

**Weiterentwicklung und
Qualifizierung der
GRS-Abbrandverfahren
unter Einbeziehung
schneller Spektren**

Weiterentwicklung und Qualifizierung der GRS-Abbrandverfahren unter Einbeziehung schneller Spektren

Alexander Aures
Matthias Behler
Friederike Bostelmann
Lucia Gallner
Volker Hannstein
Robert Kilger
Fabian Sommer
Maik Stuke
Kiril Velkov
Matias Zilly
Winfried Zwermann

September 2015

Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrunde liegende F&E-Vorhaben RS1513 wurde im Auftrag des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie (BMWi) durchgeführt.

Die Arbeiten wurden von der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH ausgeführt. 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:

Abbrandberechnung, Nuklidinventar, Neutronentransport, nukleare Daten, Kritikalität, Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse

Kurzfassung

Der vorliegende Bericht dokumentiert die im Forschungsprojekt RS1513 „Weiterentwicklung und Qualifizierung der GRS-Abbrandverfahren unter Einbeziehung schneller Spektren“ erreichten Forschungs- und Entwicklungsziele. Das übergeordnete Ziel des Projekts war die Modernisierung der GRS-eigenen Methoden Abbrandberechnung und deren Erweiterung auf Systeme mit schnellem Neutronenspektrum. Weiterhin wurden die Möglichkeiten zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse im Bereich der Abbrandberechnung erweitert.

Im Einzelnen wurde dazu anhand geeigneter Daten die Eignung der in der GRS vorhandenen Simulationswerkzeuge für schnelle Systeme untersucht. Weiterhin wurde das GRS-Nuklidinventar- und Abbrandrechensystem KENOREST durch eine Neuimplementierung der Schnittstellen zwischen den einzelnen Komponenten modernisiert. Diese Entwicklungen spiegeln sich im neuen System MOTIVE wider. Das in KENOREST vorhandene Programm zur Lösung der Bateman-Gleichungen für die Inventarbestimmung wird durch eine Neuentwicklung (VENTINA) ersetzt, das in MOTIVE integriert wurde. Die bestehenden Möglichkeiten zur Unsicherheitsanalyse wurden um Module zur Verarbeitung von Unsicherheiten in Spaltausbeuten und Zerfallsdaten ergänzt. Weiterhin wurde die Möglichkeit geschaffen, eine gemeinsame, umfassende Analyse von Unsicherheiten in den nuklearen Daten und den technischen Parametern durchzuführen, die bisher getrennt mit den Programmen XSUSA und SUnCISTT analysiert werden mussten.

Abstract

This report documents the research and development goals in the reactor safety research project RS1513 „Further Development and Qualification of GRS Burn-Up Methods including Fast Spectra“. The general aim of this project was the actualization of the GRS methods in burn-up calculation and the expansion of their range of usability to fast neutron spectrum systems. Furthermore existing methods in uncertainty and sensitivity analysis are to be enhanced for burn-up calculations.

Specifically, the applicability for fast neutron systems of the simulation tools used in GRS is tested and possible need for development is to be identified. The GRS nuclide inventory and burn-up calculation system KENOREST is modernized by re-implementing the interfaces between the different modules of this system, resulting in the new system MOTIVE. The existing code for solving the Bateman equations and determining the nuclide inventory has been replaced by a newly developed code (VENTINA). The existing tools for uncertainty analysis were complemented with modules which allow to consider uncertainties in fission yields and decay data. Moreover, methods for a comprehensive analysis of uncertainties in nuclear data and technical parameters currently done separately by XSUSA and SUnCISTT were developed.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Zielsetzung.....	3
3	Prüfung der Eignung der GRS-Codesysteme für die Modellierung von schnellen Reaktorsystemen	5
3.1	Modellierung SNEAK 7A, SNEAK 7B.....	6
3.2	Vergleichsrechnungen für eine schnelle Benchmark-Anordnung	11
3.3	Untersuchungen zum Neutronentransportprogramm nTracer	22
3.4	GRS Abbrandbenchmark.....	27
4	Modularisierung des GRS-eigenen Abbrandrechenprogramms KENOREST.....	29
4.1	Vorbereitende Arbeiten	30
4.2	Entwicklungsarbeiten.....	33
4.2.1	Eingabedatei.....	34
4.2.2	Aspekte der Programmstruktur	40
4.2.3	Werkzeug zum Bereitstellen der Multigruppen-Bibliothek	41
4.3	Rechnungen zur Verifikation und erste Ergebnisse.....	43
5	Entwicklung eines Verfahrens zur Inventarberechnung	47
5.1	Vorbereitende Arbeiten	47
5.1.1	Das rationale Chebyshev Näherungsverfahren.....	48
5.1.2	Vergleich der rationalen Chebyshev Approximation in SERPENT mit der Potenzreihennäherung in ORIGEN.....	49
5.2	Entwicklungsarbeiten und Programmstruktur.....	50
5.2.1	Programmablauf	50
5.2.2	Prozessierung der Eingabedaten.....	51
5.2.3	Eingesetzte Lösungsverfahren.....	52

5.3	Rechnungen zur Verifikation	52
5.4	Verfolgung von Nuklidketten und Berechnung von kumulativen Spaltproduktausbeuten	56
6	Methoden zur Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalyse	61
6.1	Implementierung einer gemeinsamen Rechenkette für technische Parameter und nukleare Daten	62
6.2	Unsicherheiten von Zerfallsdaten und Spaltausbeuten	66
6.3	Anwendung der „schnellen GRS-Methode“ bei Abbrand-berechnungen ..	71
6.4	Arbeiten zum UAM-LWR-Benchmark Phase 2.....	73
7	Zusammenfassung	79
	Literaturverzeichnis.....	81
	Abbildungsverzeichnis.....	87
	Tabellenverzeichnis.....	91
A	Anhang A: Technische Notizen	93
B	Anhang B: Veröffentlichungen	93
C	Anhang C: Sonstiges.....	94

1 Einleitung

In Deutschland werden zur Stromerzeugung aus Kernenergie für einige weitere Jahre Leichtwasserreaktoren betrieben werden. Zur sicherheitstechnischen Bewertung dieser Anlagen hat die GRS in den Reaktorsicherheitsforschungsvorhaben RS1110, RS1150, RS1169 und RS1189 das Reaktivitäts- und Nuklidinventarprogrammssystem KENO-REST entwickelt, validiert und für ein breites Anwendungsspektrum bis hin zu sehr hohen Abbränden zur Verfügung gestellt. Die in dem Codesystem implementierte Rechenmethodik ermöglicht eine in sich geschlossene, konsistente Verfolgung des Brennelementeinsatzes im Reaktorkern sowie eine umfassende Beschreibung der nachfolgenden Schritte des Transports und der Lagerung hochabgebrannter Brennelemente in Lagerbecken, Zwischen- und Endlager. Dieses Software-System wurde um Werkzeuge zur Unsicherheitsanalyse sowohl von neutronenphysikalischen (XSUSA) als auch von technischen Parametern (SUnCISTT) ergänzt.

In Zukunft werden in den europäischen Nachbarländern auch über einen längeren Zeitraum als in Deutschland Leichtwasserreaktoren betrieben werden, die sich in der neutronenphysikalischen Auslegung und der Beladung teilweise von den jetzt sich im Einsatz befindlichen Anlagen unterscheiden. Darüber hinaus werden langfristig auch andere Reaktortypen entwickelt und in Betrieb genommen werden. In diesem Zusammenhang verdient auch die Methode des Abtrennens und Umwandelns (Partitioning and Transmutation, P&T) von langlebigen Radionukliden durch Neutronenbestrahlung besondere Beachtung. Dieses Verfahren wird als potentielle Alternative oder zumindest Ergänzung zur Endlagerung radioaktiver Abfälle in der Zukunft gesehen, und in verschiedenen Ländern auf seine technische Machbarkeit hin untersucht. Die dabei betrachteten Szenarien beinhalten vor allem die Abtrennung von Transuranen, insbesondere Americium, aus ausgedienten Kernbrennstoffen und deren Bestrahlung in Anlagen mit schnellem Neutronenspektrum. Aktuelle P&T-Szenarien gehen davon aus, dass mit dieser Methode ein gegenüber der direkten Endlagerung deutlich schnellerer Rückgang der Radiotoxizität des hochradioaktiven Abfalls erreicht werden kann. Dies könnte zu einer wesentlichen Vereinfachung des Sicherheitsnachweises führen und auch die Akzeptanz eines Endlagers in der Bevölkerung erhöhen. Als Anlagen für die Transmutation eignen sich in erster Linie schnelle flüssigmetallgekühlte Reaktoren, oder auch sogenannte beschleunigergetriebene Systeme (Accelerator Driven Systems, ADS).

Um auch weiterhin den gesamten Brennstoffkreislauf sowohl für Deutschland als auch für die europäischen Nachbarländer fundiert beurteilen zu können, sind der Erhalt und die Weiterentwicklung der Rechenmethoden, sowohl für optimierte LWR-Auslegungen als auch für fortschrittliche Reaktorkonzepte, erforderlich. Damit den beschriebenen veränderten Anforderungen Rechnung getragen werden kann, wird das Programmsystem für Abbrand, Aktivierung, Abschirmung, sowie die zugehörigen Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysewerkzeuge der GRS entsprechend überarbeitet und erweitert. Gerade für schnelle Systeme sind dazu substantielle Anpassungen nötig. Auch werden Programmteile ersetzt, die Näherungen beinhalten welche angesichts mittlerweile verfügbarer Hardwareressourcen nicht mehr erforderlich sind. Zur effizienten Durchführung dieser Arbeiten sowie zur besseren Möglichkeit für zukünftige Änderungen und Erweiterungen wird auch die Programmstruktur wesentlich modernisiert, mit dem Ziel einer durchgängigen Modularisierung.

2 Zielsetzung

Ziel des vorliegenden Projektes war die Aktualisierung des GRS-Abbrandprogramm-systems KENOREST /HES 99/, /HES 03/, /KIL 08/. Damit sollte zum einen die Zukunftsfähigkeit der bestehenden Funktionalitäten insbesondere zur Anwendung bei LWR-Systemen sichergestellt werden, und zum anderen der Einsatzbereich auf Anordnungen mit schnellem Neutronenspektrum erweitert werden. Dies gilt sowohl hinsichtlich der Rechenmethoden als auch hinsichtlich der verwendeten nuklearen Daten. In diesem Rahmen wurde die Programmstruktur von KENOREST modularisiert, und eine aktuelle Methode zur Lösung der Abbrandgleichungen implementiert. Um eine möglichst vollständige Erfassung der relevanten Unsicherheiten (nukleare Daten, technologische Parameter, thermohydraulische und thermomechanische Parameter) zu gewährleisten, wurden die im Programm XSUSA implementierten Methoden entsprechend erweitert. Im Vordergrund stand dabei der Nutzen für die traditionelle Anwendung für LWR-Systeme. Zusätzlich wurde durch die genannten Maßnahmen das Einsatzgebiet auch auf Systeme mit schnellem Neutronenspektrum erweitert. Damit sollte die GRS in die Lage versetzt werden, quantitative Analysen für über Leichtwasserreaktoren hinausgehende Reaktorkonzepte durchzuführen, das Transmutationspotential unterschiedlicher Szenarien zu bewerten, sowie zusätzlich zur Bestimmung der Zusammensetzung des nach der Transmutation verbleibenden Materials die damit behafteten Unsicherheiten zu ermitteln.

Die Modularisierung der Programmstruktur ermöglicht es, künftig flexibler auf geänderte oder zusätzliche Anforderungen reagieren zu können. Die Schnittstellen zwischen den einzelnen Teilmodulen wurden so gestaltet, dass ein einfacher Austausch einzelner Module ohne großen zusätzlichen Programmieraufwand möglich ist. Sollte sich im späteren Einsatz zeigen, dass ein verwendetes Modul ersetzt oder ergänzt werden muss, dann kann flexibel reagiert und das System schnell und ohne unverhältnismäßig großen Ressourcenaufwand angepasst werden. Ein solcher Fall kann beispielsweise auftreten, wenn ein Modul den aktuellen Ansprüchen nicht mehr genügt, oder, im Fall externer Programme, nicht mehr unterstützt oder weiterentwickelt wird, oder sich ein neuer Anwendungsbereich ergibt, der mit dem bestehenden System nicht abgedeckt werden kann.

Die Neuentwicklung eines Inventarberechnungsprogramms zielte zum einen auf eine Verbesserung bei bestehenden Anwendungen für LWR und zum anderen auch auf

eine Erweiterung der Einsatzmöglichkeiten hin. Zum ersten Punkt sind eine Verbesserung der Rechengenauigkeit und auch der Rechenzeit zu erwarten. Zum zweiten Punkt wurde zunächst an die Einbeziehung zusätzlicher Reaktionskanäle und an eine Erweiterung des Energiebereichs für die Anwendung bei Transmutationsszenarien gedacht, aber auch an direkte Einbindung von Aktivierungsrechnungen.

Hinsichtlich Unsicherheitsanalysen werden die in der GRS vorhandenen Möglichkeiten und das bestehende Know-How möglichst effektiv und umfänglich für den Bereich der Abbrandrechnungen zur Verfügung gestellt werden.

Die daraus resultierenden Einzelziele werden in den folgenden Abschnitten kurz vorgestellt, und die dazu durchgeführten Arbeiten und erzielten Ergebnisse werden dargestellt.

3 Prüfung der Eignung der GRS-Codesysteme für die Modellierung von schnellen Reaktorsystemen

Die GRS-Abbrand-Rechenprogramme OREST und KENOREST/DORTOREST wurden bislang in erster Linie für Uranoxid- und MOX-Brennelemente von Leichtwasserreaktoren entwickelt und eingesetzt. Für den Einsatz bei schnellen Anordnungen ergeben sich Anforderungen, die durch die vorhandenen Programmoptionen nicht oder nur teilweise abgedeckt sind. Dies betrifft insbesondere die unterschiedliche Kerengeometrie (in den meisten Fällen hexagonale Gitter), sowie das unterschiedliche Kühlmittel (z. B. Natrium, Blei, Blei/Wismut oder Gas) und die daraus resultierenden unterschiedlichen Spektralverhältnisse. Es wurde daher in diesem Arbeitspaket überprüft, inwieweit sich die GRS-Berechnungsmethoden auf schnelle Anordnungen, insbesondere für P&T-Fragestellungen, übertragen lassen. Dies betrifft die gesamte Rechenkette, bestehend aus Spektralcode, Transportcode und Nuklidinventarcode, sowie die verwendeten nuklearen Daten. Dabei wurde nicht nur das in der GRS entwickelte Programmsystem KENOREST überprüft; sondern es wurden auch andere in der GRS eingesetzte Abbrandrechenprogramme wie TRITON aus dem SCALE-System /SCA 11/ miteinbezogen.

Zur Vorbereitung dieser Arbeit wurde zunächst recherchiert, welche Daten verfügbar sind und zur Überprüfung herangezogen werden können. Zur Überprüfung der Abbrandprogramme wären idealerweise Nachbestrahlungsanalyseproben nachzurechnen, wie dies bei der Validierung dieser Programme für Anwendungen bei Leichtwasserreaktoren gängige Praxis ist. Die Nachrechnung kritischer Experimente kann zumindest zeigen, ob das Transportmodul eines Abbrandprogramms die spektralen Verhältnisse und die Reaktivität einer schnellen Anordnung korrekt wiedergibt. Um in dieser Hinsicht Aussagen treffen zu können, sollte eine unabhängige Kritikalitätsrechnung mit dem in der Abbrandrechnung verwendeten Transportmodul und den gleichen Wirkungsquerschnittsbibliotheken erfolgen. Dies ist zum Beispiel im SCALE-Paket gegeben, bei dem die Kritikalitätssequenz CSAS6 und die Abbrandsequenz T6-DEPL jeweils das Monte Carlo Programm KENO-VI verwenden. Eine Nachrechnung von kritischen Experimenten mit Hilfe des KENOREST-Systems ist dagegen aufgrund von Einschränkungen bei der Geometriebeschreibung und der Wirkungsquerschnittsprozession nicht ohne weiteres möglich. Im Falle nicht vorhandener experimenteller Daten kann über die Nachrechnung von Rechenbenchmarks ein Vergleich mit anderen auf dem Gebiet der schnellen Systeme etablierten Codes durchgeführt werden.

Die durchgeführten Recherchen zeigen, dass sich der Bezug von Messdaten hinsichtlich abgebrannten Brennstoffs für schnelle Systeme, die einen quantitativen Vergleich mit Abbrandrechnungen ermöglichen, als schwierig gestaltet. Dies liegt zum einen an der Zugänglichkeit dieser Daten und zum anderen daran, dass aufgrund anderer Prioritäten bei Nachbestrahlungsanalysen von Brennstoff aus schnellen Reaktoren häufig eher die mechanischen und allgemeinen chemischen Eigenschaften und weniger die genaue Bestimmung des Nuklidinventars im Vordergrund standen. Konkret wurde im Rahmen der Untersuchungen bei der OECD/NEA das IRPHE-KNK-II Archiv beschafft /IAE 04/. Dieses enthält eine Sammlung von frei verfügbaren experimentellen Daten, die während des Betriebs des schnellen natriumgekühlten Versuchsreaktors KNK-II gesammelt wurden. In diesem Archiv finden sich recht vollständige Angaben zur Betriebshistorie und auch zu Nachbestrahlungsanalysen. Allerdings sind kaum Daten zum Nuklidinventar von bestrahlten KNK-II-Brennelementen enthalten. Ein sinnvoller Vergleich von Messdaten und Rechnungen erscheint hier nicht möglich. Weiterhin gab es Bemühungen, Daten von dem französischen Reaktor Phénix einerseits und von russischen schnellen Reaktoren (BN-Serie) andererseits zu erhalten. Diese blieben allerdings bis zum Vorhabensende ohne konkretes Ergebnis. Die Arbeiten in diesem Arbeitspaket konzentrierten sich daher auf die Analyse von kritischen Experimenten und das Nachrechnen von Rechenbenchmarks. Die dazu erzielten Ergebnisse sind in den folgenden beiden Kapiteln dargestellt.

3.1 Modellierung SNEAK 7A, SNEAK 7B

Zur Erprobung des Einsatzes von Neutronentransportmethoden für Reaktorsysteme mit schnellem Neutronenspektrum wurde die „Schnelle Null-Energie-Anordnung Karlsruhe“ (SNEAK) modelliert. Diese Anordnung wurde 1965 zur Überprüfung von Wirkungsquerschnittsdaten und von Berechnungsmethoden für schnelle Reaktorsysteme gebaut und ist als Benchmark im „International Handbook of Evaluated Reactor Physics Benchmark Experiments“ (IRPhEP, März 2013) /NEA 13b/ dokumentiert. Die zwei beschriebenen Experimente sind SNEAK 7A und SNEAK 7B. SNEAK 7A bestand aus einem Kern, der quaderförmige Brennelemente enthält. In den Brennelementen waren abwechselnd Brennstoffplatten aus $(\text{Pu/U})\text{O}_2$ und Platten aus Graphit übereinander angeordnet. Beim SNEAK 7B Experiment wurden die Platten aus Graphit gegen Platten aus $^{235}\text{UO}_2$ ausgetauscht, um eine Härtung des Neutronenspektrums zu erreichen. Bei beiden Experimenten waren die Kerne mit einem Reflektor aus angereichertem Uran umgeben. Die Berechnung der beiden Experimente wurde mit der Kritikalitäts-

sequenz CSAS6 des SCALE-Programmpaketes /SCA 11/ durchgeführt. Da innerhalb dieser Sequenz das Modul KENO-VI zur Bestimmung des Multiplikationsfaktors verwendet wird, konnten anhand der Benchmarkspezifizierung detaillierte, dreidimensionale Modelle für beide Experimente erstellt werden. Als nukleare Basisdaten wurden zum einen Punktdaten mit kontinuierlicher Energieabhängigkeit und zum anderen Multigruppendaten aus der SCALE-eigenen 238-Gruppen ENDF/B-VII Bibliothek verwendet.

In Abb. 3.1 ist ein horizontaler Schnitt durch das SNEAK 7A Modell dargestellt. Der Kern besteht aus 79 Brennelementen (grün) mit Brennstoffplatten aus $(\text{Pu/U})\text{O}_2$ und Platten aus Graphit. Außerdem beinhaltet der Kern zwei Trimmelemente (gelb), modelliert als ein homogenes Material aus PuO_2 - UO_2 und Graphit, und neun Regelemente (rot) bestehend aus Uran. Weiterhin wird der Kern von Reflektorelementen (grau) umgeben. Bei allen Elementen wurden die Hüllstrukturen nicht einzeln modelliert, sondern mit den Materialzusammensetzungen der jeweiligen Elemente homogenisiert. Abb. 3.2 zeigt anhand eines vertikalen Schnitt durch das SNEAK 7A Modell die vertikale Lage der Elemente und die abwechselnde Anordnung der Brennstoffplatten (grün) und Graphitplatten (dunkelblau).

In Abb. 3.3, einem horizontalen Schnitt durch das SNEAK 7B Modell, sind die Positionen der 113 Brennelemente (grün) und der 13 Regelelemente (rot) im Kern dargestellt. Die Brennelemente beinhalten Platten aus $(\text{Pu/U})\text{O}_2$ und Platten aus $^{\text{nat}}\text{UO}_2$, die abwechselnd übereinander angeordnet sind. Die Regelelemente bestehen aus Uran. Der Kern ist wie beim SNEAK 7A Modell ebenfalls mit Reflektorelementen (grau) umgeben und die Hüllstrukturen sind mit den Materialzusammensetzungen der jeweiligen Elemente homogenisiert. Abb. 3.4 zeigt anhand des vertikalen Schnitts durch das SNEAK 7B Modell die vertikale Lage der Elemente im Kern.

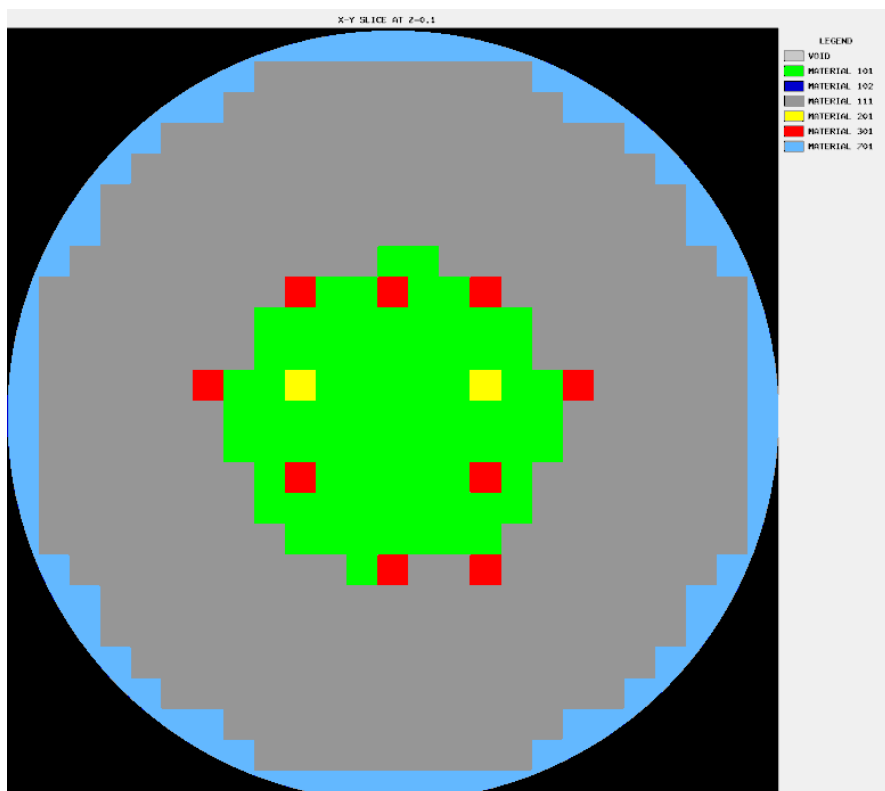


Abb. 3.1 Horizontaler Schnitt durch das SNEAK 7A Modell

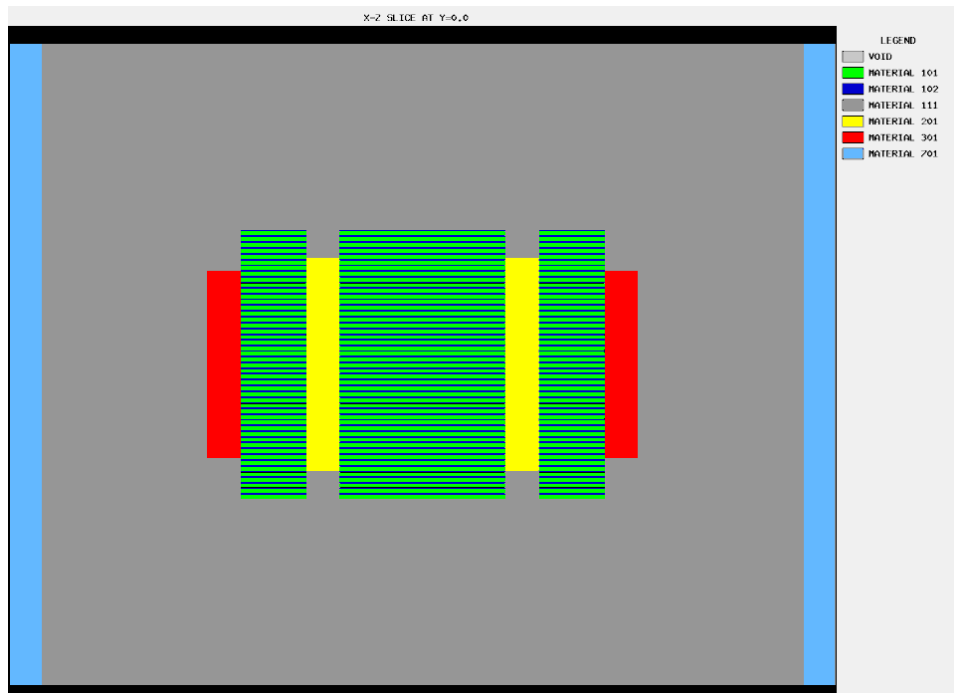


Abb. 3.2 Vertikaler Schnitt durch das SNEAK 7A Modell

Die Experimente SNEAK 7A und SNEAK 7B sind als detaillierte dreidimensionale Modelle in KENO-VI abgebildet worden, um die Multiplikationsfaktoren mithilfe der CSAS6 Sequenz des SCALE-Programmpaketes zu bestimmen. Für das SNEAK 7A Modell ist in der Dokumentation ein Multiplikationsfaktor von $1,0010 \pm 0,0029$ angegeben, und beim SNEAK 7B Modell ein Multiplikationsfaktor von $1,0016 \pm 0,0035$. Die berechneten Multiplikationsfaktoren für das SNEAK 7A Modell und das SNEAK 7B Modell für die unterschiedlichen Rechnungen sind in Tab. 3.1 dargestellt. Es zeigt sich, dass die Continuous Energy (CE) Rechnungen näher an den experimentellen Werten liegen als die Multigruppen-Rechnungen. Bei letzteren wurden verschiedene Läufe zum Testen der Resonanzbehandlung durchgeführt. Neben der Rechnung mit vollständiger Resonanzbehandlung war das jeweils eine Rechnung mit Resonanzbehandlung ohne CENTRM und eine Rechnung ohne Resonanzbehandlung. Auffällig ist, dass bei SNEAK 7B die Rechnung mit CENTRM ein schlechteres Ergebnis liefert als jene ohne CENTRM. Die Untersuchungen zum Hintergrund dieses Effekts sind noch im Gange. Insgesamt stimmen die Rechnungen mit der CE-Bibliothek im Rahmen der statistischen Unsicherheiten der Monte-Carlo Rechnungen sowie den in der Dokumentation angegebenen experimentellen Unsicherheiten miteinander überein. Die Multigruppenrechnungen liegen dagegen teilweise außerhalb einer Standardabweichung, teilweise sogar außerhalb zweier Standardabweichungen.

Tab. 3.1 Ergebnisse zur Nachrechnung der SNEAK Experimente mit CSAS6

	SNEAK7A		SNEAK7B	
	k_{eff}	σ	k_{eff}	σ
Benchmark	1,0010	0,0029	1,0016	0,0035
Continuous Energy	1,00325	0,00013	1,00091	0,00013
238 Gruppen Multiregion SLAB	1,00858	0,00013	1,00613	0,00012
238 Gruppen Multiregion SLAB, ohne CENTRM	1,01024	0,00013	1,00366	0,00013
238 Gruppen ohne Resonanzbehandlung	1,01116	0,00012	1,00684	0,00012

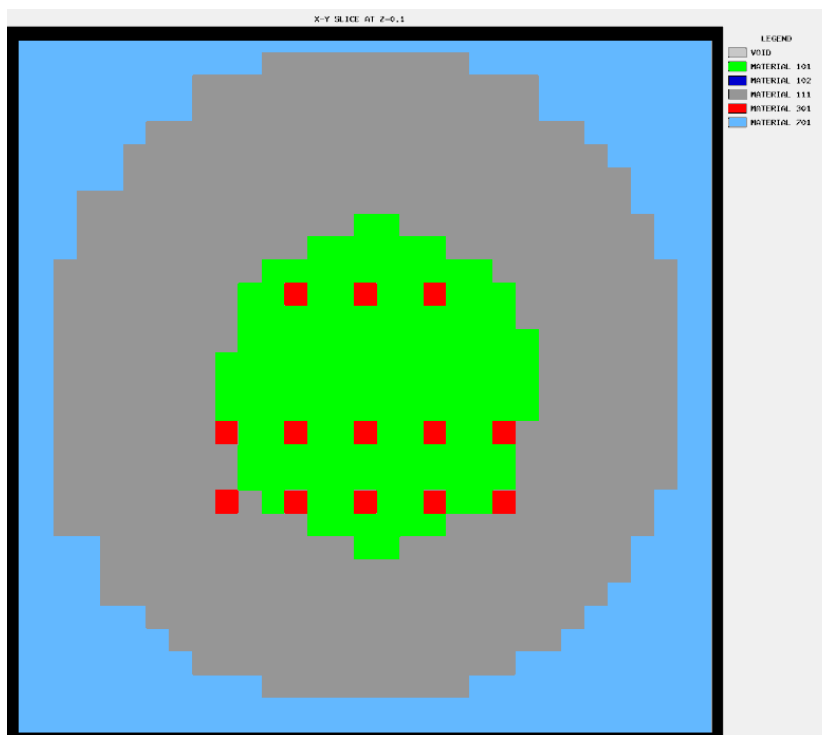


Abb. 3.3 Horizontaler Schnitt durch das SNEAK 7B Modell

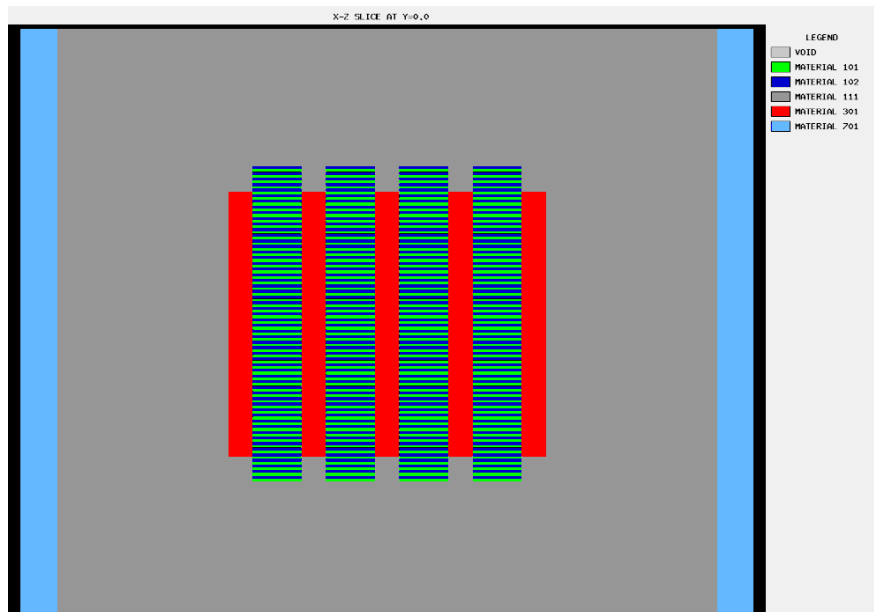


Abb. 3.4 Vertikaler Schnitt durch das SNEAK 7B Modell

3.2 Vergleichsrechnungen für eine schnelle Benchmark-Anordnung

Wie oben beschrieben deuten bisherige Recherchen darauf hin, dass nur sehr wenige Messdaten hinsichtlich abgebrannten Brennstoffs für schnelle Systeme verfügbar sind. Um die Anwendbarkeit und Qualität von Rechenprogrammen und nuklearen Daten für Abbrandberechnungen für schnelle Systeme einschätzen zu können, ist es daher zunächst erforderlich, Vergleiche der Ergebnisse von unterschiedlichen Programmen durchzuführen. Dazu wurden zwei Anordnungen aus einer Reihe von Benchmark-Aufgaben gewählt, für die gegenwärtig im Rahmen der OECD/NEA-Arbeitsgruppe SFR-FT [4] Vergleichsrechnungen durchgeführt werden. Die Benchmark-Spezifikationen sind in /BLA 11/ zu finden. Für die eigenen Berechnungen wurde zuerst ein Brennelement des „Large Oxide Core“ herangezogen. Zur Fortführung der bisher getätigten Vergleichsrechnungen wurden sowohl die Auswahl an Neutronentransport- und Abbrandprogrammsystemen wie auch die Auswahl der nuklearen Datenbibliotheken erweitert. Darüber hinaus wurden Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen hinsichtlich der Unsicherheiten in den nuklearen Daten durchgeführt und erste Untersuchungen für ein Brennelement des sog. „ABR Metallic Core“ vorgenommen.

Beim „Large Oxide Core“ handelt es sich um einen Reaktorkern mit natriumgekühltem, oxidischem Brennstoff mit einer thermischen Leistung von 3600 MW. Für dessen Brennelemente liegt hinsichtlich der berechneten Nuklidzusammensetzung nach einem Abbrandzyklus eine Reihe von Vergleichsergebnissen vor. Für die eigenen Abbrand-

berechnungen wurden die Neutronentransportrechnungen sowohl mit kontinuierlichen Wirkungsquerschnittsbibliotheken als auch mit Multigruppenbibliotheken durchgeführt. Für die Anwendung der kontinuierlichen Wirkungsquerschnittsbibliotheken ENDF/B-VII.0, -VII.1 und JEFF-3.1.1, -3.1.2, -3.2 wurden die Monte Carlo Neutronentransport- und Abbrandprogramme MCNP-6 /GOO 13/ und Serpent 2 /LEP 15/ eingesetzt. Die Bibliothek ENDF/B-VII.1 ist bei MCNP-6 enthalten, JEFF-3.1.1 wird mit Serpent geliefert und JEFF-3.1.2 und -3.2 sind bei der OECD/NEA Datenbank als prozessierte ACE-Bibliotheken (A Compact ENDF Format) erhältlich. Darüber hinaus wurden Multigruppen-Rechnungen mit den Sequenzen TRITON/NEWT und TRITON/KENO unter Anwendung der 238er Multigruppenbibliothek ENDF/B-VII.0 aus dem SCALE 6.1 Programmsystem /SCA 11/ durchgeführt, und auch mit dem Programm HELIOS /SCA 95/, welches eine 190er ENDF/B-VI Multigruppenbibliothek anwendet. Die Berechnungen mit TRITON, MCNP und Serpent wurden teilweise in Zusammenarbeit mit der Universität Stuttgart, IKE, durchgeführt /GUI 14/.

Abb. 3.5 zeigt das NEWT-Modell des untersuchten Brennelements. Es handelt sich um den untersten axialen Abschnitt eines Brennelements im inneren Kernbereich des „Large Oxide Core“. Der überwiegende Teil des Spaltstoffs ist ^{239}Pu . Der Ausgangszustand für die Abbrandberechnungen ist der Gleichgewichtszustand, wobei das gesamte Spaltproduktinventar durch einen reaktivitätsäquivalenten Anteil von Molybdän dargestellt wird. Ein Abbrandzyklus beträgt 410 Tage bei einer thermischen Leistung von 50,4 MW/t Schwermetall. Für weitere Details wird auf /BLA 11/ verwiesen.

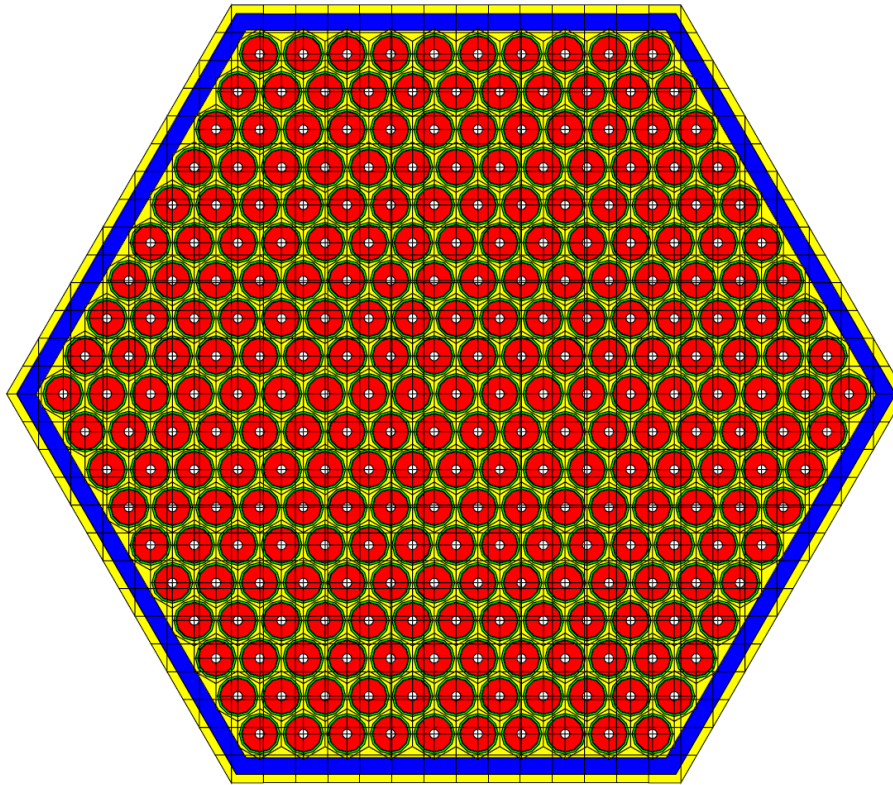


Abb. 3.5 NEWT-Modell für das Brennelement eines schnellen natriumgekühlten Reaktors

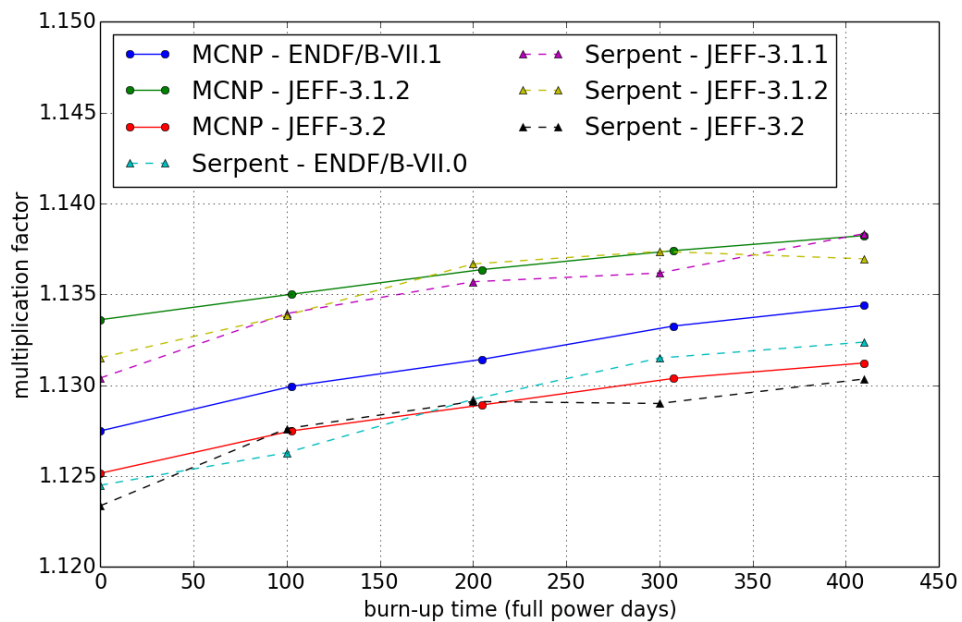


Abb. 3.6 Verlauf der Multiplikationsfaktoren für einen Zyklus von verschiedenen Monte Carlo Neutronentransportprogrammen und kontinuierlichen Datenbibliotheken

Die mit den Monte Carlo Neutronentransportprogrammen MCNP-6 und Serpent und den verschiedenen kontinuierlichen Datenbibliotheken berechneten Multiplikationsfaktoren sind für einen Zyklus von 410 Tagen in Abb. 3.6 dargestellt. Bei Vergleich der MCNP-Ergebnisse ist zu erkennen, dass die mit JEFF-3.1.2 berechneten Multiplikationsfaktoren höher sind als die mit ENDF/B-VII.1. Bei BOC besteht eine Differenz von 479 pcm und bei EOC von 297 pcm. Dieses Ergebnis stimmt qualitativ mit den Ergebnissen der Ganzkernrechnungen der Benchmarkteilnehmer überein /NEA 13/. Bei Anwendung der aktuellen JEFF Version, nämlich JEFF-3.2, liegen die Multiplikationsfaktoren unterhalb von denen, die mit ENDF/B-VII.1 berechnet wurden. Es besteht ein Unterschied von -184 pcm bei BOC und von -247 pcm bei EOC. Der Unterschied zwischen den beiden JEFF Bibliotheken ist 663 pcm bei BOC und 544 pcm bei EOC. Generell werden die MCNP-Ergebnisse von den Serpent-Ergebnissen bestätigt, jedoch sind zu Beginn des Zyklus größere Abweichungen zu erkennen, die in zukünftigen Studien näher untersucht werden könnten. Ferner ist festzuhalten, dass die Abweichungen zwischen den verschiedenen Datenbibliotheken signifikant größer sind als bei entsprechenden Berechnungen von Leichtwasserreaktorsystemen.

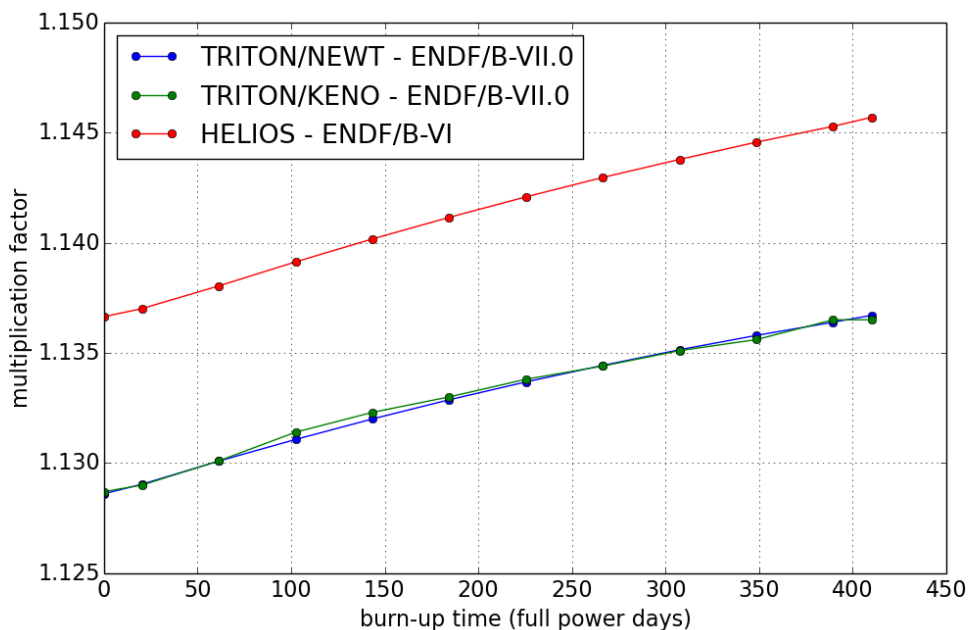


Abb. 3.7 Verlauf der Multiplikationsfaktoren für einen Zyklus von verschiedenen deterministischen Neutronentransportprogrammen und Multigruppen Datenbibliotheken

In Abb. 3.7 sind die Ergebnisse der deterministischen Multigruppenrechnungen dargestellt. Die Sequenzen TRITON/NEWT und TRITON/KENO des SCALE 6.1 Programmsystems liefern nahezu identische Ergebnisse, v. a. da sie die gleiche Bibliothek benutzen. Die Multiplikationsfaktoren von HELIOS sind um ca. 630 pcm größer als die Ergebnisse der TRITON Sequenzen. Diese Abweichung ist sehr wahrscheinlich auf die 190er Multigruppen ENDF/B-VI Bibliothek von HELIOS zurückzuführen.

Tab. 3.2 Aktiniden-Inventare am Ende des Abbrandzyklus aus den eigenen Abbrandrechnungen mit TRITON/NEWT und HELIOS und den Ergebnissen anderer Benchmarkteilnehmer

Nuklid	TRITON	HELIOS	(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)
U-234	2.403E-06	1.621E-06	2.373E-06	2.380E-06	2.390E-06	2.397E-06	2.374E-06	2.360E-06	2.389E-06
U-235	2.667E-05	2.689E-05	2.672E-05	2.654E-05	2.650E-05	2.684E-05	2.669E-05	2.665E-05	2.671E-05
U-236	5.558E-06	5.328E-06	5.584E-06	5.641E-06	5.641E-06	5.568E-06	5.533E-06	5.586E-06	5.570E-06
U-238	1.814E-02	1.816E-02	1.814E-02	1.814E-02	1.814E-02	1.817E-02	1.815E-02	1.814E-02	1.815E-02
Np-237	5.929E-06	5.391E-06	5.011E-06	5.623E-06	5.748E-06	5.236E-06	5.542E-06	5.691E-06	5.694E-06
Pu-238	8.380E-05	8.401E-05	8.477E-05	8.411E-05	8.391E-05	8.465E-05	8.492E-05	8.425E-05	8.420E-05
Pu-239	1.914E-03	1.909E-03	1.904E-03	1.905E-03	1.907E-03	1.905E-03	1.903E-03	1.902E-03	1.906E-03
Pu-240	1.026E-03	1.022E-03	1.031E-03	1.034E-03	1.032E-03	1.035E-03	1.028E-03	1.031E-03	1.030E-03
Pu-241	1.987E-04	1.992E-04	1.998E-04	1.988E-04	2.009E-04	1.988E-04	2.043E-04	2.013E-04	2.009E-04
Pu-242	3.161E-04	3.149E-04	3.150E-04	3.154E-04	3.160E-04	3.160E-04	3.157E-04	3.160E-04	3.159E-04
Am-241	4.336E-05	4.354E-05	4.294E-05	4.318E-05	4.304E-05	4.365E-05	4.343E-05	4.253E-05	4.327E-05
Am-242	5.257E-09	1.290E-08	1.805E-08	1.630E-08	1.668E-08	1.462E-08		1.725E-08	1.628E-08
Am-242m	1.825E-06	1.630E-06	1.197E-06	1.603E-06	1.617E-06	1.838E-06	1.817E-06	1.073E-06	1.603E-06
Am-243	3.285E-05	3.270E-05	3.446E-05	3.420E-05	3.339E-05	3.369E-05	3.419E-05	3.245E-05	3.349E-05
Cm-242	2.786E-06	2.734E-06	3.166E-06	2.909E-06	3.036E-06	2.654E-06	2.744E-06	3.123E-06	2.967E-06
Cm-243	1.450E-07	1.478E-07	1.908E-07	1.880E-07	1.625E-07	1.777E-07	2.431E-07	1.617E-07	1.569E-07
Cm-244	6.659E-06	6.359E-06	7.112E-06	7.128E-06	6.964E-06	6.840E-06	7.108E-06	6.843E-06	6.913E-06
Cm-245	3.953E-07	4.444E-07	4.697E-07	4.908E-07	4.332E-07	4.574E-07	4.198E-07	4.321E-07	4.296E-07
Cm-246	1.585E-08	1.129E-08	1.742E-08	1.834E-08	1.715E-08	1.693E-08	1.426E-08	1.680E-08	1.661E-08

In Tab. 3.2 werden exemplarisch die Ergebnisse für die Aktiniden-Inventare am Ende des Abbrandzyklus aus HELIOS und TRITON mit denen anderer Benchmark-Teilnehmer /NEA 13/ verglichen. Diese sind:

- (1) KIT mit KANEXT;
- (2) University of Illinois mit SERPENT- JEFF-3.1.1;
- (3) University of Illinois mit SERPENT- ENDF/B-VII.0;
- (4) KFKI mit ECCO;
- (5) JAEA mit JAEA-4;
- (6) ENEA mit MCNP- ENDF/B-VII.0;
- (7) HZDR mit SERPENT- ENDF/B-VII.0.

Abb. 3.8 zeigt Ergebnisse der Abbrandrechnungen in kondensierter Form. Für sämtliche Aktinide wird die relative Abweichung von ihrem Mittelwert dargestellt. Dabei ist der Mittelwert im Fall der eigenen Rechnungen anhand der Ergebnisse der Programme MCNP, Serpent, TRITON/NEWT, HELIOS unter Anwendung der verschiedenen Datenbibliotheken berechnet worden (blau). Zum Vergleich wurde dasselbe mit den Ergebnissen der Benchmarkteilnehmer durchgeführt (rot).

Für die meisten Aktinide, insbesondere Pu-239, ist die relative Abweichung gering, jedoch für U-234, Np-237 und die Minoren Aktinide Americium und Curium werden größere Abweichungen ermittelt. Generell sind die ermittelten Abweichungen von der gleichen Größenordnung, wie sie auch bei Abbrandrechnungen für Leichtwasserreaktoren beobachtet worden sind /HES 07/.

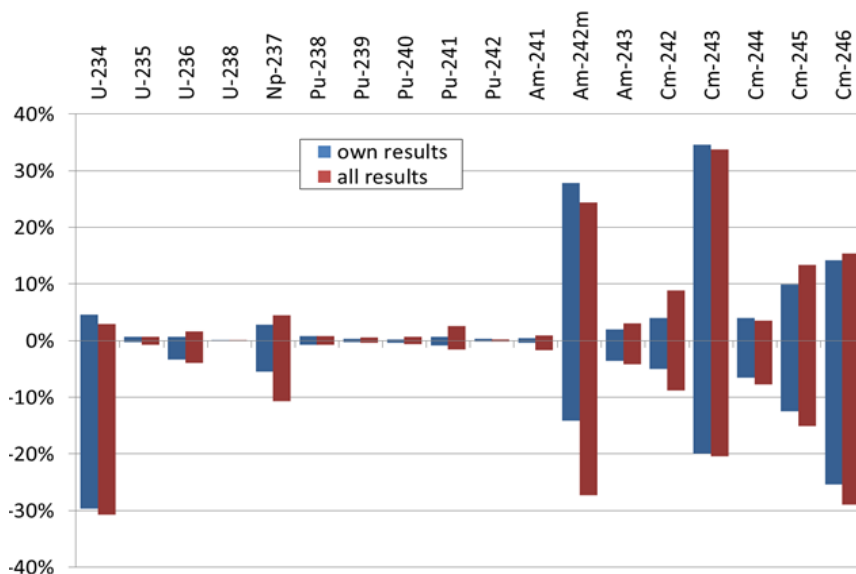


Abb. 3.8 Abweichungen der Aktinideninventare am Ende des Zyklus ermittelt durch eigene Rechnungen und von allen anderen Benchmarkteilnehmern

Tab. 3.3 Spaltprodukt-Inventare am Ende des Abbrandzyklus aus TRITON und HELIOS und deren relative Abweichung

Nuklid	TRITON	HELIOS	Relative Abweichung
Sr-90	1.031E-05	1.019E-05	-1.16%
Tc-99	3.428E-05	2.751E-05	-19.74%
Ru-101	3.016E-05	2.730E-05	-9.48%
Rh-103	2.666E-05	2.613E-05	-1.99%
Ag-109	6.537E-06	6.807E-06	4.13%
I-129	5.864E-06	5.756E-06	-1.84%
Xe-131	1.658E-05	1.645E-05	-0.81%
Xe-135	4.693E-08	4.604E-08	-1.90%
Cs-133	3.123E-05	3.075E-05	-1.54%
Cs-134	5.552E-07	5.639E-07	1.56%
Cs-137	3.027E-05	2.968E-05	-1.95%
Ce-144	1.172E-05	1.145E-05	-2.31%
Nd-142	1.120E-07	1.068E-07	-4.67%
Nd-143	1.975E-05	1.935E-05	-2.05%
Nd-144	7.042E-06	6.919E-06	-1.75%
Nd-145	1.460E-05	1.428E-05	-2.18%
Nd-146	1.273E-05	1.243E-05	-2.37%
Nd-148	8.275E-06	8.079E-06	-2.37%
Sm-147	1.181E-06	1.160E-06	-1.78%
Sm-149	5.728E-06	5.543E-06	-3.23%
Sm-150	5.268E-07	5.997E-07	13.83%
Sm-151	3.266E-06	3.238E-06	-0.87%
Sm-152	3.213E-06	3.092E-06	-3.77%
Eu-153	1.777E-06	1.737E-06	-2.24%
Eu-154	1.773E-07	1.606E-07	-9.42%
Eu-155	7.952E-07	7.122E-07	-10.43%
Gd-155	6.257E-08	5.772E-08	-7.75%

Für die Spaltprodukte sind keine Ergebnisse anderer Benchmark-Teilnehmer vorhanden. Beispielfähig werden deswegen nur die eigenen TRITON- und HELIOS-Ergebnisse miteinander verglichen. Diese sind für einige relevante Spaltprodukte in Tab. 3.3 angegeben, zusammen mit deren relativen Abweichungen. Die Abweichungen sind vergleichbar mit denen bei den DWR- und SWR-Abbrandbenchmarks, siehe Abschnitt 3.3.

In Abb. 3.9 und Abb. 3.10 werden die normierten Neutronenspektren aus den verschiedenen Rechenprogrammen für den Ausgangszustand verglichen (Im Laufe des Abbrands ändert sich das Spektrum nur sehr wenig). Die MCNP-Ergebnisse sind nur für Energien dargestellt, bei denen die relative statistische Unsicherheit weniger als 10 % beträgt. An der linearen Darstellung in Abb. 3.10 wird sichtbar, dass die Abweichungen teilweise deutlich sind; insbesondere zeigt das HELIOS-Ergebnis größere Unterschiede zu denen der anderen Programme.

Zusätzlich zu den Neutronentransport- und Abbrandrechnungen wurden Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen hinsichtlich der Unsicherheiten in den nuklearen Daten durchgeführt. Hierzu wurden die sampling-basierte XSUSA Methode und das auf Störungstheorie basierende TSUNAMI Modul von SCALE 6.1 verwendet. Mittlerweile ist auch SCALE 6.2 in einer fortgeschrittenen Beta-Version verfügbar, die das auf XSUSA basierende Unsicherheitsanalysemodul SAMPLER enthält. Damit wurden erste Berechnungen für die Unsicherheiten im Multiplikationsfaktor und den Aktiniden-Inventaren durchgeführt und mit XSUSA verglichen. In Abb. 3.11 sind die Ergebnisse für die relativen Unsicherheiten im Multiplikationsfaktor für BOC und EOC und den Nukliddichten einiger Aktinide für EOC dargestellt.

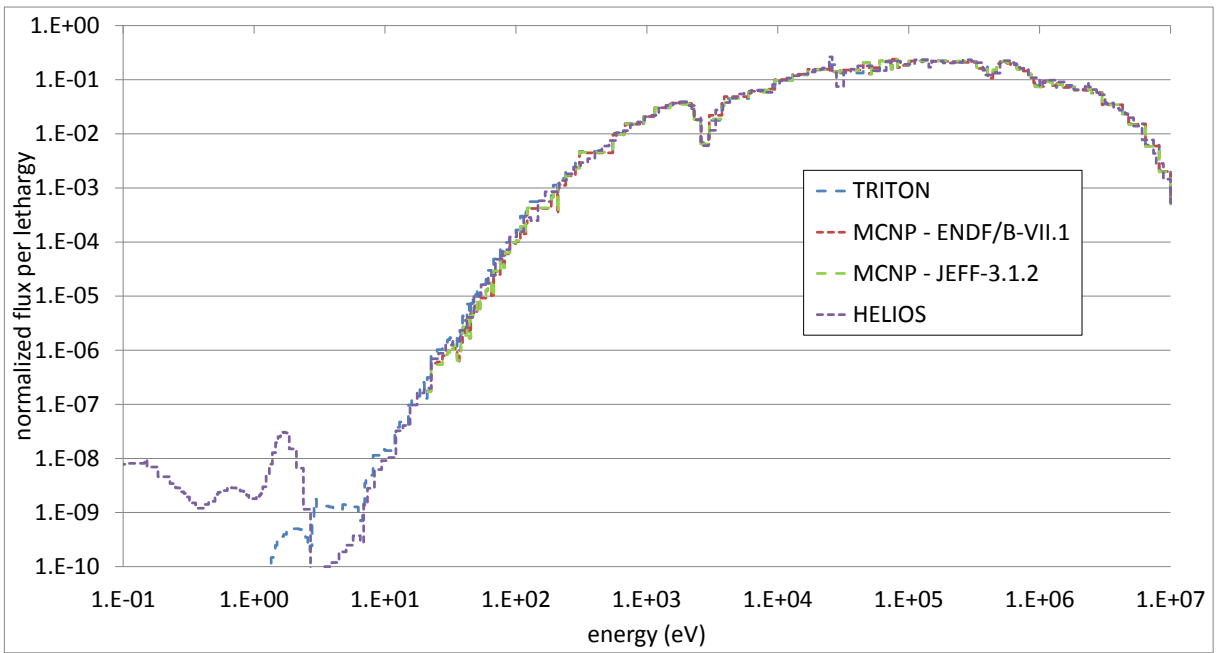


Abb. 3.9 Neutronenfluss als Funktion der Energie aus unterschiedlichen Rechenprogrammen (logarithmische Darstellung)

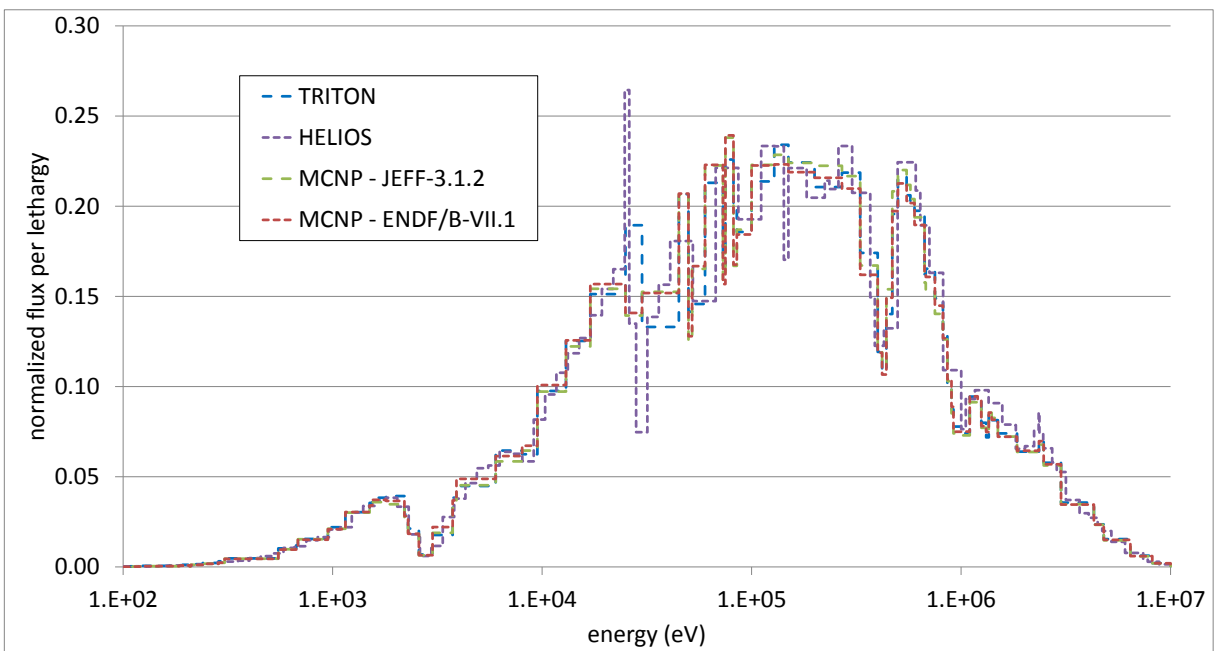


Abb. 3.10 Neutronenfluss als Funktion der Energie aus unterschiedlichen Rechenprogrammen (lineare Darstellung)

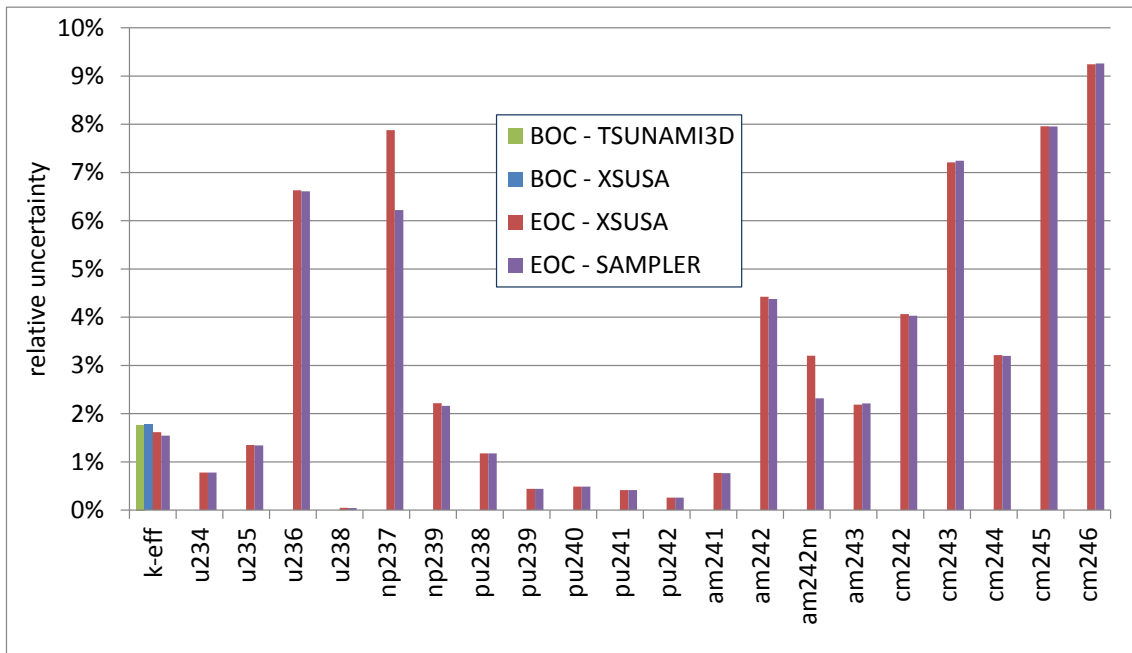


Abb. 3.11 Relative Unsicherheiten für den Multiplikationsfaktor und für Nuklidichten einiger Aktinide aufgrund von Unsicherheiten in den nuklearen Daten

XSUSA und TSUNAMI ermitteln nahezu gleiche Ergebnisse für die Unsicherheit des Multiplikationsfaktors bei BOC, nämlich 1,7 %. Ein solcher Wert ist deutlich größer im Vergleich zur Unsicherheit von Multiplikationsfaktoren von Leichtwasserreaktorsystemen /ZWE 14a/. Die Unsicherheiten der Aktinideninventare sind gering und liegen unter 8 %, wobei sich hier sehr gute Übereinstimmung zwischen den Ergebnissen von XSUSA und SAMPLER ergibt. Größere Abweichungen sind lediglich bei Np-237 und Am-242m zu beobachten.

Mit einer Sensitivitätsanalyse wurde untersucht, welche Unsicherheiten in den nuklearen Daten zur totalen Unsicherheit des Multiplikationsfaktors bei BOC und EOC hauptsächlich beitragen. Hierzu wurden mit XSUSA die Bestimmtheitsmaße (R^2) berechnet /ZWE 14/, welche in Tab. 3.4 gezeigt werden.

Tab. 3.4 Bestimmtheitsmaße für den Multiplikationsfaktor bei BOC und EOC

BOC		EOC	
U-238 inelastic scattering	0.683	U-238 inelastic scattering	0.641
U-238 elastic scattering	0.675	U-238 elastic scattering	0.633
Pu-239 nu-bar	0.125	Pu-239 nu-bar	0.156

Der Hauptbeitrag zur Unsicherheit des Multiplikationsfaktors ist die Unsicherheit der inelastischen Streureaktion von U-238 sowohl bei BOC als auch bei EOC, da sich das Nuklidinventar von U-238 über den Abbrand nur gering ändert. Durch eine starke Korrelation zwischen der inelastischen und elastischen Streureaktion von U-238 bildet die Unsicherheit von letzterer Reaktion den zweiten Hauptbeitrag.

Zusätzlich zu dem Brennelement des „Large Oxide Core“ wurden Vergleichsrechnungen für eine weitere Anordnung aus dem SFR-FT-Benchmark /BLA 11/ durchgeführt, nämlich für ein Brennelement des „ABR Metallic Core“. Der überwiegende Teil des Spaltstoffs ist wiederum Pu-239, und der Ausgangszustand für die Abbrandberechnungen ist auch hier der Gleichgewichtszustand. Ein Abbrandzyklus beträgt hier 328,5 Tage bei einer thermischen Leistung von 75,4 MW/t Schwermetall. Zum Einsatz kamen die deterministischen Brennelement-/Abbrandcodes TRITON und HELIOS, sowie MCNP-6, mit dem auch gekoppelte Neutronentransport-/Abbrandberechnungen durchgeführt werden können. Als nukleare Daten wurden die neueste ENDF/B-Version, nämlich ENDF/B-VII.1, die in der GRS bisher standardmäßig eingesetzte JEFF-Version, nämlich JEFF-3.1.2, sowie die neueste JEFF-Version, JEFF-3.2, eingesetzt.

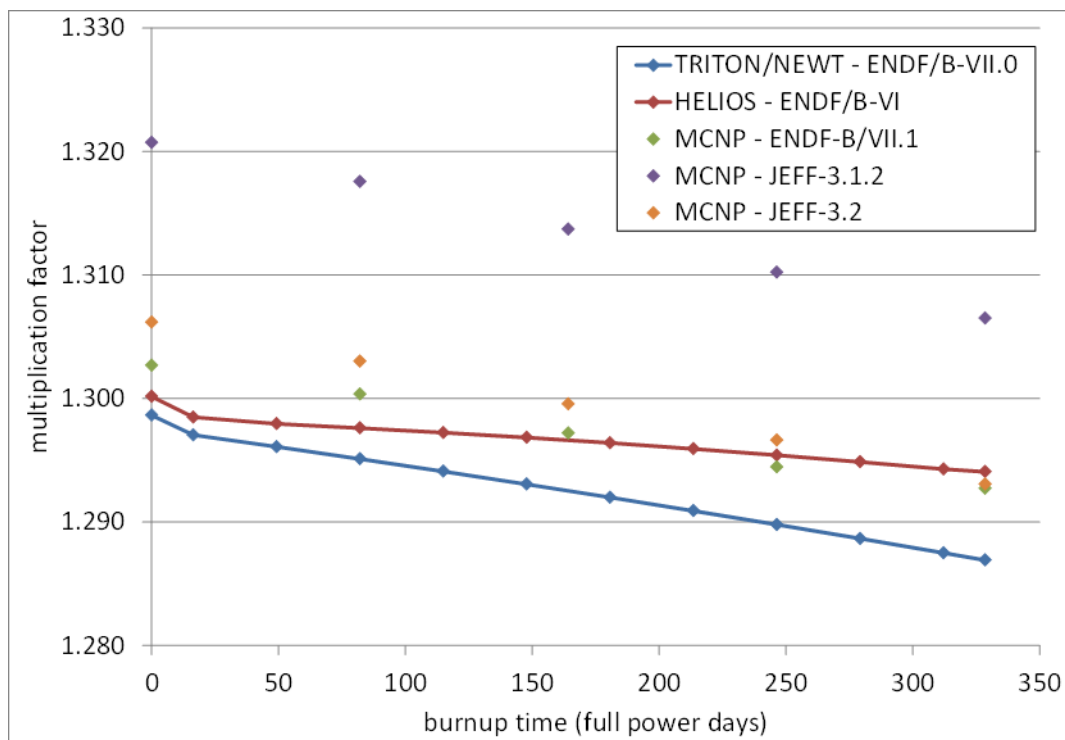


Abb. 3.12 Multiplikationsfaktor für das Brennelement des „ABR Metallic Core“ als Funktion des Abbrands aus unterschiedlichen Rechenprogrammen und nuklearen Basisdaten

Die Ergebnisse sind in Abb. 3.12 zusammengefasst. Wie schon beim Brennelement des „Large Oxide Core“ beobachtet vergrößert sich der Unterschied zwischen dem TRITON- und dem HELIOS-Ergebnis leicht im Lauf des Abbrands. Insgesamt nehmen die Ergebnisse über den gesamten Abbrand eine Bandbreite von ca. 1300 pcm ein. Dabei sind die Ergebnisse von HELIOS, TRITON und MCNP mit den neuesten Daten-evaluierungen ENDF/B-VII.1 und JEFF-3.2 in zufriedenstellender Übereinstimmung, mit einer Bandbreite von ca. 500 pcm. Eine Abweichung zu den anderen Ergebnissen zeigt die Steigung der HELIOS-Werte als Funktion der Abbrandzeit.

Bei den Rechnungen zu beiden Reaktorkonzepten, beim „ABR Metallic Core“ jedoch ausgeprägter, weist MCNP mit den JEFF-3.1.2-Daten eine drastische Abweichung zu den restlichen Ergebnissen auf. Dies legt nahe, JEFF-3.1.2 für schnelle Anordnungen nicht zu verwenden; das heißt dass zumindest für schnelle Anordnungen die Berechnungskette der GRS auf die Verwendung von ENDF/B-VII.1- oder JEFF-3.2-Daten bei Kritikalitäts- und Abbrandberechnungen mit der Monte-Carlo-Methode und Daten in kontinuierlicher Energiedarstellung umgerüstet werden sollte. Aus Konsistenzgründen sollte die umgestellte Berechnungskette dann auch auf die Simulation aller anderen Systeme (LWR, HTR, etc.) angewandt werden. Dem muss wie üblich eine gründliche Validierung an kritischen Experimenten vorausgehen; dies ist zum Teil im Vorhaben RS1503 erfolgt.

3.3 Untersuchungen zum Neutronentransportprogramm nTracer

Das nTracer-Programmsystem /SNU 14/ ist ein auf der Methode der Charakteristiken (MOC) beruhender Neutronentransportcode mit integriertem thermohydraulischen Feedback (für DWR-Anwendung) und Abbrandmodul. Der Code nTracer wurde der GRS im Rahmen eines Kooperationsvertrags mit dem Department of Nuclear Engineering der Seoul National University (SNU) im Jahr 2012 übergeben. Er liegt der GRS quelloffen vor. Über den bisherigen Einsatz von nTracer in der GRS wurde in /ZWE 13/ berichtet.

Da nTracer als deterministisches Neutronentransportprogramm potentiell eine sinnvolle Ergänzung zu den bisher in der GRS verwendeten Verfahren darstellt, die überwiegend auf Monte Carlo Methoden zur Lösung der Transportgleichung beruhen, und auch einige Vorteile hinsichtlich der Skalierbarkeit bietet, wurde die Eignung des Programmsystems für schnelle Systeme auch für dieses Programm untersucht.

Das Abbrandmodul behandelt die Lösung des Abbrandgleichungssystems

$$\frac{dN_i(t)}{dt} = -(\lambda_i + R_i(t))N_i(t) + \sum_{j \neq i} l_{ij} \lambda_j N_j(t) + \sum_{j \neq i} \gamma_{ij} R_j(t) N_j(t), \quad (1.1)$$

worin N_i die Anzahldichte, λ_i die Zerfallskonstante und R_i die mikroskopische Reaktionsrate des i -ten Nuklids und l_{ij} und γ_{ij} die Zerfallsmatrix bzw. die Matrix der Spalt- und Transmutationsausbeuten sind. Hierbei ist zu beachten, dass die Reaktionsraten als Integrale über Wirkungsquerschnitt (WQ) und Neutronenfluss selbst vom Energiespektrum der Neutronen sowie den jeweils aktuellen Rückwirkungsparametern abhängig sind. In nTracer werden übliche aktuelle Verfahren zur Lösung des Gleichungssystems (1.1) verwendet. Über diskrete Zeitschritte werden die Reaktionsraten als Konstanten behandelt. Dabei geschieht die Integration zweimal, nach dem Semi-Prediktor-Korrektor-Verfahren /YAM 09/, /JUN 13/. Speziell für die Gadolinium-Isotope wird wegen ihres großen Absorptionsquerschnitts die quadratische Abbrandmethode /LEE 13/ verwendet.

Die Zeitintegration von Gleichung (1.1) mit konstanten Parametern ergibt eine Matrixexponentialfunktion, deren Auswertung in nTracer mit der Krylov-Unterraummethode /YAM 07/ approximiert wird. Die Methoden des nTracer-Abbrandmoduls entsprechen also einer gängigen Wahl nach Stand von Wissenschaft und Technik, die auch die Behandlung schneller Systeme erlaubt.

Die Parameter λ_i , l_{ij} und γ_{ij} aus Gleichung (1.1) werden nTracer mittels einer Ascii-Eingabedatei übergeben. Die in die Reaktionsraten R_i eingehenden kondensierten mikroskopischen WQ $\bar{\sigma}_i = 1/\bar{\phi} \int dE \phi(E) \sigma_i(E)$ werden von nTracer für diejenigen Nuklide, für die Multigruppen-WQ verfügbar sind, selbst ermittelt, für alle anderen Nuklide müssen die kondensierten WQ ebenfalls mit der Ascii-Eingabedatei übergeben werden. Der Wert der kondensierten WQ hängt von dem typischen Neutronenspektrum $\phi(E)$ ab und unterscheidet sich im Allgemeinen deutlich für schnelle und thermische Reaktoren. Eine für den Einsatz bei Leichtwasserreaktoren optimierte Datei wurde der GRS mit dem Programmpaket nTracer übergeben. Diese enthält Spaltausbeuten und Zerfallskonstanten sowie WQ zu ca. 600 ausgewählten Nukliden. Die Auswahl der Nuklide und Berechnung der Eingruppen-WQ wurde dabei von KAERI, dem Koreanischen Atomenergie-Forschungsinstitut, ausgehend von den Daten von ORIGEN-2,

getroffen /JUN 14/. Unter Verwendung dieser Daten wurde das Abbrandmodul von nTracer verifiziert und gegen Anlagendaten koreanischer Reaktoren validiert /JUN 12/.

Für den Einsatz von nTracer zur Betrachtung schneller Systeme ist also eine Überprüfung der Auswahl der Nuklide und eine dem anderen Neutronenspektrum angemessene Erzeugung von kondensierten WQ erforderlich. Dies kann mit anderen in der GRS vorhandenen Codes (z. B. dem SCALE-Paket) geschehen, erfordert aber aufwendige Detailarbeiten.

Um nTracer insgesamt für schnelle Systeme zu nutzen muss außer dem Abbrandmodul auch das Neutronentransportmodul für diesen Anwendungsfall geeignet sein. Daher wurde das Neutronentransportmodul einem entsprechenden Test unterzogen.

Betrachtet wurde ein kritisches Experiment mit der Bezeichnung SNEAK 7A, welches in der Schnellen Nullenergie-Anlage Karlsruhe 1970/71 durchgeführt wurde. Eine detaillierte Beschreibung des Experiments findet sich in /IVA 13/, vgl. auch Kap. 3.1. In dem Experiment wurden in Stahl eingehüllte $\text{PuO}_2\text{-UO}_2$ - (Dicke 0,626 cm) und Graphitplatten (Dicke 0,3126 cm) abwechselnd aufeinander gestapelt und zu Brennelementartigen Strukturen (BE, Breite 5,44 cm) zusammengefasst. Um die BE herum befand sich eine Umfassung aus abgereichertem metallischem Uran. Die Kritikalität wurde durch die genaue Positionierung von Trimmstäben aus angereicherten UO_2 - bzw. $\text{PuO}_2\text{-UO}_2$ -Platten im Kern herbeigeführt. Zur Illustration siehe Abb. 3.13.

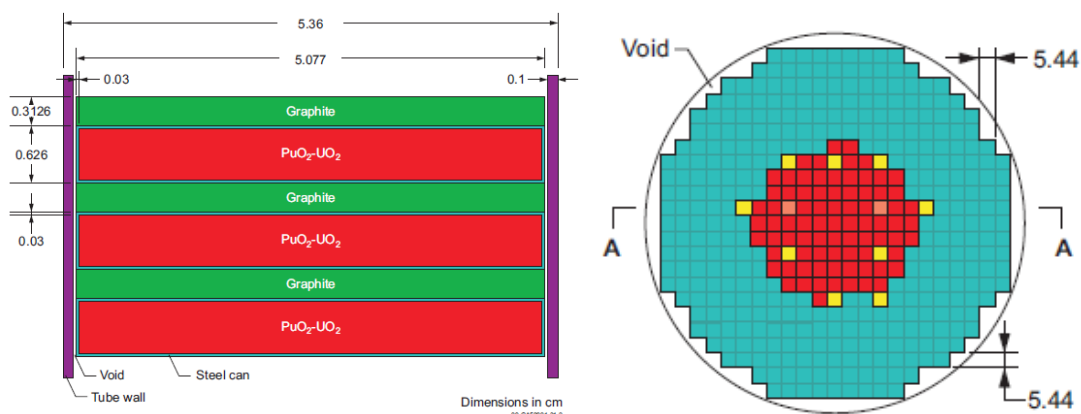


Abb. 3.13 Schematischer Aufbau des SNEAK-7A-Experiments

Links: Schichtweiser Aufbau der im SNEAK-7A-Experiment verwendeten BE. Rechts: Deren Anordnung im Kern (rot), die Positionen der UO_2 -beladenen (gelb) und $\text{PuO}_2\text{-UO}_2$ -beladenen (orange) Trimmstäbe sowie der Stäbe aus abgereichertem metallischem Uran (blau). Entnommen aus /IVA 13/.

In /IVA 13/ sind zum Experiment SNEAK 7A zwei dreidimensionale Rechenbenchmarks „detailed 3D“ (D3D) und „simplified 3D“ (S3D) beschrieben, die sich darin unterscheiden, dass die PuO_2 - UO_2 - und Graphit-Platten einzeln bzw. als homogene Mischung modelliert werden. Zu D3D und S3D wurden jeweils Inputs für nTracer erstellt.

Um die Ergebnisse der nTracer-Flussrechnungen zu analysieren, seien hier einige weitere Erläuterungen zur Methodik von nTracer vorangestellt, vgl. /ZWE 13/ und im Detail /JUN 13a/. Die stationäre Boltzmann- oder Transportgleichung, die die Neutronenflussverteilung bestimmt, wird in nTracer durch Kopplung mehrerer Methoden gelöst. Das Gesamtsystem wird in axiale Ebenen zerlegt. Innerhalb dieser wird die Flussverteilung unter Voraussetzung axialer Quell- und Verlustterme mit der Methode der Charakteristiken (MOC) gelöst. Sodann werden mit dem ermittelten Fluss stabzellenweise homogenisierte WQ für jede Ebene erzeugt. Diese sind der Ausgangspunkt für eine axiale nodale Methode (wahlweise Diffusion oder SP_3) zur Berechnung des skalaren Flusses in jedem Node. Einem Node entspricht dabei der Abschnitt einer Stabzelle innerhalb einer axialen Ebene. Mit dem skalaren Fluss aus der axialen Rechnung wiederum werden die Quell- und Verlustterme der MOC-Rechnung aktualisiert. Insgesamt werden die globalen Fluss- und Neutronenstrom- sowie Leistungsbilanzen durch Lösung einer 3D-Nodalen 2-Gruppen-CMFD-Methode sichergestellt.

Zunächst wurde das Benchmark D3D mit nTracer untersucht. Bereits zu Beginn der Arbeiten am Eingabedatensatz stellte sich heraus, dass eine axiale Diskretisierung in Ebenen von weniger als 0,4 cm – die Dicke der Graphitplatten beträgt 0,3126 cm – der Konvergenz der axialen, nodalen Methode entgegensteht. Daher wurde alternativ ein Eingabedatensatz für ein gedrehtes D3D-Modell erstellt, wobei die y- und die z-Achse vertauscht wurden. In diesem Fall werden die dünnen Platten mittels MOC aufgelöst, während die axiale Diskretisierung nun der BE-Breite von 5,44 cm entspricht. In diesem Fall konvergiert die nTracer-Rechnung sowohl für einzelne BE wie auch axiale Schnitte durch die Versuchsanlage (d. h. horizontale Schnitte im nTracer-Modell). Vgl. dazu Abb. 3.14 und Abb. 3.15.

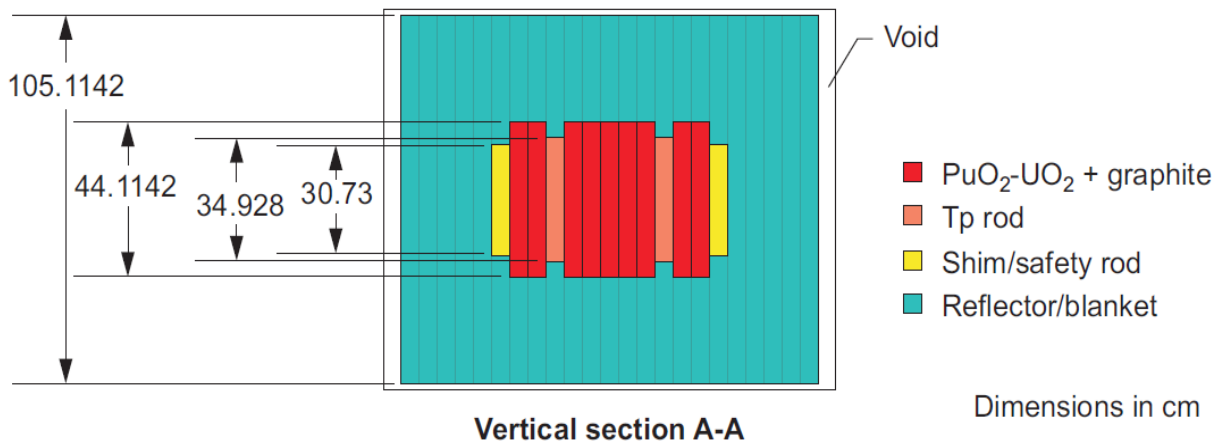


Abb. 3.14 Vertikaler Schnitt A-A durch das SNEAK-7A-Experiment. Entnommen aus /IVA 13/

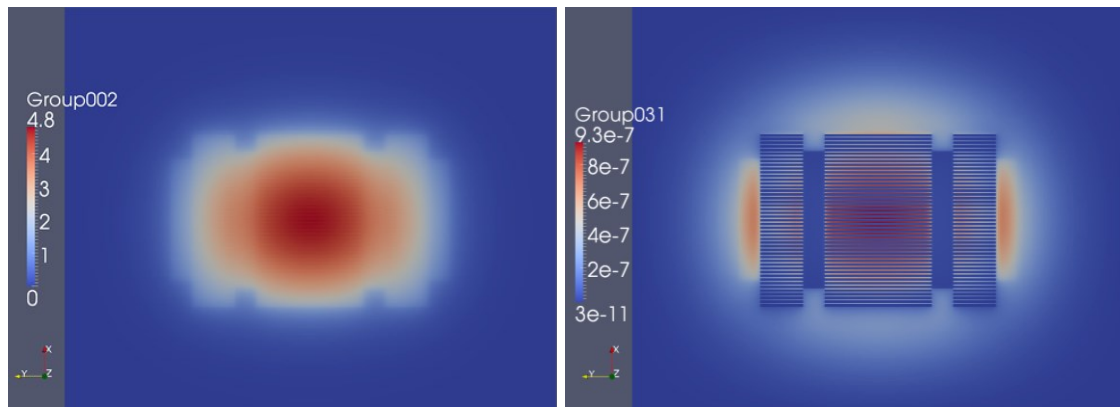


Abb. 3.15 Neutronenfluss [a.u.] im 2D-nTracer-Modell des Schnitts aus Abb. 3.14

Neutronenenergien links schnell [3,6 MeV; 6,1 MeV], rechts thermisch [1,01 eV; 1,07 eV]

In der thermischen Flussverteilung (Abb. 3.15, rechts) dieses ausgewählten Schnitts erkennt man deutliche Flussmaxima in den moderierenden Graphitplättchen. Der höhere thermische Fluss am oberen Rand der BE erklärt sich dadurch, dass der Stapel aus $\text{PuO}_2\text{-UO}_2$ - und Graphitplättchen oben mit einem Graphitplättchen endet. Weiterhin ist erkennbar, dass der thermische Fluss wegen des in diesem Energiebereich im Vergleich zum Uran hohen Einfang-WQs der Plutoniumisotope in den Regionen mit Pu-Gehalt deutlich unterdrückt ist, vgl. $\text{PuO}_2\text{-UO}_2$ -(innen) und UO_2 -Trimmstäbe (außen im dargestellten horizontalen Schnitt).

Das gesamte gedrehte D3D-Modell konvergiert in nTracer jedoch nicht. Dies liegt daran, dass im nTracer-Modell große axiale Abschnitte mit Vakuum belegt sind, was die axiale nodale Methode nicht korrekt verarbeiten kann. Daher wurde auch das Modell S3D untersucht. Hier werden die Graphit- und $\text{PuO}_2\text{-UO}_2$ -Plättchen nicht einzeln aufge-

löst, sodass keine axiale Nodalisierung im mm-Bereich nötig ist. Einzelne horizontale Schichten des Experiments konvergieren problemlos. Das Gesamtmodell konvergiert jedoch nicht. Dies liegt am sehr starken axialen Flussgradienten im Übergang BE/Umfassung (vgl. Abb. 3.15). Mangelnde Moderation in der Umfassung zusammen mit dem schnellen Neutronenspektrum führt zu einer sehr hohen Leckage; die axiale Methode konvergiert nicht.

Zusammenfassend lässt sich die Eignung von nTracer für die Modellierung von schnellen Reaktorsystemen folgendermaßen bewerten. Das Abbrandmodul des Codes ist zwar für Leichtwasserreaktoren validiert, lässt sich jedoch bei einer geeigneten Anpassung des Inputfiles der kondensierte Wirkungsquerschnitte/Zerfalls- und Spaltaten für ein hochenergetisches Neutronenspektrum auch für schnelle Reaktoren verwenden.

Probleme bereitet hingegen die Neutronentransportmethode. Während MOC für stark heterogene Systeme auch mit schnellem Spektrum geeignet ist, müsste die axiale, nodale Methode für den Einsatz in schnellen Systemen angepasst oder durch ein anderes Verfahren ersetzt werden. Viele schnelle Systeme weisen eine hexagonale Stabzellen-Geometrie auf. Für diese Geometrie ist die in der GRS vorhandene nTracer-Version nicht geeignet. Eine entsprechende Version ist an der SNU in Validierung und kann von der GRS zukünftig evtl. genutzt werden.

Noch nicht untersucht werden konnte die Frage, ob nTracer für flüssigmetallgekühlte Systeme eingesetzt werden kann. Für viele schnelle Reaktorsysteme wäre dies Voraussetzung.

3.4 GRS Abbrandbenchmark

Neben der Erweiterung der GRS-Abbrandprogramme für schnelle Systeme ist ein Hauptziel des vorliegenden Vorhabens auch die Sicherstellung der Zukunftsfähigkeit der Codes für Leichtwasserreaktoranwendungen. Im Rahmen des Vorhabens wurde aus diesem Grund ein Rechenbenchmark unter Beteiligung interessierter, im Bereich der Abbrandrechnung engagierter deutscher und internationaler Forschungseinrichtungen, Gutachterorganisationen und Behörden durchgeführt. Der Benchmark fand im Rahmen der 12. AAA-Usergroup Treffens vom 3.12.2012 in Garching statt.

Bei diesem Benchmark sollten jeweils für ein Druckwasserreaktor- und ein Siedewasserreaktorbrennelement die effektiven Multiplikationsfaktoren während des Abbrands und die Nuklidinventare von ausgewählten Nukliden zum Zeitpunkt des Endabbrands berechnet werden. Für das Siedewasserbrennelement sollten weiterhin stabweise Leistungs- und Abbranddaten bestimmt werden. Eine ausführliche Beschreibung des Benchmarks, der Benchmarkergebnisse und eine Auswertung und Bewertung dieser Ergebnisse ist in einem Technischen Bericht zusammengefasst, der im Anhang dieses Dokuments zu finden ist.

4 Modularisierung des GRS-eigenen Abbrandrechenprogramms KENOREST

Wie bereits in Kapitel 3 beschrieben, ist das GRS-eigene Abbrandrechenprogramm KENOREST /DORTOREST weitestgehend auf die Beschreibung von Leichtwasserreaktoren zugeschnitten. Es besteht aus einer festen Kopplung verschiedener Komponenten für die einzelnen Teilaufgaben wie z. B. die Neutronenflussberechnung, die Berücksichtigung der Resonanzselbstabschirmung und die Berechnung der Nuklidinventare. Einige dieser Teilcodes sind speziell für die Anwendung bei Leichtwasserreaktoren ausgelegt und lassen sich nicht ohne weiteres für Anordnungen mit schnellem Neutronenspektrum anpassen. Dies betrifft unter anderem den Energiebereich der verwendeten Wirkungsquerschnittsdatenbibliotheken sowie deren Aufbereitung bei der Erzeugung von Multigruppenquerschnitten. Auch wird eine erhöhte Flexibilität bei der Geometriedefinition zur Beschreibung solcher Reaktoren erforderlich werden. Das derzeitige Geometriemodell im KENOREST stößt teilweise bereits bei der Beschreibung von modernen Leichtwasserreaktorbrennelementen an seine Grenzen, wobei die derzeitige Programmstruktur einer Implementierung entsprechender Erweiterungen entgegensteht. Ein Beispiel hierfür sind Pellets mit einer dünnen Neutronenabsorberschichtung, wie sie etwa bei modernen Westinghouse-Brennelementen verwendet werden.

Ziel war, die oben beschriebenen starren Kopplungen durch abstrakte Schnittstellen zu ersetzen, die unabhängig von Ein- und Ausgabeformaten der einzelnen, im Gesamtsystem enthaltenen Rechencodes den Austausch notwendiger Informationen und Daten zwischen zwei oder mehr Teilprogrammen festlegen. Diese sollten unter Verwendung einer modernen, objektorientierten Programmiersprache so implementiert werden, dass in diesem gekoppelten System einzelne Rechenverfahren nahezu zwanglos durch andere, analoge Verfahren ersetzt werden können. Auf diese Art und Weise wird sichergestellt, dass einerseits die bestehende Funktionalität des KENOREST /DORTOREST-Systems erhalten bleibt und andererseits neue Komponenten für die Anwendung im Bereich schneller Reaktoren und der Transmutation höherer Aktinide mit geringem zusätzlichem Aufwand angekoppelt werden können. Weiterhin ermöglicht dieses Vorgehen, flexibler auf zukünftige Entwicklungen auch bei Leichtwasserreaktoren reagieren zu können, da ein Austausch einzelner Komponenten innerhalb des Programmsystems deutlich vereinfacht wird.

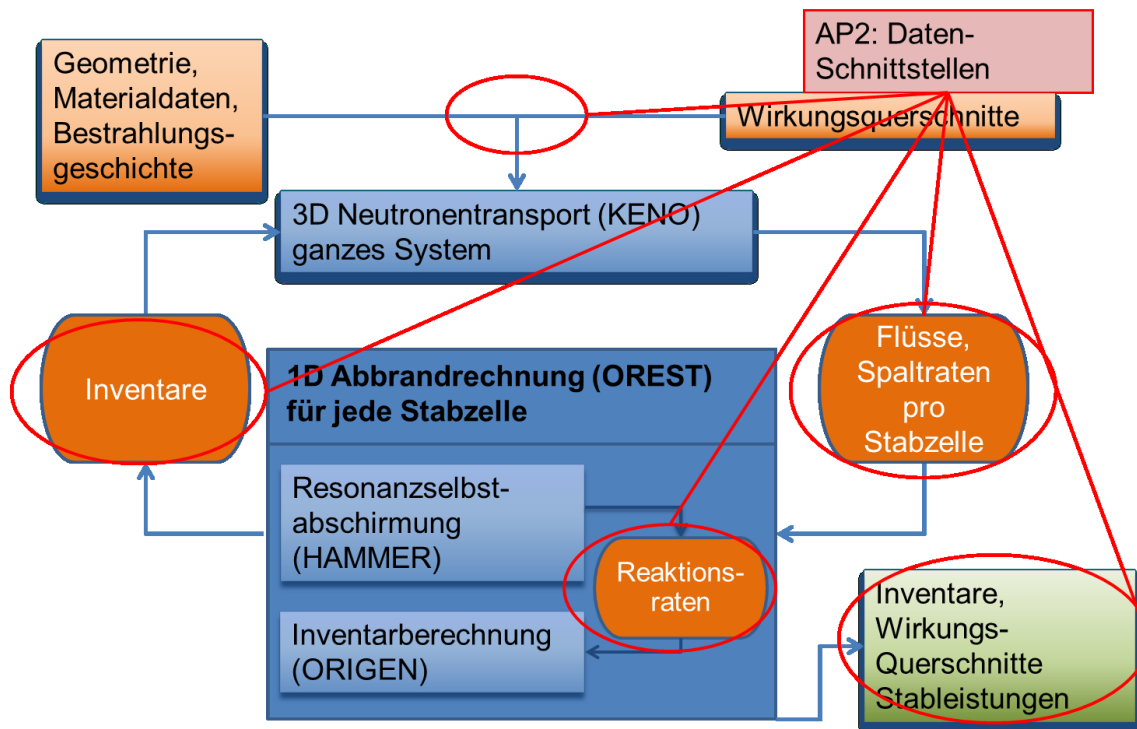


Abb. 4.1 Schematische Darstellung der Datenschnittstellen in KENOREST

4.1 Vorbereitende Arbeiten

Im Rahmen der Arbeiten in diesem Arbeitspaket wurden zunächst die vorhandenen Schnittstellen für die Kopplung der einzelnen Teilcodes im Programm KENOREST/DORTOREST analysiert. Unabhängig vom spezifischen Abbrandprogramm können allgemein vier wesentliche Schnittstellen identifiziert werden. Im Einzelnen sind diese

- das Einlesen und Weiterverarbeiten der Eingabedaten inklusive der Wirkungsquerschnittsdaten,
- die Übertragung von Daten der Flussberechnung in die Inventarberechnung,
- die Rückgabe von Daten der Inventarberechnung, und
- die Ausgabe von Ergebnisdaten.

Aufgrund der speziellen Architektur von KENOREST (interne Ankopplung von OREST) kommt bei diesem noch eine Schnittstelle für die Datenübertragung zwischen HAMMER und ORIGEN in OREST hinzu. Diese Schnittstellen sind in einer vereinfachten schematischen Darstellung in Abb. 4.1 dargestellt. In der Analyse wurde erfasst, welche Daten jeweils zwischen den verschiedenen Teilmodulen übertragen werden müssen.

Auch wenn die Neuimplementierung der Schnittstellen zu einer Austauschbarkeit der einzelnen Komponenten führen soll, ist für eine erste Realisierung zunächst die Festlegung auf konkrete Module notwendig. Bezüglich des Transportmoduls wird als Standardwerkzeug weiterhin KENO angebunden. Das Inventarberechnungsmodul soll durch den in Kapitel 5 behandelten neu entwickelten Inventarcode VENTINA ersetzt werden. Um aus den abstrakten Schnittstellen konkrete für die genannten Module zu ermöglichen ist die Analyse der Ein- und Ausgabedaten insbesondere von KENO notwendig. Um größtmögliche geometrische Flexibilität zu erhalten, wird von der bisher bevorzugt eingesetzten Version KENO-Va aus SCALE Version 4.4a auf KENO-VI aus der aktuellen SCALE Version 6.1.2 umgestellt. KENO ermöglicht grundsätzlich die Verwendung von Multigruppenwirkungsquerschnitten und von kontinuierlichen Wirkungsquerschnittsdaten. Da letztere unter anderem aufgrund der wegfallenden Resonanzbehandlung einen geringeren Implementierungsaufwand benötigen, wird angestrebt zunächst diese Variante von KENO anzukoppeln. Dies soll es ermöglichen, schneller erste Testrechnungen zur Verifikation der Entwicklung durchzuführen. Für die spätere Ankopplung des Multigruppenmodus von KENO ist geplant, CENTRM als Ersatz für den bisher zur Resonanzbehandlung eingesetzten Code HAMMER zu verwenden.

Bei der Ankopplung von KENO-VI unter Verwendung separat prozessierter Wirkungsquerschnittsdaten ist es notwendig, diesen eigenständig ohne Verwendung der sonst für Kritikalitätsrechnungen üblicherweise eingesetzten CSAS6-Sequenz anzusteuern. Es wurde analysiert, wie dies in der Praxis erfolgen kann, und ob KENO-VI für eine Kopplung mit einem beliebigen Inventarberechnungsprogramm sowie beliebigen Wirkungsquerschnitten benutzt werden kann. Dabei zeigte sich, dass die wesentliche Herausforderung in der Bereitstellung der Wirkungsquerschnittsdaten liegt. Zur Neutronenflussberechnung mit KENO-VI müssen die problemabhängigen Wirkungsquerschnitte im Format einer "AMPX Working Library" vorliegen, die innerhalb der CSAS6-Sequenz aus den problemunabhängigen Daten der sogenannten "AMPX Master Library" prozessiert werden. Während eine Manipulation der Working Library über von SCALE mitgelieferte Hilfsprogramme problemlos möglich ist, ist ein Zugriff auf die Master Library nicht ohne weiteres zu erreichen, da hier keine entsprechenden Werkzeuge im gegenwärtigen SCALE-Paket implementiert sind. Bei Verwendung von KENO-VI und CENTRM für die Flussberechnung bzw. die Resonanzbehandlung ist daher bis auf weiteres der Rückgriff auf die von SCALE mitgelieferten Wirkungsquerschnittsbibliotheken notwendig.

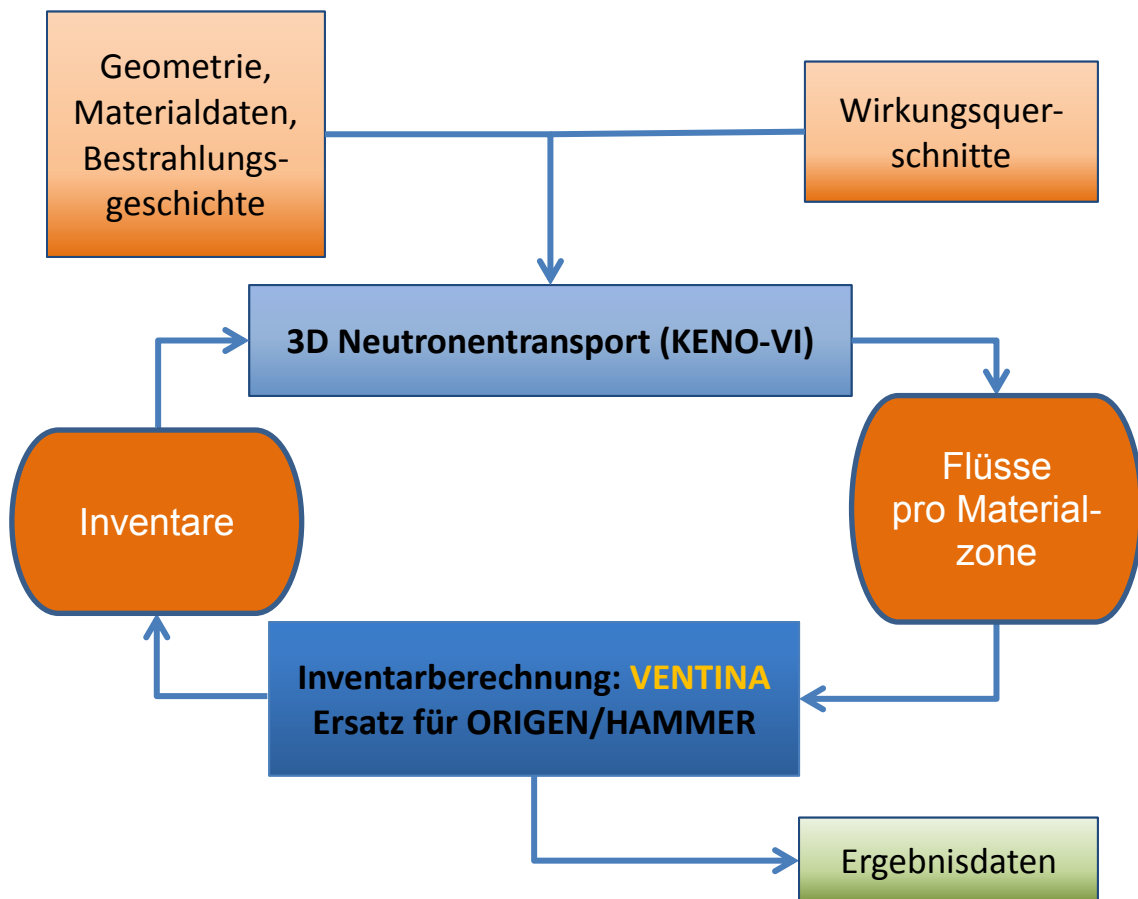


Abb. 4.2 Ablaufschema MOTIVE

Bei der Verwendung von KENO-VI im „Continuous Energy“-Modus entfallen die Zwischenschritte zur Resonanzbehandlung, so dass bei direkter Verwendung der SCALE „Master Library“ auf die CSAS6-Sequenz zurückgegriffen werden kann. Diese übernimmt zusätzlich zum „nackten“ KENO-VI die Zusammenmischung der Materialien aus den Nuklidangaben.

Zur Berechnung der Reaktionsraten aus den Ergebnissen der Flussberechnung sind im Fall der Verwendung von kontinuierlichen Wirkungsquerschnitten in der Literatur im Wesentlichen zwei Verfahren bekannt. Das exakte Verfahren zielt darauf ab, sämtliche benötigte Reaktionsraten durch die Definition geeigneter „Tallies“ direkt mit dem Monte Carlo-Verfahren zu berechnen. Da hierzu jedoch einige Tausend solcher „Tallies“ zu berechnen sind, ist dieses Verfahren mit erheblichem Rechenaufwand verbunden. Effizienter ist dagegen das zweite Verfahren, bei dem aus der Monte Carlo-Rechnung ein sehr fein aufgelöster Multigruppenfluss ausgelesen wird. Dieser wird benutzt, um vorprozessierte Multigruppen-Wirkungsquerschnitte mit der gleichen Gruppenstruktur zu Reaktionsraten zu kondensieren. Hierbei muss nur ein „Tally“ berechnet werden, was

zu deutlich kürzeren Laufzeiten der Monte Carlo Rechnung führt. Da die Multigruppen-Wirkungsquerschnittsdaten mit einem generischen, problemunabhängigen Flussspektrum erzeugt werden, ist dieses Verfahren grundsätzlich mit einer Näherung behaftet. Die Abweichung vom exakten Ergebnis wird umso kleiner, je feiner die Auflösung der Gruppenstruktur ist, d. h. je größer die Gruppenzahl ist. Bei hinreichend feiner Einteilung werden die in den Wirkungsquerschnittsdaten vorhandenen Resonanzen aufgelöst, was eine klassische Resonanzbehandlung erübrigt. In /HAE 07/, wo dieses Verfahren erstmalig beschrieben wurde, wird für den Abbrandcode ALEPH gezeigt, dass bei einer geeignet gewählten Gruppenzahl von 43.000 Gruppen eine Übereinstimmung mit dem exakten Ergebnis im Bereich $< 1\%$ erzielt werden kann, und dass dieses Verfahren eine aus Sicht der Recheneffizienz optimale Vorgehensweise darstellt. Dieses Verfahren wird daher für die Implementierung in MOTIVE übernommen.

Insgesamt ergibt sich für das neue Schnittstellenkonzept das in Abb. 4.2 gezeigte Schema. Die Eingabedaten (Geometrie, Leistungsgeschichte, Nuklidaten, Wirkungsquerschnitte, ...) werden in ein Steuerungsmodul eingelesen. Dieses steuert die iterative Ausführung von Neutronentransport- – zunächst KENO-VI („continuous energy“) – und Inventarberechnungsprogramm – zunächst VENTINA. Dabei werden aus der Flussberechnung die zonenweisen Flüsse ausgelesen. Diese werden verwendet um die vorgehaltenen fein aufgelösten Multigruppenwirkungsquerschnitte zu kondensieren und als Eingruppendaten in die Inventarberechnung einzuspeisen. Aus dieser werden wiederum die neuen Inventare ausgelesen, abgespeichert und für den nächsten Neutronentransportschritt aufbereitet. Am Ende der Rechnung werden die im Steuermodul abgelegten Ergebnisdaten formatiert ausgegeben.

4.2 Entwicklungsarbeiten

Aufbauend auf die beschriebenen Vorarbeiten wurde mit der eigentlichen Implementierung der Schnittstellen begonnen. Die Entwicklung erfolgte unter Verwendung der in der GRS verwendeten Software-Entwicklungsumgebung "Teamforge" und unter Benutzung des Versionsmanagementsystems SVN. Zur Unterstützung der Dokumentation des Quellcodes ist das Werkzeug „Doxygen“ zur automatischen Dokumentation der einzelnen Routinen im Einsatz. Zunächst wurde mit der Programmierung des Input-Prozessors begonnen. Dieses Teilmodul hat die Aufgabe, aus einer Eingabedatei die für einen Rechenlauf erforderlichen Eingabedaten einzulesen, in einer geeigneten Datenstruktur abzulegen, eine Eingabedatei für das jeweils anzusteuernde Neutronen-

transportprogramm zu erzeugen sowie Steuerungsinformationen für die übrigen Module bereitzustellen. Da die Struktur und das Format der Eingabedatei von entscheidender Bedeutung für die Benutzerfreundlichkeit des späteren Programmpakets sind, wurde zunächst ein Prototyp einer Eingabedatei erzeugt, an dem verschiedene Konzepte für die Strukturierung der Eingabedaten getestet wurden. Es wurde dabei versucht, sinnvolle Teilaspekte der Eingabedatenstrukturierung verschiedener einschlägiger Abbrandprogramme zu einem schlüssigen Konzept zu kombinieren. Hinsichtlich der Eingabe der geometrischen Informationen über das zu simulierende Brennelement war es das Ziel, einerseits größtmögliche Flexibilität hinsichtlich der darstellbaren Brennelementgeometrien zu erreichen, und andererseits dennoch den Benutzer von der Eingabe komplexer Geometriedaten zu entlasten. Es wird daher ein Konzept verfolgt, bei dem intern Geometriemodule für Brennelementklassen bereitgestellt werden, die in der Eingabedatei durch Angabe von numerischen Parametern an eine konkrete Geometrie angepasst werden können. Die internen Module übernehmen dann die Übersetzung in das jeweilige Format für das angekoppelte Transportmodul.

Nach Fertigstellung der Eingabeschnittstelle wurde die Kopplung von dem Transportmodul an das Inventarberechnungsmodul implementiert, dann die Rückkopplung von dem Inventarmodul zum Transportmodul und zuletzt die Aufbereitung und Ausgabe der Ergebnisdaten. Auf diese Weise war sichergestellt, dass die bereits bestehenden Kopplungen in einfacher Weise in ihrer Funktion getestet werden konnten.

Um die durch die vorgesehene Modularität der Schnittstellen zu erreichende Flexibilität in der Anbindung von Neutronentransport- und Inventarberechnungsprogrammen nach außen hin sichtbar zu machen, wurde der bisherige Name KENOREST aufgegeben und durch „MOTIVE“ ("**M**odular Tool for neutron **T**ransport and **I**nventory calculation") ersetzt.

4.2.1 Eingabedatei

Wie bereits oben beschrieben wurde bezüglich der Bedienung von MOTIVE ein Konzept verfolgt, bei dem zur Steuerung eine Eingabedatei dient, die größtenteils numerische Eingabeparameter enthält. Auf eine direkte Definition der Brennelementgeometrie wurde verzichtet. Stattdessen lassen sich einzelne Brennelementtypen auswählen und über Eingabeparameter steuern. Die Eingabedatei ist in einzelne Parametergruppen gegliedert, die jeweils über ein `begin Gruppenname ... end Gruppenname` abgegrenzt sind. Die Eingabegrößen lassen sich in drei verschiedene Klassen unterteilen.

Für einfache Eingabegrößen existieren zwei verschiedene Möglichkeiten: `Parameter` haben die Syntax `Parametername <Werte>`. Darüber können sowohl ein einzelner Wert als auch eine Liste von Werten eingegeben werden. `Properties` haben die Syntax `Propertyname=Wert` und dienen zum Eingeben von Eigenschaften die in Form eines Strings angegeben werden können. Für komplexe Eingabegrößen wie Brennelemente oder Brennstabzellen gibt es `Makros`. Diese besitzen die Syntax

```
Makroname <id>
    Propertyname=<Wert>
    Parametername <Werte>
    ...
end
```

wobei `<id>` ein oder mehrere ganzzahlige Werte sein können. Innerhalb der Makrodefinition erfolgen dann wieder `Parameter`- und `Property`-Definitionen. Den verschiedenen Makros in der Eingabedatei entsprechen zugehörige C++-Klassen innerhalb von MOTIVE. In diesen sind jeweils die notwendigen Informationen hinterlegt, aus denen die zugehörigen Einträge in den KENO-VI Eingabedateien erzeugt werden, etwa die Geometriebeschreibung für einen Brennelementtyp. Über den Mechanismus der Vererbung ist es ohne großen Aufwand möglich, beispielsweise zusätzliche Brennelementtypen hinzuzufügen und so das mögliche Einsatzspektrum von MOTIVE sukzessive zu erweitern. Aktuell sind in MOTIVE eine Druckwasserreaktorbrennelement-Klasse und die gängigsten Siedewasserreaktorbrennelement-Klassen realisiert. Das folgende Beispiel einer Eingabedatei stellt eine Abbrandrechnung für ein Siedewasserreaktorbrennelement mit einem zentralen quadratischen Wasserkanal dar:

```
begin general
    flux_solver KENO
    depletion_solver Ventura
    XS_library ENDFB7
    nr_of_groups 11504
end general
begin inventory_parameters
    print_nuclide_list u234 u235 u236 u238 np237 pu238 pu239
                        pu240 pu241 pu242 am241 am243 cm244 sr90 mo95
                        tc99 ru101 rh103 ag109 i129 xe131 cs133
                        cs134 cs137 ce144 nd143 nd145 nd148 sm147
                        sm149 sm150 sm151 sm152 eu153 eu154 eu155
                        gd155 gd156 gd157 gd158
```

```

end inventory_parameters
begin geometry
  pin 1
    radii 0.48 0.55
    materials UO2enr21 clad
  end
  pin 2
    radii 0.48 0.55
    materials UO2enr34 clad
  end
  pin 3 6
    radii 0.48 0.55
    materials UO2enr39 clad
  end
  pin 4 5 8 11 12
    radii 0.48 0.55
    materials UO2enr44 clad
  end
  pin 10
    radii 0.48 0.55
    materials UO2enr49 clad
  end
  pin 7 9
    radii 0.48 0.55
    materials UO2gd clad
    fuelrings 5
  end

  fuel_assembly 1
    type=atrium_9
    axial_zone_nr=1
    pins_per_row 9
    pin_pitch 1.45
    assembly_pitch 15.24
    channel_outer_width 3.85
    channel_wall_thickness 0.075
    box_outer_width 13.90
    box_wall_thickness 0.25
    axial_zones 10.0
    axial_pin_arrays 1
    channel_material box

```

```

    box_material box
    pin_array 1
      1  2  3  4  5  4  3  2  1
      2  6  7  8  9  8  7  6  2
      3  7 10 11 12 11 10 7  3
      4  8 11                11 8  4
      5  9 12                12 9  5
      4  8 11                11 8  4
      3  7 10 11 12 11 10 7  3
      2  6  7  8  9  8  7  6  2
      1  2  3  4  5  4  3  2  1
    end
  end
  fuel_assembly_array 1
end geometry
begin thermal
  fuel_temperature 900
  moderator_temperature 559
  cladding_temperature 559
  moderator_pressure 70
  #void_fraction 0.0
  power_density 25.3
end thermal
begin power_history
  mode = cumulative
  burnup_step_unit= days
  decay_step_unit=years
  burnup_steps  0.1      7.905  39.526  79.051 118.577 158.103
                197.628 237.154 276.680 316.206 355.731 395.257
                434.783 474.308 513.834 553.360 592.885 790.514
                1185.771  1581.028  1976.285
  decay_steps  1.0 2 3 4 5 6 7 8 9 15
  power_steps  fill 100
  boron_content fill 0
  void_fraction fill 40
end power_history
begin materials
  material UO2enr49
    type=number_density
    burn=fuel
    o16 4.5252E-02

```

```

    u234  8.5649E-06
    u235  1.1221E-03
    u238  2.1495E-02
end
material UO2enr44
    type=number_density
    burn=fuel
    o16   4.5249E-02
    u234  7.6910E-06
    u235  1.0076E-03
    u238  2.1609E-02
end
material UO2enr39
    type=number_density
    burn=fuel
    o16   4.5247E-02
    u234  6.8170E-06
    u235  8.9315E-04
    u238  2.1723E-02
end
material clad
    type=number_density
    burn=no
    zr90  0.021848243
    zr91  0.004764573
    zr92  0.007282748
    ...
end
material UO2enr34
    type=number_density
    burn=fuel
    o16   4.5244E-02
    u234  5.9431E-06
    u235  7.7865E-04
    u238  2.1838E-02
end
material UO2enr21
    type=number_density
    burn=fuel
    o16   4.5238E-02
    u234  3.6708E-06

```

```

    u235  4.8094E-04
    u238  2.2134E-02
end
material UO2GD
    type=number_density
    burn=fuel
    o16   4.4678E-02
    u234  5.5429E-06
    u235  7.2622E-04
    u238  2.0367E-02
    gd154 3.6051E-05
    gd155 2.4475E-04
    gd156 3.3852E-04
    gd157 2.5881E-04
    gd158 4.1079E-04
    gd160 3.6481E-04
end
material box
    type=number_density
    burn=no
    zr90  0.021848243
    zr91  0.004764573
    zr92  0.007282748
    ...
end
end materials

```

Nach der Prozessierung in MOTIVE ergibt sich aus dieser Eingabe das in Abb. 4.3 dargestellte KENO-Modell.

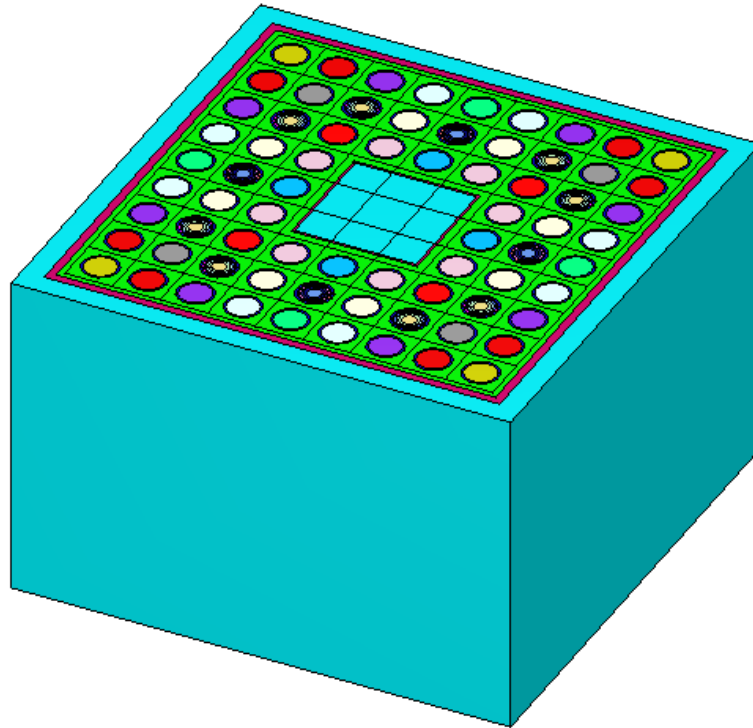


Abb. 4.3 Automatisch mit MOTIVE erzeugtes KENO-VI Modell eines Siedewasserreaktorbrennelements

4.2.2 Aspekte der Programmstruktur

Die im vorhergehenden Abschnitt beschriebene Eingabedatei wird über eine Einlese-routine in eine Datenstruktur `InputData` innerhalb von MOTIVE übertragen. Diese Einleseroutine ist dabei unabhängig vom konkreten Inhalt der Eingabedatei und benötigt lediglich die oben beschriebene feste Syntax der Eingabedatei. Wenn ein zusätzlicher Eingabeparameter hinzugefügt werden soll, ist es daher lediglich notwendig diesen innerhalb der `InputData`-Struktur zu definieren. Er steht dann sofort als möglicher Parameter in der Eingabedatei zur Verfügung.

Die `InputData`-Struktur ist Teil des Steuerungsmoduls, das den Programmablauf innerhalb von MOTIVE regelt. Nach Einlesen der Eingabedatei werden zusätzlich die Multigruppenwirkungsquerschnittsdaten für die Erzeugung der Reaktionsraten für die Inventarberechnung eingelesen und in einer zugehörigen Datenstruktur abgespeichert. Im Anschluss wird eine Eingabedatei für das Programm zur Flussberechnung geschrieben. Dies ist aktuell KENO-VI, in Zukunft ist die Möglichkeit vorgesehen auch andere Flussberechnungsprogramme anzusteuern. Nach Ausführung des Flussbe-

rechnungsprogramms werden die Multigruppenflüsse für alle benötigten Materialzonen und der k_{eff} -Wert aus der Ausgabedatei ausgelesen. Diese Daten werden in einer Ergebnisdatenstruktur `ResultData` innerhalb des Steuerungsmoduls abgelegt. Mithilfe der hinterlegten Wirkungsquerschnitte und den gerade ausgelesenen Flüsse werden die Reaktionsraten berechnet und ebenfalls in `ResultData` abgelegt. Mit den Reaktionsraten und weiteren aus der Eingabedatei bekannten Größen, etwa zur Leistungsgeschichte, wird dann die Eingabedatei für das Inventarberechnungsprogramm geschrieben. Aktuell ist hier das neu entwickelte Programm VENTINA (siehe Abschnitt 5) angekoppelt. Nach Ausführung von VENTINA werden wiederum die Ergebnisdaten, im Wesentlichen die Nuklidinventare und der materialweise Abbrand, eingelesen und ebenfalls in `ResultData` abgespeichert. Im Anschluss wird dann eine neue Eingabedatei für das Flussberechnungsprogramm mit aktualisierten Nuklidinventaren und Daten zur Leistungsgeschichte geschrieben und der Vorgang solange iteriert, bis der Zielabbrand erreicht ist. Bezüglich des Nuklidinventars ist zu beachten, dass aus Gründen der Recheneffizienz nicht alle Nuklide in den Flussberechnungsschritt übernommen werden. Vielmehr werden solche Nuklide die einen vernachlässigbaren Beitrag zur Reaktivität, zur Streuung und zur Massenbilanz liefern, nicht übertragen. Dagegen werden in den Ergebnisdaten alle Nuklide abgespeichert.

Nach Beendigung der Berechnung werden die Ergebnisse formatiert in eine Ausgabedatei geschrieben. Diese enthält aktuell die Nuklidinventare der in der Eingabe ausgewählten Nuklide, den zeitlichen Verlauf des k_{eff} -Werts und den Verlauf des Abbrands aller Materialien.

4.2.3 Werkzeug zum Bereitstellen der Multigruppen-Bibliothek

Wie bereits in Abschnitt 4.1 kurz beschrieben wird für die Erzeugung der Reaktionsraten für die Berechnung der Nuklidinventare eine Multigruppenbibliothek benötigt. Diese muss für alle betrachteten neutronischen Reaktionskanäle und alle berücksichtigten Nuklide Wirkungsquerschnittsdaten bereitstellen, die dann unter Verwendung des im Transportrechenverfahren berechneten Neutronenflusses zu Reaktionsraten kondensiert werden. Für die Erzeugung dieser Bibliothek wurde das Programm `genMotiveLib.py` in der Programmiersprache Python erstellt, das durch Ansteuerung des Programmsystems zur Prozessierung von nuklearen Daten NJOY /MAC 94/ vom Los Alamos National Laboratory (LANL) die benötigten Daten aus den im ENDF6-Format vorliegenden Originaldaten einer Datenevaluation ausliest, weiterverarbeitet

und schließlich in einer Bibliotheksdatei bereitstellt. Dabei konnte auf Vorarbeiten aus dem Vorgängervorhaben RS1189 zur Aktualisierung der KENOREST-Bibliotheken zurückgegriffen werden.

Das Programm wird über eine Eingabedatei gesteuert, in der die gewünschten Reaktionskanäle, Temperaturen und Nuklide angegeben werden können. Weiterhin wird dort spezifiziert, welche Datenevaluation verwendet werden soll. Da nicht in jeder Evaluation zu jedem Nuklid die gewünschten Daten vorliegen, kann hier auch eine Hierarchie von Evaluationen angegeben werden, die nacheinander nach den gewünschten Daten durchsucht werden. Schließlich wird in der Eingabedatei noch eine Energiegruppenstruktur angegeben.

Anhand dieser Eingabedaten wird dann für jedes Nuklid NJOY aufgerufen und nacheinander die Module `reconr` zur Rekonstruktion von unaufgelösten Resonanzen, `broadr` zur Dopplerverbreiterung und `groupr` zur Kondensation der Daten in das gewünschte Multigruppenformat abgearbeitet. Die Kondensation in Multigruppenformat erfolgt dabei mit einem vordefinierten typischen Leichtwasserreaktor-Neutronenfluss.

Die so erzeugten Daten werden aus den NJOY-Ausgabedateien ausgelesen und in `genMotiveLib.py` zwischengespeichert. Nach Prozessierung aller Nuklide wird die vollständige Bibliothek in eine Datei im HDF5-Format /HDF 15/ geschrieben. Diese kann von MOTIVE gelesen und verarbeitet werden. In **Abb. 4.4** Ausschnitt aus einer Bibliotheksdatei für MOTIVE Abb. 4.4 ein Ausschnitt aus einer Bibliotheksdatei dargestellt, wie sie mit `genMotiveLib.py` erzeugt wurde. Das Bild zeigt einen Bildschirmausschnitt des Programms HDFView zur Anzeige von Dateien im HDF-Format. In der linken Spalte ist der hierarchische Aufbau der Bibliothek gezeigt. Rechts ist exemplarisch der Spaltquerschnitt für ^{235}U gezeigt.

Wie bereits in Abschnitt 4.1 dargestellt wurde für MOTIVE das in /HAE 07/ erstmals dargestellte Verfahren zur Erzeugung der Reaktionsraten gewählt. Dabei wird eine sehr fein aufgelöste Multigruppenbibliothek mit einem Fluss der gleichen Gruppenstruktur kondensiert. Wenn die Gruppenstruktur alle Resonanzen auflöst, kann so das Problem der Resonanzselbstabschirmung umgangen werden. Dieses Problem besteht darin, dass für die Erstellung einer Multigruppenbibliothek grundsätzlich der problem-spezifische, zum Zeitpunkt der Bibliothekserstellung noch unbekannt, Neutronenfluss verwendet werden müsste. Bei der Wahl der Gruppenstruktur spielen mehrere Aspekte eine Rolle. Je mehr Gruppen verwendet werden, desto besser werden die Resonanzen

in den Wirkungsquerschnitten aufgelöst. Andererseits steigen mit steigender Gruppenzahl auch der Speicherbedarf und die Anforderung an die Neutronenstatistik. Bezüglich letzterem Punkt wird allerdings in /HAE 07/ gezeigt, dass die Fehler in den Reaktionsraten auch bei relativ großen Fehlern des Flusses in den einzelnen Energiegruppen relativ gering bleiben, weil letztere sich größtenteils bei der Kondensation herausmitteln. Aktuell wird für MOTIVE eine Bibliothek mit etwa 11.500 Energiegruppen verwendet. Die Einteilung ist dabei unterschiedlich fein. Während im Bereich zwischen 1 eV und 0,1 MeV, also im Bereich der Resonanzen, eine Einteilung von 2000 Gruppen pro Größenordnung gewählt wurden, sind die übrigen Energiebereiche weniger fein unterteilt. Die Einteilung erfolgte jeweils mit Schritten konstanter Lethargie. Die gegenwärtige Einteilung löst noch nicht alle Resonanzen vollständig auf. Einer Bibliothek mit höherer Gruppenzahl stehen gegenwärtig noch Probleme mit NJOY entgegen.

4.3 Rechnungen zur Verifikation und erste Ergebnisse

Zur ersten Verifikation der Entwicklung von MOTIVE wurden zunächst Eingabedateien zu drei unterschiedlichen Problemen erstellt. Hierbei handelt es sich zum einen um das Druckwasserreaktorbrennelement aus dem innerhalb des Vorhabens durchgeführten Abbrandbenchmarks (siehe auch Abschnitt 3.4). Weiterhin wurde ein Druckwasserreaktorbrennelement aus dem BEAVRS-Benchmark /HOR 13/ und ein Siedewasserreaktorbrennelement aus dem BUC3C-Benchmark der OECD/NEA „Working Party on Nuclear Criticality Safety“ (WPNCS) „Expert Group on Burn-up Credit“ (EGBUC) /SUY 12/ modelliert. Exemplarisch sollen hier die Ergebnisse der Nachrechnung des GRS-Benchmarks dargestellt werden. Es handelt sich dabei um ein Brennelement mit 18x18 Geometrie und einer Anfangsanreicherung von 4 wt% ^{235}U . Dieses wird bis zu einem Abbrand von 50 GWd/tHM bestrahlt. Im Benchmark wurden dann die über das Brennelement gemittelten Nuklidinventare zum Zielabbrand verglichen. Die genauen Spezifikationen des Problems sind der Benchmarkbeschreibung (Anhang C) zu entnehmen.

Die Abbildungen Abb. 4.5 und Abb. 4.6 zeigen die Ergebnisse des GRS-Benchmark für den Druckwasserreaktor-Fall jeweils für die berechneten Spaltprodukte und Aktiniden. Für die Spaltprodukte ist zu erkennen, dass die mit MOTIVE berechneten Werte sehr gut im Bereich der Ergebnisse der anderen Benchmarkteilnehmer liegen, bei signifikanten Unterschieden zwischen den einzelnen Ergebnissen folgt die MOTIVE-Rechnung im allgemeinen den Ergebnissen die mit SERPENT 1 und 2 erzielt wurden.

Hinsichtlich der Uran-Isotope passen die MOTIVE-Ergebnisse ebenfalls sehr gut zu den Resultaten der anderen Teilnehmer, wohingegen bei den übrigen Aktiniden teilweise signifikante Abweichungen zu beobachten sind. Hervorzuheben sind dabei insbesondere die Plutonium-Isotope mit gerader Massenzahl und die Curium-Nuklide. Als mögliche Erklärung für die beobachteten Unterschiede kommt in erster Linie die noch nicht hinreichend feine Multigruppenbibliothek in Betracht. Die dadurch möglicherweise auftretenden Ungenauigkeiten in den Raten der n-γ Reaktion verstärken sich zunehmend mit steigender Massenzahl, da hier der Aufbau über mehrere Einfangreaktionen stattfindet. Diese Effekte bedürfen einer vertieften Untersuchung, die im Nachfolgeprojekt erfolgen soll, wenn auch Nachrechnungen von experimentellen Daten zur Verfügung stehen.

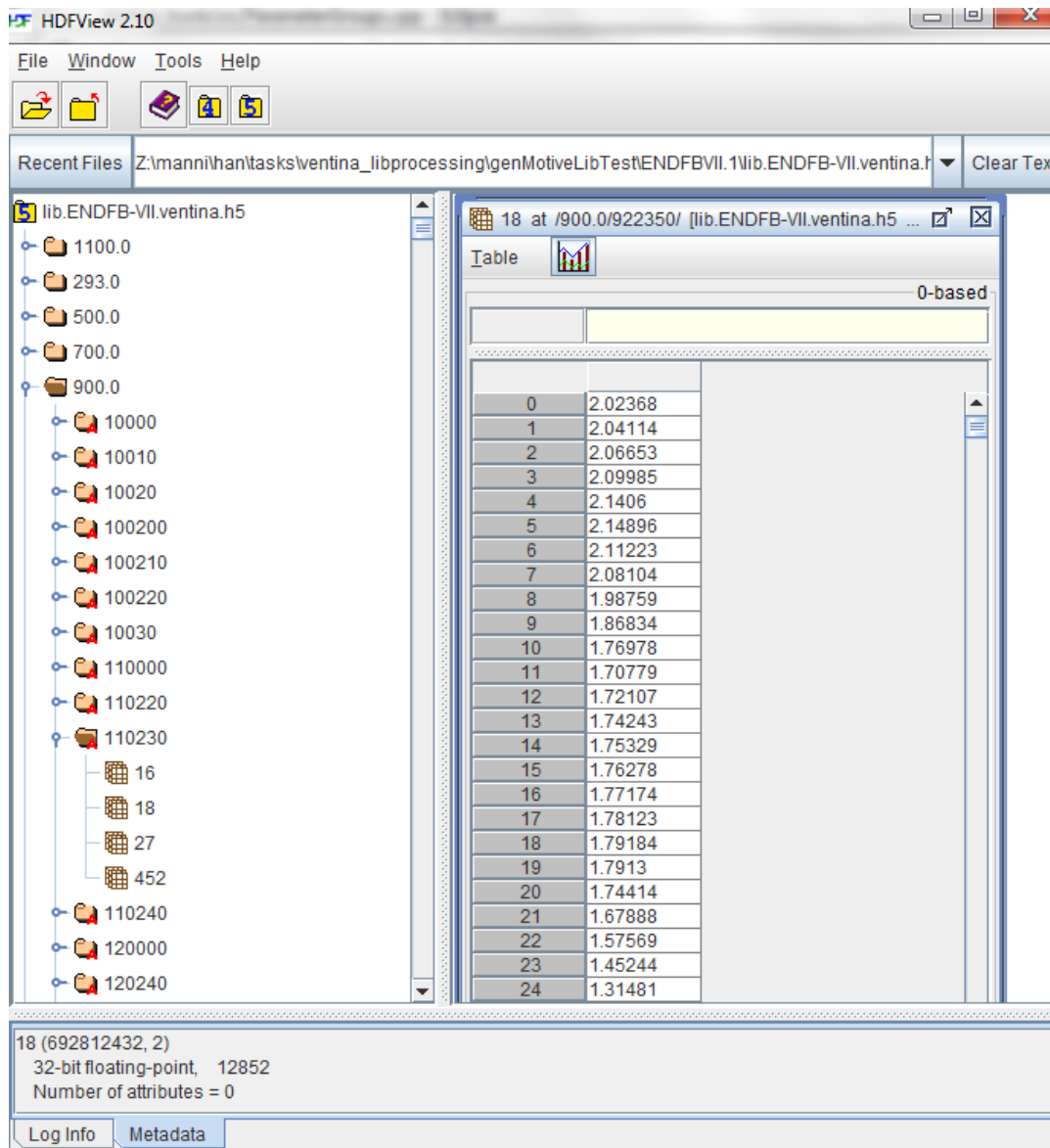


Abb. 4.4 Ausschnitt aus einer Bibliotheksdatei für MOTIVE

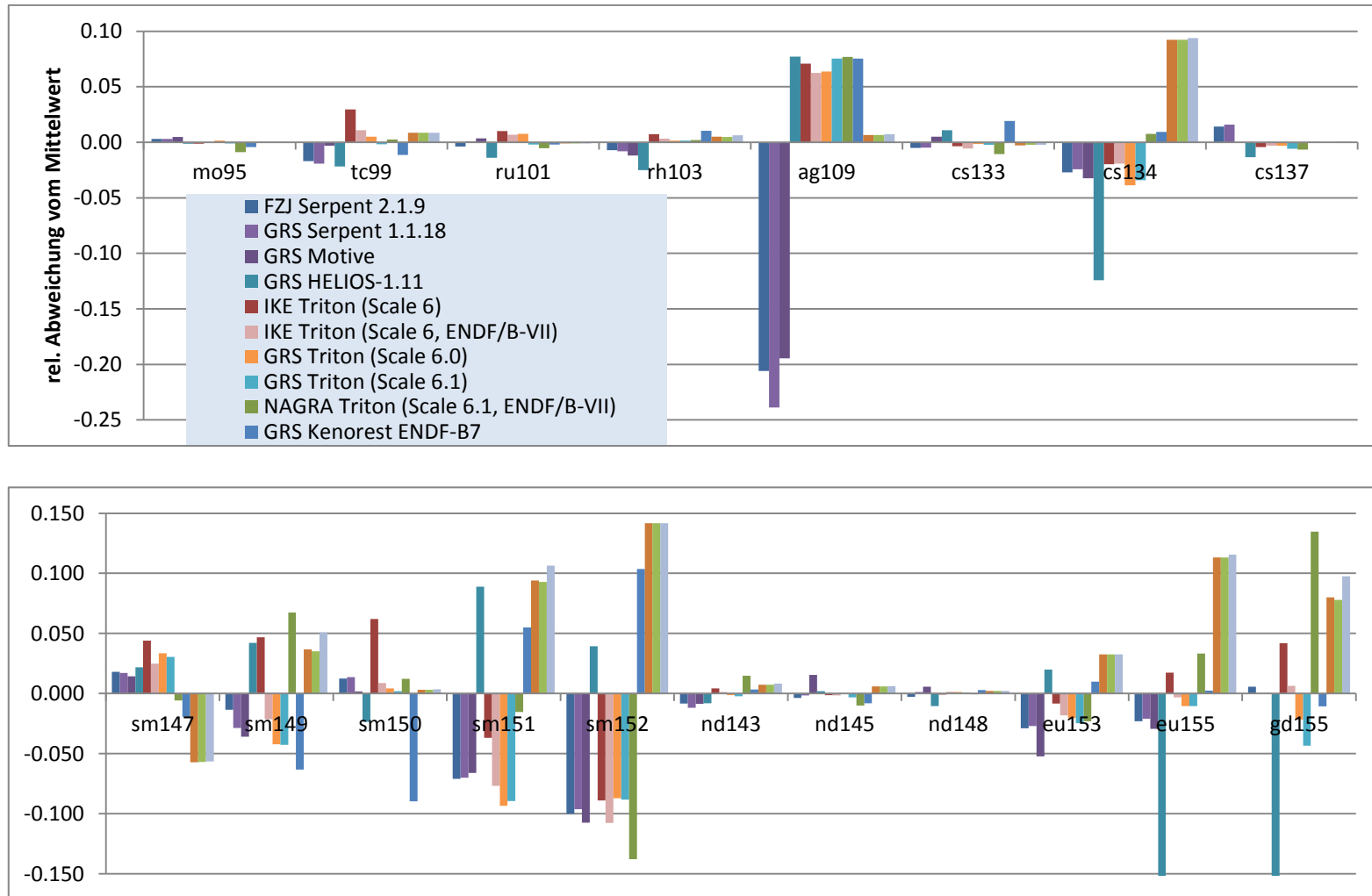


Abb. 4.5 Ergebnisse des GRS Abbrandbenchmarks für das DWR Brennelement ergänzt um die mit MOTIVE berechneten Werte. Relative Abweichung der berechneten Spaltprodukte vom Mittelwert aller Ergebnisse

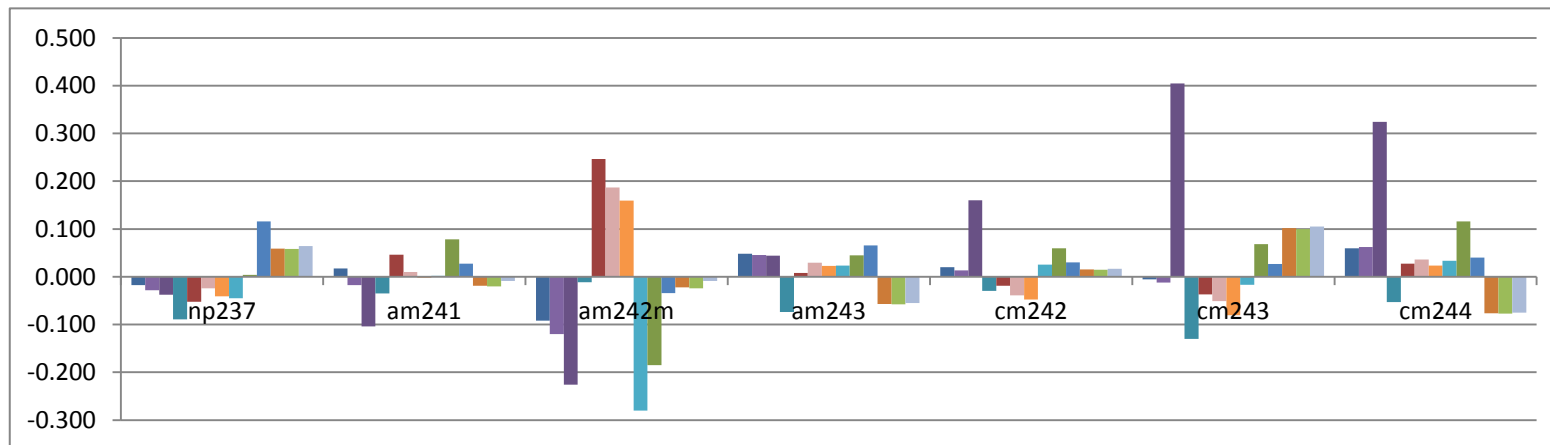
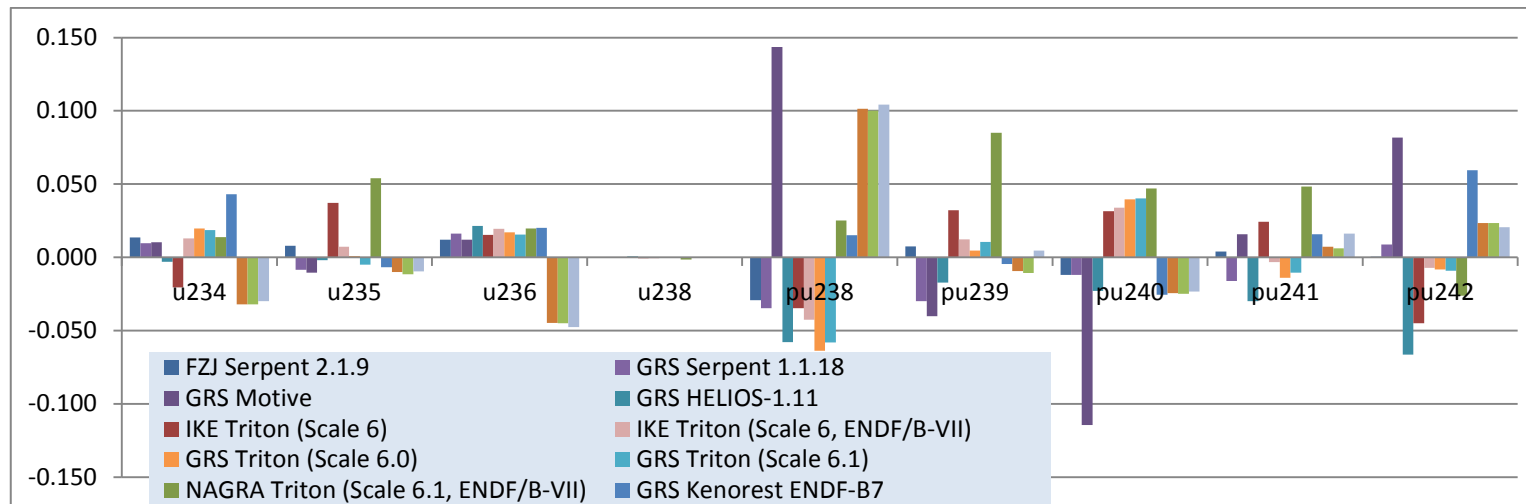


Abb. 4.6 Ergebnisse des GRS Abbrandbenchmarks für das DWR Brennelement ergänzt um die mit MOTIVE berechneten Werte. Relative Abweichung der berechneten Aktiniden vom Mittelwert aller Ergebnisse

5 Entwicklung eines Verfahrens zur Inventarberechnung

In vielen gegenwärtig verwendeten Abbrandcodes zur Bestimmung des Nuklidinventars in bestrahltem Kernbrennstoff wird zur Lösung der Bateman-Gleichungen, d. h. der Berechnung des Inventars unter einem gegebenen Neutronenfluss und -spektrum, der amerikanische Code ORIGEN bzw. eine seiner Weiterentwicklungen wie ORIGEN-2 /CRO 80/ oder ORIGEN-S /GAU 11/ verwendet. Dies trifft auch auf das 2D/3D Abbrandberechnungssystem KENOREST/DORTOREST der GRS zu. Allerdings enthält ORIGEN aus historischen Gründen eine Methode zur Lösung der Abbrandgleichung, die heutigen Genauigkeitsansprüchen nicht mehr voll genügt. In der Literatur wird bereits eine Reihe von moderneren Algorithmen beschrieben, die auch teilweise schon in Abbrandprogrammen Verwendung finden.

Im Rahmen der Weiterentwicklung des Standes von Wissenschaft und Technik wurde deshalb eine geeignete moderne Methode zur verbesserten Berechnung von Nuklidinventaren ausgewählt und programmtechnisch umgesetzt. Das zu entwickelnde Inventarberechnungsprogramm wird sich dabei nahtlos in das in Kap. 4 beschriebene Schnittstellensystem einfügen. Dies bietet maximale Flexibilität im Zusammenspiel mit beliebigen Modulen zur Berechnung des Neutronenflusses. Es soll neben verbesserten Abbrandrechnungen auch erweiterte Anwendungsgebiete wie z. B. die Aktivierung von Brennelement- oder Kernkomponenten im Neutronenstrahlungsfeld, sowie Rechnungen zur Transmutation ermöglichen. Über die Inventarberechnung von bestrahltem Kernbrennstoff hinaus können so speziell für Anwendungen im Rahmen des Rückbaus kerntechnischer Anlagen geeignete, aktuelle Methoden zur Aktivierung von Strukturelementen (Stahl, Beton, ...) implementiert werden. Die Entwicklung von VENTINA erfolgte in Zusammenarbeit mit der „École Polytechnique Fédérale de Lausanne“ (EPFL, Prof. Pautz)

5.1 Vorbereitende Arbeiten

Zur Vorbereitung der Entwicklung des Inventarberechnungsprogramms wurde zunächst eine Recherche hinsichtlich des einzusetzenden Lösungsalgorithmus für die Abbrandgleichungen durchgeführt. In der Literatur werden einige Methoden beschrieben, die bereits für diesen Zweck eingesetzt werden. Dazu gehören etwa Krylov-Unterraum-Methoden /YAM 07/ oder die sogenannte „CRAM“ Methode /PUS 10/, die in dem Code SERPENT /LEP 11/ verwendet wird. Sie kommt ohne Näherungen aus,

basiert allerdings auf einer bisher nur empirisch bestätigten Annahme über die Eigenwerte der Abbrandmatrix. In /PUS 11/ wird diese Methode auf Genauigkeit und Konvergenzeigenschaften getestet und auch erfolgreich mit Referenzlösungen verglichen. In dem Codesystem ALEPH2 ist zur Lösung der Abbrandgleichungen ein indirektes Runge-Kutta-Verfahren vierter Ordnung implementiert, bei dem allerdings hohe Genauigkeit durch längere Rechenzeiten erkaufte wird /EYN 11/. In FISPACT-II /SUB 13/ wird der LSODES-Löser ("Livermore Solver for Ordinary Differential Equations") eingesetzt. Den Angaben in der Literatur zufolge zeichnen sich vor allem die CRAM-Methode und LSODES durch ihre Effizienz aus.

Da die CRAM-Methode (im Folgenden auch „Rationale Chebyshev Approximation“) besonders vielversprechend erscheint und im Rahmen der SERPENT-Entwicklung erstmalig für die Lösung der Bateman-Gleichung eingesetzt wurde, wird sie im Folgenden gesondert diskutiert.

5.1.1 Das rationale Chebyshev Näherungsverfahren

Die Anwendung der rationalen Chebyshev Approximation beruht auf der Beobachtung, dass die Eigenwerte der Abbrandmatrix nahe der reellen Achse gruppiert sind. Zur Überprüfung dieser Beobachtung wurden einige repräsentative Beispielergebnisse in /PUS 13/ diskutiert und die Ergebnisse anschließend verallgemeinert /PUS 10/, /PUS 13/. Mit der Annahme der Gültigkeit dieser Eigenschaft kann die Matrixexponentialfunktion als Rationale Chebyshev Approximation ausgedrückt werden und mithilfe der Polstellen und Residuen über eine Partialbruchzerlegung berechnet werden. Die Rationale Chebyshev Approximation ist definiert als beste rationale Approximation $\hat{r}_{k,k}$ an die gesuchte Funktion, wobei Zähler und Nenner jeweils die Ordnung k aufweisen.

Über die polynomiale Ordnung (k,k) kann man die Genauigkeit der Lösungen steuern. In dem aktuellen Serpent Programm (Serpent v.1.1.19) wird eine Chebyshev Approximation der Ordnung $(14,14)$ verwendet. In der kommenden Serpent Version 2 soll diese vom Benutzer im Bereich [8, 10, 12, 14, 16, 18] festgelegt werden können /PUS 13/.

5.1.2 Vergleich der rationalen Chebyshev Approximation in SERPENT mit der Potenzreihennäherung in ORIGEN

Die Berechnung der Matrix-Exponentialfunktion in ORIGEN basiert auf einer gewichteten Taylorreihen-Entwicklung mit zusätzlichen Skalierungsfaktoren. Die Behandlung von kurzlebigen Nukliden erfolgt dabei separat. Diese Methode ist im Verlauf der Jahre ausgiebig getestet worden.

Da das CRAM-Verfahren erst seit kurzer Zeit zur Berechnung der Abbrandmatrix benutzt wird, fehlt die jahrelange Erfahrung im Umgang im Vergleich zur Potenzreihenentwicklung. In /ISO 10/ wurden die beiden Methoden an Beispielen eines DWR und eines Schnellen Brütters bezüglich der benötigten Berechnungszeit und Genauigkeit verglichen. Dabei wurden unter anderem die jeweiligen Methoden in SERPENT bzw. ORIGEN benutzt. Es wurden jeweils Abbrandrechnungen für frischen Brennstoff und für bereits bestrahlten Brennstoff durchgeführt und mit einer auf der analytischen Lösung der Bateman-Gleichungen beruhenden Referenzlösung verglichen. Das Ergebnis zeigte, dass ORIGEN minimal schneller, dafür aber ungenauer war. Das CRAM-Verfahren in SERPENT lieferte im Vergleich zur Referenzlösung extrem genaue Werte.

Allerdings beschränkten sich die Tests auf das generelle Verhalten und die Genauigkeit der Methoden und nicht auf das Verhalten einzelner Nuklide. Insbesondere wurde in der Rechnung mit frischem Brennstoff als Startpunkt eine nicht erklärte Ungenauigkeit der Chebyshev-Methode bei der Bestimmung der Curium-Isotope festgestellt. Auch wenn die beobachteten Ungenauigkeiten kleiner als die resultierenden Ungenauigkeiten der Streuquerschnitte sind, deuten sie möglicherweise auf einen systematischen Fehler in SERPENT beziehungsweise des CRAM-Verfahrens hin.

Besonders attraktiv an der Chebyshev-Methode ist die Variation von Rechenzeit und Ergebnisgenauigkeit durch die Ordnungsparameter. Es ist zu erwarten, dass mit höheren Ordnungen als (14,14) die Genauigkeit für die Berechnung einzelner Nuklidkonzentrationen weiter erhöht werden kann. Dabei steigt die benötigte Rechenzeit pro Abbrandschritt nur gering.

Insgesamt kann aus der durchgeführten Literaturrecherche abgeleitet werden, dass das CRAM-Verfahren sehr vielversprechend ist und sich für eine Implementierung in dem zu entwickelnden Inventarcode anbietet.

5.2 Entwicklungsarbeiten und Programmstruktur

Um die zugrundeliegenden Methoden und Algorithmen testen zu können, wurde zunächst mit der Entwicklung eines Prototypcode mit Basisfunktionalität begonnen. Dieser wurde dann im Laufe der weiteren Arbeiten erweitert und zum vollen, im Rahmen des Vorhabens geplanten Funktionsumfang ausgebaut. Analog zu Arbeitspaket 2 wurden diese Arbeiten unter Verwendung der Teamforge/SVN-Entwicklungsumgebung der GRS durchgeführt und begleitend zur Entwicklung unter Verwendung des Doxygen-Pakets dokumentiert. Der im Rahmen dieser Arbeitspakets entwickelte Code wird in Zukunft den Namen VENTINA ("Versatile numerical tool for inventory and activation calculation") tragen und wird auch im folgenden Text so bezeichnet. Im Folgenden wird zunächst der allgemeine Programmablauf beschrieben und dann auf einige Details der Implementierung und des Funktionsumfangs des Programms näher eingegangen.

5.2.1 Programmablauf

Der grundlegende Programmablauf von VENTINA stellt sich folgendermaßen dar: Zunächst werden sämtliche für die Berechnung benötigten Eingangsdaten eingelesen. Dies umfasst sowohl problemunabhängige Eingangsdaten wie etwa die Informationen zu Zerfallsketten und Zerfallsdaten als auch problemspezifische Daten wie etwa die zu Simulationsbeginn vorhandenen Nuklidinventare. Diese werden dann zur Vorbereitung der Rechnung prozessiert. Hierzu gehört der Aufbau der Abbrandmatrix aus den Nuklidkettendaten, den Neutronenwirkungsquerschnitten und den Zerfallsdaten, weiterhin die Kondensierung der Eingruppen-Wirkungsquerschnitte und die Leistungsberechnung und Flussnormierung. Im Anschluss erfolgt die eigentliche Inventarberechnung, d. h. die Lösung der Bateman-Gleichung. Hierzu stehen verschiedene Algorithmen zur Verfügung, wobei sich nach den bisherigen Testrechnungen die CRAM-Methode als am effizientesten erwiesen hat. Bei der Berechnung kann der in der Eingabe angegebene Zeitschritt in feinere Unterzeitschritte unterteilt werden. Dabei erfolgt eine schrittweise Flussanpassung zur Erhaltung der vorgegebenen Nominalleistung. Außerdem steht innerhalb eines Zeitschrittes ein einfaches Predictor-Corrector-Verfahren zur Verfügung, bei dem der Abbrand mit einem über den Zeitschritt gemittelten Fluss erfolgt. Während und nach Beendigung der Rechnung werden die Ergebnisdaten in strukturierter Form gespeichert und in eine Ausgabedatei geschrieben.

5.2.2 Prozessierung der Eingabedaten

Für die Bereitstellung der Eingabedaten für VENTINA sind insgesamt vier Dateien erforderlich. Davon sind zwei Dateien problemunabhängig und können dem Benutzer als Bibliotheksdateien zur Verfügung gestellt werden. Dies betrifft zum einen die Datei mit den Spaltproduktausbeuten und zum anderen die Datei, die die Nuklidketteninformationen enthält. Für die Spaltproduktausbeuten stehen in den Datenbibliotheken grundsätzlich Daten zu drei verschiedenen Energien zur Verfügung, zwischen denen problemabhängig interpoliert werden kann. Aktuell werden für VENTINA allerdings bereits zu einer festen Energie vorinterpolierte Daten verwendet. In der Nuklidkettendatei sind zu jedem Nuklid eine Liste der möglichen Zerfälle und neutroneninduzierten Reaktionen, die jeweiligen Zielnuklide und etwaige Verzweigungsverhältnisse sowie die jeweils freigesetzte Energie aufgeführt. Zusätzlich sind, falls vorhanden, die Halbwertszeiten und die bei Spaltung freigesetzte Energie aufgeführt. Enthalten sind auch allgemeine Informationen zum Nuklid, wie Nuklidmasse und Kernladungszahl aufgeführt. Die Prozessierung der Dateien für die Spaltausbeuten und die Nuklidkettendaten wird in Abschnitt 5.4 genauer beschrieben.

Die beiden übrigen Dateien für die Eingabe enthalten problemabhängige Daten, die vom Nutzer bereitgestellt werden müssen. Eine Datei enthält Steuerungsparameter, die der Steuerung der Rechnung dienen. Eine weitere Datei enthält die Materialdefinitionen und Informationen über den zu berechnenden Abbrandschritt. Für jedes Material müssen dabei zum einen das Startnuklidinventar und zum anderen die Wirkungsquerschnitte für neutroneninduzierte Reaktionen und die zugehörigen Neutronenflüsse angegeben werden. Diese Daten können in einer beliebigen Anzahl an Gruppen angegeben werden. Außerdem enthalten sind für die Rechnung notwendige Informationen wie Materialvolumen und -dichte, spezifische Leistung und Zielabbrand.

In der Eingabe kann eine beliebige Anzahl an Materialien definiert werden. In VENTINA werden die Abbrandgleichungen für mehrere Materialien gleichzeitig gelöst. Mithilfe der Steuerungsdatei kann die Gesamtzahl der Materialien in gleichgroße Teile aufgeteilt werden die jeweils in einem Lösungsschritt prozessiert werden. Die einzelnen Teilpakete können unter Verwendung des OpenMP-Protokolls auch parallel abgearbeitet werden. Dieser Ansatz hat sich als sehr effizient erwiesen und ermöglicht den Abbrand eines kompletten nodalisierten Reaktorkerns in einem einzelnen VENTINA-Aufruf.

5.2.3 Eingesetzte Lösungsverfahren

Aktuell sind in VENTINA vier verschiedene Verfahren zur Lösung der Bateman-Gleichung eingebunden. Diese sind das CRAM-Verfahren (siehe auch Abschnitt 5.1.1), ein Krylov-Unterraum Verfahren, ein Lösungsverfahren für gewöhnliche Differentialgleichungssysteme aus dem ODEPACK /HIN 83/ und ein Runge-Kutta-Lösungsverfahren. Diese sind über einen Parameter in der Steuerungsdatei wählbar. Der Runge-Kutta-Löser ist im Vergleich zu den anderen Verfahren relativ langsam, bietet aber die Möglichkeit, zeitlich veränderliche Reaktionsraten zu verwenden. Dies könnte in künftigen Entwicklungen ausgenutzt werden, um die Anzahl der nötigen Iterationsschritte zu reduzieren. Dazu ist allerdings eine geeignete Extrapolation der zeitlichen Entwicklung der Reaktionsraten notwendig. Von den übrigen drei Lösungsverfahren hat sich die CRAM-Methode in den bisherigen Testrechnungen als das schnellste Verfahren erwiesen und ist daher der standardmäßig verwendete Löser.

Für alle Lösungsverfahren außer CRAM steht außerdem ein Näherungsverfahren zur weiteren Beschleunigung der Rechnung zur Verfügung. Dabei wird davon ausgegangen, dass unter Vernachlässigung der Spaltung die zeitliche Entwicklung der Aktiniden unabhängig von den übrigen Nukliden (d. h. den Spaltprodukten) ist. Dies ist insofern eine zulässige Näherung, als dass die Halbwertszeiten für die α -Zerfälle der wesentlich vorkommenden Aktiniden groß gegenüber der Zeitskala des Reaktorbetriebs sind. Es wird daher zunächst die zeitliche Entwicklung der Aktinideninventare für einen Zeitschritt berechnet. Dann werden darauf aufbauend die in dem Zeitschritt durch Zerfall gebildeten Spaltprodukte berechnet und zum bestehenden Spaltproduktinventar hinzugefügt.

5.3 Rechnungen zur Verifikation

Begleitend zur Entwicklung von VENTINA wurden Testrechnungen zur Verifikation des korrekten Programmablaufs durchgeführt. Dazu wurde eine Abbrandrechnung für ein stark vereinfachtes Modellbrennelement in TRITON aufgesetzt. Ein einzelner Abbrandschritt von 5 GWd/tHM wurde durchgeführt, und für diesen der Neutronenfluss und die Wirkungsquerschnitte für Spaltung, Einfang und die (n, 2n)-Reaktion in zwei Gruppen ausgelesen. Dies erfolgte einmal für einen Satz von 94 Nukliden und einmal für einen Satz von 388 Nukliden (TRITON-Option *addnux=2* und *addnux=4*). Die zusätzlich benötigten Spaltausbeuten und Zerfallsdaten wurden direkt aus den ENDF/B-VII Roh-

daten ausgelesen, wobei für den ersten Fall ebenfalls ein Satz von 94 Nukliden und für den zweiten Fall ein Satz von 1278 Nukliden verwendet wurde. Diese Daten wurden in Ventina geladen und der gleiche 5 GWd/tHM Abbrandschritt nachvollzogen. Die zusätzlich benötigten Daten für die thermisch verwertbaren Energien pro Spaltung und Einfangreaktion wurden zu Vergleichszwecken dem SCALE-Manual /SCA 11/ entnommen. Zur Analyse der Ergebnisse wurden die Nuklidinventare für ausgewählte Nuklide verglichen. Die Ergebnisse des Vergleichs sind in Abb. 5.1 und Abb. 5.2 dargestellt. Die Ergebnisse sind für eine erste Testrechnung zufriedenstellend. Die vorhandenen Abweichungen sind in erster Linie durch fehlende Reaktionskanäle und Unterschiede bei den Spaltausbeuten zu erklären. Bei einzelnen Nukliden wie zum Beispiel ^{152}Gd liegt die große relative Abweichung auch an der geringen absoluten Nuklidichte.

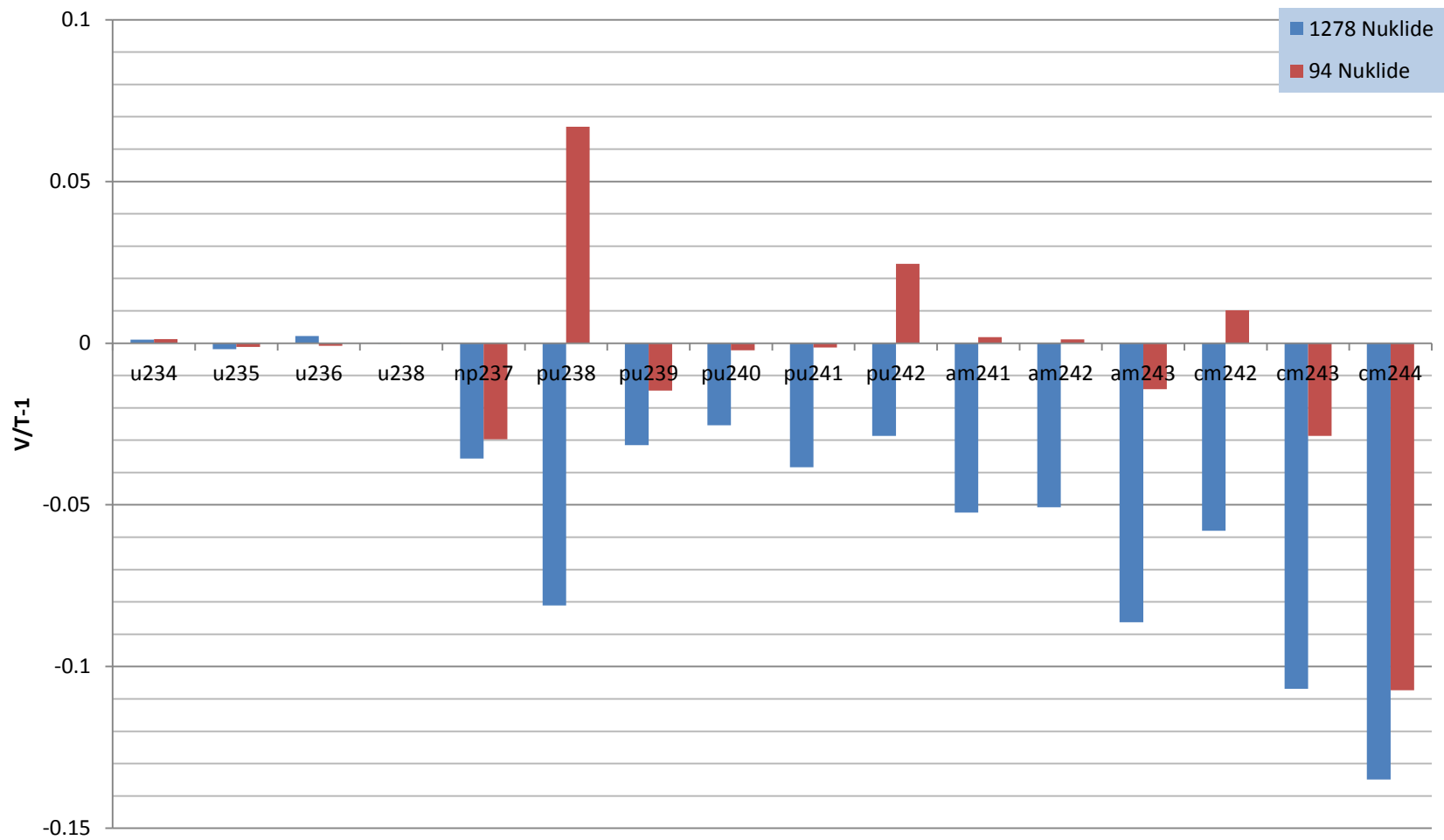


Abb. 5.1 Relative Abweichung zwischen Ventina und Triton für ein 5 GWd/tHM Abbrandschritt (Aktiniden)

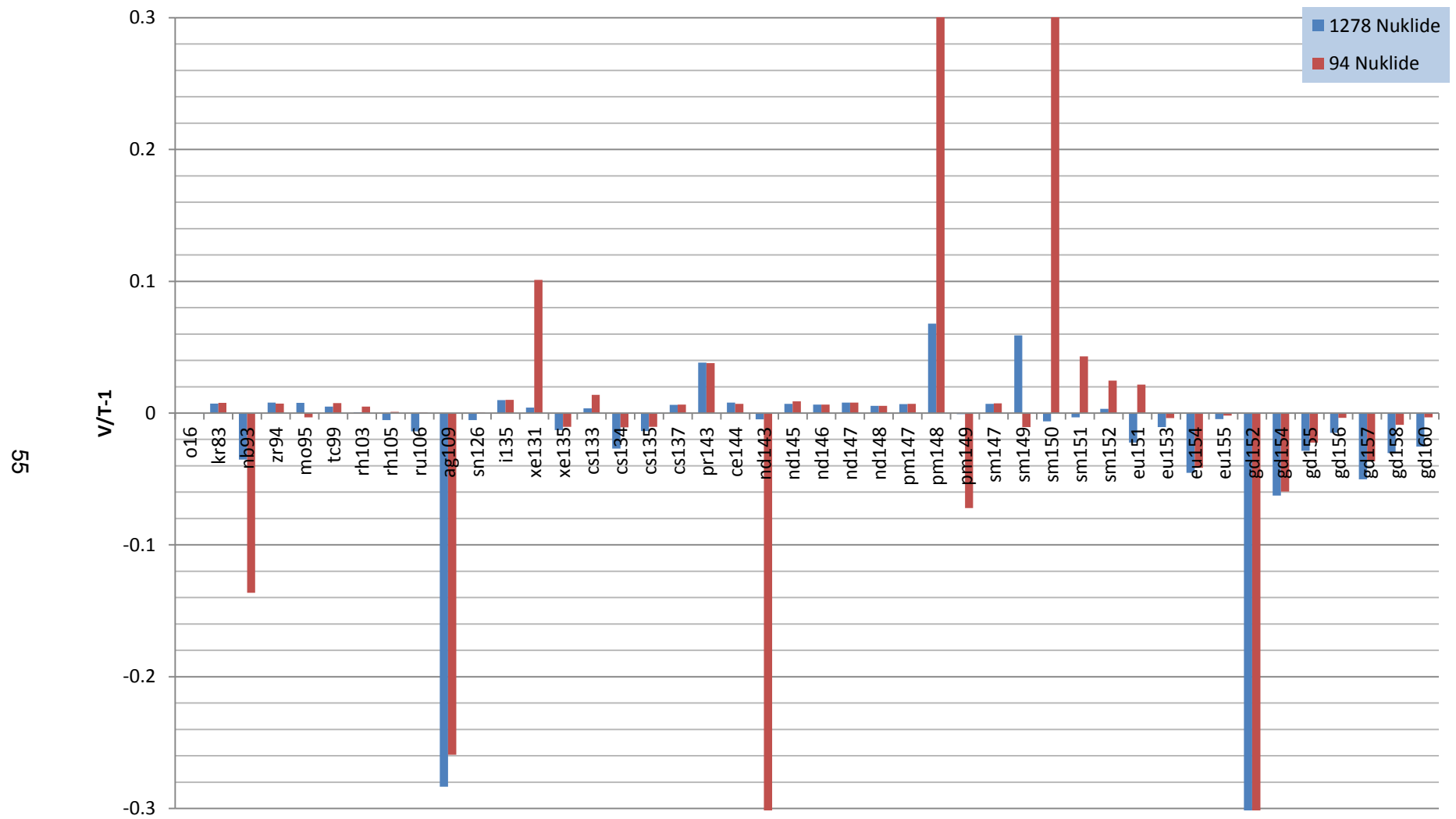


Abb. 5.2 Relative Abweichung zwischen Ventina und Triton für ein 5 GWd/tHM Abbrandschritt (Spaltprodukte).

Nach Abschluss der Entwicklungsarbeiten wurden aufbauend auf den oben beschriebenen Verifikationsrechnungen eine Vergleichsrechnung zu einer vollen Abbrandrechnung mit TRITON bis 25 GWd/THM durchgeführt. Hierzu wurden zu jedem TRITON Abbrandschritt die Neutronenflussdaten und die problemspezifischen Wirkungsquerschnittsdaten ausgelesen und für einen äquivalenten VENTINA-Abbrandschritt aufbereitet. Auf diese Weise konnte iterativ eine komplette Abbrandberechnung mit VENTINA über mehrere Zeitschritte erfolgen.

5.4 Verfolgung von Nuklidketten und Berechnung von kumulativen Spaltproduktausbeuten

Zum Aufbau der Abbrandmatrix für die Lösung der Bateman-Gleichung muss bekannt sein, welche Nuklidketten sich durch neutroneninduzierte Reaktionen und radioaktiven Zerfall bilden. In die Transmutationskoeffizienten gehen unter anderem die Spaltproduktausbeuten ein, die unter Umständen kumulierte Größen darstellen, weil nicht immer alle Nuklide einer Zerfallskette im Lösungsvektor stehen.

Zur Bestimmung der auftretenden Nuklidketten und zur Berechnung der kumulativen Spaltproduktausbeuten für eine bestimmte Auswahl von Nukliden wurde ein Programm geschrieben, das Zerfallsdaten, Spaltproduktausbeuten und Wirkungsquerschnittsdaten aus einer nuklearen Datenbibliothek im ENDF-Format ausliest, diese Informationen miteinander verknüpft, in Form eines mathematischen, gerichteten Graphen abspeichert und die vom Abbrandprogramm benötigten Informationen berechnet. Mögliche nukleare Datenbibliotheken sind zum Beispiel ENDF/B, JEFF, oder JENDL.

Aus den Zerfallsdaten werden alle stabilen und instabilen Nuklide gelesen und mit ihrer Ordnungszahl, Massenzahl, ihrem Anregungszustand und der Halbwertszeit als Knoten des Graphen gespeichert. Zusätzlich werden ihre Zerfallsreaktionen und die entsprechenden Verzweigungsverhältnisse gelesen. Über die auftretenden Zerfallsreaktionen werden die Ordnungszahl und die Massenzahl des Tochternuklids berechnet und eine Kante zwischen dem Mutternuklid und dem Tochternuklid erstellt. Die Zerfallsart und das Verzweigungsverhältnis werden anschließend als Kanteninformation abgelegt.

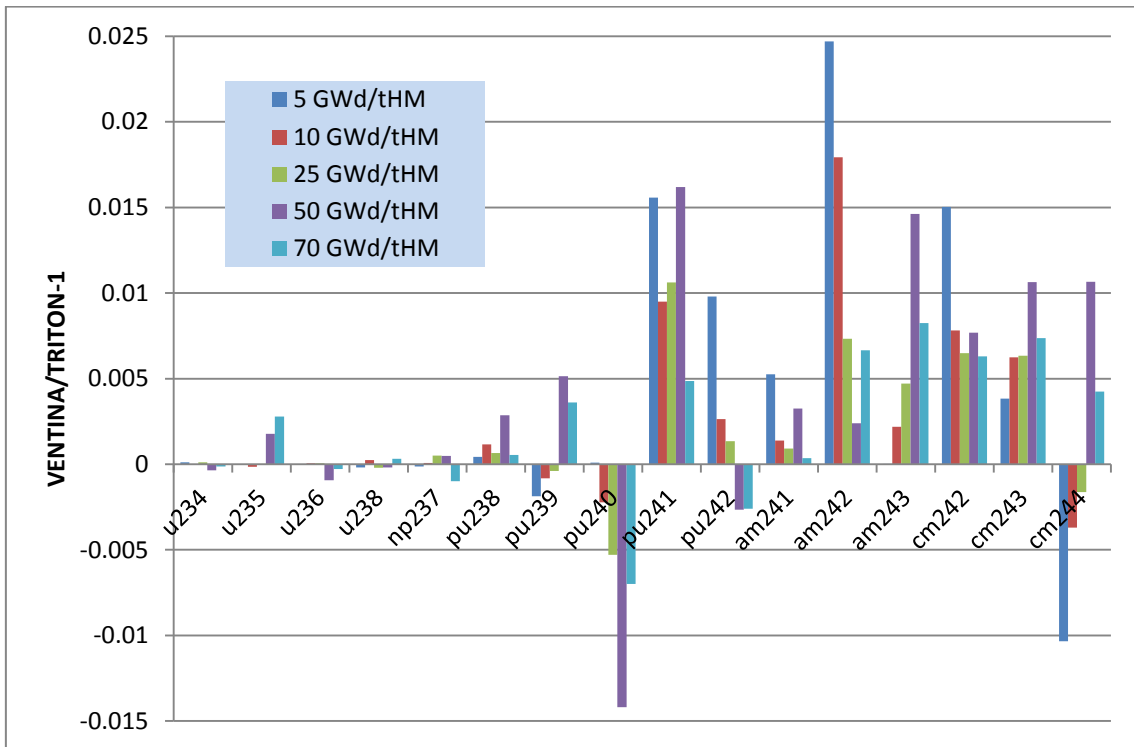


Abb. 5.3 Vergleichsdaten zwischen TRITON und VENTINA für ausgewählte Aktinide

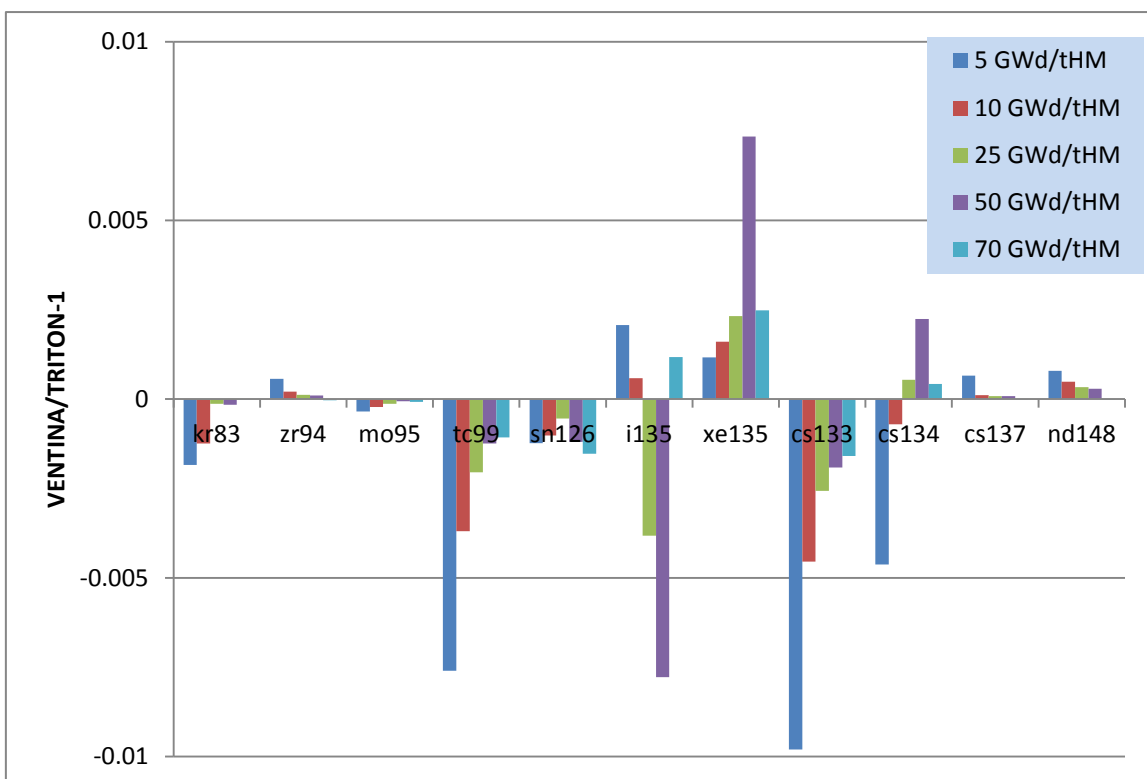


Abb. 5.4 Vergleichsdaten zwischen TRITON und VENTINA für ausgewählte Spaltprodukte

Weiterhin werden die unabhängigen Spaltproduktausbeuten für die spaltbaren Aktinide bei den Neutronenenergien 0,0253 eV, 500 keV und 14 MeV gelesen. Anhand dieser Daten werden im Graphen neue Kanten zwischen den spaltbaren Aktiniden und den Spaltprodukten erstellt, wobei auf jeder Kante als Information die Spaltproduktausbeute bei der entsprechenden Energie für ein Spaltprodukt abgelegt ist.

Die Wirkungsquerschnittsdaten für neutroneninduzierte Reaktionen werden bei jedem Nuklid daraufhin überprüft, ob sie für die Einfangreaktion eines Neutrons und auch für die (n, 2n)-Reaktion Daten unter der ENDF-Kategorie MF=8 enthalten. Sind Daten für eine derartige Reaktion vorhanden, wird daraus direkt das entsprechende Nachfolgenuklid mit dessen Halbwertszeit, seinen möglichen Zerfallsreaktionen, Verzweigungsverhältnissen und Tochternukliden ausgelesen und im Graphen gespeichert. In dem Fall, dass für eine der Reaktionen keine Daten in der Kategorie MF=8 vorhanden sind, wird geprüft ob in der Kategorie MF=3 für die jeweilige Reaktion Wirkungsquerschnittsdaten vorhanden sind. Ist dies der Fall, wird das Tochternuklid für die auftretende Reaktion berechnet und die Kante erstellt.

Für eine bestimmte Neutronenenergie und zu einem bestimmten spaltbaren Aktinid können nun auf der Basis des Graphen die kumulativen Spaltproduktausbeuten für eine beliebige Nuklidauswahl berechnet werden. Hierzu werden für jedes gewählte Nuklid die Kanten rückwärts durchgegangen. Dabei ergibt sich zum einen die Kante, welche direkt zum Aktinid führt und somit die unabhängige Spaltproduktausbeute als Information enthält. Zur Berechnung der kumulativen Ausbeute werden zu diesem Wert die Summen der unabhängigen Spaltproduktausbeuten addiert, die sich über die anderen möglichen Zerfallswege ergeben. Dabei gehen nur diejenigen Ketten ein, in denen bis auf Anfangs- und Endknoten keine für den Abbrand ausgewählten Nuklide vorkommen. Abb. 5.5 illustriert die Datenstrukturen für dieses Verfahren am Beispiel der Produktion von ^{155}Gd aus ^{235}U .

Anhand der Daten im Graph werden für den Aufbau der Abbrandmatrix die Nuklidketten zwischen den gewählten Nukliden extrahiert und dem Inventarcode übergeben. Hinsichtlich des radioaktiven Zerfalls bestehen die Informationen aus der Zerfallskonstante, den entstehenden Tochternukliden und den Verzweigungsverhältnissen für die Zerfallsreaktionen. Für die neutroneninduzierten Reaktionen werden ebenfalls die Tochternuklide und deren Verzweigungsverhältnisse bestimmt. Ist jedoch ein Tochternuklid instabil und seine Halbwertszeit kleiner als ein vorgegebener Grenzwert, wird

wiederum dieses Tochternuklid durch seine Zerfallsprodukte ersetzt, und die Verzweungsverhältnisse werden entsprechend angepasst.

Es ist geplant, dieses Programm um weitere Reaktionskanäle zu erweitern und zusätzliche Informationen wie etwa die thermisch verwertbaren Energien pro Reaktion oder die Energien der emittierten Strahlung auszulesen und für den Inventarcode Ventina zur Verfügung zu stellen.

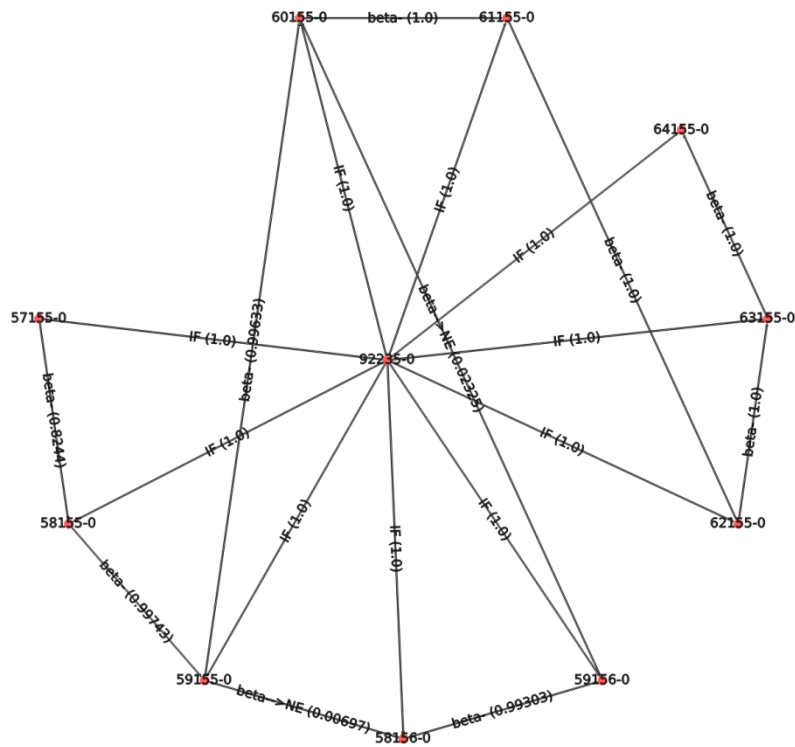


Abb. 5.5 Datenstrukturen für die Berechnung der kumulativen Spaltproduktausbeute für $^{155}_{64}\text{Gd}$ aus $^{235}_{92}\text{U}$ anhand der möglichen Zerfallswege (IF: induzierte Spaltung (induced fission), beta: β -Zerfall, NE: Neutronenemission)

6 Methoden zur Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalyse

Zur Analyse der Unsicherheiten und Sensitivitäten in den Rechenergebnissen, die sich aus den Unsicherheiten in den Eingangsparametern ergeben, stehen in der GRS für die Anwendung bei neutronenphysikalischen Fragestellungen zwei Werkzeuge zur Verfügung, welche beide auf dem in der GRS entwickelten und gepflegten Monte Carlo Sampling Werkzeug SUSA (Software for Uncertainty and Sensitivity Analysis) basieren. Zum einen kann mittels SUSA über das Kopplungsmodul SUnCISTT („Sensitivities and Uncertainties in Criticality Inventory and Source Term Tool“) /BOC 12/, /BEH 14/ die aus den technischen Parametern resultierende Unsicherheit auf unterschiedliche Rechengrößen analysiert werden. Zum anderen kann mittels XSUSA („Cross Section Uncertainty and Sensitivity Analysis“), das ebenfalls auf der Sampling-basierten GRS-Methode beruht, der Einfluss der Unsicherheiten aus den nuklearen Daten auf das zu analysierende System untersucht werden.

Zu Beginn des Vorhabens war die in SUnCISTT zur Variation der Eingangsdaten zum Einsatz kommende Version von SUSA inkompatibel mit XSUSA. Eine gemeinsame Variation von technischen Parametern und nuklearen Daten mit einem einzelnen Werkzeug war daher nicht möglich. Für eine umfassende, integrale Analyse aller Unsicherheiten ist eine solche gemeinsame Variation aller Parameter jedoch unerlässlich. Ein Ziel des Vorhabens war deshalb, die Fähigkeiten von SUnCISTT und XSUSA derart zu integrieren, dass sie in einer einheitlichen Rechenkette zur Verfügung stehen. Für diese Kopplung wurden wie in Kap. 4 beschrieben ebenfalls Schnittstellen definiert, die einen einfachen Austausch der notwendigen Informationen ermöglichen. Dazu zählen die variierten Eingangsdaten sowie die Resultate der Berechnungen, die zur statistischen Auswertung herangezogen wurden. Die Kopplung von SUnCISTT und XSUSA ermöglicht zusammen mit den in Kap. 4 definierten Schnittstellen zwischen Abbrand-, Aktivierungs- und Kritikalitätsprogrammen den flexiblen Einsatz der gekoppelten Unsicherheitsanalyse auch mit neuen Rechenmethoden und Rechenkettten. So wird die Durchführung von Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalysen mit dem in Kap. 5 entwickelten Verfahren zur Inventarberechnung aufgrund der gemeinsamen Schnittstellen einfach zu bewerkstelligen sein. Darüber hinaus bietet eine derartige Kopplung auch aus Sicht der Codepflege Vorteile, weil dadurch eine verbesserte Transparenz der Entwicklungsfortschritte in den einzelnen Teilaspekten geschaffen wird.

Zusätzlich zu den oben genannten Unsicherheiten in den Neutronenwirkungsquerschnitten gibt es für Abbrandberechnungen weitere nukleare Daten, deren Unsicherheiten Einfluss auf die Ergebnisgrößen haben können, nämlich Zerfallsdaten und Spaltproduktausbeuten. Es ist erforderlich, diese Größen in entsprechenden Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen zu berücksichtigen. Während in Bezug auf die Neutronenwirkungsquerschnitte im SCALE-Programmsystem prozessierte Kovarianzdaten in Multigruppenstruktur für alle wesentlichen Nuklide vorliegen, die mit vielen Multigruppen-Transportcodes verwendet werden können, gibt es für Zerfallsdaten und Spaltproduktausbeuten keine entsprechenden Unsicherheitsdaten in einer Darstellung, die direkt zur Anwendung auf die entsprechenden Datenbibliotheken der Abbrandcodes geeignet ist. Zur vollständigen Ermittlung des Einflusses von Unsicherheiten aller nuklearen Daten auf die Ergebnisse von Abbrandberechnungen wurde XSUSA entsprechend erweitert und verfügbare Unsicherheitsdaten wurden integriert.

Der folgende Abschnitt beschreibt die durchgeführten Arbeiten am Abbrandprogrammsystem der GRS bezüglich Methoden zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse. Dies sind Arbeiten zur Implementierung einer gemeinsamen Rechenkette für technische Parameter und nukleare Daten, die Erweiterung des Programmsystems XSUSA zur Berücksichtigung von Unsicherheiten in Zerfallsdaten und Spaltausbeuten, die Anwendung einer Methode zur effizienten Durchführung von Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen bei der Verwendung von Monte Carlo-Codes zur Simulation des Neutronentransports („schnelle GRS-Methode“) in Monte-Carlo-Transport-/ Abbrandberechnungen, sowie Arbeiten zum UAM-LWR-Benchmark Phase 2.

6.1 Implementierung einer gemeinsamen Rechenkette für technische Parameter und nukleare Daten

Die im Vorgängervorhaben RS1189 „Weiterentwicklung und Validierung von Rechenmethoden zu Hochabbrand, Aktivierung und Abschirmung“ /BEH 12/ begonnenen Untersuchungen zu kombinierten Analysen für Abbrandberechnungen mit den Unsicherheiten in nuklearen Daten und Unsicherheiten in technologischen Parametern (Fertigungstoleranzen) wurden fortgesetzt. Dazu wird die Berechnungskette für Unsicherheitsanalysen mit nuklearen Daten dahingehend erweitert, dass gleichzeitig auch diejenigen technologischen Parameter (geometrische Daten, Nukliddichten), für die Unsicherheiten verfügbar sind, entsprechend ihrer Wahrscheinlichkeitsverteilungen variiert werden. Während die Variation der nuklearen Daten den Eingabedatensatz für die Ab-

brandsequenz völlig unverändert lässt, muss zur Variation der technologischen Parameter der Eingabedatensatz, hier für die TRITON-Sequenz aus dem SCALE6.1-System /SCA 11/, entsprechend geändert werden. Es muss also eine große Anzahl von Rechenläufen durchgeführt werden, bei denen zum einen der Eingabedatensatz gemäß den Parametervariationen modifiziert wird, zum anderen die nuklearen Daten während der Rechensequenz variiert werden. Dies ist schematisch in Abb. 6.1 dargestellt. Der gelbe Kasten links oben repräsentiert die Erweiterung zur Unsicherheitsanalyse bezüglich der technologischen Parameter. Dazu werden zunächst mit der Methode „c-SCALE“ des Programmsystems zur Unsicherheits- und Sensitivitätsanalyse SUnCISTT eine Reihe von geeignet variierten TRITON-Eingabedatensätzen erzeugt und in einem „Pool“ abgelegt. Bei der von XSUSA gesteuerten Durchführung der Berechnungen wird für jede Einzelrechnung ein neuer Eingabedatensatz aus diesem Pool verwendet. Die Ergebnisse der Einzelrechnungen werden dann in einem weiteren Pool gespeichert und stehen anschließend für Unsicherheits- und Sensitivitätsanalysen bezüglich relevanter Parameter (Multiplikationsfaktor, Reaktionsraten, Isotopenzusammensetzung) zur Verfügung.

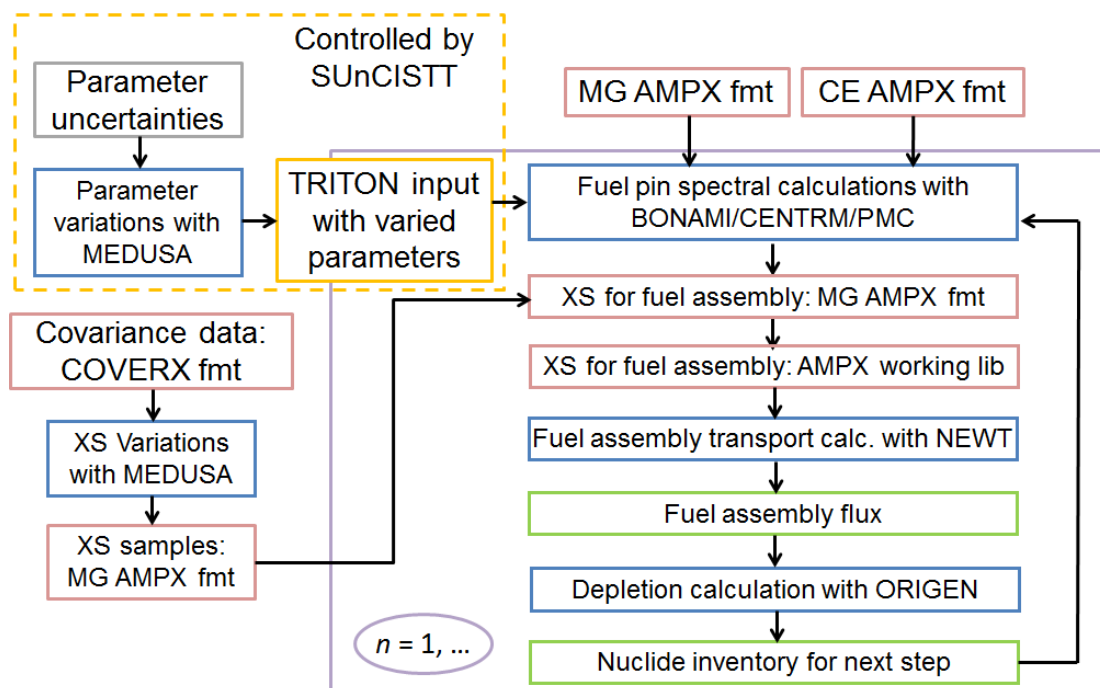


Abb. 6.1 Berechnungskette für Unsicherheitsanalysen mit SUnCISTT und XSUSA bezüglich der Unsicherheiten in technologischen Parametern und nuklearen Daten für TRITON-Abbrandberechnungen

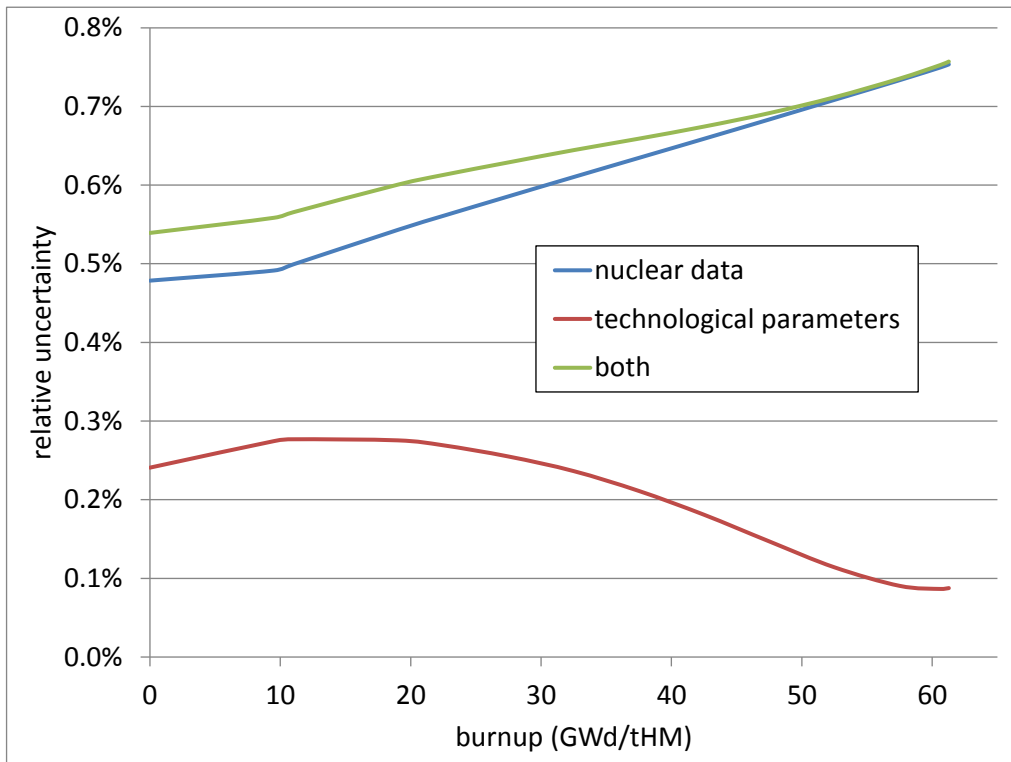


Abb. 6.2 Unsicherheit im Multiplikationsfaktor beim UAM-Phase1-Abbrandbechmark

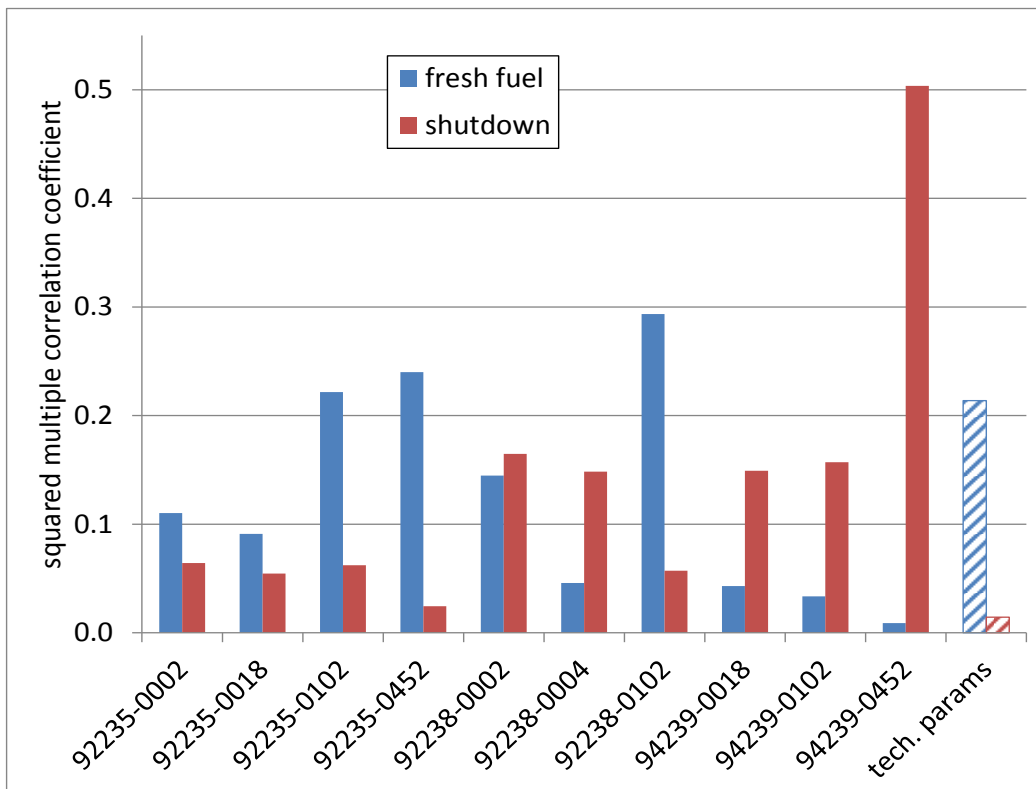


Abb. 6.3 Quadrierter multipler Korrelationskoeffizient als Maß für den Beitrag unsicherer Parameter zur Unsicherheit im Multiplikationsfaktor beim UAM-Phase1-Abbrandbechmark

Das kombinierte XSUSA/SUnCISTT-System wurde zunächst auf eine Stabzell-Abbrandberechnung im Rahmen des UAM-LWR-Benchmarks Phase 1 /IVA 11/ angewendet. Abb. 6.2 zeigt die Entwicklung der Unsicherheit des Multiplikationsfaktors mit dem Abbrand. Diese Unsicherheit wird stets durch die Unsicherheiten der nuklearen Daten dominiert. Etwa bis zur Hälfte der Abbranddauer leisten die Unsicherheiten in den technologischen Parametern noch einen wenn auch kleinen Beitrag, und werden zum Ende des Abbrands nahezu bedeutungslos.

Zur gemeinsamen Sensitivitätsanalyse bezüglich der Unsicherheiten in den nuklearen Daten und den technologischen Parametern wurden die XSUSA-Module SAMOS und RISUS entsprechend erweitert. Zur Bestimmung der Beiträge der einzelnen Unsicherheiten zur Ergebnisunsicherheit besonders geeignet ist eine Gruppensensitivitätsanalyse. Dabei werden mehrere unsichere Parameter zu Gruppen zusammengefasst. Für die nuklearen Daten sind dies sinnvollerweise einzelne Reaktionen einzelner Isotope, d. h. es wird nicht mehr nach Neutronenenergien unterschieden. Als Maß für die individuellen Beiträge wird der quadrierte multiple Korrelationskoeffizient (R^2) verwendet. Abb. 6.3 zeigt das Ergebnis für den Multiplikationsfaktor beim UAM-LWR-Benchmark Phase 1 für frischen Brennstoff und zum Ende des Abbrands. Bei den nuklearen Daten ist die Nomenklatur 0002 = elastische Streuung, 0004 = inelastische Streuung, 0102 = Einfang, 0452 = mittlere Anzahl von Spaltneutronen. Auch hier wird deutlich, dass die Unsicherheiten der technologischen Parameter beim abgebrannten Brennstoff nur noch einen sehr geringen Einfluss auf die gesamte Ergebnisunsicherheit haben. Bei den nuklearen Daten ist zu erkennen, dass im frischen Zustand der Einfluss des Einfang-Wirkungsquerschnitts von ^{238}U am größten ist, für den abgebrannten Zustand überwiegt der Einfluss der mittleren Anzahl von Spaltneutronen von ^{239}Pu . Dies ist typisch für ein System aus niedrig angereichertem Uran (frischer Zustand) und ein MOX-System (abgebrannter Zustand). Eine Sensitivitätsanalyse bezüglich der in Betracht gezogenen technologischen Parameter (Brennstoffdichte, Pelletdurchmesser, Gas-spaltdicke, Hüllrohrdicke und ^{235}U -Anreicherung) ergibt, dass für frischen Brennstoff die Unsicherheiten der ersten vier der fünf genannten Parameter einen statistisch signifikanten Einfluss auf die Unsicherheit im Multiplikationsfaktor haben; für hoch abgebrannten Brennstoff ist nur noch ein Einfluss der Unsicherheit in der Brennstoffdichte sichtbar.

6.2 Unsicherheiten von Zerfallsdaten und Spaltausbeuten

Bei der Berechnung des Inventars von bestrahlten Kernbrennstoffen sind zusätzlich zu den Neutronen-Wirkungsquerschnitten weitere spezifische nukleare Daten relevant, die den Nuklidaufbau und Zerfall beeinflussen, nämlich Spaltausbeuten und Zerfallskonstanten. Diese sind, ebenso wie die Wirkungsquerschnitte, mit Unsicherheiten behaftet. Diese Unsicherheiten stehen im Programmsystem SCALE derzeit nicht in aufbereiteter Form zur Verfügung. Daher wurde zunächst eine geeignete Datenquelle für diese Unsicherheiten ermittelt. Es zeigte sich, dass die ENDF/B-VII-Basisfiles diese Unsicherheiten in einem großen Umfang enthalten. Die numerischen Werte dieser Unsicherheiten müssen daher aus diesen Files extrahiert und in eine Form gebracht werden, die für das Sampling-Modul MEDUSA aus dem XSUSA/SUSA-System zugänglich ist. Auf der Basis dieser Daten und unter der Annahme von Normalverteilungen werden stochastisch Variationen erzeugt. Dies erfolgt für Spaltausbeuten und Halbwertszeiten. Mit diesen Variationen wird eine Vielzahl modifizierter Datenbibliotheken erzeugt, die dann anstatt den Bibliotheken mit den Nominalwerten vom Modul ORIGEN-S aus der SCALE-Abbrandsequenz TRITON zur Nuklidinventarberechnung verwendet werden können. Wegen der großen Anzahl von unsicheren Parametern (allein bei den Spaltausbeuten gibt es weit über 20.000 Werte mit Unsicherheiten) waren wesentliche datentechnische Änderungen am Sampling-Modul MEDUSA und den Sensitivitätsmodulen RISUS und SAMOS erforderlich. Details zur Implementierung sind in zwei technischen Notizen (siehe Anhang A) beschrieben.

Die Berechnungssequenz ist schematisch in Abb. 6.4 dargestellt. Zusätzlich zu den Variationsparametern für die Neutronen-Wirkungsquerschnitte stehen nun variierte Abbranddaten-Bibliotheken zur Verwendung mit ORIGEN zur Verfügung (siehe blauer Kasten links unten).

Es stellt sich heraus, dass unter nur geringen Einbußen an Rechengenauigkeit eine Vereinfachung angewandt werden kann, die, je nach berechneter Anordnung, zu einer deutlichen Rechenzeiteinsparung führen kann. Diese beruht auf der Tatsache, dass in der Spektralrechnung die Zusammensetzung des Brennstoffs nur einen geringen Einfluss auf die resultierenden resonanzabgeschirmten mikroskopischen Wirkungsquerschnitte haben. Da es sich auch zeigt, dass die Unsicherheiten in den Nukliddichten während der Abbrandrechnung nur moderat sind, insbesondere für die wichtigen Isotope ^{235}U , ^{238}U und ^{239}Pu , kann die Spektralrechnung für jeden Abbrandschritt bei den Nominalwerten der Nukliddichten durchgeführt werden. Damit ist es lediglich nötig,

eine Referenz-Abbrandrechnung durchzuführen und die Bibliotheken mit den mikroskopischen Wirkungsquerschnitten abzuspeichern; diese können dann auch für die Rechnungen mit variierten Daten verwendet werden. Die entsprechende Berechnungssequenz ist in Abb. 6.5 dargestellt.

Es zeigte sich /MAR 13/, /MAR 14/, dass in LWR-Brennelement-Abbrandberechnungen für die Unsicherheit im Multiplikationsfaktor die Unsicherheiten in den Neutronen-Wirkungsquerschnitten den Hauptbeitrag leisten, die Unsicherheiten in den Spaltausbeuten eine untergeordnete Rolle spielen, und die Unsicherheiten in den Zerfallsdaten vergleichsweise bedeutungslos sind. Bei den Unsicherheiten der Nuklidinventare für abgebrannte Zustände spielen für die Aktiniden nur die Unsicherheiten in den Neutronen-Wirkungsquerschnitten eine wesentlich Rolle, bei den Spaltprodukten können auch die Unsicherheiten in den Spaltausbeuten maßgeblich sein. Die Unsicherheiten in den Zerfallsdaten sind in den meisten Fällen vernachlässigbar, können aber für einige Spaltprodukt-Isotope relevant sein; dies wird gegenwärtig untersucht.

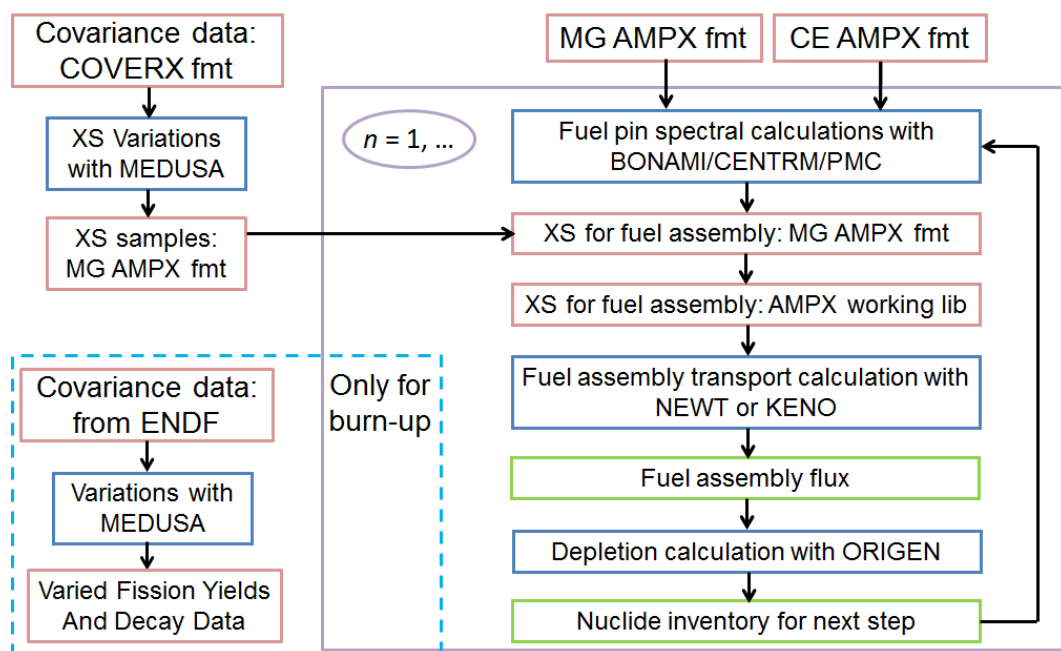


Abb. 6.4 Berechnungskette für Unsicherheitsanalysen mit XSUSA bezüglich der Unsicherheiten in Neutronen-Wirkungsquerschnitten und abbrandspezifischen Daten für TRITON-Abbrandberechnungen

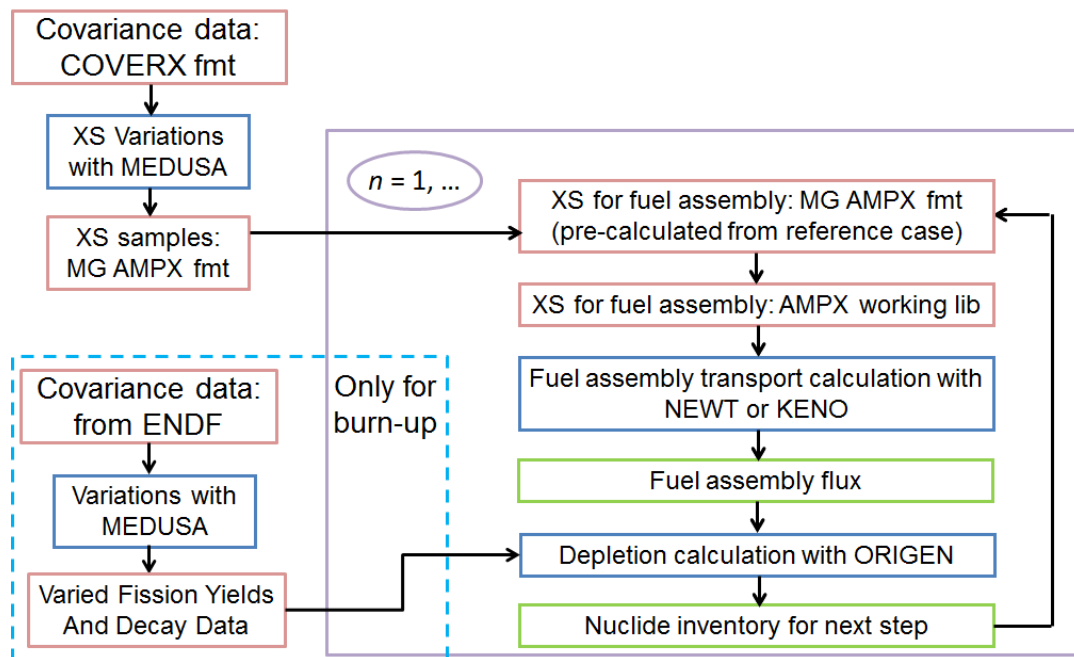


Abb. 6.5 Vereinfachte Berechnungskette für Unsicherheitsanalysen mit XSUSA bezüglich der Unsicherheiten in Neutronen-Wirkungsquerschnitten und abbrandspezifischen Daten für TRITON-Abbrandberechnungen

Die Methodik wurde auf Abbrandrechnungen für ein SWR- und ein DWR-Brennelement im Rahmen des UAM-LWR-Benchmark Phase 2 /BLY 13/ angewendet; dies wird in Kap. 6.4 beschrieben.

Es bleibt anzumerken, dass in den ENDF/B-VII-Basisfiles nur Unsicherheiten für die Spaltausbeuten in Form von Varianzen enthalten sind, aber keine Kovarianzen zwischen den einzelnen Werten. Gegenwärtig wird international diskutiert (siehe z. B. Beiträge zum UAM-8-Workshop /NEA 14/), dass die Berücksichtigung von Kovarianzen zu einer Reduktion der Unsicherheiten für einige Nuklidinventare führen kann. Es ist angekündigt, dass in der nächsten Version von SCALE6 Kovarianzmatrizen für die Spaltausbeuten enthalten sein werden. Bislang ist dies nicht der Fall; in der zu Redaktionsschluss aktuellen Beta-Version (SCALE 6.2b4) sind zwar Datenbibliotheken mit variierten Werten für die Spaltausbeuten verfügbar, aber nicht die zugrundeliegenden Kovarianzmatrizen selbst. Die entsprechenden XSUSA-Module wurden so angepasst, dass bei Verfügbarkeit der Einfluss dieser Kovarianzdaten auf Ergebnisunsicherheiten untersucht werden kann. Dies wird im Folgenden beschrieben.

Bislang sind die relevanten Werte für die Spaltausbeuten und deren Unsicherheiten in einfach strukturierten Textdateien abgespeichert. Dabei bezeichnet der Name der

Textdatei das gespaltene Aktinid, also etwa 92238.fis für U-238; die Struktur des Inhalts ist in Abb. 6.8 skizziert.

```

2.00000+06
...
2.40660+05  1.18001-10  1.17977-10  7.55051-11
2.50660+05  1.94001-08  1.940010-8  1.241610-8
2.60660+05  2.77001-07  2.770010-7  1.772810-7
2.70660+05  4.16002-07  4.160020-7  2.662410-7
2.80660+05  6.87003-08  6.870030-8  4.396820-8
2.90660+05  9.57004-10  9.57004-10  6.12483-10
3.00660+05  1.16000-12  1.16000-12  7.42403-13
3.10660+05  0.00000+00  0.000000+0  0.000000+0
3.20660+05  0.00000+00  0.000000+0  0.000000+0
2.40670+05  1.65000-11  1.64967-11  1.05579-11
...

```

Abb. 6.6 Struktur einer Textdatei für die Spaltausbeuten von U-238 ohne Korrelationen

Der Inhalt besteht aus bis zu drei Blöcken, beginnend mit der Energie in eV des spaltenden Neutrons, die den schnellen, epithermischen und thermischen Energiebereich repräsentieren; in Abb. 6.8 ist dies 2.00000+06 für 2 MeV, also der schnelle Energiebereich. Die eigentlichen Werte für die Spaltausbeuten sind in vier Spalten angegeben. Die erste Spalte ist die ZAID des erzeugten Nuklids, also Ladungszahl und Massenzahl, in Gleitkommadarstellung; 2,40660+05 etwa bezeichnet Cr-66 (Ladungszahl = 24, Massenzahl = 66). Die sechste Stelle gibt an, ob es sich um den Grundzustand (0) oder einen metastabilen Zustand (1) handelt. Die zweite Spalte enthält die Werte, die in den ORIGEN-Bibliotheken enthalten sind, also die zur Lösung der Abbrandgleichungen verwendet werden. Die Summe dieser Werte ergibt für jedes Aktinid und jede Energie immer 2.0 (bei jeder Spaltung werden zwei Spaltprodukte erzeugt). Die dritte Spalte enthält die Werte, ebenfalls mit der Summe 2.0, die in der evaluierten Datenbibliothek ENDF/B-VII.1 abgespeichert sind, und die den Werten in den ORIGEN-Bibliotheken zugrunde liegen. In den meisten Fällen sind ORIGEN- und ENDF/B-VII.1-Werte in der Tat völlig oder nahezu identisch; vereinzelt sind auch größere Unterschiede zu beobachten. In der vierten Spalte befinden sich die Unsicherheiten aus der ENDF/B-VII.1-Bibliothek als absolute Werte. Das Auswürfeln von variierten Werten mit dem Programm MEDUSA kann hier ohne größeren Aufwand bewerkstelligt werden: Für alle Aktiniden, Energiebereiche und Spaltprodukte, für die überhaupt von Null verschiedene Unsicherheiten vorhanden sind (ca. 26.000 Werte), wird zunächst die relative Unsicherheit als Quotient der vierten und dritten Spalte ermittelt. Anschließend wird eine Schleife durchlaufen, in der MEDUSA immer wieder auf die entsprechenden Werte angewendet wird; dies ist zulässig, da mangels Korrelationen alle Werte als unab-

hängig voneinander angenommen werden können. Es ist lediglich Vorsorge zu treffen, dass keine negativen Werte für die Spaltausbeuten erzeugt werden. Dies kann bei Normalverteilungen leicht vorkommen, da die Unsicherheiten häufig sehr groß sind; für die Werte in Abb. 6.8 etwa ist die relative Unsicherheit 64 %. Die dadurch möglichen unphysikalischen negativen Werte sind durch geeignetes Abschneiden der Normalverteilungen zu verhindern. Außerdem ist durch Wahl einer jeweils neuen Startzufallszahl sicherzustellen, dass keine künstlichen Korrelationen zwischen den unsicheren Parametern entstehen. Die derart bestimmten Variationen werden schließlich auf die Werte aus den ORIGIN-Bibliotheken angewendet. Dabei entstehen im Allgemeinen für jeden Satz von Variationen Werte für die Spaltausbeuten, deren Summe sich geringfügig von 2.0 unterscheidet. Dies wird durch geeignetes Nachnormieren wiederhergestellt.

Für den Fall, dass Korrelationen zwischen den Spaltausbeuten existieren, kann das Erzeugen der Variationen nicht mehr individuell für jedes Spaltprodukt durchgeführt werden. Das Programm MEDUSA in seiner ursprünglichen Form bietet zwar die Möglichkeit, im Eingabedatensatz neben den Erwartungswerten und Unsicherheiten der Parameter auch Korrelationskoeffizienten anzugeben. Für eine Anzahl von unsicheren Parametern von 1000 und mehr ist dies jedoch nicht handhabbar. Daher wurde MEDUSA zum neuen Programm FISMEDUSA derart umgestaltet, dass alle Parameter (Varianzen und Kovarianzen) direkt aus Dateien in Matrixdarstellung gelesen werden. Ein Ausschnitt aus einer solchen Matrix, der den Werten in Abb. 6.8 entspricht, ist in Abb. 6.9 dargestellt. Dabei handelt es sich wieder um relative Unsicherheitswerte.

```

.....
0.6400  0.      0.      0.      0.      0.      0.      0.      0.      0.
0.      0.6400  0.      0.      0.      0.      0.      0.      0.      0.
0.      0.      0.6400  0.      0.      0.      0.      0.      0.      0.
0.      0.      0.      0.6400  0.      0.      0.      0.      0.      0.
0.      0.      0.      0.      0.6400  0.      0.      0.      0.      0.
0.      0.      0.      0.      0.      0.6400  0.      0.      0.      0.
0.      0.      0.      0.      0.      0.      0.6400  0.      0.      0.
0.      0.      0.      0.      0.      0.      0.      0.6400  0.      0.
0.      0.      0.      0.      0.      0.      0.      0.      0.6400  0.
0.      0.      0.      0.      0.      0.      0.      0.      0.      0.6400
.....

```

Abb. 6.7 Struktur einer Datei für die Spaltausbeuten von U-238 im schnellen Energiebereich in Matrixdarstellung

Wie bereits gesagt liegen gegenwärtig noch keine Werte für Korrelationen der Spaltausbeuten vor, d. h. die Außerdiagonalelemente der entsprechenden Kovarianzmatrizen sind alle Null, siehe Abb. 6.9. Jedoch kann hier die Matrixdarstellung dazu ver-

wendet werden, die Funktionsfähigkeit von FISMEDUSA durch Vergleich mit den ursprünglichen Ergebnissen zu überprüfen. Dies wurde erfolgreich durchgeführt.

Bei der Implementierung von FISMEDUSA musste beachtet werden, dass die Kovarianzmatrix für unterschiedliche Aktiniden verschieden groß sein kann, und dass sie auch für die Varianzen Werte von Null enthalten kann. Dies ist dann der Fall, wenn es für ein Spaltprodukt keine Spaltausbeute gibt, oder wenn zu einer Spaltausbeute keine Unsicherheit gegeben ist. Weiterhin mussten Vorkehrungen getroffen werden für den Fall, dass bei Vorhandensein von Kovarianzen die Matrix nicht positiv semidefinit ist, diese Positiv-Semidefinitheit hergestellt werden kann. Dies wird durch Absenken der Kovarianzen unter Beibehaltung der Varianzen erreicht. Ferner muss noch im Hinblick auf spätere Sensitivitätsanalysen sichergestellt werden, dass gleichzeitig mit der Erzeugung der zufälligen Variationen Daten erzeugt und abgespeichert werden, die Eigenschaften der Kovarianzmatrizen beinhalten, also Informationen darüber, welche Varianzen Null sind, und welche vollständigen Abhängigkeiten zwischen den unsicheren Parametern existieren. Sobald alle Sätze von Variationen für die Werte der Spaltausbeuten bestimmt sind, werden sie wie für den Fall ohne Korrelationen schließlich auf die Werte aus den ORIGEN-Bibliotheken angewendet. Die Summen werden dann wieder auf 2.0 nachnormiert; dies kann sich als redundant erweisen, da diese Zwangsbedingung bereits in der Kovarianzmatrix enthalten sein sollte.

6.3 Anwendung der „schnellen GRS-Methode“ bei Abbrandberechnungen

Im BMWi-Forschungsvorhaben RS1503 „Entwicklung und Einsatz von Neutronentransportmethoden und Unsicherheitsanalysen für Reaktorkernberechnungen“ /ZWE 13/ wurde mit der sog. „schnellen GRS-Methode“ ein Verfahren entwickelt, mit dessen Hilfe sich bei Kritikalitätsberechnungen mit Monte-Carlo-Transportprogrammen Unsicherheitsanalysen mit erheblicher Rechenzeiteinsparung gegenüber herkömmlichen Methoden durchführen lassen.

Bei Verwendung eines Monte-Carlo-Codes entsteht eine zusätzliche Quelle für Unsicherheiten aus der endlichen Anzahl von Neutronenschicksalen im Laufe der Monte-Carlo-Simulation ("aleatorische Unsicherheit"). Diese kommt zur Unsicherheit aufgrund der unvollständigen Kenntnis der Parameter ("epistemische Unsicherheit") hinzu. Wenn daher ein Monte-Carlo-Code zur Beschreibung des Neutronentransports ange-

wendet wird, wird normalerweise eine ausreichend große Anzahl von Neutronenschicksalen für jede Berechnung mit variierten nuklearen Daten verwendet, so dass die aleatorische Unsicherheit vernachlässigbar klein wird, und die beobachtete Ergebnisunsicherheit ausschließlich der epistemischen Unsicherheit zugeschrieben werden kann. Weiterer Aufwand zur Trennung der aleatorischen und epistemischen Unsicherheiten ist nicht notwendig, so dass die übliche eindimensionale epistemische Unsicherheitsanalyse durchgeführt werden kann.

Für viele Anwendungsfälle ist es nicht erforderlich, die vollständige Reihe von Rechenläufen mit einer derart hohen Genauigkeit durchzuführen. In der Tat ist es möglich, zuverlässige Ergebnisse für die epistemische Unsicherheit mit einer deutlich reduzierten Anzahl von Neutronenschicksalen in jedem Rechenlauf zu erhalten, so dass die Gesamtzahl der Neutronenschicksale für die ganze Serie aller Berechnungen von derselben Größenordnung ist wie für die einzelne, genauere Referenzrechnung. Die Quintessenz der Methode besteht darin, zwei Serien von Berechnungen mit jeweils stark reduzierter Anzahl von Monte-Carlo-Schicksalen durchzuführen, anstelle einer einzigen Serie mit der vollen Anzahl der Monte-Carlo-Schicksale. Wesentlich ist, dass diese beiden Serien mit identischen Variationen der nuklearen Daten für jedes Paar von Berechnungen durchgeführt werden, aber mit verschiedenen Monte-Carlo-Zufallszahlen (durch die Wahl verschiedener Zufallszahlen-Startwerte). Durch Auswertung der Kovarianz zwischen den beiden Berechnungsreihen ist es möglich, die aleatorische Unsicherheit des Ergebnisses nahezu zu eliminieren. Die Details dieser „schnellen GRS-Methode“ sowie die mathematischen Grundlagen werden in /ZWE 12/ diskutiert.

Für Kritikalitätsberechnungen, in denen praktisch die gesamte Rechenzeit durch die Monte-Carlo-Simulation für den Neutronentransport verwendet wird, ist dieses Verfahren sehr effizient, und kann die erforderliche Zeit auf die Größenordnung einer einzigen Monte-Carlo-Simulation mit Nominaleingabedaten reduzieren. Dieses Verfahren ist mit den in den vorigen Abschnitten beschriebenen Abbrand-Rechensequenzen nicht einsetzbar, da bei diesen der Neutronentransport mit dem deterministischen Programm NEWT beschrieben wird. Allerdings können Abbrandberechnungen auch mit Monte-Carlo-Codes für den Neutronentransport durchgeführt werden. So bietet die TRITON-Sequenz die Möglichkeit, NEWT durch den Monte-Carlo-Code KENO-Va oder KENO-VI zu ersetzen. Jedoch ist auch dann der Zeitgewinn erheblich geringer als bei einer reinen Kritikalitätsberechnung, da ein nicht zu vernachlässigender Teil der gesamten Rechenzeit durch die deterministische Nuklidinventarberechnung verbraucht wird, auf

die die „schnelle GRS-Methode“ keinen Einfluss hat. Zusätzlich ist bei der Durchführung der TRITON-Sequenzen eine große Menge von Schreib- und Leseoperationen erheblicher Datenmengen erforderlich, die den Rechenzeitgewinn nochmals reduzieren. Dennoch ist es empfehlenswert, auch bei Abbrandberechnungen den Einsatz der „schnellen GRS-Methode“ in Erwägung zu ziehen, da die Rechenzeiteinsparung im stochastischen Teil der Rechenkette erheblich ist, und sich der Rechenzeitbedarf für Schreib- und Leseoperationen durch Hardware- und Softwaremaßnahmen (z. B. Halten der Daten im Hauptspeicher während der gesamten Berechnungssequenz, Verwenden von extrem schnellen Speichermedien wie Solid State Disks) noch reduzieren lässt.

6.4 Arbeiten zum UAM-LWR-Benchmark Phase 2

Im Rahmen der Teilnahme am UAM-LWR-Benchmark wurde XSUSA verwendet, um Unsicherheitsanalysen in Abbrandberechnungen für zwei LWR-Uran-Brennelemente durchzuführen, die in Phase 2 des Benchmarks /BLY 13/ spezifiziert sind. Details dazu sind auch in /ZWE 14/ zu finden. Es handelt sich um ein SWR-Brennelement der Anlage Peach Bottom 2 und ein DWR-Brennelement der Anlage Three Mile Island 1.

Abb. 6.8 zeigt eine schematische Darstellung der Brennelemente. Das SWR-Brennelement besitzt 7x7 Brennstäbe mit U-235-Anreicherungen zwischen 1,33 und 2,93 % („4“ – „1“) sowie UO_2/Gd -Brennstäbe („5A“, „6A“); die Position des Steuerelements ist durch „+“ markiert. Das DWR-Brennelement besitzt 15x15-17 Brennstäbe mit einer ^{235}U -Anreicherung von 4,12 % („1“) sowie UO_2/Gd -Brennstäbe („2A“) und Führungsrohre für Steuerstäbe bzw. Messlanzen („G“, „I“). Für weitere Details wird auf /BLY 13/ verwiesen.

Für beide Brennelemente wurden Abbrandrechnungen mit TRITON/NEWT durchgeführt, für das SWR-Brennelement zusätzlich mit TRITON/KENO. Die Ergebnisse für die Multiplikationsfaktoren sind in Abb. 6.9 dargestellt.

Abb. 6.10 zeigt die Unsicherheiten in den Nuklidinventaren bei einem Abbrand von 40 GWd/t Schwermetall. Insgesamt sind diese für die meisten Nuklide in beiden Brennelementen sehr ähnlich, mit größeren Unterschieden für einzelne Nuklide wie ^{234}U .

+

4	3	3	2	2	2	3	1	1	1	1	1	1	1	1
3	2	1	1	1	1	2	1	1	1	1	1	1	1	1
3	1	5A	1	1	5A	1	1	1	G	1	1	G	1	1
2	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
2	1	1	1	6A	1	1	1	1	1	1	G	1	1	1
2	1	5A	1	1	1	2	1	1	G	1	1	1	1	1
3	2	1	1	1	2	2	1	1	1	1	1	1	2A	1
							1	1	1	1	1	1	1	1

Abb. 6.8 Schematische Darstellung des SWR-Brennelements (links) und des DWR-Brennelement-Viertels (rechts)

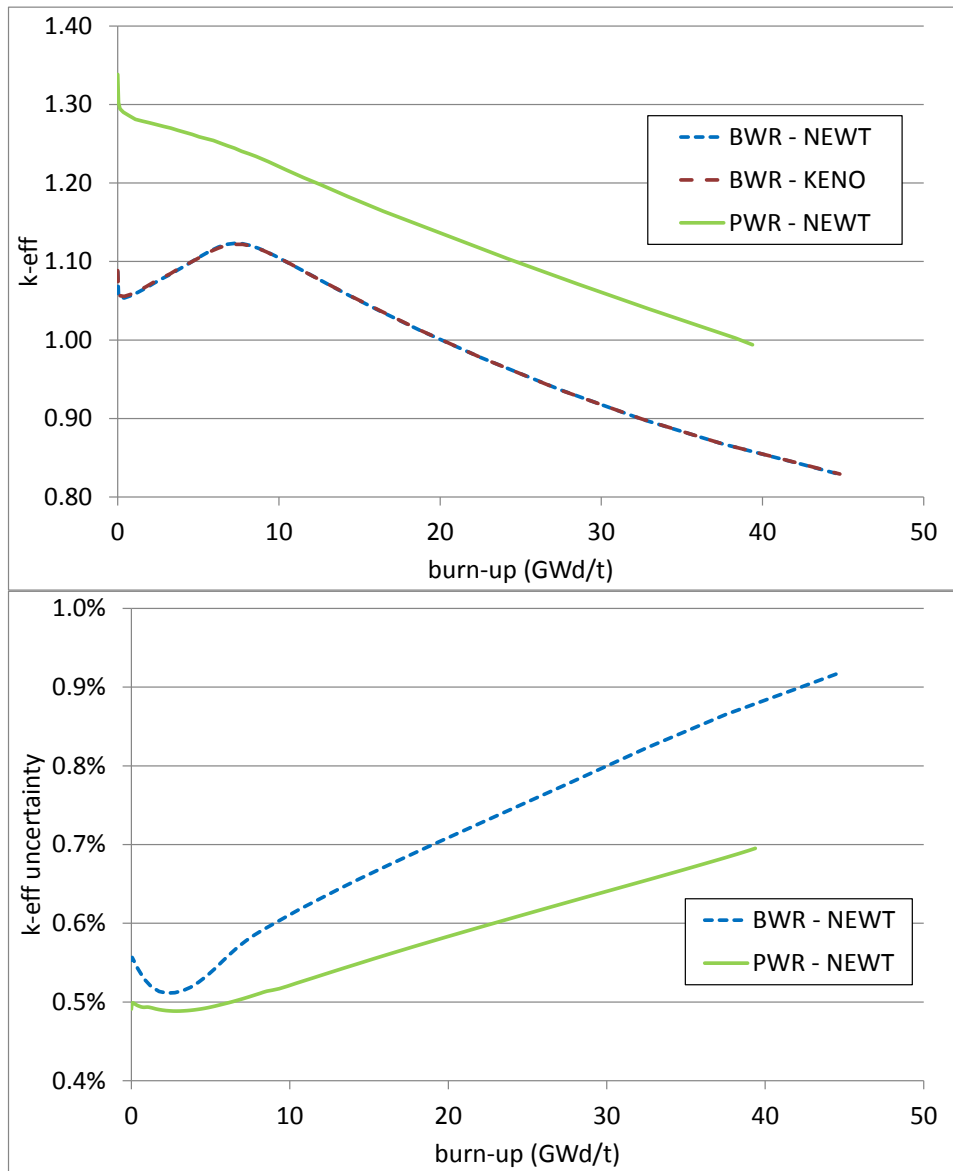


Abb. 6.9 Multiplikationsfaktoren als Funktion des Abbrands für das SWR- und das DWR-Brennelement (oben) und entsprechende 1 σ -Unsicherheiten

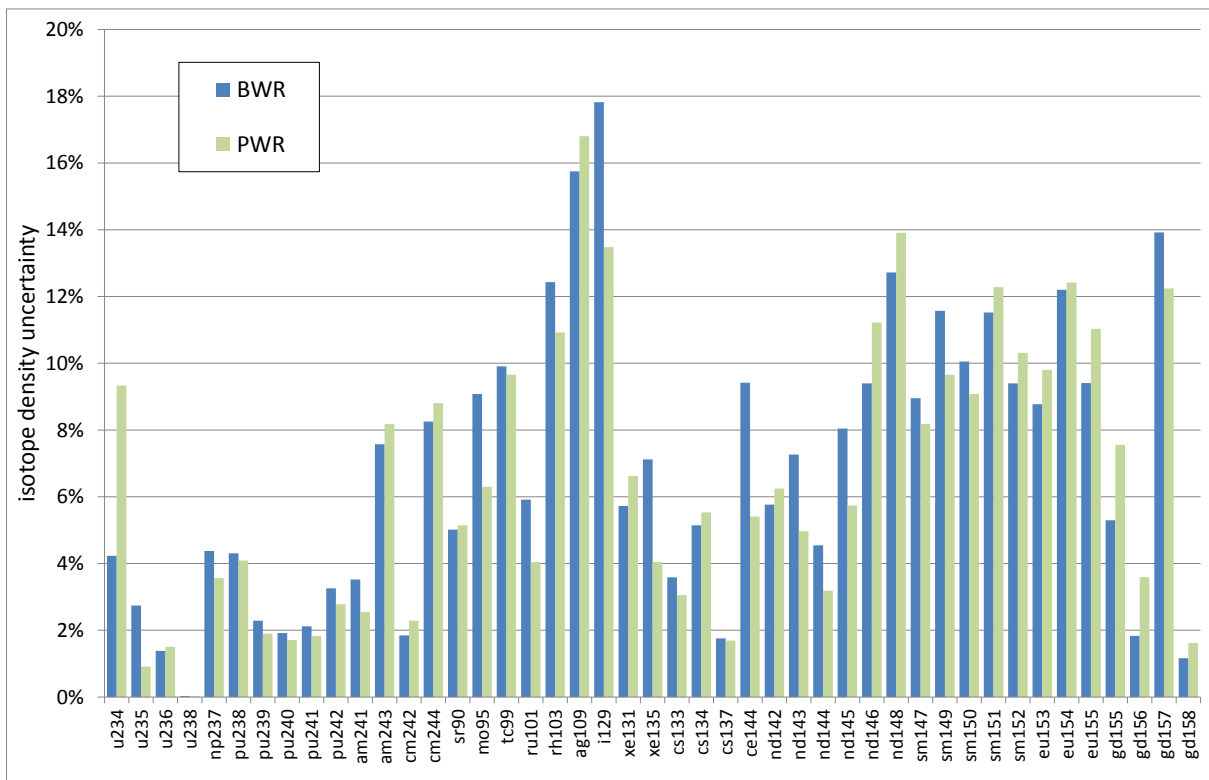


Abb. 6.10 1σ -Unsicherheiten der Nuklidinventare für das SWR- und das DWR-Brennelement bei einem Abbrand von 40 GWd/t Schwermetall

Als Beispiel für die Sensitivitätsanalyse bezüglich der Unsicherheiten in Neutronen-Wirkungsquerschnitten und Spaltausbeuten wurden einige Aktiniden und Spaltprodukte ausgewählt. Die Ergebnisse sind in Abb. 6.11 dargestellt. Bezüglich der Neutronen-Wirkungsquerschnitte wurde wieder eine Gruppen-Sensitivitätsanalyse durchgeführt, wobei in einer Gruppe jeweils eine bestimmte Reaktion eines bestimmten Nuklids zusammengefasst ist. Als Sensitivitätsmaß wird entsprechend der quadrierte multiple Korrelationskoeffizient R^2 verwendet. Bezüglich der Spaltausbeuten ist eine Einzel-Sensitivitätsanalyse geeignet, das entsprechende Sensitivitätsmaß ist der einfache Korrelationskoeffizient. Die beiden Diagramme in der oberen Reihe in Abb. 6.11 bestätigen, dass für die Aktiniden (hier ^{235}U und ^{243}Am) der Haupteinfluss von Unsicherheiten in Neutronen-Wirkungsquerschnitten herrührt. Bei den Spaltprodukten in der unteren Reihe sind für ^{157}Gd ebenfalls Unsicherheiten in Neutronen-Wirkungsquerschnitten ausschlaggebend, für ^{109}Ag jedoch Unsicherheiten in Spaltausbeuten.

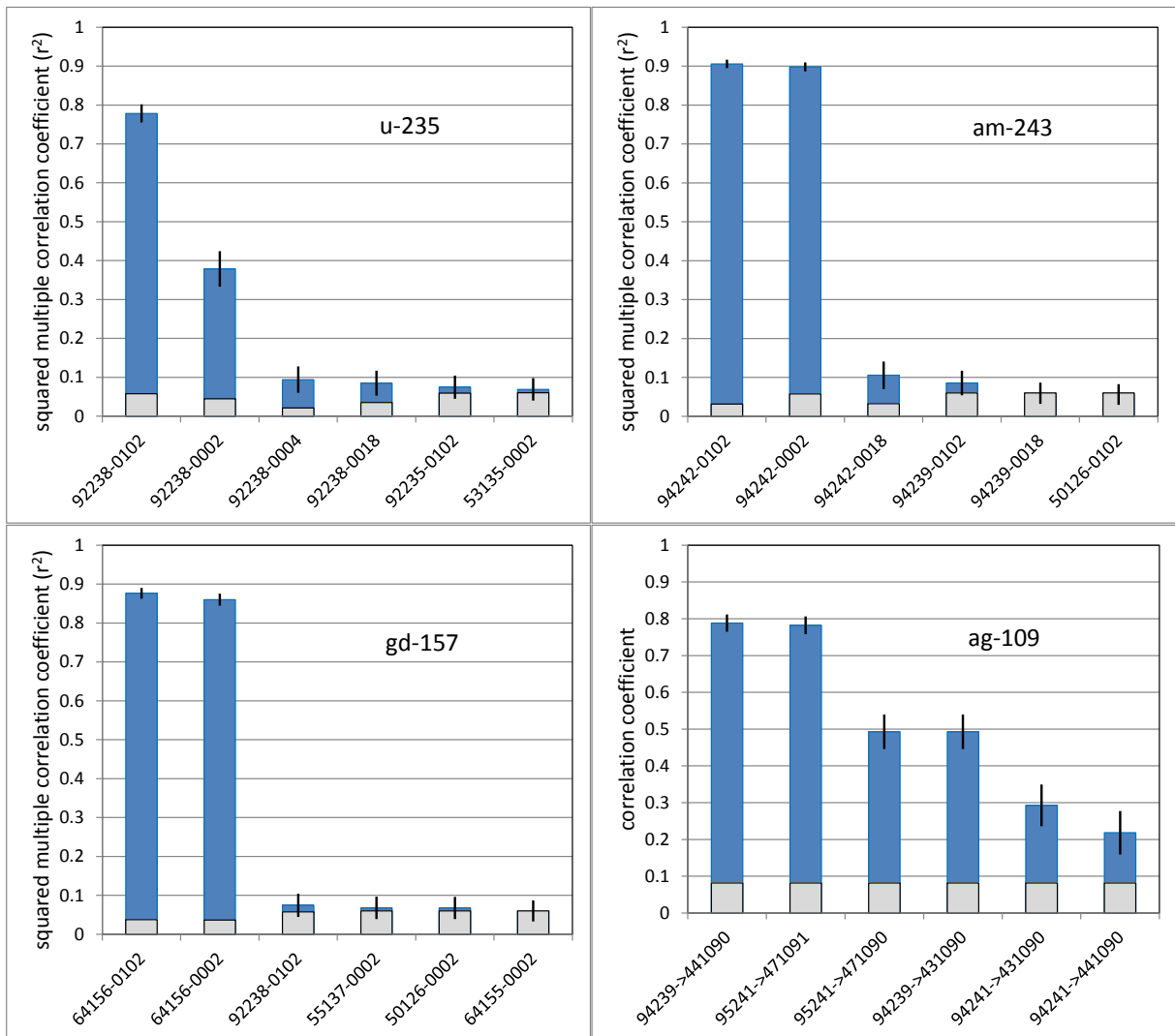


Abb. 6.11 Sensitivitätsmaße für verschiedene Nuklidichten beim Endabbrand des SWR-Brennelements mit entsprechenden 95%-Konfidenzintervallen und 95%-Signifikanzgrenzen

Schließlich wurden erste Untersuchungen für die SWR-Abbrandrechnung mit der „schnellen GRS-Methode“ durchgeführt, wobei als Neutronen-Transportprogramm der Monte-Carlo-Code KENO-Va verwendet wurde. Für die Nominalrechnung ergibt sich sehr gute Übereinstimmung zwischen der deterministischen und der Monte-Carlo-Methode (zum Multiplikationsfaktor siehe Abb. 6.9). Die Ergebnisse der „schnellen GRS-Methode“ für die Unsicherheit im Multiplikationsfaktor sind in Abb. 6.12 dargestellt. Wenn nur eine Serie von Rechnungen mit einer niedrigen Anzahl von Neutronen-Schicksalen ausgewertet wird, ergibt sich eine Unsicherheit, die deutlich höher ist als die wahre epistemische Unsicherheit, siehe die Ergebnisse, die mit „KENO Serie 1“ und „KENO Serie 2“ bezeichnet sind. Das liegt daran, dass diese Ergebnisse einen

erheblichen Anteil enthalten, der von der aleatorischen Unsicherheit der Monte-Carlo-Methode herrührt. Werden die beiden Berechnungsserien entsprechend der „schnellen GRS-Methode“ kombiniert, wird die aleatorische Unsicherheit nahezu eliminiert, und das Ergebnis stellt praktisch ausschließlich die epistemische Unsicherheit infolge der Unsicherheiten in den nuklearen Daten dar („KENO Serie 1 + 2“).

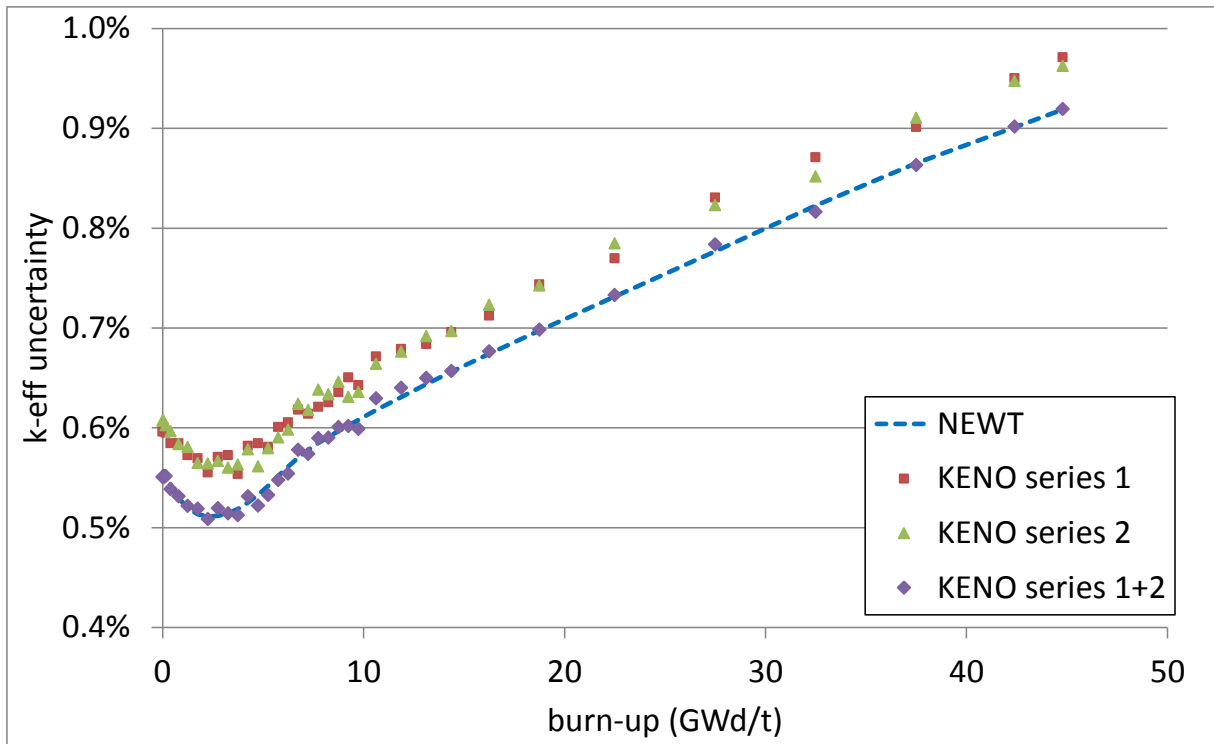


Abb. 6.12 1σ -Unsicherheiten im Multiplikationsfaktor als Funktion des Abbrands für das SWR-Brennelement, ermittelt mit NEWT, Serien von kurzen KENO-Rechnungen, und deren Kombination („schnelle GRS-Methode“)

7 Zusammenfassung

Der vorliegende Bericht gibt die Ergebnisse des BMWi-Forschungsvorhaben RS1513 wieder. Ziel der Arbeiten war einerseits die Aktualisierung des GRS-Abbrandprogrammsystems KENOREST zur Sicherstellung der Zukunftsfähigkeit der bestehenden Funktionalitäten, insbesondere zur Anwendung bei LWR-Systemen und zur gleichzeitigen Erweiterung der Anwendbarkeit auf Systeme mit schnellem Spektrum, und andererseits die Bereitstellung der in der GRS vorhandenen Methoden zur Unsicherheitsanalyse für den Bereich der Abbrandrechnungen.

Zur Überprüfung der Anwendbarkeit der Abbrandmethoden der GRS für schnelle Systeme wurde zunächst eine umfangreiche Recherche möglicher Datenquellen durchgeführt. Da sich die Verfügbarkeit geeigneter experimenteller Daten zur Inventarbestimmung als ausgesprochen schwierig erwies, wurden zunächst kritische Experimente zur Überprüfung der stationären Flussberechnung und internationale Code-zu-Code-Rechenbenchmarks zur Abbrandberechnung herangezogen und um geeignete Unsicherheitsanalysen ergänzt.

Im Anschluss an umfangreiche Voranalysen erfolgte die Entwicklung der modularen Schnittstellen für das Programm KENOREST sowie des Inventarberechnungsprogramms VENTINA. Für letzteres konnten erste vielversprechende Testrechnungen durchgeführt werden. Die durch die Modularisierung gewonnene Flexibilität in den eingesetzten Modulen wird reflektiert durch die Umbenennung von KENOREST in MOTIVE. Für die Bereitstellung der notwendigen Zerfallsdaten und Spaltausbeuten sowie zur Erstellung der Nuklidketten für die Inventarberechnung wurde ein Programm entwickelt, das diese Daten aus den Bibliotheksdateien im ENDF-Format ausliest und weiterverarbeitet. Durch die Verwendung graphentheoretischer Methoden konnte eine vereinfachte Prozessierung und eine Möglichkeit zur graphischen Darstellung der ausgelesenen Daten erzielt werden.

Im Bereich der Unsicherheitsanalysen wurde im bestehenden Programm XSUSA die Möglichkeit geschaffen, auch Unsicherheiten in Spaltausbeuten und Zerfallsdaten zu verarbeiten. Die Anwendung dieser Methodik wurden im Rahmen des UAM-LWR-Benchmark Phase 2 demonstriert. Weiterhin wurde auch die „schnelle GRS-Methode“ zur Einsparung von Rechenzeit bei Unsicherheitsanalysen auf Abbrandrechnungen übertragen. Durch die gemeinsame Anbindung von Unsicherheiten aus den Program-

men XSUSA und SUnCISTT wurden schließlich die Voraussetzungen für eine gemeinsame Unsicherheitsanalyse von Unsicherheiten in den nuklearen Daten und in technischen Parametern geschaffen.

Literaturverzeichnis

- /BEH 12/ M. Behler, M. Bock, L. Gallner, V. Hannstein, R. Kilger, M. Klein, B. Krzykacz-Hausmann, E.F. Moser, A. Pautz, Y. Perin, F. Puente-Espel, A. Seubert, A. Sureda, K. Velkov, M. Wagner, W. Zwermann, „Weiterentwicklung und Validierung von Rechenmethoden zu Hochabbrand, Aktivierung und Abschirmung“, Abschlussbericht, GRS-A-3680, Juli 2012.
- /BEH 14/ M. Behler, M. Bock, F. Rowold, M. Stuke, “SUnCISTT – A Generic Code Interface for Uncertainty and Sensitivity Analysis”, Probabilistic Safety Assessment and Management PSAM 12, Juni 2014, Honolulu, Hawaii.
- /BLA 11/ D. Blanchet, L. Buiron, N. Stauff, T. K. Kim, T. Taiwo, “AEN – WPRS Sodium Fast Reactor Core Definitions (Version 1.2 – September 19th)”, 2011, erhältlich bei der OECD/NEA Data Bank.
- /BLY 13/ T. Blyth, M. Avramova, K. Ivanov, E. Royer, E. Sartori, O. Cabellos, H. Ferroukhi, E. Ivanov, “Benchmark for Uncertainty Analysis in Modelling (UAM) for Design, Operation and Safety Analysis of LWRs, Volume I: Specification and Support Data for the Core Cases (Phase II)”, 2013, erhältlich bei der OECD/NEA Data Bank.
- /BOC 12/ M. Bock, M. Wagner, “Estimation of the Impact of Manufacturing Tolerances on Burn-Up Calculations using Monte Carlo Techniques”, Jahrestagung Kerntechnik 2012, Stuttgart, Mai 2012.
- /EYN 11/ G. Van den Eynde, A Stankovsky, E. Malambu, T. Vidmar, „ALEPH2 Monte Carlo Burn-up Code“, ICNC-2011, Edinburgh (2011).
- /GOO 13/ J.T. Goorley et al., Initial MCNP6 Release Overview – MCNP6 version 1.0, Los Alamos National Laboratory, LA-UR-13-22934 (2013).
- /GUI 14/ N. Guillard, W. Bernnat, W. Zwermann, I. Pasichnyk, Beitrag zum 4th Meeting of the WPRS/ERGPANS/Sodium Fast Reactor Task Force.
<https://www.oecd-nea.org/download/wprs-sfr/4thmeeting.html> [letzter Zugriff am 15.12.2015].

- /HAE 07/ W. Haeck, B. Verboomen, "An Optimum Approach to Monte Carlo Burnup", Nuclear Science and Technology, 156, 180-196 (2007).
- /HDF 15/ The HDF Group, Hierarchical Data Format, Version 5, 1997-2015.
<http://www.hdfgroup.org/HDF5/> [letzter Zugriff am 15.12.2015].
- /HER 11/ M. Herman, "Development of ENDF/B-VII.1 and Its Covariance Components", Journal of the Korean Physical Society, 59, pp.1034–1039 (2011).
- /HES 99/ U. Hesse, S. Langenbuch, „KENOREST, eine direkte Kopplung von KENO und OREST“, GRS-A-2783, Dezember 1999.
- /HES 07/ U. Hesse, S. Langenbuch, W. Zwermann, D. Porsch, W. Bernnat, "Comparison of Burn-up Calculations for a UO₂ PWR Fuel Assembly", Annual Meeting on Nuclear Technology 2007, Karlsruhe, Germany.
- /HIN 83/ A. C. Hindmarsh, "ODEPACK, A Systematized Collection of ODE Solvers," in Scientific Computing, R. S. Stepleman et al. (eds.), North-Holland, Amsterdam, 1983.
- /HOR 13/ N. Horelik, B. Herman, Benchmark for Evaluation And Validation of Reactor Simulations, MIT Computational Reactor Physics Group, October 2013.
- /IAE 04/ IRPHE-KNK-II-Archive, IAEA1415/01, August 2004.
- /ISO 11/ A. Isotalo, P. Aarnio, "Comparison of depletion algorithms for large systems of nuclides." Ann. Nucl. Energy, 38 (2011) 261-268.
- /IVA 11/ K. Ivanov, O. Cabellos, Benchmark for Uncertainty Analysis in Modelling (UAM) for Design, Operation and Safety Analysis of LWRs – PWR Pin-Cell Burnup Benchmark, Version 1.0, 2011, erhältlich bei der OECD/NEA Data Bank.
- /IVA 13/ E. Ivanov, A. Duranti und e. al., „SNEAK 7A and 7B Pu-fueled Fast Critical Assemblies in the Karlsruhe Fast Critical Facility,“ in International Handbook of Evaluated Reactor Physics Benchmark Experiments, 2013.

- /JUN 12/ Y.-S. Jung, S.-W. Park und H.-G. Joo, „Implementation and Verification of Quadratic Depletion Method in Direct Whole Core Calculation Code nTRACER,“ Transactions of the Korean Nuclear Society Spring Meeting, Jeju, Korea, May 17-18, 2012.
- /JUN 13/ Y.-S. Jung, „Development of Practical Numerical Nuclear Reactor for High Fidelity Core Analysis,“ Phd Thesis, Seoul National University, Seoul, 2013.
- /JUN 13a/ Y. S. Jung, C. B. Shim, C. H. Lim und H. G. Joo, „Practical numerical reactor employing direct whole core neutron transport and subchannel thermal/hydraulic solvers,“ Annals of Nuclear Energy, Bd. 62, pp. 357-374, 2013.
- /JUN 14/ Y. S. Jung, private Kommunikation, 2014.
- /KIL 08/ R. Kilger, U. Hesse, S. Langenbuch: “Isotopic inventory calculations taking into account 2D/3D environment conditions during fuel irradiation”, PHY-SOR 2008, Interlaken, Switzerland (2008).
- /LAN 03/ X-5 Monte Carlo Team, “MCNP – A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5”, LA-UR-03-1987 (2003).
- /LEE 13/ D. Lee, J. Rhodes und K. Smith, „Quadratic Depletion Method for Gadolinium Isotopes in CASMO-5,“ Nuclear Science and Engineering, Bd. 174, pp. 79-86, 2013.
- /LEP 11/ J. Leppänen, “PSG2 / Serpent—A Continuous-Energy Monte Carlo Reactor Physics Burnup Calculation Code,“ VTT Technical Research Centre of Finland; available on the Internet at <http://montecarlo.vtt.fi> (2011) [letzter Zugriff am 15.12.2015].
- /LEP 13/ J. Leppänen, M. Pusa, T. Vittanen, V. Valtavirta, T. Kaltiaisenaho, „The Serpent Monte Carlo code: Status, development and applications in 2013“, Ann. Nuc. Energy 82, 142-150, 2015.

- /MAR 13/ J.S. Martinez, W. Zwermann, L. Gallner, F. Puente-Espel, O. Cabellos, K. Velkov, V. Hannstein, "Towards a Complete Propagation of Nuclear Data Uncertainties in Depletion Calculations", Jahrestagung Kerntechnik 2013, Berlin, Germany.
- /MAC 94/ R.E. MacFarlane, D.W. Muir, "The NJOY Nuclear Data Processing System", Version 91, LA-12740-M (October 1994).
- /MAR 14/ J.S. Martinez, W. Zwermann, L. Gallner, F. Puente-Espel, O. Cabellos, K. Velkov, V. Hannstein, Propagation of Neutron Cross Section, Fission Yield, and Decay Data Uncertainties in Depletion Calculations, Nuclear Data Sheets 118 (2014) 480–483.
- /NEA 13/ Sodium Fast Reactor Core Feed-back and Transient Response Task Force (SFR-FT Task Force).
<https://www.oecd-nea.org/download/wprs-sfr/index.html> [letzter Zugriff am 15.12.2015].
- /NEA 13b/ "International Handbook of Evaluated Reactor Physics Benchmark Experiments", NEA/NSC/DOC/(2006)1, March 2013.
- /NEA 14/ Expert Group on Uncertainty Analysis in Modelling (UAM-LWR).
<https://www.oecd-nea.org/science/wprs/eqrs/ltb/UAM/> [letzter Zugriff am 15.12.2015].
- /PUS 10/ M. Pusa, J. Leppänen, „Computing the Matrix Exponential in Burnup Calculations”, Nuclear Science and Engineering 164, 140-150 (2010).
- /PUS 11/ M. Pusa, "Rational Approximations to the Matrix Exponential in Burnup Calculations", Nuclear Science and Engineering 169, 155-167 (2011).
- /PUS 13/ Pusa, M., "Numerical methods for nuclear fuel burnup calculations." D.Sc. Thesis, Aalto University (2013). [VTT Science 32](#) [letzter Zugriff am 15.12.2015].

- /SAN 09/ A. Santamarina, D. Bernard, P. Blaise, M. Coste, A. Courcelle, T.D. Huynh, C. Jouanne, P. Leconte, O. Litaize, S. Mengelle, G. Noguère, J-M. Ruggiéri, O. Sérot, J. Tommasi, C. Vaglio, J-F. Vidal, "The JEFF-3.1.1 Nuclear Data Library", JEFF Report 22, NEA No. 6807 (2009).
- /SCA 95/ Users' Manual of HELIOS, Scandpower (Dec. 15, 1995).
- /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. Available from Radiation Safety Information Computational Center at Oak Ridge National Laboratory as CCC-785.
- /SNU 14/ S. N. University, „nTracer Homepage,“ [Online]. Available: <http://neutron.snu.ac.kr/research02-1.html> [letzter Zugriff am 03 06 2014].
- /SUB 13/ J.-C. C. Sublet, J. W. Eastwood, J. G. Morgan, "The FISPACT-II User Manual", CCFE-R(11)11 Issue 4 May 2013.
- /SUY 12/ K. Suyama, Y. Uchida, T. Ito, T. Miyaji, OECD/NEA Burnup Credit Criticality Benchmark Phase IIIC, September 2012.
- /YAM 07/ A. Yamamoto, M. Tatsumi, N. Sugimura, "Numerical Solution of Stiff Burnup Equations with Short Half Lived Nuclides by the Krylov Subspace Method," J. Nucl. Sci. Technol., 44, 2, 147 (2007).
- /YAM 09/ A. Yamamoto, M. Tatsumi und N. Sugimura, „Projected Predictor-corrector Method for Burnup Calculations of Gd-Bearing Assemblies,“ in International Conference on Physics of Reactors (PHYSOR 08), Interlaken, 14.-19. September 2008, 2009.
- /ZWE 12/ W. Zwermann, B. Krzykacz-Hausmann, L. Gallner, M. Klein, A. Pautz, K. Velkov, "Aleatoric and Epistemic Uncertainties in Sampling Based Nuclear Data Uncertainty and Sensitivity Analyses", Proc. of the International Topical Meeting on Advances in Reactor Physics (PHYSOR '12), Knoxville, TN, USA, 2012, auf CD-ROM.

- /ZWE 13/ W. Zwermann, A. Aures, W. Bernnat, L. Gallner, M. Klein, B. Krzykacz-Hausmann, M. Küntzel, I. Pasichnyk, A. Pautz, Y. Perin, F. Puente-Espel, K. Velkov und M. Zilly, „Entwicklung und Einsatz von Neutronentransportmethoden und Unsicherheitsanalysen für Reaktorkernberechnungen,“ GRS-A-3713, Juni 2013.
- /ZWE 14/ W. Zwermann, A. Aures, L. Gallner, V. Hannstein, B. Krzykacz-Hausmann, K. Velkov, J.S. Martinez, “Nuclear Data Uncertainty and Sensitivity Analysis with XSUSA for Fuel Assembly Depletion Calculations”, Nuclear Engineering and Technology, Vol. 46 No. 3, June 2014.
- /ZWE 14b/ W. Zwermann, F.-P. Weiß, M. Clemente, A. Aures, K. Velkov, “Criticality and Reactor Physics Benchmark Experiments: Influence of Nuclear Data Uncertainties”, PHYSOR 2014 – The Role of Reactor Physics Toward a Sustainable Future, Kyoto, Japan, September 28 – October 3, 2014.

Abbildungsverzeichnis

Abb. 3.1	Horizontaler Schnitt durch das SNEAK 7A Modell	8
Abb. 3.2	Vertikaler Schnitt durch das SNEAK 7A Modell	9
Abb. 3.3	Horizontaler Schnitt durch das SNEAK 7B Modell	10
Abb. 3.4	Vertikaler Schnitt durch das SNEAK 7B Modell	11
Abb. 3.5	NEWT-Modell für das Brennelement eines schnellen natriumgekühlten Reaktors	13
Abb. 3.6	Verlauf der Multiplikationsfaktoren für einen Zyklus von verschiedenen Monte Carlo Neutronentransportprogrammen und kontinuierlichen Datenbibliotheken	13
Abb. 3.7	Verlauf der Multiplikationsfaktoren für einen Zyklus von verschiedenen deterministischen Neutronentransportprogrammen und Multigruppen Datenbibliotheken	14
Abb. 3.8	Abweichungen der Aktinideninventare am Ende des Zyklus ermittelt durch eigene Rechnungen und von allen anderen Benchmarkteilnehmern	16
Abb. 3.9	Neutronenfluss als Funktion der Energie aus unterschiedlichen Rechenprogrammen (logarithmische Darstellung)	19
Abb. 3.10	Neutronenfluss als Funktion der Energie aus unterschiedlichen Rechenprogrammen (lineare Darstellung)	19
Abb. 3.11	Relative Unsicherheiten für den Multiplikationsfaktor und für Nukliddichten einiger Aktinide aufgrund von Unsicherheiten in den nuklearen Daten	20
Abb. 3.12	Multiplikationsfaktor für das Brennelement des „ABR Metallic Core“ als Funktion des Abbrands aus unterschiedlichen Rechenprogrammen und nuklearen Basisdaten	21
Abb. 3.13	Schematischer Aufbau des SNEAK-7A-Experiments	24

Abb. 3.14	Vertikaler Schnitt A-A durch das SNEAK-7A-Experiment. Entnommen aus /IVA 13/	26
Abb. 3.15	Neutronenfluss [a.u.] im 2D-nTracer-Modell des Schnitts aus Abb. 3.14.....	26
Abb. 4.1	Schematische Darstellung der Datenschnittstellen in KENOREST	30
Abb. 4.2	Ablaufschema MOTIVE	32
Abb. 4.3	Automatisch mit MOTIVE erzeugtes KENO-VI Modell eines Siedewasserreaktorbrennelements.....	40
Abb. 4.4	Ausschnitt aus einer Bibliotheksdatei für MOTIVE	44
Abb. 4.5	Ergebnisse des GRS Abbrandbenchmarks für das DWR Brennelement ergänzt um die mit MOTIVE berechneten Werte. Relative Abweichung der berechneten Spaltprodukte vom Mittelwert aller Ergebnisse.....	45
Abb. 4.6	Ergebnisse des GRS Abbrandbenchmarks für das DWR Brennelement ergänzt um die mit MOTIVE berechneten Werte. Relative Abweichung der berechneten Aktiniden vom Mittelwert aller Ergebnisse	46
Abb. 5.1	Relative Abweichung zwischen Ventina und Triton für ein 5 GWd/tHM Abbrandschritt (Aktiniden).....	54
Abb. 5.2	Relative Abweichung zwischen Ventina und Triton für ein 5 GWd/tHM Abbrandschritt (Spaltprodukte).	55
Abb. 5.3	Vergleichsdaten zwischen TRITON und VENTINA für ausgewählte Aktinide.....	57
Abb. 5.4	Vergleichsdaten zwischen TRITON und VENTINA für ausgewählte Spaltprodukte	57
Abb. 5.5	Datenstrukturen für die Berechnung der kumulativen Spaltproduktausbeute für $^{64}\text{155Gd}$ aus $^{92}\text{235U}$ anhand der möglichen Zerfallswege (IF: induzierte Spaltung (induced fission), beta: β -Zerfall, NE: Neutronenemission).....	59
Abb. 6.1	Berechnungskette für Unsicherheitsanalysen mit SUnCISTT und XSUSA bezüglich der Unsicherheiten in technologischen Parametern und nuklearen Daten für TRITON-Abbrandberechnungen	63

Abb. 6.2	Unsicherheit im Multiplikationsfaktor beim UAM-Phase1- Abbrandbechmark	64
Abb. 6.3	Quadrierter multipler Korrelationskoeffizient als Maß für den Beitrag unsicherer Parameter zur Unsicherheit im Multiplikationsfaktor beim UAM-Phase1-Abbrandbechmark	64
Abb. 6.4	Berechnungskette für Unsicherheitsanalysen mit XSUSA bezüglich der Unsicherheiten in Neutronen-Wirkungsquerschnitten und abbrandspezifischen Daten für TRITON-Abbrandberechnungen	67
Abb. 6.5	Vereinfachte Berechnungskette für Unsicherheitsanalysen mit XSUSA bezüglich der Unsicherheiten in Neutronen-Wirkungsquerschnitten und abbrandspezifischen Daten für TRITON-Abbrandberechnungen	68
Abb. 6.6	Struktur einer Textdatei für die Spaltausbeuten von U-238 ohne Korrelationen	69
Abb. 6.7	Struktur einer Datei für die Spaltausbeuten von U-238 im schnellen Energiebereich in Matrixdarstellung	70
Abb. 6.8	Schematische Darstellung des SWR-Brennelements (links) und des DWR-Brennelement-Viertels (rechts).....	74
Abb. 6.9	Multiplikationsfaktoren als Funktion des Abbrands für das SWR- und das DWR-Brennelement (oben) und entsprechende 1σ -Unsicherheiten.....	75
Abb. 6.10	1σ -Unsicherheiten der Nuklidinventare für das SWR- und das DWR- Brennelement bei einem Abbrand von 40 GWd/t Schwermetall	76
Abb. 6.11	Sensitivitätsmaße für verschiedene Nuklidichten beim Endabbrand des SWR-Brennelements mit entsprechenden 95%- Konfidenzintervallen und 95%-Signifikanzgrenzen.....	77
Abb. 6.12	1σ -Unsicherheiten im Multiplikationsfaktor als Funktion des Abbrands für das SWR-Brennelement, ermittelt mit NEWT, Serien von kurzen KENO-Rechnungen, und deren Kombination („schnelle GRS- Methode“)	78

Tabellenverzeichnis

Tab. 3.1	Ergebnisse zur Nachrechnung der SNEAK Experimente mit CSAS6.....	10
Tab. 3.2	Aktiniden-Inventare am Ende des Abbrandzyklus aus den eigenen Abbrandrechnungen mit TRITON/NEWT und HELIOS und den Ergebnissen anderer Benchmarkteilnehmer.	15
Tab. 3.3	Spaltprodukt-Inventare am Ende des Abbrandzyklus aus TRITON und HELIOS und deren relative Abweichung.....	17
Tab. 3.4	Bestimmtheitsmaße für den Multiplikationsfaktor bei BOC und EOC	20

A Anhang A: Technische Notizen

- A1 Jésus Salvador Martínez González, Lucia Gallner, Winfried Zwermann, „Implementation of Fission Yield and Decay Data Uncertainties in XSUSA”, GRS, December 2012
- A2 Jesús Salvador Martínez González, Lucia Gallner, Winfried Zwermann, “Development and implementation of YiSaB (Yields Sampling Branch) and DeSaB (Decay Sampling Branch)”, GRS, February 2013

B Anhang B: Veröffentlichungen

Die nachfolgend aufgeführten Anhänge enthalten urheberrechtlich geschütztes Material und werden deshalb nicht veröffentlicht. Eine Weitergabe einzelner Anhänge an Dritte kann nur nach Prüfung des Einzelfalls und ausdrücklicher Zustimmung der jeweils zuständigen Stellen bzw. Rechteinhaber erfolgen.

- B1 J.S. Martínez, W. Zwermann, L. Gallner, F. Puente-Espel, O. Cabellos, K. Velkov, V. Hannstein, “Towards a Complete Propagation of Nuclear Data Uncertainties in Depletion Calculations”, Jahrestagung Kerntechnik 2013,
- B2 J.S. Martinez, W. Zwermann, L. Gallner, F. Puente-Espel, O. Cabellos, K. Velkov, V. Hannstein, „Propagation of Neutron Cross Section, Fission Yield, and Decay Data Uncertainties in Depletion Calculations“, Nuclear Data Sheets 118 (2014) 480–483.
- B3 W. Zwermann, A. Aures, L. Gallner, V. Hannstein, B. Krzykacz-Hausmann, K. Velkov, J.S. Martinez, „Nuclear Data Uncertainty And Sensitivity Analysis With XSUSA For Fuel Assembly Depletion Calculations“, Nuclear Engineering and Technology, Vol. 46 No. 3, June 2014.
- B4 Aures, F. Bostelmann, V. Hannstein, K. Velkov, W. Zwermann, N. Guilliard, J. Lapins, W. Bernnat, “Depletion Calculation and Uncertainty/Sensitivity Analysis for a Sodium-Cooled Fast Spectrum Fuel Assembly”, ANS MC2015 - Joint International Conference on Mathematics and Computation (M&C), Supercompu-

ting in Nuclear Applications (SNA) and the Monte Carlo (MC) Method • Nashville, TN, April 19-23, 2015.

- B5 A. Aures, V. Hannstein, K. Velkov, W. Zwermann, N. Guilliard, J. Lapins, W. Bernnat, "Depletion Calculations for a Fast Spectrum Fuel Assembly", 46th Annual Meeting of Nuclear Technology, Berlin, May 2015.

C Anhang C: Sonstiges

- C1 V. Hannstein, R. Kilger, „Rechenbenchmark zur Abbrandberechnung von Druckwasser- und Siedewasser-Brennelementen“, Technischer Bericht, GRS, August 2015.

Technische Notiz

Implementation of Fission Yield and Decay Data Uncertainties in XSUSA

Jesús Salvador Martínez González, Lucia Gallner, Winfried Zwermann

December 2012

Abstract

This report states the purpose of developing tools to generate random fission yields and decay data libraries within the XSUSA package. First, we analyze how SCALE6.1 includes both data libraries and uses them as a starting point for implementation of the new XSUSA sampling branches and, second, we propose a development scheme to be accepted by the corresponding GRS team.

The issues here considered are:

- i) Fission yields and decay data libraries in the SCALE6.1 package. Formats.
- ii) Use of the nuclear data libraries by ORIGEN-S through COUPLE module.
- iii) A conceptual and temporal scheme of the development

1. ORIGEN-S. Fission yields and decay libraries

The ENDF-6 format has been studied. ENDF/B-VII.1 and EAF/2007 nuclear data libraries have been analyzed thanks to the codes previously presented. Thanks to this exercise we have become familiar with the content of the nuclear data and the procedures to extract fission yields, decay constants and their uncertainties. However, the basic nuclear data libraries may present different formats within a nuclear code package such as SCALE6.1, depending on the use and the treatment of the data performed. In this chapter we answer questions of paramount importance: *how are the data of interest attached into the SCALE6.1 code package? Are these files ready to be used? Is the information they contain complete?*

The cross-section sampling and random libraries generation has been developed and XSUSA is capable to assess the impact of cross-section uncertainties on nuclear calculations. Nevertheless, for calculations in which fission yields and decay constants play a role, for instance nuclide inventory calculations, a complete propagation of the nuclear data uncertainties requires a complete random generation of the libraries used by the codes involved. That is, the fission yields and decay libraries used by ORIGEN-S.

First of all, then, we have to understand how these libraries are attached as part of the code information. ORIGEN-S makes use of basic nuclear data libraries contained in the folder `c:/scale/data`. Regarding to fission yields and decay constants, files are included in ASCII format in the folder `/origen_data`. Specifically, the files “`origen.rev01.yields`” and “`origen.rev01.decay`” contain this information respectively. The former seems to be written in ENDF-6 format but after an inspection one realizes that the file lacks information when compared to the original ENDF/B-VII files. Below we discuss an example.

origen.rev01.yields

9.22350+05	0.00000+00		3	0	0	0		
2.53000-02	0.00000+00		1	2	2298	1149		
1.00300+04	0.00000+00	2.00300+04	0.00000+00	2.00400+04	0.00000+00			
2.60650+05	0.00000+00	2.70650+05	0.00000+00	2.80650+05	0.00000+00			
2.90650+05	0.00000+00	2.40660+05	2.40983-14	2.50660+05	7.19949-12			
2.60660+05	3.75973-10	2.70660+05	2.80980-10	2.80660+05	5.77959-11			
2.90660+05	1.42990-13	3.00660+05	0.00000+00	3.10660+05	0.00000+00			
3.20660+05	0.00000+00	2.40670+05	0.00000+00	2.50670+05	5.37962-12			

ENDF/B-VII.1

9.223500+4	2.330250+2		3	0	0	09228	8454	1
2.530000-2	0.000000+0		2	0	4988	12479228	8454	2
2.306600+4	0.000000+0	2.05032-19	1.31220-19	2.406600+4	0.000000+09228	8454		3
2.40981-14	1.54228-14	2.406700+4	0.000000+0	0.000000+0	0.000000+09228	8454		4
2.406800+4	0.000000+0	0.000000+0	0.000000+0	2.406900+4	0.000000+09228	8454		5
2.10819-18	1.34924-18	2.407000+4	0.000000+0	0.000000+0	0.000000+09228	8454		6
2.506600+4	0.000000+0	7.19949-12	4.60767-12	2.506700+4	0.000000+09228	8454		7
5.37962-12	3.44296-12	2.506800+4	0.000000+0	6.65953-13	4.26210-139228	8454		8

The ORIGEN-S fission yields library skips the second and fourth entries, related to the daughter’s nuclear state and the half-life uncertainty. Thus, in this file we only find the list of daughter nuclides and their half-life nominal values for the fission yield, for each neutron-incident energy and fissionable isotope.

The decay library shows another structure completely different to the ENDF-6 formatted libraries. Below we can see an example of the way the decay data is arranged in the ORIGEN-S library.

```

[...]
  1  10020  6    0.0000E+00 0.0000E+00 0.0000E+00 0.0000E+00 0.0000E+00 0.0000E+00
  1    0.0000E+00 0.0000E+00 0.0000E+00 1.5000E-02 1.0000E+00 1.0000E+00
  1    0.0000E+00 0.0000E+00 0.0000E+00 0.0000E+00 0.0000E+00
[...]
  2  952450  3    2.0500E+00 0.0000E+00 0.0000E+00 0.0000E+00 0.0000E+00 0.0000E+00
LIB NUC IU      HALFL  FB1    FP      FPI    FA      FT

  2    0.0000E+00 0.0000E+00 3.1490E-01 0.0000E+00 2.9800E-08 2.9800E-04
LI2      FSF    FBN      Q(I)   ABUND(I) AMPC(I) WMPC(I)

  2    9.9350E-02 1.0000E+00 0.0000E+00 0.0000E+00 0.0000E+00
LI3      FG(I)   FB      FBB    FN(I)   FBA

[...]
  3  380970  1    4.2900E-01 0.0000E+00 0.0000E+00 0.0000E+00 0.0000E+00 0.0000E+00
  3    0.0000E+00 5.0000E-04 4.9778E+00 0.0000E+00 1.0000E+00 1.0000E+00
  3    4.9998E-01 9.9950E-01 0.0000E+00 0.0000E+00 0.0000E+00
[...]
```

The flags LIB /LI2/LI3 are set to 1, 2 or 3 depending on the type of nuclide, respectively, activation products, actinides and fission product. The nuclide identifier follows the LIB flag in the first line. IU informs about the time unit of the HALFL, half-life, quantity (seconds, minutes...). The rest of parameters are defined in the following table.

Variable name	Definition
FB	Beta decay transition leading to a daughter in the ground state
FB1	Beta decay transition leading to a daughter in the metastable state
FP	Positron emission or orbital electron capture to the ground state
FPI	Positron emission or orbital electron capture to a metastable state
FA	Alpha particle emission
FT	Isomeric transition
FSF	Spontaneous fission
FBN	Delayed neutron decay (beta particle and a neutron)
FBB	Double beta decay
FN	Neutron decay
FBA	Beta decay plus an alpha particle

Table 1. Variables definition

As can be seen, the amount of data is hugely reduced in comparison with the original ENDF/B-VII.1 decay library. Again, no uncertainty data is given in this file. Only nominal values are provided. Take that several automatic codes were developed to compare libraries (GRS Report I). A good exercise will be to compare the ORIGEN-S libraries with the original ones from which they are supposed to be extracted. However, this study goes beyond the purpose of this report, a mere statement of purpose with the aim of establishing what to do next. Now we have an idea about the content and structure of the nuclear data of interest, it is worth to go in depth about their use.

2. The COUPLE module

ORIGEN-S is not designed to read and use ASCII format libraries as nuclear data input, which means that the files described above are not used directly by the depletion code. Needless to say, then, there is a conversion from the ASCII format files to their binary version previous to their use by the ORIGEN-S code. The module COUPLE is the responsible of this process. All its functions and characteristics are widely explained in the corresponding SCALE6.1 manual, so we skip the details in order to focus on what is interesting for us.

The conceptual key of the burnup calculations is the coupling of transport codes with depletion codes through the continuous updating of the libraries used, always, according to the evolution of the materials in the nuclear system, the fluxes and, therefore, the cross-sections and fission yields. The decay constants, unlikely, do not depend on inventories or fluxes distribution. They are not problem dependent because the decay constant is an inherent property of a given nuclide. Because of this, a binary decay library, “end7dec”, is provided in the **c:/scale/data** folder and it is used by ORIGEN-S directly. If desired, *COUPLE allows the user to generate another binary decay library from a specified ASCII format decay library* with the format presented above. In fact, one of the example inputs attached in the manual refers to this library generation.

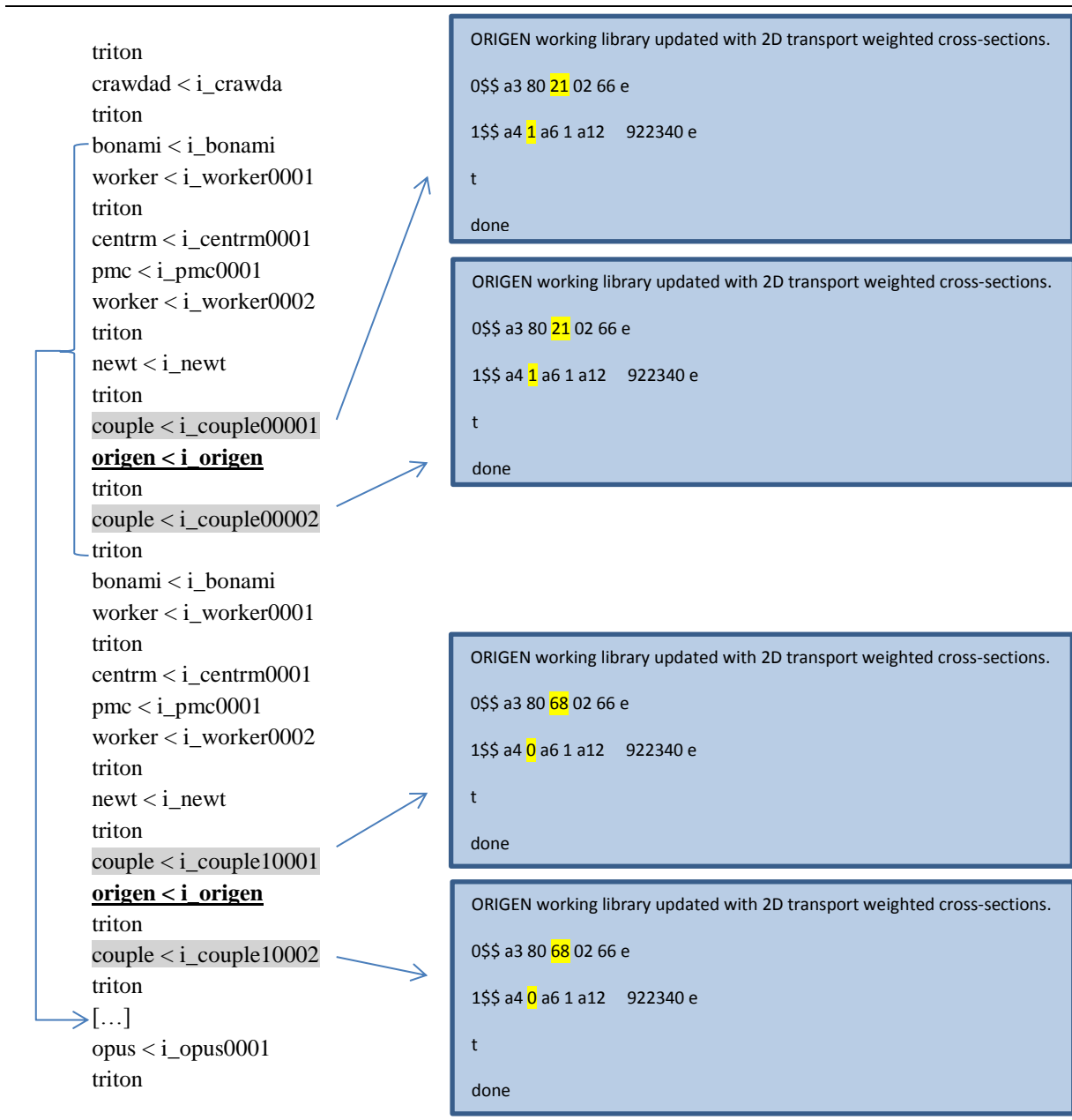
This conversion from ASCII to binary is carried out automatically during an execution that requires the fission yield library, which is read in binary format by ORIGEN-S. Unlike the decay data, the fission yield to be used for a fissionable nuclide is problem dependent. It depends on the average neutron incident energy that, at the same, time depends on the fission cross-sections and neutron fluxes of the problem. “COUPLE calculates a problem-dependent yield for each fission product by interpolating on the tabulated data using the computed averaged energy of fission for each fissile nuclide”, calculated with the formula

$$\bar{E}_n = \frac{\sum_g E_g \sigma_g \phi_g}{\sum_g \sigma_g \phi_g}$$

where \bar{E}_n is the incident neutron average energy and E_g , σ_g , ϕ_g , in the group g , the neutron energy, the neutron flux and the fission cross section. Interpolation is performed according to the interpolation scheme defined in the ENDF/B files, a short version of which is stored in **c:/scale/data/origen_data**, as previously seen. Regarding to the fission yields, an ORIGEN-S calculation requires the ASCII file. Probe of this fact are the results from three simple executions testing the burnup of a typical simple pin cell:

- i) The first execution is performed removing from the **c:/scale/data/origen_data** folder the **origen.rev01.decay** ASCII file. The result: a normal execution.
- ii) Next, we remove from the **c:/scale/data** folder the “end7dec” decay binary file. The execution comes to its end by writing the error message “error in opnfil, old-file –end7dec- does not exist. Execution will terminate. Stop code 201”
- iii) Execution without the ASCII yield data file. As a result, the message: “error in opnfil, old file –yields- does not exist. Execution will terminate. Stop code 201”

It is inescapable that ORIGEN-S needs both files “end7dec” (decays) and “orig.rev01.yield” (yields). The question that arises now is: when does ORIGEN-S need them?. It is important to know it in order to shed light onto their role during the calculation and, then, to clarify whether they are or not the files to modify. The answer can be found in the temporary directories kept by user’s request in the execution folder. Among the numerous files we find in these directories, there are two quite interesting for our purposes: the “*call_sequence*” file and the set of files “*i_couple [...]*”. The former is nothing but the order in which all the required modules are executed and the inputs they need. The latter are the COUPLE inputs. For instance, the burnup of the pin cell generates the next sequence of calls:



We will not discuss in detail the task carried out by each module. Note that the sequence [bonami -...-triton] is repeated throughout the calculation till opus module is called. The name and content of the COUPLE inputs does not change respect what is shown above. The four blue squares are the highlighted $i_couple\{1/0\}000\{1/2\}$ inputs. We should become familiar with these inputs to deeply understand the COUPLE options, however, for the moment and considering our purpose, may be it is enough to understand how COUPLE works with the libraries.

As said, ORIGEN-S only reads a binary file containing decays and problem-dependent cross-sections and fission yields as terms of the transition matrix. Actually, the binary decay library is itself a transition matrix to be updated with cross-section and fission yield information during the calculation, for example, a burnup one. Then, the binary decay library generated from its ASCII version serves as a starting point for the following required updates. One of these updates is the addition of the fission yields data to the transition matrix in the binary file. It has been demonstrated, and it is also stated in the manual, that it is performed by COUPLE from the ASCII fission yields library. Then, it is clear that any kind of modification that could help us in the propagation of the nuclear data uncertainties must be done on these two files at the beginning of the execution.

3. The decay constants and fission yields sampling branches for XSUSA

Known the use and importance of the ORIGEN-S nuclear data libraries, we can outline a methodology to propagate their uncertainties within the XSUSA package. The Decay and Yields Sampling Branches (DSB and YSB) must respect the SCALE6.1 code integrity by operating in an independent and external fashion. That is, by means of the generation of input libraries prior to the calculation.

This library generation process cannot rely only on the information provided with the original code package because it is incomplete; the decay and fission yields libraries do not contain uncertainty information. Then, it is mandatory to make use of the evaluated nuclear data libraries, whose format has been studied and from which we know how to extract the data.

Basically, the target is to achieve simple tools capable to generate nuclear data libraries for ORIGEN-S. User will decide what library (ENDF/B-VII, EAF2007/2010...) is interesting for his study. Regardless his selection, the generators of both branches will take the nominal values of the magnitudes and their associated uncertainties and they will perform a random sampling of the mean value according to a probability function that can be selected by the user (normal distribution, lognormal distribution...). In the case of the fission yields sampling, the final output, the varied library, can be stored directly as "orig.rev01.yield" in the corresponding folder and, as seen, it will be used by SCALE6.1 directly.

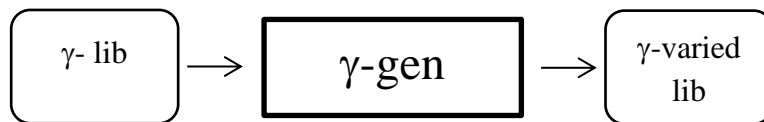


Figure 1. YSB: Yields Sampling Branch

In the case of the decay libraries, the varied library must be the input of a COUPLE run to generate an "end7dec varied file", input of ORIGEN-S during the following calculations.

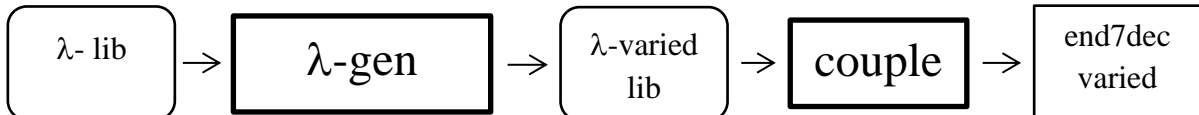


Figure 2. DSB: Decays Sampling Branch

These two branches must be called by the XSUSA driver at the very beginning of the calculation if it is desired by the user a propagation of the fission yields and decay uncertainties, altogether or independently.

Both modules will be entirely developed in fortran77 and compiled in Windows. Once it has been probed they work, they will be modified to be compiled in Linux and, finally, the XSUSA python scripts must be updated in order to include the new capabilities. Then, a problem would be chosen to probe the validity of the methodology.

Technische Notiz

Development and implementation of

YiSaB (*Yields Sampling Branch*)

and

DeSaB (*Decay Sampling Branch*)

Jesús Salvador Martínez González, Lucia Gallner, Winfried Zwermann

February 2013

Abstract

We report the development of the codes proposed in the GRS REPORT 2.1 “Proposal of implementation”. At this point of the research, the aim is the generation of a pool of varied nuclear data libraries (fission yields and decay libraries) to be read by ORIGEN-S with the purpose of studying the nuclear data uncertainties impact on a given calculation.

Needless to say, this work is backed by the experience acquired in the previous reports. In fact, the codes here presented inherit part of the codes developed to analyze and compare the content of different nuclear data libraries.

In this report, we discuss:

- i) YiSaB (yields sampling branch) flow chart. Feedback with MEDUSA. Implementation in Linux
- ii) DeSaB (yields sampling branch) flow chart. Feedback with MEDUSA. Implementation in Linux.
- iii) COUPLE and the SELECTOR SCRIPT scheme

This report is completed with the codes themselves and an explanation of their content to make easy for users and developers their modification if needed.

0. Generalities

The codes developed to create nuclear data libraries are distributed in three parts: the acquisition of data from the nuclear data libraries and generation of MEDUSA inputs, MEDUSA execution and production of outputs and, finally, acquisition of variations and generation of varied nuclear data library. The procedure is as follows. Let's imagine a magnitude m with an associated uncertainty in the library, Δm . After reading their values, our codes write the relative values in the MEDUSA inputs: 1 and $\Delta m/m$ as well as instructions to perform a Gaussian sampling over the normalized values. The results, a list of varied normalized values, become actually a list of correction factors to apply directly on the nominal values of the fission yields/decay constants stored in the libraries. This is in fact, the previous step to their print out in files correspondingly formatted.

1. YiSaB. Generator of fission yields varied libraries.

As stated in the previous report, a TRITON execution requires the ASCII format library “origen.rev01.yields.data” to include it thanks to COUPLE into the binary file “end7dec”, the only one that can be read as an input by ORIGEN-S. Modifying this ASCII file is the key to propagate nuclear data uncertainties. However, we should remember that the ORIGEN-S yields library, generated from the ENDF/B-VII corresponding library, does not respect the structure of a classical ENDF-6 formatted library. The ORIGEN-S library stores only parent nuclides, three or less neutron incident energies and a list of daughter nuclides and their yields. No data about final state, no data about uncertainty. As a consequence, YiSaB needs the use of an external nuclear data library including uncertainty values to create a new varied ORIGEN-S library for the fission yields.

A final release of YiSaB should allow the user to choose the nuclear data library source from which perform the generation of the varied library. YiSaB is only written to work with the ENDF/B-VII nuclear data library but its generalization should not represent a problem in the future.

YiSaB

YiSaB needs four inputs:

- i) The ENDF/B-VII fission yields files: the separated ENDF-6 libraries for each parent isotope
- ii) The origen.rev01.yields.data file
- iii) The “medu” file: an input template for MEDUSA. The user must not modify this file.
- iv) The “fissionables” file. A list of the names of ENDF/B-VII fission yields files followed by the isotopic identifier in the ORIGEN-S library.

The *fissionable* file is as follows:

```
30
nfy-090_Th_227.endf 9.02270+05
nfy-090_Th_229.endf 9.02290+05
nfy-090_Th_232.endf 9.02320+05
nfy-091_Pa_231.endf 9.12310+05
nfy-092_U_232.endf 9.22320+05
nfy-092_U_233.endf 9.22330+05
nfy-092_U_234.endf 9.22340+05
[...]
nfy-096_Cm_248.endf 9.62480+05
nfy-098_Cf_249.endf 9.82490+05
nfy-098_Cf_251.endf 9.82510+05
nfy-099_Es_254.endf 9.92540+05
```

and it tells YiSaB in which file it has to find the information for the corresponding nuclide. For example, for the uranium 234, the program must read the archive *nfy-092_U_234.endf* to obtain information about the ORIGEN-S nuclide *9.22340+0*. This is a good strategy because the user is free to change this file by another ENDF-6 formatted partial library, let’s say, for instance, *nfy-092_U_234.eaf07*, and then it is possible to use different libraries.

The *medu* file is a template to be read by YiSaB. It contains specific key words used by the code to rewrite on them execution and input values. That is why it is so important not to modify it.

The rest of inputs (libraries) must be in the same folder where YiSaB is going to be launched.

Briefly, YiSaB performs the next actions:

- i) Reads and stores: parent fissionable nuclides, the neutron incident energies and, for each daughter nuclide, its identifier and fission yield value.
- ii) Reads the fissionable file and, for each of the nuclides listed, reads from the selected library and stores: parent fissionable nuclides, the neutron incident energies and, for each daughter nuclide, its identifier, fission yield value and uncertainty value.

Once stored all this information, it performs an assignment of values:

- iii) Taking the set of parent nuclides, energies and daughters, as a basis, YiSaB searches in the corresponding library for each nuclide those isotopes that:
 - a) Are included in the ORIGEN-S library
 - b) and present a non-zero value for the fission yield uncertainty

This way, YiSaB assigns an uncertainty value to all those ORIGEN-S isotopes that are included in the source library and present a non-zero uncertainty. The rest will remain unchanged.

- iv) Optionally, YiSaB prints two files for each isotope: the *isotope.fis* and *isotope.medusa*. These two files help the developer and users to monitor the behavior of the code. *Isotope.fis* lists, for each energy, the isotopes included in ORIGEN-S, the fission yield value included in ORIGEN-S, the fission yield value included in the source library if present and, finally, the corresponding uncertainty value extracted from the source library, if present. Then, for instance, for *9.22350+05.fis* we have:

```

2.53000-02
1.00300+04 0.00000+00
2.00300+04 0.00000+00
2.00400+04 0.00000+00
2.60650+05 0.00000+00
2.70650+05 0.00000+00
2.80650+05 0.00000+00
2.90650+05 0.00000+00
2.40660+05 2.40983-14 2.40981-14 1.54228-14
2.50660+05 7.19949-12 7.19949-12 4.60767-12
2.60660+05 3.75973-10 3.75973-10 2.40623-10
2.70660+05 2.80980-10 2.80980-10 1.79827-10
2.80660+05 5.77959-11 5.77959-11 3.69894-11
2.90660+05 1.42990-13 1.42990-13 9.15135-14
3.00660+05 0.00000+00 0.000000+0 0.000000+0
3.10660+05 0.00000+00 0.000000+0 0.000000+0
[...]
2.00000+06
1.00300+04 0.00000+00
2.00300+04 0.00000+00
2.00400+04 0.00000+00
2.60650+05 0.00000+00
2.70650+05 0.00000+00
2.80650+05 0.00000+00
2.90650+05 0.00000+00
2.40660+05 4.02996-13
2.50660+05 9.43992-11
2.60660+05 3.94997-09
2.70660+05 2.68998-09
2.80660+05 4.94996-10
2.90660+05 1.12999-12
3.00660+05 0.00000+00
3.10660+05 0.00000+00
3.20660+05 0.00000+00
2.40670+05 4.87995-14
2.50670+05 5.30995-11
[...]

```

Isotopes only in ORIGEN-S
library for U-235

Isotopes in both libraries, with
fission yields and uncertainty
associated (also zero values)

A characteristic of the ORIGEN-S
library is the inclusion of the
incident energy 2 MeV instead
the value 0.5 MeV stored in the
source library (ENDF/B-VII). And
no assignment is made.

```

1.40000+07
2.00300+04 0.00000+00
2.00300+04 0.00000+00
2.00400+04 0.00000+00
2.60650+05 0.00000+00
2.70650+05 0.00000+00
2.80650+05 0.00000+00
2.90650+05 0.00000+00
2.40660+05 7.90911-10 7.90578-10 5.05970-10
2.50660+05 8.62902-08 8.629020-8 5.522570-8
2.60660+05 1.00989-06 1.009890-6 6.463270-7
2.70660+05 1.48983-06 1.489830-6 9.534920-7
2.80660+05 2.83968-07 2.839680-7 1.817390-7
2.90660+05 6.40927-09 6.409270-9 4.101940-9
3.00660+05 1.38984-11 1.38984-11 8.89499-12
3.10660+05 0.00000+00 0.000000+0 0.000000+0
3.20660+05 0.00000+00 0.000000+0 0.000000+0
2.40670+05 1.50982-10 1.50919-10 9.65884-11
2.50670+05 3.97955-08 3.979550-8 2.546910-8
2.60670+05 1.06988-06 1.069880-6 6.847220-7

```

Isotopes only in ORIGEN-S
library for U-235

Thanks to this file we get an idea of the isotopes shared and the equivalence of their fission yields values. Some meaningless differences have been found and there is a very good agreement between the content of both libraries.

The *isotope.medusa* is another help for the developer. It is not the MEDUSA input but the MEDUSA input is based on this file somehow. The *isotope.medusa* files polish their corresponding *isotope.fis* files. These files are a collection of those isotopes that are present in both libraries and have non-zero value for their fission yields and associated uncertainties. The *9.22350+05.medusa* is as follows:

```

1 < 2.40660+05 2.40983-14 2.40981-14 1.54228-14
2 2.50660+05 7.19949-12 7.19949-12 4.60767-12
3 2.60660+05 3.75973-10 3.75973-10 2.40623-10
4 2.70660+05 2.80980-10 2.80980-10 1.79827-10
5 2.80660+05 5.77959-11 5.77959-11 3.69894-11
6 2.90660+05 1.42990-13 1.42990-13 9.15135-14
7 2.50670+05 5.37962-12 5.37962-12 3.44296-12
[...]
1972 6.61720+05 7.36517-09 7.279180-9 4.658670-9
1973 6.71720+05 6.75923-08 6.759230-8 4.325910-8
1974 6.81720+05 7.95910-08 7.959100-8 5.093820-8
1975 6.91720+05 1.07988-08 1.079880-8 6.911220-9
1976 7.01720+05 1.83979-10 1.83979-10 1.17747-10
1977 7.11720+05 1.53983-13 1.53983-13 9.85488-14
1978 7.11721+05 1.53983-13 1.53983-13 9.85488-14

```

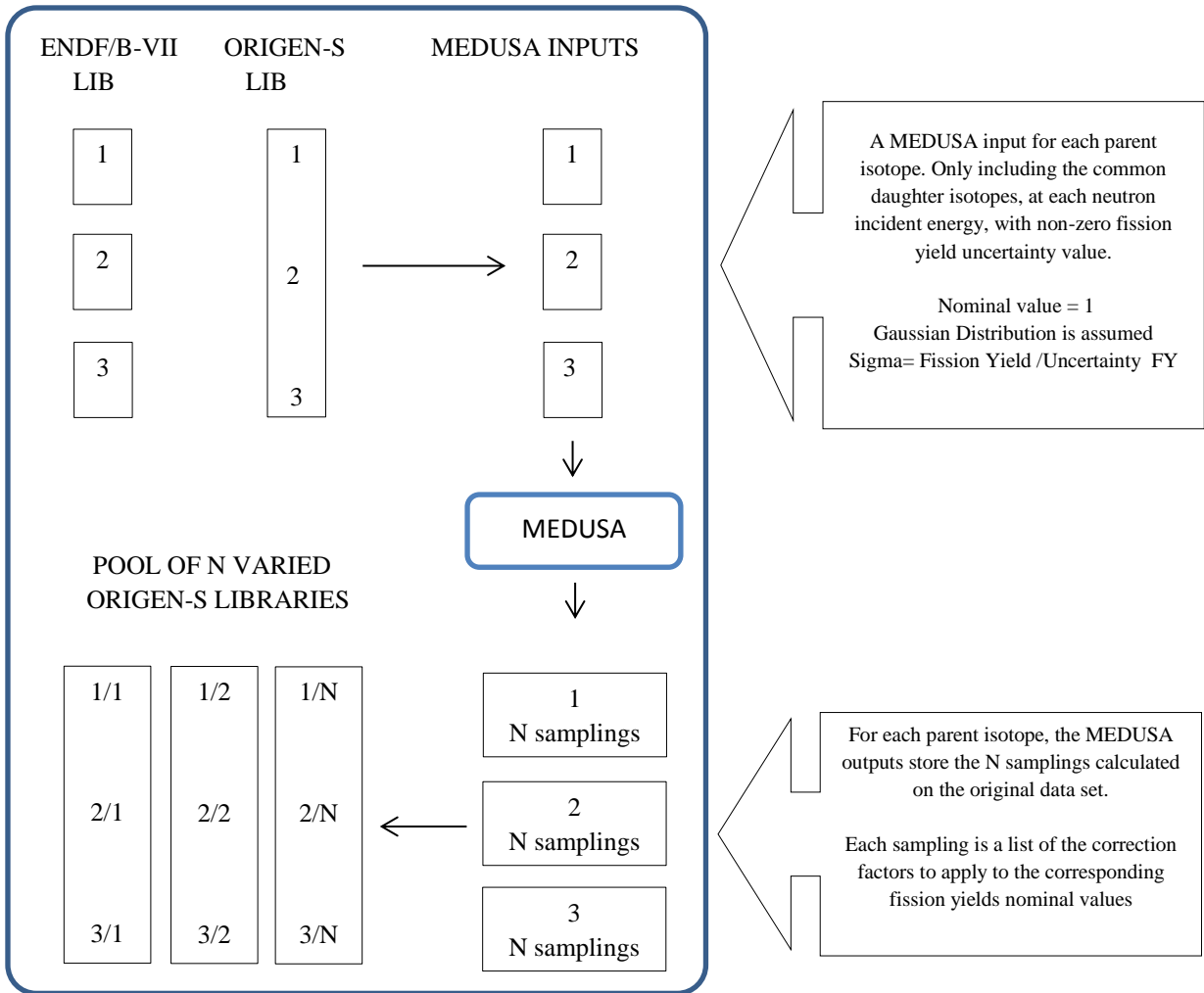
MEDUSA input identifier

In one file, it lists all the isotopes that fit the requisites explained above and it assigns them a number: the MEDUSA input identifier. The lines that generate these files can be commented and the code will not create any of them.

- v) The MEDUSA inputs. After the assignation of values, YiSaB creates for each isotope a MEDUSA input: the *isotope_medusa.inp*. To do so it needs the *medu* file, a template that must remain unchanged. The MEDUSA inputs include the relative uncertainty value of each daughter isotope and they respect their numeric identifiers. Then, YiSaB calls MEDUSA as many times as required and the corresponding MEDUSA outputs, *isotope.fmt*, are obtained.

- vi) YiSaB opens each output file, reads and stores all the sets of variations (1000, as a default) performed by MEDUSA that will be the basis of the varied libraries. The code considers these values as a multiplying modification factors to apply to the nominal fission yield values of the corresponding daughter isotopes. Once varied, a set of varied libraries (1000, as a default) is created including the modified fission yields values. This is the output of the code: a pool of varied libraries.

Below, a scheme of the procedure.



2. DeSaB. Generator of decay varied libraries.

The generator of decay libraries is quite simpler than the fission yields library because it handles only with one file instead of around 30 files (30 parent isotopes). It needs only three inputs:

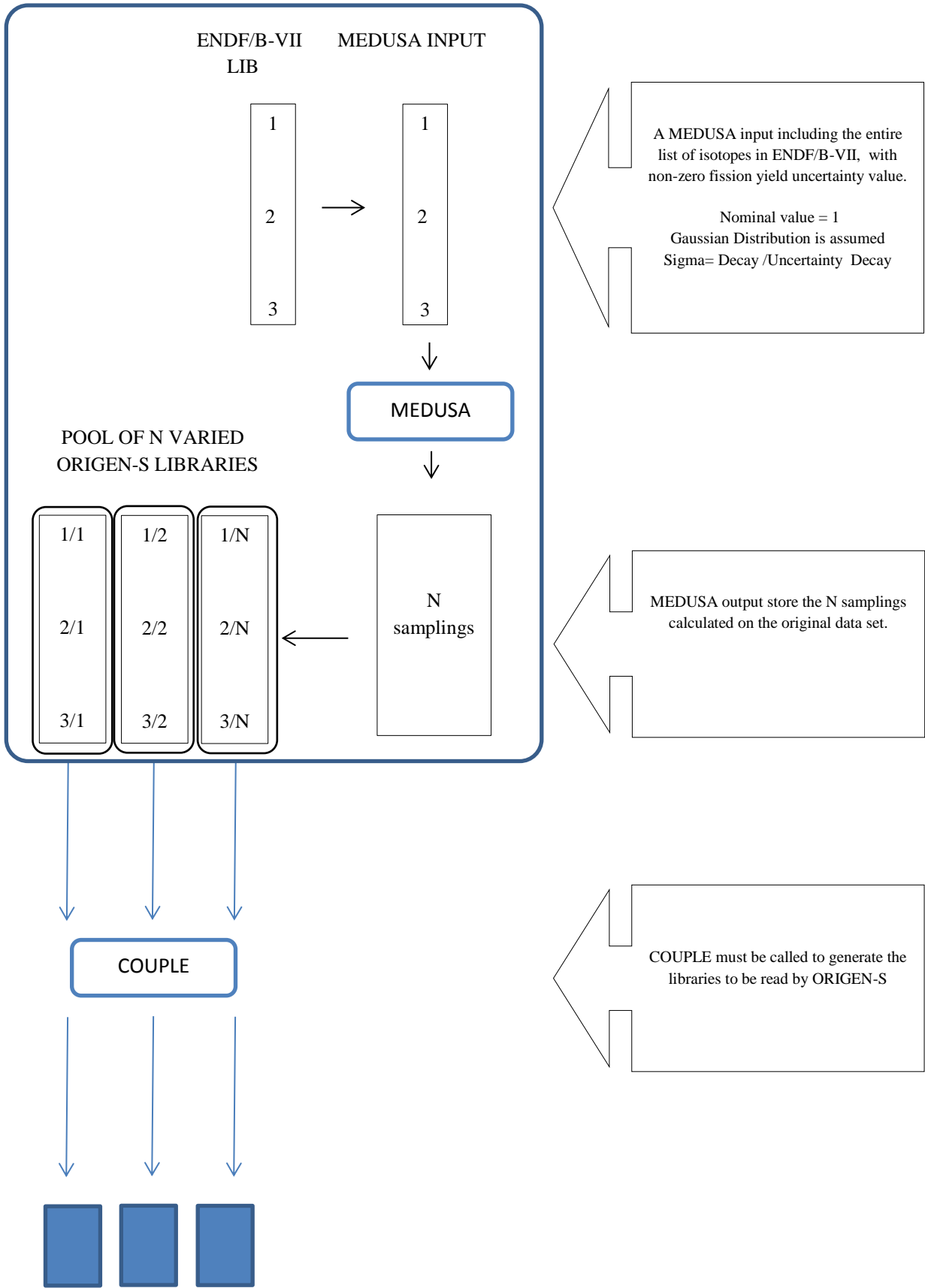
- i) The medu file
- ii) The ENDF/B-VII decay library
- iii) The ORIGEN-S “origen.rev01.decay” ASCII library.

In the previous report we saw that the ORIGEN-S decay library presents its own format, its own information distribution that has nothing to do with the ENDF-6 standard format. However, for the purpose of our code, this does not mean a real problem.

DeSaB works in a very similar way than YiSaB. Its flow chart is as follows:

- i) DeSaB reads the ORIGEN-S decay library storing not only the isotopes and their half-live values but the entire library itself.
- ii) DeSaB reads the ENDF/B-VII decay library, stores the nuclides, their half-lives and associated uncertainties. From this list, it creates only one MEDUSA input file containing the relative error of the half-lives (for those with non-zero uncertainty)
- iii) Upon MEDUSA execution, DeSaB reads all the results and stores them
- iv) DeSaB establishes the list of equal isotopes under several requisites:
 - a) They must be contained in the ORIGEN-S and ENDF/B-VII library. Here we found some problems at the beginning, because the ENDF/B-VII library includes for the same nuclide two or more states. However, their identifiers remain unchanged, so there is no way for DeSaB to distinguish one from the others. This led to mistakes in the assignation of the uncertainties. The problem was solved by including the condition of equality of half-lives.
 - b) Of course, the uncertainty cannot be null.
- v) Once identified the equal isotopes that can be affected by uncertainties, DeSaB multiplies the original half-life values stored in the ORIGEN-S library by the corresponding factors obtained from the MEDUSA calculations, once and again, creating at the same time the associated varied library.

It must not be surprising that the conceptual DeSaB chart looks so similar to the YiSaB one. However, since the amount of files and data is not so huge, the code is simpler and shorter than YiSaB. The idea, now, is to create an interface with COUPLE to generate the varied end7dec files, which are the ones to be read and updated by ORIGEN-S.



3. COUPLE and the BASH SCRIPT scheme

The DeSaB and YiSaB outputs are a pool of varied libraries generated from the ORIGEN-S libraries and the information available in the ENDF/B-VII libraries. These sets are written in ASCII format. We can force ORIGEN-S to use them by the mere fact of replacing the default libraries by our set. However, a previous steps must be performed.

COUPLE is the SCALE6 module responsible of the binary libraries updates. As explained in the previous report, it is called through a calculation and carries out its task automatically and, consequently, we will not interfere in the standard flow of the code. COUPLE, though, must be part of our scheme. Unlike the ASCII fission yields varied libraries, used directly by COUPLE during a calculation, the decay varied libraries must be converted into a binary file previously to a calculation. Then, COUPLE must be part of our methodology

The varied libraries generated are to be stored within the **folder scale/data/origen_data/FY (DC)** generated beforehand, and, then, copied in the location of the original folders when the varied calculations are to be performed, replacing the original ones.

This methodology has been proven to be successful and generates a set of different results. However, we prefer a less invasive methodology, which actually has been implemented in Linux through the use of bash scripts. In this scheme, all the replacements are done within the temporary execution directories. The strategy is as follows:

Fission Yields

A SCALE6.1 calculation needs the “origen_filename”, which specifies the units in which the nuclear data libraries are stored. We replace this file by a fake “origen_filename” containing in the unit number 17 the ASCII file “yieldsx”, actually a copy from one of the varied libraries stored in a specific folder. The process is repeated for each varied library generated beforehand. The script that performs all the replacements is designed to copy in the current directory the files ft71001 and the StdCmpMixNNNNN.

Decay constants

To replace the decay libraries we carry out the same kind of replacements. Our origen_filename now includes our own “decayx” varied ASCII library linked to unit 27, and the “end7decx” library linked to the unit 21. However, this “end7decx” library must be created. In the SCALE6.1 input we include the COUPLE lines before the rest

```
=shell
cp origen_filenamesx origen_filenames
end

=couple

0$$ a2 27 a6 33 e
1$$ 1 0 0 a11 1001 e t
3t
done
end

=shell
cp ft33f001 end7decx
end
```

The last shell command copies the ft33f001, the binary varied decay file, into the file end7decx, which is read by SCALE6.1. A combination of these two procedures are to be used if a combined propagation is requested.



Gesellschaft für Anlagen-
und Reaktorsicherheit
(GRS) gGmbH

Rechenbenchmark zur Abbrandberechnung von Druckwasser- und Siedewasser- Brennelementen

Technischer Bericht

Volker Hannstein, Robert Kilger

August 2015

1	Einleitung	4
2	Beschreibung	5
3	Ergebnisse	9
3.1	DWR-Brennelement	10
3.1.1	Multiplikationsfaktor.....	10
3.1.2	Nuklidinventare	15
3.2	SWR-Brennelement	19
3.2.1	Multiplikationsfaktor.....	20
3.2.2	Nuklidinventare	23
3.2.3	Leistungsverteilung und stabweiser Abbrand.....	27
4	Zusammenfassung	32
5	Literatur	34

1 Einleitung

Mit dem sogenannten „AAA Workshop“ veranstaltet die Abteilung Kernbrennstoff der GRS ein jährliches Treffen von Vertretern von Forschungseinrichtungen, Gutachterorganisationen und Behörden, die im Bereich **Abbrandberechnung** von Kernbrennstoffen, **Abschirmung** ionisierender Strahlung und **Aktivierung** von Materialien unter Einfluss von Neutronenstrahlung arbeiten. Im Rahmen dieses Treffens wurden bereits in der Vergangenheit Rechenbenchmarks u. a. im Bereich der Abbrandberechnung durchgeführt. Um neuere Entwicklungen auf dem Gebiet der Entwicklung von Programmen zur Abbrandberechnung mitzuverfolgen und zu analysieren wurde der im folgenden Bericht dargestellte Benchmark zur Abbrandberechnung für je ein Druckwasserreaktor- und ein Siedewasserreaktor-Brennelement im Rahmen des 12. AAA Usergroup Treffens initiiert, das am 03.12.2012 in Garching stattfand.

Der Bericht ist wie folgt gegliedert: Zunächst erfolgt eine kurze Darstellung der im Benchmark gestellten Aufgaben. Im Anschluss werden die Ergebnisse zu den einzelnen Teilaufgaben dargestellt und diskutiert. Die erzielten Erkenntnisse werden schließlich zusammengefasst. Der Anhang enthält die vollständige Beschreibung des Benchmarks mit den detaillierten Daten zur Aufgabenstellung und die von den Benchmark-Teilnehmern eingereichten Ergebnisse in tabellarischer Form.

2 Beschreibung

Zur Bearbeitung im Benchmark wurde je eine Aufgabenstellung mit einem generischen Druckwasserreaktor-Brennelement (DWR-BE) und einem generischen Siedewasserreaktor-Brennelement (SWR-BE) definiert. Es wurden bewusst vereinfachte Modellsysteme ausgewählt, um für eine erste Bestandsaufnahme den Arbeitsaufwand für die Teilnehmer zu begrenzen. Die Brennelementspezifikationen orientieren sich an bereits in der Vergangenheit durchgeführten Rechenbenchmarks /POR 06/, /OEC 96/, wobei geringfügige Änderungen der jeweiligen Aufgabenstellungen vorgenommen wurden.

Für das DWR-BE wurde eine 18x18-24 Geometrie mit homogener Brennstoffbelegung verwendet, die in Abb. 2.1 dargestellt ist. Das Brennelement enthält keine abbrennbaren Absorber.

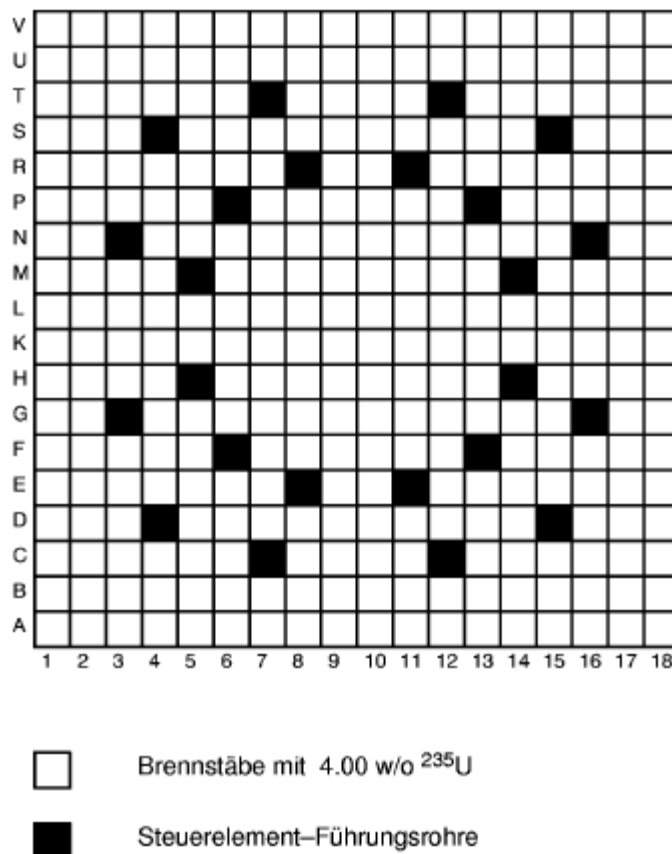


Abb. 2.1 Geometrie DWR-Brennelement

aus /POR 06/

Zu diesen beiden Brennelementen wurden die folgenden Aufgabenstellungen definiert:

Für das DWR-Brennelement:

- DWR-1) Multiplikationsfaktor k_{eff} als Funktion des Abbrands zwischen 0 und 50 GWd/tSM gemäß Tab. 2.1
- DWR-2) Vorkommen in g/tHM der in Tab. 2.2 genannten Nuklide zum Zeitpunkt des Endabbrands als Mittelwert aller Brennstäbe

Für das SWR-Brennelement:

- SWR-1) Multiplikationsfaktor k_{eff} als Funktion des Abbrands zwischen 0 und 40 GWd/tSM gemäß Tab. 2.1
- SWR-2) Vorkommen in g/tHM der in Tab. 2.2 genannten Nuklide zum Zeitpunkt des Endabbrands für den Eckstab (Stab 4 in Abb. 2.2)
- SWR-3) Stableistungsverteilung in Prozent der mittleren Brennelementleistung vor Beginn des Abbrands und beim Endabbrand
- SWR-4) Die Endabbrände aller Stäbe einzeln (in GWd/tHM)

Tab. 2.1 Abbrandzeitpunkte zur Berechnung von Multiplikationskonstanten

Abbrandschritte DWR [GWd / (tHM initial)]	Abbrandschritte SWR [GWd / (tHM initial)]
0.00	0.00
0.20	0.20
1.00	1.00
5.00	2.00
10.00	3.00
20.00	4.00
30.00	5.00
40.00	6.00
50.00	7.00
	8.00
	9.00
	10.00
	12.50
	15.00
	20.00
	30.00
	40.00

Tab. 2.2 Zu berechnende Nuklide

Actinoide	Spaltprodukte
U-234	Mo-95
U-235	Tc-99
U-236	Ru-101
U-238	Rh-103
Pu-238	Ag-109
Pu-239	Cs-133
Pu-240	Cs-134
Pu-241	Cs-137
Pu-242	Sm-147
Np-237	Sm-149
Am-241	Sm-150
Am-242m	Sm-151
Am-243	Sm-152
Cm-242	Nd-143
Cm-243	Nd-145
Cm-244	Nd-148
	Eu-153
	Eu-155
	Gd-155

3 Ergebnisse

Am vorliegenden Rechenbenchmark haben insgesamt fünf Institutionen teilgenommen. Diese haben Ergebnisse für acht verschiedene Abbrandprogramme eingereicht. Teilweise wurden Lösungen mit dem gleichen Code und unterschiedlichen Wirkungsquerschnittsbibliotheken abgegeben, so dass die Gesamtzahl der abgegebenen Lösungen 13 beträgt. Dabei war die Teilnahme an der Aufgabe für das DWR-Brennelement insgesamt etwas größer als an der Aufgabe für das SWR-Brennelement. Die eingereichten Lösungen sind in der Übersicht in Tab. 3.1 aufgeschlüsselt.

Die für die eingereichten Lösungen verwendeten Programme lassen sich grob in zwei Klassen einteilen. Die Programme KANEXT und OREST sind eindimensionale Abbrandprogramme, bei denen die Neutronenflussverhältnisse während des Abbrands unter Verwendung einer dem Moderationsverhältnis angepassten, in axialer Richtung unendlich ausgedehnten, zylindersymmetrischen Stabzelle berechnet werden. Das Ergebnis einer solchen Rechnung ist immer als Mittelung über ein Brennelement zu interpretieren. Prinzipbedingt können daher keine Inventare für Einzelstäbe berechnet werden. Dementsprechend wurden für diese beiden Programme nur Lösungen zum DWR-BE abgegeben.

Alle übrigen Programme sind zwei- oder dreidimensionale Abbrandcodes, bei denen die Flussberechnung für einen zweidimensionalen Querschnitt durch das Brennelement oder einen dreidimensionalen Abschnitt des Brennelements berechnet werden können. Mit diesen Programmen können die lokalen Flussverhältnisse für jeden Stab einzeln berücksichtigt werden. Hier können weiterhin drei Unterklassen unterschieden werden:

- Programme mit deterministischem Transportcode (TRITON (T-depl), HELIOS, DORTOREST)
- Programme mit Multigruppen Monte Carlo Transportcode (KENOREST)
- Programme mit Monte Carlo Transportcode für kontinuierliche Wirkungsquerschnitte (SERPENT)

Als Wirkungsquerschnittsevaluation kamen hauptsächlich verschiedene ENDF/B-VII Versionen zum Einsatz. In einigen Programmen werden ältere Bibliotheken wie JEF-2.2 und ENDF-B/VI verwendet, die teilweise in modifizierter Form vorliegen

Tab. 3.1 Abgegebene Lösungen zum GRS-Abbrandrechenbenchmark

Institution	Abbrandprogramm	Wirkungsquerschnittsbibliothek	DWR-BE	SWR-BE
FZ Jülich	SERPENT 2.1.9	ENDF/B-VII.0	X	X
IKE Stuttgart	TRITON (SCALE6.1)	ENDF/B-VI	X	
	TRITON (SCALE6.1)	ENDF/B-VII	X	X
KIT	KANEXT Rev. 1999	JEFF-3.1.1/ JEF-2.2	X	
NAGRA	TRITON (SCALE6.1)	ENDF/B-VII	X	X
GRS	HELIOS	ENDF/B-VI adjusted, 47 Gruppen	X	X
	TRITON (SCALE6.1)	ENDF/B-VII	X	X
	TRITON (SCALE6.0)	ENDF/B-VII	X	
	KENOREST	JEF-2.2-basiert	X	X
	KENOREST	ENDF/B-VII-basiert	X	X
	DORTOREST	JEF-2.2-basiert	X	X
	OREST	JEF-2.2-basiert	X	
	SERPENT 1.1.8	ENDF/B-VII	X	X

So wurde zum Beispiel bei HELIOS die mitgelieferte angepasste, ENDF/B-VI-basierte Bibliothek verwendet, bei KANEXT sind die Querschnitte aus JEFF-3.1.1, während die Zerfallsdaten und Spaltausbeuten aus JEF-2.2 stammen. Bei den GRS-eigenen Programmen wird eine auf JEF-2.2 basierende Bibliothek verwendet, die punktuelle Aktualisierungen enthält. Bei der entsprechenden ENDF/B-VII-basierten Bibliothek wurden nur die Wirkungsquerschnitte aktualisiert.

Im Folgenden werden die eingereichten Ergebnisse dargestellt und diskutiert.

3.1 DWR-Brennelement

3.1.1 Multiplikationsfaktor

Für das oben dargestellte DWR-Brennelement waren zwei Aufgaben zu bearbeiten. Zunächst sollte der Multiplikationsfaktor k_{eff} als Funktion des Abbrands zwischen 0 und 50 GWd/tSM angegeben werden. In Abb. 3.1 ist der Verlauf der berechneten Werte von k_{eff} über dem Abbrand für alle abgegebenen Lösungen dargestellt. Die Werte ver-

laufen in einem schmalen Band und zeigen alle den für ein DWR-Brennelement ohne abbrennbarem Absorber typischen monoton fallenden Verlauf mit einem zunächst schnellen Absinken der Reaktivität aufgrund des Xenon-Aufbaus und einem stetigen Absinken im weiteren Verlauf, das zu höheren Abbränden hin nachlässt.

Um die Unterschiede zwischen den verschiedenen Lösungen genauer analysieren zu können, ist in Abb. 3.2 die jeweilige Abweichung vom Mittelwert aller Lösungen dargestellt. Zu Beginn des Abbrands liegt die Bandbreite der k_{eff} Werte bei etwa 2000 pcm, die Graphen laufen dann bis 10 GWd/tSM leicht aufeinander zu, um sich zu höheren Abbränden hin wieder auseinander zu entwickeln. Beim Zielabbrand liegen die Unterschiede zwischen den Multiplikationsfaktoren bei etwa 5000 pcm. Die Extremwerte werden dabei von den 1d Programmen KANEXT und OREST erreicht. Auffallend sind die beiden Ausreißer im letzten Abbrandpunkt bei den Ergebnissen für IKE TRITON (SCALE6.0, ENDF/B-VII) und NAGRA TRITON (SCALE6.1, ENDF/B-VII). Der Ursprung dieser Ausreißer wurde nicht tiefer analysiert.

Auffallend in Abb. 3.2 ist weiterhin, dass TRITON in der Version aus SCALE6.0 im Vergleich zu der Version aus SCALE6.1 zu höheren k_{eff} Werten tendiert. Das gilt sowohl für die Rechnung mit ENDF/B-VI als auch für die beiden Rechnungen mit ENDF/B-VII. Bei ersterer fällt der Effekt noch etwas stärker aus. Dahingegen zeigen die Rechnungen mit KENOREST und DORTOREST (JEF-2.2) einen niedrigeren k_{eff} Wert als der Durchschnitt. Dies ist ein Effekt der so schon in der Vergangenheit zu beobachten war (siehe z. B. /OCO 03/, /HES 07/).

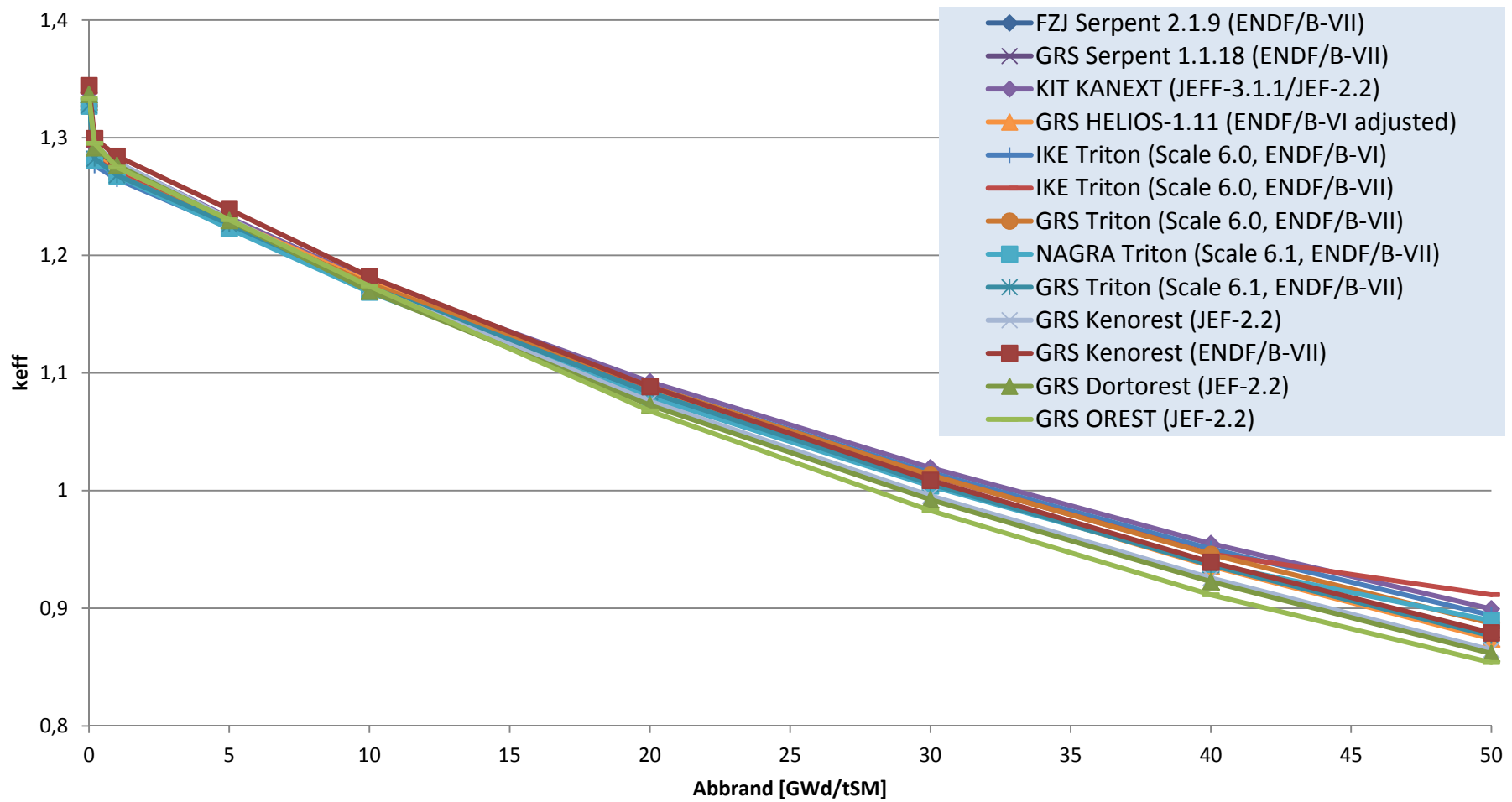


Abb. 3.1 Verlauf der Multiplikationsfaktoren über den Abbrand für alle abgegebenen Lösungen zum DWR-Brennelement

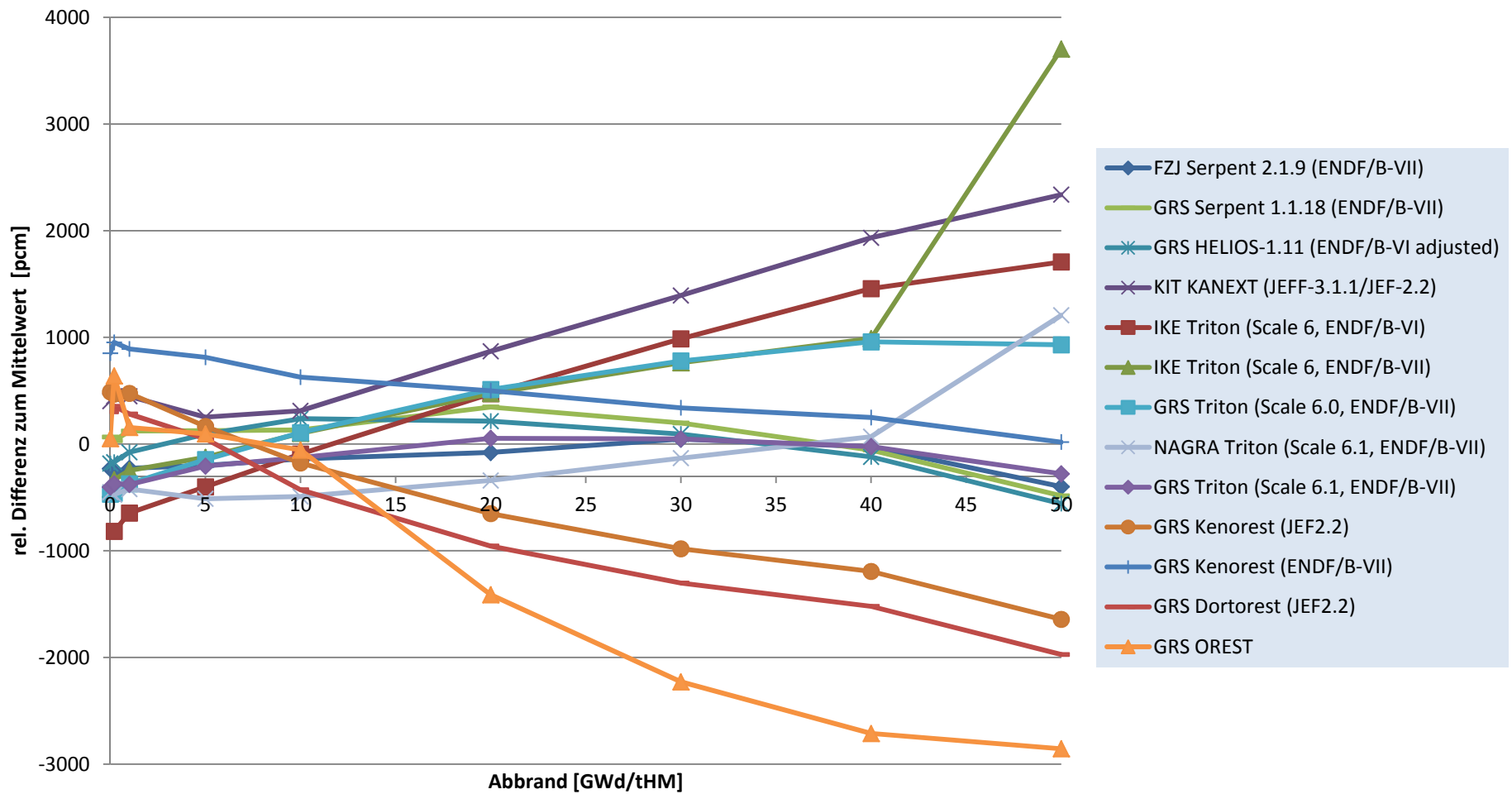


Abb. 3.2 Abweichung der einzelnen Lösungen vom Mittelwert für alle abgegebenen Lösungen für das DWR-Brennelement

Eine Vergleichsrechnung mit KENOREST mit Verwendung eines noch in der Testphase befindlichen Bibliotheksupdates auf ENDF/B-VII zeigt über den ganzen Abbrand hinweg eine Verschiebung von etwa 500 pcm hin zu höherer Reaktivität die bis zum Ende des Abbrands auf knapp 1500 pcm vergrößert.

Für das Abbrandprogramm TRITON aus dem SCALE-Paket wurden jeweils zwei Lösungen mit identischen Konfigurationen eingereicht. Zu TRITON aus SCALE6.0 gibt es zwei Rechnungen mit ENDF/B-VII und zu TRITON aus SCALE6.1 ebenfalls. Dies bietet die Möglichkeit, einen gewissen Einblick in den Beitrag, der durch unterschiedliche Modellierungen unterschiedlicher Benutzer entsteht, zu erhalten. Während die beiden SCALE6.0 Rechnungen praktisch identische Multiplikationsfaktoren liefern, gibt es bei den SCALE6.1 Rechnungen Unterschiede im Bereich von bis zu 500 pcm. Dies zeigt, dass der Einfluss des Anwenders durchaus signifikant sein kann.

Bei den TRITON-Rechnungen ist außerdem der signifikante Unterschied zwischen SCALE 6.0 und SCALE 6.1 beachtenswert, der auch bei den identischen Eingabedaten der beiden GRS-Rechnungen auftritt. Der Hintergrund dieser Beobachtung wird in Abschnitt 3.1.2 ausführlicher diskutiert.

Betrachtet man, wie in Abb. 3.3, nur die mit ENDF-B/VII erzielten Ergebnisse und die HELIOS-Rechnung mit der optimierten ENDF/B-VI Bibliothek, so zeigt sich vor allem für höhere Abbrände eine gute Konvergenz der Ergebnisse für k_{eff} im Bereich von 600 pcm. Hingewiesen sei hier auf die zumindest bei geringen Abbränden recht hohe Differenz zwischen den Ergebnissen von SERPENT 1 und SERPENT 2. Hierzu sei angemerkt, dass SERPENT 2 zwar von den eingesetzten Methoden auf SERPENT 1 aufsetzt vom Quelltext her aber komplett neu geschrieben wurde. Da die Rechnungen mit SERPENT 1 und SERPENT 2 von unterschiedlichen Institutionen stammen, werden außerdem Benutzereinflüsse eine Rolle spielen.

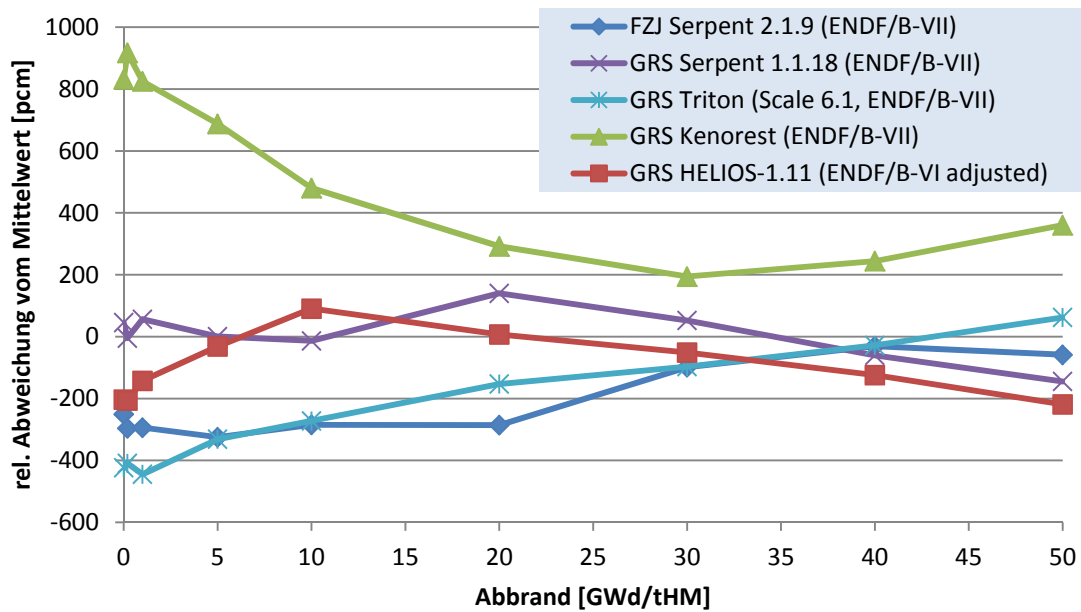


Abb. 3.3 Abweichung der k_{eff} Werte vom Mittelwert für eine Untermenge der eingereichten Lösungen

3.1.2 Nuklidinventare

Die zweite Aufgabe für das DWR-Brennelement sah die Angabe des Nuklidinventars zum Zeitpunkt des Zielabbrands von 50 GWd/tSM für die in Tab. 2.2 aufgeführte Liste an Nukliden vor. Das Nuklidinventar war dabei gemittelt über alle Stäbe des Brennelements in g/tSM anzugeben. Die Ergebnisse sind in Abb. 3.4 und Abb. 3.5 als $C/\bar{C} - 1$ Werte für Aktinoide und Spaltprodukte dargestellt, wobei C den berechneten Wert und \bar{C} den Mittelwert aller berechneten Werte darstellen. Man beachte die unterschiedlichen Skalen in den einzelnen Diagrammen.

Zur Diskussion der Ergebnisse ist zunächst festzuhalten, dass die berechneten Massen für den Abbrandindikator ^{148}Nd für alle abgegebenen Lösungen mit Ausnahme der Rechnung mit KANEXT sehr gut übereinstimmen, und somit eine konsistente Analyse der Ergebnisse möglich ist. Der ^{148}Nd -Gehalt der KANEXT-Rechnung weicht um etwa -7 % vom Mittelwert ab, was auf darauf hindeutet, dass der Zielabbrand nicht vollständig erreicht wurde. Die Ursache hierfür konnte nicht abschließend geklärt werden. Aufgrund des nicht mit den Ergebnissen der anderen Programme übereinstimmenden Abbrands sind auch für die übrigen Nuklide Abweichungen zu erwarten, die mögliche Unterschiede aufgrund anderer Effekte überlagern und den Vergleich mit den Ergeb-

nissen der anderen Abbrandprogramme verzerren würden. Aus diesem Grund werden die Ergebnisse der KANEXT-Rechnung bei der folgenden Diskussion nur eingeschränkt berücksichtigt.

Bei der Betrachtung der Uran- und Plutoniumisotope fällt zunächst die sehr gute Übereinstimmung sowohl bei ^{235}U als auch bei ^{239}Pu auf. Hier liegen alle Ergebnisse mit Ausnahme der Werte von Serpent 1.1.8, TRITON (SCALE6.1, NAGRA) und TRITON (SCALE6.0, IKE) innerhalb von 1–2 % beieinander. Die relativ großen Unterschiede zwischen den beiden Lösungen von NAGRA und GRS mit TRITON (SCALE6.1, ENDF/B-VII) deuten auf Unterschiede in der individuellen Modellierung hin, die einen signifikanten Einfluss auf die spektralen Eigenschaften des Systems haben und zeigen exemplarisch den Einfluss des Anwenders auf das Rechenergebnis. Auch die übrigen U und Pu Nuklide zeigen eine geringe Streuung im Bereich von etwa $\pm 5\%$. Lediglich ^{238}Pu zeigt eine etwas größere Streuung, wobei zum einen der relativ geringe absolute Gehalt an ^{238}Pu zu beachten ist, und zum anderen die GRS Codes KENO-REST/DORTOREST und OREST bei diesem Nuklid eine systematische Abweichung zeigen. Diese stammt vermutlich von Unterschieden zwischen den eingesetzten Wirkungsquerschnitten.

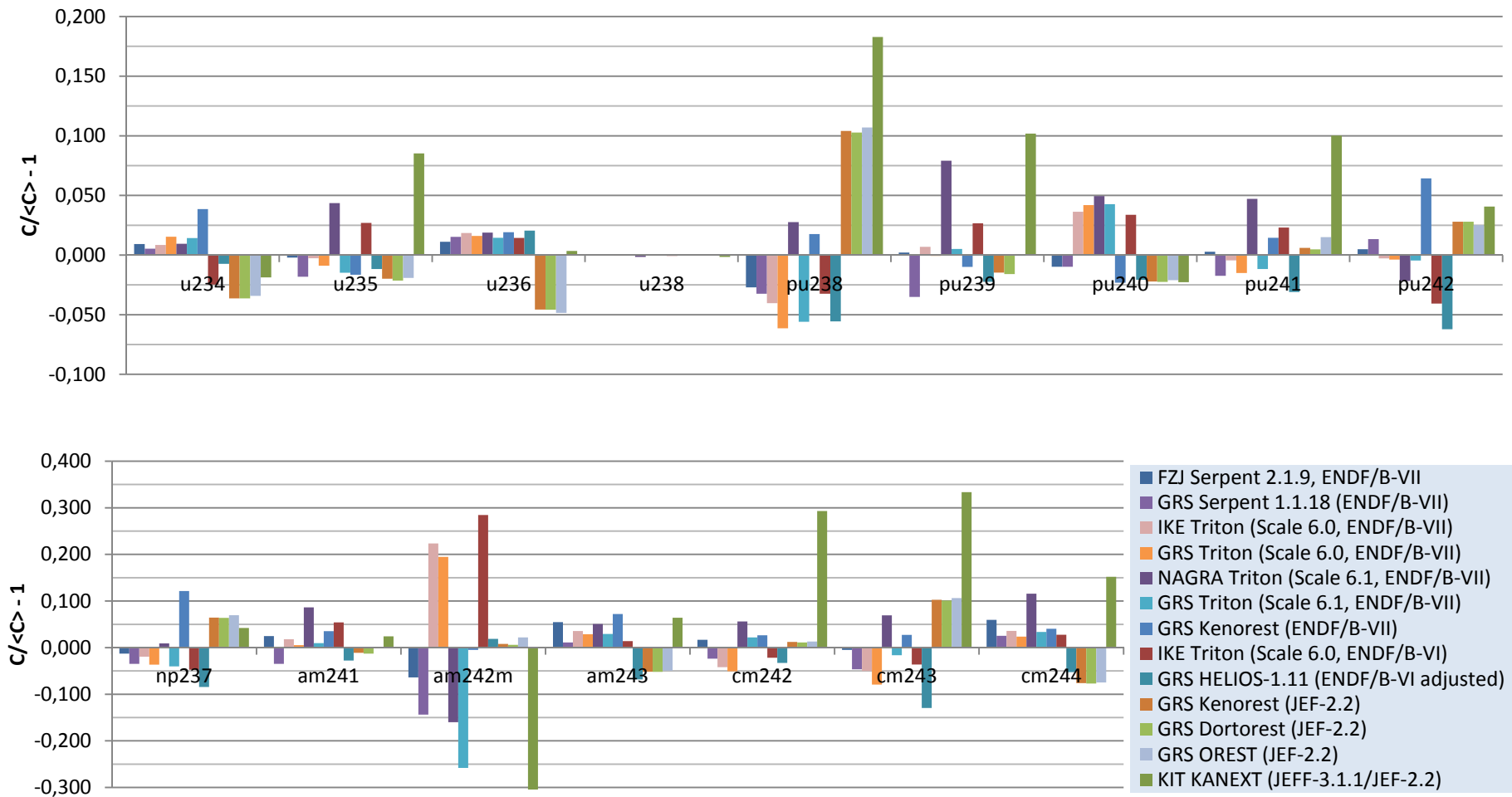


Abb. 3.4 Nuklidinventare für das DWR-Brennelement als Werte $C/\bar{C} - 1$, Aktinoide

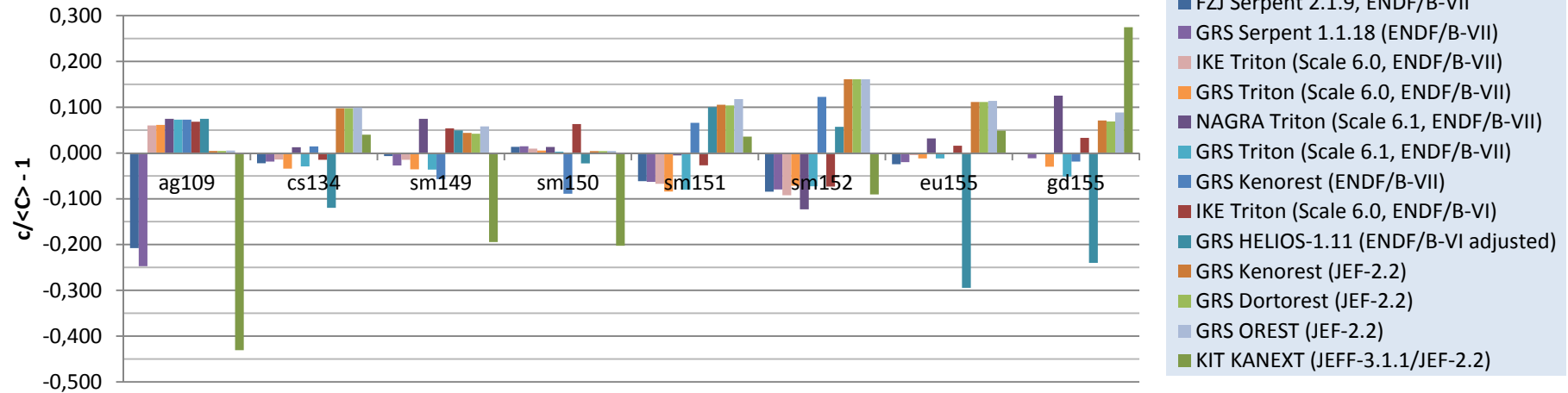
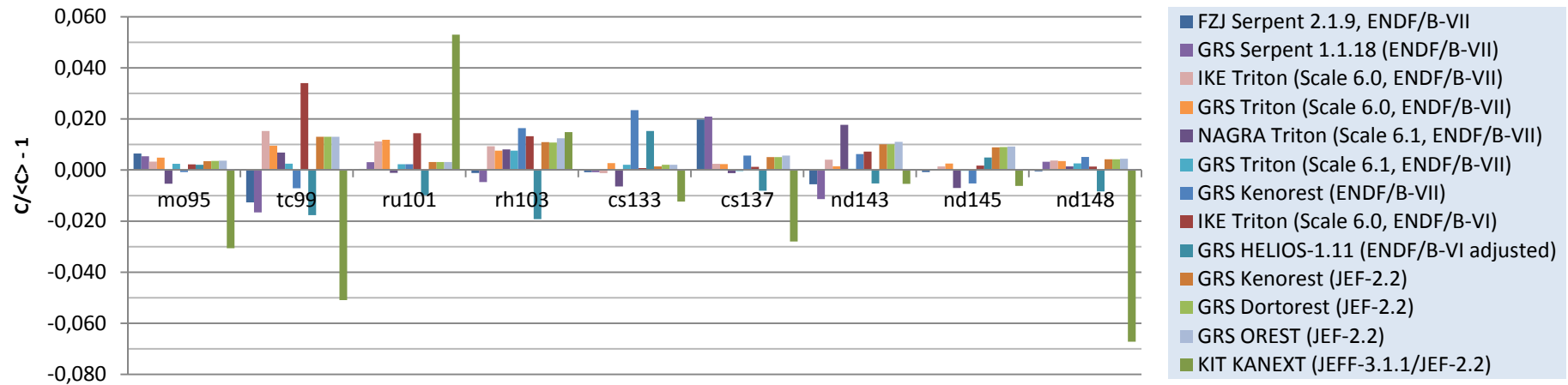


Abb. 3.5 Nuklidinventare für das DWR-Brennelement als Werte $C/\bar{C} - 1$, Spaltprodukte

Für die höheren Aktinoide ist die Streuung etwas größer insbesondere für $^{242\text{m}}\text{Am}$, ^{243}Cm und ^{244}Cm . Bei den beiden Cm-Isotopen ist ein deutlicher Unterschied zwischen den Ergebnissen der GRS Programme mit JEF-2.2 Bibliothek und den anderen Programmen zu erkennen. Hier scheint ein deutlicher Effekt der Wirkungsquerschnittsbibliotheken zu Tage zu treten. Eine sehr große Streubreite von etwa $\pm 30\%$ zeigt das bekanntermaßen schwierig zu berechnende $^{242\text{m}}\text{Am}$. Hier sind insbesondere große Unterschiede zwischen TRITON in den Versionen von SCALE6.0 und SCALE6.1 zu beobachten. Dieser Unterschied kann in einem Fehler bei der Wirkungsquerschnittsberechnung von metastabilen Zuständen in SCALE6.0 begründet liegen, von dem im SCALE Newsletter Nr. 42 /SCA 10/ berichtet wird. Laut diesem Newsletter existiert für den beschriebenen Fehler ein Patch, der in den verwendeten SCALE-Versionen allerdings nicht zum Einsatz kam.

Die in dem oberen Teil von Abb. 3.5 gezeigten Spaltprodukte zeigen alle eine sehr gute Übereinstimmung im Bereich von $\pm 2\%$. Die übrigen untersuchten Spaltprodukte weisen größere Streubreiten auf, insbesondere ^{109}Ag , ^{151}Sm , und ^{152}Sm . Bei ^{109}Ag fällt vor allem die um 20–30 % abweichenden Ergebnisse der beiden SERPENT Rechnungen auf; bei ^{155}Eu und ^{155}Gd die abweichenden Ergebnisse von Helios. Die Abweichungen bei ^{109}Ag lassen sich auf unvollständige bzw. fehlerhafte Verzweungsverhältnisse im Code von SERPENT zurückführen. Dieses Problem wurde in der Version 2.1.21 behoben. Testrechnungen haben gezeigt, dass die mit dieser Version berechnete Nuklidichte von ^{109}Ag im Bereich der anderen Codes liegt.

Insgesamt lassen sich in den Ergebnissen deutliche Bibliothekseffekte ausmachen, die allerdings bei manchen Nukliden von anderen Effekten überlagert werden. Die KENO-REST-Rechnung mit ENDF/B-VII Bibliothek verhält sich teilweise deutlich anders als die übrigen Rechenläufe mit dieser Bibliothek. Entsprechendes gilt ebenso für SERPENT.

3.2 SWR-Brennelement

Zu der Aufgabenstellung für das SWR-Brennelement wurden insgesamt 9 Lösungen eingereicht, wobei die Lösung von IKE Stuttgart nur die Aufgabe SWR-1) umfasst.

3.2.1 Multiplikationsfaktor

Der Multiplikationsfaktor für das SWR-Brennelement zeigt den typischen Verlauf, der bei einem Brennelement mit Stäben mit abbrennbarem Absorber. Nach dem Erreichen des Xenon-Gleichgewichts steigt der k_{eff} Wert zunächst an, hat dann bei etwa 12,5 GWd/tHM ein Maximum und fällt anschließend annähernd linear bis zum Erreichen des Endabbrands. In Abb. 3.7 sind die Verläufe für die einzelnen abgegebenen Lösungen gezeigt.

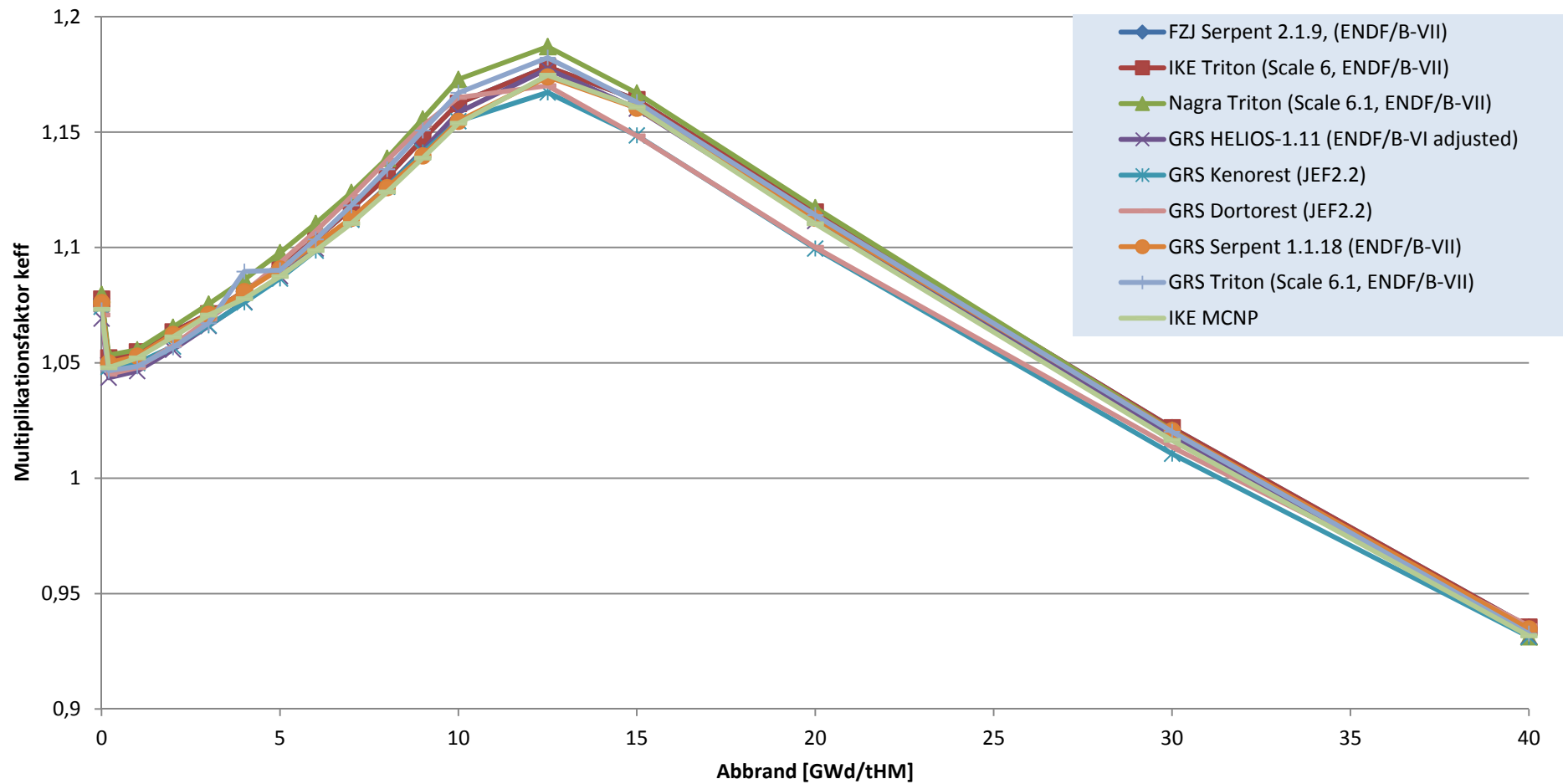


Abb. 3.6 Verlauf des Multiplikationsfaktor über den Abbrand für das SWR-Brennelement

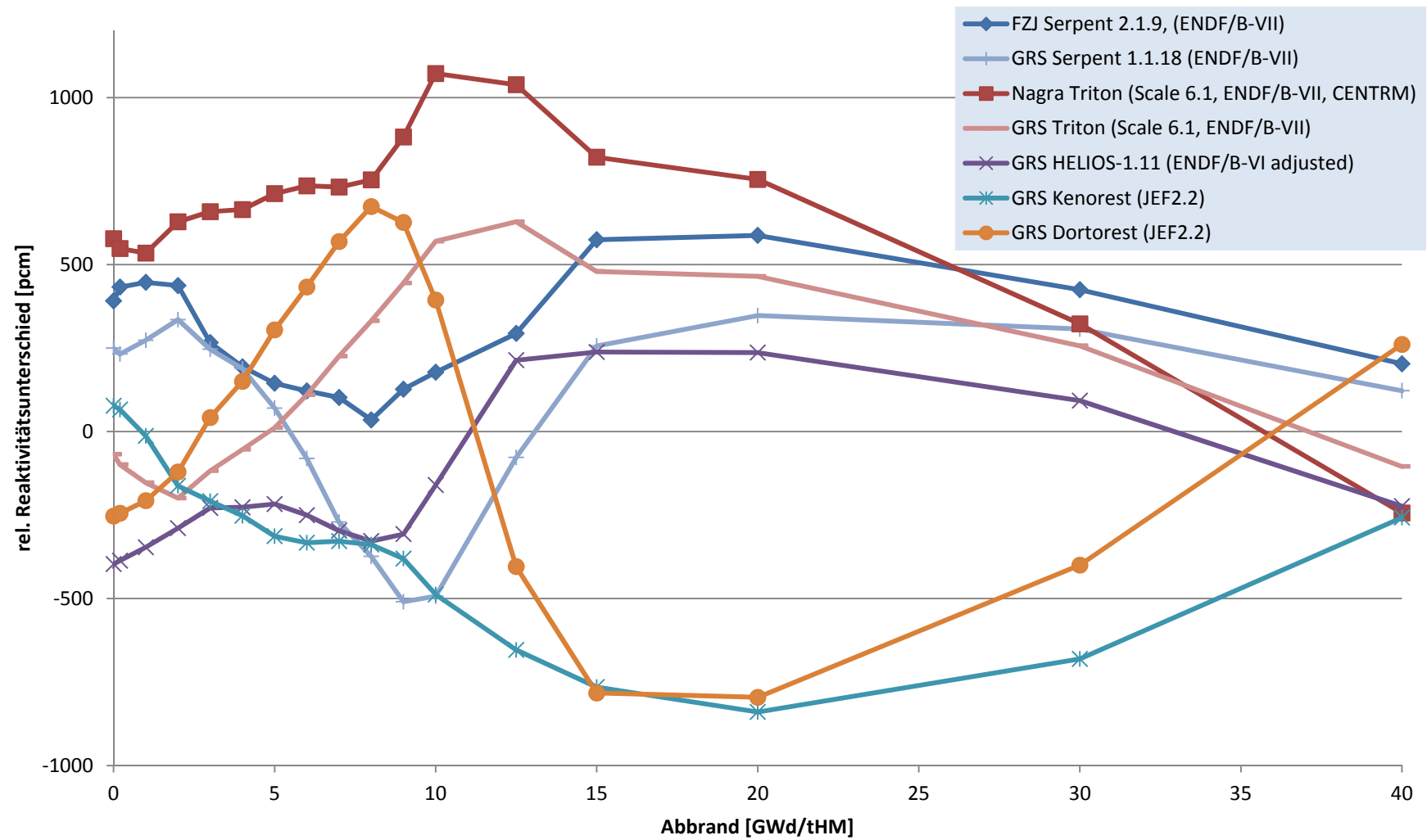


Abb. 3.7 Reaktivitätsunterschiede relativ zum Mittelwert aller Daten für das SWR-Brennelement

Abb. 3.7 stellt die relativen Differenzen von k_{eff} im Vergleich zum Mittelwert über alle Lösungen dar. Abgesehen von den beiden KENOREST/DORTOREST-Lösungen entsprechen die verfügbaren Rechenläufe der reduzierten Auswahl beim DWR-Brennelement, die in Abb. 3.5 gezeigt ist. Die Streubreite der Multiplikationsfaktoren bewegt zu Beginn des Abbrands bewegt sich ebenfalls in einem vergleichbaren Rahmen von etwa 1000 pcm. Während des Gadoliniumabbrands erhöht sich die Bandbreite leicht, danach konvergieren die k_{eff} -Werte, mit Ausnahme der KENOREST/DORTOREST-Rechnungen, deutlich. Zu Ende des Abbrands liegt die Streubreite bei etwa 500 pcm, was ebenfalls in etwa den Ergebnissen für das DWR-Brennelement entspricht. Im Bereich nach dem Gadoliniumausbrand zeigen die beiden GRS Codes KENOREST und DORTOREST ein deutlich abweichendes Verhalten. Die k_{eff} Werte liegen in diesem Abbrandbereich um 1000 pcm niedriger als die übrigen Lösungen. Dieses Verhalten von KENOREST ist bekannt, die Ursache dafür konnte noch nicht abschließend geklärt werden. Bibliothekseffekte scheinen dabei aber eine wesentliche Rolle zu spielen. Auffällig ist auch der Unterschied zwischen KENOREST und DORTOREST während des Gadoliniumausbrands. Der Gadoliniumausbrand scheint im DORTOREST schneller zu erfolgen als im KENOREST. Da beide Programme sich nur im Transportcode unterscheiden, muss die Ursache direkt in der Flussberechnung zu suchen sein.

Weiterhin ist interessant, dass die beiden von unterschiedlichen Benutzern durchgeführten SERPENT-Rechnungen reaktivitätsmäßig deutlich dichter beisammen liegen als dies bei den Rechnungen zum DWR-Brennelement der Fall ist. Dies kann als Indiz dafür gewertet werden, dass diese Unterschiede in erster Linie von Modellierungseffekten herrühren.

3.2.2 Nuklidinventare

Obwohl die Anzahl der Lösungen für die Nuklidinventare geringer als für das DWR-Brennelement ist, bestätigen die SWR-Rechnungen im Wesentlichen die Resultate der DWR-Rechnungen. Verschiedene Spezifika der SWR-Abbrandberechnung würden zunächst vermuten lassen, dass bei dieser größere Streuungen in den Nuklidinventaren zu erwarten sind. Hier sind insbesondere die komplexeren spektralen Verhältnisse, insbesondere im Bereich des Eckstabes, und der Dampfblasengehalt von im vorliegenden Fall 40 % zu nennen. Hinzu kommt außerdem die Tatsache, dass im SWR-Fall

das Nuklidinventar eines einzelnen Stabes berechnet werden sollte und nicht über das gesamte Brennelement gemittelt wurde. Eine solche größere Streuung wurde jedoch nicht beobachtet, wie in Abb. 3.8 und Abb. 3.9 ersichtlich ist.

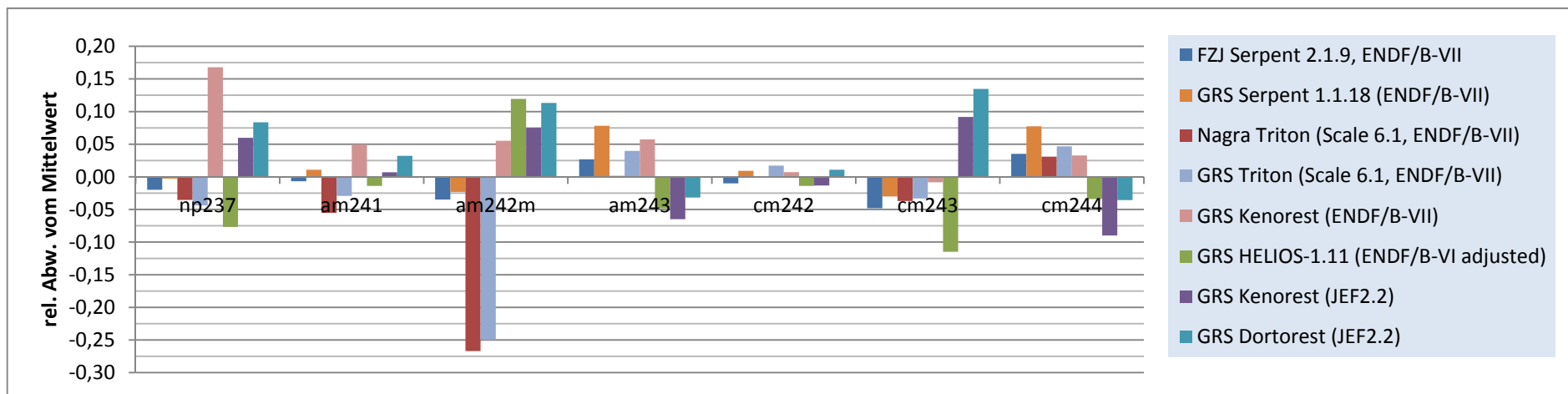
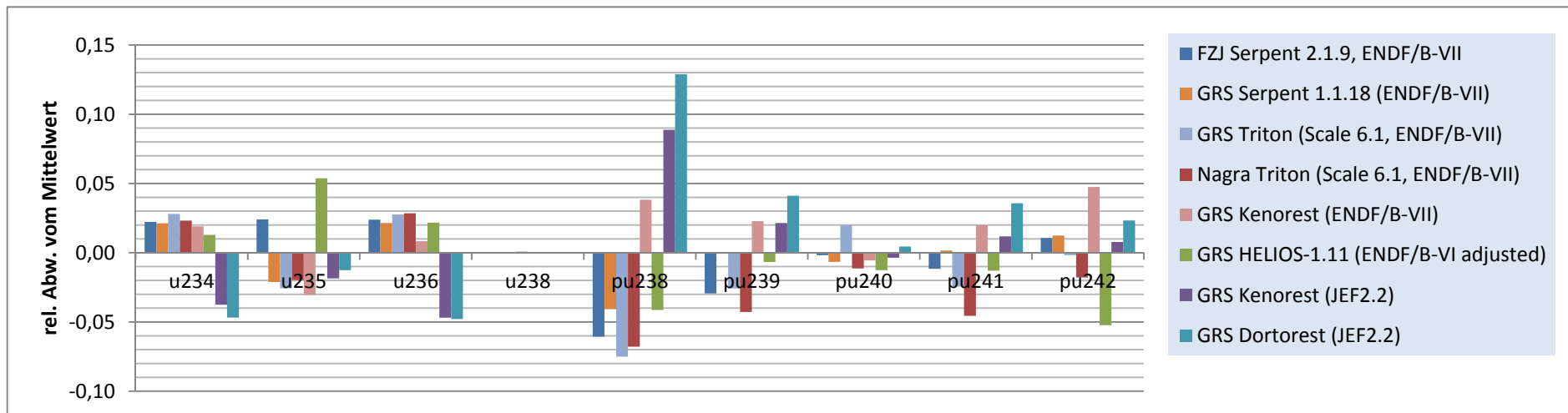


Abb. 3.8 Nuklidinventare für das SWR-Brennelement als Werte $C/\bar{C} - 1$, Aktinide

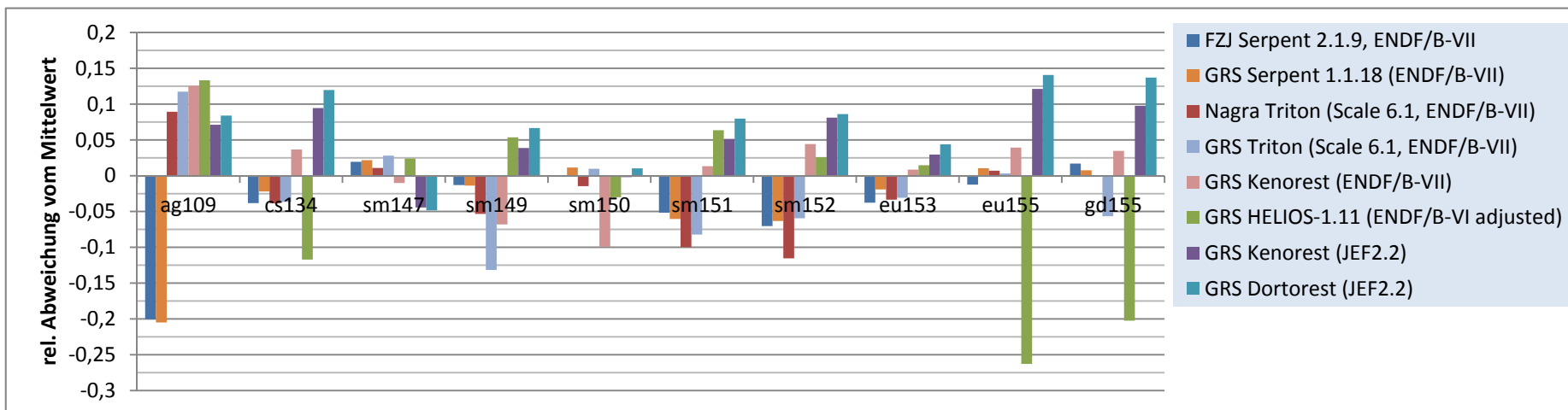
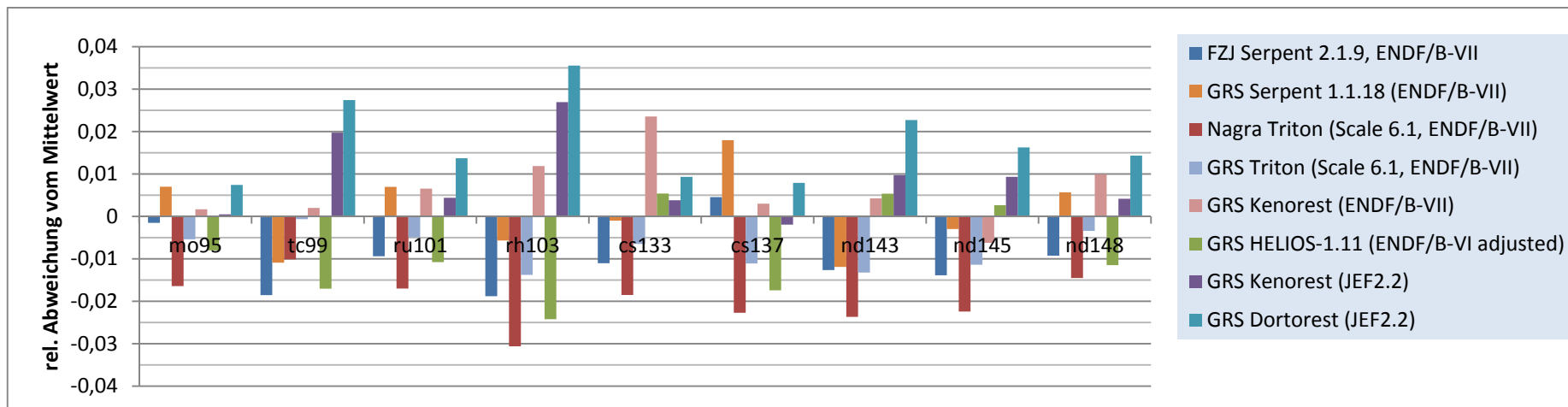


Abb. 3.9 Nuklidinventare für das SWR-Brennelement als Werte $C/\bar{C} - 1$, Spaltprodukte

Insbesondere lässt sich feststellen, dass die Streubreite der Ergebnisse in beiden Fällen im gleichen Bereich liegt, wenn man sich beim DWR-Fall auf die Codes beschränkt, für die auch im SWR-Fall Lösungen abgeleitet werden. Die beim DWR-Fall ersichtlichen Trends, was das Unter- oder Überschätzen eines Nuklids durch einen Code angeht, bestätigen sich in der SWR-Rechnung. Grundsätzlich ist die Streuung der Nuklidichten für ^{148}Nd im SWR-Fall geringfügig größer, d. h. die tatsächlich erzielten Abbrände streuen etwas stärker. Dies kann zum einen auf die komplizierteren spektralen Verhältnisse beim SWR-Brennelement und zum anderen auf die Unterschiede bei der Behandlung des Gd-Abbrands hinsichtlich des Beitrags zur thermischen Leistung zurückgeführt werden. Auf letzteres wird bei der Diskussion der Leistungsverteilungen noch einmal näher eingegangen.

3.2.3 Leistungsverteilung und stabweiser Abbrand

Zusätzlich zu den Reaktivitäts- und Nuklidinventardaten wurde für das SWR-Brennelement im Benchmark nach den stabweisen Leistungsverteilungen zu Beginn und zum Ende des Abbrands, sowie den stabweisen Endabbränden gefragt. Resultate zu diesen Aufgaben gab es von den Programmen TRITON (SCALE6.1, NAGRA und GRS), HELIOS, KENOREST, DORTOREST und SERPENT-1.1.19. In den Abbildungen Abb. 3.10 und Abb. 3.11 ist zunächst der Mittelwert der Stableistungen zu Beginn und zu Ende des Abbrands gezeigt. Zu sehen ist die zunächst geringe Leistung der Gadoliniumstäbe, die zum Ende des Abbrands fast den Wert der anderen Stäbe erreicht hat. Die umgebenden Stäbe weisen aufgrund der Wirkung der Gadoliniumstäbe zu Beginn des Abbrands eine reduzierte Leistung auf, so dass zunächst die äußeren Stäbe die höchste Leistung zeigen, während bei hohen Abbränden die Stäbe, die näher zur Mitte liegen, eine höhere Leistung aufweisen. Die Leistung der äußeren Stäbe ist aufgrund des höheren bereits erreichten Abbrands leicht reduziert. Entsprechend der Heterogenität des SWR-Brennelements sind die in Abb. 3.12 gezeigten, über alle abgegebenen Lösungen gemittelten, stabweisen Endabbrände ebenfalls stark unterschiedlich und schwanken zwischen 32 GWd/tHM für die Gadoliniumstäbe und 43 GWd/tHM für die Stäbe neben dem Wasserkanal.

Zur Illustration der Streubreite der Leistungsverteilungen sind in Tab. 3.2 und Tab. 3.3 die Standardabweichungen der Stableistungen zu Beginn und Ende des Abbrands gezeigt. Man kann sehen dass mit Ausnahme der Gadoliniumstäbe die Streuung im

Bereich $< 2\%$ liegt. Beim Endabbrand sind die Streuungen im Allgemeinen kleiner als beim frischen Brennstoff. Bei den Gadoliniumstäben liegt die Standardabweichung zu Beginn des Abbrands bei 20% und verringert sich bis zum Zielabbrand auf etwa 2% .

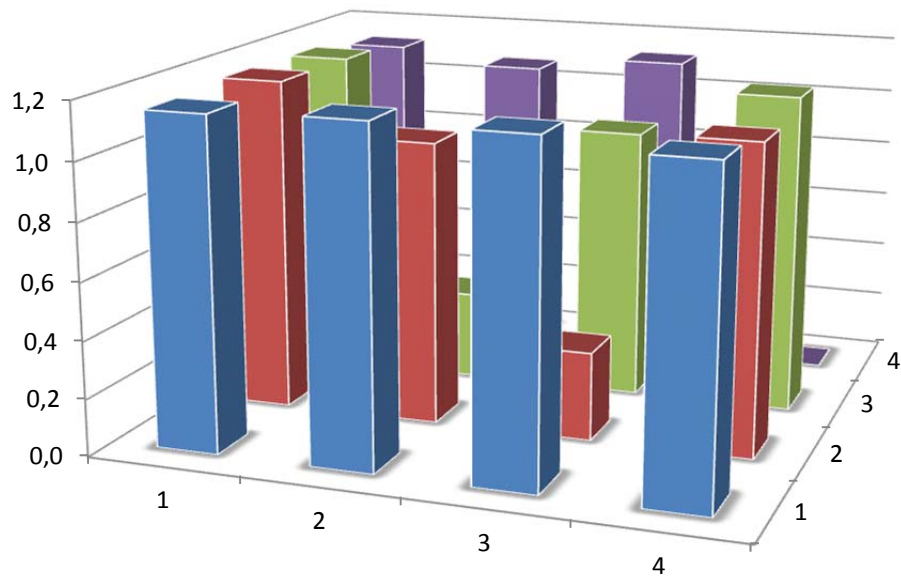


Abb. 3.10 Relative Stableistungsverteilung zu Beginn des Abbrands.

Gemittelt über alle abgegebenen Lösungen. Der Wasserkanal befindet sich an Position (4,4), der Eckstab an Position (1,1)

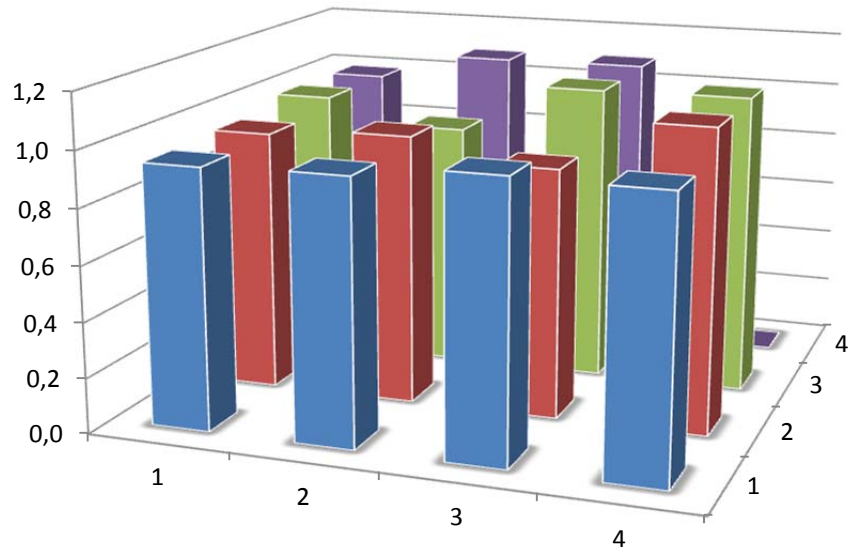


Abb. 3.11 Relative Stabileistungsverteilung zu Ende des Abbrands.

Gemittelt über alle abgegebenen Lösungen. Der Wasserkanal befindet sich an Position (4,4), der Eckstab an Position (1,1)

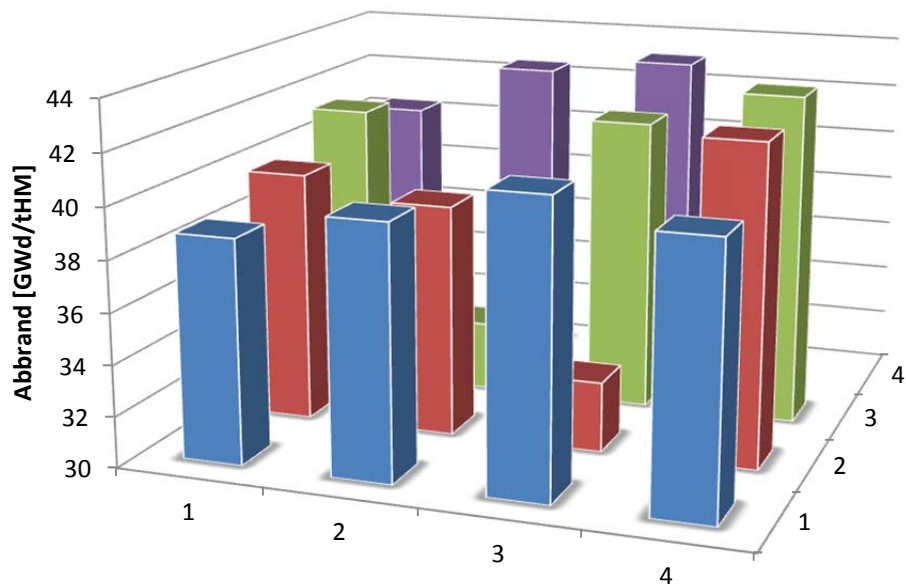


Abb. 3.12 Endabbrand stabweise.

Gemittelt über alle abgegebenen Lösungen. Der Wasserkanal befindet sich an Position (4,4), der Eckstab an Position (1,1)

Tab. 3.2 Standardabweichung der Stableistungen zu Beginn des Abbrands in Prozent.

Stableistung BOC:				
	1	2	3	4
1	0,781	0,443	0,793	0,917
2	0,517	1,154	21,572	1,673
3	0,804	21,569	2,274	1,378
4	0,971	1,647	1,385	

Tab. 3.3 Standardabweichung der Stableistungen beim Endabbrand in Prozent.

Stableistung EOC:				
	1	2	3	4
1	1,000	0,670	0,421	0,310
2	0,650	0,720	1,916	0,858
3	0,206	1,872	1,135	1,174
4	0,198	0,862	1,158	

Der Grund für diesen hohen Wert liegt in den von den Ergebnissen anderer Codes abweichenden thermischen Leistungen in Gadoliniumstäben von KENOREST und DORTOREST begründet, die bereits in früheren Vergleichsrechnungen beobachtet wurden. Zu Beginn des Abbrands sind dies 40 % der mittleren Leistung anstatt etwa 26 % bei den anderen Codes. Dieser Effekt hat auch einen leichten Einfluss auf die anderen Stäbe, da die gleiche Brennelementleistung schon bei einem etwas niedrigeren Flussniveau erreicht wird. Die übrigen Stäbe haben daher bei KENOREST/DORTOREST eine geringfügig niedrigere Leistung.

Der Hauptgrund für die Abweichungen liegt in der unterschiedlichen Berechnung der thermischen Leistung. Während Codes wie beispielsweise SERPENT hier im Wesentlichen nur die Energie aus Spaltungen berücksichtigen, wird bei KENOREST/DORTOREST zusätzlich die freigesetzte Energie aus (n,γ)-Reaktionen berücksichtigt. Der große Beitrag der Gd-Nuklide des abbrennbaren Absorbers führt dazu, dass die durch die Flussabsenkung an den Gadoliniumstäben bedingte Verringerung der Leistung kleiner ausfällt als bei den anderen Codes. Dadurch wird den Gadoliniumstäben eine höhere Leistung zugeordnet. Ein weiterer Grund für auftretende Unterschiede kann in der bei KENOREST/DORTOREST identisch verwendeten Methode

zur Resonanzbehandlung (Nordheim-Integral-Methode im Modul HAMMER) liegen. Diese ist bei der Flussberechnung in den modellierten Ringzonen eines Gadoliniumstabs ungenau. Bei TRITON ist die Lage etwas komplexer: Für die ausgegebenen Stableistungen werden Einfangreaktionen nicht berücksichtigt, wohl jedoch bei der internen materialweisen Flussnormierung. Zum Ende des Abbrands hin reduziert sich der beschriebene Effekt aufgrund des Gadoliniumausbrands.

Tab. 3.4 Standardabweichungen der Endabbrände in Prozent.

Endabbrand:	1	2	3	4
1	2,268	2,499	1,937	1,008
2	2,499	0,278	4,561	1,782
3	1,937	4,561	2,809	1,357
4	1,008	1,782	1,357	

Der beschriebene Unterschied in der Behandlung der Gadoliniumstäbe wirkt sich auch auf die Streuung der Endabbrände aus. Während die Standardabweichungen der übrigen Stäbe, wie in Tab. 3.4 gezeigt, im Bereich 1-2,5 % liegen, haben die Gadoliniumstäbe eine Standardabweichung von etwa 4,5 %. Allerdings rührt dieser höhere Wert nicht nur von den Abweichungen bei KENOREST/DORTOREST her (2 GWd/tSM weniger als der mittlere Stababbrand). Die Rechnung der NAGRA mit TRITON zeigt einen Abbrand der um 3 GWd/tSM höher liegt als der mittlere Stababbrand. Die Werte der GRS TRITON-Rechnung liegen dagegen nahe des Mittelwerts.

4 Zusammenfassung

Der vorliegende Benchmark zu Abbrandrechnungen für Leichtwasserreaktorbrennelemente bietet aufgrund der Vielfalt der eingereichten Lösungen einen guten Überblick über den aktuellen Stand von Wissenschaft und Technik in diesem Bereich. Er deckt ein großes Spektrum von Methoden insbesondere hinsichtlich der Neutronenflussberechnung ab. Hier wurden deterministische Verfahren und Monte Carlo Programme eingesetzt, letztere sowohl unter Verwendung von Multigruppen-Wirkungsquerschnittsbibliotheken als auch von solchen mit kontinuierlichen Wirkungsquerschnittsdaten. Bei der folgenden Darstellung ist zu beachten, dass ein reiner Rechenbenchmark naturgemäß keine Aussagen über die absolute Korrektheit der Ergebnisse liefert, sondern lediglich relative Vergleiche ermöglicht.

Die eingereichten Ergebnisse zeigen insgesamt eine zufriedenstellende Übereinstimmung zwischen den verschiedenen Abbrandprogrammen. So liegt zum Beispiel die Streubreite der Nuklidinventare für viele wichtige Nuklide im Bereich von unter 2 %. Gegenüber früheren Benchmarks /HES 07/ hat sich vor allem die Streuung bei den Spaltprodukten verringert. Die vormals problematischen Nuklide ^{109}Ag , ^{155}Gd und ^{155}Eu sind sogar deutlich verbessert, besonders wenn man den identifizierten Fehler in den SERPENT-Daten für ^{109}Ag berücksichtigt. Eine Hauptquelle für nach wie vor auftretende Unterschiede ist die verwendete Wirkungsquerschnittsbibliothek. Hier geht der Trend hin zur Verwendung der aktuellen ENDF/B-VII-Bibliothek. Wünschenswert wäre eine Vergleichsmöglichkeit mit anderen aktuellen Bibliotheken wie etwa JEFF-3.2 oder JENDL-4.0 um etwaige noch existierende Bibliothekseinflüsse besser untersuchen zu können.

Zunächst überraschend erscheint die Tatsache, dass die Streubreite der errechneten Nuklidinventare des zu dem im Vergleich zum DWR-Brennelement deutlich heterogeneren SWR-Brennelement in einer vergleichbaren Größenordnung liegt wie jene zum DWR-Brennelement. Dies kann z. T. mit der bei einem Rechenbenchmark naturgemäß existierenden wohldefinierten Aufgabenstellung begründet werden. Die Schwierigkeiten bei der Bestimmung von Nuklidinventaren für SWR-Brennelemente liegen in der Praxis vor allem in der Reproduktion realistischer Bestrahlungsbedingungen, wie sie im Reaktorbetrieb auftreten. Insbesondere die axiale Heterogenität wird durch das hier verwen-

dete Modell nicht wiedergegeben. Dieser Themenkreis könnte Anregungen für einen möglichen Nachfolgebenchmark bieten.

Die aufgrund der Vielzahl der möglichen Einflussgrößen mitunter nicht ganz einfache Analyse der Ergebnisse von Abbrandrechnungen zeigt darüber hinaus die Bedeutung eines vertieften Einblicks in die Berechnungsmethoden. Wichtig ist überdies die Kontrolle der verwendeten Wirkungsquerschnittsdaten beziehungsweise die Möglichkeit zwischen verschiedenen Datenevaluationen wählen zu können, um den Einfluss eventueller Unterschiede zwischen den Evaluationen besser einschätzen zu können.

5 Literatur

- /HES 07/ U. Hesse, S. Langenbuch, W. Zwermann, D. Porsch, W. Bernnat, „Comparison of Burn-Up Calculations for a UO₂ PWR Fuel Assembly“ Jahrestagung Kerntechnik 2007.
- /OCO 03/ G.J. O’Connor, P.H. Liem, “Burn-up Credit Criticality Benchmark PHASE IV-B: Results and Analysis of MOX Fuel Depletion Calculations”, NEA/NSC/DOC(2003)4, April 2003.
- /POR 06/ D. Porsch, U. Hesse, W. Zwermann, W. Bernnat, Spezifikation eines DWR-Brennelementes, UO₂ (4 w/o U-235) 18x18–24, für Vergleichsrechnungen, 2004.
- /OEC 96/ Y. NAITO, H. OKUNO², OECD/NEA Burnup Credit Criticality Benchmark Phase IIIB, Nuclide Composition and Neutron Multiplication Factor of BWR Spent Fuel Assembly, JAERI, 1996.
- /SCA 10/ SCALE Newsletter Number 42, Summer/Fall 2010. Oak Ridge National Laboratory (ORNL), USA, 2010.
http://scale.ornl.gov/news/scale_42_fall2010.pdf zuletzt abgerufen am 30.07.2015.

A Rohdaten der Beiträge zum Rechenbenchmark

A.1 DWR-1: k_{eff} -Werte

Abbrand [GWd]	FZJ Serpent 2.1.9 (ENDF/B-VII)	IKE Triton (Scale 6.0, ENDF/B-VI)	IKE Triton (Scale 6.0, ENDF/B-VII)	NAGRA Triton (Scale 6.1, ENDF/B-VII)	KIT KANEXT (JEFF-3.1.1/JEF-2.2)	GRS HELIOS-1.11 (ENDF/B-VI adjusted)	GRS Kenorest (JEF-2.2)
0	1.32982		1.3273	1.32689	1.33826	1.33046	1.33942
0.2	1.28364	1.2765	1.2827	1.28089	1.29273	1.2848	1.29301
1	1.27	1.2647	1.2698	1.26754	1.2786	1.27193	1.27896
5	1.22658	1.2241	1.2275	1.22274	1.23215	1.23019	1.23108
10	1.17292	1.1735	1.1757	1.16878	1.17822	1.17734	1.17247
20	1.08217	1.0881	1.0882	1.07934	1.09245	1.08535	1.07597
30	1.00588	1.0153	1.0131	1.00409	1.01942	1.00636	0.99555
40	0.936612	0.9505	0.9461	0.93751	0.95498	0.93574	0.92568
50	0.875442	0.8940	0.9115	0.88956	0.8995	0.87404	0.86451

Abbrand [GWd]	GRS Kenorest (ENDF/B-VII)	GRS Dortorest (JEF-2.2)	GRS Serpent 1.1.18 (ENDF/B-VII)	GRS Triton (Scale 6.1, ENDF/B-VII)	GRS Triton (Scale 6.0, ENDF/B-VII)	GRS OREST (JEF-2.2)	Mittelwert
0	1.34425	1.336913	1.33377	1.32752	1.32664	1.333572	1.333
0.2	1.29926	1.291544	1.28739	1.28218	1.28106	1.29522	1.287
1	1.28425	1.276495	1.27446	1.26808	1.26817	1.27489	1.273
5	1.23904	1.229669	1.23058	1.2265	1.22726	1.23022	1.229
10	1.18192	1.169527	1.17611	1.17307	1.17581	1.1739	1.175
20	1.08844	1.072675	1.08679	1.08361	1.08857	1.06774	1.083
30	1.00883	0.992315	1.0074	1.0059	1.01325	0.98301	1.005
40	0.93919	0.922611	0.936336	0.93664	0.94584	0.91145	0.937
50	0.87911	0.861608	0.874687	0.8765	0.88713	0.85385	0.879

A.2 DWR-2: Nuklidinventare

Nuklid	Masse [g/tHM]	FZJ Serpent 2.1.9 (ENDF/B-VII)	IKE Triton (Scale 6.0, ENDF/B-VI)	IKE Triton (Scale 6, ENDF/B-VII)	GRS HELIOS-1.11	GRS Kenorest	GRS Kenorest ENDF-B7	GRS Dortorest (JEF2.2)	GRS Serpent 1.1.18	GRS Triton (Scale 6.1)	GRS Triton (Scale 6.0)	GRS OREST	KIT KA-NEXT	NAGRA Triton (Scale 6.1, ENDF/B-VII)
u234	1.91E+02	1.85E+02	1.91E+02	1.88E+02	1.83E+02	1.97E+02	1.83E+02	1.91E+02	1.92E+02	1.93E+02	1.83E+02	1.86E+02	1.91E+02	
u235	6.52E+03	6.71E+03	6.52E+03	6.46E+03	6.40E+03	6.43E+03	6.39E+03	6.42E+03	6.44E+03	6.48E+03	6.41E+03	7.09E+03	6.82E+03	
u236	5.44E+03	5.46E+03	5.48E+03	5.49E+03	5.14E+03	5.49E+03	5.14E+03	5.47E+03	5.46E+03	5.47E+03	5.12E+03	5.40E+03	5.48E+03	
u238	9.23E+05	9.23E+05	9.23E+05	9.24E+05	9.24E+05	9.23E+05	9.24E+05	9.24E+05	9.23E+05	9.24E+05	9.24E+05	9.22E+05	9.22E+05	
pu238	3.02E+02	3.00E+02	2.98E+02	2.93E+02	3.42E+02	3.16E+02	3.42E+02	3.00E+02	2.93E+02	2.91E+02	3.43E+02	3.67E+02	3.19E+02	
pu239	5.86E+03	6.00E+03	5.88E+03	5.71E+03	5.76E+03	5.79E+03	5.75E+03	5.64E+03	5.87E+03	5.84E+03	5.84E+03	6.44E+03	6.31E+03	
pu240	2.80E+03	2.92E+03	2.93E+03	2.77E+03	2.76E+03	2.76E+03	2.76E+03	2.80E+03	2.95E+03	2.94E+03	2.77E+03	2.76E+03	2.96E+03	
pu241	1.76E+03	1.80E+03	1.75E+03	1.71E+03	1.77E+03	1.79E+03	1.77E+03	1.73E+03	1.74E+03	1.73E+03	1.79E+03	1.94E+03	1.84E+03	
pu242	9.21E+02	8.79E+02	9.14E+02	8.59E+02	9.42E+02	9.75E+02	9.42E+02	9.29E+02	9.12E+02	9.13E+02	9.39E+02	9.54E+02	8.96E+02	
np237	6.77E+02	6.53E+02	6.72E+02	6.28E+02	7.30E+02	7.69E+02	7.29E+02	6.69E+02	6.58E+02	6.60E+02	7.33E+02	7.14E+02	6.92E+02	
am241	5.87E+01	6.04E+01	5.83E+01	5.57E+01	5.67E+01	5.93E+01	5.66E+01	5.67E+01	5.79E+01	5.76E+01	5.72E+01	5.87E+01	6.23E+01	
am242m	9.47E-01	1.30E+00	1.24E+00	1.03E+00	1.02E+00	1.01E+00	1.02E+00	9.18E-01	7.51E-01	1.21E+00	1.03E+00	1.12E-02	8.50E-01	
am243	2.47E+02	2.37E+02	2.42E+02	2.18E+02	2.22E+02	2.51E+02	2.22E+02	2.46E+02	2.41E+02	2.41E+02	2.22E+02	2.49E+02	2.46E+02	
cm242	2.48E+01	2.39E+01	2.34E+01	2.36E+01	2.47E+01	2.51E+01	2.47E+01	2.47E+01	2.50E+01	2.32E+01	2.48E+01	3.16E+01	2.58E+01	
cm243	7.07E-01	6.85E-01	6.75E-01	6.19E-01	7.84E-01	7.30E-01	7.82E-01	7.03E-01	6.99E-01	6.54E-01	7.86E-01	9.48E-01	7.60E-01	
cm244	1.07E+02	1.04E+02	1.05E+02	9.59E+01	9.35E+01	1.05E+02	9.34E+01	1.08E+02	1.05E+02	1.04E+02	9.37E+01	1.17E+02	1.13E+02	

	Masse [g/tHM]												
Nuklid	FZJ Serpent 2.1.9 (ENDF/B- VII)	IKE Tri- ton (Scale 6.0, ENDF/B- VI)	IKE Tri- ton (Scale 6, ENDF/B- VII)	GRS HELIOS- 1.11	GRS Kenorest	GRS Kenorest ENDF-B7	GRS Dortorest (JEF2.2)	GRS Serpent 1.1.18	GRS Triton (Scale 6.1)	GRS Triton (Scale 6.0)	GRS OREST	KIT KA- NEXT	NAGRA Triton (Scale 6.1, ENDF/B- VII)
mo95	9.91E+02	9.87E+02	9.88E+02	9.87E+02	9.88E+02	9.84E+02	9.88E+02	9.91E+02	9.87E+02	9.90E+02	9.88E+02	9.55E+02	9.80E+02
tc99	1.13E+03	1.18E+03	1.16E+03	1.12E+03	1.16E+03	1.13E+03	1.16E+03	1.12E+03	1.14E+03	1.15E+03	1.16E+03	1.08E+03	1.15E+03
ru101	1.15E+03	1.17E+03	1.17E+03	1.14E+03	1.16E+03	1.16E+03	1.16E+03	1.16E+03	1.16E+03	1.17E+03	1.16E+03	1.21E+03	1.15E+03
rh103	5.99E+02	6.08E+02	6.06E+02	5.89E+02	6.07E+02	6.10E+02	6.07E+02	5.99E+02	6.05E+02	6.05E+02	6.08E+02	6.09E+02	6.05E+02
ag109	8.90E+01	1.20E+02	1.19E+02	1.21E+02	1.13E+02	1.21E+02	1.13E+02	8.53E+01	1.21E+02	1.19E+02	1.13E+02	6.39E+01	1.21E+02
cs133	1.59E+03	1.59E+03	1.59E+03	1.61E+03	1.59E+03	1.63E+03	1.59E+03	1.59E+03	1.59E+03	1.59E+03	1.59E+03	1.57E+03	1.58E+03
cs134	2.30E+02	2.32E+02	2.32E+02	2.07E+02	2.59E+02	2.39E+02	2.59E+02	2.31E+02	2.29E+02	2.28E+02	2.59E+02	2.45E+02	2.38E+02
cs137	1.85E+03	1.82E+03	1.82E+03	1.80E+03	1.83E+03	1.83E+03	1.83E+03	1.86E+03	1.82E+03	1.82E+03	1.83E+03	1.77E+03	1.82E+03
sm147	1.06E+02	1.09E+02	1.07E+02	1.07E+02	9.84E+01	1.02E+02	9.85E+01	1.06E+02	1.08E+02	1.08E+02	9.85E+01	9.96E+01	1.04E+02
sm149	2.39E+00	2.54E+00	2.37E+00	2.53E+00	2.52E+00	2.27E+00	2.51E+00	2.36E+00	2.32E+00	2.32E+00	2.55E+00	1.94E+00	2.59E+00
sm150	4.41E+02	4.63E+02	4.40E+02	4.26E+02	4.37E+02	3.97E+02	4.37E+02	4.42E+02	4.37E+02	4.38E+02	4.38E+02	3.47E+02	4.41E+02
sm151	1.43E+01	1.48E+01	1.42E+01	1.67E+01	1.68E+01	1.62E+01	1.68E+01	1.43E+01	1.40E+01	1.39E+01	1.70E+01	1.58E+01	1.51E+01
sm152	1.37E+02	1.39E+02	1.36E+02	1.59E+02	1.74E+02	1.68E+02	1.74E+02	1.38E+02	1.39E+02	1.39E+02	1.74E+02	1.36E+02	1.32E+02
nd143	1.04E+03	1.05E+03	1.05E+03	1.04E+03	1.05E+03	1.05E+03	1.05E+03	1.03E+03	1.04E+03	1.04E+03	1.05E+03	1.04E+03	1.06E+03
nd145	9.47E+02	9.49E+02	9.49E+02	9.52E+02	9.56E+02	9.42E+02	9.56E+02	9.49E+02	9.47E+02	9.50E+02	9.56E+02	9.41E+02	9.41E+02
nd148	5.55E+02	5.56E+02	5.57E+02	5.51E+02	5.58E+02	5.58E+02	5.58E+02	5.57E+02	5.57E+02	5.57E+02	5.58E+02	5.18E+02	5.56E+02
eu153	1.76E+02	1.80E+02	1.78E+02	1.85E+02	1.87E+02	1.83E+02	1.87E+02	1.77E+02	1.77E+02	1.78E+02	1.87E+02	1.88E+02	1.77E+02
eu155	1.30E+01	1.35E+01	1.32E+01	9.38E+00	1.48E+01	1.33E+01	1.48E+01	1.30E+01	1.31E+01	1.31E+01	1.48E+01	1.39E+01	1.37E+01
gd155	9.75E-02	1.01E-01	9.76E-02	7.43E-02	1.05E-01	9.59E-02	1.05E-01	9.69E-02	9.27E-02	9.48E-02	1.06E-01	1.25E-01	1.10E-01

A.3 SWR-1: k_{eff} -Werte

Abbrand [GWd]	FZJ Serpent 2.1.9, (ENDF/B-VII)	IKE Triton (Scale 6, ENDF/B-VII)	Nagra Triton (Scale 6.1, ENDF/B-VII)	GRS HELIOS-1.11 (ENDF/B-VI adjusted)	GRS Kenorest (JEF2.2)	GRS Dortorest (JEF2.2)	GRS Serpent 1.1.18 (ENDF/B-VII)	GRS Triton (Scale 6.1, ENDF/B-VII)	IKE MCNP	GRS Kenorest (ENDF/B-VII)
0	1.07764	1.07764	1.07964	1.06918	1.07427	1.07072	1.07612	1.07271	1.07316	1.07836
0.2	1.05213	1.05213	1.05334	1.04355	1.04829	1.045036	1.05003	1.04656	1.04786	1.05314
1	1.05474	1.05474	1.05566	1.04641	1.04991	1.047875	1.05292	1.04844	1.05209	1.05506
2	1.06339	1.06339	1.06541	1.0557	1.05704	1.05748	1.06231	1.05665	1.06119	1.06307
3	1.07124	1.07124	1.07543	1.06595	1.06617	1.068844	1.07103	1.06714	1.07068	1.07392
4	1.08096	1.08096	1.08604	1.07642	1.07615	1.08049	1.0809	1.07829	1.07772	1.08470
5	1.09151	1.09151	1.0977	1.08757	1.08652	1.093252	1.0907	1.09006	1.08739	1.09663
6	1.10361	1.10361	1.11038	1.09951	1.0986	1.107041	1.10138	1.10348	1.09863	1.10995
7	1.11679	1.11679	1.12382	1.11234	1.11199	1.121997	1.11263	1.11817	1.11037	1.12439
8	1.13052	1.13052	1.13864	1.12642	1.1263	1.137739	1.1259	1.13387	1.12400	1.13963
9	1.14698	1.14698	1.15563	1.14201	1.14117	1.1527	1.13969	1.15062	1.13871	1.15550
10	1.16244	1.16244	1.17282	1.15852	1.15472	1.164949	1.15466	1.16699	1.15377	1.16911
12.5	1.17828	1.17828	1.18703	1.17734	1.16715	1.17008	1.17392	1.18221	1.17459	1.18065
15	1.16403	1.16403	1.16689	1.16014	1.14853	1.148322	1.16035	1.16293	1.16071	1.16098
20	1.11535	1.11535	1.11721	1.11146	1.09953	1.100014	1.11269	1.11399	1.11024	1.11278
30	1.02183	1.02183	1.02079	1.01845	1.01058	1.013439	1.02063	1.02012	1.01638	1.02413
40	0.935499	0.935499	0.93133	0.93152	0.9312	0.936041	0.934746	0.93263	0.93164	0.94485

A.4 SWR-2: Nuklidinventare

	Masse [g/tHM]							
Nuklid	FZJ Serpent 2.1.9	Nagra Triton (Scale 6.1)	GRS HELIOS-1.11	GRS Kenorest	GRS Dortorest	GRS Serpent 1.1.18	GRS Triton (Scale 6.1)	GRS Kenorest (ENDF/B-VII)
u234	9.43E+01	9.44E+01	9.35E+01	8.88E+01	8.80E+01	9.42E+01	9.49E+01	9.40E+01
u235	1.71E+03	1.64E+03	1.76E+03	1.64E+03	1.65E+03	1.64E+03	1.63E+03	1.62E+03
u236	3.28E+03	3.30E+03	3.28E+03	3.06E+03	3.05E+03	3.28E+03	3.30E+03	3.23E+03
u238	9.46E+05	9.46E+05	9.46E+05	9.46E+05	9.45E+05	9.45E+05	9.46E+05	9.45E+05
pu238	1.62E+02	1.60E+02	1.65E+02	1.87E+02	1.94E+02	1.65E+02	1.59E+02	1.79E+02
pu239	3.59E+03	3.54E+03	3.68E+03	3.78E+03	3.85E+03	3.70E+03	3.61E+03	3.79E+03
pu240	2.57E+03	2.54E+03	2.54E+03	2.56E+03	2.58E+03	2.56E+03	2.62E+03	2.56E+03
pu241	1.12E+03	1.08E+03	1.12E+03	1.14E+03	1.17E+03	1.13E+03	1.10E+03	1.15E+03
pu242	9.86E+02	9.58E+02	9.25E+02	9.83E+02	9.98E+02	9.88E+02	9.74E+02	1.02E+03
np237	3.72E+02	3.67E+02	3.51E+02	4.03E+02	4.12E+02	3.79E+02	3.63E+02	4.44E+02
am241	3.96E+01	3.76E+01	3.93E+01	4.01E+01	4.11E+01	4.03E+01	3.87E+01	4.18E+01
am242m	5.00E-01	3.80E-01	5.80E-01	5.57E-01	5.77E-01	5.06E-01	3.89E-01	5.47E-01
am243	2.17E+02	2.12E+02	2.01E+02	1.98E+02	2.05E+02	2.28E+02	2.20E+02	2.23E+02
cm242	1.88E+01	1.90E+01	1.87E+01	1.87E+01	1.92E+01	1.92E+01	1.93E+01	1.91E+01
cm243	4.74E-01	4.80E-01	4.41E-01	5.44E-01	5.66E-01	4.84E-01	4.82E-01	4.94E-01
cm244	8.45E+01	8.41E+01	7.88E+01	7.43E+01	7.87E+01	8.79E+01	8.54E+01	8.43E+01

	Masse [g/tHM]							
Nuklid	FZJ Serpent 2.1.9	Nagra Triton (Scale 6.1)	GRS HELIOS-1.11	GRS Kenorest	GRS Dortorest	GRS Serpent 1.1.18	GRS Triton (Scale 6.1)	GRS Kenorest (ENDF/B-VII)
mo95	7.63E+02	7.52E+02	7.58E+02	7.65E+02	7.70E+02	7.70E+02	7.60E+02	7.66E+02
tc99	8.81E+02	8.89E+02	8.82E+02	9.15E+02	9.22E+02	8.88E+02	8.97E+02	9.00E+02
ru101	9.14E+02	9.07E+02	9.13E+02	9.27E+02	9.35E+02	9.29E+02	9.18E+02	9.29E+02
rh103	4.89E+02	4.83E+02	4.87E+02	5.12E+02	5.16E+02	4.96E+02	4.92E+02	5.05E+02
ag109	8.11E+01	1.10E+02	1.15E+02	1.09E+02	1.10E+02	8.06E+01	1.13E+02	1.14E+02
cs133	1.25E+03	1.24E+03	1.27E+03	1.27E+03	1.28E+03	1.26E+03	1.26E+03	1.30E+03
cs134	1.48E+02	1.48E+02	1.36E+02	1.69E+02	1.73E+02	1.51E+02	1.49E+02	1.60E+02
cs137	1.43E+03	1.39E+03	1.40E+03	1.42E+03	1.43E+03	1.45E+03	1.41E+03	1.43E+03
sm147	1.01E+02	1.00E+02	1.01E+02	9.46E+01	9.42E+01	1.01E+02	1.02E+02	9.80E+01
sm149	1.06E+00	1.02E+00	1.14E+00	1.12E+00	1.15E+00	1.06E+00	9.36E-01	1.00E+00
sm150	3.25E+02	3.21E+02	3.16E+02	3.25E+02	3.29E+02	3.29E+02	3.28E+02	2.93E+02
sm151	7.60E+00	7.22E+00	8.53E+00	8.43E+00	8.66E+00	7.53E+00	7.36E+00	8.13E+00
sm152	1.31E+02	1.25E+02	1.45E+02	1.52E+02	1.53E+02	1.32E+02	1.33E+02	1.47E+02
nd143	6.32E+02	6.25E+02	6.43E+02	6.46E+02	6.55E+02	6.32E+02	6.32E+02	6.43E+02
nd145	7.10E+02	7.04E+02	7.22E+02	7.27E+02	7.32E+02	7.18E+02	7.12E+02	7.16E+02
nd148	4.30E+02	4.28E+02	4.29E+02	4.36E+02	4.40E+02	4.37E+02	4.33E+02	4.38E+02
eu153	1.42E+02	1.42E+02	1.50E+02	1.52E+02	1.54E+02	1.45E+02	1.43E+02	1.49E+02
eu155	1.01E+01	1.03E+01	7.56E+00	1.15E+01	1.17E+01	1.04E+01	1.03E+01	1.07E+01
gd155	5.08E-02	5.00E-02	3.99E-02	5.49E-02	5.68E-02	5.04E-02	4.72E-02	5.17E-02

A.5 SWR-3: Stableistungen

Tab. 5.1 NAGRA Triton

Stableistung BOC:				
	1	2	3	4
A	1.147	1.168	1.172	1.139
B	1.168	0.991	0.266	1.081
C	1.172	0.266	0.958	1.130
D	1.139	1.081	1.130	

Stableistung EOC:				
	1	2	3	4
A	0.922	0.944	0.989	0.987
B	0.944	0.981	0.882	1.098
C	0.989	0.882	1.100	1.101
D	0.987	1.098	1.101	

Tab. 5.2 GRS Triton

Stableistung BOC:				
	1	2	3	4
A	1.156	1.172	1.166	1.133
B	1.172	0.993	0.264	1.078
C	1.166	0.264	0.952	1.137
D	1.133	1.078	1.137	

Stableistung EOC:				
	1	2	3	4
A	0.934	0.943	0.988	0.987
B	0.943	0.973	0.897	1.089
C	0.988	0.897	1.091	1.098
D	0.987	1.089	1.098	

Tab. 5.3 GRS Helios

Stableistung BOC:				
	1	2	3	4
A	1.142	1.163	1.162	1.119
B	1.163	1.005	0.269	1.09
C	1.162	0.269	0.987	1.129
D	1.12	1.09	1.129	

Stableistung EOC:				
	1	2	3	4
A	0.948	0.952	0.994	0.991
B	0.952	0.969	0.892	1.079
C	0.994	0.892	1.084	1.092
D	0.991	1.079	1.092	

Tab. 5.4 GRS Serpent 1.1.18

Stableistung BOC:				
	1	2	3	4
A	1.167	1.174	1.163	1.127
B	1.178	0.994	0.265	1.077
C	1.165	0.265	0.957	1.122
D	1.134	1.070	1.124	

Stableistung EOC:				
	1	2	3	4
A	0.950	0.955	1.001	0.994
B	0.952	0.969	0.886	1.082
C	0.991	0.889	1.082	1.097
D	0.989	1.085	1.095	

Tab. 5.5 GRS KENOREST

Stableistung BOC:				
	1	2	3	4
A	1.150	1.160	1.150	1.110
B	1.160	0.980	0.400	1.050
C	1.150	0.400	0.940	1.100
D	1.110	1.050	1.100	

Stableistung EOC:				
	1	2	3	4
A	0.941	0.955	0.991	0.985
B	0.955	0.984	0.920	1.077
C	0.991	0.920	1.072	1.074
D	0.985	1.077	1.074	

Tab. 5.6 GRS DORTOREST

Stableistung BOC:				
	1	2	3	4
A	1.164	1.163	1.146	1.113
B	1.163	0.969	0.418	1.040
C	1.146	0.418	0.915	1.096
D	1.113	1.040	1.096	

Stableistung EOC:				
	1	2	3	4
A	0.944	0.961	0.993	0.986
B	0.961	0.986	0.928	1.069
C	0.993	0.928	1.062	1.067
D	0.986	1.069	1.067	

A.6 WR-4: Stabweise Abbrände

Tab. 5.7 Stabweise Abbrände NAGRA TRITON und GRS TRITON

NAGRA Triton:				
	1	2	3	4
A	36.888	37.752	39.56	39.47
B	37.752	39.248	35.264	43.93
C	39.56	35.264	44.012	44.03
D	39.468	43.932	44.028	

GRS Triton				
	1	2	3	4
A	38.74	39.96	41.57	40.56
B	39.96	39.03	31.87	42.6
C	41.57	31.87	41.49	43.33
D	40.56	42.6	43.33	

Tab. 5.8 Stabweise Abbrände GRS Helios und Serpent

GRS Helios				
	1	2	3	4
A	38.94	40.01	41.52	40.47
B	40.01	39.03	32.01	42.52
C	41.52	32.01	41.73	43.15
D	40.47	42.53	43.15	

GRS Serpent				
	1	2	3	4
A	39.33	40.24	41.72	40.62
B	40.24	38.93	31.71	42.27
C	41.72	31.71	41.35	43.15
D	40.62	42.27	43.15	

Tab. 5.9 Stabweise Abbrände GRS KENOREST und DORTOREST

GRS KENOREST				
	1	2	3	4
A	39.20	40.62	41.88	40.60
B	40.62	39.21	32.18	42.00
C	41.88	32.18	40.84	42.63
D	40.60	42.00	42.63	

GRS DORTOREST				
	1	2	3	4
A	39.55	40.78	41.80	40.52
B	40.78	39.15	33.43	41.45
C	41.80	33.43	40.26	42.13
D	40.52	41.45	42.13	

**B Rechenbenchmark zur Abbrandberechnung:
Aufgabenstellung**

**Rechenbenchmark zur Inventarberechnung von abgebrannten
Druckwasser- und Siedewasser-Brennelementen**

V. Hannstein, R. Kilger

Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) mbH

Forschungszentrum, Boltzmannstr. 14, 85748 Garching

Volker.Hannstein@grs.de, Robert.Kilger@grs.de

03. August 2012

Inhalt

1	Einleitung	2
2	Beschreibung.....	3
3	Zu berechnende Größen	3
4	Zusammenfassung der Spezifikationen.....	5

1 Einleitung

Der Inventarbestimmung von abgebrannten Kernbrennstoffen kommt in vielen Bereichen der nuklearen Sicherheit eine hohe Bedeutung zu. In Deutschland werden in verschiedensten Organisationen von Forschungseinrichtungen über Gutachterorganisationen bis hin zu Herstellerfirmen Inventarberechnungen durchgeführt. Das Spektrum der verwendeten Programme reicht dabei von Eigenentwicklungen bis hin zu kommerziellen Systemen. Der Standard bei aktuellen Codes ist dabei die Kopplung eines Programms zur zwei- oder dreidimensionalen Neutronenflussberechnung mit einem null-dimensionalen Inventarberechnungsprogramm. Bei letzterem ist in zuletzt in der Literatur ein Trend zu beobachten gewesen, das vielfach verwendete ORIGEN aus dem SCALE-Paket durch Neuentwicklungen mit aktuelleren Lösungsverfahren zu ersetzen. Bei der Flussberechnung wird vermehrt auf Monte-Carlo-Verfahren mit „Continuous Energy“-Wirkungsquerschnitten gesetzt. Der dadurch mögliche Verzicht auf eine Resonanzbehandlung der Querschnitte vereinfacht zum einen die Implementierung und bietet außerdem das Potential die Rechengenauigkeit zu erhöhen, was allerdings auf Kosten des Ressourcenbedarfs erfolgt. Weiterhin lassen sich von den aktuellen Evaluationen der Wirkungsquerschnittsbibliotheken Verbesserungen in den Rechenergebnissen erwarten. Vor diesem Hintergrund erscheint es uns sinnvoll, anhand des vorliegenden Rechenbenchmarks eine Möglichkeit zur quantitativen Bewertung des Einflusses der beschriebenen aktuellen Entwicklungen bei der Abbrandberechnung auf die Bestimmung des Nuklidinventars zu bieten. Nicht zuletzt bietet sich so die Gelegenheit

die Ergebnisse von eventuell vorhandenen neu- oder weiterentwickelten Programmen mit denen etablierter Verfahren zu vergleichen.

2 Beschreibung

Es soll je ein generisches Druckwasser- und Siedewasserbrennelement untersucht werden. Dabei wurden bewusst einfache Modellsysteme ausgewählt, um bei vertretbarem Arbeitsaufwand eine erste Bestandsaufnahme zu erreichen. Die Brennelementspezifikationen beruhen auf bereits in der Vergangenheit durchgeführten Rechenbenchmarks /POR 04/, /OEC 96/, wobei allerdings Änderungen der Aufgabenstellung vorgenommen wurden. Beim Druckwasserreaktor-(DWR)-Brennelement handelt es sich um eine 18x18-24-Geometrie mit homogener Brennstoffbelegung und ohne abbrennbaren Absorber. Das Siedewasserreaktor-(SWR)-Brennelement ist eine 8x8-Anordnung mit einem zentralen Wasserkanal und fünf verschiedenen Brennstoffzusammensetzungen, von denen eine einen Anteil von 4,5 wt% Gadolinium enthält. Eine schematische Darstellung der Brennelementgeometrien findet sich in den Abbildungen 1 (DWR) und 2 (SWR). Die Spezifikationen der Brennelemente sind in den Tabellen 1 (DWR) und 2 (SWR) zusammengefasst. Es ist angedacht, je nach Interesse der Teilnehmer, in späteren Phasen des Benchmarks auch kompliziertere Geometrien und Brennstoffzusammensetzungen zu betrachten, um beispielsweise identifizierte Schwachstellen oder Herausforderungen in der Modellbildung näher zu untersuchen.

3 Zu berechnende Größen

Für das DWR-Brennelement:

DWR-1) Multiplikationsfaktor k_{eff} als Funktion des Abbrandes zwischen 0 und 50 GWd/tSM gemäß Tabelle 4

DWR-2) Vorkommen in g/tHM der in Tabelle 7 genannten Nuklide zum Zeitpunkt des Endabbrands als Mittelwert aller Brennstäbe

Für das SWR-Brennelement:

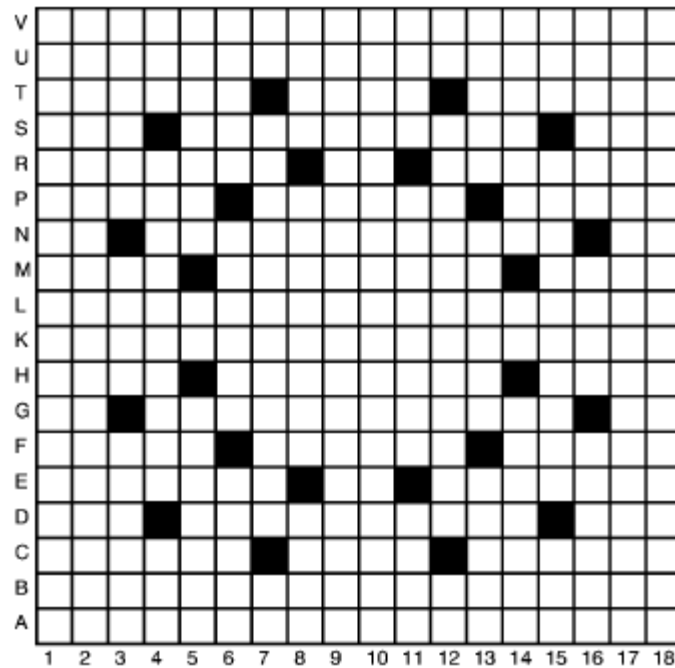
- SWR-1) Multiplikationsfaktor k_{eff} als Funktion des Abbrandes zwischen 0 und 50 GWd/tSM (DWR) bzw. 40 GWd/tSM (SWR) gemäß Tabelle 4
- SWR-2) Vorkommen in g/tHM der in Tabelle 7 genannten Nuklide zum Zeitpunkt des Endabbrands für den Eckstab (Stab 4 in Abbildung 2)
- SWR-3) Stableistungsverteilung in Prozent der mittleren Brennelementleistung vor Beginn des Abbrands und beim Endabbrand
- SWR-4) Die Endabbrände aller Stäbe einzeln (in GWd/tHM)

Die Abbrände sind jeweils als mittlere Abbrände pro Brennelement zu verstehen. Die Abbrandrechnungen sollen für den Vollast-Betriebszustand (Betriebsparameter s. Tabelle 3) durchgeführt werden. Ausgangspunkt ist ein Xenon-freier Zustand am Zyklusbeginn, so dass sich die Xenon-Gleichgewichtskonzentration von selbst einstellt. In Tabelle 4 sind die Abbrandzeitpunkte im SWR-Fall zu Beginn des Abbrands in feinere Schritte unterteilt als im DWR-Fall. Dies soll der Verfolgung des Gd-Abbrands dienen. Die Brennstoffzusammensetzungen sind in Tabelle 5 (DWR) und Tabelle 6 (SWR) angegeben. Aus Symmetriegründen reicht bei den Teilaufgaben SWR-3 und SWR-4 die Angabe der Werte für ein Viertel des Brennelements.

Die Ergebnisse sollen in einer Text-Datei in dem im Anhang spezifizierten Format abgegeben werden. Um eine Auswertung des Benchmarks bis zum nächsten AAA Usergroup Treffen am 03.12.2012 zu gestatten, sollten die Ergebnisse nach Möglichkeit bis zum 16.11.2012 an die Autoren gesandt werden. Gerne können auch Lösungen eingereicht werden, in denen nur ein Teil der gestellten Aufgaben bearbeitet sind (z.B. nur DWR oder nur SWR).

4 Zusammenfassung der Spezifikationen

Abbildung 1 Geometrie DWR-Brennelement (aus /POR 04/)



- Brennstäbe mit 4.00 w/o ^{235}U
- Steuerelement-Führungsrohre

Abbildung 2 Geometrie SWR-Brennelement (aus /OEC 96/)

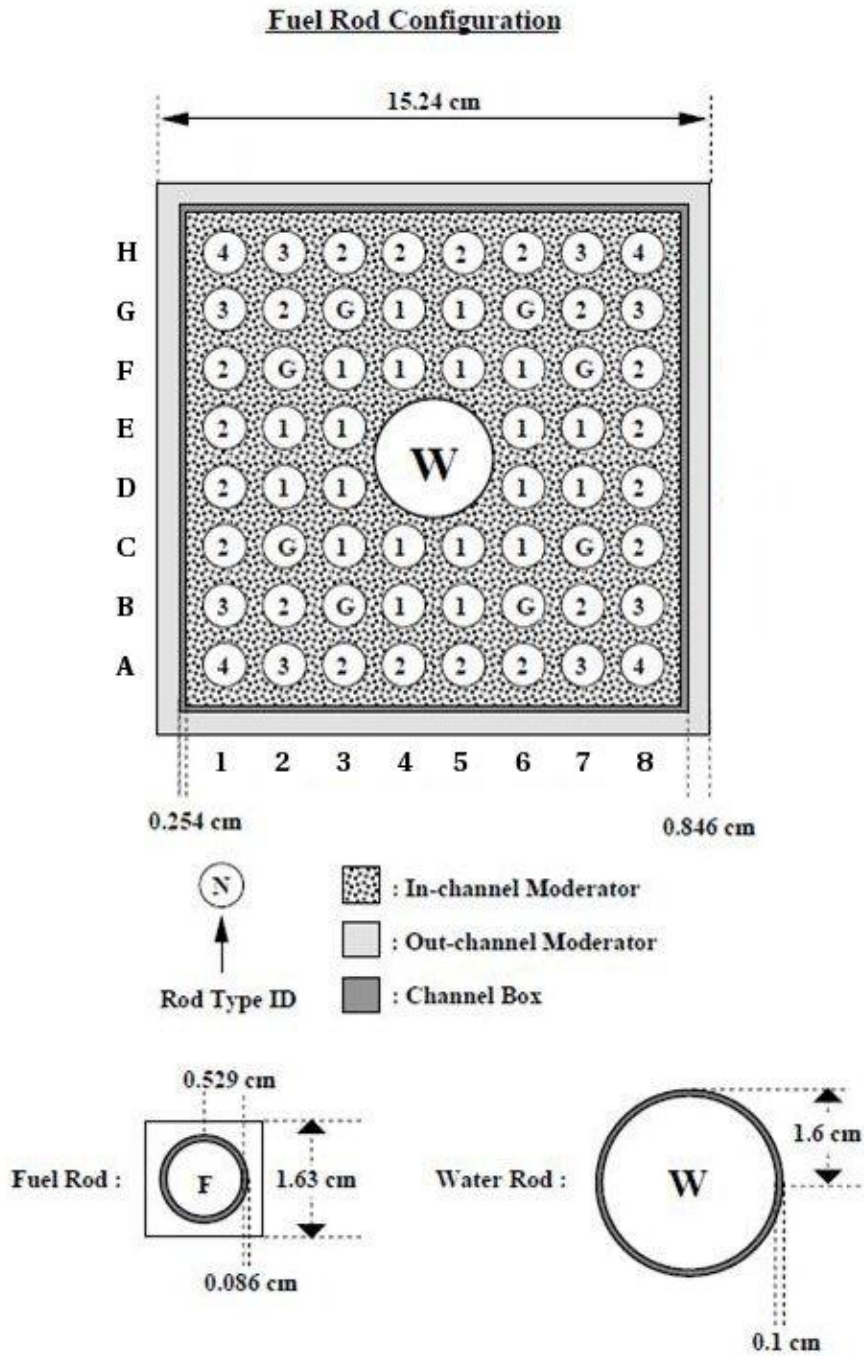


Tabelle 1 Spezifikation DWR Brennelement

Brennelementauslegungsdaten DWR		
Schematischer Brennelement-Querschnitt		s. Abbildung 1
Brennelement (BE)- Daten		
Brennelement-Kantenlänge einschließlich Wasserspalt	cm	23.116
Brennstababstand	cm	1.272
Brennstab (BS)- Daten		
Pellet-Durchmesser	cm	0.822
Hüllrohr-Innendurchmesser	cm	0.822
Hüllrohr-Außendurchmesser	cm	0.950
Hüllrohr-Material		Zirkaloy-4 ¹
Führungsrohr-Daten		
Führungsrohr-Innendurchmesser	cm	1.1127
Führungsrohr-Außendurchmesser	cm	1.235
Führungsrohr-Material		Zirkaloy-4 ¹

¹Siehe Tabelle 5

Tabelle 2 Spezifikation SWR Brennelement

Brennelementauslegungsdaten SWR		
Schematischer Brennelement-Querschnitt		s. Abbildung 2
Brennelement (BE)- Daten		
Brennelement-Kantenlänge einschließlich Wasserspalt	cm	15.24
BE-Kasten Außenmaß	cm	13.548
BE-Kasten Wandstärke	cm	0.254
Brennstababstand	cm	1.63
Brennstab (BS)- Daten		
Pellet-Durchmesser	cm	0.529
Hüllrohr-Innendurchmesser	cm	0.529
Hüllrohr-Außendurchmesser	cm	0.615
Hüllrohr-Material		Zirkaloy-4 ¹
Wasserstab-Daten		
Wasserstab -Innendurchmesser	cm	1.5
Wasserstab -Außendurchmesser	cm	1.6
Wasserstab -Material		Zirkaloy-4 ¹

¹Siehe Tabelle 6

Tabelle 3 Referenzwerte für den Volllast-Reaktorzustand

	Referenzwerte Volllast (DWR) (heißer Reaktorzustand)	Referenzwerte Volllast (SWR) (heißer Reaktorzustand)
Spez. Leistung (W/gHM)	37.085	25.6
Borkonzentration (ppm)	500	-
Moderatortemperatur (°C)	310	286
Hüllrohrtemperatur (°C)	332.8	286
Brennstofftemperatur (°C)	500	627
Kühlmitteldruck (bar)	158	70.95
Dampfblasengehalt ¹ (%)	0	40

¹ Für das SWR-Brennelement ist für die Bereiche außerhalb des Wasserkastens und innerhalb des zentralen Wasserkanals ein Dampfblasengehalt von 0% zu verwenden, vgl. Tabelle 6.

Tabelle 4 Abbrandzeitpunkte zur Berechnung von Multiplikationskonstanten

Abbrandsschritte DWR [GWd / (tHM initial)]	Abbrandsschritte SWR [GWd / (tHM initial)]
0.00	0.00
0.20	0.20
1.00	1.00
5.00	2.00
10.00	3.00
20.00	4.00
30.00	5.00
40.00	6.00
50.00	7.00
	8.00
	9.00
	10.00
	12.50
	15.00
	20.00
	30.00
	40.00

Tabelle 5 Materialzusammensetzung DWR

Stabsorte	Anreicherung U-235	Gadolinium	Isotop/Element	Nukliddichte ($10^{24}/\text{cm}^3$)
1	4.0 wt%	-	U-235 U-234 U-238 O-16	8.8451E-4 8.9940E-6 2.0952E-2 4.3691E-2
Moderator		-	H-1 O-16	4.6466E-2 2.3233E-2
Zirkaloy-4 (gemäß SCALE-Definition)		-	Zr Sn Fe Cr Hf	4.2538E-2 4.8253E-4 1.4855E-4 7.5976E-5 2.2133E-6

Tabelle 6 Materialzusammensetzung SWR

Stabsorte	Anreicherung U-235	Gadolinium-Anteil	Isotop/Element	Nukliddichte ($10^{24}/\text{cm}^3$)
1	4.9 wt%	-	U-234 U-235 U-236 U-238 O-16	1.0443E-5 1.1284E-3 6.9317E-6 2.1606E-2 4.5504E-2
2	3.6 wt%	-	U-234 U-235 U-236 U-238	7.5720E-6 8.2904E-4 5.1701E-6 2.1907E-2
3	3.0 wt%	-	U-234 U-235 U-236 U-238 O-16	6.2468E-6 6.9087E-4 4.3570E-6 2.2046E-2 4.5494E-2
4	2.3 wt%	-	U-234 U-235 U-236 U-238 O-16	4.7008E-6 5.2968E-4 3.4083E-6 2.2208E-2 4.5491E-2
G	3.0 wt%	4.5 wt%	U-234 U-235 U-236 U-238 O-16 Gd-154	5.8824E-6 6.5057E-4 4.1028E-6 2.0759E-2 4.5095E-2 3.2253E-5

			Gd-155	2.2141E-4
			Gd-156	3.0778E-4
			Gd-157	2.3576E-4
			Gd-158	3.7393E-4
			Gd-160	3.3200E-4
Moderator (0% Dampfblasengehalt)			H-1	4.9316E-2
			O-16	2.4658E-2
Moderator (40% Dampfblasengehalt)			H-1	3.0588E-2
			O-16	1.5294E-2
Zirkaloy-4 (gemäß SCALE-Definition)			Zr	4.2538E-2
			Sn	4.8253E-4
			Fe	1.4855E-4
			Cr	7.5976E-5
			Hf	2.2133E-6

Tabelle 7 Zu berechnende Nuklide

Actinoide	Spaltprodukte
U-234	Mo-95
U-235	Tc-99
U-236	Ru-101
U-238	Rh-103
Pu-238	Ag-109
Pu-239	Cs-133
Pu-240	Cs-134
Pu-241	Cs-137
Pu-242	Sm-147
Np-237	Sm-149
Am-241	Sm-150
Am-242m	Sm-151
Am-243	Sm-152
Cm-242	Nd-143
Cm-243	Nd-145
Cm-244	Nd-148
	Eu-153
	Eu-155
	Gd-155

Anhang

Die Ergebnisse des Benchmarks sollen als Textdatei im nachfolgenden Format abgegeben werden. Zusätzlich bitten wir bei Verwendung eines selbstentwickelten Codes um eine kurze (stichpunktartige) Beschreibung dieses Codes. Falls bei der Geometriebeschreibung eine Vereinfachung vorgenommen wurde, sollte diese ebenfalls kurz erläutert werden.

Inhalt der Textdatei:

Datum

Institution

Kontaktperson

Emailadresse der Kontaktperson

Mitwirkende Personen

Rechenprogramm (mit Versionsnr.)

Verwendete Wirkungsquerschnittsbibliothek

Ergebnisse DWR:

DWR-1: keff zu den Abbrandzeitpunkten aus Tab. 4

DWR-2: Nuklidzusammensetzung beim Endabbrand in [g/tHM]

U-234

...

Cm-244

Mo-95

...

Gd-155

Ergebnisse SWR:

analog zu DWR

SWR-1

.....

SWR-2

.....

zusätzlich:

SWR-3: Stabile Leistungsverteilung BOC (in % der mittl. Leistung, $\frac{1}{4}$ -BE):

A1 A2 A3 A4

B1 B2 B3 B4

C1 C2 C3 C4

D1 D2 D3

Stableistungsverteilung EOC:

analog zu BOC (siehe oben)

SWR-4: Endabbrand stabweise ($\frac{1}{4}$ -BE) [GWd/tHM]:

analog zu Stableistungsverteilung

Quellen

- /POR 04/ D. Porsch, U. Hesse, W. Zwermann, W. Bernnat, Spezifikation eines DWR-Brennelementes, UO₂ (4 w/o U-235) 18x18–24, für Vergleichsrechnungen, 2004
- /OEC 96/ Y. Naito, H. Okuno, OECD/NEA Burnup Credit Criticality Benchmark Phase IIIB, Nuclide Composition and Neutron Multiplication Factor of BWR Spent Fuel Assembly, JAERI, 1996

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

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

ISBN 978-3-944161-67-9