

**Weiterentwicklung  
und Validierung von  
Rechenmethoden  
zu Hochabbrand,  
Aktivierung und  
Abschirmung**

Abschlussbericht



## **Abschlussbericht/ Final Report**

Reaktorsicherheitsforschung-  
Vorhabens Nr.:/  
Reactor Safety Research-Project No.:  
RS1189

Vorhabentitel / Project Title:  
Weiterentwicklung und  
Validierung von Rechen-  
methoden zu Hochabbrand,  
Aktivierung und Abschirmung

Enhancement and Advanced  
Validation of Computational Me-  
thods for High-Burnup,  
Activation

Autor / Authors:  
M. Behler, L. Gallner, V. Hannstein,  
R. Kilger, M. Kirsch, M. Klein, B.  
Krzykacz-Hausmann, E.F. Moser,  
A. Pautz, Y. Perin, F. Puente-Espel,  
A. Seubert, A. Sureda, K. Velkov,  
M. Wagner, W. Zwermann

Berichtszeitraum / Publication Date:  
Juli 2012

Anmerkung:  
Das diesem Bericht zugrunde  
liegende F&E-Vorhaben wird im  
Auftrag des Bundesministeriums  
für Wirtschaft und Technologie  
(BMWi) unter dem Kennzeichen  
RS1189 durchgeführt.

Die Verantwortung für den Inhalt  
dieser Veröffentlichung liegt  
beim Auftragnehmer.

**GRS - A - 3680**





## **Kurzfassung**

Der vorliegende Bericht dokumentiert die im RS-Forschungsprojekt RS1189 „Weiterentwicklung und Validierung von Rechenmethoden zu Hochabbrand, Aktivierung und Abschirmung“ erreichten Forschungs- und Entwicklungsziele. Das übergeordnete Ziel des Projekts ist die Entwicklung und Validierung fortgeschrittener neutronenphysikalischer Rechenmethoden für Hochabbrand-, Aktivierungs- und Abschirmungsberechnungen. Diese Rechenmethoden sollen im Wesentlichen für Fragestellungen, die sich mit Abbrand, Aktivierung und Abschirmung bei Leichtwasserreaktoren beschäftigen, eingesetzt werden. Dazu beitragende Einzelzielsetzungen sind die Verbreiterung der Validierungsgrundlage und die Qualifikation des GRS-Nuklidinventar- und Abbrandcodesystems KENOREST für hohe Brennelementabbrände durch Aktualisierung der nuklearen Datenbasis und durch Ergänzung von Softwarekomponenten zur Automatisierung und Brennelement-Modellierung, die Implementierung einer qualifizierten Rechenmethodik zur Bestimmung von Unsicherheiten und Sensitivitäten, sowie die Integration von deterministischen neutronentransporttheoretischen Rechenmethoden in KENOREST für Abbrand-, Aktivierungs- und Fluenzberechnungen und zur Querschnittserzeugung für nachgelagerte 3D-Ganzkernrechnungen; dadurch wird der Funktionsumfang des existierenden Programmsystems erheblich erweitert.

## **Abstract**

This report documents the research and development goals reached within the reactor safety research project RS1189 “Enhancement and Advanced Validation of Computational Methods for High-Burnup, Activation, and Shielding”. The superordinate goal of the project is the development and validation of advanced neutron physical calculation methods for high burnup, activation, and shielding calculations. These calculation methods are substantially to be applied for problems related to burnup, activation, and shielding with light water reactors. Contributions to this goal are the broadening of the validation basis and the qualification of the GRS nuclide inventory and depletion code system KENOREST for high fuel assembly burnups by updating the nuclear data basis and by adding code components for automatizing and fuel assembly modeling, the implementation of a qualified calculation method for determining uncertainties and sensitivities, and the integration of deterministic neutron transport calculation methods in KENOREST for burnup, activation, and fluence calculations and for cross section production for subsequent 3D full core calculations; thereby, the functional range of the existing code system is extended substantially.

## **Inhaltsverzeichnis**

<b>1</b>	<b>Einleitung .....</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Zielsetzung.....</b>	<b>6</b>
<b>3</b>	<b>AP1: Validierung des Reaktivitäts- und Nuklidinventarcodes KENOREST.....</b>	<b>7</b>
<b>4</b>	<b>AP2: Aktualisierung von KENOREST-Bibliotheken und Software- Modulen.....</b>	<b>29</b>
<b>5</b>	<b>AP3: Methoden zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse.....</b>	<b>38</b>
<b>6</b>	<b>AP4: Integration des deterministischen Neutronentransportcodes DORT in die Abbrandrechnung .....</b>	<b>49</b>
<b>7</b>	<b>AP5: Erweiterung der Neutronenfluss- und Aktivierungsberechnungen für 3D-Geometrie.....</b>	<b>56</b>
<b>8</b>	<b>AP6: Behandlung der PCI-Problematik bei hochabgebrannten Brennstäben im SWR .....</b>	<b>60</b>
<b>9</b>	<b>AP7: Einsatz eines 3D-Kernsimulators für Abbrandrechnungen .....</b>	<b>68</b>
<b>10</b>	<b>Zusammenfassung .....</b>	<b>76</b>
<b>11</b>	<b>Literaturverzeichnis.....</b>	<b>78</b>
	<b>Anhang A: Technische Notizen .....</b>	<b>85</b>
	<b>Anhang B: Benchmark-Beiträge.....</b>	<b>85</b>
	<b>Anhang C: Veröffentlichungen .....</b>	<b>85</b>
<b>12</b>	<b>Verteiler .....</b>	

## Abbildungsverzeichnis

Abbildung 3-1	Vergleich Rechnung zu Experiment für ausgewählte Proben aus TMI-1: Spaltprodukte .....	8
Abbildung 3-2	Vergleich Rechnung zu Experiment für ausgewählte Proben aus TMI-1: Aktinide.....	9
Abbildung 3-3	KENOREST-Modell des PROTEUS-Brennelements ohne Berücksichtigung der Umgebung. Die markierten Brennstäbe sind die Positionen der untersuchten Proben.....	10
Abbildung 3-4	KENOREST-Modell des PROTEUS-Brennelements mit Berücksichtigung der Umgebung.....	10
Abbildung 3-5	Ergebnisse der Nachrechnungen für die PROTEUS-Probe U1.....	11
Abbildung 3-6	Ergebnisse der Nachrechnungen für die PROTEUS-Probe U2.....	12
Abbildung 3-7	Unterschiede der C/E-Verhältnisse der KENOREST-Berechnungen mit und ohne Berücksichtigung des Einflusses der umgebenden Brennelemente. ....	12
Abbildung 3-8	Schematischer Aufbau des Brennelements 2F2DN23 aus dem Siedewasserreaktor Fukushima Daini-2 (Querschnitt) .....	17
Abbildung 3-9	Querschnitt durch das KENOREST-Rechenmodell für das Brennelement 2F2DN23 aus Fukushima Daini 2 .....	18
Abbildung 3-10	Mittelwert und Standardabweichung für die mit KENOREST errechneten C/E-Werte der PIE-Proben aus Fukushima Daini 2 ....	20
Abbildung 3-11	Schematischer Aufbau des Brennelements CZ346 aus dem Siedewasserreaktor Cooper (Querschnitt) .....	22
Abbildung 3-12	Querschnitt durch das KENOREST-Rechenmodell für das Brennelement CZ346 aus dem Siedewasserreaktor Cooper .....	23

Abbildung 3-13	Mittelwert und Standardabweichung für die mit KENOREST errechneten C/E–Werte der PIE–Proben aus Cooper.....	24
Abbildung 3-14	Schematischer Aufbau der Brennelemente B23 und C16 aus dem Siedewasserreaktor Gundremmingen A (Querschnitt).....	26
Abbildung 3-15	Querschnitt durch das KENOREST-Rechenmodell für das Brennelement aus dem Siedewasserreaktor Gundremmingen A.....	26
Abbildung 3-16	Mittelwert und Standardabweichung für die mit KENOREST errechneten C/E–Werte der PIE–Proben aus Gundremmingen A.....	28
Abbildung 4-1	Mit unterschiedlichen Programmsystemen berechnete Multiplikationsfaktoren für die verschiedenen Fälle des HTR-Abbrandbenchmarks. Von oben nach unten: k(Kugel), k(Prisma) – 0.1, k(Korn) – 0.2.....	29
Abbildung 4-2	Brennelementgeometrie für KENOREST – TRITON Vergleichsrechnung.....	34
Abbildung 4-3	Differenz in den errechneten Nuklidinventaren der Eckstäbe zwischen KENOREST und TRITON für drei verschiedene KENOREST Rechnungen mit Abbrandschritten von 3 GWd/tHM, 1 GWd/tHM und 3 GWd/tHM mit an die TRITON-Rechnung angepasstem Abbrand..	35
Abbildung 4-4	SWR-Brennelementgeometrie mit teileingefahrenem Steuerstab in dreidimensionaler Darstellung .....	36
Abbildung 5-1	Multiplikationsfaktor als Funktion des Abbrands aus XSUSA/TRITON-Berechnungen mit variierten Nuklearen Daten; Referenzkurve (schwarz) und 2 $\sigma$ -Band (rot) um den Mittelwert aus 300 Rechenläufen (blau), zusammen mit Ergebnissen aus unterschiedlichen Programmen und nuklearen Daten. ....	41
Abbildung 5-2	<sup>239</sup> Pu-Nuklidichte (10 <sup>22</sup> Atome/cm <sup>3</sup> ) als Funktion des Abbrands aus XSUSA/TRITON-Berechnungen mit variierten Nuklearen Daten; Referenzkurve (schwarz) und 2 $\sigma$ -Band (rot) um den Mittelwert aus	

	300 Rechenläufen (blau), zusammen mit Ergebnissen aus unterschiedlichen Programmen und nuklearen Daten. ....	41
Abbildung 5-3	Unsicherheiten in den Aktiniden-Inventaren, resultierend aus Unsicherheiten in den nuklearen Daten, beim UAM-Abbrandbenchmark. ....	44
Abbildung 5-4	Unsicherheiten im Multiplikationsfaktor, resultierend aus Unsicherheiten in den nuklearen Daten, beim UAM-Abbrandbenchmark. ....	44
Abbildung 5-5	Quadrierte multiple Korrelationskoeffizienten $R^2$ , für die Unsicherheit im Multiplikationsfaktor beim UAM-Abbrandbenchmark. ....	45
Abbildung 5-6	Unsicherheiten im Multiplikationsfaktor, resultierend aus Unsicherheiten in den nuklearen Daten und Unsicherheiten in technologischen Parametern, beim UAM-Abbrandbechmark.....	46
Abbildung 5-7	Unsicherheiten in den Aktiniden-Inventaren des abgebrannten Brennstoffs, resultierend aus Unsicherheiten in den nuklearen Daten und technologischen Parametern, beim UAM-Abbrandbechmark....	46
Abbildung 5-8	Mittelwert und statistische Unsicherheit der Brennelementleistungen für einen 3x3-Minikern mit einem angebrannten zentralen Brennelement. ....	48
Abbildung 6-1	Graphische Darstellung eines DWR (links) und eines SWR (rechts) Brennelementmodells in DORTOREST mit dreistufiger Approximation der Brennstäbe.....	50
Abbildung 6-2	Unterschiede im Multiplikationsfaktor $k_{eff}$ zwischen KENO und DORT für verschiedene Abbrandrechnungen mit KENOREST/DORTOREST .....	51
Abbildung 6-3	Stabweise relative Leistungsverteilung eines frischen 18x18 DWR-Brennelements berechnet mit DORTOREST.....	53

Abbildung 6-4	Stabweise relative Leistungsverteilung eines 18x18 DWR-Brennelements mit 41 GWd/tHM Abbrand berechnet mit DORTOREST .....	53
Abbildung 6-5	Relative Differenz in der Stableistungsverteilung zwischen KENOREST- und DORTOREST-Rechnung: frisches Brennelement	54
Abbildung 6-6	Relative Differenz in der Stableistungsverteilung zwischen KENOREST- und DORTOREST-Rechnung: abgebranntes Brennelement .....	54
Abbildung 7-1	Grafische Darstellung des Reaktormodells, das in Testrechnungen zur TORTABLE-Entwicklung zum Einsatz kam.....	58
Abbildung 8-1	NEWT-Modell für ein kontrolliertes 8x8-SWR-Brennelement in hoher Auflösung. ....	61
Abbildung 8-2	Gesamtleistungsverlauf in einem SWR-Brennelement im unendlichen Gitter bei einem Steuerstabverfahren aus TORT-TD. ....	63
Abbildung 8-3	Leistung im Eckstab in einem SWR-Brennelement im unendlichen Gitter bei einem Steuerstabverfahren zu unterschiedlichen Zeiten aus TORT-TD.....	64
Abbildung 8-4	Leistungsänderung im Eckstab in einem SWR-Brennelement im unendlichen Gitter bei einem Steuerstabverfahren aus TORT-TD. ...	64
Abbildung 8-5	MCNP-Modell zur quasistationären Beschreibung einer Steuerstabbewegung in einem SWR-Viertelkern. ....	65
Abbildung 8-6	Leistungsänderung im Eckstab in einem SWR-Brennelement im unendlichen Gitter bei einem Steuerstabverfahren aus MCNP. ....	66
Abbildung 8-7	Leistungsänderung im Eckstab in einem SWR-Brennelement im Viertelkern bei einem Steuerstabverfahren aus MCNP. ....	66
Abbildung 9-1	Kernbeladung im „PWR MOX/UO <sub>2</sub> Core Transient Benchmark“ .....	69

Abbildung 9-2	Referenzlösung zur normierten Brennelementleistung bei ausgefahrenen Steuerstäben.....	70
Abbildung 9-3	Von DYN3D berechnete normierte Verteilung der Brennelementleistung bei ausgefahrenen Steuerstäben.....	70
Abbildung 9-4	Relative Abweichung zwischen der mit DYN3D berechneten und der Referenz-Leistungsverteilung. ....	70
Abbildung 9-5	Geometrische Darstellung des Brennelements in SERPENT (l.o.). Verteilung des Neutronenflusses zu Beginn der Bestrahlung (r.o.), mit ca. 20 GWd/tHM (l.u.) und mit ca. 50 GWd/tHM (r.u.) Abbrand. Helle und dunkle Farben repräsentieren hohen und niedrigen Fluss. ....	73



## Tabellenverzeichnis

Tabelle 3-1	Abbrandgeschichte für eine Probe des OECD/NEA-Abbrandbenchmarks Phase 2.	13
Tabelle 3-2	Ergebnisse für das OECD/NEA-Abbrandbenchmarks Phase 2.	14
Tabelle 3-3	Reaktor- und Brennelementkenngößen von Fukushima Daini-2	16
Tabelle 3-4	Zusammensetzung der Brennstäbe in dem Brennelement 2F2DN23 aus dem Siedewasserreaktor Fukushima Daini-2	17
Tabelle 3-5	Mit KENOREST errechnete C/E-Werte für die PIE-Proben aus dem Siedewasserreaktor Fukushima Daini 2	19
Tabelle 3-6	Reaktor- und Brennelementkenngößen von Cooper	21
Tabelle 3-7	Zusammensetzung der Brennstäbe in dem Brennelement CZ346 aus dem Siedewasserreaktor Cooper	22
Tabelle 3-8	Mit KENOREST errechnete C/E-Werte für die PIE-Proben aus dem Siedewasserreaktor Cooper	24
Tabelle 3-9	Reaktor- und Brennelementkenngößen von Gundremmingen A	25
Tabelle 3-10	Mit KENOREST errechnete C/E-Werte für die PIE-Proben aus dem Siedewasserreaktor Gundremmingen A	27
Tabelle 4-1	Aktiniden-Inventare der Kugel-Anordnung in Gramm pro Tonne Schwermetall für einen Abbrand von 40 GWd/tSM.	30
Tabelle 4-2	Aktiniden-Inventare der Kugel-Anordnung in Gramm pro Tonne Schwermetall für einen Abbrand von 120 GWd/tSM.	30
Tabelle 4-3	Mit MCNP errechnete Reaktivitätsdifferenzen für die ersten beide Teile des Benchmarks /LEC 10/ einmal als direkte Differenz zweier MCNP Rechnungen („Direkt“) und einmal mit der „Perturbation“-Option in MCNP („Perturbation“).	33
Tabelle 4-4	Ergebnisse der Rechnungen mit eingefahrenem Steuerstabkreuz.	37
Tabelle 5-1	Multiplikationsfaktoren und Nuklidinventare in 1022 Atome pro cm <sup>3</sup> bei einem Abbrand von 40 GWd/tSM (links) und von 80 GWd/tSM (rechts)	40

Tabelle 5-2	Mittelwert und statistische Unsicherheit des Multiplikationsfaktors für einen 3x3-Minikern mit einem angebrannten zentralen Brennelement.	47
Tabelle 6-1	WPNCS-Benchmarkergebnisse für Ru-101 (Phase 1)	52
Tabelle 8-1	Mit NEWT berechnete Stableistungsverteilung für ein kontrolliertes 8x8-SWR-Brennelement in hoher Auflösung.	62
Tabelle 8-2	Relative Abweichungen in den Stableistungsverteilungen aus NEWT-Berechnungen mit homogenisierten und nicht-homogenisierten Stabzellen.	62
Tabelle 9-1	Vergleich der Eigenwerte für ausgefahrene Steuerstäbe (ARO) und eingefahrene Steuerstäbe (ARI).	71
Tabelle 9-2	Mit DYN3D berechnete kritische Borkonzentration sowie thermohydraulische Größen im Vergleich zu den Ergebnissen der Teilnehmer.	71
Tabelle 9-3	Relative Differenzen einiger Querschnitte in Prozent zwischen den neuen und alten Daten bei einem Abbrand von 0.15 GWd/tHM. Die Werte wurden über alle Parameterverzweigungen in den Bibliotheken gemittelt.	73

# 1 Einleitung

Die Entwicklung und Validierung fortgeschrittener neutronenphysikalischer Rechenmethoden für Hochabbrand-, Aktivierungs- und Abschirmungsberechnungen sind Hauptgegenstand des Reaktorsicherheitsforschungsvorhabens RS1189 der GRS. Der vorliegende Bericht dokumentiert die erreichten Forschungs- und Entwicklungsziele. Die Arbeitsergebnisse, die bis zum Ende des 2. Quartals 2011 erzielt wurden, sind bereits im Zwischenbericht GRS-A-3636 beschrieben.

Die fortlaufende Optimierung der Beladestrategien in deutschen Leichtwasserreaktoren (LWR) wird neben dem Einsatz von Mischoxid-Brennstoffen (MOX), Neutronengiften und *Low-Leakage*-Beladeschemata wesentlich durch den Einsatz hochabgebrannter Brennelemente mit einem Entladeabbrand  $>50$  MWd/kg charakterisiert. Zur besseren Ausnutzung des Brennstoffinventars werden von den Anlagenbetreibern mittelfristig sogar Brennelementabbrände bis zu 70 MWd/kg angestrebt, was durch eine Erhöhung der Anfangsanreicherung von Uranbrennelementen bis auf 5,0%  $^{235}\text{U}$ -Gehalt erreicht werden soll. Um vergleichbare Abbrände auch für MOX-Brennelemente erreichen zu können, ist eine reaktivitätsäquivalente Brennelementauslegung mit entsprechend erhöhtem  $\text{Pu}_{\text{Fiss}}$ -Gehalt vorgesehen. Die verbesserte Ausnutzung des Brennstoffinventars führt neben der betriebswirtschaftlichen Optimierung der Anlage auch zu einer Verringerung der Anzahl der abgebrannten Brennelemente für die weitere Lagerung, den Transport und die Entsorgung.

Für die sicherheitstechnische Bewertung solcher Hochabbrandstrategien sind fortgeschrittene Rechenmethoden erforderlich, mit denen belastbare Aussagen über die Reaktivitätsbilanz und die Nuklidinventare von abgebrannten Brennelementen gemacht werden können. Diese Größen beeinflussen zum einen die sicherheitstechnischen Parameter der Kernbeladung (z. B. Stabwirksamkeiten, Reaktivitätskoeffizienten und Siedeadstände) im normalen und anomalen Betrieb der Anlage, bestimmen zum anderen aber auch die nukleare Nachzerfallsleistung, die neben ihrer Relevanz für die Kühlung des abgeschalteten Reaktorkerns und des Brennelementlagerbeckens auch von wesentlicher Bedeutung für Not- und Nachkühlanalysen in Transienten- und Störfallszenarien ist. Schließlich bestimmen die Nuklidinventare die Kritikalitätssicherheit bei der Lagerung und dem Transport abgebrannter Brennelemente; so müssen Transportbehälter neben einer hinreichenden Abschirmung radioaktiver Strahlung und ausreichender Wärmeabfuhr unter allen Umständen einen sicheren Unterkritikalitätszustand garantieren.

In den Reaktorsicherheitsforschungsvorhaben RS 1110, RS 1150 und RS1169 hat die GRS das Reaktivitäts- und Nuklidinventarprogrammssystem KENOREST /HES 99, HES 03/ entwickelt, validiert und für ein breites Anwendungsspektrum bis hin zu sehr hohen Abbränden zur Verfügung gestellt. Die in dem Codesystem implementierte Rechenmethodik ermöglicht eine in sich geschlossene, konsistente Verfolgung des Brennelementeinsatzes im Reaktorkern sowie eine umfassende sicherheitstechnische Bewertung der nachfolgenden Schritte des Transports und der Lagerung hochabgebrannter Brennelemente in Lagerbecken, Zwischen- und Endlager.

KENOREST ist ein gekoppeltes Programmsystem, das zur Bestimmung der zwei- bzw. dreidimensionalen räumlichen Neutronenflussverteilung im Brennelement den Monte-Carlo-Code KENO-Va bzw. KENO-VI /KEN 00/ zur Lösung der Neutronentransportgleichung verwendet. Der wesentliche Vorteil eines stochastischen Transportverfahrens liegt in der hohen geometrischen Flexibilität, mit der praktisch jedes Brennstabgitter, aber auch typische Brennelement-Strukturen wie SWR-Wasserkanäle oder Brennelementkästen ohne die Notwendigkeit räumlicher Diskretisierung nachgebildet werden können. Zur Behandlung der Energieabhängigkeit verwendet KENO eine Multigruppenformulierung, d. h. die nuklearen Wirkungsquerschnitte können nicht wie beim Monte-Carlo-Code MCNP /BRI 00, X-3 05/ direkt aus Punktdaten-Bibliotheken übernommen werden, sondern es müssen Berechnungen zur Bibliothekserzeugung, Resonanzbehandlung und ggf. Energiegruppenkondensation vorgelagert werden. Dadurch werden die in KENOREST erzeugten Wirkungsquerschnittsbibliotheken zwar grundsätzlich problemabhängig; der Prozess der Wirkungsquerschnittserzeugung ist allerdings hochgradig automatisiert und benötigt keine Eingriffe des Anwenders.

Für die Berechnung des Nuklidinventars wird in KENOREST der Code OREST eingesetzt, der den Spektralcode HAMMER für die 1D-Spektralrechnung mit dem Rechenprogramm ORIGEN für die Abbrandrechnung kombiniert. ORIGEN definiert den de-facto-Standard unter den Lösungsverfahren für die nuklearen Abbrandgleichungen und kann somit als Referenzcode betrachtet werden; der Code steht in einer erweiterten Version GRS-ORIGEN-X zur Verfügung. Die dem ORIGEN-Code zugrunde liegende Datenbibliothek LIBMAST06 für Spaltstoffe, Aktinide, Strukturmaterialien und Spaltprodukte wurde von der GRS im Rahmen der Vorhaben RS1169 und SR2483 wesentlich erweitert. Dies betrifft insbesondere die erweiterten Neutronenreaktionskanäle, die erhöhte Anzahl spaltbarer Nuklide sowie die erweiterten Aktivierungsreaktionen für Spaltprodukte. Als Grundlage für diese Erweiterungen wurde primär die JEF-2.2-

Basisdatenevaluation herangezogen, die an verschiedenen Stellen durch Daten aus ENDF/B-VI, JENDL-3.2 und EAF97 ergänzt wurde. Generell wird die GRS-Entwicklungsstrategie, einen Monte-Carlo-Code durch ORIGEN zu erweitern, durch eine Reihe vergleichbarer Kopplungsaktivitäten von Monte-Carlo-Verfahren mit ORIGEN international bestätigt, wie aktuellen Publikationen zu entnehmen ist /LEB 03/.

KENOREST ist bei der GRS im Rahmen der Vorhaben RS 1150 und RS1169 intensiv anhand von Experimenten und rechnerischen Benchmarks bzw. Code-zu-Code-Vergleichen validiert worden. Aufgrund der Hochabbrandproblematik wurden insbesondere Rechenergebnisse für den Abbrandbereich oberhalb von 50 MWd/kg mit experimentellen Daten verglichen. Zu den prominentesten und umfangreichsten Experimenten der letzten Jahre gehört das ARIANE-Versuchsprogramm, in dem Proben aus hochabgebrannten MOX- und UO<sub>2</sub>-Brennstäben der Anlagen Doodeward (SWR), Benzenau (DWR) und Gösgen (DWR) hinsichtlich ihres Nuklidinventars analysiert wurden /PRI 03/. Die KENOREST-Rechenergebnisse zeigen für die wichtigen Leitnuklide generell eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten, weisen allerdings aus der Rechenmethodik heraus nicht begründbare systematische Abweichungen bei den höheren Aktiniden Americium und Curium auf. Diese Beobachtungen decken sich mit den Erkenntnissen aus früheren GRS-Nachrechnungen (z. B. den Vergleichen mit den Takahama-Messungen /KIL 05/) und sind in Übereinstimmung mit der internationalen Erfahrung. Erste mögliche Lösungsansätze für diese augenscheinliche Inkonsistenz wurden erst kürzlich in zwei Publikationen veröffentlicht /OECD 06, IWA 08/. Entsprechende Untersuchungen müssen neben einer Neubewertung der Basisdatenevaluationen auch eine systematische Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse der relevanten Nuklidinventare umfassen und erfordern ggf. eine breitere experimentelle Basis. Eine wesentliche Zielsetzung des beantragten Vorhabens war deshalb die Einführung einer geeigneten Methodik zur Bestimmung der Unsicherheiten in der Abbrandrechenkette. Daneben wurden eine Aktualisierung der zugrunde liegenden Datenbibliotheken und eine erweiterte Validierung von KENOREST an Experimenten mit sehr hohem Abbrand angestrebt.

Besondere Relevanz hat die Bestimmung des Nuklidinventars unter Berücksichtigung der Genauigkeit von Rechenmodell und Datenbasis bei der Anwendung des *sog. Burnup Credits*, wo bei Lagerung und Transport von abgebrannten Brennelementen die abbrandbedingten Nuklidinventaränderungen bei der Kritikalitätsanalyse explizit berücksichtigt werden. Dem *Burnup Credit* kann in Zukunft erhebliche wirtschaftliche und

sicherheitstechnische Bedeutung zukommen, weil durch ihn bei entsprechender Genehmigungslage die Anzahl der Brennelementlagerbehälter und die damit verbundenen Transport- und Handhabungsvorgänge erheblich reduziert werden können. Auch unter diesem Aspekt ist die Implementierung einer geeigneten Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysemethode in KENOREST zu betrachten. Im Vorhaben RS1169 wurden bereits die Einflüsse von betrieblichen Parametervariationen wie z. B. Kühlmitteldichte und -temperatur, Änderungen der Borkonzentration und Steuerstabstellungen auf das Nuklidinventar analysiert; im gegenwärtigen Vorhaben wird der Einfluss der spezifischen Rechenmodelle und der Unsicherheiten in den Datenbasisevaluationen auf die Bandbreite bzw. Streuung der Nuklidinventare systematisch untersucht. Dazu sind auch gezielte Vergleiche unterschiedlicher Rechenmethoden notwendig. Die GRS verfügt einerseits über eine Reihe diversitärer Rechenprogramme zur Reaktivitäts- und Inventarberechnung und hat andererseits an einer Reihe von *Computational Benchmarks* teilgenommen bzw. diese sogar initiiert und organisiert (siehe z. B. /OECD 02, OECD 03, ZWE 07, ZWE 08/), die wesentlich zur Verifikation des KENOREST-Rechenmodells beigetragen haben.

Einer der wesentlichen Vorzüge von KENOREST gegenüber sog. Spektralcodes (*Lattice Codes*) wie CASMO /CAS 95/ oder HELIOS /HEL 95, STA 83, VIL 92/, die im Allgemeinen auf deterministischen Transportmethoden beruhen, ist die deutlich bessere Modellierungsflexibilität, mit der auch die sog. Umgebungseffekte (sog. *Unlike-Neighbor Effects*) berücksichtigt werden können. Während die übliche Spektralcode-näherung das Brennelement in unendlicher Umgebung mit periodischen bzw. reflektierenden Randbedingungen lediglich zweidimensional abbildet, können in KENOREST auch nicht-identische Nachbarbrennelemente oder angrenzende Reflektorzonen modelliert werden, falls notwendig sogar in drei Raumdimensionen. Eine dreidimensionale Darstellung kommt zum Beispiel bei der Darstellung von teilweise eingefahrenen Steuerstäben oder teillangen Stäben im SWR zum Einsatz. Von der 3D-Option wurde im Vorhaben RS1169 vielfach Gebrauch gemacht, um die Bestrahlungshistorie von Brennstäben besser wiedergeben zu können /KIL 08/, wenn der tatsächliche Abbrand der Probe unter deutlich asymmetrischen Bedingungen erfolgt war. Während allerdings in der bisherigen Rechenmethodik gewisse ad-hoc-Annahmen über die Nuklidinventare und den Abbrandzustand der Umgebung vom Anwender getroffen werden mussten, wurde nun angestrebt, die Nuklidinventare umgebender Brennelemente aus 3D-Abbrandrechnungen eines Kernsimulators zu übernehmen und über ein Datenbanksystem in KENOREST einfließen zu lassen.

In Ergänzung zu diesen Zielen erfolgte die vollständige Integration des deterministischen Transportcodes DORT in 2D-Geometrie in die Abbrandrechnung. In RS1169 konnte bereits gezeigt werden, dass sich der deterministische Diskrete-Ordinaten-Code DORT in zwei Dimensionen als Alternative zu dem (stochastischen) Transportcode KENO anbietet, um die lokale Neutronenflussverteilung im Brennelement zu bestimmen. Wesentlicher Vorzug von DORT gegenüber KENO ist die Abwesenheit von statistischen Unsicherheiten bei der Berechnung von Flüssen und Reaktivitätsbilanzen bei allerdings eingeschränkter räumlicher Flexibilität. Nichtsdestoweniger lassen sich die meisten LWR-Brennelementtypen mit DORT hinreichend gut modellieren und es konnte gezeigt werden, dass die Übereinstimmung von DORT und KENO bei Verwendung identischer Wirkungsquerschnitte aus dem KENOREST-System ausgezeichnet ist /PAU 05/. Da der DORT-Code an der GRS auch um Homogenisierungs- und Energiegruppenkondensierungsoptionen erweitert wurde /PAU 06/, kann ein System DORTOREST grundsätzlich zur Erzeugung von Wirkungsquerschnitten für 3D-Ganzkernrechnungen verwendet werden und somit Spektralfunktionalität erreichen.

## 2 Zielsetzung

Mit der Entwicklung von KENOREST in den Vorhaben RS 1110, RS 1150 und RS1169 hat die GRS ein Softwaresystem geschaffen, mit dem die sicherheitstechnischen Konsequenzen des Einsatzes hochabgebrannter MOX und UO<sub>2</sub>-Brennelemente auf Anlagenbetrieb, Transport und Lagerung umfassend bewertet werden können. Die in KENOREST implementierte Basisdatenbibliothek aus GRS-ORIGEN-X steht mit erheblich erweiterten Reaktionskanälen und Nuklidumfang für den Einsatz zur Verfügung. Das System KENOREST wurde durch die Nachrechnung verschiedener experimenteller Daten, z. B. aus dem Kraftwerk Obrigheim (Probenabbrand bis 35 MWd/kg), aus der japanischen Anlage Takahama-3 (Probenabbrand bis 48 MWd/kg), und zuletzt durch Proben aus dem ARIANE-Versuchsprogramm (Probenabbrand bis 60 MWd/kg) für Hochabbrand-Anwendungen qualifiziert.

Ziel des gegenwärtigen Vorhabens war es, die Validierungsgrundlage und die Qualifikation von KENOREST für hohe Brennelementabbrände durch Aktualisierung der Datenbasis und Softwarekomponenten deutlich zu verbreitern. Darüber hinaus war die Implementierung einer qualifizierten Rechenmethodik zur Bestimmung von Unsicherheiten in den Nuklidinventarberechnungen vorgesehen. Dies trägt z. B. wesentlich dazu bei, die Anwendung des *Burnup Credits* zu bewerten und folgt dem internationalen Trend, Unsicherheiten und Sensitivitäten in der nuklearen Rechenkette zu quantifizieren. Mit der Integration von deterministischen Rechenmethoden in KENOREST zur Durchführung von Abbrand-, Aktivierungs- und Fluenzberechnungen sowie zur Erzeugung von Wirkungsquerschnitten soll die Funktionalität des vorhandenen Programmsystems erheblich erweitert werden. Die daraus resultierenden Einzelziele werden in den folgenden Abschnitten kurz dargestellt, sowie die durchgeführten Arbeiten und die entsprechenden Ergebnisse beschrieben.



### **3 AP1: Validierung des Reaktivitäts- und Nuklidinventar-codes KENOREST**

Die Validierung von KENOREST durch experimentelle Daten umfasst bisher Daten aus dem KKW Obrigheim für Uran-Brennstoff für etwa 30 MWd/kg und MOX-Brennstoff für etwa 35 MWd/kg Abbrand und die japanischen DWR-Daten von Takahama-3 /SAN 02/ für Uranbrennstoff von etwa 48 MWd/kg Abbrand. Die Validierungsbasis wurde im Vorgängervorhaben RS1169 durch Daten aus dem ARIANE-Versuchsprogramm erweitert, in dem Proben mit Abbränden bis zu 60 MWd/kg analysiert wurden. Daneben existieren eine Reihe weiterer internationaler Versuchsprogramme wie z. B. REBUS und PROTEUS-LWR. Im Rahmen von AP1 wurde eine Erweiterung der Validierungsbasis von KENOREST durchgeführt, die sich bis hin zu sehr hohen Abbränden erstreckt.

Dazu wurden radiochemische Analysedaten von Proben aus abgebranntem DWR- und SWR-Brennstoff recherchiert und Proben aus den Druckwasserreaktoren Calvert Cliffs und TMI-1 zur Nachrechnung ausgewählt. Diese Proben umfassen Abbrände bis ca. 45 bzw. 56 GWd/tHM ("Gigawatt days per ton of heavy metal" – Gigawatt-Tage pro Tonne Schwermetall). Die Analysen wurden jeweils in mehreren Laboratorien unabhängig durchgeführt und beinhalten neben den Aktiniden zahlreiche, für Abbrandkredit-Anwendungen wichtige Spaltprodukte.

Für beide Reaktoren weisen die Bestrahlungsgeschichten der Proben verschiedene zu berücksichtigende Besonderheiten auf. Im Fall des Reaktors TMI-1 wurde die Mehrzahl der Proben aus einem Brennelement entnommen, in dem in dessen erstem Zyklus abbrennbare Absorberstäbe eingebracht wurden, die in dem nachfolgenden Zyklus wieder entfernt wurden. Im Fall der Proben aus dem Reaktor Calvert Cliffs wurde zwischen zwei Bestrahlungszyklen der dem Probenstab benachbarte, teilabgebrannte Brennstab durch einen frischen Brennstab ersetzt, was für die Proben zu einer signifikanten Änderung des lokalen Neutronenspektrums und damit des letztendlichen Nuklidinventars führte. Um für eine Validierung des Abbrandcodes eine hinreichend genaue Modellierung der Bestrahlungsgeschichte der Proben zu erreichen, sind diese Änderungen in der Umgebung der Proben zu berücksichtigen. Zwar verfügt KENOREST über die Möglichkeit sogenannte Verzweigungsrechnungen durchzuführen, bei denen zwischen einzelnen Abbrandschritten Änderungen an den Eingabedaten vorgenommen werden können; allerdings kann dies bisher nur manuell geschehen. Das bedeutet, dass die gesamte Abbrandrechnung in mehrere Teilrechnungen zu unterteilen ist, zwischen denen der Anwender manuell eingreifen und entsprechende Änderungen

vornehmen muss. Bei der hier vorliegenden größeren Anzahl an Nachbestrahlungsproben, die ein solches Vorgehen erfordern, führt dies allerdings zu merklichem Mehraufwand und erhöhter Fehleranfälligkeit. Daher wurde im Rahmen der im Vorhaben vorgesehenen Erweiterungen von KENOREST auch eine weitergehende Automatisierung der Verzweigungsrechnungen durchgeführt, um sowohl Mehraufwand also auch Fehleranfälligkeit zu reduzieren. Dazu wurde ein KENOREST-Modul entwickelt, das die automatisierte Nachrechnung von Nachbestrahlungsanalyseproben, bei denen während des Abbrands ein Stabwechsel oder ein Verfahren eines Steuerstabes vorgenommen wurde, ermöglicht. Damit konnten die Nachrechnungen der Proben aus den US-amerikanischen Reaktoren „TMI-1“ und „Calvert Cliffs“ unter Berücksichtigung ihrer oben beschriebenen Besonderheiten erfolgreich durchgeführt werden. Das neugeschaffene KENOREST-Modul ermöglicht zusätzlich auch die Variation einiger Parameter während des Abbrandes, die bisher über die gesamte Rechnung konstant gehalten werden mussten, wie z.B. die Brennstofftemperatur und der Dampfblasengehalt.

Die Ergebnisse sind in ihrer Qualität vergleichbar denen bisheriger Rechnungen zu Nachbestrahlungsanalyseproben anderer Reaktoren. In den Abbildungen 3-1 und 3-2 sind die Daten für einige ausgewählte Proben aus dem Kernkraftwerk TMI-1 gezeigt.

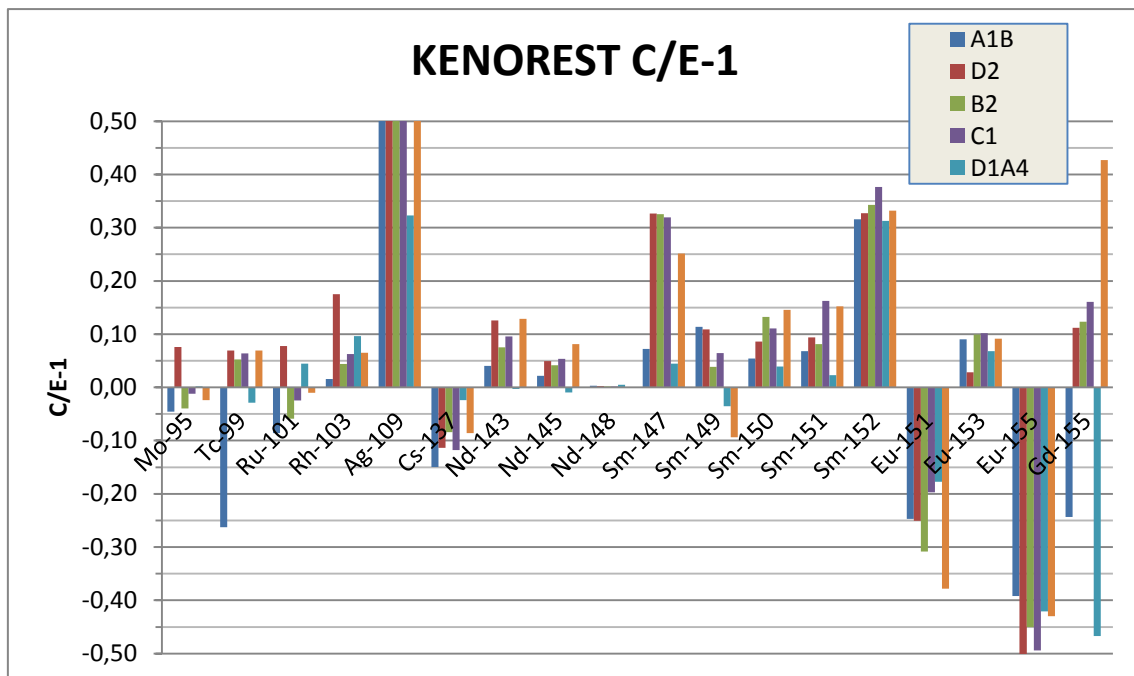


Abbildung 3-1 Vergleich Rechnung zu Experiment für ausgewählte Proben aus TMI-1: Spaltprodukte

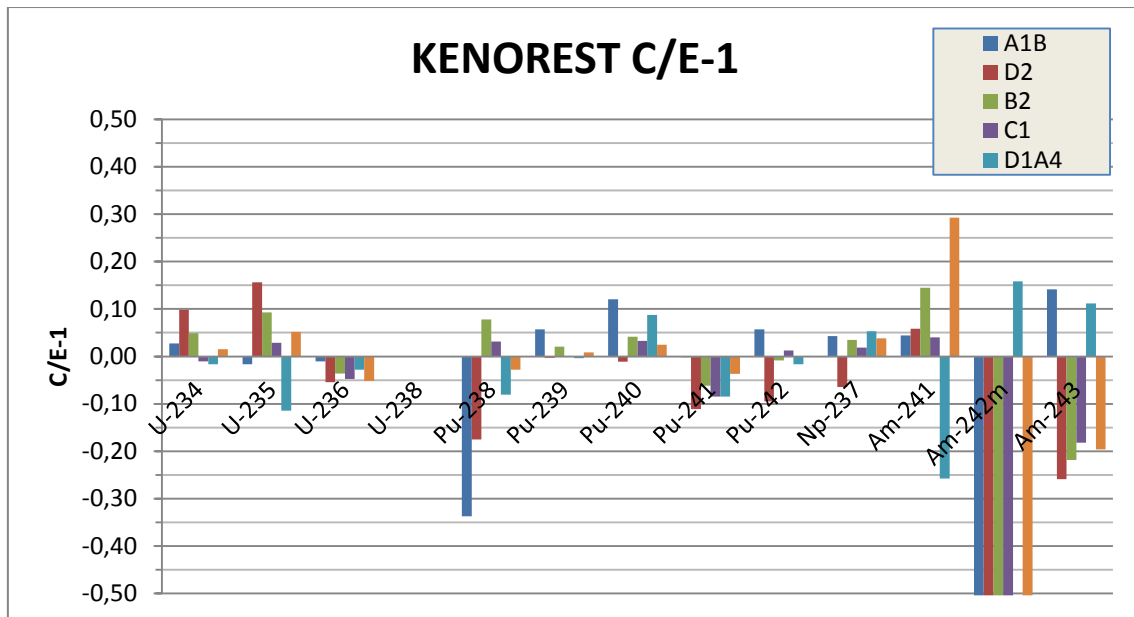


Abbildung 3-2 Vergleich Rechnung zu Experiment für ausgewählte Proben aus TMI-1: Aktinide

Im Rahmen eines dreiwöchigen Gastaufenthaltes am Paul-Scherrer-Institut (PSI) wurden zwei Proben des LWR-PROTEUS-Projekts Phase II mit KENOREST nachgerechnet. Hierbei handelte es sich um Proben mit einem Abbrand von ca. 36.5 GWd/tHM und 53.5 GWd/tHM, die zwei beziehungsweise drei Zyklen bestrahlt wurden. Es wurden Proben mit einer möglichst einfachen Bestrahlungsgeschichte ausgewählt, um die Unsicherheiten hieraus möglichst gering zu halten. Es stellte sich heraus, dass der genaue Abbrand der Proben mit einer gewissen Unsicherheit verbunden ist. In der Spezifikation der Proben wurde der Abbrand durch die Betreiber mit Hilfe eines Abbrandsimulators bestimmt. Experimentell kann der Abbrand nur indirekt über eine Rückrechnung aus der Messung eines Abbrandindikators bestimmt werden. Eine Messung des Abbrandes über die Nd-148-Konzentration und eine Rückrechnung der Schweizer Kollegen haben hier schon eine gewisse Inkonsistenz mit den Angaben aus der Spezifikation aufgezeigt. Für die KENOREST-Rechnungen wurde die Leistungsgeschichte so skaliert, dass die gemessene Nd-148-Konzentration exakt wiedergegeben wird. Diese Vorgehensweise orientiert sich also so weit wie möglich an dem experimentellen Ergebnis und entspricht somit dem direktesten Weg zur Bestimmung des Abbrandes. Eine der Proben war am Rand des Brennelements positioniert, so dass hier in der Modellierung auch die umgebenden Brennelemente eine Rolle spielen können. Von besonderem Interesse war daher die zusätzliche Modellierungsmöglichkeit in KENOREST, auch die Umgebung eines Brennelements mit abbilden zu können. Zur genaueren Untersuchung dieses Effektes wurde die Einbeziehung der Umgebung in drei Detailstufen

durchgeführt. In einer ersten Rechnung wurden die umgebenden Brennelemente mit einem über beide Zyklen gemittelten konstanten Abbrand modelliert. In einer zweiten Rechnung wurden die drei Brennelemente der unmittelbaren Umgebung mit drei verschiedenen konstanten Abbränden angenähert und in einer dritten Rechnung wurden die umgebenden Brennelemente ebenfalls mit abgebrannt. Es stellte sich heraus, dass die Berücksichtigung der umgebenden Brennelemente nur einen sehr geringen Einfluss auf die Ergebnisse hat. Insbesondere im Vergleich zu den Unsicherheiten aus der Abbrandbestimmung ist dieser Effekt kleiner. Die unterschiedlichen geometrischen Modelle sind in den Abbildungen 3-3 und 3-4 dargestellt.

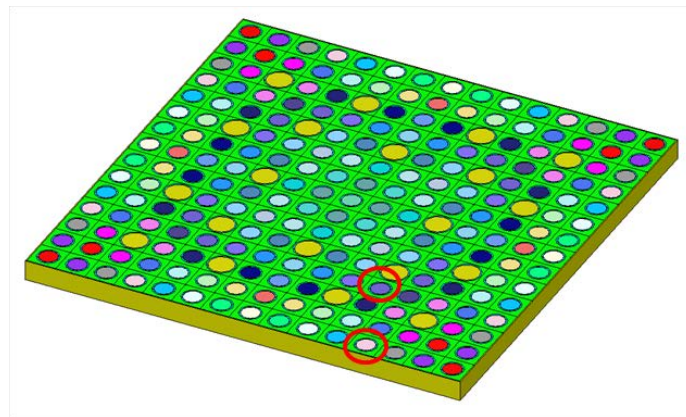


Abbildung 3-3 KENOREST-Modell des PROTEUS-Brennelements ohne Berücksichtigung der Umgebung. Die markierten Brennstäbe sind die Positionen der untersuchten Proben.

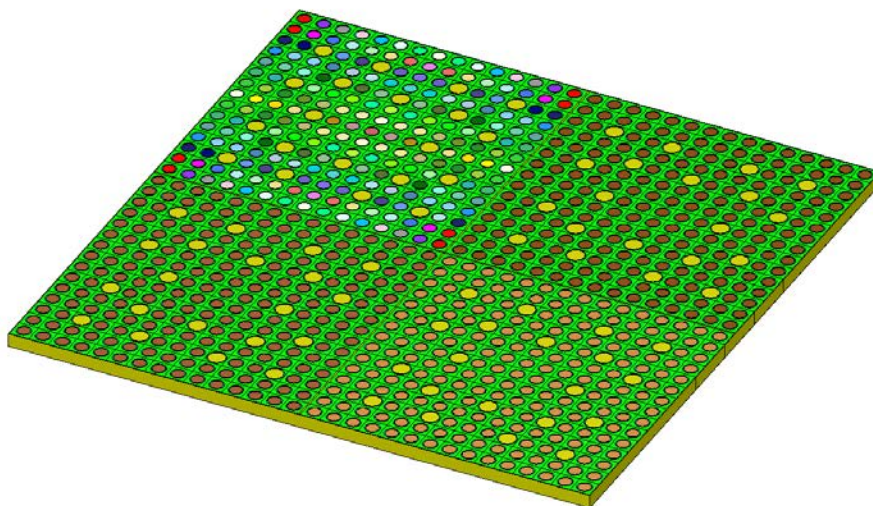


Abbildung 3-4 KENOREST-Modell des PROTEUS-Brennelements mit Berücksichtigung der Umgebung.

Die experimentellen PROTEUS-Daten konnten weitestgehend gut reproduziert werden. Der Vergleich mit den CASMO-Analysen der Schweizer Kollegen zeigte eine gute Übereinstimmung der beiden Programme und in den meisten Fällen eine gemeinsame Tendenz im Falle von Abweichungen von den experimentellen Daten. Eine Auffälligkeit zeigte sich in der Pu-239-Konzentration, die in den beiden Programmen relativ stark voneinander abweichen. Ein Teil der Abweichung konnte auf die unterschiedlichen Brennstofftemperaturen der beiden Codes zurückgeführt werden. Während die Brennstofftemperatur in CASMO eine Eingabegröße ist und aus der Spezifikation der Probe und damit aus dem Diffusionscode des Betreibers übernommen wurde, kann in KENOREST die Temperatur während des Abbrandes mitbestimmt werden. Ein Vergleich mit dem Experiment brachte hier keine eindeutige Tendenz hervor, da die Pu-239-Konzentration der einen Probe mit CASMO und die Konzentration der anderen Probe mit KENOREST übereinstimmt. Die Vergleiche der KENOREST-Ergebnisse mit den Messdaten und den CASMO-Ergebnissen von PSI sind in Abb. 3-5 und 3-6 dargestellt.

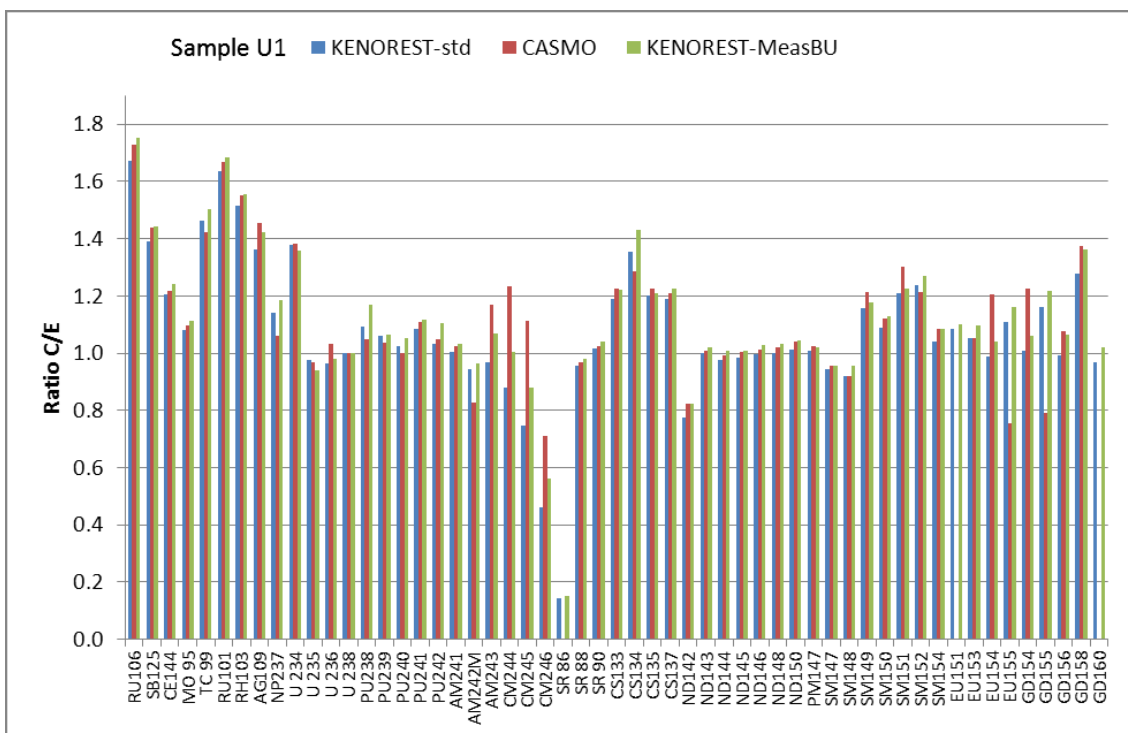


Abbildung 3-5 Ergebnisse der Nachrechnungen für die PROTEUS-Probe U1.

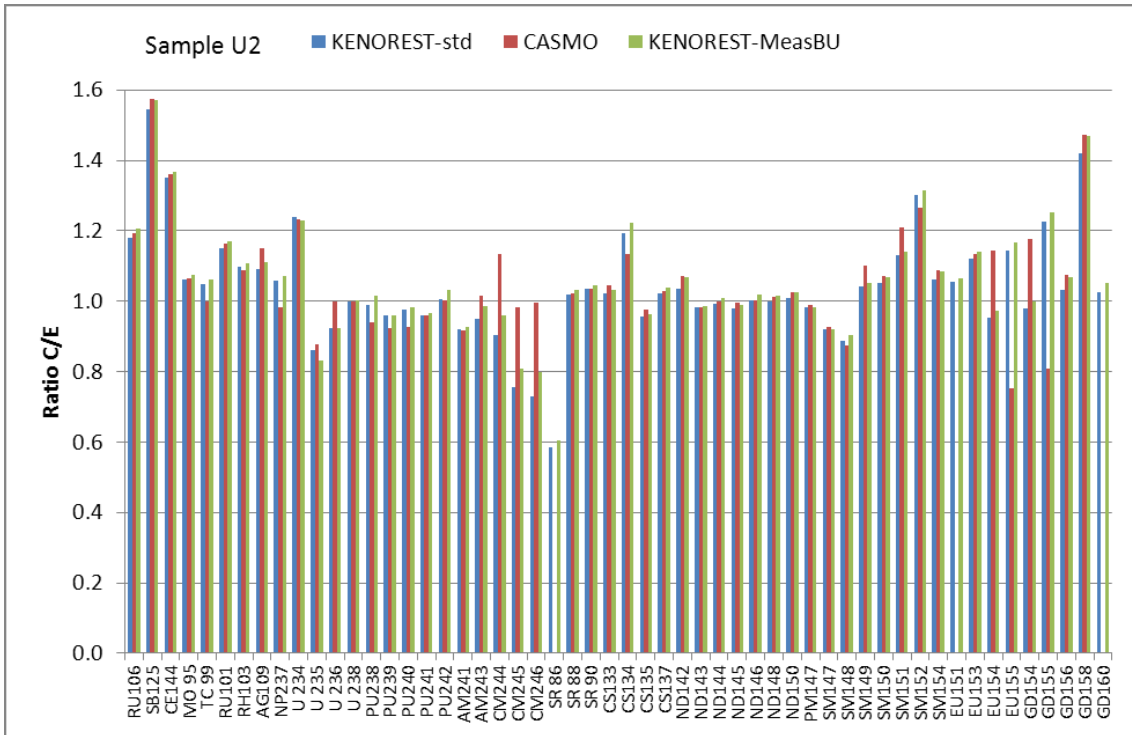


Abbildung 3-6 Ergebnisse der Nachrechnungen für die PROTEUS-Probe U2.

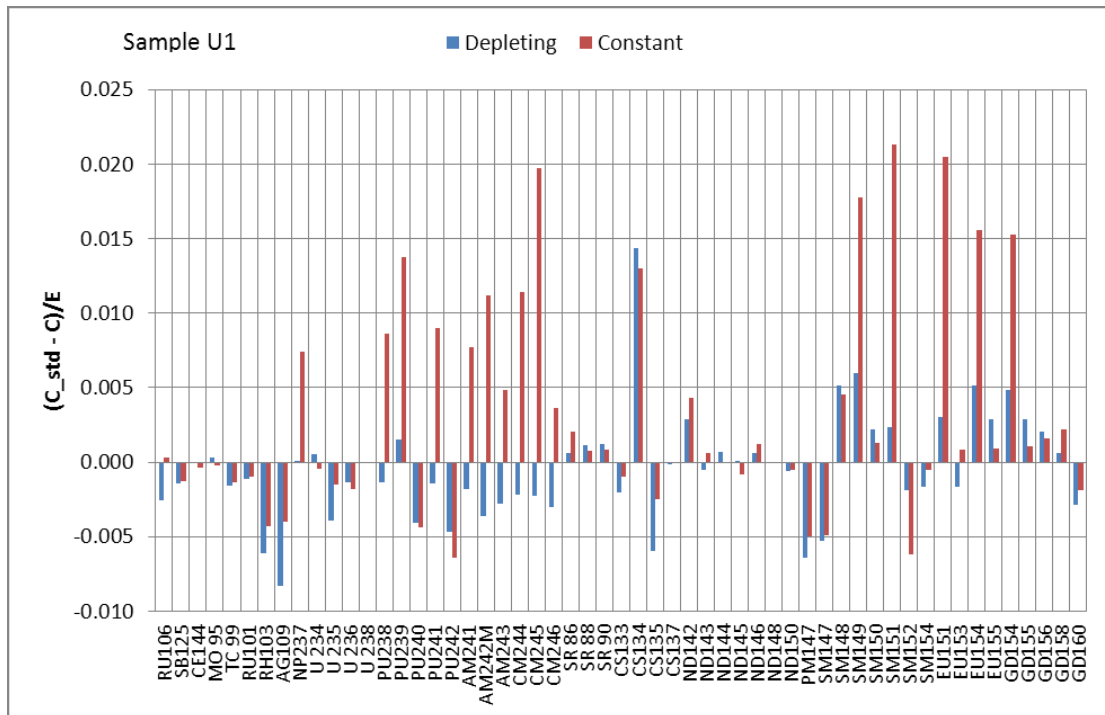


Abbildung 3-7 Unterschiede der C/E-Verhältnisse der KENOEST-Berechnungen mit und ohne Berücksichtigung des Einflusses der umgebenden Brennelemente.

In Abb. 3-7 sind die Unterschiede in den Ergebnissen von Berechnungen ohne und mit Berücksichtigung der benachbarten Brennelemente dargestellt. Diese Unterschiede

sind sehr gering und übersteigen nur für einige wenige Nuklide 1 %. Dies ist darauf zurückzuführen, dass sich für Abbrände > 20 GWd/tHM die Spektralverhältnisse in den beiden zugrundeliegenden Modellen nur unwesentlich unterscheiden. Die Ergebnisse wurden gemeinsam mit dem PSI auf der Jahrestagung Kerntechnik 2012 vorgestellt und sind in /WAG 12/ dokumentiert.

Ein weiterer Beitrag zur Validierung besteht im Vergleich von KENOREST-Ergebnissen mit den Ergebnissen von in der GRS durchgeführten Berechnungen mit dem Abbrandcode aus dem SCALE-Programmsystem, sowie bei AREVA durchgeführten Berechnungen mit den dort eingesetzten Programmen APOLLO2-A und CASMO-4 für ein im Rahmen der OECD/NEA-Arbeitsgruppe WPRS durchgeführtes Rechen-Benchmark /NEA 07/ für MOX-Brennstoff. Die Grundlage bildet ein am französischen Reaktor Saint-Laurent B1 (DWR, 900 MWe) durchgeführtes Messprogramm an MOX-Brennelementen. Allerdings handelt es sich um ein „blindes“ Benchmark, d.h. die Messdaten stehen nicht zur Verfügung, und Vergleiche können nur mit den Mittelwerten der Ergebnisse durchgeführt werden. Tabelle 3-1 zeigt die Abbrandgeschichte, Tabelle 3-2 den Vergleich der Ergebnisse.

Die eingesetzten Programme liefern ähnliche Ergebnisse für die wichtigsten Isotope, also für die wesentlichen Aktiniden und Spaltprodukte, die als Abbrandindikatoren dienen. Andere Isotope, insbesondere bei den Spaltprodukten, weisen größere Unterschiede auf; sobald die Messdaten veröffentlicht sind, wird dies möglicherweise zu Verbesserungen in den Abbrandketten führen. Die Ergebnisse wurden gemeinsam mit AREVA auf der Jahrestagung Kerntechnik 2011 vorgestellt und sind in /MAR 11/ dokumentiert.

Tabelle 3-1 Abbrandgeschichte für eine Probe des OECD/NEA-Abbrandbenchmarks Phase 2.

	Q17 MOX-Brennstab	
	Zeit (Tage)	Endabbrand (GWd/tHM)
Zyklus 1	285	12
Abkühlzeit	60	
Zyklus 2	300	25
Abkühlzeit	40	
Zyklus 3	280	38

Tabelle 3-2 Ergebnisse für das OECD/NEA-Abbrandbenchmarks Phase 2.

Isotop	APOLLO2-A	CASMO-4	KENOREST	TRITON	Mittelwert	Std. Abw.
U232	-8.99%		-6.66%	-19.34%	9.739E-05	17.50%
U233	14.07%		0.61%	-14.87%	2.389E-04	7.44%
U234	2.51%	1.66%	-1.55%	-2.42%	1.489E+01	1.78%
U235	0.77%	-1.85%	-2.48%	-2.40%	6.001E+02	1.93%
U236	1.93%	1.08%	-5.17%	2.53%	2.988E+02	2.23%
U238	-0.01%	0.02%	-0.01%	-0.04%	9.391E+05	0.03%
Pu236	2.14%		-8.11%	-34.00%	5.153E-04	19.24%
Pu238	4.23%	-1.53%	3.00%	-4.58%	3.918E+02	2.69%
Pu239	-0.41%	-2.30%	1.86%	0.37%	7.107E+03	1.26%
Pu240	3.01%	-3.11%	-1.48%	0.83%	5.919E+03	2.24%
Pu241	0.64%	-1.55%	1.48%	-2.36%	3.509E+03	1.44%
Pu242	1.60%	-0.04%	-0.09%	3.62%	2.773E+03	1.49%
Pu243			-1.37%	11.92%	7.349E-01	7.95%
Pu244			34.25%	-34.25%	2.569E-01	34.25%
Np236			-57.98%	-78.81%	3.336E-04	4.45%
Np237	5.33%	7.49%	-5.79%	0.81%	1.349E+02	4.32%
Am241	-11.81%	-2.27%	3.86%	3.35%	1.572E+02	4.14%
Am242m	7.30%	-17.14%	-8.16%	23.51%	3.094E+00	12.40%
Am243	1.06%	1.10%	-2.31%	11.91%	7.601E+02	5.60%
Cm242	-0.86%	3.43%	3.18%	-6.13%	1.106E+02	2.19%
Cm243	-4.90%	-6.07%	9.47%	4.49%	4.976E+00	4.45%
Cm244	1.81%	-4.81%	0.19%	6.85%	4.360E+02	4.32%
Cm245	6.26%	-9.75%	-6.91%	-16.20%	3.303E+01	11.52%
Cm246	3.69%	-9.31%	-6.38%	-14.40%	4.887E+00	10.55%
Cm247	10.61%		-6.84%	-8.46%	8.508E-02	11.22%
Cm248	11.75%		-21.70%	-6.85%	6.748E-03	16.08%
Nd142	0.23%		-0.16%	3.26%	2.018E+01	1.39%
Nd143	-2.14%	4.78%	0.33%	-1.04%	7.554E+02	1.46%
Nd144	0.89%		-0.23%	1.00%	8.203E+02	0.63%
Nd145	0.47%	-2.59%	0.11%	0.60%	6.471E+02	1.05%
Nd146	-0.43%		0.72%	0.16%	7.156E+02	0.41%
Nd148	-0.01%		-0.61%	-1.27%	4.255E+02	0.90%
Nd150	-0.78%		0.50%	0.50%	2.495E+02	0.46%
Cs133	0.32%	-1.82%	-0.60%	3.11%	1.215E+03	1.36%
Cs134	-0.44%	-3.77%	7.81%	-9.09%	1.681E+02	4.05%
Cs135	-1.45%	-2.84%	2.90%	1.71%	4.226E+02	1.74%
Cs137	-1.18%	3.40%	-0.39%	1.26%	1.398E+03	1.43%
Sm149	-10.06%	4.16%	2.46%	2.53%	2.833E+00	4.18%
Sm151	-12.31%	5.10%	8.78%	15.29%	1.721E+01	10.00%
Sm152	-7.59%	-5.21%	11.90%	11.19%	1.552E+02	8.24%
Eu153	-2.70%	1.63%	0.94%	-1.72%	1.845E+02	2.40%
Eu154	-15.77%	13.84%	-24.09%	-19.50%	5.163E+01	21.41%
Eu155	-16.22%	120.31%	-3.27%	-41.30%	1.588E+01	34.53%



Die bisherige Entwicklung und Qualifizierung von KENOREST fokussierte sich im Wesentlichen auf die Berechnung von Inventaren und Quelltermen für abgebrannte Brennelemente aus Druckwasserreaktoren (DWR). Ein Grund dafür ist der homogenere, zumeist stärker standardisierte Aufbau dieser Brennelemente im Vergleich zu denjenigen in Siedewasserreaktoren (SWR). Zudem erstreckt sich ein wichtiger Anwendungsbereich der Inventarberechnung im Rahmen der nuklearen Entsorgung, der sogenannte Abbrandkredit, praktisch ausschließlich auf abgebrannte DWR-Brennelemente. Allerdings sind andere Anwendungsbereiche wie die Erstellung von Quelltermen für Dosisleistungsberechnungen und Nachzerfallsleistungen auch für abgebrannte SWR-Brennelemente von hoher Bedeutung. Insbesondere bei Störfallbetrachtungen sowohl im Reaktorkern selbst als auch im Abklingbecken für abgebrannte Brennelemente sind diese Daten – auch hinsichtlich einer möglichen Rekritikalität – von erheblicher Bedeutung. Das Nuklidinventar von abgebranntem Kernbrennstoff hängt dabei wesentlich von der Einsatz- und Bestrahlungsgeschichte während des Leistungsbetriebs im Kern ab. Diese besitzt in SWR durch variablen Dampfblasengehalt, stärker variablen Kühlmitteldurchfluss und dem ausgeprägten Einsatz der Steuerkreuze eine größere Zahl an zu berücksichtigenden Parametern als bei DWR. Entsprechend sind mit diesen Parametern auch zusätzliche Unsicherheiten verbunden.

Um KENOREST auch für die Berechnung von Nuklidinventaren abgebrannter SWR-Brennelemente zu qualifizieren, sollen radiochemische Analysedaten von Proben aus SWR-Brennelementen nachgerechnet werden. In der freien Datenbank SFCOMPO /NEA 12/ der OECD/NEA steht hierzu eine Reihe von Analyseproben zur Verfügung, welche aber zu einem großen Teil älteren Datums sind und nur Massenbestimmungen der Uran- und Plutoniumisotope sowie einiger höherer Aktinide und Abbrandmarker-Spaltprodukte wie  $^{148}\text{Nd}$  enthalten. Darüber hinaus finden sich in der publizierten Literatur weitere relevante, meist jüngere Proben von abgebranntem SWR-Brennstoff. Aufgrund der größeren Variabilität in der Bestrahlungsgeschichte und teilweise auch aufgrund des Alters der Messungen sind die Nachrechnungen derartiger SWR-Brennstoffproben mit höheren Unsicherheiten behaftet als DWR-Brennstoffproben. Dennoch stellen sie gegenwärtig den einzigen Anhaltspunkt zur experimentellen Validierung eines Abbrandverfahrens dar und wurden deshalb dezidiert nachgerechnet, analysiert und ausgewertet.

## Fukushima Daini-2

Die wesentlichen Daten und Kenngrößen des Siedewasserreaktors Fukushima Daini-2 sowie des Brennelements 2F2DN23, dem die radiochemischen Analyseproben entnommen wurden, sind in Tab. 3-3 zusammengefasst. Die meisten der Daten entstammen der Referenz /NAK 00/. Lücken in der Datenbasis wurden mit Werten entsprechend der Referenz /MER 10/ aufgefüllt.

Tabelle 3-3      Reaktor- und Brennelementkenngrößen von Fukushima Daini-2

<b>Reaktor- und Brennelementdaten</b>	
Nominale therm. Leistung (MW)	3293
Gittertyp	8x8-2
Anzahl Brennstäbe	62
Anzahl Wasserstäbe	2
Aktive Kernhöhe (m)	3,71
Brennelement-Pitch (cm)	15,2
Kühlmitteldurchfluss (kg/s)	$1,3417 \times 10^4$
<b>Brennstabdaten</b>	
Brennstoff	UO <sub>2</sub> , UO <sub>2</sub> -Gd <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
Pelletdichte (g/cm <sup>3</sup> )	10,412 (~ 95 % theoret. Dichte)
Verschmierte Pelletdichte (g/cm <sup>3</sup> )	9,943
Pelletdurchmesser (cm)	1,03
Gapdicke (cm)	0,024
Hüllrohrmaterial	Zircaloy-2
Hüllrohrdicke (cm)	0,086
Hüllrohraußendurchmesser (cm)	1,23
Anzahl Gadoliniumstäbe	8
Brennstabpitch (cm)	1,63
Brennstofftemperatur (K)	900
<b>Kühlmitteldaten</b>	
Nominaldruck (Pa)	$6,93 \times 10^6$
Nominale Einlasskühlung (kcal/kg)	11,4
Nominale Auslasstemperatur (K)	559
<b>Wasserstabdaten</b>	
Wasserstabmaterial	Zircaloy
Wasserstab-Innendurchm. (cm)	1,35
Wasserstab-Außendurchm. (cm)	1,50
<b>Wasserkanaldaten</b>	
Wasserkanal-Innenweite (cm)	13,4
Wasserkanal-Dicke (cm)	0,203

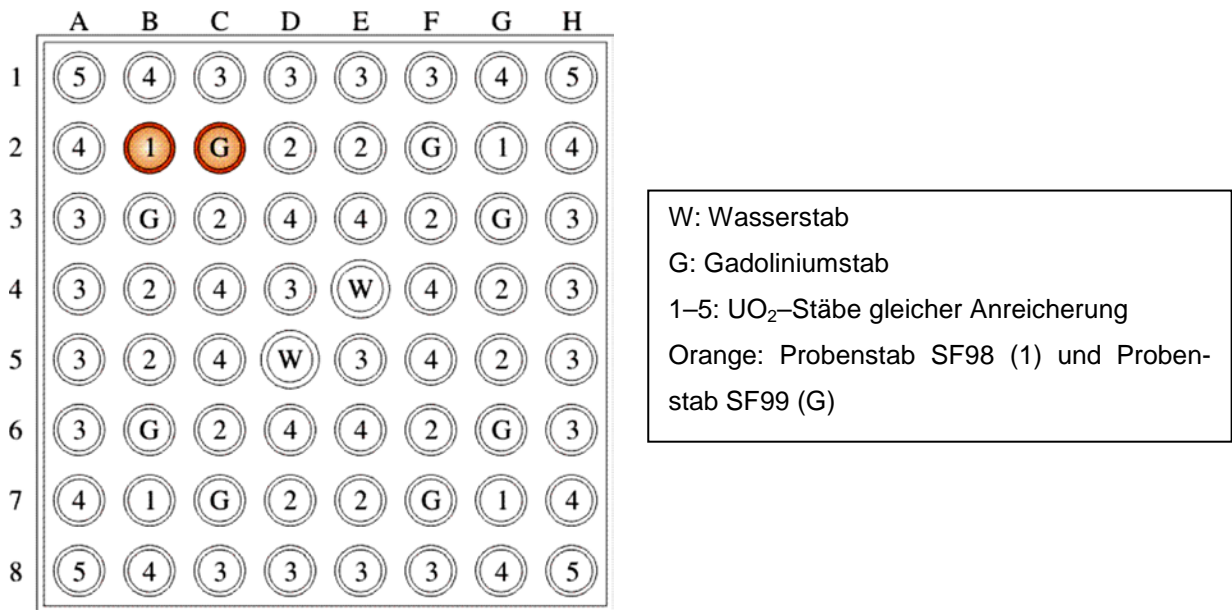


Abbildung 3-8 Schematischer Aufbau des Brennelements 2F2DN23 aus dem Siedewasserreaktor Fukushima Daini-2 (Querschnitt)

In Abb. 3-8 ist ein Querschnitt durch den schematischen Aufbau des Brennelements 2F2DN23 dargestellt. Eingezeichnet sind die Positionen der verschiedenen Stäbe mit unterschiedlichen Anfangsanreicherungen, der Stäbe mit Gadolinium als abbrennbarem Absorber, der Wasserstäbe, sowie der Probenstäbe SF98 und SF99, welchen die radiochemischen Analyseproben entnommen wurden.

Die entsprechenden Zusammensetzungen der verschiedenen Brennstäbe sind in Tabelle 3-4 aufgeschlüsselt. Der Gehalt an <sup>234</sup>U ist nur für die Probenstäbe angegeben und wurde für die anderen, niedriger angereicherten Stäbe linear mit <sup>235</sup>U skaliert.

Tabelle 3-4 Zusammensetzung der Brennstäbe in dem Brennelement 2F2DN23 aus dem Siedewasserreaktor Fukushima Daini-2

Stab	Gehalt <sup>234</sup> U % U	Gehalt <sup>235</sup> U % U	Gehalt <sup>238</sup> U % U	Gehalt Gd <sub>2</sub> O <sub>3</sub> % Brennstoff
1	0,036	3,91	96,054	–
2	0,031	3,45	96,519	–
3	0,030	3,40	96,570	–
4	0,026	2,90	97,074	–
5	0,018	2,00	97,982	–
G	0,030	3,41	96,560	4,5

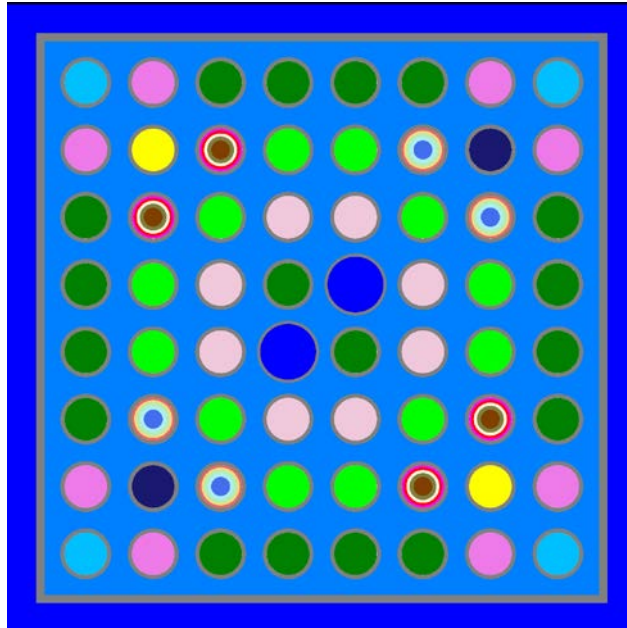


Abbildung 3-9 Querschnitt durch das KENOREST-Rechenmodell für das Brennelement 2F2DN23 aus Fukushima Daini 2

Die Geometrie des Brennelements und der Brennstäbe wurde so exakt wie möglich in KENOREST beschrieben. Für jede einzelne Probe wurde die detaillierte Leistungsgeschichte modelliert und jeweils genau dieser Probe aufgeprägt, während die Leistungsverteilung für die jeweils übrigen Brennstäbe vom Code auf Basis der lokalen zeitabhängigen Nuklidinventare und Neutronenflüsse ermittelt wurde. Die Nuklidinventare wurden für den Entladezeitpunkt berechnet, da die gemessenen Nuklidmassen mittels ihrer Halbwertszeit auf diesen Zeitpunkt rückgerechnet wurden /NAK 00/. Aufgrund ihrer Nähe zum Brennstabende und der daraus resultierenden Flussverzerrung wurden die Proben SF98-1 und SF99-1 nicht in die Analyse mit einbezogen.

In Abbildung 3-9 ist der Querschnitt durch das zweidimensionale Rechenmodell in KENOREST für das Brennelement 2F2DN23 dargestellt.

Die Ergebnisse der Nachrechnungen der Proben SF98-2 bis SF98-8 samt Mittelwert, Standardabweichung und Varianz sind in Tabelle 3-5 aufgelistet. Leerstellen in der Tabelle indizieren das Fehlen des entsprechenden Messwerts. Abbildung 3-10 stellt die Mittelwerte der Probennachrechnungen und die zugehörigen Standardabweichungen grafisch dar.

Tabelle 3-5 Mit KENOREST errechnete C/E–Werte für die PIE–Proben aus dem Siedewasserreaktor Fukushima Daini 2

	SF98-2	SF98-3	SF98-4	SF98-5	SF98-6	SF98-7	SF98-8	MW.	St.Abw.	Varianz
AM241	1,13261	0,99450	0,99532	1,06347	1,19384	1,27780	1,35660	1,14488	0,139434	0,019442
AM242M	1,20222	0,91278	0,91770	0,94795	0,96591	1,15766	1,14673	1,03585	0,126843	0,016089
AM243	2,20998	0,87287	0,88576	1,00236	0,94624	1,01748	1,00276	1,13392	0,478004	0,228488
CE144	1,35188	1,10581	1,04862	0,92841	0,99233	0,90755	0,86083	1,02792	0,165842	0,027504
CM242	1,49707	0,70342	0,70879	0,54306	0,30262	0,65906	0,78213	0,74231	0,368294	0,13564
CM243	1,82561	0,72855	0,87073	0,96704	0,83636	0,84828	0,79450	0,98158	0,379202	0,143794
CM244	2,55029	0,73172	0,74828	0,79116	0,73878	0,78903	0,76482	1,01630	0,676824	0,458091
CM245	2,73815	0,64704	0,66502	0,66494	0,56855	0,64850	0,62704	0,93703	0,794908	0,631878
CM246		0,52244	0,54176	0,54260	0,47394	0,51114	0,76147	0,55889	0,102394	0,010485
CS134	1,84536	1,15446	1,12438	1,16162	1,06143	1,02221	1,20203	1,22450	0,280585	0,078728
CS137	1,14627	0,99699	0,96386	0,99685	0,95491	0,91405	1,03265	1,00080	0,074389	0,005534
EU154	1,28890	0,88284	0,85702	0,94156	0,84545	0,93810	0,85656	0,94435	0,156876	0,02461
ND143	0,93947	1,02101	1,03865	1,02069	1,00837	1,02766	1,01481	1,01009	0,032579	0,001061
ND144	0,92903	0,94588	0,96180	0,99322	0,97118	0,99089	1,02166	0,97338	0,03134	0,000982
ND145	0,97740	1,00536	1,01152	1,00462	1,00792	1,00242	1,00295	1,00174	0,011177	0,000125
ND146	1,00758	0,99777	0,99551	0,99700	0,99537	0,99796	1,00090	0,99887	0,004263	1,82E-05
ND148	0,99966	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00000	1,00033	1,00000	0,000193	3,74E-08
ND150	1,01173	0,99625	0,99088	0,99826	0,99476	1,00048	1,00072	0,99901	0,006573	4,32E-05
NP237	1,57945	1,13090	1,08129	1,39125	1,04925	1,27203	1,26971	1,25341	0,188073	0,035372
PU238	1,75416	0,97858	0,97735	1,05785	1,18203	1,06961	1,03982	1,15134	0,274563	0,075385
PU239	1,12160	1,05651	1,06465	1,07417	1,03302	1,11865	1,06557	1,07631	0,032573	0,001061
PU240	1,32025	0,96066	0,93613	0,93188	0,90380	0,91754	0,96971	0,99142	0,14679	0,021547
PU241	1,48584	1,05096	1,05523	1,08191	1,08359	1,15277	1,17854	1,15555	0,153423	0,023539
PU242	1,86182	0,94852	0,94896	1,00778	1,04787	1,02353	1,04459	1,12615	0,326976	0,106914
RU106	1,50672	1,20257	1,35812	1,38914	1,46990	1,26356	1,24900	1,34843	0,115417	0,013321
SB125					1,59927			1,59927		
SM147	0,96700	0,83436	0,82320	0,85554	0,87167	0,84500	0,82804	0,86069	0,049766	0,002477
SM148	1,29631	0,84847	0,82750	0,88229	0,87871	0,89957	0,90880	0,93452	0,162006	0,026246
SM149	1,08769	1,08265	1,21982	0,91759	1,09870	0,98690	0,88633	1,03995	0,116399	0,013549
SM150	1,15642	0,90692	0,90608	0,97033	0,95362	0,95578	0,91528	0,96635	0,087739	0,007698
SM151	1,01573	0,97879	0,99836	1,08758	1,04009	1,17863	1,08193	1,05444	0,068129	0,004642
SM152	1,18789	1,00211	1,02058	1,12291	1,18410	1,16612	1,06949	1,10760	0,077579	0,006018
SM154	1,16009	0,86709	0,87096	0,92691	0,93809	0,92487	0,86089	0,93556	0,10412	0,010841
U-234	0,96078	0,99679	0,98988	0,97846	1,04731	0,97961	0,99915	0,99314	0,027204	0,00074
U-235	0,85600	1,08254	1,10660	1,06192	1,02770	1,09544	1,06537	1,04222	0,086038	0,007403
U-236	1,08730	0,93612	0,93376	0,93537	0,92899	0,92296	0,92263	0,95245	0,059724	0,003567
U-238	1,00148	1,00011	1,00043	1,00054	1,00075	0,99925	0,99862	1,00017	0,000958	9,18E-07

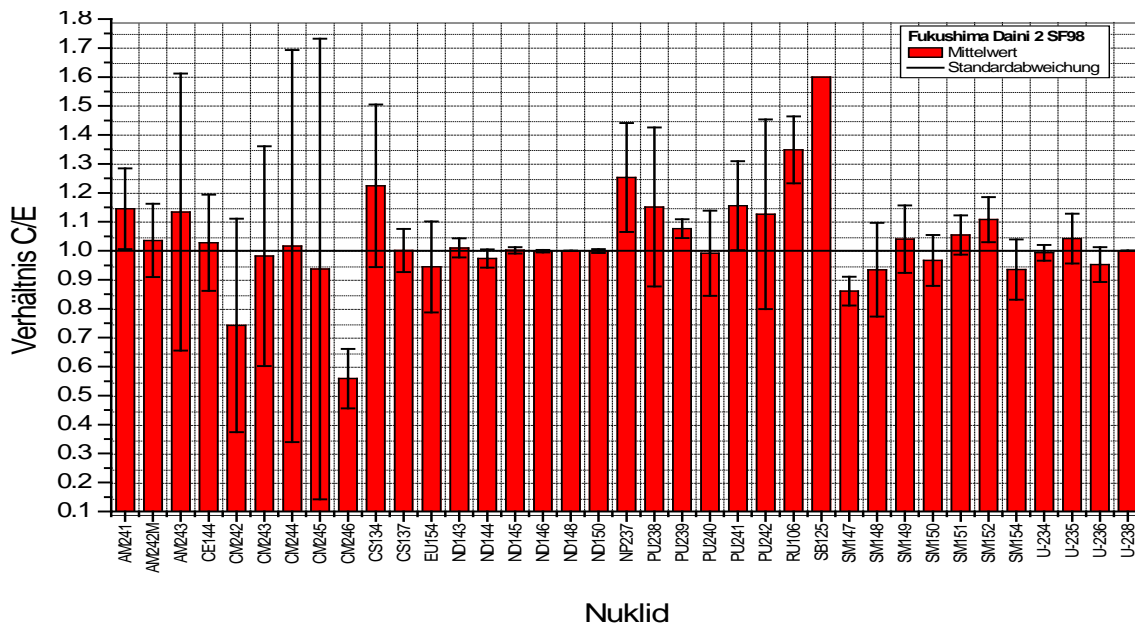


Abbildung 3-10 Mittelwert und Standardabweichung für die mit KENOREST errechneten C/E-Werte der PIE-Proben aus Fukushima Daini 2

Die Rechenergebnisse ähneln qualitativ früheren Nachrechnungen von radiochemischen Analyseproben aus dem japanischen Druckwasserreaktor Takahama-3 /KIL 05/, welche in etwa gleichzeitig in demselben Analyselabor durchgeführt wurden wie diejenigen aus Fukushima Daini 2 /NAK 00/. Somit ist eine gute Konsistenz zwischen diesen und früheren Rechenergebnissen bezüglich der Proben aus diesem Labor gegeben.

### Cooper

Die wesentlichen Daten und Kenngrößen des Siedewasserreaktors Cooper sowie des Brennelements CZ346 /MER 05/, dem die radiochemischen Analyseproben entnommen wurden, sind in Tabelle 3-6 zusammengefasst. In Abbildung 3-11 ist ein schematischer Querschnitt durch das Brennelement CZ346 aus dem Siedewasserreaktor Cooper dargestellt. Tabelle 3-7 listet die Zusammensetzungen der verschiedenen Brennstabtypen auf.

Tabelle 3-6 Reaktor- und Brennelementkenngößen von Cooper

<b>Reaktor- und Brennelementdaten</b>	
Nominale therm. Leistung (MW)	2,381
Gittertyp	7x7 GE-3b
Anzahl Brennstäbe	49
Aktive Kernhöhe (m)	3,71
Brennelement-Pitch weit (cm)	15,718
Brennelement-Pitch schmal (cm)	14,763
Kühlmitteldurchfluss (kg/s)	33800
<b>Brennstabdaten</b>	
Brennstoff	UO <sub>2</sub> , UO <sub>2</sub> -Gd <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
Pelletdichte (g/cm <sup>3</sup> )	10,32
Verschmierte Pelletdichte (g/cm <sup>3</sup> )	9,795
Pelletdurchmesser (cm)	1,21
Brennstabpitch (cm)	1,875
Brennstofftemperatur (K)	833
Hüllrohrmaterial	Zircaloy-2
Hüllrohrdicke (cm)	0,094
Hüllrohraußendurchmesser (cm)	1,43
Pelletdurchmesser heiß (cm)	1,242
Anzahl Gadoliniumstäbe	5
<b>Kühlmitteldaten</b>	
Nominaldruck (Pa)	6,91 × 10 <sup>6</sup>
Nominale Auslasstemperatur (K)	558
<b>Wasserkanaldaten</b>	
Wasserkanal-Innenweite (cm)	13,4
Wasserkanal-Dicke (cm)	0,203

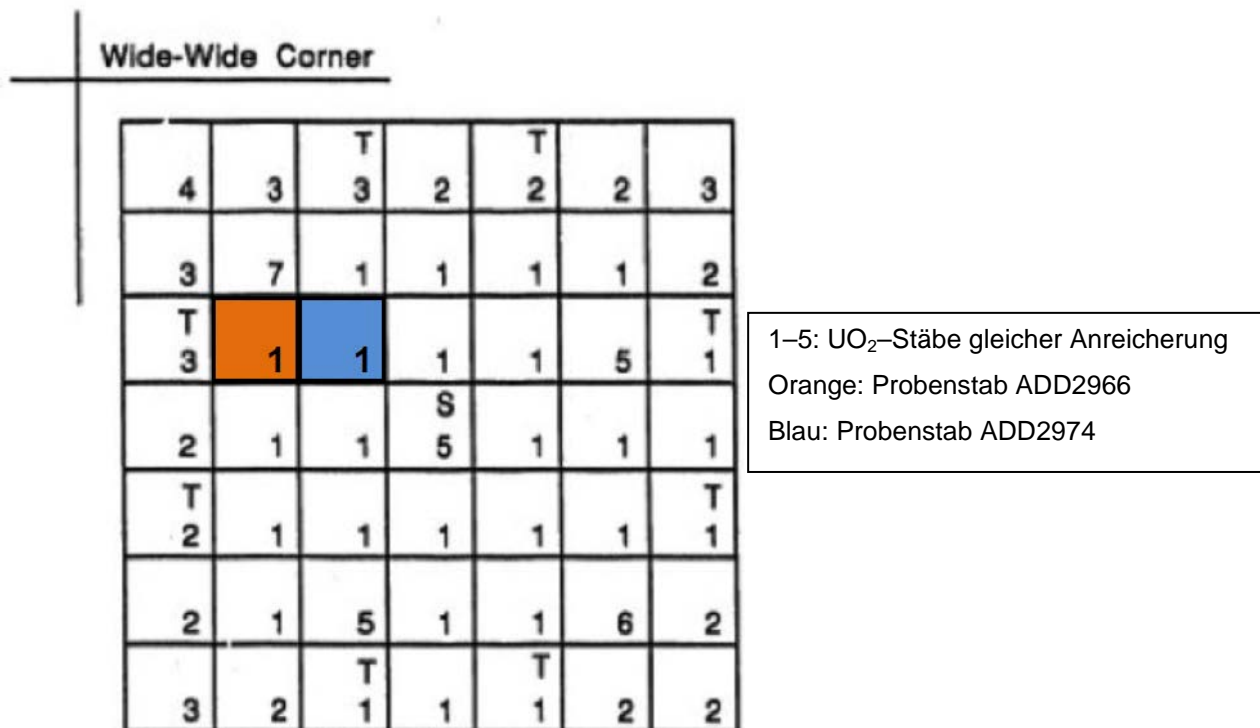


Abbildung 3-11 Schematischer Aufbau des Brennelements CZ346 aus dem Siedewasserreaktor Cooper (Querschnitt)

Tabelle 3-7 Zusammensetzung der Brennstäbe in dem Brennelement CZ346 aus dem Siedewasserreaktor Cooper

Stab	Anreicherung <sup>235</sup> U	Gd <sub>2</sub> O <sub>3</sub> Gew.-%
1	2,93	–
2	1,94	–
3	1,69	–
4	1,33	–
5	2,93	3,0
6	2,93	4,0
7	1,94	4,0

Die Geometrie des Brennelements und der Brennstäbe wurde so exakt wie möglich in KENOREST nachgebildet. Für jede einzelne Probe wurde die detaillierte Leistungs-geschichte modelliert und jeweils genau dieser Probe aufgeprägt, während die Leistungsverteilung für die übrigen Brennstäbe vom Code auf Basis der lokalen zeitabhängigen Nuklidinventare und Neutronenflüsse ermittelt wurde.

In Abbildung 3-12 ist der Querschnitt durch das zweidimensionale Rechenmodell in KENOREST für das Brennelement CZ346 dargestellt.



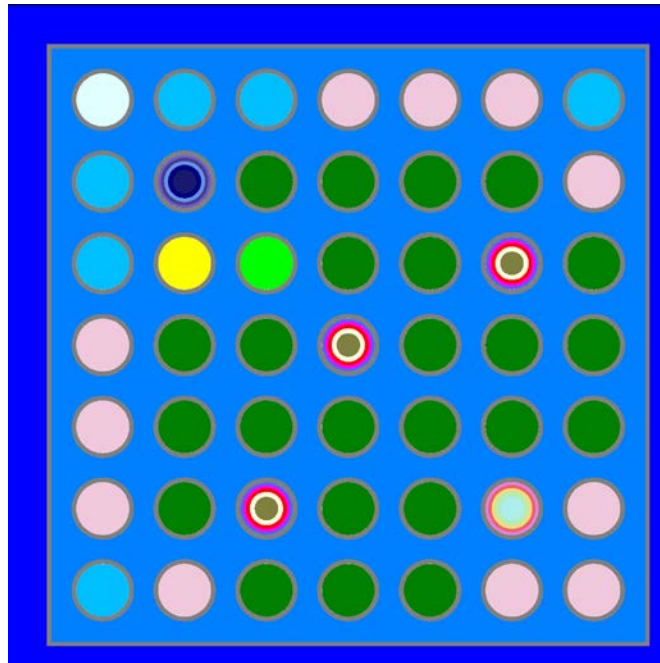


Abbildung 3-12 Querschnitt durch das KENOEST-Rechenmodell für das Brennelement CZ346 aus dem Siedewasserreaktor Cooper

In den radiochemischen Analyseproben aus diesem Reaktor sind die Uran- und Plutonium-Isotope in Gramm pro Tonne Schwermetall angegeben, während die übrigen Nuklide,  $^{79}\text{Se}$ ,  $^{90}\text{Sr}$ ,  $^{99}\text{Tc}$ ,  $^{126}\text{Sn}$ ,  $^{135}\text{Cs}$ ,  $^{137}\text{Cs}$ ,  $^{237}\text{Np}$ ,  $^{241}\text{Am}$ , sowie die Summe aus  $^{243}\text{Cm}$  und  $^{244}\text{Cm}$  in Curie pro Tonne Schwermetall quantifiziert wurden. Dies muss in den Rechnungen mit KENOEST entsprechend berücksichtigt werden.

Die Ergebnisse der Nachrechnungen für die einzelnen Proben samt Mittelwert, Standardabweichung und Varianz sind in Tabelle 3-8 aufgelistet. Abbildung 3-13 stellt die Mittelwerte der Probennachrechnungen und die zugehörigen Standardabweichungen grafisch dar.

Die hier beobachtete systematische Unterschätzung von  $^{79}\text{Se}$  mit sehr geringer Standardabweichung ist vermutlich durch die in der Querschnittsbibliothek ENDF/B-VI mit  $1.1 \times 10^6$  Jahren gegenüber aktuelleren Bibliotheken und einen Faktor von ca. drei überschätzte Halbwertszeit dieses Nuklids begründet. Eine entsprechende Korrektur dieses Zahlenwerts in der KENOEST zugrunde liegenden Querschnittsbibliothek zeigt eine deutliche Verbesserung der Berechnung der Aktivität von  $^{79}\text{Se}$  und unterstützt so diese Vermutung. Die systematische Überschätzung von  $^{126}\text{Sn}$  um etwa einen Faktor drei bei sehr geringer Standardabweichung dürfte ähnliche Ursachen besitzen.

Tabelle 3-8 Mit KENOREST errechnete C/E–Werte für die PIE–Proben aus dem Siedewasserreaktor Cooper

Nuklid	B3B	B3K	B3T	C3B	C3J	C3U	MW	STABW
U-234	0,977	1,011	0,940	0,962	0,967	0,915	0,9621	0,02973
U-235	1,005	1,000	0,934	0,992	1,016	0,912	0,9766	0,03890
U-236	0,950	0,931	0,922	0,975	0,924	0,927	0,9382	0,01882
U-238	0,999	1,000	0,995	0,986	0,983	0,990	0,9922	0,00642
PU238	1,160	1,006	0,967	1,152	1,065	1,037	1,0643	0,07120
PU239	1,186	1,121	1,062	1,175	1,178	1,012	1,1222	0,06553
PU240	1,029	0,903	0,907	1,027	0,902	0,906	0,9455	0,05826
PU241	1,361	1,152	1,085	1,359	1,257	1,067	1,2134	0,12022
PU242	1,228	1,041	1,026	1,228	1,072	1,035	1,1049	0,08822
SE-79	0,369	0,373	0,355	0,356	0,356	0,361	0,3617	0,00699
SR-90	1,036	1,090	1,077	1,069	1,062	1,059	1,0654	0,01658
TC-99	1,101	1,182	1,182	1,110	1,088	1,162	1,1374	0,03921
SN126	3,127	3,079	2,985	3,133	2,947	2,937	3,0347	0,08154
CS135	1,137	1,084	1,060	1,115	1,033	1,067	1,0828	0,03461
CS137	1,026	1,022	1,020	1,020	0,931	1,050	1,0116	0,03740
NP237	1,341	1,020	0,996	1,357	1,152	0,966	1,1388	0,15962
AM241	1,475	1,274	1,199	1,462	1,393	1,144	1,3243	0,12707
CM243+ CM244	1,271	0,974	0,909	1,105	1,033	0,890	1,0304	0,12977

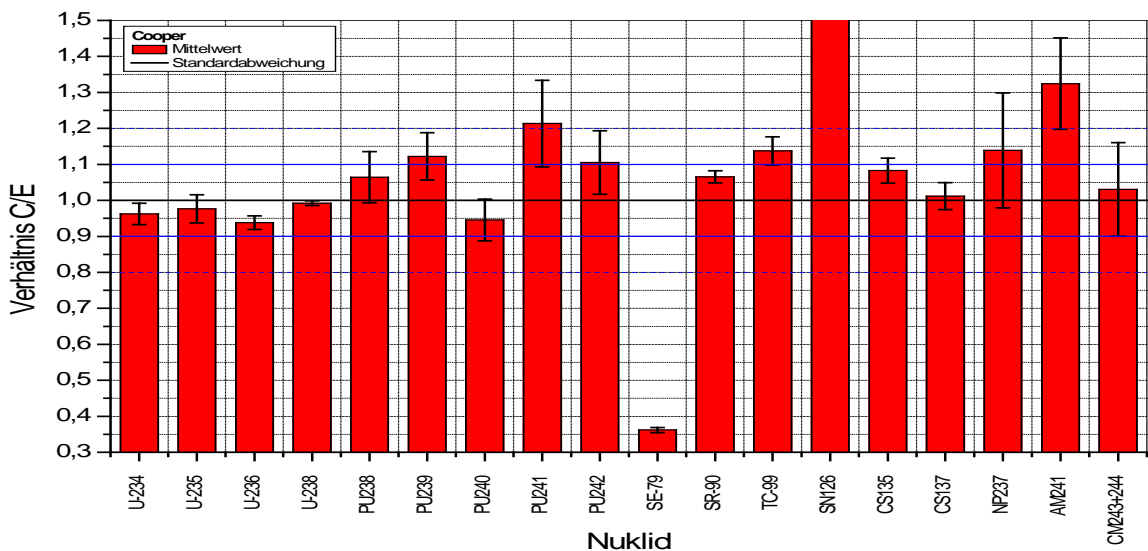


Abbildung 3-13 Mittelwert und Standardabweichung für die mit KENOREST errechneten C/E–Werte der PIE–Proben aus Cooper

## Gundremmingen A

Die wesentlichen Daten und Kenngrößen des Siedewasserreaktors Gundremmingen A sowie der Brennelemente B23 und C16 /MER 05/, denen die radiochemischen Analysproben entnommen wurden, sind in Tabelle 3-9 zusammengefasst.

Tabelle 3-9 Reaktor- und Brennelementkenngrößen von Gundremmingen A

<b>Reaktor- und Brennelementdaten</b>	
Nominale therm. Leistung (MW)	801
Gittertyp	6×6
Anzahl Brennstäbe	36
Aktive Kernhöhe (m)	3,302
Brennelement–Pitch weit (cm)	13,098
Brennelement–Pitch schmal (cm)	12,303
Kühlmitteldurchfluss (kg/s)	12300
<b>Brennstabdaten</b>	
Brennstoff	UO <sub>2</sub>
Pelletdichte (g/cm <sup>3</sup> )	10,5
Verschmierte Pelletdichte (g/cm <sup>3</sup> )	10,07
Pelletdurchmesser (cm)	1,224
Brennstabpitch (cm)	1,78
Brennstofftemperatur (K)	923
Hüllrohrmaterial	Zircaloy–2
Gapdicke (cm)	0,01375
Hüllrohrdicke (cm)	0,0889
Hüllrohrinnendurchmesser (cm)	1,25
<b>Kühlmitteldaten</b>	
Nominaldruck (bar)	69
Nominale Auslasstemperatur (K)	559
<b>Wasserkanaldaten</b>	
Wasserkanal–Außenweite (cm)	11,352
Wasserkanal–Dicke (cm)	0,15
Wasserkanal Material	Zircaloy–4

In Abbildung 3 14 Schematischer Aufbau der Brennelemente B23 und C16 aus dem Siedewasserreaktor Gundremmingen A (Querschnitt) sind schematische Querschnitte

durch die Brennelemente B23 und C16 dargestellt. Eingezeichnet sind diejenigen Stäbe, aus denen die radiochemischen Analyseproben entnommen wurden.

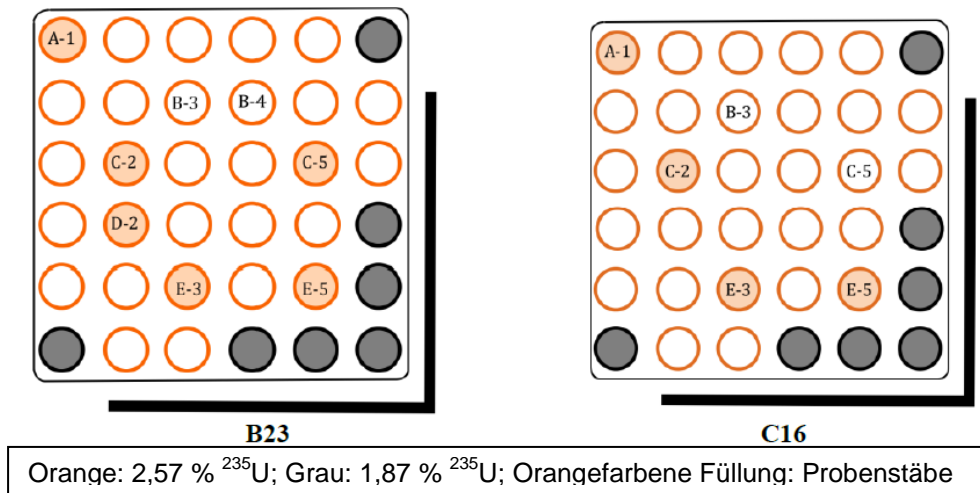


Abbildung 3-14 Schematischer Aufbau der Brennelemente B23 und C16 aus dem Siedewasserreaktor Gundremmingen A (Querschnitt)

Für die beiden Proben A-1 aus den Brennelementen B23 und C16 wurden ein Dampfblasengehalt von 0.0 % und eine Kühlmitteldichte von 740 kg/m<sup>3</sup> angenommen. Für alle anderen Proben wurden ein Dampfblasengehalt von 50.0 % und eine Kühlmitteldichte von 388 kg/m<sup>3</sup> angenommen.

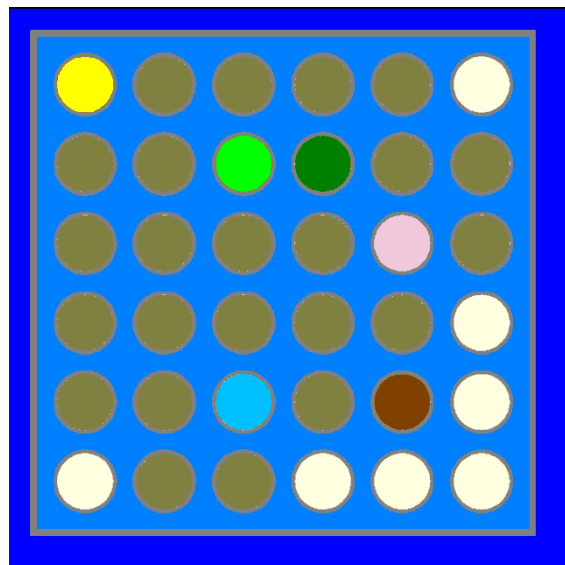


Abbildung 3-15 Querschnitt durch das KENOREST-Rechenmodell für das Brennelement aus dem Siedewasserreaktor Gundremmingen A

Die Geometrie des Brennelements und der Brennstäbe wurde so exakt wie möglich in KENOREST nachgebildet. Für jede einzelne Probe wurde die detaillierte Leistungsge-

schichte modelliert und jeweils genau dieser Probe aufgeprägt, während die Leistungsverteilung für die übrigen Brennstäbe vom Code auf Basis der lokalen zeitabhängigen Nuklidinventare und Neutronenflüsse ermittelt wurde. Die KENOEST-Geometrie ist in Abb. 3-15 dargestellt.

Die Ergebnisse der Nachrechnungen für die einzelnen Proben samt Mittelwert, Standardabweichung und Varianz sind in Tabelle 3-10 aufgelistet. Abbildung 3-16 stellt die Mittelwerte der Probennachrechnungen und die zugehörigen Standardabweichungen grafisch dar.

Tabelle 3-10 Mit KENOEST errechnete C/E-Werte für die PIE-Proben aus dem Siedewasserreaktor Gundremmingen A

	B23-A1-1	B23-A1-2	B23-B3	B23-B4	B23-C5	B23-E3	B23-E5	C16-A1-1	C16-A1-2	C16-B3	C16-C5	C16-E5	MW	STABW
AM241	0,319	0,192	0,541		1,758	0,851	1,141	0,301	0,415	0,948	3,328	0,916	0,9736	0,8633
CM242	0,011	0,009	0,012	0,013	0,013	0,014	0,014	0,010	0,011	0,011	0,014	0,012	0,0120	0,0016
CM244	0,682	0,429	0,715	0,818	0,803	1,050	0,783	0,576	0,639	0,611	0,807	0,761	0,7230	0,1483
CS134	0,409	0,498	0,487	0,468		0,507	0,518	0,403	0,383	0,449		0,560	0,4682	0,0538
CS137	0,806	1,092	0,914	0,939	0,853	0,974	0,911	0,899	0,870	0,878	0,823	0,945	0,9086	0,0729
EU154	0,486	0,542	0,643	0,733		0,780	0,785	0,610	0,639	0,632		0,763	0,6612	0,0970
ND148	0,996	0,996	0,991	0,991	0,990	0,964	0,963	0,986	1,028	0,990	1,003	0,985	0,9902	0,0163
PU236	0,156	0,124	0,229				0,493			0,319		0,393	0,2856	0,1302
PU238	1,078	0,785	1,057	1,060	1,164	1,294	1,186	1,017	1,083	1,028	1,202	1,173	1,0940	0,1224
PU239	0,912	0,713	1,059	1,148	1,173	1,207	1,205	0,911	0,929	1,041	1,141	1,170	1,0507	0,1481
PU240	1,014	0,895	0,933	0,976	0,947	1,029	0,941	0,965	0,993	0,974	1,021	0,956	0,9704	0,0379
PU241	0,813	0,599	0,984	1,057	1,064	1,136	1,077	0,786	0,819	0,943	1,088	1,056	0,9518	0,1560
PU242	1,009	0,874	1,022	1,082	1,023	1,172	0,996	0,902	0,960	0,972	1,108	0,933	1,0044	0,0822
U 235	0,854	0,700	0,996	1,041	1,050	1,018	1,145	0,965	0,911	1,015	1,003	1,079	0,9815	0,1112
U 236	0,942	0,966	0,920	0,927	0,893	0,908	0,892	0,886	0,933	0,893	0,927	0,897	0,9155	0,0235
U 238	1,002	1,004	1,000	0,999	0,999	0,999	0,999	1,001	1,001	1,000	0,999	0,999	1,0003	0,0015

Die Unterschätzung der Masse von <sup>244</sup>Cm um etwa 30 % ist typisch für Nachrechnungen radiochemischer Analyseproben auf Basis von Querschnittsbibliotheken vor ENDF/B-VII.0 und kann auch in Nachrechnungen von Proben aus DWR mit KENOEST gefunden werden /HES 09/.

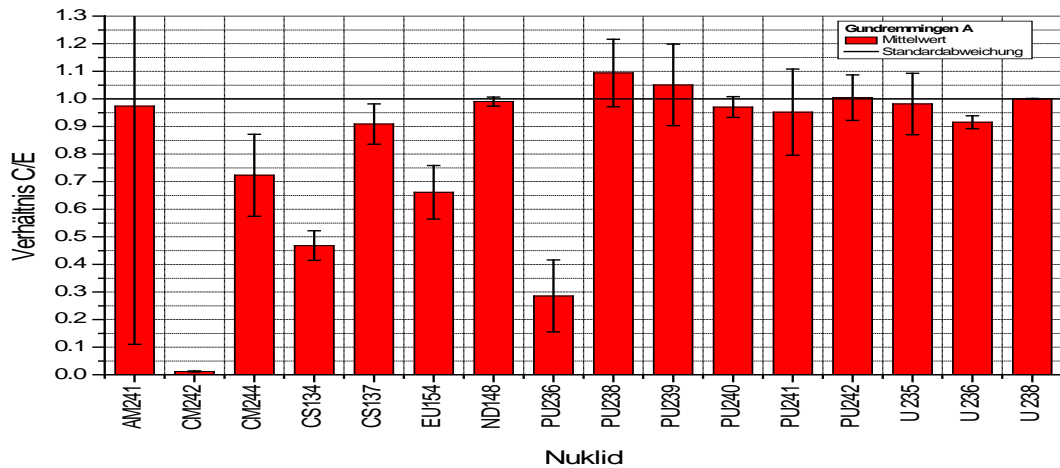


Abbildung 3-16 Mittelwert und Standardabweichung für die mit KENOREST errechneten C/E-Werte der PIE-Proben aus Gundremmingen A

Die bei geringer Standardabweichung systematische deutliche Unterschätzung der Masse von  $^{242}\text{Cm}$  deutet auf messtechnische Probleme bei diesem Isotop hin, zumal die errechnete Masse der Zerfallstochter dieses Nuklids,  $^{238}\text{Pu}$ , von den Rechnungen vergleichsweise gut reproduziert werden kann. Deshalb sollten die Rechenergebnisse für dieses Nuklid aus den Proben von Gundremmingen A nicht in eine systematische Analyse mit einbezogen werden. Qualitativ dasselbe gilt für die errechneten Massen für das Nuklid  $^{236}\text{Pu}$ , das um etwa 50 % unterschätzt wird, allerdings bei sehr geringen Absolutmassen im abgebrannten Kernbrennstoff.

## 4 AP2: Aktualisierung von KENOREST-Bibliotheken und Software-Modulen

Um den hohen Qualitätsstandard von KENOREST zu sichern und den aktuellen Stand von Wissenschaft von Technik der nuklearen Basisdaten garantieren zu können, wurden Aktualisierungen an den Basisbibliotheken sowie Erweiterungen an verschiedenen KENOREST-Modulen vorgenommen. Damit soll die Vorhersagegenauigkeit verbessert und insbesondere die noch nicht befriedigend gelöste Americium-Curium-Problematik angegangen werden.

Zur weiteren Überprüfung der in der GRS eingesetzten nuklearen Daten wurde mit den Monte-Carlo-Abbrand-Programmsystemen MONTEBURNS mit JEFF-3.1-Daten, und TRITON/KENO-Va mit ENDF/B-VII-Daten an einem in der OECD/NEA-Arbeitsgruppe WPRS durchgeführten Rechenbenchmark teilgenommen. Dabei handelt es sich um Brennstoff-Teilchen im unendlichen Gitter, sowie für Hochtemperaturreaktoren repräsentative Anordnungen von Brennstoff/Moderator-Kugeln und -Prismen. Die Ergebnisse wurden gemeinsam mit Ergebnissen, die vom IKE Stuttgart mit dortigen Rechenprogrammen erzielt wurden, auf der Jahrestagung Kerntechnik 2010 vorgestellt /MEI 10/. Der Benchmark-Beitrag mit den detaillierten Ergebnissen ist in Anhang B1 zu finden.

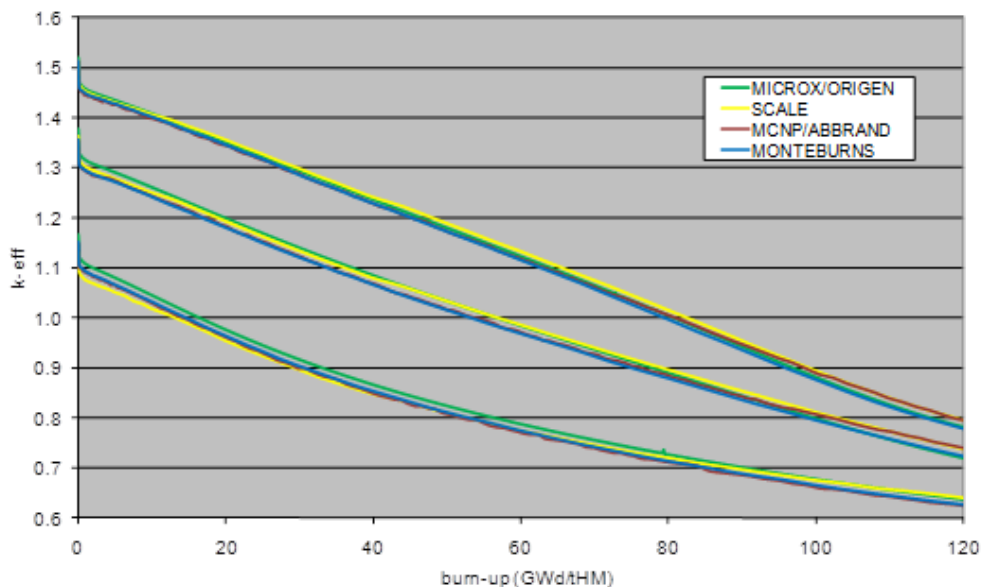


Abbildung 4-1 Mit unterschiedlichen Programmsystemen berechnete Multiplikationsfaktoren für die verschiedenen Fälle des HTR-Abbrandbenchmarks. Von oben nach unten:  $k(\text{Kugel})$ ,  $k(\text{Prisma}) - 0.1$ ,  $k(\text{Korn}) - 0.2$ .

Der Vergleich der Ergebnisse zum HTR-Benchmark ergab im Allgemeinen sehr gute Übereinstimmung zwischen MONTEBURNS mit JEFF-3.1, TRITON/KENO-Va mit ENDF/B-VII und den am IKE Stuttgart eingesetzten Programmen MICROX/ORIGEN und MCNP/ABBAND für Multiplikationsfaktoren, Neutronenspektren und Nuklidinventare. Gute Übereinstimmung ergibt sich auch mit den Ergebnissen anderer Benchmark-Teilnehmer, die bislang nur in sehr vorläufiger Form vorliegen. In Abbildung 4-1 und den Tabellen 4-1 und 4-2 sind die wichtigsten Ergebnisse dieser Arbeit dargestellt. Abbildung 4-1 zeigt die Abhängigkeit des Multiplikationsfaktors vom Abbrand für die drei betrachteten Anordnungen, die sich aus den Berechnungen mit den eingesetzten Programmsystemen ergeben. Tabelle 4-1 vergleicht die resultierenden Nuklidichten für die Kugel-Anordnung bei einer mittleren und einem sehr hohen Abbrandwert.

Tabelle 4-1 Aktiniden-Inventare der Kugel-Anordnung in Gramm pro Tonne Schwermetall für einen Abbrand von 40 GWd/tHM.

	MICROX/ORIGEN	SCALE	MCNP/ABBAND	MONTEBURNS
U-235	4.03E+04	3.95E+04	4.07E+04	4.01E+04
U-238	9.01E+05	9.00E+05	9.01E+05	9.00E+05
Pu-239	7.86E+03	8.08E+03	8.09E+03	8.10E+03
Pu-240	1.74E+03	1.80E+03	1.76E+03	1.78E+03
Pu-241	8.50E+02	8.89E+02	8.64E+02	8.68E+02
Pu-242	1.33E+02	1.41E+02	1.32E+02	1.36E+02
Am-241	1.64E+01	1.84E+01	1.72E+01	1.73E+01
Cm-244	9.84E-01	7.26E-01	5.46E-01	5.61E-01
Cm-245	1.54E-02	1.34E-02	8.63E-03	8.86E-03

Tabelle 4-2 Aktiniden-Inventare der Kugel-Anordnung in Gramm pro Tonne Schwermetall für einen Abbrand von 120 GWd/tHM.

	MICROX/ORIGEN	SCALE	MCNP/ABBAND	MONTEBURNS
U-235	1.52E+03	1.44E+03	1.89E+03	1.62E+03
U-238	8.48E+05	8.45E+05	8.46E+05	8.46E+05
Pu-239	6.58E+03	6.69E+03	7.16E+03	6.93E+03
Pu-240	3.39E+03	3.43E+03	3.51E+03	3.48E+03
Pu-241	1.94E+03	1.96E+03	2.13E+03	2.03E+03
Pu-242	3.11E+03	3.02E+03	3.09E+03	3.13E+03
Am-241	4.62E+01	5.81E+01	5.92E+01	5.43E+01
Cm-244	4.64E+02	3.55E+02	3.09E+02	3.07E+02
Cm-245	1.14E+01	1.14E+01	8.44E+00	7.80E+00



Das Programmsystem NJOY /MAC 94/ vom Los Alamos National Laboratory (LANL), das neben AMPX-2000 international zur Prozessierung nuklearer Daten eingesetzt wird, und das die direkte Verarbeitung evaluierter Daten im ENDF6-Format ermöglicht, wurde in den Ablauf zur Aktualisierung der KENOREST-Bibliotheken eingebunden. Da heute die wichtigsten evaluierten Daten (ENDF/B-VII, JEFF-3.1.1, JENDL-4.0,...) alle im gleichen einheitlichen ENDF6-Format vorliegen, wird es dadurch möglich, die zugrundeliegenden evaluierten Daten standardisiert und konsistent auszutauschen. Es wurde ein automatisierter Ablauf in einer Python-Umgebung erstellt, der die Basisbibliothek erzeugt, aus der die verschiedenen KENOREST-Datenbibliotheken für die verschiedenen Teile des Programmsystems abgeleitet werden. In dem Ablauf ist es nun leicht möglich, einzelne Daten auszutauschen, was insbesondere für den Test der Curium-Wirkungsquerschnitte aus dem JENDL Actinoid File 2008 hilfreich ist. Zusätzlich wurde ein Programm erstellt, das verschiedene Bibliotheken und damit auch die neuen und alten Daten systematisch vergleicht. Somit können zum einen mögliche Fehler schnell erkannt werden, aber auch wesentliche Änderungen in den Daten erfasst werden. Aus der neu erstellten Basisbibliothek wurden die für das KENOREST-System benötigten Bibliotheken abgeleitet. Dazu wurden einige Anpassungen an den dazu vorgesehenen Skripten vorgenommen. Der Ablauf zur Erstellung der Basisbibliothek wurde weiter verbessert und der mögliche Austausch evaluierter Daten getestet. Weiterhin wurde eine Möglichkeit zur einfachen Eingabe von Elementen, d.h. natürlichen Isotopengemischen, erstellt, da insbesondere in der ENDF/B-VII-Evaluierung bis auf wenige Ausnahmen nur Isotope angegeben werden.

Mit der neu entwickelten, auf NJOY beruhenden Verarbeitungskette zur Erzeugung von KENOREST-Datenbibliotheken wurde ein Satz von Bibliotheken für das KENOREST-System auf der Grundlage von ENDF/B-VII und JEFF-3.1.1 erstellt. Da nicht alle in KENOREST berücksichtigten Nuklide in den ENDF/B-VII Daten vertreten sind, kann in einer festlegbaren Reihenfolge in anderen Evaluationen nach den entsprechenden Daten gesucht werden. Für die auf ENDF/B-VII basierenden Daten wurde die Reihenfolge wie folgt gewählt: ENDF/B-VII, JENDL-4.0, JENDL-AC2008, JEFF-3.1.1, EAF-2003. Um die JENDL-AC2008 Daten insbesondere für Curium zu testen, wurde eine weitere Bibliothek erstellt, in der diese Reihenfolge wie folgt verändert wurde: JENDL-AC2008, ENDF/B-VII, JENDL-4.0, JEFF-3.1.1, EAF-2003. Dabei wurde darauf geachtet, dass die beiden Bibliotheken sich nur in den Nukliden unterscheiden, die aus JENDL-AC2008 verwendet wurden, um einen Vergleich zu erleichtern. Mit den neu erstellten Bibliotheken des KENOREST-Systems wurden erfolgreiche Testläufe durchgeführt.

Dabei wurde zum einen ein unendliches Gitter betrachtet, um die Auswirkung der Änderungen in einer schnellen Testumgebung betrachten zu können und zum anderen wurde die Probe SF97-4 aus der SFCOMPO-Datenbasis nachgerechnet. Für einige Nuklide, insbesondere Curium, konnte eine bessere Übereinstimmung mit dem Experiment festgestellt werden. Zur Erzielung zufriedenstellender Ergebnisse sind, wie bereits in den bisherigen Bibliotheken, nach der Prozessierung der evaluierten Daten Korrekturen erforderlich, die Besonderheiten der Resonanzbehandlung in HAMMER berücksichtigen. Zur Qualitätssicherung wurden sowohl die bisherigen Prozeduren als auch das neue Programm GENLIB in das neue Software Management System Teamforge eingestellt und eine entsprechende Dokumentation der neuen Komponenten erstellt.

Zur verbesserten Handhabung der Validierung des KENOREST-Systems einschließlich der nuklearen Datenbibliotheken wurden repräsentative Messdaten aus der SFCOMPO-Datenbasis zusammengestellt und in Ergänzung zu in einem früheren Vorhaben durchgeführten Arbeiten /BAL 00/ eine Skript-Sequenz entwickelt, mit der die Berechnungen ohne Anwender-Eingriffe durchgeführt und bezüglich relevanter Ergebnisgrößen ausgewertet werden können; die Anwendung erfolgte bei der Nachrechnung von in SFCOMPO verfügbaren SWR-Proben, siehe Abschnitt 3.

Zur weiteren Validierung der nuklearen Daten beteiligt sich die GRS am "Calculational Benchmark for the Analysis of Small-Sample Reactivity Experiments" /LEC 10/ der OECD/NEA-Arbeitsgruppe WPNCs/BUC (Working Party for Nuclear Criticality Safety/Burnup Credit). Das Benchmark ist in vier Phasen aufgeteilt, die sich jeweils in ihrer Geometrie unterscheiden und sich mit jeder Stufe der wahren experimentellen Anordnung annähern.

In der ersten Phase wird eine einzelne Stabzelle in zwei Dimensionen im unendlichen Gitter betrachtet. Dieser Stabzelle werden nacheinander kleine Mengen bestimmter Spaltprodukte und Aktinide hinzugefügt. Dabei soll nun die Reaktivitätsänderung durch die Zugabe des jeweiligen Isotops bestimmt werden. In der zweiten Phase wird ein 7x7-Gitter in zwei Dimensionen betrachtet und nur dem mittleren Stab werden die entsprechenden Isotope beigefügt. Für die ersten zwei Phasen dieses Benchmarks wurden entsprechende Eingabedatensätze für MCNP erstellt. Damit wurden gemäß der Benchmark-Spezifikation die Reaktivitätsdifferenzen und Reaktionsraten berechnet. Die Ergebnisse sind in Tabelle 4-3 dargestellt.

Tabelle 4-3 Mit MCNP errechnete Reaktivitätsdifferenzen für die ersten beide Teile des Benchmarks /LEC 10/ einmal als direkte Differenz zweier MCNP Rechnungen („Direkt“) und einmal mit der „Perturbation“-Option in MCNP („Perturbation“).

Fall	Teil 1		Teil2	
	Direkt	Perturbation	Direkt	Perturbation
1	0.00420	0.00412	0.00434	0.00300
2	0.01007	0.00995	0.00505	0.00446
3	0.00349	0.00332	0.00502	0.00432
4	0.02590	0.02566	0.00647	0.0062
5	0.00329	0.00333	0.00435	0.00376
6	0.01240	0.01226	0.00477	0.00418
7	0.02743	0.02729	0.00721	0.00703
8	0.00695	0.00683	0.00651	0.00593
9	0.00259	0.00246	0.00515	0.00472
10	0.02968	0.02949	0.00679	0.00671
11	0.00380	0.00369	0.00700	0.00686
12	0.01734	0.01744	0.00713	0.00714
13	0.00882	0.00860	0.00384	0.00338
14	0.00647	0.00643	0.00734	0.00707
15	0.00915	0.00905	0.00694	0.00687
16	0.43510	-	-0.00431	-0.00411
17	0.01189	0.01066	0.00214	0.00166
18	0.01161	0.01159	0.00672	0.00663
19	0.00597	0.00589	0.00740	0.00721
20	-0.05205	-0.04671	-0.00595	-0.00527
21	0.11939	0.08899	0.00372	0.00279
22	-0.03742	-0.03739	-0.00697	-0.00651
23	0.00821	0.00790	0.00214	0.00164
24	0.00741	0.00735	0.00643	0.00639
25	0.00378	0.00367	0.00499	0.0044
26	0.02415	0.02405	0.00539	0.00539
27	0.35493	-	0.05109	-
28			-0.00622	-
29			-0.00699	-

Wie In Tabelle 4-3 zu sehen, stimmen die Werte, die über die direkte Differenz zweier Rechnungen bestimmt wurden, und die Werte, die mit der „Pert“-Option in MCNP berechnet wurden, gut überein. Einige Werte konnten mit der störungstheoretischen Methode nicht berechnet werden. Dazu zählen jeweils die Fälle 27, in denen alle Nuklidkonzentrationen auf einmal geändert wurden. Diese Änderung stellt keine kleine Störung des Systems dar, womit die Voraussetzung für die Anwendung der Methode nicht gegeben ist. Auch die Fälle 28 und 29, in denen der gesamte Brennstoff des zentrale Brennstabs ersetzt wurde, sowie Fall 16 in Teil 1, in dem die Konzentration des U-235

stark geändert wurde, sind nicht für eine störungstheoretische Methode geeignet. Die vollständige MCNP-Lösung für die Phasen 1 und 2 liegt als Anhang B5 vor und wurde dem Benchmark-Team übergeben.

Für die Modellierung von Steuerstabkreuzen bei SWR-Brennelementbündeln im KENOREST-System wurde ein Modul entwickelt, das eine vom Benutzer zu erstellende Beschreibung einer Steuerstabkreuzgeometrie automatisiert in den KENOREST-Rechenablauf integriert. Die Geometriebeschreibung erfolgt dabei in KENO-Syntax und die zugehörigen Materialdefinitionen können in bekannter Weise im KENOREST-Eingabefile erfolgen. Die Erweiterung umfasst sowohl einfache zweidimensionale Rechnungen als auch allgemeine dreidimensionale Rechnungen mit teileingefahrenem Steuerstabkreuz. Die bereits verfügbaren Methoden zur Verzweigungsrechnung innerhalb von KENOREST ermöglichen weiterhin auch die Berücksichtigung von Änderungen der Steuerstabkreuzposition während des Abbrands.

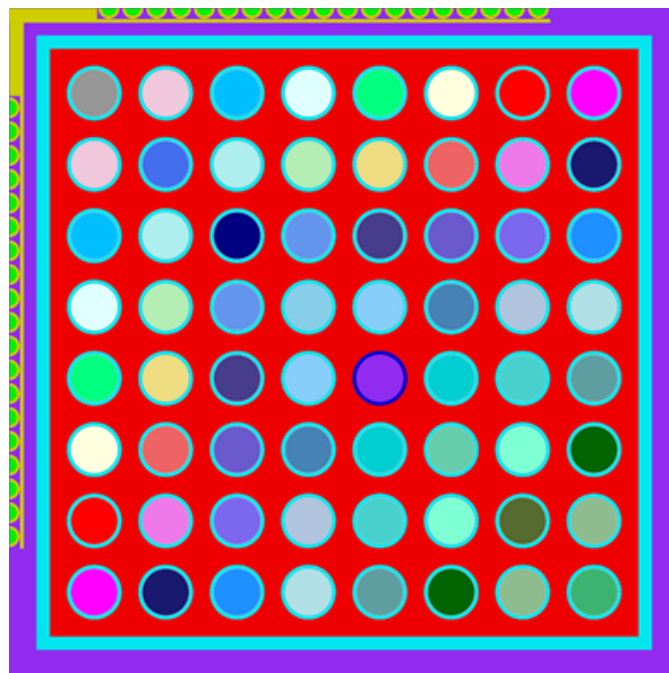


Abbildung 4-2 Brennelementgeometrie für KENOREST – TRITON Vergleichsrechnung

Anhand einer zweidimensionalen Abbrandrechnung für ein generisches SWR-Brennelement mit eingefahrenem Steuerstabkreuz wurde eine Vergleichsrechnung mit dem Abbrandprogramm TRITON aus dem SCALE-Paket durchgeführt. Dabei wurde eine gute Übereinstimmung der Ergebnisse erzielt. Vorhandene kleine Unterschiede im resultierenden Nuklidinventar konnten auf unterschiedliche numerische Ansätze bei der

Abbrandrechnung zurückgeführt werden (Predictor-Corrector-Ansatz bei TRITON). Die Brennelementgeometrie einschließlich des Steuerstabs ist in Abbildung 4-2 dargestellt. Abbildung 4-3 zeigt den Vergleich der mit KENOREST und TRITON ermittelten Inventare für einige ausgewählte Nuklide. Hierbei handelt es sich um Rechnungen bis 30 GWd/tHM Abbrand mit eingefahrenem Steuerstabkreuz. Die dargestellten Ergebnisse beziehen sich auf den Eckstab in der Ecke des Steuerstabkreuzes (in grau dargestellt). Aufgrund des in TRITON implementierten sogenannten „Predictor-Corrector“-Ansatzes, bei dem für einen Abbrandschritt jeweils die Flussverteilung nach der Hälfte des nächsten Abbrandschrittes verwendet wird, gibt es bei gleicher Abbrandschrittweite (3GWd/tHM) durchaus signifikante Unterschiede. Das liegt daran, dass aufgrund der für den Eckstab über die Zeit steigenden Leistung im TRITON in jedem Zeitschritt eine höhere Leistung für diesen Stab verwendet wird, was im Endergebnis zu einem höheren Abbrand führt. Wie in Abbildung 4-3 gezeigt, lässt sich dieser Effekt durch Verringerung der Schrittweite sowie eine Anpassung des Endabbrands im KENOREST weitestgehend reduzieren. Verbleibende Unterschiede sind größtenteils auf grundsätzliche Unterschiede zwischen KENOREST und TRITON zurückzuführen. Die Abweichungen bei  $^{239}\text{Pu}$  sind vermutlich zusätzlich auf gewisse verbleibende Unterschiede im Neutronspektrum zurückzuführen.

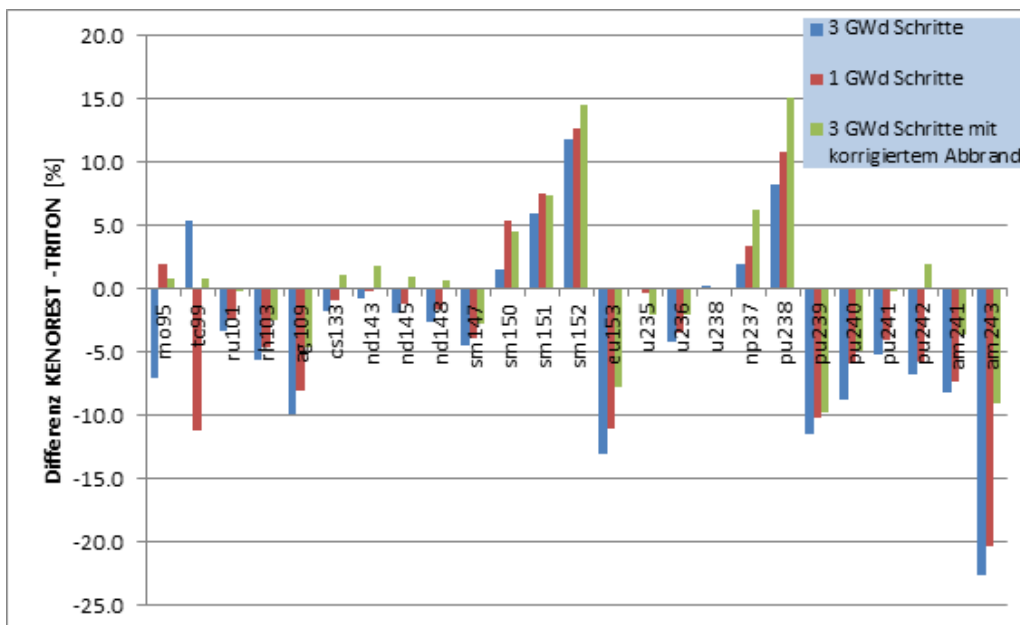


Abbildung 4-3 Differenz in den errechneten Nuklidinventaren der Eckstäbe zwischen KENOREST und TRITON für drei verschiedene KENOREST Rechnungen mit Abbrandschritten von 3 GWd/tHM, 1 GWd/tHM und 3 GWd/tHM mit an die TRITON-Rechnung angepasstem Abbrand.

Zur Visualisierung von dreidimensionalen Modellen, u.a. mit teileingefahrenen Steuerstäben, wurde das KORVIEW-System um KENO3D erweitert. Abbildung 4-4 zeigt den Ausschnitt eines Brennelements an der Steuerstab-Oberkante; der Brennelementkasten, der die Brennstäbe umschließt, ist zur besseren Sichtbarkeit der Anordnung nicht dargestellt. Zweidimensionale Schnitte durch die Brennelementgeometrie können nun direkt im KENO-Input angefordert werden.

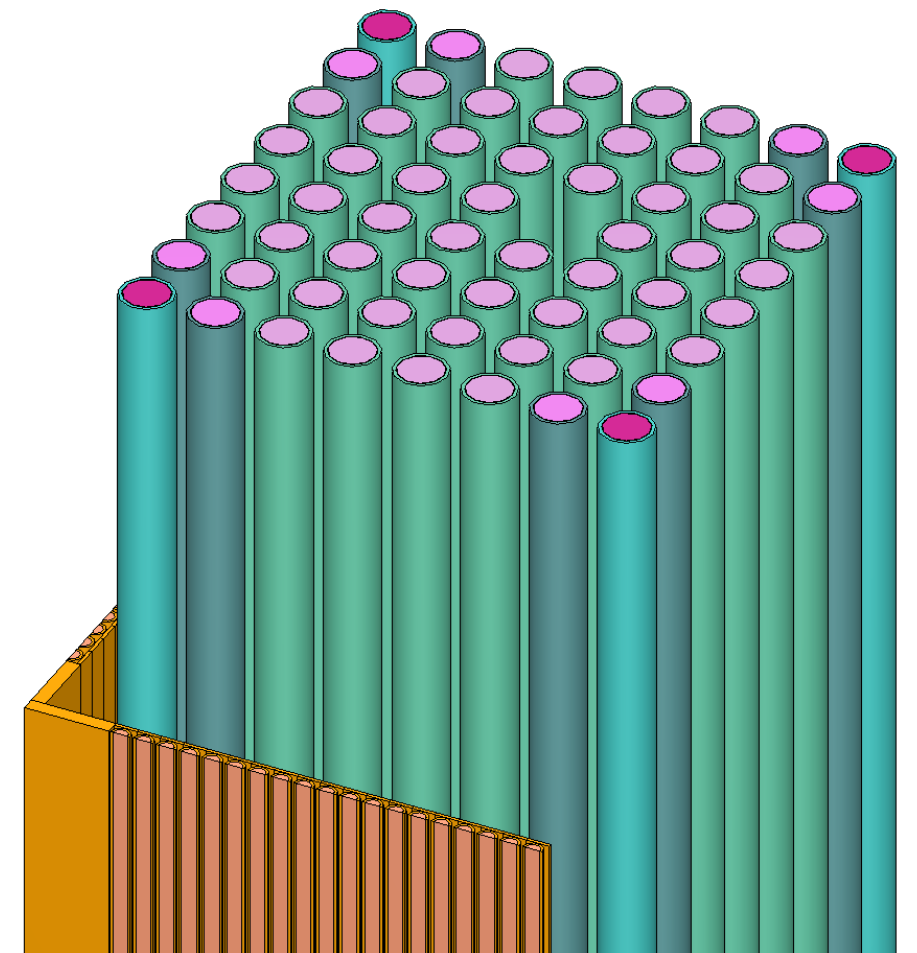


Abbildung 4-4 SWR-Brennelementgeometrie mit teileingefahrenem Steuerstab in dreidimensionaler Darstellung

Mit der Option zur Modellierung von SWR-Steuerstabkreuzen wurde zur weiteren Validierung eine Teilaufgabe eines Rechenbenchmarks der OECD/NEA „Working Party on the Physics of Plutonium Fuels and Innovative Fuel Cycles“ aus dem Jahr 2003 nachgerechnet, bei dem die GRS schon mit der damals verfügbaren KENOREST-Version und zusätzlich mit MCNP für frische Brennelementzustände teilgenommen hatte /OECD 03/. Diese Teilaufgabe besteht in der Berechnung von Stableistungsverteilun-

gen für frische SWR-Brennelemente bei eingefahrenem Steuerstab und verschiedenen Dampfblasengehalten. Tabelle 4-4 zeigt die mit KENOREST berechneten Multiplikationsfaktoren  $k_{\text{eff}}$  und Peakingfaktoren im Vergleich mit den Mittelwerten der abgegebenen Lösungen. Die Lösung mit KENOREST zeigt dabei gute Übereinstimmung mit den Ergebnissen der Benchmarkteilnehmer, d.h. die Ergebnisse liegen im Wesentlichen im Rahmen der Streubreite der Benchmarkergebnisse.

Tabelle 4-4 Ergebnisse der Rechnungen mit eingefahrenem Steuerstabkreuz.

Betriebszustand	Mittelwert Teilnehmer		KENOREST		Relative Differenz	
	$k_{\text{inf}}$	Peaking factor	$k_{\text{inf}}$	Peaking factor	$k_{\text{inf}}$	Peaking factor
hot 0% void	0.9884	1.5893	1.0015	1.5822	0.0132	-0.0044
hot 40% void	0.9461	1.5948	0.9551	1.5814	0.0095	-0.0084
hot 80% void	0.9049	1.5928	0.9054	1.5720	0.0006	-0.0130
hot 100% void	0.8954	1.6330	0.8848	1.5720	-0.0118	-0.0373
cold 0% void	1.0191	1.6983	1.0334	1.7115	0.0141	0.0078

## 5 AP3: Methoden zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse

Die Weiterentwicklung der Analysemethoden mit ständiger Verbesserung der Modellierung in der Neutronenfluss- und Nuklidinventarberechnung und die Verwendung aktualisierter Kerndatenbibliotheken erfordert eine systematische Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse als integriertem Bestandteil der Berechnungskette. Neben Unsicherheiten in den Betriebsparametern, deren Einfluss in RS1169 untersucht wurde, gilt dies auch für Unsicherheiten in den nuklearen Daten und in den Rechenmethoden. Zur Beschreibung der Unsicherheiten in den nuklearen Daten sind für die verschiedenen Basisevaluierungen JEFF, ENDF und JENDL zusammen mit den Erwartungswerten (d. h. den Wirkungsquerschnitten selbst) auch die Varianzen und deren Korrelationen in den sog. Kovarianzmatrizen verfügbar. Bisher wurden diese hauptsächlich zur Bestimmung des Einflusses auf den Multiplikationsfaktor bei der Kritikalitätssicherheit verwendet. Dabei kommen meist Rechenprogramme zum Einsatz, die auf der Propagation der Unsicherheiten durch die Berechnungskette mittels Störungstheorie erster Ordnung beruhen, wie der Code TSUNAMI aus dem SCALE-Programmsystem /SCA 06, BRO 04, SCA 06/ oder vergleichbare Entwicklungen wie SUS3D /KOD 01/. Es ist jedoch notwendig, den Einfluss der Unsicherheiten auf alle Ergebnisgrößen, etwa die Nuklidichten bestrahlter Brennelemente, zu bestimmen, die sich dem genannten störungstheoretischen Zugang erster Ordnung entziehen.

Moderne nukleare Datenbibliotheken (JEFF-3.1.1, ENDF/B-VII, JENDL-4.0) enthalten zunehmend Unsicherheitsinformationen (Kovarianzdaten) für die Neutronen-Wirkungsquerschnitte, jedoch bei weitem noch nicht vollständig. Zusätzlich bestehen häufig Inkonsistenzen zwischen den Processing-Tools und den neuesten Kovarianzdaten. Damit ist es zur Verwendung mit XSUSA gegenwärtig vorzuziehen, die in die Multigruppen-Darstellung prozessierten Kovarianzdaten aus dem SCALE-6-System zu verwenden. Für Zerfallsdaten und Spaltausbeuten sind in SCALE keine Unsicherheitsdaten vorhanden. Es ist in einem Anschlussvorhaben vorgesehen, Unsicherheitsanalysen mit entsprechenden Daten aus dem European Activation File EAF oder dem ENDF/B-VII-Basisdatenfile zu implementieren.

Das im Rahmen des BMWi-Projekts RS1183 entwickelte Programmsystem XSUSA ("Cross Section Uncertainty and Sensitivity Analysis") wurde dahingehend erweitert, dass der Einfluss der Unsicherheiten nuklearer Daten, die als sog. Kovarianzmatrizen verfügbar sind, auf die Ergebnisse von Abbrandrechnungen (z.B. Multiplikationsfakto-



ren, Nuklidinventare) in Abhängigkeit vom Abbrand bestimmt werden kann. Diese Fähigkeit wurde innerhalb der Abbrandsequenz TRITON aus dem Programmpaket SCALE-6 implementiert.

XSUSA ist eine Sampling-basierte Methode, d.h. das betrachtete Anwendungsprogramm wird mit Eingangsparametern, die anhand der entsprechenden Kovarianzdaten variiert werden, sehr oft (ca. 100 bis 1000 mal) ausgeführt, und die interessierenden Ausgabegrößen werden statistisch analysiert. Da bei Abbrandrechnungen, in denen zur Flussberechnung das Neutronentransportprogramm ohnehin mehrmals ausgeführt werden muss, die benötigte gesamte Rechenzeit sehr hoch werden kann, ist es vorteilhaft, wenn die Rechenzeit für die Einzelberechnungen reduziert werden kann. Dazu kann die auf ENDF/B-VII basierende 238-Gruppen-Bibliothek mit Hilfe eines repräsentativen LWR-Spektrums auf 44 Energiegruppen vorkondensiert werden, die mit der Gruppenstruktur der Kovarianzmatrizen übereinstimmen. Dies ist zulässig, da sich die Ergebnisse der Berechnungen mit den beiden Datenbibliotheken nur unwesentlich unterscheiden.

Dies wird in Tabelle 5-1 verdeutlicht, in der die Ergebnisse für den Multiplikationsfaktor und die Nuklidinventare von Abbrandrechnungen für ein DWR-Uran-Brennelement mit 4%  $^{235}\text{U}$ -Anreicherung verglichen werden. Die Ergebnisse weisen nur äußerst geringe Unterschiede auf, mit relativen Abweichungen von weniger als 3%. Die Abbrandrechnungen wurden mit dem zweidimensionalen deterministischen Transportcode NEWT zur Berechnung des Neutronenflusses durchgeführt.

Schließlich wurden mit XSUSA/NEWT Unsicherheiten in den resultierenden Multiplikationsfaktoren und Nuklidinventaren für eine im Rahmen der AAA-Anwendergruppe ("Abbrand, Aktivierung, Abschirmung") spezifizierte Abbrandberechnung durchgeführt und mit Ergebnissen unterschiedlicher, international eingesetzter Abbrandcodes verglichen. Dabei zeigt sich, dass die Abweichungen in den verschiedenen Abbrandcodes für viele relevante Nuklide vergleichbar mit den Unsicherheiten aus den nuklearen Daten sind. Dies wird aus den Abbildungen 5-1 und 5-2 ersichtlich, in denen die berechneten Multiplikationsfaktoren und  $^{239}\text{Pu}$ -Nukliddichten mit ihren Unsicherheitsbändern dargestellt sind und mit Ergebnissen anderer Abbrandprogramme verglichen werden. Die Ergebnisse wurden auf der Jahrestagung Kerntechnik 2011 vorgestellt /GAL 11/. Ein erweitertes Benchmark mit einem DWR-Brennelement mit Uran/Gadolinium-Stäben ist im Rahmen des Nachfolgevorhabens vorgesehen.

Tabelle 5-1 Multiplikationsfaktoren und Nuklidinventare in  $10^{22}$  Atome pro  $\text{cm}^3$  bei einem Abbrand von 40 GWd/tHM (links) und von 80 GWd/tHM (rechts)

	238 Grp.	44 Grp.	Diff.	238 Grp.	44 Grp.	Diff.
k-eff	0.95341	0.95543	0.21%	0.77629	0.77759	0.17%
u238	1.49E-02	1.49E-02	0.07%	1.43E-02	1.43E-02	0.00%
u235	1.61E-04	1.60E-04	-0.56%	2.21E-05	2.16E-05	-2.08%
pu239	9.18E-05	9.19E-05	0.11%	8.87E-05	8.88E-05	0.09%
u236	8.18E-05	8.21E-05	0.44%	8.76E-05	8.80E-05	0.45%
cs137	4.08E-05	4.08E-05	0.00%	7.83E-05	7.83E-05	-0.01%
cs133	3.82E-05	3.82E-05	-0.03%	6.16E-05	6.15E-05	-0.16%
tc99	3.68E-05	3.68E-05	0.11%	6.18E-05	6.19E-05	0.16%
ru101	3.54E-05	3.53E-05	-0.17%	6.77E-05	6.74E-05	-0.41%
pu240	3.94E-05	3.94E-05	0.20%	5.63E-05	5.62E-05	-0.18%
mo95	3.29E-05	3.29E-05	0.03%	5.97E-05	5.97E-05	-0.05%
nd143	2.51E-05	2.51E-05	-0.04%	2.92E-05	2.91E-05	-0.31%
nd145	2.11E-05	2.11E-05	0.00%	3.32E-05	3.32E-05	-0.03%
rh103	1.89E-05	1.89E-05	0.27%	2.83E-05	2.84E-05	0.50%
pu241	2.33E-05	2.32E-05	-0.73%	3.13E-05	3.12E-05	-0.29%
sm150	8.84E-06	8.85E-06	0.14%	1.68E-05	1.68E-05	0.24%
np237	8.16E-06	8.17E-06	0.15%	1.50E-05	1.51E-05	0.27%
u234	3.70E-06	3.70E-06	-0.05%	1.82E-06	1.82E-06	-0.33%
pu242	9.01E-06	8.89E-06	-1.39%	3.12E-05	3.11E-05	-0.51%
cs134	4.49E-06	4.51E-06	0.40%	1.26E-05	1.27E-05	0.63%
sm152	3.04E-06	3.00E-06	-1.35%	4.45E-06	4.38E-06	-1.66%
eu153	3.44E-06	3.46E-06	0.49%	6.48E-06	6.48E-06	-0.03%
ag109	3.04E-06	3.04E-06	-0.07%	7.39E-06	7.45E-06	0.69%
gd156	2.20E-06	2.20E-06	0.05%	1.23E-05	1.23E-05	0.24%
pu238	2.80E-06	2.79E-06	-0.39%	1.04E-05	1.04E-05	-0.58%
sm147	2.26E-06	2.26E-06	-0.13%	3.50E-06	3.48E-06	-0.63%
am243	1.96E-06	1.92E-06	-1.74%	1.10E-05	1.09E-05	-0.64%
gd158	5.08E-07	5.10E-07	0.30%	2.59E-06	2.62E-06	1.12%
sm151	3.27E-07	3.23E-07	-1.23%	4.09E-07	4.04E-07	-1.15%
am241	7.10E-07	7.02E-07	-1.08%	1.05E-06	1.04E-06	-0.57%
eu155	2.35E-07	2.34E-07	-0.30%	5.16E-07	5.13E-07	-0.56%
cm244	6.26E-07	6.07E-07	-2.91%	8.75E-06	8.57E-06	-2.01%
sm149	6.23E-08	6.19E-08	-0.67%	5.22E-08	5.18E-08	-0.59%
cm242	2.32E-07	2.30E-07	-1.21%	6.05E-07	6.03E-07	-0.40%
gd154	5.83E-08	5.93E-08	1.72%	2.70E-07	2.74E-07	1.63%
xe135	5.60E-09	5.55E-09	-0.95%	4.36E-09	4.31E-09	-1.06%
am242m	1.47E-08	1.45E-08	-1.56%	2.15E-08	2.13E-08	-1.02%
gd157	2.83E-09	2.80E-09	-0.92%	7.36E-09	7.32E-09	-0.52%
gd155	1.75E-09	1.72E-09	-1.77%	3.67E-09	3.62E-09	-1.42%
cm243	5.20E-09	5.18E-09	-0.25%	2.47E-08	2.48E-08	0.53%
gd152	7.59E-10	7.51E-10	-1.08%	9.12E-10	9.03E-10	-0.97%

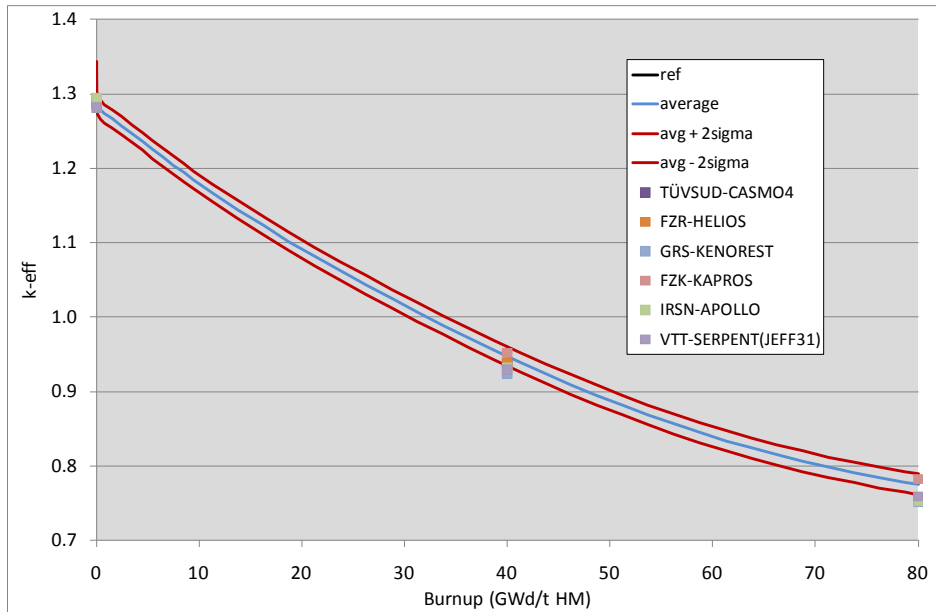


Abbildung 5-1 Multiplikationsfaktor als Funktion des Abbrands aus XSUSA/TRITON-Berechnungen mit variierten Nuklearen Daten; Referenzkurve (schwarz) und  $2\sigma$ -Band (rot) um den Mittelwert aus 300 Rechenläufen (blau), zusammen mit Ergebnissen aus unterschiedlichen Programmen und nuklearen Daten.

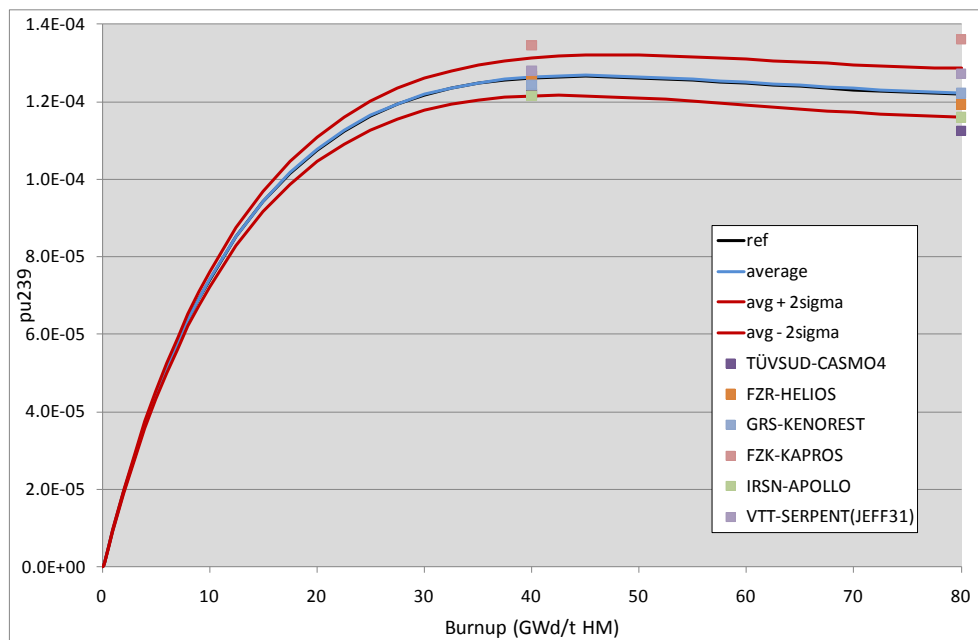


Abbildung 5-2  $^{239}\text{Pu}$ -Nuklidichte ( $10^{22}$  Atome/cm<sup>3</sup>) als Funktion des Abbrands aus XSUSA/TRITON-Berechnungen mit variierten Nuklearen Daten; Referenzkurve (schwarz) und  $2\sigma$ -Band (rot) um den Mittelwert aus 300 Rechenläufen (blau), zusammen mit Ergebnissen aus unterschiedlichen Programmen und nuklearen Daten.

Im Rahmen der Teilnahme an dem Rechenbenchmark Phase II der OECD/NEA-Arbeitsgruppe UACSA („Uncertainty Analysis for Criticality Safety Assessment“) wur-

den zur weiteren Validierung Berechnungen zur Ermittlung der Unsicherheiten für ein Brennelement in einem Lager /NEU 09/ mit XSUSA/NEWT, sowie zum Vergleich mit dem Unsicherheitsanalysecode TSUNAMI aus dem SCALE-6-Programmsystem, zusammen mit ORNL durchgeführt und als Benchmark-Beitrag eingereicht sowie auf einem Arbeitstreffen der UACSA-Arbeitsgruppe der OECD/NEA und bei der internationalen Kritikalitätskonferenz ICNC 2011 /GAL 11a/ vorgestellt. Die Ergebnisse in der Unsicherheit im Multiplikationsfaktor und den Hauptbeiträgen zu dieser Unsicherheit aus unterschiedlichen Reaktionen weisen sehr gute Übereinstimmung mit den entsprechenden TSUNAMI-Ergebnissen auf. Die detaillierten Ergebnisse sind im Benchmark-Beitrag in Anhang B2 dargestellt. Andere Ergebnisse bzgl. der Unsicherheiten in den nuklearen Daten lagen bis zum Ende der Vorhabenslaufzeit noch nicht vor.

Die Analyse-Sequenz T-NEWT aus dem SCALE-Programmpaket wurde an das Programm SUnCISTT (Sensitivities and Uncertainties in Criticality Source Term Tool) angekoppelt. Dies ist eine abstrakt programmierte Schnittstelle zwischen dem GRS-Code für Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen SUSA /HOF 93/ und Codes, die in Kritikalitätssicherheitsanalysen zum Einsatz kommen. Die bisher vorhandene Möglichkeit, Unsicherheitsanalysen mit der CSAS5-Sequenz des SCALE-Paketes durchzuführen, wurde nun um die Möglichkeit ergänzt, den deterministischen, zweidimensionalen Transportcode NEWT zur Berechnung des Neutronenmultiplikationsfaktors einzusetzen. Angewandt wurde diese Methodik im Rahmen des oben beschriebenen Benchmarks der UACSA-Arbeitsgruppe. In diesem Teil des Benchmarks soll der Einfluss von Fertigungstoleranzen auf den Multiplikationsfaktor überprüft werden. Dafür wurde zunächst das NEWT-Modell mit den Nominalwerten erstellt. Darauf folgend wurde ein Modell erstellt, in dem die Werte der mit Unsicherheiten behafteten Parameter im Rahmen der vorgegebenen Definitionsbereiche der Parameter /NEU 09/ unter konservativ abdeckenden Annahmen gewählt wurden. Ausgehend von der Eingabedatei des Nominalfalles wurde eine Template-Datei für SUnCISTT erstellt, in der die zu variierenden Größen durch Platzhalter ersetzt wurden. Zusätzlich wurde ein Python-Modul entwickelt, in dem die zusätzlichen Parameter berechnet werden können, die zur Erstellung eines vollständigen und gültigen Modells notwendig sind.

Anschließend wurden mit SUnCISTT 500 Eingabedateien für T-NEWT erstellt. Die Resultate wurden mit Hilfe der neu entwickelten Auswerte-Routinen aus den Ausgabedateien extrahiert. Diese Ergebnisse wurden daraufhin wieder an SUSA übergeben, um darin die statistische Auswertung durchzuführen. Die für die Teilnahme am Benchmark

relevanten Größen der Unsicherheitsanalyse waren der Mittelwert der resultierenden  $k_{eff}$ -Werte, die Standardabweichung des Mittelwertes sowie die obere, einseitige 95%/95%-Toleranzgrenze. Diese Größen wurden als GRS-Lösung (siehe Anhang B3) an die UACSA-Arbeitsgruppe übergeben. Details zu den Untersuchungen sind in einer Technischen Notiz (Anhang A1) beschrieben. Die abschließende Auswertung des Benchmarks ist bisher nicht erfolgt; die eigenen Ergebnisse zeigen gute Übereinstimmung mit den Ergebnissen eines anderen Beitrags /LEE 12/.

Das GRAMATFIX-System wurde dahingehend erweitert, dass die Propagation der Unsicherheiten in den nuklearen Daten durch die Abbrandrechnung automatisiert durchgeführt und ausgewertet werden kann. Es ist modular strukturiert und besteht aus den drei Modulen (1) GRAMATREF zur Durchführung der Referenzberechnungen mit den Nominalwerten der nuklearen Daten, (2) GRAMATSAM zur Durchführung der Nuklidinventar-Berechnungen mit ORIGEN mit variierten nuklearen Daten, deren Ergebnisse in der binären Datenbank FT71 abgespeichert werden, und (3) GRAMATVAL zur statistischen Auswertung der Ergebnisse anhand der zuvor abgespeicherten Daten. Die GRAMATFIX-Erweiterung ist derart flexibel aufgebaut, dass zusätzlich zu den Unsicherheiten in den nuklearen Daten auch Unsicherheiten in technologischen Parametern, die etwa durch Fertigungstoleranzen bedingt sind, berücksichtigt werden können. Dies wurde bereits implementiert und angewendet; die Berücksichtigung von Unsicherheiten in den abbrandrelevanten Spaltausbeuten und Zerfallsdaten ist vorgesehen.

Das XSUSA/GRAMATFIX-System wurde zur Teilnahme an einem internationalen Benchmark zur Ermittlung der Unsicherheiten in Abbrandberechnungen im Rahmen der UAM-Arbeitsgruppe ("PWR Burnup Pin-Cell Benchmark") verwendet. Die Ergebnisse wurden beim UAM-6-Workshop, Karlsruhe, 9. - 11. Mai 2012 vorgestellt und dem Benchmark-Team übergeben; sie werden dann in die UAM-Zusammenstellung der OECD/NEA Datenbank /NEA 06/ aufgenommen. Die betrachtete Anordnung ist eine Stabzelle mit einer für DWR-Brennelemente repräsentativen Geometrie; der Brennstoff ist  $UO_2$  mit 4.85% Anreicherung. Der vollständige Beitrag zum Benchmark liegt als Anhang B6 vor.

Abbildung 5-3 zeigt die ermittelten Unsicherheiten in den Nukliddichten der Aktinide. Die „Knicke“ in den Kurven sind durch den Übergang von der Leistungserzeugung zur Abklingphase bedingt. Abbildung 5-4 zeigt die entsprechenden Unsicherheiten in den Multiplikationsfaktoren, die infolge der Entwicklung des Brennstabs von einem rei-

nen Uran-System hin zu einem gemischten Uran-/Plutoniumsystem im Laufe des Abbrands zunehmen.

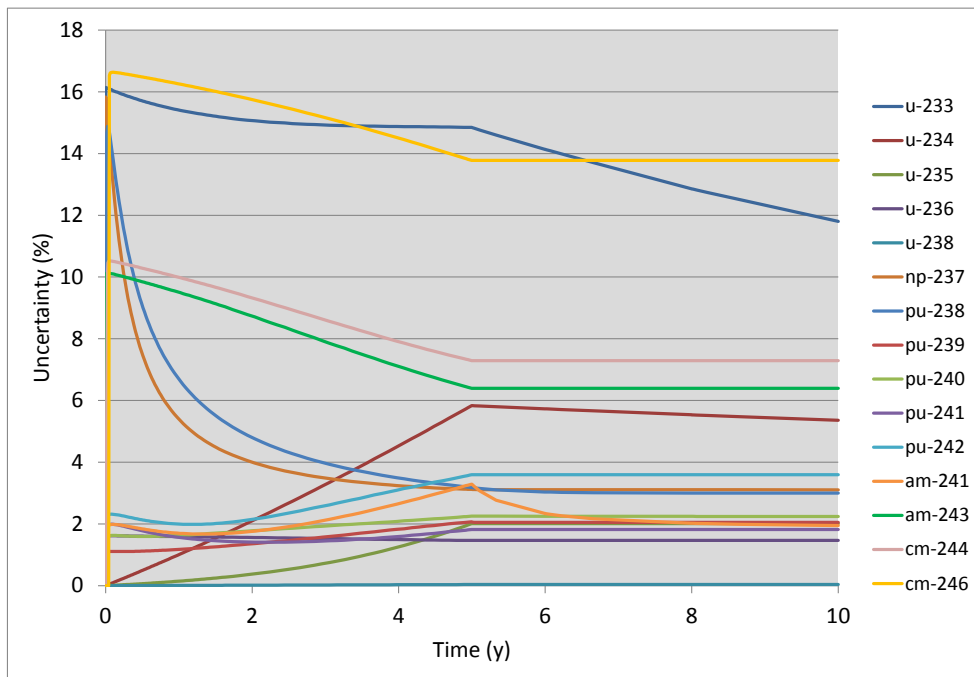


Abbildung 5-3 Unsicherheiten in den Aktiniden-Inventaren, resultierend aus Unsicherheiten in den nuklearen Daten, beim UAM-Abbrandbenchmark.

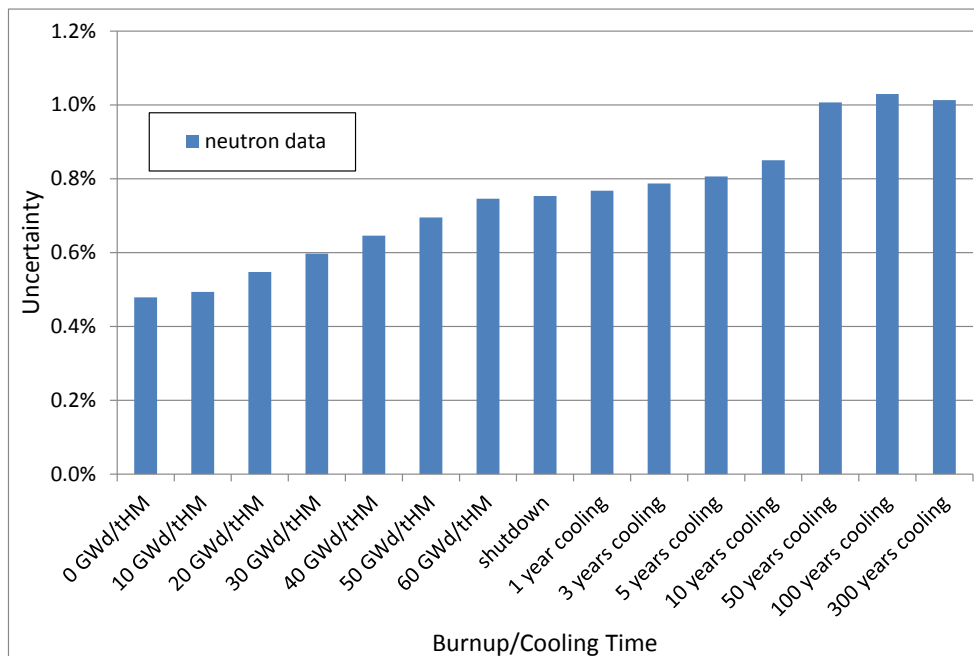


Abbildung 5-4 Unsicherheiten im Multiplikationsfaktor, resultierend aus Unsicherheiten in den nuklearen Daten, beim UAM-Abbrandbenchmark.

Als Maß für die Wichtigkeit der Unsicherheiten in einzelnen Reaktionen als Beiträge zur Ergebnisunsicherheit werden die sog. „quadierten multiplen Korrelationskoeffizienten“ herangezogen. Es zeigt sich, dass für den frischen Brennstoff der Hauptbeitrag zur Unsicherheit im Multiplikationsfaktor von der Unsicherheit im  $^{238}\text{U}$ -Einfangquerschnitt (92238-0102) geleistet wird, mit weiteren signifikanten Beiträgen von der mittleren Anzahl der je Spaltung erzeugten Neutronen in  $^{235}\text{U}$  (92235-0452) und vom  $^{235}\text{U}$ -Einfangquerschnitt (92235-0102); zum Ende der Bestrahlungszeit dominiert die Unsicherheit in der mittleren Anzahl der je Spaltung erzeugten Neutronen in  $^{239}\text{Pu}$  (94239-0452). Dies ist in Abb. 5-5 dargestellt.

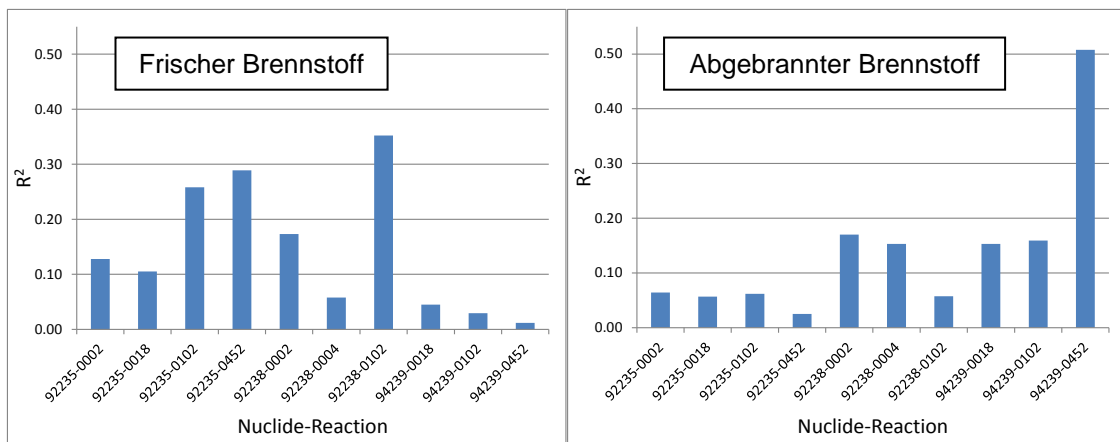


Abbildung 5-5 Quadrierte multiple Korrelationskoeffizienten  $R^2$ , für die Unsicherheit im Multiplikationsfaktor beim UAM-Abbrandbenchmark.

Wie bereits bemerkt können zusätzlich zu den Unsicherheiten in den nuklearen Daten auch Unsicherheiten in technologischen Parametern berücksichtigt werden. Auch wenn dies nicht Bestandteil des UAM-Abbrandbenchmarks ist, wurden entsprechende Unsicherheitsanalysen durchgeführt und beim UAM-6-Workshop vorgestellt.

Die entsprechenden Ergebnisse sind in Abb. 5-6 für den Multiplikationsfaktor und Abb. 5-7 für die Aktiniden-Inventare dargestellt. Es stellt sich heraus, dass für die untersuchte Anordnung der Hauptbetrag zur Ergebnisunsicherheit im Multiplikationsfaktor von den Unsicherheiten in den nuklearen Daten herrührt; bei den Nuklidinventaren gibt es einzelne Isotope ( $^{235}\text{U}$ ,  $^{239}\text{Pu}$ ,  $^{241}\text{Pu}$ , sowie einige Spaltprodukte, die hier nicht dargestellt sind), bei denen die Unsicherheiten in den nuklearen Daten und die Unsicherheiten in den technologischen Parametern vergleichbare Beiträge liefern, so dass deren Einflüsse unbedingt in der nuklearen Rechenkette zur Ermittlung der Aussagesicherheit berücksichtigt werden sollten.

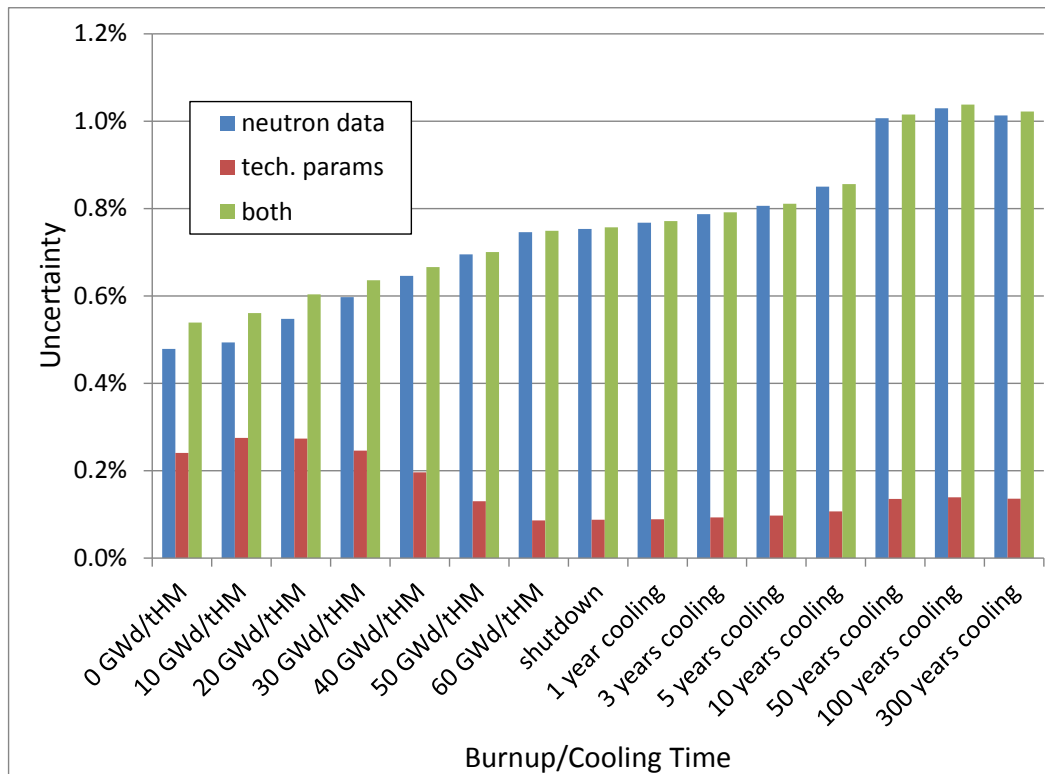


Abbildung 5-6 Unsicherheiten im Multiplikationsfaktor, resultierend aus Unsicherheiten in den nuklearen Daten und Unsicherheiten in technologischen Parametern, beim UAM-Abbrandbechmark.

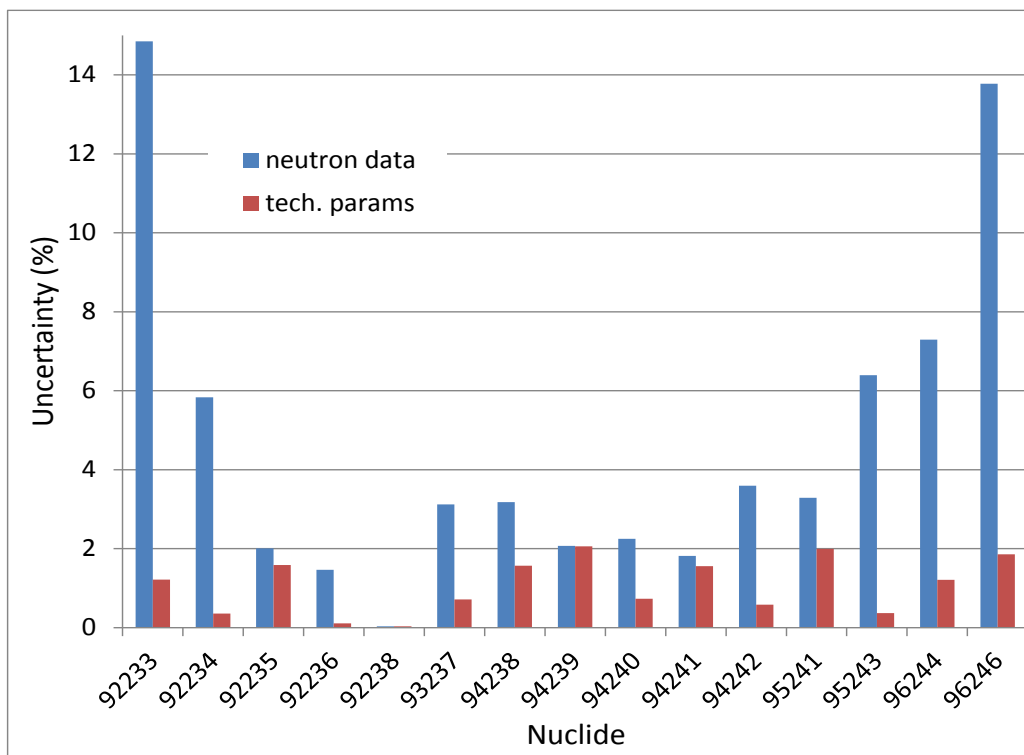


Abbildung 5-7 Unsicherheiten in den Aktiniden-Inventaren des abgebrannten Brennstoffs, resultierend aus Unsicherheiten in den nuklearen Daten und technologischen Parametern, beim UAM-Abbrandbechmark.



Bislang wurden Unsicherheitsanalysen mit nuklearen Daten für Ganzkernberechnungen mit zum Teil abgebrannten Brennelementen immer bei vorausberechneten Nuklidinventaren durchgeführt. Diese Berechnungen wurden jetzt dahingehend erweitert, dass bei der Ermittlung der Nuklidinventare bereits die Unsicherheiten berücksichtigt werden, d.h. die Unsicherheiten werden durch die vollständigen Berechnungskette Spektralrechnung - Brennelementabbrandrechnung - Kernsimulation fortgepflanzt.

Als Anwendung wurden derartige Unsicherheitsanalysen für eine Kernsimulation mit QUABOX/CUBBOX für einen modifizierten Minikern, bestehend aus 3x3 DWR-Brennelementen, aus der Phase I des UAM-Benchmarks /NEA 07/ unter Berücksichtigung des Einflusses der Unsicherheiten in den Abbrandberechnungen durchgeführt. Die ursprüngliche Benchmark-Anordnung besteht aus frischen Brennelementen, wobei im zentralen Brennelement die Steuerstäbe eingefahren sind. Für die gegenwärtigen Untersuchungen wurde das frische kontrollierte Brennelement durch ein abgebranntes unkontrolliertes Brennelement ersetzt, derart dass die Reaktivitäten der zentralen Brennelemente für die beiden Fälle näherungsweise übereinstimmen. Dies wird durch eine Abbrandzeit von ca. 1000 Tagen erreicht. Die Ergebnisse für die Multiplikationsfaktoren und deren Unsicherheiten sind in Tab. 5-2 dargestellt, die Ergebnisse für die Brennelement-Leistungen in Abb. 5-8. Dabei werden jeweils zwei Fälle betrachtet. Fall 1 bezieht sich auf Berechnungen mit vorausberechneten Nuklidinventaren, wobei die Unsicherheiten in den nuklearen Daten erst bei der Kernsimulation zur Anwendung kommen; bei Fall 2 wurden die Unsicherheiten in den nuklearen Daten bereits in der Abbrandrechnung für das zentrale Brennelement berücksichtigt. Für die Berechnungen wurde jedes Brennelement in 2x2 Maschen eingeteilt, was zu 6x6 Ergebnisgrößen führt. Es zeigt sich, dass die Unsicherheiten unter voller Berücksichtigung der Unsicherheiten der nuklearen Daten, also auch in der Abbrandrechnung (Fall 2), gegenüber dem Fall mit konstanten Nuklidinventaren (Fall 1) für die Leistungsverteilung nur leicht erhöht sind; für den Multiplikationsfaktor ergibt sich kein Unterschied.

Tabelle 5-2 Mittelwert und statistische Unsicherheit des Multiplikationsfaktors für einen 3x3-Minikern mit einem angebranntem zentralen Brennelement.

	$\langle k \rangle$	$\sigma(k)$
Fall 1	1.38990	0.00650
Fall 2	1.38968	0.00651

	Leistung						Std.-Abw.					
Fall 1	1.1022	1.0804	1.0570	1.0570	1.0804	1.1022	0.0025	0.0018	0.0010	0.0009	0.0018	0.0025
	1.0804	1.0380	0.9811	0.9811	1.0380	1.0804	0.0018	0.0004	0.0016	0.0016	0.0004	0.0018
	1.0571	0.9811	0.6227	0.6227	0.9811	1.0570	0.0009	0.0016	0.0052	0.0052	0.0016	0.0009
	1.0571	0.9811	0.6227	0.6227	0.9811	1.0570	0.0009	0.0015	0.0052	0.0052	0.0016	0.0009
	1.0804	1.0380	0.9811	0.9811	1.0380	1.0804	0.0018	0.0004	0.0016	0.0016	0.0004	0.0018
	1.1023	1.0804	1.0571	1.0570	1.0804	1.1022	0.0025	0.0018	0.0009	0.0009	0.0018	0.0025
Fall 2	1.1018	1.0800	1.0563	1.0563	1.0800	1.1018	0.0026	0.0018	0.0010	0.0010	0.0018	0.0026
	1.0800	1.0372	0.9803	0.9803	1.0372	1.0800	0.0018	0.0005	0.0016	0.0016	0.0005	0.0018
	1.0563	0.9804	0.6274	0.6274	0.9803	1.0563	0.0010	0.0016	0.0058	0.0058	0.0016	0.0010
	1.0563	0.9804	0.6274	0.6274	0.9803	1.0563	0.0010	0.0016	0.0058	0.0058	0.0016	0.0010
	1.0800	1.0373	0.9804	0.9803	1.0372	1.0800	0.0018	0.0005	0.0016	0.0016	0.0005	0.0018
	1.1019	1.0800	1.0563	1.0563	1.0800	1.1018	0.0026	0.0018	0.0010	0.0010	0.0018	0.0026

Abbildung 5-8 Mittelwert und statistische Unsicherheit der Brennelementleistungen für einen 3x3-Minikern mit einem angebrannten zentralen Brennelement.

## 6 AP4: Integration des deterministischen Neutronentransportcodes DORT in die Abbrandrechnung

Das Programmsystem KENOREST besteht aus der Kopplung des Monte-Carlo-Codes KENO-Va mit dem Abbrandcode OREST. Um aus der Monte-Carlo-Methode resultierende statistische Unsicherheiten zu vermeiden, kann es vorteilhaft sein, eine deterministische Transportmethode für die Neutronenflussberechnung einzusetzen. Im Vorgängerprojekt RS1169 wurde aus diesem Grund mit der Integration des deterministischen Codes DORT in das KENOREST-System begonnen. Mit dem erreichten Stand der Kopplung konnte DORT in jedem Abbrandzeitschritt die Nuklidinventare und Wirkungsquerschnitte aus OREST für die 2D-Transportrechnung übernehmen und die berechneten Neutronenflüsse und stabweisen Leistungsverteilungen in die Abbrandrechnung zurückführen. Die Funktionsfähigkeit eines solchen „DORTOREST“-Systems konnte bereits anhand der Nachrechnung eines  $\text{UO}_2$ -DWR-Brennelements demonstriert werden. Die Übereinstimmung mit KENOREST war dabei ausgezeichnet.

Der Input-Prozessor in DORTOREST wurde nun in seiner Funktion erweitert, um die Eingabe komplexer Geometrien (Überlagerung von Rechteckstrukturen z.B. für SWR-Wasserkästen, Multi-Ringstrukturen für die Behandlung von Gadoliniumstäben) möglichst anwenderfreundlich zu gestalten. Dabei wurde gleichzeitig auch der Datenaustausch mit dem KENOREST-System angepasst und optimiert. Die räumliche Auflösung von Ringstrukturen auf kartesischen Gittern führt allerdings zu sehr großen Rechenzeiten, die u. U. vergleichbar sind mit denen von KENO- (d.h. Monte-Carlo-) Rechnungen. Allerdings lassen sich Flüsse und Leistungsverteilungen deutlich besser auskonvergieren (bis zu  $10^{-6}$  im Fehlerresiduum). Die Konsistenz der SPH-Methode ("Superhomogenization") in DORTOREST (insbesondere Pinzell-Reaktionsratenerhaltung) wurde an verschiedenen Rechenbeispielen (ausgewählte Brennelementtypen, z. B. repräsentative MOX- und  $\text{UO}_2$ -Brennelemente) überprüft.

Im Rahmen des vorliegenden Projekts wurde nun das mittlerweile erfolgte Update des Programmsystems KENOREST von der Version 2006 auf die Version 2008 auf die entsprechenden Routinen der bereits vorhandenen teilweise gekoppelten Version des zu entwickelnden DORTOREST-Systems übertragen, so dass nun auch hier mit der aktuellsten Version gearbeitet werden kann. Dabei war zu verifizieren, dass die durch das Update erfolgten Änderungen kompatibel zu den zusätzlichen Routinen zur Ankopplung des Transportcodes DORT sind.

Schließlich wurde im Rahmen der vollständigen Automatisierung des gekoppelten Systems DORTOREST ein Input-Prozessor erstellt, der aus einer gegebenen KENOREST-Inputdatei alle für die Neutronenflussberechnung mit DORT notwendigen Parameter ausliest, diese auf Konsistenz prüft und dann in eine äquivalente DORT-Inputdatei schreibt. Zur Optimierung der Performance wird zusätzlich das eingelesene KENOREST-Modell auf mögliche Symmetrieeigenschaften hin untersucht; diese werden soweit wie möglich ausgenutzt. Aufgrund der Fähigkeit der GRS-Version von DORT auch halbe und viertel Brennstäbe bzw. Stabzellen korrekt zu simulieren, funktioniert diese Symmetrienausnutzung auch für Brennelemente mit ungeraden Anzahlen von Brennstäben pro Reihe. Dieser Input-Prozessor wurde in den DORTOREST-Programmablauf integriert, so dass nun keine zusätzliche manuelle Eingabe neben der Erstellung einer KENOREST-Inputdatei mehr nötig ist. Auf diese Art und Weise kann mit beliebigen existierenden KENOREST-Inputdateien ohne weitere Anpassungen ein DORTOREST Rechenlauf gestartet werden, solange diese sich auf 2D-Geometrien beschränken. Abbildung 6-1 zeigt je ein Brennelementmodell für einen Siedewasser- und einen Druckwasserreaktor, wie sie von DORTOREST verwendet werden. Das Modul zur graphischen Darstellung ist ebenfalls innerhalb des Projektes entwickelt worden. Weiterhin wurde durch Änderungen in der Ausgabe von DORT und in der Einleseprozedur von KENOREST die bisher noch fehlende Rückführung der Daten aus der Flussberechnung realisiert, und damit die Automatisierung des Programmablaufs abgeschlossen.

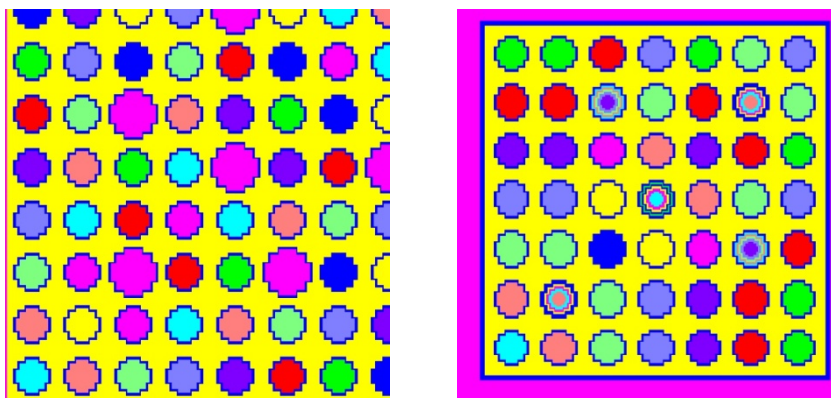


Abbildung 6-1 Graphische Darstellung eines DWR (links) und eines SWR (rechts) Brennelementmodells in DORTOREST mit dreistufiger Approximation der Brennstäbe

Unter Verwendung verschiedener vorhandener KENOREST-Inputdateien wurde die aktuelle Programmversion getestet. In Abbildung 6-2 sind Differenzen im Multiplikationsfaktor zwischen Flussberechnungen mit DORT und KENO während der Abbrand-

rechnung mit der derzeitigen Version von DORTOREST für verschiedene Brennelemente gezeigt. Man erhält eine sehr gute Übereinstimmung zwischen beiden Codes. Leicht größere Abweichungen während der ersten 10 GWd/tHM sind auf Gadoliniumabbrand zurückzuführen.

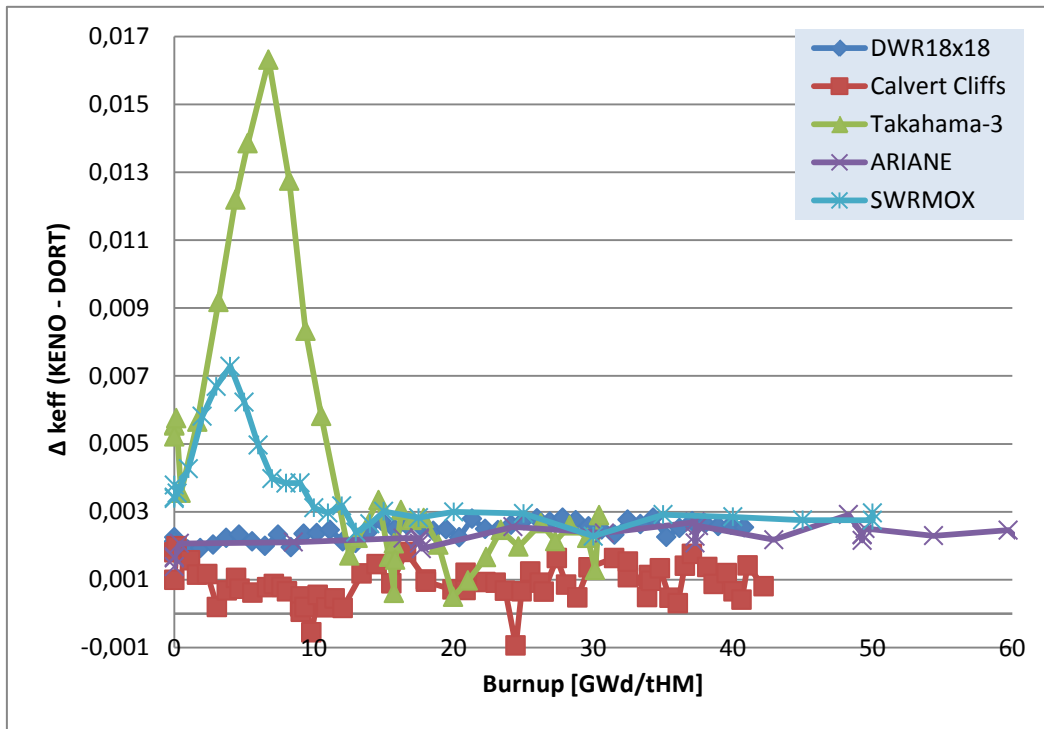


Abbildung 6-2 Unterschiede im Multiplikationsfaktor  $k_{eff}$  zwischen KENO und DORT für verschiedene Abbrandrechnungen mit KENOREST/DORTOREST

Als weiterer Test wurden außerdem die stabweisen Leistungsverteilungen vor und nach der Abbrandrechnung verglichen. Auch hier konnte eine gute Übereinstimmung zwischen DORTOREST und KENOREST gezeigt werden. Die Abbildungen 6-3 und 6-4 zeigen die relative Stableistungsverteilung eines 18x18 Druckwasserreaktorbrennelements für frischen Brennstoff beziehungsweise für 41 GWd/tHM Abbrand, wie sie mit DORTOREST berechnet wurden. In den Abbildungen 6-5 und 6-6 sind jeweils die relativen Differenzen in den Stableistungsverteilungen zur analogen Rechnung mit KENOREST dargestellt. Man erkennt, dass die Abweichungen mit zunehmendem Abbrand zwar steigen aber immer noch kleiner als 1% bleiben.

Zur Validierung wird auch das "Calculational Benchmark for the Analysis of Small-Sample Reactivity Experiments" der OECD/NEA-Arbeitsgruppe WPNCs/BUC herangezogen /LEC 10/ (siehe auch AP 2). Damit ist es möglich, die in DORTOREST verwendeten Methoden durch Vergleich mit MCNP-Referenzlösungen und voraussichtlich

mit Lösungen von anderen Rechenprogrammen zu überprüfen. Die vollständige DORTOREST-Lösung für die Phasen 1 und 2 liegt als Anhang B5 vor und wurde dem Benchmark-Team übergeben. Die Auswertung des Benchmarks ist bisher nicht erfolgt; die DORTOREST-Ergebnisse zeigen gute Übereinstimmung mit den eigenen MCNP-Ergebnissen. Die Tabelle 6-1 zeigt beispielhaft den Vergleich zwischen den DORTOREST- und den MCNP-Resultaten aus Phase 1 des Benchmarks für die Beimischung von Ru-101.

Tabelle 6-1 WPNCS-Benchmarkergebnisse für Ru-101 (Phase 1)

	DORTOREST	MCNP	Difference (absolute)	Difference (relative)
multiplication factor	1.38098	1.38850	7.52E-03	0.0054
Neutron flux	1.199e+01	1.211e+01	1.20E-01	0.0100
U-235 absorption rate	6.474e-01	6.500e-01	2.60E-03	0.0040
U-235 production rate	1.309e+00	1.315e+00	6.00E-03	0.0046
U-235 scattering rate	8.186e-02	8.250e-02	6.40E-04	0.0078
U-238 absorption rate	2.775e-01	2.744e-01	-3.10E-03	-0.0112
U-238 production rate	7.176e-02	7.373e-02	1.97E-03	0.0275
U-238 scattering rate	2.640e+00	2.639e+00	-1.00E-03	-0.0004
O-16 absorption rate	1.382e-03	1.426e-03	4.40E-05	0.0318
O-16 scattering rate	1.908e+00	1.916e+00	8.00E-03	0.0042
Ru-101 absorption rate	2.254e-03	2.250e-03	-4.00E-06	-0.0018
Ru-101 scattering rate	4.114e-03	4.136e-03	2.20E-05	0.0053
Total reactivity variation	-1.733e-03	-1.806e-03	-7.30E-05	0.0421
Total reactivity variation from perturbation theory	-	-1.718e-03	-	-
Reactivity variation due to capture	-	-1.707e-03	-	-
Reactivity variation due to scattering	-	-5.174e-06	-	-

Die abschließende Entwicklung und Verifizierung des DORTOREST-Systems und die Ergebnisse des Benchmarks wurden auf der Jahrestagung Kerntechnik 2012 vorgestellt /HAN 12/.

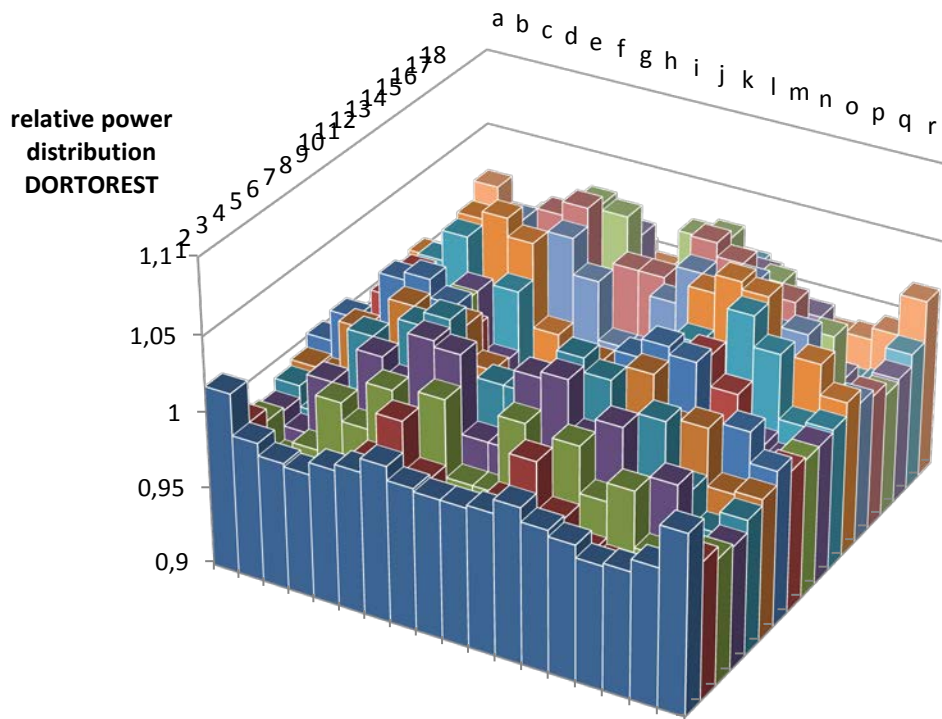


Abbildung 6-3 Stabweise relative Leistungsverteilung eines frischen 18x18 DWR-Brennelements berechnet mit DORTOREST

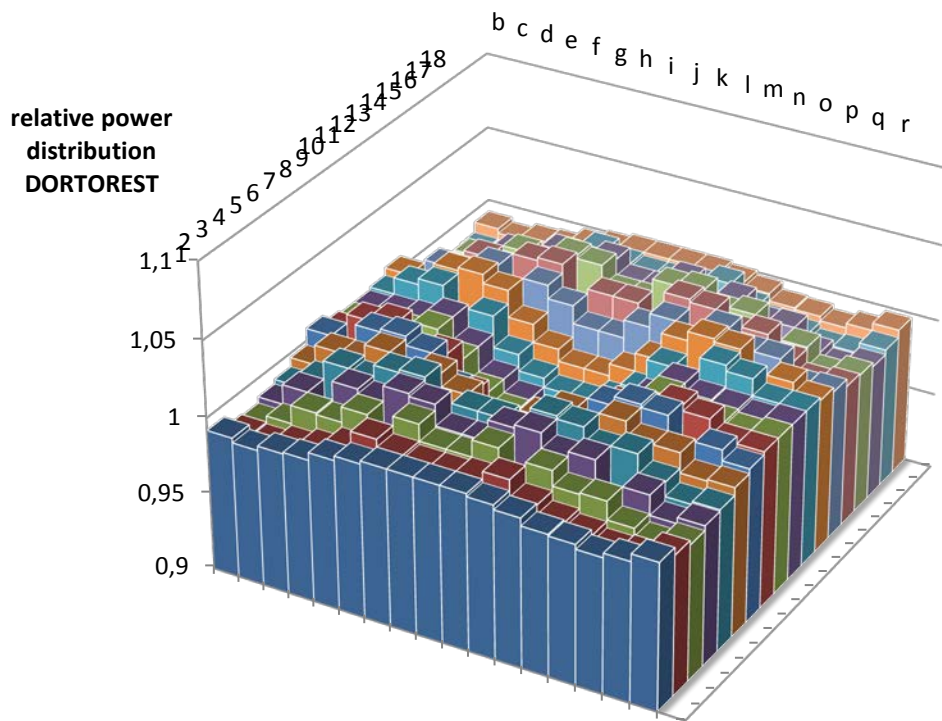


Abbildung 6-4 Stabweise relative Leistungsverteilung eines 18x18 DWR-Brennelements mit 41 GWd/tHM Abbrand berechnet mit DORTOREST

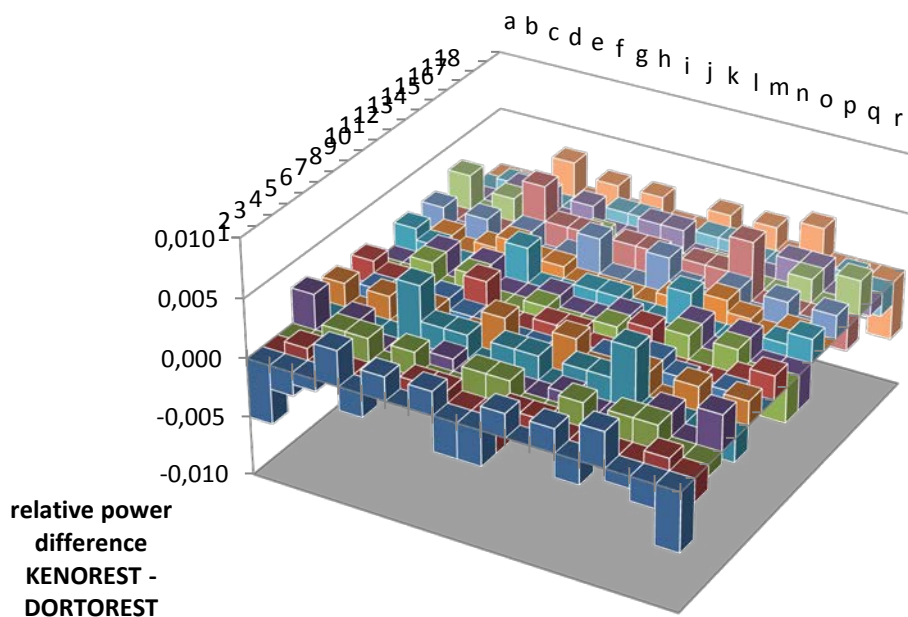


Abbildung 6-5 Relative Differenz in der Stableistungsverteilung zwischen KENOREST- und DORTOREST-Rechnung: frisches Brennelement

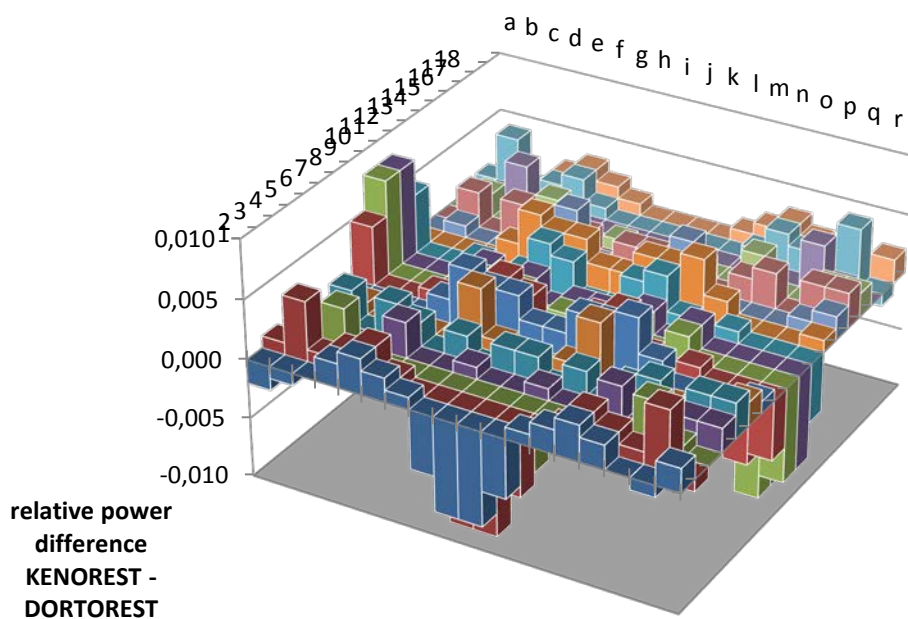


Abbildung 6-6 Relative Differenz in der Stableistungsverteilung zwischen KENOREST- und DORTOREST-Rechnung: abgebranntes Brennelement

Die in der GRS-Version von DORT implementierte Erweiterung zur Erzeugung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten mithilfe des SPH-Algorithmus ("Super-Homogenisation") wurde so in das DORTOREST-System integriert, dass jetzt optional



die Wirkungsquerschnitte nach jedem Abbrandschritt kondensiert werden können. Dabei steht der volle Funktionsumfang, wie er in DORT vorhanden ist, zur Verfügung:

- Bei der Mittelung über das gesamte Brennelement erhält man einen Wirkungsquerschnittssatz für das ganze Brennelement.
- Bei der reinen Kollabierung erhält man Weniggruppenquerschnitte für jede Materialzone unter Erhaltung der vollen Geometrie.
- Die zonenweise Kondensation ermöglicht es jeweils, über vom Benutzer festgelegte Zonen zu mitteln und die Kondensation durchzuführen.

Die notwendigen Daten werden so abgespeichert, dass auch im Nachhinein eine Kondensation möglich ist, ohne dass eine neue DORTOREST-Rechnung erforderlich wäre, falls zum Beispiel eine geänderte Gruppenstruktur gewünscht ist. Die Festlegung der notwendigen Parameter erfolgt über eine Template-Datei, die optional eingelesen werden kann.

Die Weniggruppen-Wirkungsquerschnittserzeugung wurde anhand repräsentativer Beispiele verifiziert. Damit steht DORTOREST jetzt grundsätzlich als alternativer Spektralcode zur Verfügung, d.h. man kann DORTOREST zur Berechnung von Weniggruppen-Querschnitten für Ganzkernrechnungen analog zu kommerziellen Latticecodes wie z.B. HELIOS verwenden.

## **7 AP5: Erweiterung der Neutronenfluss- und Aktivierungs- berechnungen für 3D-Geometrie**

Mit dem aktuell in der Version 2008 vorliegenden 2D-Reaktivitäts- und Transport-Codesystem DORTABLE /AAA 08/ können Berechnungen zur Neutronenfluss und Ortsdosisleistung sowie von Multiplikationsfaktoren für schnelle und thermische, kritische und unterkritische Systeme in zylindersymmetrischer oder kartesischer 2D-Geometrie durchgeführt werden. Die Übernahme der Nuklidinventare aus der Abbrandrechnung mit KENOREST zur Bestimmung des Quellterms erfolgt dabei voll integriert über das 1D-System OREST. Das 1D-System ANITABLE /AAA 08/, bestehend aus den Codes ACOND, NGSRC und ANISN zur Wirkungsquerschnitts- und Quellterm-Erstellung wird in DORTABLE als Inputprozessor für das 2D-System verwendet. Das Problem geeigneter Maschengenerierung wird bei komplizierten Geometrien in Analogie zu KENOREST iterativ gelöst. Es stehen derzeit fünf Bibliotheken für gekoppelte Neutronen-Gamma-Probleme von 13 bis 212 Energiegruppen zur Verfügung. Eine sechste, international anerkannte Bibliothek BUGLE-96 mit 47 Neutronen- und 20 Gammagruppen von RSICC steht GRS zur Verfügung und wird bereits zur Reaktorfluss- und Aktivierungsberechnung testweise eingesetzt.

Die am Ende des Vorhabens RS1169 begonnenen Weiterentwicklungen vom zweidimensionalen deterministischen System DORTABLE zum dreidimensionalen deterministischen TORTABLE-System wurden fortgeführt. Eine erste 3D-Testversion in  $r$ - $\phi$ - $z$ -Geometrie ist bereits aus dem vorangegangenen Vorhaben RS1169 verfügbar. Es wurden weitere Vergleichsrechnungen der beiden Systeme durchgeführt, um den Einfluss der zusätzlich hinzugekommenen Dimension in Bezug auf Rechenzeit und Rechenergebnisse (hier: Neutronenfluss) zu ermitteln. Zu den variierten Parametern gehörte hier auch die der Rechnung zu Grunde liegende Neutronenbibliothek. Die Rechnungen wurden mit sechs unterschiedlichen zur Verfügung stehenden gekoppelten Neutron-Gamma-Bibliotheken durchgeführt. Weiter wurden erste Neutronenfluss-Rechnungen durchgeführt, in denen die Unterteilung des Rechenmodells in der neu hinzugekommenen  $\phi$ -Richtung getestet wurde. Entwicklungsarbeiten an der TORTABLE-Codesequenz-Steuerung, die durch die Hinzunahme der zusätzlichen Raumdimension erweitert werden muss, wurden begonnen.

Ein Entwicklungsziel in der TORTABLE-Entwicklung war es, die bisherigen Eingabedateien von DORTABLE-Rechnungen weiterhin unverändert benutzen zu können. Um die Beibehaltung dieser Kompatibilität dauerhaft zu gewährleisten wurden die Eingab-

bedateien der durchgeführten Testrechnungen aus dem Bestand bisher vorhandener DORTABLE-Eingabedateien entnommen und um die notwendigen 3D-Parameter erweitert, sofern diese nicht standardmäßig programmintern gesetzt wurden.

Um auftretende Unterschiede in den Ergebnissen zwischen 2D- und 3D-Rechnungen besser beurteilen zu können, basieren die im Rahmen der Entwicklungsarbeiten durchgeführten Testrechnungen auf einem gut verstandenen DORTABLE-Modell. Dabei handelt es sich um das Modell eines Druckwasserreaktors, der mit 16x16-20 frischen  $\text{UO}_2$ -Brennelementen bestückt ist. Um Rechenzeit zu sparen handelt es sich hierbei um eine vereinfachte Version eines Modells, das mit höherer Detailgenauigkeit bereits in /PRE 07/ erfolgreich mit dem DORTABLE-System berechnet wurde. Die zu Beginn der Rechnung frischen, mit einer U-235-Anreicherung von 3,2% versehenen Brennelemente werden innerhalb von sechs Abbrandzeitschritten auf einen Gesamtabbrand von 60 GWd/tHM abgebrannt. Dies entspricht bei einer Zyklusdauer von 305 Tagen einer Leistung von 32.79 MW/tHM. Zwischen den einzelnen Abbrandsschritten liegt ein leistungsfreier Zeitraum von 60 Tagen. Die Abbrandrechnungen wurden mit dem Programmpaket OREST aus der KENOREST-Entwicklung durchgeführt. Das damit ermittelte Nuklidinventar wurde zusammen mit Strukturmaterialien, dem Zirkalloy der Hüllrohre sowie dem umgebenden Wasser für insgesamt 192 Brennelemente homogenisiert und zu einem zylindrischen Kern mit einer aktiven Höhe von 390 cm zusammengefasst. Oberhalb der aktiven Zone befinden sich 19,4 cm inaktives Brennelement, sowie ein Kopfstück von 21,0 cm Höhe. Unterhalb der aktiven Zone befindet sich ebenfalls ein inaktiver Teil des Brennelements. Dieser wurde mit 31,4 cm modelliert. Diesem folgt ein 18,3 cm langes Fußstück. Oberhalb und unterhalb von Kopf- und Fußstück befinden sich jeweils 30,0 cm Wasser. Insgesamt ergibt sich somit eine Unterteilung des Modells in sieben Axialzonen.

In radialer Richtung wurden neun Zonen definiert. Der homogenisierte Reaktorkern bildet die innerste Zone mit einer Ausdehnung von 179,6 cm. Ihm folgt die Kernumfassung (4,1 cm dick), eine Wasserschicht (16,0 cm dick), der Kernbehälter (12 cm dick), eine weitere Wasserschicht (24,15 cm dick), bevor dann der Reaktordruckbehälter mit einer Dicke von 22,4 cm modelliert wurde. Die 8,8 cm dicke Isolierung außerhalb des RDBs beginnt nach einer 91,5 cm dicken Luftschicht. Mit dem 65,0 cm dicken Bioschild ist die äußerste radiale Zone des Modells erreicht.

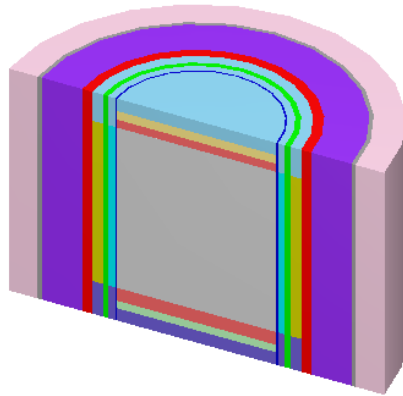


Abbildung 7-1 Grafische Darstellung des Reaktormodells, das in Testrechnungen zur TORTABLE-Entwicklung zum Einsatz kam.

Die bisher durchgeführten Rechnungen verfolgten das Ziel, den reibungslosen Ablauf der Rechenkette beim Übergang von 2D- zu 3D-Berechnungen mit den bereits erwähnten Variationen der Theta-Unterteilung bzw. der Neutronen-Wirkungsquerschnittsbibliotheken im Modus für Dosisleistungsberechnung sowie im Kritikalitätsmodus sicherzustellen. Auf Grund der durch den komplexen Rechenablauf hervorgerufenen langwierigen Einzelrechnungen wurde daher zu Gunsten eines schnellen Ergebnisses auf eine sehr genaue Konvergenz der Rechnungen verzichtet. Bei allen Rechnungen im Kritikalitätsmodus konnte eine gute Übereinstimmung der DORTABLE mit den vergleichbaren TORTABLE-Ergebnissen festgestellt werden. Die Unterschiede beliefen sich auf maximal 2% für deutlich unterkritische Systeme.

Darüber hinaus wurden die zur Kategorie "Reactor Shielding" gehörenden Einträge in der SINBAD-Datenbank /NEA 12a/ auf geeignete Anwendungsfälle zur Validierung für das TORTABLE-System überprüft. Zu Grunde liegende Kriterien waren zum einen eine möglichst zylinderförmige Anordnung. Mit einem dreidimensionalen Modell in  $r$ - $\phi$ - $z$ -Geometrie, wie es in TORTABLE zum Einsatz kommen wird, sind für eine zylinderförmige Anordnung am wenigsten Näherungen in der Modellierung erforderlich. Ein weiteres Kriterium war das Vorhandensein eines Eingabedatensatzes für einen weiteren diversitären Abschirmcode (z.B. MCNP), damit die später erzielten Resultate des TORTABLE-Systems nicht nur mit den in der SINBAD-Datenbank verfügbaren Resultaten verglichen werden können, sondern auch mit eigenen, unabhängigen Berechnungen.

Das Arbeitspaket 5 wurde nach den Ereignissen im japanischen Kernkraftwerk Fukushima zugunsten von für Analysen, die auf Wunsch des Auftraggebers mit

Fukushima in Zusammenhang stehen, umgewidmet. Nach dieser Entscheidung wurden keine weiteren Entwicklungen oder Rechnungen durchgeführt. Stattdessen wurde der zu diesem Zeitpunkt erzielte Entwicklungsstand eingefroren. Das bedeutet, dass alle Codes und Eingabedateien in einen lauffähigen Zustand versetzt und auf einen zentralen Server kopiert wurden. Darauf werden sie regelmäßig automatisiert gesichert.

## 8            **AP6: Behandlung der PCI-Problematik bei hochabgebrannten Brennstäben im SWR**

Die Untersuchung zum PCI-Verhalten von Brennstäben erfordert eine detaillierte Kenntnis des lokalen Zeitverlaufs der Leistungsdichte im Brennstab. Die PCI-Problematik wird vor allem vor dem Hintergrund des zunehmenden Einsatzes hochabgebrannter Brennelemente in deutschen Siedewasserreaktoren relevant, wo – bedingt durch die betrieblichen Steuerstab-Fahrprogramme – lokale rampenartige Leistungsexkursionen auftreten können, deren lokale Auswirkungen (z. B. durch *Pellet-Cladding-Interaction*, PCI) auf die Hüllrohrbelastung zu quantifizieren und angesichts jüngerer Vorkommnisse von PCI-Schäden in deutschen SWR zu bewerten sind. Dazu sind räumlich hoch auflösende Analysen sowohl zum transienten reaktorphysikalischen Verhalten als auch zum mechanischen Brennstabverhalten erforderlich. Ausgehend vom lokalen Leistungsdichte-Zeitverlauf können mit einem Brennstabcode die mechanischen Spannungen und deren Relaxationen ermittelt und bewertet werden. Dazu ist es nötig, mit Hilfe einer detaillierten, stabweisen Beschreibung der Brennelementgeometrie in der Nachbarschaft von Steuerstabkreuz-Kanten die geometrisch hochauflösenden zeitabhängigen Flüsse in den betroffenen Brennstäben zu ermitteln.

Der ursprünglich vorgesehene Arbeitspunkt „Mechanisches Hüllrohr-Verhalten bei Leistungsrampen unter Hochabbrand“ zur Qualifizierung des GRS-Programms TESPAS-ROD zur Berechnung der mechanischen Brennstab-Belastung anhand von entsprechenden PCI-Versuchen kann zugunsten von Analysen, die auf Wunsch des Auftraggebers vor dem Hintergrund der Ereignisse in Fukushima durchgeführt werden sollen, im Rahmen des Vorhabens RS1189 nicht mehr bearbeitet werden.

Zur Untersuchung einer möglichen Begünstigung von PCI-Ereignissen durch Steuerstabbewegung in Siedewasserreaktoren mit Hilfe von Transientenberechnungen wurden entsprechende Untersuchungen durchgeführt. Als Basis wurde ein zweidimensionales Modell eines generischen 8x8-SWR-Brennelements mit drei unterschiedlichen Brennstabsorten und einem Wasserstab erstellt. Zunächst wurde derjenige Abbrand, dessen Nuklidinventar bei einer Anordnung in einem 4x4-Brennelementbündel mit zentralem Steuerkreuz zu einem effektiven Multiplikationsfaktor möglichst nahe bei 1.0 führt, ermittelt. Zu diesem Zweck wurden Abbrand- und nachfolgende Kritikalitätsrechnungen für infinite Anordnungen von Brennelementbündeln mit und ohne Steuerkreuz durchgeführt. Die Berechnungen erfolgten mit den Programmsequenzen TRITON (Abbrand) und CSAS5 (Kritikalität) des Programmsystems SCALE 6. Es wurden zunächst

die Nuklidinventare eines SWR-Brennelements für Abbrände zwischen 24 und 40 GWd/tHM ermittelt und anschließend in Kritikalitätsrechnungen die zugehörigen effektiven Multiplikationsfaktoren bestimmt. Die Zielvorgabe von  $k_{eff} = 1.0$  wird für einen Abbrand von ca. 29 GWd/tHM erfüllt. Für diesen Abbrand wurden effektive Multiplikationsfaktoren für ein 4x4-Brennelementbündel sowohl mit Steuerkreuz ( $k_{eff} = 0.9987$ ) als auch ohne Steuerkreuz ( $k_{eff} = 1.0394$ ) errechnet. Dazu liegt eine ausführliche Technische Notiz vor (siehe Anhang A2).

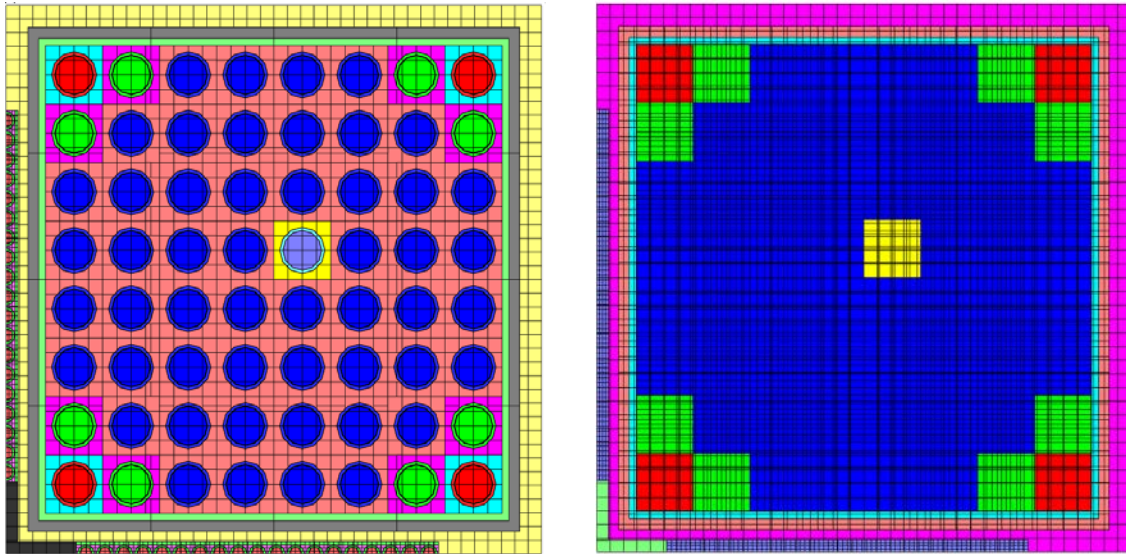


Abbildung 8-1 NEWT-Modell für ein kontrolliertes 8x8-SWR-Brennelement in hoher Auflösung.

Zur Erzeugung von Stabzell-homogenisierten Wirkungsquerschnitten für die nachfolgenden Transientenberechnungen wurden entsprechende Berechnungen mit dem zweidimensionalen Brennelement-Transportcode NEWT durchgeführt. Die Validierung dieser Wirkungsquerschnitte erfolgte durch Vergleich der Brennelement-Stableistungsverteilungen für unkontrollierte und kontrollierte Zustände zwischen der feinaufgelösten NEWT-Referenzlösung und der entsprechenden Lösung der NEWT-Berechnung mit zellhomogenisierter Geometriedarstellung. Auf diese Art wurden zellhomogenisierte Wirkungsquerschnitte in 18 und 8 Energiegruppen erstellt. Der Vergleich zwischen den ermittelten Stableistungsverteilungen mit feinaufgelöster und zellhomogenisierter Geometriebeschreibung für unkontrollierte und kontrollierte Brennelemente ergab hervorragende Übereinstimmung, mit relativen Abweichungen deutlich unter 2%. Das NEWT-Modell ist in Abbildung 8-1 (links) dargestellt; Abbildung 8-1 (rechts) zeigt das Modell mit homogenisierten Wirkungsquerschnitten. Tabelle 8-1 zeigt die berechnete Stableistungsverteilung im kontrollierten Brennelement aus der detaillierten NEWT-Berechnung (nicht-homogenisierte Stabzellen), Tabelle 8-2 zeigt die re-

lativen Abweichungen zwischen den mit homogenisierten und nicht-homogenisierten Zellen berechneten Stableistungsverteilungen.

Tabelle 8-1 Mit NEWT berechnete Stableistungsverteilung für ein kontrolliertes 8x8-SWR-Brennelement in hoher Auflösung.

1.0341	1.1758	1.4407	1.4520	1.5126	1.6382	1.4739	1.4339
0.8736	1.0939	1.0922	1.1258	1.1876	1.2849	1.4850	1.4739
0.8100	0.8725	0.9211	0.9936	1.0974	1.1398	1.2849	1.6382
0.6818	0.7619	0.8326	0.9528		1.0974	1.1876	1.5126
0.6271	0.7044	0.7692	0.8493	0.9528	0.9936	1.1258	1.4520
0.6041	0.6682	0.7169	0.7692	0.8326	0.9211	1.0922	1.4407
0.4814	0.6425	0.6682	0.7044	0.7619	0.8725	1.0939	1.1758
0.4058	0.4814	0.6041	0.6271	0.6818	0.8100	0.8736	1.0342

Tabelle 8-2 Relative Abweichungen in den Stableistungsverteilungen aus NEWT-Berechnungen mit homogenisierten und nicht-homogenisierten Stabzellen.

0.06%	0.14%	0.43%	0.56%	0.58%	0.65%	0.71%	1.11%
-0.11%	-0.16%	-0.14%	-0.11%	-0.24%	-0.01%	0.20%	0.71%
-0.19%	-0.49%	-0.40%	-0.03%	-0.46%	0.02%	-0.01%	0.65%
-0.04%	-0.51%	-0.61%	-0.49%		-0.46%	-0.24%	0.58%
0.05%	-0.45%	-0.42%	-0.04%	-0.49%	-0.03%	-0.11%	0.56%
-0.03%	-0.54%	-0.50%	-0.42%	-0.61%	-0.40%	-0.14%	0.43%
-0.54%	-0.48%	-0.54%	-0.45%	-0.51%	-0.48%	-0.16%	0.14%
-1.40%	-0.54%	-0.03%	0.05%	-0.04%	-0.19%	-0.11%	0.05%

Zur Untersuchung der Fragestellung, ob und in welchem Ausmaß zeitliche lokale Leistungspulse bzw. Leistungsüberschwingungen bei betriebsbedingten SWR-Steuerstabbewegungen auftreten können und inwieweit deren explizite Berücksichtigung bei der Bewertung der Hüllrohrintegrität notwendig ist, wurden nachfolgend mit TORT-TD /SEU 08/ dynamische Berechnungen ohne thermohydraulische Rückwirkung für ein Brennelement mit Steuerstabkreuz im unendlichen Gitter durchgeführt. TORT-TD basiert auf dem  $S_N$ -Transportcode TORT /RHO 97/ und setzt die in der GRS durchgeführte Entwicklung des zweidimensionalen zeitabhängigen  $S_N$ -Codes DORT-TD /PAU 03/ auf drei Dimensionen fort.

Für die Brennstabzellen wurden dabei homogenisierte Wirkungsquerschnitte verwendet, siehe Abb. 8-1 (rechts). Als abdeckend für ein Steuerstabverfahren im Reaktor wurde eine Transiente betrachtet, bei der das Steuerelement in einer Sekunde mit konstanter Geschwindigkeit um 2 cm nach unten verschoben wird, was zu einer Zunahme der Reaktivität führt.



Abbildung 8-2 zeigt den Verlauf der Gesamtleistung, die während der Transiente um ca. 12% zunimmt; nach Ablauf von einer Sekunde erfolgt ein weiterer langsamer Leistungsanstieg, der aufgrund des Fehlens von thermohydraulischen Rückwirkungen unrealistisch ist. Außerdem ist zu bedenken, dass in dem betrachteten Modell (unendliches Gitter) ein simultanes Verfahren aller Steuerstäbe im Reaktorkern simuliert wird; in Wirklichkeit werden nur vier Steuerstäbe (einer pro Viertelkern) gleichzeitig verfahren, so dass die Änderung der Reaktorleistung deutlich geringer ist. Berechnungen für größere Kernanordnungen konnten aufgrund des hohen Rechenzeitbedarfs nicht durchgeführt werden.

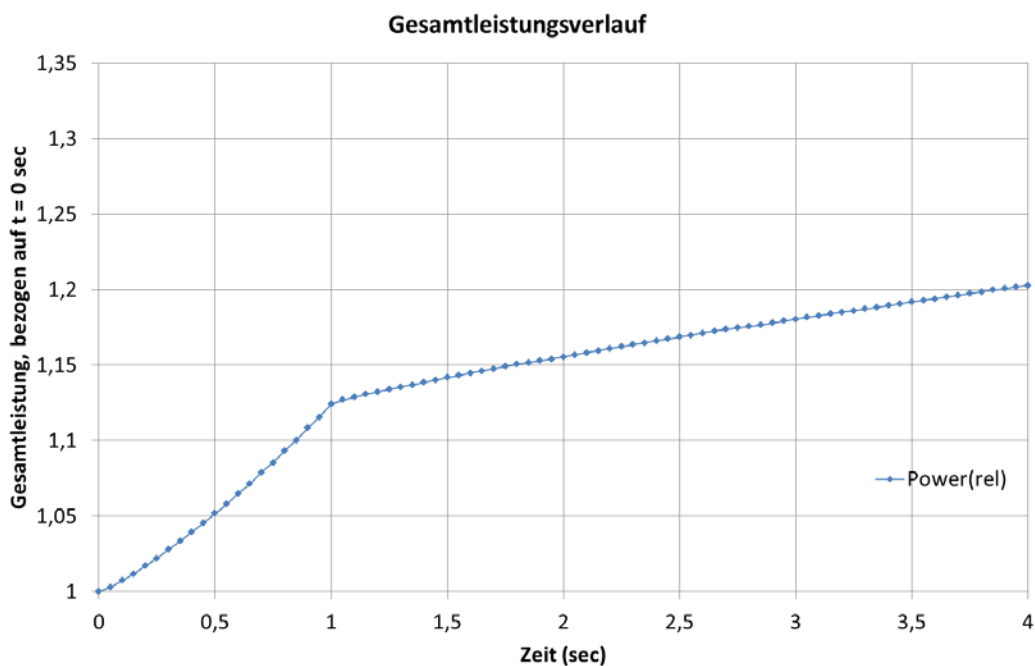


Abbildung 8-2 Gesamtleistungsverlauf in einem SWR-Brennelement im unendlichen Gitter bei einem Steuerstabverfahren aus TORT-TD.

Für PCI-Fragestellungen sind allerdings lokale Leistungsänderungen von größerer Bedeutung. Diese wurden, wiederum im unendlichen Gitter, in der dem Steuerstabkreuz benachbarten Eckstabzelle (in Abb. 8-1 links unten) ermittelt. Die Leistung entlang des Brennstabs für verschiedene Zeiten ist in Abb. 8-3 dargestellt, wobei der Verlauf nach  $t = 4$  sec wegen des Fehlens von thermohydraulischen Rückwirkungen wiederum bedeutungslos ist. Insgesamt ändert sich die Leistung entlang des Brennstabs vom Beginn ( $t = 0$  sec) bis zum Ende ( $t = 1$  sec) des Steuerstabverfahrens nur moderat, wobei erwartungsgemäß die größte relative Änderung in der Umgebung der Steuerstabkante stattfindet. Dies ist aus der roten Kurve in Abb. 8-4 ersichtlich, die den relativen Leis-

tungsanstieg gegenüber dem Ausgangszustand vor der Steuerstabbewegung wieder gibt.

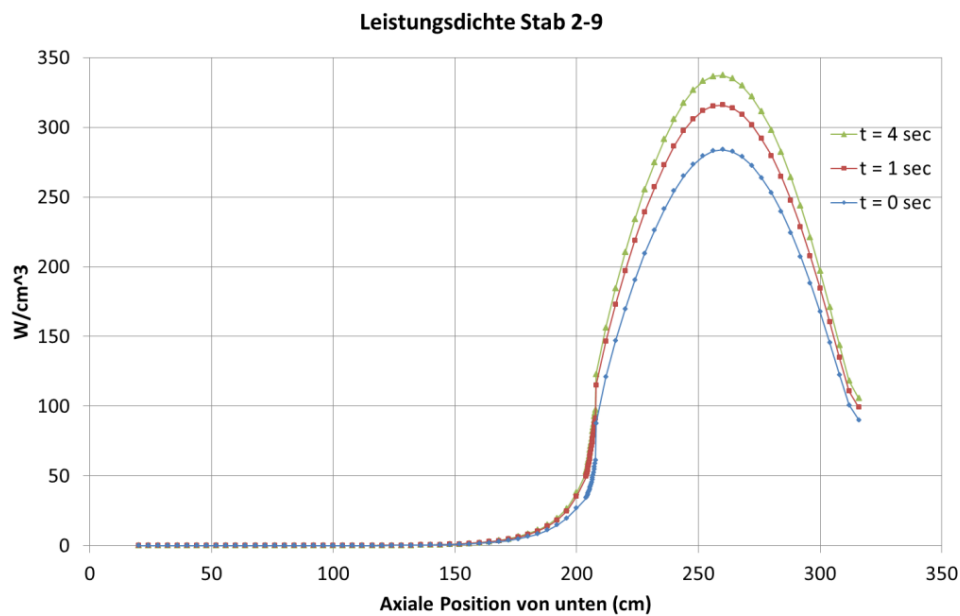


Abbildung 8-3 Leistung im Eckstab in einem SWR-Brennelement im unendlichen Gitter bei einem Steuerstabverfahren zu unterschiedlichen Zeiten aus TORT-TD.

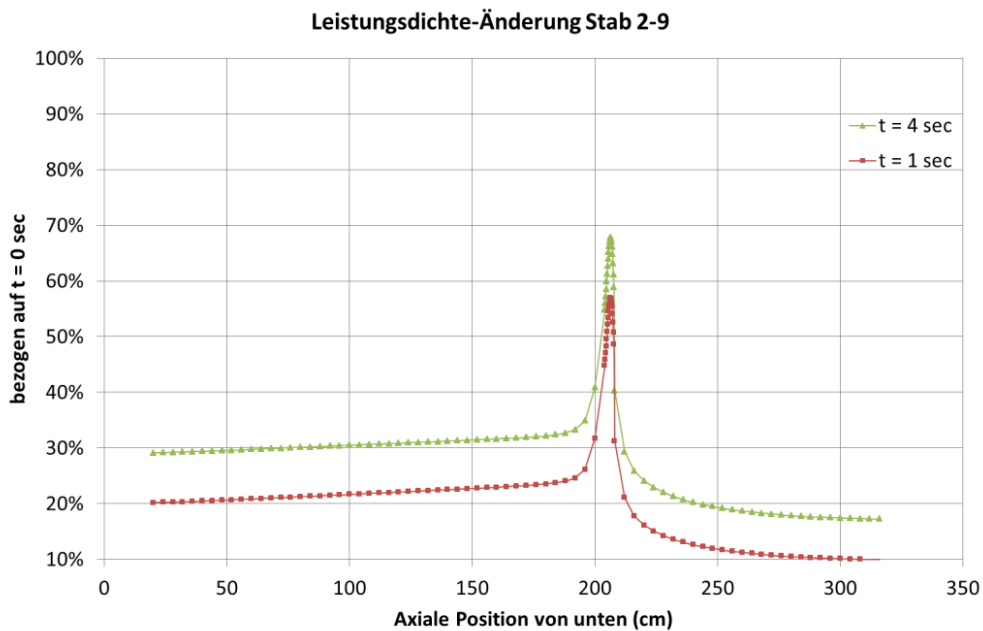


Abbildung 8-4 Leistungsänderung im Eckstab in einem SWR-Brennelement im unendlichen Gitter bei einem Steuerstabverfahren aus TORT-TD.

Um den Einfluss thermohydraulischer Rückwirkungen zu bestimmen, wurde die im Rahmen des Vorhabens RS1183 entwickelte Kopplung von TORT-TD mit dem thermohydraulischen Unterkanalmodell COBRA-TF von DWR- zu SWR-Anwendungen erweitert /MAG 12/. Die zuvor beschriebene Stand-Alone-TORT-TD-Steuer-element-bewegungstransiente wurde mit dem gekoppelten System wiederholt. Wie erwartet ergibt sich aus den aus den Ergebnissen des gekoppelten Rechensystems ein deutlich geringerer Leistungsanstieg als aus den Stand-Alone-Ergebnissen, da gewöhnlich die thermohydraulischen Rückwirkungen die Spitzenleistung vermindern. In der gekoppelten Rechnung steigt die Gesamtleistung während der Steuerstabbewegung nur um ca. 3% an und nimmt anschließend wieder ab.

Der relative Leistungsanstieg bleibt am Ende der Steuerstabbewegung auf einen Maximalwert von ca. 60 % begrenzt. Einen derartigen Wert erhält man auch, wenn das Verfahren des Steuerstabs quasistationär, also als Abfolge von stationären Zuständen bei den unterschiedlichen Steuerstabstellungen beschrieben wird. Zur Überprüfung wurden verschiedene Modell für den Monte-Carlo-Code MCNP /X-5 03/ erstellt, einmal für ein Brennelement im unendlichen Gitter (dies entspricht Abb. 8-1), und einmal für einen Viertelkern, in dem die Stellung eines Steuerstabes verändert wird. Dies ist in Abb. 8-5 dargestellt.

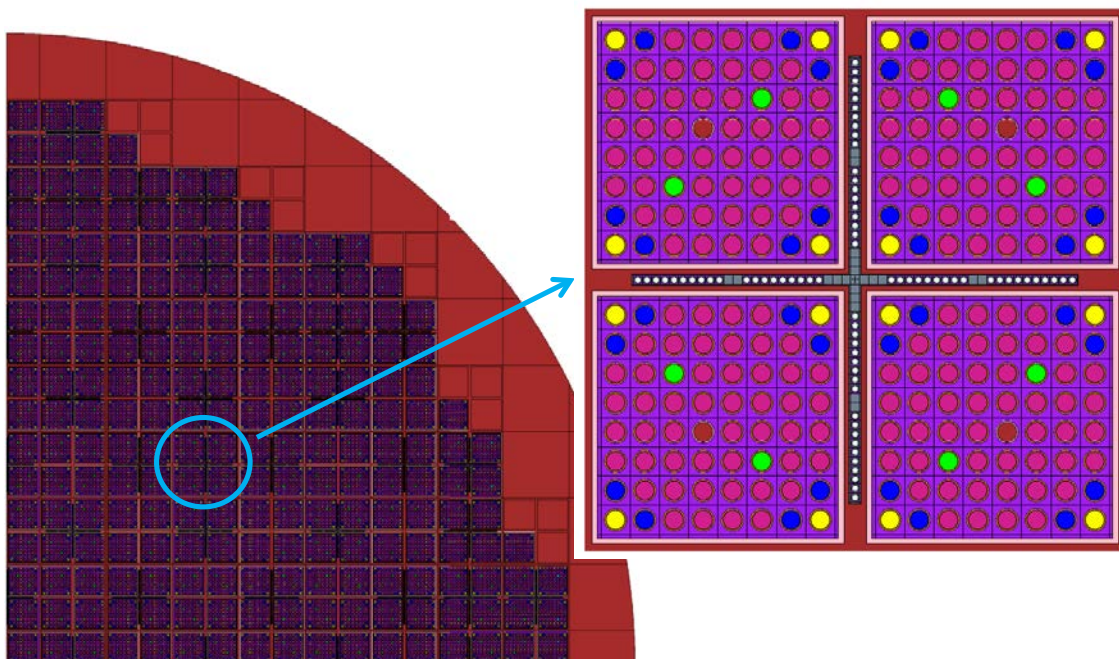


Abbildung 8-5 MCNP-Modell zur quasistationären Beschreibung einer Steuerstab-bewegung in einem SWR-Viertelkern.

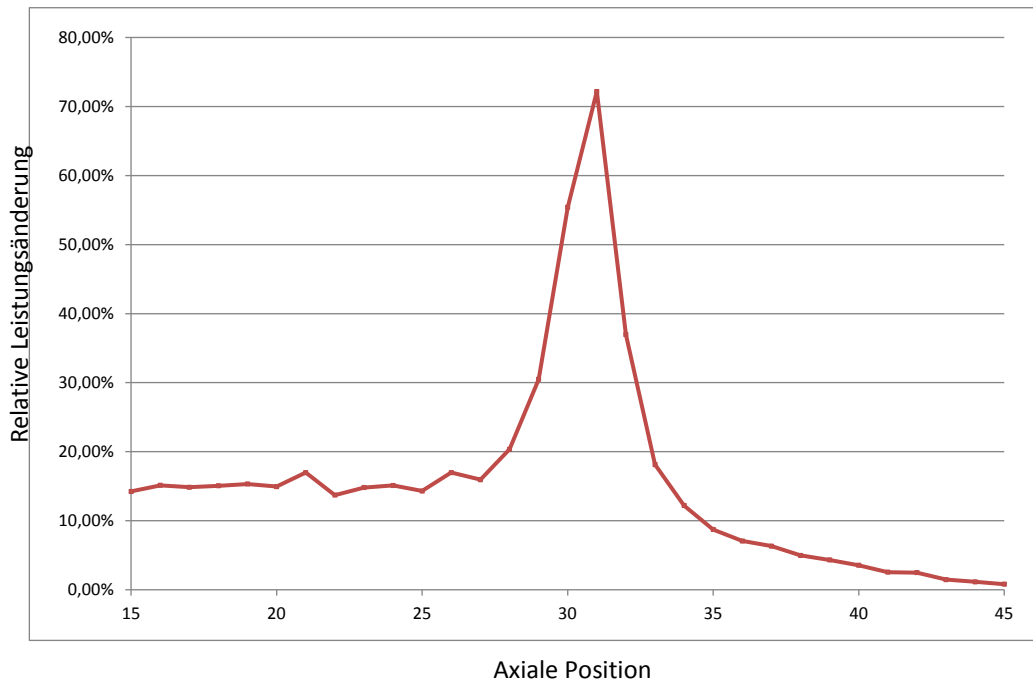


Abbildung 8-6 Leistungsänderung im Eckstab in einem SWR-Brennelement im unendlichen Gitter bei einem Steuerstabverfahren aus MCNP.

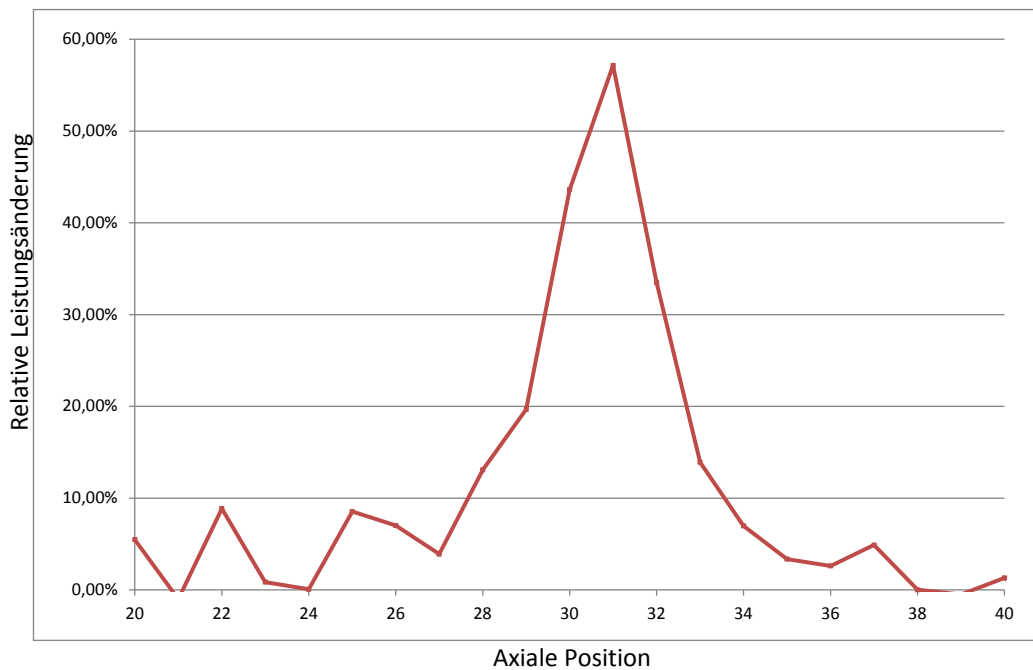


Abbildung 8-7 Leistungsänderung im Eckstab in einem SWR-Brennelement im Viertelkern bei einem Steuerstabverfahren aus MCNP.

Die Ergebnisse dieser MCNP-Berechnungen sind in Abb. 8-6 und Abb. 8-7 dargestellt. Die Ergebnisse für die Leistungsänderung im Eckstab des Brennelements im unendlichen Gitter und im Viertelkern beim Steuerstabverfahren zeigen denselben qualitativen

Verlauf, also eine Spitze in der Umgebung der Steuerstab-Oberkante, die sich in dem verwendeten Modell bei ca. 30 cm befindet. Es ergeben sich leichte quantitative Unterschiede; für die Viertelkernanordnung ist die maximale Zunahme in der Leistungsdichte erwartungsgemäß etwas geringer als bei der Steuerstabbewegung im unendlichen Gitter. Die Unregelmäßigkeiten in den Kurven im kontrollierten Bereich, also bei niedrigem Neutronenfluss, werden, insbesondere beim Viertelkernmodell, durch statistische Unsicherheiten in der Monte-Carlo-Rechnung verursacht.

Bei diesen Ergebnissen ist der unterschiedliche Isotopengehalt im unkontrollierten und kontrollierten Teil des Brennelements, der sich durch ein unterschiedliches Abbrandverhalten in diesen Zonen ergibt, noch nicht berücksichtigt. Ebenfalls unberücksichtigt ist die zum Teil komplexe Form der Steuerstaboberkante, bedingt durch Strukturmaterial wie etwa den Haltegriff des Brennelements. Es zeigt sich allerdings, dass das qualitative Verhalten des Leistungsanstiegs auch bei Berücksichtigung dieser Details das selbe ist /DEL 10, NÜN 11/.

Insgesamt zeigt sich, dass beim SWR-Steuerstabverfahren auch unter konservativen Annahmen keine dynamischen Effekte auftreten, die sich nicht quasistationär beschreiben ließen, und dass auf die Zeitabhängigkeit zurückzuführende Leistungsüberschwingungen ausgeschlossen sind. Der relative Leistungsanstieg bleibt am Ende der Steuerstabbewegung auf einen Maximalwert von ca. 60 % begrenzt. Dieses Ergebnis ist auch von unmittelbarer Relevanz für das Forschungsvorhaben RS1193.

## 9 AP7: Einsatz eines 3D-Kernsimulators für Abbrandrechnungen

Kernsimulatoren dienen der Berechnung der dreidimensionalen Leistungs- und Flussverteilung während des Kernabbrandes unter dem Einfluss verschiedener äußerer und innerer Betriebsparameter wie Bor- und Xenonkonzentration und thermohydraulischen Größen. Um den Rechenaufwand in akzeptablen Grenzen zu halten, kommen vorwiegend rechenzeitsparende Diffusions- (QUABOX/CUBBOX) oder vereinfachte Transportmethoden wie  $SP_3$  (z. B. in DYN3D /GRU 00/) zum Einsatz. Zur Verfolgung des nuklearen Abbrands werden aus Effizienzgründen im Allgemeinen nur die wichtigsten reaktivitätsrelevanten Nuklide betrachtet. Entsprechend vereinfacht sind die nuklidweisen Abbrandgleichungen z. B. in HELIOS und CASMO formuliert. Derartige Approximationen genügen zwar der für den Reaktorbetrieb relevanten Reaktivitätsbilanzierung, jedoch haben GRS-Untersuchungen /AAA 07/ gezeigt, dass durch diese Vereinfachungen der Neutronenfluss und damit die Reaktorleistung bei zunehmenden Hochabbrand um bis etwa 3 % unter- oder überschätzt werden kann. Die Unterschiede zwischen vereinfachten, globalen Abbrandmodellen und detaillierten Rechnungen unter stabweiser Betrachtung werden erheblich, wenn der Ausbrand von Gadolinium-haltigen Stäben berechnet werden muss /KIL 05/. Sie sind ebenfalls unzureichend für weitergehende, nachgelagerte Untersuchungen wie zum Beispiel der Bestimmung von Nachzerfallsleistung und Gammastrahlung bei Reaktorabschaltung oder der Freisetzung von Edelgasen und Jod bei Reaktorstörfällen. Solche Untersuchungen können nur mit Vollinventarbetrachtungen durchgeführt werden, wie sie z. B. mit dem Codesystem KENOREST mit OREST und GRS-ORIGEN-X möglich sind.

Verwandte Aufgaben mit einer Vielzahl von separaten „ORIGEN-Raumzellen“ (analog zu einer Reaktorrechnung mit vielen räumlichen Maschen) wurden von der GRS bereits mit den Systemen FIPISO-98 und GRAMATFIX behandelt. Dabei wird für jede Raumzelle ein kompletter ORIGEN-Datensatz mit der Nuklidentwicklung während der gesamten Bestrahlung abgelegt und für spätere Weiterverarbeitungen zum gewünschten Bestrahlungs- oder Abklingschritt aufgerufen. Das Ziel ist es, zu gewünschten Zeitpunkten während eines Reaktorzyklus die 3D-Information aus dem Kernsimulator auszukoppeln und an die Vollinventarrechnungen zu übergeben, um für jeden Betriebszustand des Kerns weitergehende Aussagen treffen zu können. Die ORIGEN-Versionen der GRS sind in Bezug auf Datenumfang und Lösungsmethode geeignet, eine derartige Isotopenvielfalt simultan mit bis zu 20 Spaltmaterialien zu behandeln. Dazu wurde

der Kernsimulator DYN3D bei der GRS installiert und getestet. Das Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR) hat zu diesem Zweck mehrere Versionen des Codes zur Verfügung gestellt, die einen unterschiedlichen Leistungsumfang bieten. Im Vorhaben RS1189 ist insbesondere die Option der Zyklusnachverfolgung interessant, so dass die Wahl auf die Version 3.2 fiel, die diese Option ermöglicht. Nach dem erfolgreichen Durchlauf der vom HZDR mitgelieferten Beispiele wurden Eingabedateien zu den ersten Punkten des OECD/NEA "Pressurized Water Reactor MOX/ $UO_2$  Core Transient Benchmark" /KOZ 06/ erstellt. Die Berechnungen zu diesem Benchmark wurden erfolgreich durchgeführt.

In dem oben genannten Benchmark wird ein Reaktorkern betrachtet der teilweise mit MOX beladen ist. In Abbildung 9-1 ist die entsprechende Kernbeladung gezeigt.

	1	2	3	4	5	6	7	8
A	U 4.2% (CR-D) 35.0	U 4.2% 0.15	U 4.2% (CR-A) 22.5	U 4.5% 0.15	U 4.5% (CR-SD) 37.5	M 4.3% 17.5	U 4.5% (CR-C) 0.15	U 4.2% 32.5
B	U 4.2% 0.15	U 4.2% 17.5	U 4.5% 32.5	M 4.0% 22.5	U 4.2% 0.15	U 4.2% (CR-SB) 32.5	M 4.0% 0.15	U 4.5% 17.5
C	U 4.2% (CR-A) 22.5	U 4.5% 32.5	U 4.2% (CR-C) 22.5	U 4.2% 0.15	U 4.2% 22.5	M 4.3% 17.5	U 4.5% (CR-B) 0.15	M 4.3% 35.0
D	U 4.5% 0.15	M 4.0% 22.5	U 4.2% 0.15	M 4.0% 37.5	U 4.2% 0.15	U 4.5% (CR-SC) 20.0	M 4.3% 0.15	U 4.5% 20.0
E	U 4.5% (CR-SD) 37.5	U 4.2% 0.15	U 4.2% 22.5	U 4.2% 0.15	U 4.2% (CR-D) 37.5	U 4.5% 0.15	U 4.2% (CR-SA) 17.5	
F	M 4.3% 17.5	U 4.2% (CR-SB) 32.5	M 4.3% 17.5	U 4.5% (CR-SC) 20.0	U 4.5% 0.15	M 4.3% 0.15	U 4.5% 32.5	
G	U 4.5% (CR-C) 0.15	M 4.0% 0.15	U 4.5% (CR-B) 0.15	M 4.3% 0.15	U 4.2% (CR-SA) 17.5	U 4.5% 32.5	Assembly Type CR Position Burnup [GWd/t]	
H	U 4.2% 32.5	U 4.5% 17.5	M 4.3% 35.0	U 4.5% 20.0			Fresh Once Burn Twice Burn	

CR-A Control Rod Bank A  
 CR-B Control Rod Bank B  
 CR-C Control Rod Bank C  
 CR-D Control Rod Bank D  
 CR-SA Shutdown Rod Bank A  
 CR-SB Shutdown Rod Bank B  
 CR-SC Shutdown Rod Bank C  
 CR-SD Shutdown Rod Bank D  
 O Ejected Rod

Abbildung 9-1 Kernbeladung im „PWR MOX/ $UO_2$  Core Transient Benchmark“.

Im Folgenden werden einige Vergleiche mit den Ergebnissen der Benchmark-Teilnehmer gezeigt, um die korrekte Anwendung und Funktion von DYN3D zu überprüfen. Im ersten der vier Teile des Benchmarks werden stationäre Zustände in 2D Anordnungen mit festen thermohydraulischen Bedingungen und einer festen Borkonzentration betrachtet. Die Anordnungen unterscheiden sich jeweils in der Position der Steuerstäbe. Abbildung 9-2 und Abbildung 9-3 zeigen die Verteilung der Brennelementleistung der Referenzlösung und die mit DYN3D berechneten Werte für die Anordnung, in der alle Steuerstäbe ausgefahren sind, in Abbildung 9-2 sind die entsprechenden relativen Abweichungen dargestellt.

Es ist zu sehen, dass die mit DYN3D berechnete Leistungsverteilung gut mit der Referenzlösung übereinstimmt und mit den Ergebnissen aus /GRU 06, BEC 07/ konsistent ist. Als weiterer Vergleich sind in Tabelle 9-1 die entsprechenden Multiplikationsfaktoren im Vergleich zu den Lösungen der anderen Teilnehmer dargestellt. Hier wird wiederum die Anordnung betrachtet, in der alle Steuerstäbe ausgefahren sind (ARO) und zusätzlich noch die Anordnung in der alle Steuerstäbe eingefahren sind (ARI).

	1	2	3	4	5	6	7	8
A	1.374	1.735	1.418	1.525	1.035	1.032	0.997	0.413
B	1.735	1.563	1.245	1.277	1.349	0.918	0.978	0.491
C	1.418	1.245	1.325	1.446	1.247	1.114	0.991	0.393
D	1.525	1.277	1.446	1.076	1.308	1.143	0.892	0.341
E	1.035	1.348	1.247	1.308	0.904	1.067	0.585	
F	1.032	0.917	1.114	1.142	1.067	0.754	0.281	
G	0.997	0.978	0.991	0.892	0.585	0.281		
H	0.413	0.491	0.393	0.340				

Abbildung 9-2 Referenzlösung zur normierten Brennelementleistung bei ausgefahrenen Steuerstäben.

	1	2	3	4	5	6	7	8
A	1.339	1.677	1.386	1.504	1.042	1.045	1.012	0.421
B	1.677	1.512	1.225	1.278	1.348	0.930	0.989	0.497
C	1.386	1.225	1.308	1.44	1.253	1.130	1.008	0.405
D	1.504	1.278	1.440	1.093	1.313	1.149	0.895	0.339
E	1.042	1.348	1.253	1.313	0.917	1.070	0.581	
F	1.045	0.930	1.130	1.149	1.070	0.745	0.277	
G	1.012	0.989	1.008	0.895	0.581	0.277		
H	0.421	0.497	0.405	0.339				

Abbildung 9-3 Von DYN3D berechnete normierte Verteilung der Brennelementleistung bei ausgefahrenen Steuerstäben.

	1	2	3	4	5	6	7	8
A	-2.58	-3.40	-2.28	-1.39	0.67	1.25	1.49	1.92
B	-3.40	-3.32	-1.62	0.08	-0.07	1.30	1.12	1.22
C	-2.28	-1.62	-1.29	-0.42	0.48	1.43	1.70	3.01
D	-1.39	0.08	-0.42	1.57	0.38	0.52	0.34	-0.59
E	0.67	0.00	0.48	0.38	1.43	0.28	-0.69	
F	1.25	1.41	1.43	0.61	0.28	-1.20	-1.43	
G	1.49	1.12	1.70	0.34	-0.69	-1.43		
H	1.92	1.22	3.01	-0.30				

Abbildung 9-4 Relative Abweichung zwischen der mit DYN3D berechneten und der Referenz-Leistungsverteilung.



Tabelle 9-1 Vergleich der Eigenwerte für ausgefahrene Steuerstäbe (ARO) und eingefahrene Steuerstäbe (ARI).

	Eigenvalue (ARO)	Eigenvalue (ARI)
<b>DYN3D</b>	<b>1.06380</b>	<b>0.99151</b>
CORETRAN 1/FA	1.06387	0.99202
CORETRAN 4/FA	1.06379	0.99154
EPISODE	1.06364	0.99142
NUREC	1.06378	0.99153
PARCS 2G	1.06379	0.99154
PARCS 4G	1.06376	0.99136
PARCS 8G	1.06354	0.99114
SKETCH-INS	1.06379	0.99153

Im zweiten Teil des Benchmarks wird der komplette Kern in 3D bei voller Leistung und ausgefahrenen Steuerstäben im stationären Zustand betrachtet. Hier wird der Kern exakt im kritischen Zustand betrachtet und die kritische Borkonzentration wird mit den Rechenverfahren bestimmt. In Tabelle 9-2 sieht man die mit DYN3D berechnete kritische Borkonzentration und einige über den Kern gemittelten thermohydraulischen Größen im Vergleich zu den Ergebnissen der Teilnehmer.

Tabelle 9-2 Mit DYN3D berechnete kritische Borkonzentration sowie thermohydraulische Größen im Vergleich zu den Ergebnissen der Teilnehmer.

	Crit. Boron Conc. [ppm]	Doppler Temp. [K]	Moderator Temp. [K]	Outlet Temp. [K]
<b>DYN3D</b>	<b>1680</b>	<b>945.5</b>	<b>581.2</b>	<b>598.8</b>
CORETRAN 1/FA	1647	908.4	581.0	598.6
CORETRAN 4/FA	1645	908.4	581.0	598.6
EPISODE	1661	846.5	582.6	585.5
NUREC	1683	827.8	581.1	598.7
PARCS 2G	1679	836.0	581.3	598.8
PARCS 4G	1674	836.1	581.3	598.8
PARCS 8G	1672	836.2	581.3	598.8
SKETCH-INS	1675	836.6	580.9	598.9

Man sieht, dass die mit DYN3D berechneten Ergebnisse sehr gut mit dem Ergebnissen der Teilnehmer übereinstimmen. Lediglich die Brennstofftemperatur weicht etwas von den Ergebnissen der anderen Teilnehmer ab. Hier sieht man aber, dass auch die Unterschiede zwischen den anderen Teilnehmern in diesem Bereich liegen. Die Brennstofftemperatur ist eine Größe, die mit gewissen Unsicherheiten behaftet ist, da ein Vergleich der theoretischen Modelle mit direkten Messungen der Temperatur nur

schwer durchzuführen ist. Zumindest im vorliegenden Benchmark scheint diese Unsicherheit allerdings keinen großen Einfluss auf die restlichen Größen zu haben.

Ausgehend von diesen Beispielen wurde ein generisches 3D-Abbrandmodell eines Druckwasserreaktors erstellt und an GRAMATFIX angebunden. Hierin wurden möglichst viele Optionen genutzt, wie etwa Verschiebungen der Steuerstäbe, um das Modell als Grundlage für eine Vielzahl von Situationen einsetzen zu können. Da mit der zuvor verwendeten Bibliothek bisher kein Abbrand betrachtet wurde, waren die Abbrandzustände, die in Abbildung 9-1 vorkommen, ausreichend. Um jedoch realistische Abbrandberechnungen durchführen zu können, musste zunächst eine problemabhängige Querschnittsbibliothek erstellt werden, die für jedes Brennelement genügend Abbrandschritte enthält. Diese Bibliothek wurde mit Hilfe des Monte-Carlo-Programms SERPENT /LEP 09/ erstellt. Um auch für weitere Probleme möglichst einfach Bibliotheken erstellen zu können, wurde der Prozess größtenteils in einer Python-Umgebung automatisiert. Das erstellte Modul wurde für einen generischen Druckwasserreaktor bereits eingesetzt, um die Wirkungsquerschnitte für die Abbrandrechnung bereitzustellen.

Da das Benchmark /KOZ 06/ einen realistischen Kern beschreibt und um die Vergleichsmöglichkeit zu den bisherigen Rechnungen zu gewährleisten, wurden die Brennelementbeschreibungen aus dem Benchmark verwendet. Dort werden zwei verschiedene Brennelementtypen beschrieben, ein MOX-Brennelement und ein UO<sub>2</sub> Brennelement. In beiden Typen werden zwei verschiedene Anreicherungen verwendet und für die UO<sub>2</sub>-Brennelemente muss noch unterschieden werden zwischen eingefahrenen und ausgefahrenen Steuerstäben. Der Sonderfall des Reflektors wurde nicht neu berechnet, da die Querschnitte dazu nicht abbrandabhängig sind und somit direkt übernommen werden konnten. In Abbildung 9-5 sieht man die geometrische Anordnung sowie die Neutronenflussverteilung zu verschiedenen Abbrandzuständen für das MOX-Brennelement mit 4.0% Anreicherung. In den Flussbildern kann man sehr gut das Ausbrennen der abbrennbaren Absorber verfolgen.

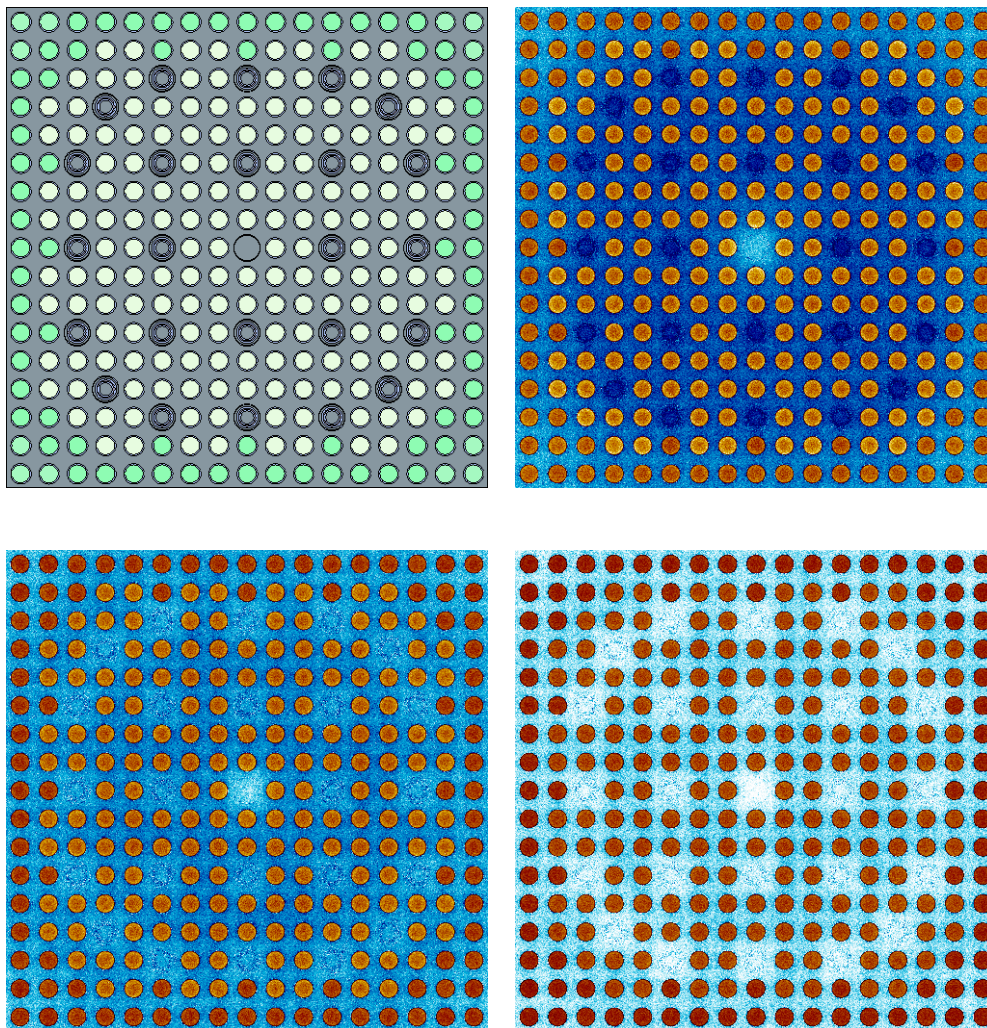


Abbildung 9-5 Geometrische Darstellung des Brennelements in SERPENT (l.o.). Verteilung des Neutronenflusses zu Beginn der Bestrahlung (r.o.), mit ca. 20 GWd/tHM (l.u.) und mit ca. 50 GWd/tHM (r.u.) Abbrand. Helle und dunkle Farben repräsentieren hohen und niedrigen Fluss.

Tabelle 9-3 Relative Differenzen einiger Querschnitte in Prozent zwischen den neuen und alten Daten bei einem Abbrand von 0.15 GWd/tHM. Die Werte wurden über alle Parameterverzweigungen in den Bibliotheken gemittelt.

Wirkungsquerschnitt	Mittlere relative Differenz in %	
	Gruppe 1	Gruppe 2
Transport	21.3	8.9
Absorption	1.9	0.02
$\nu \cdot \text{Fission}$	1.1	0.6
ADF	0.3	1.8

Zur Überprüfung der Wirkungsquerschnitte wurden diese zunächst in die Rechnungen zum Benchmark eingesetzt. Dabei stellte sich heraus, dass sich die Ergebnisse von den vorherigen unterscheiden. Als Beispiel sei hier der Multiplikationsfaktor aus dem ersten Teil des Benchmarks genannt, der in Tabelle 9-1 mit den anderen Teilnehmern verglichen wurde. Der Eigenwert sinkt bei Verwendung der neuen Bibliotheken von 1.06388 auf 1.04757. Eine Überprüfung der neuen Bibliotheken und ein Vergleich mit den zuvor verwendeten Daten zeigten keine offensichtlichen Fehler, aber gewisse Abweichungen in den Wirkungsquerschnittsdaten.

Tabelle 9-3 zeigt als Beispiel die relativen Differenzen einiger Querschnitte bei einem Abbrand von 0.15 GWd/tHM. Die Abweichungen unterscheiden sich für verschiedene Werte der Borkonzentration, Moderatorichte und Brennstofftemperatur nur wenig, so dass über alle Verzweigungen dieser Parameter gemittelt wurde. Eine aktuelle Veröffentlichung des Hauptentwicklers von SERPENT zusammen mit dem Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf /FRI 11/ ist auf ähnliche Probleme gestoßen. In dieser Veröffentlichung werden unter anderem die relativen Differenzen verschiedener mit SERPENT erstellten Bibliotheken zu den entsprechenden mit HELIOS erstellten Bibliotheken betrachtet. Die Differenzen sind in etwa vergleichbar mit den von uns gefundenen Unterschieden. Die Autoren schlagen als Lösung die Verwendung der sogenannten B1-Methode vor, die zumindest in dieser Arbeit die mit SERPENT erstellten Bibliotheken an die mit HELIOS erstellten Bibliotheken angleicht. Diese Methode beruht auf dem alten Argument, dass in unendlich ausgedehnten Gitterrechnungen Leckage-Korrekturen vorgenommen werden müssen, um die Kritikalität sicher zu stellen. Dieses Argument wird schon lange diskutiert und es gibt keinen physikalischen Grund, warum das einzelne Brennelement exakt kritisch sein muss, da im Reaktor selbst auch nur der gesamte Kern kritisch ist und nicht jedes einzelne Brennelement. SERPENT macht es nun aufgrund seiner Transparenz und der Möglichkeit auch den gesamten Kern zu modellieren möglich, dieses Argument genauer zu untersuchen. Größen wie der Absorptionsquerschnitt oder der Spaltquerschnitt können mit SERPENT in zwei Szenarios berechnet werden. Einmal kann man ein einzelnes Brennelement simulieren und zum anderen kann man den gesamten Kern simulieren. Die homogenisierten Querschnitte für die einzelnen Brennelemente in den Szenarios können dann verglichen werden und dem Effekt der Leckage-Korrektur gegenübergestellt werden. Da die Ganzkernrechnung alle Umgebungseffekte beinhaltet, sollten die daraus bestimmten Querschnitte mit den korrigierten Querschnitten übereinstimmen. Die Vermutung ist allerdings, dass dies nicht der Fall ist, sondern diese Korrektur, die in SERPENT über die B1-Methode

implementiert ist, vielmehr eine für Diffusionscode nötige Korrektur darstellt, die keine physikalische Grundlage hat. Die Korrektur könnte vielmehr Ausdruck der großen Näherungen sein, die in diesen Codes verwendet werden. Zum Zeitpunkt der Untersuchungen konnte die B1-Näherung in SERPENT in Abbrandrechnungen noch nicht verwendet werden und somit konnte die Auswirkung der Näherung in vorliegenden Fall noch nicht geprüft werden. Die Erweiterung der Methode wird in zukünftigen SERPENT-Versionen zur Verfügung stehen /FRI 12/.

Im Rahmen der Modellerweiterungen im GRAMATFIX-System wurde die Begrenzung auf maximal 999 Einzelstäbe entfernt. Im Zuge der allgemeinen Qualitätssicherung wurden im Zusammenhang mit diesen Arbeiten außerdem einige Vereinfachungen in der Programmstruktur vorgenommen und das GRAMATFIX-System in eine Softwareumgebung zur Versionskontrolle überführt. Durch Aufhebung der Begrenzung auf maximal 999 Einzelstäbe ist das GRAMATFIX-System nun in der Lage, die Ergebnisse von Inventarberechnungen für vollständige Reaktorkern-Anordnungen zu handhaben. Die Nuklidinventare für die einzelnen Stäbe eines Brennelements können nun durch Fluss-Volumen-Wichtung auf Brennelementbasis bestimmt werden.

## 10 Zusammenfassung

Der vorliegende Bericht gibt die Ergebnisse der Arbeiten im BMWi-Forschungsvorhaben RS1189 wieder. Die durchgeführten Arbeiten dienen dem Ziel der Validierung und Erweiterung der in der GRS eingesetzten Rechenmethoden für Abbrand, Aktivierung und Abschirmung. Zur weiteren Validierung von KENOREST wurden Ergebnisse von Nachbestrahlungsmessungen aus den Anlagen Calvert Cliffs und TMI-1, sowie in Zusammenarbeit mit dem Paul-Scherrer-Institut Experimente am PROTEUS-Reaktor nachgerechnet. Als neuer Arbeitsschwerpunkt erfolgte die Validierung von KENOREST für Siedewasserreaktoren anhand verschiedener Experiment-Nachrechnungen. Die KENOREST-Datenbasis wurde auf ENDF/B-VII und JEFF-3.1 aktualisiert; die Validierung wurde durchgeführt. Durch Erweiterungen an der KENOREST-Eingabedatenverarbeitung ist es nun möglich, den Abbrand von kontrollierten Siedewasserreaktor-Brennelementen, auch mit teileingefahrenen Steuerstabkreuzen, zu beschreiben. Mit Hilfe des GRS-Programmsystems XSUSA können nun auch Unsicherheiten in den nuklearen Daten durch die gesamte Abbrand-Berechnungskette propagiert werden. Das GRS-Programmsystem SUnCISTT kann dazu verwendet werden, Einflüsse von Unsicherheiten in technologischen Parametern, wie Fertigungstoleranzen, auf die Ergebnisse von Kritikalitäts- und Abbrand-Berechnungen zu ermitteln. Es können auch kombinierte Unsicherheitsanalysen mit nuklearen Daten und technologischen Parametern durchgeführt werden. Die Unsicherheiten in diesen Abbrandrechnungen können in nachfolgende Kernsimulationen mit QUABOX/CUBBOX übernommen werden. Zur Durchführung von deterministischen Neutronenflussberechnungen als Bestandteil der Abbrand-Rechenkette wurde das Modul DORTOREST weiterentwickelt und validiert. Durch die Implementierung der Erzeugung von Weniggruppen-Wirkungsquerschnitten zur Kernsimulation liegt mit DORTOREST nun ein vollwertiger Latticecode vor. Die Weiterentwicklung des Programmsystems DORTABLE für zweidimensionale Fluenz- und Aktivierungsberechnungen zum dreidimensionalen System TORTABLE wurde nach den Ereignissen im japanischen Kernkraftwerk Fukushima zugunsten von Analysen, die auf Wunsch des Auftraggebers mit Fukushima in Zusammenhang stehen, nicht mehr fortgesetzt und zum erreichten Entwicklungsstand eingefroren. Zur Vorbereitung von detaillierten zeitabhängigen Transportberechnungen zum Steuerstabverfahren in Siedewasserreaktoren wurden entsprechende Wirkungsquerschnitte erzeugt. Die Ergebnisse von nachfolgenden zeitabhängigen Transportberechnungen und deren gute Übereinstimmung mit MCNP-Ergebnissen für stationäre Zustände belegen, dass keine dynamischen Effekte

auftreten, die sich nicht quasistationär beschreiben ließen, und dass auf die Zeitabhängigkeit zurückzuführende Leistungsüberschwingungen ausgeschlossen sind. Der Kernsimulator DYN3D wurde in Betrieb genommen, mit verschiedenen Rechenfällen erprobt und an die Nuklidinventardatenbank GRAMATFIX angebunden. Wirkungsquerschnitte können nun auch mit dem Monte-Carlo-Abbrandcode SERPENT erzeugt werden. GRAMATFIX wurde für die Aufnahme von Nuklidinventaren aus Ganzkernberechnungen erweitert. Es wurde größter Wert darauf gelegt, soweit möglich alle Arbeiten durch Vergleich mit Messungen und entsprechenden Ergebnissen anderer Programmsysteme abzusichern; insgesamt resultieren aus den Arbeiten sechs Beiträge zu internationalen Benchmarks. Die Ergebnisse des Vorhabens wurden regelmäßig auf nationalen und internationalen Konferenzen und Workshops vorgestellt.

## 11 Literaturverzeichnis

- /AAA 07/ U.Hesse, Die Berechnung des Neutronenflusses in Abbrandprogrammen unter Berücksichtigung des Strahleneinfangs, Vortrag zum 7. Arbeitstreffen der AAA-Usergroup, GRS-Garching, 10. Dezember 2007
- /AAA 08/ U. Hesse, K. Gewehr, E.F. Moser, K. Hummelsheim, R. Kilger, S. Langenbuch, W. Denk, H. Deitenbeck, J. Sieberer, GRS AAA-Code-Collection for Activation, Shielding and Burn-up: GRS-A-2249, 06/1995); GRS-ORIGENX-07, Version 2 (Technical Report 02/2007); KENOREST (GRS-A-2783, 12/1999), OREST (GRS-63, 11/1986, updated 2006); DORTABLE (Technical Report 03/2007); NGSRC (GRS-A-1963, 1993); SURF-88 (Technical Report 1988); ANITABL-PC (GRS-A-3004, 2001); ANITABL - EURLIB97 extended UNIX-Version (Technical Report 12/2001); AIRBAGS V05.0 (Technical Report 03/2007)
- /BAL 00/ M.Baleanu, U.Hesse, ATIR, ein Analyse-Tool zur Überprüfung und Validierung von Inventar- und Reaktivitätsrechnungen mit KENO und OREST, 1.Ausbaustufe: Erfassung und Bewertung von Inventarrechnungen, Technischer GRS-Bericht zu RS 1110, Jan. 2000
- /BEC 07/ C. Beckert, U. Grundmann, Development and Verification of a Multigroup SP<sub>3</sub> Method for Reactor Calculations, Jahrestagung Kerntechnik, Karlsruhe, 22. – 24. Mai 2006
- /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/ B.L. Broadhead, B.T. Rearden, C.M. Hopper, J.J. Wagschal, C.V. Parks, Sensitivity- and Uncertainty-Based Criticality Safety Validation Techniques; Nucl. Sci. Eng., 146, (2004)
- /CAS 95/ D. Knott B.H. Forssen, M Edenius, CASMO-4, A Fuel Assembly Burnup Program Methodology, Studsvik/SOA-95/2



- /DEL 10/ R. Delto, B. Winterholer, D. Bender, J. Kierkegaard, J. Loberg, Pin-by-Pin Power Distributions in the Vicinity of Control Blade Tips in BWRs Based on Monte Carlo Calculations, Jahrestagung Kerntechnik 2010, Berlin, 4. - 6. Mai 2010
- /FRI 11/ E. Fridman, J. Leppänen, On the Use of the Serpent Monte Carlo Code for Few-Group Cross Section Generation, Annals of Nuclear Energy 38 (2011) 1399-1405
- /FRI 12/ E. Fridman, J. Leppänen, Serpent Monte Carlo Code: New Methods for Few-Group Cross Section Generation, Jahrestagung Kerntechnik 2012, Stuttgart, 22. - 24. Mai 2012
- /GAL 11/ L. Gallner, B. Krzykacz-Hausmann, A. Pautz, M. Wagner, W. Zwermann, Influence of Nuclear Data Uncertainties on the Depletion Chain, Jahrestagung Kerntechnik, Berlin, 17. - 19. Mai 2011
- /GAL 11a/ L. Gallner, M. Klein, B. Krzykacz-Hausmann, A. Pautz, W. Zwermann, Nuclear Data Uncertainty Analysis for a Fuel Assembly Criticality Benchmark, International Conference on Nuclear Criticality (ICNC 2011), Edinburgh, Schottland, 19.-22. Sep. 2011
- /GRU 00/ U. Grundmann, U. Rohde, S. Mittag, DYN3D – Three Dimensional Core Model for Steady-State and Transient Analysis of Thermal Reactors, ANS Int. Topical Meeting on Advances in Reactor Physics, PHYSOR 2000, Pittsburgh, USA, May 7-11, 2000
- /GRU 06/ U. Grundmann, Calculations of a Steady State of the OECD/NRC PWR MOX/ $\text{UO}_2$  Transient Benchmark with DYN3D, Jahrestagung Kerntechnik, Aachen, 16. – 18. Mai 2006
- /HAN 12/ V. Hannstein, M. Wagner, A. Pautz, W. Zwermann, "DORTOREST - A New Coup-led Transport/Burn-Up Code System", Jahrestagung Kerntechnik 2012, Stuttgart, 22. - 24. Mai 2012
- /HEL 95/ Users' Manual of HELIOS, Scandpower (Dec. 15, 1995), Release notes for HELIOS system 1.4, Scandpower TN19/41.16.15 (Jul. 3, 1996)

- /HES 99/ U. Hesse, S. Langenbuch, KENOREST, eine direkte Kopplung von KENO und OREST, GRS-A-2783, Dezember 1999
- /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
- /HES 09/ U. Hesse, K. Hummelsheim, R. Kilger, M. Kirsch, S. Langenbuch, F.E. Moser, A. Pautz, M. Wagner, W. Zwermann, Methodenentwicklung zum Hochabbrand einschließlich Burnup Credit, Abschlussbericht zum Vorhaben RS1169, GRS-A-3491, August 2009
- /HOF 93/ E. Hofer, Probabilistische Unsicherheitsanalysen von Ergebnissen umfangreicher Rechenmodelle, GRS-A-2002, Januar 1993
- /IWA 08/ O. Iwamoto, T. Nakagawa, N. Otuka, S. Chiba, K. Okumura, G. Chiba, Development of JENDL Actinoid File, International Conference on the Physics of Reactors "Nuclear Power: A Sustainable Resource", Casino-Kursaal Conference Center, Interlaken, Switzerland, September 14-19, 2008
- /KEN 00/ L.M. Petrie, N.F. Landers, KENO Va., An Improved Monte Carlo Criticality Programme with Supergrouping, NUREG/CR-0200 Rev 6, Volume 2, Section F11 (2000)
- /KIL 05/ R. Kilger, B. Gmal, Burnup Calculations with KENOREST and Associated Criticality Studies for Spent Fuel Samples from Takahama-3 Reactor, ANS-Meeting, Integrating Criticality Safety into the Resurgence of Nuclear Power, Knoxville, Tenn., Sept. 19 – 20, 2005
- /KIL 08/ R. Kilger, S. Langenbuch, Influence of the Two- and Three-Dimensional Sample Environment during Irradiation of Nuclear Fuel on the Numerical Determination of their Isotopic Inventory after Discharge, PHYSOR-2008, Interlaken, Switzerland, Sep. 14-19, 2008
- /KOD 01/ I. Kodeli, Multidimensional Deterministic Nuclear Data Sensitivity and Uncertainty Code System: Method and Application, Nucl. Sci. And Eng. 138, pp 45 – 66 (2001)

- /KOZ 06/ T. Kozlowski, T. J. Downar, The PWR MOX/UO<sub>2</sub> Core Transient Benchmark, Final Report, NEA/NSC/DOC(2006)20
- /LEB 03/ J.R. Lebenhaft, H.R. Trelue, Validation of MonteBurns for MOX Fuel using ARIANE Experimental Results, M+C 2003
- /LEC 10/ P. Leconte, A. Santamarina, Computational Benchmark for the Analysis of Small-Sample Reactivity Experiments, EGBUC Report, 2010
- /LEE 12/ G.S. Lee, J. Lee, G.-Y. Kim, S.-W. Woo, Benchmark Calculations on the Phase II Problem of Uncertainty Analyses for Criticality Safety Assessment, PHYSOR 2012, Knoxville, TN, USA, 15. - 20. Apr. 2012
- /LEP 09/ J. Leppänen, Burnup Calculation Capability in the PSG2/Serpent Monte Carlo Reactor Physics Code, M&C 2009, Saratoga Springs, NY, USA, 3. – 7. May 2009
- /MAC 94/ R.E. MacFarlane, D.W. Muir, The NJOY Nuclear Data Processing System, Version 91, LA-12740-M (October 1994)
- /MAG 12/ J. Magedanz, Y. Perin, M. Avramova, A. Pautz, F. Puente-Espel, A. Seubert, A. Sureda, K. Velkov, W. Zwermann, High-Fidelity Multiphysics Simulation of BWR Assembly with Coupled TORT-TD/CTF, PHYSOR 2012, Knoxville, TN, USA, 15. - 20. Apr. 2012
- /MAR 11/ N. Martínez Francès, D. Roßbach, R. Kilger, W. Zwermann, Comparison of Isotopic Compositions in the Frame of the NEA Depletion Calculation Benchmark Devoted to MOX Fuel Cycles, Jahrestagung Kerntechnik, Berlin, 17. - 19. Mai 2011
- /MEI 10/ A. Meier, J. Lapins, J. Bader, W. Bernnat, G. Lohnert, W. Zwermann, Burnup Calculations for HTR Kernels and Lattices of Pebbles and Compacts, Jahrestagung Kerntechnik 2010, Berlin, 4. - 6. Mai 2010
- /MER 10/ U. Mertyurek, M.W. Francis, I.C. Gauld, „SCALE 5 Analysis of BWR Spent Nuclear Fuel Isotopic Compositions for Safety Studies”, ORNL/TM–2010/286, December 2010

- /NAK 00/ Y. Nakahara, K. Suyama, T. Suzaki (2000), „Technical development on burn-up credit for spent LWR fuels,“ ORNL/TR-2001/01, Translation of JAERI-Tech 2000-071, Oak Ridge, USA, 2000
- /NEA 06/ ZZ UAM-LWR, Uncertainty Analysis in Modelling, Coupled Multi-physics and Multi-scale LWR analysis, Package-ID NEA-1769/04, <http://www.oecd-nea.org/tools/abstract/detail/nea-1769/>
- /NEA 07/ OECD Benchmark for Uncertainty Analysis in Best-Estimate Modelling (UAM) for Design, Operation and Safety Analysis of LWRs, NEA/NSC/DOC(2007)4
- /NEA 12/ SFCOMPO - Spent Fuel Isotopic Composition Database, <http://www.oecd-nea.org/sfcompo/>
- /NEA 12a/ SINBAD REACTOR, Shielding Benchmark Experiments, <http://www.oecd-nea.org/tools/abstract/detail/NEA-1517/>
- /NEU 09/ J.C. Neuber, Proposal for an UACSA benchmark study on the reactivity impacts of manufacturing tolerances of parameters characterizing a fuel assembly configuration, UACSA Report, 2009
- /NÜN 11/ K. Nünighoff, J. Li, H.-J. Allelein, 3D Pin Power Density Profiles with High Spatial Resolution in the Vicinity of a Control Blade Tip with Respect to PCI Effects in a BWR Fuel Assembly, Jahrestagung Kerntechnik 2012, Stuttgart, 22. - 24. Mai 2012
- /OECD 02/ Hiroshi Okuno et al., OECD/NEA Burnup Credit Criticality Benchmark Phase IIIB, NEA/NSC/DOC(2002)2
- /OECD 03/ Physics of Plutonium Recycling Volume VII: BWR MOX Benchmark – Specification and Results, OECD 2003
- /OECD 06/ International Evaluation Cooperation 'Nuclear Data for Improved LEU-LWR Reactivity Predictions', NEA/WPEC-22, OECD 2006

- /PAU 03/ A. Pautz, A. Birkhofer, DORT-TD: A Transient Neutron Transport Code with Fully Implicit Time Integration, Nucl. Sci. Eng., 145, S. 299–319 (2003).
- /PAU 05/ A. Pautz, Application of the discrete ordinate code DORT to fuel lattices: Benchmark results and improved cross section generation capabilities, Mathematics and Computation, Avignon, September 12-15, 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)
- /PRI 03/ R.T. Primm III., ARIANE International Programme Final Report, Fissile Materials Disposition Program, ORNL/SUB/97-XSV750-1, 2003
- /RHO 97/ W. A. Rhodes and D. B. Simpson, The TORT Three-Dimensional Discrete Ordinates Neutron/Photon Transport Code, ORNL/TM-13221, Oak Ridge National Laboratory (1997).
- /SAN 02/ C.E. Sanders, I.C. Gauld, Isotopic Analysis of High-Burnup PWR spent Fuel Samples from the Takahama-3 Reactor; ORNL/TRM-2001/259, Oak Ridge, USA, (2002)
- /SCA 06/ SCALE: A Modular Code System for Performing Standardized Computer Analysis for Licensing Evaluation, ORNL/TM-205/39, Version 5.1, Nov. 2006
- /SEU 08/ A. Seubert, K. Velkov and S. Langenbuch, The Time-Dependent 3-D Discrete Ordinates Code TORT-TD with Thermal-Hydraulic Feedback by ATHLET Models, PHYSOR 2008, Interlaken, Switzerland, September 14-19, 2008.
- /STA 83/ R. J. J. Stammler, Methods of Steady State Reactor Physics in Nuclear Design, Academic Press, London (1983)
- /VIL 92/ E. A. Villarino, R. J.J. Stammler and A. A. Ferri, HELIOS: Angular Dependent Collision Probabilities, Nuclear Science and Engineering Vol. 112, 16, (1992)

- /WAG 12/ M. Wagner, R. Kilger, A. Pautz, W. Zwermann, P.Grimm, A. Vasiliev, H. Ferroukhi, Validation of KENOREST with LWR-PROTEUS Phase II Samples, Jahrestagung Kerntechnik 2012, Stuttgart, 22. - 24. Mai 2012
- /X-5 03/ X-5 Monte Carlo Team, MCNP – A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5, LA-UR-03-1987 (2003)
- /ZWE 07/ W. Zwermann, U. Hesse, S. Langenbuch, D. Porsch, W. Bernnat, Comparison of Burnup-Calculations for a UO<sub>2</sub> PWR Fuel Assembly, Jahrestagung Kerntechnik, 23./24. Mai, Karlsruhe, 2007
- /ZWE 08/ W. Zwermann, S. Langenbuch, B.-C. Na, E. Sartori, U.-K. Wehmann, Summary of the Results of the VENUS-7 Benchmark, PHYSOR 2008, September 14-19, Interlaken, Switzerland, (2008)

## **Anhang A: Technische Notizen**

A1: Analysen zum UACSA-Benchmark mit SUnCISTT/NEWT

A2: Steuerkreuzeinsatz bei SWR-Brennelementen

## **Anhang B: Benchmark-Beiträge**

B1: HTR-Abbrand-Benchmark

B2: UACSA-Benchmark Phase II: XSUSA und TSUNAMI

B3: UACSA-Benchmark Phase II: SUnCISTT

B4: EGBUC Phase 8 Benchmark: DORTOREST

B5: EGBUC Phase 8 Benchmark: MCNP

B6: UAM PWR Burnup Pin-Cell Benchmark

## **Anhang C: Veröffentlichungen**

C1: W. Zwermann, B. Krzykacz-Hausmann, L. Gallner, A. Pautz, M. Mattes, "Uncertainty Analyses with Nuclear Covariance Data in Reactor Core Calculations", International Conference on Nuclear Data for Science and Technology 2010, Jeju, Korea, 26. - 30. April 2010

C2: A. Meier, J. Lapins, J. Bader, W. Bernnat, G. Lohnert, W. Zwermann, "Burnup Calculations for HTR Kernels and Lattices of Pebbles and Compacts", Jahrestagung Kerntechnik 2010, Berlin, 4. - 6. Mai 2010

C3: N. Martínez Francès, D. Roßbach, R. Kilger, W. Zwermann, "Comparison of Isotopic Compositions in the Frame of the NEA Depletion Calculation Benchmark Devoted to MOX Fuel Cycles", Jahrestagung Kerntechnik, Berlin, 17. - 19. Mai 2011

C4: L. Gallner, B. Krzykacz-Hausmann, A. Pautz, M. Wagner, W. Zwermann, "Influence of Nuclear Data Uncertainties on the Depletion Chain", Jahrestagung Kerntechnik, Berlin, 17. - 19. Mai 2011

- C5: L. Gallner, M. Klein, B. Krzykacz-Hausmann, A. Pautz, W. Zwermann, "Sampling-Based Nuclear Data Uncertainty Analysis in Reactor Calculations", ANS Annual Meeting, Hollywood, FL, 26. - 30. Juni 2011
- C6: L. Gallner, M. Klein, B. Krzykacz-Hausmann, A. Pautz, W. Zwermann, "Nuclear Data Uncertainty Analysis for a Fuel Assembly Criticality Benchmark", International Conference on Nuclear Criticality (ICNC 2011), Edinburgh, Schottland, 19.-22. Sep. 2011
- C7: J. Magedanz, Y. Perin, M. Avramova, A. Pautz, F. Puente-Espel, A. Seubert, A. Sureda, K. Velkov, W. Zwermann, "High-Fidelity Multiphysics Simulation of BWR Assembly with Coupled TORT-TD/CTF", PHYSOR 2012, Knoxville, TN, USA, 15. - 20. Apr. 2012
- C8: M. Wagner, R. Kilger, A. Pautz, W. Zwermann, P. Grimm, A. Vasiliev, H. Ferroukhi, "Validation of KENOREST with LWR-PROTEUS Phase II Samples", Jahrestagung Kerntechnik 2012, Stuttgart, 22. - 24. Mai 2012
- C9: V. Hannstein, M. Wagner, A. Pautz, W. Zwermann, "DORTOREST - A New Coupled Transport/Burn-Up Code System", Jahrestagung Kerntechnik 2012, Stuttgart, 22. - 24. Mai 2012



# Technische Notiz: Analysen zum UACSA-Benchmark mit SUnCISTT/NEWT

M. Kirsch

## 1 Einleitung

Im Rahmen der Berechnungen des UACSA-Benchmarks /NEU 09/ mit Hilfe des 2d deterministischen Transportcodes NEWT aus dem SCALE-Paket /SCA 09/ (eingesetzt in Version 6.0) wurden einige interessante Beobachtungen angestellt, die thematisch nicht unbedingt in den entsprechenden A-Bericht gehören. Dennoch können diese Beobachtungen für nachfolgende Anwendungen von NEWT und insbesondere in dessen Anwendung in Unsicherheitsanalysen von Bedeutung sein. Sie können bei der Wahl der Eingangsparameter (z. B. der Konvergenzkriterien) hilfreich sein und hoffentlich vermeiden, dass unüberlegte Konfigurationen wiederholt werden.

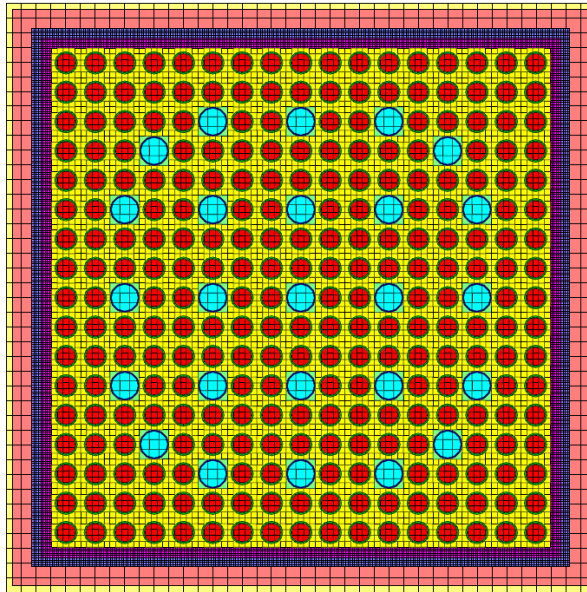
Im Rahmen des Benchmarks sollte der Neutronenmultiplikationsfaktor  $k_{\text{eff}}$  für eine Lagergestellanordnung ermittelt werden. Dabei sollten u. a. die aus Fertigungstoleranzen und technischen Größen stammenden, unsicheren Eingangsparameter des Modells variiert werden und eine Unsicherheitsanalyse der resultierenden  $k_{\text{eff}}$ -Werte durchgeführt werden.

In den folgenden Kapiteln sollen zwei Aspekte dargestellt werden. In Kapitel 2 werden Unsicherheiten betrachtet, die durch die Wahl des für die deterministische Rechnung benötigten Gitters auftreten können. Kapitel 3 beschäftigt sich mit Beobachtungen, die im Zusammenhang mit den Konvergenzkriterien stehen. Soweit möglich, werden zu den einzelnen Punkten die Beobachtungen aufgeklärt beziehungsweise Lösungsvorschläge dargestellt.

## 2 Unsicherheiten durch die Wahl des Gitters

### 2.1 Analyse des Modells anhand unterschiedlicher NEWT-Konfigurationen

Für den Fall im UACSA-Benchmark zu behandelnden Fall, in dem die Eingangsparameter unter abdeckenden, konservativen Annahmen innerhalb der jeweiligen Unsicherheiten gewählt wurden. Ein Bild des daraus resultierenden Modells ist in Abb. 2-1 dargestellt. Die entsprechende Eingabedatei ist im Anhang (Kapitel 5.1) wiedergegeben.



**Abb. 2-1: Bild des NEWT-Modells mit Gittereinteilung, erstellt unter abdeckenden, konservativen Annahmen.**

Für diese Konfiguration ergibt sich ein  $k_{\text{eff}}$ -Wert von 1,02193524 (verglichen mit einem Wert  $k_{\text{eff}} = 0,99110378$  für den Fall, dass alle Eingabewerten bei gleicher sonstiger Konfiguration auf ihren nominellen Wert gesetzt wurden). Die benutzten Wirkungsquerschnitte stammen aus der ENDF/B-VII-Datenbasis und sind in 238-Energiegruppen unterteilt.

Neben der im Anhang angegebenen Konfiguration der NEWT-Parameter wurden noch weitere sechs Konfigurationen durchgespielt und deren  $k_{\text{eff}}$ -Wert bestimmt. Für diese weiteren Konfigurationen wurden folgende Parameter variiert: die Gitterdefinition sowie die pn-Ordnung für einzelne Materialien. Ziel war es herauszufinden, wie fein man z. B. das Gitter für den Kasten aus borierterem Stahl sowie dessen pn-Ordnung wählen muss, um den Absorptionseinfluss des Bors korrekt zu berücksichtigen. Die folgenden Tabellen geben einen Überblick über die durchgeführten Variationen. Die mit Fall 1 bezeichnete Konfiguration spiegelt die Wahl der Parameter wieder, die den oben erwähnten Wert von 1,02193524 für  $k_{\text{eff}}$  erzielt hat und mit der alle Sample-Rechnungen der Unsicherheitsanalyse durchgeführt wurden.

In Tab. 2-1 werden die im Modell vorkommenden Materialnummern zusammengefasst und der Ort beschrieben, an dem sie zum Einsatz kommen.

**Tab. 2-1: Im Modell benutzte Materialnummern, die zugehörigen Materialien, sowie deren Einsatzort.**

Materialnummer	Material	Einsatz im Modell
10	Brennstoff	im Brennstab
20	Zirkoloy	Hüllrohr
21	Zirkoloy	Führungsrohr
30	Wasser	um Brennstab
31	Wasser	im Führungsrohr
32	Wasser	zwischen Brennelement und Kasten aus boriertem Stahl
33	Wasser	zwischen boriertem Stahl und Außenkante
34	Wasser	um Führungsrohr
40	borierter Stahl	innerer Kasten
50	Stahl	äußerer Kasten

Ausgehend von diesen Materialnummern ist in Tab. 2-2 die diesen Materialnummern zugeordnete pn-Ordnung in den einzelnen Konfigurationen wiedergegeben. Am meisten Augenmerk wurde darauf gelegt, die Streuung im Moderator zwischen dem äußeren Stahlkasten (33) und der Brennelement-Umrandung aus boriertem Stahl (40) möglichst genau zu beschreiben. Damit sollte die Absorption der Fluss thermischen Neutronen im Moderator und darauf folgend die Absorption im Bor beeinflusst werden.

**Tab. 2-2: pn-Ordnung der unterschiedlichen Materialien in den sieben untersuchten Fällen.**

Fall	pn-Ordnung für Material					
	10	20, 21	30, 31, 32, 34	33	40	50
1	3	1	3	3	3	1
2	3	1	3	5	3	1
3	3	1	3	5	3	1
4	3	1	3	3	3	1
5	3	1	3	3	3	1
6	3	1	3	5	5	1
7	3	1	5	5	5	1

Das NEWT-Modell umfasst insgesamt vier verschiedene Geometrie-Einheiten. Tab. 2-3 ordnet die Nummern der Geometrie-Units der im Modell dargestellten Anordnung zu.

**Tab. 2-3: Zuordnung der Geometrie-Unit auf die Einheit im Modell.**

Geometrie-Unit	Modellierte Einheit
10	Brennstab
20	Führungsrohr
30	Array von Brennstäben u. Führungsrohren. Umgeben von Wasser und boriertem Stahl
40	Unit 30 umgeben von Wasser und Stahl

Diesen Geometrien werden dann Gitter-Auflösungen zugeordnet. Diese sind in Abb. 2-1 an Hand der horizontalen und vertikalen Linien angedeutet. Durch Variation der Gitter-Parameter sollte dessen Einfluss auf den Neutronenmultiplikationsfaktor untersucht werden. Da der meiste Einfluss durch die Absorption ther-

mischer Neutronen im Bor-Stahl vermutet wurde, wurden die Variationen überwiegen in den Geometrie-Units 30 und 40 durchgeführt. Die einzelnen Konfigurationen sind in Tab. 2-4 zusammengefasst.

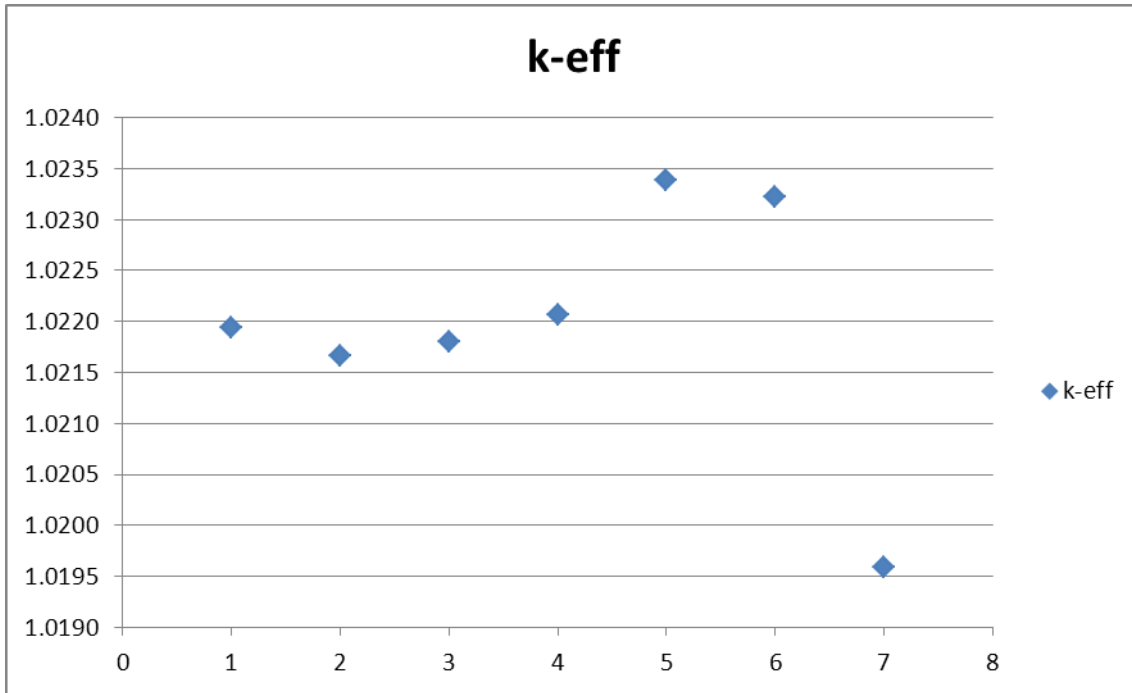
**Tab. 2-4: Einteilung des Gitters in den unterschiedlichen Geometrie-Units für die sieben betrachteten Fälle.**

Fall	Gitter-Einteilung für Geometrie-Unit			
	10	20	30	40
1	5 5	3 3	80 80	40 40
2	5 5	3 3	80 80	40 40
3	5 5	3 3	80 80	120 120
4	5 5	3 3	80 80	120 120
5	5 5	3 3	240 240	40 40
6	5 5	3 3	240 240	120 120
7	15 15	9 9	240 240	120 120

Die sich aus den soeben beschriebenen Variationen der NEWT-Parameter ergebenden Werte für den Neutronenmultiplikationsfaktor sind in Tab. 2-5 tabellarisch und in Abb. 2-2 grafisch dargestellt.

**Tab. 2-5: Resultierender Neutronenmultiplikationsfaktor für die sieben betrachteten Fälle.**

Fall	Neutronenmultiplikationsfaktor
	keff
1	1.02193524
2	1.02166472
3	1.02179615
4	1.02206734
5	1.02338019
6	1.02321881
7	1.01958928



**Abb. 2-2: Grafische Darstellung der Ergebnisse der  $k_{\text{eff}}$ -Berechnungen für die sieben betrachteten Konfigurationen.**

Es fällt auf, dass die Ergebnisse vergleichsweise großen Schwankungen unterliegen. Der Unterschied zwischen dem maximalen (Fall 5) und dem minimalen (Fall 7)  $k_{\text{eff}}$ -Wert ist  $3,8\text{E}-03$ . Es ist erstaunlich, dass das vermeintlich genaueste Modell, d. h. das Modell mit dem feinsten Gitter und der höchsten pn-Ordnung, einen mit deutlichem Abstand niedrigeren Wert für den Neutronenmultiplikationsfaktor liefert, als die anderen Fälle. Es ist herauszustreichen, dass die Schwankung der Ergebnisse der sieben unterschiedlichen Konfigurationen rein auf der Variation der NEWT-Parameter beruhen, also eine systematische Unsicherheit darstellt. Diese muss nun mit dem Resultat der Unsicherheitsanalyse verglichen werden, in deren Rahmen die technischen Parameter und die Fertigungstoleranzen innerhalb der im Benchmark spezifizierten Unsicherheiten mit den entsprechenden zu Grunde liegenden Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen variiert wurden. All diesen Rechnungen liegt die NEWT-Konfiguration zugrunde, die hier im Fall 1 wiedergegeben wurde. Die dabei resultierende Unsicherheit auf den Neutronenmultiplikationsfaktor, berechnet aus 500 Samples, ist  $6,9\text{E}-03$ . Das bedeutet, dass die durch die NEWT-Parameter bedingte, systematische Unsicherheit von derselben Größenordnung ist, wie die Unsicherheit, die dem System durch die Betrachtung der unsicheren Eingangsparameter zu Grunde liegt.

## 2.2 Fazit

Eine Beurteilung, welche der beschriebenen NEWT-Konfigurationen die „richtige“ ist, ist nicht möglich. Möglich jedoch ist ein Vergleich zu einer Rechnung mit KENO Va, in der die gleiche Materialbeschreibung und Geometrie verwendet wurde. Als Wirkungsquerschnitte wurden die Punktdaten aus der ENDF/B-VII-Basis genommen. Das so durchgeführte Rechnung lieferte einen  $k_{\text{eff}}$ -Wert von 1,024338 bei einer statistischen Unsicherheit der Monte Carlo-Rechnung von  $4,9\text{E}-05$ . Die Ergebnisse der Fälle eins bis sechs lie-

gen somit näher am Monte Carlo-Ergebnis als das Ergebnis des Falls sieben, welches die feinste Gittereinteilung und die höchste pn-Ordnung hatte.

Es ist somit zu empfehlen vor Beginn einer Unsicherheitsanalyse die Auswirkungen der pn-Ordnung und der Gittereinteilung am Nominalfall zu untersuchen und Kriterien zu suchen, mit deren Hilfe ein sinnvoller Satz an Parametern identifiziert werden kann. Um die Vergleichbarkeit der Einzelergebnisse innerhalb einer Unsicherheitsanalyse zu gewährleisten, muss dieser Parametersatz im Rahmen der Untersuchungen unverändert bleiben.

### **3 Beobachtungen Konvergenzkriterien und Eingangsparametern in Resultaten von Unsicherheitsanalysen**

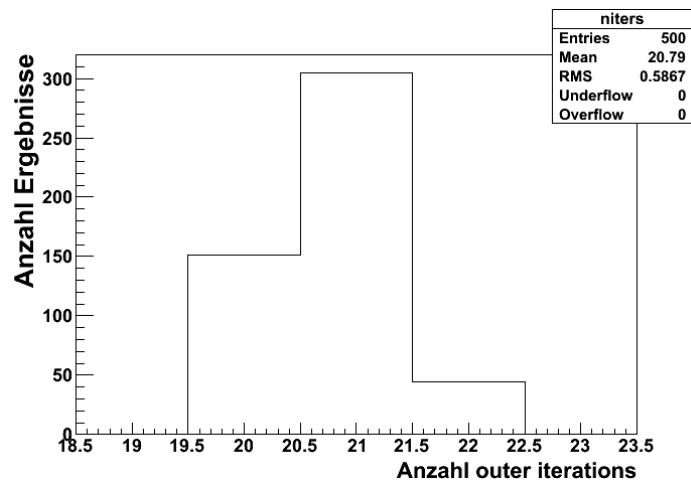
#### **3.1 Analyse der Konvergenzparameter aus der Unsicherheitsanalyse**

SUnCISTT bietet eine Anbindung der Eingangsparameter und der Resultate an die Visualisierungsmöglichkeiten des ROOT-Toolkits /BRU 97/. Damit bieten sich Möglichkeiten der Darstellung der Analyseergebnisse, die über die von SUSA bereitgestellten Werkzeuge hinausgehen. In der SUnCISTT-Anwendung mit NEWT werden zusätzlich zum Neutronenmultiplikationsfaktor  $k_{\text{eff}}$  auch Informationen über die erzielten Werte der Konvergenzparameter im ROOT-TTtree abgespeichert. Die Analyse dieser Parameter würde es z. B. ermöglichen, systematische Probleme der Rechenmethode zu identifizieren.

In der Template-Datei, welche den Einzelrechnungen zu Grunde lag, wurden keine besonderen Konvergenzkriterien gewählt, sodass die Rechnungen mit den NEWT-Standard-Werten durchgeführt wurden. Um Konvergenz zu erreichen müssen daher die folgenden Bedingungen zwei Mal in Folge erfüllt werden:

- $\Delta k_{\text{eff}}$ :  
Der Unterschied in  $k_{\text{eff}}$  zwischen zwei aufeinanderfolgenden, äußeren Iterationen muss kleiner sein als  $1,0\text{E-}04$ .
- $\Delta \text{Neutronenfluss(gesamt)}$ :  
Der maximale Unterschied des Neutronenflusses über alle Energiegruppen und alle Zellen des Modells zwischen zwei aufeinanderfolgenden, äußeren Iterationen muss kleiner sein als  $1,0\text{E-}04$ .
- $\Delta \text{Neutronenfluss(Brennstoff)}$ :  
Analog zu  $\Delta \text{Neutronenfluss(gesamt)}$ , jedoch lediglich auf die Zellen des Systems bezogen, in denen sich spaltbares Material befindet.

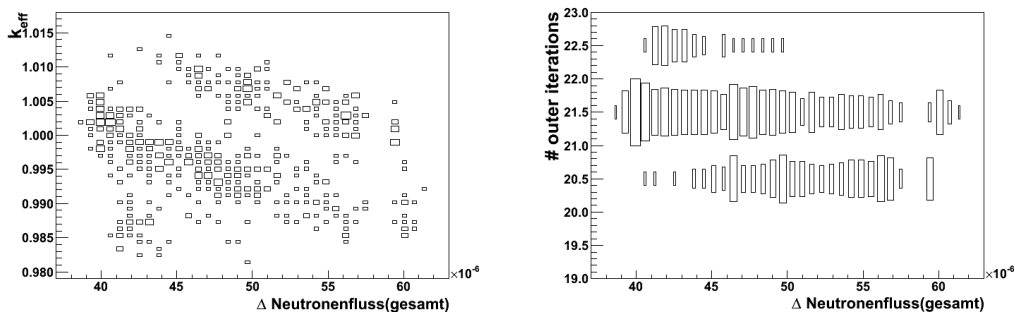
Als erster Konvergenzparameter wurde die Anzahl der bis zur Konvergenz benötigten äußeren Iterationen ausgewertet. Abb. 3-1 zeigt die Häufigkeitsverteilung für die 500 berechneten Samples.



**Abb. 3-1:** Häufigkeitsverteilung der bis zur Konvergenz benötigten Iterationen.

Die meisten Samples konvergierten nach 21 äußeren Iterationen. Es gab aber auch Anteile an Samples, die bereits nach 20 oder aber erst nach 21 äußeren Iterationen konvergiert waren. Im Mittel wurden 20,79 äußere Iterationen benötigt, um alle Konvergenzkriterien zu erfüllen. Dass die unterschiedlichen Modelle eine unterschiedliche Anzahl an Iterationen benötigen um zu konvergieren, ist erst einmal nicht ungewöhnlich. Auf Grund der Ähnlichkeiten der einzelnen Modelle zueinander, wurden jedoch die anderen Konvergenzkriterien noch weiter untersucht.

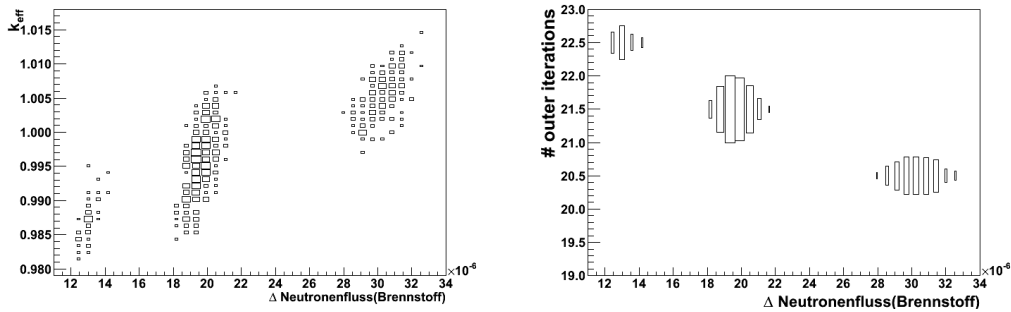
Das Kriterium  $\Delta$ Neutronenfluss(gesamt) zeigt, wie in Abb. 3-2 dargestellt, eine leichte Abhängigkeit von der Anzahl der benötigten Iterationen. Auch im Vergleich mit  $k_{eff}$  sind schwache Korrelationen zu erkennen.



**Abb. 3-2:** Zusammenhang zwischen dem Konvergenzkriterium  $\Delta$ Neutronenfluss(gesamt) und dem Neutronenmultiplikationsfaktor  $k_{eff}$  (links) sowie der Anzahl der äußeren Iterationen (rechts).

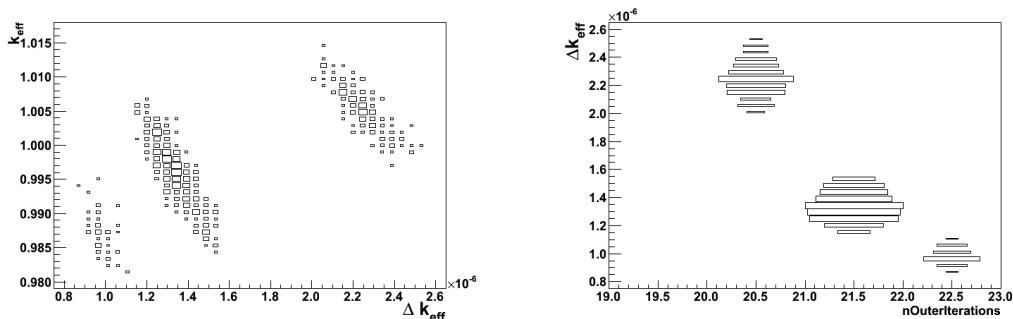
Stärkere Abhängigkeiten sind bei der Betrachtung der Konvergenz des Neutronenflusses in brennstoffhaltigen Regionen zu beobachten (siehe Abb. 3-3). Hier erkennt man, dass sich mit zunehmender Anzahl von Iterationen die Konvergenz verbessert. Dies ist zu erwarten. Man erkennt jedoch auch, dass es eine solche Einzelrechnungen, bei denen der Neutronenfluss weiter konvergiert ist, zu tendenziell niedrigeren Resultaten für  $k_{eff}$  führen. Ist die Konvergenz nicht ganz so gut, so ergeben sich eher höhere Werte für den Neutronenmultiplikationsfaktor. Dies könnte als Zeichen interpretiert werden, dass für 20 äußere Iterationen die Quelle noch nicht auskonvergiert ist. Bei besserer Konvergenz, wie sie nach 22 Iterationen erzielt

wird, konvergiert die Transportrechnung möglicherweise einen anderen Extremwert, der in Folge zu einem anderen  $k_{\text{eff}}$ -Wert führt.



**Abb. 3-3:** Zusammenhang zwischen dem Konvergenzkriterium  $\Delta$ Neutronenfluss(Brennstoff) und dem Neutronenmultiplikationsfaktor  $k_{\text{eff}}$  (links) sowie der Anzahl der äußeren Iterationen (rechts).

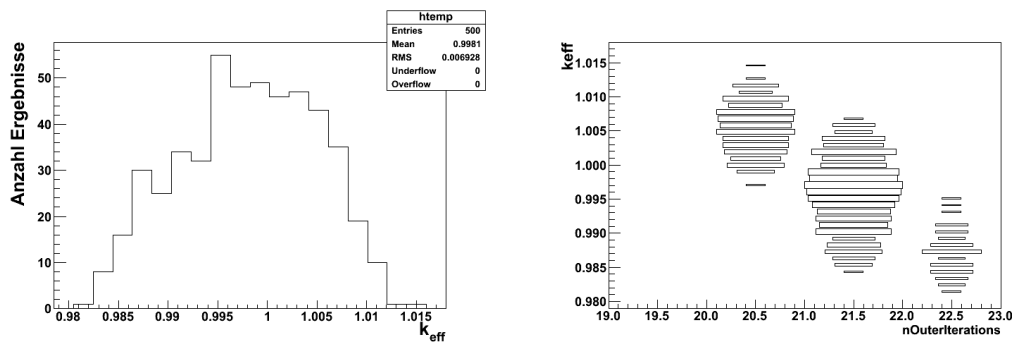
Die Feststellungen, wie sie für das Konvergenzkriterium  $\Delta$ Neutronenfluss(Brennstoff) getroffen wurden, können ähnlich auf für das Kriterium  $\Delta k_{\text{eff}}$  in Abb. 3-4 übernommen werden. Auch hier erkennt man wie zu erwarten mit zunehmender Anzahl von äußeren Iterationen eine verbesserte Konvergenz. Je besser die Konvergenz  $\Delta k_{\text{eff}}$  ist, umso geringer fallen die Werte für  $k_{\text{eff}}$  selbst aus. Es verwundert, dass die Unterschiede in  $k_{\text{eff}}$  je nach erreichter Konvergenz in der Größenordnung von 1% liegen, während die Unterschiede in  $\Delta k_{\text{eff}}$  selbst bereits bis zur Größenordnung  $1,0\text{E}-06$  fortgeschritten sind.



**Abb. 3-4:** Zusammenhang zwischen dem Konvergenzkriterium  $\Delta k_{\text{eff}}$  und dem Neutronenmultiplikationsfaktor  $k_{\text{eff}}$  (links) sowie der Anzahl der äußeren Iterationen (rechts).

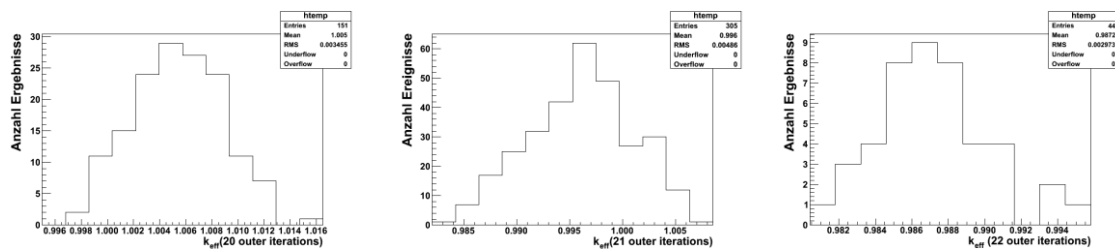
Die Häufigkeitsverteilung aller erzielten  $k_{\text{eff}}$ -Werte ist in Abb. 3-5 aufgetragen. Sie zeigt keinerlei Unregelmäßigkeiten, liefert einen Mittelwert für  $k_{\text{eff}}$  von 0,9981 bei einer Breite von  $6,9\text{E}-03$ . Trägt man nun  $k_{\text{eff}}$  gegen die Anzahl an äußeren Iterationen auf, so erkennt man, dass mit wachsender Anzahl von Iterationen  $k_{\text{eff}}$  selbst kleiner wird. Dies lässt erneut den Schluss zu, dass je nach Anzahl der äußeren Iterationen der Transportcode zu unterschiedlichen Extrempunkten konvergiert. Für eine Unsicherheitsanalyse ist dieser Zustand nicht tragbar: das Ergebnis darf nicht davon abhängen, ob eine äußere Iteration mehr oder weniger durchgeführt wurde.





**Abb. 3-5:** Häufigkeitsverteilung der  $k_{\text{eff}}$ -Resultate der 500 Einzelrechnungen (links) sowie deren Verteilung bezogen auf die Anzahl der äußeren Iterationen (rechts).

Die Häufigkeitsverteilungen des Neutronenmultiplikationsfaktors aufgeteilt nach Anzahl der Iterationen sind in Abb. 3-6 wiedergegeben. Man erkennt, dass die Mittelwerte der Verteilungen mit steigender Anzahl an Iterationen kleiner werden und auch die Breiten der Verteilungen sich verändern. Der Großteil der Einzelrechnungen, über 60%, benötigen 21 Iterationen, etwas weniger als 1/3 der Einzelrechnungen 20 Iterationen und die restlichen 44 Rechnungen waren nach 22 Iterationen beendet.

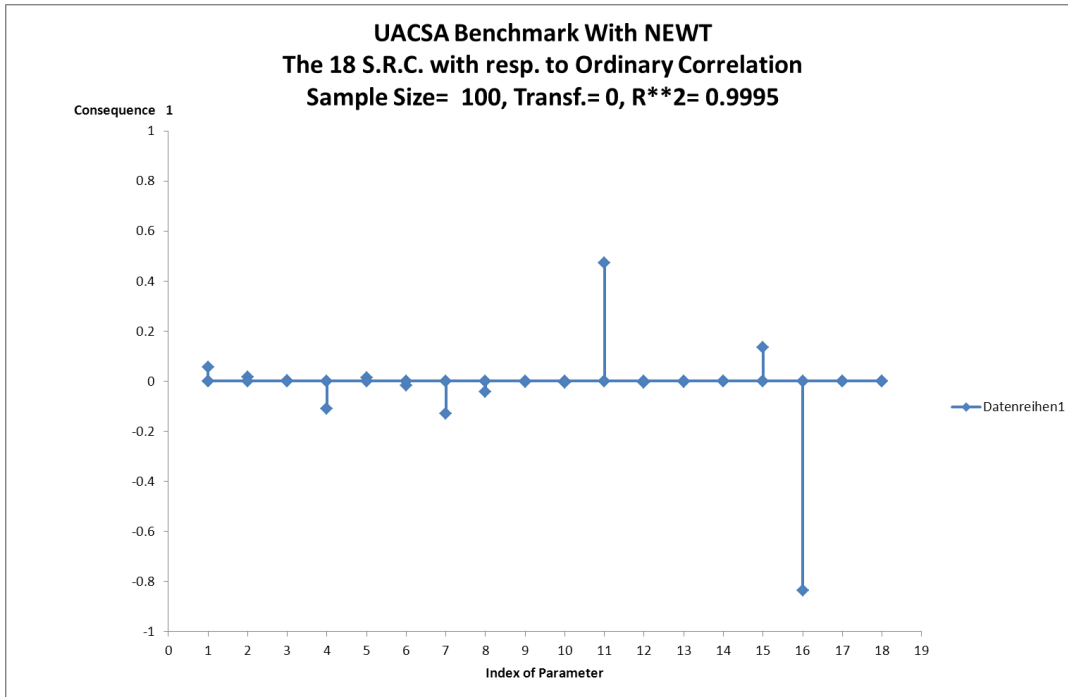


**Abb. 3-6:** Häufigkeitsverteilung der  $k_{\text{eff}}$ -Werte für die Samples in denen 20 (links), 21 (Mitte) bzw. 22 äußere Iterationen (rechts) benötigt wurden, um Konvergenz zu erreichen.

Die hier beobachteten Abhängigkeiten von der Anzahl der Iterationen und den Konvergenzkriterien würden ohne weitere Betrachtungen dazu führen, dass man dem Ergebnis einen durch die Rechenmethode bedingten, systematischen Fehler von etwa 1% zuschreiben müsste. Dieser würde im Vergleich mit der in der Unsicherheitsanalyse Unsicherheit auf Grund der Variation technischer Parameter erzielten von etwa  $7,0E-03$  dominieren und das Ergebnis der Unsicherheitsanalyse hinfällig werden lassen.

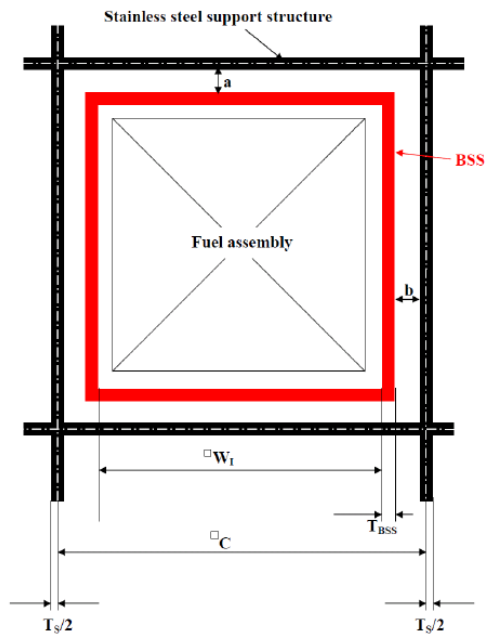
### 3.2 Erklärung der Befunde

Durch gemeinsame Analyse der Ergebnisse von  $k_{\text{eff}}$ , der Konvergenzkriterien sowie der variierten Eingangsparameter, lassen sich die beschriebenen Merkmale letztlich doch erklären. Hierfür wurden die Ergebnisse aus der mit SUSA durchgeführten Sensitivitätsanalyse herangezogen. Diese sind in Abb. 3-7 dargestellt. Die in SUSA variierten Eingangsparameter sind hier durchnummeriert dargestellt. Der Parameter, dessen Unsicherheit am meisten zur Gesamtunsicherheit des Systems beiträgt ist mit der Nummer 16 gekennzeichnet.



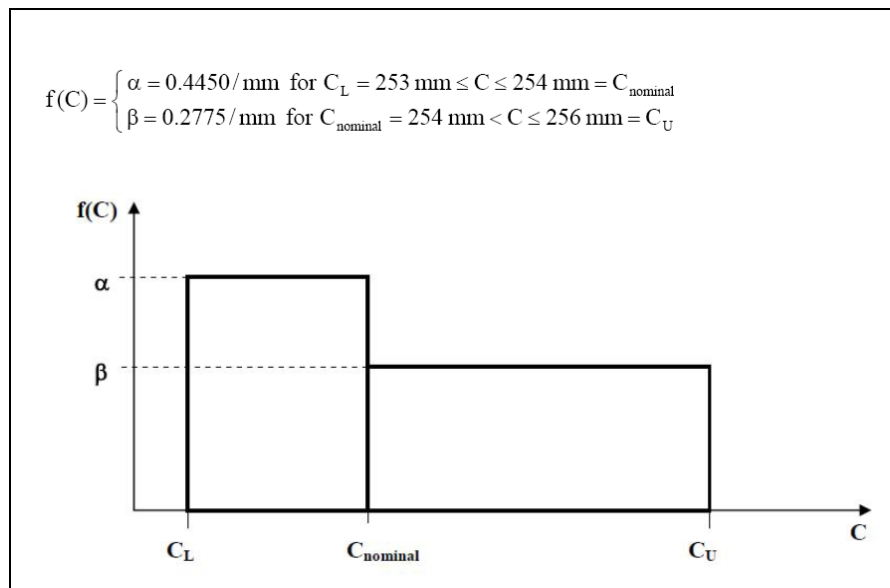
**Abb. 3-7:** SUS A-Ergebnis der Sensitivitätsanalyse für die 18 in SUS A modellierten, unsicheren Eingangparameter.

In Abb. 3-8 ist die im UACSA-Benchmark zu modellierende Lagergestellanordnung vereinfacht grafisch dargestellt. Darüberhinaus sind die für die Unsicherheitsanalyse zu variierenden Eingangparameter angedeutet. Der Parameter, dem in SUS A die Nummer 16 zugeordnet ist, entspricht in dieser Grafik der Eintrag „C“. Es handelt sich um die Gesamtbreite des Lagergestells.



**Abb. 3-8:** Im UACSA-Benchmark vorgegebene Lagergestellanordnung mit zentralen Brennelementen, einem Kasten aus boriiertem Stahl (rot) und einem umgebendem Kasten aus Stahl (schwarz). Die zu variierenden Parameter sind angedeutet.

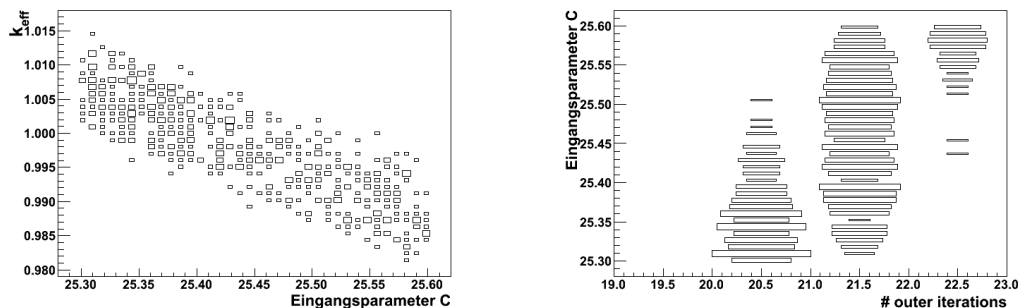
Der Variation des Parameters C liegt ein Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion zu Grunde, die durch das Histogramm und die Formel in Abb. 3-9 beschrieben wird.



**Abb. 3-9:** Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung des Parameters C aus dem UACSA-Benchmark-Modell.

Betrachtet man die Abhängigkeit von  $k_{\text{eff}}$  von diesem Eingangsparameter C (Abb. 3-10, links) so ist eine deutliche Korrelation zu erkennen. Je breiter das Lagergestell ist, desto geringer fällt der  $k_{\text{eff}}$ -Wert aus. Neutronenphysikalisch lässt sich dieses Bild damit erklären, dass durch eine Verbreiterung des Lagergestells mehr Wasser zwischen Stahl und Borstahl vorhanden ist. Diese zusätzliche Moderation erhöht den thermischen Anteil der Neutronen und somit deren Absorption im Borstahl. Daraus resultiert ein geringerer Wert für  $k_{\text{eff}}$ .

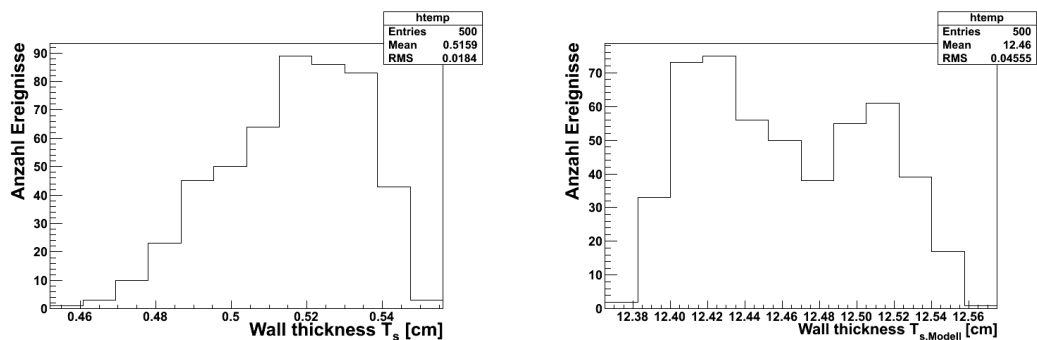
Im rechten Schaubild in Abb. 3-10 ist die Abhängigkeit des Parameters C von der Anzahl der äußeren Iterationen aufgetragen. Es ist zu erkennen, dass mit zunehmendem Wert für C die Anzahl der zur Konvergenz benötigten Iterationen ansteigt.



**Abb. 3-10:** Abhängigkeit des Neutronenmultiplikationsfaktors vom variierten Eingangsparameter C sowie dessen Abhängigkeit von der Anzahl der äußeren Iterationen.

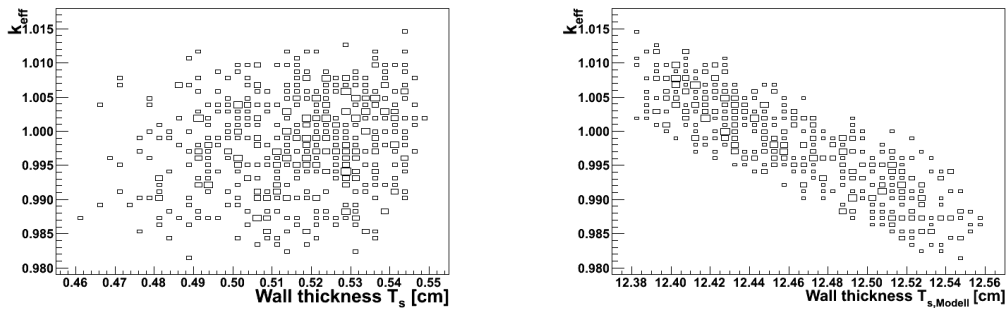
Bei den unterschiedlichen beobachteten  $k_{\text{eff}}$ -Werte in Abhängigkeit der Anzahl der äußeren Iterationen handelt es sich also nicht um eine systematische Unsicherheit von NEWT. Sondern der deterministische Code benötigt in Abhängigkeit der Größe des Modells mehr Iterationen um die vorgegebenen Konvergenzkriterien zu erfüllen. Durch die Vergrößerung des Modells und das dabei zusätzlich vorhandene Wasser lässt sich die Abhängigkeit von  $k_{\text{eff}}$  von der Anzahl der Iterationen begründen. Welchen Anteil an den zusätzlichen Iterationen die reinen geometrischen Größenunterschiede des Modells, verbunden mit den damit leicht unterschiedlich großen Zellendimensionen, in denen NEWT den Neutronenfluss berechnet, im Vergleich zu dem moderierenden Einfluss des Wassers hat, lässt sich an dieser Stelle nicht abschätzen.

Man kann jedoch versuchen, den Einfluss des Wassers selbst noch besser zu bestimmen, indem man den in Parameter C vorhandenen Einfluss des Stahls herausrechnet. Ermöglicht wird dies durch die Art, wie der in Abb. 3-8 mit  $T_s$  benannte Parameter, der die Breite des Stahlgestells angibt, modelliert wurde. Dieser Parameter entspricht der Nummer 15 in Abb. 3-7, und gehört somit zu den sensitiveren Parametern. Eine Verteilung der in der Analyse eingesetzten Werte für diesen mit einer Beta(2,4)-Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion auf dem Intervall  $(5,0 \pm 0,5)$  mm definierten Parameter ist in Abb. 3-11 links dargestellt. In der Modellierung des NEWT-Rechenmodells findet der Parameter  $T_s$  nicht direkt Anwendung. Stattdessen wird er umgewandelt in einen Parameter, der die Innenbreite des Stahlkastens angibt. Dank SUnCISTT hat man Zugriff auf diese errechneten Werte. Dieser resultierende Wert ist in Abb. 3-11 (rechts) dargestellt.



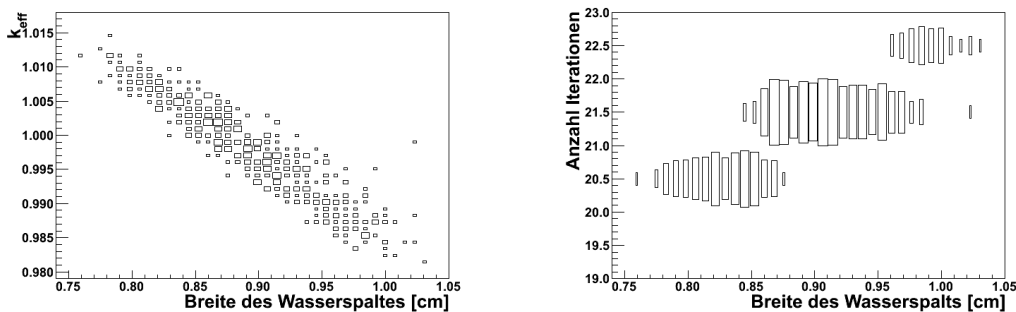
**Abb. 3-11: Gewürfelte Werte der Wandstärke  $T_s$  (links), sowie die letztlich nach Umrechnungen im NEWT-Modell eingesetzten Werte (rechts).**

Dieser im Modell umgesetzte Parameter enthält im Gegensatz zum bisher betrachteten Parameter C keine Einflüsse des umgebenden, äußeren Stahlkastens. Während der ursprüngliche Parameter  $T_s$  keine Korrelation mit  $k_{\text{eff}}$  aufweist (Abb. 3-12, links), ist in Abb. 3-12 rechts für den im Modell umgesetzten Parameter, eine deutliche Korrelation zu sehen.



**Abb. 3-12:** Abhängigkeit von  $k_{\text{eff}}$  bezüglich des ursprünglichen (links) und des im Modell umgesetzten Parameters (rechts)  $T_s$ .

Durch geschickte Kombination der variierten und der daraus resultierenden, modellierten Parameter ist es sogar möglich die Breite des Wasserspals zwischen dem Kasten aus borierter Stahl und dem umgebenden Stahlkasten zu berechnen. Die Abhängigkeiten von  $k_{\text{eff}}$  sowie der Anzahl der äußeren Iterationen von der Breite dieses Wasserspals ist in Abb. 3-13 wiedergegeben.



**Abb. 3-13:** Abhängigkeit von  $k_{\text{eff}}$  (links) sowie der Anzahl der äußeren Iterationen (rechts) von der Breite des Wasserspals zwischen den beiden Stahlkästen.

Mit diesen Abbildungen sind die ursprünglich entdeckten Auffälligkeiten endgültig erklärt und die bisher vermuteten Erkenntnisse bestätigt. Der zusätzliche Moderator führt in den Modellen mit größerem Wasserspalt zu einer Zunahme des thermischen Flusses und somit zu einer vermehrten Absorption der Neutronen im Bor des Borstahls. Daraus resultiert der beobachtete, kleinere Wert für  $k_{\text{eff}}$ .

### 3.3 Offene Frage/Denkanstöße

Die hier präsentierte Analyse hinterlässt eine derzeit noch offene Frage: Welchen Einfluss haben die reinen Größenunterschiede des Modells? Wie sollen die NEWT-Konvergenzparameter im Rahmen einer Unsicherheitsanalyse gewählt werden?

Der den Konvergenzparametern entsprechende Parameter in Monte Carlo basierten Rechnungen (z. B. mit der CSAS5-Sequenz und KENO aus dem SCALE-Paket) ist die, durch die berechneten Neutronengeschichten erzielte, statistische Unsicherheit des Neutronenmultiplikationsfaktors  $k_{\text{eff}}$ . Die Rechnungen können bei Erreichen dieser Rechengenauigkeit abgebrochen werden. Somit wird sichergestellt, dass alle

Einzelrechnungen der Unsicherheitsanalyse bis zu einem vergleichbaren Rechenfortschritt gelangt sind. Bei den hier behandelten NEWT-Rechnungen müssen dagegen drei Konvergenzkriterien gleichzeitig erfüllt sein:  $\Delta k_{\text{eff}}$ ,  $\Delta \text{Neutronenfluss(gesamt)}$  und  $\Delta \text{Neutronenfluss(Brennstoff)}$ . Diese notwendige Gleichzeitigkeit kann dazu führen, dass je nach zu analysierendem System und in Abhängigkeit der Modellierung, die einzelnen Konvergenzkriterien unterschiedlich gut erfüllt werden. In diesem Beispiel wurde beobachtet, dass die Konvergenz von  $k_{\text{eff}}$   $\Delta k_{\text{eff}}$  um bis zu zwei Größenordnungen weiter vorangeschritten war, als in der Eingabedatei spezifiziert.

Es sind zwei Möglichkeiten denkbar, wie mit dieser Situation umzugehen ist. Diese sollten vor einer erneuten Unsicherheitsanalyse mit NEWT ausprobiert und die Ergebnisse miteinander verglichen werden. Im ersten Szenario liegt das Augenmerk auf einer gleichmäßigen Konvergenz von  $k_{\text{eff}}$ . Dafür werden die Konvergenzparameter, die auf den Neutronenfluss abzielen, groß gewählt gegenüber  $\Delta k_{\text{eff}}$ . Somit wird, ähnlich wie bei den Monte Carlo-Rechnungen, gewährleistet, dass alle Rechnungen bei einer ähnlichen Konvergenz für  $k_{\text{eff}}$  abgebrochen werden. Im zweiten Szenario wird genau der umgekehrte Weg bestritten: man wählt ein schwaches Konvergenzkriterium für  $k_{\text{eff}}$  und sehr starke, den Neutronenfluss betreffende Kriterien. Dadurch soll erreicht werden, dass die der  $k_{\text{eff}}$ -Berechnung zu Grunde liegende Transportrechnung mit einer hohen Genauigkeit konvergiert ist und lokale, die Konvergenz beeinträchtigende Effekte vernachlässigt werden können.

Die hier beschriebene Analyse zeigt, dass neben der Wahl der Konvergenzparameter auch noch ein weiterer Punkt zu beachten ist, um zu einem tieferen Verständnis der Ergebnisse zu gelangen. Sowohl die erzielten Resultate der Einzelrechnungen als auch die zum Abbruch der Rechnung geführten Konvergenzwerte müssen im Licht der Variablen Eingangparameter betrachtet werden. Nur so können Beobachtungen wie z. B. die beobachteten Korrelationen zwischen der Anzahl der äußeren Iterationen und  $k_{\text{eff}}$  richtig interpretiert werden. Ein Verzicht dieser zusätzlichen Analysen kann zu Fehlinterpretationen und zu einer Überschätzung der systematischen Unsicherheiten führen.

## 4 Literaturverzeichnis

- /BRU 97/ Rene Brun and Fons Rademakers, ROOT - An Object Oriented Data Analysis Framework, Proceedings AIHENP'96 Workshop, Lausanne, Sep. 1996, Nucl. Inst. & Meth. in Phys. Res. A 389 (1997) 81-86. See also <http://root.cern.ch/>
- /SCA 09/ SCALE: A Modular Code System for Performing Standardized Computer Analyses for Licensing Evaluations, ORNL/TM-2005/39, Version 6, Vols. I-III, January 2009. Available from Radiation Safety Information Computational Center at Oak Ridge National Laboratory as CCC-750
- /NEU 10/ J.C. Neuber, Proposal for an UACSA benchmark study on the reactivity impacts of manufacturing tolerances of parameters characterizing a fuel assembly configuration, AREVA NP GmbH

## 5 Anhang

### 5.1 NEWT-Eingabedatei für konservativ, abdeckende Annahmen

```
"Input generated by GeeWiz SCALE 6.0.13.04 Compiled on January 4, 2010
'batch_args \-x\-m\-\u
=t-newt parm=(centrm)
uacsa benchmark study 238v7
v7-238
read composition
uo2 10 den=10.775 1 293.15
    92235 4
    92238 96 end
zr 20 den=6.56 1 293.15
    40090 50.70612
    40091 11.18089
    40092 17.2781
    40094 17.8911
    40096 2.943789 end
zr 21 den=6.56 1 293.15
    40090 50.70612
    40091 11.18089
    40092 17.2781
    40094 17.8911
    40096 2.943789 end
h2o 30 1 293.15 end
h2o 31 1 293.15 end
h2o 32 1 293.15 end
h2o 33 1 293.15 end
h2o 34 1 293.15 end
cr 40 den=7.6611 0.17712 293.15
    24050 4.173687
    24052 83.69936
    24053 9.673587
    24054 2.453364 end
ni 40 den=7.6611 0.0984 293.15
    28058 67.19771
    28060 26.77596
    28061 1.183359
    28062 3.834822
    28064 1.00815 end
fe 40 den=7.6611 0.70848 293.15
    26054 5.645558
    26056 91.90153
    26057 2.160369
    26058 0.2925444 end
b 40 den=7.6611 0.016 293.15
    5010 17.77115
    5011 82.22885 end
cr 50 den=7.9 0.18 293.15
    24050 4.173687
    24052 83.69936
    24053 9.673587
    24054 2.453364 end
ni 50 den=7.9 0.1 293.15
    28058 67.19771
    28060 26.77596
    28061 1.183359
    28062 3.834822
    28064 1.00815 end
fe 50 den=7.9 0.72 293.15
    26054 5.645558
    26056 91.90153
```



```

26057 2.160369
26058 0.2925444 end
end composition
read celldata
latticecell squarepitch fuelr=0.4105 10 gapr=0.4205 0 cladr=0.4725 20 hpitch=0.63 30 end
end celldata
read model
read parameter
drawit=yes
echo=yes
inners=20
outers=500
prtflux=yes
prtmxtab=no
sn=8
timed=yes
end parameter
read materials
mix=10 pn=3 com='uo2' end
mix=20 pn=1 com='zr' end
mix=21 pn=1 com='zr' end
mix=30 pn=3 com='wasser' end
mix=31 pn=3 com='wasser' end
mix=32 pn=3 com='wasser' end
mix=33 pn=3 com='wasser' end
mix=34 pn=3 com='wasser' end
mix=40 pn=3 com='bss' end
mix=50 pn=1 com='ss' end
end materials
read geometry
unit 10
com='fuel rod'
cylinder 1 0.4105
cylinder 2 0.4205
cylinder 3 0.4725
cuboid 4 0.63 -0.63 0.63 -0.63
media 10 1 1
media 0 1 2 -1
media 20 1 3 -2 -1
media 30 1 4 -3 -2 -1
boundary 4 5 5
unit 20
com='instrumentation'
cylinder 1 0.5675
cylinder 2 0.6095
cuboid 3 0.63 -0.63 0.63 -0.63
media 31 1 1
media 21 1 2 -1
media 34 1 3 -2 -1
boundary 3 3 3
unit 30
com='unit holding array of fuel rods/guide thimbles/instrumentation tube'
cuboid 1 10.71 -10.71 10.71 -10.71
array 10 1 place 1 1 -10.08 -10.08
cuboid 2 11.15 -11.15 11.15 -11.15
cuboid 3 11.55 -11.55 11.55 -11.55
media 32 1 2 -1
media 40 1 3 -2 -1
boundary 3 80 80
global unit 40
com='outside/global unit'
cuboid 1 12.375 -12.375 12.375 -12.375
hole 30 origin x=-0.005 y=0.0
cuboid 2 12.65 -12.65 12.65 -12.65
media 33 1 1
media 50 1 2 -1
boundary 2 40 40

```

```

end geometry
read array
ara=10 nux=17 nuy=17 pinpow=no
com='array of fuel rods, guide thimbles and instrumentation tubes'
fill
10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10
10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10
10 10 10 10 10 20 10 10 20 10 10 20 10 10 10 10
10 10 10 20 10 10 10 10 10 10 10 10 20 10 10 10
10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10
10 10 20 10 10 20 10 10 20 10 10 20 10 10 20 10
10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10
10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10
10 10 20 10 10 20 10 10 20 10 10 20 10 10 20 10
10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10
10 10 10 20 10 10 10 10 10 10 10 10 20 10 10 10
10 10 10 10 10 20 10 10 20 10 10 20 10 10 10 10
10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10
10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 10 end fill
end array
read bnds
  all=mirror
end bnds
end model
end

```



93 93 93 93 93 93 93 93  
 92 93 93 93 93 93 93 92  
 91 92 93 93 93 93 92 91

Mit den Nummerierungen 91, 92 und 93 werden die drei unterschiedlichen Brennstoffstäbe und mit der 99 der Wasserkanal erfasst. Die Brennstäbe weisen dabei Anfangsanreicherungen von 3,06 % (Stabtyp 91), 3,80 % (Stabtyp 92) und 4,12 % (Stabtyp 93) auf. In allen Fällen bezeichnen gleiche Nummern Stäbe, die während der Abbrandrechnung identisch behandelt und mit einem gemäß ihrer Positionen gemitteltem Spektrum abgebrannt werden.

**Tab. 2-1: Verwendete Brennelementdaten.**

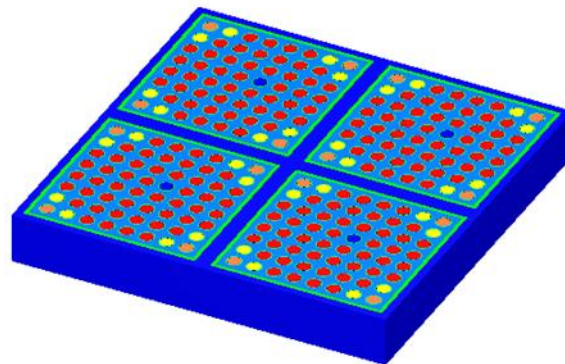
Pelletdurchmesser / cm	1,058
Hüllrohrinnendurchmesser / cm	1,08
Hüllrohraußendurchmesser /cm	1,25
Brennstabmittenabstand / cm	1,625
Anreicherung U235	4,12% (Eckstäbe 3,06% bzw. 3,80%)
Hüllrohrmaterial	Zircoly-4
Wasserstabinnendurchmesser / cm	1,08
Wasserstabaußendurchmesser /cm	1,25
Brennelementkastenseitenlänge / cm	14,0
Brennelementkastendicke / cm	0,3
Brennelementmittenabstand / cm	15,25

Mit diesem Brennelementtyp werden drei unterschiedliche Modelle aufgebaut. Das erste Modell stellt einen Quadranten eines 4x4-Brennelementbündels ohne Steuerkreuz (Abb. 2-1) dar und wird zur Inventarbestimmung bei gegebenem Abbrand herangezogen. Das zweite Modell gibt einen Quadranten eines 4x4-Brennelementbündels mit Steuerkreuz wieder (Abb. 2-2) und das dritte Modell beschreibt den Quadranten eines 2x2-Brennelementbündels mit Steuerkreuz (Abb. 2-3). Alle drei Modelle weisen eine axiale Höhe von 4 cm und allseitig reflektive Randbedingungen auf.

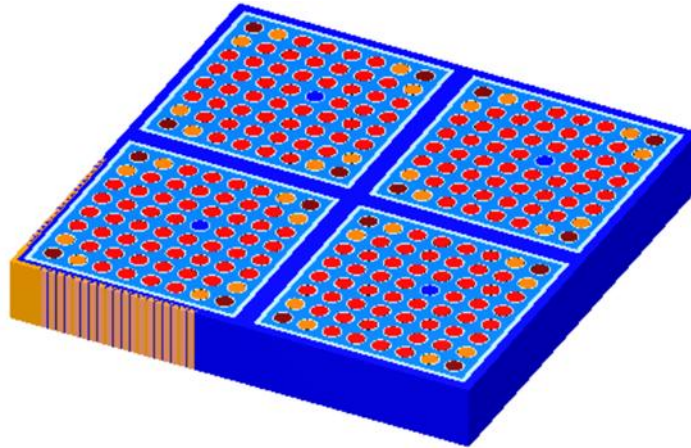
Das Steuerkreuz wird aus Stahlröhrchen in axialer Richtung mit Borcarbid-Füllung, die von einem Stahlblech eingefasst sind, modelliert. Die wesentlichen Daten sind in Tab. 2-2 aufgeführt.

**Tab. 2-2: Verwendete Steuerkreuzdaten.**

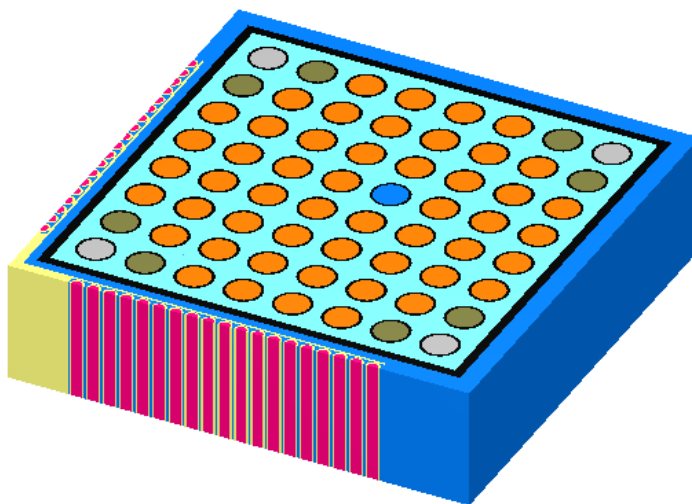
Innendurchmesser Borcarbid-Röhrchen / cm	0,3505
Außendurchmesser Borcarbid-Röhrchen / cm	0,4775
Borcarbiddichte / g/cm <sup>3</sup>	1,759
Stahlblechdicke / cm	0,08
Steuerkreuzblattdicke /cm	0,66



**Abb. 2-1: Geometrisches Modell für den Quadranten des 4x4-Brennelementbündels ohne Steuerkreuz.**



**Abb. 2-2: Geometrisches Modell für den Quadranten des 4x4-Brennelementbündels mit Steuerkreuz (unten links, gelb).**



**Abb. 2-3: Geometrisches Modell für den Quadranten des 2x2-Brennelementbündels mit Steuerkreuz (Außenflächen links und unten; gelb Stahl, rot Borcarbid).**

## 2.2 Abbrandrechnungen

Mit dem Modell des 4x4-Brennelementbündels ohne Steuerkreuz wurden Rechnungen für Abbrände zwischen 24 und 40 GWd/tSM durchgeführt. Dabei wird eine generische

Leistungsgeschichte aus 3 bzw. 4 Zyklen mit jeweils konstant gehaltener mittlerer Leistung unterstellt, wobei der Endabbrand von der Länge des jeweilig letzten Zyklus bestimmt wird. Als 100% Leistung wird 40 MW/t<sub>SM</sub> angenommen. Die einzelnen Zyklen besitzen folgende Parameter:

1. Zyklus: 50% Leistung für 300 Tage, 60 Tage Stillstandszeit,
2. Zyklus: 100% Leistung für 300 Tage, 60 Tage Stillstandszeit,
3. Zyklus: 100% Leistung mit Bestrahlungszeiten zwischen 150 Tagen (Endabbrand 24 GWd/t<sub>SM</sub>) und 300 Tagen (Endabbrand 30 GWd/t<sub>SM</sub>),
4. Zyklus: 100% Leistung mit Bestrahlungszeiten zwischen 50 Tagen (Endabbrand 32 GWd/t<sub>SM</sub>) und 250 Tagen (Endabbrand 40 GWd/t<sub>SM</sub>).

Die Leistung wurde als mittlere Leistung über alle Materialien angegeben, wobei die Leistungsanteile für die einzelnen Materialien entsprechend der Neutronenflussverteilung gewichtet wurden.

## **2.3 Kritikalitätsrechnungen**

Mit den in den Abbrandrechnungen ermittelten Nuklidinventaren der drei unterschiedlichen Stabtypen wurden Kritikalitätsrechnungen mit allen oben beschriebenen Modellen (4x4-Brennelementbündel mit und ohne Steuerkreuz, 2x2-Brennelementbündel mit Steuerkreuz) durchgeführt. Die Resultate dieser Rechnungen sind in der Abb. 3-1 und in der Tab. 3-1 dargestellt bzw. aufgelistet.

## **2.4 Durchführung der Rechnungen**

Die Berechnungen wurden mit den Programmsequenzen TRITON (Abbrand) und CSAS5 (Kritikalität) des Programmsystems SCALE 6 /SCA 09/ durchgeführt.

### **2.4.1 Abbrandrechnungen mit TRITON**

Für die Abbrandrechnungen mit TRITON wurden folgende wesentliche Einstellungen und Parameter genutzt: Als Sequenz wurde *t5-depl* verwendet, so dass der Neutronentransport für die Flussberechnung mit Hilfe des Monte Carlo-Codes KENO V.a erfolgt. Die Resonanzbehandlung erfolgte mit *centrm* und *bonami* (Bondarenko-Methode). Als Wirkungsquerschnittsbibliothek wurde eine auf ENDF/B-VII basierende Bibliothek mit

238 Energiegruppen (v7-238) verwendet. Die verwendete Leistungsgeschichte wurde bereits im Abschnitt 2.2 beschrieben. Für die Flussberechnung werden 1200 Generationen a 50000 Neutronen genutzt, wobei die ersten 200 Generationen verworfen werden. Als Resultat werden die Stoffmengen von 500 Nukliden (etwa 40% der in der Rechnung berücksichtigten Nuklide) ausgegeben, von denen die folgenden 227 Nuklide weiter berücksichtigt werden: Ag107, Ag109, Ag111, Ag112, Am241, Am242m, Am243, As75, As77, B10, B11, Ba132, Ba134, Ba135, Ba135m, Ba136, Ba137, Ba138, Ba140, Be9, Br81, Cd110, Cd111, Cd112, Cd113, Cd114, Cd115m, Cd116, Ce140, Ce141, Ce142, Ce143, Ce144, Cm242, Cm243, Cm244, Cm245, Cm246, Cm247, Cm248, Cs132, Cs133, Cs134, Cs135, Cs136, Cs137, Dy160, Dy161, Dy162, Dy163, Dy164, Er166, Er167, Eu151, Eu152, Eu153, Eu154, Eu155, Eu156, Eu157, Gd152, Gd154, Gd155, Gd156, Gd157, Gd158, Gd160, Ge72, Ge73, Ge74, Ge76, H1, H2, H3, He3, He4, Ho165, I127, I129, I130, I131, I135, In115, In115m, Kr82, Kr83, Kr84, Kr85, Kr86, La139, La140, Li6, Li7, Mo94, Mo95, Mo96, Mo97, Mo98, Mo99, Mo100, N14, N15, Nb93, Nb94, Nb95, Nd142, Nd143, Nd144, Nd145, Nd146, Nd147, Nd148, Nd150, Np237, O16, O17, Pa231, Pa232, Pd104, Pd105, Pd106, Pd107, Pd108, Pd110, Pm147, Pm148, Pm148m, Pm149, Pm151, Pr141, Pr142, Pr143, Pu238, Pu239, Pu240, Pu241, Pu242, Pu243, Pu244, Rb85, Rb86, Rb87, Rh103, Rh105, Ru98, Ru99, Ru100, Ru101, Ru102, Ru103, Ru104, Ru105, Ru106, Sb121, Sb123, Sb124, Sb125, Sb126, Se76, Se77, Se78, Se80, Se82, Sm147, Sm148, Sm149, Sm150, Sm151, Sm152, Sm153, Sm154, Sn115, Sn116, Sn117, Sn118, Sn119, Sn120, Sn122, Sn123, Sn124, Sn125, Sn126, Sr86, Sr87, Sr88, Sr89, Sr90, Tb159, Tb160, Tc99, Te122, Te123, Te123m, Te124, Te125, Te126, Te127m, Te128, Te129m, Te130, Te132, Th230, U232, U233, U234, U235, U236, U237, U238, Xe128, Xe130, Xe131, Xe132, Xe133, Xe134, Xe135, Xe136, Y89, Y90, Y91, Y97m, Zr90, Zr91, Zr92, Zr93, Zr94, Zr95, Zr96. Die Beschränkung auf diese Nuklide ist im Wesentlichen durch die verwendete Wirkungsquerschnittsbibliothek gegeben.

Die Brennstofftemperatur wird mit 823 Kelvin in allen Rechnungen konstant gehalten, ebenso die Moderatorichte, die auf  $0,738 \text{ g/cm}^3$  festgelegt wurde.

Ein Beispiel eines TRITON-Inputfiles für ein 4x4-Brennelementbündel ohne Steuerkreuz ist im Anhang 5.1 angegeben. Die Nuklidinventare der Brennstabtypen 91, 92 und 93 nach Abbränden von 28, 29 und 30 GWd/tSM sind im Anhang 5.3 aufgelistet.

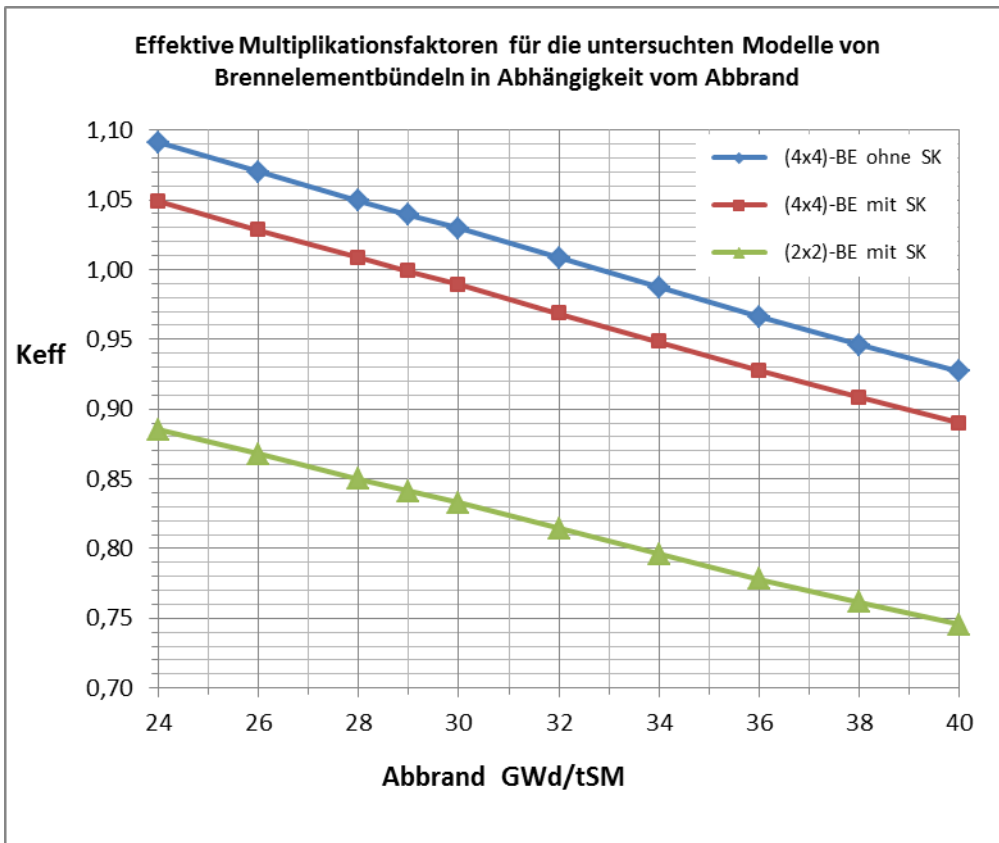


### 2.4.2 Kritikalitätsrechnungen mit CSAS5

Die Kritikalitätsrechnungen mit der Sequenz CSAS5 erfolgten im Wesentlichen mit den gleichen Einstellungen und Parametern wie im Fall der TRITON-Rechnungen. Die Bondarenko-Methode (*bonami*) und das Modul *centrm* wurden als Resonanzbehandlungsmethode genutzt und die Rechnung mit der ENDF/B-VII Wirkungsquerschnittsbibliothek in 238 Energieruppen (*v7-238*) durchgeführt. Die Flussberechnung basierte auf 1200 Generationen a 50000 Neutronen, wobei die ersten 200 Generationen verworfen wurden. Neben den effektiven Multiplikationsfaktoren wurden die Spaltdichten für jedes Material bestimmt und ausgegeben. Im Anhang 5.2 ist ein Beispiel eines CSAS5-Inputfiles für das 2x2-Brennelementbündel mit Steuerkreuz aufgelistet.

## 3 Resultate

Die Resultate sind aufgrund der stark vereinfachten Simulation (z.B. gleichbleibende Stableistung, Brennstofftemperatur und Moderatorichte-bei eingefahrenem Steuerkreuz) vor allem qualitativ zu bewerten. Die errechneten Zahlenwerte hängen maßgeblich von den verwendeten Parametern und Modellannahmen ab, weshalb diese Untersuchungen generischen Charakter haben. Die Ergebnisse der Kritikalitätsrechnungen sind in der Abb. 3-1 und in der Tab. 3-1 dargestellt bzw. aufgelistet.



**Abb. 3-1:** Effektive Multiplikationsfaktoren für (4x4)-Brennelementbündel mit und ohne Steuerkreuz sowie für (2x2)-Brennelementbündel mit Steuerkreuz für Abbrände zwischen 24 und 40 GWd/tSM.

**Tab. 3-1:** Effektive Multiplikationsfaktoren und zugehörige Standardabweichungen für (4x4)-Brennelementbündel mit und ohne Steuerkreuz sowie für (2x2)-Brennelementbündel mit Steuerkreuz für Abbrände zwischen 24 und 40 GWd/tSM.

Abbrand GWd/tSM	(4x4)-Brennelemente ohne Steuerkreuz	(4x4)-Brennelement mit Steuerkreuz	(2x2)-Brennelement mit Steuerkreuz
24	1,091299 ± 0,000073	1,049027 ± 0,000075	0,885435 ± 0,000085
26	1,070168 ± 0,000071	1,028474 ± 0,000076	0,867543 ± 0,000081
28	1,049555 ± 0,000090	1,008642 ± 0,000081	0,849783 ± 0,000085
29	1,039450 ± 0,000074	0,998754 ± 0,000075	0,841025 ± 0,000077
30	1,029487 ± 0,000070	0,989034 ± 0,000074	0,832585 ± 0,000080
32	1,008306 ± 0,000073	0,968422 ± 0,000074	0,814288 ± 0,000085
34	0,987190 ± 0,000077	0,948102 ± 0,000075	0,796196 ± 0,000081
36	0,966047 ± 0,000069	0,927622 ± 0,000075	0,778178 ± 0,000079
38	0,946072 ± 0,000068	0,908101 ± 0,000073	0,761386 ± 0,000080

40	0,927061 ± 0,000069	0,889994 ± 0,000069	0,745425 ± 0,000072
----	---------------------	---------------------	---------------------

Aus Abb. 3-1 und Tab. 3-1 ist ersichtlich, dass die effektiven Multiplikationsfaktoren bei gleichem Abbrand vom (4x4)-Brennelementbündel ohne Steuerkreuz zum (4x4)-Brennelementbündel mit Steuerkreuz im Mittel (Mittelung über alle Abbrände von 24 bis 40 GWd/tSM) um 0,040 abnehmen. Die  $k_{\text{eff}}$ -Werte zwischen dem (4x4)-Brennelementbündel ohne Steuerkreuz und dem (2x2)-Brennelementbündel mit Steuerkreuz unterscheiden sich im Mittel (Mittelung über alle Abbrände von 24 bis 40 GWd/tSM) um 0,194 und die vom (4x4)-Brennelementbündel mit Steuerkreuz von denen des (2x2)-Brennelementbündels mit Steuerkreuz um 0,154. Diese Differenzen nehmen von mit größer werdenden Abbränden ab.

Eine Zielvorgabe bestand dabei in der Ermittlung desjenigen Abbrands, dessen Nuklidinventar im Fall des 4x4-Brennelementbündelmodells mit Steuerkreuz zu einem effektiven Multiplikationsfaktor möglichst nahe bei eins führt. Der Abbrand von 29 GWd/tSM erfüllt mit einem  $k_{\text{eff}}$  von 0,998754 diese Bedingung. In diesem Fall betragen die Differenzen der  $k_{\text{eff}}$ -Werte 0,041 beim (4x4)-Brennelementbündel ohne Steuerkreuz zum (4x4)-Brennelementbündel mit Steuerkreuz, 0,198 beim (4x4)-Brennelementbündel ohne Steuerkreuz zum (2x2)-Brennelementbündel mit Steuerkreuz und 0,158 beim (4x4)-Brennelementbündel mit Steuerkreuz zum (2x2)-Brennelementbündel mit Steuerkreuz.

## 4 Referenzen

/SCA 09/ *SCALE: A Modular Code System for Performing Standardized Computer Analyses for Licensing Evaluations*, ORNL/TM-2005/39, Version 6, Vols. I-III, January 2009. Available from Radiation Safety Information Computational Center at Oak Ridge National Laboratory as CCC-750.

## 5 Anhang

### 5.1 TRITON-Inputfile

Eingabebeispiel für eine Abbrandrechnung mit einem Abbrand von 29 GWd/tSM (Modell: 4x4-Brennelementbündel ohne Steuerkreuz).

```
'Input generated by GeeWiz SCALE 6.0.13.04 Compiled on January 4, 2010
=t5-depl
kkk erstbeladung (8x8, 4.2% u-235) (uran) hot 0 % +cr Endabbr: 29
GWd/tSM
v7-238
read alias
  $fuel1 1 28 35 91 end
  $fuel2 2 21 29 34 92 end
  $fuel3 3-20 22-27 30-33 93 end
  $h2o1 101 128 135 191 end
  $h2o2 102 121 129 134 192 end
  $h2o3 103-120 122-127 130-133 193 end
  $zr1 201 228 235 291 end
  $zr2 202 221 229 234 292 end
  $zr3 203-220 222-227 230-233 293 end
end alias
read composition
zirc4      $zr3 1 580      end
zirc4      $zr2 1 580      end
zirc4      $zr1 1 580      end
h          $h2o3 0 0.0494201 559      end
o          $h2o3 0 0.02471 559      end
h          $h2o2 0 0.0494201 559      end
o          $h2o2 0 0.02471 559      end
h          $h2o1 0 0.0494201 559      end
o          $h2o1 0 0.02471 559      end
o          $fuel3 0 0.0455748 823      end
u-235     $fuel3 0 0.000918306 823      end
u-238     $fuel3 0 0.0218691 823      end
o          $fuel2 0 0.045574 823      end
u-235     $fuel2 0 0.000849092 823      end
u-238     $fuel2 0 0.021938 823      end
o          $fuel1 0 0.0455722 823      end
u-235     $fuel1 0 0.000687584 823      end
u-238     $fuel1 0 0.0220985 823      end
h          100 0 0.0494201 559      end
o          100 0 0.02471 559      end
zirc4      200 1 559      end
b-10      998 0 0.0152718 559      end
b-11      998 0 0.061471 559      end
c          998 0 0.0191857 559      end
c          999 0 0.000311144 559      end
si         999 0 0.00166178 559      end
cr         999 0 0.0152593 559      end
mn         999 0 0.00169906 559      end
fe         999 0 0.054674 559      end
```

```

ni          999 0 0.00954318 559  end
mo          999 0 0.00121616 559  end
end composition
read celldata
  latticecell squarepitch fuelr=0.529 91 gapr=0.54 0 cladr=0.625 291
hpitch=0.8125 191 end
  latticecell squarepitch fuelr=0.529 92 gapr=0.54 0 cladr=0.625 292
hpitch=0.8125 192 end
  latticecell squarepitch fuelr=0.529 93 gapr=0.54 0 cladr=0.625 293
hpitch=0.8125 193 end
end celldata
read depletion
  91 92 93
end depletion
read burndata
  power=20 burn=300 down=60 end
  power=40 burn=300 down=60 end
  power=40 burn=275 end
end burndata
read opus
  nrank=500
  symnuc=ag-109 ag-110m ag-111 ag-113 am-241 am-242 am-242m am-243 am-
244
  b-10 b-11 ba-134 ba-137 ba-138 ba-140 br-81 cd-110 cd-111 cd-112
cd-113
  cd-113m ce-140 ce-141 ce-142 ce-143 ce-144 cm-242 cm-243 cm-244
cm-245
  cm-246 cs-133 cs-134 cs-135 cs-137 dy-160 dy-161 dy-162 dy-163 dy-
164
  eu-151 eu-152 eu-153 eu-154 eu-155 eu-156 eu-157 gd-152 gd-153 gd-
154
  gd-155 gd-156 gd-157 gd-158 h-3 he-3 ho-165 i-127 i-129 i-130 i-
131
  i-133 i-135 in-115 kr-82 kr-83 kr-85 la-139 la-141 la-143 li-6 mo-
100
  mo-95 mo-97 mo-98 mo-99 nb-95 nd-142 nd-143 nd-144 nd-145 nd-146
nd-147
  nd-148 nd-149 nd-150 nd-151 np-237 np-238 np-239 o-16 pd-104 pd-
105
  pd-106 pd-107 pd-108 pd-109 pm-147 pm-148 pm-148m pm-149 pm-151
pr-141
  pr-143 pr-145 pr-149 pu-238 pu-239 pu-240 pu-241 pu-242 pu-243 rh-
103
  rh-103m rh-105 ru-100 ru-101 ru-102 ru-103 ru-104 ru-105 ru-106
sb-121
  sb-123 sb-125 sb-127 sb-131 se-77 se-79 sm-147 sm-148 sm-149 sm-
150
  sm-151 sm-152 sm-153 sm-154 sm-155 sm-156 sn-115 sn-117 sn-119 sn-
123
  sr-89 sr-90 tb-159 tb-160 tb-161 tc-99 tc-99m te-127m te-129 te-
129m
  te-130 te-131 te-131m te-135 u-234 u-235 u-236 u-237 u-238 u-239
xe-128
  xe-130 xe-131 xe-131m xe-132 xe-133 xe-133m xe-134 xe-135 xe-135m
xe-136
  y-89 y-91 zr-91 zr-92 zr-93 zr-95 end
  units=atoms
  time=days
  matl=91 92 93 end
end opus
read model

```

```

read parameter
gen=1200
npg=50000
nsk=200
htm=yes
fdn=yes
end parameter
read geometry
unit 1
com='unit 1'
zylinder 1 1 0.529 4 0
zylinder 0 1 0.54 4 0
zylinder 201 1 0.625 4 0
cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 2
com='unit 2'
zylinder 2 1 0.529 4 0
zylinder 0 1 0.54 4 0
zylinder 201 1 0.625 4 0
cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 3
com='unit 3'
zylinder 3 1 0.529 4 0
zylinder 0 1 0.54 4 0
zylinder 201 1 0.625 4 0
cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 4
com='unit 4'
zylinder 4 1 0.529 4 0
zylinder 0 1 0.54 4 0
zylinder 201 1 0.625 4 0
cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 5
com='unit 5'
zylinder 5 1 0.529 4 0
zylinder 0 1 0.54 4 0
zylinder 201 1 0.625 4 0
cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 6
com='unit 6'
zylinder 6 1 0.529 4 0
zylinder 0 1 0.54 4 0
zylinder 201 1 0.625 4 0
cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 7
com='unit 7'
zylinder 7 1 0.529 4 0
zylinder 0 1 0.54 4 0
zylinder 201 1 0.625 4 0
cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 8
com='unit 8'
zylinder 8 1 0.529 4 0
zylinder 0 1 0.54 4 0
zylinder 201 1 0.625 4 0
cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 9
com='unit 9'
zylinder 9 1 0.529 4 0
zylinder 0 1 0.54 4 0
zylinder 201 1 0.625 4 0

```

```

cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 10
com='unit 10'
zcyylinder 10 1 0.529 4 0
zcyylinder 0 1 0.54 4 0
zcyylinder 201 1 0.625 4 0
cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 11
com='unit 11'
zcyylinder 11 1 0.529 4 0
zcyylinder 0 1 0.54 4 0
zcyylinder 201 1 0.625 4 0
cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 12
com='unit 12'
zcyylinder 12 1 0.529 4 0
zcyylinder 0 1 0.54 4 0
zcyylinder 201 1 0.625 4 0
cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 13
com='unit 13'
zcyylinder 13 1 0.529 4 0
zcyylinder 0 1 0.54 4 0
zcyylinder 201 1 0.625 4 0
cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 14
com='unit 14'
zcyylinder 14 1 0.529 4 0
zcyylinder 0 1 0.54 4 0
zcyylinder 201 1 0.625 4 0
cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 15
com='unit 15'
zcyylinder 15 1 0.529 4 0
zcyylinder 0 1 0.54 4 0
zcyylinder 201 1 0.625 4 0
cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 16
com='unit 16'
zcyylinder 16 1 0.529 4 0
zcyylinder 0 1 0.54 4 0
zcyylinder 201 1 0.625 4 0
cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 17
com='unit 17'
zcyylinder 17 1 0.529 4 0
zcyylinder 0 1 0.54 4 0
zcyylinder 201 1 0.625 4 0
cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 18
com='unit 18'
zcyylinder 18 1 0.529 4 0
zcyylinder 0 1 0.54 4 0
zcyylinder 201 1 0.625 4 0
cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 19
com='unit 19'
zcyylinder 19 1 0.529 4 0
zcyylinder 0 1 0.54 4 0
zcyylinder 201 1 0.625 4 0
cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0

```

```

unit 20
com='unit 20'
  zcylinder 20 1 0.529 4 0
  zcylinder 0 1 0.54 4 0
  zcylinder 201 1 0.625 4 0
  cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 21
com='unit 21'
  zcylinder 21 1 0.529 4 0
  zcylinder 0 1 0.54 4 0
  zcylinder 201 1 0.625 4 0
  cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 22
com='unit 22'
  zcylinder 22 1 0.529 4 0
  zcylinder 0 1 0.54 4 0
  zcylinder 201 1 0.625 4 0
  cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 23
com='unit 23'
  zcylinder 23 1 0.529 4 0
  zcylinder 0 1 0.54 4 0
  zcylinder 201 1 0.625 4 0
  cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 24
com='unit 24'
  zcylinder 24 1 0.529 4 0
  zcylinder 0 1 0.54 4 0
  zcylinder 201 1 0.625 4 0
  cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 25
com='unit 25'
  zcylinder 25 1 0.529 4 0
  zcylinder 0 1 0.54 4 0
  zcylinder 201 1 0.625 4 0
  cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 26
com='unit 26'
  zcylinder 26 1 0.529 4 0
  zcylinder 0 1 0.54 4 0
  zcylinder 201 1 0.625 4 0
  cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 27
com='unit 27'
  zcylinder 27 1 0.529 4 0
  zcylinder 0 1 0.54 4 0
  zcylinder 201 1 0.625 4 0
  cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 28
com='unit 28'
  zcylinder 28 1 0.529 4 0
  zcylinder 0 1 0.54 4 0
  zcylinder 201 1 0.625 4 0
  cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 29
com='unit 29'
  zcylinder 29 1 0.529 4 0
  zcylinder 0 1 0.54 4 0
  zcylinder 201 1 0.625 4 0
  cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 30

```



```

com='unit 30'
zylinder 30 1 0.529 4 0
zylinder 0 1 0.54 4 0
zylinder 201 1 0.625 4 0
cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 31
com='unit 31'
zylinder 31 1 0.529 4 0
zylinder 0 1 0.54 4 0
zylinder 201 1 0.625 4 0
cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 32
com='unit 32'
zylinder 32 1 0.529 4 0
zylinder 0 1 0.54 4 0
zylinder 201 1 0.625 4 0
cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 33
com='unit 33'
zylinder 33 1 0.529 4 0
zylinder 0 1 0.54 4 0
zylinder 201 1 0.625 4 0
cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 34
com='unit 34'
zylinder 34 1 0.529 4 0
zylinder 0 1 0.54 4 0
zylinder 201 1 0.625 4 0
cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 35
com='unit 35'
zylinder 35 1 0.529 4 0
zylinder 0 1 0.54 4 0
zylinder 201 1 0.625 4 0
cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 91
com='unit 91'
zylinder 91 1 0.529 4 0
zylinder 0 1 0.54 4 0
zylinder 201 1 0.625 4 0
cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 92
com='unit 92'
zylinder 92 1 0.529 4 0
zylinder 0 1 0.54 4 0
zylinder 201 1 0.625 4 0
cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 93
com='unit 93'
zylinder 93 1 0.529 4 0
zylinder 0 1 0.54 4 0
zylinder 201 1 0.625 4 0
cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 99
com='unit 99'
zylinder 100 1 0.54 4 0
zylinder 200 1 0.625 4 0
cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 101
com='unit 101 references array 1'
array 1 -6.5 -6.5 0

```

```

cuboid 101 1      6.7      -6.7      6.7      -6.7      4      0
cuboid 200 1      7        -7        7        -7        4      0
unit 102
com='unit 102 references array 2'
array 2  -6.5      -6.5      0
cuboid 101 1      6.7      -6.7      6.7      -6.7      4      0
cuboid 200 1      7        -7        7        -7        4      0
unit 103
com='unit 103 references array 3'
array 3  -6.5      -6.5      0
cuboid 101 1      6.7      -6.7      6.7      -6.7      4      0
cuboid 200 1      7        -7        7        -7        4      0
unit 104
com='unit 104 references array 4'
array 4  -6.5      -6.5      0
cuboid 101 1      6.7      -6.7      6.7      -6.7      4      0
cuboid 200 1      7        -7        7        -7        4      0
unit 105
com='unit 105 references array 5'
array 5  -6.5      -6.5      0
cuboid 101 1      6.7      -6.7      6.7      -6.7      4      0
cuboid 200 1      7        -7        7        -7        4      0
unit 201
com='unit 201'
cuboid 999 1      2          0          0.33      0          4      0
unit 206
com='unit 206'
cuboid 999 1      0.33      0          0.835     -0.835     4      0
unit 211
com='unit 211'
zhemicyl+y 998 1 0.17525      4          0 chord      0
zhemicyl+y 999 1 0.23875      4          0 chord      0
cuboid 100 1      0.2715     -0.2715     0.25      0          4      0
cuboid 999 1      0.2715     -0.2715     0.33      0          4      0
unit 216
com='unit 216'
zhemicyl+x 998 1 0.17525      4          0 chord      0
zhemicyl+x 999 1 0.23875      4          0 chord      0
cuboid 100 1      0.25      0          0.2715     -0.2715     4      0
cuboid 999 1      0.33      0          0.2715     -0.2715     4      0
unit 221
com='unit 221 references array 201'
array 201 -15.25     -15.25     0
unit 226
com='unit 226 references array 206'
array 206 -15.25     -14.9199   0
unit 251
com='unit 251'
cuboid 100 1      15.25     -15.25     15.25     -15.25     4      0
hole 105  7.625     7.625     0
hole 105 -7.625     7.625     0
hole 101 -7.625     -7.625     0
hole 105  7.625     -7.625     0
hole 221  0          0          0
hole 226  0          0          0
unit 252
com='unit 252'
cuboid 100 1      15.25     -15.25     15.25     -15.25     4      0
hole 105  7.625     7.625     0
hole 105 -7.625     7.625     0
hole 101 -7.625     -7.625     0

```

```

hole 105 7.625 -7.625 0
global unit 259
com='unit 259'
cuboid 100 1 15.25 -15.25 15.25 -15.25 4 0
hole 105 7.625 7.625 0
hole 105 -7.625 7.625 0
hole 105 -7.625 -7.625 0
hole 105 7.625 -7.625 0
end geometry
read array
ara=1 nux=8 nuy=8 nuz=1
com=''
fill
1 2 4 7 11 15 21 28
2 3 5 8 12 16 22 29
4 5 6 9 13 17 23 30
7 8 9 10 14 18 24 31
11 12 13 14 99 19 25 32
15 16 17 18 19 20 26 33
21 22 23 24 25 26 27 34
28 29 30 31 32 33 34 35 end fill
ara=2 nux=8 nuy=8 nuz=1
fill
91 92 93 93 93 93 92 91
92 93 93 93 93 93 93 92
93 93 93 93 93 93 93 93
93 93 93 93 93 93 93 93
93 93 93 99 93 93 93 93
93 93 93 93 93 93 93 93
92 93 93 93 93 93 93 92
91 92 93 93 93 93 92 91 end fill
ara=3 nux=8 nuy=8 nuz=1
fill
91 92 93 93 93 93 92 91
92 93 93 93 93 93 93 92
93 93 93 93 93 93 93 93
93 93 93 99 93 93 93 93
93 93 93 93 93 93 93 93
93 93 93 93 93 93 93 93
92 93 93 93 93 93 93 92
91 92 93 93 93 93 92 91 end fill
ara=4 nux=8 nuy=8 nuz=1
fill
91 92 93 93 93 93 92 91
92 93 93 93 93 93 93 92
93 93 93 93 93 93 93 93
93 93 93 93 99 93 93 93
93 93 93 93 93 93 93 93
93 93 93 93 93 93 93 93
92 93 93 93 93 93 93 92
91 92 93 93 93 93 92 91 end fill
ara=5 nux=8 nuy=8 nuz=1
fill
91 92 93 93 93 93 92 91
92 93 93 93 93 93 93 92
93 93 93 93 93 93 93 93
93 93 93 93 93 93 93 93
93 93 93 93 99 93 93 93
93 93 93 93 93 93 93 93
92 93 93 93 93 93 93 92
91 92 93 93 93 93 92 91 end fill

```

```

ara=201 nux=20 nuy=1 nuz=1
  fill
    201 211 211 211 211 211 211 211 211 211 211 211 211 211 211
211 211 211 211 211 211 end fill
ara=206 nux=1 nuy=20 nuz=1
  fill
    206
    216
    216
    216
    216
    216
    216
    216
    216
    216
    216
    216
    216
    216
    216
    216
    216
    216
    216
    216
    216 end fill
end array
read bnds
+xb=mirror
-xb=mirror
+yb=mirror
-yb=mirror
+z b=mirror
-z b=mirror
end bnds
end data
end model
end

```

## 5.2 CSAS5-Inputfile

Eingabebeispiel für eine Kritikalitätsrechnung für ein 2x2-Brennelementbündel mit Steuerkreuz mit einem Abbrand von 29 GWd/tSM (Modell: 2x2-Brennelementbündel mit Steuerkreuz).

```

'Input generated by GeeWiz SCALE 6.0.13.04 Compiled on January 4, 2010
=csas5 parm=(centrm)
kkk 1 BE mit Steuerkreuz (8x8, Abbrand 29 GWd/tSM) revised 17.11.10
v7-238
read composition
o-16      91 0 4.55700e-02 823.0 end
u-238    91 0 2.16700e-02 823.0 end
u-235    91 0 1.19000e-04 823.0 end
pd-107   91 0 9.56700e-06 823.0 end
i-129    91 0 5.73600e-06 823.0 end
pd-106   91 0 8.58000e-06 823.0 end

```

pd-108	91	0	6.20400e-06	823.0	end
pu-239	91	0	7.54000e-05	823.0	end
u-236	91	0	8.74200e-05	823.0	end
i-127	91	0	1.76500e-06	823.0	end
cs-133	91	0	4.45000e-05	823.0	end
pu-243	91	0	3.04500e-09	823.0	end
cs-137	91	0	4.62100e-05	823.0	end
zr-94	91	0	4.28600e-05	823.0	end
tc-99	91	0	4.18600e-05	823.0	end
pu-240	91	0	4.47000e-05	823.0	end
nd-143	91	0	2.51400e-05	823.0	end
mo-95	91	0	3.52700e-05	823.0	end
cd-111	91	0	8.90200e-07	823.0	end
nd-145	91	0	2.42600e-05	823.0	end
nd-146	91	0	2.46500e-05	823.0	end
rh-103	91	0	2.08400e-05	823.0	end
ce-144	91	0	1.48300e-05	823.0	end
xe-131	91	0	1.75500e-05	823.0	end
nd-148	91	0	1.30200e-05	823.0	end
pu-241	91	0	1.93300e-05	823.0	end
cs-135	91	0	9.37700e-06	823.0	end
pm-147	91	0	7.13700e-06	823.0	end
sm-150	91	0	9.98300e-06	823.0	end
ru-106	91	0	8.16600e-06	823.0	end
sm-152	91	0	4.24500e-06	823.0	end
np-237	91	0	6.01900e-06	823.0	end
xe-136	91	0	9.20400e-05	823.0	end
kr-83	91	0	2.45600e-06	823.0	end
eu-153	91	0	3.66400e-06	823.0	end
sm-147	91	0	2.50000e-06	823.0	end
ag-109	91	0	3.36400e-06	823.0	end
pu-242	91	0	1.03700e-05	823.0	end
cs-134	91	0	4.09700e-06	823.0	end
zr-96	91	0	4.37600e-05	823.0	end
mo-100	91	0	4.83400e-05	823.0	end
xe-134	91	0	5.90000e-05	823.0	end
gd-156	91	0	2.19900e-06	823.0	end
li-6	91	0	7.32400e-09	823.0	end
sr-90	91	0	3.22800e-05	823.0	end
ba-138	91	0	4.90700e-05	823.0	end
zr-92	91	0	3.72100e-05	823.0	end
sn-126	91	0	7.26800e-07	823.0	end
pr-143	91	0	8.86500e-07	823.0	end
sm-151	91	0	2.44300e-07	823.0	end
pu-238	91	0	1.58500e-06	823.0	end
sn-115	91	0	7.79400e-09	823.0	end
ce-142	91	0	4.12900e-05	823.0	end
zr-93	91	0	4.02900e-05	823.0	end
te-130	91	0	1.47600e-05	823.0	end
mo-98	91	0	4.32000e-05	823.0	end
kr-86	91	0	1.12900e-05	823.0	end
gd-158	91	0	5.41000e-07	823.0	end
eu-154	91	0	5.61300e-07	823.0	end
la-139	91	0	4.55700e-05	823.0	end
xe-132	91	0	4.09800e-05	823.0	end
rb-87	91	0	1.51100e-05	823.0	end
am-241	91	0	4.04000e-07	823.0	end
ru-104	91	0	2.58500e-05	823.0	end
zr-95	91	0	4.63700e-06	823.0	end
eu-155	91	0	2.42800e-07	823.0	end
mo-97	91	0	4.33000e-05	823.0	end

sr-88	91	0	2.06800e-05	823.0	end
sm-149	91	0	4.26100e-08	823.0	end
nd-147	91	0	3.13000e-07	823.0	end
pr-141	91	0	3.88000e-05	823.0	end
am-243	91	0	1.53500e-06	823.0	end
ru-102	91	0	3.85500e-05	823.0	end
nd-150	91	0	5.92900e-06	823.0	end
ce-140	91	0	4.60900e-05	823.0	end
he-4	91	0	3.52900e-06	823.0	end
rb-85	91	0	6.10400e-06	823.0	end
kr-84	91	0	7.46600e-06	823.0	end
he-3	91	0	6.03500e-10	823.0	end
ru-101	91	0	4.03400e-05	823.0	end
sr-89	91	0	1.97000e-06	823.0	end
zr-91	91	0	3.18400e-05	823.0	end
y-89	91	0	2.53500e-05	823.0	end
i-135	91	0	2.38800e-08	823.0	end
se-82	91	0	2.13400e-06	823.0	end
y-91	91	0	3.01300e-06	823.0	end
kr-85	91	0	1.60000e-06	823.0	end
nb-95	91	0	2.50900e-06	823.0	end
nd-144	91	0	3.64500e-05	823.0	end
h-1	91	0	3.29700e-08	823.0	end
u-234	91	0	2.21800e-08	823.0	end
cm-242	91	0	1.89500e-07	823.0	end
te-128	91	0	3.42500e-06	823.0	end
pd-105	91	0	1.70300e-05	823.0	end
gd-160	91	0	2.98700e-08	823.0	end
ba-140	91	0	9.91800e-07	823.0	end
ru-103	91	0	2.91000e-06	823.0	end
xe-135	91	0	4.17400e-09	823.0	end
ce-141	91	0	2.38800e-06	823.0	end
gd-154	91	0	3.42500e-08	823.0	end
er-166	91	0	3.78100e-10	823.0	end
se-80	91	0	8.37000e-07	823.0	end
cm-244	91	0	3.31800e-07	823.0	end
sm-154	91	0	1.12300e-06	823.0	end
ru-100	91	0	4.32000e-06	823.0	end
br-81	91	0	1.37600e-06	823.0	end
ba-136	91	0	7.35700e-07	823.0	end
pm-148	91	0	5.04600e-08	823.0	end
pd-104	91	0	9.61200e-06	823.0	end
ba-137	91	0	1.31300e-06	823.0	end
sn-124	91	0	3.16900e-07	823.0	end
pd-110	91	0	1.96400e-06	823.0	end
gd-157	91	0	1.84000e-09	823.0	end
sm-148	91	0	3.65200e-06	823.0	end
sb-125	91	0	3.25500e-07	823.0	end
gd-155	91	0	7.17900e-10	823.0	end
h-3	91	0	1.01800e-07	823.0	end
sn-122	91	0	1.89900e-07	823.0	end
ba-134	91	0	1.05800e-06	823.0	end
i-131	91	0	3.65900e-07	823.0	end
la-140	91	0	1.38300e-07	823.0	end
cd-116	91	0	1.91700e-07	823.0	end
mo-96	91	0	1.58000e-06	823.0	end
xe-130	91	0	2.69600e-07	823.0	end
cd-114	91	0	5.24300e-07	823.0	end
pu-244	91	0	2.71900e-10	823.0	end
eu-151	91	0	1.35400e-10	823.0	end
sb-123	91	0	1.76400e-07	823.0	end

gd-152	91	0	4.14600e-10	823.0	end
sn-120	91	0	1.46200e-07	823.0	end
u-237	91	0	1.88300e-07	823.0	end
se-78	91	0	1.49700e-07	823.0	end
te-129m	91	0	8.06000e-08	823.0	end
xe-133	91	0	4.66600e-07	823.0	end
b-11	91	0	3.15300e-10	823.0	end
nd-142	91	0	7.76700e-07	823.0	end
cm-246	91	0	1.28400e-09	823.0	end
cd-112	91	0	4.53600e-07	823.0	end
o-17	91	0	2.31800e-08	823.0	end
sn-119	91	0	1.49000e-07	823.0	end
cm-243	91	0	3.17000e-09	823.0	end
ge-76	91	0	2.14400e-08	823.0	end
eu-156	91	0	1.74300e-07	823.0	end
sb-121	91	0	1.45700e-07	823.0	end
sn-118	91	0	1.45300e-07	823.0	end
te-127m	91	0	7.47200e-08	823.0	end
sn-123	91	0	8.72200e-09	823.0	end
h-2	91	0	8.12600e-09	823.0	end
te-132	91	0	2.09800e-07	823.0	end
cs-136	91	0	2.23700e-08	823.0	end
xe-128	91	0	6.84500e-08	823.0	end
pa-231	91	0	3.62500e-13	823.0	end
ru-105	91	0	1.00600e-08	823.0	end
te-125	91	0	9.09600e-08	823.0	end
pm-148m	91	0	3.61900e-08	823.0	end
u-232	91	0	2.01000e-12	823.0	end
sn-116	91	0	8.58900e-08	823.0	end
se-77	91	0	5.10400e-08	823.0	end
y-90	91	0	9.02300e-09	823.0	end
pm-149	91	0	5.59800e-08	823.0	end
tb-159	91	0	6.79400e-08	823.0	end
ag-107	91	0	8.55700e-13	823.0	end
kr-82	91	0	2.54700e-08	823.0	end
mo-99	91	0	2.26800e-07	823.0	end
te-126	91	0	2.13200e-08	823.0	end
sn-125	91	0	4.19200e-09	823.0	end
as-75	91	0	8.01400e-09	823.0	end
sr-86	91	0	1.52100e-08	823.0	end
n-15	91	0	1.28700e-09	823.0	end
ge-74	91	0	3.12100e-09	823.0	end
te-122	91	0	6.16500e-09	823.0	end
li-7	91	0	7.42700e-10	823.0	end
cd-113	91	0	2.71100e-09	823.0	end
te-124	91	0	4.49700e-09	823.0	end
th-230	91	0	7.15500e-14	823.0	end
cd-115m	91	0	7.94200e-10	823.0	end
i-130	91	0	5.90000e-10	823.0	end
sb-124	91	0	1.36500e-09	823.0	end
be-9	91	0	4.41900e-10	823.0	end
dy-163	91	0	4.85000e-09	823.0	end
dy-160	91	0	3.35700e-09	823.0	end
rb-86	91	0	1.23500e-09	823.0	end
ge-73	91	0	1.08000e-09	823.0	end
sb-126	91	0	2.52000e-10	823.0	end
rh-105	91	0	6.84400e-08	823.0	end
nb-93	91	0	1.75400e-12	823.0	end
ba-135	91	0	5.54600e-09	823.0	end
tb-160	91	0	1.87700e-09	823.0	end
cm-247	91	0	8.04100e-12	823.0	end

ho-165	91	0	1.58400e-09	823.0	end
dy-164	91	0	6.36400e-10	823.0	end
mo-94	91	0	3.01000e-10	823.0	end
sr-87	91	0	1.19000e-10	823.0	end
n-14	91	0	1.79500e-13	823.0	end
u-233	91	0	6.20300e-12	823.0	end
nb-94	91	0	3.40800e-11	823.0	end
sm-153	91	0	4.22300e-08	823.0	end
ru-98	91	0	5.00800e-12	823.0	end
ce-143	91	0	9.15900e-08	823.0	end
b-10	91	0	3.09000e-16	823.0	end
pm-151	91	0	1.05200e-08	823.0	end
eu-157	91	0	9.70000e-10	823.0	end
cm-245	91	0	1.06800e-08	823.0	end
cd-110	91	0	1.09100e-06	823.0	end
dy-162	91	0	7.74000e-09	823.0	end
am-242m	91	0	6.51000e-09	823.0	end
dy-161	91	0	8.28600e-09	823.0	end
in-115	91	0	8.17600e-08	823.0	end
eu-152	91	0	4.79000e-10	823.0	end
ag-111	91	0	2.28700e-08	823.0	end
sn-117	91	0	1.72800e-07	823.0	end
o-16	92	0	4.55700e-02	823.0	end
u-238	92	0	2.15500e-02	823.0	end
u-235	92	0	2.05500e-04	823.0	end
i-129	92	0	5.63600e-06	823.0	end
pd-107	92	0	8.28200e-06	823.0	end
pd-106	92	0	7.30400e-06	823.0	end
pd-108	92	0	5.26500e-06	823.0	end
pu-239	92	0	8.17300e-05	823.0	end
u-236	92	0	1.02000e-04	823.0	end
i-127	92	0	1.69500e-06	823.0	end
cs-133	92	0	4.63300e-05	823.0	end
pu-243	92	0	2.24300e-09	823.0	end
cs-137	92	0	4.74200e-05	823.0	end
zr-94	92	0	4.52100e-05	823.0	end
tc-99	92	0	4.35100e-05	823.0	end
nd-143	92	0	2.87500e-05	823.0	end
mo-95	92	0	3.68900e-05	823.0	end
pu-240	92	0	4.16200e-05	823.0	end
nd-145	92	0	2.57500e-05	823.0	end
cd-111	92	0	7.64800e-07	823.0	end
nd-146	92	0	2.52300e-05	823.0	end
ce-144	92	0	1.59000e-05	823.0	end
rh-103	92	0	2.12100e-05	823.0	end
xe-131	92	0	1.83500e-05	823.0	end
cs-135	92	0	1.12500e-05	823.0	end
nd-148	92	0	1.33500e-05	823.0	end
pm-147	92	0	7.88300e-06	823.0	end
pu-241	92	0	1.88800e-05	823.0	end
sm-150	92	0	1.01500e-05	823.0	end
ru-106	92	0	7.24500e-06	823.0	end
sm-152	92	0	4.22500e-06	823.0	end
np-237	92	0	6.45900e-06	823.0	end
xe-136	92	0	9.22300e-05	823.0	end
kr-83	92	0	2.78600e-06	823.0	end
eu-153	92	0	3.56900e-06	823.0	end
sm-147	92	0	2.69000e-06	823.0	end
ag-109	92	0	2.91200e-06	823.0	end
cs-134	92	0	3.87900e-06	823.0	end
zr-96	92	0	4.58000e-05	823.0	end



pu-242	92	0	7.83300e-06	823.0	end
mo-100	92	0	4.96300e-05	823.0	end
xe-134	92	0	6.08000e-05	823.0	end
li-6	92	0	9.14700e-09	823.0	end
sr-90	92	0	3.49800e-05	823.0	end
gd-156	92	0	1.82300e-06	823.0	end
zr-92	92	0	3.97700e-05	823.0	end
ba-138	92	0	5.08000e-05	823.0	end
sm-151	92	0	2.85500e-07	823.0	end
sn-126	92	0	6.93900e-07	823.0	end
pr-143	92	0	9.68000e-07	823.0	end
pu-238	92	0	1.55200e-06	823.0	end
sn-115	92	0	7.53400e-09	823.0	end
ce-142	92	0	4.29500e-05	823.0	end
zr-93	92	0	4.27700e-05	823.0	end
te-130	92	0	1.50000e-05	823.0	end
mo-98	92	0	4.45400e-05	823.0	end
kr-86	92	0	1.21800e-05	823.0	end
la-139	92	0	4.73600e-05	823.0	end
eu-154	92	0	5.56500e-07	823.0	end
gd-158	92	0	4.50200e-07	823.0	end
xe-132	92	0	4.10800e-05	823.0	end
rb-87	92	0	1.63200e-05	823.0	end
zr-95	92	0	5.08000e-06	823.0	end
am-241	92	0	4.17200e-07	823.0	end
ru-104	92	0	2.45600e-05	823.0	end
sm-149	92	0	5.36200e-08	823.0	end
eu-155	92	0	2.29000e-07	823.0	end
mo-97	92	0	4.49400e-05	823.0	end
sr-88	92	0	2.23500e-05	823.0	end
nd-147	92	0	3.35500e-07	823.0	end
pr-141	92	0	4.03300e-05	823.0	end
ru-102	92	0	3.87900e-05	823.0	end
nd-150	92	0	5.94400e-06	823.0	end
ce-140	92	0	4.76900e-05	823.0	end
he-4	92	0	3.61100e-06	823.0	end
rb-85	92	0	6.56200e-06	823.0	end
he-3	92	0	7.34000e-10	823.0	end
am-243	92	0	1.10200e-06	823.0	end
kr-84	92	0	7.84200e-06	823.0	end
sr-89	92	0	2.31700e-06	823.0	end
zr-91	92	0	3.40300e-05	823.0	end
ru-101	92	0	4.11800e-05	823.0	end
y-89	92	0	2.72700e-05	823.0	end
i-135	92	0	2.51300e-08	823.0	end
se-82	92	0	2.25200e-06	823.0	end
y-91	92	0	3.48000e-06	823.0	end
u-234	92	0	2.99400e-08	823.0	end
kr-85	92	0	1.72700e-06	823.0	end
nb-95	92	0	2.74000e-06	823.0	end
nd-144	92	0	3.54800e-05	823.0	end
h-1	92	0	3.28500e-08	823.0	end
te-128	92	0	3.38000e-06	823.0	end
pd-105	92	0	1.60200e-05	823.0	end
cm-242	92	0	1.58300e-07	823.0	end
ba-140	92	0	1.06500e-06	823.0	end
xe-135	92	0	5.33300e-09	823.0	end
ru-103	92	0	2.85200e-06	823.0	end
gd-160	92	0	2.53800e-08	823.0	end
ce-141	92	0	2.56400e-06	823.0	end
gd-154	92	0	3.32500e-08	823.0	end

se-80	92	0	8.83500e-07	823.0	end
sm-154	92	0	1.05500e-06	823.0	end
er-166	92	0	2.95100e-10	823.0	end
br-81	92	0	1.43900e-06	823.0	end
ru-100	92	0	3.97500e-06	823.0	end
ba-136	92	0	6.95800e-07	823.0	end
pm-148	92	0	5.01200e-08	823.0	end
ba-137	92	0	1.33000e-06	823.0	end
cm-244	92	0	2.15500e-07	823.0	end
pd-104	92	0	8.51100e-06	823.0	end
sn-124	92	0	3.07000e-07	823.0	end
gd-157	92	0	1.89300e-09	823.0	end
sm-148	92	0	3.55700e-06	823.0	end
pd-110	92	0	1.66900e-06	823.0	end
gd-155	92	0	8.46200e-10	823.0	end
sb-125	92	0	3.13000e-07	823.0	end
h-3	92	0	1.00900e-07	823.0	end
sn-122	92	0	1.83900e-07	823.0	end
ba-134	92	0	9.88600e-07	823.0	end
i-131	92	0	3.78600e-07	823.0	end
la-140	92	0	1.47400e-07	823.0	end
eu-151	92	0	1.94300e-10	823.0	end
cd-116	92	0	1.82400e-07	823.0	end
mo-96	92	0	1.47300e-06	823.0	end
gd-152	92	0	5.74600e-10	823.0	end
cd-114	92	0	4.76200e-07	823.0	end
xe-130	92	0	2.21900e-07	823.0	end
sb-123	92	0	1.71800e-07	823.0	end
sn-120	92	0	1.42700e-07	823.0	end
u-237	92	0	2.01400e-07	823.0	end
se-78	92	0	1.55300e-07	823.0	end
xe-133	92	0	4.92500e-07	823.0	end
pu-244	92	0	1.65800e-10	823.0	end
te-129m	92	0	7.93200e-08	823.0	end
b-11	92	0	3.12700e-10	823.0	end
nd-142	92	0	6.73800e-07	823.0	end
cd-112	92	0	3.95500e-07	823.0	end
sn-119	92	0	1.45600e-07	823.0	end
o-17	92	0	1.86500e-08	823.0	end
ge-76	92	0	2.23600e-08	823.0	end
sb-121	92	0	1.41100e-07	823.0	end
sn-118	92	0	1.40700e-07	823.0	end
te-127m	92	0	7.20400e-08	823.0	end
cm-246	92	0	6.72200e-10	823.0	end
eu-156	92	0	1.45000e-07	823.0	end
cm-243	92	0	2.43900e-09	823.0	end
pa-231	92	0	6.02600e-13	823.0	end
h-2	92	0	8.22400e-09	823.0	end
te-132	92	0	2.18500e-07	823.0	end
sn-123	92	0	7.98400e-09	823.0	end
cs-136	92	0	2.25800e-08	823.0	end
xe-128	92	0	6.40200e-08	823.0	end
ru-105	92	0	9.29800e-09	823.0	end
pm-148m	92	0	4.31600e-08	823.0	end
u-232	92	0	2.31000e-12	823.0	end
te-125	92	0	8.72100e-08	823.0	end
y-90	92	0	9.65600e-09	823.0	end
se-77	92	0	5.40200e-08	823.0	end
sn-116	92	0	7.86200e-08	823.0	end
pm-149	92	0	5.64800e-08	823.0	end
tb-159	92	0	5.78800e-08	823.0	end

mo-99	92	0	2.40100e-07	823.0	end
ag-107	92	0	7.40700e-13	823.0	end
kr-82	92	0	2.51200e-08	823.0	end
te-126	92	0	2.14100e-08	823.0	end
sn-125	92	0	3.93800e-09	823.0	end
as-75	92	0	8.22900e-09	823.0	end
n-15	92	0	1.34700e-09	823.0	end
sr-86	92	0	1.52100e-08	823.0	end
ge-74	92	0	3.12500e-09	823.0	end
te-122	92	0	5.80000e-09	823.0	end
li-7	92	0	7.44800e-10	823.0	end
cd-113	92	0	3.07400e-09	823.0	end
th-230	92	0	9.71400e-14	823.0	end
te-124	92	0	4.25100e-09	823.0	end
cd-115m	92	0	7.53400e-10	823.0	end
be-9	92	0	4.33400e-10	823.0	end
sb-124	92	0	1.29600e-09	823.0	end
i-130	92	0	4.87500e-10	823.0	end
dy-163	92	0	3.89400e-09	823.0	end
rb-86	92	0	1.26700e-09	823.0	end
dy-160	92	0	2.81600e-09	823.0	end
ge-73	92	0	1.06400e-09	823.0	end
sb-126	92	0	2.52700e-10	823.0	end
rh-105	92	0	6.49700e-08	823.0	end
nb-93	92	0	1.64700e-12	823.0	end
ba-135	92	0	4.86900e-09	823.0	end
tb-160	92	0	1.57700e-09	823.0	end
ho-165	92	0	1.20300e-09	823.0	end
dy-164	92	0	5.81400e-10	823.0	end
cm-247	92	0	4.15900e-12	823.0	end
mo-94	92	0	3.14600e-10	823.0	end
sr-87	92	0	1.02900e-10	823.0	end
n-14	92	0	2.39400e-13	823.0	end
u-233	92	0	1.02900e-11	823.0	end
nb-94	92	0	2.95600e-11	823.0	end
sm-153	92	0	3.90500e-08	823.0	end
ru-98	92	0	5.42600e-12	823.0	end
ce-143	92	0	1.00000e-07	823.0	end
b-10	92	0	3.82100e-16	823.0	end
pm-151	92	0	1.04700e-08	823.0	end
eu-157	92	0	7.79400e-10	823.0	end
cm-245	92	0	7.15300e-09	823.0	end
cd-110	92	0	8.41000e-07	823.0	end
dy-162	92	0	6.32500e-09	823.0	end
am-242m	92	0	6.98200e-09	823.0	end
dy-161	92	0	7.49300e-09	823.0	end
in-115	92	0	8.07600e-08	823.0	end
eu-152	92	0	6.70300e-10	823.0	end
ag-111	92	0	1.99700e-08	823.0	end
sn-117	92	0	1.65600e-07	823.0	end
o-16	93	0	4.55800e-02	823.0	end
u-238	93	0	2.15200e-02	823.0	end
u-235	93	0	3.25500e-04	823.0	end
i-129	93	0	4.89900e-06	823.0	end
pd-107	93	0	6.62100e-06	823.0	end
pd-106	93	0	5.56700e-06	823.0	end
pu-239	93	0	9.46300e-05	823.0	end
pd-108	93	0	4.12200e-06	823.0	end
u-236	93	0	9.83700e-05	823.0	end
i-127	93	0	1.44300e-06	823.0	end
cs-133	93	0	4.14800e-05	823.0	end

pu-243	93	0	1.35300e-09	823.0	end
cs-137	93	0	4.17800e-05	823.0	end
zr-94	93	0	4.03000e-05	823.0	end
tc-99	93	0	3.88300e-05	823.0	end
nd-143	93	0	2.84000e-05	823.0	end
mo-95	93	0	3.25300e-05	823.0	end
pu-240	93	0	3.66700e-05	823.0	end
nd-145	93	0	2.33100e-05	823.0	end
cd-111	93	0	6.02900e-07	823.0	end
nd-146	93	0	2.19400e-05	823.0	end
ce-144	93	0	1.46200e-05	823.0	end
rh-103	93	0	1.92800e-05	823.0	end
xe-131	93	0	1.66900e-05	823.0	end
cs-135	93	0	1.25800e-05	823.0	end
nd-148	93	0	1.17300e-05	823.0	end
pm-147	93	0	7.54100e-06	823.0	end
pu-241	93	0	1.80600e-05	823.0	end
sm-150	93	0	8.77800e-06	823.0	end
ru-106	93	0	5.91300e-06	823.0	end
pr-141	93	0	3.57100e-05	823.0	end
np-237	93	0	6.09200e-06	823.0	end
sm-152	93	0	3.67600e-06	823.0	end
kr-83	93	0	2.68600e-06	823.0	end
xe-136	93	0	7.82600e-05	823.0	end
eu-153	93	0	3.00900e-06	823.0	end
sm-147	93	0	2.45600e-06	823.0	end
ag-109	93	0	2.33000e-06	823.0	end
cs-134	93	0	3.04200e-06	823.0	end
zr-96	93	0	4.07500e-05	823.0	end
mo-100	93	0	4.37500e-05	823.0	end
li-6	93	0	1.03900e-08	823.0	end
xe-134	93	0	5.36300e-05	823.0	end
pu-242	93	0	5.07900e-06	823.0	end
sr-90	93	0	3.16000e-05	823.0	end
sm-151	93	0	3.33800e-07	823.0	end
gd-156	93	0	1.25500e-06	823.0	end
zr-92	93	0	3.57000e-05	823.0	end
ba-138	93	0	4.48900e-05	823.0	end
pr-143	93	0	9.27400e-07	823.0	end
sn-126	93	0	5.89000e-07	823.0	end
pu-238	93	0	1.29400e-06	823.0	end
sn-115	93	0	6.53900e-09	823.0	end
ce-142	93	0	3.80300e-05	823.0	end
zr-93	93	0	3.83000e-05	823.0	end
te-130	93	0	1.31600e-05	823.0	end
kr-86	93	0	1.09700e-05	823.0	end
mo-98	93	0	3.93200e-05	823.0	end
la-139	93	0	4.20200e-05	823.0	end
eu-154	93	0	4.82600e-07	823.0	end
sm-149	93	0	6.97900e-08	823.0	end
gd-158	93	0	3.35100e-07	823.0	end
rb-87	93	0	1.47200e-05	823.0	end
xe-132	93	0	3.54200e-05	823.0	end
zr-95	93	0	4.85600e-06	823.0	end
am-241	93	0	4.27900e-07	823.0	end
eu-155	93	0	1.84300e-07	823.0	end
ru-104	93	0	2.08500e-05	823.0	end
mo-97	93	0	3.98200e-05	823.0	end
sr-88	93	0	2.01400e-05	823.0	end
nd-147	93	0	3.18600e-07	823.0	end
ru-102	93	0	3.38700e-05	823.0	end

he-4	93	0	3.41800e-06	823.0	end
nd-150	93	0	5.19600e-06	823.0	end
ce-140	93	0	4.20300e-05	823.0	end
he-3	93	0	8.70700e-10	823.0	end
rb-85	93	0	5.89400e-06	823.0	end
kr-84	93	0	6.87200e-06	823.0	end
sr-89	93	0	2.31200e-06	823.0	end
zr-91	93	0	3.03400e-05	823.0	end
ru-101	93	0	3.62400e-05	823.0	end
u-234	93	0	3.66300e-08	823.0	end
i-135	93	0	2.35700e-08	823.0	end
y-89	93	0	2.43900e-05	823.0	end
se-82	93	0	2.00800e-06	823.0	end
am-243	93	0	6.64700e-07	823.0	end
y-91	93	0	3.43400e-06	823.0	end
kr-85	93	0	1.55800e-06	823.0	end
nb-95	93	0	2.60400e-06	823.0	end
h-1	93	0	2.95300e-08	823.0	end
nd-144	93	0	2.81900e-05	823.0	end
te-128	93	0	2.91600e-06	823.0	end
xe-135	93	0	7.01000e-09	823.0	end
pd-105	93	0	1.37300e-05	823.0	end
ba-140	93	0	1.00900e-06	823.0	end
ru-103	93	0	2.53200e-06	823.0	end
gd-160	93	0	1.98700e-08	823.0	end
cm-242	93	0	1.17400e-07	823.0	end
ce-141	93	0	2.42600e-06	823.0	end
gd-154	93	0	2.76900e-08	823.0	end
se-80	93	0	7.86000e-07	823.0	end
sm-154	93	0	8.85900e-07	823.0	end
br-81	93	0	1.27700e-06	823.0	end
er-166	93	0	2.11300e-10	823.0	end
ru-100	93	0	3.03400e-06	823.0	end
ba-136	93	0	5.98400e-07	823.0	end
pm-148	93	0	4.10600e-08	823.0	end
ba-137	93	0	1.14000e-06	823.0	end
sn-124	93	0	2.63700e-07	823.0	end
pd-104	93	0	6.25200e-06	823.0	end
gd-157	93	0	1.95700e-09	823.0	end
cm-244	93	0	1.14800e-07	823.0	end
gd-155	93	0	1.00500e-09	823.0	end
sm-148	93	0	2.91200e-06	823.0	end
pd-110	93	0	1.30200e-06	823.0	end
sb-125	93	0	2.68600e-07	823.0	end
eu-151	93	0	3.19500e-10	823.0	end
h-3	93	0	8.54800e-08	823.0	end
sn-122	93	0	1.58400e-07	823.0	end
i-131	93	0	3.50200e-07	823.0	end
la-140	93	0	1.38300e-07	823.0	end
ba-134	93	0	7.61300e-07	823.0	end
gd-152	93	0	7.79400e-10	823.0	end
cd-116	93	0	1.55600e-07	823.0	end
mo-96	93	0	1.11800e-06	823.0	end
cd-114	93	0	3.91600e-07	823.0	end
sb-123	93	0	1.48600e-07	823.0	end
xe-130	93	0	1.48100e-07	823.0	end
sn-120	93	0	1.23600e-07	823.0	end
u-237	93	0	1.82100e-07	823.0	end
xe-133	93	0	4.62200e-07	823.0	end
se-78	93	0	1.36800e-07	823.0	end
te-129m	93	0	7.07800e-08	823.0	end

b-11	93	0	2.70100e-10	823.0	end
sn-119	93	0	1.26400e-07	823.0	end
cd-112	93	0	3.14600e-07	823.0	end
nd-142	93	0	4.55100e-07	823.0	end
pu-244	93	0	7.88700e-11	823.0	end
ge-76	93	0	1.97800e-08	823.0	end
o-17	93	0	1.34500e-08	823.0	end
pa-231	93	0	9.15100e-13	823.0	end
sn-118	93	0	1.21600e-07	823.0	end
sb-121	93	0	1.21800e-07	823.0	end
te-127m	93	0	6.30500e-08	823.0	end
eu-156	93	0	9.54500e-08	823.0	end
h-2	93	0	7.32000e-09	823.0	end
te-132	93	0	2.03500e-07	823.0	end
cm-243	93	0	1.61400e-09	823.0	end
sn-123	93	0	6.73600e-09	823.0	end
cs-136	93	0	2.03400e-08	823.0	end
pm-148m	93	0	4.83200e-08	823.0	end
xe-128	93	0	5.18600e-08	823.0	end
u-232	93	0	2.27900e-12	823.0	end
ru-105	93	0	7.84800e-09	823.0	end
cm-246	93	0	2.55600e-10	823.0	end
te-125	93	0	7.30500e-08	823.0	end
y-90	93	0	8.57600e-09	823.0	end
se-77	93	0	4.86200e-08	823.0	end
pm-149	93	0	4.93200e-08	823.0	end
sn-116	93	0	6.27900e-08	823.0	end
tb-159	93	0	4.52400e-08	823.0	end
mo-99	93	0	2.26200e-07	823.0	end
ag-107	93	0	5.91800e-13	823.0	end
te-126	93	0	1.85200e-08	823.0	end
kr-82	93	0	2.08400e-08	823.0	end
sn-125	93	0	3.38200e-09	823.0	end
n-15	93	0	1.35500e-09	823.0	end
as-75	93	0	7.24800e-09	823.0	end
sr-86	93	0	1.25000e-08	823.0	end
ge-74	93	0	2.72100e-09	823.0	end
th-230	93	0	1.16000e-13	823.0	end
te-122	93	0	4.76200e-09	823.0	end
li-7	93	0	6.46700e-10	823.0	end
te-124	93	0	3.50500e-09	823.0	end
cd-115m	93	0	6.52200e-10	823.0	end
be-9	93	0	3.72300e-10	823.0	end
sb-124	93	0	1.06700e-09	823.0	end
i-130	93	0	3.17700e-10	823.0	end
dy-163	93	0	2.86200e-09	823.0	end
rb-86	93	0	1.04700e-09	823.0	end
dy-160	93	0	2.16600e-09	823.0	end
ge-73	93	0	9.27800e-10	823.0	end
sb-126	93	0	2.25600e-10	823.0	end
rh-105	93	0	5.68400e-08	823.0	end
nb-93	93	0	1.36100e-12	823.0	end
ba-135	93	0	3.43800e-09	823.0	end
tb-160	93	0	1.19500e-09	823.0	end
ho-165	93	0	8.04000e-10	823.0	end
dy-164	93	0	5.25300e-10	823.0	end
mo-94	93	0	2.71900e-10	823.0	end
sr-87	93	0	7.62500e-11	823.0	end
cm-247	93	0	1.56400e-12	823.0	end
n-14	93	0	2.21700e-13	823.0	end
u-233	93	0	1.57500e-11	823.0	end

```

nb-94      93  0  2.38100e-11  823.0  end
sm-153    93  0  3.04900e-08   823.0  end
ru-98     93  0  4.88600e-12   823.0  end
ce-143    93  0  9.62100e-08   823.0  end
b-10      93  0  4.61700e-16   823.0  end
pm-151    93  0  9.40400e-09   823.0  end
eu-157    93  0  5.27900e-10   823.0  end
cm-245    93  0  3.95300e-09   823.0  end
in-115    93  0  7.27400e-08   823.0  end
cd-110    93  0  5.83000e-07   823.0  end
dy-162    93  0  4.68900e-09   823.0  end
am-242m   93  0  7.60400e-09   823.0  end
dy-161    93  0  6.36400e-09   823.0  end
cd-113    93  0  3.71200e-09   823.0  end
eu-152    93  0  9.64300e-10   823.0  end
ag-111    93  0  1.57500e-08   823.0  end
sn-117    93  0  1.42000e-07   823.0  end
h         100 0  0.0494201 559  end
o         100 0  0.02471 559  end
h         101 0  0.0494201 559  end
o         101 0  0.02471 559  end
h         191 0  0.0494201 559  end
o         191 0  0.02471 559  end
h         192 0  0.0494201 559  end
o         192 0  0.02471 559  end
h         193 0  0.0494201 559  end
o         193 0  0.02471 559  end
zirc4     200 1 559  end
zirc4     201 1 580  end
zirc4     291 1 580  end
zirc4     292 1 580  end
zirc4     293 1 580  end
b-10     998 0 0.0152718 559  end
b-11     998 0 0.061471 559  end
c         998 0 0.0191857 559  end
c         999 0 0.000311144 559  end
si        999 0 0.00166178 559  end
cr        999 0 0.0152593 559  end
mn        999 0 0.00169906 559  end
fe        999 0 0.054674 559  end
ni        999 0 0.00954318 559  end
mo        999 0 0.00121616 559  end
end composition
read celldata
  latticecell squarepitch fuelr=0.529 91 gapr=0.54 0 cladr=0.625 291
  hpitch=0.8125 191 end
  latticecell squarepitch fuelr=0.529 92 gapr=0.54 0 cladr=0.625 292
  hpitch=0.8125 192 end
  latticecell squarepitch fuelr=0.529 93 gapr=0.54 0 cladr=0.625 293
  hpitch=0.8125 193 end
end celldata
read parameter
gen=1200
npg=50000
nsk=200
htm=yes
fdn=yes
flx=yes
far=yes
gas=yes
end parameter

```

```

read geometry
unit 91
com='unit 91'
  zcylinder 91 1 0.529 4 0
  zcylinder 0 1 0.54 4 0
  zcylinder 201 1 0.625 4 0
  cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 92
com='unit 92'
  zcylinder 92 1 0.529 4 0
  zcylinder 0 1 0.54 4 0
  zcylinder 201 1 0.625 4 0
  cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 93
com='unit 93'
  zcylinder 93 1 0.529 4 0
  zcylinder 0 1 0.54 4 0
  zcylinder 201 1 0.625 4 0
  cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 99
com='unit 99'
  zcylinder 100 1 0.54 4 0
  zcylinder 200 1 0.625 4 0
  cuboid 101 1 0.8125 -0.8125 0.8125 -0.8125 4 0
unit 105
com='unit 105 references array 5'
  array 5 -6.5 -6.5 0
  cuboid 101 1 6.7 -6.7 6.7 -6.7 4 0
  cuboid 200 1 7 -7 7 -7 4 0
unit 201
com='unit 201'
  cuboid 999 1 2 0 0.33 0 4 0
unit 206
com='unit 206'
  cuboid 999 1 0.33 0 0.835 -0.835 4 0
unit 211
com='unit 211'
  zhemicyl+y 998 1 0.17525 4 0 chord 0
  zhemicyl+y 999 1 0.23875 4 0 chord 0
  cuboid 100 1 0.2715 -0.2715 0.25 0 4 0
  cuboid 999 1 0.2715 -0.2715 0.33 0 4 0
unit 216
com='unit 216'
  zhemicyl+x 998 1 0.17525 4 0 chord 0
  zhemicyl+x 999 1 0.23875 4 0 chord 0
  cuboid 100 1 0.25 0 0.2715 -0.2715 4 0
  cuboid 999 1 0.33 0 0.2715 -0.2715 4 0
unit 221
com='unit 221 references array 201'
  array 201 -15.25 -15.25 0
unit 226
com='unit 226 references array 206'
  array 206 -15.25 -14.9199 0
global unit 261
com='unit 261'
  cuboid 100 1 7.625 -7.625 7.625 -7.625 4 0
  hole 105 0 0 0
  hole 221 7.625 7.625 0
  hole 226 7.625 7.625 0
end geometry
read array

```



```

ara=5 nux=8 nuy=8 nuz=1
fill
  91  92  93  93  93  93  92  91
  92  93  93  93  93  93  93  92
  93  93  93  93  93  93  93  93
  93  93  93  93  93  93  93  93
  93  93  93  93  99  93  93  93
  93  93  93  93  93  93  93  93
  92  93  93  93  93  93  93  92
  91  92  93  93  93  93  92  91 end fill
ara=201 nux=20 nuy=1 nuz=1
fill
  201  211  211  211  211  211  211  211  211  211  211  211  211  211
211  211  211  211  211  211 end fill
ara=206 nux=1 nuy=20 nuz=1
fill
  206
  216
  216
  216
  216
  216
  216
  216
  216
  216
  216
  216
  216
  216
  216
  216
  216
  216
  216
  216 end fill
end array
read bnds
+xb=mirror
-xb=mirror
+yb=mirror
-yb=mirror
+zb=mirror
-zb=mirror
end bnds
end data
end

```

### 5.3 Nuklidinventare der Brennstabtypen 91, 92 und 93 nach Abbränden von 28, 29 und 30 GWd/tSM

Brennstabtyp	Stabtyp 91 (3,06 % Anfangsanr.)			Stabtyp 92 (3,80 % Anfangsanr.)			Stabtyp 93 (4,12 % Anfangsanr.)		
Abbrand GWd/tSM	28	29	30	28	29	30	28	29	30
Nuklid									
ag-107	7,937E-13	8,557E-13	9,216E-13	6,859E-13	7,407E-13	7,982E-13	5,471E-13	5,918E-13	6,392E-13
ag-109	3,194E-06	3,364E-06	3,525E-06	2,760E-06	2,912E-06	3,065E-06	2,200E-06	2,330E-06	2,463E-06
ag-111	2,226E-08	2,287E-08	2,347E-08	1,939E-08	1,997E-08	2,059E-08	1,527E-08	1,575E-08	1,627E-08
am-241	3,931E-07	4,040E-07	4,159E-07	4,012E-07	4,172E-07	4,328E-07	4,052E-07	4,279E-07	4,506E-07
am-242m	6,334E-09	6,510E-09	6,703E-09	6,711E-09	6,982E-09	7,251E-09	7,188E-09	7,604E-09	8,029E-09
am-243	1,372E-06	1,535E-06	1,723E-06	9,703E-07	1,102E-06	1,244E-06	5,801E-07	6,647E-07	7,603E-07
as-75	7,777E-09	8,014E-09	8,242E-09	7,978E-09	8,229E-09	8,477E-09	7,001E-09	7,248E-09	7,494E-09
b-10	3,052E-16	3,090E-16	3,138E-16	3,774E-16	3,821E-16	3,870E-16	4,535E-16	4,617E-16	4,702E-16
b-11	3,045E-10	3,153E-10	3,258E-10	3,018E-10	3,127E-10	3,235E-10	2,598E-10	2,701E-10	2,804E-10
ba-134	9,686E-07	1,058E-06	1,152E-06	9,041E-07	9,886E-07	1,078E-06	6,944E-07	7,613E-07	8,327E-07
ba-135	4,840E-09	5,546E-09	6,310E-09	4,247E-09	4,869E-09	5,553E-09	2,996E-09	3,438E-09	3,932E-09
ba-136	6,942E-07	7,357E-07	7,770E-07	6,556E-07	6,958E-07	7,367E-07	5,621E-07	5,984E-07	6,359E-07
ba-137	1,242E-06	1,313E-06	1,387E-06	1,257E-06	1,330E-06	1,406E-06	1,074E-06	1,140E-06	1,207E-06
ba-138	4,760E-05	4,907E-05	5,050E-05	4,923E-05	5,080E-05	5,235E-05	4,336E-05	4,489E-05	4,642E-05
ba-140	9,990E-07	9,918E-07	9,843E-07	1,072E-06	1,065E-06	1,058E-06	1,012E-06	1,009E-06	1,007E-06
be-9	4,262E-10	4,419E-10	4,573E-10	4,177E-10	4,334E-10	4,490E-10	3,577E-10	3,723E-10	3,871E-10
br-81	1,339E-06	1,376E-06	1,412E-06	1,398E-06	1,439E-06	1,479E-06	1,236E-06	1,277E-06	1,318E-06
cd-110	9,932E-07	1,091E-06	1,200E-06	7,627E-07	8,410E-07	9,255E-07	5,270E-07	5,830E-07	6,425E-07
cd-111	8,395E-07	8,902E-07	9,412E-07	7,207E-07	7,648E-07	8,101E-07	5,670E-07	6,029E-07	6,401E-07
cd-112	4,284E-07	4,536E-07	4,789E-07	3,736E-07	3,955E-07	4,180E-07	2,968E-07	3,146E-07	3,330E-07

<b>Brennstabtyp</b>	<b>Stabtyp 91 (3,06 % Anfangsanr.)</b>			<b>Stabtyp 92 (3,80 % Anfangsanr.)</b>			<b>Stabtyp 93 (4,12 % Anfangsanr.)</b>		
<b>Abbrand GWd/tSM</b>	<b>28</b>	<b>29</b>	<b>30</b>	<b>28</b>	<b>29</b>	<b>30</b>	<b>28</b>	<b>29</b>	<b>30</b>
<b>Nuklid</b>									
cd-113	2,704E-09	2,711E-09	2,724E-09	3,036E-09	3,074E-09	3,057E-09	3,688E-09	3,712E-09	3,733E-09
cd-114	4,983E-07	5,243E-07	5,494E-07	4,530E-07	4,762E-07	4,993E-07	3,720E-07	3,916E-07	4,116E-07
cd-115m	7,778E-10	7,942E-10	8,084E-10	7,381E-10	7,534E-10	7,682E-10	6,381E-10	6,522E-10	6,663E-10
cd-116	1,838E-07	1,917E-07	1,994E-07	1,748E-07	1,824E-07	1,899E-07	1,488E-07	1,556E-07	1,625E-07
ce-140	4,467E-05	4,609E-05	4,749E-05	4,618E-05	4,769E-05	4,921E-05	4,057E-05	4,203E-05	4,352E-05
ce-141	2,402E-06	2,388E-06	2,371E-06	2,578E-06	2,564E-06	2,550E-06	2,429E-06	2,426E-06	2,424E-06
ce-142	4,009E-05	4,129E-05	4,245E-05	4,166E-05	4,295E-05	4,423E-05	3,676E-05	3,803E-05	3,931E-05
ce-143	9,255E-08	9,159E-08	9,069E-08	1,011E-07	1,000E-07	9,921E-08	9,673E-08	9,621E-08	9,586E-08
ce-144	1,470E-05	1,483E-05	1,493E-05	1,573E-05	1,590E-05	1,605E-05	1,438E-05	1,462E-05	1,484E-05
cm-242	1,758E-07	1,895E-07	2,030E-07	1,454E-07	1,583E-07	1,713E-07	1,067E-07	1,174E-07	1,287E-07
cm-243	2,809E-09	3,170E-09	3,538E-09	2,136E-09	2,439E-09	2,762E-09	1,395E-09	1,614E-09	1,857E-09
cm-244	2,812E-07	3,318E-07	3,894E-07	1,808E-07	2,155E-07	2,547E-07	9,552E-08	1,148E-07	1,376E-07
cm-245	8,830E-09	1,068E-08	1,285E-08	5,847E-09	7,153E-09	8,682E-09	3,187E-09	3,953E-09	4,890E-09
cm-246	1,003E-09	1,284E-09	1,625E-09	5,204E-10	6,722E-10	8,601E-10	1,955E-10	2,556E-10	3,327E-10
cm-247	5,999E-12	8,041E-12	1,063E-11	3,076E-12	4,159E-12	5,558E-12	1,144E-12	1,564E-12	2,126E-12
cs-133	4,333E-05	4,450E-05	4,562E-05	4,505E-05	4,633E-05	4,758E-05	4,017E-05	4,148E-05	4,277E-05
cs-134	3,837E-06	4,097E-06	4,344E-06	3,630E-06	3,879E-06	4,128E-06	2,838E-06	3,042E-06	3,253E-06
cs-135	9,136E-06	9,377E-06	9,618E-06	1,097E-05	1,125E-05	1,152E-05	1,225E-05	1,258E-05	1,291E-05
cs-136	2,163E-08	2,237E-08	2,307E-08	2,182E-08	2,258E-08	2,336E-08	1,964E-08	2,034E-08	2,109E-08
cs-137	4,479E-05	4,621E-05	4,758E-05	4,593E-05	4,742E-05	4,889E-05	4,034E-05	4,178E-05	4,322E-05
dy-160	3,044E-09	3,357E-09	3,686E-09	2,552E-09	2,816E-09	3,097E-09	1,958E-09	2,166E-09	2,390E-09
dy-161	7,908E-09	8,286E-09	8,664E-09	7,129E-09	7,493E-09	7,861E-09	6,025E-09	6,364E-09	6,711E-09
dy-162	7,272E-09	7,740E-09	8,205E-09	5,934E-09	6,325E-09	6,728E-09	4,389E-09	4,689E-09	5,000E-09
dy-163	4,471E-09	4,850E-09	5,239E-09	3,589E-09	3,894E-09	4,215E-09	2,637E-09	2,862E-09	3,102E-09
dy-164	5,927E-10	6,364E-10	6,821E-10	5,419E-10	5,814E-10	6,229E-10	4,894E-10	5,253E-10	5,635E-10
er-166	3,426E-10	3,781E-10	4,158E-10	2,684E-10	2,951E-10	3,239E-10	1,931E-10	2,113E-10	2,311E-10
eu-151	1,370E-10	1,354E-10	1,346E-10	1,973E-10	1,943E-10	1,916E-10	3,239E-10	3,195E-10	3,150E-10
eu-152	4,913E-10	4,790E-10	4,697E-10	6,873E-10	6,703E-10	6,548E-10	9,802E-10	9,643E-10	9,481E-10

Brennstabtyp	Stabtyp 91 (3,06 % Anfangsanr.)			Stabtyp 92 (3,80 % Anfangsanr.)			Stabtyp 93 (4,12 % Anfangsanr.)		
Abbrand GWd/tSM	28	29	30	28	29	30	28	29	30
Nuklid									
eu-153	3,508E-06	3,664E-06	3,819E-06	3,410E-06	3,569E-06	3,727E-06	2,861E-06	3,009E-06	3,161E-06
eu-154	5,328E-07	5,613E-07	5,907E-07	5,259E-07	5,565E-07	5,875E-07	4,520E-07	4,826E-07	5,139E-07
eu-155	2,310E-07	2,428E-07	2,550E-07	2,171E-07	2,290E-07	2,409E-07	1,735E-07	1,843E-07	1,949E-07
eu-156	1,636E-07	1,743E-07	1,850E-07	1,357E-07	1,450E-07	1,547E-07	8,917E-08	9,545E-08	1,021E-07
eu-157	9,218E-10	9,700E-10	1,019E-09	7,409E-10	7,794E-10	8,219E-10	5,044E-10	5,279E-10	5,542E-10
gd-152	4,183E-10	4,146E-10	4,119E-10	5,767E-10	5,746E-10	5,722E-10	7,729E-10	7,794E-10	7,849E-10
gd-154	3,169E-08	3,425E-08	3,696E-08	3,064E-08	3,325E-08	3,599E-08	2,532E-08	2,769E-08	3,020E-08
gd-155	6,907E-10	7,179E-10	7,472E-10	8,123E-10	8,462E-10	8,783E-10	9,578E-10	1,005E-09	1,049E-09
gd-156	2,012E-06	2,199E-06	2,394E-06	1,669E-06	1,823E-06	1,988E-06	1,150E-06	1,255E-06	1,368E-06
gd-157	1,767E-09	1,840E-09	1,915E-09	1,820E-09	1,893E-09	1,970E-09	1,889E-09	1,957E-09	2,030E-09
gd-158	5,033E-07	5,410E-07	5,794E-07	4,196E-07	4,502E-07	4,825E-07	3,129E-07	3,351E-07	3,586E-07
gd-160	2,815E-08	2,987E-08	3,160E-08	2,389E-08	2,538E-08	2,691E-08	1,867E-08	1,987E-08	2,112E-08
ge-73	1,042E-09	1,080E-09	1,117E-09	1,026E-09	1,064E-09	1,102E-09	8,918E-10	9,278E-10	9,640E-10
ge-74	3,015E-09	3,121E-09	3,224E-09	3,017E-09	3,125E-09	3,233E-09	2,618E-09	2,721E-09	2,824E-09
ge-76	2,084E-08	2,144E-08	2,202E-08	2,170E-08	2,236E-08	2,301E-08	1,913E-08	1,978E-08	2,043E-08
h-1	3,147E-08	3,297E-08	3,430E-08	3,138E-08	3,285E-08	3,426E-08	2,817E-08	2,953E-08	3,090E-08
h-2	7,848E-09	8,126E-09	8,394E-09	7,939E-09	8,224E-09	8,504E-09	7,048E-09	7,320E-09	7,595E-09
h-3	9,806E-08	1,018E-07	1,054E-07	9,715E-08	1,009E-07	1,047E-07	8,202E-08	8,548E-08	8,898E-08
he-3	5,921E-10	6,035E-10	6,163E-10	7,204E-10	7,340E-10	7,476E-10	8,513E-10	8,707E-10	8,905E-10
he-4	3,385E-06	3,529E-06	3,673E-06	3,465E-06	3,611E-06	3,759E-06	3,275E-06	3,418E-06	3,564E-06
ho-165	1,440E-09	1,584E-09	1,735E-09	1,094E-09	1,203E-09	1,319E-09	7,316E-10	8,040E-10	8,823E-10
i-127	1,697E-06	1,765E-06	1,832E-06	1,631E-06	1,695E-06	1,763E-06	1,386E-06	1,443E-06	1,507E-06
i-129	5,527E-06	5,736E-06	5,940E-06	5,428E-06	5,636E-06	5,844E-06	4,703E-06	4,899E-06	5,096E-06
i-130	5,590E-10	5,900E-10	6,200E-10	4,615E-10	4,875E-10	5,150E-10	3,004E-10	3,177E-10	3,362E-10
i-131	3,664E-07	3,659E-07	3,652E-07	3,793E-07	3,786E-07	3,784E-07	3,496E-07	3,502E-07	3,512E-07
i-135	2,398E-08	2,388E-08	2,380E-08	2,525E-08	2,513E-08	2,507E-08	2,359E-08	2,357E-08	2,360E-08
in-115	8,038E-08	8,176E-08	8,301E-08	7,932E-08	8,076E-08	8,212E-08	7,110E-08	7,274E-08	7,430E-08
kr-82	2,376E-08	2,547E-08	2,719E-08	2,340E-08	2,512E-08	2,690E-08	1,936E-08	2,084E-08	2,240E-08

<b>Brennstabtyp</b>	<b>Stabtyp 91 (3,06 % Anfangsanr.)</b>			<b>Stabtyp 92 (3,80 % Anfangsanr.)</b>			<b>Stabtyp 93 (4,12 % Anfangsanr.)</b>		
<b>Abbrand GWd/tSM</b>	<b>28</b>	<b>29</b>	<b>30</b>	<b>28</b>	<b>29</b>	<b>30</b>	<b>28</b>	<b>29</b>	<b>30</b>
<b>Nuklid</b>									
kr-83	2,430E-06	2,456E-06	2,479E-06	2,744E-06	2,786E-06	2,825E-06	2,625E-06	2,686E-06	2,744E-06
kr-84	7,244E-06	7,466E-06	7,679E-06	7,600E-06	7,842E-06	8,082E-06	6,640E-06	6,872E-06	7,104E-06
kr-85	1,565E-06	1,600E-06	1,632E-06	1,685E-06	1,727E-06	1,767E-06	1,514E-06	1,558E-06	1,601E-06
kr-86	1,102E-05	1,129E-05	1,155E-05	1,186E-05	1,218E-05	1,248E-05	1,064E-05	1,097E-05	1,130E-05
la-139	4,424E-05	4,557E-05	4,685E-05	4,593E-05	4,736E-05	4,877E-05	4,061E-05	4,202E-05	4,343E-05
la-140	1,395E-07	1,383E-07	1,378E-07	1,487E-07	1,474E-07	1,470E-07	1,390E-07	1,383E-07	1,385E-07
li-6	7,442E-09	7,324E-09	7,205E-09	9,227E-09	9,147E-09	9,055E-09	1,033E-08	1,039E-08	1,043E-08
li-7	7,184E-10	7,427E-10	7,663E-10	7,199E-10	7,448E-10	7,696E-10	6,229E-10	6,467E-10	6,706E-10
mo-100	4,684E-05	4,834E-05	4,980E-05	4,805E-05	4,963E-05	5,120E-05	4,222E-05	4,375E-05	4,529E-05
mo-94	2,754E-10	3,010E-10	3,227E-10	2,889E-10	3,146E-10	3,396E-10	2,493E-10	2,719E-10	2,952E-10
mo-95	3,415E-05	3,527E-05	3,635E-05	3,566E-05	3,689E-05	3,810E-05	3,132E-05	3,253E-05	3,374E-05
mo-96	1,462E-06	1,580E-06	1,705E-06	1,357E-06	1,473E-06	1,595E-06	1,030E-06	1,118E-06	1,213E-06
mo-97	4,203E-05	4,330E-05	4,453E-05	4,358E-05	4,494E-05	4,629E-05	3,848E-05	3,982E-05	4,116E-05
mo-98	4,188E-05	4,320E-05	4,449E-05	4,314E-05	4,454E-05	4,593E-05	3,796E-05	3,932E-05	4,069E-05
mo-99	2,280E-07	2,268E-07	2,258E-07	2,415E-07	2,401E-07	2,393E-07	2,266E-07	2,262E-07	2,263E-07
n-14	2,880E-13	1,795E-13	2,651E-13	2,331E-13	2,394E-13	2,551E-13	2,114E-13	2,217E-13	2,546E-13
n-15	1,234E-09	1,287E-09	1,346E-09	1,289E-09	1,347E-09	1,403E-09	1,299E-09	1,355E-09	1,412E-09
nb-93	1,643E-12	1,754E-12	1,867E-12	1,539E-12	1,647E-12	1,759E-12	1,268E-12	1,361E-12	1,458E-12
nb-94	3,239E-11	3,408E-11	3,576E-11	2,803E-11	2,956E-11	3,111E-11	2,249E-11	2,381E-11	2,515E-11
nb-95	2,499E-06	2,509E-06	2,507E-06	2,724E-06	2,740E-06	2,745E-06	2,573E-06	2,604E-06	2,625E-06
nd-142	7,168E-07	7,767E-07	8,375E-07	6,211E-07	6,738E-07	7,288E-07	4,187E-07	4,551E-07	4,937E-07
nd-143	2,492E-05	2,514E-05	2,532E-05	2,836E-05	2,875E-05	2,911E-05	2,776E-05	2,840E-05	2,901E-05
nd-144	3,463E-05	3,645E-05	3,827E-05	3,367E-05	3,548E-05	3,732E-05	2,670E-05	2,819E-05	2,972E-05
nd-145	2,368E-05	2,426E-05	2,480E-05	2,509E-05	2,575E-05	2,638E-05	2,262E-05	2,331E-05	2,400E-05
nd-146	2,380E-05	2,465E-05	2,549E-05	2,435E-05	2,523E-05	2,612E-05	2,111E-05	2,194E-05	2,277E-05
nd-147	3,149E-07	3,130E-07	3,111E-07	3,376E-07	3,355E-07	3,339E-07	3,192E-07	3,186E-07	3,184E-07
nd-148	1,262E-05	1,302E-05	1,342E-05	1,292E-05	1,335E-05	1,377E-05	1,132E-05	1,173E-05	1,214E-05
nd-150	5,722E-06	5,929E-06	6,131E-06	5,735E-06	5,944E-06	6,152E-06	5,000E-06	5,196E-06	5,393E-06

Brennstabtyp	Stabtyp 91 (3,06 % Anfangsanr.)			Stabtyp 92 (3,80 % Anfangsanr.)			Stabtyp 93 (4,12 % Anfangsanr.)		
Abbrand GWd/tSM	28	29	30	28	29	30	28	29	30
Nuklid									
np-237	5,759E-06	6,019E-06	6,273E-06	6,157E-06	6,459E-06	6,751E-06	5,786E-06	6,092E-06	6,396E-06
o-16	4,557E-02	4,557E-02	4,557E-02	4,557E-02	4,557E-02	4,557E-02	4,558E-02	4,558E-02	4,558E-02
o-17	2,216E-08	2,318E-08	2,418E-08	1,783E-08	1,865E-08	1,948E-08	1,286E-08	1,345E-08	1,405E-08
pa-231	3,789E-13	3,625E-13	3,471E-13	6,220E-13	6,026E-13	5,830E-13	9,306E-13	9,151E-13	8,985E-13
pd-104	8,902E-06	9,612E-06	1,033E-05	7,880E-06	8,511E-06	9,162E-06	5,775E-06	6,252E-06	6,756E-06
pd-105	1,629E-05	1,703E-05	1,777E-05	1,531E-05	1,602E-05	1,673E-05	1,309E-05	1,373E-05	1,439E-05
pd-106	8,026E-06	8,580E-06	9,146E-06	6,830E-06	7,304E-06	7,796E-06	5,196E-06	5,567E-06	5,955E-06
pd-107	9,054E-06	9,567E-06	1,008E-05	7,830E-06	8,282E-06	8,745E-06	6,244E-06	6,621E-06	7,009E-06
pd-108	5,854E-06	6,204E-06	6,554E-06	4,961E-06	5,265E-06	5,576E-06	3,874E-06	4,122E-06	4,377E-06
pd-110	1,851E-06	1,964E-06	2,077E-06	1,571E-06	1,669E-06	1,769E-06	1,224E-06	1,302E-06	1,384E-06
pm-147	7,094E-06	7,137E-06	7,155E-06	7,815E-06	7,883E-06	7,936E-06	7,425E-06	7,541E-06	7,649E-06
pm-148	4,960E-08	5,046E-08	5,138E-08	4,900E-08	5,012E-08	5,129E-08	3,992E-08	4,106E-08	4,222E-08
pm-148m	3,612E-08	3,619E-08	3,636E-08	4,287E-08	4,316E-08	4,344E-08	4,761E-08	4,832E-08	4,894E-08
pm-149	5,561E-08	5,598E-08	5,640E-08	5,608E-08	5,648E-08	5,705E-08	4,886E-08	4,932E-08	4,994E-08
pm-151	1,045E-08	1,052E-08	1,059E-08	1,041E-08	1,047E-08	1,055E-08	9,332E-09	9,404E-09	9,496E-09
pr-141	3,761E-05	3,880E-05	3,996E-05	3,903E-05	4,033E-05	4,160E-05	3,444E-05	3,571E-05	3,698E-05
pr-143	8,946E-07	8,865E-07	8,767E-07	9,766E-07	9,680E-07	9,592E-07	9,311E-07	9,274E-07	9,234E-07
pu-238	1,462E-06	1,585E-06	1,709E-06	1,425E-06	1,552E-06	1,683E-06	1,182E-06	1,294E-06	1,413E-06
pu-239	7,546E-05	7,540E-05	7,543E-05	8,169E-05	8,173E-05	8,180E-05	9,416E-05	9,463E-05	9,506E-05
pu-240	4,356E-05	4,470E-05	4,565E-05	4,042E-05	4,162E-05	4,276E-05	3,535E-05	3,667E-05	3,797E-05
pu-241	1,875E-05	1,933E-05	1,992E-05	1,817E-05	1,888E-05	1,957E-05	1,720E-05	1,806E-05	1,891E-05
pu-242	9,549E-06	1,037E-05	1,120E-05	7,172E-06	7,833E-06	8,521E-06	4,612E-06	5,079E-06	5,570E-06
pu-243	2,802E-09	3,045E-09	3,326E-09	2,033E-09	2,243E-09	2,470E-09	1,216E-09	1,353E-09	1,508E-09
pu-244	2,371E-10	2,719E-10	3,116E-10	1,427E-10	1,658E-10	1,915E-10	6,740E-11	7,887E-11	9,220E-11
rb-85	5,953E-06	6,104E-06	6,247E-06	6,387E-06	6,562E-06	6,733E-06	5,714E-06	5,894E-06	6,073E-06
rb-86	1,184E-09	1,235E-09	1,283E-09	1,211E-09	1,267E-09	1,324E-09	9,988E-10	1,047E-09	1,097E-09
rb-87	1,475E-05	1,511E-05	1,544E-05	1,590E-05	1,632E-05	1,673E-05	1,428E-05	1,472E-05	1,515E-05
rh-103	2,031E-05	2,084E-05	2,135E-05	2,062E-05	2,121E-05	2,178E-05	1,865E-05	1,928E-05	1,991E-05

<b>Brennstabtyp</b>	<b>Stabtyp 91 (3,06 % Anfangsanr.)</b>			<b>Stabtyp 92 (3,80 % Anfangsanr.)</b>			<b>Stabtyp 93 (4,12 % Anfangsanr.)</b>		
<b>Abbrand GWd/tSM</b>	<b>28</b>	<b>29</b>	<b>30</b>	<b>28</b>	<b>29</b>	<b>30</b>	<b>28</b>	<b>29</b>	<b>30</b>
<b>Nuklid</b>									
rh-105	6,748E-08	6,844E-08	6,938E-08	6,400E-08	6,497E-08	6,607E-08	5,587E-08	5,684E-08	5,794E-08
ru-100	4,015E-06	4,320E-06	4,627E-06	3,692E-06	3,975E-06	4,265E-06	2,813E-06	3,034E-06	3,264E-06
ru-101	3,909E-05	4,034E-05	4,156E-05	3,988E-05	4,118E-05	4,248E-05	3,498E-05	3,624E-05	3,750E-05
ru-102	3,719E-05	3,855E-05	3,988E-05	3,741E-05	3,879E-05	4,017E-05	3,258E-05	3,387E-05	3,519E-05
ru-103	2,877E-06	2,910E-06	2,936E-06	2,822E-06	2,852E-06	2,882E-06	2,500E-06	2,532E-06	2,564E-06
ru-104	2,476E-05	2,585E-05	2,692E-05	2,353E-05	2,456E-05	2,561E-05	1,993E-05	2,085E-05	2,179E-05
ru-105	9,892E-09	1,006E-08	1,022E-08	9,139E-09	9,298E-09	9,479E-09	7,701E-09	7,848E-09	8,012E-09
ru-106	7,822E-06	8,166E-06	8,498E-06	6,935E-06	7,245E-06	7,556E-06	5,646E-06	5,913E-06	6,183E-06
ru-98	4,898E-12	5,008E-12	5,112E-12	5,292E-12	5,426E-12	5,555E-12	4,745E-12	4,886E-12	5,025E-12
sb-121	1,402E-07	1,457E-07	1,510E-07	1,358E-07	1,411E-07	1,465E-07	1,168E-07	1,218E-07	1,267E-07
sb-123	1,697E-07	1,764E-07	1,830E-07	1,652E-07	1,718E-07	1,784E-07	1,425E-07	1,486E-07	1,547E-07
sb-124	1,282E-09	1,365E-09	1,446E-09	1,216E-09	1,296E-09	1,376E-09	1,001E-09	1,067E-09	1,136E-09
sb-125	3,144E-07	3,255E-07	3,362E-07	3,022E-07	3,130E-07	3,237E-07	2,585E-07	2,686E-07	2,787E-07
sb-126	2,493E-10	2,520E-10	2,544E-10	2,503E-10	2,527E-10	2,556E-10	2,229E-10	2,256E-10	2,286E-10
se-77	4,977E-08	5,104E-08	5,225E-08	5,257E-08	5,402E-08	5,543E-08	4,710E-08	4,862E-08	5,012E-08
se-78	1,453E-07	1,497E-07	1,540E-07	1,505E-07	1,553E-07	1,600E-07	1,321E-07	1,368E-07	1,414E-07
se-80	8,146E-07	8,370E-07	8,583E-07	8,586E-07	8,835E-07	9,079E-07	7,610E-07	7,860E-07	8,110E-07
se-82	2,077E-06	2,134E-06	2,189E-06	2,188E-06	2,252E-06	2,315E-06	1,944E-06	2,008E-06	2,072E-06
sm-147	2,421E-06	2,500E-06	2,576E-06	2,597E-06	2,690E-06	2,780E-06	2,361E-06	2,456E-06	2,551E-06
sm-148	3,438E-06	3,652E-06	3,875E-06	3,341E-06	3,557E-06	3,781E-06	2,725E-06	2,912E-06	3,104E-06
sm-149	4,312E-08	4,261E-08	4,228E-08	5,428E-08	5,362E-08	5,308E-08	7,041E-08	6,979E-08	6,936E-08
sm-150	9,663E-06	9,983E-06	1,032E-05	9,810E-06	1,015E-05	1,051E-05	8,417E-06	8,778E-06	9,127E-06
sm-151	2,422E-07	2,443E-07	2,467E-07	2,837E-07	2,855E-07	2,875E-07	3,314E-07	3,338E-07	3,360E-07
sm-152	4,142E-06	4,245E-06	4,337E-06	4,121E-06	4,225E-06	4,327E-06	3,572E-06	3,676E-06	3,774E-06
sm-153	4,088E-08	4,223E-08	4,360E-08	3,778E-08	3,905E-08	4,040E-08	2,945E-08	3,049E-08	3,163E-08
sm-154	1,074E-06	1,123E-06	1,173E-06	1,008E-06	1,055E-06	1,102E-06	8,453E-07	8,859E-07	9,274E-07
sn-115	7,491E-09	7,794E-09	8,091E-09	7,236E-09	7,534E-09	7,831E-09	6,260E-09	6,539E-09	6,820E-09
sn-116	8,009E-08	8,589E-08	9,172E-08	7,326E-08	7,862E-08	8,410E-08	5,836E-08	6,279E-08	6,740E-08

Brennstabtyp	Stabtyp 91 (3,06 % Anfangsanr.)			Stabtyp 92 (3,80 % Anfangsanr.)			Stabtyp 93 (4,12 % Anfangsanr.)		
Abbrand GWd/tSM	28	29	30	28	29	30	28	29	30
Nuklid									
sn-117	1,658E-07	1,728E-07	1,796E-07	1,589E-07	1,656E-07	1,723E-07	1,359E-07	1,420E-07	1,481E-07
sn-118	1,396E-07	1,453E-07	1,510E-07	1,351E-07	1,407E-07	1,464E-07	1,165E-07	1,216E-07	1,268E-07
sn-119	1,433E-07	1,490E-07	1,546E-07	1,401E-07	1,456E-07	1,512E-07	1,212E-07	1,264E-07	1,316E-07
sn-120	1,406E-07	1,462E-07	1,518E-07	1,372E-07	1,427E-07	1,483E-07	1,185E-07	1,236E-07	1,287E-07
sn-122	1,824E-07	1,899E-07	1,971E-07	1,767E-07	1,839E-07	1,911E-07	1,518E-07	1,584E-07	1,651E-07
sn-123	8,477E-09	8,722E-09	8,938E-09	7,753E-09	7,984E-09	8,205E-09	6,518E-09	6,736E-09	6,947E-09
sn-124	3,047E-07	3,169E-07	3,288E-07	2,951E-07	3,070E-07	3,189E-07	2,528E-07	2,637E-07	2,747E-07
sn-125	4,145E-09	4,192E-09	4,235E-09	3,893E-09	3,938E-09	3,991E-09	3,335E-09	3,382E-09	3,435E-09
sn-126	6,977E-07	7,268E-07	7,554E-07	6,659E-07	6,939E-07	7,219E-07	5,637E-07	5,890E-07	6,146E-07
sr-86	1,413E-08	1,521E-08	1,632E-08	1,410E-08	1,521E-08	1,636E-08	1,156E-08	1,250E-08	1,350E-08
sr-87	1,099E-10	1,190E-10	1,283E-10	9,495E-11	1,029E-10	1,113E-10	7,046E-11	7,625E-11	8,244E-11
sr-88	2,019E-05	2,068E-05	2,114E-05	2,178E-05	2,235E-05	2,291E-05	1,954E-05	2,014E-05	2,073E-05
sr-89	2,007E-06	1,970E-06	1,928E-06	2,351E-06	2,317E-06	2,279E-06	2,327E-06	2,312E-06	2,293E-06
sr-90	3,156E-05	3,228E-05	3,295E-05	3,412E-05	3,498E-05	3,582E-05	3,069E-05	3,160E-05	3,249E-05
tb-159	6,396E-08	6,794E-08	7,193E-08	5,447E-08	5,788E-08	6,137E-08	4,251E-08	4,524E-08	4,807E-08
tb-160	1,730E-09	1,877E-09	2,025E-09	1,451E-09	1,577E-09	1,707E-09	1,098E-09	1,195E-09	1,297E-09
tc-99	4,072E-05	4,186E-05	4,294E-05	4,228E-05	4,351E-05	4,473E-05	3,759E-05	3,883E-05	4,007E-05
te-122	5,682E-09	6,165E-09	6,662E-09	5,345E-09	5,800E-09	6,276E-09	4,380E-09	4,762E-09	5,168E-09
te-124	4,121E-09	4,497E-09	4,890E-09	3,894E-09	4,251E-09	4,626E-09	3,204E-09	3,505E-09	3,827E-09
te-125	8,563E-08	9,096E-08	9,644E-08	8,209E-08	8,721E-08	9,250E-08	6,863E-08	7,305E-08	7,765E-08
te-126	2,051E-08	2,132E-08	2,211E-08	2,060E-08	2,141E-08	2,223E-08	1,777E-08	1,852E-08	1,929E-08
te-127m	7,328E-08	7,472E-08	7,602E-08	7,084E-08	7,204E-08	7,363E-08	6,191E-08	6,305E-08	6,482E-08
te-128	3,302E-06	3,425E-06	3,545E-06	3,257E-06	3,380E-06	3,502E-06	2,802E-06	2,916E-06	3,031E-06
te-129m	7,992E-08	8,060E-08	8,110E-08	7,868E-08	7,932E-08	7,995E-08	7,004E-08	7,078E-08	7,153E-08
te-130	1,428E-05	1,476E-05	1,522E-05	1,451E-05	1,500E-05	1,550E-05	1,269E-05	1,316E-05	1,364E-05
te-132	2,105E-07	2,098E-07	2,093E-07	2,193E-07	2,185E-07	2,183E-07	2,035E-07	2,035E-07	2,040E-07
th-230	6,831E-14	7,155E-14	7,483E-14	9,278E-14	9,714E-14	1,015E-13	1,106E-13	1,160E-13	1,215E-13
u-232	1,852E-12	2,010E-12	2,167E-12	2,127E-12	2,310E-12	2,498E-12	2,088E-12	2,279E-12	2,481E-12



<b>Brennstabtyp</b>	<b>Stabtyp 91 (3,06 % Anfangsanr.)</b>			<b>Stabtyp 92 (3,80 % Anfangsanr.)</b>			<b>Stabtyp 93 (4,12 % Anfangsanr.)</b>		
<b>Abbrand GWd/tSM</b>	<b>28</b>	<b>29</b>	<b>30</b>	<b>28</b>	<b>29</b>	<b>30</b>	<b>28</b>	<b>29</b>	<b>30</b>
<b>Nuklid</b>									
u-233	6,440E-12	6,203E-12	6,269E-12	1,042E-11	1,029E-11	1,027E-11	1,565E-11	1,575E-11	1,568E-11
u-234	2,148E-08	2,218E-08	2,287E-08	2,910E-08	2,994E-08	3,076E-08	3,557E-08	3,663E-08	3,769E-08
u-235	1,286E-04	1,190E-04	1,103E-04	2,187E-04	2,055E-04	1,929E-04	3,405E-04	3,255E-04	3,108E-04
u-236	8,626E-05	8,742E-05	8,844E-05	1,002E-04	1,020E-04	1,036E-04	9,614E-05	9,837E-05	1,005E-04
u-237	1,836E-07	1,883E-07	1,925E-07	1,956E-07	2,014E-07	2,071E-07	1,765E-07	1,821E-07	1,877E-07
u-238	2,169E-02	2,167E-02	2,165E-02	2,156E-02	2,155E-02	2,153E-02	2,153E-02	2,152E-02	2,150E-02
xe-128	6,280E-08	6,845E-08	7,399E-08	5,875E-08	6,402E-08	6,933E-08	4,751E-08	5,186E-08	5,636E-08
xe-130	2,483E-07	2,696E-07	2,913E-07	2,043E-07	2,219E-07	2,403E-07	1,362E-07	1,481E-07	1,607E-07
xe-131	1,717E-05	1,755E-05	1,789E-05	1,792E-05	1,835E-05	1,876E-05	1,622E-05	1,669E-05	1,714E-05
xe-132	3,942E-05	4,098E-05	4,251E-05	3,952E-05	4,108E-05	4,265E-05	3,399E-05	3,542E-05	3,687E-05
xe-133	4,675E-07	4,666E-07	4,638E-07	4,937E-07	4,925E-07	4,903E-07	4,615E-07	4,622E-07	4,619E-07
xe-134	5,718E-05	5,900E-05	6,075E-05	5,889E-05	6,080E-05	6,270E-05	5,177E-05	5,363E-05	5,549E-05
xe-135	4,258E-09	4,174E-09	4,104E-09	5,445E-09	5,333E-09	5,231E-09	7,113E-09	7,010E-09	6,914E-09
xe-136	8,901E-05	9,204E-05	9,497E-05	8,913E-05	9,223E-05	9,533E-05	7,535E-05	7,826E-05	8,118E-05
y-89	2,468E-05	2,535E-05	2,599E-05	2,649E-05	2,727E-05	2,804E-05	2,359E-05	2,439E-05	2,519E-05
y-90	8,809E-09	9,023E-09	9,226E-09	9,407E-09	9,656E-09	9,900E-09	8,323E-09	8,576E-09	8,828E-09
y-91	3,054E-06	3,013E-06	2,963E-06	3,516E-06	3,480E-06	3,438E-06	3,444E-06	3,434E-06	3,417E-06
zr-91	3,095E-05	3,184E-05	3,269E-05	3,301E-05	3,403E-05	3,503E-05	2,931E-05	3,034E-05	3,136E-05
zr-92	3,627E-05	3,721E-05	3,810E-05	3,870E-05	3,977E-05	4,083E-05	3,459E-05	3,570E-05	3,679E-05
zr-93	3,924E-05	4,029E-05	4,128E-05	4,159E-05	4,277E-05	4,392E-05	3,710E-05	3,830E-05	3,948E-05
zr-94	4,169E-05	4,286E-05	4,399E-05	4,391E-05	4,521E-05	4,650E-05	3,899E-05	4,030E-05	4,160E-05
zr-95	4,652E-06	4,637E-06	4,606E-06	5,091E-06	5,080E-06	5,060E-06	4,840E-06	4,856E-06	4,864E-06
zr-96	4,252E-05	4,376E-05	4,496E-05	4,445E-05	4,580E-05	4,713E-05	3,940E-05	4,075E-05	4,208E-05

<b><u>Basic Information</u></b>	
Date	Nov 09, 2009
Organization	Gesellschaft fuer Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH
Contact Person	Winfried Zwermann
Contact Email	<a href="mailto:Winfried.Zwermann@grs.de">Winfried.Zwermann@grs.de</a>
Computer code(s) used	MONTEBURNS 2.0 (MCNP5 + ORIGEN2.2)
<b><u>Analysis Environment</u></b>	
Neutron data library/source	JEFF-3.1 based, available from NEA data bank as package ZZ-MCJEFF3.1NEA
Group structure	Continuous energy
Data processing method	
Convergence limit or statistical error on eigenvalues	1 sigma = 0.0003 - 0.0004
Other related information	No HTGR specific ORIGEN XS libraries were available; therefore, generic thermal XS were used

<b>GRAIN Results</b>								
Burnup (GWd/t)	<b>0</b>	<b>0.5</b>	<b>5</b>	<b>10</b>	<b>20</b>	<b>40</b>	<b>80</b>	<b>120</b>
k-inf	1.3509	1.29949	1.26592	1.23198	1.1635	1.05323	0.91308	0.8261
$\rho^{238}$	1.067E+01	1.112E+01	1.172E+01	1.227E+01	1.322E+01	1.469E+01	1.639E+01	1.726E+01
$\delta^{235}$	1.923E-01	2.013E-01	2.113E-01	2.204E-01	2.357E-01	2.577E-01	2.792E-01	2.862E-01
$\delta^{238}$	5.300E-03	5.539E-03	6.198E-03	6.944E-03	8.594E-03	1.275E-02	2.691E-02	5.803E-02
$c/f^{235}$	5.475E-01	5.695E-01	6.342E-01	7.073E-01	8.696E-01	1.284E+00	2.722E+00	5.948E+00
<b>Actinide masses (g/t initial U)</b>								
U-235	8.20E+04	8.13E+04	7.58E+04	7.02E+04	6.00E+04	4.33E+04	2.13E+04	9.75E+03
U-238	9.18E+05	9.18E+05	9.15E+05	9.12E+05	9.05E+05	8.90E+05	8.57E+05	8.20E+05
Pu-239	0.00E+00	1.82E+02	2.60E+03	4.87E+03	8.33E+03	1.27E+04	1.63E+04	1.75E+04
Pu-240	0.00E+00	7.98E-01	9.97E+01	3.43E+02	1.01E+03	2.32E+03	3.90E+03	4.52E+03
Pu-241	0.00E+00	8.22E-03	1.09E+01	7.53E+01	4.30E+02	1.77E+03	4.48E+03	5.83E+03
Pu-242	0.00E+00	1.12E-05	1.54E-01	2.22E+00	2.70E+01	2.48E+02	1.49E+03	3.20E+03

Am-241	0.00E+00	2.08E-06	2.80E-02	3.95E-01	4.50E+00	3.58E+01	1.54E+02	2.38E+02
Cm-244	0.00E+00	8.32E-12	1.63E-05	1.05E-03	6.03E-02	2.88E+00	8.93E+01	4.97E+02
Cm-245	0.00E+00	0.00E+00	5.65E-08	7.47E-06	8.88E-04	8.88E-02	5.68E+00	4.43E+01
<b><i>Fission product masses (g/t initial U)</i></b>								
Kr-85	0.00E+00	4.92E-01	4.93E+00	9.60E+00	1.82E+01	3.30E+01	5.48E+01	6.97E+01
Sr-90	0.00E+00	1.15E+01	1.12E+02	2.17E+02	4.13E+02	7.53E+02	1.27E+03	1.65E+03
Ag-110m	0.00E+00	1.34E-05	2.92E-03	1.22E-02	6.23E-02	3.14E-01	1.29E+00	2.52E+00
Cs-137	0.00E+00	1.85E+01	1.85E+02	3.70E+02	7.37E+02	1.46E+03	2.88E+03	4.23E+03
Xe-135	0.00E+00	4.40E-01	4.48E-01	4.53E-01	4.58E-01	4.57E-01	4.42E-01	4.20E-01
Sm-149	0.00E+00	1.60E+00	4.13E+00	4.57E+00	5.25E+00	6.18E+00	6.78E+00	6.72E+00
Sm-151	0.00E+00	1.05E+00	8.88E+00	1.30E+01	1.72E+01	2.30E+01	3.33E+01	4.15E+01

<b>PEBBLE Results</b>								
	<b>0</b>	<b>0.5</b>	<b>5</b>	<b>10</b>	<b>20</b>	<b>40</b>	<b>80</b>	<b>120</b>
Burnup (GWd/t)								
k-inf	1.51321	1.45398	1.42748	1.40139	1.34543	1.22858	0.99708	0.77894
$\rho^{238}$	6.254E+00	6.488E+00	6.491E+00	6.456E+00	6.294E+00	5.791E+00	4.267E+00	3.091E+00
$\delta^{235}$	1.010E-01	1.050E-01	1.049E-01	1.040E-01	1.008E-01	9.122E-02	6.539E-02	4.600E-02
$\delta^{238}$	2.868E-03	2.993E-03	3.209E-03	3.442E-03	3.968E-03	5.320E-03	1.180E-02	6.616E-02
$c/f^{235}$	3.614E-01	3.749E-01	4.012E-01	4.316E-01	4.979E-01	6.784E-01	1.595E+00	9.716E+00
<b>Actinide masses (g/t initial U)</b>								
U-235	8.20E+04	8.13E+04	7.59E+04	7.00E+04	5.91E+04	4.01E+04	1.31E+04	1.62E+03
U-238	9.18E+05	9.18E+05	9.16E+05	9.14E+05	9.10E+05	9.00E+05	8.78E+05	8.46E+05
Pu-239	0.00E+00	1.20E+02	1.74E+03	3.27E+03	5.58E+03	8.10E+03	8.50E+03	6.93E+03
Pu-240	0.00E+00	4.18E-01	5.72E+01	2.10E+02	6.76E+02	1.78E+03	3.29E+03	3.48E+03
Pu-241	0.00E+00	2.81E-03	4.10E+00	3.00E+01	1.88E+02	8.68E+02	2.13E+03	2.03E+03
Pu-242	0.00E+00	3.47E-06	5.43E-02	8.42E-01	1.17E+01	1.36E+02	1.17E+03	3.13E+03

Am-241	0.00E+00	7.02E-07	1.06E-02	1.57E-01	1.94E+00	1.73E+01	6.83E+01	5.43E+01
Cm-244	0.00E+00	1.03E-12	2.20E-06	1.50E-04	9.50E-03	5.61E-01	3.07E+01	3.07E+02
Cm-245	0.00E+00	1.77E-16	4.51E-09	6.19E-07	7.81E-05	8.86E-03	7.78E-01	7.80E+00
<b><i>Fission product masses (g/t initial U)</i></b>								
Kr-85	0.00E+00	4.93E-01	4.99E+00	9.79E+00	1.89E+01	3.49E+01	5.92E+01	7.33E+01
Sr-90	0.00E+00	1.16E+01	1.13E+02	2.22E+02	4.30E+02	8.04E+02	1.40E+03	1.77E+03
Ag-110m	0.00E+00	8.13E-06	1.44E-03	6.98E-03	3.16E-02	1.68E-01	9.13E-01	2.45E+00
Cs-137	0.00E+00	1.86E+01	1.86E+02	3.70E+02	7.38E+02	1.47E+03	2.88E+03	4.24E+03
Xe-135	0.00E+00	4.10E-01	4.04E-01	3.97E-01	3.77E-01	3.38E-01	2.11E-01	1.23E-01
Sm-149	0.00E+00	1.58E+00	3.74E+00	3.87E+00	4.00E+00	3.91E+00	2.96E+00	1.94E+00
Sm-151	0.00E+00	1.05E+00	8.21E+00	1.11E+01	1.28E+01	1.39E+01	1.42E+01	1.36E+01

<b>PRISM Results</b>								
	<b>0</b>	<b>0.5</b>	<b>5</b>	<b>10</b>	<b>20</b>	<b>40</b>	<b>80</b>	<b>120</b>
Burnup (GWd/t)								
k-inf	1.4572	1.4002	1.37168	1.34207	1.28038	1.16593	0.97849	0.82265
$\rho^{238}$	7.653E+00	7.976E+00	8.100E+00	8.202E+00	8.248E+00	8.078E+00	6.876E+00	5.564E+00
$\delta^{235}$	1.341E-01	1.399E-01	1.421E-01	1.432E-01	1.432E-01	1.378E-01	1.140E-01	8.958E-02
$\delta^{238}$	3.792E-03	3.965E-03	4.312E-03	4.698E-03	5.542E-03	7.690E-03	1.640E-02	5.294E-02
$c/f^{235}$	4.221E-01	4.395E-01	4.757E-01	5.185E-01	6.101E-01	8.528E-01	1.871E+00	6.313E+00
<b>Actinide masses (g/t initial U)</b>								
U-235	8.22E+04	8.11E+04	7.61E+04	7.00E+04	5.94E+04	4.12E+04	1.60E+04	3.86E+03
U-238	9.17E+05	9.17E+05	9.17E+05	9.11E+05	9.06E+05	8.94E+05	8.72E+05	8.39E+05
Pu-239	0.00E+00	1.41E+02	2.02E+03	3.78E+03	6.44E+03	9.44E+03	1.07E+04	9.56E+03
Pu-240	0.00E+00	5.42E-01	7.17E+01	2.56E+02	7.94E+02	1.97E+03	3.46E+03	3.80E+03
Pu-241	0.00E+00	4.44E-03	6.22E+00	4.46E+01	2.67E+02	1.17E+03	2.84E+03	3.02E+03
Pu-242	0.00E+00	5.72E-06	8.56E-02	1.29E+00	1.69E+01	1.79E+02	1.31E+03	3.17E+03

Am-241	0.00E+00	1.12E-06	1.61E-02	2.33E-01	2.78E+00	2.34E+01	9.39E+01	1.00E+02
Cm-244	0.00E+00	2.63E-12	5.32E-06	3.54E-04	2.16E-02	1.17E+00	5.03E+01	3.75E+02
Cm-245	0.00E+00	5.41E-16	1.38E-08	1.87E-06	2.30E-04	2.46E-02	1.88E+00	1.58E+01
<b><i>Fission product masses (g/t initial U)</i></b>								
Kr-85	0.00E+00	4.92E-01	4.97E+00	9.72E+00	1.86E+01	3.42E+01	5.78E+01	7.22E+01
Sr-90	0.00E+00	1.15E+01	1.13E+02	2.21E+02	4.24E+02	7.83E+02	1.35E+03	1.73E+03
Ag-110m	0.00E+00	1.01E-05	1.93E-03	8.69E-03	4.20E-02	2.20E-01	1.06E+00	2.43E+00
Cs-137	0.00E+00	1.86E+01	1.86E+02	3.70E+02	7.39E+02	1.46E+03	2.88E+03	4.24E+03
Xe-135	0.00E+00	4.21E-01	4.19E-01	4.15E-01	4.02E-01	3.65E-01	2.75E-01	1.93E-01
Sm-149	0.00E+00	1.58E+00	3.85E+00	4.07E+00	4.37E+00	4.54E+00	3.89E+00	2.93E+00
Sm-151	0.00E+00	1.05E+00	8.50E+00	1.18E+01	1.43E+01	1.66E+01	1.90E+01	1.93E+01



### *Information Bloc 1*

Institutes of the contributors:

Gesellschaft fuer Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Forschungszentrum, Boltzmannstrasse 14, 85748 Garching, Germany

Oak Ridge National Laboratory, P.O Box 2008, Oak Ridge, TN 37831-6354, USA

Participants:

W. Zwermann, L. Gallner, M. Klein, B. Krzykacz-Hausmann, A. Pautz; D. Wiarda, M.L. Williams, M.A. Jessee, B.T. Rearden

#### 1<sup>st</sup> solution:

Name and brief description of the criticality calculation code applied:

TSUNAMI-3D from SCALE 6 with the Monte Carlo code KENO-Va as transport solver, 1<sup>st</sup> order perturbation theory based on forward/adjoint solutions

Name and brief description of the nuclear data library applied:

238 group ENDF/B-VII data (scale.rev05.xn238v7), 44 group covariance data (scale.rev05.44groupcov), from SCALE 6

#### 2<sup>nd</sup> solution:

Name and brief description of the criticality calculation code applied:

NEWT from SCALE 6 (2-D  $S_N$  transport), random sampling of nuclear data based on uncertainty information from covariance data with XSUSA, normal distributions for ND uncertainties assumed, 960 samples, covariance data were taken into account for H-1, B-10, O-16, Fe-56, Zr-90, Zr-91, Zr-92, U-235, U-238

Name and brief description of the nuclear data library applied:

238 group ENDF/B-VII data (scale.rev05.xn238v7), 44 group covariance data (scale.rev05.44groupcov), from SCALE 6

*Information Blocs 2-4: n/a*

Information Bloc 5: Results for Task 4

1<sup>st</sup> solution (TSUNAMI-3D):

Mean value for k-eff: 0.992745 + or - 0.000075 (from forward solution)

Relative std. dev.: 0.4339 %

Additional information: contributions to uncertainty in k-eff (% delta-k/k) by individual energy covariance matrices (given are only contributions > 0.01 %)

nuclide-reaction	with	nuclide-reaction	% delta-k/k due to this matrix
u-235 nubar		u-235 nubar	2.7504E-01 +/- 1.5742E-06
u-238 n,gamma		u-238 n,gamma	2.1306E-01 +/- 2.8170E-06
u-235 n,gamma		u-235 n,gamma	1.6983E-01 +/- 2.1718E-06
u-235 fission		u-235 n,gamma	1.1554E-01 +/- 1.2448E-06
u-235 fission		u-235 fission	1.0304E-01 +/- 1.6963E-06
u-238 nubar		u-238 nubar	6.5030E-02 +/- 1.7301E-07
u-238 n,n'		u-238 n,n'	4.8705E-02 +/- 2.0224E-05
o-16 elastic		o-16 elastic	3.7322E-02 +/- 4.4622E-06
h-1 elastic		h-1 elastic	3.5115E-02 +/- 6.5797E-06
u-238 elastic		u-238 n,n'	-3.3833E-02 +/- 4.0779E-06
h-1 n,gamma		h-1 n,gamma	3.3190E-02 +/- 7.8785E-08
u-235 chi		u-235 chi	3.2773E-02 +/- 2.0719E-06
zr-90 elastic		zr-90 elastic	3.1042E-02 +/- 5.2362E-06
zr-92 n,gamma		zr-92 n,gamma	2.4364E-02 +/- 1.3850E-07
u-238 elastic		u-238 elastic	2.3308E-02 +/- 9.4008E-07
zr-91 n,gamma		zr-91 n,gamma	2.0656E-02 +/- 1.4000E-07
u-238 fission		u-238 fission	1.8637E-02 +/- 2.9346E-08
zr-90 n,gamma		zr-90 n,gamma	1.6004E-02 +/- 5.7487E-08
u-238 elastic		u-238 n,gamma	1.3898E-02 +/- 2.3171E-06
u-238 n,2n		u-238 n,2n	1.2516E-02 +/- 2.1594E-07
fe-56 n,gamma		fe-56 n,gamma	1.1836E-02 +/- 3.4381E-08
b-10 n,alpha		b-10 n,alpha	1.0738E-02 +/- 1.5301E-08

Note: relative standard deviation in k-eff can be computed from individual values by adding the square of the values with positive signs and subtracting the square of the values with negative signs, then taking the square root

2<sup>nd</sup> solution (XSUSA/NEWT):

Mean value for k-eff: 0.99226

Relative std. dev.: 0.424 %

One-sided upper 95%/95% tolerance limit for k-eff: 1.00012

This was determined with Wilks' formula, according to which, for the number of samples used (960), the one-sided upper 95%/95% tolerance limit is obtained by the maximum k-eff value disregarding the highest 36 values.

Additional information: standard deviations from one-at-a-time variations

u-235 nubar	0.280 %
u-235 fission + n, gamma	0.236 %
u-238 n, gamma	0.216 %
u-238 nubar	0.063 %
u-238 elastic + n, n'	0.037 %
h-1 elastic	0.033 %
o-16 elastic	0.032 %

## **Information bloc 1**

### ***Institute/Company of the contributor***

Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH  
Boltzmannstr. 14  
85748 Garching b. München  
Germany

### ***Name of participants***

Robert Kilger  
Matthias Kirsch  
Winfried Zwermann

### ***Name and brief description of the criticality calculation code applied***

The two dimensional deterministic transport code NEWT was applied to model the benchmark and to calculate the neutron multiplication factor. The sequence was taken from version 6.0 of the SCALE package.

### ***Name and brief description of the nuclear data library applied***

The ENDF/B-VII data library was used in the criticality calculations. In all calculations the cross sections were used in a 238 energy group structure, predefined in the SCALE package. The CENTRM module was used for the proper treatment of the energy flux spectra.

## **Information bloc 2: Results for task 1**

All calculations have been performed until the default values for the convergence options of NEWT had been fulfilled.

### ***Results for the nominal case***

Without changing the convergence criteria the deterministic code NEWT will always converge to the same  $k_{\text{eff}}$  value. Thus, it is only possible to report the result of one calculation of the model with all uncertain parameters taken at their nominal values. The resulting neutron multiplication factor for this case is 9.9110E-01.

### ***Results for the bounding case***

The same argument as for the nominal case can be applied for the bounding case. The resulting value for  $k_{\text{eff}}$  is 1.0219E+00.

### ***Brief description of the method of calculating the one-sided upper 95%/95% tolerance limit***

Neither for the nominal case, nor for the bounding case one-sided upper 95%/95% tolerance limit could be calculated.

### ***Brief description of the procedure used for figuring out the bounding case***

The values for the uncertain parameters in the bounding case were chosen either at the maximum or the minimum value of their domain of definition. The choice whether to minimize or to maximize a parameter was based on expert judgment.

## **Information bloc 3: Results for task 2**

### ***Results of the uncertainty analysis***

- All calculations were run until the criteria for convergence were fulfilled. The values of the convergence criteria were taken at their default values.
- Number of samples: 500
- Number of valid samples: 499
- Mean value: 9.9809E-01
- Sample standard deviation: 6.9415E-03
- Standard deviation of mean value: 3.10433E-04
- One-sided upper 95%/95% tolerance limit: 1.0096+00
- For comparison with the bounding case: The sample with the highest neutron multiplication factor in the uncertainty analysis had a resulting  $k_{\text{eff}}$  of 1.0149E+00

### ***Brief description of the procedure used for performing the probabilistic analysis***

The SUSA tool was used to define the uncertain parameters of the benchmark model together with their probability density functions. SUSA then generated 500 independent samples for the 18 parameters. These samples were given to the SUnCISTT (Sensitivities and Uncertainties in Criticality, Inventory, and Source Term Tool). SUnCISTT is a GRS development that allows the coupling of SUSA with criticality codes. In SUnCISTT the values of the parameters received from SUSA were transformed such, that they could be used in the NEWT model. Furthermore, additional parameters, that are dependent on the uncertain parameters but do not have an uncertainty assigned to themselves, were calculated. Finally, the 500 NEWT input files were generated and run. The resulting  $k_{\text{eff}}$  of each sample run was extracted from the output file of the corresponding sample. Then, all results were processed such, that they could be fed back into SUSA for the statistical analysis.

***Brief description of the method of calculating the one-sided upper 95%/95% tolerance limit***

The resulting  $k_{\text{eff}}$  values of the sample calculations were fed into the established GRS Software for Uncertainty and Sensitivity Analysis (SUSA) that provides the statistical methods for these kinds of calculations.

```

1   *** BENCHMARK - PHASE I ***
2   07.09.2011
3   GRS, Germany
4   Volker Hannstein
5   volker.hannstein@grs.de
6   Makus Wagner, Volker Hannstein, Winfried Zwermann
7   DORTOREST
8   XSDRN
9   238
10  2.00E+07  1.73E+07  1.57E+07  1.46E+07  1.38E+07  1.28E+07  1.00E+07
8.19E+06  6.43E+06  4.80E+06  4.30E+06  3.00E+06  2.48E+06  2.35E+06
1.85E+06  1.50E+06  1.40E+06  1.36E+06  1.32E+06  1.25E+06  1.20E+06
1.10E+06  1.01E+06  9.20E+05  9.00E+05  8.75E+05  8.61E+05  8.20E+05
7.50E+05  6.79E+05  6.70E+05  6.00E+05  5.73E+05  5.50E+05  5.00E+05
4.70E+05  4.40E+05  4.20E+05  4.00E+05  3.30E+05  2.70E+05  2.00E+05
1.50E+05  1.28E+05  1.00E+05  8.50E+04  8.20E+04  7.50E+04  7.30E+04
6.00E+04  5.20E+04  5.00E+04  4.50E+04  3.00E+04  2.50E+04  1.70E+04
1.30E+04  9.50E+03  8.03E+03  6.00E+03  3.90E+03  3.74E+03  3.00E+03
2.58E+03  2.29E+03  2.20E+03  1.80E+03  1.55E+03  1.50E+03  1.15E+03
9.50E+02  6.83E+02  6.70E+02  5.50E+02  3.05E+02  2.85E+02  2.40E+02
2.10E+02  2.08E+02  1.93E+02  1.86E+02  1.22E+02  1.19E+02  1.15E+02
1.08E+02  1.00E+02  9.00E+01  8.20E+01  8.00E+01  7.60E+01  7.20E+01
6.75E+01  6.50E+01  6.10E+01  5.90E+01  5.34E+01  5.20E+01  5.06E+01
4.92E+01  4.83E+01  4.70E+01  4.52E+01  4.40E+01  4.24E+01  4.10E+01
3.96E+01  3.91E+01  3.80E+01  3.70E+01  3.55E+01  3.46E+01  3.38E+01
3.33E+01  3.18E+01  3.13E+01  3.00E+01  2.75E+01  2.50E+01  2.25E+01
2.10E+01  2.00E+01  1.90E+01  1.85E+01  1.70E+01  1.60E+01  1.51E+01
1.44E+01  1.38E+01  1.29E+01  1.19E+01  1.15E+01  1.00E+01  9.10E+00
8.10E+00  7.15E+00  7.00E+00  6.75E+00  6.50E+00  6.25E+00  6.00E+00
5.40E+00  5.00E+00  4.75E+00  4.00E+00  3.73E+00  3.50E+00  3.15E+00
3.05E+00  3.00E+00  2.97E+00  2.87E+00  2.77E+00  2.67E+00  2.57E+00
2.47E+00  2.38E+00  2.30E+00  2.21E+00  2.12E+00  2.00E+00  1.94E+00
1.86E+00  1.77E+00  1.68E+00  1.59E+00  1.50E+00  1.45E+00  1.40E+00
1.35E+00  1.30E+00  1.25E+00  1.23E+00  1.20E+00  1.18E+00  1.15E+00
1.14E+00  1.13E+00  1.12E+00  1.11E+00  1.10E+00  1.09E+00  1.08E+00
1.07E+00  1.06E+00  1.05E+00  1.04E+00  1.03E+00  1.02E+00  1.01E+00
1.00E+00  9.75E-01  9.50E-01  9.25E-01  9.00E-01  8.50E-01  8.00E-01
7.50E-01  7.00E-01  6.50E-01  6.25E-01  6.00E-01  5.50E-01  5.00E-01
4.50E-01  4.00E-01  3.75E-01  3.50E-01  3.25E-01  3.00E-01  2.75E-01
2.50E-01  2.25E-01  2.00E-01  1.75E-01  1.50E-01  1.25E-01  1.00E-01
9.00E-02  8.00E-02  7.00E-02  6.00E-02  5.00E-02  4.00E-02  3.00E-02
2.53E-02  1.00E-02  7.50E-03  5.00E-03  4.00E-03  3.00E-03  2.50E-03
2.00E-03  1.50E-03  1.20E-03  1.00E-03  7.50E-04  5.00E-04  1.00E-04
11  cartesian lattice
12
13  Sn (cartesian)
14  1e-7
15  * Results of Case I.0 *
16  1.38429
17  - Reaction rates -
18  1.200e+01
19  6.490e-01
20  1.312e+00
21  8.196e-02
22  2.780e-01
23  7.178e-02
24  2.643e+00
25  1.382e-03
26  1.909e+00
27  * Results of Case I.1 *
28  1.38015
29  - Reaction rates -
30  1.199e+01

```

31 6.470e-01  
32 1.308e+00  
33 8.186e-02  
34 2.775e-01  
35 7.176e-02  
36 2.640e+00  
37 1.382e-03  
38 1.908e+00  
39 2.689e-03  
40 0.000e+00  
41 6.209e-03  
42 -2.167e-03  
39  
40  
41  
42  
43  
48 \* Results of Case I.2 \*  
49 1.37441  
50 - Reaction rates -  
51 1.198e+01  
52 6.443e-01  
53 1.303e+00  
54 8.172e-02  
55 2.769e-01  
56 7.175e-02  
57 2.638e+00  
58 1.382e-03  
59 1.905e+00  
60 6.427e-03  
61 0.000e+00  
62 4.452e-03  
63 -5.197e-03  
60  
61  
62  
63  
64  
69 \* Results of Case I.3 \*  
70 1.38098  
71 - Reaction rates -  
72 1.199e+01  
73 6.474e-01  
74 1.309e+00  
75 8.186e-02  
76 2.775e-01  
77 7.176e-02  
78 2.640e+00  
79 1.382e-03  
80 1.908e+00  
81 2.254e-03  
82 0.000e+00  
83 4.114e-03  
84 -1.733e-03  
81  
82  
83  
84  
85  
90 \* Results of Case I.4 \*  
91 1.35900  
92 - Reaction rates -  
93 1.195e+01



94 6.368e-01  
95 1.287e+00  
96 8.147e-02  
97 2.763e-01  
98 7.177e-02  
99 2.632e+00  
100 1.382e-03  
101 1.901e+00  
102 1.514e-02  
103 0.000e+00  
104 2.285e-03  
105 -1.345e-02  
102  
103  
104  
105  
106  
111 \* Results of Case I.5 \*  
112 1.38101  
113 - Reaction rates -  
114 1.200e+01  
115 6.474e-01  
116 1.309e+00  
117 8.188e-02  
118 2.777e-01  
119 7.178e-02  
120 2.641e+00  
121 1.382e-03  
122 1.908e+00  
123 2.094e-03  
124 0.000e+00  
125 4.267e-04  
126 -1.720e-03  
123  
124  
125  
126  
127  
132 \* Results of Case I.6 \*  
133 1.37200  
134 - Reaction rates -  
135 1.197e+01  
136 6.431e-01  
137 1.300e+00  
138 8.167e-02  
139 2.766e-01  
140 7.175e-02  
141 2.636e+00  
142 1.382e-03  
143 1.904e+00  
144 8.035e-03  
145 0.000e+00  
146 4.495e-03  
147 -6.475e-03  
144  
145  
146  
147  
148  
153 \* Results of Case I.7 \*  
154 1.35718  
155 - Reaction rates -  
156 1.196e+01

157 6.360e-01  
158 1.285e+00  
159 8.155e-02  
160 2.762e-01  
161 7.176e-02  
162 2.634e+00  
163 1.382e-03  
164 1.902e+00  
165 1.604e-02  
166 0.000e+00  
167 1.495e-02  
168 -1.443e-02  
165  
166  
167  
168  
169  
174 \* Results of Case I.8 \*  
175 1.37757  
176 - Reaction rates -  
177 1.199e+01  
178 6.458e-01  
179 1.306e+00  
180 8.181e-02  
181 2.774e-01  
182 7.176e-02  
183 2.639e+00  
184 1.382e-03  
185 1.907e+00  
186 4.181e-03  
187 0.000e+00  
188 8.108e-03  
189 -3.526e-03  
186  
187  
188  
189  
190  
195 \* Results of Case I.9 \*  
196 1.38188  
197 - Reaction rates -  
198 1.200e+01  
199 6.479e-01  
200 1.310e+00  
201 8.190e-02  
202 2.777e-01  
203 7.178e-02  
204 2.641e+00  
205 1.382e-03  
206 1.908e+00  
207 1.552e-03  
208 0.000e+00  
209 1.500e-03  
210 -1.263e-03  
207  
208  
209  
210  
211  
216 \* Results of Case I.10 \*  
217 1.35506  
218 - Reaction rates -  
219 1.196e+01

220 6.350e-01  
221 1.283e+00  
222 8.153e-02  
223 2.761e-01  
224 7.178e-02  
225 2.634e+00  
226 1.382e-03  
227 1.902e+00  
228 1.739e-02  
229 0.000e+00  
230 1.656e-04  
231 -1.559e-02  
228  
229  
230  
231  
232  
237 \* Results of Case I.11 \*  
238 1.38063  
239 - Reaction rates -  
240 1.200e+01  
241 6.473e-01  
242 1.309e+00  
243 8.189e-02  
244 2.775e-01  
245 7.177e-02  
246 2.641e+00  
247 1.382e-03  
248 1.908e+00  
249 2.442e-03  
250 0.000e+00  
251 3.135e-03  
252 -1.915e-03  
249  
250  
251  
252  
253  
258 \* Results of Case I.12 \*  
259 1.36687  
260 - Reaction rates -  
261 1.198e+01  
262 6.407e-01  
263 1.295e+00  
264 8.172e-02  
265 2.769e-01  
266 7.178e-02  
267 2.638e+00  
268 1.382e-03  
269 1.905e+00  
270 1.023e-02  
271 0.000e+00  
272 1.511e-04  
273 -9.210e-03  
270  
271  
272  
273  
274  
279 \* Results of Case I.13 \*  
280 1.37560  
281 - Reaction rates -  
282 1.198e+01

283 6.448e-01  
284 1.304e+00  
285 8.176e-02  
286 2.770e-01  
287 7.178e-02  
288 2.638e+00  
289 1.382e-03  
290 1.906e+00  
291 5.712e-03  
292 0.000e+00  
293 9.123e-03  
294 -4.565e-03  
291  
292  
293  
294  
295  
300 \* Results of Case I.14 \*  
301 1.37797  
302 - Reaction rates -  
303 1.199e+01  
304 6.460e-01  
305 1.306e+00  
306 8.183e-02  
307 2.775e-01  
308 7.178e-02  
309 2.640e+00  
310 1.382e-03  
311 1.907e+00  
312 3.908e-03  
313 0.000e+00  
314 5.637e-04  
315 -3.314e-03  
312  
313  
314  
315  
316  
321 \* Results of Case I.15 \*  
322 1.37524  
323 - Reaction rates -  
324 1.199e+01  
325 6.447e-01  
326 1.303e+00  
327 8.184e-02  
328 2.774e-01  
329 7.178e-02  
330 2.640e+00  
331 1.382e-03  
332 1.907e+00  
333 5.289e-03  
334 0.000e+00  
335 1.647e-05  
336 -4.758e-03  
333  
334  
335  
336  
337  
342 \* Results of Case I.16 \*  
343 0.95075  
344 - Reaction rates -  
345 1.477e+01

346 4.275e-01  
347 8.784e-01  
348 2.871e-02  
349 4.128e-01  
350 7.221e-02  
351 3.212e+00  
352 1.409e-03  
353 2.404e+00  
354  
355  
356  
357 -3.294e-01  
354  
355  
356  
357  
358  
363 \* Results of Case I.17 \*  
364 1.37254  
365 - Reaction rates -  
366 1.197e+01  
367 6.429e-01  
368 1.300e+00  
369 8.162e-02  
370 2.766e-01  
371 7.170e-02  
372 2.635e+00  
373 1.381e-03  
374 1.903e+00  
375 8.169e-03  
376 8.683e-04  
377 1.462e-02  
378 -6.186e-03  
375  
376  
377  
378  
379  
384 \* Results of Case I.18 \*  
385 1.37284  
386 - Reaction rates -  
387 1.198e+01  
388 6.434e-01  
389 1.301e+00  
390 8.172e-02  
391 2.770e-01  
392 7.177e-02  
393 2.637e+00  
394 1.382e-03  
395 1.905e+00  
396 7.196e-03  
397 2.706e-04  
398 1.879e-03  
399 -6.028e-03  
396  
397  
398  
399  
400  
405 \* Results of Case I.19 \*  
406 1.37842  
407 - Reaction rates -  
408 1.199e+01

409 6.459e-01  
410 1.306e+00  
411 8.186e-02  
412 2.776e-01  
413 7.178e-02  
414 2.640e+00  
415 1.382e-03  
416 1.908e+00  
417 3.838e-03  
418 5.989e-04  
419 8.900e-04  
420 -3.080e-03  
417  
418  
419  
420  
421  
426 \* Results of Case I.20 \*  
427 1.43545  
428 - Reaction rates -  
429 1.137e+01  
430 4.653e-01  
431 9.313e-01  
432 7.564e-02  
433 2.517e-01  
434 7.166e-02  
435 2.512e+00  
436 1.377e-03  
437 1.797e+00  
438 2.274e-01  
439 4.324e-01  
440 1.457e-02  
441 2.574e-02  
438  
439  
440  
441  
442  
447 \* Results of Case I.21 \*  
448 1.26710  
449 - Reaction rates -  
450 1.176e+01  
451 5.921e-01  
452 1.194e+00  
453 7.960e-02  
454 2.698e-01  
455 7.174e-02  
456 2.593e+00  
457 1.380e-03  
458 1.867e+00  
459 7.096e-02  
460 1.120e-03  
461 1.051e-02  
462 -6.681e-02  
459  
460  
461  
462  
463  
468 \* Results of Case I.22 \*  
469 1.42172  
470 - Reaction rates -  
471 1.180e+01

472 5.875e-01  
473 1.185e+00  
474 7.995e-02  
475 2.691e-01  
476 7.175e-02  
477 2.601e+00  
478 1.381e-03  
479 1.874e+00  
480 7.613e-02  
481 1.652e-01  
482 3.961e-03  
483 1.901e-02  
480  
481  
482  
483  
484  
489 \* Results of Case I.23 \*  
490 1.37626  
491 - Reaction rates -  
492 1.198e+01  
493 6.451e-01  
494 1.304e+00  
495 8.176e-02  
496 2.774e-01  
497 7.177e-02  
498 2.638e+00  
499 1.382e-03  
500 1.906e+00  
501 5.049e-03  
502 2.162e-04  
503 2.409e-03  
504 -4.220e-03  
501  
502  
503  
504  
505  
510 \* Results of Case I.24 \*  
511 1.37703  
512 - Reaction rates -  
513 1.199e+01  
514 6.455e-01  
515 1.305e+00  
516 8.183e-02  
517 2.775e-01  
518 7.178e-02  
519 2.640e+00  
520 1.382e-03  
521 1.907e+00  
522 4.423e-03  
523 1.313e-04  
524 3.194e-04  
525 -3.811e-03  
522  
523  
524  
525  
526  
531 \* Results of Case I.25 \*  
532 1.38068  
533 - Reaction rates -  
534 1.199e+01

535 6.473e-01  
536 1.309e+00  
537 8.187e-02  
538 2.777e-01  
539 7.178e-02  
540 2.641e+00  
541 1.382e-03  
542 1.908e+00  
543 2.261e-03  
544 6.197e-05  
545 4.271e-04  
546 -1.889e-03  
543  
544  
545  
546  
547  
552 \* Results of Case I.26 \*  
553 1.36036  
554 - Reaction rates -  
555 1.197e+01  
556 6.375e-01  
557 1.288e+00  
558 8.160e-02  
559 2.764e-01  
560 7.178e-02  
561 2.635e+00  
562 1.382e-03  
563 1.903e+00  
564 1.414e-02  
565 0.000e+00  
566 7.597e-05  
567 -1.271e-02  
564  
565  
566  
567  
568  
573 \* Results of Case I.27 \*  
574 1.03064  
575 - Reaction rates -  
576 1.161e+01  
577 1.495e-01  
578 3.008e-01  
579 2.037e-02  
580 2.665e-01  
581 7.172e-02  
582 2.563e+00  
583 1.379e-03  
584 1.840e+00  
585 5.203e-01  
586 6.580e-01  
587 1.070e-01  
588 -2.479e-01  
585  
586  
587  
588  
589



```

1    *** BENCHMARK - PHASE II ***
2    26.09.2011
3    GRS, Germany
4    Volker Hannstein
5    volker.hannstein@grs.de
6    Makus Wagner, Volker Hannstein, Winfried Zwermann
7    DORTOREST
8    XSDRN
9    238
10   2.00E+07  1.73E+07  1.57E+07  1.46E+07  1.38E+07  1.28E+07  1.00E+07
8.19E+06  6.43E+06  4.80E+06  4.30E+06  3.00E+06  2.48E+06  2.35E+06
1.85E+06  1.50E+06  1.40E+06  1.36E+06  1.32E+06  1.25E+06  1.20E+06
1.10E+06  1.01E+06  9.20E+05  9.00E+05  8.75E+05  8.61E+05  8.20E+05
7.50E+05  6.79E+05  6.70E+05  6.00E+05  5.73E+05  5.50E+05  5.00E+05
4.70E+05  4.40E+05  4.20E+05  4.00E+05  3.30E+05  2.70E+05  2.00E+05
1.50E+05  1.28E+05  1.00E+05  8.50E+04  8.20E+04  7.50E+04  7.30E+04
6.00E+04  5.20E+04  5.00E+04  4.50E+04  3.00E+04  2.50E+04  1.70E+04
1.30E+04  9.50E+03  8.03E+03  6.00E+03  3.90E+03  3.74E+03  3.00E+03
2.58E+03  2.29E+03  2.20E+03  1.80E+03  1.55E+03  1.50E+03  1.15E+03
9.50E+02  6.83E+02  6.70E+02  5.50E+02  3.05E+02  2.85E+02  2.40E+02
2.10E+02  2.08E+02  1.93E+02  1.86E+02  1.22E+02  1.19E+02  1.15E+02
1.08E+02  1.00E+02  9.00E+01  8.20E+01  8.00E+01  7.60E+01  7.20E+01
6.75E+01  6.50E+01  6.10E+01  5.90E+01  5.34E+01  5.20E+01  5.06E+01
4.92E+01  4.83E+01  4.70E+01  4.52E+01  4.40E+01  4.24E+01  4.10E+01
3.96E+01  3.91E+01  3.80E+01  3.70E+01  3.55E+01  3.46E+01  3.38E+01
3.33E+01  3.18E+01  3.13E+01  3.00E+01  2.75E+01  2.50E+01  2.25E+01
2.10E+01  2.00E+01  1.90E+01  1.85E+01  1.70E+01  1.60E+01  1.51E+01
1.44E+01  1.38E+01  1.29E+01  1.19E+01  1.15E+01  1.00E+01  9.10E+00
8.10E+00  7.15E+00  7.00E+00  6.75E+00  6.50E+00  6.25E+00  6.00E+00
5.40E+00  5.00E+00  4.75E+00  4.00E+00  3.73E+00  3.50E+00  3.15E+00
3.05E+00  3.00E+00  2.97E+00  2.87E+00  2.77E+00  2.67E+00  2.57E+00
2.47E+00  2.38E+00  2.30E+00  2.21E+00  2.12E+00  2.00E+00  1.94E+00
1.86E+00  1.77E+00  1.68E+00  1.59E+00  1.50E+00  1.45E+00  1.40E+00
1.35E+00  1.30E+00  1.25E+00  1.23E+00  1.20E+00  1.18E+00  1.15E+00
1.14E+00  1.13E+00  1.12E+00  1.11E+00  1.10E+00  1.09E+00  1.08E+00
1.07E+00  1.06E+00  1.05E+00  1.04E+00  1.03E+00  1.02E+00  1.01E+00
1.00E+00  9.75E-01  9.50E-01  9.25E-01  9.00E-01  8.50E-01  8.00E-01
7.50E-01  7.00E-01  6.50E-01  6.25E-01  6.00E-01  5.50E-01  5.00E-01
4.50E-01  4.00E-01  3.75E-01  3.50E-01  3.25E-01  3.00E-01  2.75E-01
2.50E-01  2.25E-01  2.00E-01  1.75E-01  1.50E-01  1.25E-01  1.00E-01
9.00E-02  8.00E-02  7.00E-02  6.00E-02  5.00E-02  4.00E-02  3.00E-02
2.53E-02  1.00E-02  7.50E-03  5.00E-03  4.00E-03  3.00E-03  2.50E-03
2.00E-03  1.50E-03  1.20E-03  1.00E-03  7.50E-04  5.00E-04  1.00E-04
11   cartesian lattice
12
13   Sn (cartesian)
14   1e-7
15   * Results of Case II.0 *
16   1.37954
17   - Reaction rates -
18   2.462e-01
19   4.176e-03
20   8.476e-03
21   4.409e-04
22   6.422e-03
23   1.454e-03
24   5.866e-02
25   2.745e-05
26   4.167e-02
27   * Results of Case II.1 *
28   1.37528
29   - Reaction rates -
30   2.437e-01

```

31 4.000e-03  
32 8.112e-03  
33 4.351e-04  
34 6.317e-03  
35 1.445e-03  
36 5.811e-02  
37 2.725e-05  
38 4.124e-02  
39 2.740e-03  
40 0.000e+00  
41 7.888e-03  
42 -2.246e-03  
39  
40  
41  
42  
43  
48 \* Results of Case II.2 \*  
49 1.37447  
50 - Reaction rates -  
51 2.434e-01  
52 4.018e-03  
53 8.151e-03  
54 4.345e-04  
55 6.236e-03  
56 1.448e-03  
57 5.809e-02  
58 2.732e-05  
59 4.117e-02  
60 3.346e-03  
61 0.000e+00  
62 3.556e-03  
63 -2.678e-03  
60  
61  
62  
63  
64  
69 \* Results of Case II.3 \*  
70 1.37465  
71 - Reaction rates -  
72 2.436e-01  
73 4.061e-03  
74 8.244e-03  
75 4.351e-04  
76 6.310e-03  
77 1.444e-03  
78 5.803e-02  
79 2.723e-05  
80 4.121e-02  
81 3.307e-03  
82 0.000e+00  
83 9.439e-03  
84 -2.580e-03  
81  
82  
83  
84  
85  
90 \* Results of Case II.4 \*  
91 1.37305  
92 - Reaction rates -  
93 2.427e-01

94 3.958e-03  
95 8.024e-03  
96 4.324e-04  
97 6.294e-03  
98 1.449e-03  
99 5.791e-02  
100 2.734e-05  
101 4.103e-02  
102 4.014e-03  
103 0.000e+00  
104 6.551e-04  
105 -3.427e-03  
102  
103  
104  
105  
106  
111 \* Results of Case II.5 \*  
112 1.37519  
113 - Reaction rates -  
114 2.438e-01  
115 4.041e-03  
116 8.200e-03  
117 4.354e-04  
118 6.311e-03  
119 1.451e-03  
120 5.816e-02  
121 2.738e-05  
122 4.123e-02  
123 2.782e-03  
124 0.000e+00  
125 7.375e-04  
126 -2.297e-03  
123  
124  
125  
126  
127  
132 \* Results of Case II.6 \*  
133 1.37484  
134 - Reaction rates -  
135 2.436e-01  
136 4.024e-03  
137 8.164e-03  
138 4.350e-04  
139 6.253e-03  
140 1.449e-03  
141 5.811e-02  
142 2.733e-05  
143 4.120e-02  
144 3.099e-03  
145 0.000e+00  
146 2.307e-03  
147 -2.481e-03  
144  
145  
146  
147  
148  
153 \* Results of Case II.7 \*  
154 1.37249  
155 - Reaction rates -  
156 2.420e-01

157 3.797e-03  
158 7.690e-03  
159 4.306e-04  
160 6.212e-03  
161 1.446e-03  
162 5.777e-02  
163 2.727e-05  
164 4.090e-02  
165 4.410e-03  
166 0.000e+00  
167 3.434e-03  
168 -3.727e-03  
165  
166  
167  
168  
169  
174 \* Results of Case II.8 \*  
175 1.37322  
176 - Reaction rates -  
177 2.426e-01  
178 3.914e-03  
179 7.935e-03  
180 4.323e-04  
181 6.250e-03  
182 1.446e-03  
183 5.783e-02  
184 2.727e-05  
185 4.102e-02  
186 4.020e-03  
187 0.000e+00  
188 7.023e-03  
189 -3.337e-03  
186  
187  
188  
189  
190  
195 \* Results of Case II.9 \*  
196 1.37447  
197 - Reaction rates -  
198 2.435e-01  
199 4.028e-03  
200 8.174e-03  
201 4.346e-04  
202 6.312e-03  
203 1.450e-03  
204 5.807e-02  
205 2.736e-05  
206 4.117e-02  
207 3.305e-03  
208 0.000e+00  
209 3.238e-03  
210 -2.677e-03  
207  
208  
209  
210  
211  
216 \* Results of Case II.10 \*  
217 1.37281  
218 - Reaction rates -  
219 2.423e-01

220 3.861e-03  
221 7.820e-03  
222 4.312e-04  
223 6.244e-03  
224 1.447e-03  
225 5.781e-02  
226 2.730e-05  
227 4.095e-02  
228 4.169e-03  
229 0.000e+00  
230 3.799e-05  
231 -3.554e-03  
228  
229  
230  
231  
232  
237 \* Results of Case II.11 \*  
238 1.37259  
239 - Reaction rates -  
240 2.421e-01  
241 3.823e-03  
242 7.744e-03  
243 4.309e-04  
244 6.112e-03  
245 1.445e-03  
246 5.777e-02  
247 2.725e-05  
248 4.092e-02  
249 4.495e-03  
250 0.000e+00  
251 4.915e-03  
252 -3.675e-03  
249  
250  
251  
252  
253  
258 \* Results of Case II.12 \*  
259 1.37225  
260 - Reaction rates -  
261 2.418e-01  
262 3.719e-03  
263 7.528e-03  
264 4.300e-04  
265 6.170e-03  
266 1.445e-03  
267 5.770e-02  
268 2.725e-05  
269 4.085e-02  
270 4.574e-03  
271 0.000e+00  
272 6.148e-05  
273 -3.855e-03  
270  
271  
272  
273  
274  
279 \* Results of Case II.13 \*  
280 1.37562  
281 - Reaction rates -  
282 2.440e-01

283 4.036e-03  
284 8.188e-03  
285 4.359e-04  
286 6.290e-03  
287 1.451e-03  
288 5.815e-02  
289 2.738e-05  
290 4.126e-02  
291 2.561e-03  
292 0.000e+00  
293 2.688e-03  
294 -2.066e-03  
291  
292  
293  
294  
295  
300 \* Results of Case II.14 \*  
301 1.37248  
302 - Reaction rates -  
303 2.423e-01  
304 3.916e-03  
305 7.943e-03  
306 4.318e-04  
307 6.243e-03  
308 1.448e-03  
309 5.780e-02  
310 2.733e-05  
311 4.096e-02  
312 4.512e-03  
313 0.000e+00  
314 6.343e-04  
315 -3.731e-03  
312  
313  
314  
315  
316  
321 \* Results of Case II.15 \*  
322 1.37253  
323 - Reaction rates -  
324 2.419e-01  
325 3.728e-03  
326 7.545e-03  
327 4.302e-04  
328 6.178e-03  
329 1.445e-03  
330 5.773e-02  
331 2.725e-05  
332 4.087e-02  
333 4.388e-03  
334 0.000e+00  
335 1.256e-05  
336 -3.705e-03  
333  
334  
335  
336  
337  
342 \* Results of Case II.16 \*  
343 1.38383  
344 - Reaction rates -  
345 2.447e-01

346 1.321e-02  
347 2.671e-02  
348 1.671e-03  
349 6.021e-03  
350 1.578e-03  
351 5.804e-02  
352 2.966e-05  
353 4.104e-02  
354  
355  
356  
357 2.245e-03  
354  
355  
356  
357  
358  
363 \* Results of Case II.17 \*  
364 1.37741  
365 - Reaction rates -  
366 2.451e-01  
367 4.127e-03  
368 8.375e-03  
369 4.384e-04  
370 6.376e-03  
371 1.450e-03  
372 5.844e-02  
373 2.738e-05  
374 4.147e-02  
375 1.624e-03  
376 3.256e-04  
377 6.304e-03  
378 -1.125e-03  
375  
376  
377  
378  
379  
384 \* Results of Case II.18 \*  
385 1.37291  
386 - Reaction rates -  
387 2.426e-01  
388 3.942e-03  
389 7.992e-03  
390 4.322e-04  
391 6.260e-03  
392 1.449e-03  
393 5.785e-02  
394 2.734e-05  
395 4.100e-02  
396 4.311e-03  
397 1.501e-04  
398 1.134e-03  
399 -3.505e-03  
396  
397  
398  
399  
400  
405 \* Results of Case II.19 \*  
406 1.37222  
407 - Reaction rates -  
408 2.417e-01

409 3.717e-03  
410 7.523e-03  
411 4.294e-04  
412 6.172e-03  
413 1.449e-03  
414 5.766e-02  
415 2.733e-05  
416 4.082e-02  
417 5.065e-03  
418 7.351e-04  
419 1.049e-03  
420 -3.871e-03  
417  
418  
419  
420  
421  
426 \* Results of Case II.20 \*  
427 1.38538  
428 - Reaction rates -  
429 2.431e-01  
430 2.955e-03  
431 5.948e-03  
432 4.159e-04  
433 5.831e-03  
434 1.669e-03  
435 5.747e-02  
436 3.130e-05  
437 4.048e-02  
438 1.773e-02  
439 3.430e-02  
440 1.074e-03  
441 3.053e-03  
438  
439  
440  
441  
442  
447 \* Results of Case II.21 \*  
448 1.37597  
449 - Reaction rates -  
450 2.443e-01  
451 4.077e-03  
452 8.271e-03  
453 4.363e-04  
454 6.360e-03  
455 1.452e-03  
456 5.823e-02  
457 2.740e-05  
458 4.132e-02  
459 2.224e-03  
460 2.885e-05  
461 2.923e-04  
462 -1.884e-03  
459  
460  
461  
462  
463  
468 \* Results of Case II.22 \*  
469 1.38630  
470 - Reaction rates -  
471 2.452e-01



472 3.294e-03  
473 6.649e-03  
474 4.256e-04  
475 5.978e-03  
476 1.615e-03  
477 5.808e-02  
478 3.034e-05  
479 4.102e-02  
480 1.171e-02  
481 2.545e-02  
482 5.922e-04  
483 3.535e-03  
480  
481  
482  
483  
484  
489 \* Results of Case II.23 \*  
490 1.37726  
491 - Reaction rates -  
492 2.450e-01  
493 4.126e-03  
494 8.373e-03  
495 4.380e-04  
496 6.387e-03  
497 1.453e-03  
498 5.839e-02  
499 2.742e-05  
500 4.144e-02  
501 1.551e-03  
502 1.833e-04  
503 1.723e-03  
504 -1.204e-03  
501  
502  
503  
504  
505  
510 \* Results of Case II.24 \*  
511 1.37317  
512 - Reaction rates -  
513 2.427e-01  
514 3.919e-03  
515 7.945e-03  
516 4.322e-04  
517 6.272e-03  
518 1.449e-03  
519 5.789e-02  
520 2.734e-05  
521 4.102e-02  
522 4.038e-03  
523 1.130e-04  
524 2.801e-04  
525 -3.367e-03  
522  
523  
524  
525  
526  
531 \* Results of Case II.25 \*  
532 1.37457  
533 - Reaction rates -  
534 2.436e-01

535 4.062e-03  
536 8.242e-03  
537 4.348e-04  
538 6.322e-03  
539 1.452e-03  
540 5.808e-02  
541 2.740e-05  
542 4.119e-02  
543 3.228e-03  
544 1.182e-04  
545 8.559e-04  
546 -2.624e-03  
543  
544  
545  
546  
547  
552 \* Results of Case II.26 \*  
553 1.37415  
554 - Reaction rates -  
555 2.430e-01  
556 3.890e-03  
557 7.881e-03  
558 4.331e-04  
559 6.261e-03  
560 1.448e-03  
561 5.797e-02  
562 2.732e-05  
563 4.109e-02  
564 3.367e-03  
565 0.000e+00  
566 1.545e-05  
567 -2.845e-03  
564  
565  
566  
567  
568  
573 \* Results of Case II.27 \*  
574 1.32865  
575 - Reaction rates -  
576 2.111e-01  
577 1.496e-03  
578 2.960e-03  
579 3.440e-04  
580 4.446e-03  
581 1.581e-03  
582 5.042e-02  
583 2.949e-05  
584 3.479e-02  
585 5.270e-02  
586 3.141e-02  
587 5.083e-02  
588 -2.777e-02  
585  
586  
587  
588  
589  
594 \* Results of Case 28.II \*  
595 1.38563  
596 - Reaction rates -  
597

598  
599  
600  
601  
602  
603  
604  
605  
606  
607  
608  
273 3.185e-03  
610  
611  
612  
613  
614  
615 \* Results of Case 29.II \*  
616 1.38694  
617 - Reaction rates -  
618  
619  
620  
621  
622  
623  
624  
625  
626  
627  
628  
629  
273 3.867e-03  
631  
632  
633  
634  
635

```
1   *** BENCHMARK - PHASE I ***
2   26.09.2011
3   GRS, Germany
4   Markus Wagner
5   markus.wagner@grs.de
6   Makus Wagner, Volker Hannstein, Winfried Zwermann
7   MCNP
8   NJoy
9   1
10
11
12
13  Monte Carlo
14
15  * Results of Case I.0 *
16  1.39199  3.00e+07  1.00e-04
17  - Reaction rates -
18  1.212e+01
19  6.518e-01
20  1.318e+00
21  8.261e-02
22  2.749e-01
23  7.381e-02
24  2.642e+00
25  1.431e-03
26  1.918e+00
27  * Results of Case I.1 *
28  1.38779  3.00e+07  1.00e-04
29  - Reaction rates -
30  1.211e+01
31  6.499e-01
32  1.314e+00
33  8.250e-02
34  2.744e-01
35  7.374e-02
36  2.639e+00
37  1.426e-03
38  1.916e+00
39  2.710e-03
40  0.000e+00
41  6.260e-03
42  -2.174e-03
43  -2.133e-03
44  -2.143e-03
45  -0.000e+00
46  6.730e-05
47
48  * Results of Case I.2 *
49  1.38192  3.00e+07  1.00e-04
50  - Reaction rates -
51  1.210e+01
52  6.469e-01
53  1.308e+00
54  8.236e-02
55  2.738e-01
56  7.374e-02
57  2.636e+00
58  1.426e-03
59  1.913e+00
60  6.468e-03
61  0.000e+00
62  4.484e-03
63  -5.235e-03
```

```
64 -5.173e-03
65 -5.167e-03
66 -0.000e+00
67 -0.000e+00
68
69 * Results of Case I.3 *
70 1.38850 3.00e+07 1.00e-04
71 - Reaction rates -
72 1.211e+01
73 6.500e-01
74 1.315e+00
75 8.250e-02
76 2.744e-01
77 7.373e-02
78 2.639e+00
79 1.426e-03
80 1.916e+00
81 2.250e-03
82 0.000e+00
83 4.136e-03
84 -1.806e-03
85 -1.718e-03
86 -1.707e-03
87 -0.000e+00
88 -5.174e-06
89
90 * Results of Case I.4 *
91 1.36609 3.00e+07 1.00e-04
92 - Reaction rates -
93 1.207e+01
94 6.392e-01
95 1.292e+00
96 8.209e-02
97 2.731e-01
98 7.370e-02
99 2.631e+00
100 1.426e-03
101 1.909e+00
102 1.541e-02
103 0.000e+00
104 2.301e-03
105 -1.362e-02
106 -1.349e-02
107 -1.348e-02
108 -0.000e+00
109 -0.000e+00
110
111 * Results of Case I.5 *
112 1.38870 3.00e+07 1.00e-04
113 - Reaction rates -
114 1.211e+01
115 6.501e-01
116 1.315e+00
117 8.252e-02
118 2.745e-01
119 7.375e-02
120 2.639e+00
121 1.427e-03
122 1.916e+00
123 2.120e-03
124 0.000e+00
125 4.302e-04
126 -1.702e-03
```

127 -1.723e-03  
128 -1.723e-03  
129 -0.000e+00  
130 -0.000e+00  
131  
132 \* Results of Case I.6 \*  
133 1.37959 3.00e+07 1.00e-04  
134 - Reaction rates -  
135 1.209e+01  
136 6.458e-01  
137 1.306e+00  
138 8.230e-02  
139 2.733e-01  
140 7.371e-02  
141 2.634e+00  
142 1.425e-03  
143 1.912e+00  
144 8.085e-03  
145 0.000e+00  
146 4.524e-03  
147 -6.457e-03  
148 -6.384e-03  
149 -6.379e-03  
150 -0.000e+00  
151 5.207e-06  
152  
153 \* Results of Case I.7 \*  
154 1.36456 3.00e+07 1.00e-04  
155 - Reaction rates -  
156 1.208e+01  
157 6.386e-01  
158 1.291e+00  
159 8.219e-02  
160 2.730e-01  
161 7.375e-02  
162 2.633e+00  
163 1.428e-03  
164 1.910e+00  
165 1.612e-02  
166 0.000e+00  
167 1.496e-02  
168 -1.444e-02  
169 -1.437e-02  
170 -1.434e-02  
171 -0.000e+00  
172 -1.053e-05  
173  
174 \* Results of Case I.8 \*  
175 1.38504 3.00e+07 1.00e-04  
176 - Reaction rates -  
177 1.211e+01  
178 6.483e-01  
179 1.311e+00  
180 8.245e-02  
181 2.742e-01  
182 7.375e-02  
183 2.638e+00  
184 1.428e-03  
185 1.915e+00  
186 4.232e-03  
187 0.000e+00  
188 8.128e-03  
189 -3.605e-03

190 -3.543e-03  
191 -3.522e-03  
192 -0.000e+00  
193 1.037e-05  
194  
195 \* Results of Case I.9 \*  
196 1.38940 3.00e+07 1.00e-04  
197 - Reaction rates -  
198 1.211e+01  
199 6.505e-01  
200 1.315e+00  
201 8.253e-02  
202 2.746e-01  
203 7.375e-02  
204 2.640e+00  
205 1.427e-03  
206 1.916e+00  
207 1.572e-03  
208 0.000e+00  
209 1.501e-03  
210 -1.339e-03  
211 -1.272e-03  
212 -1.267e-03  
213 -0.000e+00  
214 -0.000e+00  
215  
216 \* Results of Case I.10 \*  
217 1.36231 3.00e+07 1.00e-04  
218 - Reaction rates -  
219 1.208e+01  
220 6.374e-01  
221 1.288e+00  
222 8.215e-02  
223 2.729e-01  
224 7.374e-02  
225 2.632e+00  
226 1.426e-03  
227 1.910e+00  
228 1.736e-02  
229 0.000e+00  
230 1.653e-04  
231 -1.565e-02  
232 -1.555e-02  
233 -1.555e-02  
234 -0.000e+00  
235 -0.000e+00  
236  
237 \* Results of Case I.11 \*  
238 1.38819 3.00e+07 1.00e-04  
239 - Reaction rates -  
240 1.212e+01  
241 6.499e-01  
242 1.314e+00  
243 8.253e-02  
244 2.743e-01  
245 7.378e-02  
246 2.640e+00  
247 1.428e-03  
248 1.917e+00  
249 2.436e-03  
250 0.000e+00  
251 3.130e-03  
252 -1.967e-03

253 -1.910e-03  
254 -1.946e-03  
255 -0.000e+00  
256 3.623e-05  
257  
258 \* Results of Case I.12 \*  
259 1.37465 3.00e+07 1.00e-04  
260 - Reaction rates -  
261 1.210e+01  
262 6.435e-01  
263 1.301e+00  
264 8.238e-02  
265 2.738e-01  
266 7.379e-02  
267 2.637e+00  
268 1.430e-03  
269 1.914e+00  
270 1.024e-02  
271 0.000e+00  
272 1.517e-04  
273 -9.062e-03  
274 -9.114e-03  
275 -9.114e-03  
276 -0.000e+00  
277 -0.000e+00  
278  
279 \* Results of Case I.13 \*  
280 1.38317 3.00e+07 1.00e-04  
281 - Reaction rates -  
282 1.210e+01  
283 6.476e-01  
284 1.309e+00  
285 8.240e-02  
286 2.738e-01  
287 7.373e-02  
288 2.637e+00  
289 1.426e-03  
290 1.914e+00  
291 5.744e-03  
292 0.000e+00  
293 9.168e-03  
294 -4.581e-03  
295 -4.467e-03  
296 -4.436e-03  
297 -0.000e+00  
298 5.713e-05  
299  
300 \* Results of Case I.14 \*  
301 1.38552 3.00e+07 1.00e-04  
302 - Reaction rates -  
303 1.211e+01  
304 6.487e-01  
305 1.312e+00  
306 8.246e-02  
307 2.743e-01  
308 7.373e-02  
309 2.638e+00  
310 1.427e-03  
311 1.915e+00  
312 3.960e-03  
313 0.000e+00  
314 5.638e-04  
315 -3.355e-03



316 -3.334e-03  
317 -3.329e-03  
318 -0.000e+00  
319 -0.000e+00  
320  
321 \* Results of Case I.15 \*  
322 1.38284 3.00e+07 1.00e-04  
323 - Reaction rates -  
324 1.211e+01  
325 6.472e-01  
326 1.309e+00  
327 8.247e-02  
328 2.743e-01  
329 7.376e-02  
330 2.639e+00  
331 1.427e-03  
332 1.916e+00  
333 5.290e-03  
334 0.000e+00  
335 1.658e-05  
336 -4.753e-03  
337 -4.702e-03  
338 -4.702e-03  
339 -0.000e+00  
340 -0.000e+00  
341  
342 \* Results of Case I.16 \*  
343 0.95689 3.00e+07 8.00e-05  
344 - Reaction rates -  
345 1.487e+01  
346 4.281e-01  
347 8.797e-01  
348 2.884e-02  
349 4.089e-01  
350 7.407e-02  
351 3.207e+00  
352 1.450e-03  
353 2.410e+00  
354  
355  
356  
357 -3.267e-01  
354  
355  
356  
357  
358  
363 \* Results of Case I.17 \*  
364 1.38010 3.00e+07 1.00e-04  
365 - Reaction rates -  
366 1.208e+01  
367 6.456e-01  
368 1.305e+00  
369 8.225e-02  
370 2.735e-01  
371 7.366e-02  
372 2.633e+00  
373 1.424e-03  
374 1.911e+00  
375 8.181e-03  
376 8.839e-04  
377 1.468e-02  
378 -6.189e-03

379 -5.549e-03  
380 -5.788e-03  
381 2.238e-04  
382 7.808e-05  
383  
384 \* Results of Case I.18 \*  
385 1.38038 3.00e+07 1.00e-04  
386 - Reaction rates -  
387 1.210e+01  
388 6.460e-01  
389 1.306e+00  
390 8.236e-02  
391 2.739e-01  
392 7.374e-02  
393 2.636e+00  
394 1.427e-03  
395 1.913e+00  
396 7.283e-03  
397 2.766e-04  
398 1.890e-03  
399 -6.042e-03  
400 -6.032e-03  
401 -6.110e-03  
402 7.807e-05  
403 -0.000e+00  
404  
405 \* Results of Case I.19 \*  
406 1.38602 3.00e+07 1.00e-04  
407 - Reaction rates -  
408 1.211e+01  
409 6.486e-01  
410 1.311e+00  
411 8.250e-02  
412 2.743e-01  
413 7.375e-02  
414 2.639e+00  
415 1.426e-03  
416 1.916e+00  
417 3.849e-03  
418 5.936e-04  
419 8.960e-04  
420 -3.094e-03  
421 -3.053e-03  
422 -3.203e-03  
423 1.451e-04  
424 5.183e-06  
425  
426 \* Results of Case I.20 \*  
427 1.44404 3.00e+07 1.00e-04  
428 - Reaction rates -  
429 1.151e+01  
430 4.660e-01  
431 9.329e-01  
432 7.629e-02  
433 2.486e-01  
434 7.492e-02  
435 2.513e+00  
436 1.484e-03  
437 1.806e+00  
438 2.294e-01  
439 4.358e-01  
440 1.468e-02  
441 2.589e-02

442 2.324e-02  
443 -7.426e-02  
444 1.015e-01  
445 -9.950e-06  
446  
447 \* Results of Case I.21 \*  
448 1.27260 3.00e+07 1.10e-04  
449 - Reaction rates -  
450 1.188e+01  
451 5.938e-01  
452 1.198e+00  
453 8.019e-02  
454 2.666e-01  
455 7.370e-02  
456 2.591e+00  
457 1.424e-03  
458 1.875e+00  
459 7.214e-02  
460 1.142e-03  
461 1.060e-02  
462 -6.740e-02  
463 -5.024e-02  
464 -5.086e-02  
465 3.839e-04  
466 1.806e-04  
467  
468 \* Results of Case I.22 \*  
469 1.42941 3.00e+07 1.00e-04  
470 - Reaction rates -  
471 1.192e+01  
472 5.896e-01  
473 1.189e+00  
474 8.056e-02  
475 2.660e-01  
476 7.379e-02  
477 2.599e+00  
478 1.445e-03  
479 1.881e+00  
480 7.670e-02  
481 1.664e-01  
482 3.983e-03  
483 1.881e-02  
484 1.879e-02  
485 -1.800e-02  
486 3.716e-02  
487 -0.000e+00  
488  
489 \* Results of Case I.23 \*  
490 1.38378 3.00e+07 1.00e-04  
491 - Reaction rates -  
492 1.210e+01  
493 6.477e-01  
494 1.310e+00  
495 8.239e-02  
496 2.742e-01  
497 7.379e-02  
498 2.637e+00  
499 1.427e-03  
500 1.914e+00  
501 5.145e-03  
502 2.212e-04  
503 2.428e-03  
504 -4.262e-03

505 -4.101e-03  
506 -4.174e-03  
507 6.230e-05  
508 2.077e-05  
509  
510 \* Results of Case I.24 \*  
511 1.38458 3.00e+07 1.00e-04  
512 - Reaction rates -  
513 1.211e+01  
514 6.482e-01  
515 1.311e+00  
516 8.246e-02  
517 2.743e-01  
518 7.373e-02  
519 2.638e+00  
520 1.424e-03  
521 1.915e+00  
522 4.468e-03  
523 1.334e-04  
524 3.212e-04  
525 -3.845e-03  
526 -3.814e-03  
527 -3.850e-03  
528 3.632e-05  
529 -0.000e+00  
530  
531 \* Results of Case I.25 \*  
532 1.38821 3.00e+07 1.00e-04  
533 - Reaction rates -  
534 1.211e+01  
535 6.499e-01  
536 1.314e+00  
537 8.251e-02  
538 2.746e-01  
539 7.377e-02  
540 2.640e+00  
541 1.427e-03  
542 1.916e+00  
543 2.307e-03  
544 6.342e-05  
545 4.303e-04  
546 -1.956e-03  
547 -1.899e-03  
548 -1.925e-03  
549 2.070e-05  
550 5.175e-06  
551  
552 \* Results of Case I.26 \*  
553 1.36784 3.00e+07 1.00e-04  
554 - Reaction rates -  
555 1.209e+01  
556 6.402e-01  
557 1.294e+00  
558 8.224e-02  
559 2.732e-01  
560 7.376e-02  
561 2.634e+00  
562 1.427e-03  
563 1.911e+00  
564 1.420e-02  
565 0.000e+00  
566 7.657e-05  
567 -1.268e-02

568 -1.263e-02  
569 -1.263e-02  
570 -0.000e+00  
571 -0.000e+00  
572  
573 \* Results of Case I.27 \*  
574 1.03706 3.00e+07 1.10e-04  
575 - Reaction rates -  
576 1.175e+01  
577 1.494e-01  
578 3.006e-01  
579 2.053e-02  
580 2.635e-01  
581 7.583e-02  
582 2.563e+00  
583 1.547e-03  
584 1.846e+00  
585 5.232e-01  
586 6.605e-01  
587 1.075e-01  
588 -2.459e-01  
585  
586  
587  
588  
589

```
1      *** BENCHMARK - PHASE II ***
2      26.09.2011
3      GRS, Germany
4      Markus Wagner
5      markus.wagner@grs.de
6      Makus Wagner, Volker Hannstein, Winfried Zwermann
7      MCNP
8      NJoy
9      1
10
11
12
13     Monte Carlo
14
15     * Results of Case II.0 *
16     1.38719   6.00e+07   7.00e-05
17     - Reaction rates -
18     2.487e-01
19     4.196e-03
20     8.519e-03
21     4.445e-04
22     6.364e-03
23     1.494e-03
24     5.868e-02
25     2.836e-05
26     4.188e-02
27     * Results of Case II.1 *
28     1.38285   6.00e+07   7.00e-05
29     - Reaction rates -
30     2.460e-01
31     4.015e-03
32     8.144e-03
33     4.384e-04
34     6.245e-03
35     1.484e-03
36     5.808e-02
37     2.806e-05
38     4.141e-02
39     2.761e-03
40     0.000e+00
41     7.964e-03
42     -2.262e-03
43     -2.064e-03
44     -2.132e-03
45     -0.000e+00
46     7.298e-05
47
48     * Results of Case II.2 *
49     1.38214   6.00e+07   7.00e-05
50     - Reaction rates -
51     2.458e-01
52     4.038e-03
53     8.194e-03
54     4.380e-04
55     6.177e-03
56     1.487e-03
57     5.809e-02
58     2.821e-05
59     4.136e-02
60     3.378e-03
61     0.000e+00
62     3.588e-03
63     -2.634e-03
```

64 -2.326e-03  
65 -2.326e-03  
66 -0.000e+00  
67 1.043e-05  
68  
69 \* Results of Case II.3 \*  
70 1.38217 6.00e+07 7.00e-05  
71 - Reaction rates -  
72 2.460e-01  
73 4.080e-03  
74 8.284e-03  
75 4.386e-04  
76 6.247e-03  
77 1.484e-03  
78 5.802e-02  
79 2.809e-05  
80 4.141e-02  
81 3.373e-03  
82 0.000e+00  
83 9.544e-03  
84 -2.618e-03  
85 -2.253e-03  
86 -2.290e-03  
87 -0.000e+00  
88 6.259e-05  
89  
90 \* Results of Case II.4 \*  
91 1.38072 6.00e+07 7.00e-05  
92 - Reaction rates -  
93 2.451e-01  
94 3.978e-03  
95 8.069e-03  
96 4.359e-04  
97 6.229e-03  
98 1.490e-03  
99 5.789e-02  
100 2.819e-05  
101 4.122e-02  
102 4.082e-03  
103 0.000e+00  
104 6.610e-04  
105 -3.378e-03  
106 -3.237e-03  
107 -3.232e-03  
108 -0.000e+00  
109 -5.221e-06  
110  
111 \* Results of Case II.5 \*  
112 1.38284 6.00e+07 7.00e-05  
113 - Reaction rates -  
114 2.463e-01  
115 4.060e-03  
116 8.241e-03  
117 4.390e-04  
118 6.249e-03  
119 1.491e-03  
120 5.817e-02  
121 2.825e-05  
122 4.143e-02  
123 2.825e-03  
124 0.000e+00  
125 7.456e-04  
126 -2.268e-03

127 -1.960e-03  
128 -1.971e-03  
129 -0.000e+00  
130 1.043e-05  
131  
132 \* Results of Case II.6 \*  
133 1.38242 6.00e+07 7.00e-05  
134 - Reaction rates -  
135 2.462e-01  
136 4.043e-03  
137 8.205e-03  
138 4.386e-04  
139 6.183e-03  
140 1.490e-03  
141 5.813e-02  
142 2.827e-05  
143 4.140e-02  
144 3.140e-03  
145 0.000e+00  
146 2.355e-03  
147 -2.487e-03  
148 -2.180e-03  
149 -2.190e-03  
150 -0.000e+00  
151 2.086e-05  
152  
153 \* Results of Case II.7 \*  
154 1.37998 6.00e+07 7.00e-05  
155 - Reaction rates -  
156 2.443e-01  
157 3.813e-03  
158 7.724e-03  
159 4.338e-04  
160 6.149e-03  
161 1.485e-03  
162 5.773e-02  
163 2.807e-05  
164 4.107e-02  
165 4.441e-03  
166 0.000e+00  
167 3.497e-03  
168 -3.766e-03  
169 -3.672e-03  
170 -3.672e-03  
171 -0.000e+00  
172 1.567e-05  
173  
174 \* Results of Case II.8 \*  
175 1.38068 6.00e+07 7.00e-05  
176 - Reaction rates -  
177 2.448e-01  
178 3.927e-03  
179 7.963e-03  
180 4.353e-04  
181 6.189e-03  
182 1.486e-03  
183 5.777e-02  
184 2.810e-05  
185 4.117e-02  
186 4.078e-03  
187 0.000e+00  
188 7.081e-03  
189 -3.399e-03



190 -3.096e-03  
191 -3.154e-03  
192 -0.000e+00  
193 9.398e-05  
194  
195 \* Results of Case II.9 \*  
196 1.38204 6.00e+07 7.00e-05  
197 - Reaction rates -  
198 2.458e-01  
199 4.044e-03  
200 8.211e-03  
201 4.378e-04  
202 6.244e-03  
203 1.490e-03  
204 5.803e-02  
205 2.826e-05  
206 4.134e-02  
207 3.393e-03  
208 0.000e+00  
209 3.306e-03  
210 -2.686e-03  
211 -2.462e-03  
212 -2.540e-03  
213 -0.000e+00  
214 1.043e-04  
215  
216 \* Results of Case II.10 \*  
217 1.38040 6.00e+07 7.00e-05  
218 - Reaction rates -  
219 2.447e-01  
220 3.872e-03  
221 7.844e-03  
222 4.346e-04  
223 6.184e-03  
224 1.488e-03  
225 5.781e-02  
226 2.825e-05  
227 4.114e-02  
228 4.207e-03  
229 0.000e+00  
230 3.835e-05  
231 -3.546e-03  
232 -3.504e-03  
233 -3.509e-03  
234 -0.000e+00  
235 -0.000e+00  
236  
237 \* Results of Case II.11 \*  
238 1.38019 6.00e+07 7.00e-05  
239 - Reaction rates -  
240 2.444e-01  
241 3.837e-03  
242 7.776e-03  
243 4.341e-04  
244 6.047e-03  
245 1.485e-03  
246 5.773e-02  
247 2.817e-05  
248 4.109e-02  
249 4.521e-03  
250 0.000e+00  
251 5.011e-03  
252 -3.656e-03

253 -3.583e-03  
254 -3.630e-03  
255 -0.000e+00  
256 5.745e-05  
257  
258 \* Results of Case II.12 \*  
259 1.38006 6.00e+07 7.00e-05  
260 - Reaction rates -  
261 2.442e-01  
262 3.733e-03  
263 7.558e-03  
264 4.335e-04  
265 6.109e-03  
266 1.486e-03  
267 5.771e-02  
268 2.816e-05  
269 4.104e-02  
270 4.578e-03  
271 0.000e+00  
272 6.174e-05  
273 -3.724e-03  
274 -3.730e-03  
275 -3.730e-03  
276 -0.000e+00  
277 -0.000e+00  
278  
279 \* Results of Case II.13 \*  
280 1.38335 6.00e+07 7.00e-05  
281 - Reaction rates -  
282 2.462e-01  
283 4.050e-03  
284 8.220e-03  
285 4.390e-04  
286 6.211e-03  
287 1.490e-03  
288 5.811e-02  
289 2.825e-05  
290 4.142e-02  
291 2.560e-03  
292 0.000e+00  
293 2.671e-03  
294 -2.001e-03  
295 -1.761e-03  
296 -1.850e-03  
297 -0.000e+00  
298 9.380e-05  
299  
300 \* Results of Case II.14 \*  
301 1.37985 6.00e+07 7.00e-05  
302 - Reaction rates -  
303 2.448e-01  
304 3.934e-03  
305 7.981e-03  
306 4.352e-04  
307 6.187e-03  
308 1.489e-03  
309 5.782e-02  
310 2.820e-05  
311 4.114e-02  
312 4.589e-03  
313 0.000e+00  
314 6.379e-04  
315 -3.835e-03

316 -3.694e-03  
317 -3.688e-03  
318 -0.000e+00  
319 -5.224e-06  
320  
321 \* Results of Case II.15 \*  
322 1.38025 6.00e+07 7.00e-05  
323 - Reaction rates -  
324 2.443e-01  
325 3.742e-03  
326 7.576e-03  
327 4.336e-04  
328 6.115e-03  
329 1.486e-03  
330 5.772e-02  
331 2.818e-05  
332 4.106e-02  
333 4.394e-03  
334 0.000e+00  
335 1.265e-05  
336 -3.625e-03  
337 -3.588e-03  
338 -3.588e-03  
339 -0.000e+00  
340 -0.000e+00  
341  
342 \* Results of Case II.16 \*  
343 1.39150 6.00e+07 7.00e-05  
344 - Reaction rates -  
345 2.471e-01  
346 1.327e-02  
347 2.684e-02  
348 1.683e-03  
349 5.964e-03  
350 1.619e-03  
351 5.801e-02  
352 3.056e-05  
353 4.121e-02  
354  
355  
356  
357 2.233e-03  
358 2.129e-03  
359 -1.466e-03  
360 3.709e-03  
361 -0.000e+00  
362  
363 \* Results of Case II.17 \*  
364 1.38505 6.00e+07 7.00e-05  
365 - Reaction rates -  
366 2.475e-01  
367 4.148e-03  
368 8.422e-03  
369 4.419e-04  
370 6.315e-03  
371 1.491e-03  
372 5.843e-02  
373 2.830e-05  
374 4.166e-02  
375 1.680e-03  
376 3.346e-04  
377 6.391e-03  
378 -1.114e-03

379 -8.640e-04  
380 -9.993e-04  
381 8.328e-05  
382 6.766e-05  
383  
384 \* Results of Case II.18 \*  
385 1.38047 6.00e+07 7.00e-05  
386 - Reaction rates -  
387 2.450e-01  
388 3.955e-03  
389 8.022e-03  
390 4.356e-04  
391 6.200e-03  
392 1.488e-03  
393 5.785e-02  
394 2.817e-05  
395 4.119e-02  
396 4.373e-03  
397 1.534e-04  
398 1.141e-03  
399 -3.509e-03  
400 -3.462e-03  
401 -3.499e-03  
402 4.178e-05  
403 -5.222e-06  
404  
405 \* Results of Case II.19 \*  
406 1.37979 6.00e+07 7.00e-05  
407 - Reaction rates -  
408 2.441e-01  
409 3.730e-03  
410 7.551e-03  
411 4.329e-04  
412 6.112e-03  
413 1.491e-03  
414 5.769e-02  
415 2.824e-05  
416 4.101e-02  
417 5.083e-03  
418 7.313e-04  
419 1.065e-03  
420 -3.866e-03  
421 -3.767e-03  
422 -3.965e-03  
423 2.038e-04  
424 -0.000e+00  
425  
426 \* Results of Case II.20 \*  
427 1.39314 6.00e+07 7.00e-05  
428 - Reaction rates -  
429 2.454e-01  
430 2.957e-03  
431 5.955e-03  
432 4.188e-04  
433 5.753e-03  
434 1.726e-03  
435 5.741e-02  
436 3.298e-05  
437 4.060e-02  
438 1.786e-02  
439 3.452e-02  
440 1.082e-03  
441 3.079e-03

442 2.727e-03  
443 -5.728e-03  
444 8.807e-03  
445 5.175e-06  
446  
447 \* Results of Case II.21 \*  
448 1.38347 6.00e+07 7.00e-05  
449 - Reaction rates -  
450 2.467e-01  
451 4.093e-03  
452 8.305e-03  
453 4.398e-04  
454 6.305e-03  
455 1.491e-03  
456 5.824e-02  
457 2.819e-05  
458 4.151e-02  
459 2.251e-03  
460 2.942e-05  
461 2.946e-04  
462 -1.938e-03  
463 -1.454e-03  
464 -1.475e-03  
465 1.042e-05  
466 5.211e-06  
467  
468 \* Results of Case II.22 \*  
469 1.39416 6.00e+07 7.00e-05  
470 - Reaction rates -  
471 2.475e-01  
472 3.301e-03  
473 6.666e-03  
474 4.288e-04  
475 5.913e-03  
476 1.656e-03  
477 5.805e-02  
478 3.157e-05  
479 4.121e-02  
480 1.178e-02  
481 2.562e-02  
482 5.959e-04  
483 3.604e-03  
484 3.366e-03  
485 -2.906e-03  
486 6.391e-03  
487 5.171e-06  
488  
489 \* Results of Case II.23 \*  
490 1.38505 6.00e+07 7.00e-05  
491 - Reaction rates -  
492 2.474e-01  
493 4.143e-03  
494 8.410e-03  
495 4.415e-04  
496 6.329e-03  
497 1.492e-03  
498 5.838e-02  
499 2.830e-05  
500 4.163e-02  
501 1.570e-03  
502 1.876e-04  
503 1.751e-03  
504 -1.114e-03

505 -8.536e-04  
506 -9.212e-04  
507 5.725e-05  
508 1.561e-05  
509  
510 \* Results of Case II.24 \*  
511 1.38076 6.00e+07 7.00e-05  
512 - Reaction rates -  
513 2.452e-01  
514 3.944e-03  
515 7.997e-03  
516 4.360e-04  
517 6.211e-03  
518 1.492e-03  
519 5.791e-02  
520 2.829e-05  
521 4.122e-02  
522 4.089e-03  
523 1.151e-04  
524 2.819e-04  
525 -3.357e-03  
526 -3.336e-03  
527 -3.367e-03  
528 3.133e-05  
529 -5.221e-06  
530  
531 \* Results of Case II.25 \*  
532 1.38220 6.00e+07 7.00e-05  
533 - Reaction rates -  
534 2.460e-01  
535 4.082e-03  
536 8.285e-03  
537 4.383e-04  
538 6.264e-03  
539 1.492e-03  
540 5.809e-02  
541 2.831e-05  
542 4.138e-02  
543 3.281e-03  
544 1.210e-04  
545 8.621e-04  
546 -2.603e-03  
547 -2.295e-03  
548 -2.342e-03  
549 3.651e-05  
550 5.215e-06  
551  
552 \* Results of Case II.26 \*  
553 1.38180 6.00e+07 7.00e-05  
554 - Reaction rates -  
555 2.454e-01  
556 3.904e-03  
557 7.913e-03  
558 4.364e-04  
559 6.192e-03  
560 1.487e-03  
561 5.796e-02  
562 2.818e-05  
563 4.126e-02  
564 3.383e-03  
565 0.000e+00  
566 1.557e-05  
567 -2.812e-03

568 -2.812e-03  
569 -2.812e-03  
570 -0.000e+00  
571 -0.000e+00  
572  
573 \* Results of Case II.27 \*  
574 1.33610 6.00e+07 7.00e-05  
575 - Reaction rates -  
576 2.126e-01  
577 1.490e-03  
578 2.949e-03  
579 3.452e-04  
580 4.341e-03  
581 1.630e-03  
582 5.014e-02  
583 3.105e-05  
584 3.480e-02  
585 5.304e-02  
586 3.155e-02  
587 5.121e-02  
588 -2.757e-02  
585  
586  
587  
588  
589  
594 \* Results of Case 28.II \*  
595 1.39341 6.00e+07 7.00e-05  
596 - Reaction rates -  
597  
598  
599  
600  
601  
602  
603  
604  
605  
606  
607  
608  
273 3.218e-03  
610  
611  
612  
613  
614  
615 \* Results of Case 29.II \*  
616 1.39418 6.00e+07 7.00e-05  
617 - Reaction rates -  
618  
619  
620  
621  
622  
623  
624  
625  
626  
627  
628  
629  
273 3.614e-03

631  
632  
633  
634  
635



Name of Participant(s)	E-mail Address
Lucia Gallner	<a href="mailto:lucia.gallner@grs.de">lucia.gallner@grs.de</a>
Markus Klein	<a href="mailto:markus.klein@grs.de">markus.klein@grs.de</a>
Winfried Zwermann	<a href="mailto:winfried.zwermann@grs.de">winfried.zwermann@grs.de</a>
Organization	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS)mbH
Country	Germany

<b>Reactor Name</b>	<i>TMI-1</i>
<b>Operating Condition</b>	<i>Hot Full Power</i>
<b>Reactor type</b>	<i>PWR</i>
<b>Nuclear Data Library Used</b>	<i>ENDF/B-VII</i>
<b>Covariance Data Library Used</b>	<i>SCALE 6.0 (44groups)</i>
<b>Computer Code Used</b>	<i>XSUSA / TRITON (BONAMI-CENTRM-NEWT-ORIGENS)</i>
<b>Criticality Calculation Method</b>	<i>two-dimensional (2-D) discrete-ordinates transport</i>
<b>Uncertainty Calculation Method</b>	<i>sampling method</i>

		0 GWd/MTU		10 GWd/MTU		20 GWd/MTU		30 GWd/MTU		40 GWd/MTU	
		mean	rel. std. dev.	mean	rel. std. dev.	mean	rel. std. dev.	mean	rel. std. dev.	mean	rel. std. dev.
	k-eff	1.4029	0.48%	1.2474	0.49%	1.1623	0.55%	1.0913	0.60%	1.0270	0.65%
main contributions		92238-0102	0.352	92238-0102	0.288	94239-0452	0.294	94239-0452	0.388	94239-0452	0.449
		92235-0452	0.289	92238-0002	0.199	92238-0102	0.193	92238-0002	0.172	94239-0102	0.176
		92235-0102	0.258	92235-0102	0.176	92238-0002	0.185	94239-0102	0.166	94239-0018	0.171
		92238-0002	0.173	92235-0452	0.168	94239-0102	0.141	94239-0018	0.161	92238-0002	0.165
		92235-0002	0.128	94239-0452	0.147	94239-0018	0.139	92238-0004	0.121	92238-0004	0.135
	flux	2.002E+01	0.92%	1.973E+01	0.92%	1.968E+01	0.92%	1.971E+01	0.91%	1.977E+01	0.91%
reaction rates	u235-cap	1.279E-01	1.39%	9.080E-02	1.42%	6.883E-02	1.40%	5.223E-02	1.33%	3.889E-02	1.22%
	u235-fis	5.406E-01	0.44%	3.703E-01	0.62%	2.781E-01	0.73%	2.108E-01	0.80%	1.575E-01	0.85%
	u238-cap	2.581E-01	0.82%	2.519E-01	0.75%	2.506E-01	0.70%	2.508E-01	0.65%	2.514E-01	0.60%
	u238-fis	3.002E-02	4.78%	3.010E-02	4.59%	3.008E-02	4.48%	3.000E-02	4.42%	2.989E-02	4.38%
	pu239-cap			4.903E-02	1.25%	6.981E-02	1.16%	8.039E-02	1.11%	8.639E-02	1.07%
	pu239-fis			8.615E-02	0.90%	1.238E-01	0.80%	1.436E-01	0.76%	1.552E-01	0.76%
	pu240-cap			2.111E-02	1.26%	4.070E-02	1.06%	5.438E-02	1.00%	6.501E-02	0.98%
	pu240-fis			7.578E-05	3.29%	1.955E-04	3.25%	3.149E-04	3.30%	4.261E-04	3.37%
	pu241-cap			1.423E-03	1.67%	5.182E-03	1.46%	9.502E-03	1.39%	1.335E-02	1.36%
	pu241-fis			3.915E-03	1.60%	1.436E-02	1.35%	2.642E-02	1.25%	3.721E-02	1.19%
cross sections	abs-1	1.159E-02	0.90%	1.202E-02	0.91%	1.236E-02	0.92%	1.255E-02	0.94%	1.268E-02	0.95%
	abs-2	1.164E-01	0.23%	1.306E-01	0.35%	1.323E-01	0.50%	1.307E-01	0.67%	1.274E-01	0.86%
	fis-1	3.873E-03	0.38%	3.447E-03	0.40%	3.076E-03	0.51%	2.758E-03	0.69%	2.478E-03	0.92%
	fis-2	8.663E-02	0.32%	8.504E-02	0.36%	8.110E-02	0.51%	7.567E-02	0.70%	6.971E-02	0.94%
	nufis-1	9.761E-03	0.50%	8.818E-03	0.54%	7.973E-03	0.65%	7.239E-03	0.82%	6.591E-03	1.03%
	nufis-2	2.111E-01	0.44%	2.156E-01	0.51%	2.105E-01	0.69%	2.001E-01	0.90%	1.875E-01	1.13%
	diff-1	1.414E+00	2.37%	1.418E+00	2.35%	1.422E+00	2.33%	1.425E+00	2.32%	1.428E+00	2.31%
	diff-2	3.745E-01	0.18%	3.655E-01	0.17%	3.618E-01	0.17%	3.600E-01	0.18%	3.592E-01	0.18%

inventories	42095	0.000E+00		8.372E-06	0.08%	2.238E-05	0.13%	3.563E-05	0.19%	4.783E-05	0.27%
	43099	0.000E+00		1.481E-05	0.07%	2.875E-05	0.14%	4.152E-05	0.21%	5.335E-05	0.28%
	44101	0.000E+00		1.291E-05	0.05%	2.572E-05	0.05%	3.837E-05	0.06%	5.077E-05	0.06%
	44106	0.000E+00		1.789E-06	0.61%	3.955E-06	0.54%	6.115E-06	0.48%	8.149E-06	0.41%
	45103	0.000E+00		6.462E-06	0.40%	1.412E-05	0.69%	2.110E-05	0.99%	2.722E-05	1.27%
	47109	0.000E+00		4.376E-07	0.87%	1.332E-06	0.91%	2.520E-06	0.99%	3.901E-06	1.11%
	55133	0.000E+00		1.541E-05	0.18%	3.013E-05	0.36%	4.359E-05	0.55%	5.578E-05	0.74%
	55134	0.000E+00		4.787E-07	5.01%	1.795E-06	4.83%	3.717E-06	4.64%	6.070E-06	4.45%
	55135	0.000E+00		6.240E-06	2.53%	1.238E-05	2.54%	1.826E-05	2.56%	2.387E-05	2.60%
	55137	0.000E+00		1.511E-05	0.02%	2.992E-05	0.02%	4.444E-05	0.02%	5.867E-05	0.02%
	57139	0.000E+00		1.538E-05	0.04%	3.024E-05	0.05%	4.470E-05	0.05%	5.879E-05	0.05%
	58140	0.000E+00		1.398E-05	0.04%	2.863E-05	0.05%	4.363E-05	0.05%	5.843E-05	0.06%
	58142	0.000E+00		1.392E-05	0.07%	2.734E-05	0.07%	4.035E-05	0.07%	5.300E-05	0.07%
	58144	0.000E+00		9.138E-06	0.07%	1.302E-05	0.09%	1.450E-05	0.10%	1.488E-05	0.11%
	60142	0.000E+00		3.801E-08	0.40%	1.835E-07	0.44%	4.517E-07	0.51%	8.586E-07	0.60%
	60143	0.000E+00		1.229E-05	0.28%	2.339E-05	0.58%	3.243E-05	0.91%	3.948E-05	1.26%
	60145	0.000E+00		9.113E-06	0.29%	1.729E-05	0.61%	2.464E-05	0.94%	3.119E-05	1.30%
	60146	0.000E+00		7.531E-06	0.35%	1.533E-05	0.68%	2.349E-05	0.98%	3.206E-05	1.26%
	60148	0.000E+00		4.200E-06	0.29%	8.348E-06	0.31%	1.246E-05	0.32%	1.654E-05	0.34%
	60150	0.000E+00		1.762E-06	0.21%	3.630E-06	0.20%	5.585E-06	0.19%	7.613E-06	0.18%
	62147	0.000E+00		4.254E-07	0.49%	1.420E-06	0.88%	2.582E-06	1.26%	3.678E-06	1.63%
	62148	0.000E+00		4.499E-07	3.38%	1.743E-06	2.87%	3.660E-06	2.44%	6.067E-06	2.10%
	62149	0.000E+00		1.170E-07	1.69%	1.227E-07	1.82%	1.147E-07	2.00%	1.100E-07	2.15%
	62150	0.000E+00		2.758E-06	0.32%	5.931E-06	0.56%	9.285E-06	0.77%	1.265E-05	0.96%
	62151	0.000E+00		3.909E-07	1.72%	4.724E-07	2.28%	5.268E-07	2.68%	5.685E-07	3.02%
	62152	0.000E+00		1.274E-06	0.76%	2.506E-06	1.29%	3.459E-06	1.81%	4.203E-06	2.25%
	62154	0.000E+00		2.511E-07	0.34%	5.759E-07	0.31%	9.609E-07	0.28%	1.398E-06	0.25%
	63151	0.000E+00		5.924E-10	1.93%	7.837E-10	2.73%	8.303E-10	3.24%	8.305E-10	3.72%
	63153	0.000E+00		6.876E-07	1.20%	1.884E-06	1.67%	3.327E-06	2.04%	4.800E-06	2.44%
	63154	0.000E+00		6.975E-08	5.21%	3.025E-07	5.93%	6.760E-07	6.61%	1.117E-06	7.23%
	63155	0.000E+00		4.358E-08	4.69%	1.028E-07	6.05%	1.988E-07	6.33%	3.185E-07	6.11%
	64154	0.000E+00		1.467E-09	4.97%	1.251E-08	5.50%	4.238E-08	6.02%	9.589E-08	6.51%
	64155	0.000E+00		5.151E-10	4.87%	1.212E-09	5.93%	2.312E-09	5.96%	3.588E-09	5.61%

	64156	0.000E+00		1.561E-07	1.23%	5.511E-07	2.08%	1.336E-06	2.98%	2.699E-06	3.35%
	64158	0.000E+00		6.062E-08	0.70%	1.782E-07	1.03%	3.598E-07	1.68%	6.257E-07	2.54%
	64160	0.000E+00		3.584E-09	0.76%	1.101E-08	0.67%	2.173E-08	0.60%	3.546E-08	0.54%
	92233	0.000E+00		5.899E-11	15.51%	1.002E-10	15.17%	1.252E-10	14.99%	1.367E-10	14.91%
	92234	1.166E-05		1.034E-05	0.81%	9.097E-06	1.69%	7.940E-06	2.62%	6.874E-06	3.60%
	92235	1.126E-03		8.716E-04	0.11%	6.660E-04	0.28%	4.980E-04	0.51%	3.623E-04	0.85%
	92236	0.000E+00		4.870E-05	1.59%	8.633E-05	1.57%	1.151E-04	1.55%	1.361E-04	1.52%
	92238	2.181E-02		2.167E-02	0.01%	2.153E-02	0.01%	2.137E-02	0.02%	2.120E-02	0.03%
	93237	0.000E+00		1.695E-06	5.95%	4.878E-06	4.33%	8.759E-06	3.72%	1.285E-05	3.40%
	94238	0.000E+00		1.233E-07	7.36%	7.333E-07	5.29%	2.072E-06	4.36%	4.233E-06	3.82%
	94239	0.000E+00		8.072E-05	1.15%	1.232E-04	1.28%	1.447E-04	1.45%	1.546E-04	1.64%
	94240	0.000E+00		9.364E-06	1.61%	2.452E-05	1.72%	4.000E-05	1.85%	5.405E-05	1.97%
	94241	0.000E+00		3.545E-06	1.63%	1.348E-05	1.44%	2.470E-05	1.41%	3.434E-05	1.47%
	94242	0.000E+00		1.983E-07	2.03%	1.672E-06	2.04%	4.960E-06	2.33%	9.939E-06	2.73%
	95241	0.000E+00		3.648E-08	1.74%	2.764E-07	1.69%	7.147E-07	1.90%	1.219E-06	2.25%
	95243	0.000E+00		9.627E-09	9.64%	1.778E-07	9.03%	8.158E-07	8.37%	2.161E-06	7.69%
	96244	0.000E+00		5.641E-10	10.10%	2.323E-08	9.58%	1.740E-07	9.01%	6.592E-07	8.42%
	96246	0.000E+00		1.172E-13	16.34%	2.199E-11	15.95%	4.165E-10	15.50%	3.118E-09	15.00%

		50 GWd/MTU		60 GWd/MTU		shutdown		1 year cooling time		3 years cooling time	
		mean	rel. std. dev.	mean	rel. std. dev.	mean	rel. std. dev.	mean	rel. std. dev.	mean	rel. std. dev.
	k-eff	0.9688	0.70%	0.9169	0.75%	0.9102	0.75%	0.9246	0.77%	0.9124	0.79%
main contributions		94239-0452	0.487	94239-0452	0.507	94239-0452	0.508	94239-0452	0.499	94239-0452	0.488
		94239-0102	0.174	92238-0002	0.169	92238-0002	0.170	92238-0002	0.169	94239-0102	0.173
		94239-0018	0.168	94239-0102	0.162	94239-0102	0.159	94239-0102	0.167	92238-0002	0.172
		92238-0002	0.164	94239-0018	0.156	94239-0018	0.153	94239-0018	0.163	94239-0018	0.168
		92238-0004	0.146	92238-0004	0.152	92238-0004	0.153	92238-0004	0.152	92238-0004	0.154
	flux	1.984E+01	0.91%	1.992E+01	0.91%	1.993E+01	0.91%	1.997E+01	0.91%	1.998E+01	0.91%
reaction rates	u235-cap	2.817E-02	1.13%	1.968E-02	1.16%	1.873E-02	1.18%	1.903E-02	1.19%	1.906E-02	1.19%
	u235-fis	1.147E-01	0.90%	8.068E-02	1.03%	7.686E-02	1.07%	7.862E-02	1.08%	7.877E-02	1.08%
	u238-cap	2.520E-01	0.55%	2.525E-01	0.50%	2.525E-01	0.50%	2.536E-01	0.50%	2.538E-01	0.50%
	u238-fis	2.975E-02	4.37%	2.957E-02	4.36%	2.955E-02	4.36%	2.956E-02	4.37%	2.957E-02	4.38%
	pu239-cap	8.968E-02	1.04%	9.134E-02	1.02%	9.145E-02	1.02%	9.394E-02	1.01%	9.412E-02	1.01%
	pu239-fis	1.618E-01	0.76%	1.654E-01	0.77%	1.657E-01	0.78%	1.706E-01	0.78%	1.710E-01	0.78%
	pu240-cap	7.324E-02	0.97%	7.969E-02	0.95%	8.045E-02	0.95%	8.083E-02	0.95%	8.101E-02	0.95%
	pu240-fis	5.208E-04	3.46%	5.987E-04	3.56%	6.081E-04	3.57%	6.094E-04	3.57%	6.116E-04	3.56%
	pu241-cap	1.655E-02	1.34%	1.898E-02	1.31%	1.920E-02	1.30%	1.866E-02	1.29%	1.699E-02	1.29%
	pu241-fis	4.621E-02	1.14%	5.307E-02	1.09%	5.367E-02	1.08%	5.222E-02	1.07%	4.755E-02	1.08%
cross sections	abs-1	1.278E-02	0.97%	1.287E-02	0.99%	1.288E-02	0.99%	1.290E-02	0.99%	1.289E-02	0.99%
	abs-2	1.235E-01	1.07%	1.195E-01	1.27%	1.190E-01	1.30%	1.165E-01	1.29%	1.163E-01	1.29%
	fis-1	2.240E-03	1.17%	2.040E-03	1.42%	2.017E-03	1.45%	2.012E-03	1.45%	1.992E-03	1.47%
	fis-2	6.388E-02	1.22%	5.854E-02	1.52%	5.788E-02	1.56%	5.797E-02	1.56%	5.708E-02	1.58%
	nufis-1	6.035E-03	1.26%	5.572E-03	1.49%	5.517E-03	1.52%	5.502E-03	1.52%	5.443E-03	1.54%
	nufis-2	1.744E-01	1.40%	1.620E-01	1.68%	1.604E-01	1.72%	1.606E-01	1.72%	1.580E-01	1.74%
	diff-1	1.431E+00	2.30%	1.434E+00	2.29%	1.435E+00	2.29%	1.435E+00	2.29%	1.435E+00	2.29%
	diff-2	3.588E-01	0.18%	3.588E-01	0.19%	3.589E-01	0.19%	3.590E-01	0.19%	3.591E-01	0.19%

inventories	42095	5.902E-05	0.34%	6.922E-05	0.43%	7.046E-05	0.44%	7.607E-05	0.41%	7.623E-05	0.41%
	43099	6.422E-05	0.36%	7.412E-05	0.45%	7.535E-05	0.46%	7.556E-05	0.46%	7.556E-05	0.46%
	44101	6.289E-05	0.07%	7.467E-05	0.08%	7.615E-05	0.08%	7.615E-05	0.08%	7.615E-05	0.08%
	44106	1.003E-05	0.35%	1.174E-05	0.32%	1.195E-05	0.32%	6.046E-06	0.32%	1.548E-06	0.32%
	45103	3.240E-05	1.54%	3.665E-05	1.79%	3.713E-05	1.82%	3.976E-05	1.70%	3.977E-05	1.70%
	47109	5.400E-06	1.26%	6.960E-06	1.41%	7.161E-06	1.43%	7.171E-06	1.43%	7.171E-06	1.43%
	55133	6.668E-05	0.94%	7.627E-05	1.14%	7.741E-05	1.17%	7.786E-05	1.16%	7.786E-05	1.16%
	55134	8.711E-06	4.26%	1.152E-05	4.08%	1.188E-05	4.06%	8.493E-06	4.06%	4.338E-06	4.06%
	55135	2.924E-05	2.63%	3.442E-05	2.68%	3.508E-05	2.68%	3.511E-05	2.68%	3.511E-05	2.68%
	55137	7.258E-05	0.02%	8.620E-05	0.03%	8.791E-05	0.03%	8.591E-05	0.03%	8.203E-05	0.03%
	57139	7.252E-05	0.04%	8.589E-05	0.04%	8.757E-05	0.04%	8.758E-05	0.04%	8.758E-05	0.04%
	58140	7.306E-05	0.06%	8.756E-05	0.06%	8.934E-05	0.06%	9.026E-05	0.06%	9.026E-05	0.06%
	58142	6.532E-05	0.07%	7.732E-05	0.06%	7.884E-05	0.06%	7.884E-05	0.06%	7.884E-05	0.06%
	58144	1.476E-05	0.11%	1.442E-05	0.11%	1.437E-05	0.11%	5.913E-06	0.11%	1.001E-06	0.11%
	60142	1.421E-06	0.71%	2.154E-06	0.84%	2.261E-06	0.85%	2.265E-06	0.85%	2.265E-06	0.85%
	60143	4.463E-05	1.63%	4.800E-05	2.03%	4.830E-05	2.08%	4.911E-05	2.05%	4.911E-05	2.05%
	60145	3.697E-05	1.67%	4.201E-05	2.06%	4.260E-05	2.11%	4.261E-05	2.11%	4.261E-05	2.11%
	60146	4.106E-05	1.50%	5.052E-05	1.70%	5.176E-05	1.73%	5.176E-05	1.73%	5.176E-05	1.73%
	60148	2.058E-05	0.36%	2.459E-05	0.38%	2.510E-05	0.39%	2.510E-05	0.39%	2.510E-05	0.39%
	60150	9.703E-06	0.17%	1.185E-05	0.16%	1.213E-05	0.16%	1.213E-05	0.16%	1.213E-05	0.16%
	62147	4.583E-06	2.00%	5.250E-06	2.37%	5.318E-06	2.41%	7.296E-06	2.27%	9.987E-06	2.21%
	62148	8.862E-06	1.81%	1.195E-05	1.57%	1.236E-05	1.55%	1.248E-05	1.55%	1.248E-05	1.55%
	62149	1.041E-07	2.34%	9.834E-08	2.55%	1.030E-07	2.57%	1.509E-07	1.76%	1.509E-07	1.76%
	62150	1.595E-05	1.16%	1.912E-05	1.37%	1.949E-05	1.40%	1.949E-05	1.40%	1.949E-05	1.40%
	62151	6.026E-07	3.28%	6.326E-07	3.46%	6.368E-07	3.47%	6.415E-07	3.42%	6.318E-07	3.42%
	62152	4.804E-06	2.60%	5.308E-06	2.87%	5.366E-06	2.89%	5.367E-06	2.89%	5.367E-06	2.89%
	62154	1.881E-06	0.22%	2.406E-06	0.19%	2.475E-06	0.18%	2.475E-06	0.18%	2.475E-06	0.18%
	63151	8.090E-10	4.16%	7.815E-10	4.56%	7.767E-10	4.61%	5.733E-09	3.52%	1.553E-08	3.45%
	63153	6.172E-06	2.87%	7.381E-06	3.28%	7.520E-06	3.33%	7.566E-06	3.32%	7.566E-06	3.32%
	63154	1.555E-06	7.77%	1.944E-06	8.21%	1.988E-06	8.26%	1.834E-06	8.26%	1.561E-06	8.26%
	63155	4.452E-07	5.77%	5.649E-07	5.47%	5.800E-07	5.43%	5.002E-07	5.43%	3.721E-07	5.43%
	64154	1.722E-07	6.96%	2.665E-07	7.36%	2.795E-07	7.41%	4.335E-07	7.68%	7.065E-07	7.89%
	64155	4.836E-09	5.34%	5.954E-09	5.29%	6.058E-09	5.31%	8.586E-08	5.31%	2.140E-07	5.38%

	64156	4.778E-06	3.35%	7.629E-06	3.20%	8.050E-06	3.18%	8.307E-06	3.15%	8.307E-06	3.15%
	64158	1.011E-06	3.53%	1.548E-06	4.53%	1.628E-06	4.65%	1.628E-06	4.65%	1.628E-06	4.65%
	64160	5.201E-08	0.50%	7.124E-08	0.48%	7.388E-08	0.48%	7.388E-08	0.48%	7.388E-08	0.48%
	92233	1.379E-10	14.87%	1.322E-10	14.85%	1.312E-10	14.85%	1.380E-10	14.14%	1.523E-10	12.86%
	92234	5.906E-06	4.63%	5.043E-06	5.70%	4.940E-06	5.83%	5.031E-06	5.73%	5.214E-06	5.54%
	92235	2.554E-04	1.31%	1.741E-04	1.92%	1.654E-04	2.01%	1.654E-04	2.01%	1.654E-04	2.01%
	92236	1.502E-04	1.49%	1.582E-04	1.47%	1.589E-04	1.47%	1.589E-04	1.47%	1.589E-04	1.47%
	92238	2.102E-02	0.03%	2.082E-02	0.04%	2.080E-02	0.04%	2.080E-02	0.04%	2.080E-02	0.04%
	93237	1.679E-05	3.23%	2.030E-05	3.13%	2.071E-05	3.12%	2.101E-05	3.11%	2.103E-05	3.11%
	94238	7.152E-06	3.46%	1.061E-05	3.21%	1.107E-05	3.18%	1.161E-05	3.04%	1.157E-05	3.00%
	94239	1.577E-04	1.85%	1.574E-04	2.05%	1.573E-04	2.07%	1.593E-04	2.05%	1.593E-04	2.05%
	94240	6.593E-05	2.10%	7.533E-05	2.23%	7.635E-05	2.25%	7.649E-05	2.25%	7.675E-05	2.24%
	94241	4.164E-05	1.61%	4.667E-05	1.79%	4.713E-05	1.82%	4.491E-05	1.82%	4.078E-05	1.82%
	94242	1.621E-05	3.15%	2.332E-05	3.55%	2.427E-05	3.59%	2.427E-05	3.59%	2.427E-05	3.59%
	95241	1.659E-06	2.71%	1.970E-06	3.22%	2.001E-06	3.29%	4.217E-06	2.34%	8.330E-06	2.02%
	95243	4.263E-06	7.05%	7.004E-06	6.46%	7.389E-06	6.39%	7.394E-06	6.39%	7.393E-06	6.39%
	96244	1.727E-06	7.86%	3.588E-06	7.35%	3.890E-06	7.29%	3.751E-06	7.29%	3.474E-06	7.29%
	96246	1.401E-08	14.45%	4.522E-08	13.86%	5.159E-08	13.78%	5.158E-08	13.78%	5.157E-08	13.78%

		5 years cooling time		10 years cooling time		50 years cooling time		100 years cooling time		300 years cooling time	
		mean	rel. std. dev.	mean	rel. std. dev.	mean	rel. std. dev.	mean	rel. std. dev.	mean	rel. std. dev.
	k-eff	0.9011	0.81%	0.8777	0.85%	0.8078	1.01%	0.7999	1.03%	0.8104	1.01%
main contributions		94239-0452	0.478	94239-0452	0.456	94239-0452	0.397	94239-0452	0.392	94239-0452	0.406
		94239-0102	0.177	94239-0102	0.187	94239-0102	0.218	94239-0102	0.223	94239-0102	0.221
		92238-0002	0.174	94239-0018	0.181	94239-0018	0.207	94239-0018	0.211	94239-0018	0.209
		94239-0018	0.173	92238-0002	0.178	92238-0002	0.183	92238-0002	0.183	92238-0002	0.180
		92238-0004	0.156	92238-0004	0.158	92238-0004	0.161	92238-0004	0.161	92238-0004	0.158
	flux	1.999E+01	0.91%	2.000E+01	0.91%	2.007E+01	0.92%	2.009E+01	0.92%	2.013E+01	0.91%
reaction rates	u235-cap	1.908E-02	1.19%	1.916E-02	1.19%	1.955E-02	1.19%	1.971E-02	1.18%	2.008E-02	1.17%
	u235-fis	7.891E-02	1.08%	7.930E-02	1.08%	8.145E-02	1.08%	8.232E-02	1.08%	8.428E-02	1.05%
	u238-cap	2.540E-01	0.50%	2.544E-01	0.50%	2.561E-01	0.50%	2.566E-01	0.50%	2.576E-01	0.49%
	u238-fis	2.958E-02	4.38%	2.960E-02	4.40%	2.966E-02	4.46%	2.967E-02	4.48%	2.967E-02	4.48%
	pu239-cap	9.428E-02	1.02%	9.463E-02	1.03%	9.630E-02	1.06%	9.697E-02	1.06%	9.841E-02	1.07%
	pu239-fis	1.713E-01	0.78%	1.719E-01	0.78%	1.753E-01	0.80%	1.767E-01	0.79%	1.793E-01	0.77%
	pu240-cap	8.117E-02	0.95%	8.151E-02	0.96%	8.283E-02	0.98%	8.308E-02	0.99%	8.272E-02	1.00%
	pu240-fis	6.137E-04	3.56%	6.181E-04	3.55%	6.330E-04	3.54%	6.338E-04	3.53%	6.215E-04	3.53%
	pu241-cap	1.546E-02	1.29%	1.222E-02	1.30%	1.822E-03	1.32%	1.648E-04	1.33%	2.703E-07	12.64%
	pu241-fis	4.328E-02	1.08%	3.420E-02	1.09%	5.100E-03	1.13%	4.613E-04	1.14%	7.563E-07	12.56%
cross sections	abs-1	1.289E-02	0.99%	1.288E-02	0.99%	1.289E-02	1.00%	1.289E-02	1.00%	1.286E-02	1.00%
	abs-2	1.161E-01	1.29%	1.156E-01	1.29%	1.129E-01	1.31%	1.119E-01	1.32%	1.101E-01	1.32%
	fis-1	1.974E-03	1.49%	1.936E-03	1.54%	1.816E-03	1.70%	1.797E-03	1.73%	1.795E-03	1.73%
	fis-2	5.627E-02	1.59%	5.458E-02	1.61%	4.934E-02	1.71%	4.856E-02	1.72%	4.856E-02	1.73%
	nufis-1	5.389E-03	1.56%	5.274E-03	1.61%	4.908E-03	1.78%	4.848E-03	1.81%	4.834E-03	1.81%
	nufis-2	1.556E-01	1.75%	1.506E-01	1.78%	1.351E-01	1.90%	1.328E-01	1.93%	1.327E-01	1.93%
	diff-1	1.435E+00	2.30%	1.436E+00	2.30%	1.437E+00	2.31%	1.437E+00	2.31%	1.437E+00	2.31%
	diff-2	3.592E-01	0.19%	3.592E-01	0.19%	3.587E-01	0.19%	3.587E-01	0.19%	3.592E-01	0.19%



inventories	42095	7.623E-05	0.41%	7.623E-05	0.41%	7.623E-05	0.41%	7.623E-05	0.41%	7.623E-05	0.41%
	43099	7.556E-05	0.46%	7.555E-05	0.46%	7.555E-05	0.46%	7.553E-05	0.46%	7.548E-05	0.46%
	44101	7.615E-05	0.08%	7.615E-05	0.08%	7.615E-05	0.08%	7.615E-05	0.08%	7.615E-05	0.08%
	44106	3.965E-07	0.32%	1.316E-08	0.32%	1.937E-20	0.32%	0.000E+00		0.000E+00	
	45103	3.977E-05	1.70%	3.977E-05	1.70%	3.977E-05	1.70%	3.977E-05	1.70%	3.977E-05	1.70%
	47109	7.171E-06	1.43%	7.171E-06	1.43%	7.171E-06	1.43%	7.171E-06	1.43%	7.171E-06	1.43%
	55133	7.786E-05	1.16%	7.786E-05	1.16%	7.786E-05	1.16%	7.786E-05	1.16%	7.786E-05	1.16%
	55134	2.216E-06	4.06%	4.131E-07	4.06%	6.030E-13	4.06%	3.431E-20	3.99%	0.000E+00	
	55135	3.511E-05	2.68%	3.511E-05	2.68%	3.511E-05	2.68%	3.510E-05	2.68%	3.510E-05	2.68%
	55137	7.833E-05	0.03%	6.979E-05	0.03%	2.771E-05	0.03%	8.736E-06	0.03%	8.625E-08	0.03%
	57139	8.758E-05	0.04%	8.758E-05	0.04%	8.758E-05	0.04%	8.758E-05	0.04%	8.758E-05	0.04%
	58140	9.026E-05	0.06%	9.026E-05	0.06%	9.026E-05	0.06%	9.026E-05	0.06%	9.026E-05	0.06%
	58142	7.884E-05	0.06%	7.884E-05	0.06%	7.884E-05	0.06%	7.884E-05	0.06%	7.884E-05	0.06%
	58144	1.695E-07	0.11%	1.999E-09	0.11%	0.000E+00	0.00%	0.000E+00		0.000E+00	
	60142	2.265E-06	0.85%	2.265E-06	0.85%	2.265E-06	0.85%	2.265E-06	0.85%	2.265E-06	0.85%
	60143	4.911E-05	2.05%	4.911E-05	2.05%	4.911E-05	2.05%	4.911E-05	2.05%	4.911E-05	2.05%
	60145	4.261E-05	2.11%	4.261E-05	2.11%	4.261E-05	2.11%	4.261E-05	2.11%	4.261E-05	2.11%
	60146	5.176E-05	1.73%	5.176E-05	1.73%	5.176E-05	1.73%	5.176E-05	1.73%	5.176E-05	1.73%
	60148	2.510E-05	0.39%	2.510E-05	0.39%	2.510E-05	0.39%	2.510E-05	0.39%	2.510E-05	0.39%
	60150	1.213E-05	0.16%	1.213E-05	0.16%	1.213E-05	0.16%	1.213E-05	0.16%	1.213E-05	0.16%
	62147	1.157E-05	2.20%	1.324E-05	2.19%	1.385E-05	2.19%	1.385E-05	2.19%	1.385E-05	2.19%
	62148	1.248E-05	1.55%	1.248E-05	1.55%	1.248E-05	1.55%	1.248E-05	1.55%	1.248E-05	1.55%
	62149	1.509E-07	1.76%	1.509E-07	1.76%	1.509E-07	1.76%	1.509E-07	1.76%	1.509E-07	1.76%
	62150	1.949E-05	1.40%	1.949E-05	1.40%	1.949E-05	1.40%	1.949E-05	1.40%	1.949E-05	1.40%
	62151	6.221E-07	3.42%	5.986E-07	3.42%	4.400E-07	3.42%	2.994E-07	3.42%	6.424E-08	3.42%
	62152	5.367E-06	2.89%	5.367E-06	2.89%	5.368E-06	2.89%	5.368E-06	2.89%	5.368E-06	2.89%
	62154	2.475E-06	0.18%	2.476E-06	0.18%	2.476E-06	0.18%	2.476E-06	0.18%	2.476E-06	0.18%
	63151	2.518E-08	3.44%	4.867E-08	3.43%	2.073E-07	3.42%	3.478E-07	3.42%	5.830E-07	3.42%
	63153	7.566E-06	3.32%	7.566E-06	3.32%	7.566E-06	3.32%	7.566E-06	3.32%	7.566E-06	3.32%
	63154	1.328E-06	8.26%	8.876E-07	8.26%	3.529E-08	8.26%	6.267E-10	8.26%	6.230E-17	8.26%
	63155	2.767E-07	5.43%	1.320E-07	5.43%	3.544E-10	5.43%	2.165E-13	5.43%	0.000E+00	
	64154	9.389E-07	7.98%	1.379E-06	8.07%	2.232E-06	8.14%	2.266E-06	8.14%	2.267E-06	8.14%
	64155	3.094E-07	5.40%	4.541E-07	5.41%	5.857E-07	5.41%	5.861E-07	5.41%	5.861E-07	5.41%

	64156	8.307E-06	3.15%	8.307E-06	3.15%	8.307E-06	3.15%	8.307E-06	3.15%	8.307E-06	3.15%
	64158	1.628E-06	4.65%	1.628E-06	4.65%	1.628E-06	4.65%	1.628E-06	4.65%	1.628E-06	4.65%
	64160	7.388E-08	0.48%	7.388E-08	0.48%	7.388E-08	0.48%	7.388E-08	0.48%	7.388E-08	0.48%
	92233	1.666E-10	11.81%	2.016E-10	9.89%	4.904E-10	4.82%	8.985E-10	3.47%	3.043E-09	2.36%
	92234	5.396E-06	5.36%	5.837E-06	4.98%	8.804E-06	3.58%	1.141E-05	3.11%	1.569E-05	2.82%
	92235	1.654E-04	2.01%	1.654E-04	2.01%	1.656E-04	2.01%	1.658E-04	2.01%	1.668E-04	2.01%
	92236	1.589E-04	1.46%	1.589E-04	1.46%	1.593E-04	1.46%	1.597E-04	1.46%	1.613E-04	1.44%
	92238	2.080E-02	0.04%	2.080E-02	0.04%	2.080E-02	0.04%	2.080E-02	0.04%	2.080E-02	0.04%
	93237	2.107E-05	3.10%	2.119E-05	3.08%	2.344E-05	2.80%	2.691E-05	2.48%	3.875E-05	1.92%
	94238	1.139E-05	3.00%	1.095E-05	3.00%	7.992E-06	3.00%	5.390E-06	2.99%	1.117E-06	2.98%
	94239	1.593E-04	2.05%	1.593E-04	2.05%	1.591E-04	2.05%	1.589E-04	2.05%	1.582E-04	2.05%
	94240	7.699E-05	2.24%	7.750E-05	2.23%	7.926E-05	2.22%	7.933E-05	2.22%	7.775E-05	2.22%
	94241	3.703E-05	1.82%	2.908E-05	1.82%	4.218E-06	1.82%	3.779E-07	1.82%	6.081E-10	12.59%
	94242	2.427E-05	3.59%	2.427E-05	3.59%	2.427E-05	3.59%	2.427E-05	3.59%	2.427E-05	3.59%
	95241	1.205E-05	1.94%	1.986E-05	1.89%	4.248E-05	1.85%	4.285E-05	1.84%	3.140E-05	1.84%
	95243	7.392E-06	6.39%	7.388E-06	6.39%	7.360E-06	6.39%	7.326E-06	6.39%	7.190E-06	6.39%
	96244	3.218E-06	7.29%	2.658E-06	7.29%	5.751E-07	7.29%	8.487E-08	7.29%	4.025E-11	7.29%
	96246	5.155E-08	13.78%	5.151E-08	13.78%	5.121E-08	13.78%	5.084E-08	13.78%	4.937E-08	13.78%

# UNCERTAINTY ANALYSES WITH NUCLEAR COVARIANCE DATA IN REACTOR CORE CALCULATIONS

W. ZWERMANN\*, B. KRZYKACZ-HAUSMANN, L. GALLNER, A. PAUTZ, M. MATTES<sup>1</sup>

Gesellschaft fuer Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH, Forschungsinstitute, 85748 Garching, Germany

<sup>1</sup>Universitaet Stuttgart, IKE, Pfaffenwaldring 31, 70550 Stuttgart, Germany

\*Corresponding author. E-mail : Winfried.Zwermann@grs.de

*Received*

*Accepted for Publication*

---

To investigate the influence of nuclear data uncertainties on the core power distributions systematically, the uncertainty and sensitivity software package SUSA developed at GRS was extended for the use with nuclear covariance data. Varied nuclear data are generated randomly corresponding to the uncertainty information from the covariance matrices. After performing a large number of calculations with these data, the results are statistically evaluated; this can be done not only with integral, but also differential output quantities like the assembly power distribution. The method is applied to multi-group Monte Carlo calculations for the PWR MOX/ $\text{UO}_2$  benchmark core. The uncertainty in the resulting k-eff turns out to be of the same order as for pin cell calculations. Unexpectedly large uncertainties result for the normalized radial power distribution. The relative  $1\sigma$ -uncertainties in the central and peripheral assembly powers are of the order of 4 %. The dominating contribution is the uncertainty in the number of neutrons per fission of  $^{239}\text{Pu}$ ; therefore, the effect is particularly pronounced in a  $\text{UO}_2/\text{MOX}$  core with a high amount of  $^{239}\text{Pu}$  in the isotopic composition.

---

KEYWORDS: Uncertainty Analysis, Nuclear Covariance Data, Sampling Based Method, Full Scale Reactor Calculations

## 1. INTRODUCTION

Evaluated nuclear data are continuously improved. During the last years, the European library was updated from JEF-2.2 to JEFF-3.1 [1] and further to JEFF-3.1.1, the American library from ENDF/B-VI to ENDF/B VII [2], and the Japanese library from JENDL-3.2 to JENDL-3.3/AC-2008 [3], with the main aim to take into account the newest evaluations of differential experiments, and to achieve better agreement between calculated and measured results for integral systems. Along with this, growing attention is paid to uncertainty and sensitivity studies concerning the nuclear data evaluations, accompanied by improvements in the covariance data files describing the uncertainties of nuclear cross section data, and the calculation methods using these covariance data.

For the validation of the nuclear data libraries, a large number of integral experiments are used. Descriptions of such experiments are found in the "International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments" [4]. Most of these validation calculations refer to multiplication factors, although other measured quantities like reaction rates and reactivity coefficients are increasingly considered; such experiments are described in the "International Handbook of Evaluated Reactor Physics Benchmark

Experiments" [5]. Most systems considered are compact assemblies, mainly at room temperature. Likewise, uncertainty and sensitivity investigations based on covariance data, as performed, e.g. with the TSUNAMI code package [6], primarily consider the multiplication factors of critical assemblies. Such compact critical systems at low temperatures are not necessarily representative for power reactors at operating conditions.

In a recent investigation [7], differences in the fission rate distributions of problems representative for large reactor cores arising from the use of different evaluated nuclear data libraries were determined. It turned out that these differences may be substantial. As an example, in Fig. 1 the fission rate distribution in a row of fuel assemblies for the uncontrolled hot zero power state of the "PWR MOX/ $\text{UO}_2$  Core Transient Benchmark" [8], calculated with MCNP-5 [9] using JEF-2.2, JEFF-3.1, and JEFF-3.1.1 data, is displayed along with a sketch of the core layout. The relative differences between the JEF-2.2 and JEFF-3.1 results in the core centre, where the assembly power is highest, reaches unexpectedly high values of more than 4 % in this case, due to the heterogeneous distribution of MOX and  $\text{UO}_2$  fuel assemblies over the core. The JEFF-3.1.1 results lie between JEF-2.2 and JEFF-3.1.

To systematically investigate the influence of nuclear

data uncertainties on the results of calculations for large reactors, uncertainty analyses are being performed for this reactor core. For this, the XSUSA (“Cross Section Uncertainty and Sensitivity Analysis”) sequence is used, which has been recently developed at GRS as an extension of the SUSA package for the use with nuclear covariance data. A similar study is performed for a critical assembly to point out the differences.

U 4.2%	U 4.2%	U 4.2%	U 4.5%	U 4.5%	M 4.3%	U 4.5%	U 4.2%
35.0	0.15	22.5	0.15	37.5	17.5	0.15	32.5
U 4.2%	U 4.2%	U 4.5%	M 4.0%	U 4.2%	U 4.2%	M 4.0%	U 4.5%
0.15	17.5	32.5	22.5	0.15	32.5	0.15	17.5
U 4.2%	U 4.5%	U 4.2%	U 4.2%	U 4.2%	M 4.3%	U 4.5%	M 4.3%
22.5	32.5	22.5	0.15	22.5	17.5	0.15	35.0
U 4.5%	M 4.0%	U 4.2%	M 4.0%	U 4.2%	U 4.5%	M 4.3%	U 4.5%
0.15	22.5	0.15	37.5	0.15	20.0	0.15	20.0
U 4.5%	U 4.2%	U 4.2%	U 4.2%	U 4.2%	U 4.5%	U 4.2%	
37.5	0.15	22.5	0.15	37.5	0.15	17.5	
M 4.3%	U 4.2%	M 4.3%	U 4.5%	U 4.5%	M 4.3%	U 4.5%	
17.5	32.5	17.5	20.0	0.15	0.15	32.5	
U 4.5%	M 4.0%	U 4.5%	M 4.3%	U 4.2%	U 4.5%	U 4.5%	Assembly Type
0.15	0.15	0.15	0.15	17.5	32.5	Burnup (GWd/tHM)	
U 4.2%	U 4.5%	M 4.3%	U 4.5%				
32.5	17.5	35.0	20.0				

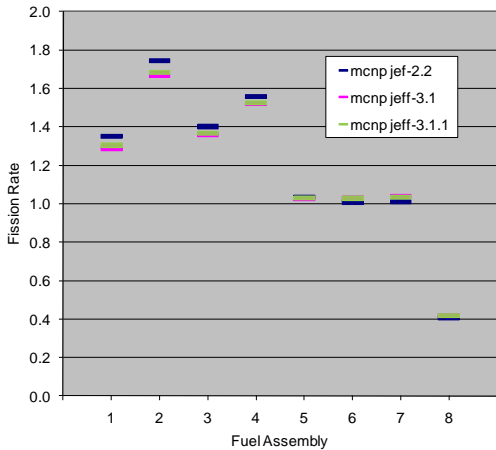


Fig. 1. Top: Core layout of the PWR MOX/ $\text{UO}_2$  Core Transient Benchmark. Bottom: Calculated fission rate distribution for the marked row of fuel assemblies from MCNP with JEF-2.2, JEFF-3.1, and JEFF-3.1 data.

## 2. THE XSUSA METHOD

Within the sampling based GRS method implemented in the code package SUSA (“Software for Uncertainty and Sensitivity Analysis”) [10], many calculations for the problem under consideration are performed with varied input data. The variations of the input data are generated randomly from the given probability distributions of the parameters including possible correlations between them. After performing all the calculations (typically 100 or

more), the output quantities of interest are statistically analyzed, and their uncertainty ranges and sensitivities to the input parameters are determined.

So far, the GRS method has been mainly applied to problems with a limited number of parameters and only few correlations between them. However, in the case of its application to the nuclear data uncertainties, various reactions of various nuclides have to be considered. Using the nuclear covariance data from the SCALE-6 code package [11], 44 uncertain parameters for each nuclide and reaction corresponding to the 44 energy group structure are analyzed, resulting in a huge overall number of uncertain parameters. Moreover, a large amount of correlations between the energy group data of each nuclide/reaction combination have to be taken into account, and also cross correlations between data of different reactions and nuclides. Therefore, so far only the uncertain data of a limited number of nuclides and reactions are considered, based on an a priori judgement of their respective importances. For the calculations presented in this paper, uncertainties of the following nuclear data are used: the fission and capture cross sections, neutrons per fission, and fission spectra of  $^{235}\text{U}$  and  $^{239}\text{Pu}$ , the capture and inelastic scattering cross sections of  $^{238}\text{U}$ , the capture cross section  $^{240}\text{Pu}$ , and the capture and elastic scattering cross sections of  $^1\text{H}$ , and the  $(n,\alpha)$  cross section of  $^{10}\text{B}$ , when present.

The nuclear data covariance matrices only contain the relative variances and covariances of the nuclear data, i.e. the second moments of the distributions; the types of the distributions are not known and for the moment assumed to be Gaussian.

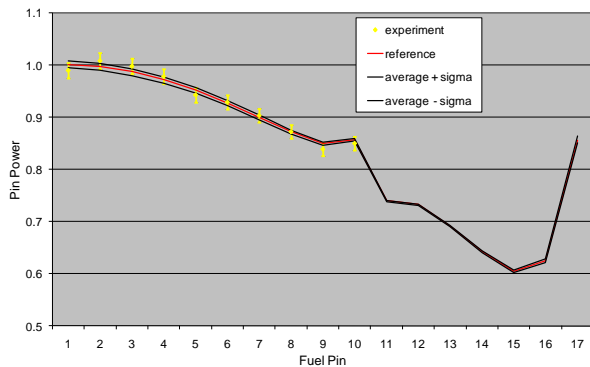
To use the GRS method with nuclear covariance data, the ENDF/B-VII based 238-group library of SCALE-6 is collapsed to the 44-group structure of the covariance data using a flux spectrum typical for the system under consideration. With this collapsed master library, all necessary spectral calculations are performed, using the Bondarenko method implemented in the BONAMI module for the unresolved resonance regions, and performing 1-D transport calculations by the CENTRM module with continuous energy data in the resolved resonance region. The resulting multi-group data libraries are modified according to the uncertainty information in the covariance matrices for each nuclide/reaction combination considered, taking into account, if present, the covariances between different energy groups, different reactions, and different nuclides. After doing so, it has to be assured that the cross section set is entirely consistent, i.e. that sum rules are fulfilled and that 2-d cross sections (e.g. scattering matrices) are compatible with their 1-d counterparts. With the modified cross sections created in this way, the core calculations are performed and the results are statistically evaluated.

An effect which is not taken into account so far within the XSUSA method is the influence of the nuclear data

uncertainties on the spectral calculations. This is due to the fact that the SCALE-6 covariance matrices contain uncertainty information in multi-group representation also in the resonance region. Therefore, for the time being the spectral calculations are performed with undisturbed data, and the same uncertainties are assumed for the resonance-treated data as for the infinite dilution data.

### 3. CRITICAL ASSEMBLY CALCULATIONS

Before presenting uncertainty analyses results for power reactor cores, the XSUSA method is applied to the VENUS 7/1 critical assembly. The VENUS-7 cores are cold compact square lattices containing approximately 900 fuel pins each. The assemblies consist of an inner MOX and an outer UO<sub>2</sub> radial zone, and are moderated and reflected by light water. In addition to multiplication factors and reactivity differences in substitution experiments, in the cylindrical-shaped configuration 7/1, radial pin powers for selected pins were measured. The complete description of the technological parameters and the benchmark specification are found in Ref [12].



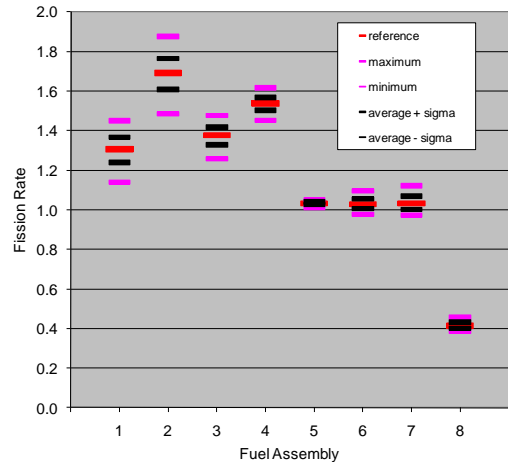
**Fig. 2.** Power distribution for a row of fuel pins of the VENUS 7/1 assembly from XSUSA/KENO; reference distribution (red line) and 1σ band (black lines) along with experimental values (yellow).

While the multiplication factors considerably depend on the nuclear data base used, it was found that the radial pin power distributions obtained with different nuclear data are very similar to each other [13]. This is consistent with the findings of the XSUSA method with the Monte Carlo code KENO-Va in multi-group mode with 44-group data collapsed from the ENDF/B-VII master library. In Fig. 2, the calculated and measured VENUS 7/1 radial pin power distributions are compared. For the uncertainty analysis, the results from 100 calculations are evaluated. One recognizes that the nuclear data uncertainties only lead to a very narrow uncertainty band in the resulting pin powers, with 1σ-values not exceeding 0.75 %. This is substantially smaller than the

experimental uncertainties and in the same order of magnitude as the differences in the results of various modern transport codes applied with different nuclear data [14].

### 4. CORE CALCULATIONS

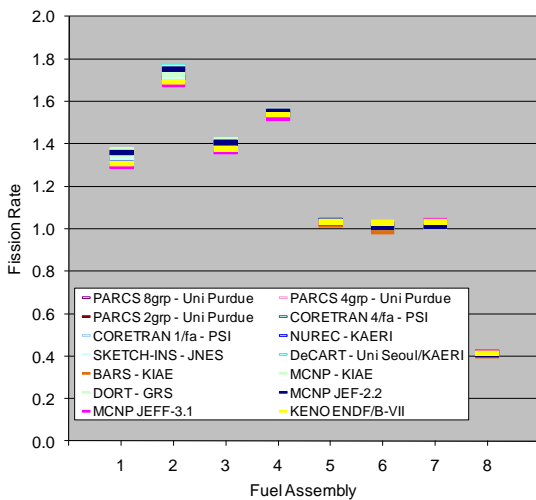
The XSUSA method is finally applied to full scale 2-D calculations for the hot zero power state of the core displayed in Fig. 1. Again, KENO-Va in multi-group mode is used with 44-group ENDF/B-VII based data. Nuclide densities are taken in accordance with the benchmark specification. For the number of neutron histories, a large value of 10<sup>9</sup> is chosen to assure that differences in the fission rate distributions obtained with varied data do not originate from insufficiently converged solutions. In total, 96 KENO calculations are run. These calculations are performed on a cluster with twelve nodes, each equipped with two Intel Xeon E5540 quad-core processors running at 2.53 GHz. Each of the KENO calculations takes approx. 12 hrs of CPU time, amounting to slightly more than half a day of wall-clock time for the whole batch of runs using all processors simultaneously. Therefore, sampling based uncertainty analyses come into reach of routine application even for CPU time intensive problems.



**Fig. 3.** Fission rate distribution for a row of fuel assemblies of the PWR MOX/UO<sub>2</sub> core from XSUSA/KENO; reference distribution (red bars), 1σ band (black bars), and extreme values.

The calculated multiplication factors turn out to lie in a reasonable band with a relative standard deviation of 0.5 %, while their average is in very good agreement with the MCNP/JEFF-3.1 result. Looking at the radial fission rate distribution, however, one observes a much larger influence of the nuclear data variations on the result. This is shown in Fig. 3, where the resulting fission rate distribution and its band widths for a row of fuel assemblies are displayed

together with the results of a reference calculation with unvaried nuclear data. The resulting relative standard deviation of more than 4 % in the core centre is unexpectedly high, and the maximum and minimum values of the fission rates obtained for the central fuel assemblies deviate by more than +/- 10 % from the reference values. Additional calculations with varying single nuclides and reactions separately have shown that the differences in the fission rate distributions are mainly due to the uncertainties in the nuclear data of  $^{239}\text{Pu}$ , specifically nu-bar, and, to a less degree,  $^{235}\text{U}$ .



**Fig. 4.** Fission rate distribution for a fuel assembly row of the PWR MOX/VO<sub>2</sub> core from the benchmark contributions.

In Fig. 4, the results of all benchmark contributions [8], obtained with nodal diffusion, as well as pin-by-pin deterministic and Monte Carlo codes, are displayed along with our MCNP and KENO reference solutions. Comparing with Fig. 3, it is seen that for this case, the differences in the results caused by the different methodologies applied, are completely covered by the uncertainties caused by the nuclear data covariances.

## 5. SUMMARY AND CONCLUSIONS

Motivated by differences observed in the radial fission rate distributions obtained with different nuclear data evaluations in full core benchmarks, the sampling based XSUSA cross section uncertainty and sensitivity analysis sequence was applied to a VO<sub>2</sub>/MOX core using ENDF/B-VII based data and nuclear covariance data from the SCALE-6 system, taking into account important materials/reactions. The resulting uncertainties in the calculated radial fission rate distributions are substantial, originating mainly from uncertainties in the nuclear data of

$^{239}\text{Pu}$  and, to a less degree,  $^{235}\text{U}$ . In conclusion, it is desirable to routinely accompany reactor calculations by uncertainty and sensitivity analyses in the future, along with aiming for a continuous convergence of different nuclear data evaluations, and a reduction of their uncertainties.

## ACKNOWLEDGMENTS

This work is supported by the German Federal Ministry of Economics and Technology.

## REFERENCES

- [1] A. Koning, R. Forrest, M. Kellett, R. Mills, H. Henriksson, and Y. Rugama, "The JEFF-3.1 Nuclear Data Library", JEFF Report 21, NEA No. 6190.
- [2] 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).
- [3] O. Iwamoto, T. Nakagawa, N. Otuka, S. Chiba, K. Okumura, and G. Chiba, "JENDL Actinoid File 2008 and Plan of Covariance Evaluation", *Nuclear Data Sheets 109*, pp. 2885–2889 (2008).
- [4] "International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments", September 2009 Edition, available on DVD-ROM, NEA/NSC/DOC(95)03.
- [5] "International Handbook of Evaluated Reactor Physics Benchmark Experiments", March 2009 Edition, available on DVD-ROM, NEA/NSC/DOC(2006)1.
- [6] B. T. Rearden, "TSUNAMI Sensitivity and Uncertainty Analysis Capabilities in SCALE 5.1," *Trans. Am. Nucl. Soc.* 97, pp. 604-605 (2007).
- [7] S. Langenbuch, A. Pautz, W. Zwermann, W. Bernnat, and M. Mattes, "Influence of Nuclear Data Evaluations on Full Scale Reactor Core Calculations", *Proc. Int. Conf. Advances in Mathematics, Computational Methods, and Reactor Physics (M&C 2009)*, Saratoga Springs, NY, USA, May 3–7, 2009.
- [8] T. Kozłowski, and T. J. Downar, "The PWR MOX/VO<sub>2</sub> Core Transient Benchmark, Final Report", NEA/NSC/DOC(2006) 20.
- [9] X-5 Monte Carlo Team, "MCNP – A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5", LA-UR-03-1987 (2003).
- [10] B. Krzykacz, E. Hofer, and M. Kloos, "A Software System for Probabilistic Uncertainty and Sensitivity Analysis of Results from Computer Models", *Proc. Int. Conf. Probabilistic Safety Assessment and Management (PSAM-II)*, San Diego, Ca., USA, March 20–25, 1994.
- [11] "SCALE: A Modular Code System for Performing Standardized Computer Analyses for Licensing Evaluation, Version 6", ORNL/TM-2005/39 (2009).
- [12] N. Messaoudi, P. Baeten, and B.-C. Na, "Benchmark on the VENUS Plutonium Recycling Experiments – Configuration 7", NEA/NSC/DOC(2005)11.
- [13] W. Zwermann, S. Langenbuch, B.-C. Na, E. Sartori, and U.-K. Wehmann, "Summary of Results for the VENUS-7 Benchmark", *Proc. Int. Conf. Physics of Reactors (PHYSOR-2008)*, Interlaken, Switzerland, Sep. 14–19, 2008.
- [14] W. Zwermann, A. Pautz, and W. Timm, "The VENUS-7 Benchmarks: Results from State-of-the-Art Transport Codes and Nuclear Data", *Proc. German Annual Meeting on Nuclear Technology*, Berlin, Germany, May 4–6, 2010.

# BURNUP CALCULATIONS FOR HTR KERNELS AND LATTICES OF PEBBLES AND COMPACTS

**A. Meier\***, J. Lapins, J. Bader, W. Bernnat, G. Lohnert  
Institute for Nuclear Technology and Energy Systems  
Universität Stuttgart, 70569 Stuttgart, Germany

**W. Zwermann**  
Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH  
85748 Garching, Germany

\*corresponding author, astrid.meier@ike.uni-stuttgart.de

## 1. INTRODUCTION

There are several different calculation methods for the high temperature reactor (HTR) neutronics and nuclide inventory determination. They are applied mainly to two different kinds of fuel types for HTRs – pebbles and cylindrical rods/compacts (Figure 1). In both types, the heavy metal ( $\text{UO}_2$ ) is a small kernel (radius about 500  $\mu\text{m}$ ) surrounded with four coatings. These coated particles are mixed with graphite and formed to pebbles or rods, surrounded by pure graphite. Therefore there is a double heterogeneity which must be taken into account in spectral calculations. The first heterogeneity is the kernel inside the graphite matrix; the second is the matrix with its graphite surrounding.

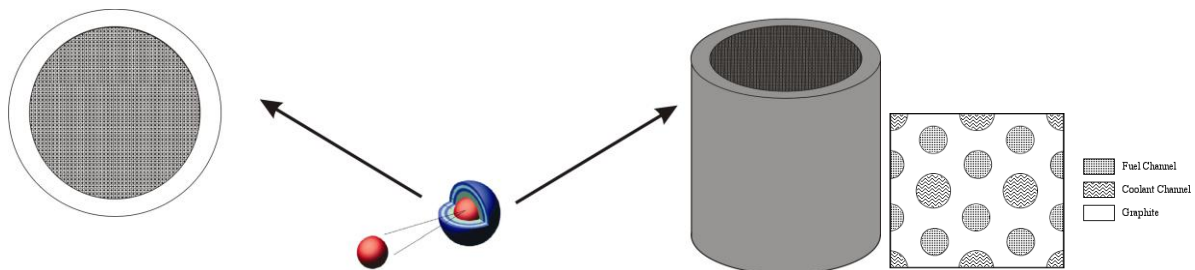


Figure 1: Model for pebble and compact.

To validate calculation methods for such double heterogeneous fuel, a benchmark was proposed by the Oak Ridge National Laboratory [1] which is currently being executed within the OECD/NEA Working Party on Scientific Issues of Reactor Systems (WPRS). The first phase of the benchmark consists of three parts:

1. Depletion of the kernel distributed in a graphite matrix in a infinite lattice
2. Depletion of the pebble (infinite lattice)
3. Depletion of the compact (infinite lattice)

The parameters are given with 293.6 K and 8.2 wt% enrichment. Also all geometry data are given. The depletion calculation is to be performed with a power of 62 MW/t heavy metal (HM) and up to a target burn-up of 120 GWd/t HM.

## 2. COMPUTER CODES

For the benchmark calculations different program systems were applied:

- MICROX 2 coupled with ORIGEN-2.2



- SCALE 5
- MCNP5 coupled with module ABBRAND (a burnup code)
- MONTEBURNS

### **2.1. MICROX2 + ORIGEN-2.2**

MICROX2 [2] is a deterministic spectral multigroup-code with 92 fast groups, 101 thermal groups and over 20.000 energy points in the resonance region. It solves the neutron slowing down and the thermalisation equation. A two-zone geometry can be modeled – the first region represents the fuel grains with coating and binder, and the other one represents the moderator. The database for the microscopic cross-section is JEFF3.1 [3]. The depletion calculations were performed by the well validated ORIGEN-2.2 [4] code. The two codes are coupled via a special interface. ORIGEN-2.2 calculates the number densities for every burnup time step. These densities are used after each step in MICROX2 to calculate actual microscopic cross sections for the actinides and fission products. They are condensed for the next depletion calculation and put in the ORIGEN-2.2 weighted cross section library. These steps are continued until the target burnup is reached.

### **2.2. SCALE/TRITON**

For an infinite grain lattice the slowing down equation is solved for the homogenised fuel/coating/graphite region and a great number of energy points taking self-shielding into account. This is done with the SCALE5 module CENTRM [5] (Continuous Energy Transport Module) also accounting for the first heterogeneity of the fuel. Reflective boundary condition was applied. The transport equation was solved using the 3-dimensional Monte Carlo code KENO-Va [6].

For the pebble and the hexagonal problem basically the same calculation procedure was used, but the geometry was extended applying a non-fuel graphite region (outer shell, moderator) in order to take the second heterogeneity into account.

Depletion calculations were performed by using the ORIGEN-ARP [7] module (Automatic Rapid Processing) which is a derivative of the ORIGEN-S Code. As basis for generation of problem dependent cross-sections ENDF/B-7 was used.

### **2.3. MCNP5 + ABBRAND**

Another method is the MCNP5 Monte Carlo Code [8] coupled with a burnup code ABBRAND. MCNP5 is well suited to solve the neutron transport equation for a fuel pebble with randomly distributed coated particles in the matrix zone. In the program every single particle with its coating is modelled and put in a regular lattice. The database is in a continuous energy range and is also JEFF 3.1.

MCNP5 can be coupled to the burnup program via an interface similar to that one of MICROX2 + ORIGEN2.2. For solving the depletion equations the module ABBRAND [10] is used which is well proven for applications in power reactor design calculations.

### **2.4. MONTEBURNS**

Similarly to the MCNP5/ABBRAND sequence, the code MONTEBURNS [9] combines MCNP5 with the inventory code ORIGEN-2.2. Besides these, it mainly consists of a FORTRAN program which is responsible for the data transfer between the codes, and a PERL script that controls the sequence of the codes. As an extension to its standard version, the JEFF-3.1 based nuclear data library provided by the NEA data bank, which is available on a 100 K grid in the temperature range of interest, was connected with MONTEBURNS and used for the calculations performed in this work.



### 3. RESULTS

First of all, in Figure 2 the multiplication factors for the different geometries are compared. The results generally show a good agreement, with differences of approximately 2 % over the whole burn-up range. Only the SCALE results for the kernel calculations introduced larger discrepancies, showing also a somewhat different behavior of the  $k_{\text{eff}}$  vs. burn-up curve than the other results, with low values for the fresh fuel and high values for the burn-up. For the kernel, the MICROX curve lies systematically higher by about 2 % than the Monte Carlo results. This can be explained because MICROX2 is specialized to systems with a double heterogeneity, which is not the case for fuel kernels in an infinite lattice.

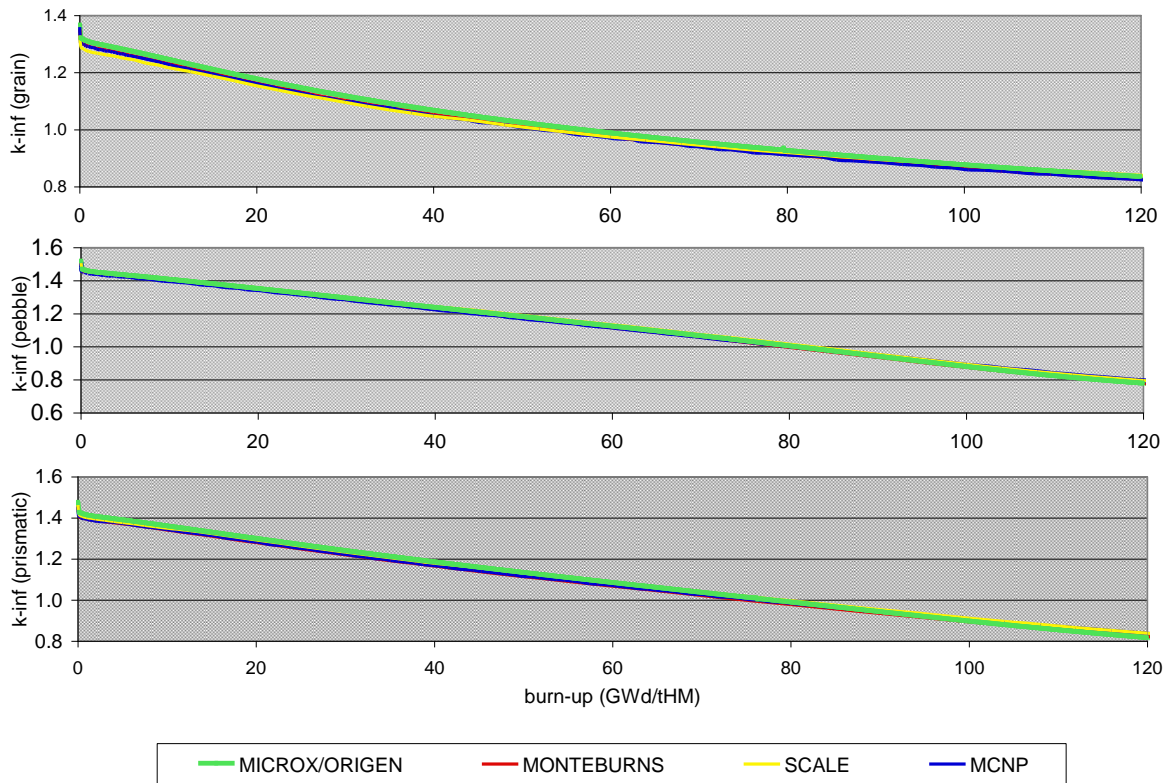


Figure 2: Multiplication factor for the different cases.

Figure 3 shows the MICROX/ORIGEN spectrum results for the kernel and pebble cases. For the fresh condition, the spectrum is the same for all calculation methods. At high burn-ups, there are some differences in the thermal range also depending on the amount of special nuclides like the strongly absorbing actinides Pu-240 and Pu-242.

It is interesting that for the pebble and the prismatic fuel the thermal flux spectrum practically does not change with burn-up for a long time, but at burn-ups greater than 40GWd/t HM the spectrum is getting remarkably softer; at 120 GWd/t HM, it increases by a factor of two at the thermal peak. In contrast, the thermal spectrum of the kernel lattice is getting continuously harder with burn-up. Already the spectrum in the fresh fuel is much harder in the case for kernel fuel as in the case for pebble/prismatic fuel. Due to the harder spectrum also the amount of plutonium gets much higher. This again results in a harder spectrum because of the higher amount of strong absorbing actinides. On the other hand, for pebble/prismatic case, the amount of absorbing nuclides is not that high and the spectrum is getting softer due to the reduction of U-235.

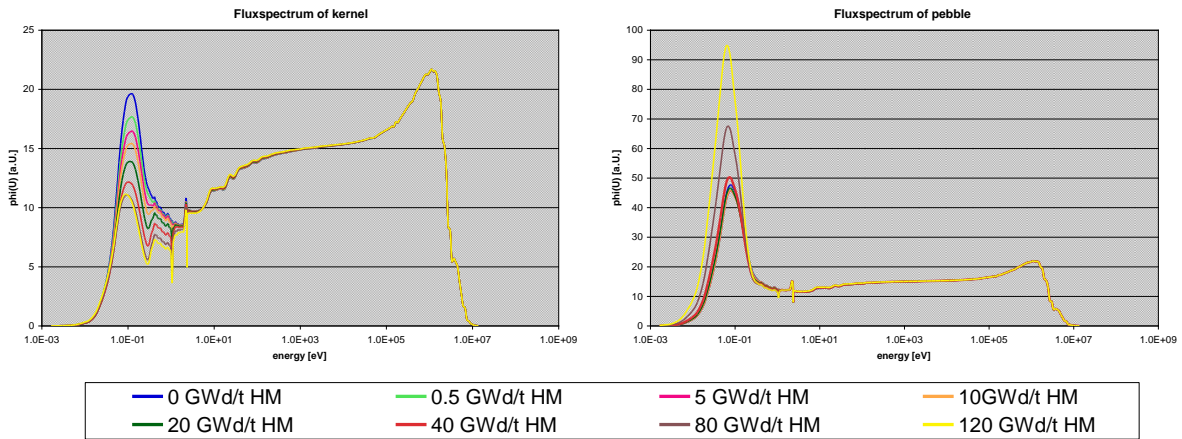


Figure 3: Flux in the kernel and in the pebble at different burn-ups.

Also some nuclides densities (U-235, U-238, Pu-239, Pu-240, Pu-241, Pu-242, Am-241, Cm-244, Cm-245 and Kr-85, Sr-90, Ag-110m, Cs-137, Xe-135, Sm-149, Sm-151) and some spectral indices were compared. Usually all nuclides lie in an error range of  $\pm 10\%$ . Most of the differences appear at 80 and 120 GWd/t HM. For Cm-244, Cm-245, Ag-110m, Sm-149 and Sm-151, however, the differences are highest at lower burn-ups, with values of up to 110%. As examples, in Table 1 the calculated actinide inventories in the pebble are given for intermediate and high burn-up values, along with their relative spread, i.e. (max-min)/average. For the Curium isotopes, large differences are observed, which are highest for the lower burn-up values.

Table 1: Actinide inventories in grams per ton of initial heavy metal for burn-up values of 40 GWd/t HM (top) and 120 GWd/t HM (bottom) for the pebble geometry.

	<i>MICROX/ORIGEN</i>	<i>SCALE</i>	<i>MCNP/ABBRAND</i>	<i>MONTEBURNS</i>	<i>spread</i>
U-235	4.03E+04	3.95E+04	4.07E+04	4.01E+04	3.02%
U-238	9.01E+05	9.00E+05	9.01E+05	9.00E+05	0.13%
Pu-239	7.86E+03	8.08E+03	8.09E+03	8.10E+03	2.96%
Pu-240	1.74E+03	1.80E+03	1.76E+03	1.78E+03	3.47%
Pu-241	8.50E+02	8.89E+02	8.64E+02	8.68E+02	4.43%
Pu-242	1.33E+02	1.41E+02	1.32E+02	1.36E+02	6.65%
Am-241	1.64E+01	1.84E+01	1.72E+01	1.73E+01	11.25%
Cm-244	9.84E-01	7.26E-01	5.46E-01	5.61E-01	62.31%
Cm-245	1.54E-02	1.34E-02	8.63E-03	8.86E-03	58.44%
U-235	1.52E+03	1.44E+03	1.89E+03	1.62E+03	27.76%
U-238	8.48E+05	8.45E+05	8.46E+05	8.46E+05	0.30%
Pu-239	6.58E+03	6.69E+03	7.16E+03	6.93E+03	8.54%
Pu-240	3.39E+03	3.43E+03	3.51E+03	3.48E+03	3.53%
Pu-241	1.94E+03	1.96E+03	2.13E+03	2.03E+03	9.45%
Pu-242	3.11E+03	3.02E+03	3.09E+03	3.13E+03	3.60%
Am-241	4.62E+01	5.81E+01	5.92E+01	5.43E+01	23.75%
Cm-244	4.64E+02	3.55E+02	3.09E+02	3.07E+02	43.96%
Cm-245	1.14E+01	1.14E+01	8.44E+00	7.80E+00	36.98%

## 4. CONCLUSION

IKE and GRS participate in a depletion calculation benchmark for simplified HTR arrangements, consisting of fuel grains in an infinite lattice as well as pebbles and prisms. The results obtained with various coupled transport/depletion codes show in all a satisfactory agreement. Results of other benchmark participants are not yet published.

The results of calculations based on Monte Carlo codes with continuous energy data, MCNP/ABBAND and MONTEBURNS, agree very well; they can serve as a reference because no special measures have to be taken to treat the double heterogeneity. The codes using multi-group data, MICROX/ORIGEN and TRITON, yield, with some exceptions, very similar results, demonstrating the quality of their double heterogeneity spectral treatment. The remaining discrepancies, in particular concerning the nuclide inventories of minor actinides and some fission products, should be further investigated.

## ACKNOWLEDGMENTS

This work is supported by EnBW Kernkraft GmbH and the German Federal Ministry of Economics and Technology.

## REFERENCES

- 1) M.D. DeHart, A.P. Ulses, Benchmark Specification for HTGR Fuel Element Depletion, NEA/NSC/DOC(2009)13.
- 2) D. Mathews, An Improved Version of the Microx-2 Code, Paul Scherer Institut, PSI Bericht Nr. 97-11, November 1997
- 3) A. Koning et al., JEFF Report 21: The JEFF-3.1 Nuclear Data Library, OECD 2006,
- 4) A.G. Croff, RSICC Computer Code Collection - Origen 2.2, Oak Ridge National Laboratory, CCC-371, June 2002
- 5) M.L. Williams, M. Asgari, D.F. Hollenbach: CENTRM: A one-dimensional neutron transport code for computing pointwise energy spectra, Oak Ridge National Laboratory, January 2009
- 6) L.M. Petrie, N.F. Landers, D.F. Hollenbach, B.T. Rearden, M.E. Dunn, S. Goluoglu: KENO-Va: An Improved Monte Carlo Criticality Program, Oak Ridge National Laboratory, January 2009
- 7) I.C. Gauld, S.M. Bowman, J.E. Horwedel: ORIGEN-ARP: Automatic Rapid Processing for Spent Fuel Depletion, Decay, and Source Term Analysis, Oak Ridge National Laboratory, January 2009
- 8) X-5 Monte Carlo Team, MCNP - A general Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version5, LA-UR-03-1987, April 2003
- 9) D.I. Posten, H.R. Trellue, "User's Manual Version 2.0 for Monteburns, Version 1.0", LA-UR-99-4999 (September 1999)
- 10) H. Wohland, R. Rühle, Abbrand, ein Modul für Abbrandrechnungen in RSYST-1, Berichtnr. 4-10, Oktober 1972

# COMPARISON OF ISOTOPIC COMPOSITIONS IN THE FRAME OF THE NEA DEPLETION CALCULATION BENCHMARK DEVOTED TO MOX FUEL CYCLES

N. Martínez Francès<sup>1</sup>, D. Roßbach<sup>1</sup>,  
Areva, Areva NP, Erlangen, Germany  
R. Kilger<sup>2</sup>, W. Zwermann<sup>2</sup>

Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) GmbH,  
Garching

## Introduction

An accurate knowledge of irradiated fuel composition is of utmost importance regarding properties such as criticality, activity or residual heat generation. These magnitudes are in turn essential to fuel transport and storage and depend on many parameters, from which of course fuel type is essential.

In the frame of activities devoted to fuel cycle issues, the NEA WPRS<sup>3</sup> proposed a Depletion Calculation Benchmark to compare results and trends with different codes and libraries. While Phase 1 dealt with UOX fuel, Phase 2 is devoted with MOX fuel /1/.

The present paper aims at comparing isotopic compositions for MOX fuel obtained by GRS and AREVA with different codes and libraries.

## Benchmark Description

Basis for this benchmark is a French program carried out on MOX fuel assemblies of Saint-Laurent B1, a 900 MWe pressurized water reactor characterized by a 30% MOX loading. The problem specification has been simplified and involves four bundles, as shown below. The MOX fuel assembly has three zones with different Plutonium content (2.9 w/o, 4.4 w/o and 5.5 w/o Pu<sub>tot</sub>, <sup>241</sup>Am inclusive) to flatten its power distribution. Uranium surroundings are modeled via identical UO<sub>2</sub> assemblies, whose composition corresponds to an initial enrichment of 3.25 w/o <sup>235</sup>U and a 24 GWd/tHM burn-up.

The two selected pins from the MOX assembly belong to the low and high Pu zones. While the L14 pin is located at the border of the zone with high Plutonium content and close to a guide tube, Q17 is located at the corner of the assembly and as such is strongly influenced by the Uranium surroundings (see Figure 1).

All material compositions are given, including fuel, cladding and coolant. Irradiation histories for the two pins are summarized in Table 1.

## Calculations

As far as bundle calculations are concerned, four codes were used. GRS used its KENOREST depletion calculation system version 2004 /2/ which applies a JEF 2.2 based library, and the TRITON code from the SCALE 5.0) package /3/; the latter applied the SCALE 44 group ENDF/B-V library. AREVA obtained results with its own

---

<sup>1</sup> detlev.rossbach@areva.com, nicolas.martinez@areva.com

<sup>2</sup> Winfried.Zwermann@grs.de, Robert.Kilger@grs.de

<sup>3</sup> Working Party on Scientific Issues of Reactor Systems

APOLLO2-A code /4/ and Studsvik's CASMO-4 /5/. Several neutronic libraries were used with these two codes: APOLLO2-A used, along with its standard JEFF3.1.1 library, JEF2.2 and ENDF/B-7 (test library generated by CEA); CASMO-4 calculations were performed with the standard L70 library and Studsvik's own JEF2.2 adaptation.

	Q17 MOX pin		L14 MOX pin	
	Time (days)	End Burn-up (GWd/t)	Time (days)	End Burn-up (GWd/t)
Cycle 1	285 <sup>4</sup>	12	285	12
Downtime	60		60	
Cycle 2	300	25	300	25
Downtime	40		40	
Cycle 3	280	38	280	42

Table 1: Pin power history

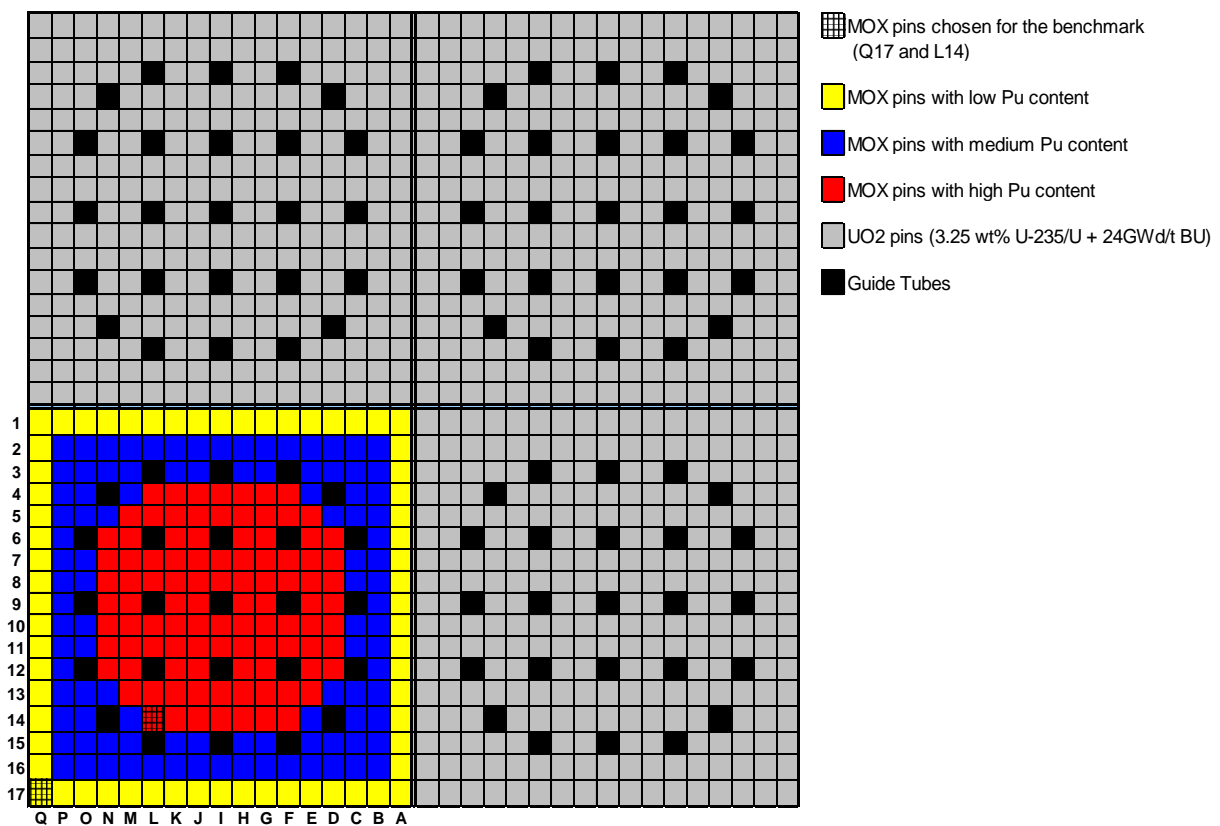


Figure 1: Mixed core geometry

## Results

Since this is a blind benchmark, it is not yet possible to compare results to any valid reference. Only comparison between codes/libraries and trends can be observed. For this purpose, a mean value of isotopic concentrations obtained for the aforementioned seven solutions has been determined and taken as reference. Individual values of the four codes (with their standard library, when applicable) have been compared with respect to this mean value, irrespective of the technical merit of this "reference".

<sup>4</sup> Full power days (applies to all cycles)

Isotope	Q17				Mean value (g/tHM)	Std. Dev
	APOLLO2-A	CASMO-4	KENOREST	TRITON		
U232	-8.99%		-6.66%	-19.34%	9.739E-05	17.50%
U233	14.07%		0.61%	-14.87%	2.389E-04	7.44%
U234	2.51%	1.66%	-1.55%	-2.42%	1.489E+01	1.78%
U235	0.77%	-1.85%	-2.48%	-2.40%	6.001E+02	1.93%
U236	1.93%	1.08%	-5.17%	2.53%	2.988E+02	2.23%
U238	-0.01%	0.02%	-0.01%	-0.04%	9.391E+05	0.03%
Pu236	2.14%		-8.11%	-34.00%	5.153E-04	19.24%
Pu238	4.23%	-1.53%	3.00%	-4.58%	3.918E+02	2.69%
Pu239	-0.41%	-2.30%	1.86%	0.37%	7.107E+03	1.26%
Pu240	3.01%	-3.11%	-1.48%	0.83%	5.919E+03	2.24%
Pu241	0.64%	-1.55%	1.48%	-2.36%	3.509E+03	1.44%
Pu242	1.60%	-0.04%	-0.09%	3.62%	2.773E+03	1.49%
Pu243			-1.37%	11.92%	7.349E-01	7.95%
Pu244			34.25%	-34.25%	2.569E-01	34.25%
Np236			-57.98%	-78.81%	3.336E-04	4.45%
Np237	5.33%	7.49%	-5.79%	0.81%	1.349E+02	4.32%
Am241	-11.81%	-2.27%	3.86%	3.35%	1.572E+02	4.14%
Am242m	7.30%	-17.14%	-8.16%	23.51%	3.094E+00	12.40%
Am243	1.06%	1.10%	-2.31%	11.91%	7.601E+02	5.60%
Cm242	-0.86%	3.43%	3.18%	-6.13%	1.106E+02	2.19%
Cm243	-4.90%	-6.07%	9.47%	4.49%	4.976E+00	4.45%
Cm244	1.81%	-4.81%	0.19%	6.85%	4.360E+02	4.32%
Cm245	6.26%	-9.75%	-6.91%	-16.20%	3.303E+01	11.52%
Cm246	3.69%	-9.31%	-6.38%	-14.40%	4.887E+00	10.55%
Cm247	10.61%		-6.84%	-8.46%	8.508E-02	11.22%
Cm248	11.75%		-21.70%	-6.85%	6.748E-03	16.08%
Nd142	0.23%		-0.16%	3.26%	2.018E+01	1.39%
Nd143	-2.14%	4.78%	0.33%	-1.04%	7.554E+02	1.46%
Nd144	0.89%		-0.23%	1.00%	8.203E+02	0.63%
Nd145	0.47%	-2.59%	0.11%	0.60%	6.471E+02	1.05%
Nd146	-0.43%		0.72%	0.16%	7.156E+02	0.41%
Nd148	-0.01%		-0.61%	-1.27%	4.255E+02	0.90%
Nd150	-0.78%		0.50%	0.50%	2.495E+02	0.46%
Cs133	0.32%	-1.82%	-0.60%	3.11%	1.215E+03	1.36%
Cs134	-0.44%	-3.77%	7.81%	-9.09%	1.681E+02	4.05%
Cs135	-1.45%	-2.84%	2.90%	1.71%	4.226E+02	1.74%
Cs137	-1.18%	3.40%	-0.39%	1.26%	1.398E+03	1.43%
Sm149	-10.06%	4.16%	2.46%	2.53%	2.833E+00	4.18%
Sm151	-12.31%	5.10%	8.78%	15.29%	1.721E+01	10.00%
Sm152	-7.59%	-5.21%	11.90%	11.19%	1.552E+02	8.24%
Eu153	-2.70%	1.63%	0.94%	-1.72%	1.845E+02	2.40%
Eu154	-15.77%	13.84%	-24.09%	-19.50%	5.163E+01	21.41%
Eu155	-16.22%	120.31%	-3.27%	-41.30%	1.588E+01	34.53%

**Table 2: Results comparison for the Q17 pin**

In this paper, we will focus on the results obtained at discharge time (without decay) for five isotopic groups: Uranium isotopes, Plutonium isotopes, other heavy metals, Neodymium isotopes and some fission products. The results are given in Tables 2 and 3 and visualized in Figures 2 – 7. It must be noted that only KENOREST could give results for all the isotopes present in the benchmark, while the other codes have various degrees of limitation in this aspect depending on their burn-up models and the neutronic libraries used.

Isotope	L14				Mean value (g/tHM)	Std. Dev
	APOLLO2-A	CASMO-4	KENOREST	TRITON		
U232	-14.97%		-11.32%	0.81%	1.037E-04	13.15%
U233	15.12%		-1.20%	-14.33%	3.509E-04	7.77%
U234	1.82%	2.99%	-2.26%	-2.65%	2.050E+01	1.69%
U235	0.06%	1.91%	-5.73%	-2.16%	1.005E+03	2.25%
U236	3.04%	2.19%	-5.74%	-2.03%	2.616E+02	2.56%
U238	-0.51%	1.26%	-0.55%	-0.48%	9.205E+05	0.73%
Pu236	-1.94%		-10.10%	-17.05%	5.743E-04	15.78%
Pu238	2.70%	1.09%	2.90%	-4.89%	7.478E+02	1.91%
Pu239	-1.48%	0.59%	1.71%	-3.04%	1.452E+04	1.32%
Pu240	2.29%	0.18%	-2.83%	-1.38%	1.240E+04	1.52%
Pu241	-1.84%	1.34%	4.00%	-3.49%	6.749E+03	2.05%
Pu242	0.22%	2.77%	-0.15%	4.69%	3.451E+03	2.19%
Pu243			-0.88%	10.71%	8.476E-01	7.14%
Pu244			40.60%	-40.60%	2.478E-01	40.60%
Np236			-43.49%	-72.70%	3.654E-04	4.61%
Np237	5.91%	8.19%	-6.46%	0.36%	1.363E+02	4.72%
Am241	-10.32%	1.15%	2.36%	2.02%	4.664E+02	3.35%
Am242m	7.90%	-13.11%	-4.98%	17.69%	1.077E+01	9.86%
Am243	1.04%	0.75%	-1.66%	11.23%	9.071E+02	5.15%
Cm242	0.45%	4.74%	3.12%	-6.92%	2.162E+02	2.86%
Cm243	-3.04%	-4.44%	10.28%	5.84%	8.542E+00	4.61%
Cm244	2.50%	-9.34%	4.57%	1.88%	4.597E+02	4.72%
Cm245	4.11%	-10.88%	1.76%	-21.64%	4.064E+01	9.91%
Cm246	1.88%	-11.94%	0.23%	-17.09%	3.517E+00	8.89%
Cm247	6.95%		0.29%	-11.47%	5.594E-02	8.19%
Cm248	8.70%		-18.10%	-1.79%	3.256E-03	13.86%
Nd142	0.14%		0.60%	3.45%	1.577E+01	1.68%
Nd143	-2.08%	6.20%	-0.12%	-1.34%	9.490E+02	1.84%
Nd144	0.75%		-0.55%	1.22%	7.574E+02	0.66%
Nd145	0.36%	-1.88%	-0.34%	0.14%	7.346E+02	0.98%
Nd146	-0.42%		0.73%	-0.11%	7.685E+02	0.40%
Nd148	-0.16%		-0.81%	-1.02%	4.684E+02	1.07%
Nd150	-0.76%		0.33%	0.26%	2.769E+02	0.50%
Cs133	0.28%	-1.34%	-0.76%	2.62%	1.394E+03	1.10%
Cs134	-0.69%	-3.80%	8.80%	-10.64%	1.677E+02	4.75%
Cs135	-2.68%	1.66%	3.94%	-0.43%	7.322E+02	1.70%
Cs137	-1.25%	3.86%	-0.52%	0.89%	1.562E+03	1.36%
Sm149	-12.19%	9.33%	5.58%	-1.89%	5.543E+00	6.06%
Sm151	-13.03%	9.27%	11.04%	9.27%	3.054E+01	10.84%
Sm152	-5.20%	-5.43%	8.62%	9.92%	1.844E+02	6.69%
Eu153	-2.16%	5.14%	0.19%	-4.25%	2.029E+02	2.88%
Eu154	-10.25%	16.59%	-15.54%	-16.06%	5.900E+01	14.87%
Eu155	-20.54%	124.83%	-8.03%	-43.89%	1.843E+01	39.64%

**Table 3: Results comparison for the L14 pin**

## Results Discussion

Generally speaking, results are very satisfactory and all codes seem to share similar strengths and weaknesses: most isotopes present comparable, small deviations, especially Plutonium and Uranium ones.

A closer look into categories allows us to draw some more conclusions.

First of all, results for neodymium are excellent, slightly better for the Q17 pin, with a somewhat limited applicability of CASMO-4, whose L70 standard library only contains two of the isotopes required. It is only fair to say that Studsvik's L70 library

was mainly generated for good performance in view of actinide isotopes; it has thus significant limitations regard fission product isotopes.

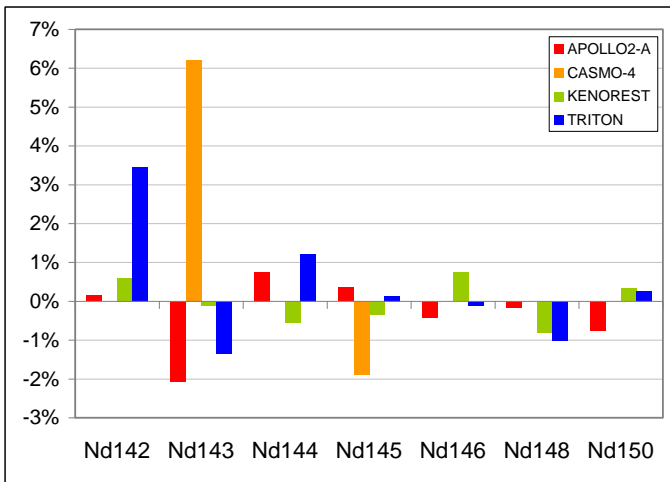


Figure 2: Neodymium isotopes for the L14 pin

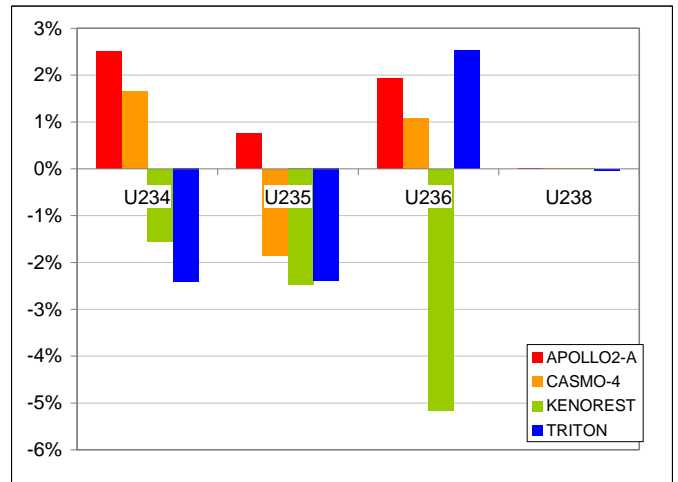


Figure 3: Relevant U isotopes (Q17)

Although differences between codes for the Q17 pin could be expected to be larger - given its position at the edge of the MOX assembly- the opposite is actually true. In most cases, deviations have turned out to be smaller than the ones from the inner L14 pin. Worthy exceptions are Plutonium isotopes, whose deviations are smaller for L14. This is probably to be attributed to the higher initial Plutonium content of the fuel.

Deviations from Uranium and Plutonium are overall comparable and good, with some exceptions ( $^{236}\text{Pu}$ ,  $^{244}\text{Pu}$ ,  $^{232}\text{U}$  and  $^{233}\text{U}$ , who have a very small concentration).

It can also be seen that TRITON tends to underestimate  $\text{Pu}_{\text{tot}}$  in comparison with other solutions. Figure 4 shows that this comparative underestimation affects all isotopes but  $^{242}\text{Pu}$ . Figure 5, however, shows similar Plutonium vectors. APOLLO2-A and TRITON would seem to slightly underestimate  $^{239}\text{Pu}$  and  $^{241}\text{Pu}$ , leading to a “negative” bias in  $\text{Pu}_{\text{fis}}$  content relative to the chosen reference. KENOREST shows the opposite behaviour.

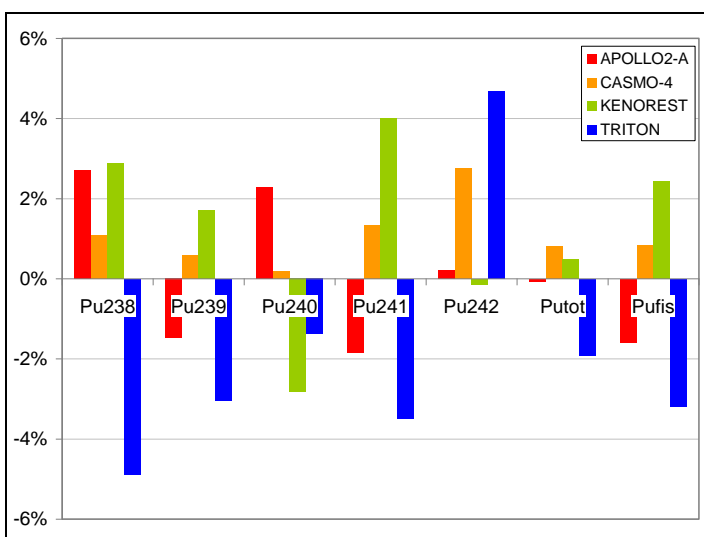


Figure 4: Relevant Pu isotopes (L14)

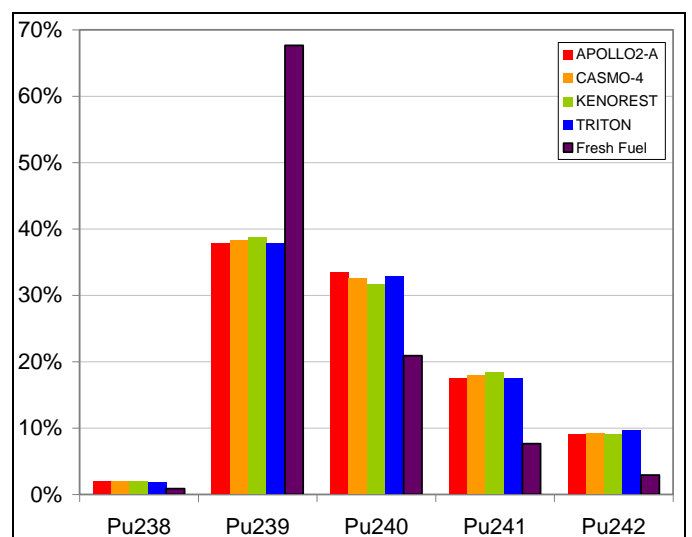


Figure 5: Plutonium vectors (L14)



Other heavy metals bear much larger differences in the results. They might be discussed on a case-by-case basis.  $^{242}\text{Cm}$  and  $^{243}\text{Cm}$  show quite a good agreement between codes, whereas  $^{236}\text{Np}$  or  $^{248}\text{Cm}$ , for instance, present large differences. In most of these isotopes, in particular Curium ones, APOLLO2-A calculates a higher yield than the other codes.

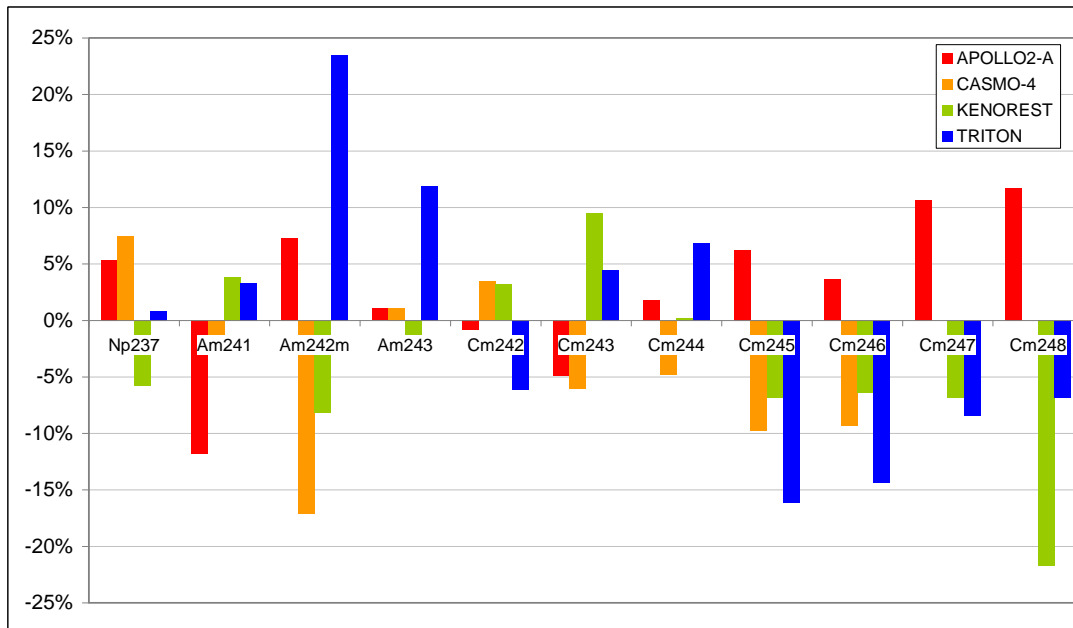


Figure 6: Some minor actinides (Q17)

Also fission products could be discussed individually and show, generally, larger deviations. However, it can be said that Cesium isotopes show an agreement comparable to that of Uranium or Plutonium; this would also be the case of  $^{153}\text{Eu}$ , while other Europium isotopes have an outlier value ( $^{154}\text{Eu}$ ) or present larger differences ( $^{155}\text{Eu}$ ), as do Samarium isotopes.

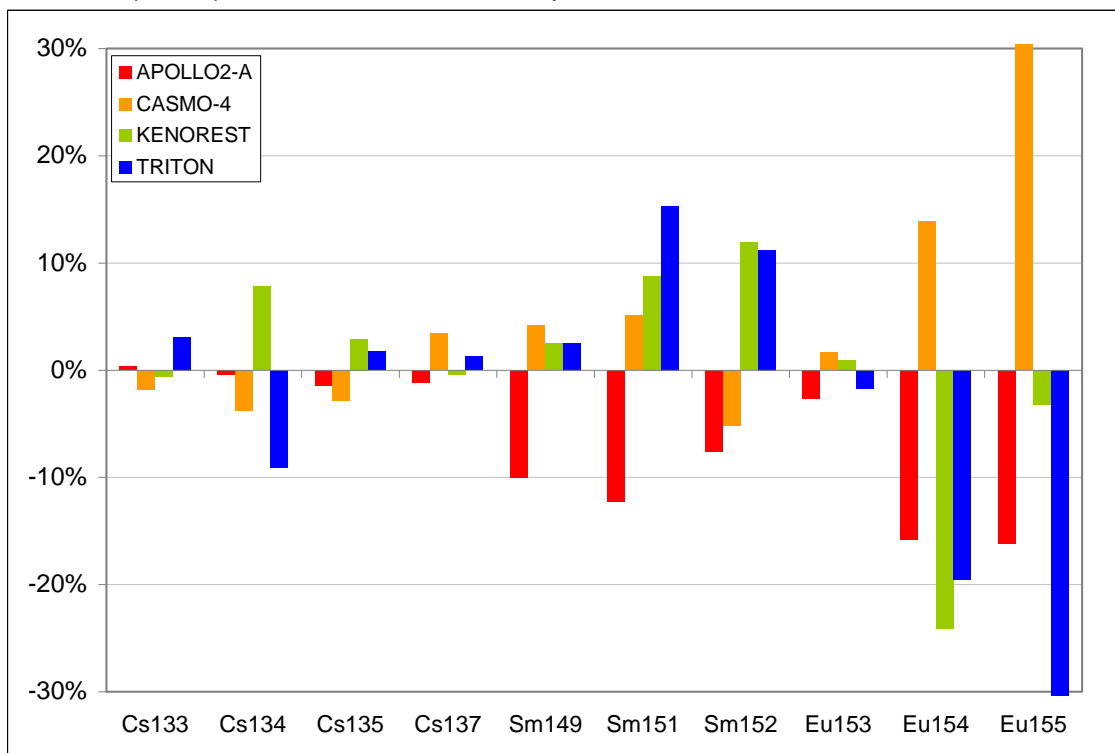


Figure 7: Some relevant fission products (Q17)

## **Conclusions**

The number of different codes and libraries used allows a high degree of confidence in the results and trends obtained. Indeed, while APOLLO2-A, TRITON and CASMO-4 are multi-group deterministic codes, KENOEST obtains the neutron flux with Monte Carlo methods. These different approaches produce results that are markedly similar for most relevant isotopes: major actinides and burn-up indicators. Other isotopes, especially fission products, show at times larger deviations, as do some minor actinides as well. This will probably make it possible, with further insight, to improve depletion chains and code performance overall, especially when the results of the benchmark are published.

## **Acknowledgement**

The work of GRS is supported by the German Federal Ministry of Economics and Technology.

## **References**

- /1/ Specification for the Phase 2 of a Depletion Calculation Benchmark devoted to MOX Fuel Cycles (NEA/NSC/DOC(2007)9).
- /2/ U. Hesse, R. Kilger, S. Langenbuch, E. Moser, "The Status of the GRS Reactivity and Burn-up Code System KENOEST", Proc. Intl. Conf. Mathematics and Computation, Supercomputing, Reactor Physics and Nuclear and Biological Applications (SNA), Avignon, France, September 2005.
- /3/ M. D. DeHart: "TRITON: A two-dimensional depletion sequence for characterization of spent nuclear fuel", being part of: SCALE 5 – Modular code system for performing standardized computer analyses for licensing evaluation for workstations and personal computers, ORNL/TM-2005/39 CCC-725 SCALE 5, Oak Ridge, April 2005.
- /4/ J. Marten, F. Clément, V. Marotte, E. Martinolli, S. Misu, S. Thareau, L. Villate, "The new AREVA NP spectral code APOLLO2-A", Proc. Jahrestagung Kerntechnik (Meeting on Nuclear Technology), Karlsruhe, Germany, May 2007.
- /5/ M. Edenius, B. H. Forssen and C. Gragg, "The Physics Model of CASMO-4", Proc. Adv in Math., Comp. & Reactor Physics, Vol. 10-1, Pittsburgh (1991).

# INFLUENCE OF NUCLEAR DATA UNCERTAINTIES ON THE DEPLETION CHAIN

L. Gallner, B. Krzykacz-Hausmann, A. Pautz, M. Wagner, W. Zwermann

Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH,  
Forschungszentrum, Boltzmannstrasse 14, 85748 Garching, Germany

Lucia.Gallner@grs.de, Bernard.Krzykacz-Hausmann@grs.de, Andreas.Pautz@grs.de,  
Markus.Wagner@grs.de, Winfried.Zwermann@grs.de

## Introduction

Nuclear data are the basis of all neutron transport calculations. Thus, the quality of the nuclear data used is essential for obtaining reliable results from the nuclear calculation chain. The major evaluated nuclear data, as stored in the JEFF [1], ENDF/B [2], and JENDL [3] files, are continuously improved. Nevertheless, the precision of nuclear data is limited by the uncertainties of the underlying measurements and the theoretical parameters. These uncertainties are provided in the nuclear covariance data files along with the basic data libraries. There is an increasing effort to improve the amount and the quality of the covariance files accompanying the major data libraries. For now, a rather complete set of covariance data is provided in multi-group format with the SCALE-6 code system [4].

So far, most uncertainty and sensitivity investigations with nuclear covariance data, as performed, e.g., with the TSUNAMI code package [5], are based on first order perturbation theory, and primarily consider the multiplication factors and other integral quantities, like reactivity differences, of critical assemblies. With today's increasing computer power, another approach has become possible also for CPU time intensive problems, namely the random sampling of nuclear data according to the uncertainty information available in the covariance matrices. Such an approach was presented in [6] for criticality calculations with pin cells and a full reactor core application. This differs from the "Total Monte Carlo" approach [7], which also determines output uncertainties by random sampling, but directly starts from the uncertainties in the basis data before generating evaluated data files.

Due to its nature – calculations are repeatedly performed with varied input parameters and the multitude of resulting quantities is statistically evaluated – the random sampling method is likewise applicable to depletion calculations. For real reactor calculations, the nuclide inventories of the individual fuel assemblies are not given, but have to be pre-calculated in depletion calculations taking into account the histories of the fuel assemblies under consideration. Therefore, in order to estimate the total uncertainty in a reactor calculation originating from nuclear data uncertainties, these also have to be propagated through the depletion calculation chain. First results of such an uncertainty analysis are presented in this paper.

## The XSUSA Method

The XSUSA ("Cross Section Uncertainty and Sensitivity Analysis") method is based on the random sampling GRS method implemented in the code package SUSA ("Software for Uncertainty and Sensitivity Analysis") [8]. The probability distributions of the uncertain input parameters are used to generate random samples of these

input quantities. When applying this method with nuclear data uncertainties, this means that many nuclear data libraries are generated, where all uncertain quantities (inelastic and elastic scattering, n,2n and capture cross sections; in the case of fissionable nuclides in addition the fission cross section, the number of neutrons per fission, and the fission neutron spectrum) are varied at the same time for a large number of nuclides (in the following calculations, 65 nuclides in the fuel are taken into account). Thus, while the “traditional” GRS SUSANNE method is mainly applied to problems with a limited number of parameters and only few correlations between them, the application to depletion calculations with nuclear data uncertainties leads to a huge amount of uncertain parameters (65 nuclides, approx. 5-7 reactions per nuclide, 44 energy groups per reaction), with a large amount of correlations between the energy group data of each nuclide/reaction combination, and also cross correlations between data of different reactions and nuclides.

For the types of the distributions, which are not known, Gaussian shapes are assumed; various calculations with uniform distributions have shown, however, that the shape of the input probability distributions has only a minor influence on the uncertainty of the output quantities.

## The Calculation Model

The calculations are performed for a standard PWR fuel assembly with 18x18 pin cells, 24 of which contain control rod guide tubes. The fuel is UO<sub>2</sub> with a U-235 enrichment of 4.0 %. The state of the fuel assembly during depletion is hot full power (fuel temperature = 500 °C, moderator temperature = 310 °C, pressure = 158 bar, specific power = 170 W/cm). The boron concentration is 500 ppm; this value is assumed to be constant during the whole depletion time. The main quantities to be calculated are the multiplication factor as a function of burn-up up to 80 GWd/t HM, and the nuclide densities in the fuel for relevant actinides and fission products as a function of burn-up. This arrangement had already been used earlier for comparison calculations using different state-of-the-art spectral and depletion codes and nuclear data libraries [9].

The present investigations were performed with the TRITON depletion sequence from the SCALE-6 package, with the 2-D S<sub>N</sub> code NEWT as transport solver, which is not restricted to Cartesian geometry. TRITON was used with the newest nuclear data library available with SCALE-6, based on ENDF/B-VII data; the corresponding 238 energy group library was pre-collapsed to the 44 group structure of the covariance data. Comparison calculations have shown that this simplification has no significant influence on the results. The covariance matrices were also taken from the SCALE-6 package.

The depletion calculations were performed with 42 flux calculation steps until a final burn-up value of 80 GWd per metric ton of heavy metal. For the evaluation of uncertainties, a total of 300 samples were used.

## Uncertainty Analysis of Depletion Calculations

The calculated multiplication factors in dependence of the burn-up are displayed in Fig. 1, along with their +/-2  $\sigma$  band. For zero burn-up, the relative 1 $\sigma$  uncertainty is 0.51 %; this is absolutely consistent with other findings for light water moderated low-enrichment uranium pin cell lattices, e.g. in [6]. With increasing burn-up, the uncertainty increases. Another important observation consists in the fact that the average of the 300 results obtained from the different samples is practically identical

to the result obtained from unvaried nuclear data, confirming the applicability and correct implementation of the method for depletion calculations up to high burn-up values.

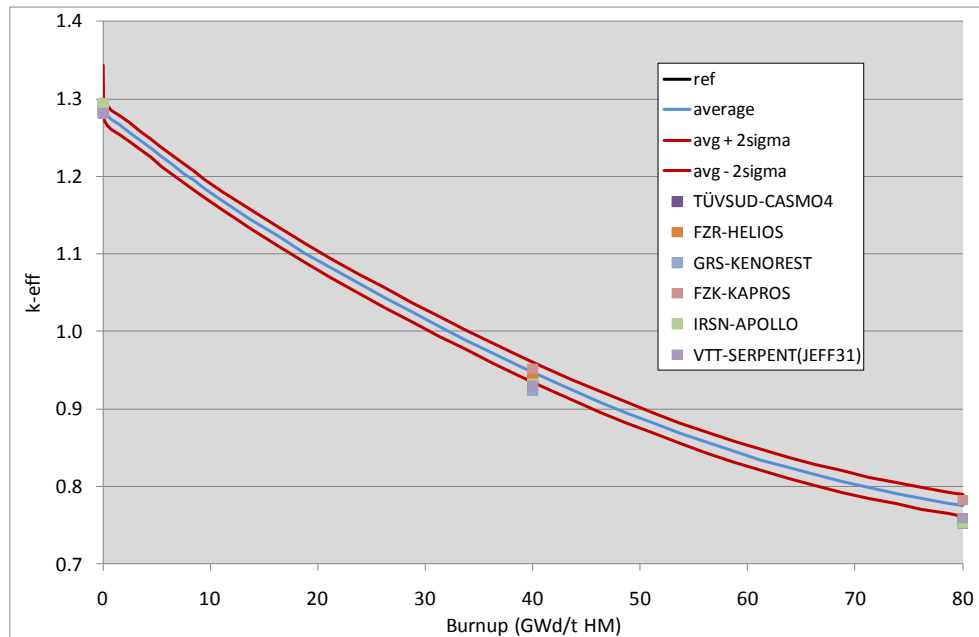


Fig. 1: Multiplication factor as a function of burn-up from XSUSA/TRITON with varied nuclear data; reference curve (black) and  $2\sigma$  band (red) around the average of 300 results (blue), along with results obtained from various codes and nuclear data.

Fig. 1 also shows results for three burn-up points obtained with various spectral codes and nuclear data that were presented in [9], and in addition APOLLO and SERPENT results which have become available in the meantime; it turns out that the nuclear data uncertainties cause a spread in the results which is comparable to the spread covered by the different codes and data.

Table 1: Uncertainty results for nuclide concentrations from XSUSA/TRITON at intermediate and high burn-up values; relative deviation of the average of 300 results from the reference value, denoted by "ave vs. ref", and relative  $2\sigma$  uncertainties.

	Actinides				Fission products				
	40 GWd/t HM		80 GWd/t HM		40 GWd/t HM		80 GWd/t HM		
	ave vs. ref	$2\sigma$	ave vs. ref	$2\sigma$	ave vs. ref	$2\sigma$	ave vs. ref	$2\sigma$	
u234	0.21%	7.51%	0.66%	16.40%	mo95	-0.02%	0.57%	-0.01%	1.34%
u235	0.10%	2.52%	0.51%	10.90%	tc99	-0.01%	0.62%	-0.04%	1.47%
u236	-0.10%	3.01%	-0.07%	3.11%	ru101	0.01%	0.13%	0.01%	0.21%
u238	-0.02%	0.06%	-0.02%	0.08%	rh103	-0.01%	2.47%	0.02%	4.50%
np237	-0.44%	6.50%	-0.38%	6.19%	ag109	0.01%	2.19%	0.02%	3.44%
pu238	-0.31%	7.46%	-0.26%	5.92%	xe135	-0.11%	6.82%	-0.07%	8.20%
pu239	0.21%	3.89%	0.20%	5.17%	cs133	0.07%	1.51%	0.17%	3.35%
pu240	0.04%	4.30%	0.05%	5.73%	cs134	-0.37%	8.68%	-0.32%	7.47%
pu241	0.16%	3.43%	0.26%	5.13%	cs137	-0.01%	0.05%	0.01%	0.07%
pu242	0.38%	5.39%	0.74%	9.43%	nd143	-0.02%	2.67%	0.06%	6.40%
am241	0.11%	5.40%	0.31%	10.27%	nd145	0.02%	2.68%	0.08%	6.00%
am242m	0.28%	4.78%	0.44%	9.30%	sm147	-0.03%	3.29%	-0.09%	6.38%
am243	-0.85%	15.55%	-0.75%	12.77%	sm149	0.07%	4.67%	0.13%	6.14%
cm242	0.16%	4.00%	0.22%	3.97%	sm150	-0.04%	2.00%	-0.08%	3.87%
cm243	-0.02%	22.30%	0.16%	22.92%	sm151	0.20%	6.17%	0.17%	7.02%
cm244	-0.77%	17.13%	-0.59%	14.92%	sm152	0.07%	4.66%	0.11%	6.50%
					eu153	0.03%	4.73%	0.14%	7.52%
					eu155	0.69%	11.02%	0.70%	9.57%
					gd155	0.70%	10.04%	0.58%	11.23%

In Table 1, uncertainty results for nuclide concentrations at intermediate and high burn-up values are given. Again, the averages of the 300 results obtained from the different samples are very close to the corresponding results obtained from unvaried nuclear data. The  $2\sigma$  bands have, depending on the nuclide considered, values between practically 0 (no uncertainty originating from nuclear data uncertainties) to approx. 20% for Cm-243. An example for the nuclide density of an important actinide, Pu-239, as a function of burn-up is given in Fig. 2, along with results obtained from various codes for intermediate and high burn-up. Again, the spread in the results is similar to the  $2\sigma$  uncertainty originating from the nuclear covariance data. There are, however, nuclides with different findings. Comparing Table 1 with the results from different codes presented in [9], one recognizes that for certain nuclides, the differences between the individual results can be significantly higher than the uncertainties due to nuclear data, in particular for Eu-155, where the solutions scattered from -40% to +100% around the average. Here, it has to be mentioned that uncertainties in additional nuclear data relevant for nuclide inventory calculations, namely decay data and fission yields, are not available with SCALE-6, and are not taken into account in the present investigation. There are indications that the uncertainties in fission yields may give an important contribution to the total uncertainty of fission products [10].

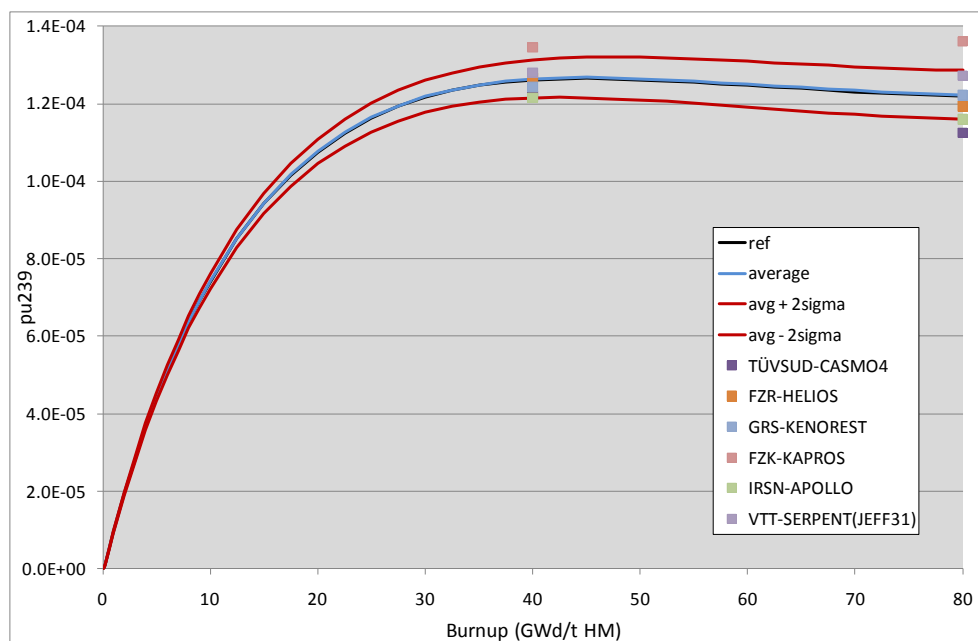


Fig. 2: Pu-239 nuclide density (atoms/barn/cm<sup>2</sup>) as a function of burn-up from XSUSA/TRITON with varied nuclear data; reference curve (black) and  $2\sigma$  band (red) around the average of 300 results (blue), along with results obtained from various codes and nuclear data.

## Summary and Conclusions

The sampling based XSUSA cross section uncertainty and sensitivity analysis sequence was applied to TRITON/NEWT depletion calculations for a standard PWR UO<sub>2</sub> fuel assembly, taking into account the available nuclear covariance data for all nuclides considered in the transport calculations. The resulting uncertainty in the multiplication factor for the fresh fuel assembly compares well to previous findings and behaves as expected; it moderately increases as a function of burn-up. The resulting  $2\sigma$  uncertainties in the inventories of the considered nuclides have values between zero and 20%; in some cases, they are small compared to differences

between results from different depletion codes. Uncertainties in decay data and fission yields are not taken into account so far; their influence will be investigated as soon as reliable data are available. Work has been started to propagate nuclear data uncertainties through the complete nuclear reactor calculation chain.

In conclusion, it is desirable and feasible to routinely accompany all parts of reactor calculations by uncertainty and sensitivity analyses in the future, along with aiming for evaluated nuclear data of highest quality, as well as reliable and complete nuclear data uncertainty information.

## Acknowledgements

This work is supported by the German Federal Ministry of Economics and Technology.

## References

1. 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).
2. 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).
3. 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).
4. "SCALE: A Modular Code System for Performing Standardized Computer Analyses for Licensing Evaluation, Version 6", ORNL/TM-2005/39 (2009).
5. B. T. Rearden, "TSUNAMI Sensitivity and Uncertainty Analysis Capabilities in SCALE 5.1," Trans. Am. Nucl. Soc. 97, pp. 604-605 (2007).
6. W. Zwermann, B. Krzykacz-Hausmann, L. Gallner, A. Pautz, "Uncertainty Analyses with Nuclear Covariance Data in Reactor Core Calculations", Jahrestagung Kerntechnik 2010.
7. A.J. Koning and D. Rochman, Annals of Nuclear Energy 35 (2008) 2024.
8. 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, 1994.
9. U. Hesse, S. Langenbuch, W. Zwermann, D. Porsch, W. Bernnat, "Comparison of Burn-up Calculations for a UO<sub>2</sub> PWR Fuel Assembly", Jahrestagung Kerntechnik 2007.
10. O. Cabellos, N. García-Herranz, C. J. Diez de la Odra, R. Alvarez-Cascos, J. Sanz, F. Ogando, P. Sauvan, "Propagation of Nuclear Data Uncertainties In Transmutation Calculations Using ACAB Code", International Conference on Nuclear Data for Science and Technology, Jeju Island, Korea, 2010.

# Sampling Based Nuclear Data Uncertainty Analysis in Reactor Calculations

L. Gallner, M. Klein, B. Krzykacz-Hausmann, A. Pautz, W. Zwermann

*Gesellschaft fuer Anlagen- und Reaktorsicherheit, Forschungszentrum, Garching, Germany, 85748  
Winfried.Zwermann@grs.de*

## INTRODUCTION

Evaluated nuclear data files are continuously being improved [1,2,3]. Nevertheless, their precision is limited by the uncertainties of the underlying measurements and theoretical parameters. There is an increasing effort to improve the amount and quality of the covariance files accompanying the major data libraries. For now, a rather complete set of covariance data is provided in multi-group format with the SCALE-6 system [4].

So far, most uncertainty investigations with nuclear covariance data, as performed, e.g., with TSUNAMI [5, 6], are based on first order perturbation theory, and primarily consider the multiplication factors and other integral quantities. With increasing computer power, another approach has become possible, namely random sampling of nuclear data. This approach is implemented in the code package XSUSA (“Cross Section Uncertainty and Sensitivity Analysis”) [7]; the sampling is done according to the uncertainty information in the covariance matrices. The calculations are repeated many times with varied nuclear data, and the results are statistically analyzed. This differs from the “Total Monte Carlo” approach [8], which also determines output uncertainties by random sampling, but directly starts from the uncertainties in the basis data before generating evaluated files.

In the present contribution, the influence of nuclear data uncertainties on the results of reactor calculations is investigated.

## UNCERTAINTY ANALYSIS FOR A VVER CORE

For the uncertainty analysis, a VVER-1000 core is chosen, which was specified for an international OECD/NEA benchmark [9], see Fig. 1. It is loaded with UO<sub>2</sub> and MOX fuel assemblies in various burn-up states, the latter containing high quality plutonium.

The calculations presented here refer to the hot zero power state, with MCNP5 1.40 [9] in multi-group mode as transport solver. Spectral calculations were performed with the BONAMI/CENTRM sequence of SCALE-6, starting from a pre-collapsed 44-group master library based on ENDF/B-VII. As covariance data, the SCALE-6 44GROUPOV set was used. In total, 480 samples were run, each with 400 millions of neutron histories, to make sure that the fission rate distributions are sufficiently converged, and MC statistical uncertainties are small compared to those originating from nuclear data sampling.

Calculations with KENO-VI and comparisons with TSUNAMI-3D results are under preparation.

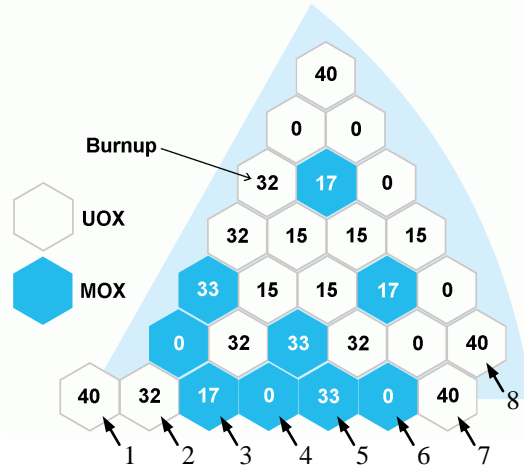


Fig. 1. Layout of the VVER MOX core configuration.

## RESULTS

The calculated multiplication factors turn out to lie in a band with a relative standard deviation of 0.71 %, a value which one expects for a U/Pu LWR system.

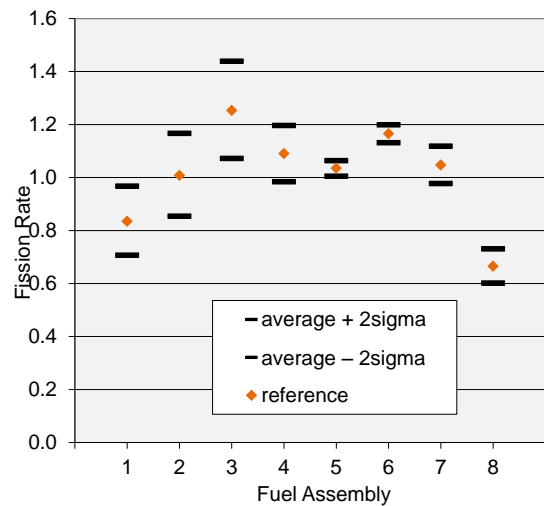


Fig. 2. Radial fission rate distribution for the VVER MOX core (averaged over all fuel assemblies belonging to the same radial column).



For the radial fission rate distribution, however, a much larger influence of the nuclear data variations on the result is observed. This is shown in Fig. 2, where the reference values and standard deviations are displayed. The resulting relative  $\sigma$  of almost 8% in the core center is unexpectedly high. Investigations on a simplified core model [10] have shown that the differences in the fission rate distributions are mainly due to the uncertainties in the average number of neutrons per fission of  $^{239}\text{Pu}$ , and the particularly non-uniform distribution of  $\text{UO}_2$  and MOX fuel assemblies in the considered core, along with the high amount of  $^{239}\text{Pu}$  in the isotopic composition. Such reactor cores are not yet in operation; uncertainty analyses for standard  $\text{UO}_2$  and reactor grade MOX cores will be performed.

In conclusion, it is desirable to routinely accompany reactor calculations by uncertainty and sensitivity analyses in the future, along with aiming for evaluated nuclear data of highest quality, as well as reliable and complete nuclear data uncertainty information.

## ACKNOWLEDGEMENT

This work is supported by the German Federal Ministry of Economics and Technology.

## REFERENCES

1. 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 (2006).
2. M.B. CHADWICK et al., "ENDF/B-VII.0: Next Generation Evaluated Nuclear Data Library for Nuclear Science and Technology," *Nuclear Data Sheets*, **107**, 2931 (2006).
3. 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**, 2885 (2008).
4. "SCALE: A Modular Code System for Performing Standardized Computer Analyses for Licensing Evaluation, Version 6," ORNL/TM-2005/39 (2009).
5. B.T. REARDEN, "TSUNAMI Sensitivity and Uncertainty Analysis Capabilities in SCALE 5.1," *Trans. Am. Nucl. Soc.*, **97**, 604 (2007).
6. M.A. JESSEE, M.L. WILLIAMS, M.D. DEHART, "Development of Generalized Perturbation Theory Capability within the SCALE Code Package," *Proc. M&C 2009*, Saratoga Springs, New York, May 3–7, 2009, American Nuclear Society (2009) (CD-ROM).
7. W. ZWERMANN, B. KRZYKACZ-HAUSMANN, L. GALLNER, A. PAUTZ, "Uncertainty Analyses with Nuclear Covariance Data in Reactor Core Calculations," *Proc. Annual Meeting on Nuclear Technology 2010*, Berlin, Germany, May 4–6, 2010, (CD-ROM).
8. A.J. KONING, D. ROCHMAN, "Towards Sustainable Nuclear Energy: Putting Nuclear Physics to Work," *Ann. Nucl. Energy*, **35**, 2024 (2008).
9. E. GOMIN, M. KALUGIN, D. OLEYNIK, "VVER-1000 MOX Core Computational Benchmark – Specification and Results," NEA/NSC/DOC(2005)17.
10. W. ZWERMANN, B. KRZYKACZ-HAUSMANN, L. GALLNER, A. PAUTZ, "Influence of Nuclear Covariance Data on Reactor Core Calculations," *Proc. WONDER 2009*, Cadarache, France, Sep. 29 – Oct. 2, 2009.

# NUCLEAR DATA UNCERTAINTY ANALYSIS FOR A FUEL ASSEMBLY CRITICALITY BENCHMARK

**W. Zwermann, L. Gallner, M. Klein, B. Krzykacz-Hausmann, and A. Pautz**  
Gesellschaft fuer Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH  
Forschungszentrum, Boltzmannstrasse 14, 85748 Garching, Germany  
Winfried.Zwermann@grs.de, Lucia.Gallner@grs.de, Markus.Klein@grs.de,  
Bernard.Krzykacz-Hausmann@grs.de, Andreas.Pautz@grs.de

**D. Wiarda, M. L. Williams, M. A. Jessee, and B. T. Rearden**  
Oak Ridge National Laboratory  
P.O Box 2008, Oak Ridge, TN 37831-6354, USA  
wiardada@ornl.gov, williamsml@ornl.gov, jesseema@ornl.gov, reardenb@ornl.gov

## ABSTRACT

Results of criticality calculations for an infinite lattice of fuel assemblies, simulating a storage situation, and corresponding uncertainty and sensitivity analyses are presented, performed with the SCALE code suite TSUNAMI which is based on first order perturbation theory, and the random sampling based XSUSA method, which is currently being integrated into the SCALE system. TSUNAMI was applied in 3D mode, with the Monte Carlo code KENO V.a as the transport solver, while for the XSUSA analyses, the 2D deterministic transport code NEWT was used. All studies were performed with the general-purpose 238-group ENDF/B-VII library, along with the SCALE 6 covariance data. The results of both the approaches agree very well, both for the total multiplication factor uncertainty and for the main contributions to this uncertainty from individual nuclides and reactions. With XSUSA/NEWT, also uncertainties in the pin-wise fission rate distribution are evaluated. It turns out that these quantities are most sensitive to other reactions than the multiplication factor; while the multiplication factor is most sensitive to U-235 nu-bar, fission, and capture as well as U-238 capture, the pin fission rate uncertainties are dominated by U-238 elastic and inelastic scattering.

*Key Words:* Nuclear Data, Uncertainty/Sensitivity Analysis, XSUSA, TSUNAMI, SCALE

## 1 INTRODUCTION

Nuclear data are the basis of all neutron transport calculations. Thus, the quality of the nuclear data used is essential for obtaining reliable results from the nuclear calculation chain. The major evaluated nuclear data, as stored in the JEFF [1], ENDF/B [2], and JENDL [3] files, are continuously improved. Nevertheless, the precision of nuclear data is limited by the uncertainties of the underlying measurements and the theoretical parameters. These uncertainties are provided in the nuclear covariance data files along with the basic data libraries. There is an increasing effort to improve the amount and the quality of the covariance files accompanying the major data libraries. Simultaneously, there is significant development, validation, and application of computer codes which evaluate the impact of these nuclear data uncertainties on the results of neutron transport calculations, like MCNP-ACAB [4], SUS3D [5], TMC [6], TSUNAMI [7], and XSUSA [8].

The perturbation theory based TSUNAMI (“Tools for Sensitivity and Uncertainty Analysis Methodology Implementation”) code suite is included in the SCALE [9] code system since version SCALE 5. In the current version SCALE 6.1, TSUNAMI is available using the 1-D  $S_N$  code XSDRN, the 2-D  $S_N$  code NEWT, or the 3-D Monte Carlo code KENO as transport solvers. In addition to eigenvalue uncertainty and sensitivity analysis, it now also provides generalized perturbation theory capabilities to compute sensitivities and uncertainties for reactor responses such as reaction rate and flux ratios as well as homogenized few-group cross sections for 1-D and 2-D system models. In all cases, TSUNAMI uses multi-group nuclear data and covariance data. A comprehensive set of covariance data is provided in multi-group format with SCALE 6. The data has been assem-

bled from a variety sources, including high-fidelity covariance evaluations from ENDF/B-VII, ENDF/-VI, and JENDL-3.3, as well approximate uncertainties obtained from a collaborative project performed by Brookhaven National Laboratory, Los Alamos National Laboratory, and Oak Ridge National Laboratory [10].

To complement the perturbation theory based uncertainty methods already available in SCALE, the sampling based uncertainty and sensitivity analysis tool XSUSA (“Cross Section Uncertainty and Sensitivity Analysis”) is currently being integrated into the SCALE 6 system. XSUSA applies and extends the GRS method originally implemented in the code package SUSA (“Software for Uncertainty and Sensitivity Analysis”) [11]. XSUSA has been developed for the use with nuclear data and their uncertainties in multi-group representation. To this end, many calculations for the problem under consideration are performed with sampled nuclear data. These variations are generated randomly from the uncertainty information contained in the covariance matrices. Any deterministic or Monte Carlo code using multi-group nuclear data can be used as the transport solver. With this method, it is possible to directly propagate the uncertainties through the whole nuclear calculation chain, from the spectral and depletion calculation to the steady-state and transient core simulation.

Both of the tools, TSUNAMI and XSUSA, have been applied to a criticality benchmark, for which currently comparison calculations are performed within the OECD/NEA Expert Group on Uncertainty Analysis for Criticality Safety Assessment (EG-UACSA). After a brief description of the arrangement under consideration and the corresponding calculation models, the results of uncertainty and sensitivity analyses with TSUNAMI and XSUSA are presented and compared.

## 2 THE EG-UACSA BENCHMARK PHASE II AND THE CALCULATION MODELS

Although the EG-UACSA Benchmark Phase II [12] is mainly dedicated to estimating the influence of manufacturing tolerances, one optional task refers to the influence of nuclear data uncertainties, which is investigated in the present paper. Uncertainty and sensitivity analyses referring to manufacturing tolerances with the GRS method are presented in [13].

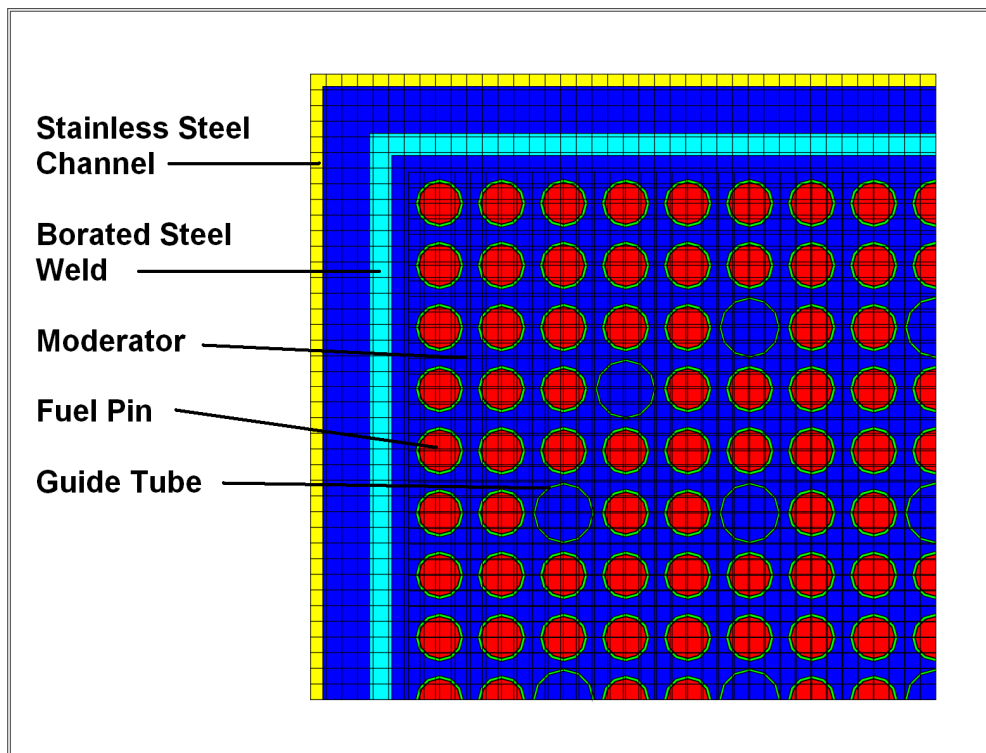


Figure 1. NEWT model for the arrangement of the EG-UACSA benchmark phase II

The arrangement is a two-dimensional representation of an infinite lattice of fuel assemblies, simulating a storage situation. The fuel assemblies consist of 17x17 pin cells, 25 of which contain control rod guide or instrumentation tubes; the fuel is fresh UO<sub>2</sub> with 4 wt.-% U-235 enrichment, moderated by light water at room temperature. The fuel assemblies are placed inside square stainless steel support channels. A slight sub-criticality is obtained by the presence of borated steel welds around the fuel pin arrays. For criticality calculations at nominal geometry, as it is the case for the nuclear data uncertainty and sensitivity analyses presented here, the description of one quarter of a fuel assembly with reflecting boundary conditions on all surfaces is appropriate.

The TSUNAMI calculation was performed in 3D mode (with reflecting boundary conditions also on the top and bottom surfaces) with the Monte Carlo code KENO V.a as the transport solver. In order to make sure that statistical uncertainties due to the Monte Carlo method are small compared to the uncertainties resulting from the nuclear data uncertainties, 10<sup>8</sup> neutron histories were used for the KENO calculation in forward mode, leading to a statistical 1  $\sigma$  uncertainty of 0.00008. For the XSUSA analyses, the 2D transport code NEWT was applied. In all studies, the general-purpose 238-group ENDF/B-VII based library, which is part of the SCALE 6 distribution, was used, along with the SCALE 6 covariance data. In both the calculation routes, the same spectral calculations with the SCALE modules BONAMI and CENTRM for the unresolved and resolved resonance regions were used to obtain problem specific multi-group data.

The NEWT calculations were performed with in S<sub>N</sub> order of 4 and a P<sub>1</sub> order of 2 for the moderator and 1 for the other materials. Each pin cell was spatially divided in 4x4 meshes. A sketch of the geometry model for NEWT is given in Fig. 1. The same model, except for the spatial meshing, was applied with the TSUNAMI-3D calculations.

For the uncertainty and sensitivity analyses with XSUSA, a total of 960 NEWT calculations were performed with sampled nuclear data, in addition to the reference calculation with unmodified data. The covariance matrices contain only the widths of the uncertainty distributions. Therefore, multidimensional Gaussian distributions were used. Alternatively, an analysis with uniform distributions has also been performed; however, it turns out that for the problem under consideration, this has only a minor influence on the uncertainties of the calculated results.

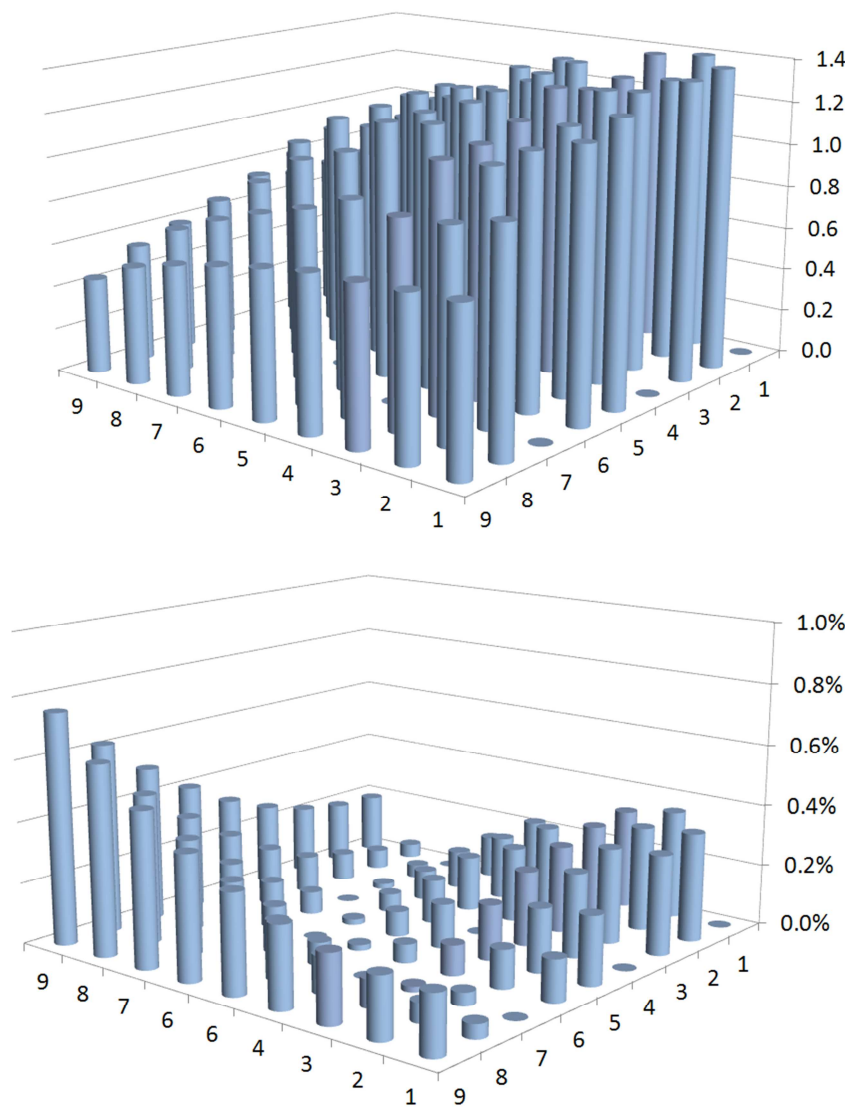
### 3 RESULTS OF UNCERTAINTY AND SENSITIVITY ANALYSES

In Table I, the multiplication factors for the EG-UACSA Benchmark Phase II obtained with TSUNAMI-3D and XSUSA/NEWT, along with the uncertainties due to the nuclear covariance data, are given. The slight difference in the reference values, which are simply the KENO V.a and NEWT results with the reference nuclear data, results from the different calculation methods of the transport solvers. It turns out that the average of 960 XSUSA/NEWT results obtained with sampled nuclear data is in very good agreement with the reference value, and that the uncertainties obtained with TSUNAMI and XSUSA/NEWT also agree very well. The remaining differences will be discussed later.

**Table I. Multiplication factor and uncertainty results for the EG-UACSA benchmark phase II model from TSUNAMI-3D and XSUSA/NEWT**

Code	Reference	Average	Rel. Standard Deviation (%)
<b>TSUNAMI-3D</b>	0.99275	--	0.434
<b>XSUSA/NEWT</b>	0.99212	0.99226	0.424

With the XSUSA method, it is possible to determine uncertainties and sensitivities of every output quantity which results from the corresponding neutron transport calculation. As an example, the uncertainties in the radial pin fission rate distribution are evaluated, although this is of no high relevance for a subcritical arrangement of fuel assemblies. Nevertheless, the uncertainty and sensitivity analysis can be performed in the same way for fission rate distributions in critical assembly or reactor core calculations. In Fig. 2, the pin fission rate distribution calculated with NEWT is displayed, along with the  $1\sigma$  uncertainty for each pin from 960 calculations with varied nuclear data. The averages of these 960 results are practically identical to the reference values, with relative deviations less than 0.008 % for any one pin. The  $1\sigma$  uncertainties possess values of less than 0.8 %, with an absolute maximum for the corner pin where the fission rate is lowest, a relative maximum for the centre of the fuel assembly, and an annular region where the uncertainty almost van-

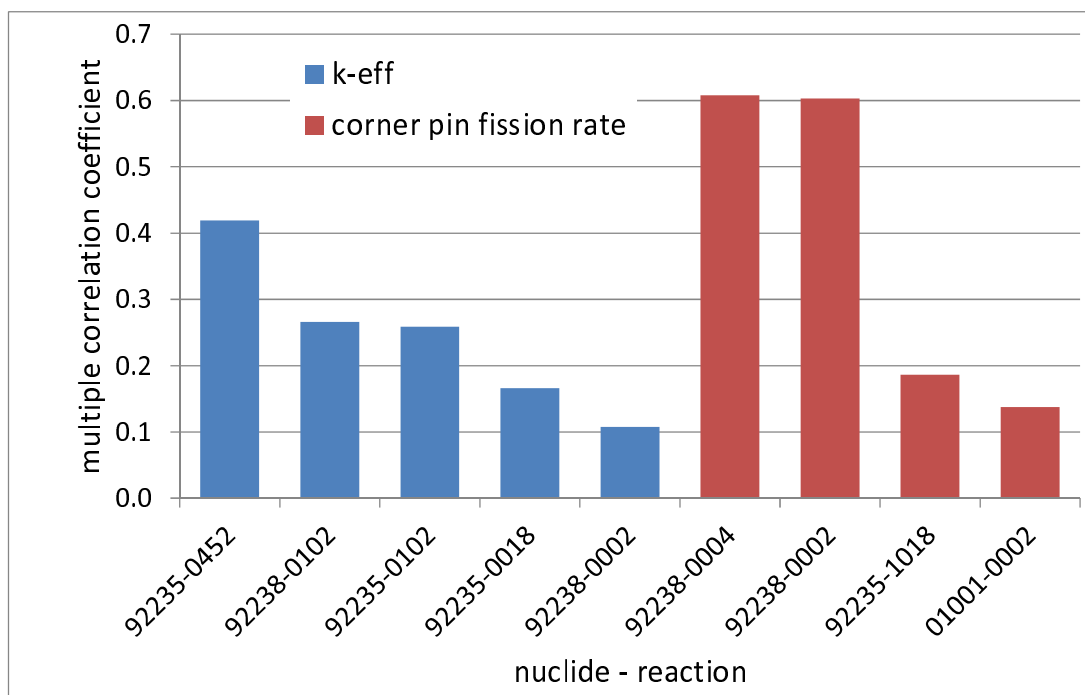


**Figure 2. Pin-wise fission rate distribution from NEWT (top) and relative uncertainties from XSUSA/NEWT (bottom) for the EG-UACSA benchmark phase II model; position 1-1 is the centre of the assembly**

ishes. It should be noted, however, that the fission rate distributions are normalized to the same value, namely the number of fuel pins in the assembly, i.e. fission rate uncertainties corresponding to multiplication factor uncertainties are not contained in the displayed values.

Figure 3 displays the sensitivity results for the multiplication factor and the pin fission rate at the corner of the fuel assembly (position 9-9 in Fig. 2) with respect to the uncertainty sources with the highest influences. The so-called “multiple correlation coefficient ( $R^2$ )” is used as sensitivity/un-

certainty importance indicator. It can be interpreted as the relative amount of output uncertainty coming from the uncertainty of the respective parameter group. It is basically determined from correlations of the calculated output quantities with the sampled input quantities, i.e. from the sampled nuclear data, taking into account inter-dependencies of input quantities due to non-zero covariance terms.

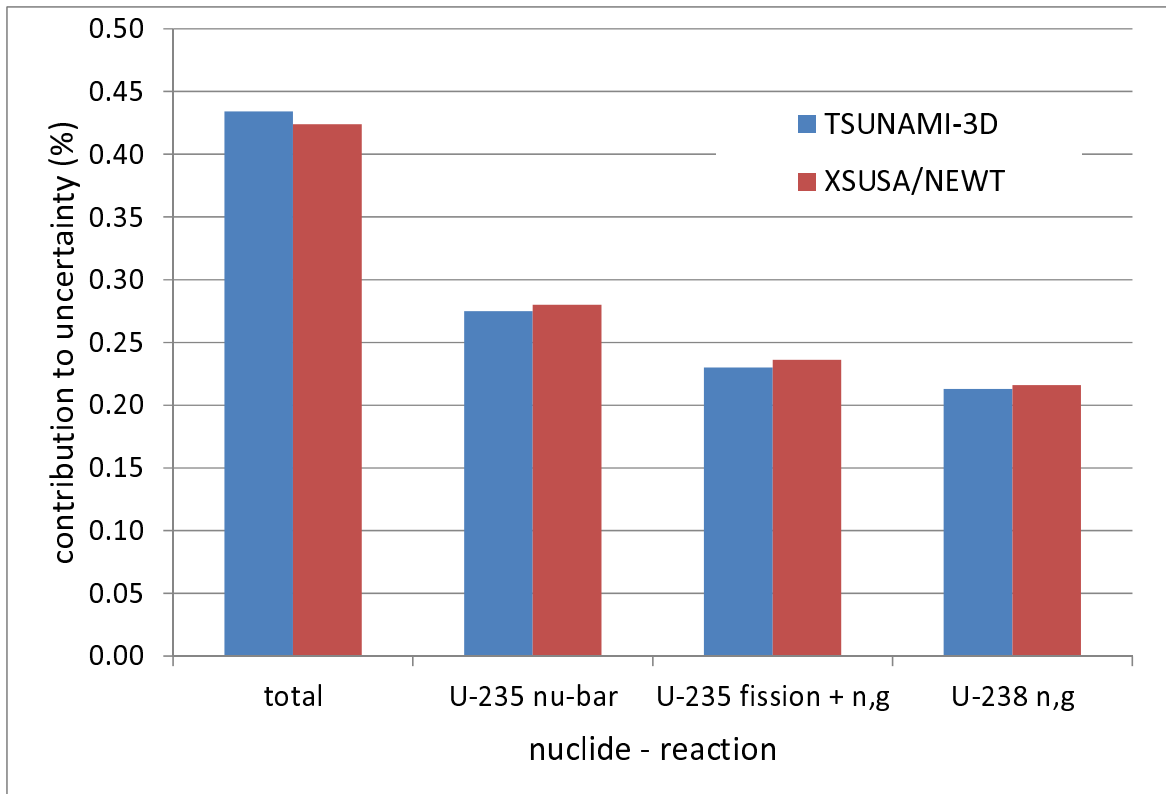


**Figure 3. Multiple correlation coefficient ( $R^2$ ) from XSUSA/NEWT for the EG-UACSA benchmark phase II model; reaction IDs: 2 = elastic scattering, 4 = inelastic scattering, 18 = fission, 102 = n, $\gamma$  capture, 452 = nu-bar, 1018 = fission spectrum**

While the multiplication factor uncertainty is mainly determined by the uncertainty in the average number of neutrons per fission of U-235, of the U-238 capture cross section, and of the U-235 capture and fission cross sections (which are strongly correlated), the uncertainty in the corner fission rate (as well as in the fission rates at all other positions, which are not explicitly displayed) is dominated by the uncertainties of the inelastic and elastic scattering cross sections on U-238. The fact that the uncertainties of the multiplication factor and pin fission rates are dominated by different and uncorrelated input uncertainties leads to an almost zero correlation between them, while there is practically a complete correlation or complete anti-correlation between the various fission rates, depending on the positions of the considered pins relatively to each other.

A similar behaviour of the multiplication factor uncertainty is observed in the TSUNAMI-3D result. However, due to the first order perturbation theory method, TSUNAMI evaluates the contributions of each uncertain input quantity to the output uncertainty, holding all other uncertain input quantities fixed at their nominal values, which is different to the sensitivity methods applied by XSUSA. It essentially corresponds to the results of XSUSA calculation series with any one nuclide/reaction data set varied while using the unvaried data for all other nuclides/reactions (“one-at-a-time variations” with respect to nuclides and reactions, with all energy groups combined). For U-235, the contributions from fission and n, $\gamma$  capture are evaluated in combination, because the uncertainties of these reactions are strongly correlated, and both give substantial individual contributions to the output uncertainty; therefore, it is not useful to consider one-at-a-time variations for each of these reactions alone (unlike the U-238 case, where fission and n, $\gamma$  capture are also correlated, but the contribution to the multiplication factor uncertainty from fission is very small for a thermal uranium system). The main contributions to the multiplication factor uncertainties resulting from

the TSUNAMI calculation are compared with the XSUSA results from the corresponding one-at-a-time variations in Fig. 4, along with the total uncertainties resulting from both of the methods.



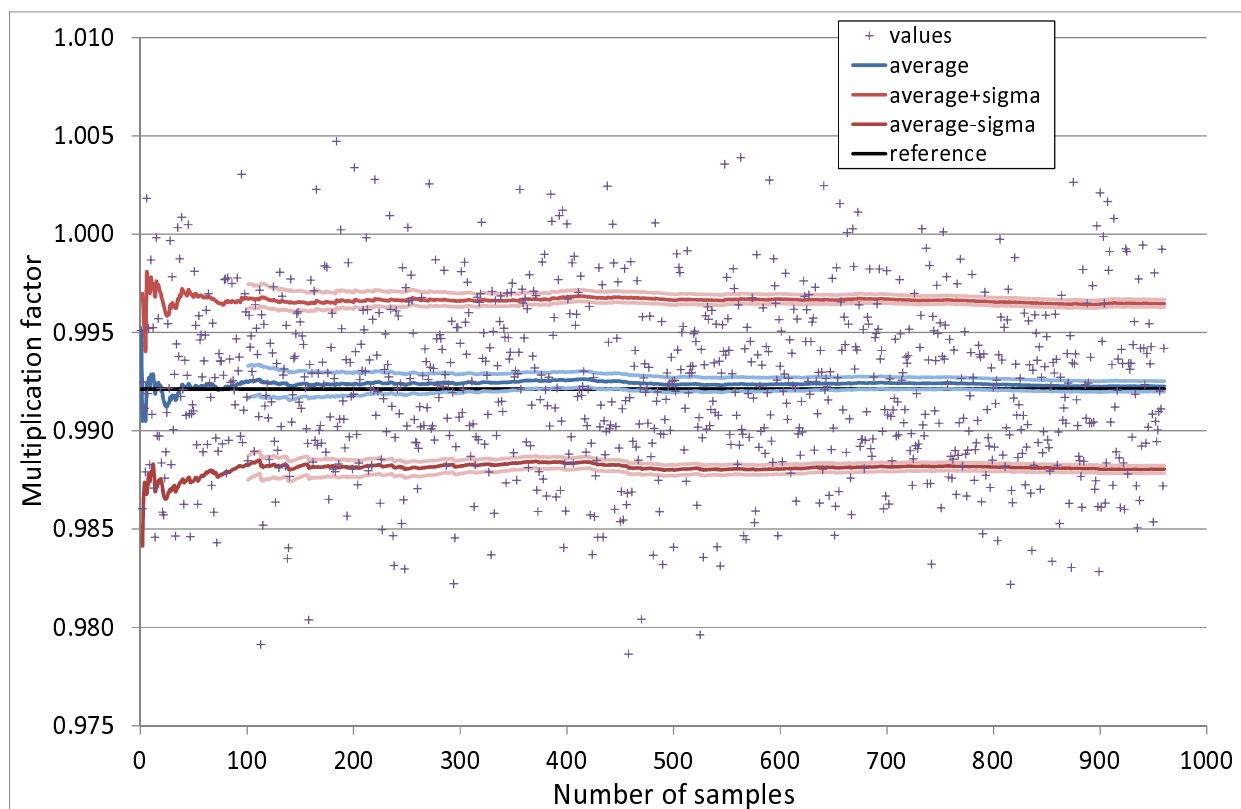
**Figure 4. Main contributions from various nuclides/reactions to the relative  $1\sigma$  multiplication factor uncertainty (%) for the EG-UACSA benchmark phase II model from TSUNAMI and XSUSA/NEWT calculations; XSUSA/NEWT results obtained by one-at-a-time variations**

There are small, but still visible differences in the uncertainty contributions calculated with TSUNAMI and XSUSA/NEWT. For the total uncertainty, the relative difference is 2.3 %; for the contributions from individual nuclides/reactions, the relative differences have the same order of magnitude. Part of these differences comes from the stochastic nature of the XSUSA random sampling method; even for a sample size of almost thousand, there is still a substantial amount of uncertainty in the standard deviations of the output quantities. For 960 random samples that were used for the calculations with all input uncertainties, and each of the one-at-a-time variations, the upper and lower 95 % confidence limits for the standard deviation  $\sigma$  are +4.8 % and -4.2 %, respectively, both relative to the absolute values of the sample standard deviation, which can be considered as an additional source of the uncertainty due to the limited sample size. This means that the differences between the TSUNAMI and XSUSA/NEWT results observed in Fig. 4 are compliant within the statistical uncertainty. Looking at the relative upper and lower 95 % confidence limits of the mean of the multiplication factor, they are determined as  $\pm 0.027$  %, showing also that the average of 0.99226 from 960 samples complies with the reference value of 0.99212 obtained with unvaried nuclear data (the relative difference is 0.014 %).

Part of the differences between the TSUNAMI and XSUSA results may also be assigned to differences in the methods implemented in both the approaches. One difference is the implicit assumption of a linear dependence of the output uncertainties on the input uncertainties in TSUNAMI due to first order perturbation theory, while no such assumption is necessary for determining output uncertainties with a method based on random sampling. Another difference is the fact that in the XSUSA version currently implemented, the cross sections are perturbed after the spectral calculation, thereby neglecting a possible influence of the uncertainties on the resonance self-shielding. For thermal uranium systems, there are indications that this influence is very small [14]. Any-



way, the results show that methodical differences are, at least for the system under consideration and with the sample size chosen, below the statistical uncertainties.



**Figure 5. Average and standard deviation for the multiplication factor as a function of the number of samples, along with the individual results for each sample for the EG-UACSA benchmark phase II model; the 95 % confidence intervals for the mean and the standard deviation are also given**

In Fig. 5, the multiplication factor results from calculations with increasing sample size are displayed, along with the mean, the  $1\sigma$  uncertainty band, and the 95 % confidence intervals of the mean and the standard deviations as a function of the number of samples. While there is still some clearly visible fluctuation in the average value as well in in the standard deviation also for a high sample size, it can also be seen that a very good estimate for the uncertainty can be gained even with a relatively small sample size (a hundred or even less).

#### 4 SUMMARY AND CONCLUSIONS

Currently, the sampling based uncertainty and sensitivity analysis tool XSUSA is being integrated into the SCALE 6 code system. This complements the perturbation theory based uncertainty methods already available through the TSUNAMI modules.

With both of the tools, XSUSA and TSUNAMI, solutions to the benchmark phase II of the Expert Group on Uncertainty Analysis for Criticality Safety Assessment (UACSA) have been generated. The TSUNAMI calculations were performed in 3-D mode, with the Monte Carlo code KENO V.a as the transport solver, while for the XSUSA analyses, the 2-D transport code NEWT was applied. In all studies, the general-purpose 238-group ENDF/B-VII based library was used, along with the SCALE 6 covariance data. The results of both approaches agree very well concerning the total uncertainty of the resulting multiplication factors as well as the main contributions to these uncertainties. Some of the difference in the results may be due to the current SCALE/XSUSA integration that perturbs cross sections after the resonance self-shielding has been applied. Further improved agreement may be realized when the final implementation is completed to perturb infinitely dilute cross-section data along with the continuous energy data in the resonance region before



the resonance self-shielding; this is currently under development. Nonetheless, the two methods show excellent agreement for computing integral uncertainties in system responses due to cross section covariance data, compliant within the statistical uncertainty of the sampling based results, obtained from 960 varied nuclear data libraries.

To obtain a good estimate for the total output uncertainty, a relatively small number of samples (about 100) are already sufficient; with a number of almost 1000 samples, as chosen for the present investigation, the main contributions to the uncertainty from individual nuclides and reactions can precisely be determined. The corresponding number of neutron transport calculations can be easily performed. But also sampling based uncertainty and sensitivity analyses for more costly applications, like depletion calculations or full reactor core transport calculations, can be performed in reasonable time with today's standard computing clusters.

In conclusion, it is desirable and feasible to routinely accompany all parts of reactor calculations by uncertainty and sensitivity analyses in the future, along with aiming for evaluated nuclear data of highest quality, as well as reliable and complete nuclear data uncertainty information.

## 5 ACKNOWLEDGMENTS

This work is supported by the German Federal Ministry of Economics and Technology.

## 6 REFERENCES

1. A. Koning, R. Forrest, M. Kellett, R. Mills, H. Henriksson, and Y. Rugama, "The JEFF-3.1 Nuclear Data Library," JEFF Report 21, NEA No. 6190, (2006).
2. 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).
3. O. Iwamoto, T. Nakagawa, N. Otuka, S. Chiba, K. Okumura, and G. Chiba, "JENDL Actinoid File 2008 and Plan of Covariance Evaluation," Nuclear Data Sheets 109, pp.2885-2889, (2008).
4. N. García-Herranz, O. Cabellos, J. Sanz, J. Juan, and J. C. Kuijper, "Propagation of Statistical and Nuclear Data Uncertainties in Monte Carlo Burnup Calculations," Annals of Nucl. Energy, 35, pp.714-730, (2008).
5. I. Kodeli, "The SUS3D Code for Cross-Section Sensitivity and Uncertainty Analysis – Recent Development," Trans. Am. Nucl. Soc., 104, pp.791-793, (2011).
6. A. J. Koning and D. Rochman, "Towards Sustainable Nuclear Energy: Putting Nuclear Physics to Work," Annals of Nucl. Energy, 35, pp.2024-2030, (2008).
7. B. T. Rearden and D. E. Mueller, "Uncertainty Quantification Techniques of SCALE/TSUNAMI", Trans. Am. Nucl. Soc., 104, pp.371-373, (2011).
8. W. Zwermann, B. Krzykacz-Hausmann, L. Gallner, A. Pautz, "Influence of Nuclear Covariance Data on Reactor Core Calculations", Proc. Second International Workshop on Nuclear Data Evaluation for Reactor Applications (WONDER 2009), Cadarache, France, 29 Sep. - 2 Oct., pp.99-104, (2009).
9. "SCALE: A Modular Code System for Performing Standardized Computer Analyses for Licensing, Version 6," ORNL/TM-2005/39, (2009).
10. R. Little, T. Kawano, G. D. Hale, M. T. Pigni, M. Herman, P. Obložinský, M. L. Williams, M. E. Dunn, G. Arbanas, D. Wiarda, R. D. McKnight, J. N. McKamy and J. R. Felty, "Low-fidelity Covariance Project," Nuclear Data Sheets 109, pp. 2828–2833, (2008).
11. B. Krzykacz, E. Hofer, M. Kloos, "A Software System for Probabilistic Uncertainty and Sensitivity Analysis of Results from Computer Models," Proc. International Conference on Probabilistic Safety Assessment and Management (PSAM-II), San Diego, Ca., USA, (1994).

12. J. C. Neuber, "Proposal for an UACSA benchmark study on the reactivity impacts of manufacturing tolerances of parameters characterizing a fuel assembly configuration," available online at <http://www.oecd-nea.org/science/wpncs/UACSA/>.
13. M. Kirsch, V. Hannstein, and R. Kilger, "Applications of the SUnCISTT: Monte Carlo Sampling on Uncertain Technical Parameters in Criticality and Burn-Up Calculations," Proc. International Conference on Nuclear Criticality (ICNC2011), Edinburgh, Scotland, 19-22 Sep., (2011).
14. M. Williams, M. Jessee, H. Smith, and D. Wiarda, "Statistical Uncertainty Analysis Methodology for UAM Exercise I-3," presented at the UAM-5 Workshop, Stockholm, Sweden, April 13-15, (2011).

## HIGH-FIDELITY MULTIPHYSICS SIMULATION OF BWR ASSEMBLY WITH COUPLED TORT-TD/CTF

**J. Magedanz<sup>1</sup>, Y. Perin<sup>2</sup>, M. Avramova<sup>1</sup>, A. Pautz<sup>2</sup>, F. Puente-Espel<sup>2</sup>, A. Seubert<sup>2</sup>, A. Sureda<sup>2</sup>, K. Velkov<sup>2</sup>, W. Zwermann<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Department of Mechanical and Nuclear Engineering  
The Pennsylvania State University  
Reber Building, University Park, PA 16802, USA  
[jwm288@psu.edu](mailto:jwm288@psu.edu); [mna109@psu.edu](mailto:mna109@psu.edu)

<sup>2</sup>Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH  
Forschungsinstitute  
D-85748 Garching, Germany  
[Yann.Perin@grs.de](mailto:Yann.Perin@grs.de); [Andreas.Pautz@grs.de](mailto:Andreas.Pautz@grs.de); [Federico.Puente-Espel@grs.de](mailto:Federico.Puente-Espel@grs.de);  
[Armin.Seubert@grs.de](mailto:Armin.Seubert@grs.de); [Antonio.Sureda@grs.de](mailto:Antonio.Sureda@grs.de); [Kiril.Velkov@grs.de](mailto:Kiril.Velkov@grs.de);  
[Winfried.Zwermann@grs.de](mailto:Winfried.Zwermann@grs.de)

### ABSTRACT

This paper describes the application of the coupled codes TORT-TD and CTF to the pin-by-pin modeling of a BWR fuel assembly with thermal-hydraulic feedback. TORT-TD, developed at GRS, is a time-dependent three dimensional discrete ordinates code. CTF is the PSU's improved version of the subchannel code COBRA-TF, which uses a two-fluid, three-field model to represent two-phase flow with entrained droplets, and is commonly applied to evaluate LWR safety margins. The coupled codes system TORT-TD/CTF, already applied to several PWR cases involving MOX, was adapted from PWR to BWR applications. The purpose of the research described in this paper is to verify the coupling for modeling two-phase flow at the pin cell level. Using an ATRIUM-10 assembly, the system's steady-state capabilities were tested on two cases: one without control blade insertion and another with partially inserted blades. The influence of the neutron absorber on local axial and radial parameters is presented. The description of an inlet flow reduction transient is an example for the time-dependent capability of the coupled system.

Key Words: TORT-TD, CTF, coupled codes, BWR

### 1. INTRODUCTION

The current "best-estimate" coupled codes are able to predict the core power perturbations in a realistic manner by means of three-dimensional core models with a spatial resolution at assembly/channel spatial scale. This approximation level is acceptable. However, the safety-relevant parameters that determine the accident consequences, such as fuel rod enthalpy, Departure from Nucleate Boiling Ratio (DNBR), burn-out, maximum fuel rod cladding temperature, fuel rod centerline temperature, etc., have to be evaluated at local conditions, at pin cell/subchannel spatial scale, via coupled neutronics/thermal-hydraulics calculations. For example, sustaining the current fleet of light water reactors (LWRs), including extending the life of existing plants and developing advanced fuel designs, requires the use of advanced software tools

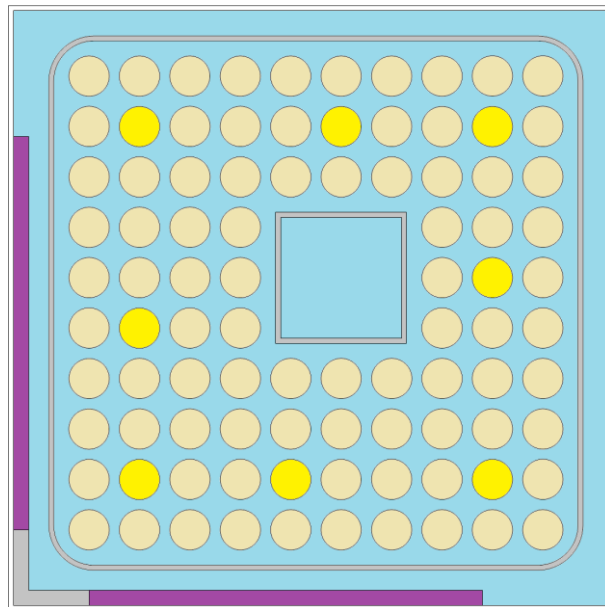
for the prediction of safety margins and circumstances that can cause fuel failure. While many issues are currently being addressed, questions remain that must be answered by pin-by-pin simulation methods that incorporate modeling of phenomena from a number of disciplines, and their interaction, on a variety of spatial and time scales. These will be applied to a wide range of reactor operating and transient conditions.

The coupling of the few-group discrete ordinates code TORT-TD with the subchannel thermal hydraulics code COBRA-TF (CTF) represents an approach to a multi-physics system capable to predict local core parameters. TORT-TD [1] is based on the  $S_N$  transport code TORT [2] and continues the development of the two-dimensional transient  $S_N$  code DORT-TD [3] to three dimensions. Previous research including application of the coupled code system TORT-TD/CTF to several PWR cases involving MOX fuel has already been performed and can be found in [4].

The purpose of the research described in this paper is to apply the coupling for modeling two-phase flow at the pin cell level. A coupled model was developed for a single BWR fuel assembly, with reflected boundary conditions. Every rod and coolant channel was modeled individually, as well as the water rod and bypass.

## 2. ATRIUM-10 ASSEMBLY

In order to validate the coupled system for two-phase flow, a single ATRIUM-10 assembly from the “Physics of Plutonium Fuels BWR MOX Benchmark” [5] was selected. The ATRIUM-10 contains a 10-by-10 rod array, with eight partial-length rods and nine array positions occupied by the water rod (see Figure 1).



**Figure 1: Layout of ATRIUM-10 assembly, showing water rod, bypass, control blade (with absorbing part in purple), and partial-length fuel rods (in yellow)**

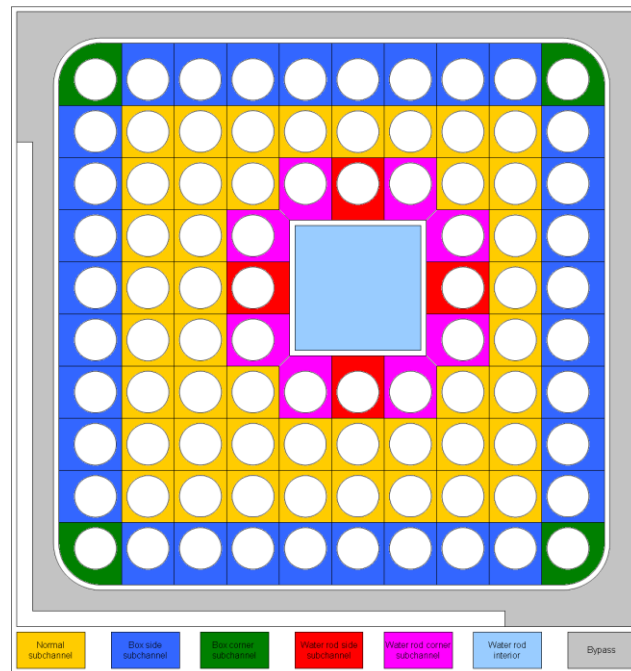
There are seven neutronic axial sections, which can be described as follows:

1. Bottom reflector
2. Bottom low-enriched zone
3. Normal enrichment section, which includes partial rods
4. Axial slice above active part of partial rods
5. Zone above partial rods, with these positions occupied only by coolant
6. Top low-enrichment zone
7. Top reflector

Figure 1 shows the layout of the ATRIUM-10 assembly, including the partial-length rods, water rod, and control blade.

### 3. CTF THERMAL-HYDRAULIC MODEL

The stand-alone CTF code has been validated for BWR applications against: 3x3 GE and 4x4 ISPRA (PELCO) void distribution tests [6] as well as OECD/NRC BFBT benchmark [7]. When COBRA-TF models are developed for resolving pin-level conditions, it is conventional to use subchannel-centered model of the coolant flow between four pins, as this is a more appropriate region to be treated homogeneously and it is a better representation of lateral flow than rod-centered subchannel model. However, the current coupling scheme requires that each TORT-TD cell correspond to at most one COBRA-TF subchannel. Thus, the hydraulic model uses a 10 by 10 subchannel arrangement, with each subchannel representing the flow around a single fuel rod, which corresponds to the rod-centered subchannel model.



**Figure 2: Subchannel type configuration**

Figure 2 shows the geometry and arrangement of subchannel types. There are five types of rod-centered subchannels: normal, box-side, box-corner, water-rod-side, and water-

rod-corner, as well as one channel each representing the bypass and water rod interior. However, in the coupled version, the following assumption was used: the moderator density transported to TORT-TD for both internal and external bypass are not taken from the CTF model but linearly interpolated from the inlet temperature to the saturation temperature at outlet.

Although the assembly contains partial length rods, with empty subchannels above, this is not represented in the current rod-centered channel hydraulic model. In these subchannels, the hydraulic geometry is kept the same as for a full-length rod, but no heat is generated above the active length.

The axial nodalization contains a total of 25 nodes, two of which represent the top and bottom reflectors. Of the 23 nodes in the active region, 15 are below the top of the partial-length rods, and 8 are above.

#### 4. TORT-TD NEUTRONIC MODEL

The following assembly model (Figure 3) was implemented within the 2D lattice transport code HELIOS-1.11 [8] to generate pin-cell homogenized 8 energy group cross-sections by weighting with the flux obtained from the 2D calculation. Some simplifications were adopted in comparison to the real ATRIUM-10 fuel assembly. For instance, the corners of both, inner and outer boxes (colored in red in Figure 3) were assumed to be squared. This does not substantially influence the calculation results, while the modeling effort was significantly reduced.

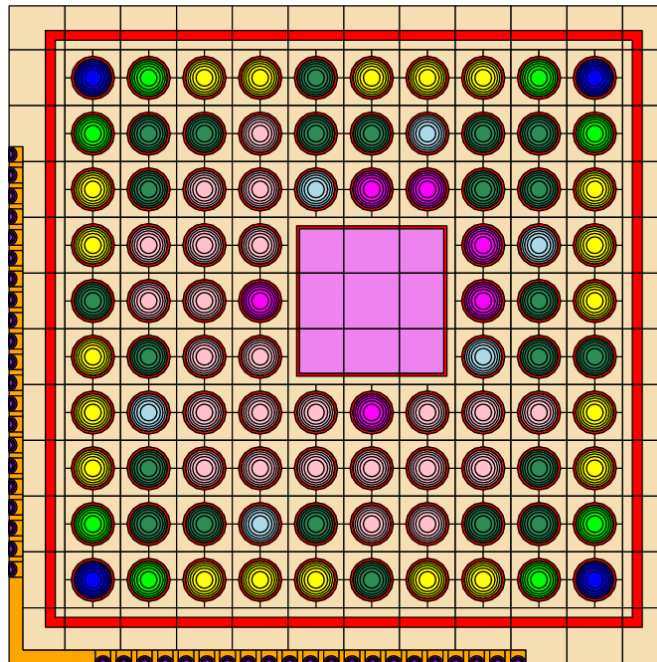


Figure 3: Layout of ATRIUM-10 HELIOS model

In order to generate a LWR cross-sections library, it is common to define history and instantaneous parameters. History parameters are used in base depletion calculations, while instantaneous parameters are for branch-off calculations. The cross-section history modeling is very important for correct prediction of axial power profile in a LWR.

It is well known that BWRs have highly non-uniform axial power and density profiles during operation. Under normal conditions, the top part of a usual BWR core presents a much lower power level compared to the bottom part. It is also noticeable that moderator is present in both, liquid phase (bottom part of the core) and vapor phase (top).

The void fraction (i.e. moderator density) has a strong influence on the neutron spectrum and therefore on the fuel evolution during burnup. After a number of sensitivity analyses were performed, it was concluded that three axial sets of thermal-hydraulic historical values (see Table 1) are sufficient in order to generate an accurate and efficient cross-sections library. The maximum accuracy is provided by non-equidistant axial layers: the first layer goes from the bottom of the core to 0.594 m, the second one from 0.594 m to 1.336 m, and the last layer from 1.336 m to the top of the core.

**Table 1: Axial thermal-hydraulic historical values for the burnup calculation**

<b>Parameter</b> <b>Layer</b>	<b>Fuel Temperature</b> [°C]	<b>Moderator density [kg/cm<sup>3</sup>] / Saturation Temperature</b> [°C]	<b>Blades insertion</b>
<b>Top</b>	581	197 (285.83)	Uncontrolled
<b>Middle</b>	647	416 (285.83)	Uncontrolled
<b>Bottom</b>	539	714 (285.83)	Uncontrolled

The depletion calculation covers a wide range of burnups: from 0.0 to 60,000 MWd/t divided into 34 sub-steps, being fine at the beginning and coarser at the end. For the purpose of this study, only a fresh assembly has been simulated but the high burnup points will be used in future studies. For every burnup step, branch-off calculations were made as follows:

Fuel Temperature (°C): 20, 150, 278, 475, 600, 800, 1000, 1200, 1500, 1800, 2100, 2400 and 2600.

Moderator Density (kg/m<sup>3</sup>): 10, 100, 197, 275, 375, 416, 500, 600, 675, 714, 775, 850, 1001.34.

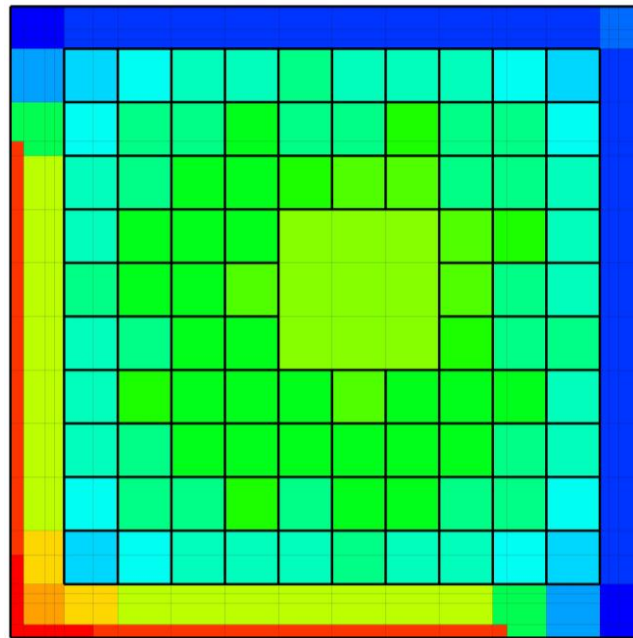
Blades insertion: Uncontrolled, Controlled.

It is noted that a non-explicit void dependency was included. This fact should not lead to confusion. The void fraction is implicitly included by giving moderator density at a given pressure. This methodology was chosen in order to limit the number of interpolation parameters in the cross-section library.

The chosen fuel temperature and moderator density branching points cover a broad spectrum conditions allowing calculations from cold state (20°C; 1001.34kg/m<sup>3</sup>) to severe accident conditions (2600°C, 10 kg/m<sup>3</sup>). These extreme conditions are not used in the present paper but will be in future studies (the same as for the burnup).

For the various materials in the fuel assembly, macroscopic nuclear cross sections have been prepared in 8 energy groups and  $P_1$  Legendre scattering order. Diffusion constants for each material have also been obtained to supply the TORT-TD diffusion solver for fast running scoping calculations and future comparisons between transport and diffusion solutions. The transient calculation is based on 6 delayed neutron precursor families. Level-symmetric  $S_8$  quadrature has been chosen for the TORT-TD model.

The TORT-TD neutronic model of the ATRIUM-10 fuel assembly is a pin-cell homogenized representation of the original layout shown in Figure 1. The active height of the fuel assembly is 371.2 cm and is spatially discretized into 75 axial meshes. A radial cut through the active axial section of the TORT-TD model is shown in Figure 4. Figure 4 also shows the spatial mapping scheme with CTF. All TORT-TD meshes within thick black lines uses the same TH feedback values.



**Figure 4: Radial cross section of the TORT-TD model. The colors denote individual compositions represented by corresponding nuclear cross-section sets.**

At the top and bottom of the assembly, a 23 cm bottom reflector and a 29.8 cm top reflector are attached. The axial reflector regions are divided into 10 meshes each. The material of the fuel assembly hollow channel is been taken as material for both axial reflectors.



## 5. RESULTS

### 5.1. Implementation of a Steady-State Convergence Forcing Method

The coupled code TORT-TD/CTF has been verified for pin-by-pin calculations of PWR mini-cores [4]. The coupling scheme used in these studies had to be adapted for the needs of BWR simulations. Indeed, with the former version, oscillations of the system between two states could be observed (Figure 5).

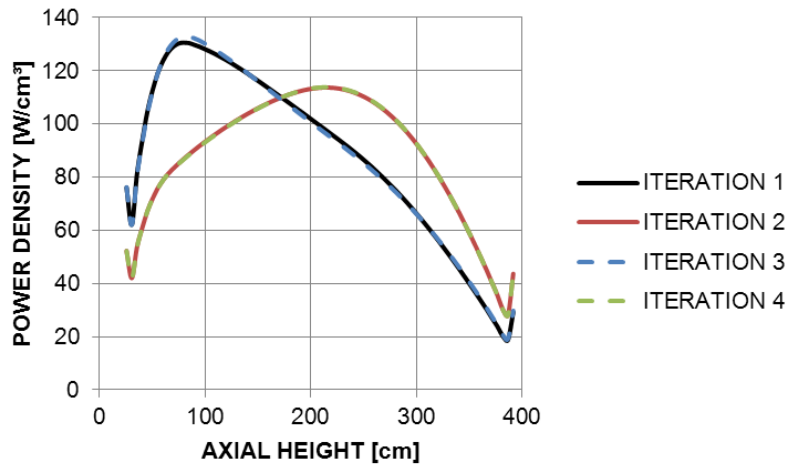


Figure 5: Axial power distribution oscillation during steady-state TORT-TD/CTF convergence

In order to force the convergence, instead of using the latest power computed with TORT-TD, the averaged value between the last two TORT-TD iterations is used. Figure 6 indicates that this technique was successfully implemented and the coupled system is now able to converge toward a single, physically correct, power profile. The occurrence of the strong oscillations observed needs further investigation.

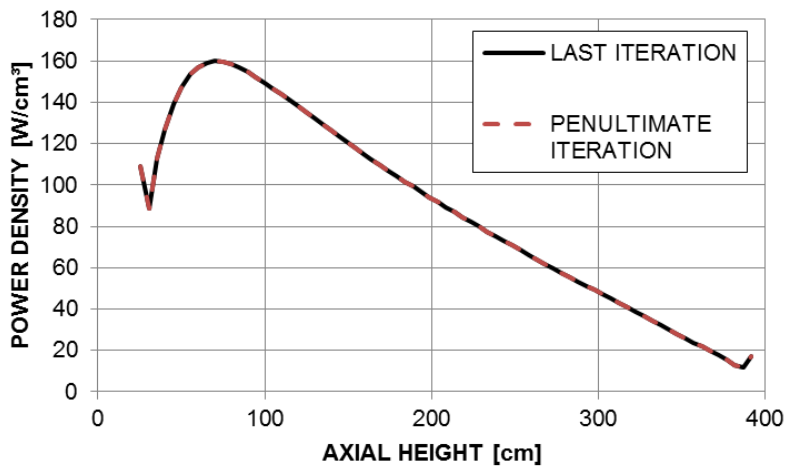


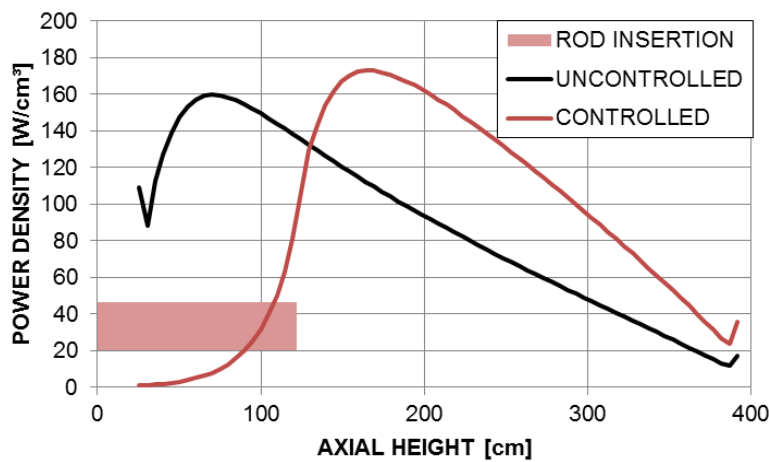
Figure 6: Axial power distribution during steady-state TORT-TD/CTF convergence after implementation of a convergence forcing method

## 5.2. Steady-State Simulations

Several coupled calculations were performed using the previously described BWR assembly model. Two steady-state cases using a 5 MW assembly power were selected: one without control blade insertion and one with the control blades inserted to 100 cm in the active part of the core (122 cm including the reflector).

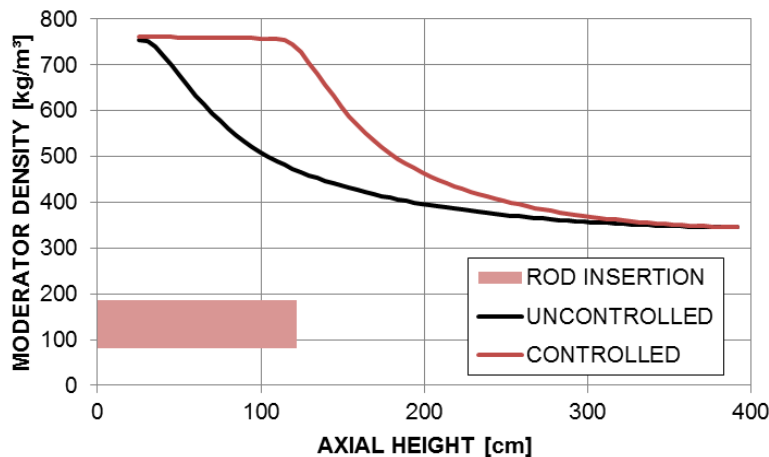
In both cases, power peaks can be observed at the axial extremities. There, the presence of reflector improves the moderation and thus causes a local peak of the thermal flux i.e. of the power density.

The effect of the control blades on the axial power distribution can be clearly seen in Figure 7. As expected, the presence of the control blades shifts the power peak toward the top of the core.



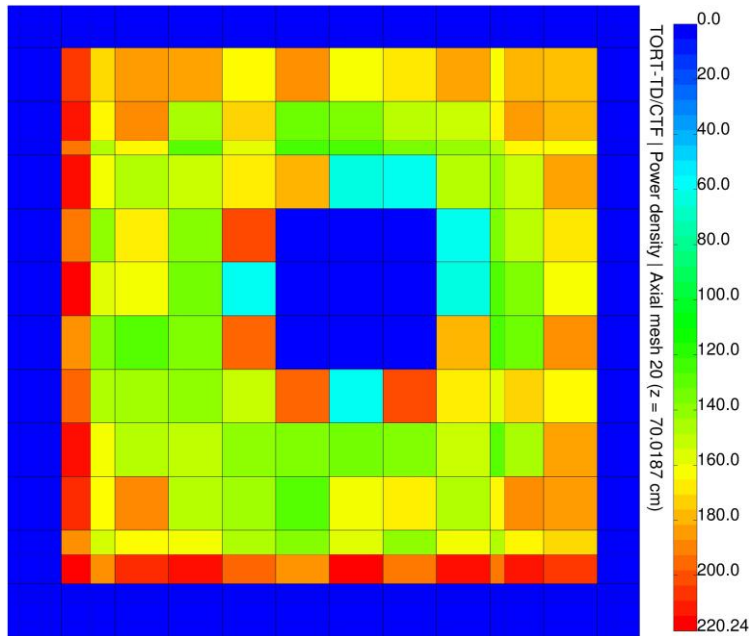
**Figure 7: Axial power distribution – Comparison between the case without control blade and the one with partially inserted blade (122cm).**

As a consequence, as seen in Figure 8, the moderator density distribution stays almost constant along the bundle height, where the control blades are present.

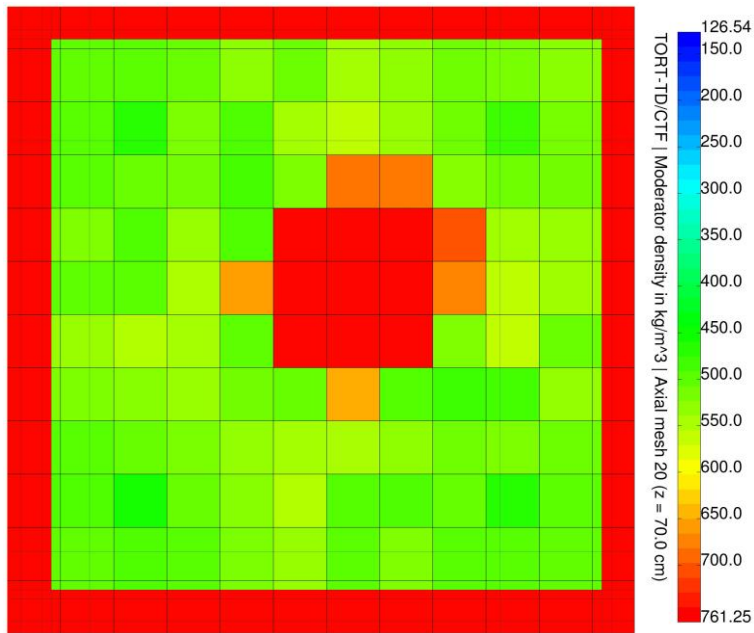


**Figure 8: Axial moderator density distribution – Comparison between the case without control blade and the one with partially inserted blade (122cm).**

At a more local scale, Figure 9 shows the radial power density where the axial maximum occurs ( $z = 70.0\text{cm}$ ) for the uncontrolled case. The corresponding moderator density distribution is given in Figure 10. For the uncontrolled case, the relative radial power distribution stays constant over the core height. The maximum is located around the water channel and on the assembly borders where the moderation is optimal.



**Figure 9: Radial power density distribution for the uncontrolled case where the maximum axial power occurs (at axial mesh 20 or  $z = 70.0\text{cm}$ )**



**Figure 10: Radial moderator density distribution for the uncontrolled case where the maximum axial power occurs (at axial mesh 20 or  $z = 70.0\text{cm}$ )**

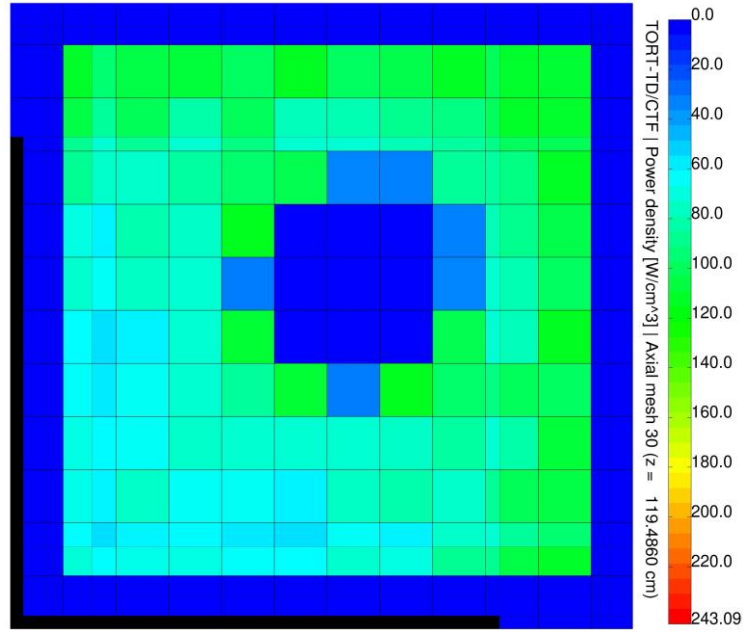


Figure 11: Radial power density distribution for the controlled case where the control blades (in black) are inserted (at axial mesh 30 or  $z = 119.5\text{cm}$ )

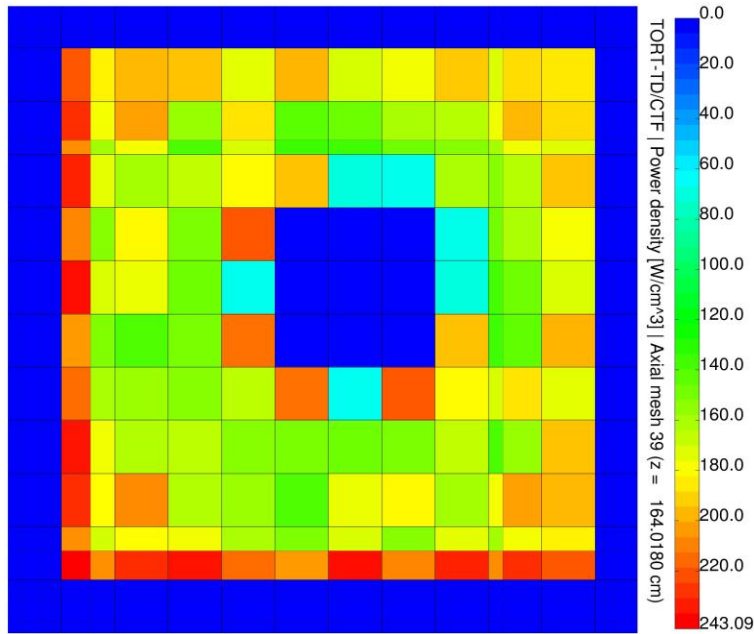
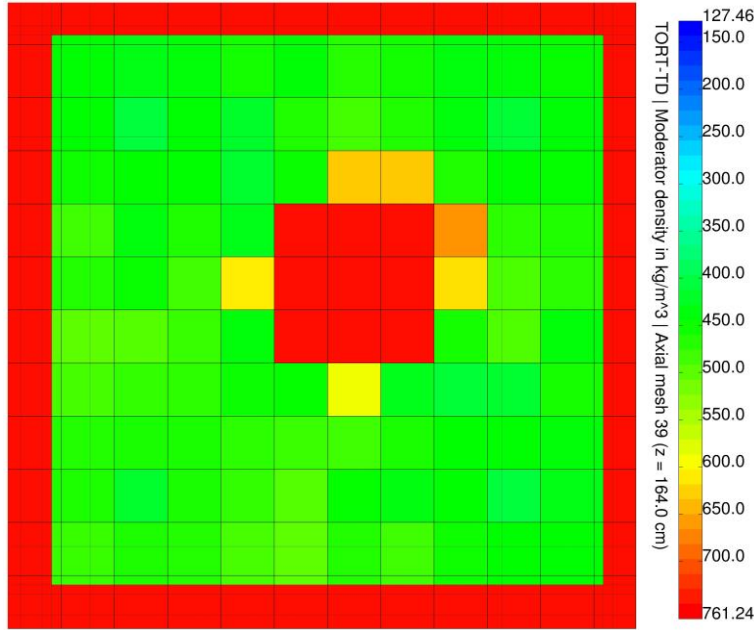


Figure 12: Radial power density distribution for the controlled case where the maximum axial power occurs (at axial mesh 39 or  $z = 164.0\text{cm}$ )



**Figure 13: Radial moderator density distribution for the controlled case where the maximum axial power occurs (at axial mesh 39 or  $z = 164.0\text{cm}$ )**

In the partially inserted control blade case, different radial power distributions can be observed. First, where the control blades are inserted (until  $z=122\text{cm}$ ), compared to the uncontrolled case, a shift in the distribution from the surroundings of the water channel to the north-east (as far from the control blades as possible) can be observed in Figure 11.

As soon as the control blades influence is negligible, the power distribution starts shifting from the north-east to the south-west of the assembly (toward the uncontrolled power distribution) as shown in Figure 12. The corresponding radial moderator distribution is provided in Figure 13.

All of the obtained results as discussed above show the expected tendencies, so confirming the BWR steady-state modeling capability of TORT-TD/CTF. Future studies will include comparisons with other TORT-TD modeling options ( $\text{SN}_4$  instead of  $\text{SN}_8$ , diffusion approximation, less number of energy groups, etc.) and other simulation tools as part of the verification process. If available, comparisons with measured are also planned data in order to validate TORT-TD/CTF for steady-state BWR applications.

### 5.3. Transient Analysis

After examination of the steady-state mode, a mass-flow reduction transient was simulated. Starting from the uncontrolled case, after 1 s of null-transient, the inlet mass-flow is reduced by approximately 10% within one second (see Figure 14). As expected, this causes a decrease of the assembly power which can be seen in Figure 15.

This transient calculation has also shown that optimization work is necessary for the time synchronization algorithm. In the current version, the time step size is chosen by CTF and TORT-TD is following this time step. CTF needs very small time steps (in the present

case around 1.7 ms) for simulating high void fraction, while TORT-TD could converge with much larger time steps. The new algorithm should only call TORT-TD when the thermal-hydraulic feedbacks have changed sufficiently to significantly influence the neutron flux. Therefore, the accuracy would be retained, whereas the computational efficiency may increase greatly.

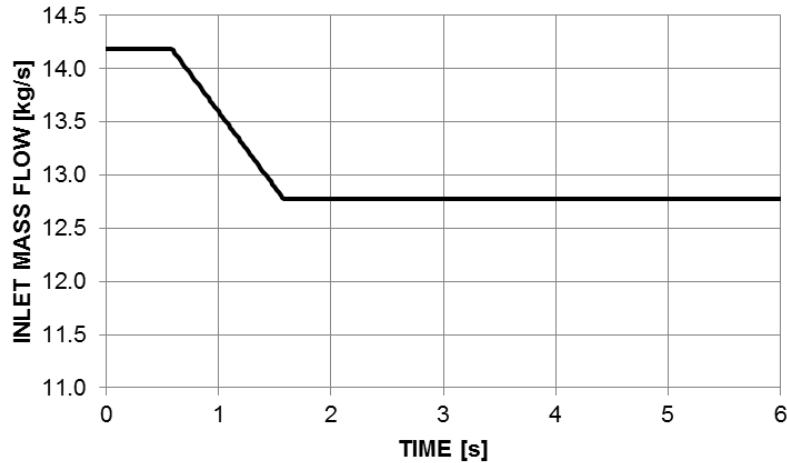


Figure 14: Inlet mass flow rate time history

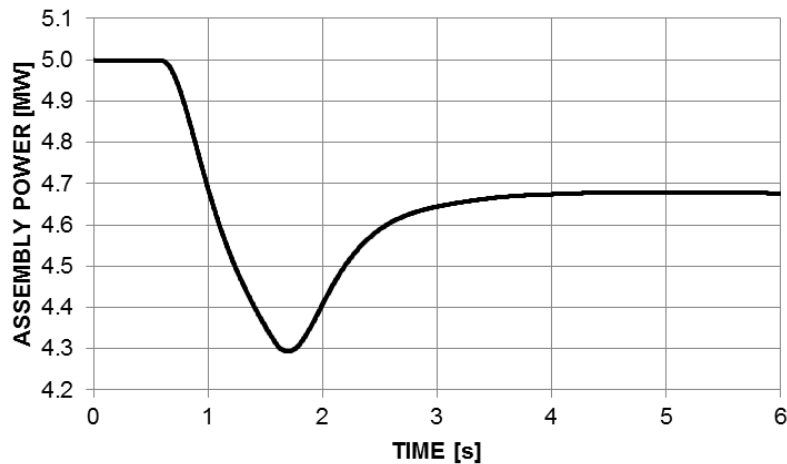


Figure 15: Assembly power time history

## 6. CONCLUSIONS

This paper addresses the need to extend the model capability of current “best-estimate” coupled codes for design and safety assessment in such a way that the prediction of the fuel rod response is possibly based on local parameters. It describes the application of the developed TORT-TD/CTF tool to BWR assembly calculations on a pin cell/subchannel level.

The developed neutronics and thermal-hydraulics models are presented along with the utilized coupling schemes for BWR assembly steady state and transient calculations. The obtained results, as discussed above, are reasonable and show the expected tendencies, which confirms the BWR steady-state and transient modeling capability of TORT-TD/CTF. Future studies will include comparisons with other simulation tools in order to validate TORT-TD/CTF for steady-state and transient BWR applications.

## ACKNOWLEDGEMENT

This work is supported by the German Federal Ministry of Economics and Technology.

## REFERENCES

1. A. Seubert, K. Velkov and S. Langenbuch, “The Time-Dependent 3-D Discrete Ordinates Code TORT-TD with Thermal-Hydraulic Feedback by ATHLET Models”, Physor 2008, Interlaken, Switzerland, September 14-19, 2008.
2. W. A. Rhodes and D. B. Simpson, “The TORT Three-Dimensional Discrete Ordinates Neutron/Photon Transport Code,” ORNL/TM-13221, Oak Ridge National Laboratory (1997).
3. A. Pautz and A. Birkhofer, “DORT-TD: A Transient Neutron Transport Code with Fully Implicit Time Integration,” *Nucl. Sci. Eng.*, **145**, pp.299–319 (2003).
4. M. Christienne, M. Avramova, Y. Perin, and A. Seubert, “Coupled TORT-TD/CTF Capability for High-Fidelity LWR Core Calculations,” PHYSOR 2010 Conference, Pittsburgh, Pennsylvania, (2010).
5. “Physics of Plutonium Fuels BWR MOX Benchmark,” NEA/NSC, Working party on physics of plutonium fuel and innovative fuel cycles, Vol. VII, 2003.
6. J. Kronenberg, M. Avramova, and F. Burtak, “COBRA-TF - a Core Thermal-Hydraulic Code: Validation Against GE 3x3 Experiment”, Annual Meeting on Nuclear Technology 2003, Proceedings, ISSN 0720-9207, pp. 105 – 109.
7. M. Avramova, et al., “Analysis of Steady State and Transient Void Distribution Predictions for Phase I of the OECD/NRC BFBT Benchmark using CTF,” *Proceedings of NURETH-12 Conference*, Pittsburgh, Pennsylvania, U.S.A. September 30-October 4, 2007.
8. J. J. Casal, R. J. J. Stamm’ler, E. A. Villarino, A. A. Ferri, “HELIOS: Geometric Capabilities of a New Fuel-Assembly Program”, Intl. Topical Meeting on Advances in Mathematics, Computations, and Reactor Physics, Pittsburgh (1991).

# VALIDATION OF KENOREST WITH LWR-PROTEUS PHASE II SAMPLES

*M. Wagner, R. Kilger, A. Pautz, W. Zwermann \**,  
*P.Grimm, A. Vasiliev, H. Ferroukhi \*\**

**\* GRS, 85748 Garching n. Munich, Germany**

**\*\* Paul Scherrer Institut, CH 5232 Villigen PSI, Switzerland**

## Introduction

The nuclide inventory of irradiated fuel determines its characteristics concerning nuclear safety and implies its criticality, radiological and thermal characteristics for transport, interim storage and final disposal. Thus the accurate prediction of the inventory of spent nuclear fuel is of utmost importance and it requires a thorough validation of the calculational tools. The LWR-PROTEUS phase II program, which is carried out in cooperation between the Swiss Nuclear Utilities and PSI, studied a set of well characterised highly burnt fuel samples. Reactivity and inventory measurements of spent fuel have been performed and offer data on a large set of actinides and fission products [1]. In order to broaden the validation basis of the burnup code KENOREST [2] the isotopic inventory of two samples, irradiated in a Swiss PWR, have been calculated and compared to experiment. The same samples have previously been analyzed using CASMO-4E [1] as well as HELIOS and SCALE/TRITON [3]. The calculations described in this paper have been performed in cooperation with PSI and the results are compared with those obtained by PSI using CASMO-4E.

A special interest has been in studying the effect of the surrounding fuel assemblies. In most burnup calculations an infinite lattice of the same fuel assembly is modeled whereas in reality the situation is more complex. The surrounding fuel assemblies usually have different compositions, due to for example different burnups or different enrichments, and therefore different neutron spectra. The influence of these differences in the spectra is studied by also modeling the next neighbor fuel assemblies.

## Calculational Methods

The two samples, named U1 and U2, were cut from uranium dioxide fuel rods irradiated in a Swiss nuclear power plant. U1 was irradiated for two cycles of twelve months each. The rod was situated at the outer periphery of the fuel assembly and thus is suited for studying the influence of surrounding fuel assemblies. The burnup reached was determined to be around 36 GWd/tHM by a nodal core simulation of the fuel vendor. However, that value is subject to uncertainties. At PSI the burnup has been determined by measuring the burnup monitor Nd-148. The value extracted from this measurement significantly differs from the value provided by the fuel vendor. This determination of course also includes theoretical calculations and assumptions. In order to obtain the actual burnup one calculates an average fission yield from the four main fissionable nuclides. Thus the uncertainties imply for example the



uncertainty from the determination of the fractions of these nuclides and the fission yield data itself. In order to use the information from the measurement as directly as possible, the power history in KENOREST has been modified such that the Nd-148 concentration is exactly reproduced. As modification of the power history a simple rescaling of the power has been utilized. It should be mentioned that the resulting burnup in this method lies in between the value inferred from the measured Nd-148 concentration and that specified by the fuel vendor.

The irradiation histories of the samples were also provided by the nodal core simulation. The power, the moderator temperatures, the fuel temperatures and the boron concentrations are given at a few time points per cycle.

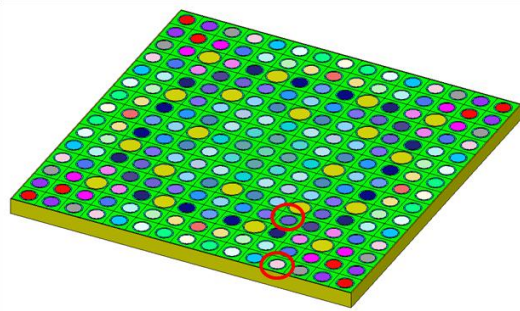
The sample U2 was irradiated for three twelve month cycles and the burnup reached as determined by the fuel vendor was about 52 GWd/tHM. This rod was situated next to a guide tube three rows away from the periphery and one cannot expect a big influence from the surrounding fuel assemblies. Therefore calculations taking into account the environment for this sample have not been performed.

### ***KENOREST***

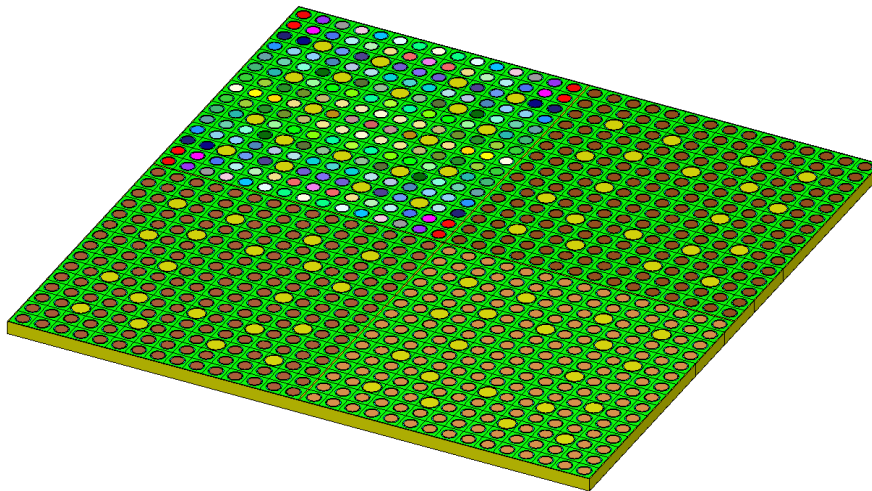
KENOREST [2] is a reactivity and inventory code system representing a coupling of the one dimensional burnup and reactivity code system OREST [4] with the three dimensional Monte Carlo Code KENO Va from the SCALE code package [5]. It provides accurate geometric modeling for flux calculations of a fuel assembly in the reactor core environment for depletion calculations. The flux spectra and cross section calculations are performed by an extended version of the pin cell code HAMMER [4]. The neutron data libraries for the different parts of the code system are based on data from JEF-2.2., ENDF/B-VI, JENDL-3.2 and EAF97.

The standard calculation for both samples is performed using the burnup scaled to fit the measured Nd-148 concentration. A burnup averaged constant coolant temperature is used based on the specifications given by the core simulation of the fuel vendor. The values for coolant temperature, boron concentration and fuel temperature are given at a few points for each cycle. In KENOREST more time steps are chosen in order to get a finer feedback from the inventory to the flux calculation and to the determination of the cross sections. The boron concentration for these intermediate steps is linearly interpolated from the given values. For the sample U1 the fuel temperature does not vary much and thus one constant average temperature is chosen for the whole calculation, which was determined by TESP-ROD [6], a code to determine fuel rod behavior. For sample U2 there is more variation in the fuel temperature and a constant temperature is not sufficient. Thus, the fuel temperature was calculated internally in KENOREST using an effective gap width in the model in order to reproduce approximately the values calculated by TESP-ROD for the different time steps.

Sample U2, for which the environment cannot be expected to have any influence, was modeled as an infinite array of the same fuel assembly and the environment has not been taken into account. In Figure 1 the KENOREST geometry model of the fuel assembly for sample U2 is shown. This model is the same as the geometrical model for sample U1 without environment.



**Figure 1 :** KENOREST model of the fuel assembly for sample U2 and for sample U1 without environment. The encircled rods are the positions of sample U1 and sample U2.



**Figure 2 :** KENOREST model for the sample U1 including the surrounding fuel assemblies.

In Figure 2 the KENOREST model for sample U1 taking into account the environment can be seen. In addition to the fuel assembly of interest, three of the surrounding assemblies have been modeled. The modeling of more fuel assemblies should not improve the calculation, since the fuel assemblies on the opposite side of the sample rod can not be expected to have any influence on the results.

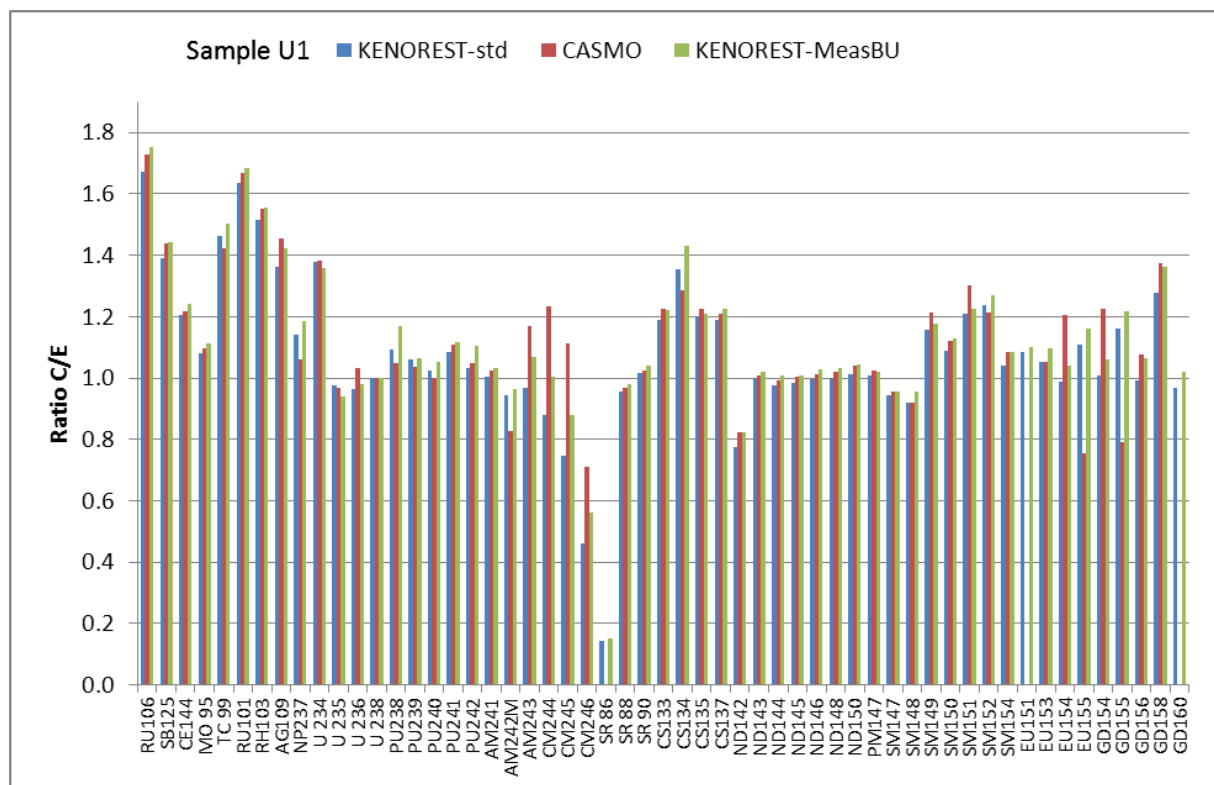
In one case the three surrounding assemblies are modeled with one constant average burnup over both cycles. This average burnup has been chosen according to the burnup of the direct neighbor. In a second calculation the surrounding fuel assemblies are also depleted. A few separate burnup calculations have been performed to obtain the inventory of the surrounding fuel assemblies at the beginning of each cycle. This fuel with the specified burnup is inserted in the rods of the surrounding fuel assembly and depleted over the cycles. This case is the most realistic consideration of the environment. Although the rods in the surrounding assemblies in principle also have different inventories, they have been modeled with one average fuel composition, which suffices for studying the effect of the environment.

## Results

At first the most straightforward KENOREST calculation is compared to the experiment and to the results of CASMO-4E with a library based on ENDF/B-VI data.

Based on these results the influence of taking into account the surrounding fuel assemblies will be discussed and compared to this standard calculation. In order to directly compare to the CASMO-4E results, the results for the calculation with the same burnup as used in CASMO-4E are also shown.

The results for the calculation of sample U1 with the standard configuration are shown in Figure 3 in terms of the ratios of calculated and experimental (C/E) nuclide concentrations. The left bar shows the standard calculation, the middle bar the CASMO-4E calculation and the right bar the KENOREST calculation with the same burnup value as in CASMO-4E. The experimental uncertainties for both samples are typically in the range of 1–3%, but larger values occur for some nuclides, especially in case of very low concentrations.



**Figure 3 :** KENOREST results for two burnup values for sample U1 in comparison to CASMO-4E and the experiment.

The results for most of the metallic fission products, Ru-106, Sb-125, Ce-144, Tc-99, Ru-101, Rh-103 and Ag-109 show large deviations. Deviations for metallic fission products have also been found in comparing KENOREST results with experimental data from the ARIANE program [7]. A possible reason for the problems might be the known difficulties in dissolving these nuclides in the chemical analysis, which has already been discussed [7]. Another indication that there might be a problem with the experimental uncertainty is that the KENOREST results agree quite well with the CASMO-4E results. Fitting the power history to the concentration of Nd-148, the U-235 concentration is well reproduced. Using the power history as in CASMO-4E the U-235 concentration is underpredicted by about 6 percent. The Np-237 concentration is overpredicted compared to experiment and also compared to CASMO-4E. A reason might be that the capture cross section U-236 to U-237, which then decays to Np-237, might be too large in KENOREST. A similar overprediction could be found from the comparisons to data from Takahama-3 but could not be found for the MOX sample BM5 from the ARIANE program.

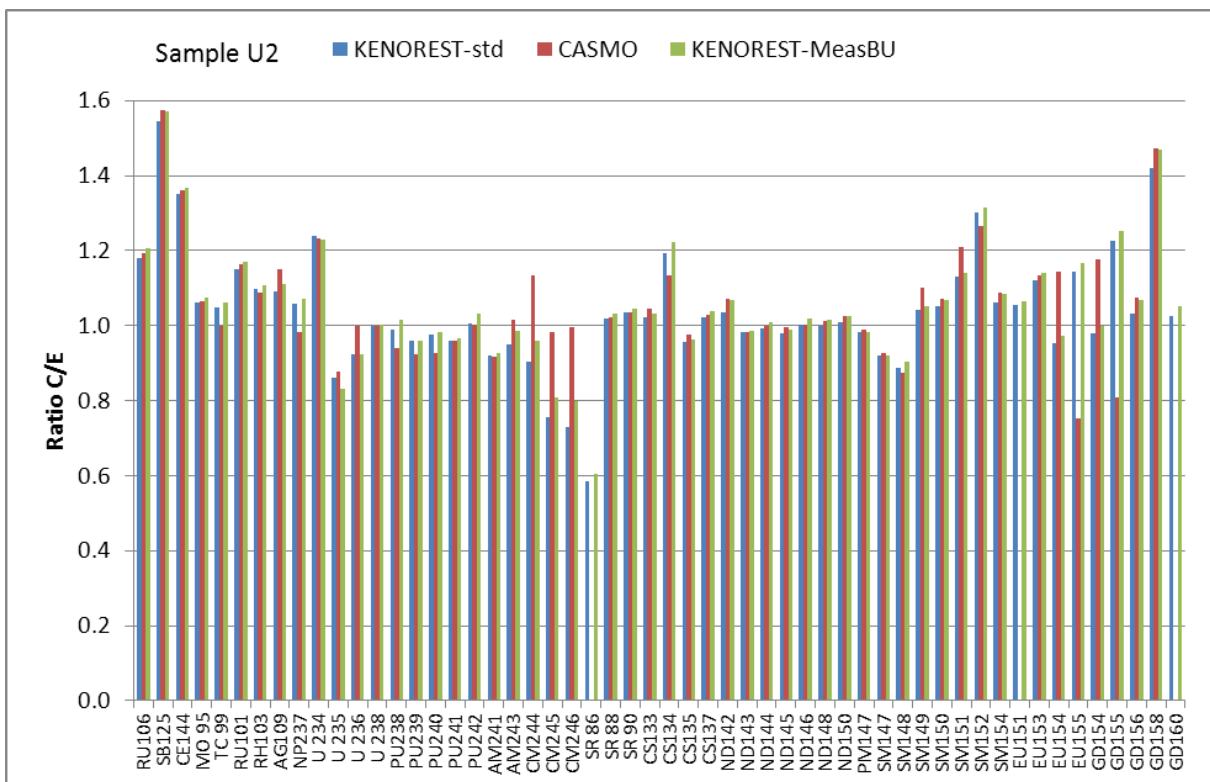
The overprediction of Pu-238 can be explained by the already discussed overprediction of Np-237. A small deviation can also be seen for Pu-239, which is quite sensitive to the fuel temperature since the Doppler broadening has a big influence on the capture in U-238. CASMO-4E also slightly overpredicts the Pu-239 value. The remaining plutonium isotopes are produced by successive captures starting at Pu-239 and thus the deviations can be explained by the overprediction of Pu-239.

The curium isotopes are generally underpredicted. One sees that for the higher isotopes there is a tendency to an increased deviation. In general this trend of decreasing C/E ratios can also be found in the CASMO-4E results, but the value for Cm-244 is much bigger and therefore some isotopes are even overpredicted. The problem for the higher isotopes of curium has already been known and will be investigated further. A new set of cross sections [8] will be implemented, which is supposed to improve the results. It should also be mentioned that due to the complicated production path the curium isotopes are sensitive to many details of the power history. Especially the influence of scaling the power is clearly visible.

The results for the cesium isotopes in KENOEST as well as in CASMO-4E show a quite large overprediction, which could not be found in previous calculations.

The gadolinium and europium isotopes are quite well reproduced by KENOEST and amongst the important isotopes only Gd-155 shows a significant deviation.

Sr-86 has a very low concentration, is stable and does not contribute significantly to the reactivity reduction. Thus the isotope is rather unimportant concerning fuel characteristics and the deviation is not considered to be very relevant.



**Figure 4 :** KENOEST results for two burnup values for sample U2 in comparison to CASMO-4E and the experiment.

In Figure 4 the results of the KENOEST calculations for sample U2 are shown in comparison to the experiment and CASMO-4E. Again the metallic fission products are overpredicted but not as pronounced as for sample U1. For most of these

nuclides the deviations are within 10% and only for Sb-125 larger deviations are seen.

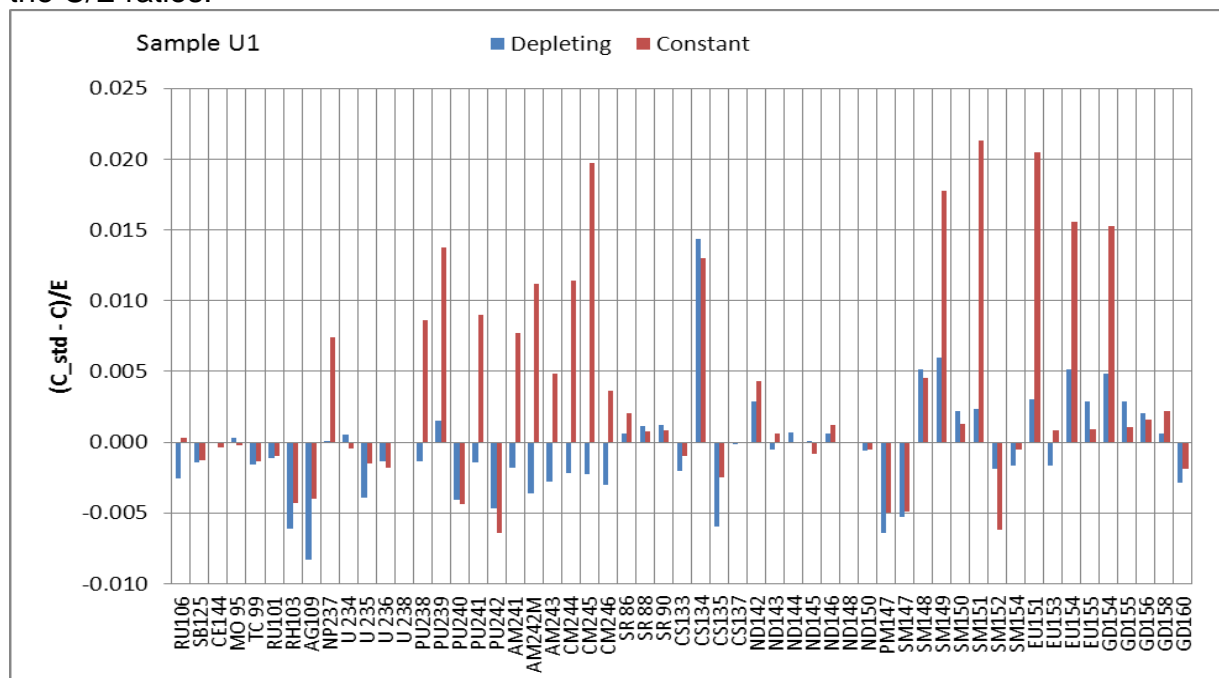
For sample U2 the remaining U-235 concentration is quite low since it has a higher burnup and a lower initial enrichment than sample U1. This might explain the deviations between the calculations and the experiment as seen in Figure 4.

The Pu-239 concentration for sample U2 is slightly underpredicted as compared to the slight overprediction for sample U1.

The cesium isotopes for sample U2 are well reproduced and only Cs-134 shows some deviation. Thus the overprediction seen in sample U1 does not appear for this case. The remaining isotopes show the same behavior as in the previous case and do not need to be discussed separately.

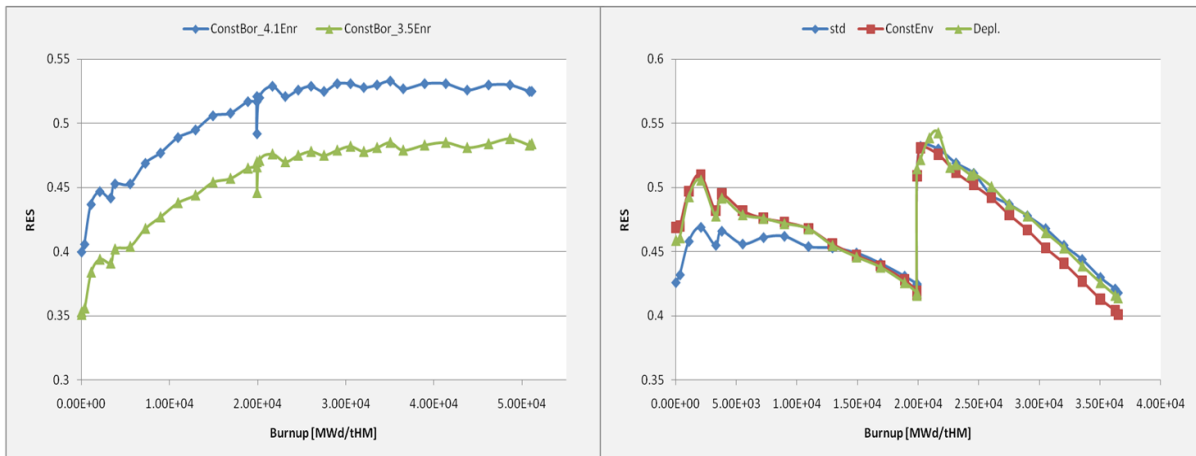
### ***Influence of surrounding assemblies***

In Figure 5 one sees the difference between the calculations taking into account the surrounding fuel assemblies and the standard calculation in terms of the difference of the C/E ratios.



**Figure 5 :** Difference of the C/E ratios of the KENOREST calculations with and without taking into account the surrounding fuel assemblies.

The differences are very small and only a few nuclides show changes of more than one percent. Especially for the case of the depleting environment the changes are quite small. In order to understand the absence of change, the spectral parameter “res” is used, which is proportional to the ratio of the epithermal to the thermal flux and thus is a good indicator for the hardness of the spectrum. In order to see the effect of the burnup on the spectrum, the left side of Figure 6 shows the parameter “res” as a function of burnup for a constant boron concentration. The remaining parameters have been chosen basically as in the standard configuration with an extended irradiation time to see the evolution of the spectrum also for higher burnups. In addition two different initial enrichments have been used in order to study the effect of this parameter on the spectrum.



**Figure 6:** Spectral parameter RES as a function of burnup for two different enrichments and a constant boron concentration (left) and spectral parameter RES of sample U1 as function of burnup with and without taking into account the environment (right).

One sees that for both curves after about 20GWd/tHM the spectrum does not change significantly. The calculation with the lower enrichment shows the same shape but has a general offset to the second curve.

In both cycles the surrounding fuel assemblies have a lower enrichment than sample U1 and the enrichment of the surrounding assemblies in the second cycle is higher than in the first cycle. In addition the burnup of the direct neighbor assembly is well beyond 20 GWd/tHM. Thus, a hardening of the spectrum can only be expected at the beginning of the first cycle, and since the enrichment of the surrounding assemblies is lower, the effect should vanish somewhere between 10 and 20 GWd/tHM. In the second cycle the environment can even have a contrary effect and soften the spectrum due to the lower enrichment compared to sample U1. The kink at about 20 GWd/tHM is due to a 25 day break after the first cycle. In that time the reactor poisons decay to a large extent and therefore the spectrum in the very first time step is softer.

The behavior discussed in the previous paragraph is demonstrated on the right side of Figure 6. Up to about 12 GWd/tHM a hardening of the spectrum can be observed in case the environment is considered. Afterwards there is hardly any effect visible and beyond 25GWd/tHM one can see a slight softening of the spectrum for the constant environment. For the depleting environment, there is only a very slight softening visible. This can be explained by the fact that the enrichment of the direct neighbor fuel assembly is higher in the second cycle than in the first. In the case of the constant environment the enrichment of the neighbor in the first cycle was used throughout the two cycles, whereas the actual enrichments were of course taken into account for the depleting case. The strong increase at 20 GWd/tHM is explained by the sudden jump of the boron concentration from 0 in the last step of the first cycle to the maximum in the first step of the second cycle.

## Summary

In order to broaden the validation basis of the reactivity and nuclide inventory code KENOREST two samples of the LWR-PROTEUS phase II program have been calculated and compared to the experimental results. In general most nuclides are reproduced very well and agree within about ten percent with the experiment. Some



already known problems, the overprediction of metallic fission products and the underprediction of the higher curium isotopes, have been confirmed.

One of the largest uncertainties in the calculation was the burnup of the samples due to differences between a core simulation of the fuel vendor and the burnup determined from the measured values of the burnup indicator Nd-148.

Two different models taking into account the environment for a peripheral fuel rod have been studied. The more detailed model included the three direct neighbor fuel assemblies depleted along with the fuel rod of interest. The influence on the results has been found to be very small. Compared to the uncertainties from the burnup, this effect can be considered negligible. The reason for the low influence was basically that the spectrum did not get considerably harder with increasing burnup beyond about 20GWd/tHM. Since the sample reached burnups far beyond that value, an effect could not be seen.

In the near future an update of the used libraries is planned and it will be very interesting to study the effect on the results, especially for Curium.

### **Acknowledgements**

The LWR-PROTEUS-Phase II project is being conducted jointly by PSI and the Swiss Nuclear utilities with specific contributions from Alpiq AG. The work of GRS is supported by the German Federal Ministry of Economics and Technology. M. W. also would like to thank PSI for their kind hospitality.

### **References**

- [1] P. Grimm, I. Günther-Leopold and H.D. Berger, "Burnup Calculations and Chemical Analysis of Irradiated Fuel Samples Studied in LWR-PROTEUS Phase II", Proc. PHYSOR 2006, Vancouver, Canada, September 10-14, 2006.
- [2] U. Hesse, S. Langenbuch, "KENOREST, eine direkte Kopplung von KENO und OREST", GRS-A-2783, Dezember 1999.
- [3] S. Tittelbach, T. Mispagel, P.-W. Phlippen, "Comparison of SCALE/TRITON and HELIOS Burnup Calculations for High Burnup LWR Fuel", Proc. Annual meeting on nuclear technology, Dresden, Germany, May 12-14, 2009.
- [4] U. Hesse, W. Denk, H. Deitenbeck, "OREST – eine direkte Kopplung von HAMMER und ORIGEN zur Abbrandsimulation von LWR-Brennstoffen" GRS-63, November 1986.
- [5] "SCALE: A Modular Code System for Performing Standardized Computer Analyses for Licensing Evaluation, Version 6", ORNL/TM-2005/39 (2009).
- [6] H. G. Sonnenburg, E. Hofer, A. Kloos, "Methodenentwicklung zur Analyse des Brennstabverhaltens bei erhöhtem Abbrand", GRS-A-3079, November 2002.
- [7] A. Pautz, U. Hesse, K. Hummelsheim, R. Kilger, M. Kirsch, S. Langenbuch, F. E. Moser, M. Wagner, W. Zwermann, „Methodenentwicklung zum Hochabbrand einschließlich Burnup Credit“, GRS-A-3491, August 2009.
- [8] O. Iwamoto, T. Nakagawa, N. Otuka, S. Chiba, K.Okumura, G. Chiba, "Development of JENDL Actinoid file", PHYSOR 2008.

# **DORTOREST – A NEW COUPLED TRANSPORT/BURN-UP CODE SYSTEM**

**Volker Hannstein, Markus Wagner, Andreas Pautz, Winfried Zwermann**

Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH,  
Forschungszentrum, Boltzmannstrasse 14, 85748 Garching, Germany

Volker.Hannstein@grs.de, Markus.Wagner@grs.de, Andreas.Pautz@grs.de,  
Winfried.Zwermann@grs.de

## **Introduction**

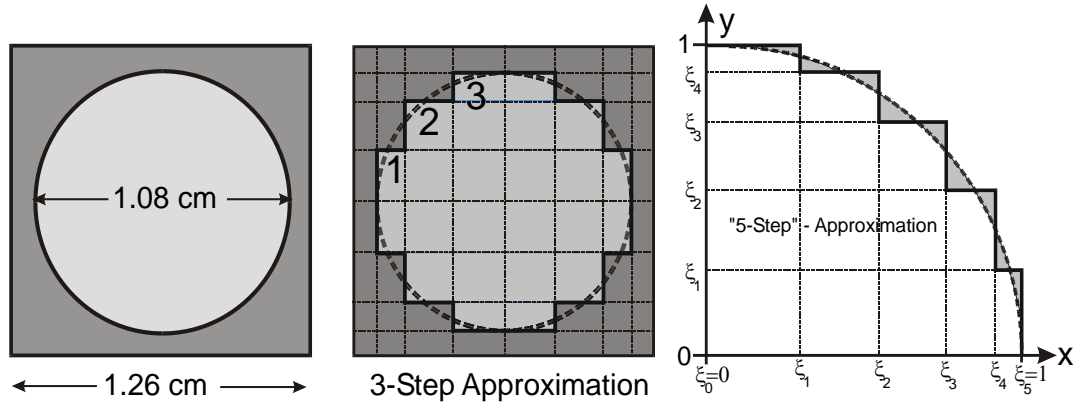
The precise pin-wise determination of the nuclide inventory and neutronic properties of irradiated fuel assemblies is an important task in various areas of nuclear technology such as criticality safety of spent fuel or the generation of cross section input for full core reactor calculations. Modern code systems for this purpose typically couple a two- or three-dimensional transport solver to a depletion code in an iterative fashion. The employed transport code can be either a Monte-Carlo code or a deterministic solver. The former has major advantages concerning the flexibility and accuracy in modeling the fuel assembly geometry, the latter usually offers faster convergence and higher accuracy when a very high resolution in space and energy is required; this is especially important, when one is interested in the extraction of spatially homogenized few group cross-sections for full core reactor physics calculations. Based on the GRS-developed KENOREST the new coupled deterministic burn-up code DORTOREST is presented here. A description of the main properties is given and first application results are presented, including the participation in the OECD/NEA Expert Group on Burn-up Credit benchmark on reactivity worth calculations.

## **Description of the DORTOREST Code System**

The DORTOREST code system is based on the established burn-up code system KENOREST which has been under development in GRS over the last 15 years [1]. KENOREST couples the well-known Monte-Carlo transport code KENO-Va/VI from the SCALE package [2] with the 1D burn-up code OREST. OREST itself consists of the spectral code HAMMER and the depletion code ORIGEN. In DORTOREST, KENO has been replaced by an extended version of the deterministic 2D transport code DORT [3]. This extended version is the result of extensive work done by GRS in the past, adding features like cross section homogenization and group collapsing capabilities [4] and the possibility of treating time-dependent problems [3]. For the use in the DORTOREST system a simple way of modeling fuel assembly geometry representations is of special importance. For this purpose, the extended DORT comes with a keyword-based input processor [5]. Since the code DORT has to use a



Cartesian grid to represent the circular fuel rods inside the rectangular moderator pin cells, a rather complicated geometric model is hidden behind the input processor. In this model, the circular perimeters of each fuel pin are described by a “stair case” or “step” function, which is constructed such as to approximate the circular fuel pin, gap and cladding structures as close as possible. The principle is depicted in Figure 1 for a 3- and 5-step approximation. For the generation of the step values  $\xi_0$  to  $\xi_5$  in Figure 1 (right), the geometric “distance” between fuel perimeter and step function is



**Fig. 1 Original pin cell geometry; middle: an approximate fuel pin model for a “3-step” representation; right: a sketch of the minimization principle used to evaluate the “step” or “stair case” coordinate**

minimized, while strictly conserving the volumetric fraction of the fuel pin. An n-step approximation of a pin cell with fuel, cladding and moderator therefore consists of  $(4n+1) \times (4n+1)$  Cartesian meshes. It has been shown previously that a 3-step approximation already yields a very good approximation that is sufficient for burn-up calculation purposes. Furthermore, a partial coupling of DORT to KENOREST has already been achieved earlier, in which DORT could be run in parallel to KENO yielding a complementary transport solution for each burn-up step [5].

In order to achieve a fully independent code system, mainly two additional components have been added. The first is an input processor that reads in KENOREST input files, extracts the information needed for a corresponding DORT input, and writes a corresponding DORT input file. In this way, existing (2D) KENOREST models can be readily used to start a DORTOREST run without any additional work. Furthermore, this input processor analyzes a given pin matrix for symmetries and supplies DORT with a quarter assembly or half assembly input if possible, in order to save memory resources and computation time. This utilization of assembly symmetry also works for fuel assemblies with odd numbers of pins in a row due to the fact that the extended DORT is able to deal with half pins and quarter pins. Special geometry features like BWR atrium water channels are also treated properly. The second component concerns the interface which feeds the pin-by-pin flux results into the OREST 1D burn-up sequence. This has been adapted to work with DORT output instead of KENO output. Figure 2 shows two examples for geometry input for DORTOREST.

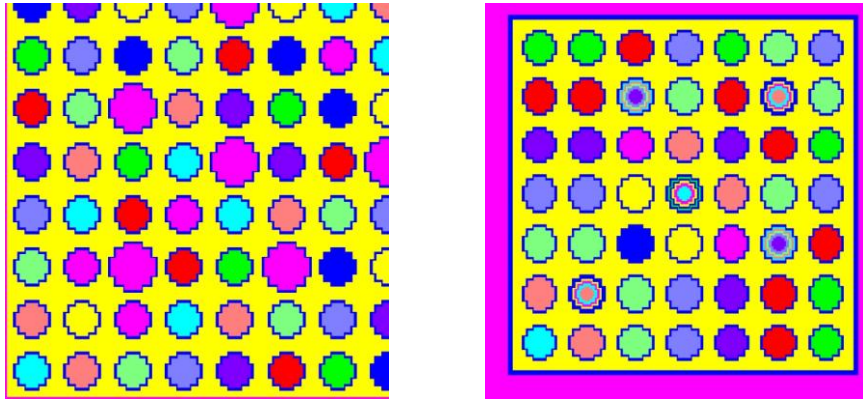


Fig. 2 Geometry plot of a PWR (left) and a BWR (right) fuel assembly model in DORTOREST with a 3-step approximation of the fuel pins

## First Results

The burn-up code system KENOREST has been in use in GRS for over 10 years and was tested in several international benchmarks. It has been shown to be in good agreement with standard burn-up. Therefore, for first tests of the new DORTOREST code system, calculational results were compared against KENOREST as reference. For this purpose a number of typical PWR and BWR assemblies have been simulated both with DORTOREST and KENOREST. In order to illustrate the results obtained a typical KONVOI-type 18x18 PWR fuel assembly, as previously used in a code-to-code comparison [6], has been chosen here as an example for which some of these verification calculations are presented. These assemblies have an 18x18 fuel pin lattice with 24 control rod guide tubes. The pin pitch amounts to 1.28 cm, with a pellet diameter of 0.805 cm and a cladding width of 0.95 cm.

In Figure 3 the multiplication factor  $k_{\text{eff}}$  for a collection of fuel assembly configurations is plotted against burn-up. It can be seen that the DORTOREST value is typically about 0.2 % smaller than the KENOREST value. This seems to be a systematic difference which has already been observed in earlier comparisons between KENO and DORT. Larger deviations occur in assemblies containing gadolinium rods during gadolinium burn-up. However, these deviations disappear after gadolinium burn-up is completed. The origin of these deviations is being investigated at the moment.

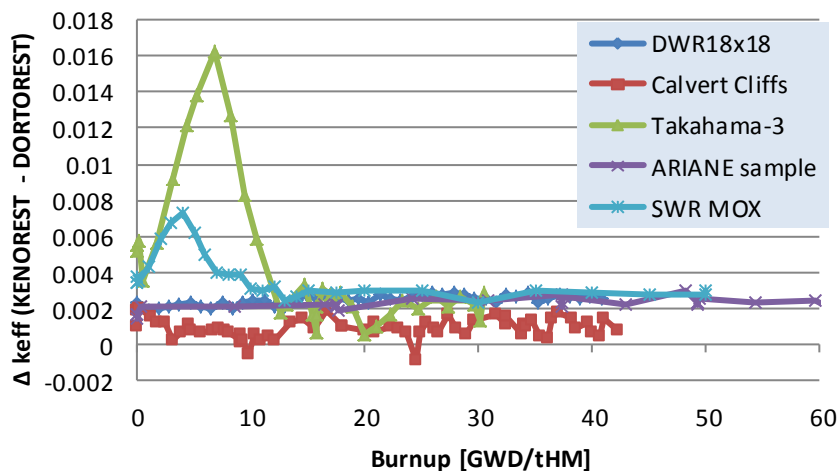


Fig. 3 Difference in the multiplication factor  $k_{\text{eff}}$  between KENOREST and DORTOREST for a range of fuel assemblies plotted versus burn-up

As a second test the normalized pin-by-pin power distributions have been compared for the fresh assembly and after approximately 41 GWd/tHM burn-up. Figure 4 shows the values for DORTOREST calculation. It can be seen that the power distribution is flattened out during burn-up. In Figure 5 the pin-wise difference between DORTOREST and KENOREST power distributions is shown. It can be seen that deviations are slightly larger after burn-up, but are still less than  $\pm 1\%$ .

The third comparison has been done with nuclide inventory of the burned fuel. A number of typical burn-up credit nuclides have been chosen for this purpose. The occurring deviations are largest for nuclides which are known to be calculated with rather high uncertainty in burn-up calculations. Nevertheless, they are always smaller than 0.3% for the assembly average and not more than 1% on a single pin level. Slightly larger deviations have been observed in the simulation of a BWR fuel assembly containing Gadolinium-rods. In this case the maximum difference was 2% for Cm-243/Cm-244.

## The OECD/NEA Expert Group on Burn-up Credit Benchmark on Reactivity Worth Calculations

Besides the verification calculations GRS participates in phase I and II of the eighth Benchmark of the OECD/NEA Expert Group on Burn-up Credit. This benchmark intends to verify the possibility of calculating correctly the effect on reactivity of small amounts of fission products contained in used nuclear fuel. To this end, a model system of PWR type geometry with various levels of sophistication (phase I to IV) has been defined for which the reactivity effect of 25 isotopes with major importance for burn-up credit are to be calculated separately and as a whole. The quantities of interest are the multiplication factor, the neutron flux, the reaction (i.e. absorption, production, scattering) rates for U-235, U-238, O-16, and the added isotope as well as the reactivity variation compared to the system without added isotopes.

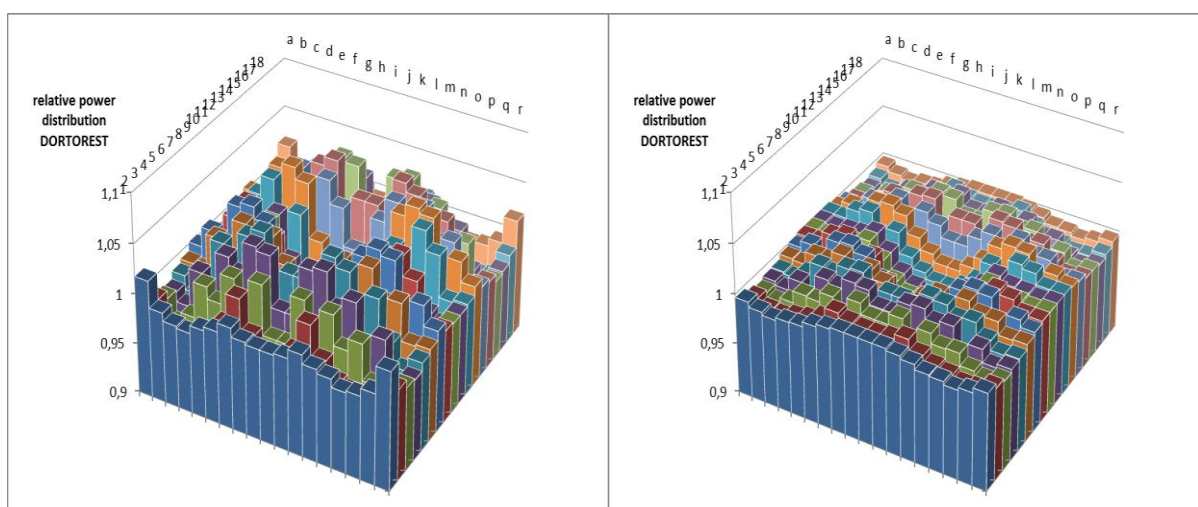
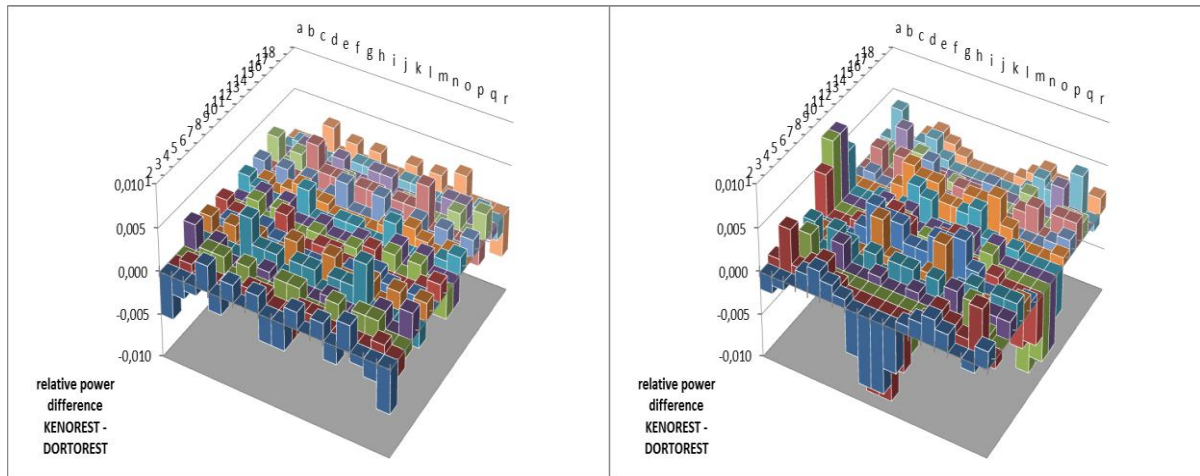


Fig. 4 Pin-by-pin power distribution for a 18x18 PWR fuel assembly as calculated by DORTOREST, left hand side: fresh, right hand side: after 41 GWd/tHM burn-up.



**Fig. 5 Calculated relative power difference between KENOREST and DORTOREST, left hand side: fresh, right hand side: after 41 GWd/tHM burn-up**

One solution was created using the transport part of DORTOREST. For this purpose resonance-shielded cross sections were produced using XSDRN from the SCALE package [2] and then fed into DORT using the GIP cross section library format. The geometry specifications of the benchmark were entered using the aforementioned input processor of DORT. In order to have the possibility to crosscheck the results from DORT a second solution was created using the well-known Monte Carlo transport code MCNP. For the latter solution reactivity variations from perturbation theory have also been calculated using the “PERT card” of MCNP. A typical sample of the results is shown in Tab. 1. In this table the results for Ru-101 are shown for phase I, i.e. for a simple pin cell model. The multiplication factor shows a typical

	DORTOREST	MCNP	Difference (absolute)	Difference (relative)
multiplication factor	1.38098	1.38850	7.52E-03	0.0054
Neutron flux	1.199e+01	1.211e+01	1.20E-01	0.0100
U-235 absorption rate	6.474e-01	6.500e-01	2.60E-03	0.0040
U-235 production rate	1.309e+00	1.315e+00	6.00E-03	0.0046
U-235 scattering rate	8.186e-02	8.250e-02	6.40E-04	0.0078
U-238 absorption rate	2.775e-01	2.744e-01	-3.10E-03	-0.0112
U-238 production rate	7.176e-02	7.373e-02	1.97E-03	0.0275
U-238 scattering rate	2.640e+00	2.639e+00	-1.00E-03	-0.0004
O-16 absorption rate	1.382e-03	1.426e-03	4.40E-05	0.0318
O-16 scattering rate	1.908e+00	1.916e+00	8.00E-03	0.0042
Ru-101 absorption rate	2.254e-03	2.250e-03	-4.00E-06	-0.0018
Ru-101 scattering rate	4.114e-03	4.136e-03	2.20E-05	0.0053
Total reactivity variation	-1.733e-03	-1.806e-03	-7.30E-05	0.0421
Total reactivity variation from perturbation theory	-	-1.718e-03	-	-
Reactivity variation due to capture	-	-1.707e-03	-	-
Reactivity variation due to scattering	-	-5.174e-06	-	-

**Tab. 1 Benchmark results for Ru-101 (Phase 1)**

offset of about 0.0075. This value is also seen for all other samples. The reaction rates show reasonable agreement, typically in the range of 0.5 - 5%. While U-235 and most additional nuclides are in good agreement, the deviations for O-16 and U-238 are sometimes larger, though still acceptable. These results give another independent confirmation of the validity of the step function approximation used in DORTOREST.

## Conclusions

The new burn-up code system DORTOREST complementary to the existing GRS-developed KENOREST was presented featuring an extended version of the deterministic code DORT as neutron transport solver. First validation results were presented showing good agreement with results obtained from KENOREST. Additionally, the results for the Eighth Benchmark of the OECD/NEA Expert Group on Burn-up Credit with DORTOREST and MCNP were reported. In the future a broader validation of DORTOREST will be done including a comparison against other available burn-up codes.

## Acknowledgements

This work is supported by the German Federal Ministry of Economics and Technology.

- [1] U. Hesse, S. Langenbuch, W. Zwermann: "*Nuclear Codes and Data Libraries at GRS for Reactivity and Nuclide Inventory Calculations*", Eurosafe 2003, Paris, Nov. 25-26, (2003) See also:  
R. Kilger, U. Hesse, S. Langenbuch: "*Isotopic inventory calculations taking into account 2D/3D environment conditions during fuel irradiation*", PHYSOR 2008, Interlaken, September 2008
- [2] SCALE: A Modular Code System for Performing Standardized Computer Analyses for Licensing Evaluations, ORNL/TM-2005/39, Version 6, Vols. I III, January 2009. Available from Radiation Safety Information Computational Center at Oak Ridge National Laboratory as CCC-750
- [3] A. Pautz, A. Birkhofer, "*DORT-TD: A Transient Neutron Transport Code with Fully Implicit Time Integration*", *Nuclear Science and Engineering*, Vol. 145, pp. 299-319, (2003)
- [4] A. Pautz: "*Application of the Discrete Ordinates Code DORT to Fuel Lattices: Benchmark Results and improved Cross Section Generation Capabilities*", Mathematics and Computation, Avignon, September 2005
- [5] A. Pautz: "*Improved Strategies for Fuel Assembly, Pin Cell and Reflector Cross Section Generation Using the Discrete Ordinates Code DORT*", PHYSOR2006, Vancouver, September (2006)

- [6] U. Hesse, S. Langenbuch, W. Zwermann, D. Porsch, W. Bernnat: "Comparison Of Burn-Up Calculations For a UO<sub>2</sub> PWR Fuel Assembly", Jahrestagung Kerntechnik 2007, Karlsruhe, May 2007
- [7] P. Leconte, A. Santamarina: "*Calculational Benchmark for the Analysis of Small-Sample Reactivity Experiments*", OECD/NEA Expert Group on Burn-up Credit

## 12 Verteiler

		Exemplare: gedruckt	Exemplare: pdf	CD- ROM
<b>BMWi</b>				
Referat III C 7		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	(wfp, stj)		je 1 x	
Bereichsleiter	(san, uhl, prg, rot, stc, ver, zir)		je 1 x	
Abteilungsleiter	(luw, som, vek)		je 1 x	
Projektleitung	(zww)	1 x	1 x	
Projektbetreuung	(wal)		1 x	
Informationsverarbeitung	(nit)		1 x	
Bibliothek	(Köln)	1 x		
Autoren	(beh, muh, han, kig, kih, mof, krb, paa, wag, zww)	je 1 x	je 1 x	
<b>Gesamtauflage</b>	<b>Exemplare</b>	<b>24</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)**