

Untersuchung moderner Verfahren zur Berechnung der Abschirmung ionisierender Strahlung



Gesellschaft für Anlagenund Reaktorsicherheit (GRS) mbH

#### Untersuchung moderner Verfahren zur Berechnung der Abschirmung ionisierender Strahlung

Matthias Bock Volker Hannstein Klemens Hummelsheim Sven Keßen

September 2014

#### Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrunde liegende FE-Vorhaben 3612 R 03350 wurde im Auftrag des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz, Bau und Reaktorsicherheit (BMUB) durchgeführt.

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Auftragnehmer.

Der Bericht gibt die Auffassung und Meinung des Auftragnehmers wieder und muss nicht mit der Meinung des Auftraggebers übereinstimmen.

**Deskriptoren:** Abschirmung, CADIS, Gammastrahlung, MAVRIC, MCNP, Neutronenstrahlung, Quellterm-Erstellung, SCALE, Strahlungstransporte

#### Kurzfassung

Die rechnerische Ermittlung der Abschirmung ionisierender Strahlung sowie der Ortsdosisleistung in der Umgebung von Behältern und Einrichtungen zur Lagerung und Handhabung bestrahlter Brennelemente und radioaktiver Abfälle ist ein wesentlicher Baustein bei der Bewertung sicherheitstechnischer Fragestellungen im Rahmen des Brennstoffkreislaufs. Die vorliegende Arbeit hatte daher zum Ziel, aktuelle Entwicklungen im Bereich der Simulationswerkzeuge auf diesem Gebiet zu untersuchen und zu bewerten und eine Analyse bestehender Unsicherheiten durchzuführen.

Das Programm MAVRIC aus dem SCALE-Paket erlaubt durch eine Kombination deterministischer und Monte Carlo Verfahren die vereinfachte Analyse komplexer Probleme im Bereich der Strahlungsabschirmung, die für eine Berechnung mit rein statistischen Verfahren schwer zugänglich sind, und kommt dabei ohne die Einschränkungen in der geometrischen Modellierung aus, die typisch für deterministische Verfahren sind. Anhand von Benchmark-Experimenten aus den Datenbanken SINBAD und ICSBEP für die Problemklassen Skyshine, starke Abschirmung ("Deep Penetration") und Labyrinthartige Systeme wurden die Möglichkeiten dieses Programmpakets quantitativ analysiert. Dabei wurde ein besonderes Augenmerk auf die erreichbare Beschleunigung der Rechnungen bei gleicher Rechengenauigkeit aufgrund der automatischen Varianzreduktion gegenüber einer analogen Monte Carlo Rechnung, d. h. einer Rechnung ohne Varianzreduktion gelegt. Es wurden Stärken und Schwächen der Methode untersucht, und im Zuge dessen auch zwei Hilfsroutinen zur Vereinfachung der Arbeit mit dem Paket entwickelt.

Die Qualität einer Abschirmungsrechnung ist wesentlich durch die Qualität der Quelldefinition bestimmt. Für den Fall, dass die Quelle aus bestrahlten Brennelementen oder hochaktivem Abfall besteht, umfasst die Erzeugung eines Quellterms zunächst die rechnerische Bestimmung des Nuklidinventars und im Anschluss daran die Berechnung des Neutronen- und Gammastrahlungsspektrums mit Hilfe eines Programms, dass Modelle für die zugrunde liegenden physikalischen Prozesse enthält. In der Abteilung Kernbrennstoff der GRS stehen für diese Aufgaben die Eigenentwicklungen OREST zur Inventarbestimmung und NGSRC zur anschließenden Berechnung des Strahlungsquellterms zur Verfügung. Weiterhin ist mit dem Programm ORI-GEN-S/ORIGEN-ARP in dem bereits erwähnten SCALE-Paket alternativ ein externes Programmsystem vorhanden. Im vorliegenden Vorhaben wurden diese Programme

I

einer Bestandsaufnahme unterzogen, bei der die jeweils zugrunde liegenden Modelle analysiert wurden, und anhand von Beispielrechnungen Unterschiede in der Quelltermberechnung quantifiziert wurden.

Anhand eines detaillierten, dreidimensionalen generischen Behältermodells wurden schließlich anhand von Rechnungen mit den Programmen MCNP 5 Version 1.51 und MAVRIC/SCALE6.1.2 verschiedene Ursachen möglicher Unsicherheiten bei der Strahlungstransportrechnung untersucht und quantifiziert. Hierzu wurde eine Serie von Rechnungen durchgeführt, bei denen die wichtigsten Einflussgrößen variiert und die Auswirkungen auf die resultierende Dosisleistung an einer Stelle im Bereich der Tragzapfen bestimmt wurden. Insbesondere bei MCNP 5 wurden auch die Ergebnisse unter Verwendung unterschiedlicher, moderner Wirkungsquerschnittsbibliotheken verglichen.

#### Abstract

The numerical determination of the shielding of ionizing radiation as well as local dose rates in the vicinity of casks and facilities for handling and storage of irradiated nuclear fuel assemblies and radioactive waste is an essential part in the assessment of safety related questions in the nuclear fuel cycle. The work at hand aimed at the review and assessment of recent developments of simulation tools, and to perform analyses on the existing uncertainties in their application.

By combining deterministic and Monte Carlo methods, the MAVRIC code from the SCALE package allows for a simplified analysis of complex problems in the field of radiation transport which are challenging when applying purely statistical methods, and does not suffer from restrictions in the geometrical modelling which are common for deterministic methods. By modelling benchmark experiments from the SINBAD and ICSBEP data bases for the problem classes skyshine, deep penetration, and labyrinth, the capabilities of this program package were analyzed quantitatively. Special focus was put on the achievable acceleration of the calculations at equal calculation accuracy, applying the automatic variance reduction against an analogue Monte Carlo calculation, i. e. a calculation without variance reduction. Strengths and weaknesses of the method have been analyzed, and in the course of that, two supplemental routines for further simplification of work with that package have been developed.

The quality of the radiation source term definition has a major influence on the quality of a shielding calculation. In case of spent fuel assemblies or highly active waste, the source term generation includes the numerical determination of the nuclide inventory, accompanied by the calculation of the neutron and gamma spectrum by using tools which implement models of the underlying physical phenomena. In the Nuclear Fuel Department of GRS, for these tasks the in-house developed codes OREST for inventory determination and NGSRC for source term generation are available. In addition, with ORIGEN-S/ORIGEN-ARP included in the already mentioned SCALE package an alternative external tool is available. In the work at hand, these tools have been reviewed by analysis of the implemented methods, and by comparative calculations to quantify differences in the source term definition.

Finally, by using a detailed three-dimensional generic cask model with MCNP 5 1.51 and MAVRIC/SCALE6.1.2, different sources of potential uncertainties in the radiation

transport calculation are analyzed and quantified. For this purpose, a series of calculations has been performed, varying important input parameters to evaluate the impact on the resulting dose rate in the region of the cask trunnions. Especially with MCNP 5, the results using different modern cross section evaluations have been compared.

### Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Internationaler Stand von Wissenschaft und Technik	5
3	Nachrechnung von Benchmark-Experimenten zur Bewertung aktueller Methoden zur Strahlungstransportrechnung	11
3.1	Labyrinth-artige Anordnungen	13
3.1.1	Modellierung	15
3.1.2	Durchgeführte Rechnungen	16
3.1.3	Ergebnisse	18
3.2	Starke Abschirmung ("Deep Penetration") am Beispiel Reaktordosimetrie	30
3.2.1	Modellierung mit MAVRIC	34
3.2.2	Ergebnisse	39
3.3	Streuung von Neutronenstrahlung an Luft (Skyshine)	52
3.3.1	Modellierung	54
3.3.2	Ergebnisse zur Quellverifikation	57
3.3.3	Ergebnisse der Rechnungen zu den Skyshine-Detektoren	63
3.4	Hilfsroutinen zur vereinfachten Anwendung von MAVRIC	64
3.4.1	Ausleseroutine zur Ergebnisdatenauswertung	65
3.4.2	Routine zur Gitteroptimierung für die CADIS-Rechnung	65
4	Vergleich von Methoden zur Quelltermbestimmung	67
4.1	Berechnung von Quelltermen	67
4.1.1	OREST und NGSRC	67
4.1.2	SCALE und ORIGEN	68
4.2	Vergleichende Abbrand- und Quelltermberechnungen	68
4.2.1	Auslegung der Vergleichsrechnungen	69
4.2.2	Nuklidinventare	70

4.2.3	Neutronenquellterm	74
4.2.4	Gammastrahlung	81
4.2.5 4.3	Alternative Bibliotheken für ( $\alpha$ ,n)-Reaktionen Zusammenfassung	82 83
5	Analyse eines generischen Behältermodells	85
5.1	Hintergrund	85
5.2	Randbedingungen	86
5.2.1	Generischer Behälter mit homogener Beladung in MCNP	86
5.2.2	Behältermodell in MAVRIC	88
5.2.3	Behälterinventar	90
5.2.4	Quelltermberechnung	91
5.2.5	Wirkungsquerschnitte	97
5.2.6	Berechnung der Äquivalentdosisleistung	100
5.3	Ergebnisse	101
5.3.1	Unterschiedliche Energiegruppenanzahl für die Quelle	104
5.3.2	Unterschiedliche Wirkungsquerschnitte für Eisen	104
5.3.3	Variationen der Quelldefinition	107
5.3.4	Ergebnisse der Vergleichsrechnungen mit MAVRIC	108
5.4	Gesamtübersicht der Ergebnisse	110
5.5	Manteldosisleistung	112
5.6	Diskussion	113
6	Zusammenfassung	115
	Quellenverzeichnis	117
	Abbildungsverzeichnis	125
	Tabellenverzeichnis	129

#### 1 Einleitung

Den Themenbereichen Anlagenrückbau sowie Transport, Lagerung und Entsorgung von abgebrannten Brennelementen und radioaktiven Abfällen wird in den kommenden Jahren eine stetig wachsende Bedeutung zukommen. Daraus ergibt sich eine verstärkte Notwendigkeit, sicherheitsrelevante Fragestellungen auf diesem Gebiet nach Stand von Wissenschaft und Technik zu prüfen und zu bewerten. Wesentliche Elemente hiervon sind die Abschirmung ionisierender Strahlung, die Bestimmung der Ortsdosisleistung in der Umgebung von Behältern und Einrichtungen zur Lagerung und Handhabung bestrahlter Brennelemente und radioaktiver Abfälle. Da genaue Messungen in vielen Bereichen nicht möglich sind, ist die rechnerische Ermittlung der Ortsdosisleistung im Voraus von besonderem Interesse. Je nach Anwendungsbereich können dabei unterschiedliche Arten der Strahlung im Vordergrund stehen. Beispielsweise ist beim Rückbau von Kernkraftwerken im Zusammenhang mit der Aktivierung von Bauteilen speziell die Berechnung des Neutronentransports relevant. Dagegen spielt bei Abschirmungsrechnungen für Transportbehälter auch die γ-Strahlung, also der Photonentransport, eine entscheidende Rolle. Für andere Situationen kann wiederum die korrekte Beschreibung der durch Absorption von β-Strahlen entstehenden Bremsstrahlung eine bedeutende Rolle spielen.

Forschung und Entwicklung auf dem Gebiet der Rechenverfahren zum Strahlungstransport haben in den letzten Jahren die Möglichkeiten bei Abschirmrechnungen deutlich erweitert. Ein wichtiger Teil der Erweiterungen bezieht sich auf Varianzreduktionsmethoden in Monte Carlo Verfahren. Dadurch werden statistische Unsicherheiten und die Konvergenzeigenschaften von Monte Carlo Verfahren verbessert bzw. beschleunigt, und deren Einsatzgebiet erweitert. Vor allem bei Anwendungsbereichen, die mit den bisherigen Methoden nur schwer zuverlässig zu erfassen waren, kann dadurch eine erhöhte Leistungsfähigkeit und Rechengenauigkeit erzielt werden. Insbesondere sind durch diese Neuerungen Fortschritte bei der Berechnung des Strahlungstransports bei Labyrinth-artigen Systemen und bei Anordnungen mit starker Abschirmung zu erwarten. Dies gilt ebenso für die Streuung von ionisierender Strahlung an Luft, dem sog. "Skyshine".

Trotz aller Fortschritte sind Transportrechnungen nach wie vor mit weiteren Unsicherheiten behaftet: Unsicherheiten in der Quelltermerstellung, unvollständige Erfassung der auftretenden Effekte wie Selbstabschirmung oder Sekundäreffekte, Unsicherheiten

1

in den nuklearen Daten, und auch Unsicherheiten in der Modellierung. Dies macht die Überprüfung der Rechenprogramme anhand gemessener Daten zu einer wichtigen Aufgabe. Die internationale Datenbank für Benchmark-Experimente SINBAD (Shielding INtegral Benchmark Archive Database) als Grundlage zur Validierung von Rechensystemen zur Abschirmung wurde in jüngerer Zeit speziell für die oben genannten Herausforderungen wesentlich erweitert. Auch in dem sog. International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments (ICSBEP) /NEA 12/ gibt es eine stetig wachsende Anzahl an Benchmark-Experimenten zu Strahlungstransportrechnungen, die hauptsächlich auf Anwendungen im Bereich der Kritikalitätsalarmsysteme zugeschnitten sind. Diese bieten die Möglichkeit einer systematischen Untersuchung von typischen Problemen für Transportrechnungen sowie einer genaueren Quantifizierung vorhandener Unsicherheiten.

Die Abteilung Kernbrennstoff der GRS beschäftigt sich seit vielen Jahren mit Fragestellungen zur Abschirmung in unterschiedlichen Szenarien. Dazu gehörten in jüngerer Zeit die Berechnung der Dosisleistung für ein generisches Behältermodell /KIG 09/ zusammen mit der Nachrechnung eines Abschirmungsexperiments aus der Datenbank SINBAD /KOD 06/, oder die Berechnung der Neutronenstrahlung im Umfeld eines Reaktors, um die Aktivierung einzelner Komponenten räumlich aufgelöst zu bestimmen /WAG 11/. Weiterhin wurden Strahlungsfelder im näheren Umfeld russischer RITEG-Strahlungsquellen berechnet /PRE 08/. Als international tätige wissenschaftlichtechnische Sachverständigenorganisation ist die GRS bestrebt, ihre Methoden auf dem neuesten Stand zu halten und den Stand von Wissenschaft und Technik im Rahmen ihrer Möglichkeiten selbst mit zu gestalten. Dazu gehören insbesondere die Verfolgung der internationalen Entwicklung und die Erprobung von neuen Verfahren und Methoden. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde eine quantitative Bewertung aktueller Entwicklungen im Bereich der Abschirmrechenverfahren angestrebt, um so in Zukunft Strahlungstransport und Dosisleistung rechnerisch genauer bestimmen zu können und die radiologische Sicherheit z. B. beim Rückbau kerntechnischer Anlagen sowie bei der Handhabung, dem Transport, der Zwischenlagerung und der Entsorgung von abgebrannten Brennelementen und radioaktiven Abfällen zu erhöhen.

Seit Version 6.0 ist in dem amerikanischen Codepaket SCALE /SCA 11/ das gekoppelte deterministisch-stochastische Transportprogramm MAVIRC enthalten. Es ermöglicht eine automatisierte Varianzreduktion für den in das System integrierten Monte Carlo Code MONACO, wodurch die Berechnung auch von schwierigen Problemkategorien ermöglicht wird, die sonst mit Monte Carlo Programmen nur mit erheblichem manuellen Aufwand zugänglich sind. Anhand von Benchmark-Experimenten aus den Datenbanken SINBAD und ICSBEP für die Problemklassen Skyshine, starke Abschirmung ("Deep Penetration") und Labyrinth-artige Systeme wurden die Möglichkeiten dieses Programmpakets quantitativ analysiert. Dabei wurde ein besonderes Augenmerk auf die erreichbare Beschleunigung der Rechnungen bei gleicher Rechengenauigkeit aufgrund der automatischen Varianzreduktion gegenüber einer analogen Monte Carlo Rechnung, d. h. einer Rechnung ohne Varianzreduktion gelegt. Es wurden Stärken und Schwächen der Methode untersucht, und im Zuge dessen auch zwei Hilfsroutinen zur Vereinfachung der Arbeit mit dem Paket entwickelt.

Die Qualität einer Abschirmungsrechnung ist wesentlich durch die Qualität der Quelldefinition bestimmt. Für den Fall, dass die Quelle aus bestrahlten Brennelementen oder hochaktivem Abfall besteht, umfasst die Erzeugung eines Quellterms zunächst die rechnerische Bestimmung des Nuklidinventars und im Anschluss daran die Berechnung des Neutronen- und Gammastrahlungsspektrums mit Hilfe eines Programms, dass Modelle für die zugrunde liegenden Prozesse enthält. In der Abteilung Kernbrennstoff der GRS stehen für diese Aufgaben die selbstentwickelten Programme OREST /HES 86/ zur Inventarbestimmung und NGSRC /QUA 93/ zur anschließenden Berechnung des Strahlungsquellterms zur Verfügung. Weiterhin ist mit dem Programm ORIGEN-S/ORIGEN-ARP in dem bereits erwähnten SCALE-Paket alternativ ein externes Programmsystem vorhanden. Im vorliegenden Vorhaben wurden diese Programme einer Bestandsaufnahme unterzogen, bei der die jeweils zugrunde liegenden Modelle analysiert wurden, und anhand von Beispielrechnungen Unterschiede in der Quelltermberechnung quantifiziert wurden.

Anhand eines detaillierten generischen Behältermodells wurden schließlich anhand von Rechnungen mit den Programmen MCNP 5 Version 1.51 und MAVRIC/SCALE6.1.2 verschiedene Ursachen möglicher Unsicherheiten bei der Strahlungstransportrechnung untersucht und quantifiziert. Hierzu wurde eine Serie von Rechnungen durchgeführt, bei denen die wichtigsten Einflussgrößen variiert und die Auswirkungen auf die resultierende Dosisleistung an einer Stelle im Bereich der Tragzapfen bestimmt wurden.

#### 2 Internationaler Stand von Wissenschaft und Technik

Seit vielen Jahren werden sowohl stochastische als auch deterministische Verfahren für Strahlungstransportrechnungen entwickelt und eingesetzt. Beide Methoden haben eine Reihe von Vorteilen und auch Schwächen, die in gewisser Hinsicht als komplementär angesehen werden können.

Ein wesentliches Merkmal der deterministischen Methode ist die konstante Flussausbreitung, abhängig von der Zellgröße und damit dem Flussgradienten von Zelle zu Zelle. Damit kann für jeden Punkt einer Geometrie ein verlässliches Ergebnis mit definierter Genauigkeit und ohne statistischen Fehler berechnet werden. Probleme mit starker Abschirmung, d. h. mit einer Flussabschwächung um viele Größenordnungen, sind problemlos zu rechnen. Allerdings sind diese Verfahren in der Regel limitiert in der Geometriedarstellung, und leiden u. U. unter Artefakten aus der Raumwinkelnäherung, wie dem sog. "Ray Effect". Die Berechnung umfangreicher Modelle erfordert typischerweise einen sehr hohen Arbeitsspeicheraufwand, und man benötigt problemspezifische Multigruppenbibliotheken.

Stochastische Methoden bieten dagegen im Allgemeinen die Möglichkeit einer sehr genauen Modellierung. Zudem können problemunabhängige kontinuierliche Wirkungsquerschnittsdaten verwendet werden. Bei Monte Carlo Verfahren werden die interessierenden Partikel, z. B. Neutronen oder Photonen ( $\gamma$ -Quanten) einzeln verfolgt, weshalb hier im Gegensatz zu deterministischen Methoden oftmals kein vollständig raumaufgelöstes Strahlungsfeld berechnet wird. Stattdessen werden an einzelnen Stellen, sog. Detektorpositionen, eintreffende Partikel (Ereignisse) gezählt, um eine Messgröße wie z. B. die Dosisleistung zu ermitteln. Da es sich hier um einen statistischen Prozess handelt, ist die errechnete Größe mit einer intrinsischen Unsicherheit behaftet, die von den meisten Rechenverfahren mit quantifiziert wird. Für eine hinreichend kleine statistische Unsicherheit in der interessierenden Messgröße benötigt man eine entsprechend hohe Anzahl dieser Ereignisse. Deshalb kommt es in Anwendungsfällen, bei denen trotz hoher Quellstärke nur wenige Partikel die interessierende Detektorposition erreichen, häufig zu Problemen. Dazu gehören v. a. Streuung an Luft ("Skyshine"), starke Abschirmungen ("Deep Penetration") und Labyrinth-artige Systeme, die aus diesem Grund für Monte Carlo basierte Rechenverfahren eine besondere Herausforderung darstellen. Für solche Probleme werden in der Regel aufwändige Methoden zur Varianzreduktion benötigt.

5

In den letzten Jahren wurden verstärkt Anstrengungen unternommen, um die angesprochenen Schwächen der verschiedenen Verfahren zu beheben. Im Bereich der Monte Carlo Verfahren wurden verschiedene Methoden entwickelt, die das Ziel haben, die verschiedenen existierenden Techniken zur Varianzreduktion zu automatisieren. Standardmäßig benötigen diese Techniken einen erheblichen Arbeitsaufwand und technisches Expertenwissen. Durch Automatisierung kann dieses Vorgehen erheblich beschleunigt werden, und liefert in günstigen Fällen sogar bessere Ergebnisse /RIS 12/. Einen Überblick über automatisierte lokale und globale Varianzreduktionsverfahren bieten z. B. /PEP 13/ und /DAV 11/. Größere Verbreitung gefunden hat vor allem die sogenannte CADIS- beziehungsweise FW-CADIS-Methode /WAG 97/, /HAG 03/, /WAG 11a/, /WAG 14/. Diese ist im Programm MAVRIC aus dem SCALE-Paket realisiert, das im folgenden Abschnitt ausführlicher behandelt wird. Außerdem bietet das Programm ADVANTG /MOS 10/, /MOS 13/ eine Implementierung der Methode zur Anbindung an MCNP. Die Bereitstellung von ADVANTG über RSICC (Radiation Safety Information Computational Center) wird seit einiger Zeit in Aussicht gestellt, ist aber noch nicht erfolgt.

Bei deterministischen Transportcodes gab es in den letzten Jahren eine Reihe von Neuentwicklungen. Unter Verwendung moderner Programmiersprachen und aktueller Numerikpakete wurden dabei in erster Linie Verbesserungen im Bereich der verwendeten Algorithmen erzielt. Beispiele für aktuelle deterministische Codes sind DENOVO /EVA 10/ des Oak Ridge National Laboratory (ORNL), der auch in MAVRIC zur Anwendung kommt und das bekannte DORT/TORT-Paket ersetzt, PARTISN des Los Alamos National Laboratory (LANL) als Fortentwicklung von DANTSYS, TITAN von den Universitäten von Georgia und Florida, sowie der nicht frei verfügbare Code PENTRAN /KIR 09/. Das Problem der begrenzten Genauigkeit in der Geometriedarstellung konnte durch die Entwicklung von Finite Elemente-basierten S<sub>N</sub>-Codes behoben werden, die Berechnung von Flussverteilungen auf unstrukturierten tetraedrischen oder hexaedrischen Gittern ermöglichen. Ein Beispiel für einen derartigen Code ist das kommerzielle Programm ATTILA /WAR 01/ der Firma Transpire Inc.

Die fortschreitende Entwicklung im Bereich der Rechnerhardware, insbesondere die zunehmende Integration mehrerer Prozessorkerne in einer CPU bei weitgehend konstanter Prozessorfrequenz, führt zu einer wachsenden Bedeutung der Parallelisierung von Strahlungstransportprogrammen. Einige Neuentwicklungen wie z. B. DENOVO sind speziell auf eine gute Skalierbarkeit bei Ausführung auf modernen Supercomputern mit mehreren Tausend CPUs ausgelegt. Obwohl sich Monte Carlo Codes aufgrund des zugrunde liegenden Prinzips für parallele Ausführung anbieten, sind etablierte Programme wie zum Beispiel MCNP aufgrund des Speicherbedarfs nur begrenzt parallelisierbar, weil jeder Einzelprozess den vollständigen Geometrie- und Wirkungsquerschnittsdatensatz benötigt. Derzeit werden eine Reihe von Programmen entwickelt, die diese Schwierigkeit über verschiedene Ansätze umgehen. Am Oak Ridge National Laboratory werden sogenannte "Domain Decomposition" Methoden entwickelt, um die geometrischen Informationen des Gesamtproblems auf die einzelnen parallelen Prozesse aufzuteilen /WAG 11b/. Der Monte Carlo Code OpenMC /ROM 13/ nutzt unter anderem sogenannte "Memory Server", die die Daten separat von den eigentlichen Rechenprozessen vorhalten.

In klassischen Bereichen der Anwendung von Rechenmethoden zum Strahlungstransport in der Kerntechnik, etwa in der Reaktordosimetrie, werden häufig auch heutzutage noch die in den letzten Jahrzehnten bewährten Standardverfahren wie DORT eingesetzt (siehe z. B. /KUR 12/). Etablierte Monte Carlo Verfahren kommen ebenfalls zum Einsatz /RIN 09/, /PIT 11/. Aktuelle Verfahren wie MAVRIC werden bislang noch seltener eingesetzt /HAR 11/. Bei der Schweizer Nationalen Genossenschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle (NAGRA) wird MCNP für die Berechnung der Aktivierung von Reaktorbauteilen außerhalb des Druckbehälters eingesetzt /VOL 14/. Zur Verbesserung der zunächst manuell durchgeführten Varianzreduktionsmethoden wird dabei auch das FW-CADIS-Verfahren angewandt.

Die Programme ADVANTG und MAVRIC zur automatischen Varianzreduktion werden aktuell vor allem im Bereich der Fusionsforschung und für Beschleunigeranwendungen eingesetzt /TUR 13/, /TAY 14/, /RIS 12/. Bei der Optimierung der Abschirmung und der Berechnung der zu erwartenden Aktivierung für den geplanten Fusionsreaktor ITER werden CAD-Modelle als Ausgangspunkt für aufwendige Transportrechnungen mit ADVANTG/MCNP und ATTILA eingesetzt /IBR 14/, /YOU 13/, /WIL 08/.

Im Rahmen der WPRS "Expert Group on Radiation Transport and Shielding" der OECD/NEA wird aktuell ein "State of the Art Report" zu Rechenmethoden im Bereich Strahlungstransport und Abschirmung erstellt.

Im Bereich der Analyse von Unsicherheiten bei der Berechnung von Abschirmungen haben die TU Dresden und das Forschungszentrum Řež bei Prag Untersuchungen zum Neutronen und Gammatransport durch Eisen veröffentlicht /KOS 12/, wobei Nachrechnungen mit unterschiedlichen Wirkungsquerschnittsdaten für Eisen (TENDL 2009,

CENDL 3.1, JENDL 4 und JENDL 3.3) durchgeführt wurden. Für das Experiment wurden am Forschungsreaktor AKR-2 in Dresden Messungen an einem Strahlrohr für Eisenschichtdicken zwischen 5 und 30 cm durchgeführt. Entsprechende Rechnungen wurden mit MCNPX /PEL 11/ für Energieintervalle zwischen 0,5 und 10 MeV durchgeführt. Der Vergleich der Nachrechnungen mit dem Experiment hat gezeigt, dass je nach Wirkungsquerschnittdaten und Dicke des Targets die Unterschiede im betrachteten Energiegruppenintervall erheblich sein können. Ungenauigkeiten der experimentellen Messverfahren wurden dabei berücksichtigt.

#### Das CADIS-Verfahren zur automatisierten Varianzreduktion

Herausfordernde Probleme der Strahlungstransportrechnungen, bei denen nur ein geringer Bruchteil der Quellteilchen den interessierenden Bereich erreicht, stellen eine klassische Monte Carlo Rechnung, bei der jedes Quellteilchen bis zu seiner Absorption verfolgt wird – eine solche Rechnung wird auch als analoge Monte-Carlo-Rechnung bezeichnet – vor größere Schwierigkeiten. Um eine ausreichend gute Statistik in den Ergebnisgrößen zu erreichen, müssen sehr große Neutronenzahlen verfolgt werden, damit genügend Ereignisse in dem relevanten Raumbereich auftreten. In einigen Fällen führt dies zu unerwünscht hohen Laufzeiten der Programme.

Um diese Schwierigkeiten zumindest teilweise zu umgehen, wurden sog. Varianzreduktionsverfahren entwickelt. Ziel dieser Verfahren ist, auf der einen Seite das statistische Gewicht von den Teilchen zu erhöhen, die den interessierenden Bereich erreichen, und auf der anderen Seite solche Teilchen frühzeitig zu vernachlässigen, die für die Ergebnisgrößen keine Rolle spielen.

Bisherige Varianzreduktionsverfahren wie sie z. B. in MCNP /LAL 05/ realisiert sind, erfordern üblicherweise eine manuelle Eingabe durch den Anwender und, insbesondere im Fall von iterativen Vorgehensweisen, je nach Erfahrung des Anwenders einen teilweise erheblichen Zeitaufwand. Es gibt daher verschiedene Ansätze zur Automatisierung der Varianzreduktion (siehe z. B. die Referenzen in /HAG 03/ und /DAV 11/). Im Allgemeinen erfordern solche Verfahren eine Vorkenntnis der Flussverteilung im jeweiligen Problem. Dies kann durch eine deterministische Vorrechnung oder durch iteratives Wiederholen der eigentlichen Monte Carlo Rechnung erfolgen /DAV 11/.

Bei der CADIS-Methode (Consistent Adjoint Driven Importance Sampling) wird zunächst eine relativ grobe Lösung der adjungierten Transportgleichung erzeugt, bei der der zu optimierende Detektor als adjungierte Quelle dient. Aus dieser wird eine gitterbasierte "Importance Map" erzeugt, die für die sog. "Weight Windows"-Methode herangezogen werden kann. Gleichzeitig wird die Quelle so mit einem Bias versehen, dass die Gewichte der Quellteilchen gerade dem Gewicht des Weigth Windows desjenigen Gitterpunkts entsprechen, an dem sie erzeugt werden (daher die Bezeichnung "Consistent"). Das CADIS-Verfahren funktioniert zunächst nur für eine einzelne Detektorposition. Wenn die Varianzreduktion für mehrere verschiedene Detektorpositionen oder sogar ein "Mesh Tally" erreicht werden soll, d. h. die gesuchte Größe wird für jede Gitterzelle eines benutzerdefinierten Gitters berechnet, so muss zusätzlich zwischen den unterschiedlichen Orten eine geeignete Gewichtung vorgenommen werden. Beim FW-CADIS (Forward Weighted-CADIS) Verfahren wird dies über eine zusätzliche deterministische Vorwärtsrechnung erreicht. Der Teilchenfluss am Ort des Detektors dient der Gewichtung der einzelnen adjungierten Quellen untereinander. Ausführlichere Beschreibungen der CADIS-Methode und der FW-CADIS-Methode sind z.B. in /WAG 97/, /WAG 11/, /WAG 14/ oder /SCA 11/ zu finden. Im SCALE-Paket sind diese Methoden in dem Programm MAVRIC realisiert. Dieses koppelt das Monte-Carlo-Programm MONACO für Transportrechnungen mit definierter Quelle mit dem neuentwickelten dreidimensionalen deterministischen Transportcode DENOVO, der eine grobe Vorabrechnung der Flussverteilung durchführt. Zur Verwendung von MAVRIC wird die MONACO-Eingabedatei um einen Block "Importance Map" erweitert, in dem ein Gitter für die deterministische Rechnung sowie eine oder mehrere adjungierte Quelle(n) und weitere Steuerparameter angegeben werden. Die MAVRIC-Sequenz erzeugt automatisiert die erforderlichen Eingabeinformationen für DENOVO und startet die verschiedenen Transportrechnungen. Aus dem adjungierten Fluss werden automatisch die Weigth Windows und den Quellbias für die MONACO-Rechnung erzeugt.

## 3 Nachrechnung von Benchmark-Experimenten zur Bewertung aktueller Methoden zur Strahlungstransportrechnung

Wie in Kap. 1 ausführlich beschrieben bietet das in der MAVRIC-Sequenz implementierte CADIS-Verfahren durch die automatisierte Varianzreduktion die Möglichkeit, auch komplizierte abschirmende Anordnungen, die für klassische Monte Carlo Verfahren nicht oder nur mit großem manuellem Aufwand analysiert werden können, mit zufriedenstellender Genauigkeit zu berechnen. Gegenüber den für solche Probleme einsetzbaren deterministischen Verfahren bietet sich dabei die Möglichkeit, einen hohen Detailierungsgrad in der geometrischen Modellierung zu erreichen bzw. ohne geometrische Näherungen auszukommen. Eine besondere Herausforderung ist dabei eine geometrische Modellierung auf stark unterschiedlichen Skalen. Dies kann zum Beispiel auftreten, wenn in der eigentlichen Anordnung ein vergleichsweise kleiner Detektor sehr detailliert modelliert werden soll.

Ziel der Arbeiten im vorliegenden Arbeitspaket ist eine Quantifizierung der durch das CADIS-Verfahren erzielten Verbesserungen gegenüber analogen Monte Carlo Rechnungen anhand der Nachrechnung ausgewählter Benchmarkexperimente zu typischen Abschirmungsproblemen. Betrachtet werden drei Klassen von Problemen:

- Labyrinth-artige Anordnungen: Anordnungen bei denen die Strahlung aus der Quelle nur über mehrfache Wandstreuung am Detektor ankommen kann
- Starke Abschirmung ("deep penetration"): Strukturen, die Neutronen- und/oder Photonenstrahlung um mehrere Größenordnungen abschwächen
- (Neutronen-)Streuung an Luft ("Skyshine"): Strahlungsquellen die hinreichend stark abgeschirmt sind, so dass eine geometrisch direkte Strahlung nicht am Messort eintrifft. Durch Streuung an Luft gelangt jedoch indirekt Strahlung zum Detektor

Für jeden der drei Problemtypen wurde exemplarisch je ein Benchmarkexperiment zur Analyse ausgewählt. Diese Experimente und die erzielten Ergebnisse werden im Folgenden ausführlich dargestellt und diskutiert. Für Benchmark-Experimente im Bereich Abschirmung stehen im Wesentlichen zwei einschlägige Quellen zur Verfügung. Dies sind zum einen die internationale Datenbank für Benchmark-Experimente SINBAD (Shielding INtegral Benchmark Archive Database) /KOD 06/ und zum anderen das "International Criticality Safety Benchmark Evaluation Project Handbook" (ICSBEP) /NEA 12/, das eine Sektion zum Bereich Strahlungstransport im Zusammenhang mit sog. Kritikalitäts-Alarmsystemen enthält.

#### Vergleichsgrößen zur Auswertung der Ergebnisse

Die mit Hilfe eines Monte-Carlo-Programms berechneten Größen sind methodisch bedingt immer mit einer statistischen Unsicherheit behaftet, die in Form der Standardabweichung  $\sigma$  von den Programmen in der Ausgabe mit angegeben wird. Grundsätzlich kann diese Unsicherheit durch Erhöhung der Rechenzeit, also durch Erhöhung der Anzahl der simulierten Teilchen, beliebig reduziert werden. Die relative Unsicherheit  $u = \sigma/\bar{x}$ , wobei  $\bar{x}$  der Mittelwert der zu berechnenden Größe ist, reduziert sich dabei mit einer Rate die proportional zum Quadrat der Rechenzeit *t* ist. Um die Effizienz verschiedener Rechenläufe miteinander vergleichen zu können wird daher typischerweise die sogenannte "Figure of Merit" (FOM)

$$FOM = \frac{1}{u^2 t}$$
(3.1)

betrachtet. In MAVRIC wird diese FOM in der Einheit 1/min angegeben. Beim Vergleich zweier Rechenläufe wird der Quotient der beiden FOM als sogenannter "Speed-Up" Faktor oder Beschleunigungsfaktor als Maß für den Effizienzgewinn verwendet, der sich beispielsweise durch Anwendung eines Varianzreduktionsverfahrens ergibt. Aus Gründen der höheren Anschaulichkeit wird im Folgenden bei der Auswertung der Benchmarkrechnungen zusätzlich eine fiktive theoretische Rechenzeit  $t_{th}$  zum Erreichen einer relativen Unsicherheit von 1 % verwendet. Diese ergibt sich aus der Definition der FOM über

$$t_{\rm th} = \frac{1}{\rm FOM * u_0^{\ 2}}$$
(3.2)

mit  $u_0 = 0.01$ . Wenn im Folgenden theoretische Rechenzeiten verwendet werden, ist dies stets im Sinne dieser Definition zu verstehen.

#### 3.1 Labyrinth-artige Anordnungen

Zur Analyse Labyrinth-artiger Anordnungen wurden die Experimentserien ALARM-CF-AIR-LAB-001 und ALARM-CF-CH2-LAB-001 aus dem ICSBEP mit dem Titel "Neutron Fields in a Three Section Concrete Labyrinth from a CF-252 Source" /NIK 95/ ausgewählt. Bei diesen Experimentserien wurde der Neutronenfluss durch eine Labyrinthartige Betonstruktur untersucht. Die Neutronen entstehen dabei in einer <sup>252</sup>Cf Punktquelle. An zehn verschiedenen Stellen innerhalb des Labyrinths sind Detektoren in Form von Bonner Kugeln mit Lithiumiodid-(LiI)-Kristallen platziert um den Neutronenfluss zu messen. Die experimentelle Anordnung ist in Abb. 3.1 und Abb. 3.2 gezeigt.



### Abb. 3.1 Horizontaler Querschnitt durch die experimentelle Anordnung für das ALARM-AIR/CF-CH2-LAB-001-Benchmarkexperiment

/NIK 95/, Fälle 1 – 4	
Fall 1 (links):	Labyrinth ohne zusätzliche Installationen,
Fall 2/3 (Mitte):	Mit Polyethylen-Reflektor mit und ohne Cd-Beschichtung in der ersten
	Ecke,
Fall 4 (rechts):	Mit Platten aus boriertem Beton in beiden Ecken

Beide Experimentserien beziehen sich auf die gleiche Strukturen, jedoch wurde die <sup>252</sup>Cf-Neutronenquelle in der Serie ALARM-CF-AIR-LAB-001 unabgeschirmt verwendet (im weiteren Fall A), während sie in der Serie ALARM-CF-CH2-LAB-001 von einer Polyethylen-Kugel abgeschirmt wurde (im weiteren Fall B), wodurch über Moderationseffekte eine Variation des Spektrums des von der Quelle ins Labyrinth abgestrahlten Neutronenflusses erzielt werden kann. Innerhalb der beiden Experimentserien wurden einige Modifikationen der geometrischen Grundanordnung vorgenommen. Wie in Abb. 3.1 und Abb. 3.2 zu sehen, wurde ausgehend von der S-förmigen Grundstruktur zunächst Polyethylen-Platten bzw. bornierte Betonplatten an den Wänden platziert. Weiterhin wurde eine Abschirmung aus Polyethylen in den in der Zeichnung waagerecht dargestellten Arm des Labyrinths platziert. Schließlich wurde die geometrische Anordnung um eine Einbuchtung am ersten Knick des Labyrinths erweitert. Die Messungen an allen Punkten wurden mit Bonner Kugeln verschiedener Durchmesser durchgeführt. Insgesamt ergibt sich so eine große Anzahl an verschiedenen Fällen. Für die vorliegende Untersuchung wurde daher eine Beschränkung auf einige wenige, repräsentative Beispielfälle vorgenommen.





/NIK 95/, Fälle 5 und 6

Fall 5: Mit Polyethylen-Platten im Querarm des Labyrinths

Fall 6: Mit verlängertem ersten "Gang"



Abb. 3.3Vertikaler Querschnitt durch die experimentelle Anordnung für dasALARM-AIR/CF-CH2-LAB-001-Benchmarkexperiment /NIK 95/

#### 3.1.1 Modellierung

Zunächst wurden die in den Abbildungen dargestellten Labyrinth-Anordnungen in voller Detailtiefe in MAVRIC modelliert. Für die Modellierung der Detektoren ergeben sich nun zwei Möglichkeiten. Zum einen können die Bonner-Kugeln ebenfalls in voller geometrischer Detailtiefe dargestellt werden gemäß den Abmessungen, wie sie in /NIK 95/ angegeben sind (siehe auch Abb. 3.4). Zur Simulation des Detektorsignals wird dann für das Volumen des Lil-Kristalls ein "Region Tally" verwendet, dass die Reaktionsrate der zugrundeliegenden <sup>6</sup>Li(n, $\alpha$ )-Reaktion misst. Aufgrund der stark unterschiedlichen Dimensionen der Anordnung als solcher und des Detektors, stellt diese Form der Modellierung eine besondere Herausforderung an den Transportcode dar. Außerdem muss aufgrund der expliziten geometrischen Repräsentation in diesem Fall für jede Größe der Bonner Kugeln eine eigene Eingabedatei erstellt werden.

Alternativ können die Detektoren als reine Punktdetektoren am Ort des Lil-Kristalls simuliert werden. In diesem Fall wird kein direkter Bezug auf die geometrischen Abmessungen der Detektoren genommen. Stattdessen sind sämtliche geometrischen und neutronenphysikalischen Informationen wie etwa jene über die moderierenden und absorbierenden Eigenschaften der Bonner Kugeln sowie über die Wirkungsquerschnitte der <sup>6</sup>Li(n, $\alpha$ )-Reaktion in einer sogenannten Response-Funktion zusammengefasst. Diese muss im Prinzip für jede der Bonner Kugel in einer separaten Rechnung bestimmt werden. Im vorliegenden Fall wurden diese Response-Funktionen aus dem Benchmarkbericht übernommen. Diese wurden dort mithilfe von Simulationen mit MCNP bestimmt. Da die geometrische Form der Bonner Kugeln bei dieser Form der Simulation keine Rolle spielt, können hier die Ergebnisse aller Detektoren gleichzeitig über eine einzige Eingabedatei berechnet werden.



Abb. 3.4 Darstellung der zur Messung verwendeten Bonner Kugeln Nach /NAK 95/

#### 3.1.2 Durchgeführte Rechnungen

Ziel der Rechnungen ist zum einen die Demonstration der Effizienz des CADIS-Verfahren und zum anderen eine differenzierte Betrachtung der verschiedenen Optionen, die sich durch dieses Verfahren ergeben. Daher wurden zunächst analoge Monte Carlo-Rechnungen mit MONACO, das heißt ohne das CADIS-Verfahren durchgeführt. Das Konvergenzverhalten dieser Rechnungen wurde dann mit den verschiedenen CADIS-Optionen verglichen. Für die Rechnungen mit CADIS bieten sich eine Reihe von Möglichkeiten:

- 1. CADIS: Optimierung auf eine Detektorposition (10 Fälle)
  - a) Optimierung auf den Neutronenfluss
  - b) Punktdetektor-Rechnung: Optimierung auf eine Detektorantwort (7 Fälle)
- Region Tally Rechnung: Optimierung auf die <sup>6</sup>Li(n,α)-Reaktionsrate FW-CADIS: Optimierung auf alle Detektorpositionen gleichzeitig (je eine Rechnung)
  - a) Optimierung auf den Neutronenfluss
  - b) Punktdetektor-Rechnung: Optimierung auf eine oder mehrere Detektorantworten
  - c) Region Tally Rechnung: Optimierung auf die  ${}^{6}Li(n,\alpha)$ -Reaktionsrate

Aufgrund der Vielzahl an möglichen Rechenfällen, und da die für eine Beurteilung des CADIS-Verfahrens aus den verschieden experimentellen Anordnungen erzielbare Information teilweise als redundant anzusehen ist, werden im Folgenden nur Ergebnisse zu einer Auswahl von Experimenten gezeigt. So wird nur der Fall der nicht abgeschirmten Quelle betrachtet (Fall A).



# Abb. 3.5MAVRIC-Modell von ALARM-CF-AIR-LAB-001 für Fall A1 mit Bonner Ku-<br/>geln mit Durchmesser 30,47 cm

Zur besseren Darstellung wurden die Deckenplatten, eine Seitenwand sowie das Material "Luft" aus der Abbildung entfernt.

Zunächst wird am Beispiel von Fall A1 (Bonner-Kugeln mit Durchmesser 5,08 cm) mit Punktdetektormodellierung das Verhalten der MONACO-Rechnung mit CADIS-Rechnungen mit Optimierung auf jede einzelne der zehn Detektorpositionen und einer FW-CADIS-Rechnung mit Optimierung auf alle Detektorpositionen gleichzeitig verglichen. Im Anschluss daran werden für die übrigen Fälle A2 bis A6 die MONACO-Rechnung mit der entsprechenden FW-CADIS-Rechnung verglichen. Im Weiteren folgen einzelne Analysen für die Region Tally-Rechnungen.

#### 3.1.3 Ergebnisse

Für die Rechnungen mit Punktdetektor und impliziter Modellierung der Detektoren durch Responsefunktionen wurde zunächst die Effizienz der verschiedenen möglichen Optimierungen mit dem CADIS Verfahren verglichen. Für einen anschaulichen Vergleich wurde dabei die theoretische Rechenzeit zum Erreichen einer Monte Carlo-Unsicherheit von 1 % aus der in der Ausgabedatei angegebenen Wert der "Figure of Merit" (FOM, vgl. Kap. 3) berechnet. Das Ergebnis dieses Vergleichs ist in Abb. 3.6 und Abb. 3.7 dargestellt, wobei die Ergebnisse einmal sortiert nach dem optimierten Detektor und einmal sortiert nach dem Detektorergebnis dargestellt sind, um jeweils andere Effekte deutlicher herausarbeiten zu können.



Abb. 3.6Theoretische Rechenzeit zum Erreichen von 1 % Unsicherheit für die<br/>MAVRIC-Rechenläufe zu Fall 1A, sortiert nach optimiertem Detektorort

Jede Balkenfarbe steht für eine Detektorposition.



## Abb. 3.7Theoretische Rechenzeit zum Erreichen von 1 % Unsicherheit für die<br/>MAVRIC-Rechenläufe zu Fall 1A, sortiert nach Detektor

Jede Balkenfarbe steht für eine Form einen Rechenlauf:

- MONACO: Analoge Monte Carlo Rechnung
- 1-10: Optimierung auf Detektorposition 1-10
- 10\_opt: Optimierung auf Detektorposition 10 mit optimiertem Gitter
- FW: FW-CADIS mit gleichzeitiger Optimierung auf alle Detektorpositionen

Verglichen wird die analoge Monte-Carlo-Rechnung mit CADIS Rechnungen, bei denen auf die Detektoren 1 bis 10 optimiert wird und mit einer FW-CADIS Rechnung mit Optimierung auf alle Detektorpositionen gleichzeitig. Schließlich erfolgte noch eine Rechnung bei der das Gitter für die DENOVO-Rechnung mithilfe des in Abschnitt beschriebenen Verfahrens zur automatischen Gitteroptimierung verfeinert wurde. Anhand von Abb. 3.6 und Abb. 3.7 können eine ganze Reihe von Effekten abgeleitet werden, von denen einige als allgemeingültig angesehen werden können und andere spezifisch für das vorliegende Problem sind.

Zunächst ist zu erkennen, dass für einen bestimmten Detektor die direkte Optimierung im Allgemeinen besser funktioniert als die Optimierung mit FW-CADIS. Für die quellfernen Detektoren ab Detektorposition 8 kehrt sich dieses Bild um. Weiterhin wird bei einer CADIS-Rechnung auch das Ergebnis der umliegenden Detektoren positiv beeinflusst. Es ist zu erwarten, dass dieser Effekt nur bei identischen Detektoren oder zumindest Detektoren mit ähnlicher Charakteristik auftritt. Wie erwartet steigt bei der CA-DIS-Methode die benötigte Rechenzeit für Detektoren, die weit von der Position des optimierten Detektors entfernt liegen, stark an. Die einzelnen Rechenzeiten der Detektoren nähern sich dabei immer stärker an, je weiter der optimierte Detektor von der Quelle entfernt liegt. Die FW-CADIS Rechnung liefert weitgehend homogene Rechenzeiten für alle Detektoren, wobei quellnahe Detektoren etwas schneller die angestrebte Statistik erreichen. Für alle Detektoren sind dabei die nötigen Rechenzeiten deutlich kürzer als bei der Optimierung auf Detektorposition 10. Schließlich ist noch anzumerken, dass eine Optimierung des Gitters für die deterministische Rechnung einen deutlichen Einfluss auf die Rechenzeit haben kann, im vorliegenden Beispiel um einen Faktor 2 bis 3.

Als spezifisch für das vorliegende Problem kann angesehen werden, dass bei den ersten vier Detektoren die benötigte Rechenzeit für die analoge Monte-Carlo-Rechnung zwar über den entsprechenden einzelnen CADIS-optimierten Rechenzeiten, aber deutlich unter der FW-CADIS-optimierten Rechenzeit liegt. Dies liegt wohl darin begründet, dass für diese Detektoren ein vom Rechenaufwand her relativ einfaches Transportproblem vorliegt. Diese vier Detektoren liegen ohne zusätzliche Abschirmung in einer direkten Sichtlinie zur Quelle. Erst mit dem fünften Detektor beginnt das eigentliche Labyrinthproblem. In Abb. 3.7 ist ersichtlich, dass die kürzesten Rechenzeiten für die Detektorpositionen 8, 9 und 10 nicht für bei den zugehörigen CADIS-Läufen erreicht werden, sondern bei solchen, die auf weiter vorne liegende Detektoren optimiert wurden. Dies kann am verwendeten Gitter liegen. Dieses wurde identisch für alle Rechenläufe verwendet und nicht einzeln optimiert, um den notwendigen Arbeitsaufwand zu begrenzen. Man sieht, dass die CADIS-Rechnung für Position 10, bei der das Gitter separat optimiert wurde deutlich effizienter ist.

In Tab. 3.1 sind die Beschleunigungsfaktoren, das heißt die FOM-Werte relativ zur MONACO-Rechnung für die CADIS-Rechnungen und die FW-CADIS Rechnung, aufgeführt. Wie sich gezeigt hat bringen die CADIS-Rechnungen hier nur unwesentliche Verbesserungen, während die FW-CADIS Rechnung für die hintersten drei Detektoren eine signifikante Verbesserung bringen.

Die entsprechende Tabelle für Fall 4A (borierte Betonplatten in den Ecken) zeigt, dass bei einer rechnerisch schwierigeren Anordnung höhere Beschleunigungsfaktoren erzielt werden können.

## Tab. 3.1Beschleunigungsfaktoren für die CADIS-Rechnungen und die FW-CADIS<br/>Rechnung für Fall 1A

Detektor	CADIS	FW-CADIS
1	1,56	0,13
2	2,66	0,21
3	1,03	0,24
4	1,61	0,20
5	1,05	0,87
6	0,66	0,78
7	1,08	0,87
8	0,40	3,00
9	0,50	8,10
10	1,48	34,27

In der CADIS-Spalte stehen jeweils die Werte bei Optimierung auf den jeweiligen Detektor

Tab. 3.2Beschleunigungsfaktoren für die CADIS-Rechnungen und die FW-CADIS<br/>Rechnung für Fall 4A

Detektor	CADIS	FW-CADIS
1	15,43	4,70
2	1,48	0,60
3	1,66	0,60
4	1,32	0,06
5	1,83	2,29
6	2,02	3,63
7	7,66	10,90
8	11,76	31,21
9	2,04	54,29
10	37,53	107,69

Insgesamt lässt sich anmerken, dass das vorliegende Labyrinthproblem bei Detektormodellierung mit Punktdetektortallies und Responsefunktionen rechnerisch nicht aufwendig genug ist, um den Vorteil der CADIS-Methode deutlich herausarbeiten zu können. Die Zählratenergebnisse für die Fälle 1A bis 6A sind in Abb. 3.8 als C/E-1-Werte dargestellt. Wie man erkennen kann überschätzen die Rechenergebnisse die experimentellen Daten im Bereich von etwa 20 – 40 %. Dieser Trend ist allerdings auch in den im Benchmarkbericht angegebenen Ergebnissen einer MCNP-Rechnung zu erkennen. Wie man in Abb. 3.9 und Abb. 3.10 erkennen kann, stimmen die beiden Rechnungen recht gut überein. Die Abweichungen liegen größtenteils deutlich unter 5 %. Lediglich die Ergebnisse für die Bonner Kugel ohne Cadmium-Beschichtung weichen teilweise stärker voneinander ab.













Abb. 3.8 Vergleich zwischen Experiment und Nachrechnung mit MAVRIC (Punktdetektoren) für die Fälle 1A bis 6A (von oben nach unten) für alle Detektorpositionen und alle Bonner Kugeln als Werte C/E-1

> Die Unsicherheiten der MAVRIC Rechnungen liegen durchgängig im Bereich < 1% Fehlende Werte sind begründet durch fehlende experimentelle Daten



 Abb. 3.9 Abweichungen zur MCNP-Rechnung aus dem Benchmarkbericht /NIK 95/ für die Fälle 1A bis 3A (von oben nach unten) für alle Detektorpositionen und alle Bonner Kugeln als Werte C<sub>MAVRIC</sub>/C<sub>MCNP</sub>-1



 Abb. 3.10 Abweichungen zur MCNP-Rechnung aus dem Benchmarkbericht /NIK 95/ für die Fälle 4A bis 6A (von oben nach unten) für alle Detektorpositionen und alle Bonner Kugeln als Werte C<sub>MAVRIC</sub>/C<sub>MCNP</sub>-1
## 3.1.3.1 Ergebnisse bei expliziter Modellierung der Detektoren

Im Vergleich zu den Punktdetektorrechnungen stellen die Rechnungen mit expliziter Modellierung der Bonner Kugeln eine deutlich höhere Herausforderung an die Rechenmethode. Analog zum vorhergehenden Abschnitt wird zunächst ausführlich die Effizienz der verschiedenen Optimierungsmöglichkeiten diskutiert, bevor im Anschluss die eigentlichen Rechenergebnisse dargestellt werden.

In Abb. 3.11 sind die theoretischen Rechenzeiten zum Erreichen von 1 % Unsicherheit dargestellt für den Fall 1A. Im Unterschied zu den Punktdetektorrechnungen werden hier in vielen Rechnungen nicht alle Detektoren von Neutronen erreicht, so dass für diese keine Aussagen zur Statistik abgeleitet werden können. Für die analoge Monte Carlo Rechnung ergaben sich beispielsweise nur für die ersten sieben Detektoren Ergebnisse für die die Laufzeiten mit den CADIS-Rechnungen verglichen werden können.





Abb. 3.11Theoretische Rechenzeit zum Erreichen von 1 % Unsicherheit für die<br/>MAVRIC-Rechenläufe zu Fall 1A, sortiert nach optimiertem Detektorort<br/>Jede Balkenfarbe repräsentiert das Ergebnis für einen Detektor

Bei den CADIS-Rechnungen mit Optimierung des Neutronenflusses für einen einzelnen Detektor erhält man auch nur für diesen Detektor eine belastbare Neutronenstatistik, im Unterschied zu den Punktdetektorrechnungen, bei denen auch benachbarte Detektoren von der Optimierung profitierten. In allen Fällen ergab sich dabei eine Laufzeitverringerung im Vergleich zu der analogen Monte Carlo-Rechnung. Mit der FW-CADIS Rechnung konnte für alle Detektoren eine deutliche Effizienzsteigerung erzielt werden. Die erzielten theoretischen Rechenzeiten (vgl. Kap. 3) sind für die verschiedenen Detektoren allerdings nicht so homogen wie bei den Punktdetektorrechnungen. Grund dafür könnte ein ungünstig definiertes Rechengitter sein. Wenn man statt den Neutronenfluss zu optimieren auf die Detektorantwort optimiert, kann man, wie in Abb. 3.11 zu sehen, nochmal eine deutliche Laufzeitverkürzung bei gleicher erzielter Rechengenauigkeit erreichen. In Tab. 3.3 sind die Beschleunigungsfaktoren für die verschiedenen CADIS- und FW-CADIS-Rechenläufe zusammengefasst. Man sieht, dass sich mit MAVRIC signifikante Verbesserungen in der Effizienz der Rechnungen erzielen lassen.

Tab. 3.3	Beschleunigungsfaktoren für die CADIS- und FW-CADIS-Rechnungen				
	gegenüber der analogen Rechnung und FW-CADIS-Rechnung mit				
	Response-Optimierung gegen Rechnung mit Flussoptimierung				

Detektorposition	CADIS vs MONACO	FW-CADIS vs MONACO	FW-CADIS Response vs Fluss
1	5,0	0,2	9,1
2	14,7	0,8	4,0
3	50,1	2,6	6,3
4	262,5	18,6	4,0
5	1215,4	223,1	1,3
6	2154,4	363,2	4,2
7	364,7	52,0	14,1
8			4,4
9			12,6
10			1,0



Abb. 3.12Vergleich zwischen Experiment und Nachrechnung mit MAVRIC (explizite<br/>Detektormodellierung) für den Fall 1A als Werte C/E-1

Die statistischen Unsicherheiten der Ergebnisse liegen im Bereich 2 – 10 %.



Abb. 3.13Vergleich zwischen expliziter Modellierung der Detektoren und impliziterModellierung mit Responsefunktion

### Zählraten

Abb. 3.12 zeigt den Vergleich der MAVRIC Ergebnisse mit expliziter Modellierung der Detektoren und Optimierung auf den Neutronenfluss mit den experimentellen Daten als Verhältnis der errechneten (C) zu den experimentellen (E) Werten in der Form C/E-1. Die Daten zeigen eine vergleichbare Streubreite wie die Punktdetektorergebnisse. Tendenziell scheint eine geringere Überschätzung der experimentellen Daten vorzuliegen. Dies bestätigt der Vergleich zwischen den MAVRIC-Rechnungen mit impliziter und expliziter Modellierung der Detektoren, wie in Abb. 3.13 gezeigt ist. Die Vergleichswerte Cexpl/Cimpl-1 liegen mit Ausnahme von Detektor 1 durchgängig im negativen Bereich. Bei expliziter Modellierung werden also kleinere Zählraten berechnet als bei Verwendung der in /NIK 95/ angegebenen Responsefunktionen. Dies scheint darauf hinzudeuten, dass die angegebenen Response-Funktionen zumindest für diese MAVRIC-Rechnung nicht optimal sind. Zu berücksichtigen ist hier auch, dass eine Berechnung von eigenen Responsefunktionen mit MAVRIC methodenbedingt durchaus zu leicht unterschiedlichen Ergebnissen führen kann und dass konsistenterweise besser mit dem gleichen Rechenverfahren erzeugte Responsefunktionen verwendet werden sollten, was in der vorliegenden Untersuchung aus Zeitgründen unterblieb. Ein Vergleich entsprechender Response-Funktionen wird ggf. für künftige vertiefende Untersuchungen von Interesse sein.

# 3.2 Starke Abschirmung ("Deep Penetration") am Beispiel Reaktordosimetrie

Für die Bearbeitung und Untersuchung eines sog. "Deep Penetration"-Problems, d. h. zur Berechnung des Strahlungstransports durch eine starke Abschirmung, wurde das "H.B. Robinson 2 Pressure Vessel Benchmark" /REM 97/ ausgewählt. Es handelt sich hierbei um ein Reaktordosimetrie-Problem, bei dem die Reaktionsraten von Aktivierungsproben an zwei unterschiedlichen Positionen innerhalb und außerhalb des Druckbehälters eines amerikanischen Druckwasserreaktors zu bestimmen sind. Der Benchmark wird von der US NRC als zur Qualifizierung von Rechenmethoden zur Druckbehälter-Fluenzberechnung anerkannt und in der Literatur vielfältig zur Rechenmethodenqualifikation verwendet. Neben den im Benchmark-Bericht angegebenen Ergebnissen einer Nachrechnung mit dem deterministischen DORT-Code gibt es umfangreiche Nachrechnungen mit MCNP, mit deren Ergebnissen verglichen werden kann /VAS 10/, /PIT 11/. Auch erste Ansätze für Nachrechnungen mit MAVRIC lassen sich in der Literatur finden /VRA 11/. Eine Nachrechnung mit dem französischen Monte Carlo Programm TRIPOLI-4 ist in /BOU 14/ dargestellt.

H.B. Robinson-2 ist ein amerikanischer Druckwasserreaktor mit 2,3 GW<sub>th</sub> thermischer Leistung, der 1971 in Betrieb genommen wurde. Der Reaktorkern enthält 157 Brennelemente. An diesem Reaktor wurden während des neunten Zyklus, der im Januar 1984 beendet war, Fluenzmessungen mit Hilfe von verschiedenen Aktivierungsproben durchgeführt. Diese waren an verschiedenen Positionen innerhalb und außerhalb des Druckbehälters angebracht. Für den Benchmark wurden davon zwei Sätze von Aktivierungsproben ausgewählt, die jeweils in der Mittenebene des Reaktorkerns positioniert waren. Eine davon befand sich in einer Überwachungskapsel direkt an der Außenseite des thermischen Schilds in 191,15 cm Abstand zur Kernmitte, der andere im Reaktorhohlraum ("reactor cavity") außerhalb des Druckbehälters in 238,02 cm Abstand zur Kernmitte. Abb. 3.14 zeigt einen radialen Schnitt durch den Reaktor. Die Positionen der beiden Aktivierungsproben sind durch rote Punkte gekennzeichnet.



#### Abb. 3.14 Horizontaler Schnitt durch das H.B. Robinson-2 Reaktormodell

Nach /REM 97/

Die axiale Anordnung der Kernkomponenten ist in Abb. 3.15 gezeigt. Die Kerneinbauten sind als homogenisierte axiale Zonen angegeben, und auch die aktive Zone der Brennelemente selbst ist räumlich homogenisiert dargestellt. Zu jeder Axialzone innerhalb des Druckbehälters sind genaue Materialzusammensetzungen angegeben. Gleiches gilt für die Radialzonen außerhalb des Kernbehälters. Für die Brennelemente sind im Benchmarkbericht lediglich der Brennelementtyp (15 x 15 Brennelement mit 204 Brennstäben und 21 Steuerstabführungsrohren) und dessen äußere Abmessung angegeben. Für den gleichen Reaktor existiert ein Eintrag für eine Nachbestrahlungsanalyseprobe in der Datenbank SFCOMPO /NEA 14/ der OECD/NEA, aus der hier Details der Brennelementgeometrie für den zugrunde liegenden Brennlementtyp abgeleitet wurden. Diese Daten wurden für die in den folgenden Abschnitten beschriebene stabweise Modellierung verwendet.

Im Benchmarkbericht sind umfangreiche Betriebsdaten zum neunten Zyklus des Reaktors in acht verschiedenen Dateien hinterlegt. Diese umfassen:

- Abbrand am Zyklusbeginn und -ende, Abbrandinkrement während des neunten Zyklus, mittlere Leistung und die Schwermetallmasse für alle Brennelemente im Kern.
- Zyklusgemittelte axiale Leistungsverteilung in zwölf äquidistanten Axialzonen für alle Brennelemente.
- Zyklusgemittelte stabweise Leistungsverteilungen für alle Brennelemente im rechten oberen Quadranten des Kerns.
- Brennelementfeine Leistungsverteilung f
  ür acht Abbrandschritte des neunten Zyklus.
- Stabweise Leistungsverteilungen für acht Abbrandschritte des neunten Zyklus für alle Brennelemente im rechten oberen Quadranten des Kerns.
- Axiale Leistungsverteilungen in zwölf äquidistanten Axialzonen für acht Abbrandschritte des neunten Zyklus für alle Brennelemente.
- Tagesgenaue Leistungsgeschichte mit mittlerem Kernabbrand, Lastfaktor, Tagesabbrand in MWd, mittlere Kühlmitteltemperatur im Kern.



Abb. 3.15 Vertikaler Schnitt durch das H.B. Robinson-2 Reaktormodell

Nach /REM 97/

Für die Aktivierungsmessungen wurden Proben aus den Materialien Ni, Fe, Ti und Cu in natürlicher Isotopenzusammensetzung sowie <sup>237</sup>Np und <sup>238</sup>U in isotopenreiner Form verwendet. Angegeben sind jeweils die spezifischen Aktivitäten aufgrund der Aktivierung durch die Reaktionen <sup>237</sup>Np(n,f)<sup>137</sup>Cs, <sup>238</sup>U(n,f)<sup>137</sup>Cs, <sup>58</sup>Ni(n,p)<sup>58</sup>Co, <sup>54</sup>Fe(n,p)<sup>54</sup>Mn, <sup>46</sup>Ti(n,p)<sup>46</sup>Sc und <sup>63</sup>Cu(n, $\alpha$ )<sup>60</sup>Co. Ergänzend zur Benchmarkbeschreibung enthält der Bericht die Darstellung einer Nachrechnung mit dem zweidimensionalen deterministischen Transportcode DORT. Für die Nachrechnungen wurden die auf ENDF/B-VI basierenden Wirkungsquerschnittsbibliotheken BUGLE-93, SAILOR-95 und BUGLE-96 verwendet. Es sind zunächst die jeweils ermittelten Reaktionsraten für die oben genannten Reaktionen angegeben. Daraus wurden dann spezifische Aktivitäten sowie C/E-Werte für den Vergleich mit den experimentellen Daten angegeben.

## 3.2.1 Modellierung mit MAVRIC

Für das vorliegende Experiment wurden verschiedene Detaillierungsgrade hinsichtlich der geometrischen Modellierung untersucht. Dies betrifft zum einen die Ausnutzung der Rotationssymmetrie des Problems und zum anderen die geometrische Modellierung des Reaktorkerns und der Kerneinbauten. Der Bereich ab dem Kernbehälter wurde in allen Modellen der vorliegenden Arbeit anhand aller vorliegenden Informationen modelliert. Identisch für alle erstellten Modelle ist auch die Darstellung der Aktivierungsproben. Im Benchmarkbericht sind zu diesen nur unvollständige Angaben zu finden. So ist der Halter für die Überwachungskapsel zwar detailliert in seinen Abmessungen und Materialien beschrieben, die Abmessungen der Aktivierungsproben selbst sind dagegen nicht angegeben. Für die Proben im Reaktorhohlraum sind nur Angaben zu Länge, Breite und Tiefe sowie Material der Halterung angegeben. Daher wurden die Halterungen gemäß der Angaben im Bericht modelliert, die Halterung im Hohlraum als kubischer Block. Die Aktivierungsproben selbst wurden nicht explizit modelliert. Stattdessen wurden für die entsprechenden Reaktionen "Region Tallies" definiert, die sich über den Bereich der Halterung erstrecken. Die Detektoren sind in Abb. 3.16 dargestellt.

Für erste Testrechnungen wurde zunächst ein vereinfachtes Modell mit einem zylindrischen Kern erstellt. Es hat sich herausgestellt, dass die Ausnutzung der Symmetrieeigenschaften des Problems aufgrund der Eigenschaften der in MAVRIC verwendeten Geometriebeschreibung mit Schwierigkeiten behaftet ist. So muss die äußere Begrenzung des Gesamtmodells durch einen einzigen Körper erfolgen und kann nicht durch mehrere Körper, zum Beispiel durch einen Satz von Ebenen erfolgen. Eine Einschränkung auf ein Achtel des Kerns war somit nur schwer zu realisieren. Daher wurde zunächst ein Modell für ein Viertel des Kerns erstellt, wie in Abb. 3.17 gezeigt ist.



Abb. 3.16 Dreidimensionale Darstellungen der Detektormodelle für das H.B. Robinson-2 Reaktormodell

Links: Überwachungskapsel, rechts: Reaktorhohlraum







Abb. 3.18 Position der beiden Detektoren im HBR-2 Modell

Für die Definition der Quelle wurde analog zu dem im Benchmarkbericht beschriebenen Verfahren für den Transportcode DORT vorgegangen. Wie im Bericht angegeben wurde für den Brennstoff frisches Urandioxid mit 2,9 Gew.-% Anreicherung <sup>235</sup>U und einer Dichte von 10,418 g/cm<sup>3</sup> verwendet. Das Quellneutronenspektrum wurde als Mittelwert aus den Spaltspektren von <sup>235</sup>U und <sup>239</sup>Pu definiert .Dies reflektiert den Beitrag von <sup>239</sup>Pu zur Spaltung bei Brennstoff, der bereits einen gewissen Abbrand erreicht hat. Für den Konversionsfaktor C<sub>f</sub> für die Umrechnung von thermischer Leistung in Neutronenquellstärke wurde aus Konsistenzgründen der Wert

 $C_f = 8,175 * 10^{16} \text{ Neutronen/s/MW}$ 

aus /REM 97/ übernommen. Als Quelle wurde eine Zylinderschale verwendet, die volumengleich mit den äußeren beiden Reihen von Brennelementen ist. Für die Quellstärke wurde die Leistung dieser Brennelemente aufaddiert. Auf eine axiale und radiale Quellverteilung wurde verzichtet, das heißt die Quellstärke wurde als gleichverteilt über das Volumen angenommen. Dies entspricht nicht der tatsächlichen Quellverteilung, die sowohl radial als auch axial einen Abfall zum Rand des Kerns hin zeigt, und führt somit zu überhöhten Werten in den Tally-Ergebnissen. Dieser Umstand wurde aber für die ersten Testrechnungen akzeptiert, um den Modellierungsaufwand zu begrenzen.

In weiteren Arbeitsschritten wurden ausgehend von diesem Modell Verfeinerungen vorgenommen, um den Effekt auf die Rechendauer und die allgemeine Performance des Programms zu untersuchen. Gleichzeitig wurden realistischere Quelldefinitionen angestrebt, um sich den Benchmarkergebnissen anzunähern.

Wie oben beschrieben stellt die Definition der Quelle als Zylinderschale mit räumlich konstanter Quelle eine relativ grobe Näherung dar, die für eine genaue Bestimmung von Reaktionsraten an spezifischen Positionen nicht hinreichend genau ist. Grundsätzlich bieten sich zwei mögliche Wege zur Verbesserung der Genauigkeit an. Zum einen kann auf Grundlage der angegebenen Daten die Quellverteilung innerhalb des Bereichs der Zylinderschale genauer angegeben werden, d. h. man definiert gemittelte radiale und axiale Verteilungsfunktionen der Quellstärke. Zum anderen kann die geometrische Beschreibung des Quellbereichs verfeinert werden. Aufgrund der flexiblen Geometriebeschreibung bietet sich für Monte Carlo Verfahren die zweite Option an. Es wurde daher in mehreren Schritten eine genauere Modellierung des Reaktorkerns vorgenommen.

Zunächst wurde der homogenisierte Kern durch eine Beschreibung mit homogenisierten Brennelementen ersetzt. Jedem dieser Brennelemente wurde dabei eine eigene Quellstärke gemäß den angegebenen zyklusgemittelten brennelementweisen Leistungen zugeordnet. Zusätzlich wurden auch die axialen Leistungsverteilungen der Brennelemente mitberücksichtigt. Abb. 3.19 zeigt das entsprechende MAVRIC-Modell.





Wie oben bereits beschrieben ist die Ausnutzung der Symmetrie eines Problems in MAVRIC mit gewissen Schwierigkeiten behaftet. Eine solche Ausnutzung der Symmetrie eines Problems wird üblicherweise vorgenommen, um insbesondere bei deterministischen Codes die Rechenzeit zu reduzieren. Da beim CADIS-Verfahren idealerweise nur solche Neutronen verfolgt werden, die auch zum Ergebnis beitragen, liegt der Schluss nahe, dass die Modellierung der vollen Symmetrie keine signifikanten Nachteile bezüglich der Rechenzeit nach sich zieht, bei gleichzeitig deutlich vereinfachter Geometriebeschreibung. Es wurde daher ein Modell aufgesetzt, dass die komplette Reaktorgeometrie umfasst und ansonsten identisch zum vorher beschriebenen Viertelkern-Modell ist. Die neu hinzugekommenen Brennelemente wurden dabei als passiv, also ohne Quellterm modelliert, da ihr Beitrag zum Ergebnis vernachlässigbar klein ist. Abb. 3.20 zeigt das Vollkernmodell.

In zwei weiteren Schritten wurden die Formbleche ("Formers") explizit modelliert. Schließlich wurden auch die fünf Brennelemente, die den beiden Detektoren am nächsten liegen (Brennelemente 43, 56, 70, 71 und 86 in der Benchmarkbeschreibung), stabweise modelliert und mit den entsprechenden Leistungsdaten versehen.



Abb. 3.20 360° Version des Reaktormodells mit Brennelement-genauer Quelldefinition



Abb. 3.21 Ausschnitt aus dem Modell mit stabweiser Quelldefinition für die fünf wichtigsten Brennelemente

## 3.2.2 Ergebnisse

Anhand der oben beschriebenen Modelle wurde zunächst der Effekt der CADIS-Methode untersucht. Die durchgeführten Untersuchungen und erzielten Ergebnisse werden hier am Beispiel von Modell C (Brennelement-genaue Quelldefinition mit Axialverteilung) dargestellt. Entsprechende Ergebnisse haben sich auch für die anderen dargestellten Modelle ergeben.

Zur Quantifizierung des Effizienzgewinns durch das CADIS-Verfahren wurde zunächst eine analoge Monte Carlo Rechnung, das heißt eine reine MONACO-Rechnung ohne Verwendung von CADIS durchgeführt. Die Rechenzeit betrug 10 Tage, und es wurden etwa 2 Milliarden Neutronenhistorien verfolgt. In Abb. 3.22 ist der errechnete Neutronenfluss und die zugehörige Monte Carlo Unsicherheit für einen horizontalen Schnitt durch die Ebene der Detektoren und einen vertikalen Schnitt durch die Ebene des In-Vessel Detektors gezeigt. Man erkennt das Neutronenhistorien in der gesamten Modellgeometrie verfolgt werden. Die Eindringtiefe der verfolgten Neutronen in den Bioschild ist jedoch stark begrenzt. Weiterhin ist zu erkennen, dass die Neutronenstatistik für Gitterzellen mit kleiner Grundfläche nicht ausreicht, um belastbare Aussagen zu gewinnen. Entsprechendes gilt daher auch für die beiden Detektoren, insbesondere für den Ex-Vessel Detektor.



## Abb. 3.22 Totaler Neutronenfluss für einen horizontalen Schnitt in der Kernmittenebene

Von links oben nach rechts unten: MONACO-Rechnung, CADIS-Rechnung mit Optimierung auf Überwachungskapsel, CADIS-Rechnung mit Optimierung auf Hohlraum, FW- CADIS Rechnung



# Abb. 3.23 Relative Unsicherheit des totalen Neutronenflusses für einen horizontalen Schnitt in der Kernmittenebene

Von links oben nach rechts unten: Analoge Rechnung mit MONACO, CADIS-Rechnung mit Optimierung auf den Detektor in der Überwachungskapsel, CADIS-Rechnung mit Optimierung auf den Detektor im Reaktorhohlraum, FW-Cadis-Rechnung.



Abb. 3.24 Vertikaler Schnitt durch das Modell: Totaler Neutronenfluss

Von links oben nach rechts unten: Analoge Rechnung mit MONACO, CADIS-Rechnung mit Optimierung auf den Detektor in der Überwachungskapsel, CADIS-Rechnung mit Optimierung auf den Detektor im Reaktorhohlraum, FW-Cadis-Rechnung.



## Abb. 3.25 Relative Unsicherheit des totalen Neutronenflusses für einen vertikalen Schnitt

Von links oben nach rechts unten: Analoge Rechnung mit MONACO, CADIS-Rechnung mit Optimierung auf den Detektor in der Überwachungskapsel, CADIS-Rechnung mit Optimierung auf den Detektor im Reaktorhohlraum, FW-Cadis-Rechnung.

Zum Vergleich der verschiedenen CADIS-Optionen wurde nun jeweils eine CADIS-Rechnung mit Optimierung auf den In-Vessel Detektor ("Kapsel") und auf den Ex-Vessel Detektor ("Hohlraum") durchgeführt. Zusätzlich erfolgte eine Rechnung mit dem FW-CADIS Verfahren bei dem auf beide Detektoren zugleich optimiert wurde. Abb. 3.22, Abb. 3.23, Abb. 3.24 und Abb. 3.25 zeigen den totalen Neutronenfluss und dessen Unsicherheit für zwei entsprechende Schnitte durch den Reaktor für die vier verschiedenen Rechnungen. Man sieht, dass sich bei den beiden CADIS-Rechnungen der Bereich geringer relativer Unsicherheit, d. h. < 0.1, jeweils um die Region des Detektors erstreckt. Für den Fall der Optimierung auf den In-Vessel Detektor ist der effektiv simulierte Bereich im Vergleich zur gesamten Modellgeometrie deutlich reduziert, sowohl in der x-y-Ebene als auch in der x-z-Ebene. Im Bereich der Quelle zeigt sich, dass effektiv nur wenige Brennelemente einen Beitrag zum Fluss im relevanten Bereich beitragen. Bei der Optimierung auf den Ex-Vessel Detektor zeigt sich ein deutlich größerer Bereich mit geringer Unsicherheit. Dieser reicht nun auch deutlich in den Bioschild hinein. Im Quellbereich tragen nun andere Brennelemente zum Fluss bei. Die Flüsse und Unsicherheiten für die FW-CADIS Rechnung können dabei als Überlagerung der entsprechenden Abbildungen für die beiden CADIS-Rechnungen beschrieben werden.

Um den Effizienzgewinn der verschiedenen CADIS-Rechnungen zu quantifizieren, sind in Tab. 3.4 die der jeweilige FOM-Faktor relativ zur analogen MONACO-Rechnung für die sechs Aktivierungsreaktionen und den Neutronenfluss aufgeführt.

Um diese Größen noch deutlicher zu veranschaulichen ist in Tab. 3.5 zusätzlich die aus diesen Werten berechnete theoretische Rechenzeit zum Erreichen einer relativen Standardabweichung von 0,01 angegeben. Diese Rechenzeiten sind deswegen fiktiv, weil es bei der MONACO-Rechnung, im Gegensatz zu einer KENO-Rechnung, nicht möglich ist, eine Ziel-Standardabweichung anzugeben, bei deren Erreichen die Rechnung beendet wird. Die tatsächlichen Rechenzeiten bei der Bestimmung der FOM-Werte wichen davon ab.

	CADIS Ho	hIraum	CADIS Ka	psel	FW CADIS	
Speed-up	Kapsel	Hohlraum	Kapsel	Hohl- raum	Kapsel	Hohl- raum
<sup>237</sup> Np(n,f) <sup>137</sup> Cs	2.9E+01	5.1E+04	1.1E+05	1.2E+01	2.5E+04	1.0E+04
<sup>238</sup> U(n,f) <sup>137</sup> Cs	4.1E+02	2.4E+05	1.6E+05	2.8E+01	4.9E+04	2.5E+05
<sup>58</sup> Ni(n,p) <sup>58</sup> Co	4.8E+02	2.7E+05	1.5E+05	4.4E+01	6.7E+04	9.2E+05
<sup>54</sup> Fe(n,p) <sup>54</sup> Mn	5.2E+02	2.2E+05	1.6E+05	3.7E+01	7.4E+04	1.2E+06
<sup>46</sup> Ti(n,p) <sup>46</sup> Sc	6.4E+02	1.0E+05	1.8E+05	3.4E+01	1.2E+05	1.0E+06
<sup>63</sup> Cu(n,α) <sup>60</sup> Co	9.5E+02	6.2E+04	2.2E+05	3.4E+01	3.0E+05	1.2E+06
Neutronen- fluss	6.2E-01	3.7E+03	9.7E+03	1.3E+00	1.5E+03	1.9E+03

Tab. 3.4Speed-up Faktoren für die verschiedenen Rechenfälle relativ zur analogenMonte Carlo Rechnung für den MONACO-Anteil der Rechnungen

Es ist zu erkennen, dass bei den CADIS-Rechnungen jeweils für den optimierten Detektor eine deutliche Effizienzsteigerung zu verzeichnen ist. Die Speed-up Werte für die Reaktionsraten in den optimierten Detektoren liegen im Bereich 10<sup>5</sup>. Das heißt, die erforderliche Rechenzeit zum Erreichen einer bestimmten Unsicherheit im Ergebnis verringert sich um fünf Größenordnungen. Dagegen weisen die Ergebnisse für die nicht optimierten Detektoren bei den CADIS-Rechnungen einen deutlich geringeren Speed-up von zwischen 10 und 1000 auf. Die Speed-up Werte für den Detektor in der Überwachungskapsel bei der Optimierung auf den Detektor im Reaktorhohlraum sind dabei höher als im umgekehrten Fall. Dies ist nicht überraschend, da der erstere das schwierigere Problem darstellt. Neutronen die den Druckbehälter durchqueren, passieren unterwegs auch die Bereiche innerhalb des Druckbehälters.

Die Rechenzeiten zum Erreichen von 1 % Unsicherheit im Ergebnis stellen sich folgendermaßen da: Während bei die reinen MONACO-Rechnungen Wochen bis Monate bräuchten, sind die 1 % Unsicherheit für die in den Rechnungen optimierte Reaktion <sup>237</sup>Np(n,f)<sup>137</sup>Cs bei der Kapsel nach 6 Minuten und für den Hohlraum nach 1,6 Stunden erreicht. Die Rechenzeiten für die anderen, nicht direkt optimierten Reaktionen sind nach etwas länger, bei der Kapsel bis zu 1,6 Stunden, beim Hohlraum bis zu 39 Stunden. In beiden Fällen ist <sup>63</sup>Cu(n, $\alpha$ )<sup>60</sup>Co diejenige Reaktion, für die das Ergebnis am langsamsten konvergiert. Die unterschiedlichen Rechenzeiten für die verschiedenen

	MONACO		CADIS Hohl- raum		CADIS Kapsel		FW CADIS	
	Kapsel	Hohl- raum	Kapsel	Hohl- raum	Kapsel	Hohl- raum	Kapsel	Hohl- raum
<sup>237</sup> Np(n,f) <sup>137</sup> Cs	7.6E+3	8.1E+4	264.1	1.6	0.1	6.9E+3	0.3	8.0
<sup>238</sup> U(n,f) <sup>137</sup> Cs	1.8E+4	9.5E+5	43.2	3.9	0.1	3.4E+4	0.4	3.8
<sup>58</sup> Ni(n,p) <sup>58</sup> Co	3.4E+4	2.1E+6	69.7	7.6	0.2	4.7E+4	0.5	2.2
<sup>54</sup> Fe(n,p) <sup>54</sup> Mn	4.1E+4	2.3E+6	79.7	10.5	0.3	6.3E+4	0.6	2.0
<sup>46</sup> Ti(n,p) <sup>46</sup> Sc	1.1E+5	2.4E+6	171.5	24.0	0.6	7.2E+4	0.9	2.3
<sup>63</sup> Cu(n,α) <sup>60</sup> Co	3.5E+5	2.4E+6	366.3	39.0	1.6	7.2E+4	1.2	2.1
Neutronenfluss	3.1E+3	1.9E+4	4916.4	5.2	0.3	1.4E+4	2.0	10.2

Tab. 3.5Theoretische Rechenzeiten bis zum Erreichen von 1 % Unsicherheit im<br/>Ergebnis für die verschiedenen Rechenfälle

Reaktionen liegen in den unterschiedlichen spektralen Abhängigkeiten der jeweiligen Response-Funktionen begründet. Für die FW-CADIS-Rechnung zeigt sich, dass die Rechenzeiten für die <sup>237</sup>Np(n,f)<sup>137</sup>Cs-Reaktion zwar um einen Faktor 3 beziehungsweise 5 länger sind, dafür aber die übrigen Reaktionen teilweise kürzere Rechenzeiten haben.

Bei der Beurteilung der Frage, ob es sinnvoller wäre eine Serie von CADIS-Rechnungen durchzuführen oder nur eine FW-CADIS-Rechnung für alle Detektoren und Reaktionen, ist zusätzlich die benötigte Rechenzeit für die vorgeschalteten DENOVO-Rechnungen zu berücksichtigen. Die adjungierte Flussberechnung mit DENOVO erforderte bei den beiden CADIS-Rechnungen jeweils etwa 10 Stunden Rechenzeit. Für die FW-CADIS-Rechnung kommt zusätzlich eine Vorwärtsrechnung mit DENOVO hinzu, die hier ebenfalls etwa 10 Stunden gedauert hat. Die Rechenzeit hängt dabei stark von der Größe des verwendeten Gitters ab. Insgesamt ergibt sich bei der Betrachtung der reinen Rechenzeit ein Vorteil für einzelne CADIS-Rechnungen. Allerdings lässt sich feststellen, dass die FW-CADIS-Methode ebenfalls praktikable Rechenzeiten erzielt. Sie bietet dabei den Vorteil alle Ergebnisse in übersichtlicher Form mit einem Rechenlauf zu erhalten.



Abb. 3.26 Neutronenfluss und adjungierter Fluss für das volle Reaktormodell

Wie im vorhergehenden Kapitel beschrieben wurden auch Rechnungen durchgeführt, bei denen die detaillierte Reaktorgeometrie modelliert wurde. Ziel war, die Unterschiede im Rechenaufwand bei vergleichbarer Ergebnisqualität an den Detektorpositionen im Vergleich zur Modellierung eines Viertelkerns zu quantifizieren. Bevor auf die Ergebnisse hinsichtlich Rechenzeit und FOM eingegangen wird, sollen an diesem Beispiel die einzelnen Schritte des FW-CADIS-Verfahrens illustriert werden. Zunächst erfolgt eine deterministische Vorwärtsrechnung, wie im linken Bild in Abb. 3.26 zu sehen ist. Anhand der Flusswerte an den Detektorpositionen wird vom Programm eine Gewichtung der adjungierten Quellen (also der Detektoren) für die adjungierte Rechnung vorgenommen. Das Ergebnis der adjungierten Rechnung ist im rechten Bild von Abb. 3.26 zu sehen. Aufgrund der Gewichtung gemäß dem berechneten Neutronenfluss ist die zum Detektor im Hohlraum gehörende adjungierte Quelle höher gewichtet als die zum Detektor der Überwachungskapsel gehörige Quelle. Der adjungierte Fluss ist ein Maß für die Bedeutung eines Neutrons der Vorwärtsrechnung an einem bestimmten Ort und einer bestimmten Energie für das Ergebnis in den definierten Detektoren und wird deswegen auch Importance, also Wichtigkeit, Gewicht, genannt. Aus dem adjungierten Fluss erstellt MAVRIC eine sogenannte "Mesh Importance Map". Das heißt für jeden Gitterpunkt und jede Energiegruppe wird aus dem adjungierten Fluss für die "Weight Windows"-Methode ein Zielgewicht für die Neutronen berechnet. In dieses Gewicht geht der adjungierte Fluss invers ein. Die berechnete Importance Map ist in Abb. 3.27 für zwei verschiedene Energiegruppen im Bereich des thermischen beziehungsweise des schnellen Spektrums dargestellt. Es ist zu erkennen, dass für die thermische Gruppe deutlich höhere Importance-Werte berechnet wurden, als für die schnelle Gruppe. Für die Rechnung bedeutet dies, dass die thermischen Neutronen bei einem höheren Gewicht als die schnellen Neutronen dem "Russian Roulette" unterliegen und somit nicht weiter verfolgt werden.



## Abb. 3.27 "Mesh importance map" für zwei verschiedene Energiegruppen

links: Schnelle Neutronen,

rechts: Thermische Neutronen

Dies entspricht der Erwartung, dass für die Detektorantwort insbesondere außerhalb des Druckbehälters in erster Linie schnelle Neutronen eine Rolle spielen, während die thermischen Neutronen auf dem Weg zum Detektor absorbiert werden. Die berechnete Importance Map führt bei der eigentlichen Monte Carlo-Rechnung dazu, dass nur Neutronen im relevanten Bereich der Modellgeometrie verfolgt werden. Dieser entspricht im Wesentlichen der vorher verwendeten Viertelkern-Modellgeometrie. In Abb. 3.28 rechts ist die Darstellung des totalen Neutronenfluss zu sehen. Das linke Bild in Abb. 3.28 zeigt den Fluss in einer thermischen Energiegruppe. Hier zeigt sich ein merklicher Beitrag nur in der Nähe des Kapseldetektors und im Bericht des Bioschilds. Ersterer stammt aus dem äußeren Rand des Kerns, da nur diese thermischen Neutronen den Detektor erreichen. Letzterer entsteht durch Moderation des den Hohlraumdetektor erreichenden schnellen Flusses im Beton des Bioschilds.

Die bisher diskutierten Ergebnisse legen den Schluss nahe, dass eine Rechnung mit der vollen Modellgeometrie nicht wesentlich ineffizienter als eine Rechnung mit der vorher betrachteten eingeschränkten Modellgeometrie ist. Dies wird durch die berechneten FOM-Werte bestätigt, die in Tab. 3.6 als Rechenzeiten zum Erreichen von 1 % Unsicherheit zu sehen sind. Maximal ist ein Faktor zwei in der benötigten Rechenzeit zu erwarten. Die Rechenzeiten der vorgeschalteten deterministischen Rechnungen sind sogar etwas kürzer als im Viertelkern-Modell.



Abb. 3.28 Resultierender berechneter thermischer (links) und totaler (rechts) Neutronenfluss

	FW-Cadis Viertelgeometri	ie	FW-CADIS volle Geometrie		
	Kapsel	Hohlraum	Kapsel	Hohlraum	
<sup>237</sup> Np(n,f) <sup>137</sup> Cs	0.31	7.97	0.56	7.82	
<sup>238</sup> U(n,f) <sup>137</sup> Cs	0.36	3.81	0.63	6.61	
<sup>58</sup> Ni(n,p) <sup>58</sup> Co	0.50	2.22	0.80	3.42	
<sup>54</sup> Fe(n,p) <sup>54</sup> Mn	0.56	1.97	0.90	4.16	
<sup>46</sup> Ti(n,p) <sup>46</sup> Sc	0.89	2.29	1.30	4.30	
<sup>63</sup> Cu(n,α) <sup>60</sup> Co	1.16	2.07	1.56	4.95	
Neutronenfluss	2.01	10.22	3.63	17.01	

Tab. 3.6Theoretische Rechenzeiten zum Erreichen von 1 % Unsicherheit für das<br/>Viertelsymmetrie-Modell und für das Vollkern-Modell

Das liegt daran, dass trotz des größeren zu modellierenden Bereichs ein etwas weniger großes Gitter verwendet werden konnte. Hauptgrund dafür sind die Brennelemente die hier mit den Seitenkanten parallel zu den Gitterebenen liegen und daher durch weniger Ebenen modelliert werden können. Insbesondere bei rotationssymmetrischen Problemen hat sich gezeigt, dass die Modellierung einer Teilgeometrie in MAVRIC mit einem erheblichen Mehraufwand verbunden sein kann. Die hier vorgestellten Untersuchungen zeigen, dass das CADIS-Verfahren die Einschränkung eines Problems auf den relevanten Bereich automatisch erzielt. Eine Ausnutzung von Modellsymmetrien, wie sie bei traditionellen Transportprogrammen üblich und häufig auch notwendig ist, kann deshalb bei Anwendung von MAVRIC in vielen Fällen entfallen. Die Auswahl eines Modellbereichs sollte hier also eher anhand der Frage erfolgen, wie der Modellierungsaufwand minimiert werden kann als wie die die Modellgeometrie minimiert werden kann.

Für die korrekte Bestimmung der Reaktionsraten an den Detektorpositionen ist eine realistische Modellierung des Leistungsprofils der äußersten Brennelementreihe und insbesondere der den Detektoren geometrisch am nächsten stehenden Brennelemente erforderlich. Wie oben beschrieben wurde hierfür eine Verfeinerung des Modells vorgenommen, bei der fünf Brennelemente stabweise modelliert wurden. Entsprechend erfolgte dabei auch die Quellmodellierung stabweise. Neben dem Ziel einer möglichst realistischen Modellierung stand hier auch der Versuch im Vordergrund, die Grenzen der Methodik auszuloten. Tatsächlich führte die Simulation mit diesem Modell zu einem

stark erhöhten Ressourcenbedarf der verfügbaren Hardware, hauptsächlich hinsichtlich des Hauptspeichers. Wesentliche Ursache hierfür ist die hohe Anzahl an Einzelquellen (410 Quellen pro Brennelement) und deren Sampling. Dies führte zu einer Rechenzeit von 68 Stunden für die Vorprozessierung, d. h. für alle Rechenschritte vor Beginn der MONACO-Rechnung. In Abb. 3.29 sind die Ergebnisse der Reaktionsraten für die verschiedenen diskutierten Modelle in relativer Abweichung zu den Ergebnissen der DORT-Rechnungen des Benchmarkberichts dargestellt. Zusätzlich sind zur Einordnung der Ergebnisse Vergleichswerte von MCNPX-Rechnungen aus /PIT 11/ dargestellt. Man sieht, dass erst die stabweise Modellierung Ergebnisse liefert, die zu den MCNPX-Ergebnissen vergleichbar sind. Mit Ausnahme der Ti- und Cu-Reaktionsraten stimmen die Ergebnisse auf weniger als 5 % (Überwachungskapsel) beziehungsweise (Hohlraum) 10 % miteinander überein. Die etwas größeren Abweichungen bei den Hohlraumdaten können darin begründet liegen, dass eine der drei Aktivierungsproben im Hohlraum am nächsten liegenden Brennelemente nicht mit stabweiser Quelle modelliert wurde, weil für diese keine entsprechenden Daten vorlagen. Hier kann eine Verbesserung erreicht werden, indem unter Ausnutzung der Symmetrie des Systems die Daten des gegenüberliegenden Brennelements verwendet werden.





Wie bereits in /VAS 10/ und /PIT 11/ diskutiert sind die mit MCNPX berechneten Werte für die Reaktionsraten der Reaktionen <sup>237</sup>Np(n,f)<sup>137</sup>Cs und <sup>238</sup>U(n,f)<sup>137</sup>Cs im Fall des Detektors im Hohlraum deutlich höher als die entsprechenden DORT-Werte. Letztere liefern allerdings im Vergleich zu den übrigen Daten deutlich zu niedrige Werte für die daraus im Benchmarkbericht berechneten Aktivitäten. Dies lässt darauf schließen, dass es sich hier um Probleme bei der DORT-Rechnung handelt und nicht um eine fehlerhafte Auswertung der Messergebnisse. Die gute Übereinstimmung der vorliegenden MAVRIC-Rechnung mit den MCNPX-Daten unterstützt diese Vermutung. Ein möglicher Grund für die Abweichungen in den DORT-Rechnungen könnte in den dabei verwendeten Schwellenwerten für die Reaktionsratenberechnung liegen. Dies wurde auch in in /VAS 10/ und /PIT 11/ näher untersucht. Bei den vorliegenden Rechnungen wurde im Unterschied zu den MCNPX-Rechnungen keinerlei expliziter Grenzwert für die simulierte Neutronenenergie verwendet. Implizit werden allerdings niederenergetische Neutronen durch die energieabhängigen Weight Windows unter Umständen von der Rechnung ausgeschlossen.



#### Abb. 3.30 Reaktionsraten für die Aktivierungsproben im Reaktorhohlraum

Die Ergebnisse sind dargestellt als  $C_{MC}/C_{DORT}$ -1. Die Werte für die MCNP-Rechnungen sind /PIT 11/ entnommen.

Die verwendete stabweise Quelldefinition ist wie bereits erwähnt sehr ressourcenaufwändig. Für praktische Anwendungen kann es daher sinnvoll sein, effizientere Methoden zur Modellierung der Quellverteilung einzusetzen. MAVRIC bietet hierfür die Option, ortsabhängige Verteilungsfunktionen zu verwenden. Dies wurde in den vorliegenden Modellen für die axiale Quellstärkenverteilung verwendet. Diese Möglichkeit ist allerdings auf eindimensionale Verteilungen beschränkt, so dass die zweidimensionale radiale Quellstärkenverteilung der Brennelemente nur als Produkt zweier eindimensionaler Verteilungen angenähert werden kann. Für eckständige Brennelemente ist das eine relativ grobe Näherung.

## 3.3 Streuung von Neutronenstrahlung an Luft (Skyshine)

Zur Modellierung von Skyshine-Effekten wurde das "Baikal-1 Skyshine Experiment" (NEA-1517/83 in der SINBAD-Datenbank bzw. ALARM-REAC-AIR-SKY-001 im ICSEP-Handbuch) ausgewählt /NEA 95/. Bei diesem 1996-97 durchgeführten Versuch wurde am RA Versuchsreaktor bei Semipalatinsk über einen abnehmbaren Betondeckel der Reaktorkern freigelegt und unter anderem der Neutronen- und Photonenfluss in Bodennähe in verschiedenen Abständen zum Reaktor gemessen. Bei dem RA Reaktor handelt es sich um einen luftgekühlten Zirkoniumhydrid-moderierten Reaktor, der über mit Borcarbid beschichtete rotierbare Zylinder gesteuert werden kann und mit hochangereichertem Uran betrieben wurde.

Eine schematische Darstellung des Reaktors ist in Abb. 3.31 zu sehen. Wie in Abb. 3.32 dargestellt besteht der Kern des Reaktors aus 37 stabförmigen runden Brennelementen mit Brennstoff bestehend aus Urancarbid (UC<sub>2</sub>) in einer Niob-Zirkonium-Matrix. Der Brennstoff ist dabei in einer Stahlhülle eingeschlossen und von einem Abstandshalter aus Graphit umgeben. Die Brennelemente befinden sich in einer hexagonalen Anordnung in einem zylinderförmigen festen Moderator aus Zirkonium-hydrid, der mit einer Vielzahl kleiner Bohrungen zur Luftkühlung versehen ist. Der Reaktorkern ist von einem Reflektor aus metallischem Beryllium und Graphit umgeben. Der Moderator ist wiederum von einem ebenfalls zylinderförmigen Berylliumreflektor umgeben und in einen Behälter aus Stahl eingefasst. Der Stahlbehälter ist von einem Graphitreflektor umschlossen. Außerdem befinden sich Wassertanks als zusätzliche Reflektoren im Reaktorgebäude. Innerhalb des Berylliumreflektors sind drehbar gelagerte Berylliumzylinder eingelassen, die zu einem Drittel ihres Umfangs mit einer Borcarbidbeschichtung versehen sind.



Abb. 3.31 Schematische Darstellung des RA-Versuchsreaktors für das Skyshine-Experiment

Nach /NEA 95/, Abmessungen in Millimeter.



Abb. 3.32 Graphische Darstellung eines Brennelements (links) und des Reaktorkerns (rechts) des RA Reaktors

Nach /NEA 95./

Diese Berylliumzylinder dienten als Steuerelemente für den Reaktor. Nach unten hin wird der Reaktorkern von einem Berylliumreflektor abgeschlossen, nach oben von einem Graphitreflektor und einer Stahlplatte als Abdeckung mit Durchführungen für den Luftstrom für die Kühlung.

Für die Skyshine-Experimente an diesem Reaktor wurden umfangreiche Messungen mit vielen unterschiedlichen Detektoren durchgeführt. Dies ist im Detail in /NEA 95/ beschrieben. Eine aktuelle Nachrechnung des Benchmarks mit dem Programm TRI-POLI-4 ist in /LEE 14/ beschrieben. Zur Nachrechnung für den Benchmark wurde in /NEA 95/ eine Untermenge dieser Messungen ausgewählt. Diese werden im Folgenden beschrieben.

Oberhalb des Reaktorkerns wurden in drei Höhen Messungen vorgenommen: Direkt auf der Stahlabdeckung 18 cm oberhalb des Kerns (Ebene 0), 130 cm oberhalb der Stahlabdeckung (Ebene 1) und 260 cm oberhalb der Stahlabdeckung (Ebene 2). Die Messungen fanden jeweils in verschiedenen Abständen zur Kernmitte statt. Die eigentlichen Skyshine-Messungen wurden außerhalb des Reaktors in Abständen von 50, 100, 200, 300, 400, 500, 600, 800, 1000, 1250 und 1500 m von der Reaktormitte vorgenommen. Die Detektoren befanden sich dabei in 1 m Höhe über dem Boden. An den Detektorpositionen oberhalb des Reaktors wurden für die Analyse Messungen des thermischen Neutronenflusses und der Photonendosis ausgewertet. Für eine Auswertung der Reaktionsraten der <sup>115</sup>In(n,n')-Reaktion, die im Benchmarkbericht zusätzlich angegeben sind, fehlen in SCALE die entsprechenden Wirkungsquerschnittsdaten. An den Positionen der Skyshine-Detektoren neben dem Reaktorgebäude wurden Messungen der Neutronen- und der Photonendosis, des thermischen Neutronenflusses und des epithermischen und schnellen Flusses analysiert. Um die Komplexität der Auswertung in vertretbarem Rahmen zu halten, wurde auf die Analyse von spektral aufgelösten Multigruppendaten, die Benchmarkbericht zusätzlich angegeben sind, verzichtet.

## 3.3.1 Modellierung

Zur Modellierung des Problems wurde auf sämtliche im Benchmarkbericht verfügbaren Daten zurückgegriffen. Das heißt, es wurde soweit möglich eine vollständige Modellierung der geometrischen Anordnung vorgenommen. An einzelnen Stellen sind die Angaben in /NEA 95/ nicht ganz eindeutig. Dies betrifft zum einen die Betonabschirmung um den Reaktorkern und die äußere Gebäudehülle und zum anderen den Berylliumreflektor unterhalb des Reaktorkerns. Da mögliche kleinere Fehler in der Geometrie der Abschirmung wenig Einfluss auf das Ergebnis haben dürften, wurde mit plausiblen Schätzungen gearbeitet. Auf die Unsicherheiten beim Berylliumreflektor wird weiter unten noch einmal eingegangen.

In Abb. 3.33, Abb. 3.34 und Abb. 3.35 ist das in MAVRIC erstellte Modell des RA Reaktors und seiner Umgebung in verschiedenen Detaillierungsgraden dargestellt. Die gesamte Anordnung ist eingebettet in einen Zylinder der Höhe 1200 m und einem Radius von 1500 m, der mit Luft, beziehungsweise gemäß den Vorgaben aus /NEA 95/ in den unteren 40 cm mit Erde gefüllt ist. Im Benchmarkbericht sind Messreihen von drei unterschiedlichen Daten angegeben, an denen jeweils unterschiedliche Luftdrücke und Luftfeuchtigkeiten herrschten. Entsprechend sind für die drei Messreihen unterschiedliche Materialangaben zur Modellierung der Umgebungsluft angegeben.



### Abb. 3.33 MAVRIC-Modell des RA Versuchsreaktors inklusive Gebäude

Ebenfalls abgebildet sind die als Ringdetektoren modellierten Tallies oberhalb des Reaktorkerns.



Abb. 3.34 Ausschnitt des MAVRIC Reaktormodells RA für Skyshine-Rechnungen

Zur besseren Darstellung wurde das Material für die Umgebungsluft aus der Darstellung entfernt.

Im Weiteren werden nur die Daten für die Messreihe vom 13.11.1996 verwendet. Analog zu den Angaben in /NEA 95/ wurden die Steuerzylinder nicht explizit modelliert, da dazu die notwendigen Daten nicht vorhanden sind. Stattdessen wurde das Borcarbid über den gesamten Berylliumreflektor verschmiert.

Zur Bestimmung der Quellverteilung für Neutronen und Photonen wurde die sogenannte CAAS-(Criticality Accident Alarm System)-Sequenz des SCALE-Pakets verwendet. Diese Sequenz wurde entwickelt, um, das Verhalten von Systemen zur Detektion von Kritikalitätsstörfällen zu modellieren. Dabei werden eine KENO-VI- und eine MAVRIC-Rechnung manuell gekoppelt. Mit der KENO-VI-Rechnung wird eine Kritikalitätsrechnung für eine kritische Anordnung durchgeführt. Aus dieser Rechnung wird eine gitterbasierte Neutronen- oder Photonenquelle in eine Datei abgespeichert, die in einer nachfolgenden MAVRIC-Rechnung als Quellverteilung verwendet werden kann. Im vorliegenden Fall bietet sich diese Sequenz zur Quelldefinition aufgrund dieses exotischen Reaktortyps an, bei dem ein von typischen LWR-Spektren deutlich abweichendes Neutronenspektrum zu erwarten ist. Ein zusätzlicher Vorteil ist, dass die Kritikalitätsrechnung auch ein dreidimensionales Leistungsprofil liefert. Entsprechende Daten sind im Benchmarkbericht nicht enthalten. Die Quellstärken wurden aus den angegebenen 300 kW thermischer Reaktorleistung zu 2,256E+16 Neutronen/s berechnet. Mithilfe des Parameters *fissionPhotonZAID* und der Angabe der mittleren Zahl der Neutronen pro Spaltung  $\bar{\nu}$ , der sich aus der Kritikalitätsrechnung ergibt, kann MAVRIC anhand vordefinierter Spaltphotonenspektren eine Gammaquelle berechnen<sup>1</sup>. Im vorliegenden Fall wurde das Spaltphotonenspektrum von <sup>235</sup>U verwendet.

Bei der Kritikalitätsrechnung wurde zunächst ein k<sub>eff</sub>-Wert erzielt, der um einige Prozent unterhalb von 1,0 lag. Dies ist vermutlich in der oben beschriebenen Mehrdeutigkeit bei der Reflektorspezifikation am Boden der Anordnung begründet. Durch Analyse des mitgelieferten MCNP Inputfiles und durch plausible Annahmen konnte dies schließlich korrigiert werden. Letzte Abweichungen vom Zustand der Kritikalität wurden durch manuelle Anpassung des Borcarbidgehalts erreicht. In Abb. 3.36 ist die mit KENO-VI berechnete Neutronenquellverteilung gezeigt. Die axiale Leistungsverteilung innerhalb der Brennstäbe ist deutlich zu erkennen. In radialer Richtung ist keine Reduzierung der Spaltraten zu erkennen. Dies liegt offenbar an der Ummantelung des Kerns mit dem Berylliumreflektor.

## 3.3.2 Ergebnisse zur Quellverifikation

Anhand der Messergebnisse der über dem Reaktor positionierten Detektoren kann die Definition der Quelle verifiziert werden. Dazu wurden die mit MAVRIC berechneten Ergebnisse mit den experimentellen Daten und den in /NEA 95/ angegebenen Ergebnissen einer Nachrechnung mit MCNP verglichen.

Anhand der Abbildungen ist ersichtlich, dass die mit MAVRIC erzielten Ergebnisse eine gute Übereinstimmung mit den Daten der MCNP-Rechnung aufweisen. Auch die gruppenweise Darstellung des Neutronenflusses zeigt eine gute Übereinstimmung. Es kann somit geschlossen werden, dass die mithilfe der CAAS-Sequenz ermittelte Quelle konsistent mit der in der MCNP-Rechnung definierten Quelle ist. Die CAAS-Sequenz stellt

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Gemäß SCALE Newsletter Nr. 45 (Frühjahr 2013)

also über ihren eigentlichen Zweck hinaus eine sinnvolle und praktikable Möglichkeit dar, einen Quellterm für ein Abschirmproblem zu bestimmen, dessen Quelle eine kritische Anordnung ist. Abb. 3.38 und Abb. 3.39 zeigen den thermischen Neutronenfluss und die Photonendosis an den drei Detektorebenen oberhalb des Reaktors als C/E-Werte relativ zum experimentellen Wert. Zum Vergleich sind zusätzlich die C/E-Werte der im Benchmarkbericht dokumentierten MCNP-Rechnung abgebildet. Es ist zu erkennen, dass die Ergebnisse der MAVRIC-Rechnungen dicht an denen der MCNP-Rechnungen liegen. Beide Rechnungen sind zueinander konsistent. Jedoch ist bei der Photonendosis eine Diskrepanz zwischen der analogen Monte Carlo Rechnung mit MONACO und der FW-CADIS Rechnung mit MAVRIC zu erkennen. Die Abweichungen zwischen beiden Rechnungen liegen teilweise außerhalb der jeweiligen statistischen Unsicherheiten. Eine schlüssige Erklärung dieser Beobachtung konnte bisher nicht gefunden werden.

Aufgrund der schwierigen Geometrie des Problems, die das Auffinden eines geeigneten Gitters für die DENOVO-Rechnung erschwert, könnte das Ergebnis wegen einzelnen Teilchen mit hohem Gewicht noch nicht genügend auskonvergiert sein. Es bleibt festzustellen, dass nicht für jeden Wert alle von MAVRIC bereitgestellten statistischen Konvergenzkriterien erfüllt waren.



Abb. 3.35 Detailausschnitt des Reaktormodells: RA Reaktorkern

Es zeigte sich zudem, dass für die Detektoren oberhalb des Reaktors nur geringe Verbesserungen der FOM-Werte erzielt werden konnten. Die Werte liegen im Bereich zwischen 1 und 10.



Abb. 3.36 Horizontaler und vertikaler Schnitt durch die mit KENO-VI berechnete Quellverteilung



Abb. 3.37Fluss an der Reaktorabdeckung: Vergleich zwischen den Daten aus dem<br/>Benchmarkbericht und den mit MAVRIC berechneten Werten





Die blaue Linie gibt jeweils das Ergebnis der MCNP-Rechnung aus dem Benchmarkbericht wieder. Die rote und orangene Kurve die MONACO- und die MAVRIC-Rechnung.





Die blaue Linie gibt jeweils das Ergebnis der MCNP-Rechnung aus dem Benchmarkbericht wieder, die rote und orangene Kurve die MONACO- und die MAVRIC-Rechnung.
# 3.3.3 Ergebnisse der Rechnungen zu den Skyshine-Detektoren

Bei den Rechnungen zur Bestimmung der Ergebnisdaten an den Detektoren neben dem Reaktor wurden ebenfalls die FOM-Werte für die FW-CADIS Rechnung mit der analogen MONACO-Rechnung verglichen. Für die weit entfernten Detektoren konnten dabei hohe Beschleunigungsfaktoren erzielt werden, wie in Tab. 3.7 zusammengestellt ist.

Die Ergebnisse entsprechend weitgehend den Ergebnissen der MCNP-Rechnungen aus dem Benchmark-Bericht. In beiden Rechnungen überschätzt die berechnete Summe aus epithermischem und schnellem Fluss das experimentelle Ergebnis nur leicht, während die berechneten thermischen Flüsse um einen Faktor 3 bis 4 über den experimentellen Werten liegen. Beide Rechnungen unterschätzen die Photonendosis etwa um einen Faktor 2. Deutlichere Unterschiede bestehen zwischen den berechneten Neutronendosen. Die MCNP-Rechnung aus dem Benchmarkbericht stimmt hier gut mit den experimentellen Werten überein, während die Ergebnisse aus der MAVRIC-Rechnung um einen Faktor 2 niedriger liegen. Abb. 3.40 zeigt die Ergebnisse aus beiden Rechnungen im Vergleich, jeweils als C/E-Werte.

Abstand zur Reaktormitte [m]	Neutronen dosis	Photonen dosis	Thermischer Fluss	Epithermi- scher und schneller Fluss
50	1.71E+00	2.99E+00	8.83E-01	1.11E+00
100	3.14E+00	2.84E+00	2.70E+00	1.08E+00
200	2.86E+01	2.62E+01	2.59E+01	2.20E+01
300	2.02E+01	2.28E+01	6.54E+01	6.46E+01
400	1.62E+02	1.33E+01	2.09E+02	3.17E+02
500	1.31E+02	4.43E+01	9.12E+02	4.50E+02
600	1.88E+03	1.02E+01	1.84E+03	1.36E+03
800	1.17E+03	1.91E+02	2.86E+02	9.29E+02
1000	3.21E+03	5.06E+02	2.97E+04	2.41E+04

Tab. 3.7Beschleunigungsfaktoren für die verschiedenen Ergebnisgrößen beiOptimierung auf den Neutronenfluss bzw. den Photonenfluss



Abb. 3.40 Ergebnisse der Skyshine-Detektoren als C/E-Daten. Jeweils MAVRIC- und MCNP-Rechnung aus dem Benchmarkbericht

Dn:	Neutronendosis
Dgamma:	Photonendosis
phi_th:	Thermischer Neutronenfluss
phi_in+f:	epithermischer + schneller Fluss

Wie bei der Berechnung der Werte für die Detektoren oberhalb des Reaktors gab es auch hier teilweise Probleme bei der Konvergenz der Ergebnisse. Die Streubreite der Ergebnisdaten für verschiedene Rechenläufe lag teilweise deutlich außerhalb der vom Programm angegebenen statistischen Unsicherheiten. Die genaue Ursache dieses Effekts konnte bislang nicht identifiziert werden.

#### Hilfsroutinen zur vereinfachten Anwendung von MAVRIC

Um die Arbeit mit MAVRIC in der GRS zu vereinfachen, wurden zwei Hilfsroutinen in der Programmiersprache Python3 entwickelt. Dabei konnte auf ein existierenden "Werkzeugkasten" von Programmen zurückgegriffen werden, die in der Vergangenheit in der Abteilung entwickelt wurden. Aufgrund der modularen Struktur dieses Baukastens ist die Erstellung neuer Werkzeuge im Allgemeinen mit einem geringen Aufwand verbunden.

#### 3.3.4 Ausleseroutine zur Ergebnisdatenauswertung

Je nach Anzahl und Art der in einer MAVRIC-Rechnung definierten Tallies kann ein MAVRIC-Lauf einen beträchtlichen Umfang an Daten ergeben, die in mehreren Ausgabedateien vorliegen. Die Auswertung und Aufbereitung dieser Daten ist z. T. mit erheblichem Aufwand verbunden. Daher wurde eine Routine erstellt, die die interessierenden Daten einliest und in Form einer großen Tabelle in eine Textdatei ablegt. Dabei können auch die Ergebnisdaten von mehreren Rechenläufen oder ganzen Rechenserien eingelesen werden. Durch Importieren dieser Daten in Excel können dann über Filterfunktionen die interessierenden Daten ausgewählt werden. Zusätzlich besteht die Option, eine Datenstruktur für das Auswerteprogramm ROOT /BRU 97/ zu erzeugen.

#### 3.3.5 Routine zur Gitteroptimierung für die CADIS-Rechnung

Die im Vorhaben gemachten Erfahrungen mit MAVRIC haben gezeigt, dass die Definition eines geeigneten Gitters für die deterministischen Vorrechnungen mit DENOVO von entscheidender Bedeutung für eine sinnvolle Nutzung der CADIS-Methode ist. Ein solches Gitter muss alle Materialgrenzen und vor allem die Abschwächung des Flusses über die Geometrie hinweg gut erfassen, d. h. bei starker Flussabschwächung müssen engere Maschen gesetzt werden. Ansonsten führt die erzeugte Importance Map zu einer ungünstigen Neutronenstatistik. MAVRIC gibt hier eine Hilfestellung in dem in der Ausgabe diejenigen Gitterpunkte angegeben werden, bei denen eine starke Änderung in der Importance auftritt.

Eine manuelle Optimierung ist ggf. sehr zeitaufwändig. Daher wurde diese Ausgabe wurde genutzt, um ein Programm zu schreiben, dass iterativ das zugrundeliegende Gitter verbessert. Dazu wird zunächst eine MAVRIC-Rechnung mit einem relativ groben Gitter gestartet, die direkt nach der deterministischen Rechnung abbricht. Die angegebenen Gitterpunkte mit zu starker Änderung in der Importance werden ausgelesen und es werden dann automatisch neue Zwischengitterpunkte definiert. Das neue Gitter wird dann in die Eingabedatei geschrieben und eine neue Rechnung gestartet. Dieser Prozess wird im Idealfall wiederholt, bis MAVRIC keine Warnmeldungen zum Gitter mehr ausgibt. Da in der aktuellen Ausführung des Programms keine Unterscheidung nach der Größe der Änderung in der Importance gemacht wird, können die so erzeugten Gitter sehr schnell sehr stark anwachsen, so dass die Rechnung unter Umständen die Größe des verfügbaren Arbeitsspeichers überschreitet, bevor die Konvergenz er-

65

reicht ist. Es gibt daher die Möglichkeit, die Optimierung nach einer gewissen Anzahl von Iterationen abzubrechen.

Trotz der bisher recht groben Ausführung der Optimierung konnten bereits vielversprechende Ergebnisse mit derart erzeugten Gittern erzielt werden. Insbesondere kann man beispielsweise zunächst ein sehr grobes Gitter definieren, dass nur wenig Rücksicht auf die geometrischen Gegebenheiten des jeweiligen Problems nimmt. Nach einigen Iterationen erhält man dann ein hinreichend feines Gitter, das an das Problem angepasst ist. Für zukünftige Anwendungen von MAVRIC wird es sinnvoll sein, diesen Optimierungsprozess weiter zu verfeinern.

# 4 Vergleich von Methoden zur Quelltermbestimmung

Will man Transportprozesse von Strahlung durch ein Medium und die dadurch lokal verursachte Ortsdosisleistung rechnerisch bestimmen, ist die möglichst exakte Berechnung des Quellterms eine wesentliche Voraussetzung für die Genauigkeit des Ergebnisses. Diese besteht in der Bestimmung von Intensität und spektraler Verteilung der auftretenden Beiträge der einzelnen Strahlungsarten. Sie umfassen neben der Gammastrahlung, die bei direkter Emission aus den Nukliden, aber auch bei den anderen Kernprozessen entsteht, die bei Kernspaltungen entstehende spontane und verzögerte wie auch die durch Reaktion von Alphateilchen im Quellmaterial hervorgerufene ( $\alpha$ ,n)-Neutronenstrahlung. Zusätzlich entsteht z. B. durch im Quellmaterial abgebremste geladene Teilchen photonische Bremsstrahlung.

Die vorgelegten Vergleichsrechnungen dienen der Untersuchung, in welchem Maße der von der GRS entwickelte Quelltermcode NGSRC sich in den Ergebnissen von anderen Codepaketen zur Quelltermerstellung, im Besonderen von dem heute im Paket SCALE 6.1 enthaltenen ORIGEN-ARP, unterscheidet.

## 4.1 Berechnung von Quelltermen

## 4.1.1 OREST und NGSRC

Die GRS verfügt mit den von ihr entwickelten Programmpaketen OREST /HES 86/ und NGSRC /QUA 92/ über zwei langjährig in der Praxis erprobte Werkzeuge zur Berechnung von Abbränden (OREST) und den daraus resultierenden Quelltermen (NGSRC). OREST stellt dabei ursprünglich eine Kombination der Abbrandsoftware ORIGEN mit dem Zellcode HAMMER dar, der seit 1984 in der GRS verwendet und stetig weiterentwickelt wurde. Das so bestimmte Material- und Isotopengemisch dient als Eingabeinformation für die Berechnung des Quellterms durch NGSRC.

Bei NGSRC handelt es sich um eine von der GRS in den Jahren 1988 – 1992 entwickelte Software, in der verschiedene Module zur Lösung von Einzelaufgaben zu einem System gekoppelt wurden, in dem in sich konsistent die Neutronen- und Photonenstrahlungsquellen aus der Kombination von etwa 700 Strukturmaterial-, 140 Schwermetall- und 800 Spaltprodukt-Isotopen bestimmt werden können. Die Erfassung der Zerfallsgamma- und Bremsstrahlungsspektren geschieht dabei über Gammalinienbibliotheken, während die Spontanspaltneutronen in Intensität und Spektrum berechnet werden. Für die ( $\alpha$ ,n)-induzierte Neutronenspaltung wird durch das in NGSRC enthaltene Modul GRSALP ein semi-empirisches Modell bereitgestellt, das die Erzeugung der Neutronenspektren unter Verwendung einfacher physikalischer Formeln und der Berücksichtigung bekannter experimentellen Daten durchführt.

## 4.1.2 SCALE und ORIGEN

Das vom *Oak Ridge National Laboratory* (ORNL) entwickelte und vertriebene Softwarepaket SCALE (*Standardized Computer Analyses for Licensing Evaluation*) ist eines der heute weitverbreitetsten Werkzeuge für Berechnungen und Simulationen auf den Gebieten Reaktorphysik, Kritikalitätssicherheit und Strahlenschutz. Seit Dezember 2013 liegt es in der Version 6.1.3 vor. Das Programmpaket selbst besteht aus der Bereitstellung verschiedener, für jeweils unterschiedliche Aufgaben entwickelter Module, die sich miteinander entsprechend der jeweils zu bearbeitenden Problematik kombinieren lassen.

Als Modul für die Bestimmung des abbrand- und zerfallsabhängigen Nuklidinventars sowie resultierender Quellterme greift SCALE auf eine angepasste und stetig aktualisierte Weiterentwicklung des Abbrandcodes ORIGEN mit der Bezeichnung ORIGEN-S zurück. In den aktuellen SCALE-Versionen werden viele der eigentlichen ORIGEN-S-Funktionalitäten in ein neues Prozessierungsmodul integriert, das Modul *Automatic Rapid Processing* bzw. ORIGEN-ARP. Dieses stellt neben einer neuen grafischen Benutzeroberfläche zur Ansteuerung von ORIGEN durch automatisierte Erstellung der ORIGEN-S-Eingabedateien auch ein alternatives und schnelles Werkzeug für die Erstellung von Abbrandanalysen zur Verfügung. Zusätzlich integriert es zur grafischen Aufarbeitung bzw. Darstellung der berechneten Ergebnisse die SCALE-Module OPUS und PlotOPUS.

## 4.2 Vergleichende Abbrand- und Quelltermberechnungen

Für die Vergleichsrechnungen bei der Quelltermbestimmung wurde ein realitätsnah modellierter Fall eines bestrahlten Uranoxid-Brennelements mit anschließender fünfjähriger Abklingzeit gewählt, nach deren Ende Nuklidinventar und Quellterm ausgewertet werden.

# 4.2.1 Auslegung der Vergleichsrechnungen

Die Abbrandgeschichte des modellierten Brennelements, die zu einem Gesamtabbrand von 55 GWd/tSM führte, wird in Tab. 4.1 aufgeschlüsselt dargestellt. Sie wurde entsprechend in OREST und ORIGEN-ARP modelliert. Einer Zeitdauer von einem Jahr zwischen Herstellung des Brennelements und Einbringung in den Reaktor schließen sich vier Betriebsjahre an, in denen der Brennstoff jeweils 305 Tage bei einer Leistung von 45,09 MW/tSM bestrahlt wird. Dem schließt sich eine Abklinglagerung von fünf Jahren an.

Der Kernbrennstoff selbst wurde mit einer ursprünglichen Anreicherung von 4,4 % <sup>235</sup>U modelliert. Er befindet sich in einem DWR-Brennelement der Auslegung 16 x 16-20. Die Modellierung in OREST orientierte sich an den typischen Daten eines solchen Brennelementtyps; sie sind in Tab. 4.2 wiedergegeben. In ORIGEN-ARP, das innerhalb der Benutzeroberfläche nur die Verwendung vordefinierter Geometrien erlaubt, wurde der diesem Fall der Anordnung am nächsten kommende vordefinierte Brennelementtyp CE16 x 16 ausgewählt.

Tab. 4.1	Modellierung der Abbrandgeschichte im untersuchten Modelllauf, realisiert
	in SCALE und OREST

Zeitdauer /d	Leistung /(MW/tSM)	Anmerkung
365	0	vor Reaktoreinsatz
305	45,09	1. Leistungsjahr
60	0	
305	45,09	2. Leistungsjahr
60	0	
305	45,09	3. Leistungsjahr
60	0	
305	45,09	4. Leistungsjahr
1825	0	5-jährige Abklinglagerung

# Tab. 4.2Spezifika der Brennelementparametrisierung in OREST mit den<br/>wichtigsten geometrischen Kenndaten des Modells

Parameter	Wert	
Brennelementauslegung	16 x 16-20	
Brennstablänge gesamt	4407 [mm]	
Aktive Brennstablänge	3900 [mm]	
Hüllrohraußendurchmesser	10,75 [mm]	
Hüllrohrinnendurchmesser	9,3 [mm]	
Pellet-Durchmesser	9,1 [mm]	
Schwermetalleinsatz	537 [kg]	

Für den Vergleich der beiden Berechnungen wurde die Ergebnisse jeweils auf eine Gesamtmasse von einer Tonne Uran normiert. Sowohl bei OREST/NGSRC als auch bei ORIGEN-ARP geht die Masse nur als Faktor in die Berechnungen ein und kann somit ohne Beeinflussung der Ergebnisse nachträglich angeglichen werden.

# 4.2.2 Nuklidinventare

# 4.2.2.1 SCALE 6.1

Während der Bestrahlungszeiten zeichnet SCALE die zeitabhängigen Massenkonzentrationen von 1.143 Nukliden im Brennstoff auf und listet sie in der am Ende der Simulation übergebenen Ausgabedatei auf. Von diesen Nukliden sind 69 Aktinoide und 1 074 Spaltprodukte. Viele dieser Nuklide sind kurzlebig, so dass ihre Beiträge schon kurze Zeit nach der Entnahme aus dem Reaktor deutlich zurückgegangen sind. Für die Simulation der fünfjährigen Abklinglagerung werden von SCALE schließlich nur noch acht Aktinoide (<sup>235</sup>U, <sup>236</sup>U, <sup>237</sup>Np, <sup>239</sup>Pu, <sup>240</sup>Pu, <sup>241</sup>Pu, <sup>242</sup>Pu) und 83 Spaltprodukte explizit in der Ausgabe aufgeführt. Die Aktinoide finden sich dabei am Ende der Abklingzeit in einer Konzentration von 943 kg/t Schwermetall und die Spaltprodukte von 57 kg/t Schwermetall. Dabei bestehen die Schwermetalle der Masse nach zu etwa 91,6 % aus <sup>238</sup>U; bei den Spaltprodukten weisen <sup>136</sup>Xe mit etwa 3,9 % und <sup>144</sup>Nd mit etwa 2,3 % die höchsten Massenanteile auf. Für eine graphische Ausgabe bietet die Benutzeroberfläche von ORIGEN-ARP an, eine vom Benutzer zu definierende Auswahl an Nukliden an das Programmmodul OPUS zu übergeben. Für diese Auswahl werden je nach Einstellung die zeitabhängigen Konzentrationen, Massen, Stoffmengen oder Aktivitäten während der Abklinglagerung übergeben und von OPUS in Form eines semi-logarithmischen Diagramms dargestellt. Die dargestellten Daten werden auch in die SCALE-Ausgabedatei übernommen und können von dort entnommen und weiter verarbeitet werden.

Die Massekonzentration der wichtigsten Nuklide aus dem SCALE-Modellauf findet sich in Tab. 4.3. Alle Daten beziehen sich auf eine fünfjährige Abklingdauer.

# 4.2.2.2 OREST Version 2004

In der Ausgabe der Ergebnisse werden von OREST weitere 477 Isotope, die 70 Elementen zugeordnet werden können, mit nicht vernachlässigbarem Vorkommen aufgeführt. Getrennt nach einzelnen Isotopen bzw. nach summierten Werten für die Elemente werden die zeitabhängigen Werte für Stoffmenge, Masse, Aktivität und über Neutronen abgegebene Energie kalkuliert und in die OREST-Ausgabedatei aufgenommen. Zusätzlich werden direkt Statistiken erstellt über die am stärksten beitragenden Isotope sowie – für einige der wichtigeren Elemente (Th, Pa, U, Np, Pu, Am und Cm) – über die relativen Beiträge der Einzelisotope zu dem jeweiligen Wert des Elements. Diese ermöglichen ohne weitere Analyse das Ablesen relevanter Werte direkt aus der Ausgabedatei.

Anders als SCALE berücksichtigt OREST in der Ausgabe der Nuklidliste auch leichte Elemente wie Sauerstoff, die sich z. T. in großer Menge in dem oxidischen Brennstoff befinden. Auf die reine Nuklidmenge bezogen ist <sup>16</sup>O der am häufigsten vorkommende Kern und stellt dabei 11,8 % der Gesamtmasse des Brennstoffs. Für die spätere Berechnung der ( $\alpha$ ,n)-Reaktionen sind die beiden Sauerstoffisotope <sup>17</sup>O und <sup>18</sup>O allerdings von größerer Bedeutung.

Bezogen auf die im Kernbrennstoff enthaltenen Schwermetalle ergibt sich für Uran eine Massenkonzentration von etwa 929 kg/t Schwermetall. Davon entfallen etwa 917 kg auf <sup>238</sup>U, ein im Wesentlichen identischer Wert zu der analogen Berechnung in SCALE.

# 4.2.2.3 Vergleich der berechneten Nuklidinventare

Die von SCALE und OREST kalkulierten Nuklidinventare werden in den Tab. 4.3 und Tab. 4.4 sortiert wiedergegeben; in Tab. 4.3 nach berechneter Masse bzw. Massenkonzentration, und in Tab. 4.4 nach Stoffmenge in Grammatom. Verglichen werden nur die enthaltenen Schwermetalle, da SCALE leichte Elemente hier nicht aufführt. Von diesen erbrächte andernfalls <sup>16</sup>O gemäß den OREST-Berechnungen nach Stoffmenge den höchsten Beitrag der enthaltenen Nuklide, nach Masse den zweithöchsten. Zusätzlich erschiene in der Sortierung nach Nuklidvorkommen auch <sup>18</sup>O an achter Stelle aller Nuklide.

SCALE			OREST	
Nuklid	Konzentration [kg/t SM]	Rang	Nuklid	Konzentration [kg/t SM]
U-238	915,90	1	U-238	916,90
U-235	6,79	2	U-235	6,55
U-236	6,24	3	Pu-239	6,21
Pu-239	6,23	4	U-236	5,66
Xe-136	3,88	5	Xe-136	3,89
Pu-240	3,08	6	Pu-240	2,91
Xe-134	2,54	7	Xe-134	2,53
Nd-144	2,29	8	Nd-144	2,30
Ba-138	2,16	9	Ba-138	2,16
Ce-140	2,11	10	Ce-140	2,02
La-139	2,01	11	La-139	2,01
Xe-132	1,95	12	Xe-132	1,94
Ce-142	1,85	13	Ce-142	1,86
Pr-141	1,83	14	Pr-141	1,82
Cs-137	1,79	15	Cs-137	1,79

Tab. 4.3Massenkonzentration der am meisten beitragenden Schwermetall-Nuklide<br/>in SCALE und OREST ohne leichte Elemente

Für die meisten untersuchten Nuklide ergeben sich im Wesentlichen übereinstimmende Werte zwischen den beiden Modellrechnungen (Abweichungen < 1 %). Lediglich einige Nuklide zeigen deutlich darüber hinausgehende Abweichungen. Am auffälligsten ist hier <sup>236</sup>U, das in der SCALE-Rechnung sowohl nach dem Reaktoreinsatz (hier nicht gezeigt) wie auch nach der Abklinglagerung zu etwa 10 % häufiger vorkommt als in der Vergleichsrechnung. Ebenso findet sich in der OREST-Abbrandrechnung eine merklich verringerte Konzentration an <sup>240</sup>Pu mit etwa 6%iger Abweichung vom SCALE-Wert.

Tab. 4.4Vorkommen der wichtigsten Schwermetall-Nuklide nach fünfjähriger<br/>Abklinglagerung in Grammatom, sortiert nach ihrer Häufigkeit im Kern-<br/>brennstoff

SCALE		OREST		
Nuklid	Stoffmenge [Grammatom]	Rang	Nuklid	Stoffmenge [Grammatom]
U-238	3847,5	1	U-238	3852,0
U-235	28,9	2	Xe-136	28,6
Xe-136	27,7	3	U-235	27,9
U-236	26,4	4	Pu-239	26,0
Pu-239	26,0	5	U-236	24,0
Xe-134	19,0	6	Xe-134	18,9
Nd-144	15,9	7	Nd-144	16,90
Ba-138	15,6	8	Ba-138	15,6
Mo-100	15,6	9	Mo-100	15,6
Ce-140	15,1	10	Xe-132	14,7
Xe-132	14,8	11	Ce-140	14,5
La-139	14,5	12	La-139	14,4
Mo- 98	13,9	13	Mo-98	13,9
Zr-96	13,7	14	Zr-96	13,7
Mo-97	13,7	15	Mo-97	13,7

Die Abweichungen ziehen sich entsprechend weiter in Tab. 4.5, da die resultierenden Stoffmengen bzw. Atomanzahlen trivial über das Atomgewicht der Isotope mit der Massenkonzentration zusammenhängen. OREST stellt diese Werte in einer zusätzlichen Auflistung in der Ausgabe bereit, für SCALE müssen sie durch den Anwender berechnet werden.

#### 4.2.3 Neutronenquellterm

#### 4.2.3.1 Neutronen durch Spontanspaltung

Die Konzentration der Nuklide im lagernden Kernbrennstoff bildet die direkte Ausgangsgröße zur Bestimmung der durch Spontanspaltung entstehenden Neutronen. OREST berücksichtigt dabei mit Beginn der Abklinglagerung 31 Spontanspalter, von denen nach fünfjähriger Lagerung noch 28 nicht-verschwindende Beiträge leisten. Zu diesem Zeitpunkt beträgt die gesamte Rate der Neutronen aus spontaner Spaltung etwa 1,090E09 pro Sekunde. Diese hat sich von einer Rate von 1,903E09 Neutronen pro Sekunde zu Beginn der Einlagerung damit bereits um etwa 43 % verringert. Die Beiträge der Nuklide werden dabei dominiert von dem des <sup>244</sup>Cm, das nach fünf Jahren Lagerung 98,5 % der Spontanspaltungsneutronen erzeugt, nämlich 1,074E09 pro Sekunde. Dagegen fallen die Beiträge anderer Nuklide kaum noch ins Gewicht. Es folgen <sup>246</sup>Cm mit etwa 8,3E06 und <sup>240</sup>Pu mit etwa 3,3E06 Neutronen pro Sekunde.

SCALE verfolgt in seiner Ausgabedatei eine alternative Methode der Darstellung. Hier finden sich für die relevanten Nuklide nach Energiegruppen aufgeschlüsselte Neutronenraten aus Spontanspaltung, mithin für jedes Ursprungsnuklid ein eigenes Neutronen-Energiespektrum. Allerdings beziehen sich diese Angaben lediglich auf den Zeitpunkt der Einlagerung, nicht auf die hier eigentlich interessierende fünfjährige Lagerungsdauer. Für die Einlagerung berechnet SCALE dabei eine Neutronenrate von 2,12E09 Neutronen pro Sekunde, mithin einen etwas höheren Wert verglichen mit der OREST-Rechnung zum gleichen Zeitpunkt. Die Diskrepanz geht zum größten Teil auf eine höhere <sup>244</sup>Cm-Masse bei Einlagerung in der SCALE-Simulation zurück; diese liegt um etwa 25 % gegenüber dem vergleichbaren OREST-Wert höher. Aufgrund unterschiedlicher in den Simulationen verwendeter Parametersätze zu den Kernzerfällen – die Zahl der pro Spaltung im Mittel freigesetzten Neutronen und des relativen Beitrag der Spontanspaltung – führt dies effektiv zu einer etwa 20 %igen Erhöhung der aus <sup>244</sup>Cm-Spaltungen stammenden Neutronen. Hier zeigen sich die Unterschiede in Bibliotheken bezüglich der Wirkungsquerschnitte und auch der spontanen Zerfälle des <sup>244</sup>Cm. Für SCALE ergibt sich so eine Neutronenausbeute von 2,70E09 Neutronen pro Sekunde pro Grammatom <sup>244</sup>Cm; für OREST liegt dieser Wert bei 2,80E09. Eine Darstellung der Unterschiede findet sich Tab. 4.5. Zusätzlich aufgeführt wurden die Beiträge des dominierenden Nuklids <sup>244</sup>Cm- und die durch die Verwendung verschiedener Bibliotheken unterschiedliche Neutronenrate pro Grammatom <sup>244</sup>Cm.

Die zum Zeitpunkt der Entladung vorhandenen Unterschiede ziehen sich entsprechend durch bis zum Zeitpunkt der Betrachtung nach fünf Jahren Abklinglagerung. Bei beiden Simulationen dominiert hier <sup>244</sup>Cm die Neutronenerzeugung mit 98,5 % der aus spontaner Spaltung erzeugten Neutronen. Dies erfolgt in der SCALE-Rechnung allerdings bei insgesamt höheren Werten für die Spontanspaltung. Aufgrund des weitgehenden Verschwindens anderer Beiträge zur Neutronenrate aus Spontanspaltung hat sich dieser Wert dem Unterschied zwischen den aus <sup>244</sup>Cm-Kernen stammenden Neutronen von 19 % angeglichen.

Zeitpunkt: Einlagerung					
	SCALE 6.1	OREST V.2004	Diskrepanz		
Neutronenrate ges. [n/s]	2.12E09	1.90E09	11.6%		
Neutronenrate Cm-244 [n/s]	1.56E09	1.30E09	19.8%		
Anteil Cm-244	73.4%	68.3%	7.4%		
Vorkommen Cm-244 [gat]	0.578	0.4641	24.6%		
Neutronenausbeute [n/s/gat Cm-244]	2.70E09	2.80E09	-3.8%		
Zeitpunkt: fünf Jahre Abklinglagerung					
	SCALE 6.1	OREST V.2004	Diskrepanz		
Neutronenrate ges. [n/s]	1.31E09	1.09E09	19.8%		
Neutronenrate Cm-244 [n/s]	1.29E09	1.07E09	19.9%		
Anteil Cm-244	98.6%	98.5%	0.1%		
Vorkommen Cm-244 [gat]	0.478	0.3834	24.7%		

Tab. 4.5Neutronenrate durch Spontanspaltung zu Beginn und am Ende der<br/>fünfjährigen Abklinglagerung in SCALE und OREST

#### 4.2.3.2 (α,n)-Neutronen

SCALE verwendet in seiner Berechnung der ( $\alpha$ ,n)-Neutronenrate, bei Verwendung der voreingestellten UO<sub>2</sub>-Matrix Option, das Vorkommen der Sauerstoffisotope <sup>17</sup>O und <sup>18</sup>O, die in der Neutronenerzeugung als Target dienen und deren relatives Vorkommen im Kernbrennstoff darum direkt in die Berechnung einfließt. Gleichermaßen werden für alle relevanten  $\alpha$ -Strahler die Vorkommen berechnet. Aus diesen Werten werden gemäß der Bibliotheken die abgestrahlten  $\alpha$ -Teilchen mitsamt ihres Energieprofils bestimmt, sowie im Anschluss die daraus resultierenden ( $\alpha$ ,n)-Reaktionen und als Ergebnis die ( $\alpha$ ,n)-Neutronenausbeute. Diese Berechnung, die eine Bestimmung der Neutronenrate für jeden  $\alpha$ -Strahler mit jeweils den beiden  $\alpha$ -Sauerstoff-Zielisotopen ermöglicht, wird so explizit wieder nur für den Zeitpunkt der Entladung, d. h. das Ende des Reaktoreinsatzes, ausgegeben. Mittels der Anbindungsfunktion des Programmmoduls OPUS kann man sich aber auch hier wieder die nach Energiegruppe aufgeschlüsselten Neutronenraten nach fünfjähriger Abklinglagerung ausgeben und gegebenenfalls graphisch darstellen lassen.

OREST gibt für die eingestellten Zeitpunkte in der Abklinglagerung jeweils für jedes  $\alpha$ aktive Nuklid die resultierenden Neutronenraten an und erstellt die schon dargestellten Statistiken bezüglich relativer Anteile zu sämtlichen ( $\alpha$ ,n)-Neutronen und berücksichtigten Elementen. Eine exaktere Auswertung erlaubt allerdings die Verwendung des Programmmoduls NGSRC. Dieses bezieht aus OREST das vollständige berechnete Nuklidinventar und verwendet im Anschluss ORIGEN-Bibliotheken, um aus diesen Daten eine detaillierte Berechnung der ( $\alpha$ ,n)-Reaktionen und der resultierenden ( $\alpha$ ,n)-Neutronenrate durchzuführen. Dazu bestimmt es zuerst – vergleichbar wie SCALE – zu jedem Nuklid die  $\alpha$ -Erzeugungsrate. Für die weiteren Berechnungen werden dann nur die Teilchen mit nicht vernachlässigbarer  $\alpha$ -Teilchen-Erzeugung berücksichtigt. Aus Ihnen wird das diskrete Energiespektrum der erzeugten  $\alpha$ -Teilchen erstellt.

Im Folgenden berücksichtigt NGSRC für die Bestimmung der ( $\alpha$ ,n)-Neutronenraten elf verschiedene Targetnuklide (<sup>6</sup>Li, <sup>7</sup>Li, <sup>9</sup>Be, <sup>10</sup>B, <sup>11</sup>B, <sup>13</sup>C, <sup>14</sup>N, <sup>17</sup>O, <sup>18</sup>O, <sup>19</sup>F, <sup>23</sup>Na). Aus deren Konzentration und dem zuvor erstellten Energiespektrum der  $\alpha$ -Teilchen wird für jedes Zielnuklid die erzeugte Neutronenrate bestimmt. Die Hauptbeiträge werden hierbei auch hier von ( $\alpha$ ,n)-Reaktionen der Sauerstoffisotope <sup>17</sup>O und <sup>18</sup>O gestellt; die übrigen Nuklide tragen in der Modellrechnung einen Anteil von etwa 1,7 % oder 1,47E05 Neutronen pro Sekunde bei. Aus der Kombination von  $\alpha$ -Energien, Zielnukliden und

nuklidspezifischer Neutronenrate wird dann das Energiespektrum der Neutronen berechnet.



Abb. 4.1Vergleich der aus (α,n)-Reaktionen stammenden Neutronenstrahlung in<br/>SCALE (rot) und NGSRC (blau)

Vergleicht man die Raten der berechneten Neutronen, ergibt sich zwischen den Simulationen weitgehende Übereinstimmung: 1,682E07 Neutronen/s für SCALE, 1,599E07 Neutronen/s für OREST und 1,600E07 Neutronen/s für NGSRC. Unterschiede dagegen erscheinen beim Vergleich der Neutronen-Energiespektren, wie sie SCA-LE und das auf dem OREST-Nuklidinventar aufbauende NGSRC bestimmen (vergl. Abb. 4.1). Für beide Verteilungen liegt das Maximum übereinstimmend bei etwa 2,6 MeV. Im Gegensatz zum SCALE-Spektrum löst die OREST-Rechnung allerdings noch zwei lokale Maxima in den Bereichen 0,2 und 0,9 MeV auf, erfasst dagegen aber signifikant weniger Neutronen um die Hauptmaximumsenergie. Dies spiegelt sich auch in der durchschnittlichen Energie der ( $\alpha$ ,n)-Neutronen wieder; sie beträgt in der SCA-LE-Rechnung etwa 2,47 MeV, in der OREST-Rechnung dagegen nur 2,28 MeV.

ORIGEN-S und NGSRC greifen bei der Berechnung der ( $\alpha$ ,n)-Neutronenraten und -spektren grundsätzlich auf die gleiche experimentellen Datenbasis zurück. Bei den verwendeten Berechnungsverfahren gibt es allerdings einige kleinere Unterschiede. Grundsätzlich werden für die Rechnung die Energien und Intensitäten der emittierten Alphateilchen, die Neutronenausbeuten in Abhängigkeit der Alphaenergie, die Energieverteilung pro Anregungsniveau der emittierten Neutronen und die Verteilung der Besetzung des Zwischenkerns benötigt. ORIGEN-S bezieht diese Informationen aus tabellierten Werten, die teilweise von experimentellen Daten und teilweise aus Berechnungen mit Programmen zur Modellierung von Kernreaktionen herrühren. NGSRC nutzt eine Kombination von tabellierten Daten und semi-empirischen Fitmodellen. So beruht zum Beispiel die Berechnung der Neutronenspektren auf der Annahme von Gaußprofilen für die einzelnen Teilspektren /GEW 89/, /QUA 92/.

Während in NGSRC jeweils das eingegebene Materialgemisch für die Berechnung der  $(\alpha,n)$ -Neutronenraten herangezogen wird, ist bei ORIGEN-S eine zusätzliche Angabe der Matrix erforderlich, in der das in der Abbrandrechnung bestimmte Inventar eingebettet ist. Voreingestellt ist hier eine UO<sub>2</sub>-Matrix, man kann aber auch eine vordefinierte Glasmatrix wählen oder eine selbstdefinierte Matrix wählen.

## 4.2.3.3 Gesamtneutronen

Alle drei Programme (OREST, NGSRC, ORIGEN-ARP/SCALE) bieten eine Aufbereitung der Gesamtzahl an entstehenden Neutronen pro Sekunde. Diese besteht aus der Summe der betrachteten Neutronenbeiträge. Eine Einbeziehung von verzögerten Neutronen erübrigt sich aufgrund ihres verschwindenden Beitrags während der Abklinglagerung<sup>2</sup>, Der Vergleich der absoluten Zahlen zeigt, wie auch der oben ausgeführten Darstellung zu entnehmen ist, dass die Zahl der aus spontaner Spaltung stammenden Neutronen diejenige aus ( $\alpha$ ,n)-Reaktionen deutlich überwiegt. Die jeweils errechneten Werte lauten, parallel zu den Daten zur Spontanspaltung, 1,32E09 Neutronen/s in SCALE, 1,11E09 Neutronen/s in OREST und 1,05E09 Neutronen/s in NGSRC.

Neben der Verringerung der Gesamtneutronen zeigen sich in den in SCALE und NGSRC erzeugten Energieverteilungen der Neutronen (vergl. Abb. 4.2) nur geringe Unterschiede. Die mittlere Energie der Neutronen liegt in der NGSRC-Rechnung wieder leicht unter der in der SCALE berechneten, nämlich mit 1,99 MeV gegenüber 2,14 MeV. Damit erscheint die breite Energieverteilung etwas in den niederenergetischen Bereich verschoben. Eine in der SCALE-Verteilung sichtbare Einzellinie bei etwa 1,38 MeV wird durch die NGSRC-Rechnung nicht reproduziert. In beiden Spektren lässt sich auch aufgrund der Intensitätsunterschiede zwischen Spontanspaltung und  $(\alpha,n)$ -Reaktionen der Beitrag der  $(\alpha,n)$ -Neutronen nicht feststellen.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> In OREST wie auch in SCALE finden sich zum betrachteten Zeitpunkt der Abklinglagerung keine verzögerten Neutronen. In NGSRC ist eine Berücksichtigung nicht implementiert.



Abb. 4.2 Berechnete Gesamtneutronenstrahlung in SCALE (rot) und NGSRC (blau)

## 4.2.4 Gammastrahlung

Aufgrund ihrer Bedeutung für den Quellterm stellen alle drei Programme nicht nur eine Berechnung der auftretenden  $\gamma$ -Teilchen pro Sekunde zur den verschiedenen Zeitpunkten des Modellaufs dar, sie berechnen auch explizit die Energiespektren für die Strahlungsart. Die Auflösung der Spektren unterscheidet sich dabei allerdings deutlich, so dass die Daten, die direkt in OREST errechnet und ausgegeben werden, lediglich zu einer ersten Abschätzung dienen können. Die Auflösung der SCALE-Rechnung kann man manuell einstellen; in der höchsten vorgegebenen Energiegruppen-Auflösung entspricht sie in etwa derjenigen von NGSRC.

Die berechneten  $\gamma$ -Raten liegen für SCALE bei 1,79E+16  $\gamma$ /s, für OREST bei 1,97E+16  $\gamma$ /s und für NGSRC bei 2,24E+16  $\gamma$ /s. Im Energiespektrum zeigen sich allerdings deutliche Unterschiede. So ist die überwiegende Zahl der von NGSRC erfassten  $\gamma$ -Teilchen niederenergetischer Art, was sich auch in der mittleren Energie der berechneten Teilchen ausdrückt. Diese liegt für NGSRC mit 385 keV deutlich niedriger als für SCALE mit 439 keV. Möglicherweise handelt es sich bei den Unterschieden auch durch unterschiedliche Schwellenwerte für niederenergetische  $\gamma$ -Teilchen hervorgerufene numerische Artefakte in der Rechnung. Auffällig ist ferner das Fehlen einer von SCALE berechneten  $\gamma$ -Linie bei 511 keV in der NGSRC-Simulation. Durch ihre Energie lässt sie sich leicht als Signal der Elektron-Positron-Annihilation identifizieren, die in den ORIGEN-Bibliotheken ausdrücklich erwähnt wird. Die Implementierung dieses Prozesses ist derzeit in NGSRC nicht gegeben /QUA 92/. Über die eventuelle Berücksichtigung dieser Linie in der OREST-Berechnung lässt sich durch die grobe Energiegruppen-Einteilung an dieser Stelle keine Aussage treffen.

Anhand des Modelllaufs Aussagen hinsichtlich der Effekte unterschiedlicher Bremsstrahlungsmodellierungen bzw. des Einsatzes diesbezüglich unterschiedlicher Bibliotheken zu treffen, ist nicht möglich, da die γ-Raten nur als Gesamtsumme und nicht in einzelne Beiträge aufgeschlüsselt in den Ausgaben der Programme angegeben werden. Hier bedürfte es weitreichender Modellläufe mit genau vorgegebenen und programmübergreifend realisierten identischen Materialzusammensetzungen und Verteilungen. Einstellungen solcher Art sind in ORIGEN-ARP nicht vorgesehen, weshalb sie einen Rückgriff auf den eigentlichen ORIGEN-S-Kern der SCALE-Simulation erfordern würden.



Abb. 4.3 γ-Strahlungs-Energiespektren aus SCALE (rot), NGSRC (blau) und OREST (grün)

Die Energieauflösung wird in NGSRC und OREST vorgegeben, in SCALE wurde die feinste standardisierte Energiegruppenauflösung verwandt, die etwa der von NGSRC vergleichbar ist.

#### 4.2.5 Alternative Bibliotheken für (α,n)-Reaktionen

Von den aktuellen, etablierten Datenevaluationen für nukleare Wirkungsquerschnitte enthalten nur TENDL /KON 12/ und JENDL/AN-2005 /MUR 06/ Daten zu Reaktionen mit einlaufenden  $\alpha$ -Partikel und nur letztere zu ( $\alpha$ ,n)-Reaktionen. JENDL/AN-2005 ist eine speziell für Brennstoffkreislaufanwendungen entwickelte Bibliothek, die Wirkungsquerschnitte für ( $\alpha$ ,n)-Reaktionen für 17 leichte Nuklide enthält. Insbesondere enthält sie Daten zu Neutronenproduktionsquerschnitten und -energiespektren. Diese Daten beruhen auf experimentellen Daten und Berechnungen mit verschiedenen Program-

men zur Analyse von Kernreaktionen, insbesondere zur Analyse der Resonanzstrukturen.

Die so bestimmten Wirkungsquerschnitte wurden mit Messungen von Neutronenausbeuten an dicken Targets verglichen und verifiziert. Teilweise wurden anhand dieser Vergleiche Anpassungen der Wirkungsquerschnitte vorgenommen. Die in /MUR 06/ dargestellten Vergleiche mit den Neutronenausbeuten zeigen im Allgemeinen sehr gute Übereinstimmungen, die eine Verwendung dieser Daten für die Berechnung von Neutronenquelltermen interessant erscheinen lassen. Eine Implementierung in die vorhandene Programmstruktur wäre allerdings mit erheblichem Aufwand verbunden. Weiterhin ist festzustellen, dass die zugrundeliegenden experimentellen Daten dieser Bibliothek im Wesentlichen die gleichen sind, die auch schon für die Entwicklung von NGSRC verwendet wurden, und offenbar nur in sehr geringem Umfang neuere experimentelle Daten hinzugekommen sind.

#### 4.3 Zusammenfassung

Der Vergleich der beiden Programmpakete ORIGEN/SCALE und OREST/NGSRC zeigt in weiten Teilen eine gute Übereinstimmung der Ergebnisse. Im Detail finden sich aber z. T. signifikante Unterschiede, z. B. in der Berechnung des Nuklidinventars während des Abbrands. Diese deuten auf Unterschiede in den verwendeten Wirkungsquerschnitts- und Zerfallsbibliotheken hin. Sie setzen sich dann zum Teil – hauptsächlich durch den hohen relativen Beitrag von <sup>244</sup>Cm – in die Bestimmung der ( $\alpha$ ,n)-Neutronenstrahlung fort. Bei dieser zeigt sich aber auch die unter Umständen detailreichere Berechnung des Spektrums durch das Quellterm-Erzeugungsmodul NGSRC, das mehrere in den SCALE-Berechnungen nicht auftauchende niederenergetische Signale auflöst. Im Gegenzug führt die fehlende Implementierung von Paarvernichtungsprozessen in NGSRC zu einer Nichtberücksichtigung dieses Signals um die typische Elektronenruheenergie von 511 keV bzw. dessen Vielfachen.

# 5 Analyse eines generischen Behältermodells

#### 5.1 Hintergrund

In den letzten Jahren wurden bei den Rechenmethoden zum Strahlungstransport große Fortschritte erzielt. Trotzdem sind diese Rechnungen aus unterschiedlichen Gründen immer noch mit großen Unsicherheiten verbunden. Ein Ziel der vorliegenden Untersuchungen ist, mit fortgeschrittenen Rechenverfahren zur Abschirmung für einen generischen Transportbehälter aufzuzeigen, welche Unterschiede sich in der Dosisleistungsberechnung ergeben können, wenn verschiedene unsichere Einflussgrößen variiert werden. Speziell sollen diese Unterschiede an den Stellen quantifiziert werden, an denen der Behälter eine Schwächung der Abschirmung aufweist, wie beispielsweise an den Tragzapfen oder am Ende von PE-Moderatorstäben. Ein wesentlicher zu untersuchender Punkt ist dabei der Einfluss der Wirkungsquerschnittsdaten-Evaluierungen, die bei der Rechnung zum Einsatz kommen. Der Einfluss der Methode zur Erstellung des Quellterms hinsichtlich der Auswirkung der Breitgruppenanzahl der Quelldefinition und der Verwendung unterschiedlicher Programme zur Quelltermerzeugung betrachtet werden. Die Einteilung des Quellterms in bestimmte Energiegruppen rührt noch aus der Nutzung von Breitgruppen für die Wirkungsquerschnittsbestimmung. Die Erzeugung des Quellterms durch die Abbrandrechnung und die Methode der Kondensierung unter Energie- und Teilchenerhalt pro Gruppe werden an dieser Stelle nicht tiefer untersucht. Fragen der Quelltermerstellung werden in Kap. 4 ausführlich diskutiert.

Am Beispiel eines generischen Transport- und Lagerbehältermodells werden die Auswirkungen in Abhängigkeit von

- der geometrischen Beschreibung (volumetrische /detaillierte Darstellung) der Quelle
- der Quellgruppenstruktur
- der Wirkungsquerschnittsdaten für Eisen
- Auswirkungen der Rechenmethoden bei gleicher Geometrie und gleichen Wirkungsquerschnittsdaten

auf die Dosisleistungsergebnisse am Behälter gezeigt. Zur Einschätzung der Unterschiede wird auch noch eine Rechnung zentral am Behältermantel durchgeführt.

85

Wesentliche Grundlage bei allen Methoden sind die nuklearen Daten. Gute und verlässliche Wirkungsquerschnitte bilden die Voraussetzung für die Berechnung von Abschirmungsproblemen. Wirkungsquerschnittsevaluierungen sind oft für bestimmte Probleme zugeschnitten und bedienen mit ihren Informationen nicht alle Fragestellungen.

Unsicherheiten durch Variation der Abmessungen der Geometrie liefern keinen Beitrag zur Bestimmung von Unsicherheiten in der Methodik und werden hier nicht untersucht.

## 5.2 Randbedingungen

## 5.2.1 Generischer Behälter mit homogener Beladung in MCNP

Für die Untersuchungen wird beispielhaft ein generisches Behältermodell gewählt. Die wesentlichen Abmessungen und Einbauten finden Berücksichtigung. Der Behälter wird mit 19 identischen UO<sub>2</sub>-Brennelementen beladen angenommen, die einen maximalen, über die gesamte aktive Brennstablänge homogenen Abbrand aufweisen. Für die Untersuchung werden nur Neutronenrechnungen betrachtet. Die Brennelementgeometrie wird im Behälter nicht stabweise, sondern als homogenes Material in der Korbposition, verteilt über das Volumen mit reduzierter Dichte angenommen. Zahlreiche Berechnungen in der Vergangenheit bestätigten, dass dies eine angemessene Näherung ist und deshalb eine sinnvolle Vorgehensweise darstellt /GUA 91/.

Der Behälter besteht aus dem Behälterkörper, sowie den Schacht verschließenden Doppeldeckeln – Primär- und Sekundärdeckel. Das Behälterkörpermaterial ist aus Sphäroguss (GGG-40), der Primär- und Sekundärdeckel aus Edelstahl (1.4313). In den Mantel sind in zwei Teilkreisen Bohrungen über die Behälterhöhe angeordnet, die mit Polyethylen-Stäben gefüllt sind. Sie dienen zur Neutronenmoderation. Deckel und Boden enthalten ebenfalls Moderatorplatten aus Polyethylen (PE). Der Behältermantel ist in Form von radialen Kühlrippen ausgebildet. Im oberen und unteren Bereich befinden sich an den Seiten Anschlagelemente. Die Tragzapfen wurden explizit modelliert. Detaillierte Angaben zu Abmessungen und Materialdefinitionen sind in Tab. 5.1 und Tab. 5.2 aufgeführt. Tab. 5.1Behältermaße des für die Analyserechnungen verwendeten generischen<br/>Lagerbehältermodells

Behälterkörper	
Schachtdurchmesser	148 [cm]
Schachthöhe gesamt	549,2 [cm]
Schachthöhe bis Primärdeckel	502,5 [cm]
Teilkreisdurchmesser erste PE-Bohrungsreihe	154 [cm]
Teilkreisdurchmesser zweite PE-Bohrungsreihe	174 [cm]
Anzahl der Bohrungen erste PE-Bohrungsreihe	50
Anzahl der Bohrungen zweite PE-Bohrungsreihe	57
Durchmesser je Bohrung	8 [cm]
Durchmesser bis Rippengrund	231,6 [cm]
Durchmesser bis Rippenspitze	243,6 [cm]
Primärdeckel	
Durchmesser oberer Teil	173 [cm]
Durchmesser unterer Teil	148 [cm]
Höhe	22,5 [cm]
Sekundärdeckel	
Durchmesser	195 [cm]
Höhe	12,5 [cm]

Die Umsetzung in ein MCNP-Modell wird in Abb. 5.1 und Abb. 5.3 gezeigt. Mit MCNP bzw. MCNP-VisEd /CAR 05/ werden die Zellunterteilungen auch innerhalb einer Materialschicht gezeigt. Dieses Vorgehen orientiert sich an der mittleren freien Weglänge der Teilchen durch die Geometrie und soll sicherstellen, dass die Flussabsenkung von Zelle zu Zelle möglichst einheitlich bleibt und nicht zu große Sprünge aufweist. In MCNP werden so sinnvoll Importances vom Benutzer vordefiniert.

Durch die geometrische Aufteilung wird der Weg der Teilchen durch die Materialschichten und somit die Entwicklung des Neutronenflusses verfolgt. Dazu wird die Neutronenanzahl von Zone zu Zone so optimiert, dass die Teilchenanzahl nahezu konstant bleibt. Diese Art von Varianzreduktion wird Importance Sampling genannt. Ausgehend davon wurden iterativ weitere Läufe durchgeführt, die zu einer automatische Verbesserung eines Detektorergebnisses am Tragzapfen führen. Dieser optimierte Satz an Weight Windows wurde für alle nachfolgenden Rechnungen verwendet.

# 5.2.2 Behältermodell in MAVRIC

Um den Einfluss verschiedener Berechnungsverfahren auf das Rechenergebnis abschätzen zu können, wurde für einzelne Vergleichsrechnungen zusätzlich ein Behältermodell in MAVRIC erzeugt. Dabei wurde versucht, ein möglichst identisches Modell zu erhalten. Das heißt, es wurde anhand der gleichen Daten in Bezug auf die Abmessungen gearbeitet und ein gleicher Detailierungsgrad angestrebt. Ein Bild des so erstellten Modells ist in Abb. 5.3 zu sehen.

Werkstoff	Element	Anteil (wt%)	Dichte (g/cm <sup>3</sup> )
Sphäroguss GGG-40	С	3.5	0,25
	Si	1.96	0,14
	Mn	0,6	0,04
	Fe	92,63	6,48
	Ni	1,31	0,09
	Summe	100	7
Edelstahl 1.4313	Cr	12,75	1
	Ni	4,25	0,33
	С	0,07	0,01
	Fe	80,43	6,274
	Si	1	0,08
	Mn	1,5	0,12
	Summe	100	7,8
Polyethylen (PE)	н	14,378	0,132
	С	85,662	0,788
	Summe	100	0,92

Tab. 5.2 N	Naterialzusammensetzungen des generischen Lagerbehältermodells
------------	--



Abb. 5.1 Querschnitt in Behältermitte des MCNP-Modells mit Einsatzkorb



# Abb. 5.2 Querschnitt mit Tragzapfen und dreidimensionale Explosionsdarstellung des Tragzapfens am MCNP-Modell des Behälters

Aufgrund bereits vorhandener Vorarbeiten wurde zusätzlich zum Modell mit homogenisierten Brennelementen auch eine Modellvariante mit stabweiser Modellierung der Brennelemente erstellt. Für den Vergleich mit den MCNP-Rechnungen wurden zwei Punktdetektoren am äußeren Ende der oberen Tragzapfens und im Tragzapfen ausgewertet. Dabei wurde als Quelle das mit NGSRC berechnete 174-Gruppen Neutronenspektrum verwendet, das auch bei den MCNP-Rechnungen zur Anwendung kam. Die Rechnung erfolgte unter Verwendung der in SCALE 6.1.2 enthaltenen 200-Neutronengruppen- und 47-Photonengruppen-Bibliothek für Abschirmungsrechnungen auf Basis von ENDF/B-VII.0. Analog zu den Rechnungen in den vorhergehenden Abschnitten wurde auch hier auf das FW-CADIS-Verfahren zur automatischen Varianzreduktion zurückgegriffen.

#### 5.2.3 Behälterinventar

Der für die Studie verwendete Brennelementtyp entspricht einem DWR-Brennelement mit 16 x 16-20 Aufbau. Der Abbrand von 55 GWd/tSM wird mit einer spezifischen Brennstoffleistung von 45 kW/tU und einer Bestrahlungsdauer von 1.220 Tagen erreicht. Die angenommene Anfangsanreicherung lag bei 4,4 % <sup>235</sup>U.

Die Behälterinventarbestimmung wird zum einen mit OREST/NGSRC, dem Standardverfahren der GRS, und zum Vergleich mit dem aus dem SCALE Paket zur Verfügung stehenden ORIGEN-ARP (ORIGEN- Automatic Rapid Processing) /SCA 11/ durchgeführt. Für beide Abbrandrechnungen wird für die homogene Beladung davon ausgegangen, dass alle Positionen im Behälter von Brennelementen gleichen Abbrands belegt werden. Dabei wird eine axiale Abbrandabhängigkeit vernachlässigt. Die Abklingzeit vor der Einlagerung beträgt 5 Jahre. Die für die Abbrandrechnung verwendeten Daten sind in Tab. 5.3 dargestellt.

Die Quellstärken werden mit den GRS-Codes OREST (Abbrand) /HES 86/ und NGSRC (Quellterm) /HES 92/ erstellt. ORIGEN-ARP dagegen liefert direkt den Abbrand und Verteilung der Strahlungsintensitäten für Neutronen und Gammas in Abhängigkeit von der Teilchenenergie in einer benutzerdefinierten Gruppenstruktur. Diese Daten werden als Quellterm für die weiterführenden Abschirmungsrechnungen mit MCNP5 /BRI 05/ und MAVRIC verwendet. Zur Umrechnung von Teilchenflüssen in Dosisleistungen werden die ICRP-74 Konversionsfaktoren /ICR 74/ angewendet.



Abb. 5.3Außenansicht und Schnitt durch das Behältermodell für MAVRIC in der<br/>Version mit stabweiser Brennelementmodellierung

# 5.2.4 Quelltermberechnung

NGSRC übernimmt die aus der OREST-Abbrandrechnung zum Abklingzeitpunkt vorliegenden Gramatom-Mengen und führt eine eigene Bestimmung der Quellstärken durch. Das Neutronenspektrum wird durch die Summation der Einzelspektren ermittelt. Die Energieverteilung der Neutronen wird von ORIGEN nicht selbst berechnet sondern liefert die Absolutwerte pro Isotop. Die energetische Verteilung erfolgt nach einer Maxwell- oder Cranbergfunktion. Mit Vorgabe von Neutronenvermehrungsfaktoren werden

Reaktortyp	Druckwasser
Brennelement	16 x 16-20
Zielabbrand	55 [GWd/tSM]
Anfangsanreicherung U-235	4,4%
Brennstabanzahl im BE	236
Brennstablänge	4407 [mm]
Hüllrohraußendurchmesser	10,75 [mm]
Hüllrohrinnendurchmesser	9,30 [mm]
Pellet-Durchmesser	9,10 [mm]
Aktive Länge	3900 [mm]
Schwermetalleinsatz Uran	537 [kg/BE]
Hüllrohrmaterial	Zirkaloy

## Tab. 5.3Daten eines DWR-Brennelements mit 16 × 16-20 Aufbau

zusätzliche Neutronenspektren aus induzierter Spaltung erfasst. ( $\alpha$ ,n)-Neutronen werden mit einem Modell für alle relevanten Isotope berücksichtigt.

Die Neutronenenergieverteilung für ein Isotop, einen Energiezustand und eine Alpha-Energie wird durch ein ,Gauss-Level'-Modell dargestellt /QUA 93/. Die Ergebnisse der Abbrandrechnung ergeben nach 5 Jahren Abklingzeit die in Tab. 5.4 dargestellten Eingangsquellgrößen bezogen auf das Volumen einer Brennelementposition von 23,5 x 23,5 x 390 cm<sup>3</sup>  $\approx$  215 cm<sup>3</sup>.

Die Art der Kondensierung der Quelldaten in vorgegebene Breitgruppen kann Auswirkungen auf das Ergebnis einer Abschirmungsrechnung haben, wenn die verwendete Bibliothek im quellintensiven Energiebereich grob definiert ist. NGSRC bietet verschiedene Methoden zur Kondensierung an:

- Standardverfahren unter Teilchenerhaltung,
- Energieerhaltung bei der Kondensierung,
- Gleichzeitige Energie- und Teilchenerhaltung.

	Teilchen pro cm <sup>3</sup> Brennelementvolumen
Zerfalls-γ	3,22E+10
Bremsstrahlung	2,315E+10
Summe	5,53E+10
Neutronen aus:	
Spontanspaltung	2,578E+3 [n/s]
(α,n)	4,136E+1 [n/s]
Summe	2,619E+3 [n/s]

Tab. 5.4Strahlungsquelltermdaten aus dem Abbrand eines UO2-Brennelementsmit 4,4 % Anfangsanreicherung nach 5 Jahren Abklingzeit

Verwendet wurde hier die letzte der drei Methoden. Bei diesem Modus werden alle Quellteilchen, die energetisch in eine Bibliotheksgruppe L fallen, energetisch gewichtet zwei korrespondierenden Gruppen zugeteilt /QUA 93/.

$$S(L) = S(L) + S_0(I) \frac{E_0(I) - E_M(L+1)}{E_M(L) - E_M(L+1)}$$
(5.1)

$$S(L+1) = S(L+1) + S_0(I) \frac{E_M(L) - E_0(I)}{E_M(L) - E_M(L+1)}, \qquad I = 1,15000$$
(5.2)

Dabei ist  $E_0(I)$  die Energie der Quelle,  $S_0(I)$  die Quellstärke,  $E_M(L)$  die Mittenenergie der *L*-ten Gruppe der Bibliothek, S(L) die Quellstärke der *L*-ten Gruppe der Bibliothek, in die die Quelle  $S_0(I)$  energetisch fällt. Es gilt  $E_M(L+1) < E_0(I) \le E_M(L)$ . Bei der untersten und obersten Gruppe fehlen die entsprechenden Nachbargruppen. Hier wird nur die Energieerhaltung berücksichtigt. Ausgangspunkt der Kondensierung ist in NGSRC sowohl für Photonen als auch für Neutronen ein Feingruppenspektrum in 15 000 Gruppen mit konstanter Breite von 1 keV. Mit dem Verfahren zur Erhaltung der Teilchen und Energie des Quellterms lassen sich folgende Vorteile erzielen:

- Sowohl die gesamte Quellstärke als auch die Quellleistung bleiben auch bei energetisch grob strukturierten Bibliotheken erhalten.
- Eine Renormierung auf andere Quellgrößen (Teilchen/Sekunde) ist möglich.
- Die gemittelte Teilchenenergie bleibt erhalten.

Abb. 5.4 zeigt die mit Hilfe von NGSRC berechnete Neutronen-Quellverteilung in 174 Energiegruppen. Die zu erkennenden Spitzen sind durch das Kondensierungsverfahren bedingt. Wenn in der Zielgruppenstruktur eine sehr schmale Gruppe neben einer relativ breiten Gruppe liegt, bekommt die schmale Gruppe aufgrund der oben dargestellten Methode eine höhere Gewichtung, da es einige Gruppen in der Ausgangsgruppenstruktur gibt, die zwar im Energiebereich der breiten Gruppe liegen, deren Mittenenergie näher an der Mittenenergie der schmalen als an jener der breiten Gruppe liegt.



Abb. 5.4 Kondensiertes Neutronenquellspektrum in 174 Energiegruppen unter Teilchen- und Energieerhalt, in direkter Verteilung (Teilchen/s) und in Lethargiedarstellung (Teilchen/s keV)

Die Quelle mit 174 Neutronengruppen wird im weiteren als Referenz verwendet.

Eine weitere Möglichkeit zur Erstellung eines Quellterms ist die Angabe einer analytischen Funktion für die Energieverteilung. MCNP bietet die Möglichkeit solche vordefinierten Funktionen zu verwenden. Im vorliegenden Problem liegt ein Neutronenspektrum vor, das von der Spontanspaltung von Curium-244 bestimmt wird. Dieses wird durch ein Watt-Energie-Spaltspektrum

$$p(E) = C \exp\left(\frac{E}{a}\right) \sinh((bE)^{\frac{1}{2}})$$
(5.3)

beschrieben. Für Cm-244 sind die Variablen a und b (0,906 MeV und 3,848 1/MeV) einzusetzen. Die Normierungsfaktor *C* wird aus der mit OREST/NGSRC berechneten Quellstärke bestimmt, um die Vergleichbarkeit der Ergebnisse zu gewährleisten.

Aus der Abbrandrechnung ergibt sich der Quellterm für Neutronenstrahlung aus den Anteilen der

- Spontanspaltung,
- α.n Reaktionen, und
- verzögerten Neutronen.

Die verzögerten Neutronen spielen im Reaktorbetrieb eine wichtige Rolle, entfallen aber für die Lagerung. Für die beiden Rechenverfahren OREST/NGSRC und ORIGEN-ARP stellen sich die Quellterme im Vergleich gemäß Tab. 5.5 dar.

Es ist festzustellen, dass der Quellterm durch die Spontanspaltung geprägt ist und ein Unterschied von 16 % zwischen ORIGEN-ARP und OREST/NGSRC vorliegt. Die Spontanspaltung wird durch Curium-244 dominiert. Der Trend als solches wird von beiden Rechencodes bestätigt. Allerdings wird in den ORIGEN-ARP Abbrandrechnungen eine höhere Curium-Menge berechnet, was letztendlich den Unterschied von 16 % erklärt.

Die Neutronenquellstärke aus ( $\alpha$ ,n)–Reaktionen wird von beiden Verfahren in etwa gleich berechnet. Die spektrale Verteilung des Quellterms ist in Abb. 5.5 dargestellt. Der ( $\alpha$ ,n)-Anteil ist kleiner als 2 % am Gesamtanteil der Neutronen und ist nicht erkennbar, da er überlagert wird. Das Maximum der Neutronenverteilung liegt bei 729 keV.

Tab. 5.5	Vergleich der von den Programmen OREST/NGSRC und ORIGEN-ARP
	berechneten Quellstärken

Reaktion	OREST/NGSRC	ORIGEN-ARP
Spontanspaltung	1,090E+9	1,298E+9
α,n	1,660E+7	1,678E+7
Gesamtneutronen	1,107E+9	1,314E+9



 Abb. 5.5 Energieverteilung f
ür Neutronen aus einem mit 55 GWd/tSM abgebrannten DWR-Brennelement nach 5 Jahren Abklingzeit in 1 keV Schritten aus Spontanspaltung und (α,n)-Reaktionen mit OREST

Mit dem in der GRS entwickelten Hilfsprogramm SRCMCNP /QUA 93/ können diese Ausgangsdaten, die zunächst in 1 keV Schritten vorliegen, in beliebige Energiestrukturen unter Teilchen- bzw. Energieerhalt oder gleichzeitigem Teilchen- und Energiegehalt kondensiert werden. Somit ergeben sich die Intensitäten, verteilt auf die Energiebreitgruppen als Quellstruktur für die MCNP-Rechnungen. Für die Rechnungen wurden zwei verschiedene Gruppenstrukturen verwendet:

- 27 Neutronengruppen
- 174 Neutronengruppen

Die Kondensierung auf 27 Energiegruppen ist sowohl mit SCALE/ORIGEN-ARP als auch mit OREST/SRCMCNP möglich. Der Vergleich der kondensierten Quellterme aus ORIGEN-ARP sowie OREST auf 27 bzw. 174 Energiegruppen ist in Abb. 5.6 zu sehen. Für eine einheitliche Darstellung wurden die Intensitäten jeweils durch die Energiegruppenbreiten geteilt.

Die ORIGEN-ARP-Kurve weist wesentlich mehr Daten im niederenergetischen Bereich auf als die beiden anderen Gruppenaufteilungen. Die 174 Gruppen haben den bereits vorher beschriebenen unruhigen Verlauf. Der Kurvenverlauf für die 27 Energie-Gruppen verläuft im niederenergetischen Bereich oberhalb der beiden anderen Kurven, stimmt dann aber wieder für höhere Energien überein. Dem Verlauf des Quellterms nach zu urteilen, dürften sich daraus keine größeren Unterschiede ergeben, da die Dosisleistung aus den höheren Energiegruppen zu erwarten und hier der Verlauf einheitlich ist.



Abb. 5.6 Renormierte Neutronenemissionsraten einer Tonne Schwermetall nach ORIGEN-ARP und OREST/SRCMCNP

## 5.2.5 Wirkungsquerschnitte

In MCNP stehen unterschiedliche Wirkungsquerschnittsdatensätze zur Verfügung. Die Einflüsse der unterschiedlichen Datenevaluierungen auf die Ergebnisse der Dosisleistungsrechnungen sollen mit den Rechnungen gezeigt werden. Die Wirkungsquerschnittsdaten werden dabei nur für Eisen variiert. Voraussetzung ist dabei, dass sich alle eingesetzten WQ-Datensätze auf die gleiche Neutronentemperatur beziehen.

Der Behälterkörper und die Rippen des generischen Behälters bestehen aus Grauguss. Im MCNP wird das Material in seiner Zusammensetzung wie in Tab. 5.6 zu sehen definiert.

Elementname	Material-ID	Anteil in Gewichtsprozent
Kohlenstoff	6000	3,500
Silizium	14000	1,957
Mangan	25055	0,600
Eisen	26054	5,372
	26056	84,959
	26057	2,038
	26058	0,259
Nickel	28000	1,314

 Tab. 5.6
 Materialzusammensetzung von Grauguss



Abb. 5.7 Mit MCNP berechneter Gesamt-Wirkungsquerschnitt für Grauguss
Bei älterer Datenevaluation, beispielsweise bei den ENDF/B-V Daten, werden die eingesetzten Wirkungsquerschnitte für Eisen als Element aufgerufen, da kein anderer Datensatz verfügbar ist. Im Vergleich dazu werden in neueren WQ-Datensätzen Angaben zu Eisen immer isotopweise aufgeschlüsselt (entsprechend der natürlichen Zusammensetzung 26054, 26056, 26057 und 26058). Die verwendeten Daten stammen aus den amerikanischen Evaluated Nuclear Data Files (ENDF), die im MCNP 5 Paket mitgeliefert werden. Zusätzlich werden extern generierte Wirkungsquerschnittsdaten für Eisen aus den Bibliotheken JEFF-3.1, JENDL-3.3 und JENDL-4.0 verwendet. Die Auswirkungen der Wirkungsquerschnitte unterschiedlicher Datenevaluierungen werden im Folgenden verglichen. Für das Material Gusseisen wird der Gesamtquerschnitt mit einem Plot aus MCNP dargestellt. Der Eisenanteil beträgt im Material über 92 % und dominiert den Querschnitt des Gesamtmaterials. Die Abbildung zeigt in der energieabhängigen Darstellung im Thermischen einen 1/v Verlauf gefolgt von einem Resonanzbereich.

Der Wirkungsquerschnitt besteht im Wesentlichen aus zwei Komponenten, dem Absorptions- und Streuquerschnitt beschrieben durch den  $(n, \gamma)$  und den (n, n')-Prozess. Der Absorptionsquerschnitt beträgt für Eisen etwa 2,6 barn, der Streuquerschnitt etwa 12,2 barn für thermische Neutronen.



Incident neutron data / BROND-2.2 / FeNat / MT=1 : (n,total) / Cross section

Abb. 5.8 Mit JANIS dargestellter Eisen-Wirkungsquerschnitt nach BROND-2.2

Die Absorption macht also den kleineren Anteil am Gesamtquerschnitt aus und die Neutronen sind, wenn sie nicht moderiert werden, durchdringend und werden einen wesentlichen Dosisbeitrag liefern. In Tab. 5.7 sind die integralen Wirkungsquerschnittsdaten als Summe aus Absorption und Streuung aufgeführt.

Mit JANIS (Java-based nuclear information software) lassen sich die Querschnitte aus unterschiedlichen Datenevaluierungen integral miteinander vergleichen. Abb. 5.8 zeigt den Gesamtquerschnitt für natürliches Eisen. Optisch entspricht dies in etwa dem Verlauf in Abb. 5.7, d. h. Eisen allein bestimmt den Querschnitt des Gesamtmaterials.

Nach Tab. 5.7 unterscheiden sich die integralen Querschnittsdaten für <sup>56</sup>Fe, das mit über 90 Gew.-% den Hauptanteil von natürlichem Eisen ausmacht, zwischen den verschiedenen ENDF/B Evaluierungen nur unwesentlich. Das heißt, es sollten in den berechneten Ergebnissen keine größeren Unterschiede auftreten. Ebenso sind die Unterschiede zu anderen Datenbasen für Eisen gering (ENDF/B zu JEFF und JENDL).

#### 5.2.6 Berechnung der Äquivalentdosisleistung

Zur Umrechnung von Teilchenflüssen in Dosiswerte nach der Strahlungstransportrechnung werden Dosiskonversionsfaktoren (DKF) verwendet. Diese Dosiskonversionsfaktoren setzen sich aus zwei energieabhängigen Größen zusammen. Der Neutronenfluss wirkt auf die Materialien ein und absorbiert Energie. Wird die so erzeugte Energiedosis mit einem Qualitätsfaktor beaufschlagt, der die biologische Wirkung berücksichtigt.

- K = Konversionsfaktor (Fluss  $\phi \rightarrow$  Energiedosis D)
- Q = Qualitätsfaktor (Energiedosis D → Äquivalentdosis)
- $H = \phi^* K(E)^* Q(E)$

Die effektive Dosis berücksichtigt, dass verschiedene Organe unterschiedliche Strahlenempfindlichkeiten haben und aufgrund der Abschirmwirkung des Körpers je nach Lage verschieden stark strahlenexponiert werden, sodass die Strahlenexposition aller Organe die effektive Ganzkörperdosis ergibt. Die für die Rechnungen verwendeten Qualitätsfaktoren sind der ICRP-74 /ICR 74/ Empfehlung entnommen.

Reaction	Library	Sig(2200)	Sig(E0)	Avg-Sigma	Res Integ	Sig(Fiss)	Sig(E14)
total	ENDF/B-VI.8	14.7494 b	14.7474 b	16.309 b	121.282 b	3.21946 b	2.59983 b
total	ENDF/B-VII.0	14.7494 b	14.7474 b	16.309 b	121.282 b	3.21946 b	2.59983 b
total	ENDF/B-VII.1	14.7494 b	14.7474 b	16.309 b	121.282 b	3.21934 b	2.59983 b
total	FENDL-2.1	14.7939 b	14.7919 b	16.359 b	121.763 b	3.24682 b	2.58908 b
total	JEFF-2.2	14.7813 b	14.7793 b	16.344 b	121.618 b	3.18699 b	2.5684 b
total	JEFF-3.0	14.7939 b	14.7919 b	16.359 b	121.763 b	3.24682 b	2.58908 b
total	JEFF-3.1	14.7939 b	14.7919 b	16.359 b	121.763 b	3.24682 b	2.58908 b
total	JEFF-3.1.1	14.7939 b	14.7919 b	16.359 b	121.763 b	3.24682 b	2.58908 b
total	JEFF-3.1.2	14.7939 b	14.7919 b	16.359 b	121.763 b	3.2469 b	2.58908 b
total	JEFF-3.2	14.7939 b	14.7939 b	16.361 b	121.763 b	3.24682 b	2.58908 b
total	JENDL-3.3	14.7813 b	14.7793 b	16.344 b	121.62 b	3.25251 b	2.58904 b
total	JENDL-4.0	14.7813 b	14.7813 b	16.347 b	121.623 b	3.25283 b	2.58904 b
total	TENDL-2012	15.9465 b	15.9465 b	17.662 b	133.553 b	3.30148 b	2.65077 b
total	TENDL-2013	14.7629 b	14.7629 b	16.326 b	121.501 b	3.29066 b	2.56698 b

 Tab. 5.7
 Querschnittsdaten unterschiedlicher Herkunft für <sup>56</sup>Fe nach JANIS

#### 5.3 Ergebnisse

Für die Vergleichsrechnungen wurde die Dosisleistung am Behälter an den Tragzapfen mit Punkt- und Ringdetektoren bestimmt. Der Ringdetektor bestimmt dabei den Neutronenfluss innerhalb eines virtuellen Rings in Höhe der Tragzapfen. Die Punktdetektoren sitzen jeweils mittig genau im Tragzapfengrund und auf Höhe des äußeren Endes des Tragzapfens.

Alle Monte Carlo Rechnungen wurden so durchgeführt, dass die in MCNP durchgeführten statistischen Konvergenztests erfüllt wurden. Die erzielten statistischen Fehler der Ergebnisgrößen waren mit einer Ausnahme kleiner gleich 2,4 % Damit wurde sichergestellt, dass eine ausreichende Teilchenanzahl statistisch befriedigende Ereignisse im Detektor abliefern.



Abb. 5.9 Behälterschnitt mit Tragzapfen und Position der Punktdetektoren

 Tab. 5.8
 Positionen der Detektoren zur Dosisleistungsberechnung

Detektortyp	Position X/Y/Z R
Ringdetektor	0 / 0 / 545 / 116.1
Punktdetektor	-116 / 0 / 545
Punktdetektor	-111 / 0 / 545

Im Einzelnen wurden die folgenden Fälle untersucht, bei denen die Wirkungsquerschnitte, die Quelltermdefinition und der eingesetzte Code variiert wurden:

- Alle Materialien mit Eisen werden mit einem ELEMENT-Querschnitt beschreiben. Die Datenevaluierung entspricht einer zusammengesetzten Bibliothek aus ENDF/B-V.0 und Los Alamos National Laboratory Data Group T-2 erzeugten Daten (174 Quellgruppen).
- 2. Alle Materialien mit Eisen werden mit einem ELEMENT-Querschnitt beschreiben. Die Datenevaluierung entspricht ENDF/B-V.0 (174 Quellgruppen).
- Eisen wird in den Materialien isotopweise mit der Evaluierung ENDF/B-VII.0 beschrieben (174 Quellgruppen).
- 4. Eisen wird in den Materialien isotopweise mit der Evaluierung ENDF/B-VI.1 beschrieben (174 Quellgruppen).
- 5. Eisen wird in den Materialien isotopweise mit der Evaluierung ENDF/B-VI.6 beschrieben (174 Quellgruppen).
- 6. Eisen wird in den Materialien isotopweise mit der Evaluierung JEFF-3.1 beschrieben (174 Quellgruppen).
- 7. Eisen wird in den Materialien isotopweise mit der Evaluierung JENDL3.3 beschrieben (174 Quellgruppen).
- 8. Eisen wird in den Materialien isotopweise mit der Evaluierung JENDL4.0 beschrieben (174 Quellgruppen).
- Eisen wird in den Materialien isotopweise mit der Evaluierung ENDF/B-VII.0 beschrieben (27 Quellgruppen).
- 10. Eisen wird in den Materialien isotopweise mit der Evaluierung ENDF/B-VI.1 beschrieben (27 Quellgruppen)
- 11. Eisen wird in den Materialien isotopweise mit der Evaluierung ENDF/B-VI.1 beschrieben (<sup>244Cm</sup>-Quelle)
- 12. Eisen wird in den Materialien isotopweise mit der Evaluierung JEFF-3.1 beschrieben (<sup>244</sup>Cm-Quelle)
- Eisen wird in den Materialien isotopweise mit der Evaluierung JENDL3.3 beschrieben (<sup>244</sup>Cm-Quelle)
- 14. Eisen wird in den Materialien isotopweise mit der Evaluierung JENDL4.0 beschrieben (<sup>244</sup>Cm-Quelle)
- 15. Eisen wird in den Materialien isotopweise mit der Evaluierung ENDF/B-VII.0 beschrieben (SCALE-Quelle).
- 16. MAVRIC 200-Gruppen ENDF/B-VII stabweise definierte Quelle.
- 17. MAVRIC 200-Gruppen ENDF/B-VII mit homogenisierter Quelle

Bei der Variation der Wirkungsquerschnitte wurden nur die Eisen-Wirkungsquerschnitte ausgetauscht. Die Wirkungsquerschnitte der Bibliotheken JENDL-3.3, JENDL-4.0 und JEFF-3.1 wurden GRS-intern mit Hilfe des Programmpakets NJOY direkt aus den Rohdaten erzeugt. Alle übrigen Materialien werden in sämtlichen MCNP-Rechnungen mit der Referenzbibliothek ENDF/B-VII.0 modelliert.

Im Folgenden werden zunächst die Auswirkungen der Variation einzelner Einflussgrößen diskutiert, bevor abschließend eine zusammenfassende Darstellung aller Variationen erfolgt.

#### 5.3.1 Unterschiedliche Energiegruppenanzahl für die Quelle

Die Berechnungen mit MCNP wurden zunächst mit gleicher Materialspezifikation, d. h. mit gleichen kontinuierlichen Wirkungsquerschnitten, jedoch mit unterschiedlichen Energiegruppen zur Quellbeschreibung durchgeführt. Als Kondensierungsverfahren wurde nur NGSRC/SRCMCNP entsprechend Kap. 2.3 angewendet. Damit kann der Einfluss der Energiegruppeneinteilung des Quellterms auf das Ergebnis festgestellt werden.

Tab. 5.9 zeigt, dass die Abweichungen zwischen den Rechnungen im Bereich der statistischen Unsicherheiten liegen. Der Effekt, dass eine größere Anzahl von Energiegruppen die Quelle genauer und damit das Ergebnis weniger konservativ ausfällt, ist in diesen Rechnungen nicht zu beobachten.

Energie- gruppen	Ringdetektor	Tragzapfen	im Tragzapfen	
27	5,42E-08	8,95E-08	1,41E-07	
174	5,47E-08	8,84E-08	1,38E-07	

#### 5.3.2 Unterschiedliche Wirkungsquerschnitte für Eisen

Bei den Rechnungen zum Einfluss der Wirkungsquerschnittsbibliotheken wurden sowohl elementweise (ENDF/B-V, LANL/T) als auch nuklidweise (alle anderen betrachteten) definierte Wirkungsquerschnitte verwendet. Als Referenzrechnung wird der Datensatz verwendet, bei dem alle Eisenanteile mit der ENDF/B-VII.0 Evaluierung angesprochen werden. Die Quellverteilung ist in 174 Energiegruppen unterteilt. In zwei weiteren Rechnungen werden ENDF/B-VI.1 und ENDF/B-VI.6 für Eisen eingesetzt. Vergleichend dazu stehen die Ergebnisse mit einer Quellverteilung mit 27 Neutronengruppen.

Die Ergebnisse für die Detektoren zeigen Unterschiede auf. Der höchste Absolutwert wird mit den Wirkungsquerschnittsdaten für Eisen aus der Evaluierung nach ENDF/B-VII.0 erzielt. Ältere Datenevaluierungen ergeben kleinere Dosiswerte. Eine Abhängigkeit von der Energie-Startgruppenanzahl ist hier zu erkennen, denn die ENDF/B-VII.0 (27 Energie-Startgruppen) erzeugt kleinere Dosiswerte als die gleiche Rechnung mit 174 Startgruppen. Die Normierung der obigen Ergebnisse auf die Basisrechnung (ENDF/B-VII.0; 174 Startgruppen) ergibt die Abweichungen der unterschiedlichen Rechnungen. Demnach sind bis auf eine Ausnahme alle Detektorergebnisse kleiner als bei der Referenzrechnung. Die Abweichungen betragen bis zu 7 %, mit der gleichen Querschnittsdatenbibliothek und einer Startquelle in 27 Energiegruppen bei ansonsten identischen Bedingungen. Die Wahl der Anzahl und Breite der Energiegruppen bei der Quelldefinition kann also im Ergebnis Unterschiede von hier 2 bis 6,8 % bewirken.



### Abb. 5.10 Dosisleistungen am Tragzapfen bei unterschiedlichen Wirkungsquerschnittsdaten für Eisen



# Abb. 5.11Dosisleistungen am Tragzapfen bei unterschiedlichen Wirkungsquer-<br/>schnittsdaten für Eisen erweiterte Auswertung

In einem weiteren Schritt wurden zusätzliche Rechenvarianten in die Auswertung mit einbezogen. Unter Verwendung der integralen Wirkungsquerschnitte bei sonst gleichen Rechenrandbedingungen verschiebt sich das Bild.

Die beiden Rechnungen mit einem zusammengefassten Element-Eisenquerschnitt produzieren signifikant kleinere Rechenergebnisse. Mit den von Los Alamos bearbeiteten und ENDF/B-V.0 Daten wird das Ergebnis im Vergleich zur Referenzrechnung um rund 14 % unterschätzt. Weitere Bibliotheken wie JEFF3.1 /JEF 06/ und JENDL-3.3 /SHI 02/ und -4.0 /SHI 11/ werden ebenfalls eingesetzt. Beide Bibliotheken liefern bei den Ergebnissen in etwa die gleiche Schwankungsbreite von 2 % bis 7 % gegenüber ENDF/B-VII.

Der Vergleich unterschiedlicher Datenevaluierung zeigt, dass die Schwankungsbreite bei dem generischen Modell an den Tragzapfen bis zu 15 % betragen kann. Größere Abweichungen von der Referenzlösung sind dabei allerdings in erster Linie für ältere Datenevaluationen zu erkennen. Die Ergebnisse mit einer Querschnittsbeschreibung der Einzelnuklide liegen enger zusammen als bei der elementweisen Definition der Wirkungsquerschnitte.

Bibliothek	Ringdetektor	Punktdetektor in -X	Punktdetektor im Tragzapfen -X
ENDF/B-VI.6; 174 Gr.	-1,65%	0,20%	0,39%
ENDF/B-VI.1; 174 Gr.	0,23%	4,20%	4,28%
ENDF/B-VII.0; 27 Gr.	2,55%	6,84%	5,27%
ENDF/B-VI.1; 27 Gr.	1,20%	3,44%	1,99%
Element FE (LANL/T); 174 Gr.	9,84%	12,88%	11,70%
Element FE (ENDF/B-V.0); 174 Gr.	14,41%	14,16%	13,75%
JEFF-3.1; 174 Gr.	1,87%	6,87%	7,30%
JENDL3.3; 174 Gr.	7,02%	5,64%	4,96%
JENDL4.0; 174 Gr.	4,07%	5,16%	5,34%

Tab. 5.10Prozentuale Ergebnisdifferenzen auf die Ortsdosisleistung im Vergleich zur<br/>Referenzlösung (174 E-Gruppen; ENDFB-VII.0)

Die Unterschiede betragen bis zu etwa 6 %, liegen aber auch vielfach im Bereich der statistischen Unsicherheiten. Abweichungen aus der gewählten Anzahl der Quellgruppen lassen sich für das Modell auf 2 bis 7 % quantifizieren.

#### 5.3.3 Variationen der Quelldefinition

Wie in Kapitel 5.2.4 diskutiert wurde die Quelldefinition dahingehend variiert, dass zum einen ein Watt-Spaltspektrum für Spontanspaltung von <sup>244</sup>Cm und zum anderen ein mit ORIGEN-ARP erzeugter Quellterm verwendet wurde. Mit dem Watt-Spaltspektrum wurden Rechnungen mit verschiedenen Wirkungsquerschnittsbibliotheken durchgeführt. Im Fall des ORIGEN-ARP-Quellterms erfolgte eine Rechnung mit der Referenzbibliothek ENDF/B-VII.0 Die Ergebnisse sind in Tab. 5.11 gezeigt. Sie sind als prozentuale Abweichung von der Rechnung mit NGSRC-Quellterm unter Verwendung der jeweils gleichen Bibliothek angegeben. Für die Rechnungen mit Wattspektrum ergeben sich um etwa 3 – 8 % höhere Werte als bei den vergleichbaren Rechnungen mit NGSRC-Quellterm. Wie zu erwarten sind die errechneten Dosiswerte für die Rechnung mit ORIGEN-ARP-Quellterm noch deutlich größer. Die Abweichungen von der Referenzrechnung sind mit etwa 25 – 30 % noch deutlich größer, als die Abweichung zwischen den Quelltermen.

Bibliothek	Ringdetektor	Punktdetektor in +X	Punktdetektor im Tragzapfen -X	Punktdetektor im Tragzapfen
ENDFB-VI.1; Cm-244 Quelle	-2,42%	-1,31%	-1,61%	-1,38%
JEFF-3.1; Cm-244 Quelle	-0,43%	-0,58%	0,20%	-0,43%
JENDL3.3; Cm-244 Quelle	4,00%	4,00%	1,74%	2,09%
JENDL4.0; Cm-244 Quelle	0,69%	1,84%	0,59%	0,31%

Tab. 5.11Ergebnisse mit Quellterm aus einem Watt Spaltenergie Spektrum für<br/>Spontanspalter Curium

#### 5.3.4 Ergebnisse der Vergleichsrechnungen mit MAVRIC

Der direkte Vergleich aller Rechnungen zeigt, dass die MAVRIC Ergebnisse innerhalb der Streubreiten der anderen Ergebnisse liegen. Sie liegen etwa im Bereich der elementweisen Datenevaluierungen und etwa 10 % niedriger als die MCNP-Rechnungen mit der ENDF/B-VII.0 Bibliothek. Als mögliche Quellen der Unterschiede zur MCNP-Referenzrechnung kommen hier mehrere Einflüsse in Betracht. Neben möglichen Diskrepanzen in der Geometrie- und Materialdefinition und Unterschieden in der Rechenmethode selbst dürfte vor allem die Tatsache, dass es sich bei MAVRIC um ein Multigruppenprogramm handelt, eine wesentliche Rolle spielen. Insbesondere die korrekte Berücksichtigung der Resonanzen in den Wirkungsquerschnitten der Eisennuklide ist für Multigruppencodes u. U. problematisch.

Ergänzend wurde mit MAVRIC eine Rechnung mit globaler Varianzreduktion durchgeführt, bei dem der Neutronenfluss in einem Volumen in und um den Behälter bestimmt wurde. Das Ergebnis ist in Abb. 5.12 dargestellt. Anhand dieser Abbildung lassen sich die lokalen Abschwächungen der Abschirmung im Bereich der oberen und unteren Tragzapfen gut erkennen. Die Rechnung ist annähernd für den gesamten untersuchten Bereich gut auskonvergiert. Lediglich in den Bereichen des Deckels und des Bodens, die jeweils besonders gut abgeschirmt sind, sind die statistischen Unsicherheiten etwas größer.



Abb. 5.12 Neutronenfluss und relative statistische Unsicherheit des Neutronenflusses im und um den Behälter in der Ebene der Tragzapfen

#### 5.4 Gesamtübersicht der Ergebnisse

In Abb. 5.13 sind alle durchgeführten Rechnungen zusammengefasst. Tab. 5.12 zeigt diese Ergebnisse mit ihren statistischen Unsicherheiten.



Abb. 5.13 Dosisleistungswerte am Tragzapfen durch Neutronenstrahlung für alle durchgeführten Rechnungen

Wirkungsquerschnitts- evaluierung	F5 Ringdet. um Tragzapfen [µSv/h]	σ [μSv/h]	Dosisleistung am Tragzapfen [µSv/h]	σ [μSv/h]	Dosisleistung im Tragzapfen [µSv/h]	σ [μSv/h]	Gruppenanzahl Quellterm
Element Eisen (LANL/T)	149,75	0,9	224,72	4,4	329,03	7,8	174
Element Eisen (ENDFB-V.0)	142,15	0,9	221,41	4,4	321,42	7,4	174
ENDFB-VII.0	166,09	1,0	257,93	4,9	372,64	8,0	174
ENDFB-VI.6	168,83	1,0	257,42	5,0	371,19	8,4	174
ENDFB-VII.0	161,86	1,0	240,3	4,6	352,99	8,5	27
ENDFB-VI.1	164,1	1,2	249,07	5,0	365,22	8,5	27
ENDFB-VI.1	165,7	1,1	247,1	4,7	356,7	8,1	174
ENDFB-VI.1; <sup>244</sup> Cm-Quelle;	170,11	1,0	261,3	5,3	377,79	9,0	Funkt.
ENDFB-VII.0 mit SCALE Quelle	216,19	3,0	324	18,0	463,3	25,7	174
JEFF-3.1; <sup>244</sup> Cm-Quelle	166,8	1,0	259,43	5,1	374,23	8,5	Funkt.
JEFF-3.1; 174 Gr.	162,99	1,0	240,2	4,8	345,45	7,8	174
JENDL3.3; <sup>244</sup> Cm-Quelle	159,45	1,0	247,6	4,9	364,86	8,9	Funkt.
JENDL4.0; <sup>244</sup> Cm-Quelle	164,95	1,0	253,18	5,0	371,48	8,5	Funkt.
JENDL3.3; 174 Gr.	154,43	0,9	243,39	5,0	354,14	8,2	174
JENDL4.0; 174 Gr.	159,33	1,0	244,61	4,8	352,74	8,3	174
MAVRIC 200-Gruppen stabweise			223,0	3,3	322	5,0	174 (Quelle) 200 (Rechnung)
MAVRIC 200-Gruppen homogenisiert			226,0	2,1	325	3,0	174 (Quelle) 200 (Rechnung)

 Tab. 5.12
 Ergebnisse zur Dosisleistungsberechnung um die oberen Tragzapfen des generischen Lagerbehälters

#### 5.5 Manteldosisleistung

Zusätzlich zur Berechnung der Dosisleistung an den Tragzapfen wurden Dosisleistungsberechnungen am Mantel in Höhe der der Behältermitte durchgeführt. Ziel war es festzustellen, wie sich das Verhältnis der Ergebnisse aus zwei gleichen Rechnungen mit unterschiedlichen Wirkungsquerschnittsdatenevaluierungen für eine andere Stelle am Behälter darstellt. Insbesondere sollte geklärt werden, ob der Messpunkt am geometrisch komplexen Tragzapfen eine höhere Unsicherheit aufweist als ein Messpunkt in einem geometrisch homogeneren Bereich. Am Mantel ist die Wirkung des Moderatormaterials aus geometrischen Gründen effektiver als im Bereich der Tragzapfen, d. h. die Neutronen werden hier durch die PE-Stäbe moderiert und vom Eisen des Mantelmaterials absorbiert. Entsprechend sind die ermittelten Dosisleistungen geringer als an den Tragzapfen. Die prozentualen Abweichungen zwischen den verschiedenen Rechenläufen bewegen sich in der gleichen Größenordnung wie bei den Ergebnissen im Bereich der Tragzapfen. Eine erhöhte Sensitivität der Ergebnisse an den Tragzapfen auf Unsicherheiten in den Wirkungsquerschnitten konnte hier nicht festgestellt werden.

	Oberfläche Ringdetektor	Oberfläche Punktdetektor	Ringdetektor 1m Entfernung	Punktdetektor 1m Entfer- nung
	[µSv/h]	[µSv/h]	[µSv/h]	[µSv/h]
174 Gruppen (174 DKF) mit ENDF/B-VI.1	154,24 ± 0,9	158,79 ± 4,8	61,42 ± 0,1	61,75 ± 0,3
174 Gruppen (174 DKF) mit ENDF/B-VII.0	154,34 ± 0,9	152,99 ± 4,3	61,56 ± 0,1	61,34 ± 0,3
175 Gruppen (174 DKF) mit LANL/T	141,0 ± 0,8	138,91 ± 4,2	56,07 ± 0,1	56,50 ± 0,3

Tab. 5.13Dosisleistung auf Höhe der Behältermitte für drei ausgewählte<br/>Rechenläufe

#### 5.6 Diskussion

Die durchgeführten Untersuchungen zu den Unsicherheiten einer Abschirmungsrechnung an einem generischen Transportbehältermodell zeigen, dass die wichtigste Quelle von Unsicherheiten in der Bestimmung des Quellterms liegt. Abweichungen in der ermittelten Quellstärke schlagen direkt linear auf das Ergebnis durch. Im vorliegenden Fall rühren diese Abweichungen in erster Linie von Unterschieden in der Berechnung des Nuklidinventars durch die vorgeschaltete Abbrandrechnung her. Bei Anwendungsfällen, in denen (a,n)-Reaktionen einen wesentlichen Beitrag zur Quellstärke liefern, können zusätzlich Unterschiede in den jeweils zugrunde gelegten physikalischen Modellen für die Quelltermerstellung eine Rolle spielen. Wenn wie hier Spontanspaltung der dominierende Effekt ist, ist die genaue spektrale Darstellung der Quellverteilung von untergeordneter Bedeutung. Ein zweiter wesentlicher Einfluss liegt in der benutzten Wirkungsquerschnittsbibliothek. Es fällt auf, dass die neueren Datenbibliotheken untereinander ähnliche Ergebnisse liefern, während ältere Bibliotheken größere Abweichungen zeigen. Auch wenn dies darauf hindeutet, dass hinsichtlich der nuklearen Daten in den letzten Jahren Verbesserungen erzielt werden konnten und die modernen Bibliotheken zunehmend konvergieren, fehlt bei dieser Untersuchung ein Vergleich zu experimentellen Daten, um absolute Aussagen treffen zu können. Unterschiede zwischen den Rechenverfahren sind ebenfalls deutlich zu Tage getreten. Die Hauptursache hierfür dürfte im Unterschied zwischen der Verwendung von kontinuierlichen Wirkungsquerschnittsdaten und Multigruppendaten liegen.

#### 6 Zusammenfassung

Im vorliegenden Vorhaben wurden Untersuchungen zu aktuellen Methoden im Bereich der Strahlungstransportrechnung durchgeführt. Der Leistungsumfang des Programms MAVRIC aus dem SCALE-Paket wurde anhand von umfangreichen Nachrechnungen von Benchmarkexperimenten aus den Datenbanken SINBAD und ICSBEP untersucht. Die Experimente umfassten dabei die Problemklassen Skyshine, Deep Penetration und Strahlungstransport durch Labyrinth-artige Systeme. Es konnte verifiziert werden, dass mit dem CADIS- bzw. dem FW-CADIS-Verfahren deutliche Reduktionen der Rechenzeit bei gleicher Ergebnisgenauigkeit erzielt werden können, ohne dass dafür umfangreiche zusätzliche manuelle Optimierungen notwendig sind. Die erzielten Rechenzeiten zum Erreichen einer bestimmten statistischen Unsicherheit liegen teilweise um mehrere Größenordnungen unter denen einer äquivalenten Monte Carlo Rechnung ohne Varianzreduktion. Die im Vorhaben gemachten Erfahrungen, zeigen dass MAVRIC eine sinnvolle Ergänzung zu den in der Abteilung Kernbrennstoff der GRS bereits genutzten Werkzeugen zur Strahlungstransportberechnung ist.

Weiterhin wurden im Vorhaben die in der GRS verfügbaren Methoden zur Quelltermerstellung systematisch miteinander verglichen. Anhand eines generischen Lagerbehältermodells wurden außerdem bestehende Unsicherheiten im Bereich Abschirmungsrechnung quantitativ analysiert. Dabei hat sich gezeigt, dass sich die größten Unsicherheiten aus der genauen Bestimmung des Quellterms für die Abschirmungsrechnung ergeben. Dies gilt insbesondere dann, wenn dabei die rechnerische Bestimmung von Nuklidinventaren, beispielsweise für bestrahlte Brennelemente, involviert ist. Die Betrachtungen zur Quelltermerstellung zeigten, dass es Verbesserungsbedarf der GRS-eigenen Werkzeuge gibt. Ein Beispiel hierfür ist die Methode zur Energiegruppenkondensation, die für thermische Energien nur relativ ungenau funktioniert. Bezüglich der Berechnung der Neutronen aus ( $\alpha$ ,n)-Reaktionen hat sich gezeigt, dass neuere Datenevaluationen wie zum Beispiel JENDL-AN letztlich auf die gleichen experimentellen Daten zurückgreifen, die auch in NGSRC verwendet werden. Unterschiede gibt es hier nur in den angewandten Modellen.

Bezüglich der Unsicherheiten in den nuklearen Daten haben die durchgeführten Untersuchungen den Eindruck bestätigt, dass die Unterschiede zwischen den aktuellen Datenevaluationen wie ENDF/B-VII.1, JEFF-3.1 und JENDL-4.0 deutlich geringer ausfallen als dies bei vergangenen Evaluationen der Fall war. Dies lässt den Schluss zu, dass die nuklearen Daten allgemein an Genauigkeit gewonnen haben. Für eine definitive Aussage zu diesem Punkt sind die durchgeführten Untersuchungen allerdings nicht geeignet. Signifikante Unterschiede ergab auch der direkte Vergleich zwischen den Codes MCNP5 und MAVRIC. Deren Ursache wird allerdings eher in den Unterschieden zwischen der Verwendung von kontinuierlichen Wirkungsquerschnittsdaten gegenüber Multigruppendaten gesehen als in den verwendeten Methoden selbst.

#### Quellenverzeichnis

- /BRU 97/ R. Brun, F. Rademakers, "ROOT An Object Oriented Data Analysis Framework", Nucl. Inst. and Meth. in Phys. Res. A 389, 81-86 (1997).
- /BOU 14/ S. Bourganel, I. Raskinyte, M. Soldevila, "Analysis of the H.B.Robinson-2 Reactor Pressure Vessel Dosimetry Benchmark Using TRIPOLI-4 Monte Carlo Code", Progress in Nuclear Science and Technology Volume 4 (2014) pp. 312-316.
- /CAR 05/ L.L. Carter, R.A. Schwarz, MCNP Visual Editor Computer Code, Version 19k, Released November 2005.
- /DAV 11/ A. Davis, A. Turner, "Comparison of global variance reduction techniques for Monte Carlo radiation transport simulations of ITER", Fusion Engineering and Design, Vol. 86, 2011.
- /EVA 10/ T. M. Evans, A. S. Stafford, R. N. Slaybaugh, K. T. Clarno. "Denovo: A New Three-Dimensional Parallel Discrete Ordinates Code in SCALE." Nuclear Technology. 171, 171-200, 2010.
- /GEW 89/ K. Gewehr, U. Hesse, J. Huber, U. Quade, "Modellrechnungen zu Ortsdosisleistungen bei der Verarbeitung von Plutonium aus hochabgebrannten Leichtwasser-Brennelementen", GRS-A-1514, 1989
- /GUA 91/ Gualdrini, Burn, Casalini, Peerani, "The ENEA Contribution to the Nea-CRP international intercomparison of codes for radiation protection – assessment of spent fuel transport flasks"; ENEA Comitato Nationale per la Ricerca e per lo sviluppo dell'energia nucleare e delle delle energie alternative; Bologna, Italy (1991).
- /HAG 03/ A. Haghighat, J. C. Wagner, "Monte Carlo Variance Reduction With Deterministic Importance Functions", Progress in Nuclear Energy, Vol. 42, No. 1. 2003.

- /HAR 11/ D. P. Hartmangruber, B. Petrovic, "Using SCALE6/MAVRIC to Determine the Dose Rate Distribution in the IRIS Power Plant Control Room and Preliminary Estimate Throughout the Reactor Building", Nuclear Technology, Volume 175, Number 1, July 2011, Pages 187-197.
- /HES 86/ U. Hesse, W. Denk, H. Deitenbeck, OREST Eine direkte Kopplung von HAMMER und ORIGEN zur Abbrandsimulation von LWR-Brennstoffen, GRS-63, November 1986.
- /IBR 14/ A. M. Ibrahim, P. P. Wilson, M. E. Sawan, S. W. Mosher, D. E. Peplow, R. E. Grove, "Assessment of fusion facility dose rate map using mesh adaptivity enhancements of hybrid Monte Carlo/deterministic techniques", Fusion Eng. Des. (2014), Volume 89, Issues 9–10, October 2014, Pages 1875–1879.
- /ICR 74/ ICRP Publication 74, Conversion Coefficients for use in Radiological Protection against External Radiation, Pergamon Press, table A.42, P.200, September 1995.
- /JEF 06/ JEFF Team, The JEFF-3.1 library, JEFF Report 21, NEA/OECD No. 6190, 2006, ISBN92-64-02314-3; 2006.
- /KIG 09/ R. Kilger, U. Hesse, K. Hummelsheim, F. E. Moser und M. Wagner, "Kritikalitäts- und Dosisleistungsrechnungen mit MCNP 5 und DORTABLE-v06 für ein generisches Behältermodell Castor V/19, unter Verwendung eines axialen Abbrandprofils, sowie Experimentnachrechnung zur Abschirmung mit MCNP 5", GRS A 3467, Mai 2009.
- /KIR 09/ B. Kirk, "Overview of Neutron Transport Codes", 11th Neutron And Ion Dosimetry Symposium (NEUDOS-11), Kapstadt, Süd Afrika, Oktober 2009.
- /KOD 06/ I. Kodeli, E. Sartori und B. Kirk, "SINBAD Shielding Benchmark Experiments Status and Planned Activities", The American Nuclear Society's 14th Biennial Topical Meeting of the Radiation Protection and Shielding Division, Carlsbad New Mexico, USA, April 2006.

- /KON 12/ A. J. Koning, D. Rochman, "Modern Nuclear Data Evaluation with the TALYS Code System", Nuclear Data Sheets 113 (2012) 2841–2934.
- /KOS 12/ Michal Koštál et. al.: "Neutron and Photon transport in Fe with the employment of TENDL 2009, CENDL 3.1, JEMDL 4 and JENDL 4 evolution from JENDL 3.3 in case of Fe";; Nuclear Engineering and Design 249, Seite 275-286, 2012.
- /KUR 12/ M. Kurosava et al., "Development of Radioactivity Calculation Method for Nuclear Power Plant", ICRS-12 & RPSD-2012, Nara, Japan, September 2012.
- /LAL 05/ Los Alamos X-5-Monte Carlo Team, MCNP- A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5; LA-UR-03-1987; Revised 10/3/2005.
- /LEE 14/ Y.-K. Lee, "Reactor radiation skyshine calculations with TRIPOLI-4 code for Baikal-1 experiments", Progress in Nuclear Science and Technology Volume 4 (2014) pp. 303-307.
- /MOS 10/ S. W. Mosher, "A New Version of the ADVANTG Variance Reduction Generator," ANS Radiation Protection and Shielding Division 2010 Topical Meeting, Las Vegas, USA, April 2010.
- /MOS 13/ S. W. Mosher et al., "ADVANTG AN Automated Variance Reduction Parameter Generator", ORNL/TM-2013/416, Oak Ridge National Laboratory, November 2013.
- /MUR 06/ T. Murata, H. Matsunobu, K. Shibata, "Evaluation of (α,n) Reaction Data for JENDL/AN-2005," JAEA-Research 2006-052 (2006).
- /NEA 12/ OECD/NEA Nuclear Science Committee, International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments, NEA/NSC/DOC(95)03, September 2012.
- /NEA 14/ SFCOMPO Spent Fuel Isotopic Composition Database https://www.oecd-nea.org/sfcompo/. Zuletzt besucht am 17.02.2014.

- /NEA 95/ Baikal-1 Skyshine Experiment, Evaluators: O. F. Dikareva, I. A. Kartashev, M. E. Netecha, V. P. Zharkov, Research Development Institute of Power Engineering, NEA/NSC/DOC/(95)03/VIII.
- /NIK 95/ M. Nikolaev, N. Prokhorova, T. Ivanova (Evaluators), "Neutron Fields In Three-Section Concrete Labyrinth from Cf-252 Source", Institute of Physics and Power Engineering, NEA/NSC/DOC/(95)03/VIII.
- /PEL 11/ D. B. Pelowitz, editor, "MCNPX User's Manual Version 2.7.0", April 2011, LA-CP-11-00438.
- /PEP 13/ D. E. Peplow, "Comparison Of Hybrid Methods For Global Variance Reduction In Shielding Calculations", M&C 2013, Sun Valley, Idaho, May 5-9, 2013.
- /PIT 11/ R. Pittarello, A. Vasiliev, H. Ferroukhi, R. Chawla, "Refined Monte Carlo analysis of the H.B. Robinson-2 reactor pressure vessel dosimetry benchmark", Annals of Nuclear Energy, 38 (2011) 1842–1851.
- /PRE 08/ G. Pretzsch, K. Hummelsheim and P. Bogorinski, "Radiation Field Calculation In The Vicinity Of Russian Radioisotope Generator Sources", EU-ROSAFE 2008, Brüssel 2008.
- /QUA 92/ U. Quade, U. Hesse, Optimierung von Verfahren zur Berechnung der Ortsdosisleistung von Plutonium und plutoniumhaltigen Brennelementen, GRS-A-1969, September 1992.
- /REM 97/ I. Remec, F. B. K. Kam, H.B. Robinson-2 Pressure Vessel Benchmark, NUREG/CR-6453 ORNL/TM-13204, Oak Ridge National Laboratory, October 1997.
- /RIN 09/ U. Rindelhardt, H.-W. Viehriga, J. Konheiser, J. Schuhknecht, K. Noack,
   B. Gleisberg, "RPV material investigations of the former VVER-440
   Greifswald NPP", Nuclear Engineering and Design 239 (2009) 1581–
   1590.

- /RIS 12/ J. M. Risner, I. Remec, K. B. Bekar, "Application of the FW-CADIS Methodology to SNS Beamline Shielding Studies", ICRS-12 & RPSD-2012, Nara, Japan, September 2012.
- /ROM 13/ P. Romano, B. Forget, "The OpenMC Monte Carlo particle transport code", Annals of Nuclear Energy 51 (2013) 274–281.
- /SCA 11/ SCALE: A Comprehensive Modeling and Simulation Suite for Nuclear Safety Analysis and Design, ORNL/TM-2005/39, Version 6.1, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee, June 2011. NEA Data Bank CCC-785/001.
- /SHI 02/ K. Shibata et al., "Japanese Evaluated Nuclear Data Library Version 3 Revision-3: JENDL-3.3," J. Nucl. Sci. Technol. 39, 1125 (2002).
- /SHI 11/ K. Shibata et al., "JENDL-4.0: A New Library for Nuclear Science and Engineering," J. Nucl. Sci. Technol. 48(1), 1-30 (2011).
- /TAY 14/ D. Taylor, S Lilley, A. Turner, A. Davis, "Neutron shielding and activation of the MASTU device and surrounds", Fusion Eng. Des. (2014), Volume 89, Issues 9–10, October 2014, Pages 2076–2082.
- /TUR 13/ A. Turner, A. Davis, "Improving Computational Efficiency Of Monte-Carlo Simulations With Variance Reduction", M&C 2013, Sun Valley, Idaho, USA, May 5-9, 2013.
- /VAS 10/ A. Vasiliev, H. Ferroukhi, E. Kolbe, "Performance of a Monte Carlo solution for the H.B. Robinson-2 Pressure Vessel Dosimetry Benchmark", Annals of Nuclear Energy 37 (2010) 1404–1410.
- /VOL 14/ B. Volmert, E. Tamaseviciute, M. Pantelias, P. Zvoncek, B. Bitterli, "MCNP Neutron Streaming Investigations from the Reactor Core to Regions Outside the RPV for a Swiss PWR", Progress in Nuclear Science and Technology Volume 4 (2014) pp. 481-485.

- /VRA 11/ D. Vragolov, M. Matijević, D. Pevec, K. Trontl, "Modeling of H.B.Robinson-2 Pressure Vessel Benchmark", Nuclear Energy for New Europe 2011, Bovec Slovenia, September 2011.
- /WAG 11/ M. Wagner, U. Hesse, K. Hummelsheim, M. Kirsch und M. Wehrfritz, "Aktivierung von Großkomponenten und daraus resultierende Dosisleistung in der Umgebung", GRS-A-3627, September 2011.
- /WAG 11a/ J. C. Wagner, D. E. Peplow, S. W. Mosher, T. M. Evans, "Review of Hybrid (Deterministic/Monte Carlo) Radiation Transport Methods, Codes, and Applications at Oak Ridge National Laboratory", Progress in Nuclear Science and Technology, Vol. 2, pp.808-814 (2011).
- /WAG 11b/ J. C. Wagner, S. W. Mosher, T. M. Evans, D. E. Peplow, J. A. Turner, "Hybrid and Parallel Domain-Decomposition Methods Development to Enable Monte Carlo for Reactor Analyses", Progress in Nuclear Science and Technology, Vol. 2, pp.815-820 (2011).
- /WAG 14/ J. C. Wagner, D. E: Peplow, S. W. Mosher, "FW-CADIS Method for Global and Regional Variance Reduction of Monte Carlo Radiation Transport Calculations", Nuclear Science and Engineering, 176, 37-57 (2014).
- /WAG 97/ J. C. Wagner, "Acceleration Of Monte Carlo Shielding Calculations With An Automated Variance Reduction Technique And Parallel Processing", Ph.D. Thesis, Pennsylvania State University, 1997.
- /WAR 01/ T. A. Wareing, J. M. McGhee, J. E. Morel, S. D. Pautz, "Discontinuous Finite Element S<sub>N</sub> Methods on Three-Dimensional Unstructured Grids", Nuclear Science and Engineering, Volume 138, Number 3, July 2001.
- /WIL 08/ P.P.H. Wilson et al., "State-of-the-art 3-D radiation transport methods for fusion energy systems ", Fusion Engineering and Design 83 (2008) 824–833.

/YOU 13/ M. Youssef, R. Feder, P. Batistoni, U. Fischer, S. Jakhar, C. Konno, M. Loughlin, R. Villari, Y. Wu, "Benchmarking of the 3-D CAD-based Discrete Ordinates code "ATTILA" for dose rate calculations against experiments and Monte Carlo calculations", Fusion Engineering and Design 88 (2013) 3033–3040.

# Abbildungsverzeichnis

Abb. 3.1	Horizontaler Querschnitt durch die experimentelle Anordnung für das ALARM-AIR/CF-CH2-LAB-001-Benchmarkexperiment	3
Abb. 3.2	Horizontaler Querschnitt durch die experimentelle Anordnung für das ALARM-AIR/CF-CH2-LAB-001-Benchmarkexperiment14	4
Abb. 3.3	Vertikaler Querschnitt durch die experimentelle Anordnung für das ALARM-AIR/CF-CH2-LAB-001-Benchmarkexperiment /NIK 95/1	5
Abb. 3.4	Darstellung der zur Messung verwendeten Bonner Kugeln16	ô
Abb. 3.5	MAVRIC-Modell von ALARM-CF-AIR-LAB-001 für Fall A1 mit Bonner Kugeln mit Durchmesser 30,47 cm17	7
Abb. 3.6	Theoretische Rechenzeit zum Erreichen von 1 % Unsicherheit für die MAVRIC-Rechenläufe zu Fall 1A, sortiert nach optimiertem Detektorort 18	8
Abb. 3.7	Theoretische Rechenzeit zum Erreichen von 1 % Unsicherheit für die MAVRIC-Rechenläufe zu Fall 1A, sortiert nach Detektor	9
Abb. 3.8	Vergleich zwischen Experiment und Nachrechnung mit MAVRIC (Punktdetektoren) für die Fälle 1A bis 6A (von oben nach unten) für alle Detektorpositionen und alle Bonner Kugeln als Werte C/E-124	4
Abb. 3.9	Abweichungen zur MCNP-Rechnung aus dem Benchmarkbericht /NIK 95/ für die Fälle 1A bis 3A (von oben nach unten) für alle Detektorpositionen und alle Bonner Kugeln als Werte C <sub>MAVRIC</sub> /C <sub>MCNP</sub> -128	5
Abb. 3.10	Abweichungen zur MCNP-Rechnung aus dem Benchmarkbericht /NIK 95/ für die Fälle 4A bis 6A (von oben nach unten) für alle Detektorpositionen und alle Bonner Kugeln als Werte C <sub>MAVRIC</sub> /C <sub>MCNP</sub> -126	6
Abb. 3.11	Theoretische Rechenzeit zum Erreichen von 1 % Unsicherheit für die MAVRIC-Rechenläufe zu Fall 1A, sortiert nach optimiertem Detektorort27	7
Abb. 3.12	Vergleich zwischen Experiment und Nachrechnung mit MAVRIC (explizite Detektormodellierung) für den Fall 1A als Werte C/E-129	Э
Abb. 3.13	Vergleich zwischen expliziter Modellierung der Detektoren und impliziter Modellierung mit Responsefunktion	9

Abb. 3.14	Horizontaler Schnitt durch das H.B. Robinson-2 Reaktormodell
Abb. 3.15	Vertikaler Schnitt durch das H.B. Robinson-2 Reaktormodell
Abb. 3.16	Dreidimensionale Darstellungen der Detektormodelle für das H.B. Robinson-2 Reaktormodell
Abb. 3.17	MAVRIC-Modell für HBR-2 mit zylinderschalenförmigem Quellbereich35
Abb. 3.18	Position der beiden Detektoren im HBR-2 Modell
Abb. 3.19	MAVRIC-Modell für HBR-2 mit Brennelement-genauer Quelldefinition37
Abb. 3.20	360° Version des Reaktormodells mit Brennelement-genauer Quelldefinition
Abb. 3.21	Ausschnitt aus dem Modell mit stabweiser Quelldefinition für die fünf wichtigsten Brennelemente
Abb. 3.22	Totaler Neutronenfluss für einen horizontalen Schnitt in der Kernmittenebene
Abb. 3.23	Relative Unsicherheit des totalen Neutronenflusses für einen horizontalen Schnitt in der Kernmittenebene41
Abb. 3.24	Vertikaler Schnitt durch das Modell: Totaler Neutronenfluss
Abb. 3.25	Relative Unsicherheit des totalen Neutronenflusses für einen vertikalen Schnitt
Abb. 3.26	Neutronenfluss und adjungierter Fluss für das volle Reaktormodell 46
Abb. 3.27	"Mesh importance map" für zwei verschiedene Energiegruppen
Abb. 3.28	Resultierender berechneter thermischer (links) und totaler (rechts) Neutronenfluss
Abb. 3.29	Reaktionsraten für die Aktivierungsproben in der Überwachungskapsel 50
Abb. 3.30	Reaktionsraten für die Aktivierungsproben im Reaktorhohlraum51

Abb. 3.31	Schematische Darstellung des RA-Versuchsreaktors für das Skyshine- Experiment	. 53
Abb. 3.32	Graphische Darstellung eines Brennelements (links) und des Reaktorkerns (rechts) des RA Reaktors	. 53
Abb. 3.33	MAVRIC-Modell des RA Versuchsreaktors inklusive Gebäude	. 55
Abb. 3.34	Ausschnitt des MAVRIC Reaktormodells RA für Skyshine-Rechnungen	. 56
Abb. 3.35	Detailausschnitt des Reaktormodells: RA Reaktorkern	. 59
Abb. 3.36	Horizontaler und vertikaler Schnitt durch die mit KENO-VI berechnete Quellverteilung	. 60
Abb. 3.37	Fluss an der Reaktorabdeckung: Vergleich zwischen den Daten aus dem Benchmarkbericht und den mit MAVRIC berechneten Werten	. 60
Abb. 3.38	C/E-Werte für den thermischen Neutronenfluss für die Detektorebenen 0, 1 und 2	. 61
Abb. 3.39	C/E-Werte für die Photonendosis an den Detektorebenen 0, 1 und 2 oberhalb des Reaktors	. 62
Abb. 3.40	Ergebnisse der Skyshine-Detektoren als C/E-Daten. Jeweils MAVRIC- und MCNP-Rechnung aus dem Benchmarkbericht	. 64
Abb. 4.1	Vergleich der aus ( $\alpha$ ,n)-Reaktionen stammenden Neutronenstrahlung in SCALE (rot) und NGSRC (blau)	. 77
Abb. 4.2	Berechnete Gesamtneutronenstrahlung in SCALE (rot) und NGSRC (blau)	. 80
Abb. 4.3	$\gamma\text{-}Strahlungs\text{-}Energiespektren$ aus SCALE (rot), NGSRC (blau) und OREST (grün)	. 82
Abb. 5.1	Querschnitt in Behältermitte des MCNP-Modells mit Einsatzkorb	. 89
Abb. 5.2	Querschnitt mit Tragzapfen und dreidimensionale Explosionsdarstellung des Tragzapfens am MCNP-Modell des Behälters	. 89

Abb. 5.3	Außenansicht und Schnitt durch das Behältermodell für MAVRIC in der Version mit stabweiser Brennelementmodellierung
Abb. 5.4	Kondensiertes Neutronenquellspektrum in 174 Energiegruppen unter Teilchen- und Energieerhalt, in direkter Verteilung (Teilchen/s) und in Lethargiedarstellung (Teilchen/s keV)94
Abb. 5.5	Energieverteilung für Neutronen aus einem mit 55 GWd/tSM abgebrannten DWR-Brennelement nach 5 Jahren Abklingzeit in 1 keV Schritten aus Spontanspaltung und (α,n)-Reaktionen mit OREST
Abb. 5.6	Renormierte Neutronenemissionsraten einer Tonne Schwermetall nach ORIGEN-ARP und OREST/SRCMCNP97
Abb. 5.7	Mit MCNP berechneter Gesamt-Wirkungsquerschnitt für Grauguss
Abb. 5.8	Mit JANIS dargestellter Eisen-Wirkungsquerschnitt nach BROND-2.299
Abb. 5.9	Behälterschnitt mit Tragzapfen und Position der Punktdetektoren
Abb. 5.10	Dosisleistungen am Tragzapfen bei unterschiedlichen Wirkungsquerschnittsdaten für Eisen105
Abb. 5.11	Dosisleistungen am Tragzapfen bei unterschiedlichen Wirkungsquerschnittsdaten für Eisen erweiterte Auswertung
Abb. 5.12	Neutronenfluss und relative statistische Unsicherheit des Neutronenflusses im und um den Behälter in der Ebene der Tragzapfen
Abb. 5.13	Dosisleistungswerte am Tragzapfen durch Neutronenstrahlung für alle durchgeführten Rechnungen

## Tabellenverzeichnis

Tab. 3.1	Beschleunigungsfaktoren für die CADIS-Rechnungen und die FW- CADIS Rechnung für Fall 1A	21
Tab. 3.2	Beschleunigungsfaktoren für die CADIS-Rechnungen und die FW- CADIS Rechnung für Fall 4A	21
Tab. 3.3	Beschleunigungsfaktoren für die CADIS- und FW-CADIS-Rechnungen gegenüber der analogen Rechnung und FW-CADIS-Rechnung mit Response-Optimierung gegen Rechnung mit Flussoptimierung	28
Tab. 3.4	Speed-up Faktoren für die verschiedenen Rechenfälle relativ zur analogen Monte Carlo Rechnung für den MONACO-Anteil der Rechnungen	44
Tab. 3.5	Theoretische Rechenzeiten bis zum Erreichen von 1 % Unsicherheit im Ergebnis für die verschiedenen Rechenfälle	45
Tab. 3.6	Theoretische Rechenzeiten zum Erreichen von 1 % Unsicherheit für das Viertelsymmetrie-Modell und für das Vollkern-Modell	49
Tab. 3.7	Beschleunigungsfaktoren für die verschiedenen Ergebnisgrößen bei Optimierung auf den Neutronenfluss bzw. den Photonenfluss	63
Tab. 4.1	Modellierung der Abbrandgeschichte im untersuchten Modelllauf, realisiert in SCALE und OREST	69
Tab. 4.2	Spezifika der Brennelementparametrisierung in OREST mit den wichtigsten geometrischen Kenndaten des Modells	70
Tab. 4.3	Massenkonzentration der am meisten beitragenden Schwermetall- Nuklide in SCALE und OREST ohne leichte Elemente	72
Tab. 4.4	Vorkommen der wichtigsten Schwermetall-Nuklide nach fünfjähriger Abklinglagerung in Grammatom, sortiert nach ihrer Häufigkeit im Kernbrennstoff	73
Tab. 4.5	Neutronenrate durch Spontanspaltung zu Beginn und am Ende der fünfjährigen Abklinglagerung in SCALE und OREST	75

Tab. 5.1	Behältermaße des für die Analyserechnungen verwendeten generischen Lagerbehältermodells
Tab. 5.2	Materialzusammensetzungen des generischen Lagerbehältermodells 88
Tab. 5.3	Daten eines DWR-Brennelements mit 16 x 16-20 Aufbau
Tab. 5.4	Strahlungsquelltermdaten aus dem Abbrand eines UO <sub>2</sub> – Brennelements mit 4,4 % Anfangsanreicherung nach 5 Jahren Abklingzeit
Tab. 5.5	Vergleich der von den Programmen OREST/NGSRC und ORIGEN- ARP berechneten Quellstärken95
Tab. 5.6	Materialzusammensetzung von Grauguss
Tab. 5.7	Querschnittsdaten unterschiedlicher Herkunft für <sup>56</sup> Fe nach JANIS 101
Tab. 5.8	Positionen der Detektoren zur Dosisleistungsberechnung 102
Tab. 5.9	Einfluss der Energiegruppenanzahl für die Quelle auf den Neutronenfluss
Tab. 5.10	Prozentuale Ergebnisdifferenzen auf die Ortsdosisleistung im Vergleich zur Referenzlösung (174 E-Gruppen; ENDFB-VII.0)
Tab. 5.11	Ergebnisse mit Quellterm aus einem Watt Spaltenergie Spektrum für Spontanspalter Curium
Tab. 5.12	Ergebnisse zur Dosisleistungsberechnung um die oberen Tragzapfen des generischen Lagerbehälters111
Tab. 5.13	Dosisleistung auf Höhe der Behältermitte für drei ausgewählte Rechenläufe

Gesellschaft für Anlagenund 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