichen zusätzlichen Rechenaufwand, der sowohl von der stark ansteigenden Anzahl räumlicher Maschen (u. U. in 3D mehrere Millionen gegenüber einigen Zehntausend bei den üblichen Grobgitterverfahren) als auch von den deutlich aufwändigeren Lösungsalgorithmen für die Neutronentransportgleichung herrührt. Während mit den Transportmethoden eine stationäre 3D-Ganzkernrechnung für einen typischen LWR-Kern bereits heute mit wenn auch erheblichem Aufwand möglich ist, stellt die zeitabhängige Berechnung mit u. U. mehreren tausend Zeitschritten in 3D-Geometrie eine Herausforderung an die derzeit verfügbaren Rechnerkapazitäten dar und erfordert den Einsatz massiv paralleler Systeme oder die Entwicklung von geeigneten methodischen Vereinfachungen, die die gewünschte Genauigkeit erhalten.

Um das Potential des Einsatzes von Transportmethoden voll auszuschöpfen, müssen auch die nuklearen Daten in Form von Multigruppen-Querschnitten entsprechend hohen Qualitätsanforderungen genügen. Während die Erstellung nodaler Wirkungsquerschnittsdaten durch vollständige Homogenisierung der heterogenen Struktur eines Brennelements in modernen Spektralcodes weitgehend standardisiert ist, besteht bei der Bereitstellung von Pinzell-Daten, bei denen nur über die einzelne Stabzelle homogenisiert wird, vergleichsweise wenig Erfahrung. An der GRS durchgeführte Analysen zeigten, dass eine einfache flussvolumetrische Wichtung wie bei der Brennelement-Homogenisierung bereits zu deutlichen Fehlern für die Berechnung individueller Stableistungen führte. Bereits dadurch würde aber der gewünschte Genauigkeitsgewinn durch den Einsatz der Transportmethoden in Frage gestellt werden.

Angesichts der zunehmend komplexeren Reaktorkernauslegung mit steigender Anreicherung, erhöhtem Abbrand und Einsatz von MOX-Brennstoffen und abbrennbaren

Giften gewinnen zudem sog. „Nachbarschaftseffekte“ immer mehr an Bedeutung. Sie bewirken signifikante Änderungen des Neutronenspektrums am Übergang zwischen Brennelementen verschiedenen Typs/Abbrands oder an Grenzflächen zwischen Kern und Reflektor. Solche Effekte können mit den auf Einzelbrennelementen beruhenden Standard-Spektralverfahren kaum noch erfasst werden; die sich daraus ergebenden Auswirkungen sind zu quantifizieren und durch verbesserte Verfahren zu minimieren.

Schließlich erschien es notwendig, die neutronenphysikalischen und thermohydraulischen Rechenmethoden zu harmonisieren, wenn mit dem Einsatz der Neutronentransportmethoden der Genauigkeitsgewinn im vollen Umfang erzielt werden soll. Die räumliche Auflösung bis auf den einzelnen Brennstab erforderte auch eine entsprechende Modellierung der thermohydraulischen Rückwirkungseffekte aus Unterkanalmodellen wie COBRA-TF, da der Queraustausch gerade für Strömungszustände unter Störfallbedingungen an Bedeutung gewinnt. Langfristig sollten die Schnittstellen auf eine Kopplung mit CFD-(„Computational Fluid Dynamics“)-Rechenprogrammen ausgelegt sein.

Exemplarisch wurden mit dem gekoppelten Codesystem TORT-TD/ATHLET bereits in RS1160 einfache LWR-Stabgitterprobleme behandelt. So wurden für eine 2x2-Brennelementanordnung eine Steuerstabauswurf-Transiente sowie eine Reaktivitäts-transiente durch lokale Borverdünnung gerechnet. Die Ergebnisse belegen die korrekte Implementierung der Kopplung von Thermofluiddynamik und Neutronenkinetik. Zudem erlaubt das Codesystem Sensitivitätsstudien hinsichtlich der notwendigen Gitterweite und Energiegruppenstruktur, der optimalen Wahl der ATHLET-Unterkanäle und der Parametrisierung der Wirkungsquerschnitte.

Darüber hinaus wurden mit dem Codesystem TORT-TD/ATHLET Lösungen für den internationalen OECD/NEA UO<sub>2</sub>-MOX-Benchmark berechnet, in dem ein Viertelkern eines amerikanischen Druckwasserreaktors vom Westinghouse-Typ mit ~25 % MOX-Beladung betrachtet wird. Mit den in der Spezifikation gegebenen Nukliddichten wurden mit HELIOS geeignete Querschnittsbibliotheken erstellt und mit TORT-TD/ATHLET die stationären stabweisen Leistungsverteilungen bestimmt.

Neben den LWR-Berechnungen wurde in einer Kooperation mit der Penn State University (PSU) eine Kopplung des Codes DORT-TD mit dem Thermofluiddynamikcode THERMIX/DIREKT für gasgekühlte Reaktoren erstellt. Mit dem so geschaffenen Programmsystem DORT-TD/THERMIX konnten Transienten- und Störfallanalysen für

Hochtemperaturreaktoren vom Kugelhaufentyp, basierend auf Multigruppen-Transportmethoden durchgeführt werden. Mit dem Codesystem DORT-TD/THERMIX nahmen GRS und PSU in RS1183 am internationalen OECD/NEA PBMR400 Transient-Benchmark teil, in dessen Rahmen verschiedene gekoppelte Transienten (Steuerstabauswurf, hypothetische Reaktivitätsstörfälle, Unterkühlungstransienten, „Loss of Flow“) des PBMR400 untersucht wurden. Die erste Phase des Benchmarks, in der der stationäre Zustand des Reaktors beschrieben wurde, war bereits 2008 mit zufriedenstellenden Ergebnissen abgeschlossen worden; dabei war die GRS zu diesem Zeitpunkt die einzige teilnehmende Institution, die neben Diffusionsrechnungen auch Ergebnisse basierend auf Neutronentransporttheorie vorweisen konnte. Die generelle Einsatzfähigkeit von DORT-TD für transiente Transportrechnungen zum PBMR-Typ konnte zu diesem Zeitpunkt ebenfalls anhand einer Unterkühlungstransiente demonstriert werden.

Für das Monte Carlo Programm MCNP stehen an der GRS Punktdaten für die Basisdatenevaluationen JEF-2.2, JEFF-3.1 und ENDF/B-VI zur Verfügung. Es wurden eine Vielzahl kritischer Experimente, wie z. B. KRITZ und VENUS-1, 2 und 7 nachgerechnet, für die auch Leistungsverteilungen gemessen wurden, sowie Brennelementkonfigurationen und Kernanordnungen wie das OECD/NEA UO<sub>2</sub>/MOX-Benchmark berechnet. Durch die Erweiterungen im Vorhaben RS1160 konnten in den Berechnungen auch Verteilungen thermohydraulischer Zustände berücksichtigt werden, so dass die Berechnung von Leistungszuständen in LWR-Stabgittern möglich wurde. Für die neueren Datenbibliotheken, insbesondere für JEFF3.1, ergaben sich für kritische Experimente mit niedrig angereichertem Uran-Brennstoff systematische Verbesserungen bei der Berechnung des Multiplikationsfaktors und bezüglich der Leistungsverteilung, gerade aber für 3D-LWR-Ganzkernanordnungen zeigten sich systematische Abweichungen zu älteren Evaluationen, aus denen Unterschiede von bis zu 5 % in der stabweisen Leistung resultieren können.

Die Weiterentwicklung der Analysemethoden mit einer kontinuierlichen Verbesserung der Modellierung und der erzielbaren Genauigkeit führte zur Notwendigkeit einer systematischen Behandlung der Unsicherheiten in den Berechnungen. Dies galt auch für den Einfluss der nuklearen Daten und deren Verarbeitung in den drei wesentlichen Berechnungsschritten Spektral- und Brennelementabbrechung, Bereitstellung von Weniggruppensdaten und Berechnung des stationären und zeitabhängigen Kernverhaltens. Auf Initiative der OECD/-NEA wurde etwa zeitgleich mit dem Beginn des Vorha-

bens RS1183 eine internationale Aktivität zur Unsicherheitsanalyse in der Modellierung (UAM) für die Auslegung, den Betrieb und die Sicherheitsanalyse von LWR initiiert. Diese Aktivitäten fokussierten und fokussieren sich auf alle o. g. genannten Themen: Spektralrechnungen und Erzeugung von Kovarianzdaten für einzelne Brennstabzellen und Brennelementrechnungen, stationäre Ganzkernanalysen bis hin zu transienten Störfallberechnungen für den Reaktorkern.

### **3.2 Zusammenarbeit mit anderen Forschungsstellen**

Im Rahmen des RS-Forschungsprojekts RS1183 wurde intensiv mit dem IKE Stuttgart, insbesondere in Arbeitspunkt 3.4 „Volle Integration der thermohydraulischen Rückwirkungen in MCNP Berechnungen“ zusammengearbeitet.

Bei der OECD/NEA-Benchmarkinitiative UAM „Uncertainty Analysis in Modelling“ übernahm die GRS gemeinsam mit der Penn State University (PSU) und später dem KIT (Prof. Kostadin Ivanov) sowie der University of Michigan (Prof. Tom Downar) eine koordinierende Rolle bei der Abstimmung der Benchmarkspezifikationen und der Aufbereitung der Ergebnisse.

Im Rahmen von RS1183 entwickelte sich eine fruchtbare Partnerschaft zwischen den Oak Ridge International Laboratories (ORNL) und der GRS, insbesondere bei der Entwicklung des Werkzeugs zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse XSUSA. ORNL und GRS waren bei Abschluss von RS1183 bereits im Gespräch, ob bzw. wie XSUSA als fortgeschrittenes Rechenprogramm in das Reaktorphysik-Codesystem SCALE übernommen werden kann und in welchem anstehenden SCALE-Release dieses erfolgen soll.

Mit der Penn State University wurden gemeinsam die Arbeiten zu Arbeitspunkt 2.2 „PBMR – Testfall“, das sind insbesondere die Arbeiten zum OECD/NEA PBMR400 Transient Benchmark durchgeführt. Die Nachrechnungen erfolgten zum Teil im Rahmen einer Promotionsarbeit an der PSU, wo das gekoppelte Codesystem DORT-TD/THERMIX-DIREKT erfolgreich für die Transientenanalysen des PBMR400 eingesetzt werden konnte. Ebenfalls gemeinsam mit der PSU, später mit KIT, wurden die Arbeiten zum Arbeitspaket 1.3 „Kopplung des Neutronentransportcodes TORT-TD mit einem thermohydraulischen Unterkanalmodell“ durchgeführt; hier stellt die PSU eine

erste Version des Codes COBRA-TF zur Verfügung, der dann von der GRS weiterentwickelt und an TORT-TD gekoppelt wurde.

Gemeinsam mit dem KIT wurden die Arbeiten zu AP 2.3 „Testfall für eine unterkritische Anordnung“, d.h. der unterkritischen Anordnung YALINA durchgeführt. Die Erzeugung der Wirkungsquerschnitte für die unterkritische Anordnung wurde dabei vom KIT übernommen, während die Modellierung des Quellterms in TORT-TD sowie der überwiegende Teil der Testrechnungen durch die GRS durchgeführt wurde.

## **4 AP 1: Weiterentwicklung der von der GRS bereitgestellten gekoppelten Rechencodes TORT-TD/ATHLET**

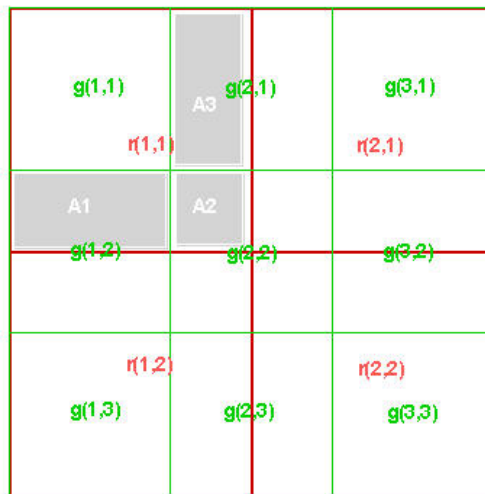
### **4.1 AP 1.1: Adaptive Modellierung mit homogenen und heterogenen Kernbereichen**

Das Grobgitterverfahren QUABOX/CUBBOX wurde zur Lösung der orts- und zeitabhängigen Neutronendifusionsgleichung entwickelt. Die Methode der lokalen Polynomapproximation für den Neutronenfluss ermöglicht eine genaue Berechnung der dreidimensionalen Leistungsverteilung im Reaktorkern mit einer Gittereinteilung, die im XY-Querschnitt der Brennelementabmessung entspricht. Die räumliche Approximation des Neutronenflusses erfolgt wahlweise durch quadratische, kubische oder spezielle Polynome sechsten Grades. Zur Berechnung der einzelnen Anteile in der Neutronenbilanz, des Strombeitrages und der Reaktionsraten wird innerhalb jedes Volumenelementes für die räumliche Darstellung ein Polynomansatz definiert, dessen Parameter die Funktionswerte im Zentrum sowie die Funktionswerte in den Mittelpunkten der Seitenflächen sind. Diese Funktionswerte auf den Seitenflächen werden durch Auswertung der Stetigkeit von Neutronenfluss und der Normalkomponente des Neutronenstromes auf den Trennflächen zwischen benachbarten Volumenelementen ersetzt. Dadurch bekommt man die ortsdiskretisierten Diffusionsgleichungen mit den zentralen Funktionswerten als unabhängigen Variablen.

In der Kopplung mit TORT-TD sind diese zentralen Funktionswerte auszutauschen. Da die Darstellung des Neutronenflusses in TORT-TD und QUABOX/CUBBOX nach unterschiedlichen Raum- und Winkeldiskretisierungen erfolgt, erfordert die adaptive Modellierung ein Abbildungsverfahren (Projektion), welches zwischen zwei verschiedenen



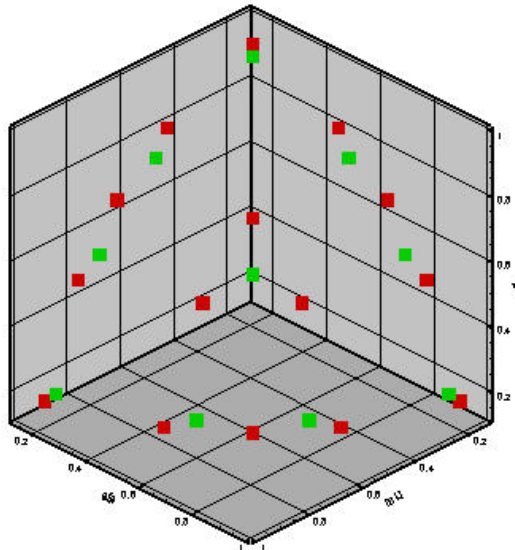
Raumgittern (räumliche Kopplung) und Winkelgittern (Winkel-Kopplung) vermitteln kann.



**Abb. 4-1** Zweidimensionale Projektion zwischen einem groben 2x2-Gitter (rot) und einem feinen 3x3-Gitter (grün).  $g(i,j)$  und  $r(i,j)$  sind die Volumina der Masche  $(i, j)$  auf dem groben bzw. feinen Gitter, aus denen sich die Gewichtungsfaktoren errechnen.

#### 4.1.1 Räumliche Kopplung

Die räumliche Kopplung von TORT-TD mit QUABOX/CUBBOX basiert auf einem Interpolationsmodul, welches ursprünglich zur Kopplung von TORT-TD mit THERMIX entwickelt wurde. Dieses Modul bildet räumliche Verteilungen auf einem feinen Gitter (TORT-TD) auf ein grobes Gitter (QUABOX/CUBBOX) ab und umgekehrt (Abb. 4-1). Die Projektion zwischen beiden Gittern erfolgt über ein Hilfgitter, welches in Verbindung mit geeignet definierten Gewichtungsfaktoren zwischen grobem und feinem Raumgitter vermittelt. Dabei wird auch der Fall berücksichtigt, dass eines der beiden Gitter einen größeren Raumbereich überdeckt als das andere. Das Hilfgitter ist die Vereinigung von grobem und feinem Raumgitter. Die Gewichtungsfaktoren werden einmalig im Rahmen der Initialisierungen von TORT-TD und QUABOX/CUBBOX ermittelt. Sie sind auf dem Hilfgitter definiert und ergeben sich aus den Verhältnissen der Maschenvolumina von grobem und feinem Raumgitter.



**Abb. 4-2** Zur Transformation zwischen einer  $S_8$ -Quadratur (grün) auf eine  $S_{10}$ -Quadratur (rot).

#### 4.1.2 Winkelkopplung

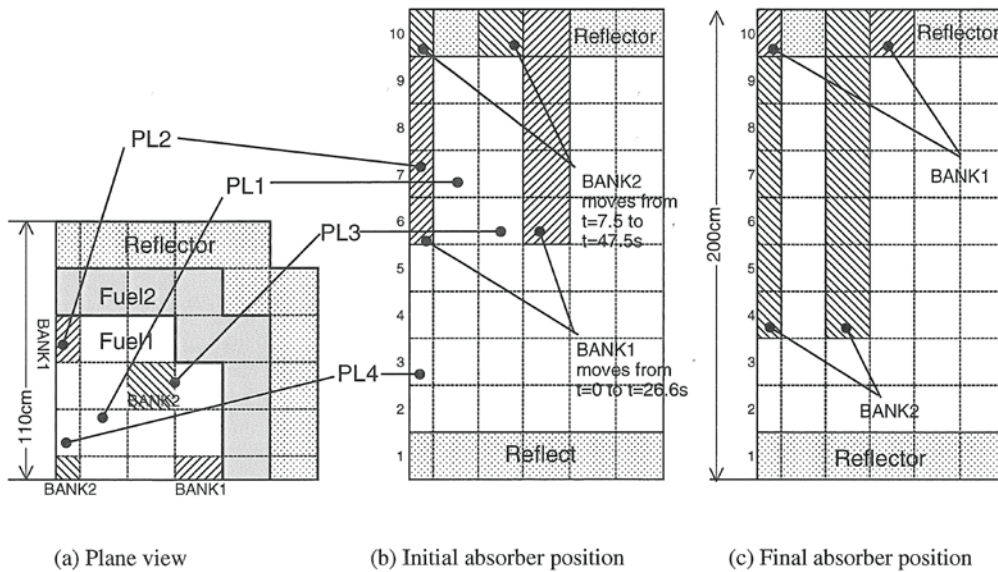
Die Winkelkopplung zwischen TORT-TD und QUABOX/CUBBOX ist ein Spezialfall für die Transformation des winkelabhängigen Neutronenflusses zwischen zwei verschiedenen Quadraturesätzen. Dies ist in Abb. 4-1 schematisch dargestellt. Während in TORT-TD an einem Raumpunkt der Neutronenfluss je nach gewählter  $S_N$ -Ordnung winkelabhängig detailliert vorliegt, existieren in der Diffusionsnäherung von QUABOX/CUBBOX nur das nullte und erste Moment (skalärer Fluss bzw. Neutronenstrom). Für die Winkelkopplung zwischen TORT-TD und QUABOX/CUBBOX ist daher zu fordern, dass der skalare Fluss und der Neutronenstrom erhalten bleiben. Für Neutronenstrom in x-Richtung bedeutet dies:

$$\phi_{QC} = \phi_T = \sum_{m=1}^n w_m \phi_m \quad (4.1-1)$$

$$j_{QC} = \frac{2}{\frac{\Delta x_i}{D_i} + \frac{\Delta x_{i+1}}{D_{i+1}}} (\phi_i - \phi_{i+1}) = j_T = \sum_{m=1}^n w_m \mu_m \phi_m \quad (4.1-2)$$

Darin ist  $n$  die Anzahl Richtungen in der gewählten Quadratur und  $w_m$  die zugehörigen Gewichte, für die  $\sum_{m=1}^n w_m = 1$  gilt. Mit QC und T wird zwischen der QUABOX/CUBBOX- und TORT-TD-Darstellung derselben physikalischen Größe un-

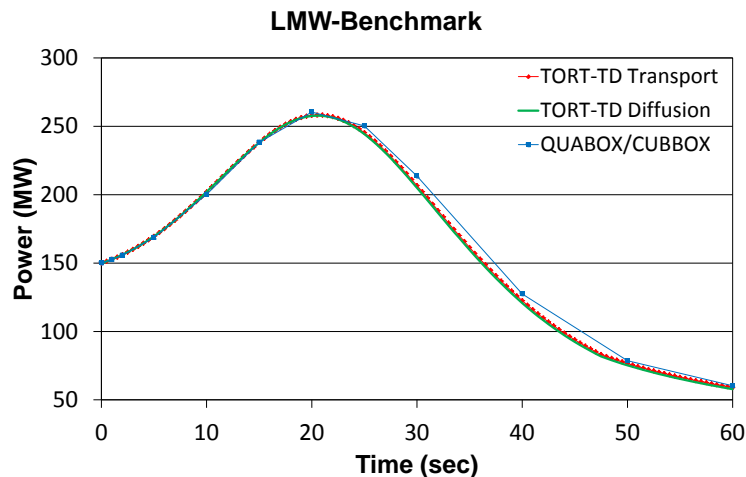
terschieden.  $\phi_i$  und  $\phi_{i+1}$  sind die skalaren Neutronenflüsse im Zentrum der Masche  $i$  bzw  $i+1$ .



**Abb. 4-3** LMW-Benchmark

#### 4.1.3 Testproblem

Als Testbeispiel wurde der LMW-Benchmark /LAN 77c/ herangezogen. Es handelt sich dabei um eine verzögert kritische Transiente auf der Zeitskala von Minuten in einem kompakten DWR-Kern, die durch gegenläufiges Verfahren zweier Steuerelementgruppen bewirkt wird. Geometrie sowie Anfangs- und Endstellung der Steuerelemente sind in Abb. 4-3 zu sehen. Dieses Testproblem hat den Vorteil, dass es als Diffusionsproblem in zwei Energiegruppen definiert ist und somit für QUABOX/CUBBOX geeignet ist. Andererseits kann mit den aus den Zwei-Gruppen-Wirkungsquerschnitten abgeleiteten totalen Wirkungsquerschnitten auch eine Transport-Rechnung mit TORT-TD durchgeführt werden.



**Abb. 4-4** Leistungsverlauf der LMW-Transiente, berechnet mit QUABOX/CUBBOX (blau) sowie TORT-TD im  $S_N$ -Modus (rot) bzw. im Diffusionsmodus (grün).

Zudem bietet der Feinmaschen-Diffusionsolver von TORT-TD die Möglichkeit eines direkten Vergleichs mit der hybriden Fein-Gitter-Transport/Grob-Gitter-Diffusions-Methode mit TORT-TD-QUABOX/CUBBOX. Die Ergebnisse sind in Abb. 4-4 dargestellt. Anhand dieses Testproblems wurden die Gewichtungsfaktoren für die Raumkopplung ermittelt. Zudem wurde in TORT-TD eine Schnittstelle implementiert, über die man für das durch QUABOX/CUBBOX vorgegebene Grobgitter an über jede der sechs Zellgrenzen ein- und auslaufenden Neutronenströme zugreifen kann.

#### 4.2 AP 1.2: Erzeugung konsistenter Multigruppen-Wirkungsquerschnitte für Neutronentransportrechnungen

Trotz stetig steigender Rechenleistung stellen Ganzkern-Transienten- und Störfall-Analysen auf Basis der direkten Lösung der 3D-Neutronentransportgleichung mit vielen Energiegruppen und detaillierter heterogener Geometriebeschreibung große rechen-technische Anforderungen dar. Daher werden häufig in zweidimensionalen Zell-Abbrand-Rechnungen für einzelne Brennelemente mittels Gruppenkondensation und räumlicher Homogenisierung Weniggruppen-Wirkungsquerschnitte zur Durchführung der Kernsimulation erzeugt.

Zur Versorgung des Codes TORT-TD mit geeigneten Wirkungsquerschnittsdaten ist es notwendig, Wirkungsquerschnitte nicht nur wie in Spektralcodes üblich, auf Brennelementniveau zu homogenisieren und zu kondensieren, sondern es müssen sog. Stabzellquerschnitte erzeugt werden. Die in Brennelementrechnungen erzeugten Stabzell-

querschnitte sind aber aufgrund der Leckage zu Nachbarstabzellen bei einer einfachen Fluss-/Volumenwichtung nicht mehr reaktionsratenerhaltend, was bei einer stabweisen Ganzkernrechnung u. U. zu erheblichen Fehlern bei der stabweisen Leistungsdichteverteilung führt. Unterschiedliche Methoden, wie die SPH (Superhomogenization)-Methode, verallgemeinerte Äquivalenztheorie (Generalized Equivalence Theory, GET) oder empirische Anpassungen mittels multiplikativer Faktoren, insbesondere bei kontrollierten Zuständen wurden im Rahmen von RS1183 implementiert.

Der zeitabhängige dreidimensionale Neutronentransportcode TORT-TD wurde zur Korrektur von Stabzellhomogenisierungsfehlern erweitert. Räumliche Wirkungsquerschnittshomogenisierung erfordert nicht nur die Kenntnis des exakten heterogenen Neutronenflusses innerhalb des Homogenisierungsvolumens, sondern auch die tatsächliche Randbedingung eines Brennelements oder einzelner Stabzellen je nach Position im Reaktorkern. Im Rahmen der verallgemeinerten Äquivalenztheorie (*Generalized Equivalence Theory*, GET) ist es möglich, sowohl volumenintegrierte Reaktionsraten als auch die Neutronenströme durch die Oberfläche des Volumens (Randbedingungen) zu erhalten, indem die Forderung nach Stetigkeit des volumenhomogenisierten Flusses an der Oberfläche aufgegeben und die Unstetigkeit durch Brennelement-Diskontinuitätsfaktoren (*Assembly Discontinuity Factors*, ADF) ausgedrückt wird. Für TORT-TD wurde die in nodalen Methoden verwendete GET-Methodik für das Problem der Stabzellhomogenisierung verallgemeinert und implementiert. Grundlage ist die Darstellung des raumwinkelaufgelösten homogenisierten Neutronenflusses innerhalb einer Stabzelle als lineare Funktion, welche an den Grenzen zu den Nachbarzellen nicht notwendigerweise stetig ist. Die Unstetigkeit wird durch sog. Stabzell-Diskontinuitätsfaktoren (*Pin cell Discontinuity Factors*, PDF) ausgedrückt, welche im Rahmen von Brennelement-Spektralrechnungen bestimmt werden. Die Implementierung in TORT-TD erfordert eine Modifizierung der *Mesh-Sweeping*-Beziehungen und wurde sowohl für das *Diamond-Differencing*- als auch für das *Weighted-Differencing*-Verfahren durchgeführt. Die PDF können für jeden Stabzelltyp eines Brennelements in den NEMTAB-Wirkungsquerschnittsbibliotheken in Abhängigkeit von Abbrand und thermohydraulischen Parametern spezifiziert werden. Die Bestimmung der PDF wurde in HELIOS durch explizite Berechnung des Verhältnisses aus heterogenem Stabzell-Randfluss und stabzellhomogenisiertem Fluss implementiert.

Die Leistungsfähigkeit der GET-Implementierung in TORT-TD wurde anhand des stationären Zustandes des PWR MOX/UO<sub>2</sub>-Kerntransienten-Benchmarks mit eingefahre-

nen Steuerelementen demonstriert. Dieser Fall stellt durch die große Anzahl von Absorbermaterialien eine besondere Herausforderung für deterministische Transportrechnungen dar. In HELIOS wurden hierzu abbrandabhängig PDF in 8 Energiegruppen berechnet. Es ergibt sich, dass die PDF für die thermischen Gruppen insbesondere an Steuerstabpositionen erheblich von 1 abweichen. Der Vergleich mit einer Monte-Carlo-Referenzrechnung (MCNP) unter Verwendung nuklearer Punktdaten zeigt, dass die Berücksichtigung der PDF in TORT-TD eine signifikante Verbesserung der Spaltratenverteilung liefert. Dies gilt sowohl für die brennelementweise Verteilung als auch für stabzellweise Verteilungen innerhalb einzelner Brennelemente. Mit der GETImplementierung in TORT-TD steht ein iterationsfreies Verfahren zur korrekten Behandlung der Stabzellhomogenisierung zur Verfügung, welches trotz zusätzlicher arithmetischer Operationen in den Diskrete-Ordinaten-Gleichungen nicht nennenswert zu Lasten der Rechenzeit geht. Die Methodik wird in Beiträgen zur Physor 2010 /SEU 10a/ sowie zur Jahrestagung Kerntechnik 2010 /SEU 10b/ vorgestellt werden.

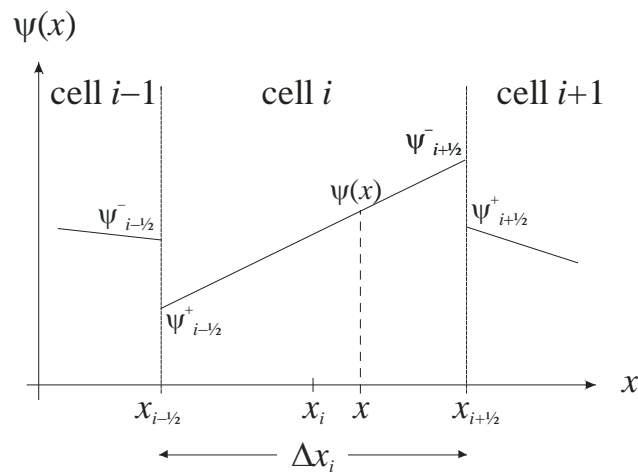
Um eine konsistente Homogenisierung von Wirkungsquerschnitten auf Stabzell-Basis zu erreichen, wurde die sogenannte "Superhomogenization"-Methode (SPH) implementiert. Die SPH-Methode benutzt die Lösung einer heterogenen Transportrechnung und verändert die Wirkungsquerschnitte für eine homogene Rechnung so, dass die nuklearen Reaktionsraten stabzellenweise gleich sind. Um die Genauigkeit schnell laufender Diffusionsrechnungen auf nodaler Ebene zu erhöhen, wurde die SPH-Methode als Schnittstelle zwischen dem ORNL-Neutronentransportprogramm NEWT und den GRS-Kernsimulatoren TORT-TD und QUABOX/CUBBOX erstellt. Dazu musste auch der Quellcode von NEWT insofern verändert werden, dass in der Ausgabe alle relevanten Größen in einer standardisierten Form angezeigt werden. Die SPH-Schnittstelle erzeugt eine Bibliothek von Wirkungsquerschnitten, welche für spätere Ganzkernrechnungen verwendet werden können. Nach Anwendung der Methode für ein Brennelement im unendlichen Raum entspricht die Verteilung der Reaktionsraten der homogenen Lösung exakt der der heterogenen Lösung.

#### **4.2.1 Stabzell-Diskontinuitätsfaktoren in der Diskrete-Ordinaten-Transportgleichung in Kartesischer Geometrie**

Räumliche Homogenisierung eines Brennelements (oder einer Stabzelle) erfordert grundsätzlich die genaue Kenntnis von Randbedingung (lokale Kernumgebung) und exakter heterogener Neutronenflussverteilung (Referenzfluss) in Brennelement bzw.

Stabzelle. Da insbesondere die Flussverteilung im Voraus nicht bekannt ist, wird in der Regel von der Flussverteilung in einem einzelnen Brennelement im unendlichen Gitter ausgegangen, was äquivalent ist zur Annahme verschwindender Neutronennettoströmen über die Brennelementgrenzen. Die hierdurch verursachten Homogenisierungsfehler können bekanntlich zu unerwünscht großen Fehlern bei der Berechnung von Kern-Leistungsverteilungen führen, insbesondere wenn große Flussgradienten vorliegen, etwa bei heterogenen Kernbeladungen und/oder starken lokalen Absorbern (z. B. DWRs mit teilweiser MOX-Beladung und eingefahrenen Steuerelementen). Eine der anerkannten und praktizierten Methoden zur Kompensation von Homogenisierungsfehlern ist die verallgemeinerte Äquivalenztheorie (GET) mit sog. Diskontinuitätsfaktoren /KOE 78, SMI 86/. Auch wenn die Diskontinuitätsfaktoren routinemäßig für einzelne Brennelemente zur Anwendung kommen (Assembly Discontinuity Factors, ADF), kann die GET-Methode auf stabzellhomogenisierte Ganzkernrechnungen unter Verwendung von Stabzell-Diskontinuitätsfaktoren (Pin Cell Discontinuity Factors, PDF) erweitert werden /CAB 99, PAR 01/. Hier gibt es Anwendungen auf die Diffusions- und vereinfachte Transportmethode ( $SP_3$ ) /KOZ 04/.

Die folgende Darstellung dokumentiert die Implementierung der GET-Methode in TORT-TD in Form von Stabzell-Diskontinuitätsfaktoren /SEU 08/. Sie bezieht sich der besseren Übersicht halber auf die eindimensionale Diskrete-Ordinaten-Gleichung. Die GET-Methode ist in TORT-TD /SEU 10/ für den Gewichtete-Differenzen-Ansatz (weighted difference method) zur Neutronenflussapproximation realisiert; der Übersichtlichkeit wegen wird im Folgenden der Ansatz ungewichteter Differenzen (diamond difference method) gewählt.



**Abb. 4-5** Darstellung des homogenisierten Winkelflusses innerhalb aneinandergrenzender Rechenzellen.

Die Diskrete-Ordinaten-Darstellung der Transportgleichung für Energiegruppe  $g$  lautet für Ordinaten  $\mu_n$  in gebräuchlicher Notation /LEW 84/:

$$\mu_n \frac{d}{dx} \psi_{g,n}(x) + \sigma_g(x) \psi_{g,n}(x) = q_g(x, \mu_n) \quad (4.2-1)$$

Wobei

$$q_g(x, \mu_n) = \sum_{l=0}^L (2l+1) P_l(\mu_n) \sigma_{g,l}(x) \phi_{g,l}(x) + s_g(x, \mu_n) \quad (4.2-2)$$

Darin ist  $s_g(x, \mu_n)$  der Gruppenquellterm für Gruppe  $g$  und  $L$  die Ordnung der Legendreentwicklung für den Winkelfluss.  $P_l(\mu_n)$  sind die Legendrepolynome. Der Klarheit wegen wird der Energiegruppenindex  $g$  im Folgenden weggelassen.

Man betrachte eine Rechenzelle  $i$ , die über ihre linke und rechte Grenze (bei  $x_{i-1/2}$  bzw.  $x_{i+1/2}$ ) an ihre Nachbarzellen  $i-1$  bzw.  $i+1$  angrenzt (Abb. 4-5). In stabzellhomogenisierten Problemen entspricht die Größe der Zelle ( $\Delta x_i = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}$ ) gerade der Ausdehnung der Stabzelle. Jede Zellgrenze hat zwei Seiten: eine rechte Seite (Symbol +), die in Richtung größerer  $x$ -Werte weist, und eine linke Seite (Symbol -), welche zu kleineren  $x$ -Werten weist. Entsprechend wird der linke Zellrand bei  $x_{i-1/2}$  mit „-“, der rechte bei  $x_{i+1/2}$  mit „+“ bezeichnet. Die Wirkungsquerschnitte  $\sigma(x)$  werden als stückweise konstant angenommen, d. h. innerhalb der Zelle  $i$  gilt  $\sigma(x) = \sigma_i$  für  $x_{i-1/2} < x \leq x_{i+1/2}$ . Integration von Gl. (4.2-1) über Zelle  $i$  liefert die räumliche Neutronenbilanzgleichung für diese Zelle:

$$\frac{\mu}{\Delta x_i} (\psi_{i+1/2} - \psi_{i-1/2}) + \sigma_i \psi_i = q_i \quad (4.2-3)$$

Hierin wurde der Richtungsindex  $n$  der Einfachheit halber weggelassen. Man beachte, dass Gl. (4.2-3) keine räumliche Approximation beinhaltet und daher exakt ist.

Im Rahmen der verallgemeinerten Äquivalenztheorie die räumlich integrierten Reaktionsraten als auch die über Zelloberfläche integrierten Neutronenströme des heterogenen Problems im homogenisierten Problem dadurch zu erhalten, indem die Stetigkeitsbedingung für den homogenisierten Neutronenfluss an den Zellgrenzen modifiziert



wird. Dies wird dadurch erreicht, indem der homogenisierte Neutronenfluss innerhalb einer Zelle als (im einfachsten Fall) lineare Funktion angenommen wird, die an den Zellgrenzen unstetig ist. Für Zelle  $i$ , also für  $x_{i-1/2} < x \leq x_{i+1/2}$ , lautet der lineare Ansatz demnach:

$$\psi(x) = \frac{1}{\Delta x_i} \left[ (x_{i+1/2} - x) \psi_{i-1/2}^+ + (x - x_{i-1/2}) \psi_{i+1/2}^- \right] \quad (4.2-4)$$

Dies ist in Abb. 4-5 dargestellt, wo die Bedeutung der Größen  $\psi_{i-1/2}^+$  und  $\psi_{i+1/2}^-$  als linke und rechte Randflüsse in Zelle  $i$  deutlich wird. Anstatt nun Stetigkeit des homogenisierten Flusses an der Zellgrenze zu fordern:

$$\psi_{i-1/2}^- = \psi_{i-1/2}^+$$

wird die modifizierte Stetigkeitsbedingung

$$f_{i-1}^+ \psi_{i-1/2}^- = f_i^- \psi_{i-1/2}^+$$

an der Grenze zwischen den Zellen  $i - 1$  und  $i$  gefordert. Die Größen  $f_{i-1}^+$  und  $f_i^-$  sind die Stabzell-Diskontinuitätsfaktoren (engl. Pin Cell Discontinuity factors, PDF) für Zelle  $i - 1$  bzw.  $i$ . Die hochgestellten Indizes + und – bezeichnen den linksseitigen („westlichen“) bzw. rechtsseitigen („östlichen“) Diskontinuitätsfaktor. Der – an den Zellgrenzen stetige – heterogene Randfluss ist dann gegeben durch

$$\psi_{i-1/2} = f_{i-1}^+ \psi_{i-1/2}^- = f_i^- \psi_{i-1/2}^+ \quad (4.2-5)$$

Nach der diamond-differencing-Beziehung ist der mittlere Zellfluss in Zelle  $i$  durch den Flusswert im Zellmittelpunkt gegeben:

$$\psi_i = \frac{1}{2} (\psi_{i-1/2} + \psi_{i+1/2}) \quad (4.2-6)$$

Darin sind  $\psi_{i-1/2}$  und  $\psi_{i+1/2}$  die Zellrandflüsse. Um eine äquivalente Beziehung zu erhalten, die der modifizierten Zellrandfluss-Stetigkeitsbedingung (4) genügt, wird die Flussdarstellung (3) über die Zelle  $i$  integriert:

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} dx \psi(x) = \frac{1}{2} \Delta x_i (\psi_{i-1/2}^+ + \psi_{i+1/2}^-) \quad (4.2-7)$$

Wird das Integral auf der linken Seite durch  $\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} dx \psi(x) = \Delta x_i \psi_i$  ausgedrückt, erhält man unter Verwendung von (5) folgende modifizierte diamond-differencing-Beziehung, die die Diskontinuitätsfaktoren enthält:

$$\psi_i = \frac{1}{2} \left( \frac{\psi_{i-1/2}}{f_i^-} + \frac{\psi_{i+1/2}}{f_i^+} \right) \quad (4.2-8)$$

Mit dieser Gleichung, die den mittleren Zellfluss mit den Randflüssen in Beziehung setzt, erhält man folgende Gleichung für den mittleren Neutronenfluss in Zelle  $i$ :

$$\psi_i = \left( 2f_i^+ + \frac{\sigma_i \Delta x_i}{\mu} \right)^{-1} \left[ \left( 1 + \frac{f_i^+}{f_i^-} \right) \psi_{i-1/2} + \frac{\Delta x_i}{\mu} q_i \right] \quad (4.2-9)$$

Um das räumliche Gitternetz in (beispielsweise) positiver Neutronenflugrichtung ( $\mu > 0$ ) zu durchlaufen („Sweeping“-Prozess), benutzt man Gl. (4.2-8), um den rechten Randfluss in Zelle  $i$  zu bestimmen:

$$\psi_{i+1/2} = 2f_i^+ \psi_i - \frac{f_i^+}{f_i^-} \psi_{i-1/2} \quad (4.2-10)$$

Setzt man  $f_i^+ = f_i^- = 1$ , so resultiert dies offensichtlich in der Anwendung der bekannten diamond-differencing-Beziehung.

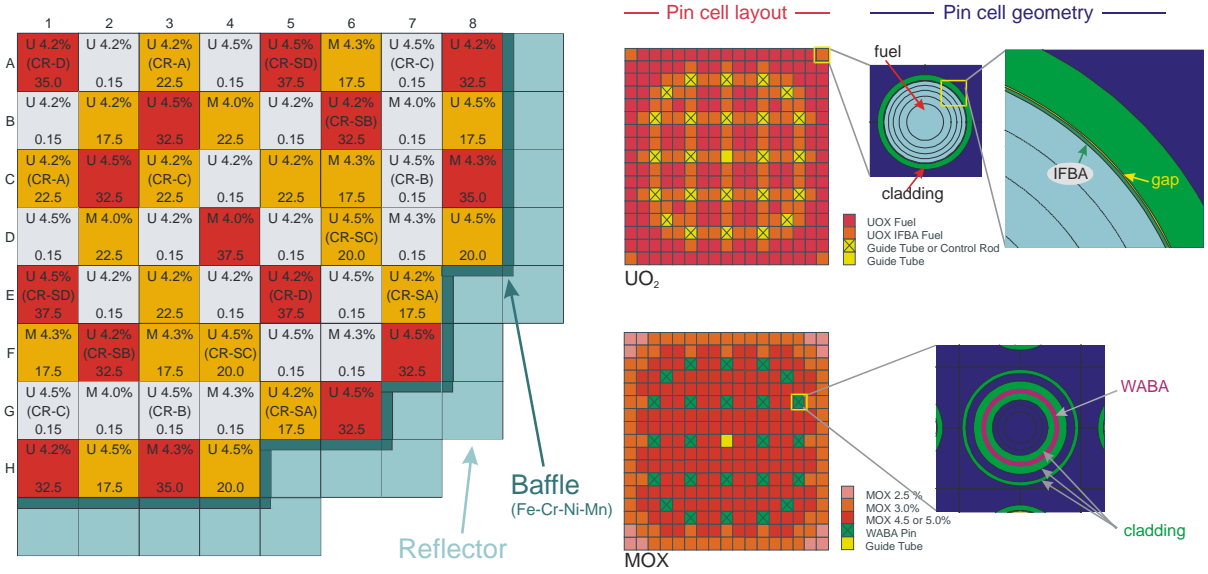
Die Erweiterung auf zwei und drei Raumdimensionen ist ohne Schwierigkeiten möglich. Im zweidimensionalen Fall gibt es zusätzlich zu den links- und rechtsseitigen Diskontinuitätsfaktoren solche für untere und obere Zellgrenze („südlich“ bzw. „nördlich“). Beispielsweise ergibt sich für einen Durchlauf durch das räumliche Gitter mit  $\mu > 0$  und  $\eta > 0$  der mittlere Winkelfluss in Zelle  $i,j$  zu

$$\psi_{ij} = \frac{q_{i,j} + \frac{\mu}{\Delta x_i} \left( 1 + \frac{f_{ij}^{x+}}{f_{ij}^{x-}} \right) \psi_{i-1/2,j} + \frac{\eta}{\Delta y_j} \left( 1 + \frac{f_{ij}^{y+}}{f_{ij}^{y-}} \right) \psi_{i,j-1/2}}{\sigma_{ij} + \frac{2\mu}{\Delta x_i} f_{ij}^{x+} + \frac{2\eta}{\Delta y_j} f_{ij}^{y+}} \quad (4.2-11)$$

Darin sind  $f_{ij}^{x-}$  und  $f_{ij}^{x+}$  die West- bzw. Ost-PDFs der Zelle  $i,j$  und  $f_{ij}^{y-}$  und  $f_{ij}^{y+}$  deren Süd- bzw. Nord-PDFs.

Anwendung: Der DWR MIX/ $UO_2$ -Benchmark-Zustand mit eingefahrenen Steuerelementen

Die Wirkungsweise der GET-Implementierung in TORT-TD lässt sich am deutlichsten für ein Reaktorproblem mit vollständig eingefahrenen Steuerelementen demonstrieren. Das hier betrachtete Beispiel ist der „All rods in“-Zustand (ARI) des OECD/NEA- und US-NRC-PWR-MOX/ $UO_2$ -Kerntransienten-Benchmarks /KOZ 06/ und ist in Abb. 4-6 dargestellt. Der Kern enthält  $UO_2$ - und MOX-Brennelemente mit mittleren Abbränden zwischen 0,15 GWd/t und 35,0 GWd/t. In den  $UO_2$ -Brennelementen beträgt die Anreicherung 4,2 % bzw. 4,5 %, der spaltbare Pu-Anteil der MOX-Brennelemente ist 4,0 % bzw. 4,3 %. Jedes Brennelement besteht aus einer 17x17-Anordnung quadratischer Stabzellen mit IFBA- (Initial Fuel Burnable Absorber) und WABA-Zellen (Wet Annular Burnable Absorber), welche die Überschussreaktivität des frischen Zustands kompensieren. In radialer Richtung ist der Kern von einer Reihe Reflektorelementen umgeben, die dieselben Abmessungen wie die Brennelemente haben. Jedes Reflektorelement enthält eine 2,52 cm dicke Dampfsperre (Baffle). Am äußeren Rand herrschen Vakuum-Randbedingungen.



**Abb. 4-6** OECD/NEA- und US-NRC-PWR-MOX/ $UO_2$ -Kerntransienten-Benchmark mit vollständig eingefahrenen Steuerelementen. Links: Viertelkern-Brennelement-Anordnung. Rechts: Stabzell-Anordnungen der  $UO_2$ - und MOX-Brennelemente mit Geometrien ausgewählter Stabzellen.

Zur stabzellweisen nuklearen Darstellung des Reaktorkerns wurden mit dem Zell-Abbrand-Programm HELIOS /CAS 91/ Abbrandrechnungen für die einzelnen Brennelementtypen im unendlichen Gitter durchgeführt. Die Wirkungsquerschnitte wurden für

jeden Stabzelltyp eines Brennelementtyps zellweise homogenisiert sowie in 8 Energiegruppen und  $P_1$ -Legendre-Streuordnung berechnet. Die Stabzell-Diskontinuitätsfaktoren (PDFs) wurden ebenso in HELIOS bestimmt. Da die Stabzellen innerhalb eines Brennelements nicht individuell, d.h. mit reflektierenden Randbedingungen, betrachtet werden, sind Stab-Stab-Wechselwirkungen mit berücksichtigt. Diese nicht verschwindende Oberflächenleckage erfordert strenggenommen eine besondere Vorgehensweise zur Berechnung der PDFs /SAN 09a/. Der Einfachheit halber wurden hier – gemäß GET /SMI 86/ – die PDFs durch das Verhältnis zwischen über die Seitenfläche gemitteltem Fluss und mittlerem Zellfluss  $\phi_v$  approximiert:

$$f = \frac{\phi_s}{\phi_v}$$

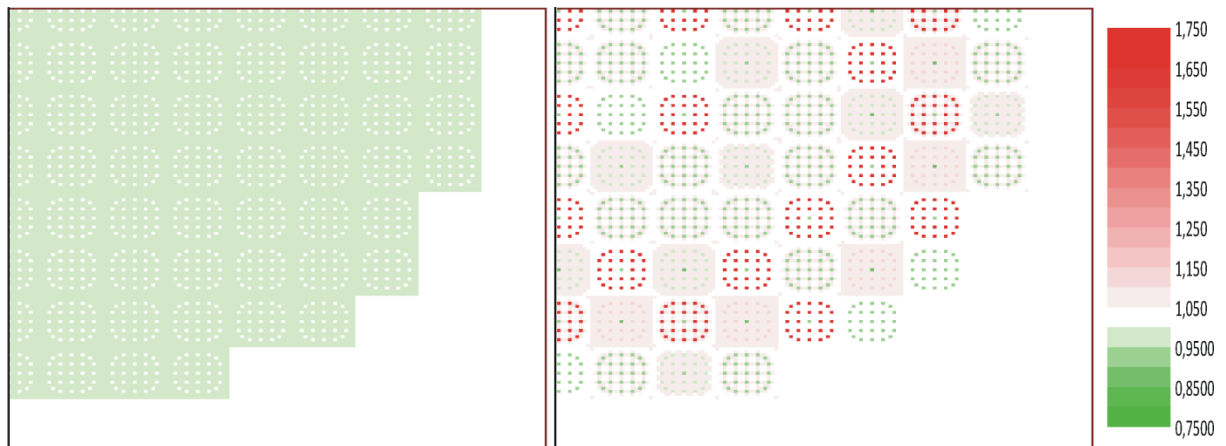
Darin ist  $\phi_s$  der über die jeweilige Seitenfläche (also West, Ost, Süd oder Nord) gemittelte Neutronenfluss und  $\phi_v$  der volumenintegrierte Zellfluss. In HELIOS sind die Partialstromdichtevektoren zugänglich, so dass der flächengemittelte Fluss mit Hilfe der aus der Diffusionsapproximation stammenden Beziehung

$$j^\pm = \frac{1}{4}\phi_s \pm \frac{1}{2}j$$

wie folgt ermittelt werden kann:

$$\phi_s = 2(j^+ + j^-) \tag{4.2-12}$$

Darin sind  $j^-$  und  $j^+$  die in die Stabzelle über ihren Rand hin- bzw. herauslaufenden Partialstromdichten, und  $j$  ist der Nettostrom. Diese Methode wurde in HELIOS für Stabzellen in jedem Brennelementtyp umgesetzt. Im vorliegenden Beispiel wurden für die vier Brennelementtypen separate PDFs je Stabzelltyp generiert. Wie im Folgenden gezeigt wird, liefert bereits eine Mittelung über die vier PDFs je Stabzelle gute Ergebnisse.



**Abb. 4-7** Verteilung der Stabzell-Diskontinuitätsfaktoren im Viertelkern des ARI-Zustands (alle Steuerelemente eingefahren) für die schnelle (links) und thermische (rechts) Energiegruppe.

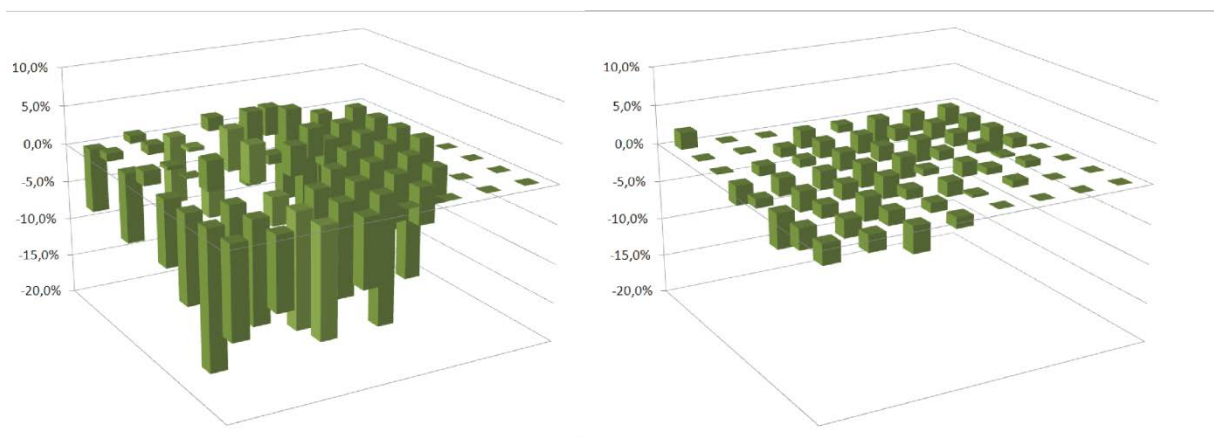
Abb. 4-7 Verteilung der Stabzell-Diskontinuitätsfaktoren im Viertelkern des ARI-Zustands (alle Steuerelemente eingefahren) für die schnelle (links) und thermische (rechts) Energiegruppe. zeigt die zweidimensionale Verteilung der Stabzell-Diskontinuitätsfaktoren im Viertelkern des ARI-Zustands (alle Steuerelemente eingefahren) für die schnelle (erste) und thermische (achte) Energiegruppe. Gemäß der gewählten Farbskala erscheinen PDFs in der Nähe von 1,0 weiß oder nur leicht gefärbt. Für die schnelle Energiegruppe (linkes Bild) gibt es also eine Korrektur durch die PDFs von maximal 5 %; für die thermische Gruppe hingegen (rechtes Bild) weichen die PDFs an den Steuerstabpositionen signifikant von 1,0 ab.

**Tab. 4-1** Eigenwerte (Multiplikationsfaktoren  $k_{eff}$ ) des ARI-Zustand mit verschiedenen Rechenmethoden

DeCART	TORT-TD ohne PDF	TORT-TD mit PDF	MCNP
0,98743	0,98511	0,99158	0,9900

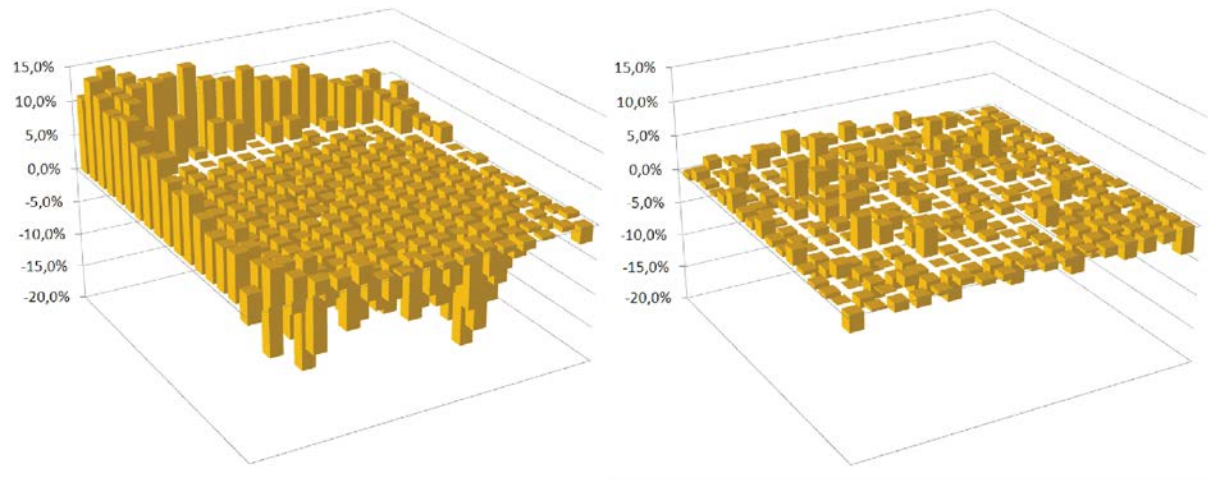
Um den Einfluss der in TORT-TD implementierten GET-Methode auf die Brennelement-Leistungsverteilung im Reaktorkern zu studieren, wurden zwei verschiedene TORT-TD-Rechnungen für den Nulllast-Heiß-Zustand gemäß Benchmark-Spezifikation durchgeführt: die erste ohne PDF, die zweite mit PDF. In beiden Fällen wurde die niveausymmetrische S4-Quadratur gewählt. Die Ergebnisse wurden mit einer Monte-

Carlo-Rechnung mittels MCNP unter Verwendung nuklearer JEF-2.2-Punktdateien /ZWE 08, LAN 09/ verglichen. Da in der Monte-Carlo-Methode Problem-Geometrie und nukleare Reaktionen ohne weitere Approximationen behandelt werden können, wurde die MCNP-Lösung der DeCART-Lösung – welche im Benchmark als Referenz diente – vorgezogen. Die relativen Unterschiede der beiden TORT-TD-Leistungsverteilungen zum MCNP-Ergebnis sind in Abb. 4-8 dargestellt. Die Abweichungen sind mit bis zu 17 % sehr deutlich, sofern von der GET-Methode in TORT-TD kein Gebrauch gemacht wird (alle PDFs auf 1,0 gesetzt). Dagegen bewirkt die GET-Methode eine substantielle Fehlerreduktion. Dies gilt auch für den Eigenwert, welcher sich deutlich in Richtung des Monte-Carlo-Werts verbessert (vgl. Tab. 4-1).



**Abb. 4-8** Relative Unterschiede zwischen der TORT-TD-Brennelement-Leistungsverteilung zur Monte-Carlo-Lösung mit nuklearen Punktdateien: Links ohne PDFs, rechts nach der GET-Methode (mit PDFs).

Zusätzlich zur brennelementweisen Leistungsverteilung im Kern wurden auch stabzellweise Leistungsverteilungen in einzelnen Brennelementen näher untersucht. Als Beispiel wird hier das Brennelement an Position E5 gewählt, da dieses den höchsten Abbrand aufweist und dort zudem alle 24 Steuerstäbe eingefahren sind. Als Referenz wurde in diesem Fall die DeCART-Lösung in 47 Energiegruppen herangezogen /KOZ 06/. Wiederum wurden die beiden TORT-TD-Lösungen ohne bzw. mit GET-Methode mit der DeCART-Rechnung verglichen; die Ergebnisse sind in Abb. 4-9 wiedergegeben. Die großen Abweichungen, die bereits in der Kern-Brennelement-Leistungsverteilung zu sehen sind, sind offensichtlich auch in der stabzellweisen Leistungsverteilung innerhalb eines Brennelements erkennbar, wenn die GET-Methode nicht zur Anwendung kommt. Die GET-Methode hingegen bewirkt eine signifikante Verbesserung, wie Abb. 4-8 (rechts) zu entnehmen ist.



**Abb. 4-9** Relative Unterschiede zwischen der stabzellweisen TORT-TD- Leistungsverteilung im Brennelement an Position E5 zur DeCART-Lösung in 47 Energiegruppen: Links ohne PDFs, rechts nach der GET-Methode (mit PDFs). 1.2.5

Zusammenfassend ist festzuhalten, dass die Implementierung der verallgemeinerten Äquivalenztheorie (Generalized Equivalence Theory, GET) in den Diskrete-Ordinaten-Transportcode TORT-TD einen substantiellen Gewinn an Genauigkeit bei der Berechnung stabzell- und brennelementweiser Kern-Leistungsverteilungen für LWR liefert. Zentraler Bestandteil der GET-Implementierung in TORT-TD ist die Darstellung des winkelabhängigen Neutronenflusses innerhalb einer (Stab-)Zelle durch eine lineare Funktion, die an den Zellgrenzen nicht notwendigerweise stetig ist. Die Unstetigkeit wird durch Stabzell-Diskontinuitätsfaktoren (Pin Cell Discontinuity Factors, PDF) ausgedrückt. Diese werden im Rahmen der vorangeschalteten Zell-Abbrand-Rechnung, die zur Generation der nuklearen Gruppendaten dient, im Voraus ermittelt, ohne auf rechenzeitintensive iterative Verfahren zurückgreifen zu müssen. Dies erleichtert insbesondere gekoppelte neutronenkinetisch/thermohydraulische Transientenanalysen, da die PDFs – wie die Wirkungsquerschnitte – nach thermohydraulischen Größen parametrisiert werden können. In TORT-TD sind die PDFs vollständig in das Wirkungsquerschnitts-Interpolationsverfahren integriert. Die Ergebnisse zeigen, dass bereits mit über die Stabzell-Seitenflächen gemittelten PDFs signifikante Genauigkeitsgewinne für LWR-Anwendungen erzielt werden können und die Genauigkeit der Diskrete-Ordinaten-Methode hierdurch voll zur Geltung kommen kann, und zwar ohne Einbußen an Rechenzeit.

#### 4.2.2 Die SPH-Methode

Die im vorigen Abschnitt beschriebene GET-Methode erfordert massive programmtechnische Eingriffe im verwendeten Transportprogramm, die in TORT-TD durchgeführt wurden. Damit ist die Anwendung dieser Methode auf TORT-TD beschränkt und mit den anderen in der GRS eingesetzten deterministischen und Monte-Carlo-Transportcodes mit Multigruppen-Daten (DORT-TD, DOORS, PARTISN, KENO, MCNP im Multigruppenmodus) nicht verwendbar. Diese Einschränkung wird aufgehoben, wenn man für Transportberechnungen mit homogenisierten Stabzellen Verfahren verwendet, bei denen der Einfluss der Homogenisierung durch Modifikation der Wirkungsquerschnitte oder der Materialdichten berücksichtigt wird. Solche effektiven Parameter sind mit beliebigen, unveränderten Multigruppen-Transportprogrammen einsetzbar.

Das sogenannte Superhomogenisierungs-(SPH)-Verfahren wurde von Kavenoky und Hébert entwickelt /HEB 93, HEB 93a/. Ziel dieses Verfahrens ist es, die Reaktionsraten in einer Rechnung mit homogenisierten Stabzellen zu erhalten. In der SPH-Methode werden dazu sowohl die Lösung der stationären Neutronentransportgleichung mit heterogener (räumlich aufgelöster) Geometrie als auch eine (Diffusions-) Lösung der Transportgleichung mit homogenisierten Stabzellen eingesetzt. Die Reaktionsraten der beiden Lösungen unterscheiden sich aufgrund der unterschiedlichen Neutronenflüsse:

$$R_m^k = \overline{\Sigma}_m(k) F_m^*(k) \neq \overline{\Sigma}_m(k) \tilde{F}_m^*(k) = \tilde{R}_m^k \quad (4.2-13)$$

Das SPH-Verfahren besteht nun darin, für jede Stabzelle und Energiegruppe einen Korrekturfaktor  $\mu_{m,k}$  zu ermitteln, der dieses Ungleichgewicht aufhebt. Dabei wird die Lösung der heterogenen Rechnung zur Korrektur der homogenisierten Querschnitte genutzt. Ein Eingriff in die jeweiligen Codes muss nicht vorgenommen werden, insofern ist diese Methode codeunabhängig einsetzbar.

#### **Implementierung:**

Die Berechnung der SPH-Faktoren ist in der Literatur beschrieben /HEB 09/. Daher soll hier nur kurz auf die Implementierung der Methode eingegangen werden. Der iterative Berechnungsalgorithmus lässt sich in vier Schritte einteilen:



1. In Iteration 0, werden die SPH Faktoren für jede Gruppe und jede Region auf den Wert 1 initialisiert:  $\mu_{m,k}^{(0)} = 1 \forall m, k$  (m: Index der homogenisierten Region, k: Index der Energiegruppe)

Dann wird eine Iterationsschleife gestartet:

2. Zunächst werden die korrigierten Querschnitts- und Diffusionskoeffizienten mit dem SPH-Faktor von Iteration n-1 berechnet.

$$\begin{aligned}\tilde{\Sigma}_m(k) &= \mu_m(k) \overline{\Sigma}_m(k) \\ \tilde{\Sigma}_{w,m}(k) &= \mu_m(k) \overline{\Sigma}_{w,m}(k) \\ \tilde{D}_m(k) &= \mu_m(k) \overline{D}_m(k)\end{aligned}\tag{4.2-14}$$

Mit Hilfe des Diffusionscodes wird anschließend der homogenisierte Neutronenfluss in den einzelnen Stabzellen berechnet.

3. Der neue SPH-Faktor der Iteration n, Makroregion m der Energiegruppe k wird dann aus dem Verhältnis des Flusses aus heterogener und homogener Lösung erhalten:

$$\mu_m^{(n)}(k) = \frac{F_m^*(k)}{\tilde{F}_m^{*(n)}(k)}\tag{4.2-15}$$

4. Die Schritte 2. und 3. werden solange wiederholt bis ein Konvergenzkriterium erfüllt ist:

$$\max_{m,k} \frac{|\mu_m^{(n)}(k) - \mu_m^{(n-1)}(k)|}{\mu_m^{(n)}(k)} < \varepsilon \text{ mit } \varepsilon = 10^{-4}\tag{4.2-16}$$

Nach dieser iterativen Sequenz stimmen die Reaktionsraten der heterogenen Lösung mit der homogenen Lösung überein.

$$R_m^k = \overline{\Sigma}_m(k) F_m^*(k) = \mu_m(k) \Sigma_m(k) \tilde{F}_m^*(k) = \tilde{R}_m^k\tag{4.2-17}$$

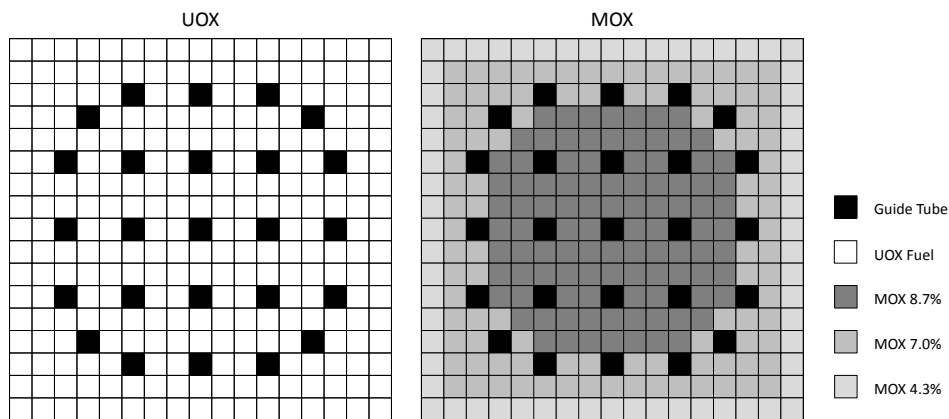
Die SPH-Methode wird i.A. immer brennelementweise angewendet. Größere Anordnungen werden dann aus den Brennelementen mit korrigierten Wirkungsquerschnitten

zusammengesetzt. Da dann andere Randbedingungen für die einzelnen Brennelemente gelten, stimmen die Reaktionsraten dann u. U. nicht mehr mit einer heterogenen Lösung überein. Daher ist an einem generischen Beispiel die Qualität der SPH-Methode für zusammengesetzte Kernanordnungen zu überprüfen.

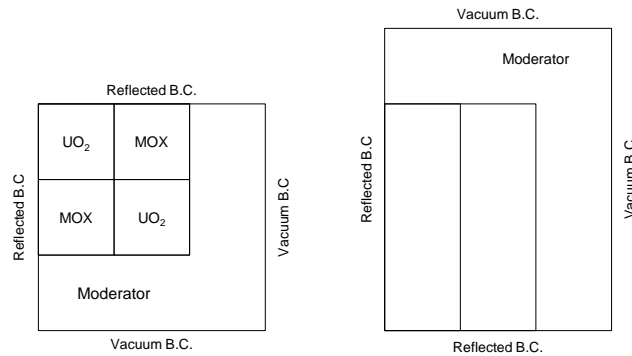
**Anwendungen:**

Um die Methode zu testen wurde sie zur Berechnung der C5G7-Benchmark-Anordnung verwendet. Der Spektralcode NEWT aus SCALE-6 lieferte dabei die heterogene Lösung. Der Diffusionscode QUABOX/CUBBOX wurde als Löser für die stabzellenhomogenisierte Anordnung verwendet. Als Referenzlösung wurde ein Monte Carlo-Modell mit KENO-VI erstellt.

Die C5G7-Anordnung besteht aus einem Mini-Kern mit acht MOX und acht UOX Brennelementen, die in einem Schachbrettmuster angeordnet sind (vgl. Abb. 4-10 und Abb. 4-11). An den Seiten der Anordnung befindet sich ein Wasserreflektor. Aus Symmetriegründen kann die Anordnung als Viertelkern mit reflektierenden Randbedingungen modelliert werden.



**Abb. 4-10** Brennelementkonfigurationen des C5G7-Kerns.



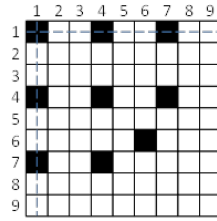
**Abb. 4-11** Horizontaler (links) und vertikaler (rechts) Schnitt durch den C5G7-Kern mit Reflektor.

Um die SPH-Methode schrittweise zu überprüfen, wird zunächst die Implementierung an den beiden Brennelementen überprüft, danach ein vereinfachtes Kernmodell ohne Reflektor (mit reflektierenden Randbedingungen) und als letzter Schritt die C5G7-Anordnung mit Reflektor berechnet.

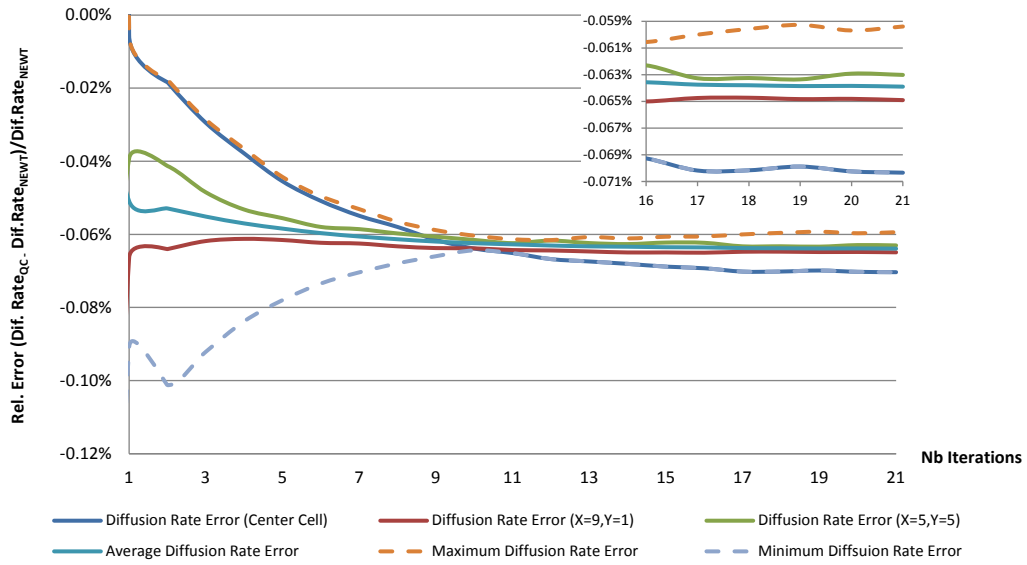
### Brennelemente

Die iterative SPH-Methode wurde wie oben beschrieben auf das UOX- und das MOX-Brennelement angewendet. Mit einem Konvergenzkriterium von  $\mu_m(k) = 10^{-4}$  wurden 20 Iterationen für das UOX- und 66 für das MOX-Brennelement benötigt. Dies ist auf die Heterogenität des MOX-Brennelements, welches drei Zonen mit unterschiedlicher Anreicherung hat, zurückzuführen.

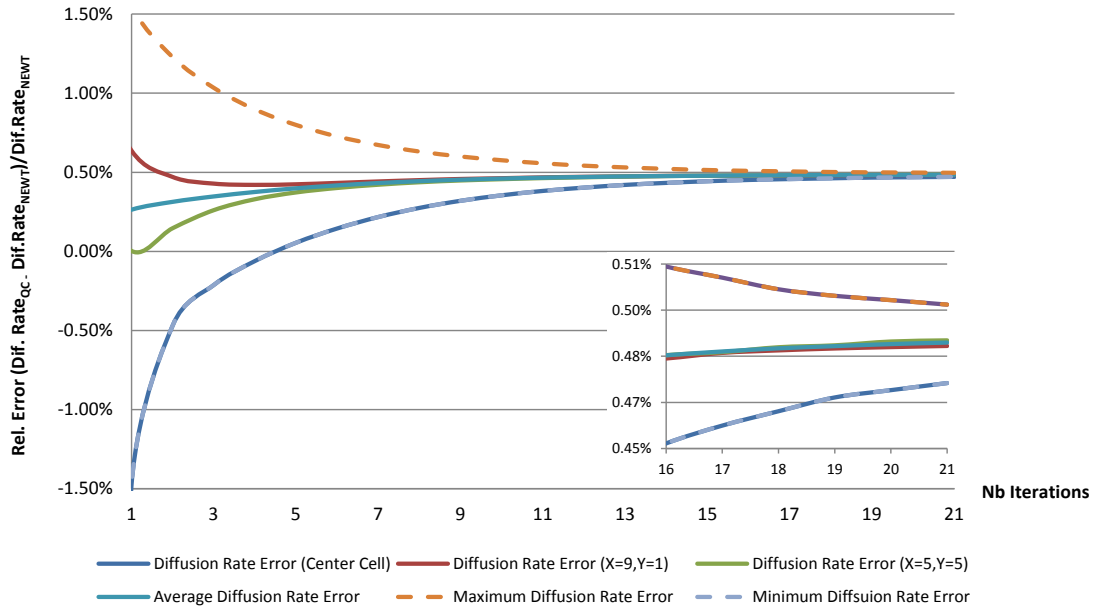
Um die Konvergenz des Verfahrens darzustellen, sind in Abb. 4-13 bis Abb. 4-16 die relativen Unterschiede von Diffusionsraten und Produktionsraten für unterschiedliche Stabzellen des UOX-Brennelements (s. Abb. 4-12 gezeigt). Man erkennt, dass die konvergierten Reaktionsraten nahezu identisch mit dem Wert der heterogenen NEWT-Rechnung sind. Die maximalen Abweichungen in der schnellen Energiegruppe liegen bei ca. 0.06 %, die Abweichungen in der thermischen Gruppe liegen eine Größenordnung höher bei ca. 0.5 %.



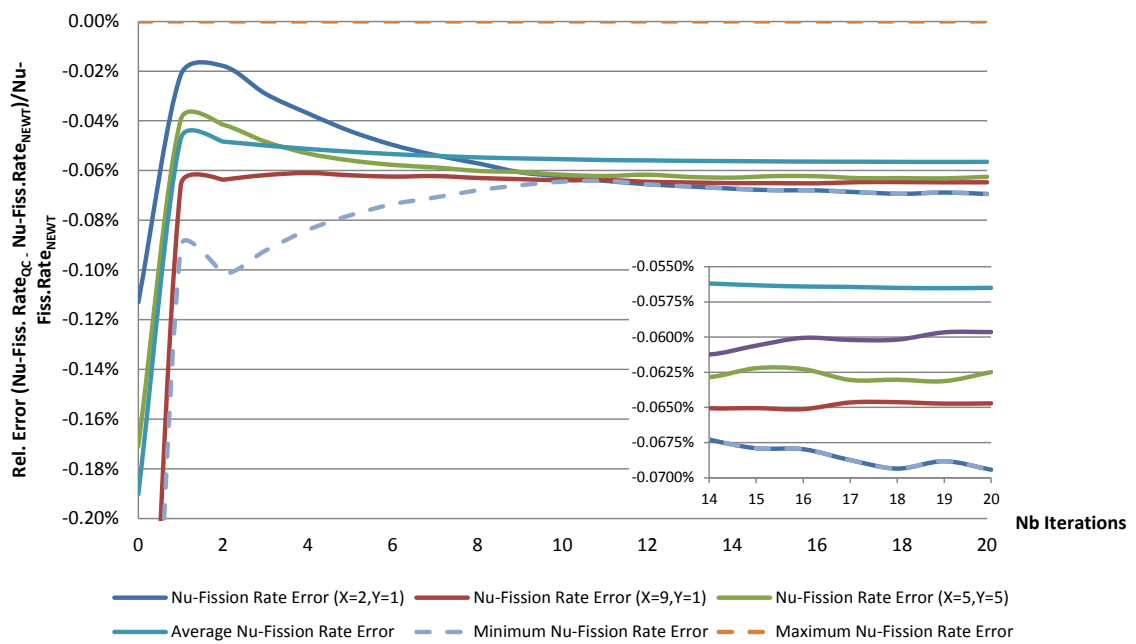
**Abb. 4-12** Darstellung der Brennelementgeometrie mit Nummerierung der einzelnen Stabzellen.



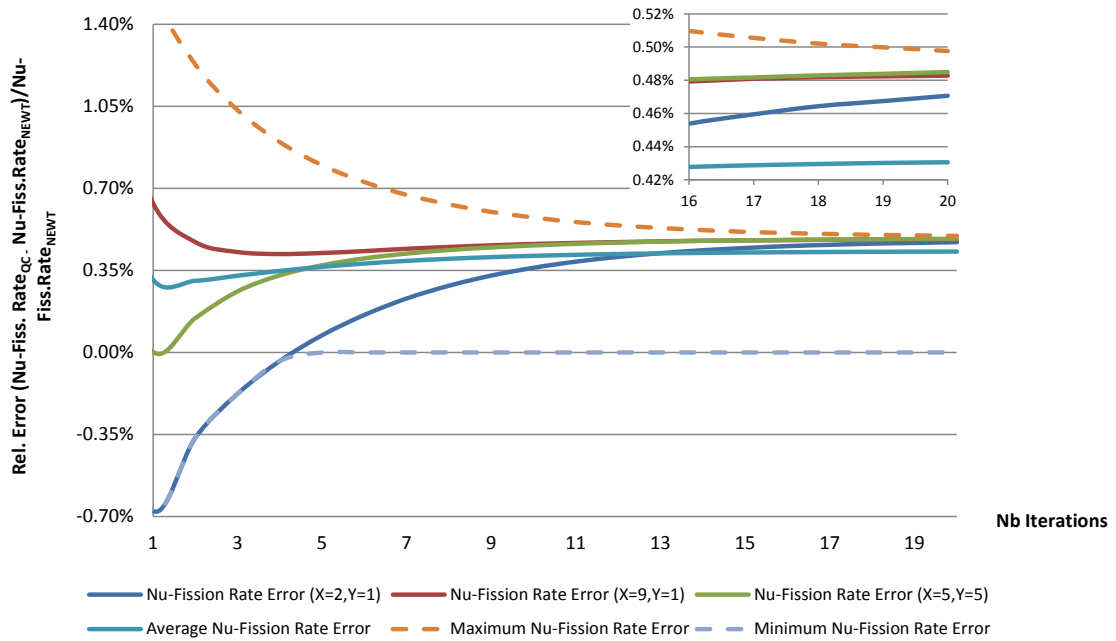
**Abb. 4-13** Relativer Fehler der Diffusionsrate in der schnellen Energiegruppe (UOX-Brennelement).



**Abb. 4-14** Relativer Fehler der Diffusionsrate in der thermischen Energiegruppe (UOX-Brennelement).



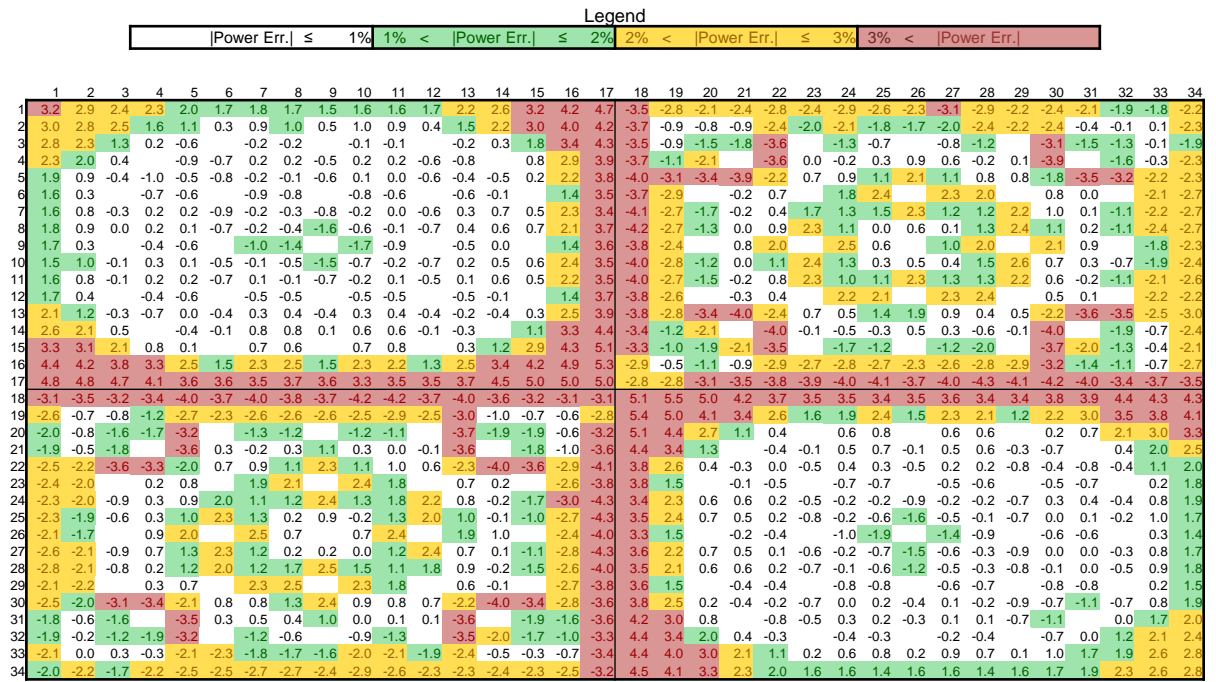
**Abb. 4-15** Relativer Fehler der Produktionsrate in der schnellen Energiegruppe (UOX-Brennelement).



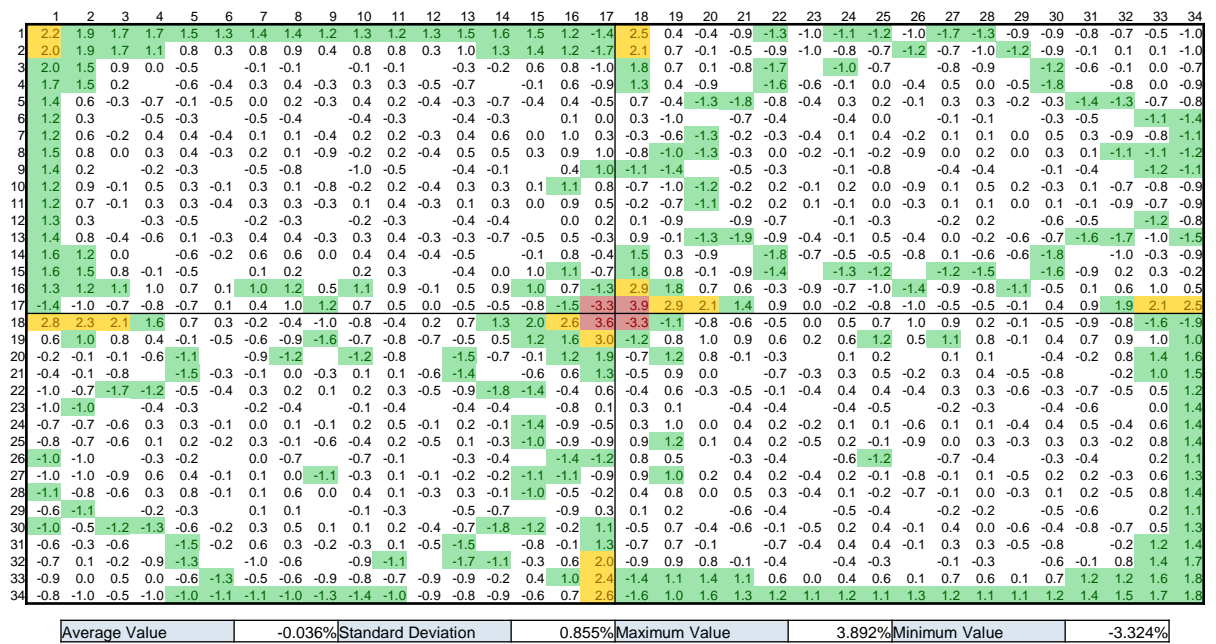
**Abb. 4-16** Relativer Fehler der Produktionsrate in der thermischen Energiegruppe (UOX-Brennelement).

### C5G7 mit reflektierenden Randbedingungen

Nachdem die homogenisierten Wirkungsquerschnitte mit der SPH-Methode korrigiert wurden, wurde als nächster Schritt das vereinfachte C5G7-Modell mit reflektierenden Randbedingungen berechnet. Als Ergebnis sind die Abweichungen der Stableistungen von der KENO-VI Referenzlösung in Abb. 4-17 dargestellt. Es ist zu erkennen, dass die Anwendung der SPH-Methode einen deutlichen Genauigkeitsgewinn bringt. Die mittlere Abweichung der Stabzellenleistung verringert sich von 2,129 % auf 0,855 %, die maximale Abweichung von 5,5 % auf 3,9 %. Auch der Fehler des Multiplikationsfaktors verringert sich von 602 pcm auf 135 pcm.



(a) QUABOX/CUBBOX Power Distribution obtained with NEWT Cross sections without SPH



(b) QUABOX/CUBBOX Power Distribution obtained with NEWT Cross sections with SPH

**Abb. 4-17** Relative Abweichungen der QUABOX/CUBBOX-Rechnungen (oben: ohne SPH-Korrektur, unten: mit SPH-Korrektur) von der KENO-VI-Referenzlösung.

C5G7 mit Reflektor

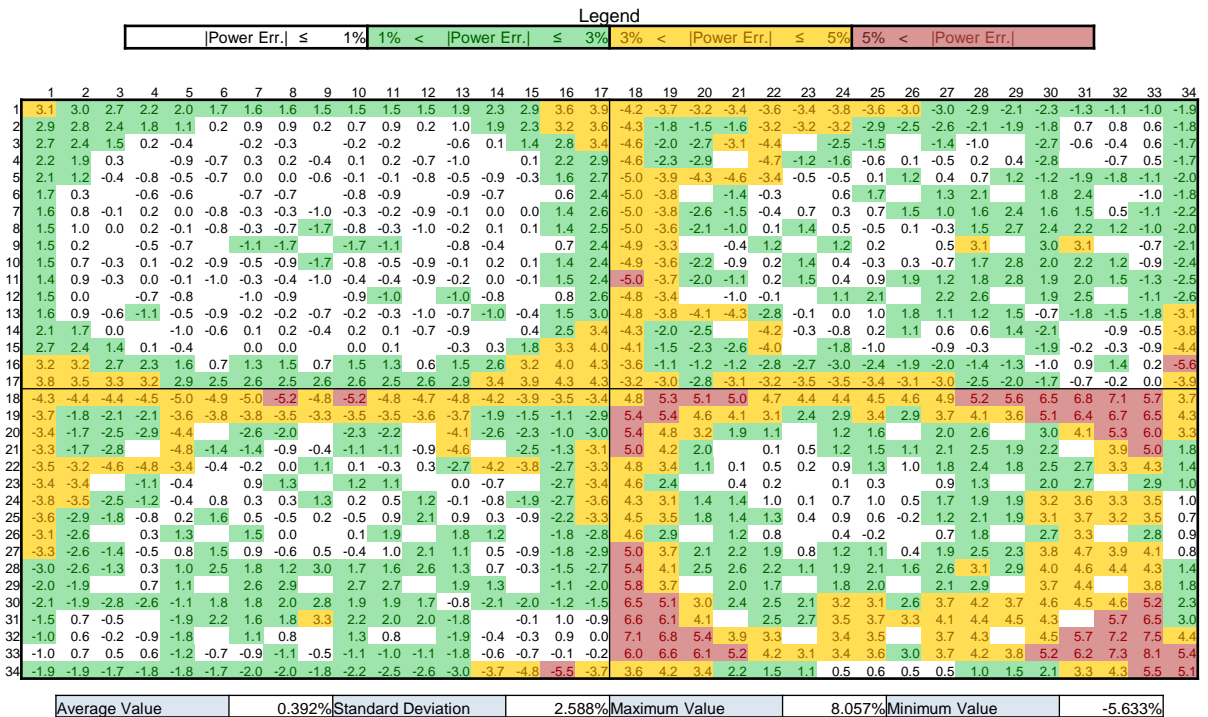


Abb. 4-18 Relative Abweichungen der QUABOX/CUBBOX-Rechnungen ohne SPH-Korrektur von der KENO-VI-Referenzlösung.

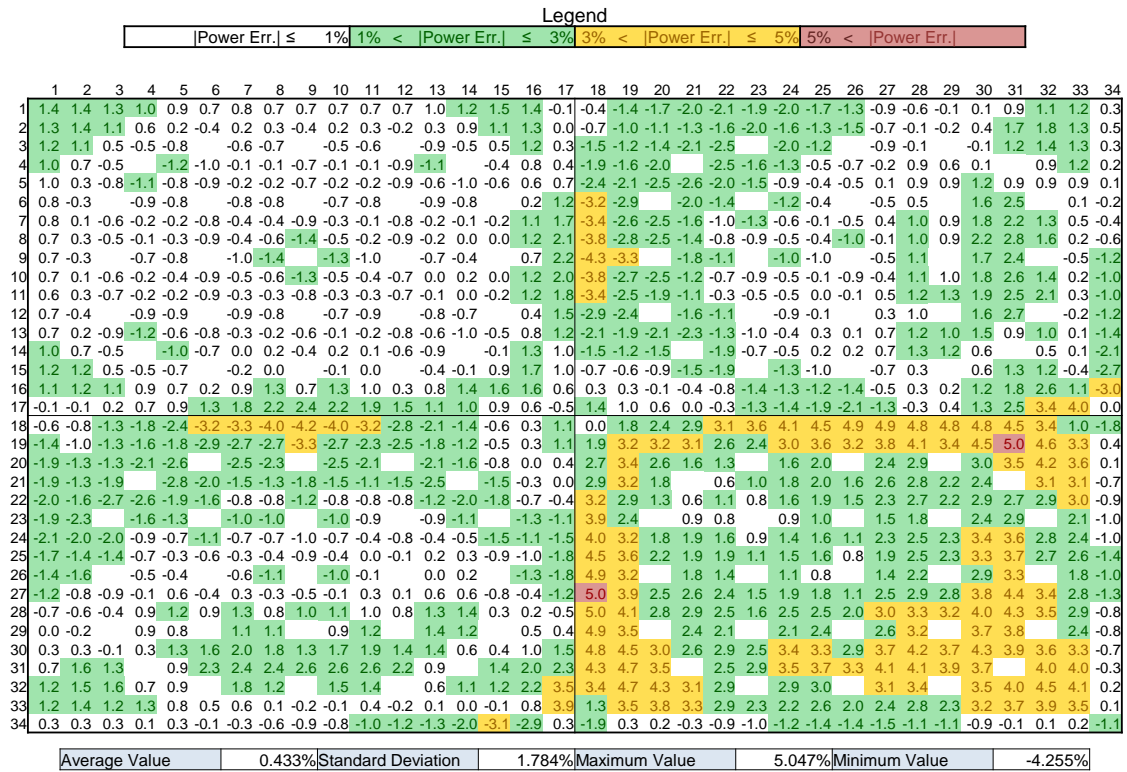


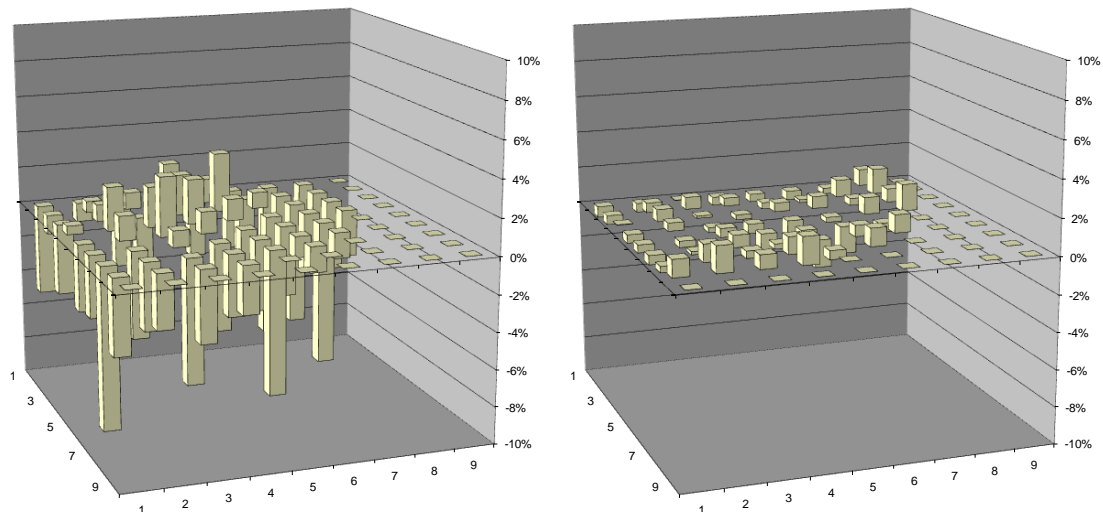
Abb. 4-19 Relative Abweichungen der QUABOX/CUBBOX-Rechnungen mit SPH-Korrektur von der KENO-VI-Referenzlösung.



Nachdem die sich die SPH-Methode für das Modell mit reflektierenden Randbedingungen als erfolgreich bewiesen hatte, wurde in einem letzten Schritt die C5G7-Anordnung mit Reflektor berechnet. Dabei wurden die Wirkungsquerschnitte für den Reflektor durch die übliche Homogenisierungsprozedur erhalten. Die Abweichungen der Stableistungen von der KENO VI Referenzlösung sind in Abb. 4-17 und Abb. 4-18 dargestellt. Es ist zu erkennen, dass die Anwendung der SPH-Methode auch hier einen deutlichen Genauigkeitsgewinn bringt. Die mittlere Abweichung der Stabzellenleistung verringert sich von 2,7 % auf 1,8 %, die maximale Abweichung von 8 % auf 5 %. Andererseits ist festzustellen, dass die Abweichungen größer sind als im Modell mit reflektierenden Randbedingungen. Insbesondere weisen die Stabzellen in der Nähe des Reflektors relativ hohe Abweichungen auf. Dieser Effekt könnte sich bei größeren Kernanordnungen noch verstärken. Daher ist eine Weiterentwicklung der SPH-Methode für den Reflektor angebracht.

#### **4.2.3 Die Methode der effektiven Absorber-Wirkungsquerschnitte**

Ein weiteres Verfahren zur Korrektur stabzellhomogenisierter Wirkungsquerschnitte in Reaktorberechnungen wurde im Vorgängervorhaben RS1160 entwickelt und bereits angewandt /LAN 09, ZWE 08/. Dabei wurde eine für die Absorberelemente in schnellen Reaktoren entwickelte und eingesetzte Methode /GIE 90/ auf Leichtwasserreaktoren übertragen. Eine reine Fluss-Volumen-Homogenisierung der Stabzellen-Wirkungsquerschnitte in der Brennelement-Transportrechnung zieht für heterogene Anordnungen eine Nichterhaltung der Reaktionsraten nach sich. Im Fall starker Heterogenitäten, z. B. bei Absorberstabzellen, führt dies zu einer deutlichen Überschätzung der Absorptionsraten /LAN 09/. Für die kontrollierten Brennelemente des DWR-MOX/UO<sub>2</sub>-Kerntransientenbenchmarks /KOZ 06/ (siehe Abb. 4-6) ergeben sich damit um ca. 2000 pcm zu hohe Steuerstabwirksamkeiten. Werden die entsprechenden Wirkungsquerschnitte für Ganzkernberechnungen verwendet, ergeben sich dadurch falsche Steuerstabwirksamkeiten sowie eine stark verzerrte Leistungsverteilung, Abb. 4-20.



**Abb. 4-20** Relative Unterschiede zwischen der PARTISN-Brennelement-Leistungsverteilung zur Monte-Carlo-Lösung mit JEF-2.2-Daten: Links mit unkorrigierten, rechts mit effektiven homogenisierten Absorber-Wirkungsquerschnitten.

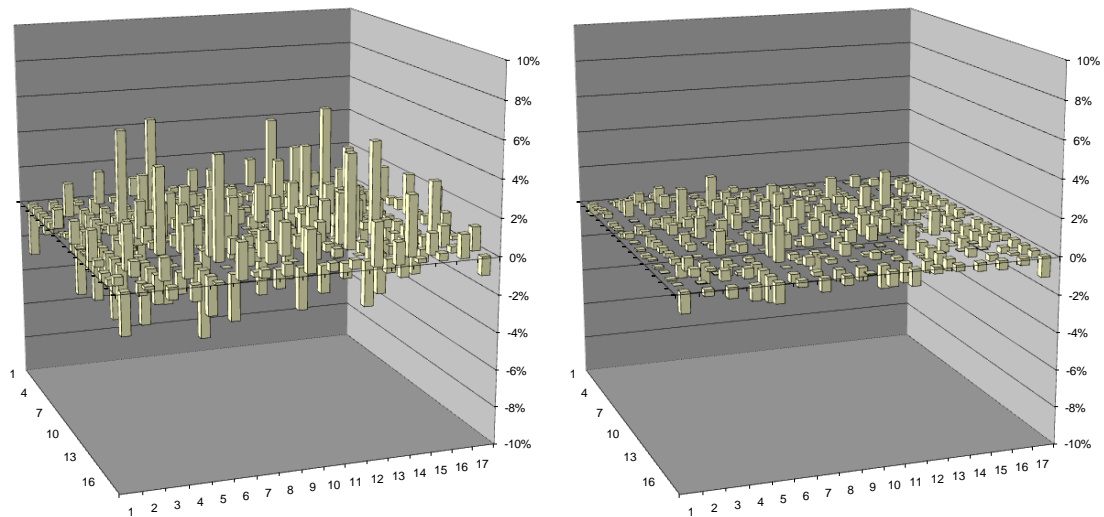
Dies kann dadurch weitgehend korrigiert werden, dass durch Einführung einer effektiven Absorberdichte, und damit eines Satzes von effektiven makroskopischen Absorber-Wirkungsquerschnitten, die Absorption der Steuerstäbe soweit reduziert wird, dass in den Brennelement-Berechnungen die Steuerstabwirksamkeiten für homogenisierte Stabzellen dieselben Werte annehmen wie für nicht-homogenisierte Stabzellen, siehe Abb. 4-20 rechts. Zur Erzeugung der stabzell-homogenisierten Wirkungsquerschnitte wurde der Lattice-Code NEWT aus dem SCALE-5.1-Programmsystem mit einer auf ENDF/B-V basierenden 44-Gruppen-Bibliothek eingesetzt. Die Wirkungsquerschnitte wurden auf 18 Energiegruppen zur Verwendung mit dem SN-Transportcode PARTISN kondensiert. Details finden sich in /ZWE 08/. Die Wirkung der Korrektur der zellhomogenisierten Absorber-Wirkungsquerschnitte ist ähnlich wie bei der Verwendung von Stabzell-Diskontinuitätsfaktoren, siehe Abb. 4-8.

In Tab. 4-2 werden die mit und ohne Korrektur der Absorberwirkungsquerschnitte berechneten Steuerstabwirksamkeiten mit den MCNP-Referenzergebnissen verglichen. Die Wirksamkeiten der Steuerstäbe in den Einzelbrennelementen A1, C3 und E5 beziehen sich auf den vollständig kontrollierten Zustand, d.h. sie beschreiben die Reaktivitätsänderung bei einem Steuerstabauswurf aus dem kontrollierten Kern. Es zeigt sich, dass die Verwendung korrigierter Absorberwirkungsquerschnitte ganz wesentlich für die Bestimmung realistischer Werte der Steuerstabwirksamkeiten ist, was den Ablauf von Transienten entscheidend mitbestimmt.

**Tab. 4-2** Berechnete Steuerstabwirksamkeiten in pcm für den DWR-MOX/UF<sub>6</sub>-Kerntransientenbenchmark.

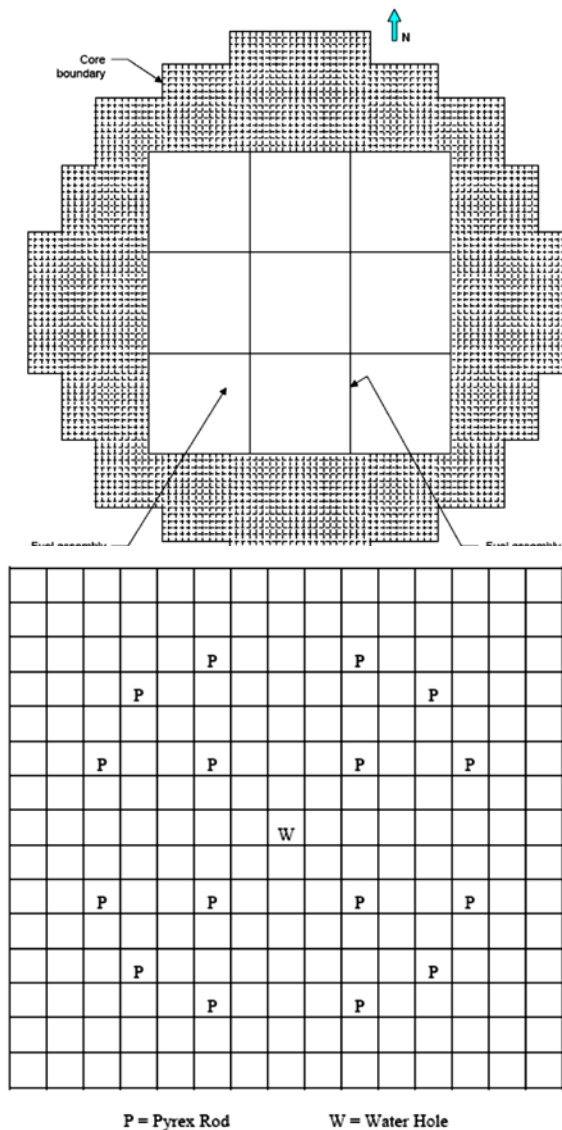
	Alle Stäbe	A1	C3	E5
MCNP/JEF-2.2	6723	-826	-1096	-241
PARTISN	6713	-824	-1110	-239
PARTISN ohne WQ-Korrektur	7034	-888	-1245	-269

Die Stärke der beschriebenen Methode der effektiven Absorber-Wirkungsquerschnitte kommt voll zur Geltung, wenn man die berechneten Stableistungsverteilungen mit der MCNP-Referenzlösung vergleicht. Dazu wird wieder das kontrollierte Brennelement E5 (siehe Abb. 4-6) aus dem DWR-MOX/UF<sub>6</sub>-Kerntransientenbenchmark herangezogen. Um sicherzustellen, dass Diskrepanzen zwischen der deterministischen und der Monte-Carlo-Lösung nicht auf statistische Unsicherheiten zurückzuführen sind, wurden für die MCNP-Rechnung  $10^9$  Neutronenschicksale ausgewertet; dies führt zu relativen statistischen Unsicherheiten ( $1 \sigma$ ) für die Stableistungen im betrachteten Brennelement von 0.23 % – 0.43 %. Während sich ohne die Korrektur der Wirkungsquerschnitte ein ähnlich unbefriedigendes Bild wie in Abb. 4-9 links ergibt, verbessert sich die Übereinstimmung mit korrigierten Wirkungsquerschnitten drastisch. Die Verwendung von Stabzell-Diskontinuitätsfaktoren ergibt noch Unterschiede zur MCNP-Referenzlösung von maximal ca. 5 % bei einer Standardabweichung von 1.75 %; die Methode der effektiven Absorber-Wirkungsquerschnitte liefert eine maximale Abweichung von weniger als 2 % bei einer Standardabweichung von 0.65 %. Dies ist in Abb. 4-21 dargestellt.



**Abb. 4-21** Relative Unterschiede zwischen der stabzellenweisen  $S_N$ -Transportlösung für die Leistungsverteilung im Brennelement E5 und der MCNP-Referenzlösung. Links: TORT-TD mit PDFs nach der GET-Methode. Rechts: PARTISN mit effektiven homogenisierten Absorber-Wirkungsquerschnitten.

Im Rahmen des Vorhabens RS1183 wurde die Methode der effektiven Absorber-Wirkungsquerschnitte zusätzlich zum Vergleich mit Monte-Carlo-Referenzergebnissen an gemessenen Daten validiert. Dazu wurde eine Serie von Benchmark-Experimenten herangezogen, bei denen die Stableistungsverteilungen in kritischen Anordnungen von DWR- $UO_2$ -Brennelementen gemessen wurden (LEU-COMP-THERM-008 in /NEA 95/). Diese Experimente wurden 1970 von Babcock & Wilcox durchgeführt; es handelt sich um 15x15-Brennelemente mit niedrig-angereichertem Uran. Die Brennelemente enthalten unterschiedliche Heterogenitäten in Form von Wasserkanälen und Absorberstäben.



**Abb. 4-22** Kernanordnung und Brennelement mit Absorberstäben aus der Benchmark-Serie LEU-COMP-THERM-008.

Für die Validierungsberechnungen wurden drei Fälle verwendet, (a) ohne Heterogenität, (b) mit Wasserkanälen, (c) mit Pyrex-Absorberstäben und einem zentralen Wasserkanal. Die gesamte Anordnung und das Brennelement mit Absorberstäben sind in Abb. 4-22 dargestellt. Im Fall (a) sind alle 17 Positionen P/W mit Brennstäben besetzt, im Fall (b) mit Wasserkanälen. Die MCNP-Referenzberechnungen wurden mit auf JEFF-3.1 basierenden Daten kontinuierlicher Energie durchgeführt. Für die Anordnungen, für die Stableistungsverteilungen berechnet wurden, wurden  $3 \times 10^8$  Neutronenschicksale ausgewertet, um die Stableistungen mit hinreichend kleiner statistischer Unsicherheit zu ermitteln; diese beträgt an allen Stabpositionen des zentralen Brennelements weniger als 0.2 % ( $1 \sigma$ ).

Für die deterministischen Berechnungen mit dem  $S_N$ -Code PARTISN wurden wie üblich zellhomogenisierte Wirkungsquerschnitte aus entsprechenden Brennelement-Berechnungen mit dem Lattice-Code NEWT erzeugt und auf 18 Energiegruppen kondensiert; dabei wurde bereits die ENDF/B-VII-Bibliothek in 238 Energiegruppen aus dem SCALE-6-System verwendet. Bei der Durchführung von Brennelementberechnungen mit PARTISN unter Verwendung dieser homogenisierten Wirkungsquerschnitte wird für das Brennelement mit den Absorberstäben erwartungsgemäß die Stabwirksamkeit deutlich überschätzt. Dies wird wieder durch die Einführung einer effektiven Absorberdichte korrigiert, mit der die makroskopischen homogenisierten Wirkungsquerschnitte für die Absorber-Stabzelle zu multiplizieren sind.

Die Ergebnisse werden in Tab. 4-3 verglichen. Die deutlichen Abweichungen zwischen den gemessenen und mit MCNP berechneten Stableistungsverteilungen sind mit großer Wahrscheinlichkeit zumindest teilweise auf Messungenauigkeiten zurückzuführen; darauf deuten physikalisch schwer erklärbare Sprünge in den gemessenen Verteilungen hin.

**Tab. 4-3** Ergebnisse für Kernanordnungen aus der Benchmark-Serie LEU-COMP-THERM-008 mit MCNP unter Verwendung von nuklearen Punktdaten, und PARTISN unter Verwendung zellhomogenisierter 18-Gruppen-Daten.

		(a) nur Brennstäbe	(b) mit Wasserkanälen	(c) mit Absorbers- stäben
k-eff	MCNP	0.99805	0.99815	0.99716
	PARTISN	0.99704	0.99835	0.98995
	PARTISN (korrigiert)			0.99741
Abweichung in der Stab- leistungsverteilung ( $1\sigma$ )	MCNP / Experiment		1.80 %	1.31 %
	PARTISN / Experiment		1.88 %	1.91 %
	PARTISN / MCNP		0.55 %	1.47 %
	PARTISN (korrigiert) / Ex-			1.45 %
	PARTISN (korrigiert) /			0.69 %

Aus Tab. 4-3 ist ersichtlich, dass zum Erreichen eines vernünftigen Multiplikationsfaktors für die Anordnung mit Absorberstäben eine Korrektur der zellhomogenisierten Wirkungsquerschnitte zwingend erforderlich ist. Mit einer solchen Korrektur wird auch die Übereinstimmung der berechneten Stableistungsverteilung sowohl mit der Monte-Carlo-Referenzlösung als auch mit den Messdaten entscheidend verbessert.

Damit stehen zwei Verfahren, die SPH-Methode und die Methode der effektiven Absorber-Wirkungsquerschnitte, in der nuklearen Berechnungskette der GRS zur Verfügung, unter deren Anwendung aus den verfügbaren Lattice-Codes (HELIOS, NEWT) zellhomogenisierte Multigruppen-Wirkungsquerschnitte für nachfolgende Kernberechnungen mit beliebigen deterministischen und Monte-Carlo-Transportcodes erzeugt werden können. Die Verwendung von Stabzell-Diskontinuitätsfaktoren nach der GET-Methode ist unter den in der GRS verfügbaren Neutronentransportprogrammen auf TORT-TD beschränkt. Sie weist bei der Bestimmung der Stableistungsverteilungen in kontrollierten Brennelementen deutliche Diskrepanzen zur Monte-Carlo-Referenzlösung auf.

#### **4.3 AP 1.3: Kopplung des Neutronentransportcodes TORT-TD mit einem thermohydraulischen Unterkanalmodell**

Der für die Kopplung mit TORT-TD und QUABOX-CUBBOX vorgesehene Unterkanalcode COBRA-TF wurde in RS1183 an verschiedene Computerplattformen (Linux und Windows) angepasst und erfolgreich an der GRS implementiert und getestet. In Analogie zur Kopplung mit ATHLET wurde für TORT-TD/COBRA-TF eine interne Kopplung realisiert. Die zur Kopplung erforderlichen Schnittstellen in TORT-TD und COBRA-TF wurden definiert und implementiert. Wie in TORT-TD/ATHLET, so wird auch in TORT-TD/COBRA-TF nach Ermittlung des stationären Ausgangszustandes eine Nulltransiente durchgeführt. Zur Verifikation des gekoppelten Codes TORT-TD/COBRA-TF wurde eine Steuerelement-Auswurftransiente in einer 2x2 DWR-Brennelementanordnung mit halbseitig reflektierenden Randbedingungen und axialen Reflektoren berechnet. Dieses Problem wurde zuvor schon mit TORT-TD/ATHLET behandelt, so dass direkte Vergleiche möglich sind. Für COBRA-TF wurde ein Modell mit vier thermohydraulischen Kanälen erstellt, die den einzelnen Brennelementen zugeordnet sind. Die Eingabedatensätze für TORT-TD und COBRA-TF wurden zusammen mit dem Codesystem TORT-TD/COBRA-TF an die Pennsylvania-State-Universität weitergegeben, um die weitere Kooperation auf dem Gebiet der gekoppelten Codesysteme zu intensivie-

ren und auszubauen. Erste Ergebnisse zeigen ein stabiles Konvergenzverhalten und einen plausiblen Verlauf der Transiente in guter Übereinstimmung mit dem TORT-TD/ATHLET-Resultat.

Der Code COBRA-TF verfügt zum gegenwärtigen Zeitpunkt über keinen echten stationären Modus, was den Start einer transienten Rechnung erheblich erschwert. Es wurde daher ein sogenannter pseudo-stationärer Modus entwickelt, aus dem heraus die Transiente eingeleitet wird. Die Vorgehensweise ist dabei wie folgt:

- COBRA-TF wird mit einer zunächst per Input spezifizierten, physikalisch plausiblen Leistungsverteilung auskonvergiert;
  - Die von COBRA-TF erzeugten Thermohydraulik-Daten werden an TORT-TD bzw. QUABOX/CUBBOX übergeben;
  - TORT-TD bzw. QUABOX/CUBBOX führt mit den durch die Thermohydraulik gegebenen Rückwirkungen eine stationäre Rechnung durch;
  - COBRA-TF wird erneut auskonvergiert, diesmal aber mit den von TORT-TD bzw. QUABOX/CUBBOX berechneten nodalen bzw. stabweisen Leistungswerten.

Diese Prozedur wird solange ausgeführt, bis sich eine sog. Nulltransiente einstellt, d.h. ein zeitabhängiger Verlauf, bei dem sich die für die Neutronik relevanten Daten Brennstofftemperatur, Moderatorichte und nodale Leistung nicht mehr signifikant ändern. Während dieser Nulltransiente werden außerdem die Zeitschritte der beiden gekoppelten Codes synchronisiert, wobei üblicherweise die Fluidynamik der führende Code ist. Eine Demonstration der Funktionalität des gekoppelten Systems sowie erste Rechenresultate sind auf der Physor 2010 veröffentlicht worden /PER 10a, CHR 10/. Auf der ICON 17 wurde darüber hinaus über die ersten Implementierungserfolge mit TORT-TD/ATHLET berichtet /VEK 09/.

Außerdem musste in COBRA-TF ein sog. *Boron Tracking*-Modell implementiert, mit dem die räumliche Verteilung der Borkonzentration (z. B. für den Fall von Bortransienten wie Borverdünnung) ermittelt werden kann. Diese Funktionalität war bislang nicht in COBRA-TF vorhanden. Erste Versuche mit einem sog. *Upwind*-Verfahren erwiesen sich numerisch als robust, zeigten allerdings eine deutliche numerische Diffusion. Ein erweiterter Ansatz wurde gemeinsam mit der TU München erarbeitet: hier wurde die



sog. flusskorrigierte Methode von Smolarckievic implementiert, die in dieser Form auch bereits im TRAC-PF1/MOD2-Code eingesetzt wird. Diese Methode verringert zwar deutlich die numerische Diffusion, kann aber zu Instabilitäten führen, die im weiteren Vorhabensverlauf noch gründlicher untersucht werden müssen.

Parallel zur Kopplung an TORT-TD wurde auch eine Kopplung zwischen dem thermohydraulischen Unterkanalcode COBRA-TF und dem neutronenkinetischen Code QUABOX/CUBBOX (nodale Diffusionstheorie) implementiert, um eine volle Vergleichbarkeit von nodaler Diffusionstheorie und Transporttheorie zu erreichen. Eine sogenannte *Moderator Density Transient* (bei der die Kühlmitteldichte am Kerneintritt variiert wird) wurden mit diesem Codesystem gerechnet. Die Arbeiten zu COBRA-TF sind relevant für die Simulation von LWR-Transienten, da eine detailgenaue Simulation solcher Transienten eine Unterkanalanalyse erfordert. Die Rechenzeit dieses gekoppelten Codesystems ist für praktische Anwendungen durchführbar und erfordert bei vergleichbarer Genauigkeit deutlich weniger Systemressourcen als COBRA-TF/TORT-TD. Die Ergebnisse wurden auf der Jahrestagung Kerntechnik 2010 vorgestellt /PER 10b/ und sind ausführlich in Kapitel 4.3.5 und Kapitel 4.3.6 dokumentiert.

#### **4.3.1 COBRA-TF Beschreibung**

Als Ergänzung zu dem Rückwirkungsmodell mit parallelen Kühlkanälen aus ATHLET-Komponenten wurde in TORT-TD eine Kopplung mit einem Unterkanalmodell implementiert. In der GRS ist das thermohydraulische Unterkanal-Programm COBRA-TF seit 2008 verfügbar. COBRA-TF (COBRA-TF: COolant Boiling in Rod Arrays – Two Fluid) ist ursprünglich vom Pacific Northwest Laboratory unter der Betreuung der U.S.NRC entwickelt worden. Die Version, die derzeit in der GRS benutzt wird, wurde an der Penn State University (PSU) aktualisiert und verbessert /CUE 06/. COBRA-TF ist in der Lage, verschiedene geometrische Nodalierungen umzusetzen: so kann z. B. eine radiale Masche einem Brennelement-Querschnitt („Grobmasche“), aber ebenso auch einer einzelnen Brennstabzelle („Feinmasche“) entsprechen. Der Code löst das Zwei-Fluid-, Drei-Feld-Gleichungssystem für zwei Phasen im Reaktordruckbehälter:

- „Continuous vapor“ (Masse, Impuls und Energie)
- „Continuous liquid“ (Masse, Impuls und Energie)
- „Entrained liquid drops“ (Masse und Impuls)
- „Non-condensable Gas“ Mischung (Masse)

#### **4.3.2 Anbindung von COBRA-TF an die Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse des GRS-Codes SUSa**

Eine automatisierte Anbindung an die Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse des GRS-Codes SUSa (*Software for Uncertainty and Sensitivity Analysis*) wurde gemeinsam von GRS und Penn State University (PSU) entwickelt. COBRA-TF/SUSa-Rechenläufe sind z. B. für die Übung I-4 des BFBT-Benchmarks /NEY 05/ durchgeführt worden. Das Ziel dieser Übung ist die Verteilung des Dampfvolumentanteils am Austritt des elektrischen geheizten SWR-Brennelements nachzurechnen und mit den experimentellen Daten zu vergleichen. Zwei Ergebnistypen werden erzeugt: die Wahrscheinlichkeitsdichteverteilungen (*PDF = Probability Density Functions*) und das statistische Gewicht, d.h. die Sensitivität jedes Parameters auf die Rechenergebnisse. Zwei Parametertypen wurden untersucht: die thermohydraulischen Randbedingungen (z. B. der Druck, die Leistungsverteilung, etc...) und die Modellierungsparameter (z. B. „single-phase mixing coefficient“, „film-to-vapor interfacial drag coefficient“, etc...). Relevante Ergebnisse, die bei der Dienstreise nach Saratoga Springs in 2009 gerechnet wurden, wurden auf der M&C 2009 präsentiert /AVR 09/. Sie lassen sich wie folgt zusammenfassen:

- Der Druck ist ein Randbedingungsparameter, der den höchsten Einfluss auf die Verteilung des Dampfvolumentanteils hat.
- Der „single-phase mixing coefficient“ und der „film-to-vapor interfacial drag coefficient“ sind die Modellierungsparameter, die den höchsten Einfluss auf die Verteilung des Dampfvolumentanteils haben.

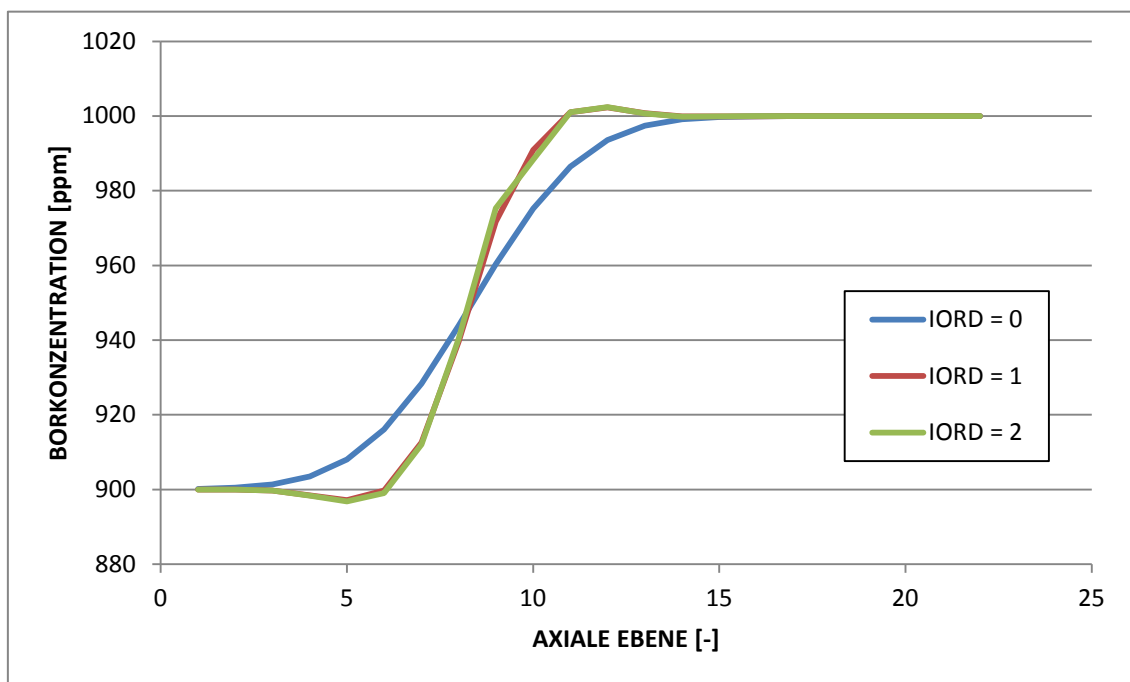
Daraus folgt, dass der Weiterentwicklungsaufwand von COBRA-TF Modellen auf diese zwei Korrelationen fokussiert werden soll.

#### **4.3.3 Implementierung eines sogenannten „Boron Tracking“-Modells**

Die Borkonzentration im Kern spielt eine wichtige Rolle bei gekoppelten DWR-Transientensimulationen. Die COBRA-TF Version, die die GRS in 2008 bekommen hat, war nicht in der Lage die Borkonzentration zu berechnen. Deshalb wurden zwei verschiedene sogenannte „Boron Tracking“-Modelle höherer Ordnung in COBRA-TF implementiert. Das sogenannte Godunov-Modell wurde in der PSU entwickelt, während das Smolarkievicz-Modell in der GRS implementiert und getestet wurde.

Die Smolarkievicz-Methode wurde erfolgreich in dem 3-dimensionalen Druckbehältermodul des Systemcodes TRACPF1/MOD2 in der PSI implementiert. Diese Methode besteht aus einer höheren Flusskorrektur-Ordnung des üblichen Berechnungsmodells erster Ordnung.

Erste Ergebnisse einer Borpfropfen-Transiente in einer 2x2-Kanal Anordnung, die mit der Smolarkievicz-Methode berechnet wurden, sind in Abb. 4-23 dargestellt. Das Berechnungsmodell erster Ordnung (IORD=0) zeigt eine sehr gute Stabilität. Allerdings kann starke numerische Diffusion beobachtet werden. Korrekturen höherer Ordnung (IORD=1-2) können deutlich die numerische Diffusion reduzieren. Doch wenn die numerische Diffusion in COBRA-TF reduziert wurde, sind einige Stabilitätsprobleme identifiziert worden, die derzeit untersucht werden. Durch diese Probleme kann die lokale Borkonzentration unter- bzw. überschätzt werden. Dies spielt eine bedeutende Rolle, wenn die Borkonzentration mit einem neutronenkinetischen Code gekoppelt wird.



**Abb. 4-23** Axiale Borkonzentrationsverteilung im 2x2-Minikern während einer Borpfropfen-Transiente

#### 4.3.4 Kopplung des Neutronentransportcodes TORT-TD mit dem thermohydraulischen Unterkanalmodell COBRA-TF

Auf der Basis der bei der GRS vorliegenden Erfahrungen bei der Kopplung von Neutronenkinetik- und Thermohydraulik-Programmen wird die so genannte interne Kopp-

lung zwischen TORT-TD und COBRA-TF angewandt (Abb. 4-24). Bei dieser Art der Kopplung ist das Thermohydraulik-Programm das Hauptprogramm. Der Neutronenkinetikcode wird als Unterprogramm aufgerufen.

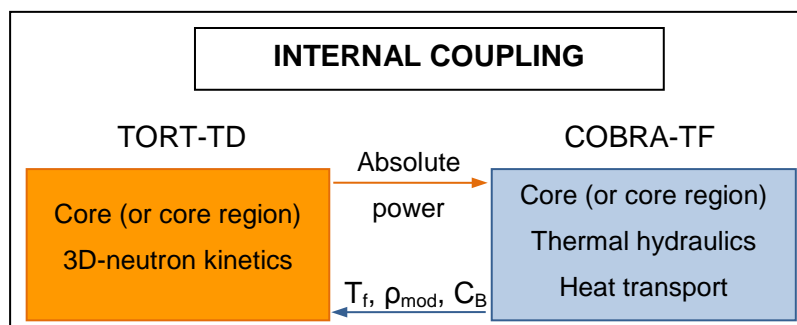
Eine allgemeine Kopplungsschnittstelle ist auf Basis der bereits existierenden Kopplung der Programme QUABOX-CUBBOX (auch TORT-TD) und ATHLET entwickelt worden. Diese Schnittstelle erlaubt den Austausch von Informationen unabhängig von der unterschiedlichen Anzahl der axialen Knoten der beiden Programme und führt die automatisierte Interpolation der ausgetauschten Parameter auf den jeweiligen Gittern durch. Die ausgetauschten Daten zwischen beiden Programmen schließen folgende Parameter ein:

Von TORT-TD zu COBRA-TF:

- Nodale Leistungsverteilung,

Von COBRA-TF zu TORT-TD:

- Nodale Kühlmitteldichte,
- Nodale Kühlmitteltemperatur,
- Nodale (Doppler-) Brennstofftemperatur,
- Nodale Borkonzentration



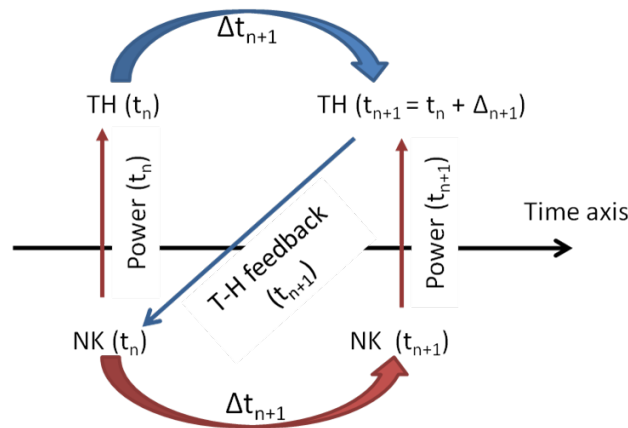
**Abb. 4-24** Interne Kopplungsmethode

In einem zweiten Schritt wurde die stationäre Kopplung der beiden Programmteile implementiert. Solange noch kein vollwertiger stationärer Modus in COBRA-TF vorhanden ist, wird zunächst der *Pseudo Steady-State Mode* benutzt. Im *Pseudo Steady-State* Modus werden die folgenden Schritte durchgeführt:

1. COBRA-TF läuft im transienten Modus bis zur Konvergenz mit seinen Eingabedatensatz-Randbedingungen
2. Konvergierte TH-Parameter werden auf TORT-TD übertragen
3. TORT-TD läuft im stationären Modus bis zur Konvergenz
4. Konvergierte Leistungsverteilung wird auf COBRA-TF übertragen

Die beiden Programme iterieren bis zur Systemkonvergenz. Dazu müssen sogenannte Konvergenzkriterien definiert werden. Die internen COBRA-TF Konvergenzkriterien sind die Moderator Dichte sowie die Brennstofftemperatur (Doppler-Temperatur). Dazu kommt die Leistungsdichte als letztes Systemkonvergenzkriterium.

Um transiente Rechnungen mit dem gekoppelten Programmsystem TORT-TD/COBRA-TF in effizienter Weise durchführen zu können, ist es nötig, eine spezielle Zeitschrittsynchronisationsmethode zu entwickeln. Die Zeitsynchronisation zwischen COBRA-TF und TORT-TD wird explizit mit der sogenannten „staggered time step scheme“ gelöst (Abb. 4-25). In diesem Schema ist COBRA-TF der führende Code. Wenn der COBRA-TF Zeitschritt länger ist als das Maximum, das in TORT-TD erlaubt ist, hat TORT-TD die Möglichkeit, mehrere kleinere Zeitschritte mit linear interpolierten TH-Feedbacks durchzuführen.



**Abb. 4-25** „Staggered time step“ Schema

Die Kopplung zwischen dem thermohydraulischen Unterkanalcode COBRA-TF und dem neutronenkinetischen Code TORT-TD (Feinmaschen-Transporttheorie) wurde voll implementiert. Das gekoppelte Codesystem COBRA-TF/TORT-TD erlaubt eine sehr detaillierte Darstellung des Kerns (eine Feinmasche entspricht dabei einer Brennstabzelle). Der Vorteil eines solchen Systems ist, dass die Genauigkeit der Ergebnisse sehr

groß ist. Hierfür wird international mittlerweile der Begriff "High-Fidelity"- Kernberechnungen verwendet. Wesentlicher Nachteil ist die erhebliche benötigte Rechenzeit.

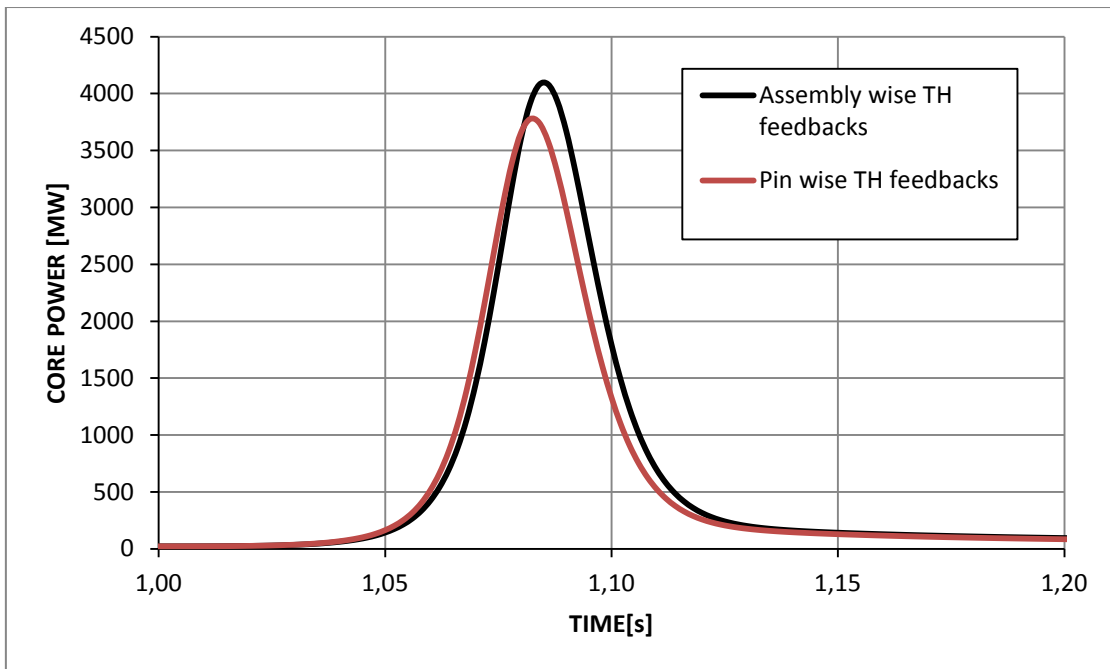
#### 4.3.5 COBRA-TF/TORT-TD DWR-Validierungsfälle

Zwei relevante Ergebnisse, die bei der Dienstreise zur Penn-State University in 2009 gerechnet wurden, wurden auf der PHYSOR 2010 präsentiert /CHR 10/.

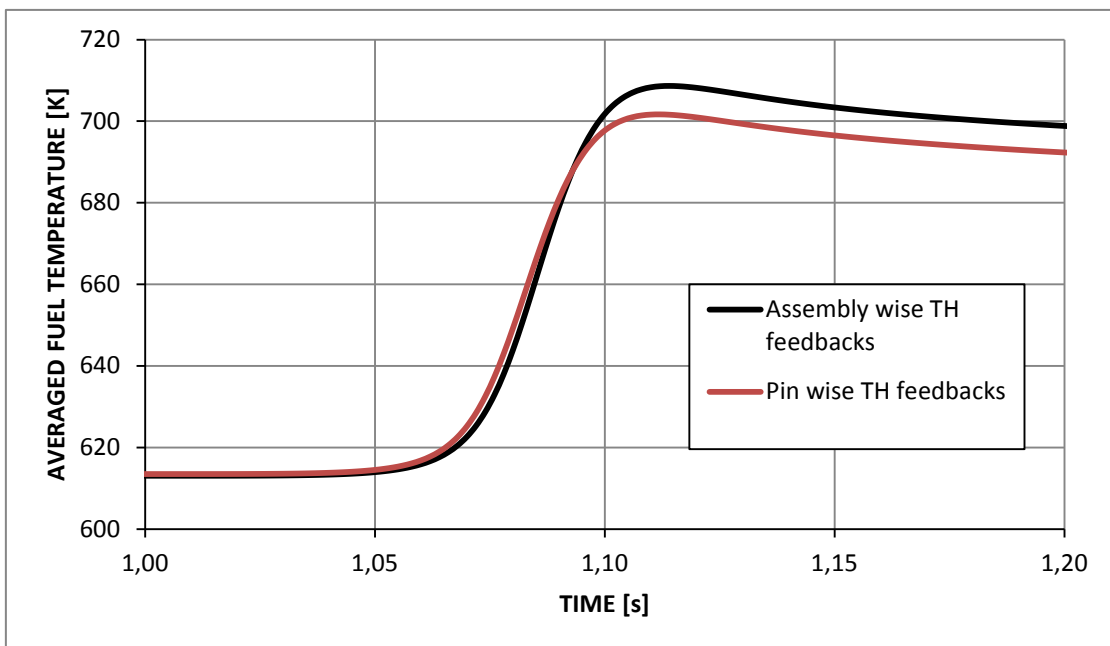
- Ein Stabauswurf aus einer 2x2-UO<sub>2</sub>-Brennelementanordnung (Abb. 4-26). Die gleiche Transiente wurde mit zwei verschiedenen COBRA-TF Modellen durchgeführt: Erst entspricht eine radiale Masche einem Brennelement-Querschnitt („Grobmasche“) dann einer einzelnen Brennstabzelle („Feinmasche“). In beiden Fällen ist das TORT-TD Modell feinmaschig. Die Ergebnisse sind in Abb. 4-27 und Abb. 4-28 dargestellt. Die TH-Modellierung hat eine erhebliche Auswirkung auf die maximale Leistung und die Brennstofftemperatur. Diese Ergebnisse zeigen, dass "High-Fidelity"-Systeme wichtig sind um transiente Simulationen mit höherer Genauigkeit durchzuführen.

		Reflective BC			
		1	2		
Reflective BC	A	U 4.2% 0.15	U 4.2% 0.15	Vacuum	
	B	U 4.2% 0.15	U 4.2% 37.5		
		Vacuum			

**Abb. 4-26** 2x2-UO<sub>2</sub>-Brennelementanordnung für die Steuerstabauswurf-Simulation



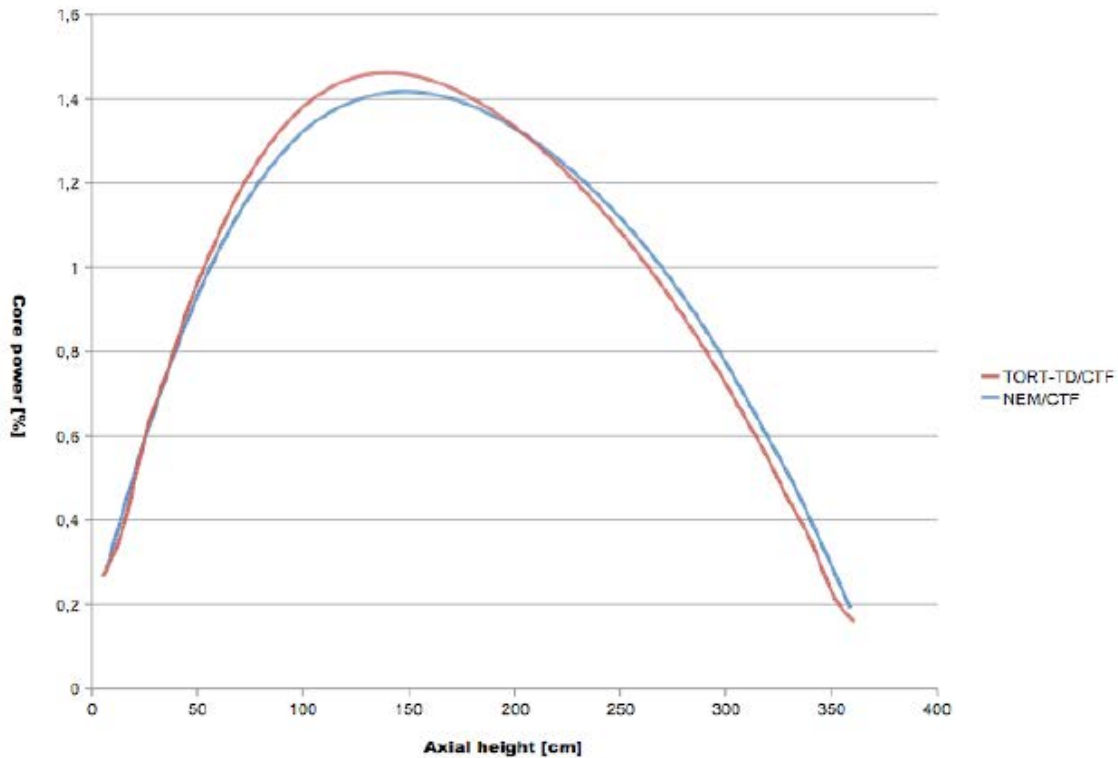
**Abb. 4-27** Zeitablauf der Kernleistung während eines Steuerstabauswurfs – Vergleich zwischen grobmaschigen und feinmaschigen TH-Modellen



**Abb. 4-28** Zeitablauf der mittleren Kern-Brennstofftemperatur während eines Steuerstabauswurfs – Vergleich zwischen grobmaschigen und feinmaschigen TH-Modellen

- Stationärer Zustand eines vollen DWR-Kerns. Der ausgewählte Kern kommt aus dem „OECD/NEA, PWR MOX/UO<sub>2</sub> Core Transient Benchmark“. Die mittlere axiale Leistungsverteilung am Volllast Zustand ist in Abb. 4-29 dargestellt. Diese Ergebnisse stehen in guter Übereinstimmung mit den Ergebnissen des

COBRA-TF/NEM Systems (von PSU geliefert). Beide gekoppelte Systeme verwenden das gleiche COBRA-TF Modell. Deshalb beruhen die Unterschiede auf den verschiedenen neutronischen Modellen (z. B. NEM ist nur ein Diffusionscode, der aus wenigen Gruppen besteht).



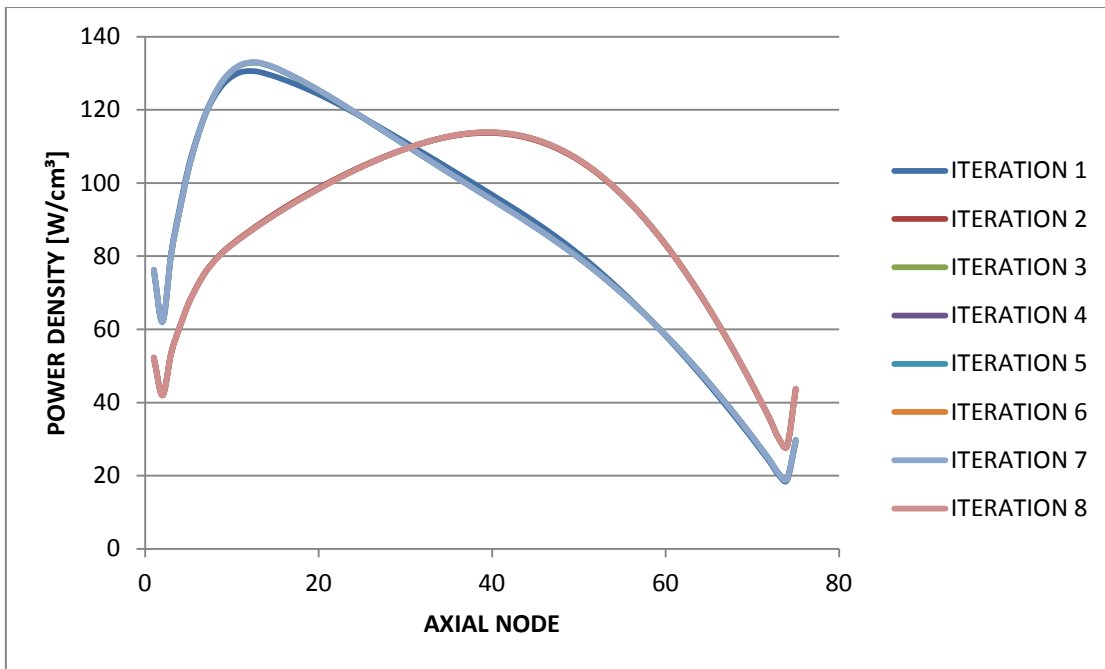
**Abb. 4-29** Axiale Leistungsverteilung am Vollast Zustand – Vergleich zwischen COBRA-TF/TORT-TD und COBRA-TF/NEM

#### 4.3.6 COBRA-TF/TORT-TD SWR-Validierungsfälle

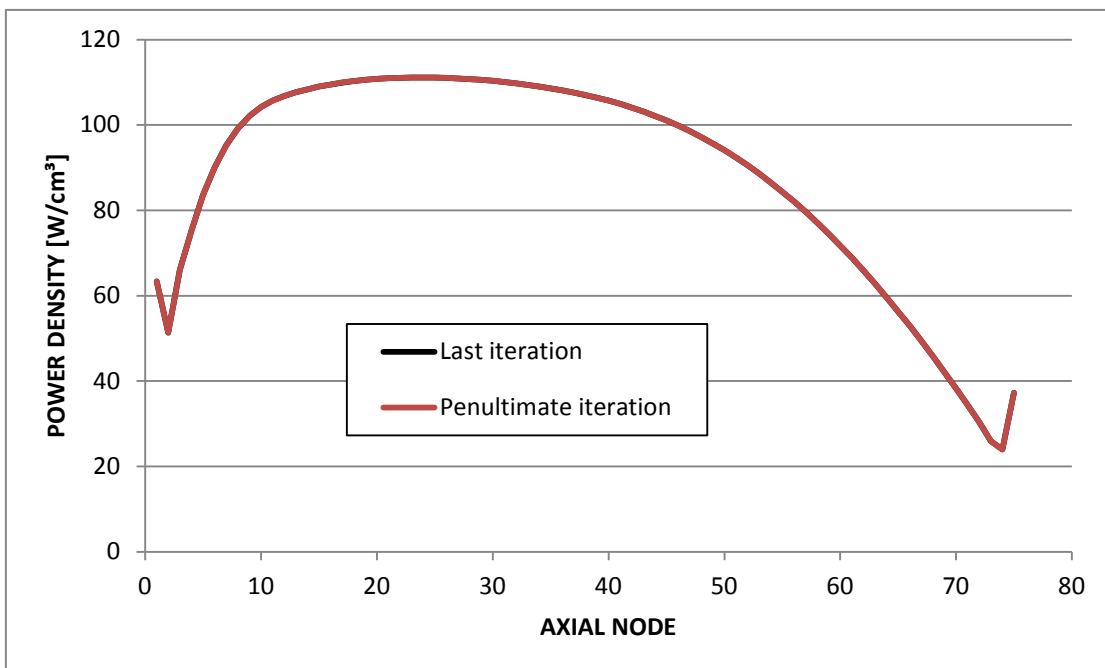
Die entwickelte Kopplung des Neutronentransportcodes TORT-TD mit dem thermohydraulischen Unterkanalmodell COBRA-TF wurde von DWR- zur SWR-Anwendungen erweitert. Zur Validierung wurde ein Brennelementtyp aus dem „OECD/NRC Oskarshamn-2 BWR Stability“ Benchmark benutzt (sog. ATRIUM10) benutzt, der derzeit auch in deutschen Reaktoren verwendet wird.

Oszillationen des Rechensystems wurden während der *Pseudo Steady-State* Konvergenz beobachtet (Abb. 4-30). Deshalb sollte eine Konvergenzbeschleunigungsmethode implementiert werden. Diese Implementierung wurde erfolgreich durchgeführt und stationäre Simulationen konnten berechnet werden (Abb. 4-31).





**Abb. 4-30** Leistungsverteilung während der *Pseudo Steady-State* Konvergenz vor der Implementierung einer Konvergenzbeschleunigungsmethode

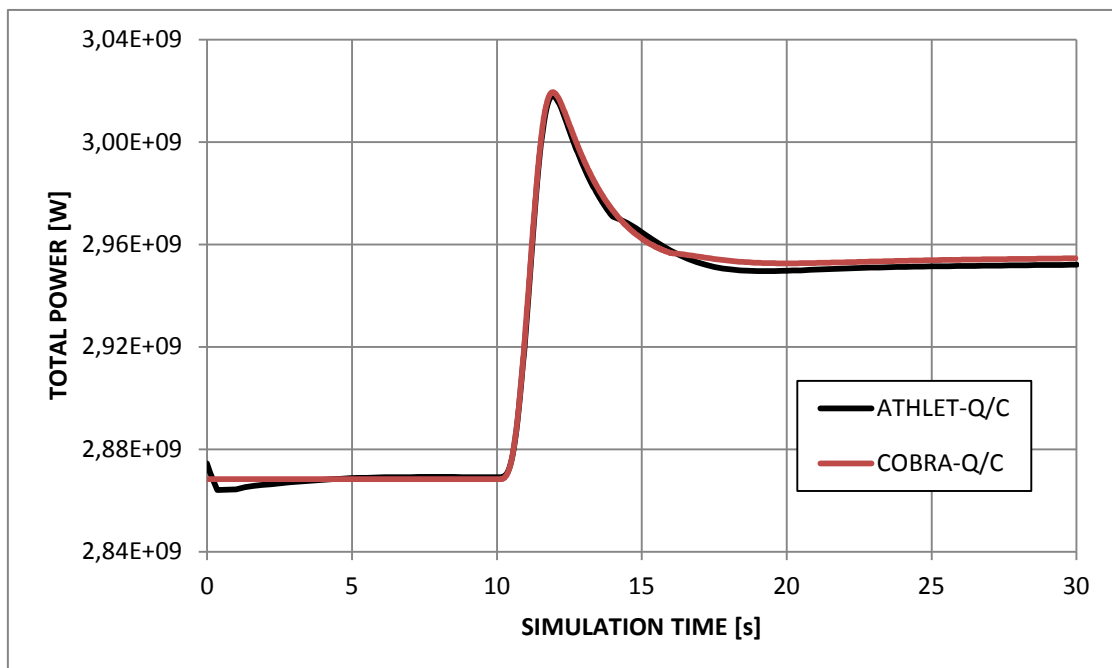


**Abb. 4-31** Leistungsverteilung während der *Pseudo Steady-State* Konvergenz nach der Implementierung einer Konvergenzbeschleunigungsmethode

#### 4.3.7 Kopplung des Diffusionscodes QUABOX/CUBBOX mit dem thermohydraulischen Unterkanalmodell COBRA-TF

Parallel zur Kopplung an TORT-TD wurde auch eine Kopplung zwischen dem thermohydraulischen Unterkanalcode COBRA-TF und dem neutronenkinetischen Code QUABOX/CUBBOX (nodale Diffusionstheorie) implementiert, um eine volle Vergleichbarkeit der nodalen Diffusionstheorie mit der Transporttheorie zu erreichen. Die Rechenzeit dieses gekoppelten Codesystems ist für praktische Anwendungen durchführbar und erfordert bei vergleichbarer Genauigkeit deutlich weniger Systemressourcen als COBRA-TF/TORT-TD.

Eine sogenannte "Moderator Density Transient" (bei der die Kühlmitteldichte am Kerneintritt variiert) wurde mit diesem Codesystem gerechnet. Die Ergebnisse wurden ebenfalls auf der PHYSOR 2010 /PER 10a/ und der Jahrestagung 2010 /PER 10b/ vorgestellt. Der Zeitablauf der Transiente ist in Abb. 4-32 dargestellt. Diese Ergebnisse stehen in sehr guter Übereinstimmung mit den Ergebnissen des ATHLET/QUABOX-CUBBOX Systems.



**Abb. 4-32** Zeitablauf der Kernleistung während einer Kühlmitteldichteveränderung am Kerneintritt - Vergleich zwischen COBRA-TF/QUABOX-CUBBOX und ATHLET/QUABOX-CUBBOX Ergebnisse

#### 4.4 AP 1.4: Auswertung von Ansätzen zur Behandlung mit unstrukturierten Gittern

Numerische Routinen, unter anderem aus den Open Source-Softwarepaketen PetSC, Paradiso und Trilinos wurden für unterschiedliche Sparse-Matrix-Testprobleme auf den Rechnern der GRS implementiert, mit unterschiedlichen Compileroptionen optimiert und hinsichtlich ihrer parallelen Performance überprüft. Das Programmpaket Paradiso wurde erfolgreich für die Lösung von linearen Gleichungssystemen mit schwach besetzten Matrizen verwendet, wie sie z. B. bei der Diskretisierung von partiellen Differentialgleichungen mit unstrukturierten Gittern oder auch bei ATHLET bei der Zeitdiskretisierung von parabolischen Differentialgleichungen auftreten.

##### 4.4.1 Herleitung der FEM-Grundgleichungen

Ausgangspunkt ist die allgemeine Form der zweidimensionalen Diffusionsgleichung in Cartesischen Koordinaten ( $\vec{r} = (x, y)$ ):

$$\vec{\nabla} [D(\vec{r}) \vec{\nabla} f(\vec{r})] - \sigma(\vec{r}) f(\vec{r}) + s(\vec{r}) = 0 \quad (4.4-1)$$

Darin sind  $D(\vec{r})$  die Diffusionskonstante,  $f(\vec{r})$  der gesuchte skalare Neutronenfluss,  $\sigma(\vec{r})$  der totale Wirkungsquerschnitt und  $s(\vec{r})$  der Gruppenquellterm. Ist  $\Omega$  das Raumgebiet, innerhalb dessen die Diffusionsgleichung zu lösen ist (Problemgebiet), lautet die Galerkin-Bedingung für noch näher zu spezifizierende Testfunktionen  $\phi_i(\vec{r})$ :

$$\int_{\Omega} dA \phi_i(\vec{r}) \{ \vec{\nabla} \cdot [D(\vec{r}) \vec{\nabla} f(\vec{r})] - \sigma(\vec{r}) f(\vec{r}) + s(\vec{r}) \} = 0 \quad (4.4-2)$$

bzw.

$$\int_{\Omega} dA \phi_i(\vec{r}) \vec{\nabla} \cdot [D \vec{\nabla} f] - \int_{\Omega} dA \sigma(\vec{r}) \phi_i(\vec{r}) f(\vec{r}) + \int_{\Omega} dA \phi_i(\vec{r}) s(\vec{r}) = 0 \quad (4.4-3)$$

Hierin ist  $dA = dx dy$ . Nach dem Satz von Gauß

$$\int_{\Omega} \vec{\nabla} \cdot \vec{v} = \oint_{\partial\Omega} \vec{v} \cdot \vec{ds}$$

lässt sich das erste Integral in ein Integral über die Oberfläche von  $\Omega$  umwandeln (setze hierzu  $v(\vec{r}) := [D(\vec{r})\vec{\nabla}f(\vec{r})]\phi_i(\vec{r})$ ) und damit die zweifache Ableitung im Integranden in eine erste Ableitung überführen (partielle Integration):

$$\int_{\Omega} dA [D\vec{\nabla}\phi_i \cdot \vec{\nabla}f + \sigma\phi_i f - \phi_i s] = \oint_{\partial\Omega} ds D\phi_i g_n \quad (4.4-4)$$

Darin wurde die Abkürzung

$$g_n := \vec{\nabla}f(\vec{r}) \cdot \vec{n}(\vec{r}) \quad (4.4-5)$$

für den Gradienten des Neutronenflusses entlang der Oberflächennormalen von  $\Omega$  gesetzt, die der Neumann-Randbedingung auf dem Rand  $\partial\Omega$  des Problemgebiets entspricht.

Die Entwicklung des gesuchten Neutronenflusses  $f(\vec{r})$  nach den  $N$  Basisfunktionen einer räumlichen Diskretisierung in finite Elemente mit insgesamt  $N$  Knoten lautet:

$$f(\vec{r}) = \sum_{j=1}^N f_j \phi_j(\vec{r}) \quad (4.4-6)$$

Damit die (unbekannten und zu bestimmenden) Entwicklungskoeffizienten  $f_j$  die Werte des Neutronenflusses an den Knoten  $j = 1, \dots, N$  darstellen, müssen die Basisfunktionen folgende Eigenschaft besitzen ( $k$  läuft über alle Knoten-Indizes):

$$\phi_j(\vec{r}_k) = \delta_{jk} \quad (4.4-7)$$

Die genaue Gestalt der Basisfunktionen wird weiter unten angegeben. Zunächst wird die Entwicklung des Neutronenflusses nach den Basisfunktionen dazu benutzt, ein lineares Gleichungssystem für die Entwicklungskoeffizienten  $f_j$  aufzustellen:

Einsetzen der Neutronenflussentwicklung in die Galerkin-Bedingung führt auf

$$\int_{\Omega} dA \left[ D(\vec{r}) \vec{\nabla}\phi_i \cdot \sum_{j=1}^N f_j \vec{\nabla}\phi_j + \sigma\phi_i \sum_{j=1}^N f_j \phi_j - s\phi_i \right] = \oint_{\partial\Omega} ds D\phi_i g_n \quad (4.4-8)$$

bzw.

$$\sum_{j=1}^N f_j \int_{\Omega} dA \left[ D(\vec{r}) \vec{\nabla} \phi_i(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla} \phi_j(\vec{r}) + \sigma \phi_i(\vec{r}) \phi_j(\vec{r}) \right] \quad (4.4-9)$$

$$= \int_{\Omega} dA s(\vec{r}) \phi_i(\vec{r}) + \oint_{\partial\Omega} ds D(\vec{r}) \phi_i(\vec{r}) g_n$$

$ds$  ist im Zweidimensionalen das Linienelement entlang des Randes  $\partial\Omega$  von  $\Omega$ . Mit den Abkürzungen

$$a_{ij} := \int_{\Omega} dA \left[ D(\vec{r}) \vec{\nabla} \phi_i(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla} \phi_j(\vec{r}) + \sigma \phi_i(\vec{r}) \phi_j(\vec{r}) \right] \quad (4.4-10)$$

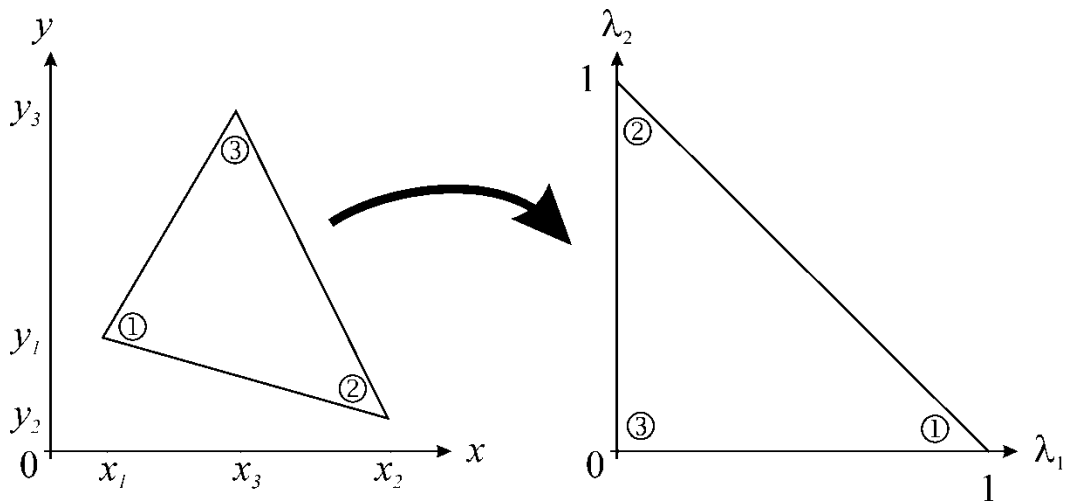
und

$$b_i := \int_{\Omega} dA s(\vec{r}) \phi_i(\vec{r}) + \oint_{\partial\Omega} ds D(\vec{r}) \phi_i(\vec{r}) g_n \quad (4.4-11)$$

lautet das zu lösende lineare Gleichungssystem:

$$\sum_{j=1}^N a_{ij} f_j = b_i \quad (4.4-12)$$

Die Matrix der Koeffizienten  $a_{ij}$  und die Elemente  $b_i$  des Vektors der rechten Seite werden in Anlehnung an die Strukturmechanik auch Steifigkeitsmatrix (stiffness matrix) bzw. Lastvektor (load vector) genannt.



**Abb. 4-33:** Affin-lineare Transformation eines allgemeinen Dreiecks (links) auf ein isoparametrisches Standarddreieck (rechts)

Das Finite-Element-Problem der Diffusionsgleichung wurde somit zurückgeführt auf die Berechnung der Elemente  $a_{ij}$  der Koeffizientenmatrix und der Elemente  $b_i$  des Vektors der rechten Seite. Dies kann analytisch erfolgen, sofern die Basisfunktionen  $\phi_i(\vec{r})$  geeignet definiert werden. Im Folgenden sollen dreieckige finite Elemente betrachtet werden. Um die in den Koeffizienten auftretenden Integrale allgemein auswerten zu können, wird jedes Dreieckselement auf ein isoparametrisches (Standard-)Dreieck abgebildet (Abb. 4-33). Dies geschieht mittels einer affin-linearen Transformation, die auf die sog. Baryzentrischen Koordinaten  $\lambda_1, \lambda_2$  (auch als Schwerpunktskoordinaten im Dreieck bekannt) führt. Demnach ist jeder Punkt  $x, y$  im Dreieck mit den Eckpunkten  $(x_1, y_1)$ ,  $(x_2, y_2)$  und  $(x_3, y_3)$  wie folgt gegeben:

$$\begin{aligned} x(\lambda_1, \lambda_2) &= (x_1 - x_3)\lambda_1 + (x_2 - x_3)\lambda_2 + x_3 \\ y(\lambda_1, \lambda_2) &= (y_1 - y_3)\lambda_1 + (y_2 - y_3)\lambda_2 + y_3 \end{aligned}$$

Hierbei gilt  $\lambda_1, \lambda_2 \in [0; 1]$ .

Im einfachsten Fall linearer Basisfunktionen gibt es zu jedem Eckpunkt des Dreiecks eine Basisfunktion, also insgesamt drei Basisfunktionen je finites Element. Damit im linearen Gleichungssystem die Koeffizientenmatrix dünnbesetzt wird, dürfen die Basisfunktionen – zusätzlich zur oben geforderten Eigenschaft – nur innerhalb des jeweiligen finiten Elements von null verschieden sein. Eine mögliche Wahl linearer Basisfunktionen ist gegeben durch die oben eingeführten baryzentrischen Koordinaten:

$$\vec{\phi}(\lambda_1, \lambda_2) := \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ 1 - \lambda_1 - \lambda_2 \end{pmatrix} \quad (4.4-13)$$

Die Auswertung der Integrale in den Koeffizienten des Gleichungssystems kann jetzt durch die isoparametrische Koordinatentransformation über dem Standarddreieck erfolgen. Als Beispiel wird hier das Teilintegral

$$c_{ij} := \int_{\Omega_e} dA \phi_i(\vec{r}) \phi_j(\vec{r}) \quad (4.4-14)$$

betrachtet.  $\Omega_e$  bedeutet, dass sich die Integration über das Dreieck mit der Nummer  $e$  in der Liste der finiten Elemente erstreckt. Da es drei Basisfunktionen gibt, ist das Resultat eine  $3 \times 3$ -Matrix der Koeffizienten  $c_{ij}$ . Mit der Jacobi-Matrix transformiert sich das Flächenelement gemäß  $dA = \det J d\lambda_1 d\lambda_2$ , so dass für  $c_{11}$ , also  $i = j = 1$ , gilt:

$$c_{11} := \int_{\Omega_e} dA \phi_1(\vec{r}) \phi_1(\vec{r}) = \det J \int_0^1 d\lambda_1 \int_0^{1-\lambda_1} d\lambda_2 \lambda_1^2 = \frac{1}{12} \det J \quad (4.4-15)$$

Insgesamt ergibt sich für die einzelnen Teilintegrale:

$$\int_{\Omega_e} dA \phi_i(\vec{r}) \phi_j(\vec{r}) = \frac{1}{24} \det J \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix} \quad (4.4-16)$$

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_e} dA \vec{\nabla} \phi_i(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla} \phi_j(\vec{r}) \\ &= \frac{1}{2 \det J} \begin{pmatrix} x_{23}^2 + y_{23}^2 & -x_{13}x_{23} - y_{13}y_{23} & -x_{12}x_{32} - y_{12}y_{32} \\ -x_{13}x_{23} - y_{13}y_{23} & x_{31}^2 + y_{31}^2 & -x_{31}x_{21} - y_{31}y_{21} \\ -x_{12}x_{32} - y_{12}y_{32} & -x_{31}x_{21} - y_{31}y_{21} & x_{12}^2 + y_{12}^2 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4.4-17)$$

Darin wurde zur Abkürzung  $x_{ij} = x_i - x_j$  bzw.  $y_{ij} = y_i - y_j$  gesetzt.

$$\int_{\Omega_e} dA s(\vec{r}) \phi_i(\vec{r}) = \frac{1}{24} \det J \begin{pmatrix} 2s_1 + s_2 + s_3 \\ s_1 + 2s_2 + s_3 \\ s_1 + s_2 + 2s_3 \end{pmatrix}$$

Im letzten Ausdruck sind die  $s_i$  die Werte des Quellterms an den drei Knoten des Dreiecks.

#### **4.4.2 Assemblierung des Gleichungssystems**

Die weitere Vorgehensweise zur Aufstellung des linearen Gleichungssystems erfolgt nach dem in der FEM verbreitet genutzten Verfahren der elementweisen Assemblierung /ZIE 94/. Dazu wird in einer Schleife über alle finiten Elemente für jedes Element die (Element-)Steifigkeitsmatrix und der (Element-)Lastvektor berechnet und zu den entsprechenden Koeffizienteneinträgen der Steifigkeitsmatrix bzw. des Lastvektors aufaddiert. Dazu ist es notwendig zu wissen, welche Indizes die Eckpunkte des betrachteten Dreiecks in der globalen Knotenliste haben. Dies erfolgt über die Element-Konnektivitätsmatrix, die beim Einlesen der Knoten- und Elementliste aufgestellt wird. Die Berücksichtigung der Neumann-Randbedingungen kann während der Assemblierung erfolgen. Dirichlet-Randbedingungen werden nach Abschluss der Assemblierung durch geeignete Modifikation von Lastvektor- und Koeffizientenmatrix derart durchgeführt, dass die an den gewünschten Knoten vorgegebenen Flusswerte erzwungen werden.

#### **4.4.3 Entwicklung eines 2D-FEM-Solvers für die Diffusionsgleichung in mehreren Energiegruppen**

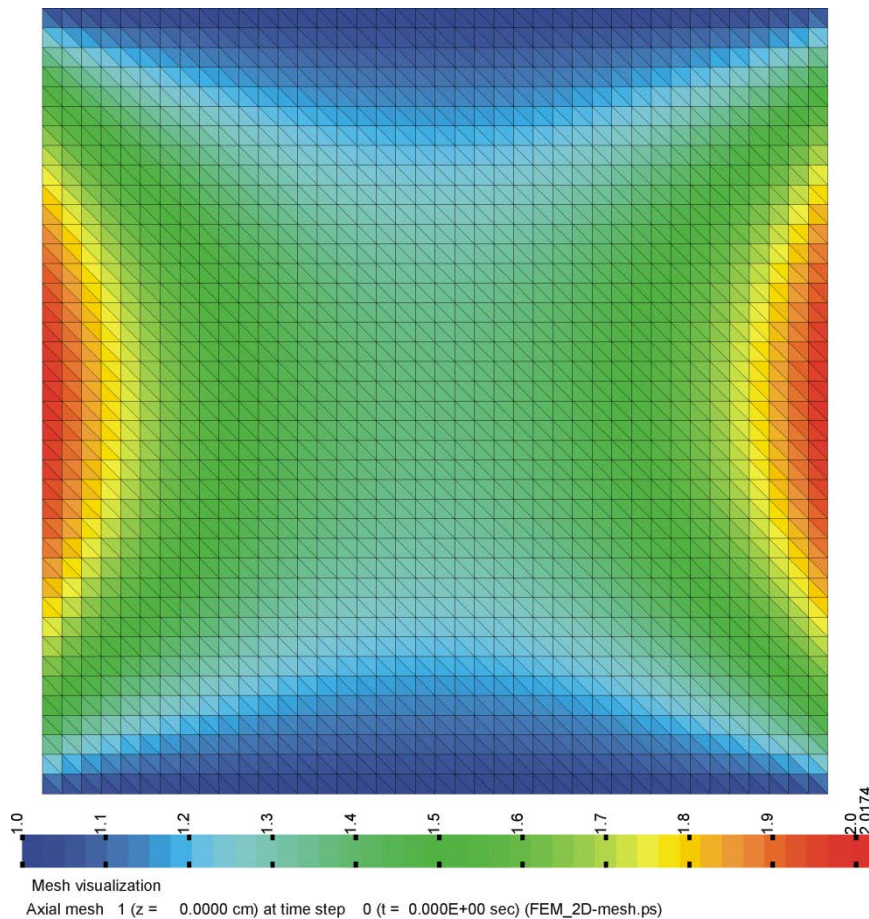
Nach dem oben skizzierten Verfahren wurde der Kern eines 2D-FEM-Solver für die Diffusionsgleichung entwickelt. Er operiert auf linearen Dreieckselementen und ist bereits auf die Behandlung mehrerer Energiegruppen vorbereitet. Folgende Rechenschritte werden ausgeführt:

- Einlesen von Knoten- und Elementliste (inkl. elementweiser Materialeigenschaften) sowie Randbedingungen und nuklearen Wirkungsquerschnitten.
- Aufbau der Konnektivitätsmatrix und elementweise Assemblierung von Steifigkeitsmatrix und Lastvektor.
- Berücksichtigung von Neumann- und Dirichlet-Randbedingungen.
- Effiziente Lösung der linearen Gleichungssysteme durch Ausnutzung dünnbesetzter Matrixstrukturen (hier: Compressed-Sparse-Row-Speicherformat, CSR).
- Graphisches Post-Processing in Form plattformübergreifender Postscript-Darstellungen.

Es wurde ein Rechenprogramm in Fortran-95 entwickelt, welches die auftretenden linearen Gleichungssysteme entweder iterativ nach dem Verfahren konjugierter Gradi-



enten oder direkt unter Verwendung der PARDISO-Bibliothek /SEN 06, SEN 07/ löst. Zur Vernetzung der zweidimensionalen Ebene wurde ein separates Programm entwickelt, welches für eine regelmäßige Triangulation die zugehörige Knoten- und Elementliste aufstellt. Hinsichtlich der Art der Vernetzung besteht jedoch keine Einschränkung auf regelmäßige Triangulierungen.



**Abb. 4-34** 2D-FEM-Lösung der Diffusionsgleichung mit konstantem Quellterm für  $0 < x, y < 1$  auf einer regelmäßigen Triangulierung. Randbedingungen: Bei  $y = 0$  und  $y = 1$  Dirichlet ( $f = 1,0$ ), bei  $x = 0$  und  $x = 1$  Neumann ( $df/dr = 1,0$ ).

Das FEM-Programm wurde zunächst anhand kleiner Gitter u.a. durch Vergleich mit bekannten Lösungen verifiziert. Abb. 4-34 zeigt die 2D-FEM-Lösung der Diffusionsgleichung mit konstantem Quellterm für  $0 < x, y < 1$  auf einer regelmäßigen Triangulierung mit 1681 Knoten und 3200 finiten Elementen. Bei  $y = 0$  und  $y = 1$  ist die Dirichlet-Randbedingungen  $f = 1,0$  vorgegeben, bei  $x = 0$  und  $x = 1$  Neumann-Randbedingungen ( $df/dr = 1,0$ ).

#### 4.4.4 Strategie zur Implementierung von Transportlösern auf unstrukturierten Gittern

Im Rahmen der Auswertung unterschiedlicher Lösungsansätze der Neutronentransportgleichungen hinsichtlich ihrer Verwendbarkeit auf unstrukturierten Gittern wurde die Finite-Elemente-Methode in die engere Wahl gezogen. Die Vorteile der FEM liegen nicht nur in ihrem Anpassungsvermögen an unregelmäßige Problem-Geometrien. Vielmehr erlaubt sie einen analytischen Näherungsansatz für den räumlichen Neutronenflussverlauf innerhalb eines Elements. Die Tatsache, dass dieser Näherungsansatz innerhalb gewisser Grenzen, denen die FEM-Basisfunktionen genügen müssen, frei gewählt werden kann, erlaubt eine zweifache, unter dem Begriff h-p-Refinement bekannte Verfeinerung des Rechengitters: So kann durch das h-Refinement die Größe der finiten Elemente angepasst werden und durch das p-Refinement unabhängig die lokale Neutronenflussapproximations-Ordnung innerhalb des finiten Elements. Beides kann elementweise lokal erfolgen. Interessant ist daher die Frage, ob mit der FEM die Vorteile der Finiten-Volumen-Methode (Recheneffizienz der nodalen Verfahren) mit der Genauigkeit räumlich hochaufgelöster Fein-Maschen-Differenzen-Verfahren kombiniert werden können.

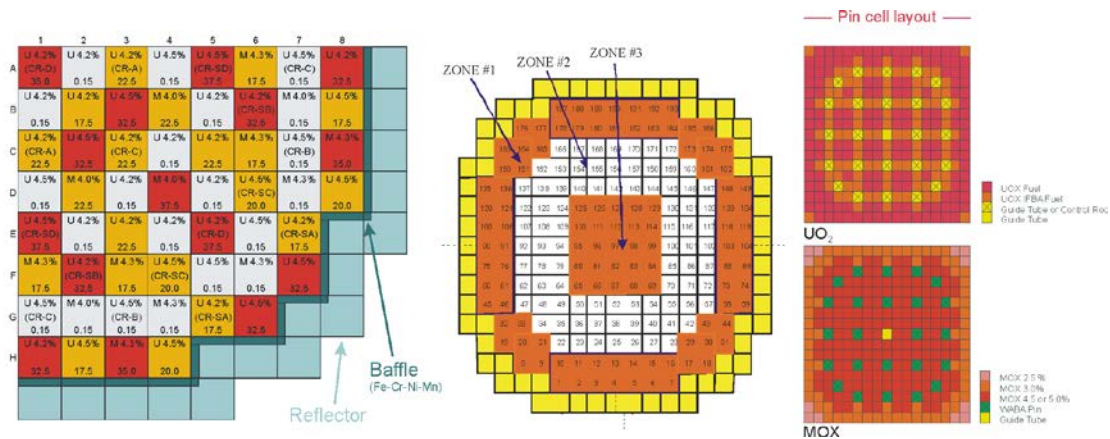
Im Rahmen dieses Arbeitspunktes wurde der Prototyp eines 2D-FEM-Solvers für die Diffusionsgleichung entwickelt und erfolgreich verifiziert, der auf beliebigen linearen Dreieckselementen operiert und bereits auf die Behandlung mehrerer Energiegruppen vorbereitet ist. Es ist naheliegend, das Programm auf drei Dimensionen zu erweitern und um einen vereinfachten Transportansatz (z. B.  $SP_3$ ) oder  $S_N$  auszubauen.

## 5 AP 2: Validierung der zeitabhängigen deterministischen Transportmodelle in DORT-TD und TORT-TD anhand geeigneter Experimente und Benchmarks

### 5.1 AP 2.1: LWR-Testfälle

#### Asymmetrische Bortransiente in einem DWR-Kern – Vergleich TORT-TD/ATHLET und QUABOX-CUBBOX/ATHLET

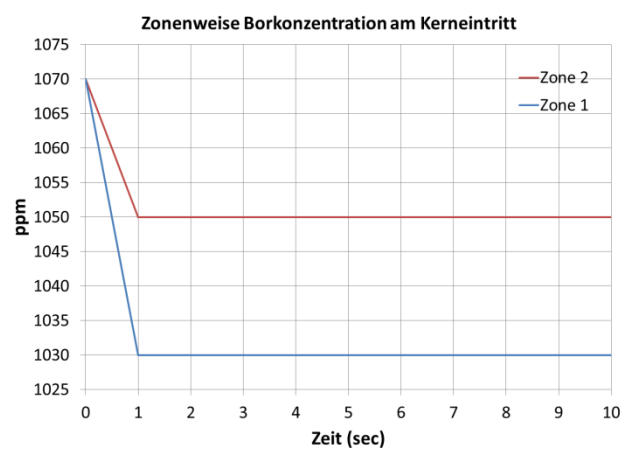
Ziel dieses LWR-Testfalls ist es, Möglichkeiten und Grenzen zweier verschiedener neutronenkinetischer Rechenverfahren zur Untersuchung von LWR westlicher Bauart (z. B. KWU, Westinghouse) zu vergleichen. Beide Codes sind mit demselben thermohydraulischen Modell gekoppelt, daher sind die thermohydraulischen Rückwirkungsmodelle identisch. Es interessieren hier nur der Reaktorkern und sein Verhalten während der Transiente. Als neutronenkinetische Codes kommen das zeitabhängige Diskrete-Ordinaten-Programm TORT-TD /SEU 08/ und das auf der Zwei-Gruppen-Diffusionsapproximation basierende Grobgitterprogramm QUABOX-CUBBOX /LAN 77/ zum Einsatz. Für beide Programme existiert eine Kopplung mit dem Systemcode ATHLET /LER 03/. Die Rechnungen wurden mit der ATHLET-Version 2.1 B durchgeführt.



**Abb. 5-1** Untersuchter DWR-Kern. Links: Brennelementanordnung im Viertelkern. Mitte: Die drei radialen Ringzonen für die Bortransiente. Der gelbe äußere Ring stellt den Reflektor dar. Rechts: Stabzellkonfiguration der UO<sub>2</sub>- und MOX-Brennelemente

Als Reaktorkernkonfiguration wird ein typischer DWR-Kern mit 193 Brennelementen auf Basis des PWR-UO<sub>2</sub>/MOX-Kerntransienten-Benchmarks /KO 06/ gewählt (siehe

Abb. 5-1 links). Für die Bortransiente wird der Reaktorkern in radialer Richtung in die in Abb. 5-1 eingezeichneten drei konzentrischen Ringzonen unterteilt (siehe Abb. 5-1 Mitte). Hierdurch bleibt die 90°-Rotationssymmetrie erhalten. In bis zu zwei dieser Ringzonen wird innerhalb einer Sekunde individuell die Borkonzentrationen am Kerneintritt linear abgesenkt; die Borkonzentration der Ringzone 3 wird auf ihrem Ursprungswert konstant gehalten. Das Diagramm in Abb. 5-2 zeigt den Zeitverlauf der Borkonzentrationen in den Zonen 1 und 2. Es wird angenommen, dass während der Transiente weder eine Reaktorschnellabschaltung noch irgendeine andere Operatorhandlung stattfindet.



**Abb. 5-2** Lineare Absenkung der Borkonzentrationen am Kerneintritt der radialen Zonen 1 und 2

Die Anfangsbedingung für die Transiente entspricht dem Vollast-Heiß-Zustand mit einer Borkonzentration von 1070 ppm. Der Eintrag borverdünnten Kühlmittels resultiert in einer positiven Reaktivitätszufuhr. Der dadurch ausgelöste Leistungsanstieg wird in erster Linie durch die negative Brennstofftemperatur-Rückwirkung (Doppler-Effekt) kompensiert, so dass sich einige Sekunden später ein neues, höheres Leistungsniveau einstellt. Für die hier durchgeführten Untersuchungen sind nur die ersten zehn Sekunden von Bedeutung.

Folgende zwei Fälle wurden analysiert (siehe Abb. 5-2):

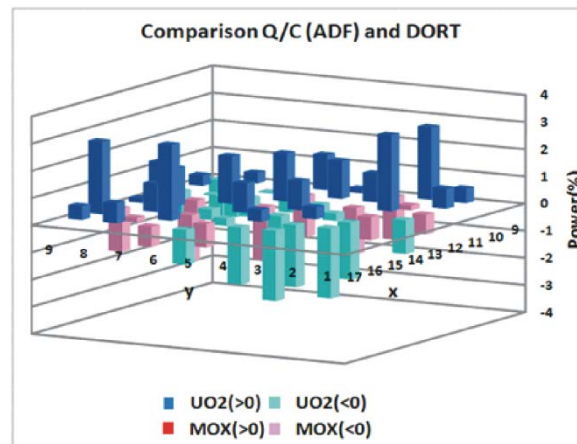
1. Lineare Absenkung der Borkonzentration von 1070 ppm auf 1030 ppm in Zone 1.
2. Lineare Absenkung der Borkonzentration von 1070 ppm auf 1030 ppm in Zone 1; im selben Zeitraum lineare Absenkung der Borkonzentration von 1070 ppm auf 1050 ppm zusätzlich in Zone 2.

Das in QUABOX-CUBBOX/ATHLET verwendete Kernmodell ist eine Ganzkerndarstellung des Reaktors. Das neutronenkinetische und thermohydraulische Rechengitter entspricht in radialer Richtung den Brennelement-Abmessungen (ein Knoten je Brennelement). Die Größe der axialen Maschen entspricht ebenfalls der Breite eines Brennelements. QUABOX-CUBBOX liefert folglich in jeder axialen Masche einen nodalen Leistungsdichtewert je Brennelement. In ATHLET wird jedes Brennelement durch einen individuellen thermohydraulischen (Parallel-)Kanal (THC, Thermal Hydraulic Channel) repräsentiert. Bei diesem sog. 1:1-Abbildungsschema zwischen Neutronenphysik und Thermohydraulik gibt also insgesamt 193 THC zuzüglich einem weiteren Kanal, der den äußeren radialen Reflektor darstellt. Zwischen parallelen Kanälen wird keine Querströmung angenommen. Jedem der 193 Brennelemente wird ein ATHLET-Wärmetransportobjekt zugeordnet. Als Wirkungsquerschnitte dienen die auf der Benchmark-Website bereitgestellten brennelementweise homogenisierten Zweigruppen-Daten, die in Verbindung mit den ebenfalls dort veröffentlichten Brennelement-Diskontinuitätsfaktoren (Assembly Discontinuity Factors, ADF) verwendet werden.

Das neutronenphysikalische Modell des gekoppelten Codesystems TORT-TD/ATHLET ist eine Viertelkern-Darstellung mit insgesamt 56 Brennelementen, wie in Abb. 5-1 links gezeigt. Die Anzahl der THC entspricht der Anzahl Brennelemente im Viertelkern zuzüglich einem weiteren für den äußeren radialen Reflektor, also insgesamt  $56 + 1$ . Das ATHLET-Modell ist ansonsten jedoch identisch mit dem für QUABOX-CUBBOX. Die wesentlichen Unterschiede zum QUABOX-CUBBOX-Modell liegen im räumlichen Maschennetz sowie in den nuklearen Wirkungsquerschnitten: Der Reaktorkern wird in TORT-TD stabzellweise aufgelöst, d. h. jede Stabzelle wird durch eine einzelne Raummasche dargestellt. TORT-TD liefert also für jede der 264 Brennstäbe enthaltenden Stabzellen (vgl. Abb. 5-1 rechts) einen eigenen Leistungsdichtewert. Durch Summation über alle Stabzellen wird hieraus ein nodaler Leistungsdichtewert gebildet, der mit QUABOX-CUBBOX verglichen werden kann. In axialer Richtung wird die aktive Kernzone in 42 Maschen diskretisiert; für den unteren und oberen axialen Reflektor kommen nochmals je 3 Maschen hinzu. Zusammen mit den radialen Reflektorelementen und dem an den östlichen und südlichen Kernaußenrand anschließenden Vakuumbereich (vgl. Abb. 5-1) ergibt dies etwa eine Million räumliche Maschen. Dieser Vakuumbereich muss auch in die TORT-TD-Rechnung einbezogen und somit diskretisiert werden, da in Cartesischen Koordinaten das Raumgebiet immer ein Quader ist. Der Reaktorkern ist jedoch kein Quader. Daher wirken die Vakuumrandbedingungen am

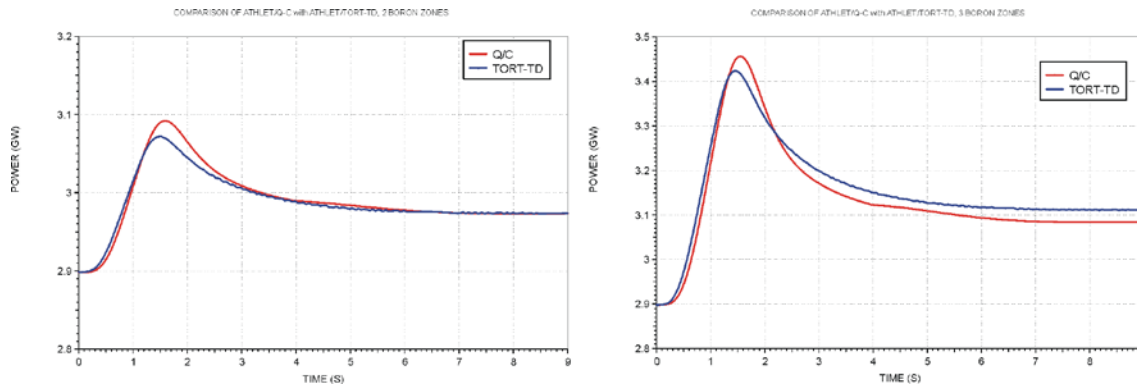
Ost- und Südrand nicht am Kernaußenrand, sondern am Rand des (quaderförmigen) Rechengebiets.

Die Wirkungsquerschnitte für das TORT-TD/ATHLET-Modell wurden mit dem Zell-Abbrand-Programm HELIOS /CAS 91/ in 8 Energiegruppen und 6 Gruppen verzögerter Neutronen generiert. Sie wurden über die verschiedenen Stabzelltypen der jeweiligen Brennelementtypen homogenisiert und liegen in  $P_1$ -Legendre-Streuordnung vor. Zur Berücksichtigung thermohydraulischer Rückwirkungen wurde für jeden Stabzelltyp eine parametrisierte Wirkungsquerschnittsbibliothek erstellt. Die Stützstellen für Brennstofftemperatur, Moderatorerdichte und Borkonzentration entsprechen denjenigen der Benchmark-Spezifikation /KOZ 06/.



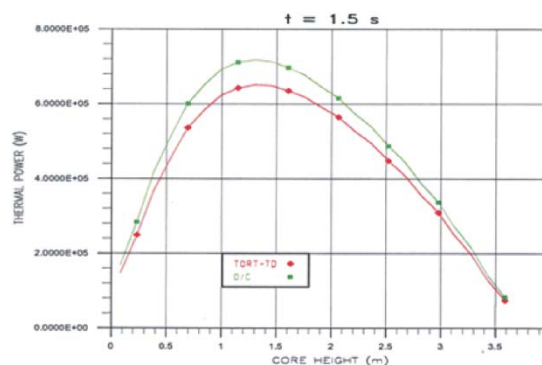
**Abb. 5-3** Vergleich der Brennelement-Leistungsverteilungen des stationären Zustands

Zunächst wurde mit beiden gekoppelten Codesystemen der stationäre Zustand unmittelbar vor Beginn der Transiente ermittelt. Abb. 5-3 zeigt den Vergleich zwischen QUABOX-CUBBOX/ATHLET und TORT-TD/ATHLET. Die relativen Unterschiede liegen im Bereich zwischen  $-3\%$  und  $+3\%$ , was für den auf der Diffusionsapproximation basierenden nodalen Code QUABOX-CUBBOX ein gutes Ergebnis ist. Generell ist zu beobachten, dass die Leistungswerte der MOX-Brennelemente von QUABOX-CUBBOX unterschätzt werden. Als Multiplikationsfaktor ergibt sich  $k_{\text{eff}} = 0,99998$  für QUABOX-CUBBOX und  $k_{\text{eff}} = 0,99570$  für TORT-TD/ATHLET. Der Differenz von 428 pcm kann auf die Unterschiede in den Rechenverfahren zurückgeführt werden: TORT-TD löst die Transport-, nicht die Diffusionsgleichung, und rechnet zudem stab-zellweise in 8 Energiegruppen und  $P_1$ -Streuordnung. Insofern wird die TORT-TD/ATHLET-Rechnung als die genauere angesehen und als Referenz betrachtet.



**Abb. 5-4** Integrale Leistungsverläufe für die Borverdünnungstransiente (links: Fall 1, rechts: Fall 2)

Abb. 5-4 zeigt die mit QUABOX-CUBBOX/ATHLET und TORT-TD/ATHLET errechneten integralen Leistungsverläufe für Fall 1 und Fall 2. QUABOX-CUBBOX/ATHLET liefert ein um etwa 1 % höheres Leistungsmaximum, dessen zeitliche Lage gegenüber TORT-TD/ATHLET um ca. 0,2 sec verschoben ist. Die Gradienten der Leistungsanstiege und -abfälle werden mit beiden Codes annähernd gleich ermittelt. Ergänzend wurden auch lokale Größen beider Codesysteme ausgewertet und miteinander verglichen. Die ist in Abb. 5-5 für das axiale Leistungsprofil des nahe der Kernmitte gelegenen Brennelements Nr. 83 für den Fall 2 zum Zeitpunkt des integralen Leistungsmaximums dargestellt. Der bereits im Gesamtleistungsverlauf festgestellte Unterschied ist hier auch zu sehen und liegt bei etwa 8 %.



**Abb. 5-5** Axiales Leistungsprofil im Brennelement 83 für Fall 2 zum Zeitpunkt des integralen Leistungsmaximums

Die mit TORT-TD/ATHLET erzielten überzeugenden Ergebnisse für asymmetrische Transienten in LWR demonstrieren nicht nur die Einsatzfähigkeit dieses gekoppelten Codesystems. Sie geben im Vergleich mit QUABOX-CUBBOX/ATHLET auch Hinweise auf Möglichkeiten und Grenzen hinsichtlich Rechenverfahren (Transport- bzw. Diffusionsgleichung), nuklearer Daten (zwei oder mehrere Energiegruppen, stabzell- oder

Brennelementweise homogenisiert) und räumlicher Auflösung (Darstellung einzelner Stabzellen oder ganzer Brennelemente).

### Test eines alternativen Spektralcodes

Um einen alternativen Spektralcode zu testen, wurde für den oben beschriebenen Reaktorkern auch ein Wirkungsquerschnittsdatensatz mit dem Code NEWT aus SCALE6 erstellt. Dabei ist anzumerken, dass keine Abbrandrechnungen durchgeführt wurden, sondern die Nuklidinventare für die jeweiligen Abbrände aus der Benchmarkspezifikation genommen wurden. Wie oben beschrieben, wurden die homogenisierten Wirkungsquerschnitte durch die Diskontinuitätsfaktoren dividiert und außerdem eine Korrektur für die Aufwärtsstreuung durchgeführt. Danach wurden Rechnungen für den stationären Nulllast-heiß-Zustand des Reaktors mit QUABOX/CUBBOX durchgeführt.

Da die berechnete Leistungsverteilung dieser Kernanordnung stark von den verwendeten nuklearen Basisdaten abhängt wurde eine weitere Monte-Carlo Referenzlösung mit ENDF/B-VII Daten unter Verwendung des Monte Carlo-Codes KENO Va aus SCALE6 erstellt. Der Vergleich zwischen Referenzlösung und den QUABOX/CUBBOX-Ergebnissen zeigt eine gute Übereinstimmung. Der Wert für  $k_{\text{eff}}$  unterscheidet sich nur um 247pcm und die Unterschiede in der nodalen Leistungsverteilung sind in keinem Punkt größer als 2,5 % (vgl. Abb. 5-6).

	1	2	3	4	5	6	7	8		1	2	3	4	5	6	7	8
A	1.319	1.662	1.376	1.509	1.032	1.040	1.020	0.422	A	0.5%	0.0%	0.0%	-0.1%	-0.5%	-1.3%	0.5%	1.3%
B	1.662	1.504	1.232	1.273	1.329	0.936	0.990	0.506	B	0.0%	0.3%	1.5%	-0.3%	-1.8%	0.5%	-0.7%	1.9%
C	1.376	1.232	1.287	1.420	1.233	1.132	1.029	0.411	C	0.0%	1.5%	-1.3%	-1.5%	-1.6%	-0.5%	1.8%	2.5%
D	1.509	1.273	1.420	1.070	1.296	1.159	0.918	0.344	D	-0.1%	-0.3%	-1.5%	-1.4%	-1.4%	0.7%	1.8%	0.5%
E	1.032	1.329	1.233	1.296	0.914	1.081	0.587		E	-0.5%	-1.8%	-1.6%	-1.4%	0.8%	1.3%	0.6%	
F	1.040	0.936	1.132	1.159	1.081	0.764	0.283		F	-1.3%	0.5%	-0.5%	0.7%	1.3%	1.7%	1.8%	
G	1.020	0.990	1.029	0.918	0.587	0.283			G	0.5%	-0.7%	1.8%	1.8%	0.6%	1.8%		
H	0.422	0.506	0.411	0.344					H	1.3%	1.9%	2.5%	0.5%				

**Abb. 5-6** Mit KENO Va berechnete Leistungsverteilung des DWR MOX/UOX-Kerns (links) und relative Abweichung der QUABOX/CUBBOX-Lösung für den gleichen Kern (rechts)



## 5.2 AP 2.2: PBMR-Testfall

Im Rahmen von RS1183 wurden Arbeiten zum *OECD/NEA PBMR400 Transient Benchmark*, einem internationalen Benchmark der sich mit Transientenanalysen in Kugelhaufen-Hochtemperaturreaktoren befasst, durchgeführt und abgeschlossen. In 2008 wurden mit dem Codesystem DORT-TD/THERMIX qualifizierte Lösungen für die unterschiedlichen transienten Benchmark-Aufgaben erzeugt und bei den Organisatoren des Benchmarks eingereicht. Zu den wesentlichen betrachteten Störfällen und Transienten gehören die folgenden, für HTR wesentlichen Szenarios: Kühlmittelverluststörfälle bei vollständiger und teilweiser Druckentlastung, Lastwechselvorgänge mit Xenontransienten, Reaktivitätsstörfälle durch Stabfehlfahren und Stabauswurf, hypothetische Störfälle mit maximaler Reaktivitätszufuhr sowie Unterkühlungstransienten. Der Code DORT-TD erweist sich in der Kopplung mit THERMIX als ein probates Werkzeug, um auch Störfälle von HTR (insbesondere vom Kugelhaufentyp) angemessen simulieren zu können.

Die Auswertungen der Ergebnisse zum PBMR400-Benchmark liegen inzwischen vor, verschiedene Vergleiche zwischen DORTTD-/THERMIX und anderen teilnehmenden Codesystemen wurden auf der Jahrestagung Kerntechnik veröffentlicht und sind in /PAU 09/ veröffentlicht. Für die Auslegungsstörfälle DLOFC (*Depressurized Loss of Flow*), Steuerstabfehlfahren und "Einbruch von kaltem Helium" ergibt sich insgesamt eine recht gute Übereinstimmung zwischen den fünf eingereichten transienten Lösungen, allerdings sind für den Fall DLOFC die Unsicherheiten in der maximalen Brennstofftemperatur größer als 100 K. Auch hinsichtlich des Zeitpunkts der Rekritikalität bei DLOFC schwanken die Aussagen um mehrere Stunden. Die Ursache für diese Unsicherheiten ist in erster Linie in der thermohydraulischen Modellierung, z. B. des Wärmeverlustes an die Umgebung und der effektiven Wärmeleitung im Kugelhaufen zu suchen. Dagegen zeigt sich in den Analysen zum Lastwechselvorgang und zum Steuerstabfehlfahren, dass die neutronischen Codes z. B. bei Xenontransienten, aber auch bei Reaktivitätstransienten über eine recht hohe Aussagegenauigkeit verfügen. Generell findet man bei den neutronisch dominierten Transienten die beste Übereinstimmung zwischen den Rechencodes.

Im Nachgang zu diesen Benchmarkaktivitäten wurden noch einige Verbesserungen an DORT-TD implementiert: dazu gehört insbesondere eine verbesserte Formulierung der richtungsabhängigen Diffusionskoeffizienten (bei korrekter Anwendung können mit diesen Diffusions- Transporttheorie-Resultate in sehr gute Übereinstimmung gebracht werden) sowie die Integration einer Reihe von Validierungsrechnungen und Bench-

marks in eine automatisierte Testmatrix. Die Ergebnisse in ihrer Gesamtheit (d. h. die generischen Arbeiten an DORT-TD/THERMIX sowie exemplarische Ergebnisse des PBMR400 Benchmarks) sind in einer Veröffentlichung gesammelt worden, die bei *Nuclear Science and Engineering* erschienen ist /PAU10/.

### 5.2.1 Der „PBMR 400 MW Transient Benchmark“

Dieses Kapitel hat die Teilnahme der GRS am OECD/NEA/NSC-Benchmark zu Transienten im modularen Hochtemperatur-Kugelhaufenreaktor (Pebble Bed Modular Reactor) PBMR-400 (OECD/NEA/NSC PBMR 400 MW Transient Benchmark) zum Inhalt, die eine hervorragende Möglichkeit bot, nicht nur die eigenständigen Neutronendynamik- und Thermohydraulik-Codes, sondern auch das gekoppelte Codesystem DORT-TD/ATHLET im Rahmen einer wohldefinierten numerischen Benchmarkübung mit großer internationaler Beteiligung zu validieren. Dies wird als eine wesentliche Erweiterung der Verifizierungsgrundlage für das DORT-TD/THERMIX-Codesystem angesehen. Das Hauptziel der „PBMR 400 MW Transient Benchmark“-Übung ist es, Benchmarkprobleme für gekoppelte Neutronenkinetik-/Thermohydraulik-Codes zur Berechnung des Reaktorkerns zu definieren, die sowohl schnelle (Reaktivitätszufuhr) als auch langsame (thermische Aufheizung durch Zerfallswärme) Transienten abdecken. Die Referenzauslegung für dieses Benchmarkproblem wird von einer Vereinfachung der derzeitigen Auslegung des südafrikanischen PBMR-400 abgeleitet. Es handelt sich um einen ringförmigen Kern mit einem Außendurchmesser von 3,7 m und einem druckfesten zentralen Reflektor aus Graphit mit einem Außendurchmesser von 2 m, einer effektiven zylindrischen Kernhöhe von 11 m und einem Seitenreflektor aus Graphit mit einer Dicke von 0,9 m.

Für die Zwecke dieser Benchmarkübung wurde die Auslegung des Reaktorkerns durch die zweidimensionale Darstellung des Kerns in r-z-Geometrie vereinfacht und Folgendes unterstellt: gleichförmige Bewegung der Kugeln im Kern, eine abgeflachte obere Fläche des Kugelbettes und die Entfernung des unteren Kegelbereichs und des Kugelabzugsrohrs, was zu einem flachen Bodenreflektor führte.

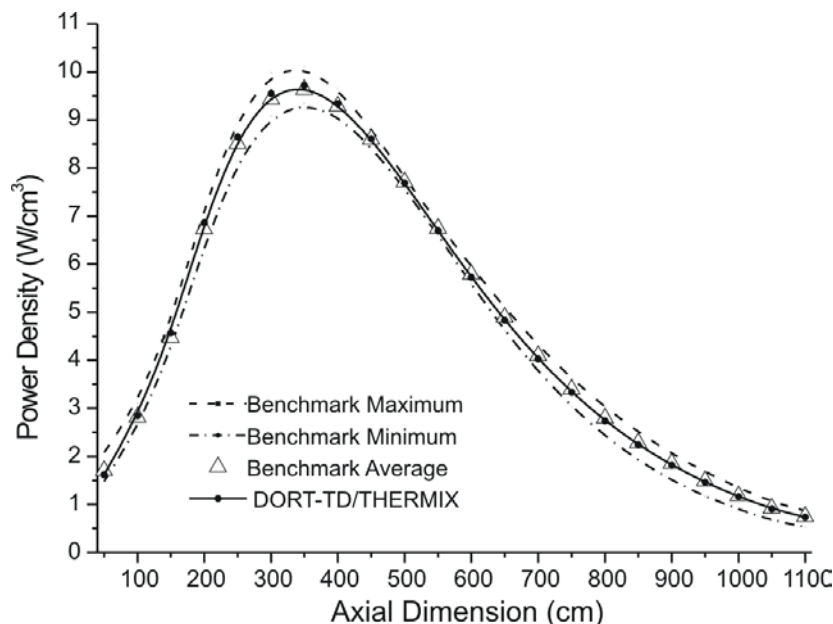
Die im Seitenreflektor angeordneten Steuerstäbe sind als zylindrischer Mantel (im Englischen auch als „Grey Curtain“ - grauer Vorhang - bezeichnet) mit einer vorgegebenen Bor-10-Konzentration modelliert. Bezüglich der Thermohydraulik wird bei den Vereinfachungen unterstellt, dass sich alle Wärmequellen aus der Kernspaltung lokal nieder-

schlagen, d. h. im Brennstoff, und dass außerhalb des Kerns keine weiteren Wärmequellen vorhanden sind. Weiter werden als Randbedingungen stagnierendes Helium zwischen dem biologischen Schild und dem Reaktordruckbehälter sowie stagnierende Luft zwischen dem Behälter und der Wärmesenke (äußere Begrenzung) vorgegeben. Der Kühlmitteldurchfluss ist begrenzt auf eine Strömung vom Einlass unterhalb des Kerns innerhalb eines porösen Rings im Reflektor aufwärts und eine Strömung abwärts durch den Kugelhaufen zum Austrittsplenum; Reflektorkühlung und Leckagepfade werden nicht definiert. Vereinfachungen werden auch bei den thermischen Eigenschaften des Materials vorgenommen, soweit konstante Werte oder bestimmte Korrelationen zum Ansatz kommen. Weitere Einzelheiten zum Benchmarkproblem, Materialspezifikationen, geometrische Beschreibung etc. sind in der Benchmarkspezifikation /REI 05/ enthalten.

Um die Modelle der Teilnehmer an der Benchmarkübung zu initialisieren und um Unterschiede in den Ergebnissen der Teilnehmer besser verstehen und diese, soweit möglich, reduzieren zu können, wurde ein gekoppelter stationärer Fall als Ausgangspunkt für alle Transienten angenommen. Es werden makroskopische Wirkungsquerschnitte verarbeitet, die nach Zustandsparametern parametrisiert sind. Es ist erforderlich, dass eine gekoppelte neutronenkinetische/thermohydraulische Berechnung mit Feedback durchgeführt wird. Es müssen Eigenwert, Energieverteilung, Xenon-Verteilungsgleichgewicht, Temperaturverteilung sowie Druckverlust über den Kern berechnet werden.

Mit der Benchmarkspezifikation wurden Querschnitt-Interpolationsroutinen zur Verfügung gestellt und im DORT-TD-Codesystem implementiert sowie die Routine zum Lesen der tabellarischen Querschnittsbibliothek. Diese Bibliothek war auch Teil der Spezifikation. Dies war eine wesentliche Festlegung, da es die Teilnehmer von der Aufgabe entlastet hat, eigene Querschnitte generieren zu müssen. Darüber hinaus hätte dies zu einer zusätzlichen potentiellen Fehlerquelle in der Benchmarkübung geführt, und es wäre schwierig gewesen, diese von den methodischen Unsicherheiten zu trennen. In diesen 2-Energiegruppen-Bibliotheken werden fünfdimensionale Tabellen verwendet, um die unmittelbare Variation im Querschnitt aufgrund von Änderungen im Reaktor darzustellen. Die Querschnittsmodelle sind so ausgelegt, dass sie die stationären Ausgangsbedingungen und die zu erwartenden Bereiche der Änderung der fünf ausgewählten sofortigen Feedback-Parameter in den im Benchmark zu simulierenden Transienten abdecken. Es wurden Querschnitte für alle Kombinationen der vorgegebenen

Zustandsparameter generiert. Die fünf Zustandsparameter sind: Brennstofftemperatur, Moderatortemperatur, Xenon-Konzentration und schnelles/thermische Beulen. Es sollte hier beachtet werden, dass diese Querschnitte vor allem für Diffusionsberechnungen geeignet waren, so dass in erster Linie das DORT-TD-Diffusionsmodul für Vergleiche verwendet wurde. Die vollständigen Details zu den Benchmarkergebnissen werden in einem OECD-Abschlussbericht veröffentlicht werden. Einige Ergebnisse wurden bereits in zwei zusammenfassenden Arbeiten zum stationären Teil bzw. den Transienten-Teil des Benchmarks vorgestellt /REI 08, STR 10/. Es wird daher nur ein kurzer Überblick über die GRS-Ergebnisse gegeben und einige Vergleiche mit den Ergebnissen anderer Teilnehmern vorgestellt, wobei nur die wichtigsten Parameter berücksichtigt wurden. Für die Benchmarkübung gekoppelt/stationärer Zustand näherten sich alle Teilnehmer in der Endphase des Benchmarks an Eigenwerte an, die praktisch alle in einer Unsicherheitsbandbreite von  $\pm 1000$  pcm lagen. Die Lösung mit DORT-TD/THERMIX ergab einen Wert von  $k_{\text{eff}}=0.99471$ . Als Benchmarkergebnis sollte auch das radial gemittelte, axiale Leistungsprofil aufgezeigt werden. In Abb. 5-7 sind die DORT-TD-Lösung zusammen mit der Benchmarkmittelung sowie die nach oben und unten begrenzenden Lösungen dargestellt. Aus der Abbildung lässt sich erkennen, dass DORT-TD den Benchmark-Mittelwerten sehr gut entspricht, und dass es eine  $\pm 5\%$ -Unsicherheitsbandbreite gibt, die auf die Verwendung unterschiedlicher Methoden und Codesysteme zurückzuführen ist.



**Abb. 5-7** DORT-TD-Ergebnisse der „PBMR 400 MW Transient Benchmark“-Übung zur axialen Leistungsverteilung für den stationären Zustand

Der Benchmark gibt eine Reihe von Transienten-Fällen vor, die von langsamen Aufheiztransienten bis zur schnellen Reaktivitätszufuhr reichen. DORT-TD/THERMIX wurde mit der zur Verfügung gestellten Querschnittsbibliothek angewandt, um die folgenden Transienten zu modellieren, wobei vor allem die Diffusionstheorie zur Anwendung kam:

- Ausfall der Zwangskühlung im drucklosen Zustand (Depressurised Loss of Forced Cooling - DLOFC)
- 100-40-100 %-Lastfolgebetrieb
- Steuerstabausfahren
- Einströmen von kaltem Helium

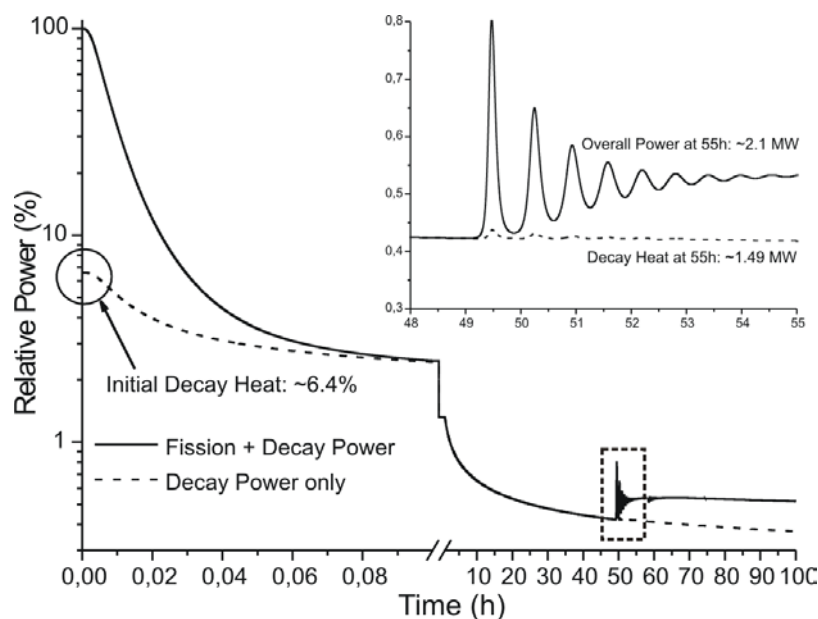
Einige Details zu diesen Übungen, z. B. der entsprechende Input und der geforderte Output, sind in der Benchmarkspezifikation /REI 05/ zu finden.

### **5.2.2 Fall: Ausfall der Zwangskühlung im drucklosen Zustand (Depressurised Loss of Forced Cooling - DLOFC)**

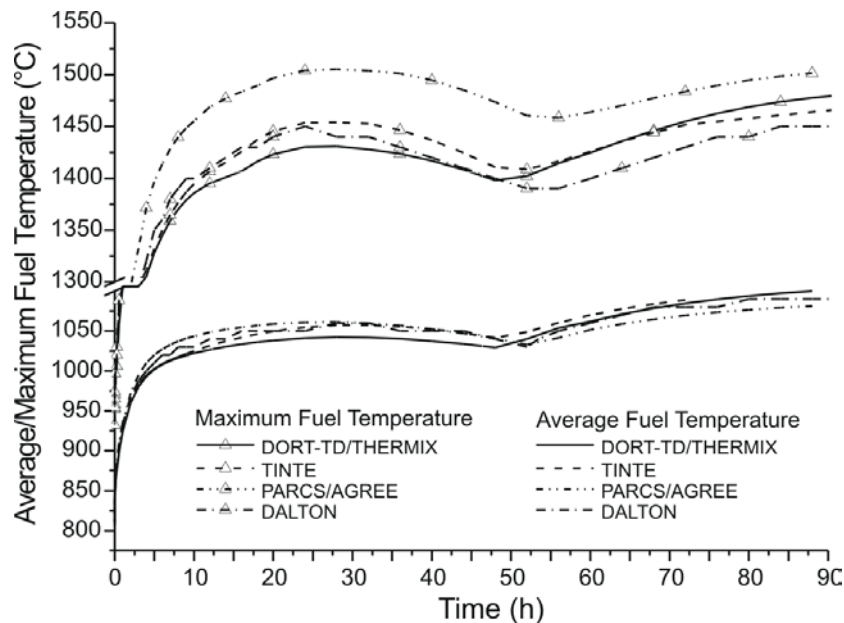
Bei der Modellierung dieser Transiente wird ein linear verlaufender Druckabbau über einen Zeitraum von 13 Sekunden mit einem daraus resultierenden Ausfall der Zwangskühlung innerhalb des gleichen Zeitraums unterstellt. Solch ein Verlauf könnte als Folge eines Rundabbrisses der Leitung auftreten, die das Energieumwandlungssystem mit dem Reaktor verbindet. Helium strömt aus dem Sicherheitsbehälter in das Reaktorgebäude, bis sich der Druck auf 1 bar (vom Systemenddruck von 90 bar) stabilisiert hat.

Die Auswirkungen der natürlichen Konvektion sollten einbezogen werden, und da für den ersten Fall keine Schnellabschaltung angenommen wird, sollte Rekritikalität eintreten. Die Transiente wurde mit dem Diffusionsmodus von DORT-TD modelliert und wird für 100 Stunden verfolgt. Die Zerfallswärme wird in der Benchmarkspezifikation als eine analytische Kurve angegeben und wird somit angewandt, obwohl mit DORT-TD im Prinzip auch „Full-Heat-Precursor“-Gleichungen numerisch gelöst werden können. Bei einem Ausfall der Zwangskühlung im drucklosen Zustand nimmt die durch prompte Spaltneutronen erzeugte Energie rapide ab und ist im Vergleich zur Nachzerfallsleistung nach ein paar Minuten vernachlässigbar (s. Abb. 5-8). Die Nachzerfallswärme wird durch passive Kühlprozesse vom Kern zum Reaktordruckbehälter transportiert, wo

sie durch natürliche Konvektion und Strahlung an die Umwelt abgegeben werden kann. Dies ist ein langsamer Prozess, und es dauert Tage, bis das Gleichgewicht erreicht ist. Aufgrund der großen thermischen Trägheit in Graphit steigen die Temperaturen langsam und kontinuierlich an. Wie in Abb. 5-9 dargestellt, ergeben die Berechnungen mit DORT-TD ein Maximum von ca. 1450°C nach ungefähr 24 Stunden. Dieses Diagramm zeigt auch die Vergleiche von DORT-TD mit anderen Systemprogrammen (TINTE von PBMR, DALTON von der Technischen Universität Delft und PARCS/AGREE von der University of Michigan). Hier ist zu beachten, dass hinsichtlich der durchschnittlichen Kerntemperatur (die im Wesentlichen durch die Brennstofftemperaturrückwirkung reguliert wird) zwischen den Teilnehmern innerhalb einer Unsicherheitsbandbreite von 50 K eine gute Übereinstimmung erzielt wird, während für die maximale lokale Kerntemperatur größere Unterschiede von bis zu 100 K auftreten. Angesichts der komplexen Thermohydraulik dieser Transiente ist dies immer noch eine recht zufriedenstellende Übereinstimmung.



**Abb. 5-8** DORT-TD-Ergebnisse der „PBMR 400 MW Transient Benchmark“-Übung zum Ausfall der Zwangskühlung im drucklosen Zustand (Depressurised Loss of Forced Cooling - DLOFC). In der oberen rechten Ecke ist eine vergrößerte Ansicht des Bereichs im gestrichelten Rechteck dargestellt.



**Abb. 5-9** Vergleich der durchschnittlichen und der maximalen Kerntemperatur der „PBMR 400 MW Transient Benchmark“-Übung zum Ausfall der Zwangskühlung im drucklosen Zustand (Depressurised Loss of Forced Cooling - DLOFC). Durchgezogene Linien: DORT-TD-Ergebnisse

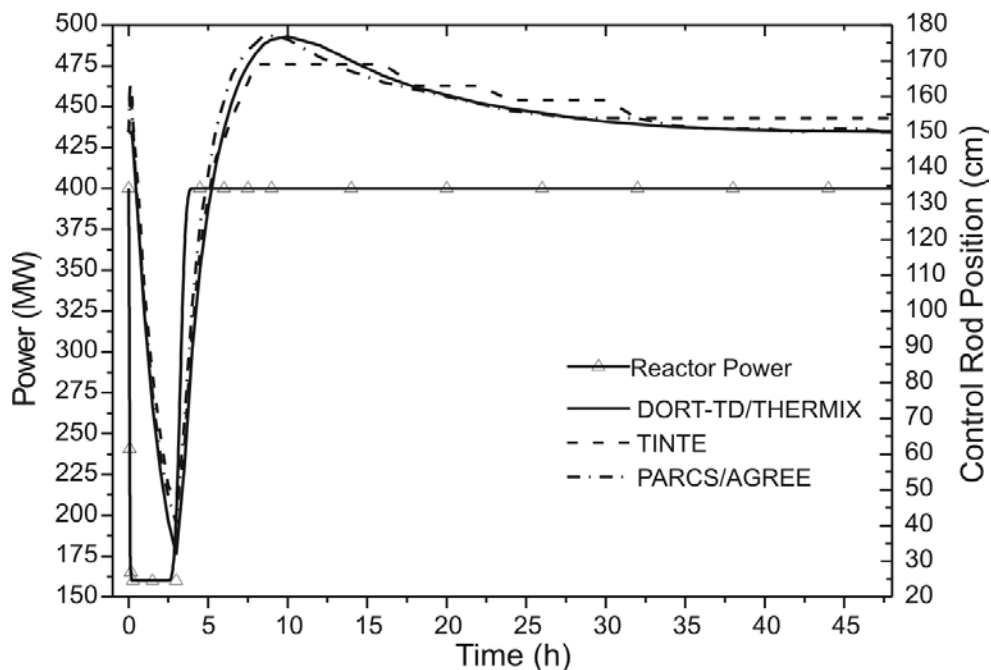
Mit DORT-TD wird Rekritikalität etwa 49 Stunden nach Transientenbeginn vor allem dadurch erreicht, dass sich der Kern abgekühlt hat und Xenon größtenteils abgeklungen ist. Nach einigen Leistungsdichteschwängungen (siehe Abb. 5-8), stabilisiert sich der Reaktorkern auf einem niedrigen Leistungsniveau von 0,5 % der Nennleistung, und der Kern heizt sich wieder auf. Etwa ein Drittel der produzierten Wärme ist auf Kernspaltung zurückzuführen, der Rest entspricht der Nachzerfallswärme. Der Zeitpunkt des Eintretens der Rekritikalität ist eine sehr schwer zu berechnende Größe. Die Ergebnisse der Teilnehmer lagen hier zwischen 49 und 53 Stunden.

### 5.2.3 Fall: 100-40-100 %-Lastfolgebetrieb

Als Reaktion auf eine Änderung hinsichtlich der benötigten Leistung können im PBMR sogenannte Lastfolgen durch Änderung des Heliuminventars im System erreicht werden. Die durch den Reaktor produzierte Wärmemenge ist annähernd linear zum Helium-Massenstrom durch den Kern. Wenn der Leistungsbedarf sinkt, kann das Regelungssystem den Massenstrom verringern und dessen Kühlleistung effektiv reduzieren. Im PBMR-400, ist die Lastfolge ausgelegt für Lastwechsel von 100 % auf 40 % und zurück auf 100 % der Nennleistung.

Die Simulation dieser Transiente ist notwendig, um die korrekte Umsetzung der Xenon-Gleichungen zu überprüfen, da diese Art von Transienten Xenon-induzierte räumliche Leistungsschwingungen auslösen kann. Um solche Effekte modellieren zu können, wird eine Reduzierung des Kühlmittelmassenstroms am Reaktoreintritt von nominal 192,7 kg/s auf 77 kg/s (40 % des Nennwerts) in einem Zeitraum von 400 Sekunden angenommen. Des Weiteren wird eine lineare Massenstromrampe unterstellt.

Der Reaktorausstrittsdruck fällt über den gleichen Zeitraum von nominal (90 bar) auf 40 % des Wertes, was zu einer Verringerung der Reaktorleistung von nominal 400 MW (100 %) auf 160 MW (40 %) von  $t=0$  über 400 Sekunden führt. Für diese Leistungsrampe wird ebenfalls ein linearer Verlauf unterstellt. Für die nachfolgenden drei Stunden (400s - 11200s) wird keine Änderung der Eingabeparameter durchgeführt. Später, ab 11200s -11600s, wird ein Wiederanstieg des Kühlmittelmassenstroms am Reaktoreintritt von 77 kg/s (40 % des Nennwerts) auf 192,7 kg/s unterstellt. Gleichzeitig wird der Reaktorausstrittsdruck linear wieder auf den Nennwert erhöht, was zu einem Anstieg der Reaktorleistung von 160 MW auf 400 MW ebenfalls über 400 Sekunden führt, wie in Abb 5-10 dargestellt ist. Die Gesamtleistung des Reaktors ist somit eine festgelegte Zielbedingung.



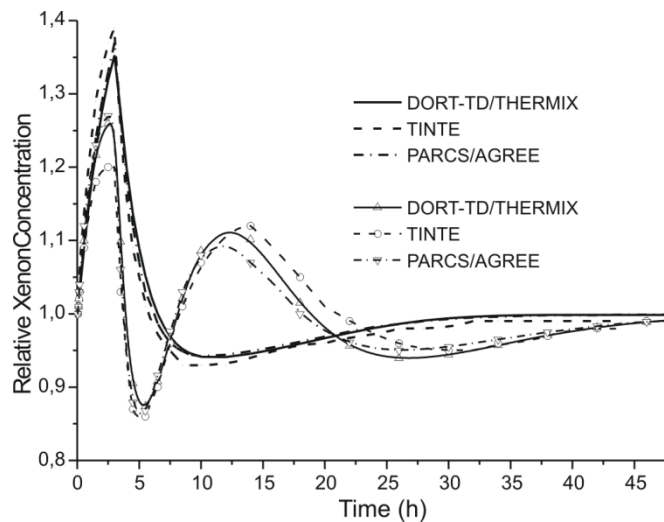
**Abb 5-10** „PBMR 400 MW Transient Benchmark“-Übung zu Reaktorleistung und Steuerstabsposition während des 100-40-100 %-Lastfolgebetriebs. Es sind die mit drei verschiedenen Codes erzielten Ergebnisse zu den Steuerstabspositionen dargestellt (durchgezogene Linie: DORT-TD-Werte).



Für Xenon-induzierte Transienten wurde im DORT-TD/THERMIX-Codesystem eine spezielle Kombination von stationärem und zeitabhängigem Modus verwendet. Eine vollkommen zeitabhängige Berechnung für diese Langzeittransiente wäre eine große Herausforderung für den Code, da die Reaktorleistung kontinuierlich durch Anpassung der Steuerstabsposition stabilisiert werden muss, um dem Aufbau von Xenon Rechnung zu tragen. Stattdessen kehrt DORT-TD während der Phasen konstanter Leistung wieder zum stationären Modus zurück und führt von Zeit zu Zeit eine Kritikalitätssuche durch, um die tatsächliche Steuerstabsposition zu ermitteln. Dies geschieht normalerweise mit einer Frequenz von einer Minute. Nur für die realen transienten Vorgänge, z. B. während des Auslaufens von Pumpen, arbeitet der Code tatsächlich vollständig im transienten Modus.

Abb 5-10 zeigt die Reaktorleistung und die entsprechende Steuerstabsposition für die verschiedenen Phasen der Xenon-Dynamik. Die Steuerstäbe werden beim Aufbau von Xenon nach dem Abbau der Leistung herausgefahren und erneut eingefahren, wenn sich der Reaktor wieder im Volllastbetrieb befindet. Aufgrund der guten Übereinstimmung zwischen den Codes TINTE, PARCS/AGREE und DORT-TD/THERMIX wird die Schlussfolgerung gezogen, dass die Xenon-Dynamik und die Physik durch DORT-TD korrekt dargestellt werden.

Abb. 5-11 zeigt die entsprechenden Xenon-Konzentrationen, die hier als Werte relativ zum stationären Betrieb bei Nennleistung angegeben werden. Dargestellt sind die Gesamtmengen von Xenon im Kern während der Aufbau- und Abbauphasen, sowie die lokale Xenon-Konzentration für eine ausgewählte Position ca. 100 cm unterhalb der Oberkante des Kerns. Für diese Position sind stark gedämpfte Xenon-Schwingungen klar erkennbar. Auch hier ist die Übereinstimmung für die globale Xenon-Konzentration zwischen den drei Codes zufriedenstellend, während etwas größere Abweichungen für die lokale Auswertung beobachtet werden können. Dennoch prognostizieren alle Codes ähnliche Maximalwerte und schließlich eine Rückkehr zu der ursprünglichen Xenon-Verteilung rund zwei Tagen nach dem Lastwechsel.



**Abb. 5-11** Relative über den Kern gemittelte und lokale Xenonkonzentrationen der „PBMR 400 MW Transient Benchmark“-Übung zum Lastfolgebetrieb. Die Linien ohne Symbole zeigen die durchschnittliche Xenonkonzentration, während die Linien mit Symbolen die lokale Xenonkonzentration etwa 100 cm unterhalb der Oberkante des Kugelhaufenreaktorkerns zeigen.

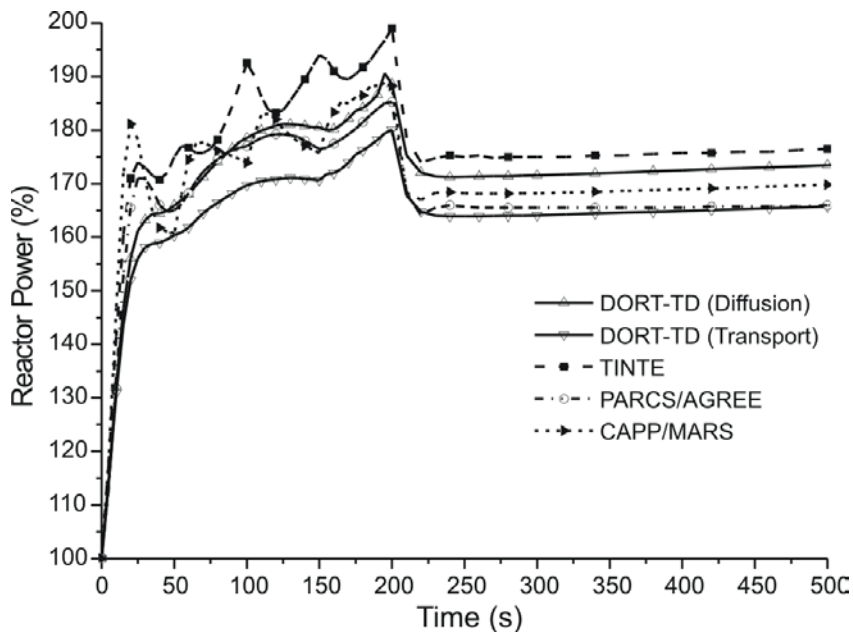
#### 5.2.4 Fall: Steuerstabausfahren

Hier handelt es sich um eine Reaktivitätstransiente, die durch das vollständige Ausfahren (von der betrieblichen Position bei 150 cm unterhalb der Oberkante des Kugelhaufens auf 50cm oberhalb des Kugelhaufens) aller Steuerstäbe von  $t=0$  über 200 Sekunden (d. h. mit einer Geschwindigkeit von 1 cm/s) ausgelöst wird.

Die Transiente wird für 500 Sekunden verfolgt, wobei als erwünschter Output die Spaltleistung und die maximale Brennstofftemperatur vorgegeben war. Die Reaktivitätszufuhr während des Steuerstabausfahrens wird mit DORT-TD/THERMIX-Berechnungen zum stationären Zustand auf etwa 1500 pcm geschätzt. Das Steuerstabausfahren führt zu einem steilen jedoch langsamen Anstieg der Spaltenergieproduktion, die mit DORT-TD ein Maximum von ca. 190 % der Nennleistung bei 300 Sekunden erreicht, wie in Abb. 5-12 dargestellt ist.

Andere Codes, die bei dieser Benchmarkübung zum Einsatz kamen, waren TINTE, PARCS/AGREE und MARS/CAPP von KAERI. Alle Ergebnisse spiegeln mehr oder weniger den gleichen Trend bei der integralen Leistung wieder und zeigen eine relativ gute Übereinstimmung bei der Berechnung der Spitzenleistung (185 – 200 %) und der Leistung, bei der der Reaktor sich schließlich stabilisiert (168 – 177 %). Es sollte er-

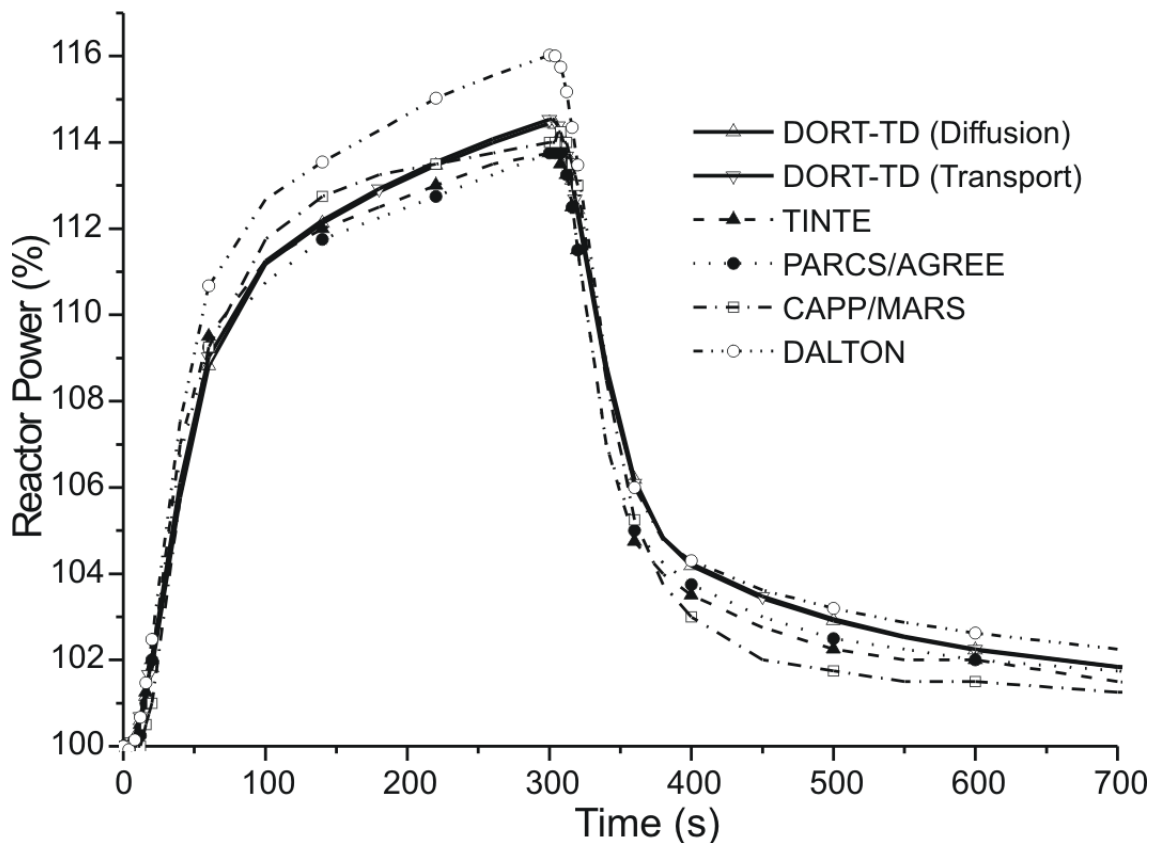
wähnt werden, dass einige Lösungen bei den Steuerstabbewegungen sehr ausgeprägte sogenannte Cusping-Effekte ausweisen, die teils auf die stark unterschiedlichen Steuerstab-Wirkungsquerschnitte pro Zone und teils auf eine zu große Maschenweite zurückzuführen sind. DORT-TD zeigt ein ziemlich gemäßigtes Verhalten hinsichtlich der Reaktorleistung, da die axiale Vermaschung in Zonen, in denen der Steuerstab eingefahren wurde, beträchtlich verfeinert wurde, was zu einer Minderung der Cusping-Effekte führte.



**Abb. 5-12** Vergleich der Ergebnisse für die Reaktorleistung der „PBMR 400 MW Transient Benchmark“-Übung zum Steuerstabausfahren. Durchgezogene Linien: DORT-TD-Ergebnisse (sowohl für Diffusion als auch Transport)

### 5.2.5 Fall: Einströmen von kaltem Helium

Bei dieser Transiente wird das Öffnen eines Umleitventils simuliert, wobei Helium als Kühlmittel in das Kerneintrittsplenum eingespeist wird. Es wird eine Temperaturrampe von 50°C (ab 500°C nominale Eintrittstemperatur) über 10 Sekunden angewendet, ohne weitere Reaktorparameter, wie Mengenstrom, Druck oder Steuerstabpositionen, zu ändern. Es wird unterstellt, dass das Ventil durch ein Reaktorschutzsystem nach 300 Sekunden wieder geschlossen und die Temperatur innerhalb von 10 Sekunden wieder auf den Nennwert zurückgehen würde. Für diese Benchmarkübung wurde der Transientenverlauf über 700 Sekunden verfolgt, und es mussten die Spaltleistung sowie die maximale und durchschnittliche Brennstofftemperatur ausgewertet werden.



**Abb. 5-13** Vergleich der Leistungsexkursion der „PBMR 400 MW Transient Benchmark“-Übung zum Einströmen von kaltem Helium. Die DORT-TD-Lösung wird als durchgezogene Linie dargestellt.

Neben der Lösung mit DORT-TD, wurden vier von anderen Teilnehmern mit deren Codes erzielte Lösungen vorgestellt: TU Delft mit DALTON, University of Michigan mit PARCS/AGREE, PBMR mit TINTE und KAERI mit CAPP/MARS. Diese Übung war wahrscheinlich am einfachsten zu berechnen, da die Steuerstabbewegung nicht enthalten war und das Reaktorverhalten nicht über lange Zeiträume verfolgt werden musste. Dementsprechend wurde eine sehr gute Übereinstimmung bei der Reaktorleistung für alle erzielten Lösungen beobachtet. Abb. 5-13 zeigt, dass die Reduzierung der Eintrittstemperatur zu einem langsamen jedoch steilen Anstieg der Spaltenergieproduktion führt, deren Maximum bei etwa 114 % (mit DORT-TD) der Nennleistung aufgrund der erhöhten Moderierung im Brennstoff liegt. Nachdem die Temperatur bei 300 Sekunden wieder den ursprünglichen Wert erreicht, fällt die Leistung sehr schnell ab und stellt sich nach ein paar hundert Sekunden asymptotisch mit 102 % wieder auf ihren Nennwert ein. Die einzelnen Berechnungen der Codesysteme für die Transientenleistung stimmen mit wenigen Ausnahmen in einer engen Unsicherheitsbandbreite von 1 bis 1,5 % während der gesamten Übung miteinander überein. Das gleiche gilt (obwohl hier nicht dargestellt) für die Änderungen bei der Brennstoff- und Moderator Temperatur, die

allerdings relativ klein sind und keine ernste Probleme hinsichtlich Brennstoff und Reaktorkomponenten darstellen.

### 5.3 AP 2.3: Testfall für eine unterkritische Anordnung

Das Konzept zur Implementierung eines zeitabhängigen Quellterms in TORT TD wurde umgesetzt und abgeschlossen: in TORT-TD können nun Transientenberechnungen mit anisotroper externer zeitabhängiger Quelle durchgeführt werden. Die Winkelanisotropie wird durch eine Entwicklung nach Kugelflächenfunktionen analog zur Neutronenflussverteilung dargestellt. Dieses Rechenmodell ist grundsätzlich geeignet für die Anwendung auf sog. beschleunigergetriebene Systeme (ADS); eine erste Überprüfung der implementierten Rechenmethodik soll anhand des unterkritischen Experiments YALINA stattfinden. Dieses System bietet durch die weitgehende Abwesenheit von Rückwirkungseffekten eine ausgezeichnete Möglichkeit, einen zeitabhängigen Transportcode direkt am Experiment zu validieren. Um die Stab- und Detektorgeometrie von YALINA akkurat wiedergeben zu können, wurde in TORT-TD ein Inputprozessor implementiert, der die hochgenaue Auflösung des Rechengebiets durch eine ergonomische Eingabe ermöglicht. Erst damit ist es möglich, das YALINA-Experiment mit erträglichem Aufwand in TORT-TD zu simulieren.

Erste Testrechnungen zu YALINA, in denen die externe Quelle als eine Folge von Rechteckimpulsen angenommen wird, zeigen physikalisch plausible Ergebnisse. Mit einer vom Forschungszentrum Karlsruhe gelieferten zeitabhängigen Quellbeschreibung wurde das unterkritische YALINA-Thermal-System mit TORT-TD berechnet. Zur detaillierten Darstellung des lokalen Quellgebietes (spezieller Abschnitt des Strahlrohrs) musste die Geometriebeschreibung des Systems verfeinert werden. Der anisotrope Quellterm besteht aus zwei Rechteckimpulsen von 5  $\mu\text{sec}$  und 40  $\mu\text{sec}$  Dauer mit einer Pause von 5  $\mu\text{sec}$  und orientiert sich an den experimentellen Bedingungen von YALINA-Thermal. Die Simulation der Impulsantwort wurde mit Zeitschrittweiten von 1  $\mu\text{sec}$  und 2  $\mu\text{sec}$  durchgeführt und liefert physikalisch plausible Ergebnisse. Es wurden Konferenzbeiträge zur *International Conference on Mathematics, Computational Methods & Reactor Physics (M&C 2009) /SEU 09/* sowie zur Jahrestagung Kerntechnik 2009 /SEU 09a/ verfasst und auf den jeweiligen Konferenzen vorgestellt.

Weiterhin konnte für die experimentelle unterkritische Anordnung YALINA eine Folge von Rechteck- und Sägezahnimpulsen mit TORT-TD simuliert werden. Das neutronische

Verhalten des Systems ist sehr plausibel und beschreibt anschaulich den Zerfall der prompten Neutronengeneration sowie die langsame Abnahme der durch die verzögerten Neutronen bedingten Spaltraten. Aus dem exponentiellen Zerfall der prompten Neutronenpopulation kann derart die prompte Lebensdauer des Systems durch die "Area"- oder "Slope fit"-Methode ermittelt werden. Es ist vorgesehen, dass im nächsten Arbeitsschritt erste vorliegende Messungen an der YALINA-Anordnung mit TORT-TD zu Validierungszwecken nachgerechnet und die Systemparameter aus diesen Rechnungen ermittelt werden. Neben der prompten Lebensdauer spielt hier auch der effektive Anteil verzögerter Neutronen eine wesentliche Rolle. Die Implementierung des zeitlichen Quellterms sowie die Simulation des gepulsten Betriebes der Anordnung YALINA sind in Kapitel 5.3.3 dokumentiert.

Der Einsatz beschleunigergetriebener Systeme (Accelerator Driven Systems, ADS) wird weltweit in Betracht gezogen zur Transmutation langlebiger Spaltprodukte und damit zur Minimierung des radioaktiven Abfalls. Die Bewertung der Performance von ADS erfordert, sofern es Transientenanalysen betrifft, den Einsatz deterministischer Transportcodes. Die Gesamteigenschaften von ADS werden dabei entscheidend vom Raum-Zeit-Verhalten der externen Neutronenquelle bestimmt. Es ist daher notwendig, sowohl Verfahren zur adäquaten Darstellung der Neutronenquelle zu entwickeln als auch zeitabhängige deterministische Transportcodes für die Behandlung externer zeitabhängiger Neutronenquellen zu ertüchtigen. Im Folgenden wird die Implementierung eines zeitabhängigen anisotropen externen Neutronenquellterms in TORT-TD sowie die Anwendung auf das unterkritische System YALINA-Thermal dokumentiert.

### **5.3.1 Rechenverfahren und Implementierung**

Der zeitabhängige 3D-Transportcode TORT-TD wurde um die Berücksichtigung zeitabhängiger externer anisotroper lokalisierter Neutronenquellen erweitert. Dies geschieht durch explizite Darstellung des Quellterms  $q_g(\vec{r}, \vec{\Omega}, t)$  in der zeitabhängigen Diskrete-Ordinaten-Transportgleichung:

$$\left[ \frac{1}{v_g} \frac{\partial}{\partial t} + \hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} + \sigma_g^{tot}(\vec{r}) \right] \psi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) = q_g(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) + \sum_{g'} \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \sigma_{gg'}(\vec{r}, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) \psi_{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}', t) + \chi_g (1 - \beta) \sum_{g'} v \sigma_{fg'}(\vec{r}) \phi_{g'}(\vec{r}, t) + \sum_l \chi_{gl}^d \lambda_l c_l(\vec{r}, t) \quad (5.3-1)$$

Darin ist  $\phi_g(\vec{r}, t)$  der skalare Neutronenfluss der Energiegruppe g, welcher aus dem Winkelfluss  $\psi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}, t)$  durch Integration über den gesamten Raumwinkelbereich folgt. Das in TORT-TD realisierte implizite Zeitintegrationsverfahren resultiert in der Gleichung

$$\left[ \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} + \sigma'_g(\vec{r}) \right] \psi_g^{\tau+1}(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \sum_{g'} \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \sigma_{gg'}(\vec{r}, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) \psi_{g'}^{\tau+1}(\vec{r}, \vec{\Omega}') + \chi'_g \sum_{g'} v \sigma_{fg'}(\vec{r}) \Phi_{g'}^{\tau+1}(\vec{r}) + q'_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) \quad (5.3-2)$$

die für jeden Zeitschritt ein Fixed-Source-Problem mit folgendem zeitabhängigen Quellterm darstellt:

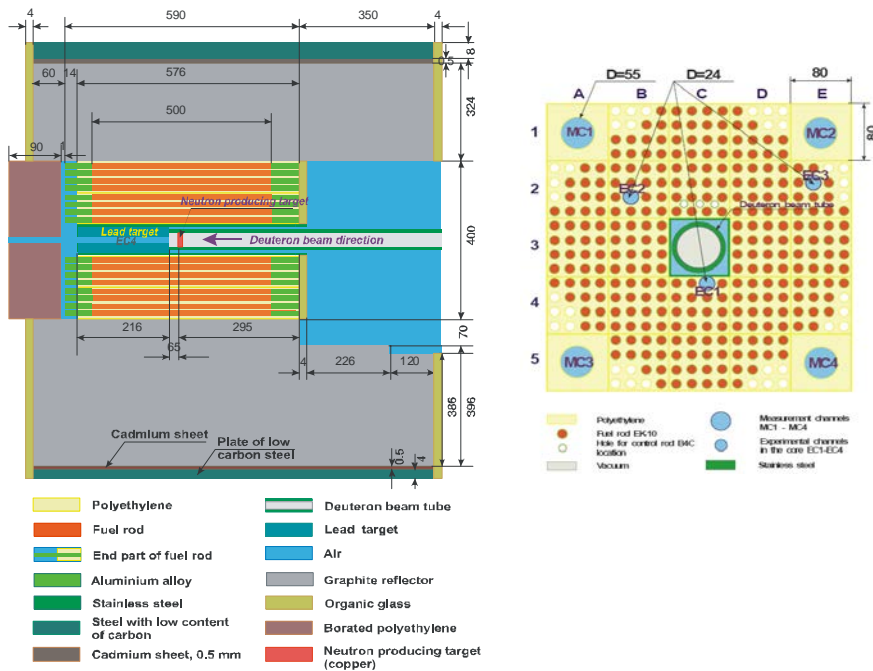
$$D_z = R \frac{\sqrt{H^2 + 4}^3 - 8 - 6H - H^3}{6H(H - \sqrt{H^2 + 4})} \quad (5.3-3)$$

$$q'_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) := q_g^{\tau+1}(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \frac{1}{v_g \Delta t} \psi_g^{\tau}(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \frac{1}{\Delta t} \sum_l \chi_{gl}^d \lambda_l \gamma_l c_l^{\tau}(\vec{r}) \quad (5.3-4)$$

Der erste Term repräsentiert den hier interessierenden zeitabhängigen externen Quellterm; die übrigen Terme resultieren aus der Zeitdiskretisierung und der Dynamik der verzögerten Neutronen. In (1) wurden ferner die Abkürzungen  $\sigma'_g(\vec{r}) := \sigma_g^{tot}(\vec{r}) + \frac{1}{v_g \Delta t}$  und  $\chi'_g := \chi_g (1 - \beta) + \sum_l \chi_{gl}^d \lambda_l \gamma_l \beta_l$  verwendet.

Zur detaillierten Darstellung des externen Quellterms wird  $q_g^{\tau+1}(\vec{r}, \vec{\Omega})$  in Analogie zu den winkelabhängigen Neutronenflüssen nach Kugelflächenfunktionen entwickelt /BEC 09/. Die Zeitabhängigkeit der Quelle wird durch ihre Werte zu frei wählbaren Zeitpunkten vorgegeben. Quelltermwerte für dazwischenliegende Zeitpunkte berechnet TORT-TD

hieraus mittels linearer Interpolation. In TORT-TD lassen sich mehrere verschiedene Neutronenquellen, die sich u.a. in ihrem Zeitverhalten unterscheiden können, beliebigen Raumbereichen innerhalb der Problemgeometrie zuordnen.

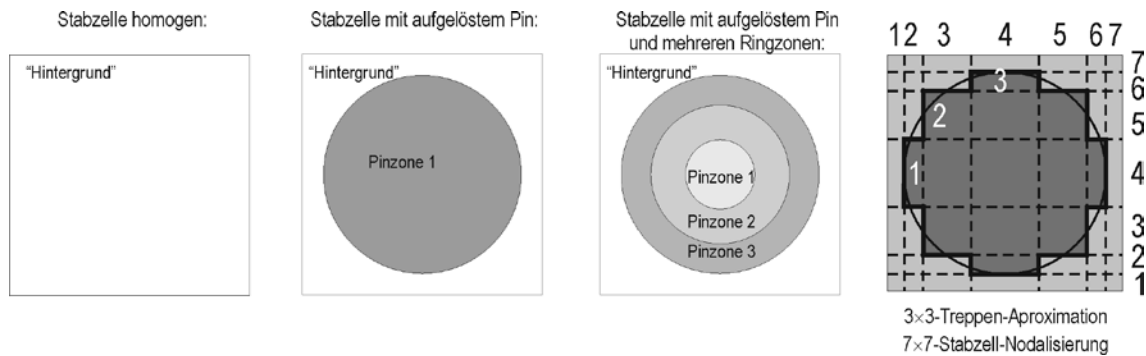


**Abb. 5-14:** Schematische Darstellung des YALINA-Thermal-Systems mit 280 EK-10-Brennstäben. Links: axialer Schnitt, rechts: radialer Schnitt

### 5.3.2 Anwendung auf das unterkritische System YALINA-Thermal

Das unterkritische System YALINA-Thermal /BOU 07/ ist eine Kompaktkern-Anordnung mit thermischem Spektrum. Als Brennstoff wird  $UO_2$  mit 10 %iger Anreicherung eingesetzt, als Moderator dient Polyethylen. Das System ist umgeben von einem Graphitreflektor. Abb. 5-14 zeigt eine schematische Darstellung mit wesentlichen geometrischen Abmessungen. Als unterkritisches System beträgt der Multiplikationsfaktor YALINA-Thermal wird mit  $k_{eff} < 0,98$  betrieben und wird von einer externen Neutronenquelle getrieben, wobei zur Neutronenproduktion entweder eine  $^{252}Cf$ -Quelle oder ein Deuteron-Beschleuniger mit Deuterium- oder Tritium-Target zum Einsatz kommt. Wie in Abb. 5-1 (links) zu erkennen, liegt das neutronenemittierende Target in etwa im Zentrum der aktiven Zone. Hinsichtlich dieser aktiven Zone gibt es drei verschiedene Brennstoffkonfigurationen, die sich in der Zahl der Brennstäbe (216, 245 und 280) unterscheiden. Die im Folgenden dokumentierten Rechnungen beziehen sich auf die Beladung mit 280 EK-10-Brennstäben.



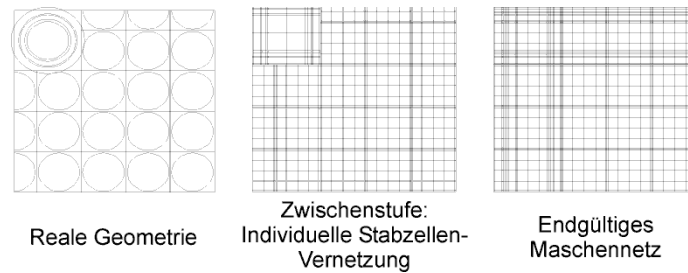


**Abb. 5-15:** Die verschiedenen Möglichkeiten der Darstellung einer Stabzelle in TORT-TD

### 5.3.3 Geometrische Modellierung von YALINA-Thermal in TORT-TD

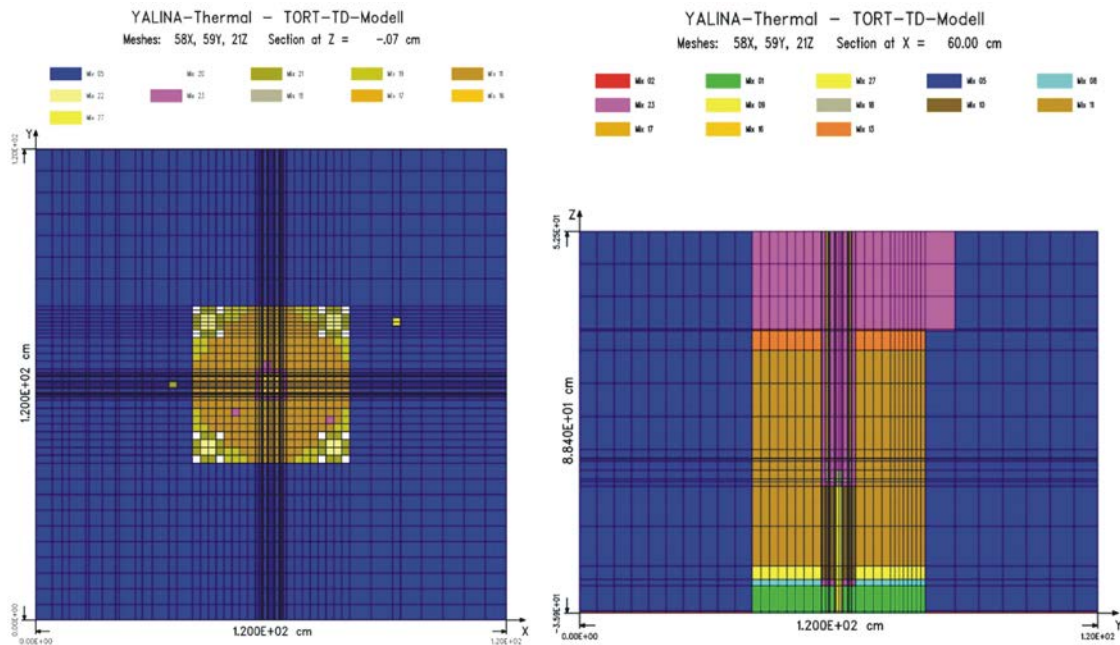
Wie in Abb. 5-1 rechts zu sehen ist, besteht das Problem der geometrischen Modellierung von YALINA-Thermal darin, ein zweidimensionales rechtwinkliges Gitter kreisförmiger Querschnitte mit unterschiedlichen Radien zu diskretisieren (z. B. das große zentrale Strahlrohr inmitten der kleineren Brennstäbe). Dazu bieten sich Cartesische Koordinaten an, doch dann müssen die Kreisquerschnitte durch gestufte (treppenförmige) Ränder approximiert werden. Dabei muss im TORT-TD-Geometriemodell sichergestellt werden, dass die Flächeninhalte der Kreise bzw. Kreisringe erhalten bleiben. Der TORT-TD-Präprozessor zur Generierung des Maschennetzes wurde daher derart erweitert, dass er folgendes leistet:

- Modellierung einer Stabzelle entweder homogen oder heterogen, d. h. mit Unterscheidung zwischen kreisförmigem Stab und dessen Umgebung, die den Rest der Zelle ausfüllt. Dabei kann der Stab seinerseits in beliebig viele radiale Zonen unterteilt werden.
- Approximation des kreisförmigen Stab(zonen)-Querschnitts durch eine Treppenfunktion dergestalt, dass im diskretisierten Modell der jeweilige (Zonen) Flächeninhalt erhalten bleibt. Dies ist in Abb. 5-15 rechts für eine 3x3-Treppenfunktion dargestellt, die zu einer 7x7-Nodalisierung innerhalb der Stabzelle führt.



**Abb. 5-16:** Maschengenerierung in TORT-TD für unterschiedlich große Stabzellen, Stabdurchmesser und Ringzonen

Es ist zulässig, unterschiedlich große Stabzellen mit unterschiedlich großen Stabdurchmessern mit jeweils unterschiedlichen Ringzonenanzahlen und -radien zu kombinieren. Dies führt zu zusätzlichen Maschengrenzen, wie in Abb. 5-16 zu sehen. Hinsichtlich der Treppenapproximation konnte auf im Rahmen des C5G7-Benchmarks geleistete Vorarbeiten zurückgegriffen werden /PAU 04, SEU 06/.

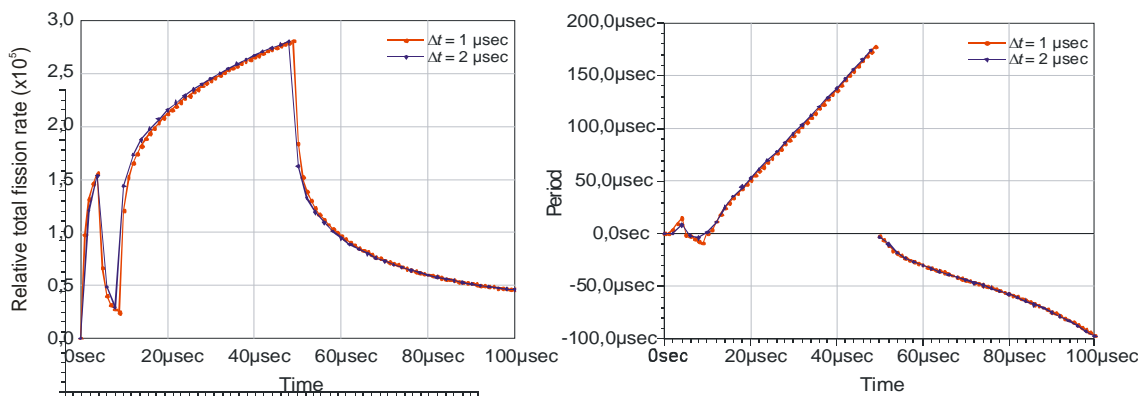


**Abb. 5-17** Radialer (links) und axialer Querschnitt (rechts) durch das TORT-TD-Modell von YALINA-Thermal

Das TORT-TD-Modell von YALINA-Thermal ist in Abb. 5-17 im radialen (links) und axialen Querschnitt (rechts) wiedergegeben.

### 5.3.4 TORT-TD-Analysen des stationären Zustands von YALINA-Thermal und der Antwort auf eine gepulste Neutronenquelle

Für die TORT-TD-Analysen zu YALINA-Thermal wurden am Forschungszentrum Karlsruhe mit dem KAPROS-Codesystem /BRO 04/ stabzellhomogenisierte Wirkungsquerschnitte in 18 prompten Energiegruppen und  $P_1$ -Streuordnung sowie 8 Gruppen verzögerter Neutronen generiert. Die Modellierung des zeitabhängigen Quellterms wurde ebenfalls vom Forschungszentrum Karlsruhe übernommen. Zu Vergleichszwecken wurden auch Daten in 11, 27 und 69 Energiegruppen sowie höheren Streuordnungen (bis  $P_5$ ) bereitgestellt. Der für den stationären Zustand ermittelte Multiplikationsfaktor von  $k_{eff} = 0,96111$  korrespondiert gut mit dem in /KIY 07/ dokumentierten Wert von  $k_{eff} = 0,96080$ .



**Abb. 5-18** Zeitabhängige Simulation der Antwort von YALINA-Thermal auf eine Sequenz zweier Rechteckimpulse von 5  $\mu\text{sec}$  bzw. 40  $\mu\text{sec}$  Dauer (5  $\mu\text{sec}$  Pause). Links: Gesamt-Spaltrate, rechts: Reaktorperiode. Es sind zwei Rechnungen mit verschiedenen Zeitschritten ( $\Delta t = 1 \mu\text{sec}$  bzw.  $\Delta t = 2 \mu\text{sec}$ ) dargestellt.

Die Implementierung des anisotropen zeitabhängigen Quellterms in TORT-TD wurde anhand einer gepulsten Quelle getestet. Dazu wurde eine Folge zweier Rechteckimpulse 5  $\mu\text{sec}$  bzw. 40  $\mu\text{sec}$  Dauer, die durch eine Pause von 5  $\mu\text{sec}$  separiert sind, herangezogen. Die Pulsdauern orientieren sich an den tatsächlichen Bedingungen von YALINA-Thermal. Die resultierende zeitliche Entwicklung der (auf den stationären Ausgangszustand bezogenen) Spaltrate zeigt das linke Diagramm in Abb. 5-18. Die zugehörige Reaktorperiode ist in Abb. 5-18 rechts wiedergegeben. Deutlich ist hier die Unstetigkeit infolge der Rechteck-Pulsform zu erkennen.

Die Ergebnisse sind vor dem Hintergrund von Validierungsrechnungen /PER 05/ physikalisch plausibel. Sie demonstrieren die Einsatzfähigkeit von TORT-TD für quellgetriebene unterkritische Systeme und eröffnen TORT-TD grundsätzlich die Anwendung auf die Transientenanalyse beschleunigergetriebener Systeme (ADS) zur Transmutation langlebiger Spaltprodukte.

## **6 AP 3: Ganzkernrechnungen mit Monte Carlo-Methoden**

### **6.1 AP 3.1: Bereitstellung von NJOY zur Erstellung von Punktdaten und Mehrgruppendaten**

Nukleare Daten sind die Grundlage aller Neutronentransportberechnungen. Die Qualität der verwendeten nuklearen Daten ist deshalb wesentlich für die Zuverlässigkeit der Ergebnisse der nuklearen Berechnungskette. Die großen Datenbibliotheken, wie JEFF, ENDF/B und JENDL werden ständig erweitert und verbessert. Während der letzten Jahre wurde die europäische Datenbibliothek von JEF-2.2 auf JEFF-3.1 /KON 06/ und weiter auf JEFF-3.1.1, die amerikanische Datenbibliothek von ENDF/B-VI auf ENDF/B VII.0 /CHA 06/ und ENDF/B VII.1 und die japanische Datenbibliothek von JENDL-3.2 auf JENDL-3.3/AC-2008 /IWA 08/ und JENDL-4.0 aktualisiert. Diese Bibliotheksverbesserungen berücksichtigen die neuesten Auswertungen von differentiellen Experimenten; die Validierung erfolgt hauptsächlich durch Vergleich der Ergebnisse von Monte-Carlo-Berechnungen mit einer großen Anzahl von kritischen Experimenten, die einen weiten Bereich von Brennstoff-, Moderator- und Strukturmaterialien unter unterschiedlichen Spektralverhältnissen abdecken.

Das international eingesetzte Standardprogramm NJOY /MAC 94/ rekonstruiert aus dem ENDF-6-Format der nuklearen Basisdatenbibliotheken die Wirkungsquerschnitte für die Darstellung in Punktdaten oder in Mehrgruppendaten. Das Programmsystem enthält u.a. Module zur Rekonstruktion der Punktdaten (RECONR), zur Temperatur- bzw. Dopplerverbreiterung (BROADR), zur Verarbeitung des unaufgelösten Resonanzbereichs (PURR), zur Wärme- und Gaserzeugung (HEATR und GASPR), zur Erzeugung thermischer Streudaten (THERMR) zur Formatierung für Anwendungs-codes wie MCNP (ACER) sowie zur Wichtung für die gewünschte Energiegruppeneinteilung (GROU-PR). NJOY ist Voraussetzung für eine unabhängige Bereitstellung von Wirkungsquerschnitten für Anwendungsrechnungen ausgehend von den nuklearen Basisdatenbibliotheken. Eigene Erfahrungen und detaillierte Kenntnisse der Rechenschritte sind auch erforderlich, um die Unsicherheit in den nuklearen Daten einzuschätzen oder Daten für zukünftige Reaktorkonzepte zu erstellen.

Im Rahmen des Vorhabens RS1183 wurde das NJOY-Programmsystem in der GRS implementiert und in die nukleare Berechnungskette integriert. Dazu wurde eine voll-

ständige Neutronen-Datenbibliothek kontinuierlicher Energie bei Raumtemperatur aus der aktuellen JEFF-3.1.1-Evaluierung erzeugt, die Daten für 381 Nuklide enthält; Für H<sub>2</sub>O wurden zusätzlich thermische Streudaten erzeugt, die Bindungseffekte berücksichtigen, was bei Molekülen aus leichten Atomen erforderlich ist. Diese Daten stehen nun in der GRS auf einem zentralen Fileserver für allgemeine Anwendungen bereit.

Die Validierung dieser Datenbibliothek ist noch nicht abgeschlossen und wird im Nachfolge-Vorhaben für fortschrittliche Reaktorsysteme fortgesetzt. Innerhalb des Vorhabens RS1183 beschränkt sich die Validierung auf LWR-Systeme, siehe Arbeitspunkt 3.2. Ebenfalls im Nachfolgevorhaben erfolgt die Erweiterung der Datenbibliothek für ausgewählte wichtige Nuklide auf ein sehr feines Energiegitter; die nötigen Vorbereitungen dazu sind getroffen.

Zusätzlich zur Verwendung mit nuklearen Daten kontinuierlicher Energie bietet MCNP auch die Möglichkeit, mit Multigruppendaten zu rechnen. Diese werden gewöhnlich mit einem Spektralprogramm, z. B. aus dem SCALE-6-System, erzeugt (siehe Kapitel 4.2) und anschließend für MCNP aufbereitet. Dies hat gegenüber dem Einsatz mit Daten kontinuierlicher Energie den Nachteil, dass die Spektralrechnungen normalerweise für vereinfachte Anordnungen durchgeführt werden müssen, bietet aber die Vorteile kürzerer Rechenzeiten, der Möglichkeit des Einsatzes von MCNP mit der XSUSA-Methode zur Unsicherheitsanalyse (siehe Kapitel 7), und die Möglichkeit der Wirkungsquerschnittsinterpolation für gekoppelte Thermofluiddynamik-/Neutronentransportberechnungen. Deshalb wurde die Erzeugung von für MCNP geeigneten Multigruppendaten in der GRS implementiert. Für Berechnungen im Multigruppen-Modus benötigt MCNP nukleare Daten in einem spezifischen Format, im Gegensatz zu den deterministischen und Monte-Carlo-Transportprogrammen aus dem SCALE-System, die allesamt das AMPX-Format verwenden. Deshalb wurde mit Hilfe des Programms CRSRD und einiger Anpassungen die Transformation von AMPX-Multigruppen-Datenbibliotheken in das MCNP-Format in die GRS-Berechnungskette zum Daten-Processing integriert und an Anwendungsfällen überprüft.

Dazu wurde eine Serie von Ganzkern-Benchmarks /GOM 05/ herangezogen; die Ergebnisse wurden mit Ergebnissen von MCNP-Berechnungen mit nuklearen Daten kontinuierlicher Energie verglichen, siehe Kapitel 6.1.

## **6.2 AP 3.2: Überprüfung der neuen Datenbibliotheken durch Nachrechnung kritischer Experimente und von Kernanordnungen**

Die Überprüfung der neu erzeugten JEFF-3.1.1-Datenbibliotheken erfolgte wie bisher durch Nachrechnung von kritischen Anordnungen aus den KRITZ- und VENUS-Serien von Experimenten sowie durch Berechnung der stationären Kernanordnung aus dem DWR-UO<sub>2</sub>/MOX-Kerntransientenbenchmark. Durch die Auswertung dieser Sequenz von Problemen kann die Entwicklung der nuklearen Datenbibliotheken in Bezug auf die Multiplikationsfaktoren und die Auswirkungen für die Leistungsverteilung verfolgt und bewertet werden. Diese Ergebnisse liefern einen wesentlichen Beitrag zur Qualitätssicherung der nuklearen Daten für Kernberechnungen.

### **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. Die detaillierte Beschreibung der Anordnungen, deren Messergebnisse öffentlich zugänglich sind, ist in /JOH 90/, NEA 05/ zu finden. Dabei handelt es sich um zwei Uran-Stabgitter mit unterschiedlicher Gitterweite ("KRITZ-2:1" und "KRITZ-2:13" in der Bezeichnungsweise von /JOH 90/) 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. Gemessen wurden für fünf der sechs Anordnungen die radialen Spaltratenverteilungen an einigen ausgewählten Stabpositionen.

**Tab. 6-1** MCNP-Ergebnisse für die Multiplikationsfaktoren der KRITZ-2-Anordnungen bei Raumtemperatur mit unterschiedlichen JEF/JEFF-Daten

	<b>JEF-2.2</b>	<b>JEFF-3.1</b>	<b>JEFF-3.1.1</b>
KRITZ-2:01	0.99396	0.99587	0.99711
KRITZ-2:13	0.99649	0.99879	1.00118
KRITZ-2:19	0.99746	1.00237	1.00062

In Tab. 6-1 werden die Ergebnisse für die Multiplikationsfaktoren, die sich unter Verwendung der neu erstellten JEFF-3.1.1-Datenbibliothek ergeben, mit den Ergebnissen der bisher eingesetzten Bibliotheken auf JEF-2.2- und JEFF-3.1-Basis verglichen. Während die früheren Rechnungen mit JEF-2.2- und JEFF-3.1-Daten mit  $10^8$  Neutronenschicksalen durchgeführt wurden, wurden für die neuen JEFF-3.1.1-Rechnungen  $2 \times 10^8$  Neutronenschicksale ausgewertet; dies führt zu statistischen Unsicherheiten von 0.00007 bzw. 0.00005. Es ergibt sich nochmals eine leichte Verbesserung in der Übereinstimmung mit den experimentellen Werten von 1.0.

### Die VENUS-7-Benchmarks

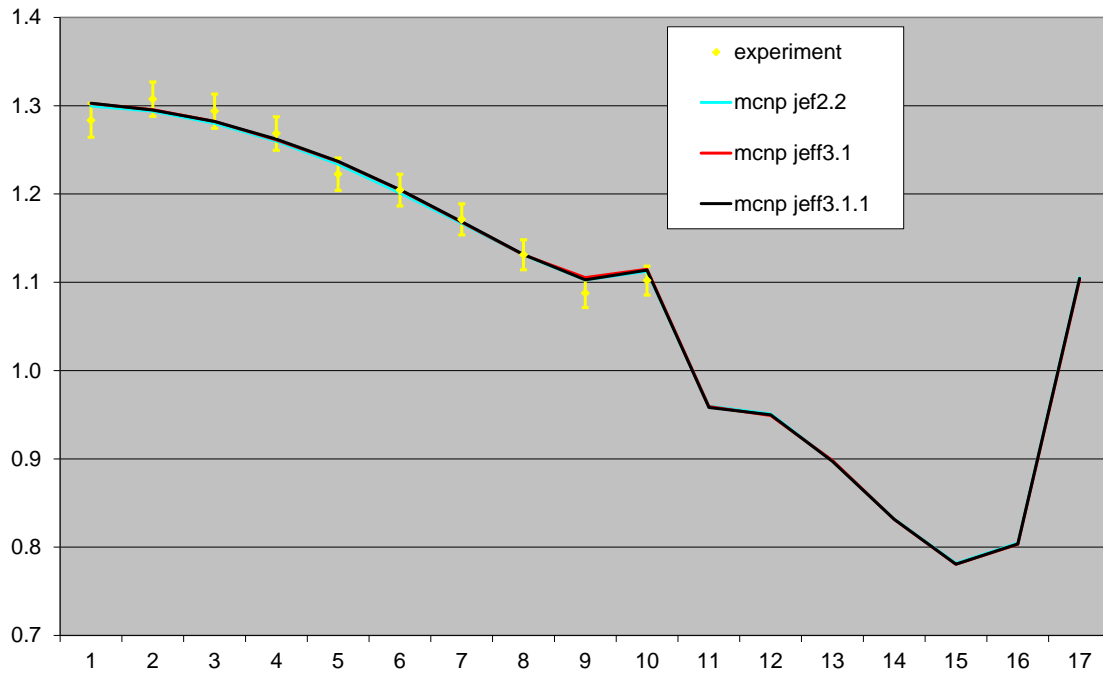
Der VENUS-7-Serie von kritischen Experimenten wurde bei SCK-CEN in Belgien durchgeführt. Die VENUS-7-Kernanordnungen sind quadratische Stabgitter bei Raumtemperatur, die ca. 900 Brennstäbe enthalten. Die Anordnungen unterscheiden sich durch ihre radiale Form; 7/0 und 7/1 sind näherungsweise zylindrisch, wohingegen es sich bei 7/3 um eine quadratische Anordnung handelt. Die Kerne bestehen aus einer inneren MOX- und einer äußeren  $UO_2$ -Zone und sind leichtwassermoderiert und -reflektiert. Die wesentlichen gemessenen Größen sind die Multiplikationsfaktoren, Reaktivitätsdifferenzen bei Ersetzung oder Entfernung von Brennstäben und radiale stabweise Spaltratenverteilungen an ausgewählten Stabpositionen. 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  $UO_2$  mit 3 % Anreicherung und  $PuO_2$  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 /MES 05/ zu finden.



Die Ergebnisse für die Multiplikationsfaktoren aus den MCNP-Berechnungen mit unterschiedlichen Datenbibliotheken sind in Tab. 6-2 dargestellt. Alle MCNP-Berechnungen wurden mit  $2 \times 10^8$  Neutronenschicksalen durchgeführt; dies ergibt statistische Unsicherheiten von 0.00005. In den Experimenten VENUS-7/0 wurden 4x4 zentrale Brennstäbe durch andersartige Brennstäbe ersetzt; die entsprechenden Ergebnisse sind in der Tabelle mit „subst“ bezeichnet. Der gemessene Multiplikationsfaktor für VENUS-7/0 wurde nicht dokumentiert und wird daher als 1.0 angenommen; die angegebenen Multiplikationsfaktoren für die Substitutionsexperimente wurden aus den gemessenen Reaktivitätsdifferenzen relativ zu diesem Wert berechnet. In der Anordnung VENUS-7/1 wurde eine zusätzliche Messung durchgeführt, in der ein peripherer Stab pro Kernviertel entfernt wurde. Während sich beim Übergang von JEF-2.2 zu JEFF-3.1 noch eine deutliche Verbesserung der Ergebnisse ergab, wobei die Multiplikationsfaktoren für alle Anordnungen um ca. 250 pcm zunehmen, ergibt sich bei Verwendung der JEFF-3.1.1-Daten nur noch eine sehr kleine Verbesserung (Zunahme um ca. 30-40 pcm).

**Tab. 6-2** MCNP-Ergebnisse für die die Multiplikationsfaktoren der VENUS-7-Anordnungen mit unterschiedlichen JEF/JEFF-Daten.

	<b>Experiment</b>	<b>JEF-2.2</b>	<b>JEFF-3.1</b>	<b>JEFF-3.1.1</b>
VENUS-7/0	1.00000	0.99248	0.99494	0.99520
dto. (subst. UOX 4/0)	1.00094	0.99373	0.99627	0.99672
dto. (subst. MOX 3/1 0.38)	0.99942	0.99158	0.99414	0.99461
dto. (subst. MOX 2/2.7)	0.99908	0.99173	0.99433	0.99468
VENUS-7/1	1.00090	0.99354	0.99604	0.99644
dto. (- 1 rod/quarter)	1.00026	0.99294	0.99548	0.99592
VENUS-7/3	0.99850	0.99300	0.99523	0.99574



**Abb. 6-1** MCNP-Ergebnisse für die radialen Stableistungsverteilungen der VENUS-7/1-Anordnung mit unterschiedlichen JEF/JEFF-Daten

Abb. 6-1 zeigt die radialen Stableistungsverteilungen, die mit MCNP unter Verwendung der verschiedenen JEF/JEFF-Datenbibliotheken für die Anordnung VENUS-7/1 berechnet wurden. Hier ergeben sich nur äußerst geringe Unterschiede, die wesentlich kleiner sind als die Messunsicherheiten. Insgesamt sind die mit allen Bibliotheken ermittelten Ergebnisse mit den gemessenen Werten verträglich.

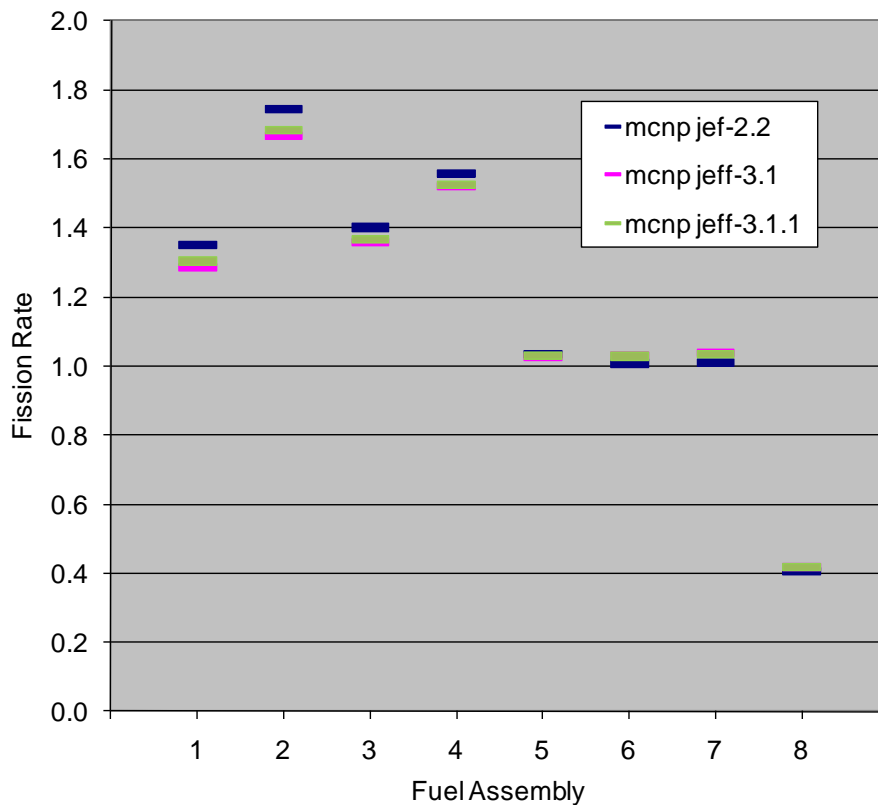
### Der DWR-UO<sub>2</sub>/MOX-Kerntransientenbenchmark

Als Testfall für die Berechnung einer stationären Ganzkern-Anordnung dient der Nulllast-Heiß-Zustand DWR-UO<sub>2</sub>/MOX-Kerntransientenbenchmark, der in der GRS schon in der Vergangenheit regelmäßig zur Überprüfung nuklearer Daten und Rechenmethoden herangezogen wurde. Die Kernanordnung ist in Kapitel 4.2 beschrieben.

**Tab. 6-3** MCNP-Ergebnisse für die Multiplikationsfaktoren und Steuerstabwirksamkeiten des DWR-UO<sub>2</sub>/MOX-Kerntransientenbenchmarks mit unterschiedlichen JEF/JEFF-Daten.

	<b>JEF-2.2</b>	<b>JEFF-3.1</b>	<b>JEFF-3.1.1</b>
unkontrolliert	1.06065	1.05797	1.05856
kontrolliert	0.99001	0.98714	0.98767
Steuerstabwirksamkeit (pcm)	6727	6782	6780

In Tab. 6-3 werden die Multiplikationsfaktoren für den unkontrollierten und kontrollierten Zustand aus MCNP-Berechnungen mit verschiedenen JEF/JEFF-Datenbibliotheken verglichen. Beim Übergang von JEF-2.2 zu JEFF-3.1 ergaben sich noch sichtbare Unterschiede von ca. 200 – 300 pcm in den Multiplikationsfaktoren und ca. 50 pcm in der gesamten Steuerstabwirksamkeit. Beim Übergang von JEF-3.1 zu JEFF-3.1.1 sind diese Unterschiede erheblich geringer (ca. 50 pcm in den Multiplikationsfaktoren); die Steuerstabwirksamkeit bleibt praktisch unverändert.



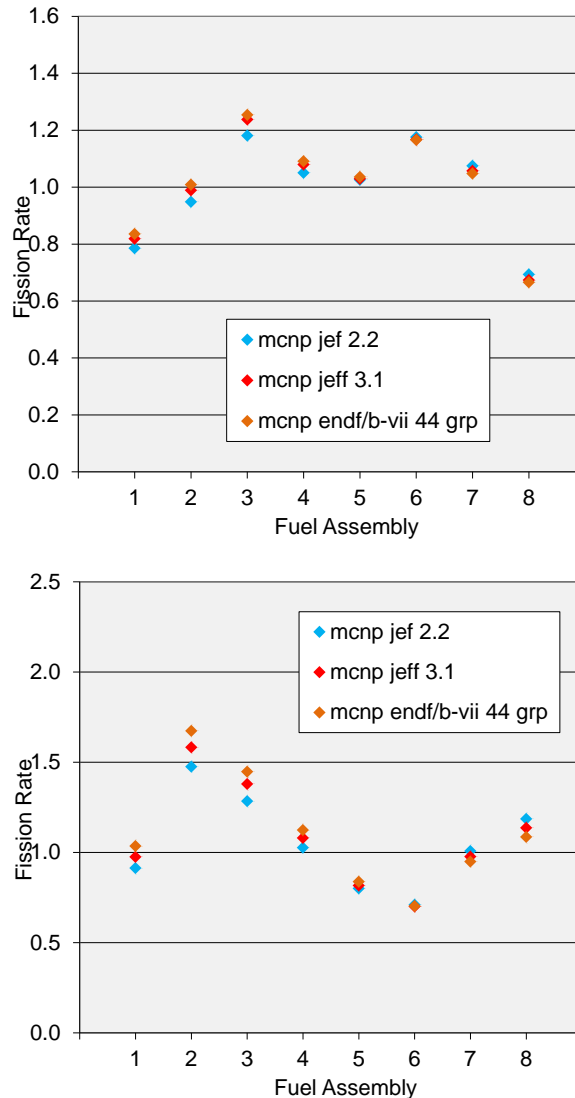
**Abb. 6-2** MCNP-Ergebnisse für die radialen Brennelementleistungsverteilungen des DWR-UO<sub>2</sub>/MOX-Kerntransientenbenchmarks mit unterschiedlichen JEF/JEFF-Daten

In Abb. 6-2 sind die entsprechenden radialen Brennelementleistungsverteilungen dargestellt. Hier waren beim Übergang von JEF-2.2 zu JEFF-3.1 erhebliche Unterschiede zu beobachten; in den Brennelementen in der Kernmitte betrugen die Differenzen mehr als 4 %, was unerwartet hoch war und schließlich zur Durchführung systematischer Unsicherheitsanalysen bzgl. nuklearer Daten führte, wofür die XSUSA-Methode entwickelt wurde (siehe Kapitel 7). Selbst beim Übergang von JEF-3.1 zu JEFF-3.1.1 sind noch Unterschiede von ca. 1.5 % zu beobachten. Dies zeigt ein weiteres Mal die starke Empfindlichkeit der Leistungsverteilung großer heterogener Reaktorkerne auf Unterschiede in den nuklearen Daten.

### Der VVER-1000-Ganzkernbenchmark

Als Anwendung einer Ganzkernberechnung wurde im Rahmen einer OECD/NEA-Arbeitsgruppe ein Reaktivitätsbenchmark für einen zweidimensionalen WWR-Reaktorkern definiert /GOM 05/. 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.



**Abb. 6-3** MCNP-Ergebnisse für die radialen Brennelementleistungsverteilungen des VVER-1000-Ganzkernbenchmark mit unterschiedlichen Punkt- und Multigruppen-Daten. Links: Nulllast heiß unkontrolliert, rechts: Nulllast heiß kontrolliert, ohne Bor

Für den Ganzkern-Benchmark werden Brennelemente in unterschiedlich abgebrannten Zuständen (bis 40 MWd/kg Schwermetall) 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.

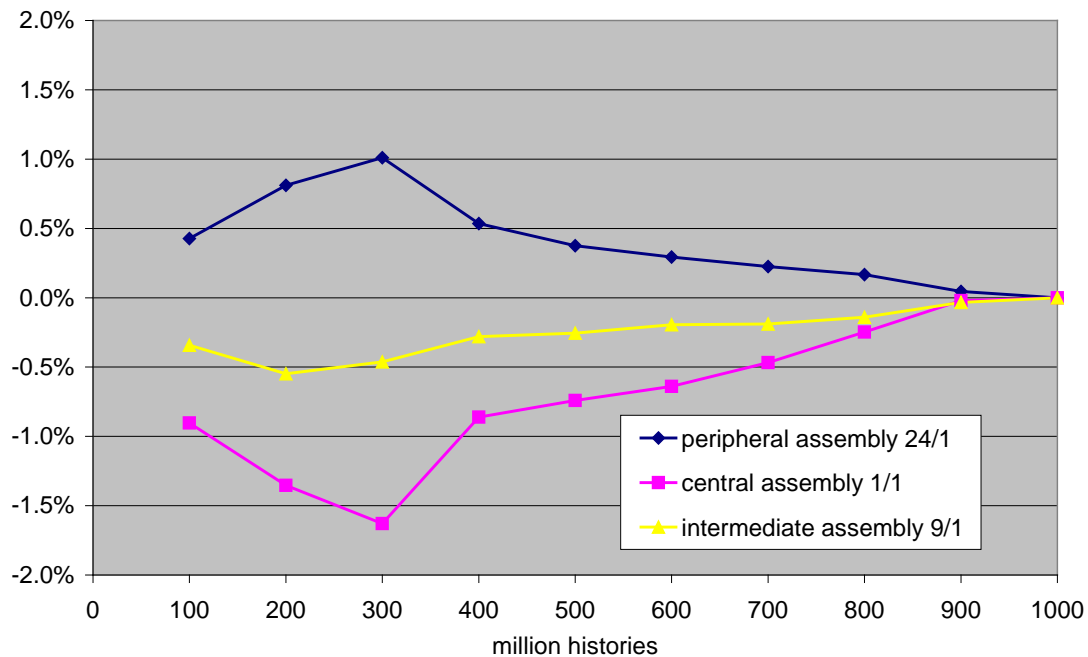
Anhand zweier Zustände wurde die Verwendung von Multigruppen-Daten mit MCNP überprüft. Dazu wurden der unkontrollierte Nulllast-Heiß-Zustand sowie ein vollständig kontrollierter Zustand ohne Borierung des Kühlmittels ausgewählt. Die Ergebnisse für die jeweiligen radialen Leistungsverteilungen sind in Abb. 6-3 dargestellt. Wie bereits beim DWR-UO<sub>2</sub>/MOX-Kerntransientenbenchmark sind deutliche Unterschiede bei der Verwendung von JEF-2.2- und JEFF-3.1-Daten kontinuierlicher Energie zu beobachten. Beim Einsatz von auf ENDF/B-VII basierenden Multigruppen-Daten nimmt die Bandbreite der Ergebnisse nochmals zu. Diese Unterschiede werden allerdings von den Ergebnisunsicherheiten, die sich aus systematischen Unsicherheitsanalysen bzgl. der nuklearen Daten ergeben, bei weitem übertroffen.

### **6.3 AP 3.3: Methodenentwicklung zur Beschleunigung der Monte Carlo Berechnungen für große Kernanordnungen**

Mit MCNP steht ein leistungsfähiges und international anerkanntes Monte-Carlo-Programm an der GRS zur Verfügung. Die Berechnungen erfordern zum Teil sehr große Rechenzeiten, insbesondere bei Berechnungen von lokalen Größen für große Kernanordnungen. Im Vorhaben RS1183 wurde untersucht, ob Verbesserungen im Konvergenzverhalten erzielt werden können, wenn eine verbesserte Schätzung für die anfängliche Verteilung der Spaltquellen vorgegeben werden kann. Eine mögliche Methode besteht in der gleichzeitigen Berechnung mit einem deterministischen Diffusions- oder Transportprogramm und Übernahme der Quellverteilung in die Monte-Carlo-Berechnung.

Für die Untersuchung wurden wiederum der DWR-UO<sub>2</sub>/MOX-Kerntransientenbenchmark und der VVER-1000-Ganzkernbenchmark herangezogen, die große Leistungsreaktoren mit heterogener Teil-MOX-Kernbeladung in vereinfachter Beschreibung darstellen. Für beide Kerne wurde für verschiedene Zustände das Verhalten der mit MCNP berechneten Brennelement-Leistungsverteilung in Abhängigkeit von der Anzahl der beitragenden Neutronenschicksale ausgewertet. Dabei ist immer wieder folgendes Verhalten zu beobachten: Nach einer moderaten Anzahl von Neutronenschicksalen von einigen 100 Millionen oder sogar weniger, die auf heutigen Parallelrechnern routinemäßig durchgeführt werden können, ist die Leistungsverteilung mit einer verbleibenden Ungenauigkeit von einigen Prozent bestimmt. Um eine Vorhersagegenauigkeit von deutlich weniger als 1 % zu erreichen, müssen erheblich mehr Neutronenschicksale ausgewertet werden. Ein Erfahrungswert liegt bei einer Milliarde Neutronenschicksale.

Dies wird in Abb. 6-4 deutlich. Darin ist für den unkontrollierten Zustand des VVER-1000-Ganzkernbenchmarks die Entwicklung der Leistung in drei Brennelementen an repräsentativen Positionen (in der Kernmitte, am Kernrand und bei etwa halbem Kernradius) zu sehen. Dargestellt ist die jeweilige Abweichung vom Wert bei einer Milliarde Neutronenschicksale. Es ist zu erkennen, dass für das Brennelement in der Kernmitte für 500 Millionen Neutronenschicksale immer noch um fast 1 % vom Endwert abweicht.



**Abb. 6-4** Relative Differenz der Leistung in drei Brennelementen des WWER-1000-Ganzkernbenchmarks vom Endwert nach einer Milliarde Neutronenschicksale, berechnet mit MCNP und JEFF 3.1-Daten.

Andererseits hat sich immer wieder gezeigt, dass die berechnete Leistungsverteilung in großen heterogenen Reaktorkernen ausgesprochen empfindlich hinsichtlich der verwendeten nuklearen Daten ist /LAN 09a/, sondern auch auf Näherungen in der Rechenmethodik wie räumliche Homogenisierung oder Energiegruppen-Kondensation /KOZ 06, LAN 09/. Es kann also nicht davon ausgegangen werden, dass aus einer deterministischen Transport- oder Diffusionsrechnung die Leistungsverteilung aus der Referenz-Monte-Carlo-Rechnung auf wesentlich weniger als 1 % Differenz bestimmt werden kann, selbst wenn dieselbe Datenevaluierung verwendet wird. Eine solche Genauigkeit wäre aber erforderlich, um eine Startverteilung für die Monte-Carlo-Rechnung zur Verfügung zu stellen, von der ausgehend die Rechenzeit substantiell reduziert werden könnte. Für stationäre Monte-Carlo-Ganzkernberechnungen scheint diese Vorgehensweise also nicht zweckmäßig zu sein.

#### **6.4 AP3.4: Volle Integration der thermohydraulischen Rückwirkungen in MCNP Berechnungen**

Nach dem bisherigen Entwicklungsstand (Vorhaben RS1160) konnten in der MCNP-Rechnung vorausberechnete Verteilungen für die thermohydraulischen Größen berücksichtigt werden, die von einem Parallelkanalmodell aus ATHLET-Komponenten übernommen wurden. Die berechnete Leistungsdichteverteilung aus MCNP wurde aber bislang nicht an das thermohydraulische Modell zurückgegeben. Das Ziel der vollen Integration von MCNP-Rechnung und thermohydraulischem Modell ist es, die endgültige Lösung durch Iteration zwischen beiden Rechenprogrammen zu erzeugen. Dies wurde im Rahmen des Vorhabens RS1183 in einer Zusammenarbeit mit dem Institut für Kernenergetik und Energiesysteme der Universität Stuttgart prototypisch verwirklicht und validiert /BER 10/.

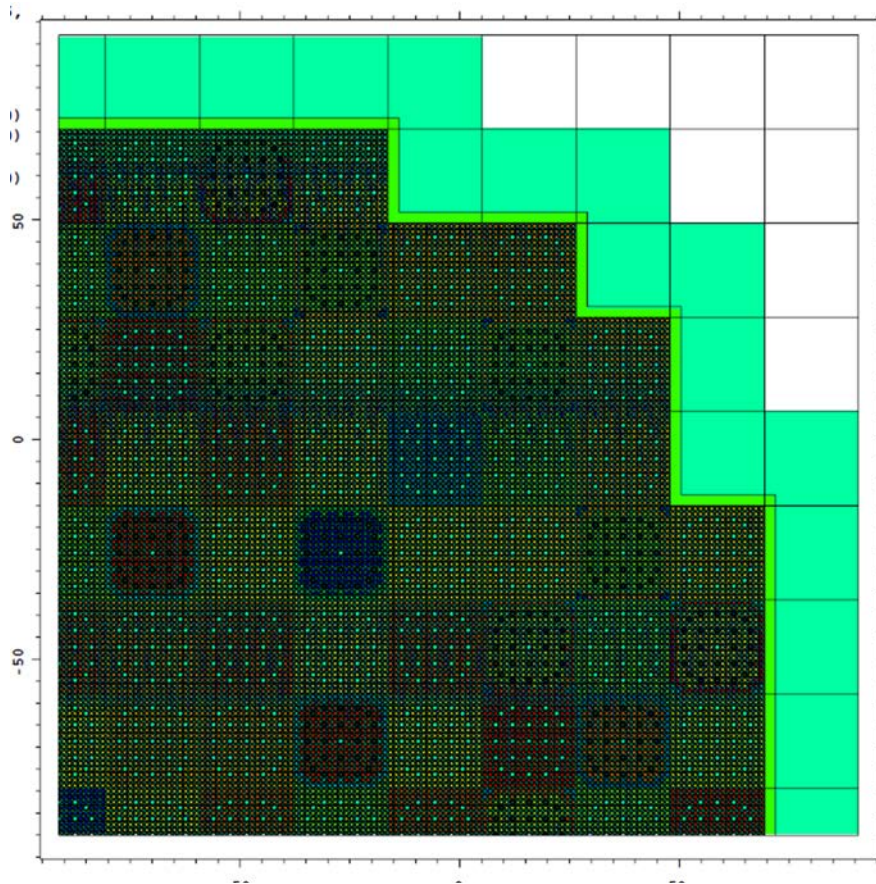
Die Analyse der Brennstoffleistungsverteilung in Brennelementgittern von Leichtwasserreaktoren unter realistischen thermohydraulischen Bedingungen kann mit gekoppelten Neutronik-/Thermohydraulik-Systemrechenprogrammen durchgeführt werden. Aufgrund der heutigen Verfügbarkeit von leistungsstarken Parallelrechnerressourcen für die Neutronik können Monte-Carlo-Codes mit dem Vorteil angewandt werden, dass keine Homogenisierung und Energiegruppennäherungen erforderlich sind. Realistische Betriebsbedingungen erfordern, dass für alle Brennstäbe Material und Temperaturverteilungen in Betracht gezogen werden müssen. Bei der Anwendung von Monte-Carlo-Codes wie MCNP5 /X-5 03/ muss eine sehr große Anzahl von Eingabebereichen mit unterschiedlicher Materialzusammensetzung oder Temperatur angegeben werden. Die entsprechenden Thermohydraulik-Daten – Moderatortemperaturen, Dichten und Brennstofftemperaturen – müssen mit geeigneten Thermohydraulik-Codes berechnet werden. Dies wurde durch die Kopplung von MCNP5 mit dem ATHLET-Code /LER 98/ für die Analyse der detaillierten Leistungsverteilung in einem Druckwasserreaktor (DWR) bewerkstelligt. Das DWR-Modell wurde gemäß dem stationären Teil des DWR-MOX/ $\text{UO}_2$ -Kerntransientenbenchmarks /KOZ 06/ vereinfacht. Dies bedeutet, dass der Abbrand aller Brennelemente radial und axial konstant ist und sich die Temperatur in einem Brennelement nur axial verändert. Die Nuklidzusammensetzungen der verschiedenen Brennelemente ( $\text{UO}_2$  und MOX) für festgelegte Abbrände wurden aus der Benchmark-Spezifikation übernommen.



## Das neutronenkinetische Modell

Das neutronenkinetische Modell ist ein Gitter mit Brennelementen bestehend aus 17x17 Brennstäben. Ein Viertel des Kerns und der Geometrie der UO<sub>2</sub>- und MOX-Brennelemente ist in Abb. 4-6 dargestellt. In dieser Abbildung wird für jedes Brennelement der durchschnittliche Spaltstoffgehalt im UO<sub>2</sub> oder MOX und der durchschnittlichen Abbrand gezeigt. Die MOX-Brennelemente haben Brennstäbe mit drei verschiedenen Plutoniumgehalten. Darüber hinaus wurden IFBA-Stäbe (Integral Fuel Burnable Absorber) mit abbrennbaren Giften für UO<sub>2</sub>-Brennelemente und WABA-Stäbe („Wet Annular Burnable Absorber“) mit abbrennbaren Giften in den Steuerstabsführungspositionen für MOX-Elemente eingesetzt. Der Kern ist radial durch eine Kernumfassung und einen Reflektor umgeben. Die axialen Reflektoren enthalten Kühlmittel jeweils mit Ein- und Austrittstemperatur. Der Einfluss von Abstandshaltern wurde nicht berücksichtigt. Die aktive Kernzone ist in 23 axiale Zonen unterteilt. Aufgrund der Symmetrie umfasst das Modell nur ein Viertel des Kerns. Das MCNP-Geometrie-Modell ist in Abb. 6-5 dargestellt.

Die Brennstab- und Brennelemente-Gitter werden durch die „Repeated Structure“-Option des MCNP-Codes modelliert. Es wurden die mit ATHLET berechneten Brennstoff- und Moderatortemperaturen berücksichtigt. Die Berechnung der radial gemittelten axialen Leistungsverteilung wurde für jedes Brennelement mittels einer speziellen „User-Tally-Subroutine“ berechnet. Es wurde JEFF-3.1-Querschnittsbibliothek verwendet /NEA 06/. Diese Bibliothek enthält die Querschnitte für 10 Temperaturen und für die Streuung thermischer Neutronen für H in H<sub>2</sub>O für 20 Temperaturen (durch IKE erstellt /MAT 05/). Die Querschnitte für die verschiedenen lokalen Temperaturen wurden intern auf der Grundlage der benachbarten Gittertemperaturen interpoliert (in MCNP5), siehe auch /BER 10/. Die interne Interpolation vereinfacht die Geometrie-Darstellung für MCNP, d. h. die axiale Variation der Kühlmitteltemperatur und der Dichte sowie die Brennstofftemperatur muss nicht für die MCNP-Eingabe formuliert werden. Die Variation dieser Parameter wird beim „Neutronen-Tracking“ durch die Brennstab- und Brennelemente-Gitter berücksichtigt.



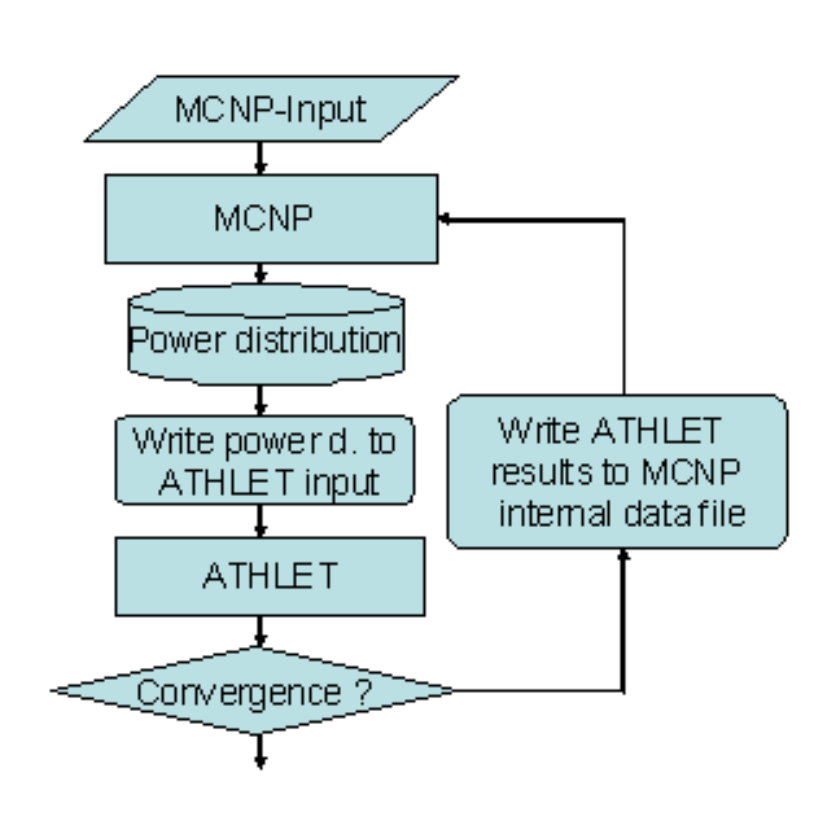
**Abb. 6-5** MCNP-Geometriemodell für den DWR-MOX/ $\text{UO}_2$ -Kerntransientenbenchmark

### Thermohydraulik-Modell

Im ATHLET-Kernmodell für die Thermohydraulik wurde jedes Brennelement durch einen repräsentativen Kanal mit einer mittels MCNP5 berechneten axialen Leistungsverteilung berücksichtigt. Jeder repräsentative Brennstab wurde in 4 radiale Zonen (mit identischer Leistungsdichte) unterteilt. Die thermischen Eigenschaften für  $\text{UO}_2$  und MOX wurden aus der Benchmark-Spezifikation übernommen. Alle Kanäle wurden mit einem Kontrollvolumen im unteren Plenum und oberen Plenum des Reaktors verbunden. Die Massenströme einzelner Kanäle wurden mittels Druckabfalliteration berechnet. Es wurden keine Querströmungen zwischen BE-Kanälen angenommen. Der Eingangsdruck betrug 15,5 MPa, der Ausgangsdruck 15,0 MPa.

## Kopplung von MCNP5 und ATHLET

MCNP5 und ATHLET wurden mit den beschriebenen Modellen nacheinander ausgeführt. Es wurde ein Schnittstellenmodul entwickelt, über das die axiale Leistungsverteilung pro Brennelement vom MCNP zur ATHLET-Eingabe und die Ergebnisse (axiale Kühlmitteldichte und Temperatur sowie Brennstofftemperaturverteilungen pro Brennelement) zurück an MCNP transferiert werden. Diese Ergebnisse werden für die interne Funktion verwendet. Die MCNP-Eingabe muss nicht zwischen verschiedenen Iterationsschritten verändert werden. Abb. 6-6 zeigt ein Flussdiagramm des gekoppelten Systems.



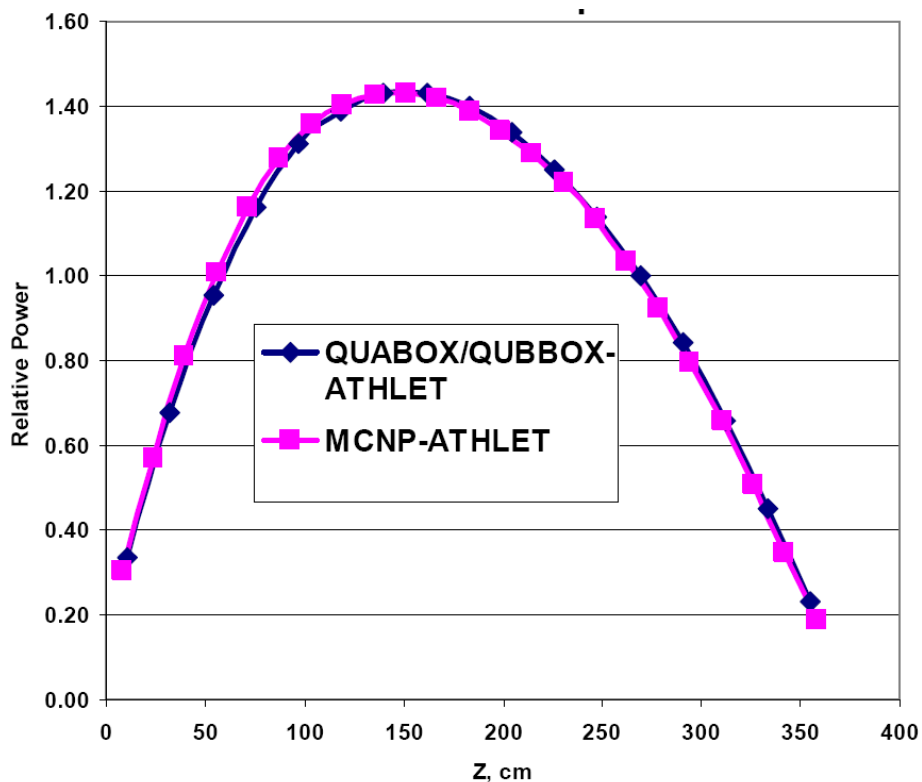
**Abb. 6-6** Flussdiagramm für die MCNP/ATHLET-Kopplung

## Ergebnisse

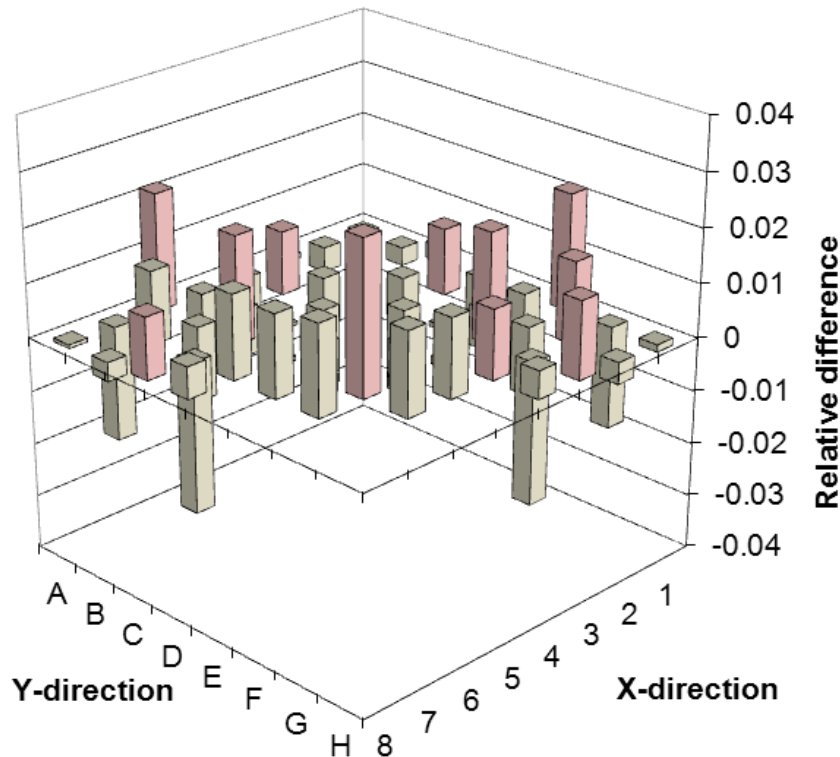
Zur Demonstration der Methode wurde der Volllastzustand des Benchmarks analysiert. Beginnend mit konstanten Temperaturen wurde der stationäre Zustand nach wenigen Iterationen erreicht. Das MCNP5-Programm wurde auf einem Cray-XT5-

Parallelrechner mit der MPI-Version mit 256 Prozessoren ausgeführt. Das MCNP/ATHLET-Ergebnis wurde mit entsprechenden Ergebnissen aus der Anwendung von PARCS /DOW 02/ (vom Benchmark) und QUABOX/CUBBOX-ATHLET (QC) /LAN 04/ verglichen. Abb. 6-7 zeigt die über den Kern gemittelte axiale Leistungsverteilung aus MCNP/ATHLET und QC/ATHLET. Die axiale nicht symmetrische Form ist auf die Änderung des Kühlmittelzustands von der Kernunterkante zur Kernoberkante zurückzuführen. Es besteht nur ein kleiner Unterschied zwischen der QC- und der MCNP-Lösung.

Die axial gemittelten BE-Leistungen wurden ebenfalls berechnet und mit den QC-Ergebnissen verglichen. Die Vergleiche (die relativen Unterschiede) sind in Abb. 6-8 dargestellt. Diese Unterschiede sind vergleichsweise gering und liegen in der Größenordnung der Differenzen zwischen QC und PARCS. Im Durchschnitt sind die Differenzen für die MOX-Brennelemente etwas größer (rot markiert) als für die UO<sub>2</sub>-Brennelemente. Weitere integrale Ergebnisse, wie durchschnittliche Temperatur von Brennstoff und Moderator, stimmen ebenfalls gut überein.



**Abb. 6-7** Axiale Leistungsverteilung für den Volllast-Heiß-Zustand



**Abb. 6-8** Relative Differenz zwischen QC und der MCNP/ATHLET-Lösung für die axial gemittelte Brennelement-Leistung

MCNP ermöglicht die Berechnung von detaillierten Ganzkernmodellen auch unter realistischen Bedingungen, wie z. B. variierende Kühlmitteldichten, Temperaturen und raumabhängige Brennstofftemperaturen. Wichtig für die Handhabung bei der MCNP-Eingabe ist es, dass die Interpolation von Querschnitten und thermischen Neutronenstreudaten intern durchgeführt wird, da auch im Falle vereinfachter axial und radial konstanter Brennstoffdichten eine große Anzahl verschiedener Materialspezifikationen erforderlich ist, wenn die Standardeingabemethode angewandt wird. Die Methode der Querschnittsinterpolation zwischen Gitterpunkten nach den lokalen Brennstoff- und Moderatortemperaturen hat sich als genau und effektiv für das analysierte DWR-Gitter erwiesen. Die für den Benchmark festgelegten Vereinfachungen sind unter den Gesichtspunkten der Handhabung und des Speicherbedarfs nicht erforderlich. Vielmehr könnten die gekoppelten Berechnungen mit einem viel höheren Grad an Heterogenität (z. B. im Innern des Brennelements) durchgeführt werden.

## **7 AP4: Quantifizierung der methodischen Unsicherheiten und der Unsicherheiten in den nuklearen Basisdaten**

### **7.1 AP 4.1: Einsatz von Methoden zur Unsicherheitsanalyse für Zell-Spektalrechnungen und Brennelementrechnungen**

Heute werden auf Monte Carlo oder deterministischen Methoden beruhende hochgenaue Transportcodes zur Kritikalitätsanalysen verwendet, während grobmaschige Methoden zur Analyse von Transienten verwendet werden. Beide Techniken erweisen sich als sehr erfolgreich bei der Simulation nuklearer Anlagen. Doch obwohl Codes wie MCNP /BRO 02/, DORT und TORT /PAU 03, RHO 97/ ausgiebig getestet und validiert wurden, sind sie nicht in der Lage, exakte Lösungen für ein physikalisches Problem geben, da sie auf Parametern, die mit Unsicherheiten behaftet sind, basieren. Auch die nuklearen Wirkungsquerschnitte sind z. T. mit großen Unsicherheiten behaftet. Eine Quantifizierung dieser Unsicherheiten findet sich beispielsweise in Kovarianzbibliotheken, die zusammen mit den nuklearen Daten erstellt werden. In dieser werden nicht nur die einzelnen Unsicherheiten, sondern auch deren Abhängigkeit untereinander quantifiziert.

Um die Auswirkung dieser Unsicherheiten in berechneten Werten für nukleare Systeme zu quantifizieren – um beispielsweise zuverlässige Sicherheitsmargen zu bestimmen –, ist es daher notwendig Unsicherheitsanalysen unter Berücksichtigung der nuklearen Kovarianzdaten durchzuführen. In diesem Gebiet basieren die meisten der heutigen Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen auf Störungstheorie, welche mit Hilfe direkter und adjungierter Neutronenflüsse die Unsicherheiten der Ausgabegrößen berechnet /WIL 09, JES 09, KOD 01/. Diese Techniken sind hauptsächlich für die Berechnung der Unsicherheiten von Multiplikationsfaktoren von kleinen, kritischen Anordnungen entwickelt worden. Solche kompakten kritischen Experimente sind nicht unbedingt repräsentativ für Leistungsreaktoren bei Betriebsbedingungen. Daher wurde im Rahmen dieses Forschungsprojektes die XSUSA-Methode entwickelt, die auf einem statistischen Ansatz beruht. Mit dieser Methode ist es möglich, die Berechnungsunsicherheiten in allen Phasen der nuklearen Rechenkette – von der Stabzellrechnung bis zur Kerntransiente – zu bestimmen.

## Die XSUSA-Methode

Der zentrale Teil der Methode ist die Verwendung des Moduls MEDUSA, aus der GRS-Statistiksoftware SUSAS /KRZ 94, GLA 08/. Mit Hilfe einer Kovarianzmatrix, den Verteilungsfunktionen der unsicheren Parameter und einem Zufallszahlengenerator, erstellt MEDUSA einen Satz von  $N$  variierten Datensätzen, wobei alle unsicheren Parameter gleichzeitig variiert werden. Jede der so erstellten Parametersätze dient als ein unabhängiger Eingabeparametersatz für die anschließenden  $N$  Codesimulationen. Der Vorteil dieser Technik ist, dass die Anzahl der benötigten Codeberechnungen unabhängig von der Anzahl der unsicheren Parameter ist. Die benötigte Zahl der Rechenläufe ist nur von den geforderten Wahrscheinlichkeitsaussagen und deren statistischen Konfidenzintervallen gegeben. Die erforderliche Mindestanzahl der benötigten Codeberechnungen  $n$  kann mit Hilfe der Formel von Wilks /WIL41/ bestimmt werden:

$$1 - a n \geq b \quad (7.1-1)$$

Dabei ist  $b$  das Konfidenzniveau, dass die (in den  $n$  Rechenläufen) maximale berechnete Ausgabegröße eines bestimmten berechneten Wertes (z. B. eine Reaktorleistung) mit einer Wahrscheinlichkeit von  $a$  nicht überschritten wird. Für einen Satz von  $n = 90$  Variationen beträgt das Konfidenzniveau beispielsweise 99 %, dass die maximale Größe eines berechneten Wertes mit einer Wahrscheinlichkeit von 95 % nicht überschritten wird. Im Prinzip ist die Methode universell, d. h. es spielt keine Rolle welcher Simulationscode für verwendet wird. Bisher wurde die Methode in der GRS vor allem bei thermo-hydraulischen Rechnungen mit einer kleinen Anzahl von unsicheren Parametern angewendet. Bei der hier entwickelten Anwendung der Methode für nukleare Daten der wird der Parameterraum sehr groß und kann je nach Anwendung mehrere zehntausend Einträge haben.

XSUSA wurde für die Benutzung der nuklearen Kovarianzdaten aus dem SCALE-6-Codepaket /SCA 09/ entwickelt. Diese Kovarianzdaten sind in 44 Energiegruppen unterteilt, so dass die Kovarianzmatrix einer Größe von  $(m \cdot 44) \times (m \cdot 44)$  hat, wobei  $m$  die Anzahl der betrachteten, unterschiedlichen Kernreaktionen ist. Zwei kleinere Anpassungen mussten auf einige Matrizen angewendet werden, bevor variierte Parameter generiert werden konnten. Erstens waren einige der Matrizen nicht positiv semidefinit – wahrscheinlich aus numerischen Gründen. Da diese Eigenschaft für Kovarianzmatrizen zwingend erforderlich ist, wurden die Nebendiagonalelemente leicht verändert. Zweitens ist die Verteilungsfunktion der Unsicherheiten unbekannt und als erste

Annahme wurde daher eine Normalverteilung verwendet. Da diese Verteilungsfunktionen theoretisch bis unendlich reicht, könnten einige der erzeugten, variierten Parameter negativ werden. Die hier betrachteten Parameter stellen allerdings Wirkungsquerschnitte dar, die physikalischen Gründen nicht negativ werden können. Um dieses Problem zu umgehen, wurden die Verteilungen auf beiden Seiten so abgeschnitten, dass keine negativen Werte entstehen können, der Mittelwert der Verteilung jedoch erhalten bleibt. Nach diesen Anpassungen wurde eine Reihe von  $N$  variierten Parameter-Sets für jede Rechnung erstellt.

Die erhaltenen variierten Parameter-Sets stellen relative Variationen dar, die zu den jeweiligen unvariierten nuklearen Daten hinzugezählt werden müssen. Zunächst müssen diese jedoch die normale Resonanzbehandlung durchlaufen. Diese wird im SCALE-System mittels des BONAMI-Moduls für die ungelösten Resonanzen und mit Hilfe des CENTRM-Moduls für die aufgelösten Resonanzen durchgeführt. Danach werden die Abweichungen zu den jeweiligen Wirkungsquerschnitten hinzugezählt. Doch bevor die variierten Parametersätze auf eine Transportrechnung angewendet werden können, muss eine weitere Konsistenzprüfung durchgeführt werden: die Summenregeln der Wirkungsquerschnitte müssen erfüllt sein und außerdem müssen die zweidimensionalen Querschnitte der Streumatrizen mit ihren eindimensionalen Gegenstücken kompatibel sein. Beides wird von der XSUSA-Methode berücksichtigt.

Im nächsten Schritt werden  $N$ -Codeberechnungen durchgeführt. Wie bereits oben ausgeführt, ist die Methode in Bezug auf den für die endgültige Simulationen verwendeten Transportcode universell. Unten werden Beispiele für die Verwendung von XSUSA mit den Codes XSDRN, NEWT, NEWT/QUABOX-CUBBOX und KENO Va gezeigt. Bei der Anwendung von Monte Carlo-Methoden, ist vom Benutzer sicherzustellen, dass die aleatorische Unsicherheit der  $N$  Monte Carlo-Rechnungen viel kleiner ist als die epistemische Unsicherheit, die mit XSUSA ausgerechnet werden soll.

In einem letzten Schritt müssen die  $N$  Ergebnisse mit statistischen Mitteln ausgewertet werden. Im Prinzip kann die Unsicherheit für jeden Ausgabewert des verwendeten Neutronencodes berechnet werden:  $k_{\text{eff}}$ , Reaktionsraten, homogenisierte Querschnitte, Leistungsverteilungen, Diskontinuitätsfaktoren etc. Es ist jedoch zu berücksichtigen, dass diese statistischen Unsicherheitswerte selbst eine Unsicherheit aufweisen /KEN04/ /A9994/. Unter der Annahme, dass der betrachtete Ausgabewert normal verteilt ist, kann das zweiseitige Konfidenzintervall  $((100-\alpha) \%)$  der Varianz  $\sigma^2$  der Grund-



gesamtheit, mit Hilfe der Chi-Quadrat-Verteilung und die Stichprobenvarianz  $S^2$  berechnet werden:

$$\frac{(N-1)S^2}{\chi_{\alpha/2}^2} \leq \sigma^2 \leq \frac{(N-1)S^2}{\chi_{1-\alpha/2}^2} \quad (7.1-2)$$

Das Konfidenzintervall für die Standardabweichung  $\sigma$  kann leicht mit Hilfe der Quadratwurzel aus den oben genannten Werten berechnet werden. Wie in der obigen Formel zu sehen, ist der relative Wert  $S^2/\sigma^2$  (oder  $S/\sigma$ ) der oberen und unteren Grenze nur durch die Anzahl der Proben  $N$  bestimmt. Es ist deshalb aufschlussreich, einige Beispiele zu berechnen und ein Gefühl für die relative Größe des Konfidenzintervalls zu bekommen. Ausgewählte Werte für eine 95 %/95 %-Konfidenzintervall sind in Tab. 7-1 dargestellt. Es ist ersichtlich, dass die relative Unsicherheit von ~ 15 % bei  $N = 100$  auf ca. 6 % bei  $N = 500$  und auf ~ 4,5 %  $N = 1000$  sinkt. Die Anzahl der Berechnungen muss also entsprechend gewählt werden.

**Tab. 7-1** Ausgewählte Werte für das 95 % Konfidenzintervall der relativen Standardabweichung

<b>N</b>	<b>100</b>	<b>500</b>	<b>1000</b>
lower limit for $\sigma/S$	1.15	1.07	1.05
upper limit for $\sigma/S$	0.87	0.94	0.96

Die statistische Auswertung der Ausgabewerte erlaubt auch die Berechnung des Korrelationskoeffizienten nach Pearson  $R$  zwischen zwei unterschiedlichen Ausgabewerten. Da dieser ebenfalls den Gesetzen der Statistik unterworfen ist, kann auch dieser Wert nicht ohne Unsicherheit durch den begrenzten Stichprobenumfang ermittelt werden. Unter der Annahme, dass beide Ausgabewerte normal verteilt sind, kann das Konfidenzintervall für  $R$  unter Verwendung einer Fisher-Transformation berechnet werden. Die Größe des Intervalls ist abhängig von der Anzahl der Proben  $N$  und dem statistischen Korrelationskoeffizienten  $R$  selbst. In Tab. 7-2 sind beispielhaft einige Werte aufgelistet. Es ist zu beachten, dass der Pearson-Koeffizient nur Auskunft über eine lineare Beziehung zwischen zwei Ausgabewerten gibt, und daher in die Irre führen kann. In diesen Fällen müssen andere statistische Parameter wie die Rangkorrelation nach Spearman oder andere Methoden aus SUSA angewandt werden.

**Tab. 7-2** Ausgewählte Werte für das 95 % Konfidenzintervall des Pearson Korrelationskoeffizienten

N →	100		500		1000	
	lower limit	upper limit	lower limit	upper limit	lower limit	upper limit
0.9	0.855	0.932	0.882	0.915	0.888	0.911
0.5	0.337	0.634	0.431	0.563	0.452	0.545
0.1	-0.098	0.291	0.012	0.186	0.038	0.161

### Anwendung der XSUSA-Methode auf eine Stabzellrechnung

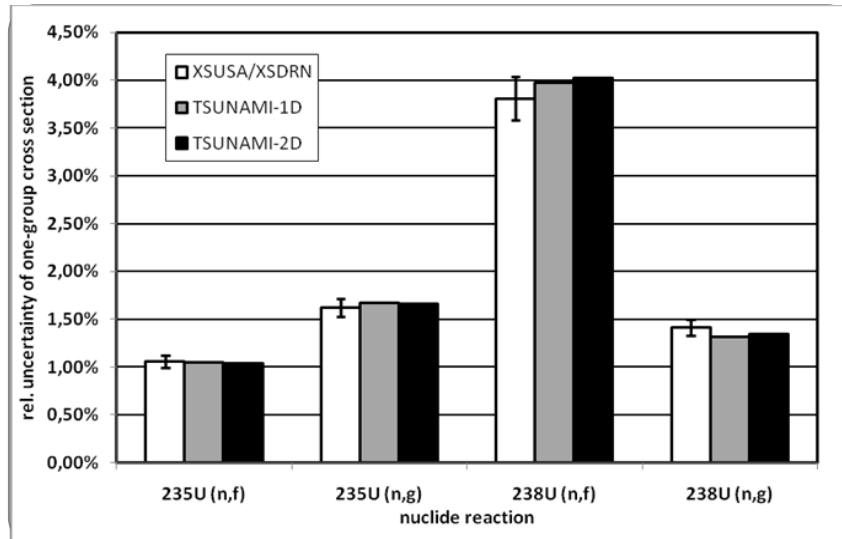
Das erste Anwendungsbeispiel ist das SWR-Brennstabmodell aus Phase 1-1 des OECD UAM Benchmarks /IVA 07/. Es besteht aus einem einzigen UO<sub>2</sub> Brennstab (2,93 % <sup>235</sup>U) bei Nulllast heiß und mit reflektierenden Randbedingungen. Der Moderator- und die Brennstofftemperatur betragen 552,833 K, und die Moderatordichte 753,978 kg/m<sup>3</sup>. Für die Modellierung wurde der 1D-Code XSDRN zusammen mit einer Wirkungsquerschnittbibliothek in 238 Energiegruppen verwendet. Ein Satz von N = 500 Rechenläufen wurde berechnet und analysiert.

**Tab. 7-3** Vergleich von Eingruppen-Querschnitten und ihren Unsicherheiten für die SWR-Stabzelle des OECD UAM-Benchmarks bei Nulllast heiß

		k <sub>eff</sub>	<sup>1</sup> H (n,n)	<sup>235</sup> U (n,f)	<sup>235</sup> U (n,γ)	<sup>238</sup> U (n,f)	<sup>238</sup> U (n,γ)
XSUSA/XSDRN	mean values	1.3386604	16.0982 b	49.3646 b	10.7584 b	0.0940 b	0.8367 b
	1σ	0.56 %	0.88 %	1.06 %	1.62 %	3.81 %	1.41 %
TSUNAMI-1D	value	1.33612		49.0398 b	10.6421 b	0.0949 b	0.8399 b
	1σ	0.52 %		1.05 %	1.67 %	3.97 %	1.32 %
TSUNAMI-2D	value	1.33952		49.0353 b	10.6186 b	0.0949 b	0.8301 b
	1σ	0.52 %		1.04 %	1.66 %	4.02 %	1.34 %

Zu den im UAM Benchmark spezifizierten Ausgabegrößen gehören u.a. die Unsicherheiten von k<sub>eff</sub>, und die mikroskopischen Eingruppenwirkungsquerschnitte für Spaltung

und Neutroneneinfang. Tab. 7-3 und zeigen die mit Hilfe von XSUSA berechneten Werte und vergleichen sie mit Ergebnissen von TSUNAMI und TSUNAMI-2D. Es ist ersichtlich, dass die Werte in guter Übereinstimmung sind.



**Abb. 7-1** Vergleich von Eingruppen-Querschnitten und ihren Unsicherheiten für die SWR-Stabzelle des OECD UAM-Benchmarks. Die Fehlerbalken symbolisieren ein 95 %-Konfidenzintervall

Die Betrachtung des Korrelationskoeffizienten  $R$  zwischen zwei Eingruppenquerschnitten (vgl. Tab. 7-4) liefert weitere Informationen. Zum Beispiel wird ersichtlich, dass der elastische Streuquerschnitt von  $^1\text{H}$  stark mit dem Spaltquerschnitt von  $^{235}\text{U}$  korreliert ( $R = 0,95$ ). Da diese beiden Querschnitte keine Korrelationen in den Eingangsgrößen aufweisen, muss dieser Sachverhalt mit Hilfe indirekter Auswirkungen – aufgrund von Variationen im Neutronenfluss – begründet werden. Die Neutronenflussvariationen spielen eine wichtige Rolle für die Magnitude der Unsicherheiten. In Abb. 7-2, wo die beiden mikroskopischen Querschnitte gegeneinander aufgetragen sind, wird die starke Korrelation zwischen diesen beiden Größen nochmals veranschaulicht. Jeder einzelne Kreis steht für eine von  $N = 500$  XSDRN-Rechenläufen. Es ist klar zu erkennen, dass sie alle in der Nähe einer Geraden liegen, und somit eine lineare Abhängigkeit andeuten.

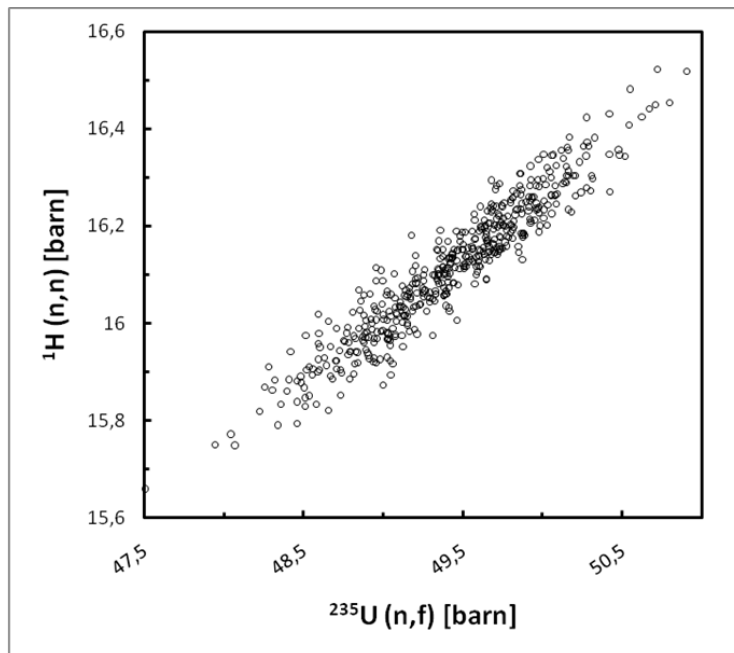
**Tab. 7-4** Statistische Korrelationen R für die SWR-Stabzelle des OECD UAM Benchmarks

	$^1\text{H} (n,n)$	$^{235}\text{U} (n,f)$	$^{235}\text{U} (n,\gamma)$	$^{238}\text{U} (n,f)$	$^{238}\text{U} (n,\gamma)$
$^1\text{H} (n,n)$	1.00	0.95	0.55	-0.90	0.49
$^{235}\text{U} (n,f)$		1.00	0.41	-0.88	0.34
$^{235}\text{U} (n,\gamma)$			1.00	-0.52	0.18
$^{238}\text{U} (n,f)$				1.00	-0.57
$^{238}\text{U} (n,\gamma)$					1.00

In Tab. 7-5 sind einige der wichtigsten Beiträge zur Unsicherheit von  $k_{\text{eff}}$  ( $\Delta k/k$ ) aufgelistet und mit Werten aus TSUNAMI-2D-Berechnungen verglichen. Die XSUSA/XSRDN Werte wurden mit Hilfe von „one-at-a-time“-Variation der einzelnen Querschnitte erhalten. Jede dieser Serie besteht aus  $N = 500$  Rechenläufen und sind mit einer relativen Unsicherheit von  $S \sim 6\%$  behaftet (siehe Tab. 7-1 oben). Innerhalb dieser Fehlergrenzen wird eine gute Übereinstimmung zwischen den beiden Methoden erreicht. Die Untersuchungen dieses einfachen Stabzellproblems zeigen, dass XSUSA für die Berechnungen der Modellunsicherheiten, die durch die Unsicherheiten in den nuklearen Basisdaten stammen, geeignet ist. Die erhaltenen Ergebnisse sind in guter Übereinstimmung mit etablierten Rechenmethoden wie TSUNAMI.

**Tab. 7-5** Vergleich der Beiträge zur Unsicherheit  $\Delta k/k$

	nuclide-reaction					
	$^{238}\text{U} (n,\gamma)$	$^{235}\text{U} (\nu)$	$^{235}\text{U} (n,\gamma)$	$^{238}\text{U} (n,n')$	$^{235}\text{U} (\chi)$	$^1\text{H} (n, \gamma)$
XSUSA/XSRDN	0.336 %	0.271 %	0.182 %	0.135 %	0.092 %	0.029 %
TSUNAMI-2D	0.329 %	0.271 %	0.181 %	0.127 %	0.085 %	0.029 %



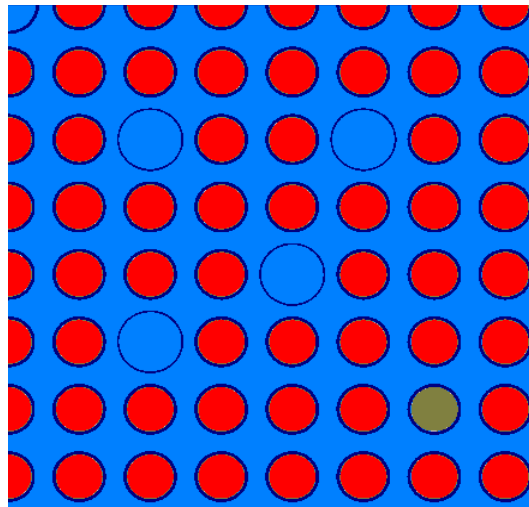
**Abb. 7-2** Eingruppen-Querschnitt für  $^1\text{H}(n,n)$  aufgetragen gegen  $^{235}\text{U}(n,f)$  für  $N = 500$  Rechenläufe.

### Anwendung der XSUSA-Methode auf ein Brennelement

Für die Anwendung auf ein zweidimensionales Problem wurde das DWR-Brennelement (TMI-1) der Übung 1-2 des OECD UAM-Benchmarks mit dem Transportcode NEWT aus SCALE-6 modelliert. Eine Darstellung der Anordnung ist in Abb. 7-3 zu sehen. Die  $15 \times 15$  Stabzellenanordnung besteht aus 204  $\text{UO}_2$  Stabzellen (4,85 %  $^{235}\text{U}$ ), vier Stabzellen mit brennbarem Gift (4,123 %  $^{235}\text{U}$ , 2 Gew.-%  $\text{Gd}_2\text{O}_3$ ), 16 Steuerstabführungsrohren und einem Instrumentierungsrohr. Die Randbedingungen wurden auf allen Seiten reflektierend und die Temperaturen als Nulllast heiß angenommen.

Für den UAM-Benchmark wurden die Unsicherheiten von  $k_{\text{eff}}$ , homogenisierten Zweigruppen-Wirkungsquerschnitten, Reaktionsraten von Absorption und Spaltung, Diskontinuitätsfaktoren, sowie die  $\lambda$ - und  $\beta$ -Parameter für verzögerte Neutronen berechnet. Die Grenze zwischen thermischer und schneller Energiegruppe wurde auf 3,0 eV gesetzt, so dass es keine Aufwärtsstreuung gibt. Die berechneten Mittelwerte und Standardabweichungen sind in Tab. 7-6 aufgeführt.

Man erkennt, dass die Unsicherheit des Multiplikationsfaktors  $\Delta k_{\text{eff}} = 0,49 \%$  ist und damit etwa den gleichen Wert hat wie die oben berechnete UOX-Stabzelle. Dies ist eine direkte Konsequenz aus der Homogenität des Brennelementes. Abb. 7-4 vergleicht das Histogramm von  $k_{\text{eff}}$  mit einer Normalverteilung ( $f(x, \mu, \sigma^2)$  mit  $\sigma = S_{k_{\text{eff}}}$  und  $\mu = k_{\text{eff}}$ ). Wie zu erkennen ist, gibt die diskrete Verteilung der  $k_{\text{eff}}$ -Ausgabewerte in guter Näherung die Normalverteilung wieder, was auch mit einem Lillieforstest bestätigt werden kann.



**Abb. 7-3** Darstellung eines Viertel des DWR-Brennelementes des OECD UAM-Benchmarks

Die Standardabweichungen für die homogenisierten Zwei-Gruppen-Wirkungsquerschnitte überschreiten nicht 1,3 %. Weiterhin kann man feststellen, dass die Reaktionsraten von Absorption und Spaltung viel größeren Unsicherheiten aufweisen als ihre jeweiligen Querschnitte allein. Dies ist eine Konsequenz der Unsicherheiten im Neutronenfluss.

Die Werte für die verzögerten Neutronen Parameter wurden in NEWT mit Hilfe der Formel

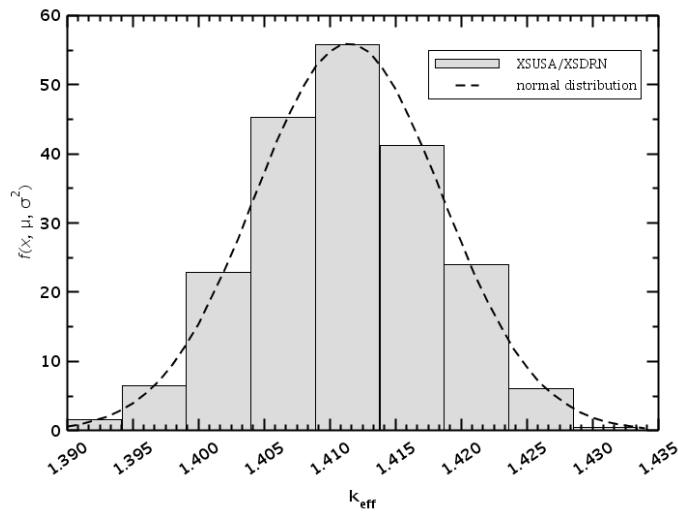
$$\tilde{\beta}_k = \sum_{g,i} \frac{\phi_{g,i}}{\phi_{\text{tot}}} \cdot \Sigma_{\text{fis}}^g \cdot \rho \cdot \beta_{g,k} \quad (7.1-3)$$

berechnet. Dabei ist  $g$  der Index der Energiegruppe,  $i$  ist der Index einer Rechenzelle und  $k$  die Gruppennummer von  $\beta$ . Die einzelnen Werte für  $\beta_{g,k}$  wurden nicht variiert. Somit sind die erhaltenen Unsicherheiten der Kinetikparameter nur auf die indirekten Auswirkungen des variierenden Neutronenflusses und der variierenden Spaltquerschnitte zurückzuführen.

**Tab. 7-6** Mittelwerte und Unsicherheiten der verschiedenen neutronischen Parameter für das DWR-Brennelement. Auf der linken Seite sind jeweils die Querschnitte der schnellen, auf der linken Seite der thermischen Energiegruppe dargestellt. Die Parameter für die verzögerten Neutronen sind in sechs Gruppen aufgeteilt

mean value 1S	$k_{\text{eff}}$ 1.41123 0.49%							
mean value 1S	$\Sigma_{\text{total}}$ 5.43E-01 0.94%		$\Sigma_{\text{transport}}$ 1.31E+00 0.09%		$D$ 2.99E-01 1.04%		$\Sigma_{\text{absorption}}$ 9.46E-01 0.09%	
mean value 1S	$v\Sigma_{\text{fission}}$ 7.96E-03 0.62%		$k\Sigma_{\text{fission}}$ 1.55E-01 0.44%		$\Sigma_{\text{fission}}$ 9.79E-14 0.40%		$\text{rel. flux } \phi$ 1.97E-12 0.30%	
mean value 1S	$1 \rightarrow 1$ 5.14E-01 0.93%		$1 \rightarrow 2$ 1.94E-02 1.23%		$2 \rightarrow 1$ 0.00E+00 0.10%		$2 \rightarrow 1$ 1.22E+00 0.87%	
mean value 1S	$\Sigma_{\text{absorption}} \phi$ 8.17E-03 0.87%		$\Sigma_{\text{fission}} \phi$ 1.59E-02 0.98%		$\Sigma_{\text{absorption}} \phi$ 2.59E-03 0.53%		$\Sigma_{\text{fission}} \phi$ 1.12E-02 1.08%	
mean value 1S	2.25E-04 0.01%		1.50E-03 0.15%		delayed neutron spectrum $\lambda$ 1.38E-03 0.29%		inv. velocity 2.73E-08 1.14%	
mean value 1S	2.89E-03 0.38%		9.79E-04 0.88%		3.25E-04 0.87%		2.03E-06 0.07%	
mean value 1S	1.25E-02 0.02%		3.08E-02 0.01%		delayed neutron spectrum $\lambda$ 1.14E-01 0.07%		ADF 3.07E-01 1.02E+00	
	0.06%		0.09%		9.87E-01 0.04%		1.02E+00 0.02%	

Weiterhin wurden die Unsicherheiten der Energieverteilung untersucht. Wie bereits erwähnt, hat das untersuchte Brennelement eine fast homogene Stabzellenanordnung und damit auch eine nahezu gleichmäßige Leistungsverteilung mit nur einem Sprung an der Position des Stabs mit  $\text{Gd}_2\text{O}_3$  (s. Abb. 7-5). Für die Unsicherheiten der Leistungsverteilung hat diese homogene Anordnung der Brennstäbe ebenfalls Konsequenzen: wenn die nuklearen Daten in einem bestimmten Rechenlauf so variiert wurden, dass die sich Spaltrate in einer UOX-Stabzelle erhöht, wird dies ebenfalls in allen anderen UOX-Stabzellen der Fall sein, denn alle UOX-Brennstäbe besitzen das gleiche Nuklidinventar und damit sind ihre mikroskopischen Wirkungsquerschnitte vollständig miteinander korreliert. Die relative Leistungsverteilung im Brennelement bleibt daher – mit Ausnahme der mit  $\text{Gd}_2\text{O}_3$  vergifteten Stabzelle – nahezu unverändert. Ein anderes Verhalten kann für heterogene Setups erwartet werden, wie später für Ganzkernrechnungen gezeigt wird.



**Abb. 7-4** Histogramm der statistischen Werte von  $k_{eff}$  verglichen mit einer Normalverteilung

	1.09	1.03	1.01	1.00	1.00	0.99	0.99
1.09	1.06	1.08	1.03	1.03	1.06	1.01	1.00
1.03	1.08		1.10	1.10		1.05	1.01
1.01	1.03	1.10	1.08	1.11	1.09	1.00	0.99
1.00	1.03	1.10	1.11		1.05	0.96	0.96
1.00	1.06		1.09	1.05	0.96	0.88	0.92
0.99	1.01	1.05	1.00	0.96	0.88	0.33	0.87
0.99	1.00	1.01	0.99	0.96	0.92	0.87	0.87

	0.02%	0.02%	0.02%	0.02%	0.01%	0.02%	0.01%
0.02%	0.02%	0.02%	0.02%	0.01%	0.02%	0.01%	0.01%
0.02%	0.02%		0.03%	0.02%		0.02%	0.01%
0.02%	0.02%	0.03%	0.02%	0.03%	0.03%	0.01%	0.01%
0.02%	0.01%	0.02%	0.03%		0.01%	0.02%	0.01%
0.01%	0.02%		0.03%	0.01%	0.02%	0.05%	0.03%
0.02%	0.01%	0.02%	0.01%	0.02%	0.05%	0.49%	0.06%
0.01%	0.01%	0.01%	0.01%	0.01%	0.03%	0.06%	0.03%

**Abb. 7-5** Mittelwert der Leistungsverteilung (links) und Unsicherheiten (rechts) des DWR-Brennelements des OECD UAM-Benchmarks bei Nulllast heiß



## 7.2 AP 4.2: Einsatz von Methoden zur Unsicherheitsanalyse für Kerntransienten

In Ganzkernberechnungen für gemischte Uran/MOX-Kerne wurden deutliche Unterschiede in den radialen Leistungsverteilungen aus Rechnungen mit unterschiedlichen nuklearen Daten beobachtet, siehe oben. Daher wurden erste Unsicherheitsanalysen mit der GRS/SUSA-Methode für eine vereinfachte zylindrische Kernanordnung mit räumlich getrennten Uran- und MOX-Bereichen durchgeführt. Die ermittelten Unsicherheiten für die Multiplikationsfaktoren der entsprechenden Brennstabzellen stimmen mit den Werten aus TSUNAMI-1D-Berechnungen überein. Für die berechnete radiale Leistungsverteilung einer Anordnung von der Größe eines kommerziellen Reaktorkerns ergeben sich substantielle Unsicherheiten, hauptsächlich aus den Kovarianzdaten der mittleren Anzahl von Neutronen pro Spaltung in Pu-239. Die entsprechenden Ergebnisse wurden auf der M&C 2009 /LAN 09/ und insbesondere auch auf dem Workshop der UAM (Uncertainty Analysis in Modeling) OECD Benchmark-Initiative an der Penn State University vorgestellt /KRZ 09/.

Das Programmsystem XSUSA (Cross Section Uncertainty and Sensitivity Analysis), das auf dem GRS-Programmsystem SUSA zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse unter Verwendung nuklearer Kovarianzdaten beruht, wurde weiterentwickelt. Inzwischen werden zur Anwendung die auf ENDF/B-VII basierenden nuklearen Daten sowie die Kovarianzmatrizen aus dem SCALE- 6-Programmsystem eingesetzt. Dazu werden die 238-Gruppen-Datenbibliotheken auf die 44-Gruppen-Struktur der Kovarianzmatrizen vorkondensiert. Die Variation der nuklearen Daten wird nach der Spektralrechnung durchgeführt, wobei für die Varianzen und Kovarianzen der Unsicherheiten Gaußverteilungen angenommen werden. Die Werkzeuge zur Variation sowie zur Handhabung der nuklearen Daten während der gesamten Berechnungskette wurden bereitgestellt. Nach der Variation von Reaktionen mit Unsicherheitsdaten wird die Konsistenz der Wirkungsquerschnitte wiederhergestellt. Damit ist jetzt die Berücksichtigung aller Unsicherheiten, auch in den Daten für elastische und inelastische Streuung, möglich. Die Methode und Anwendungen wurden auf dem 2nd International Workshop On Nuclear Data Evaluation For Reactor Applications vorgestellt /ZWE 09c/.

Kerntransienten werden üblicherweise mit Diffusionsrechnungen für den Reaktorkern durchgeführt. Dazu müssen Wirkungsquerschnittsbibliotheken mit zweidimensionalen Transportrechnungen erstellt werden. Um in Zukunft Unsicherheitsanalysen bei Kerntransienten durchführen zu können, wurde XSUSA weiterentwickelt. Mittels des

SCALE6-Programms NEWT können nun variierte Wirkungsquerschnittsbibliotheken für den GRS-Kernsimulator QUABOX/CUBBOX erstellt werden. Die Berechnungskette wurde weiter automatisiert; die vollständige Integration in das SCALE-6-Programmsystem ist geplant. Anwendungsfälle wurden bis jetzt mit den Neutronentransportcodes XSDRN (1-d), NEWT (2-d), sowie den Monte-Carlo-Codes KENO und MCNP im Multigruppenmodus (3-d) behandelt. Die Validierung erfolgt hauptsächlich durch Vergleich von Unsicherheiten in Multiplikationsfaktoren und Reaktivitätsdifferenzen mit Werten, die mit TSUNAMI aus dem SCALE-6-System berechnet wurden. Die Methode und Anwendungen wurden auf der Jahrestagung Kerntechnik vorgestellt /ZWE 10a/. Die Anwendung der XSUSA-Methode für Abbrandrechnungen wird im Rahmen des Projekts RS1189 durchgeführt. Die Anwendung auf Kerntransienten, die üblicherweise mit Diffusionsrechnungen für den Reaktorkern durchgeführt werden, ist in Vorbereitung. Dazu werden Wirkungsquerschnittsbibliotheken mit zweidimensionalen Transportrechnungen erzeugt. Mittels des 2-D-Spektralcodes NEWT aus dem SCALE-6-System können nun variierte Wirkungsquerschnittsbibliotheken für den GRS-Kernsimulator QUABOX/CUBBOX erstellt werden.

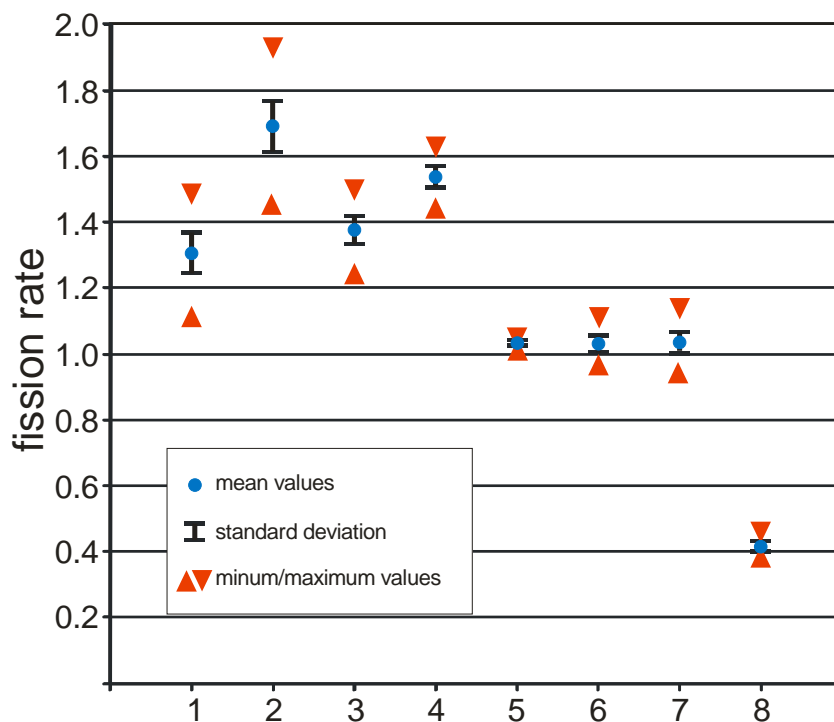
Um den Einfluss von Unsicherheiten in den nuklearen Daten auf realistische Anlagen und Kerntransienten systematisch zu untersuchen, wurde die oben beschriebene XSUSA-Methode sowohl auf Monte-Carlo-Rechnungen als auch auf entsprechende nodale Diffusionsrechnungen für den „all-rods-out“- Zustand des OECD DWR-MOX/ $\text{UO}_2$ -Kerntransienten-Benchmarks angewandt.

Da der Kernaufbau, sowie Referenzlösungen bereits weiter oben beschrieben sind (s. Ergebnisse zu AP2.1, Kapitel 5.1), soll hier nicht näher darauf eingegangen werden. Es sei jedoch nochmals erwähnt, dass die gewählte Kernanordnung (s. Abb. 7-1) sehr heterogen ist, d. h. es gibt sowohl  $\text{UO}_2$ - als auch MOX-Brennelemente und es gibt sowohl frische als auch hoch abgebrannte Brennelemente (bis zu 37 GWd/tHM). Erwähnenswert ist außerdem, dass der MOX-Brennstoff einen sehr hohen Anteil an  $^{239}\text{Pu}$  enthält.

Die Monte Carlo-Rechnung ist als Referenzlösung für die Unsicherheiten angesehen. Im Gegensatz zu den Berechnungen mit dem Kernsimulator wird kein Zwischenschritt in Form von variierten Bibliotheken für homogenisierte Wirkungsquerschnitte in der Berechnung gemacht, sondern direkt auf die variierten mikroskopischen Wirkungsquerschnitte zugegriffen. Für die Anzahl der Neutronen-Geschichten, wurde ein großer Wert von  $10^9$  gewählt, um sicherzustellen, dass die aleatorischen Unsicherheiten klei-

ner sind als die epistemischen (s. oben). Insgesamt wurden  $N=480$  KENO-Rechenläufe ausgeführt.

Die berechneten Multiplikationsfaktoren weisen eine relative Standardabweichung von ca. 0,5 % auf, was in guter Übereinstimmung mit den oben gezeigten typischen Unsicherheiten für  $UO_2$ -dominierte, thermische LWR-Systeme ist. In der radialen Leistungsverteilung, kann jedoch ein viel größerer Einfluss der Unsicherheiten der nuklearen Daten beobachtet werden. Dies ist in Abb. 7-6, wo die Mittelwerte der Leistungsverteilung einer Reihe von Brennelementen und den dazugehörigen Standardabweichung gezeigt ist, dargestellt. Die relative Standardabweichung von etwa 5% im Zentrum des Kerns ist unerwartet hoch. Die erhaltenen maximalen und minimalen Werte der Spaltraten weichen sogar um +/- 14 % von den Referenzwerten ab. Zusätzliche Berechnungen mit „one-at-a-time“-Variationen der unterschiedlichen Nuklide und Reaktionen haben gezeigt, dass diese großen Unsicherheiten hauptsächlich auf die Unsicherheiten der nuklearen Basisdaten von  $^{239}Pu$ , speziell  $\nu$  zurückzuführen sind.



**Abb. 7-6** Spaltratenverteilung und deren Unsicherheiten für eine Reihe von Brennelementen des DWR MOX/ $UO_2$  Kerns. (Mittelwerte: blau, Unsicherheiten: schwarz, Extremwerte rot)

Für die Berechnungen mit QUABOX/CUBBOX wurden  $N=480$  komplette, variierte Bibliotheken mit homogenisierten Wirkungsquerschnitten mit dem Spektralcode NEWT

erstellt. Durch die Berechnung jedes parametrischen Punktes dieser Bibliothek (Brennelementtyp, Brennstofftemperatur, Moderatorichte, Borkonzentration etc.) mit dem gleichen Satz von Zufallszahlen, bleiben die Korrelationen in den Basisdaten erhalten und finden sich implizit in den Wirkungsquerschnittsbibliotheken wieder. Für die Erstellung der Bibliotheken wurden die gleichen Zufallszahlen wie für die obigen XSUSA/KENO-Rechnungen verwendet.

**Tab. 7-7** Mittelwerte und Standardabweichungen für den DWR MOX/ $UO_2$  Benchmark-Kern

	<b>ARO <math>k_{eff}</math></b> <b>mean</b>	<b>ARO <math>k_{eff}</math></b> <b><math>\sigma</math></b>	<b>ARI <math>k_{eff}</math></b> <b>mean</b>	<b>ARI <math>k_{eff}</math></b> <b><math>\sigma</math></b>	<b>Rod worth</b> <b>mean (pcm)</b>	<b>Rod worth</b> <b><math>\sigma</math></b>
<b>XSUSA/KENO</b>	1.05913	0.56%	0.98782	0.49%	6802	0.67%
<b>XSUSA/QC</b>	1.06227	0.55%	0.98939	0.50%	6934	0.78%
<b>TSUNAMI-3D</b>	1.05670	0.56%	0.98645	0.52%	6764	0.71%

Tab. 7-7 zeigt die errechneten Mittelwerte und Standardabweichungen für einige Ausgabewerte der Reaktorkernberechnungen im Vergleich zu den XSUSA/KENO- Ergebnissen. Die Unsicherheiten der globalen Ausgabewerte wurden zum Vergleich auch mit dem SCALE-Code TSUNAMI-3D berechnet. Man erkennt, dass diese globalen Ausgabewerte und deren Unsicherheiten in guter Übereinstimmung sind.

**Tab. 7-8** Relative Unsicherheiten der einzelnen Steuerstabwirksamkeiten

	<b>A1</b>	<b>A3</b>	<b>A5</b>	<b>A7</b>	<b>C3</b>	<b>E5</b>
<b>XSUSA/KENO</b>	4.35%	N/A	N/A	N/A	N/A	3.02%
<b>XSUSA/QC</b>	4,24	1.44%	1.79%	9.66%	2.22%	2.66%
<b>TSUNAMI-3D</b>	4.69%	1.68%	2.28%	9.66%	2.46%	3.14%

Auch für lokale Ausgabewerte konnten positive Ergebnisse erzielt werden. In Abb. 7-7 sind die Unsicherheiten in der berechneten Leistungsverteilung für KENO und QUABOX/CUBBOX gezeigt. Die Übereinstimmung zwischen beiden Methoden ist sehr gut. Weiterhin zeigen auch die Unsicherheiten der einzelnen Steuerstabwirksamkeiten sehr gute Übereinstimmung (vgl. Tab. 7-8).

	1	2	3	4	5	6	7	8
A	4.75%	4.55%	3.13%	2.03%	0.71%	2.42%	3.11%	3.53%
B	4.55%	3.93%	2.76%	1.46%	0.69%	1.95%	3.69%	3.67%
C	3.13%	2.76%	2.32%	1.85%	0.49%	1.92%	2.77%	3.65%
D	2.03%	1.46%	1.85%	1.21%	0.94%	1.11%	2.88%	3.17%
E	0.71%	0.69%	0.49%	0.94%	0.64%	1.10%	1.67%	
F	2.42%	1.95%	1.92%	1.11%	1.10%	1.70%	1.53%	
G	3.11%	3.69%	2.77%	2.88%	1.67%	1.53%		
H	3.53%	3.67%	3.65%	3.17%				

	1	2	3	4	5	6	7	8
A	4.79%	4.57%	3.20%	2.11%	0.89%	2.38%	3.10%	3.48%
B	4.57%	3.95%	2.83%	1.53%	0.79%	1.95%	3.71%	3.69%
C	3.20%	2.83%	2.43%	1.92%	0.51%	1.94%	2.84%	3.66%
D	2.11%	1.53%	1.92%	1.27%	0.94%	1.27%	3.07%	3.26%
E	0.89%	0.79%	0.51%	0.94%	0.67%	1.34%	1.81%	
F	2.38%	1.95%	1.94%	1.27%	1.34%	2.02%	1.60%	
G	3.10%	3.71%	2.84%	3.07%	1.81%	1.60%		
H	3.48%	3.69%	3.66%	3.26%				

**Abb. 7-7** Unsicherheiten in der nodalen Leistungsverteilung des untersuchten DWR-Kerns. Auf der linken Seite sind die berechneten Standardabweichungen von XSUSA/KENO auf der rechten Seite die berechneten Werte von XSUSA/NEWT/QC gezeigt

## 8 Zusammenfassung der Ergebnisse und Verwertungsplan

Dieses abschließende Kapitel gibt nochmals einen kurzen Abriss der im Rahmen von RS1183 erreichten Projektziele und erläutert die wissenschaftlichen Anschlussmöglichkeiten und weitere Verwertungsoptionen der Ergebnisse. Es sei zunächst festgehalten, dass aus Sicht der Autoren alle im ursprünglichen Vorhabensvorschlag genannten Ziele vollständig erreicht wurden. Insbesondere auf dem Gebiet der Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen ist die internationale Entwicklung während der Projektlaufzeit besonders dynamisch gewesen, woran die GRS mit ihren Arbeiten (Arbeitspaket 4 von RS1183) einen entscheidenden Anteil hatte. Das im Rahmen von RS1183 entstandene Softwareprodukt XSUSA ist heute international das am weitesten fortgeschrittene Werkzeug zur Durchführung von reaktorphysikalischen Unsicherheitsbetrachtungen und hat sich als einsatzfähig nicht nur für Brennelement-, sondern auch für 3D-Ganzkernrechnungen im stationären und transienten Modus erwiesen. Anfragen von vielen Institutionen weltweit zur Weitergabe des Tools XSUSA haben die GRS erreicht, und es wird angestrebt, XSUSA in das SCALE-Programmpaket von ORNL (Oak Ridge National Laboratories) zu integrieren, um es einer großen Anwendergemeinde zugänglich zu machen. Auch im Rahmen der UAM-Benchmarkaktivitäten (OECD-Benchmark zu „Uncertainty Analysis in Modelling“) und eines *Coordinated Research Programs* der IAEA zu Hochtemperaturreaktoren ist die Einführung von XSUSA als Referenzprogramm für die Benchmarkteilnehmer geplant.

In den folgenden Abschnitten wird der erreichte Projektfortschritt für jedes Arbeitspaket einzeln dokumentiert und die weitere Verwertung aufgezeigt.

### 8.1 AP 1: Weiterentwicklung der gekoppelten Rechencodes TORT-TD/ATHLET und TORT-TD/COBA-TF

Der Prototyp einer hybriden Kopplung zwischen dem Neutronentransportcode TORT-TD und dem Grobgitter-Diffusionscode QUABOX/CUBBOX wurde erstmals dargestellt. Durch diese Art der Kopplung können große Probleme wie z. B. eine 3D-Ganzkernrechnung in Rechengebiete mit hoher und niedrigerer räumlicher Auflösung unterteilt werden. Ein typisches Anwendungsbeispiel ist z. B. eine Steuerstabauswurf-Transiente, bei der insbesondere die Stabileistungen in unmittelbarer Nähe des ausgeworfenen Steuerstabs interessieren und daher räumlich hoch aufgelöst (und mit Neutronentransport behandelt) werden, während der Rest des Kerns lediglich für die Ge-

samtdynamik des Kerns relevant ist und daher hinreichend genau mit den bekannten Grobgittermethoden in Diffusionsnäherung dargestellt werden kann. Dadurch erreicht man effektiv eine Gebietszerlegung des Gesamtproblems in zwei oder mehrere Gebiete unterschiedlicher räumlicher Auflösung, zwischen denen dann in mehreren iterativen Schritten Randbedingungen ausgetauscht werden müssen. Während die Übertragung von Randbedingungen von einem Multigruppen-Transportproblem (möglicherweise in Pin-by-Pin-Darstellung) auf ein nodales Weniggruppen-Diffusionsproblem unproblematisch ist, mussten spezielle Interpolationsalgorithmen entwickelt werden, die den Transfer vom Diffusions- in das Transportproblem bewerkstelligen. Die dabei zu beachtenden Aspekte bei der räumlichen und der Winkelkopplung wurden in Abschnitt 4.1 ausführlich dargestellt. Die Funktionalität der Kopplung wurde anhand von 3D-Testproblemen für zwei Ganzkernanordnungen demonstriert.

Die mit sog. Pin-by-Pin-Neutronentransportcodes erreichbare Rechengenauigkeit ist zum einen beschränkt durch die Güte der verwendeten Transportnäherung; die im Code TORT-TD verwendete  $S_N$ -Methode ist für Leichtwasser-Reaktorprobleme sicherlich eine der besten verfügbaren Näherungen und anderen Methoden wie  $SP_3$  im Genauigkeitsanspruch weit überlegen. Zum anderen ist aber die Bereitstellung von stabweisen Wirkungsquerschnitten aus herkömmlichen Spektralcodes genauigkeitslimitierend, da im Gegensatz zu nodalen Rechnungen mit brennelementweiser Auflösung die in der Spektralrechnung generierten, stabweise homogenisierten Querschnitte nicht reaktionsratenerhaltend sind und entsprechend angepasst werden müssen. Die Nichtbeachtung dieser Tatsache kann insbesondere bei Problemen mit eingefahrenen Steuerstäben zu erheblichen Ungenauigkeiten in den Stableistungen einer 3D-Kernrechnung führen. Die GRS hat im Rahmen von RS1183 drei verschiedene Verfahren entwickelt, um diesem Problem zu begegnen. In der Methode der effektiven Absorberkonzentration werden die Nuklidichten von Absorbern und Brennstoffzellen empirisch so angepasst, dass die aus der heterogenen Rechnung resultierenden Stabwirksamkeiten denen der stabweise homogenisierten Rechnung entsprechen. Dies geschieht durch Anpassung der besagten Nuklidichten. In der sog. Superhomogenisierungs- (SPH)-Methode werden für Stabzellen oder Stabzellgruppen iterativ sog. SPH-Faktoren ermittelt, die als multiplikative Faktoren in die Wirkungsquerschnittsbasis mit eingehen und daher praktisch mit jedem Transportcode einsetzbar sind. Die hochwertigste Methode, die sog. „Generalized Equivalence Theory“, greift die Idee der Diskontinuitätsfaktoren in nodalen Rechenschemata auf und erweitert diese auf Stabzellbasis. Sie ist sowohl reaktionsraten- als auch stromerhaltend und damit den beiden o. g. Me-

thoden aus theoretischer Sicht überlegen. Allerdings erfordert sie die Implementierung der Stabzell-Diskontinuitätsfaktoren in den Rechencode und steht daher nur für den Code TORT-TD zur Verfügung. Die Leistungsfähigkeiten der drei unterschiedlichen Ansätze wurde für mehrere 3D-Ganzkernprobleme durch Vergleiche mit Monte Carlo-Referenzrechnungen demonstriert (siehe dazu Abschnitt 4.2).

Im Rahmen von Arbeitspaket 1 wurde auch die Kopplung des Neutronentransportcodes TORT-TD mit dem thermohydraulische Unterkanalmodell COBRA-TF (in enger Zusammenarbeit mit der Penn State University, PSU) umgesetzt. Die Schnittstelle von COBRA-TF wurde dabei derart allgemein gehalten, dass auch die Anbindung des Diffusionscodes QUABOX/CUBBOX zwanglos möglich war. Dadurch ergibt sich eine nahtlose Integration von COBRA-TF in die nukleare Rechenkette der GRS. Neben der Erstellung der Kopplungsalgorithmen wurde COBRA-TF durch die GRS um ein dreidimensionales Bortransport-Modell, einen stationären Startmodus und eine automatisierte Anbindung an Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen mit SUSANA erweitert. Die Funktionalität von TORT-TD/COBRA-TF wurde demonstriert an einer 2x2-Minikernanordnung (transient) sowie an einer stationären 3D-Ganzkernrechnung, basierend auf der Spezifikation des OECD/NRC UO<sub>2</sub>/MOX Core Transient Benchmark. Darüber hinaus wurde das gekoppelte Codesystem für SWR-Analysen ertüchtigt, so dass es nun die GRS in den Stand versetzt, auch an der OECD-Benchmarkstudie zum „Oskarshamn-2 Stability Event“ teilzunehmen. Die parallele Kopplung des Codes QUABOX/CUBBOX mit ATHLET und COBRA-TF wurde zudem bereits in Auftragsstudien für die britische Behörde (ATWS-Analysen für einen EPR) und den BMU verwendet, was die unmittelbare (auch genehmigungstechnische) Relevanz der Entwicklungen deutlich unterstreicht.

Schließlich wurden gemäß Projektplan Ansätze zur Implementierung von Transportmethoden auf unstrukturierten Gittern erarbeitet. Es wurde mit der Entwicklung eines GRS-eigenen Finite-Elemente Frameworks begonnen, in dem zukünftig die Diskretisierung der Neutronentransportgleichung (z. B. in  $SP_N$  oder  $S_N$ -Approximation) umgesetzt werden soll. Exemplarisch wurde bereits die  $SP_1$ -Näherung dort integriert; verschiedene 2D- und 3D-Kernkonfigurationen konnten bereits mit den implementierten FEM-Solvern in hoher Genauigkeit gelöst werden. Ferner wurde dieser Lösungsansatz auch im RS-Forschungsprojekt RS1191 („Rechenmodellentwicklung für die Sicherheitsbewertung von Hochtemperaturreaktoren“) eingesetzt, um prismatische HTR-Brennstoffgitter in hexagonalen Anordnungen zu beschreiben. Als langfristige Strategie strebt



die GRS eine hybride Implementierung eines 2D-FEM-Solvers (zur Beschreibung der radialen Reaktorgeometrie) in der Kopplung mit einer 1D-Finite-Differenzen-Näherung für die axiale Richtung an. Dadurch kann gegenüber einer vollen 3D-FEM-Implementierung erhebliche Rechenzeit bei einem vertretbaren Verlust an Genauigkeit erreicht werden.

## **8.2 AP2: Validierung der zeitabhängigen deterministischen Transportmodelle in DORT-TD und TORT-TD**

Validierung und Verifizierung sind integrale Bestandteil des Entwicklungsprozesses der GRS-Codesysteme und unabdingbare Voraussetzung für den qualifizierten Einsatz der Rechencodes an der GRS oder durch Lizenznehmer.

Die Qualifizierung von DORT-TD und TORT-TD fand anhand mehrerer Benchmark-Probleme statt, die das breite Anwendungsspektrum der  $S_N$ -Neutronentransportmethoden verdeutlichen. Schwerpunkt sind natürlich die LWR-Anwendungen (AP2.1), DORT/TORT-TD sind aber ebenso auch einsatzfähig für graphitmoderierte Hochtemperaturreaktoren (AP2.2) und selbst für unterkritische, beschleunigergetriebene Anordnungen (AP 2.3). Die wichtigsten Ergebnisse aus RS1183 zu diesen drei Arbeitspunkten werden im Folgenden in komprimierter Form dargestellt.

Die Validierung von TORT-TD für Leichtwasserreaktoren bediente sich zu einem erheblichen Maße des in 2007 finalisierten, international mit großer Aufmerksamkeit verfolgten OECD/NRC UO<sub>2</sub>/MOX Core Transient Benchmark, der seinerzeit von der Purdue University koordiniert wurde. Die ausgezeichnete und umfangreiche Spezifikation und die große Anzahl von Teilnehmern, sowie die Strukturierung in mehrere Phasen (2D/3D, Diffusion-Transport, stationäre und transiente Rechenfälle) machen diesen Benchmark außerordentlich wertvoll für alle zukünftigen Validierungsanstrengungen. Aufbauend auf der Spezifikation hat die GRS eine Erweiterung des Benchmarks entwickelt, die insbesondere den Bereich verzögert überkritischer Transienten mit Asymmetrieffekten abdeckt. Die entsprechende Bortransiente ist in Abschnitt 5.1 ausführlich beschrieben und wurde sowohl zum Benchmarking der Codes QUABOX/CUBBOX und TORT-TD, aber auch als Testfall für den Einsatz alternativer Spektralcodes (z. B. HELIOS, SCALE-TRITON, DRAGON) verwendet. Der Benchmarkfall wurde als fester Bestandteil in die Validierungsmatrix der GRS aufgenommen; ferner ist es vorgesehen,

auch der OECD diesen Benchmark als Erweiterung des o. g. OECD/NRC-Benchmarks vorzuschlagen.

Der 2D-Neutronentransportcode DORT-TD wurde im Rahmen des AP 2.2 für eine weitere OECD-Aktivität, den OECD/NEA/NSC PBMR400 Transient Benchmark, eingesetzt, der sich mit Transienten und Auslegungsstörfällen des südafrikanischen modularen Hochtemperaturreaktorkonzepts PBMR400 befasste und in 2010 finalisiert wurde. Die GRS war von Anbeginn (d. h. ab ca. 2005) an diesem Benchmark beteiligt und hat gemeinsam mit der Penn State University an allen Übungen konsequent mitgewirkt und ihre eigenen Ergebnisse beigesteuert. Es ist dabei wichtig hervorzuheben, dass die GRS als eine von nur vier Institutionen (bei insgesamt mehr als 20 Teilnehmern) weltweit in der Lage war, alle Rechenfälle komplett zu bearbeiten (neben PBMR, dem südafrikanischen Reaktorhersteller selbst, haben nur noch KAERI (Korea) und die University of Michigan vollständige Lösungen bereitgestellt). Darüber hinaus ist die GRS die einzige Institution, die Neutronentransportcodes für den Benchmark einsetzte, alle anderen Teilnehmer hatten sich auf Diffusionscodes beschränkt. Dies demonstriert sehr deutlich die herausragende Position der GRS bei der Entwicklung innovativer Programmsysteme. Zu den simulierten Transienten und Unfallabläufen gehörten neben dem Lastfolgebetrieb (Xenon-Transiente) auch das unbeabsichtigte Steuerstabausfahren, sog. „Loss-of-Flow“-Ereignisse mit und ohne Druckentlastung des Primärkreislaufs, eine Unterkühlungstransiente sowie der Auswurf aller Steuerstäbe als auslegungsüberschreitendes, hypothetisches Ereignis. Die in Abschnitt 5.2 ausführlich dokumentierten Ergebnisse zeugen von der Flexibilität des gekoppelten DORT-TD/THERMIX-Codesystems, zeigen aber auch deutlich die Grenzen der Genauigkeit, insbesondere bei der thermohydraulischen Modellierung auf. Die Übereinstimmung zwischen Neutronentransport- und Diffusionstheorie ist generell gut; eine Quantifizierung der Unterschiede zwischen beiden Ansätzen ist auch und gerade deshalb möglich, weil DORT-TD neben dem Transportmodus auch über ein Diffusionsmodul verfügt, dass mit den identischen Wirkungsquerschnitten versorgt werden kann und erst dadurch einen direkten Vergleich der beiden theoretischen Ansätze ermöglicht.

Der 3D-Code TORT-TD wurde im Rahmen von RS1183 durch einen externen Quellterm erweitert, der es nun auch ermöglicht, unterkritische Anordnungen (wie z. B. sog. „Accelerator Driven Systems“, ADS) zu beschreiben. Ein wesentlicher Vorzug der  $S_N$ -Formulierung der Neutronentransportgleichung ist, dass praktisch beliebige anisotrope Verteilungen der externen Quellneutronen dargestellt werden können (so wie sie z. B.

in einer Spallationskaskade produziert werden). Damit ist diese Methode den sog. „Even-Parity“-Formulierungen der Transportgleichung weit überlegen, in die de-facto kein zeitabhängiger Quellterm eingebaut werden kann. Im Rahmen einer engen Zusammenarbeit mit dem Karlsruhe Institut für Technologie (KIT) wurde die unterkritische Anordnung YALINA modelliert; dabei war KIT weitestgehend für die Erzeugung der Multigruppen-Wirkungsquerschnitte zuständig, während die GRS die Anlage in TORT-TD abgebildet hat. Die Funktionsfähigkeit des Rechensystems konnte anhand einfacher Beispiele nachgewiesen werden, allerdings konnte die Validierung durch das KIT anhand von Versuchsdaten nicht durchgeführt werden, da es offenbar bei der Durchführung der YALINA-Experimente zu massiven Verzögerungen kam. Das Codesystem TORT-TD steht aber in jedem Fall voll zur Verfügung (siehe Abschnitt 5.3).

### **8.3 AP3: Ganzkernrechnungen mit Monte Carlo-Methoden**

Nukleare Daten sind die Grundlage aller Neutronentransportberechnungen. Die Qualität dieser Daten ist daher wesentliche Voraussetzung für die Zuverlässigkeit der Ergebnisse der nuklearen Berechnungskette. Die großen Datenbibliotheken wie JEFF, ENDF/B, JENDL und BROND L werden ständig erweitert und verbessert und berücksichtigen die neuesten Auswertungen von differentiellen Experimenten, wobei die Evaluierung meist hauptsächlich durch Vergleich von Monte Carlo-Berechnungen mit den Ergebnissen kritischer Experimente stattfindet.

Das international eingesetzte Standardprogramm NJOY rekonstruiert aus den o. g. Datenbibliotheken die nuklearen Wirkungsquerschnitte in Punkt- oder Multigruppendarstellung. NJOY ist daher Voraussetzung für eine unabhängige Bereitstellung von Querschnitten und integraler Bestandteil einer vollständigen nuklearen Rechenkette. Kenntnisse in NJOY sind insbesondere erforderlich, wenn es um die Auswertung der neuesten Kovarianzdaten (für Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen) geht oder um die Bereitstellung von Daten für fortgeschrittene oder innovative Reaktorkonzepte.

Im Rahmen des Vorhabens RS1183 wurde das NJOY-Programmsystem vollständig in die nukleare Rechenkette der GRS implementiert. Dazu wurde eine vollständige Neutronen-Datenbibliothek kontinuierlicher Energie bei Raumtemperatur aus der aktuellen JEFF 3.1.1.-Evaluierung erzeugt. Für H<sub>2</sub>O wurden zusätzlich thermische Streudaten generiert, die auch molekulare Bindungseffekte berücksichtigen. Die entsprechenden Bibliotheken stehen nun an der GRS internen und externen Nutzern zur Verfügung.

Außerdem wurde in RS1183 die Validierungsmatrix der GRS für deterministische und stochastische Neutronentransportprogramme erheblich erweitert. So wurden z. B. der KRITZ-Benchmark, die VENUS-7-Benchmarkserie, die stationäre Kernanordnung des OECD UO<sub>2</sub>/MOX-Kerntransienten-Benchmarks, sowie ein VVER-1000-Ganzkernbenchmark in die Validierung mit aufgenommen, wobei in allen Fällen die neuesten verfügbaren Datenbibliotheken wie JEFF 3.1.1 zum Einsatz kamen. Während die Ergebnisse mit neuen Datenevaluationen für kleine kritische Anordnungen meist in guter Übereinstimmung mit den mit älteren Basisdaten erzeugten waren, ergaben sich für Ganzkernanordnungen teilweise erhebliche Abweichungen zwischen Kernberechnungen mit JEFF 3.1.1. und ENDF/B-VI. Die zum Teil erheblichen Diskrepanzen von mehreren Prozent in Brennelement-gemittelten Leistungen waren ein wesentlicher Grund, die Arbeiten zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse (siehe Kapitel 7) weiter voranzutreiben.

Des Weiteren wurde im Vorhaben RS1183 untersucht, ob Verbesserungen im Konvergenzverhalten von Ganzkern-Monte Carlo-Berechnungen erzielt werden können, wenn eine verbesserte Schätzung für die anfängliche Verteilung der Spaltquellen vorgegeben werden kann, z. B. durch Vorausrechnung mit einem deterministischen Transportcode. Eine solche Vorgehensweise wurde in der Vergangenheit immer wieder für verschiedene Anordnungen propagiert, insbesondere wenn es um Abschirmungsprobleme ging. Diese Verfahrensweise wurde in RS1183 auch getestet für zwei Ganzkernanordnungen für einen VVER und einen DWR mit quadratischen Brennelementen. Dabei stellte sich heraus, dass die berechnete Leistungsverteilung in solch großen heterogenen Reaktorkernen ausgesprochen empfindlich hinsichtlich der verwendeten nuklearen Daten ist. Andererseits ist eine erhebliche Beschleunigung von Monte Carlo-Rechnungen für 3D-Ganzkerne nur dann zu erwarten, wenn die Brennelementleistungen aus der Vorausrechnung besser als auf 1% bekannt sind. Dies ist aber selbst bei Verwendung derselben Datenevaluation und sorgfältigster Multigruppen-Querschnittsaufbereitung mit deterministischen Codes kaum zu erreichen. Eine Vorausrechnung mit deterministischen Codes zur substantiellen Beschleunigung von Monte Carlo-Berechnungen mag daher zwar für gewisse Problemklassen sehr erfolgversprechend sein, hat aber nur einen marginalen Effekt für 3D-Ganzkernrechnungen mit Monte Carlo. Diese Arbeiten werden daher an der GRS nicht weiter verfolgt (siehe Abschnitt 6.3).

An der GRS wurde bereits im Vorgängervorhaben zu RS1183, dem Vorhaben RS1160, eine Einwegkopplung aus MCNP und einem thermohydraulischen LWR-Kernmodell mit ATHLET erstellt. In diesem Kopplungsschema wurde aber die neutronenphysikalische Lösung nicht an die Thermohydraulik zurückgegeben. Im Rahmen von RS1183 wurde erstmals eine vollständige Kopplung von MCNP5 und ATHLET erreicht, in der zwischen Neutronik und Thermohydraulik mehrfach iteriert wird, bis sowohl alle Leistungsverteilungen als auch die thermohydraulischen Größen hinreichend auskonvergiert sind. Wesentliche Stärke dieses Modells ist es, dass die Neutronik mit MCNP5 prinzipiell mit beliebigem räumlichem Detail modelliert werden kann, im Gegensatz zu den bisherigen Kopplungsansätzen mit deterministischen Transportcodes, bei denen immer gewisse Homogenisierungs- und Energiekondensierungsschritte notwendig sind. Zur Demonstration der Methode wurde der Vollastzustand des OECD UO<sub>2</sub>/MOX-Core Transient Benchmarks berechnet und Vergleiche zwischen deterministischen und stochastischen gekoppelten Rechencodes durchgeführt (siehe Abschnitt 6.4).

#### **8.4 AP4: Quantifizierung der methodischen Unsicherheiten und der Unsicherheiten in den nuklearen Basisdaten**

In Ganzkernberechnungen für gemischte UO<sub>2</sub>/MOX-Kerne wurden deutliche Unterschiede in den radialen Leistungsverteilungen aus Rechnungen mit unterschiedlichen nuklearen Daten beobachtet, siehe oben. Um den Ursachen dieser Abweichungen auf die Spur zu kommen, wurden in RS1183 anfangs erste Unsicherheitsanalysen mit der GRS/SUSA-Methode für eine vereinfachte zylindrische Kernanordnung mit räumlich getrennten Uran- und MOX-Bereichen durchgeführt. Die ermittelten Unsicherheiten für die Multiplikationsfaktoren der entsprechenden Brennstabzellen stimmen mit den Werten aus TSUNAMI-1D-Berechnungen (TSUNAMI ist ein Standardwerkzeug aus dem SCALE-Programmsystem) überein. Für die berechnete radiale Leistungsverteilung einer Anordnung von der Größe eines kommerziellen Reaktorkerns ergeben sich substantielle Unsicherheiten, hauptsächlich aus den Kovarianzdaten der mittleren Anzahl von Neutronen pro Spaltung in U-235 und Pu-239.

Aufbauend auf diesen Erfahrungen wurde in RS1183 das Programmsystem XSUSA (Cross Section Uncertainty and Sensitivity Analysis), das auf dem GRS-Programmsystem SUSA zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse unter Verwendung nuklearer Kovarianzdaten beruht, entwickelt. Inzwischen werden zur Anwendung auf ENDF/B-VII basierende nukleare Daten sowie die Kovarianzmatrizen aus dem SCALE-

6-Programmsystem eingesetzt. Dazu werden die 238-Gruppen-Datenbibliotheken auf die 44-Gruppen-Struktur der Kovarianzmatrizen vorkondensiert. Die Variation der nuklearen Daten wird nach der Spektralrechnung durchgeführt, wobei für die Varianzen und Kovarianzen der Unsicherheiten Gaußverteilungen angenommen werden. Die Werkzeuge zur Variation sowie zur Handhabung der nuklearen Daten während der gesamten Berechnungskette wurden bereitgestellt. Nach der Variation von Reaktionen mit Unsicherheitsdaten wird die Konsistenz der Wirkungsquerschnitte wiederhergestellt. Damit ist jetzt die Berücksichtigung aller Unsicherheiten, auch in den Daten für elastische und inelastische Streuung, möglich. Die Methode hat international große Aufmerksamkeit erregt, da sie im Gegensatz zu störungstheoretischen Ansätzen (wie z. B. in TSUNAMI) auch Aussagen zu differentiellen Größen wie z. B. Leistungsverteilungen möglich macht und nicht auf einer linearen störungstheoretischen Näherung beruht. XSUSA ist daher gegenwärtig das einzige Codesystem weltweit, mit dem gezielt Aussagen zur Unsicherheiten in Schlüsselgrößen von Kernbeladungen (Multiplikationsfaktoren, Leistungs- und Spaltratenverteilungen) gemacht werden können. Darüber hinaus ist die Methode universell einsetzbar für jeden Reaktortyp beliebigen Spektrums, und hat mittlerweile auch für nukleare Abbrandrechnungen (im parallel verlaufenden GRS RS-Forschungsprojekt RS1189) und sogar in gekoppelten Kerntransienten (siehe Abschnitt 7.2) ihre Eignung bewiesen. XSUSA ist mittlerweile an eine Vielzahl von Institutionen weltweit weitergegeben worden, und befindet sich im intensiven Einsatz z. B. für Hochtemperaturreaktoren (Idaho National Laboratories, INL). Geplant ist ferner ein Einsatz für die MYRRHA-Forschungseinrichtung bei SCK-CEN. Außerdem ist es vorgesehen, XSUSA als Standardwerkzeug an die Teilnehmer des OECD UAM-Benchmarks für die Finalisierung der letzten zwei Benchmarkphasen weiterzugeben. Um eine maximale Verbreitung von XSUSA zu erreichen und die GRS-Methode für Nukleardaten weltweit zu etablieren, wird derzeit in einer engen Kooperation mit den Oak Ridge National Laboratories (ORNL) XSUSA in das Programmsystem SCALE integriert. Damit wird XSUSA der mehr als tausendköpfigen Anwendergemeinde von SCALE direkt zugänglich.

## **8.5 Weitere Verwertung und Veröffentlichungen im Rahmen von RS1183**

Zusammenfassen stellen sich die weiteren Verwertungsmöglichkeiten der in RS1183 erzielten Ergebnisse wie folgt dar:

- Die Codesysteme DORT/TORT-TD in der Kopplung mit thermohydraulischen Programmen wie ATHLET, COBRA-TF oder THERMIX-DIREKT sind hinreichend validiert und können auf Anfrage an externe Institutionen weiter gegeben werden. Mehrere Anfragen, unter anderem von chinesischen Partnern (CNPRI, SNERDI) haben die GRS erreicht, in denen der Einsatz von TORT-TD für LWR der Generation-III angefragt wird. Ebenso großes Interesse wurde für den gemeinsam mit der Penn State University entwickelten Code COBRA-TF bekundet. Derzeit ist geplant, COBRA-TF sowohl in die neue US-amerikanische nukleare Simulationsplattform CASL als auch in das europäische NURESIM-Framework mit aufzunehmen. Im Rahmen eines Verbundvorschlags zum BMBF-geförderten Programm Energie 2020+ ist ebenfalls der Einsatz von COBRA-TF und TORT-TD vorgesehen.
- Darüber hinaus steht als Ergebnis von RS1183 eine Hybridkopplung von Neutronentransport und Neutronendiffusion (TORT-TD-QUABOX/CUBBOX) zur Verfügung. Erste Schritte für eine Erweiterung von TORT-TD auf unstrukturierte oder reguläre Dreiecksgitter wurden im Rahmen von RS1183 ausgeführt und eine langfristige Entwicklungsstrategie festgelegt. Die ersten Diffusionsrechnungen mit dem neuen Finite-Elemente-Ansatz konnten bereits im Rahmen des parallel verlaufenden RS-Projekts RS1191 für einen Hochtemperaturreaktor mit prismatischen Brennelementen demonstriert werden. Hier ergeben sich unmittelbar weitere Einsatzmöglichkeiten für innovative Reaktoren wie z. B. MYRRHA oder den ASTRID-Prototyp. Solche Arbeiten sind z. B. in Nachfolgeprojekten zu RS1191 oder RS1189 vorgesehen.
- Die GRS hat darüber hinaus die SPH- und GET-Methoden (siehe Abschnitt 4.2) soweit vervollständigt, dass diese Ansätze nun in allen Rechencodes der GRS für Ganzkernrechnungen mit hoher Genauigkeit eingesetzt werden können.
- Im Bereich der Validierung wurde die Qualifikation der GRS-Programme entscheidend vorangetrieben. Aufgrund der ständig steigenden Nachfrage nach GRS-Rechencodes ist dies auch unabdingbar, um die Robustheit der weitergegebenen Codes zu garantieren. Der Einsatz von TORT-TD und anderen Codes wurde insbesondere um Anwendungsbereiche bei Hochtemperaturreaktoren und unterkritischen Anordnungen erweitert.
- Das gleiche gilt für den Einsatz des Referenzcodes MCNP, für den ebenfalls die bereits vorhandene, solide Validierungsbasis um mehrere, insbesondere für Ganzkernrechnungen relevante Fälle erweitert wurde. Als wesentliches Ergebnis zeigte sich hier, welchen großen Einfluss die Verwendung unterschiedlicher

Basisdatenevaluationen auf die Ergebnisse haben können. Der effizienten Kopplung von MCNP an unterschiedliche thermohydraulische Rechencodes wird in der Gesamtcodestrategie der GRS eine große Bedeutung zugemessen, entsprechend werden die Arbeiten, u.a. gemeinsam mit dem IKE Stuttgart weiter vorangetrieben werden.

- Wie bereits oben kommentiert, stellen insbesondere die Entwicklungen der GRS zu Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen (XSUSA) ein Hauptergebnis von RS1183 dar. Auch hier ist eine unmittelbare Verwertung durch Codeweitergabe unmittelbar gegeben. XSUSA wird voraussichtlich in mehreren europäischen Forschungsprojekten ab 2013 (z. B. SOFIA zum schnellen Reaktor, MAXSIMA zum MYRRHA-Reaktor), im Rahmen der OECD/UAM-Benchmark-Initiative, in mehreren *Coordinated Research Programs* der IAEA und natürlich bei mehreren Partnern des Kompetenzverbunds Kerntechnik eingesetzt werden. Darüber hinaus hat auch die deutsche Industrie (z. B. E.On) Interesse am Einsatz des Werkzeugs bekundet. Die Arbeiten zu XSUSA werden selbstverständlich in den GRS-RS-Forschungsprojekten weitergeführt, um die internationale Vorreiterstellung der GRS zu erhalten und auszubauen.

Im Vorhaben RS1183 wurden insgesamt mehr als 25 Beiträge zu wissenschaftlichen Fachtagungen sowie zwei Veröffentlichungen in „Peer-reviewed“ Fachjournalen erstellt. Die folgende Übersicht zeigt diese Beiträge in chronologischer Reihenfolge (die Journalveröffentlichungen sind dabei fett gedruckt):

/01/ 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).

/02/ B. Tyobeka, A. Pautz, K. Ivanov: "DORT-TD/THERMIX solutions for the OECD/NEA/NSC PBMR400 MW coupled neutronics thermal hydraulics transient benchmark", Physor 2008, Interlaken, Schweiz, September 14-19, (2008).

/03/ 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).



/04/ B. Krzykacz-Hausmann, L. Gallner, R. Kilger, A. Pautz, W. Zwermann: "Application of a Sampling Based Uncertainty Method with Nuclear Covariance Data", UACSA-Workshop, Issy-les-Molineaux, Frankreich, 4.-5. Dezember 2008

/06/ A. Seubert, A. Pautz, R. Dagan, M. Becker, "Time-Dependent Anisotropic Distributed Source Capability in Transient 3D-Transport Code TORT-TD", M&C 2009, 03.-07. Mai 2009, Saratoga Springs, USA

/07/ A. Seubert, A. Pautz, R. Dagan, M. Becker, "Time-Dependent Anisotropic External Sources in Transient 3D-Transport Code TORT-TD", Jahrestagung Kerntechnik, 12.-14. Mai 2009, Dresden

/08/ Y. Perin, K. Velkov, A. Pautz, K. Ivanov, "Uncertainty Analysis of COBRA- TF Void Distribution Predictions for the OECD/NRC BFBT Benchmark", M&C 2009, 03.-07. Mai 2009, Saratoga Springs, USA

/09/ M. Becker, R. Dagan, C.H.M. Broders, A. Pautz, A. Seubert, G. Lohnert, "Energy-Angle Dependent Neutron Source in Deterministic Transport Codes with Spherical Harmonic Expansion", M&C 2009, 03.-07. Mai 2009, Saratoga Springs, USA

/10/ K. Velkov, A. Seubert, I. Pasichnyk, A. Pautz, "Boron Transient by the GRS Coupled System Codes QUABOX/CUBBOX-ATHLET and TORT-TD/ATHLET", Jahrestagung Kerntechnik, 12.-14. Mai 2009, Dresden

/11/ Siegfried Langenbuch, Andreas Pautz and Winfried Zwermann, "Influence of nuclear data evaluations on full scale reactor calculations", M&C 2009, 03.-07. Mai 2009, Saratoga Springs, USA

/12/ Bernard Krzykacz-Hausmann, Lucia Gallner, Andreas Pautz, Winfried Zwermann, "Application of a Sampling Based Uncertainty Method with Nuclear Covariance Data to Reactor Core Calculations", OECD/NEA UAM Benchmark, UAM-3 Workshop, Penn State University, 29 April - 1 May 2009

/13/ A. Pautz, S. Misu, W. Timm, W. Zwermann, "VENUS-9, a Valuable Experimental Power Distribution Benchmark for Modern Transport Codes", Jahrestagung Kerntechnik, 12.-14. Mai 2009, Dresden

/14/ A. Pautz, B. Tyobeka, K. Ivanov, "The Coupled Code System DORT-TD/THERMIX and its Application to the OECD/NEA/NSC PBMR400 MW Coupled Neutronics Thermal Hydraulics Transient Benchmark", Jahrestagung Kerntechnik, 12.-14. Mai 2009, Dresden

/15/ W. Zwermann, B. Krzykacz-Hausmann, L. Gallner, A. Pautz, 'Influence of Nuclear Covariance Data on Reactor Core Calculations', 2nd Intl. Workshop on Nuclear Data Evaluation for Reactor applications (WONDER2009), Cadarache, France, Sep. 29 - Oct. 2, 2009.

/16/ K. Velkov, A. Seubert, I. Pasichnyk, A. Pautz; BORON TRANSIENT ANALYSIS BY THE GRS COUPLED CODE SYSTEMS QUABOX-CUBBOX/ATHLET AND TORT-TD/ATHLET, Proceedings of the 17th International Conference on Nuclear Engineering ICONE17, July 12-16, 2009, Brussels, Belgium

/17/ M. Klein M, I. Pasichnyk, A. Pautz, K. Velkov, W. Zwermann, "ACCURACY ENHANCEMENTS OF THE COARSE-MESH DIFFUSION CORE MODEL QUABOX/CUBBOX FOR HIGHLY HETEROGENEOUS CORE CONFIGURATIONS", PHYSOR 2010, Pittsburgh, PA, USA, 09.-14.05.2010

/18/ I. Pasichnyk, M. Klein, A. Pautz, K. Velkov, W. Zwermann, "MODELING OF HIGHLY HETEROGENEOUS LWR REACTOR CORES WITH ADVANCED OPTIONS OF THE QUABOX/CUBBOX CORE SIMULATOR", JK 2010, BERLIN, 04.-06.05.2010

/19/ M. Christienne, M. Avramova, Y. Périn, A. Seubert, "COUPLED TORTTD/CTF CAPABILITY FOR HIGH-FIDELITY LWR CORE CALCULATIONS", PHYSOR 2010, Pittsburgh, PA, USA, 09.-14.05.2010

/20/ Y. Périn, A. Seubert, K. Velkov und A. Pautz, "MULTI-SCALE COUPLED CODE SYSTEMS: FROM COARSE-MESH TO HIGH-FIDELITY LWR CORE CALCULATIONS", Jahrestagung Kerntechnik, Berlin, 4.-6. Mai 2010

/21/ W. Zwermann, B. Krzykacz-Hausmann, L. Gallner, A. Pautz, "Uncertainty Analyses with Nuclear Covariance Data in Reactor Core Calculations", Jahrestagung Kerntechnik, Berlin, 4.-6. Mai 2010

/22/ W. Zwermann, A. Pautz, W. Timm, "The VENUS-7 Benchmarks: Results from

State-of-the Art Transport Codes and Nuclear Data", Jahrestagung Kerntechnik, Berlin, 4.-6. Mai 2010

/23/ Y. Périn, K. Velkov und A. Pautz, "COBRA-TF/QUABOX-CUBBOX: CODE SYSTEM FOR COUPLED CORE AND SUBCHANNEL ANALYSIS", PHYSOR 2010, Pittsburgh, PA, USA, 09.-14.05.2010

/24/ A. Pautz et al., "Zwischenbericht zum Vorhaben RS1183: Fortschrittliche Rechenmethoden zum Kernverhalten bei Reaktivitätsstörfällen", November 2010

/25/ A. Pautz, B. Tyobeka, K. Ivanov, "Application of Time-Dependent Transport Theory to High Temperature Reactors of Pebble Bed Type", Nuclear Science and Engineering, Volume 168, Number 2, pages 93-114, June 2011

/26/ M. Klein, L. Gallner, B. Krzykacz-Hausmann, A. Pautz, W. Zwermann, "Influence of Nuclear Data Uncertainties on Reactor Core Calculations", Kerntechnik 2011/03, Page 174-178

/27/ M. Klein, L. Gallner, B. Krzykacz-Hausmann, I. Pasichnyk, A. Pautz, W. Zwermann, "Influence of Nuclear Data Covariance on Reactor Core Calculations", M&C 2011, Rio de Janeiro, 2011

/28/ W. Bernnat, M. Buck, I. Pasichnyk, W. Zwermann, "Coupled Neutronics and Thermal Hydraulics Analysis for PWR with MCNP5 and ATHLET", Jahrestagung Kerntechnik, Berlin, 2011

/29/ I. Pasichnyk, M. Klein, W. Zwerman, "Influence of nuclear data covariance on transient calculations", 5th OECD-Workshop on Uncertainty Analysis in Modelling (UAM), 13-15. April 2011, Stockholm

## 9 Literaturverzeichnis

- /ALC 05/ 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)
- /ALC 95/ 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, Los Alamos National Laboratory Report LA-12969-M, (1995)
- /ANL 85/ ANL Benchmark Problem Book, 1985. ANL-Report ANL-7416, Supplement 2 and 3, (1985)
- /AVR 03/ M. Avramova, COBRA-TF Development, Qualification, and Application to Light Water Reactor Analysis, Master Thesis, The Pennsylvania State University, (2003).
- /AVR 06/ M. Avramova and D. Cuervo and K. Ivanov, Improvements and Applications of COBRA-TF for Stand-Alone and Coupled LWR Safety Analyses, PHYSOR 2006 Conference, Vancouver, Canada, (2006).
- /AVR 07/ M. Avramova, et al., "Analysis of Steady State and Transient Void Distribution Predictions for Phase I of the OECD/NRC BFBT Benchmark using CTF/NEM," Proceedings of NURETH-12 Conference, Pittsburgh, Pennsylvania, U.S.A. September 30-October 4, 2007
- /AVR 07/ M. Avramova, Development of an Innovative Spacer Grid Model Utilizing Computational Fluid Dynamics within a Sub-channel Analysis Tool, PhD Thesis, The Pennsylvania State University, 2007
- /AYD 07/ F. Aydogan, et al., "NUPEC BWR Full-Size Fine-Mesh Bundle Test (BFBT) Benchmark Volume II: Uncertainty and Sensitivity Analyses of Void Distribution and Critical Power - Specification", NEA/NSC/DOC(2007)21
- /AYY 97/ B.M. Ayyub and R.H. McCuen, "Probability, Statistics, and Reliability for Engineers", CRC Press, New York, (1997)
- /BAH 06/ T. Bahadyr, S.-Ö. Lindahl, Simulate-4 Pin Power Calculations, Physor 2006, September 9-14, Vancouver, Canada, (2006)
- /BEC 07/ C. Beckert, U. Grundmann, Development and Verification of a Multigroup SP3 Option for Reactor Calculations, Jahrestagung Kerntechnik 2007, Karlsruhe, (2007)
- /BEC 09/ M. Becker, R. Dagan, C.H.M. Broeders, A. Seubert, A. Pautz, G. Lohmert, „Energy-Angle Dependent Neutron Source in Deterministic Transport Codes with Spherical Harmonics Expansion”, International Conference on Mathematics, Computational Methods & Reactor Physics (M&C 2009), Saratoga Springs, New York, USA, May 3-7, 2009.
- /BER 01/ W. Bernnat, S. Langenbuch, M. Mattes, W. Zwermann, Validation of Nuclear Data Libraries for Reactor Safety and Design Calculations, International Conference on Nuclear Data for Science and Technology, Tsukuba, Japan, Oct. 2001

- /BER 02/ W. Bernnat, M. Mattes, S. Langenbuch, W. Zwermann, Monte Carlo Reactor Physics Calculations for Critical Assemblies and LWR Full Core Models, PHYSOR 2002, Oct. 7-11, Seoul, (2002)
- /BER 02/ 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)
- /BER 03/ W. Bernnat, S. Langenbuch, M. Mattes, W. Zwermann, The VENUS-2 MOX Core Benchmark: Three-Dimensional MCNP Calculations with Up-to-date Nuclear Data Libraries, Jahrestagung Kerntechnik, Berlin, 20.-22. Mai 2003
- /BER 03/ W. Bernnat, S. Langenbuch, W. Zwermann, Monte Carlo Large Scale Reactor Physics Calculations, Beitrag zu Int. Conference on Supercomputing in Nuclear Applications (SNA 2003), Paris, Sept. 22-24, (2003)
- /BER 10/ W. Bernnat, M. Mattes, A. Pautz, W. Zwermann, „Monte Carlo Applications with Consideration of Detailed Material Composition and Temperature Distributions in LWR and HTR”, International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications and Monte Carlo 2010 (SNA + MC2010, Hitotsubashi Memorial Hall, Tokyo, Japan, October 17-21, 2010
- /BEU 70/ S. G. Beus, “A two-phase turbulent mixing model for flow in rod bundles”, Bettis Atomic Power Laboratory, WAPD-T-2438, (1970).
- /BOU 07/ V. Bournos et al., “YALINA-Thermal Benchmark Specifications for the IAEA Coordinated Research Projects on Analytical and Experimental Benchmark Analysis on Accelerator Driven Systems and Low Enriched Uranium Fuel Utilization in Accelerator Driven Sub-Critical Assembly Systems”, IAEA (2007)
- /BRI 00/ J.F. Briesmeister, Editor, MCNP – A General Monte Carlo N-Particle Transport Code – Version 4C, Los Alamos National Laboratory Report LA-13709-M, (2000)
- /BRO 04/ C. H. M. Broeders et al., “KAPROS-E: Modular Program System for Nuclear Reactor Analysis, Status and Results of Selected Applications,” Jahrestagung Kerntechnik, Düsseldorf (2004)
- /BRO 02/ F. B. Brown, et al., „MCNP Version 5“, Trans. Am. Nucl. Soc., 87, 273 (2002)
- /CAS 91/ Casal, J. J., Stamm’ler, R. J. J., Villarino, E. A., and Ferri, A. A., 1991. “HELIOS: Geometric capabilities of a new fuel-assembly program”. Intl. Topical Meeting on Advances in Mathematics, Computations and Reactor Physics, Pittsburgh.
- /CAS 91/ J.J. Casal, R.J. Stamm’ler, E.A. Villarino, A.A. Ferri, HELIOS: Geometric Capabilities of a New Fuel Assembly Program, Int. Top. Meeting on Advances in Mathematics and Computation, Pittsburgh, USA, April 1991
- /CAS 95/ CASMO-4: A Fuel Assembly Burnup Program, User’s Manual, Studsvik/SOA-95/1, Sep. 1995
- /CEY 09/ Ce Yi, TITAN User Manual Version 1.05, Universität Florida, 2009.

- /CHA 06/ M.B. Chadwick et al., "ENDF/B-VII.0: Next Generation Evaluated Nuclear Data Library for Nuclear Science and Technology", Nuclear Data Sheets 107, pp. 2931–3118 (2006)
- /CHR 10/ M. Christienne, M. Avramova, Y. Périn, A. Seubert, "COUPLED TORT-TD/CTF CAPABILITY FOR HIGH-FIDELITY LWR CORE CALCULATIONS", PHYSOR 2010, Pittsburgh, PA, USA, 09.-14.05.2010
- /CHR 10/ M. Christienne, M. Avramova, Y. Périn, A. Seubert, "COUPLED TORTTD/ CTF CAPABILITY FOR HIGH-FIDELITY LWR CORE CALCULATIONS", PHYSOR 2010, Pittsburgh, PA, USA, 09.-14.05.2010
- /COS 69/ M. De Coster, L. Leenders, L. Mewissen, J. Ransbotyn, Experience critique VENUS – etude experimentale de la configuration n° 9, SCK/CEN report PRP/EX/N.52, Oct. 1969
- /COU 08/ T. Courau, M. Cometto, E. Girardi, D. Couyras, N. Schwartz, "Elements of Validation of Pin-by-Pin Calculations with the Future EDF Calculation Scheme Based on APOLLO2 and COCAGNE Codes", Proceedings of ICAPP'08, Anaheim, CA, USA, June 8 – 12,2008, Paper 8202
- /CUE 06/ D. Cuervo, M. Avramova, K. Ivanov, R. Miro, Evaluation and Enhancement of COBRA-TF efficiency for LWR calculations, Annals of Nuclear Energy, Vol. 33, No. 9, pp. 837-847, (2006)
- /CUR 07/ F. Curca-Tivig, S. Merk, A. Pautz, S. Thureau  
ARCADIA – A new Generation of Coupled Neutronics / Thermal- Hydraulics Code System at AREVA NP, Top Fuel 2007, September 30 – Oct. 3, San Francisco, USA, (2007)
- /FER 71/ D. Ferguson, K. Hansen, "Solutions of the Space-Dependent Reactor Kinetics Equations in Three-Dimensions", MIT-3903-4, Massachusetts Institute of Technology, August 1971
- /GER 87/ Gerwin, H., Scherer, G., 1987. 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
- /GLA 08/ H. Glaeser, "GRS Method for Uncertainty and Sensitivity Evaluation of Code Results and Applications", Science and Technology of Nuclear Installations, Hindawi Publishing Corporation, 798901 (2008).
- /GOL 01/ S. Goluoglu and H. L. Dodds, "A Time-Dependent, Three-Dimensional Neutron Transport Methodology", Nucl. Sci. Eng., 139, 248, 2001.
- /GOL 97/ S. Goluoglu, H.L. Dodds, „Development of a Time-Dependent Three-Dimensional Deterministic Neutron Transport Method“, Trans. Am. Nucl. Soc., 76, S. 219, (1997)
- /GOL 98/ K.L. Goluoglu, C.L. Bentley, R.V. Demeglio, S. Goluoglu, R.E. Pevey, I. Suslov, and H.L. Dodds, "Application of TDKENO for the Analysis of Criticality Excursion Experiments," Transactions of the American Nuclear Society, Vol. 77, pp. 145-146 (June, 1998)

- /GOM 05/ E. Gomin, M. Kalugin, D. Oleynik, "VVER-1000 MOX Core Computational Benchmark – Specification and Results", NEA/NSC/DOC(2005)17.
- /HAG 97/ A. Haghighat et al., PENTRAN - A 3-D Cartesian Parallel Sn Code with Angular, Energy, and Spatial Decomposition, Joint International Conference on Mathematical Methods and Supercomputing in Nuclear Applications, Vol. II, 1267-1276, Saratoga Springs, NY, Oct. 6-10, (1997)
- /HEB 93/ A. Hébert, "A Consistent Technique for the Pin-by-Pin Homogenization of a Pressurized Water reactor Assembly", Nuclear Science and Engineering, 113, 227 – 238 (1993)
- /HEG 98/ G. Hegyi, A. Kerezturi, I. Trosztel, S. Langenbuch, W. Horche, and K. Velkov, Improvement of Plant Transient Analysis for VVER by Coupling KIKO3D with ATHLET, Proc. ICONE-6, San Diego, California, (1998)
- /HES 03/ U. Hesse, S. Langenbuch, W. Zwermann, Nuclear Codes and Data Libraries at GRS for Reactivity and Inventory Calculations, EUROSAFE 2003, Paris, 25.-26. Nov. 2003
- /HOF 93/ E. Hofer, Probabilistische Unsicherheitsanalyse von Ergebnissen umfangreicher Rechenmodelle, GRS-A-2002, Januar 1993
- /INT 06/ "International Handbook of Evaluated Reactor Physics Benchmark Experiments", March 2008 Edition, available on DVD-ROM, NEA/NSC/DOC(2006)1
- /INT 08/ "International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments", September 2008 Edition, available on DVD-ROM, NEA/NSC/DOC(95)03.
- /IRP 10/ <http://www.nea.fr/html/dbprog/IRPhE-latest.htm>
- /IVA 07/ K. Ivanov, M. Avramova, I. Kodeli, and E. Satori, "Benchmark for Uncertainty Analysis in Modeling (UAM) for Design, Operation, and Safety Analysis of LWRs", NEA/NSC/DOC(2007)23, (2007)
- /IVA 08/ K. Ivanov, S. Langenbuch, A. Pautz, A. Seubert, K. Velkov, International Activities of Development and Validation of Coupled Codes and Their Significance for Realistic Accident Analysis, Jahrestagung Kerntechnik 2008, May 27-29, Hamburg, Germany, (2008)
- /IWA 08/ O. Iwamoto, T. Nakagawa, N. Otuka, S. Chiba, K. Okumura, G. Chiba, "JENDL Actinoid File 2008 and Plan of Covariance Evaluation", Nuclear Data Sheets 109, pp. 2885–2889 (2008)
- /JES 09/ M. A. Jessee, et al., "Development of Generalized Perturbation Theory Capability within the SCALE Code Package", International Conference on Mathematics, Computational Methods & Reactor Physics (M&C 2009), Saratoga Springs, NY, (2009)
- /JOH 92/ Johnson, J.O., 1992. A User's Manual for MASH 1.0, A Monte Carlo Adjoint Shielding Code System", (contains the DORT documentation), ORNL/TM-11778, Oak Ridge.
- /JOO 04/ H.G. Joo et al., Methods and Performance of a Three-Dimensional Whole-Core Transport Code DeCART, Physor 2004, April 25-29, Chicago, U.S., (2004)

- /KEN 04/ A. Stuart and K. Ord, "Kendall's Advanced Theory of Statistics", Vol. 1, John Wiley & Sons Ltd, Chichester, (2004)
- /KIM 84/ M.H. Kim, J. Chang, K.S. Moon, C.K. Lee, "An Application of Homogenization Theory to the Coarse-Mesh Nodal Calculation of PWRs", J. of the Korean Nucl. Soc., 16, 202-216, (1984)
- /KIY 07/ H. Kiyavitskaya, "YALINA Subcritical Facility to investigate neutronics of ADS: Yalina-Thermal Benchmark, Yalina-Booster Benchmark", IAEA Technical Meeting, Rome, Italy, 12-16 November (2007)
- /KLE 10/ M. Klein M, I. Pasichnyk, A. Pautz, K. Velkov, W. Zwermann, "ACCURACY ENHANCEMENTS OF THE COARSE-MESH DIFFUSION CORE MODEL QUABBOX/CUBBOX FOR HIGHLY HETEROGENEOUS CORE CONFIGURATIONS", PHYSOR 2010, Pittsburgh, PA, USA, 09.-14.05.2010
- /KLE 10/ M. Klein M, I. Pasichnyk, A. Pautz, K. Velkov, W. Zwermann, "ACCURACY ENHANCEMENTS OF THE COARSE-MESH DIFFUSION CORE MODEL QUABBOX/CUBBOX FOR HIGHLY HETEROGENEOUS CORE CONFIGURATIONS", PHYSOR 2010, Pittsburgh, PA, USA, 09.-14.05.2010
- /KLE 10b/ Markus Klein, Bernard Krzykacz-Hausmann, Lucia Gallner, Andreas Pautz, Winfried Zwermann, "Application of a Sampling Based Uncertainty Method with Nuclear Covariance Data to Reactor Core Calculations", OECD/NEA UAM Benchmark, UAM-4 Workshop, Pisa University, 2010
- /KOD 01/ I. Kodeli, "Multidimensional Deterministic Nuclear Data Sensitivity and Uncertainty Code System: Method and Application", Nucl. Sci. Eng., 138, 45-66, (2001)
- /KOM 07/ Kompetenzverbund Kerntechnik , Themen der nuklearen Sicherheits und Endlagerforschung in Deutschland 2007-2011, Internet-Adresse: [http://www.grs.de/module/layout\\_upload/071214\\_bericht\\_kvkt\\_endg\\_ev.pdf](http://www.grs.de/module/layout_upload/071214_bericht_kvkt_endg_ev.pdf), zuletzt abgerufen am 04.06.2008
- /KON 06/ A. Koning, R. Forrest, M. Kellett, R. Mills, H. Henriksson, Y. Rugama, "The JEFF-3.1 Nuclear Data Library", JEFF Report 21, NEA No. 6190, [http://www.nea.fr/html/dbdata/nds\\_jefreports/jeffreport-21/jeff21.pdf](http://www.nea.fr/html/dbdata/nds_jefreports/jeffreport-21/jeff21.pdf) (2006)
- /KOZ 03/ T. Kozlowski, T. J. Downar, OECD/NEA and U.S. NRC PWR MOX/UO<sub>2</sub> Core Transient Benchmark, Working Party of the Physics of Plutonium Fuels and Innovative Fuel Cycles, OECD/NEA Nuclear Science Committee (2003)
- /KOZ 06/ T. Kozlowski, T. J. Downar, "The PWR MOX/UO<sub>2</sub> Core Transient Benchmark", Final Report, NEA/NSC/DOC(2006)20, [https://engineering.purdue.edu/PARCS/MOX\\_Benchmark](https://engineering.purdue.edu/PARCS/MOX_Benchmark), (2006).
- /KOZ 07/ T. Kozlowski, T. J. Downar, Pressurised Water Reactor MOX/UO<sub>2</sub> Core Transient Benchmark, Final Report, December 2006, NEA/NSC/DOC(2006)
- /KRZ 08/ Bernard Krzykacz-Hausmann, Lucia Gallner, Robert Kilger, Andreas Pautz, Winfried Zwermann, "Application of a Sampling Based Uncertainty Method with Nuclear Covariance Data", UACSA-Workshop, Issy-les-Moulineaux, Frankreich, 4.-5. Dezember 2008



- /KRZ 08/ Bernard Krzykacz-Hausmann, Lucia Gallner, Robert Kilger, Andreas Pautz, Winfried Zwermann, "Application of a Sampling Based Uncertainty Method with Nuclear Covariance Data", UACSA-Workshop, Issy-les-Moulineaux, Frankreich, 4.-5. Dezember 2008
- /KRZ 09/ Bernard Krzykacz-Hausmann, Lucia Gallner, Andreas Pautz, Winfried Zwermann, "Application of a Sampling Based Uncertainty Method with Nuclear Covariance Data to Reactor Core Calculations", OECD/NEA UAM Benchmark, UAM-3 Workshop, Penn State University, 29 April - 1 May 2009
- /KRZ 94/ B. Krzykacz, E. Hofer, and M. Kloos, "A Software System for Probabilistic Uncertainty and Sensitivity Analysis of Results from Computer Models", International Conference on Probabilistic Safety Assessment and Management (PSAM-II), San Diego, CA, USA,(1994)
- /KRZ 94/ B. Krzykacz, E. Hofer, M. Kloos, "A Software System for Probabilistic Uncertainty and Sensitivity Analysis of Results from Computer Models", International Conference on Probabilistic Safety Assessment and Management (PSAM-II), San Diego, Ca., USA, March 20 – 25, 1994
- /KÜH 08/ Klaus Kühnel, Albin Gensler, Klaus Richter, PWR Core Transient Analysis with the 3-Dimensional Methods, Jahrestagung Kerntechnik, May 27-29, Hamburg, Germany, (2008)
- /KUI 10/ J.C. Kuijper et al., "Plutonium and Minor Actinide Management in Thermal High-Temperature Gas-Cooled Reactors", Publishable Final Activity Report, issued in June 2010, accessible via [http://janleenkloosterman.nl/reports/puma\\_final\\_201006.pdf](http://janleenkloosterman.nl/reports/puma_final_201006.pdf) (date of last access: 2010-11-15).
- /LAH 93/ R. T. Lahey and F. J. Moody, The Thermal Hydraulics of a Boiling Water Nuclear Reactor, American Nuclear Society (ANS) (1993).
- /LAN 04/ S. Langenbuch, K. Velkov, The Capability of the Coupled Code System ATHLET-QUABOX/CUBBOX – Experience and Development, ANS-2004 Annual Meeting, Pittsburg, June 13-17, 2004
- /LAN 05/ S. Langenbuch, A. Seubert, W. Zwermann, Monte Carlo and Deterministic Transport Methods Applied to Reactor Calculations, Mathematics & Computations 2005, September 12-15, Avignon, France, (2005)
- /LAN 05/ S. Langenbuch, K. Velkov, "Overview on the Development and Application of the Coupled Code System ATHLET – QUABOX-CUBBOX", Mathematics and Computation, Supercomputing, Reactor Physics and Nuclear and Biological Applications, Avignon, France (2005)
- /LAN 07/ S. Langenbuch, A. Seubert, W. Zwermann, High Accuracy Large Scale Monte Carlo and Deterministic Transport Calculations for Critical Systems, M&C + SNA 2007, April 15-19, Monterey, (CA), USA, (2007)
- /LAN 08/ S. Langenbuch, A. Pautz, W. Zwermann, Effects of Nuclear Data on Core Calculations, OECD/NEA UAM-2 Workshop, April 2-4, Garching, (2008)

- /LAN 09/ Siegfried Langenbuch, Andreas Pautz and Winfried Zwermann, "Influence of nuclear data evaluations on full scale reactor calculations", M&C 2009, 03.-07. Mai 2009, Saratoga Springs, USA
- /LAN 77/ Langenbuch, S., Maurer, W., and Werner, W., "Coarse mesh flux expansion method for the analysis of space-time effects in large LWR cores". Nucl. Sci. Eng. 63 (1977) 437.
- /LAN 77/ S. Langenbuch, W. Maurer, W. Werner, Coarse Mesh Flux-Expansion Method for the Analysis of Space-Time Effects in Large Light Water Reactor Cores, Nucl. Sci. Eng., Vol. 63, p. 437, (1977)
- /LAN 77/ S. Langenbuch, W. Maurer, W. Werner, High Order Schemes for Neutron Kinetics Calculations based on Local Polynomial Approximation, Nucl. Sci. Eng., Vol. 64, p. 508, (1977)
- /LAN 77/ Langenbuch, Werner, Maurer, Nucl. Sci. Eng. 63 (1977) 437
- /LAU 90/ J. J. Lautard, S. Loubiere, and C. Fedon-Magnaud, CRONOS: A Computational Modular Code System for Neutronic Core Calculations, Proc. IAEA Specialist Mtg. Advanced Computational Methods for Power Reactors, Cadarache, France, September 10–14, (1990)
- /LER 03/ Lerchl, G., Austregesilo, H., 2003. "ATHLET Mod2 Cycle A, User's Manual". GRS 2003.
- /LER 03/ G. Lerchl, H. Austregesilo, ATHLET Mod2 Cycle A, User's Manual, GRS 2003
- /LEW 01/ E.E. Lewis u.a. Benchmark Specification for Deterministic 2D/3D-MOX Fuel Assembly Transport Calculations without Spatial Homogenisation (G5G7-MOX) NEA/NSC/DOC (2001) 4, (2001)
- /LEW 04/ E.E. Lewis, M.A. Smith, and B.C. Na Guest Editors, Progress in Nuclear Energy, Volume 45, Issues 2-4, (2004)
- /LIZ 92/ M. P. Lizorkin, V. N. Semonov, V. S. Ionov and V. I. Lebedev, Time-Dependent Spatial Neutron Kinetic Algorithm for BIPR-8 and Its Verification, Proc. 2nd Symp. AER, Paks, Hungary, p. 389, (1992)
- /LOU 04/ S. Loubiere, R. Sanchez et al. APOLLO-2 Twelve Years Later, Proceedings of Mathematics & Computation, Vol. 2, pp. 1298-1315, Madrid, Spain, (2004)
- /MAC 94/ R.E. MacFarlane & D.W. Muir, The NJOY Nuclear Data Processing System, Version 91, LA-12740-M (October 1994)
- /MAR 07/ J. Marten, F. Clément, V. Marotte, E. Martinolli, S. Misu, S. Thareau, L. Villatte, The new AREVA NP spectral code APOLLO2-A, Jahrestagung Kerntechnik, Karlsruhe, Germany, May 2007
- /MAR 94/ G. Marleau, R. Roy and A. Hébert, DRAGON: A Collision Probability Transport Code for Cell and Supercell Calculations, Report IGE-157, Institut de génie nucléaire, École Polytechnique de Montréal, Montréal, Québec (1994)
- /MAT 97/ Mathews, D., 1997. An Improved Version of the MICROX-2 Code, Paul Scherrer Institute, Switzerland, PSI Bericht Nr. 97-11.
- /MES 05/ N. Messaoudi, P. Baeten, B.-C. Na, "Benchmark on the VENUS Plutonium Recycling Experiments – Configuration 7", NEA/NSC/DOC(2005)11.

- /NEA 00/ Prediction of Neutron Embrittlement in the Reactor Pressure Vessel – VENUS-1 and VENUS-3 Benchmarks, OECD/NEA Report NEA/NSC/DOC(2000) 5
- /NEA 02/ A VVER-1000 LEU And MOX Assembly Computational Benchmark – Specification And Results, NEA/NSC/DOC(2002)10
- /NEA 02/ NEA-Report: Deterministic 2D/3D MOX Fuel Assembly Transport Calculations without spatial homogenisation (G5G7-MOX), Oct. 2002 NEA/NSC/DOC (2003) 16, ISBN 92-64-02139-6
- /NEA 04/ Benchmark on the Three-dimensional MOX Core Measurements – Final Report”, NEA/NSC/DOC(2003)5
- /NEA 04/ Benchmark on Deterministic 3D MOX fuel assembly transport calculations without spatial homogenisation (C5G7 MOX Benchmark Extension) NEA/NSC/DOC (2004)
- /NEA 07/ OECD Benchmark for Uncertainty Analysis in Best-Estimate Modeling (UAM) for Design, Operation and Safety Analysis of LWRs, NEA/NSC/DOC(2007)4
- /NEY 05/ B. Neykov, et al., “NUPEC BWR Full-Size Fine-Mesh Bundle Test (BFBT) Benchmark, Volume I: Specifications”, NEA/NSC/DOC(2005).
- /NIS 02/ NIST Core Math LIBrary CMLIB, in “Guide to Available Mathematical Software,” available on the Internet at <http://gams.nist.gov/serve.cgi/Package/CMLIB>, (2002).
- /NUR 08/ The NURESIM Project, verfügbar in [www.nuresim.com](http://www.nuresim.com), letzter Zugriff: 04.06.2008
- /OLI 96/ C. R. E. de Oliveira and A. J. H. Goddard, EVENT: A Multidimensional Finite Element-Spherical Harmonics Radiation Transport Code, Proc. 3D Deterministic Radiation Transport Computer Programs, Paris, France, December 2–3, (1996)
- /PAS 10/ I. Pasichnyk, M. Klein, A. Pautz, K. Velkov, W. Zwermann, "MODELING OF HIGHLY HETEROGENEOUS LWR REACTOR CORES WITH ADVANCED OPTIONS OF THE QUABOX/CUBBOX CORE SIMULATOR", JK 2010, BERLIN, 04.-06.05.2010
- /PAU 03/ A. Pautz and A. Birkhofer, “DORT-TD: A Transient Neutron Transport Code with Fully Implicit Time Integration”, Nucl. Sci. Eng., 145, 299-319, (2003)
- /PAU 03/ A. Pautz, S. Langenbuch Experiences in the Parallelization of the Discrete Ordinates Method Using OPENMP and MPI, Beitrag zu Int. Conference on Supercomputing in Nuclear Applications (SNA 2003), Paris, Sept. 22-24, (2003)
- /PAU 03/ A. Pautz, U. Hesse, W. Zwermann, S. Langenbuch Fuel Assembly Calculations using the Methods of Discrete Ordinates, Beitrag zu Nuclear Mathematical and Computational Sciences, Gatlinburg, Tenn. April 6-11, (2003)
- /PAU 03/ 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, Nucl. Sci. Eng. Vol. 145, pp. 320-341, (2003)

- /PAU 04/ A. Pautz, "Results on the OECD/NEA C5G7-MOX benchmark obtained with the discrete ordinates code DORT", Prog. Nucl. Energy 45, No. 2-4 (2004) 153
- /PAU 05/ A. Pautz et al., Application of the Discrete Ordinates Code DORT to Fuel Lattices: Benchmark Results and Improved Cross Section Generation Capabilities, Mathematics & Computation 2005, September 12-15, Avignon, France, (2005)
- /PAU 06/ A. Pautz et al., Improved Strategies for Fuel Assembly, Pin Cell and Reflector Cross Section Generation Using the Discrete Ordinates Code DORT, Physor 2006, September 9-14, Vancouver, Canada, (2006)
- /PAU 08/ A. Pautz, B. Tyobeka, K. Ivanov, Application of Time-Dependent Neutron Transport Theory To High-Temperature Reactors of Pebble Bed Type, accepted for Physor 2008, September 14-19, Interlaken, Switzerland, (2008)
- /PAU 09/ A. Pautz, B. Tyobeka, K. Ivanov, "The Coupled Code System DORT-TD/THERMIX and its Application to the OECD/NEA/NSC PBMR400 MW Coupled Neutronics Thermal Hydraulics Transient Benchmark", Jahrestagung Kerntechnik, 12.-14. Mai 2009, Dresden
- /PAU 09/ A. Pautz, S. Misu, W. Timm, W. Zwermann, "VENUS-9, a Valuable Experimental Power Distribution Benchmark for Modern Transport Codes", Jahrestagung Kerntechnik, 12.-14. Mai 2009, Dresden
- /PAU 09/ A. Pautz, B. Tyobeka, K. Ivanov, "The Coupled Code System DORTTD/ THERMIX and its Application to the OECD/NEA/NSC PBMR400 MW Coupled Neutronics Thermal Hydraulics Transient Benchmark", Jahrestagung Kerntechnik, 12.-14. Mai 2009, Dresden
- /PAU 10/ A. Pautz, B. Tyobeka, K. Ivanov, "Application of Time-Dependent Neutron Transport Theory to High Temperature Reactors of Pebble-Bed Type", eingereicht und akzeptiert durch Nuclear Science and Engineering, 2010
- /PAY 85/ C. Y. Payk, et al., "Analysis of FLECHT SEASET 163-Rod Blocked Bundle Data using COBRA-TF", NRC/EPRI/Westinghouse-12, (1985).
- /PER 05/ C.-M. Persson, "Reactivity Determination and Monte Carlo Simulation of the Subcritical Reactor Experiment – Yalina", M.Sc. thesis, Royal Institute of Technology, Stockholm (2005)
- /PER 09/ Y. Perin, K. Velkov, A. Pautz, K. Ivanov, "Uncertainty Analysis of COBRA-TF Void Distribution Predictions for the OECD/NRC BFBT Benchmark", eingereicht bei M&C 2009, 03.-07. Mai 2009, Saratoga Springs, USA
- /PER 10/ Y. Périn, K. Velkov und A. Pautz, "COBRA-TF/QUABOX-CUBBOX: CODE SYSTEM FOR COUPLED CORE AND SUBCHANNEL ANALYSIS", PHYSOR 2010, Pittsburgh, PA, USA, 09.-14.05.2010
- /PER 10/ Y. Périn, A. Seubert, K. Velkov und A. Pautz, "MULTI-SCALE COUPLED CODE SYSTEMS: FROM COARSE-MESH TO HIGH-FIDELITY LWR CORE CALCULATIONS", Jahrestagung Kerntechnik, Berlin, 4.-6. Mai 2010

- /PET 09/ L. M. Petrie, N. F. Landers, D. F. Hollenbach, B. T. Rearden, M. E. Dunn, S. Goluoglu, "KENO-V.a: An Improved Monte Carlo Criticality Program", ORNL/TM-2005/39, Version 6, Vol. II, Sect. F11 (January 2009).
- /REA 07/ B. T. Rearden, "TSUNAMI Sensitivity and Uncertainty Analysis Capabilities in SCALE 5.1," Trans. Am. Nucl. Soc. 97, pp. 604-605 (2007)
- /REI 05/ Reitsma, F, et.al "OECD/NEA/NSC PBMR Coupled Neutronics/Thermal hydraulics Transient Benchmark Specification", OECD Workshop, Paris, 2005, available on the internet: <http://www.nea.fr/science/wprs/pbmr400>
- /REI 06/ F. Reitsma, G. Strydom, J.B.M. De Haas, K. Ivanov, B. Tyobeka, R. Mphahlele, T. J. Downar, V. Seker, H.D. Gougar, D.F. Da Cruz, "The PBMR Steady State and Coupled Kinetics Core Thermal-Hydraulics Benchmark Test Problems", Nucl. Eng. Des. 236, 657, (2006).
- /REI 08/ F. Reitsma, J. Han, K. Ivanov, E. Sartori, "The OECD/NEA/NSC PBMR400 MW Coupled Neutronics Thermal Hydraulics Transient Benchmark – Steady-state Results and Status", Proceedings of PHYSOR2008 Meeting, Interlaken, Switzerland, September 14-19, 2008.
- /RHO 82/ W. A. Rhoades, M. B. Emmett, GIP: Group-Organized Cross Section Input Program, ORNL/TM-8362 (1982)
- /RHO 88/ W. A. Rhoades and R. L. Childs, The DORT Two-Dimensional Discrete Ordinates Transport Code, Nucl. Sci. Eng. 99, 88 (1988)
- /RHO 91/ W. A. Rhoades, R. L. Childs, The TORT Three-dimensional Discrete Ordinates Neutron/Photon Transport Code, (ORNL-6268), Nucl. Sci. Eng. 107 (1991) 397
- /RHO 97/ W. A. Rhoades and D. B. Simpson, " The TORT Three-Dimensional Discrete Ordinates Neutron/Photon Transport Code", ORNL/TM-13221, Oak Ridge National Laboratory, (1997)
- /ROG 72/ J. T. Rogers and R. G. Rosehart, "Mixing by Turbulent Interchange in Fuel Bundles, Correlations and Inferences", ASME, 72-HT-53, (1972).
- /SCA 06/ SCALE: A Modular Code System for Performing Standardized Computer Analyses for Licensing, Version 5.1 ORNL/TM-2005/39, (2006)
- /SCA 09/ "SCALE: A Modular Code System for Performing Standardized Computer Analyses for Licensing Evaluation, Version 6", ORNL/TM-2005/39, (2009)
- /SCA 09/ "SCALE: A Modular Code System for Performing Standardized Computer Analyses for Licensing Evaluation, Version 6", ORNL/TM-2005/39 (2009).
- /SEN 06/ O. Schenk, K. Gärtner, "On fast factorization pivoting methods for symmetric indefinite systems", Elec. Trans. Numer. Anal, 23 (2006) 158-179.
- /SEN 07/ O. Schenk, A. Wächter, M. Hagemann, "Matching-based preprocessing algorithms to the solution of saddle-point problems in large-scale non-convex interior-point optimization", Comput. Optim. Appl. 36 (2007) 321.

- /SEU 04/ A. Seubert, S. Langenbuch, W. Zwermann, Solving the C5G7 3D-Extension Benchmark Problem with the SN-Code TORT, Jahrestagung Kerntechnik, Düsseldorf. 25. – 27. Mai 2004
- /SEU 04/ A. Seubert, S. Langenbuch, W. Zwermann, Solution of the C5G7 3D-Extension Benchmark by the SN-Code TORT, PHYSOR 2004, Reactor Physics Topical Meeting, April 25-29, 2004, Chicago, Ill., U.S.A
- /SEU 04/ A. Seubert, S. Langenbuch, W. Zwermann, Entwicklung des zeitabhängigen 3D-SN-Neutronen-Transportcodes TORT-TD, GRS-A-3237, Nov. 2004
- /SEU 05/ A. Seubert, S. Langenbuch, W. Zwermann, Solving the C5G7 3D-Extension Benchmark with the SN-Code TORT, Mathematics & Computation 2005, September 12-15, Avignon, France
- /SEU 06/ A. Seubert, S. Langenbuch, W. Zwermann, Solution of the Stationary State of the PWR MOX/UO<sub>2</sub> Core Transient, Benchmark, Physor 2006, September 9-14, Vancouver, Canada
- /SEU 06/ A. Seubert, W. Zwermann, S. Langenbuch, „Solution of the C5G7 3-D extension benchmark by the SN code TORT“, Prog. Nucl. Energy 48, No. 5 (2006) 432
- /SEU 07/ Applicability of Deterministic and Monte Carlo Neutron Transport Models Coupled with Thermo-Fluidynamics, Eurosafe 2007, November 5-6, Berlin, Germany, (2007)
- /SEU 08/ Seubert, A., Velkov, K., and Langenbuch, S., “The time-dependent 3-D discrete ordinates code TORT-TD with thermal-hydraulic feedback by ATHLET models”. PHYSOR-2008, Interlaken, Switzerland, Sep. 14-19, 2008.
- /SEU 08/ A. Seubert, S. Langenbuch, K.Velkov, W. Zwermann, Deterministic and Monte Carlo Transport Models with Thermal Hydraulic Feedback, Jahrestagung Kerntechnik 2008, May 27-29, Hamburg, Germany
- /SEU 09/ A. Seubert, A. Pautz, R. Dagan, M. Becker, "Time-Dependent Anisotropic Distributed Source Capability in Transient 3D-Transport Code TORT-TD", M&C 2009, 03.-07. Mai 2009, Saratoga Springs, USA
- /SEU 09/ A. Seubert, A. Pautz, R. Dagan, M. Becker, "Time-Dependent Anisotropic Distributed Source Capability in Transient 3D-Transport Code TORT-TD", M&C 2009, 03.-07. Mai 2009, Saratoga Springs, USA
- /SEU 09/ A. Seubert, A. Pautz, R. Dagan, M. Becker, "Time-Dependent Anisotropic External Sources in Transient 3D-Transport Code TORT-TD", Jahrestagung Kerntechnik, 12.-14. Mai 2009, Dresden
- /SEU 10/ A. Seubert, A. Sureda, J. Bader, J. Lapins, M. Buck, E. Laurien, “The 3-D time-dependent transport code TORT-TD and its coupling with the 3D thermal-hydraulic code ATTICA-3D for HTGR applications”, Proceedings of the 5th International Conference on High Temperature Reactor Technology, Prague, Czech Republic, 18–20 October 2010
- /SEU 10/ ACCURACY ENHANCEMENTS OF THE COARSE-MESH DIFFUSION CORE MODEL QUABBOX/CUBBOX FOR HIGHLY HETEROGENEOUS CORE CONFIGURATIONS”, PHYOR 2010, Pittsburgh, PA, USA, 09.-14.05.2010

- /SEU 10/ Modeling of Highly Heterogeneous LWR Reactor Cores with Advanced Options of the QUABOX/CUBBOX Core Simulator”, JK 2010, Berlin, 04.-06.05.2010
- /SMI 03/ M. A. Smith, G. Palmiotti, T. A. Taiwo, E. E. Lewis and N. Tsoufanidis, Benchmark specification for deterministic MOX fuel assembly transport calculations without spatial homogenisation (3-D extension C5G7 MOX), NEA/NSC/DOC(2003) 6
- /STA 07/ W.M. Stacey, Nuclear Reactor Physics, Wiley (2007)
- /STR 10/ G. Strydom, F. Reitsma, P. Ngeleka, K. Ivanov, “The OECD/NEA/NSC PBMR 400 MW Coupled Neutronics Thermal Hydraulics Transient Benchmark: Transient Results”, PHYSOR 2010, Pittsburgh, Pennsylvania, USA, May 9-14, 2010
- /STR 99/ S. Struth et al., DIREKT – A Computer Programme for Non-Steady Two-Dimensional Simulation of Thermal-Hydraulics Transients, Forschungszentrum Jülich, Report-Nr.: JÜL-1702, (1999)
- /TAT 06/ M. Tatsumi et al., Calculation Models of AEGIS/SCOPE-2, a Core Calculation System of Next Generation, Physor 2006, September 9-14, Vancouver, Canada, (2006)
- /TYO 05/ Tyobeka, B., Pautz, A., Ivanov, K., 2005. Preliminary Investigations on the Importance of Using Transport Methods for the Analysis of the PBMR, ANS Winter Meeting, Washington DC, November 13-17.
- /TYO 07/ B. Tyobeka, A. Pautz, K. Ivanov, Analysis of PBMR Transients Using a Coupled Neutron Transport / Thermal Hydraulics Code DORT-TD/THERMIX, ICAPP 2007, May 13-18, Nice, France, (2007)
- /TYO 08/ Tyobeka, B., Ivanov, K, Pautz, A., 2008. Evaluation of PBMR Control Rod Worth Using full Three-Dimensional Deterministic Transport Methods. Annals of Nuclear Energy, in Press, available online at [www.elsevier.com](http://www.elsevier.com)
- /VEL 09/ K. Velkov, A. Seubert, I. Pasichnyk, A. Pautz, “BORON TRANSIENT ANALYSIS BY THE GRS COUPLED CODE SYSTEMS QUABOX-CUBBOX/ATHLET AND TORT-TD/ATHLET”, Proceedings of the 17th International Conference on Nuclear Engineering ICONE17, July 12-16, 2009, Brussels, Belgium
- /VEL 09/ K. Velkov, A. Seubert, I. Pasichnyk, A. Pautz, "Boron Transient by the GRS Coupled System Codes QUABOX/CUBBOX-ATHLET and TORT-TD/ATHLET", Jahrestagung Kerntechnik, 12.-14. Mai 2009, Dresden
- /WEB 06/ D. Weber et al., Extension of Integrated Neutronic and Thermal-Hydraulic Analysis Capabilities of the “Numerical Nuclear Reactor Software System for BWR Applications, Physor 2006, September 9-14, Vancouver, Canada, (2006)
- /WIL 09/ M. L. Williams and B. T. Rearden, “SCALE-6 Sensitivity/Uncertainty Methods and Covariance Data”, Nuclear Data Sheets, 109(12), 2796, (2009)
- /WIL 09/ M. L. Williams, M. A. Jessee, “TSAR: Tool for Sensitivity Analysis of Reactivity Responses”, ORNL/TM-2005/39, Version 6, Vol. III, Sect. M23 (January 2009).

- /WIL 41/ S. S. Wilks, "Determination of sample sizes for setting tolerance limits", *Annals of Mathematical Statistics*, 12(1), 91-96, (1941)
- /X-5 03/ X-5 Monte Carlo Team, MCNP – A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5, LA-UR-03-1987 (2003).
- /YAL 08/ H. Kiyavitskaja et al. Experimental Investigations at Sub-critical Facilities of Joint Institute For Power And Nuclear Research Sosny, online verfügbar;  
[http://www.iaea.org/OurWork/ST/NE/NEFW/documents/TMonUseofLEUonADS/PDFPapers/Kiyavitskaya\\_Paper.pdf](http://www.iaea.org/OurWork/ST/NE/NEFW/documents/TMonUseofLEUonADS/PDFPapers/Kiyavitskaya_Paper.pdf), zuletzt abgerufen 04.06.2008
- /ZIE 94/ O. C. Zienkiewicz, R. L. Taylor, „The Finite Element Method. Vol. 1: Basic Formulation and Linear Problems“, 4th edition, MacGraw-Hill Book Company, 1994.
- /ZWE 04/ W. Zwermann, S. Langenbuch, A. Seubert, Berechnungen von Uran- und MOX-Kritikalitätsexperimenten und -Benchmarks mit deterministischen und Monte-Carlo-Neutronentransportprogrammen, GRS-A-3223, Sept. 2004
- /ZWE 08/ W. Zwermann, S. Langenbuch, B.-C. Na, E. Sartori, U.K. Wehmann, Summary of Results for the VENUS-7 Benchmark, PHYSOR Conference, Interlaken, Switzerland, Sep. 2008.
- /ZWE 09/ W. Zwermann, A. Pautz, S. Misu, W. Timm, „VENUS-9, a Valuable Experimental Power Distribution Benchmark for Modern Transport Codes“, Jahrestagung Kerntechnik, 12.-14. Mai 2009, Dresden
- /ZWE 09/ W. Zwermann, B. Krzykacz-Hausmann, L. Gallner, A. Pautz, "Influence of Nuclear Covariance Data on Reactor Core Calculations", 2nd Intl. Workshop on Nuclear Data Evaluation for Reactor applications (WONDER2009), Cadarache, France, Sep. 29 - Oct. 2, 2009.
- /ZWE 09/ Siegfried Langenbuch, Andreas Pautz and Winfried Zwermann, "Influence of nuclear data evaluations on full scale reactor calculations", M&C 2009, 03.-07. Mai 2009, Saratoga Springs, USA
- /ZWE 10/ W. Zwermann, A. Pautz, W. Timm, "The VENUS-7 Benchmarks: Results from State-of-the-Art Transport Codes and Nuclear Data", Jahrestagung Kerntechnik, Berlin, 4.-6. Mai 2010



## 10 Verteiler

		Exemplare: gedruckt	Exemplare: pdf	CD-ROM
<b>BMW</b>				
Referat III B 4		1 x		
<b>GRS-PT/B</b>				
Internationale Verteilung	(FIZ)	10 x		30 x
Projektbegleiter	(ket)	2 x	1 x	1 x
<b>GRS</b>				
Geschäftsführung	(wep, stj)		je 1 x	
Bereichsleiter	(erv, paa, prg, rot, stc, ver, zir)		je 1 x	
Abteilungsleiter	(luw, poi, som, vek)		je 1 x	
Projektleitung	(paa)	1 x		
Projektbetreuung	(wal)		1 x	
Informationsverarbeitung	(nit)		1 x	
Bibliothek	(Köln)	1 x		
Autoren	(per, pas, vek, zww, seu, kle, muh, krb)	je 1 x	je 1 x	
<b>Gesamtauflage</b>	<b>Exemplare</b>	<b>23</b>		<b>31</b>



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

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

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

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

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

**[www.grs.de](http://www.grs.de)**