

KERNFORSCHUNGSZENTRUM

KARLSRUHE

Januar 1969

KFK 743 EUR 3725 d

Institut für Angewandte Reaktorphysik

Zur Berechnung von Heterogenitätseffekten in periodischen Zellstrukturen thermischer und schneller Kernreaktoren

D. Wintzer



GESELLSCHAFT FUR KERNFORSCHUNG M.B.H.

KARLSRUHE

Als Manuskript vervielfältigt

Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

GESELLSCHAFT FÜR KERNFORSCHUNG M.B.H. KARLSRUHE

KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE

Januar 1969

KFK-743 EUR 3725 d

Institut für Angewandte Reaktorphysik

Zur Berechnung von Heterogenitätseffekten in periodischen Zellstrukturen thermischer und schneller Kernreaktoren*

von

Detlev Wintzer

Gesellschaft für Kernforschung mbH., Karlsruhe

Diese Arbeit wurde im Rahmen der Assoziation zwischen der Europäischen Atomgemeinschaft und der Gesellschaft für Kernforschung mbH., Karlsruhe, auf dem Gebiet der schnellen Reaktoren durchgeführt.

.

Diese Arbeit wurde von Herrn Prof. Dr. W. Häfele angeregt. Ich danke ihm für die interessante Themenstellung sowie für viele klärende und anregende Diskussionen. Herrn Prof. Dr. K. Wirtz und Herrn Prof. Dr. Kofink bin ich für hilfreiche Gespräche und für ihr Interesse am Fortgang dieser Arbeit verpflichtet. Ich danke auch Herrn Dr. P. Engelmann für zahlreiche wertvolle Diskussionen sowie für seine Ermutigung, den Problemen dieser Arbeit auch experimentell nachzugehen.

Schließlich möchte ich Herrn Dipl. Physiker G. Bruhn meinen Dank aussprechen, der mir sehr tatkräftig bei der mühevollen Programmierungsarbeit half.

Inhaltsverzeichnis

			Seite				
1.	Einl	eitung, Aufgabenstellung und Zusammenfassung	1				
2.	Ausgangsgleichungen						
	2.1	Allgemine Annahmen, die mit der Verwendung von Stoßwahrscheinlichkeiten verbunden sind	5				
	2.2	Verwendung des Zellkonzeptes	8				
	2.3	3 Übergang zu Multigruppen-Gleichungen					
3.	Einf	nführung von Reaktionskoeffizienten					
4.	Berechnung der Reaktionskoeffizienten						
	4.1	Aufspaltung der Reaktionskoeffizienten in Nuklid-Anteile	14				
	4.2	Einfache Spezialfälle	17				
	4.3	Synthetische Mikrospektren	19				
	4.4	Wahl der Standardspektren und Bestimmung der Koeffizienten a _{Vimn}	20				
	4.5	Anwendungsmöglichkeiten	22				
	4.6	Testrechnungen	24				
5.	Diff	usionskorrekturen	25				
6.	Hete	Heterogenitätskorrekturen für Wirkungsquerschnitte					
7.	Approximationen für Stoßwahrscheinlichkeiten						
	7.1	Approximation für Plattenzellen	33				
	7.2	Approximation für andere Geometrietypen	35				
8.	Anwendungsbeispiele						
	8.1	Räumliche Feinstruktur von Flüssen und Reaktionsraten in thermischen Reaktoren	36				
	8.2	Räumliche Feinstruktur von Flüssen und Reaktionsraten in SNEAK-3A-1-Zellen	37				
	8.3	Heterogenitätseffekte auf die Reaktivität in SNEAK-3A-1	39				
	8.4	Einfluß der Heterogenität auf die Lebensdauer, Beispiel SUAK (Anordnung UH 1A)	42				
	8.5	Heterogenitätswirkung auf das Flutverhalten des Referenzreaktors D1	42				

Literaturverzeichnis

43

Einleitung, Aufgabenstellung und Zusammenfassung

1.

1 -

In der Anfangsphase der Entwicklung schneller Reaktoren, in der vorwiegend Reaktoren mit sehr "harten" Spektren und relativ großen mittleren freien Weglängen untersucht wurden, war es möglich, die durch periodische heterogene Zellstrukturen verursachten Heterogenitätseffekte entweder zu vernachlässigen oder in Form kleiner Reaktivitätskorrekturen zu berücksichtigen. Dabei konnte vom Resonanzcharakter der Wirkungsquerschnitte abgesehen werden.

Die Untersuchung größerer Reaktoren mit weicheren Spektren erfordert aber einen höheren Aufwand bei der Behandlung von Heterogenitätseffekten. Neutronen im keV-Bereich und teilweise auch darunter werden wichtig. Ihre freien Weglängen sind häufig vergleichbar mit den charakteristischen Abmaßen der Gitterzelle oder sogar kleiner. Zudem spielt im angesprochenen Energiebereich der Resonanzcharakter der Wirkungsquerschnitte eine wichtige Rolle, der die Berücksichtigung der stark ortsabhängigen Selbstabschirmung erfordert.

Für den hochenergetischen Teil des Neutronenspektrums sind verschiedene Methoden entwickelt worden /1 bis 4/, die davon ausgehen, daß die Wirkungsquerschnitte innerhalb einer Energiegruppe als energieunabhängig betrachtet werden dürfen. Im Resonanzbereich der schweren Kerne (etwa unterhalb 10 keV) greift man gewöhnlich auf Äquivalenztheoreme aus der Theorie thermischer Reaktoren /5/ zurück, die für 2-Medien-Modelle der Zelle abgeleitet wurden. Die für schnelle Reaktoren wichtigste Version ist die "Bell"-Näherung /6/, die eine sehr einfache und elegante Methode darstellt, den räumlichen Mittelwert der Resonanzreaktionen in einer Zone (gewöhnlich der Brennstoffzone) einer 2-Medienzelle zu berechnen.

Es gibt jedoch einige Fragestellungen, die eine detailliertere Erfassung der räumlichen Verteilung der Resonanzreaktionen in einer Gitterzelle erfordern:

 In schnellen Nullenergieanordnungen wie SNEAK /7/ werden gewöhnlich einige Millimeter dicke Plättchen verschiedener Materialien verwendet, um in einer periodischen Anordnung eine gewünschte mittlere Corezusammensetzung zu simulieren. Dabei läßt sich ein komplizierter Aufbau der Einheitszelle häufig nicht vermeiden, und es kommt oft vor, daß ein"Resonanzmaterial" (etwa ²³⁸U) innerhalb der Einheitszelle in mehreren Platten vertreten ist. Solche Fälle lassen sich nicht mehr durch ein 2-Zonen-Modell der Zelle beschreiben und sind für die Anwendung der erwähnten Äquivalenztheoreme ungeeignet. Sie sind es auch dann, wenn man nur an Mittelwerten für die Zelle interessiert ist.

2) Wenn dünne Folien von Spalt- und Brutmaterialien zur Bestimmung von Reaktionsratenverhältnissen im Reaktorgitter aktiviert werden, ist die Kenntnis der räumlichen Feinstruktur von Resonanzreaktionen für die Interpretation der Messungen wichtig.

In beiden Fällen haben wir es mit der Ortsabhängigkeit der energetischen Selbstabschirmung von Resonanzquerschnitten in Gitterzellen zu tun.

Der direkteste Weg, dieses Problem anzugehen, besteht in Multigruppen-Zellrechnungen mit guten Transportnäherungen, bei denen einzelne Resonanzstellen in einer sehr feinen Gruppenaufteilung Schritt für Schritt durchgerechnet werden. Mit dieser Methode wurden von Kier Modellstudien für einfache thermische Reaktorgitter durchgeführt. Für Routinerechnungen ist ein derartiges Verfahren leider zu aufwendig insbesondere, wenn mehrere Resonanzmaterialien gleichzeitig behandelt werden müssen.

In der vorliegenden Arbeit wird versucht, die räumliche Feinstruktur von Resonanzreaktionen für Routinerechnungen zugänglich zu machen. Dabei wird angestrebt, ähnlich wie bei der Verwendung von Äquivalenztheoremen, mit integralen Informationen über Resonanzquerschnitte auszukommen, die in Form tabellierter Selbstabschirmungsfaktoren in Multigruppen-Querschnittssätzen für homogenisierte Reaktorzonen verfügbar sind.

Es wird ferner angestrebt, die Resonanzbehandlung für eine Gitterzelle in ein möglichst allgemein zu haltendes Rechenprogramm einzubetten, das für verschiedene Zellgeometrien und nicht nur für thermische Reaktoren anwendbar ist. Einer der Gesichtspunkte dafür ist, die teilweise bestehende Lücke zwischen der Theorie thermischer und der Theorie schneller Reaktoren schließen zu helfen und vergleichende Rechnungen mit gleichen Querschnittssätzen und einer einheitlichen Methode zu ermöglichen.

- 2 -

Die Ausgangserwägungen für die gewählte Behandlung der Resonanzquerschnitte sind folgende:

Die Orts- und Energieabhängigkeit der Reaktionsdichte $R(E, \mathscr{U})$ in der Nähe von Resonanzstellen der Wirkungsquerschnitte ist i.a. zu kompliziert, als daß sie sich durch eine Ortsfunktion und eine Energiefunktion (innherhalb einer Energiegruppe) darstellen ließe, wie dies bei der Anwendung von Äquivalenztheoremen für den räumlichen Mittelwert einer Zweimedienzelle geschieht^{*)}.

Die nächste Stufe der Verallgemeinerung ist eine Überlagerung von mehreren Orts- und Energiefunktionen:

$$R(E, \mathbf{H}) = \sum_{j=1}^{J} R_{j}(E) f_{j}(\mathbf{H}),$$

zu der man bei Verfolgung der Grundgedanken der Äquivalenztheoreme geführt wird. Um mit der Information auszukommen, die in tabellierten Selbstabschirmungsfaktoren vorliegt, ist es erforderlich, daß die Energiefunktionen $R_{j}(E)$ formal mit entsprechenden Energiefunktionen für homogene Medien übereinstimmen. Wenn nur ein Resonanzmaterial (Index γ) vorliegt, bedeutet das (in der "Narrow Resonance"-Näherung):

$$R_j(E) \sim \frac{\sigma_v(E)}{\sigma_v(E) + b_{vj}}$$
.

In der Wahl der Parameter $b_{\nu j}$ (im homogenen Fall charakterisieren sie den Untergrundquerschnitt, der von anderen Materialien beigetragen wird) besteht zunächst Freiheit, und es liegt nahe, diese Parameter den neutronenoptischen Kenngrößen des jeweiligen Zellproblems anzupassen. Untersuchungen in dieser Richtung haben drei Gründe herausgestellt, die dagegen sprechen:

- 1) Der nötige mathematische Aufwand steigt stark mit komplexer werdenden Zellen.
- 2) Es ergeben sich numerische Probleme, wenn zwei oder mehr Parameter dicht beieinander liegen.
- 3) Die physikalische Signifikanz der Verdünnungsparameter b v_j ist gering.

- 3 -

^{&#}x27;Schon bei der Behandlung der Zweimedienzelle müssen vereinfachende Annahmen über den räumlichen Neutronentransport gemacht werden, um das Problem auf die Berechnung der Selbstabschirmung in einem homogenen Fall zu reduzieren.

Dagegen zeigt es sich, daß einige allgemeine Erwägungen ausreichen, um einen Satz von etwa 5 Parametern b_{yj} für ein Material und eine Energiegruppe so vorzugeben, daß eine gute Beschreibung für sehr verschiedene Zellkonfigurationen erreicht werden kann. Die spezifischen Besonderheiten der jeweiligen Zellkonfiguration können bei der Berechnung der Überlagerungsvorschrift (der Ortsfunktionen $f_i(\%)$) berücksichtigt werden.

Dieser Weg wird in der vorliegenden Arbeit verfolgt, um Heterogenitätseffekte mit vertretbarem Aufwand, mit einer einheitlichen Methode und mit wenig einschränkenden Annahmen über die Geometrie der Gitterzelle zu berechnen.

In den folgenden Abschnitten werden zunächst die räumlichen und energetischen Transportmodelle beschrieben, innerhalb derer das angedeutete Verfahren ausgearbeitet wurde. Die mathematische Behandlung führt auf ein lineares Gleichungssystem für die Emissionsdichte, für dessen Koeffizienten eine einheitliche Rechenvorschrift angegeben wird (Gl. 3.1). Die physikalische Bedeutung dieser Koeffizienten ("Reaktionskoeffizienten") wird diskutiert; auf ihre Berechnung kondensieren sich die Resonanzprobleme. Die Verwendung von Selbstabschirmungsfaktoren oder Gruppen-Resonanzintegralen bei der Berechnung der Reaktionskoeffizienten wird in Abschnitt 4 geschildet. Äquivalenztheoreme vom Typ der Bell-Approximation ergeben sich als Spezialfälle.

In Abschnitt 5 werden einfache Diffusionskorrekturen beschrieben, die einerseits (da sie die globale Form des Spektrums mitbestimmen) für die Berechnung der räumlichen Verteilung von Reaktionsraten innerhalb einer Gitterzelle wichtig sind und andererseits zu Heterogenitätskorrekturen am Neutronenausfluß und damit der Reaktivität führen.

Abschnitt 6 ist praktischen Erfordernissen gewidmet: er beschreibt die Berechnung "heterogenitätskorrigierter"Gruppenquerschnitte für Multigruppen - Diffusionsprogramme, die auf homogenisierte Reaktorzonen anwendbar sind.

Das Motiv dabei ist, den Einfluß der heterogenen Zellstruktur auf das (über die Gitterzelle gemittelte) Spektrum, auf die mittlere Lebensdauer der Neutronen, auf Dopplerkoeffizienten, Voidkoeffizienten und auf die Reaktivität von Mehrzonenreaktoren berechnen zu können.

Der letzte Abschnitt enthält einige Anwendungsbeispiele für schnelle und thermische Reaktoren.

- 4 -

2. Ausgangsgleichungen

In diesem Abschnitt wird der allgemeine Rahmen beschrieben, innerhalb dessen die in der Einleitung angeführten Ziele dieser Arbeit verfolgt werden. Er ist durch das Arbeiten mit Stoßwahrscheinlichkeiten in der Multigruppennäherung gekennzeichnet.

Bei einer kurzen Ableitung des verwendeten Gleichungssystems werden die wesentlichen Annahmen beschrieben, die den benutzten Modellen zugrunde liegen.

2.1 Allgemeine Annahmen, die mit der Verwendung von Stoßwahrscheinlichkeiten verbunden sind

Wir gehen von der integralen Boltzmanngleichung /8/ für den stationären Reaktor aus, die den Winkelfluß Ø ($\mathscr{W}, u, \vec{\Omega}$) am Ort \mathscr{W} , bei der Lethargie u in Richtung $\vec{\Omega}$ mit der Neutronenemissionsdichte q an anderen Orten verknüpft:

$$\emptyset(\mathcal{X}, \mathbf{u}, \vec{\Omega}) = \int_{0}^{\infty} \mathrm{ds} \, q(\mathcal{X} - \mathbf{s}\vec{\Omega}, \mathbf{u}, \vec{\Omega}) \, \exp\left\{-\int_{0}^{s} \mathrm{ds}' \, \Sigma(\mathcal{X} - \mathbf{s}'\vec{\Omega}, \mathbf{u})\right\}. \quad (2.1)$$

Die Emissionsdichte $q(x, u, \vec{\Omega})$ setzt sich aus Spaltneutronen und abgebremsten Neutronen zusammen, die am Ort x mit der Lethargie u in Richtung $\vec{\Omega}$ starten:

$$q(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{\vec{\Omega}}) = \int_{0}^{\infty} d\mathbf{u}' \int d\mathbf{\vec{\Omega}}' \ \mathbf{p}(\mathbf{x}, \mathbf{u}', \mathbf{\vec{\Omega}}') \ \mathbf{v}(\mathbf{u}' \cdot \mathbf{u}) \Sigma_{\mathbf{f}}(\mathbf{x}, \mathbf{u}', \mathbf{\vec{\Omega}}')$$

$$+ \int_{0}^{\infty} d\mathbf{u}' \int d\mathbf{\vec{\Omega}}' \ \mathbf{p}(\mathbf{x}, \mathbf{u}', \mathbf{\vec{\Omega}}') \Sigma_{\mathbf{s}}(\mathbf{x}, \mathbf{u}' \cdot \mathbf{u}, \mathbf{\vec{\Omega}}' \cdot \mathbf{\Omega}) \qquad (2.2)$$

$$o \qquad (4\pi)$$

 Σ , Σ_{f} und Σ_{s} sind makroskopische totale, Spalt- und Streuquerschnitte. $\gamma(u' \rightarrow u)$ ist die mittlere Zahl der Neutronen mit der Lethargie u, die bei einer Spaltung bei der Lethargie u' entstehen.

- 5 -

Sofern die Spaltneutronen isotrop erscheinen $(\Sigma_{f}(x,u,\vec{\alpha}) = \Sigma_{f}(x,u)/4\pi)$ und die Streuprozesse im Laborsystem ebenfalls isotrop sind^{*)}, vereinfacht sich Gl. (2.2) zu:

 $q(x, u, \vec{\Omega}) = q(4r, u)/4\pi =$

$$= \frac{1}{4\pi\epsilon} \int_{0}^{\infty} du' \, \mathscr{D}(\mathscr{K}, u') \left\{ \mathcal{V}(u' \rightarrow u) \, \varSigma_{f}(\mathscr{K}, u') + \, \varSigma_{s}(\mathscr{K}, u' \rightarrow u) \right\}$$
(2.3)

 $\tau(x,x')$ ist die Zahl der freien Weglängen zwischen den Punkten w und x'.

Denkt man sich den Reaktor in N kleine homogene Zonen zerlegt, die so gewählt werden, daß die Emissionsdichte q(w,u) in ihnen als ortsunabhängig angesehen werden darf und spaltet die Integrale (2.3) und (2.4) in entsprechende Teilintegrale auf, so erhält man

$$q_{n}(u) = \int_{0}^{\infty} du' \mathscr{P}_{n}(u') \left\{ \gamma(u' \rightarrow u) \Sigma_{f,n}(u') + \Sigma_{s,n}(u' \rightarrow u) \right\}$$
(2.5)

$$\mathscr{O}_{n}(u) \quad V_{n} = \sum_{m=1}^{N} q_{m}(u) \quad V_{m} \Psi_{mn}(u)$$
(2.6)

In diesen Gleichungen sind $\emptyset_n(u)$ und $q_m(u)$ räumliche Mittelwerte für die jeweilige Zone:

*) Diese Annahme kann durch Benutzung von Transportquerschnitten statt der totalen Querschnitte gemildert werden.

- 6 -

 $\Psi_{mn}(u)$ ist durch

$$\begin{split} \Psi_{mn}(u) &= \int dV_{n} \int \frac{dV_{m}}{V_{m}} \frac{q(\pi', u)}{q_{m}(u)} \frac{e^{-\mathcal{T}(\pi, \pi')}}{4\pi |\pi' - \pi'|^{2}} \\ &= \int dV_{n} \int \frac{dV_{m}}{V_{m}} \frac{e^{-\mathcal{T}(\pi, \pi')}}{4\pi |\pi' - \pi'|^{2}} \end{split}$$
(2)

definiert und läßt sich nach Division durch V_n als der Beitrag der Zone m zum mittleren Fluß in der Zone n interpretieren, der pro Neutron verursacht wird, das in Zone m in der Zeiteinheit emittiert wird.

•7)

Die Stoßwahrscheinlichkeit P_{m,n}, d.h. die Wahrscheinlichkeit, mit der Neutronen, die in Zone m isotrop emittiert werden, ihren nächsten Stoß in der Zone n erleiden, ist mit Ψ_{mn} durch

$$\Psi_{mn}(u) = \frac{P_{mn}(u)}{\sum_{n} (u)}$$
(2.8)

verknüpft.

Der weßentliche Vorteil der Gleichungen (2.5) und (2.6) liegt darin, daß der Winkelfluß nicht berechnet werden muß. Meist ist man an der räumlichen und energetischen Verteilung der Reaktionsraten interessiert. Zu ihrer Berechnung genügt es, den skalaren Fluß zu kennen.

2.2 Verwendung des Zell-Konzeptes

Gewöhnlich führt die Forderung, daß sich die Emissionsdichte innerhalb einer Zone nur geringfügig ändern darf, zu einer so großen Zahl von Zonen, daß eine Auflösung des durch (2.5) und (2.6) gegebenen Gleichungssystems praktisch nicht möglich ist.

Die Überwindung dieser Schwierigkeit gelingt, wenn der Reaktor (oder ein größeres Gebiet des Reaktors) aus einem periodischen Gitter besteht und wenn die charakteristischen Zelldimensionen und die mittleren freien Weglängen klein gegenüber den Reaktorabmessungen sind. Dann läßt sich die Flußverteilung in guter Näherung als Produkt einer Funktion mit Zellperiodizität und einer "Makrofunktion" beschreiben. Die Makrofunktion gibt die globale Neutronenverteilung im Reaktor an und ändert sich nur wenig innerhalb einer Zelle und innerhalb einer freien Weglänge der Neutronen.

Bei der Berechnung des Flusses in einer Zone n aus (2.6) kann man Beiträge von Zonen m vernachlässigen, die viele freie Weglängen entfernt sind (aus (2.7) läßt sich ablesen, daß die zugehörigen Funktionen $\Psi_{mn}(u)$ verschwindend klein sind). Wenn sich nun die Makrofunktion innerhalb einiger freier Weglängen nur wenig ändert, kann man zur Berechnung der Flußverteilung innerhalb einer Gitterzelle die Unterschiede der Emissionsdichten in einander entsprechenden Zonen benachbarter Zellen vernachlässigen und damit so verfahren, als wäre das Reaktorgitter unendlich ausgedehnt. Formal lassen sich dann alle die Zonen zu einer zusammenfassen, die in gleicher Weise in der jeweils zugehörigen Zelle lokalisiert sind.

Dadurch wird die Zahl N der Zonen, die in (2.6) berücksichtigt werden müssen, beträchtlich verringert; nämlich auf die Zonenzahl innerhalb einer Zelle. Allerdings müssen bei der Berechnung von Ψ_{mn} (u) bzw. bei der Berechnung der Stoßwahrscheinlichkeiten P_{mn} auch Stöße in den entsprechenden Zonen von Nachbarzellen mitgezählt werden. Das ist jedoch erheblich einfacher, als mit einer großen Zahl von Gleichungen (2.5) und (2.6) zu arbeiten.

- 8 -

2.3 Übergang zu Multigruppen-Gleichungen

Durch Einsetzen von (2.6) in (2.5) ergibt sich

$$Q_{n}(u) = \sum_{m=1}^{N} \int_{0}^{\infty} du' \ Q_{m}(u') \ \psi_{mn}(u') \left\{ \forall (u' \rightarrow u) \ \sum_{f,n} (u') + \sum_{s,n} (u' \rightarrow u) \right\}$$
(2.9)

Hier ist $Q_n(u) = q_n(u)V_n$ die Emissionsrate in der Zone n. Der Übergang zu Multigruppengleichungen geschieht durch Zerlegung der Integrale in (2.9) in Teilintegrale:

$$Q_{m}(u) = \sum_{m=1}^{N} \sum_{g=1}^{G} \int_{\Delta u_{g}} du' Q_{m}(u') \Psi_{mn}(u') \left\{ \gamma(u' \rightarrow u) \Sigma_{f,n}(u') + \Sigma_{s,n}(u' \rightarrow u) \right\}$$
(2.10)

 Δu_{σ} ist die Lethargiebreite der Gruppe g.

Um die Zahl G der Energiegruppen in vernünftigen Grenzen zu halten, muß man jedoch in Kauf nehmen, daß eine Reihe von Gruppen eine oder mehrere Resonanzstellen der Wirkungsquerschnitte enthält. Das bedeutet, daß im allgemeinen auch innerhalb einer Energiegruppe eine starke Abhängigkeit der Wirkungsquerschnitte und der Funktionen Ψ_{mn} von der Lethargie zu berücksichtigen ist. Der am wenigsten lethargieabhängige Faktor in den Integranden von (2.10) ist die Emissionsrate $Q_m(u')$. Gewöhnlich ist der mittlere Energieverlust der Neutronen bei Streuprozessen groß gegenüber der Breite der Resonanzen, so daß man die NR- (Narrow Resonance) Näherung verwenden kann. In dieser Näherung kann die Lethargieabhängigkeit der Emissionsraten auch in der Nähe der Resonanzstellen vernachlässigt und $Q_m(u')$ durch das Produkt aus dem Gruppenmittelwert

$$\left\langle Q_{m}(u') \right\rangle_{g} = \frac{1}{\Delta u_{g}} \int_{\Delta u_{g}} Q_{m}(u') du' = \frac{Q_{g,m}}{\Delta u_{g}}$$
 (2.11)

und einer nur schwach von der Lethargie abhängigen Funktion w(u') dargestellt werden:

- 9 -

$$Q_{m}(u') = \frac{Q_{g,m}}{\Delta u_{g}} w(u')$$
(2.12)

Die Wichtungsfunktion w(u) ist so normiert, daß ihr Gruppenmittelwert 1 ist:

$$\frac{1}{\Delta u} \int w(u) du = 1.$$

Mit den Abkürzungen

$$\mathcal{V}(\mathbf{u}') \, \mathcal{X}_{\mathbf{k}} = \int \mathcal{V}(\mathbf{u}' \star \mathbf{u}) \, \mathrm{d}\mathbf{u} \tag{2.13}$$

und

$$\sum_{k,n} (u') = \int \sum_{s,n} (u' \rightarrow u) \, du \qquad (2.14)$$

ergibt sich nach Einsetzen von (2.12) in (2.10)

$$Q_{k,n} = \int_{\Delta u_k} Q_n(u) du =$$

$$= \sum_{m=1}^{N} \sum_{g=1}^{G} Q_{g,m} \frac{1}{\Delta u_{g}} \int_{\Delta u_{g}} du' w(u') \Psi_{mn}(u') \{\lambda \chi_{k} \psi(u') \sum_{f,n} (u') + \sum_{k,n} (u')\}$$
(2.15)

Wenn die hier vorkommenden Integrale bekannt sind, kann das durch (2.15) beschriebene lineare Gleichungssystem gelöst werden, wobei sich der eingeführte Eigenwert λ und die Matrix $Q_{k,n}$ ergibt. Die Reaktionsrate

$$F_{g,\alpha,n} = V_n \int_{\Delta u_g} \mathscr{O}_n(u) \sum_{\alpha,n} (u) du$$

für den Reaktionstyp \propto (z.B. Absorption) in Zone n und Gruppe g läßt sich dann auf direktem Wege aus

$$F_{g,\alpha,n} = \sum_{m=1}^{N} Q_{g,m} \frac{1}{\Delta u_g} \int_{\Delta u_g} du \ w(u) \ \mathcal{V}_{mn}(u) \Sigma_{\alpha,n}(u) \qquad (2.16)$$

berechnen. $\sum_{\alpha,n}$ ist der makroskopische Wirkungsquerschnitt für den Reaktionstyp α in Zone n.

Der Gruppenfluß

$$\emptyset_{g,n} = \int_{\Delta u_g} \emptyset_n(u) du$$

ergibt sich aus (2.6) zu

$$\emptyset_{g,n}V_n = \sum_{m=1}^{N} Q_{g,m} \frac{1}{\Delta u_g} \int_{\Delta u_g} du \ w(u) \Psi_{mn}(u) . \qquad (2.17)$$

3. <u>Einführung von Reaktionskoeffizienten</u>

Das Problem ist die Berechnung der Integrale, die sowohl im Gleichungssystem (2.15) als auch in (2.16) auftreten. Sie haben die gemeinsame Form

$$A_{g,\alpha,m,n} = \frac{1}{\Delta u} \int_{\Delta u_g} du \ w(u) \sum_{\alpha,n} (u) \Psi_{mn}(u) . \qquad (3.1)$$

Aus (2.16) läßt sich ihre physikalische Bedeutung ablesen: es handelt sich um Wahrscheinlichkeiten, dafür, daß Neutronen, die in Gruppe g und Zone m emittiert werden, ihren nächsten Stoß in Zone n erleiden, und daß dieser Stoß zu einer Reaktion vom Typ \propto führt. Wir werden sie im folgenden Reaktionskoeffizienten nennen. Mit Hilfe der Reaktionskoeffizienten lassen sich die Gleichungen (2.15) bis (2.17) in einer sehr einfachen Form schreiben:

$$Q_{k,n} = \sum_{m=1}^{N} \sum_{g=1}^{G} Q_{g,m} \left\{ \lambda \chi_{k} \gamma_{g} A_{g,f,m,n} + A_{g,k,m,n} \right\}$$
(3.2)

$$F_{g,\alpha,n} = \sum_{m=1}^{N} Q_{g,m} A_{g,\alpha,m,n}$$
(3.3)
$$\emptyset_{g,n} V_n = \sum_{m=1}^{N} Q_{g,m} A_{g,\beta,m,n}$$
(3.4)

Die in der letzten Gleichung auftretenden Koeffizienten A sind als Spezialfälle von (3.1) definiert, in denen $\sum_{\alpha,n} (u)$ fiktiv gleich eins gesetzt ist.

Die Reaktionskoeffizienten sind <u>die</u> Größen innerhalb des Gleichungssystems, in denen der etwaige Resonanzcharakter der Wirkungsquerschnitte innerhalb einer Energiegruppe berücksichtigt werden muß; Gl. (3.1) ist die allgemeine Vorschrift zur energetischen Wichtung der Wirkungsquerschnitte.

Die Berechnung der Reaktionskoeffizienten ist das Thema des folgenden Abschnitts 4. Zuvor wollen wir zwei Spezialfälle betrachten, die die Beziehung zwischen den Reaktionskoeffizienten und Wirkungsquerschnitten verdeutlichen.

Der erste Spezialfall ist der einer Zelle, die nur eine Zone enthält und die als Teil eines unendlich ausgedehnten homogenen Mediums angesehen werden kann. In diesem Fall reduziert sich die Matrix der Stoßwahrscheinlichkeiten auf eine Zahl P₁₁ = 1, und die energetische Feinstruktur des Flusses wird durch $\Psi_{11}(u) = 1/\sum_{1}(u)$ beschrieben.

Das Verhältnis zwischen Reaktionsdichte und Gruppenfluß ist

$$\frac{F_{g,\alpha,1}}{\varphi_{g,1}V_{1}} = \frac{A_{g,\alpha,1,1}}{A_{g,\beta,1,1}} = \frac{\frac{1}{\Delta u_{g}}\int du \ w(u) \sum_{\alpha,1} (u) / \sum_{1} (u)}{\frac{1}{\Delta u_{g}}\int du \ w(u) / \sum_{1} (u)} = \sum_{g,\alpha,1}^{eff} g_{g,\alpha,1}$$
(3.5)

Diese Gleichung beschreibt genau den Mittelungsprozeß, der gewähnlich bei der Berechnung effektiver Gruppenquerschnitte $\sum_{g,\kappa}^{eff}$ für homogene Medien (in NR-Näherung) angewandt wird.

Der zweite Spezialfall ist der, bei dem die Wirkungsquerschnitte $\sum_{g,\chi,n}$ in einer Energiegruppe g in allen Zonen der Zelle energieunab-

- 12 -

hängig sind. Dann sind auch die Stoßwahrscheinlichkeiten in der betrachteten Gruppe energieunabhängig, und die Reaktionskoeffizienten sind einfach aus

$$A_{g,\alpha,m,n} = \sum_{g,\alpha,n} \cdot P_{m,n} / \Sigma_{g,n}$$
(3.6)

zu berechnen. Für das Verhältnis zwischen Reaktionsdichte und Fluß ergibt sich erwartungsgemäß

N

$$\frac{\mathbf{F}_{\mathbf{g},\alpha,\mathbf{m},\mathbf{n}}}{\mathbf{\rho}_{\mathbf{g},\mathbf{n}}\mathbf{v}_{\mathbf{n}}} = \frac{\sum_{m=1}^{N} \mathbf{Q}_{\mathbf{g},\mathbf{m}}\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{g},\alpha,\mathbf{n}} \mathbf{P}_{\mathbf{m},\mathbf{n}}/\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{g},\mathbf{n}}}{\sum_{m=1}^{N} \mathbf{Q}_{\mathbf{g},\mathbf{m}} \mathbf{P}_{\mathbf{m},\mathbf{n}}/\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{g},\mathbf{n}}} = \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{g},\alpha,\mathbf{n}}$$
(3.7)

Im allgemeinenist jedoch

4.

im Gegensatz zu (3.7) von den Wirkungsquerschnitten in anderen Zonen der Zelle abhängig. Darüberhinaus ist $\widetilde{\Sigma}_{g, \varkappa, n}$ i.a. im Gegensatz zu (3.5) von den Wirkungsquerschnitten bzw. Reaktionskoeffizienten in <u>anderen</u> Energiegruppen k \ddagger g abhängig, die die Emissionsstärken $Q_{g,m}$ mitbestimmen (siehe (3.2)). So gesehen, sind die Reaktionskoeffizienten spezifischere Kenngrößen als effektive Wirkungsquerschnitte $\widetilde{\Sigma}_{g, \varkappa, n}$, die durch das Verhältnis zwischen Reaktionsdichte und Fuß definiert sind.

Berechnung der Reaktionskoeffizienten

Wenn der Resonanzcharakter der Wirkungsquerschnitte in einer Energiegruppe berücksichtigt werden muß, ist die Berechnung der Reaktionskoeffizienten deshalb schwierig, weil im Integranden von (3.1) neben den Wirkungsquerschnitten die Spektralfunktionen γ_{mn} und damit Stoßwahrscheinlichkeiten auftreten, die an Resonanzstellen der Wirkungsquerschnitte ebenfalls eine starke Energieabhängigkeit aufweisen. Die Abhängigkeit der Stoßwahrscheinlichkeiten von den Wirkungsquerschnitten in den einzelnen Zonen der Zelle ist im allgemeinen sehr unübersichtlich und läßt eine direkte analytische Berechnung der Reaktionskoeffizienten nicht zu.

Im Prinzip ist es möglich, den Integranden von (3.1) für eine ausreichende Zahl von Lethargiepunkten zu berechnen und die Integration numerisch durchzuführen. Das erfordert jedoch viel Information über den detaillierten Verlauf der Wirkungsquerschnitte innerhalb der Energiegruppe und führt zu einem erheblichen Rechenaufwand.

In diesem Abschnitt streben wir an, mit integralen Informationen über den Verlauf der mikroskopischen Wirkungsquerschnitte (durch Verwendung von Selbstabschirmungsfaktoren für Gruppenquerschnitte) auszukommen und den Zeitaufwand für praktische Rechnungen möglichst gering zu halten.

4.1 Aufspaltung der Reaktionskoeffizienten in Nuklid-Anteile

Nach Zerlegung der makroskopischen Wirkungsquerschnitte

$$\Sigma_{\alpha,n}(u) = \sum_{\nu} N_{\nu n} \tilde{c}_{\alpha \nu}(u)$$

in Beiträge einzelner Nuklide y läßt sich (3.1) in der Form

$$A_{g,\alpha,m,n} = \sum_{\nu} \frac{1}{\Delta u_{g}} \int_{\Delta u_{g}} du \frac{N_{\nu,n} \tilde{\sigma}_{\alpha,\nu}(u) P_{mn}(u) w(u)}{N_{\nu,n} \tilde{\sigma}_{\nu}(u) + \sum_{\mu \neq \nu} N_{\mu n} \tilde{\sigma}_{\mu}(u)} = \sum_{\nu} A_{g,\alpha,\nu,m,n} \quad (4.1)$$

schreiben. N ist die Dichte der Kerne des Nuklides v in Zone n. Mit der Abkürzung

$$\mathcal{O}_{\nu n}(u) = \sum_{\mu \neq \nu} \frac{N_{\mu n}}{N_{\nu n}} \mathcal{O}_{\mu}(u)$$
(4.2)

gelangt man zu

- 14 -

$$\mathbf{A}_{g,\alpha,\nu,m,n} = \frac{1}{\Delta u_g} \int_{\Delta u_g} d\mathbf{u} \, \tilde{\mathbf{G}}_{\alpha\nu}(\mathbf{u}) \, \mathcal{V}_{\nu\,mn}(\mathbf{u}) \tag{4.3}$$

wobei $\Psi_{\gamma,m,n}$ durch

$$\Psi_{\nu,m,n}(u) = \frac{P_{mn}(u)}{\sigma_{\nu}(u) + \sigma_{\nu n}(u)}$$
(4.4)

definiert ist.

Durch (4.3) wird die Wahrscheinlichkeit dargestellt, mit der Neutronen, die in der Zone m emittiert werden, ihren nächsten Stoß mit einem Kern des Nuklides ν in Zone n machen, der zu einer Reaktion vom Typ α führt.

Bei der Berechnung dieser Wahrscheinlichkeit kommt es darauf an, $\Psi_{\gamma mn}(u)$ insbesondere bei solchen Lethargien in einer guten Näherung zu erfassen, bei denen der Wirkungsquerschnitt $\tilde{O}_{\alpha\gamma}$ Resonanzstellen aufweist.

Die Berechnung wird erheblich vereinfacht, wenn sich die Resonanzen verschiedener Nuklide, die in der Zelle vorkommen, nicht überlappen. Dann ist $\widetilde{O}_{\gamma n}(u)$ in der Nähe von Resonanzstellen des Nuklides γ nur schwach von der Lethargie abhängig und kann als konstanter Untergrundquerschnitt behandelt werden. In dieser Weise wird gewöhnlich auch bei der Auswertung von (3.5) für homogene Medien verfahren, wobei sich effektive Gruppenquerschnitte

$$\widetilde{O}_{g,\alpha,\nu}^{\text{eff}} = \frac{\int du \ w(u) \ \frac{\widetilde{O}_{\alpha\nu}(u)}{\widetilde{O}_{\nu}(u) + \widetilde{O}_{\nu1}}}{\int du \ w(u) \ \frac{1}{\widetilde{O}_{\nu}(u) + \widetilde{O}_{\nu1}}}$$
(4.5)

ergeben, die nur von der Größe des Untergrundquerschnittes \mathcal{O}_{v1} , nicht aber von der Art der Nuklide abhängen, die zu diesem Untergrundquerschnitt beitragen. Mit Hilfe der Reaktionskoeffizienten läßt sich $\mathcal{O}_{g,\mathfrak{C},v}^{eff}$ auch als

(4.6)

$$\mathcal{G}_{g,\alpha,\nu}^{\text{eff}}(\mathcal{G}_{\gamma}) = \frac{A_{g,\alpha,\nu,1,1}}{A_{g,\beta,\nu,1,1}}$$

- 15 -

schreiben (vergl. (3.5)). Zähler und Nenner dieser Gleichung sind dabei aus (4.3) zu berechnen, wobei $\Psi_{0,11}$ die einfache Form

$$\Psi_{v 11}(u) = \frac{1}{\sigma_v(u) + \sigma_{v1}}$$
 (4.7)

hat. Umgekehrt lassen sich immer dann die Koeffizienten A aus effektiven Gruppenquerschnitten $\mathcal{G}_{g,\alpha,\gamma}^{eff}$ (b_y) berechnen, wenn $\mathcal{V}_{ymn}(u)$ in der Form

$$\Psi_{\rm mn}(u) = \frac{a_{\rm v}}{O_{\rm v}(u) + b_{\rm v}} \tag{4.8}$$

dargestellt werden kann.

Diese Aussage gilt jedoch nur dann, wenn es sinnvoll ist, im heterogenen Fall bei der Berechnung der Reaktionskoeffizienten mit der gleichen Wichtungsfunktion w(u) zu arbeiten, die auch bei der Berechnung von effektiven Gruppenquerschnitten (aus Gl. (4.5)) für den jeweiligen Reaktortyp verwendet wird.

Im Prinzip ist die Energieabhängigkeit der Emissionsdichte und damit w(u) innerhalb einer Zelle von Zone zu Zone verschieden. Diese Unterschiede haben wir bisher stillschweigend vernachlässigt und die Emissionsdichte (nicht aber den stärker energieabhängigen Fluß) innerhalb einer Energiegruppe in eine Ortsfunktion (charakterisiert durch die Zonenmittelwerte $Q_{g,m}/V_m$) und eine Lethargiefunktion w(u) separiert. Diese Separationsnäherung wird durch die Verwendung des Multigruppenkonzeptes gerechtfertigt: Einer der wesentlichen Vorteile jedes Multigruppenverfahrens ist es, daß die Emissionsdichte innerhalb einer Energiegruppe bei hinreichend großer Zahl von Energiegruppen nur wenig vom Gruppenmittelwert abweicht, und daß man mit zunehmender Zahl der Energiegruppen zunehmend gröbere Näherungen für w(u) verwenden kann. Zudem wird durch den Neutronentransport von Zone zu Zone mehr oder weniger dafür gesorgt, daß das Emissionsdichtespektrum in verschiedenen Zonen der Zelle ähnlich ist.

Wenn wir nun w(u) als zonenunabhängig betrachten, dann ist es naheliegend, für die Zellrechnung die gleiche Wichtungsfunktion

- 16 -

zu verwenden, die auch bei Querschnittsberechnungen für das homogenisierte Medium benutzt wird. Nur dann hat man die oben erwähnte Möglichkeit, bei der Berechnung der Reaktionskoeffizienten auf tabellierte effektive Gruppenquerschnitte zurückzugreifen. Ferner ist dann gewährleistet, daß man im Grenzfall sehr schwach ausgeprägter Heterogenitätseffekte zu Ergebnissen gelangt, die auch entsprechende Rechnungen für das homogenisierte Medium liefern.

4.2 Einfache Spezialfälle

Für ein Stabgitter, dessen Zellen aus nur zwei Zonen bestehen, läßt sich – jedenfalls näherungsweise – der Zusammenhang zwischen Stoßwahrscheinlichkeiten und Wirkungsquerschnitten in einer rationalen Form angeben. Beispielsweise kann die Stoßwahrscheinlichkeit P₂₁ durch die Approximation

$$P_{21} = \frac{\Sigma_1^{1}}{\Sigma_1^{1} + \Sigma_2^{1} + \Sigma_1^{1} + \Sigma_2^{1}}$$
(4.9)

beschrieben werden. Für die anderen Stoßwahrscheinlichkeiten P_{11} , P_{12} und P_{22} ergeben sich ähnliche Ausdrücke. In (4.9) ist l_1 die mittlere Sehnenlänge in der Zone 1, die mit dem Volumen V_1 und der Oberfläche S_1 durch

$$1_1 = 4V_1/S_1$$

verknüpft ist. 1, ist die entsprechende Größe für Zone 2.

Die Voraussetzungen, die bei der Ableitung von (4.9) gemacht werden müssen, sind:

1. Neutronen, die von der Zone 2 in die Zone 1 (und umgekehrt) eintreten, tun dies mit isotroper Winkelverteilung.

- 17 -

2. Neutronen, die in Zone 1 emittiert werden, erleiden mit der Wahrscheinlichkeit

$$P_{11}^{(0)} = \frac{\Sigma_1 L_1}{1 + \Sigma_1 L_1}$$
(4.10)

ihren nächsten Stoß in der Zone 1, ohne diese zuvor verlassen zu haben. (4.10) ist eine von Wigner /9 / vorgeschlagene rationale Approximation.

Wenn die Zone 2 der Zelle keine Resonanzquerschnitte enthält, ergibt sich durch Einsetzen von (4.7) in (4.4):

$$\mathcal{V}_{\nu 21}(\mathbf{u}) = \frac{1}{1 + \sum_{2} l_{2}} \cdot \frac{1}{\sigma_{\nu}(\mathbf{u}) + \sigma_{\nu 1}' + \frac{1}{N_{\nu 1} l_{1}}} \frac{\sum_{2} l_{2}}{1 + \sum_{2} l_{2}}$$
(4.11)

Dieser Ausdruck stimmt formal überein mit (4.8). Dabei spielt

$$b_{v1} = O_{v1} + \frac{1}{N_{v1}l_1} + \frac{\Sigma_2 l_2}{1 + \Sigma_2 l_2}$$
 (4.12)

die Rolle eines Untergrundquerschnittes in einem fiktiven homogenen Medium, dessen Mikrospektrum in der Nähe der Resonanzen des Nuklides den gleichen Verlauf wie in der betrachteten Zone 1 hat. Die formale Übereinstimmung zwischen (4.11) und (4.8), die das Arbeiten mit effektiven Querschnitten für homogene Medien ermöglicht, ist der Kern der häufig benutzten Äquivalenztheoreme (siehe /6 /); Gl. (4.12) entspricht Bell's /7/ Formel für den fiktiven Untergrundquerschnitt $b_{\gamma 1}$. In der Literatur /10/ sind für Stabgitter Modifikationen des zweiten Terms in (4.12) beschrieben, die sich auf genauere Ausgangsnäherungen als (4.10) stützen und auch bei der Berechnung von Heterogenitätseffekten in schnellen Reaktoren benutzt wurden /11/.

Komplizierter werden die Verhältnisse, wenn das Nuklid \mathcal{V} in beiden Zonen der Zelle vorhanden ist. Dann kann Σ_2 nicht mehr als energieunabhängig behandelt werden, und im Nenner von (4.11) tritt ein Term $\sigma_{\mathcal{V}}^2(u)$ auf, der die formale Übereinstimmung mit (4.8) zerstört. In diesem Fall kann man sich durch Partialbruchzerlegung helfen, die zu

$$\Psi_{y_{21}}(u) = \frac{a_{y_1}}{\sigma_y(u) + b_{y_1}} + \frac{a_{y_2}}{\sigma_y(u) + b_{y_2}}$$
 (4.13)

führt und auch die Benutzung von Selbstabschirmungsfaktoren bei der Berechnung der Reaktionskoeffizienten ermöglicht. Im Prinzip kann die Methode der Partialbruchzerlegung auch für Zellen mit mehr als zwei Zonen angewendet werden, wobei man zu Ausdrücken der Form

$$\mathcal{V}_{vmn}(u) = \sum_{j=1}^{J} \frac{a_{vjmn}}{\sigma_v(u) + b_{vj}}$$
(4.14)

kommt. Die Gleichungen zur Berechnung der Parameter b_{vj} aus den neutronenoptischen Kenngrößen der Zelle werden jedoch äußerst unübersichtlich, wenn man zu größeren Zonenzahlen übergeht, mit denen man es häufig in Anordnungen zu tun hat, in denen mittlere Zusammensetzungen von Leistungsreaktoren simuliert werden sollen.

Dann verlieren die Parameter $b_{\gamma j}$ ihre physikalische Einsehbarkeit, die sie in der Zwei-Zonen-Zelle in der Form (4.12) haben. Auch unter dem Gesichtspunkt der Genauigkeit ist es zweifelhaft, inwieweit eine Berechnung der in (4.14) auftretenden Parameter sinnvoll ist, die sich auf die oben unter 1. und 2. genannten Annahmen stützt. Diese Annahmen sind besonders bei Plattenzellen mit dünnen Platten wenig gerechtfertigt.

4.3 Synthetische Mikrospektren

Für die Berechnung der Stoßwahrscheinlichkeiten aus Wirkungsquerschnitten und geometrischen Kenngrößen der Zelle sind Approximationen bekannt, die die Winkelverteilung der Neutronen besser berücksichtigen und die die Durchgangswahrscheinlichkeiten genauer erfassen als es mit den erwähnten Annahmen möglich ist. Derart "gute" Approximationen für die Stoßwahrscheinlichkeiten ermöglichen jedoch nicht ohne weiteres die Benutzung von Äquivalenztheoreme zur Berechnung der Reaktionskoeffizienten, da sie formal andere Ausdrücke für die Funktion $\Psi_{\rm ymn}$ ergeben als (4.14).

- 19 -

Der allgemeine Charakter dieser Funktion ist jedoch ähnlich wie der, der durch Gl. (4.14) beschrieben wird: es handelt sich um Funktionen, die mit wachsendem \mathfrak{S}_{v} monton fallen und für $\mathfrak{S}_{v} \to \infty$ gegen O streben.

Das legt den Versuch nahe, das Mikrospektrum, d.h. die Funktion $\Psi_{y\,mn}$ zwar formal durch einen Ausdruck der Form (4.14) zu beschreiben, die fiktiven Untergrundquerschnitte b_{vj} jedoch nicht aus neutronenoptischen Kenngrößen der Zelle zu bestimmen, die nur für stark vereinfachte Transportmodelle sinnvolle Größen sind. Vielmehr könnte man die b_{vj} so wählen, daß man mit ihnen imstande ist, die Mikrospektren für einen weiteren Bereich von Zellproblemen zu beschreiben, wenn man einen Satz von Standardspektren der Form $1/(O_{v}(u)+b_{vj})$ in geeigneter Weise überlagert.

Dabei kann man so vorgehen, daß man das Mikrospektrum in der Nähe einer Resonanz "abtastet", indem man zunächst $\Psi_{\gamma mn}(\tilde{\sigma}_{\gamma}(u))$ für J Werte $\tilde{\sigma}_{\gamma j}$ des Resonanzquerschnittes $\tilde{\sigma}_{\gamma}$ mit "guten" Näherungen für P berechnet. Die Koeffizienten a werden nun auf dem Wege einer Anpassung so bestimmt, daß mit dem Ausdruck (4.14) die Tastwerte reproduziert werden können und zwischen ihnen interpoliert werden kann. Der Prozess der Anpassung läuft auf die Lösung eines Systems J linearer Gleichungen hinaus.

Den resultierenden Ausdruck für $\mathcal{V}_{y\,mn}$ könnte man als "synthe-tisches" Mikrospektrum charakterisieren.

4.4 Wahl der Standardspektren und Bestimmung der Koeffizienten ^avjmn

Wir wollen zunächst einige Forderungen formulieren, die sinnvollerweise an den Satz von Standardspektren, d.h. an den Satz von fiktiven Untergrundquerschnitten b_{vi} zu stellen sind.

Die erste Forderung ist die, daß möglichst wenig Terme in (4.14) eine gute Approximation der Funktionen $\Psi_{\nu \, \rm mn}$ ermöglichen sollen. Wenn wir dabei darauf verzichten, von neutronenoptischen Kenngrößen

- 20 -

des speziellen Zellproblems auszugehen, bedeutet diese Forderung, daß die $b_{\nu j}$ so gewählt werden müssen, daß der Ausdruck (4.14) durch Variation der Koeffizienten möglichst flexibel wird. Nun ist ein Term, der proportional zu $1/(\mathfrak{S}_{\nu}+\mathbf{b}_{\nu j})$ ist, in erster Linie dazu geeignet, den Verlauf der Funktion $\Psi_{\nu mn}$ in einem solchen \mathfrak{S}_{ν} -Intervall zu beschreiben, in dem \mathfrak{S}_{ν} von der Größenordnung \mathbf{b}_{ν} ist. Die Forderung nach Flexibilität kann jedoch auf das \mathfrak{S}_{ν} -Intervall beschränkt werden, in dem die Wirkungsquerschnitte \mathfrak{S}_{ν} der jeweiligen Energiegruppe auch wirklich vorkommen (das ist das Intervall zwischen dem Potentialquerschnitt $\mathfrak{S}_{\mu\nu}$ und dem höchsten Resonanzquerschnitt \mathfrak{S}_{ν} des Isotops ν in der Energiegruppe).

Es hat also keinen Sinn, Standardspektren zu verwenden, für die b_{vj} entweder klein im Vergleich zu $\widetilde{o_v}$ oder groß im Vergleich zu $\widehat{o_v}$ ist.

Natürlich hängt die Wahl der b_{vj} von der Zahl J der Terme ab, die zur Approximation von $\Psi_{\rm ymn}$ verwendet werden. In diesem Zusammenhang ist ein weiterer Gesichtspunkt zu berücksichtigen: Die Auswahl der b_{vj} sollte so erfolgen, daß man mit einer Erhöhung der Zahl der zur Anpassung benutzten Terme auch eine Erhöhung der Genauigkeit bei der Approximation von $\Psi_{\rm ymn}$ erwarten darf, so daß ein sinnvoller Zusammenhang zwischen Aufwand und Genauigkeit entsteht, und daß die Genauigkeit durch Testrechnungen mit vielen Termen kontrollierbar wird.

Den angeführten Forderungen ge**nügt** das folgende Vorgehen bei der Wahl der Standardspektren:

Der kleinste fiktive Untergrundquerschnitt b_{v1} wird gleich \widetilde{O}_{pv} gesetzt, der größte (b_{vJ}) wird so festgelegt, daß er mit \widetilde{O}_v übereinstimmt oder jedenfalls in der Größenordnung von \widetilde{O}_v liegt. Die übrigen Untergrundquerschnitte werden so bestimmt, daß sich jeweils aufeinanderfolgende b_{vj} um den gleichen Faktor $\widetilde{\tau}$ unterscheiden, wenn sie nach wachsendem Index j geordnet sind. Bei der Auswahl der J "Tastwerte" \widetilde{O}_{vi} , für die

- 21 -

$$\Psi_{\gamma mn}(\tilde{\sigma}_{\gamma j}) = \frac{P_{mn}(\tilde{\sigma}_{\gamma j})}{\tilde{\sigma}_{\gamma j} + \tilde{\sigma}_{\gamma n}}$$
(4.15)

für die nachfolgende Anpassung von (4.14) berechnet wird, ist es naheliegend, die \tilde{O}_{yj} so zu wählen, daß sie mit den b_{yj} übereinstimmen.

Zur Bestimmung der Koeffizienten av steht dann das lineare Gleichungssystem

$$\frac{P_{mn}(\widetilde{O}_{\nu j})}{\widetilde{O}_{\nu j}+\widetilde{O}_{\nu n}} = \sum_{j=1}^{J} \frac{a_{\nu jmn}}{\widetilde{O}_{\nu j}+b_{\nu j}}$$
(4.16)

zur Verfügung.

4.5 Anwendungsmöglichkeiten

Der wesentliche Vorteil beim Arbeiten mit synthetischen Mikrospektren ist der, daß man nicht an rationale Näherungen für Entkommwahrscheinlichkeiten und nicht an vereinfachende Annahmen über die Winkelverteilung der Neutronen an Zonengrenzen gebunden ist. Das Problem der ortsabhängigen Selbstabschirmung wird auf die Berechnung von Stoßwahrscheinlichkeiten für einige Wirkungsquerschnitte reduziert, die in der jeweiligen Energiegruppe vorkommen. Die Behandlung verschiedenster Typen von Zellgeometrien ist möglich, wenn nur eine Vorschrift zur Berechnung von Stoßwahrscheinlichkeiten bekannt ist. Sofern die NR-Näherung gültig ist, ist die erreichbare Genauigkeit eine Frage des Aufwandes, der bei der Berechnung von Stoßwahrscheinlichkeiten getrieben wird und kann bei guten Näherungen für die Stoßwahrscheinlichkeiten durch die Zahl J der benutzten Standardspektren gesteuert werden. Im Gegensatz zur Anwendung der klassischen Äquivalenztheoreme ist eine Aufteilung von Zonen mit Resonanzquerschnitten in Unterzonen möglich. Dadurch wird eine genauere Erfassung der Emissionsdichte innerhalb der Zelle und die Berechnung der Ortsabhängigkeit der Reaktionsdichte auch innerhalb einer homogenen Zellzone möglich.

Bei der Untersuchung relativ kleiner Heterogenitätseffekte, wie sie meist in schnellen Reaktoren auftreten, kann die Genauigkeit durch eine Modifikation der beschriebenen Methode erhöht werden:

- 22 -

Es wird nicht $\boldsymbol{\gamma}_{\!\!\!\!\!\!\!\!\!\boldsymbol{y_{mn}}},$ sondern die Differenzfunktion

$$\Psi_{\nu mn}^{*} = \Psi_{\nu mn} - \Psi_{\nu mn} (hom)$$
(4.17)

durch Überlagerung von Standardspektren approximiert. $\Psi_{\rm ymn}$ (hom) ist der homogene Grenzwert von $\Psi_{\rm ymn}$, der sich ergibt, wenn man die betrachtete Zelle so modifiziert, daß die absoluten Zonengrößen bei gleichbleibender Zusammensetzung der Zonen und gleichbleibenden <u>relativen</u> Zonenabmaßen extrem klein werden. Für diesen Grenzfall sind die Stoßwahrscheinlichkeiten

$$P_{mn}(hom) = \frac{\sum_{n} V_{n}}{\sum_{m=1}^{N} \sum_{m} V_{m}}$$
(4.18)

so daß sich für Ψ_{vmn} (hom)

$$\Psi_{\nu mn}(hom) = \frac{P_{mn}(hom)}{\sigma_{\nu} + \sigma_{\nu n}} = \frac{Z_{\nu n}}{\sigma_{\nu} + \sum_{m=1}^{N} Z_{\nu m} \sigma_{\nu m}}$$
(4.19)

schreiben läßt. Z_{vn} ist durch

$$Z_{\gamma n} = \frac{N_{\gamma n} V_n}{\sum_{m=1}^{N} N_{\gamma m} V_m}$$

definiert.

Der Vorteil bei der Approximation von $\mathcal{V}_{\mathrm{ymn}}^*$ anstelle von $\mathcal{V}_{\mathrm{ymn}}^*$ ist offensichtlich; für Zelldimensionen, die klein gegenüber der mittleren freien Weglänge der Neutronen sind, wird eine kleine Differenz ähnlicher Funktionen untersucht. Gerade diese Differenz ist maßgebend für die Heterogenitätseffekte.

4.6 Testrechnungen

Um zu untersuchen, inwieweit die Reaktionskoeffizienten (4.1) von der Zahl und Wahl der zur Approximation von $\gamma_{y\,mn}^*$ benutzten Standardspektren abhängig sind, wurde eine Reihe von Testrechnungen durchgeführt. Einige typische Resultate sind in Abb. 1 für eine Plattenzelle mit zwei Zonen aufgeführt. Die Spezifikationen der Zelle sind in Tab. 1 enthalten.

Tabelle 1:

Nr. der Zone	Plattendicke	¹ H-Dichte	235 _{U-Dichte}	238 _{U-Dichte}
1	1 cm	-	$1.10^{22}/cm^3$	$2 \cdot 10^{22} / \text{cm}^3$
2	1 cm	$1.10^{22}/\mathrm{cm}^3$	-	$4.10^{22}/cm^3$

Die Rechnungen wurden mit den Wirkungsquerschnitten der Gruppe 19 des ABN-Satzes /12/ durchgeführt. In dieser Gruppe ist die Selbstabschirmung der Resonanzquerschnitte für ²³⁸U bei kleinen Untergrundquerschnitten stark ausgeprägt (die Selbstabschirmungsfaktoren liegen zwischen 0.023 und 1).

Zwei der berechneten Reaktionskoeffizienten, die Koeffizienten A g,a,1,2 für Absorption und A g,e,1,2 für elastische Streuung in Zone 2 sind in Abb. 1a als Funktion der Zahl J der Terme in (4.14) aufgetragen. Der größte fiktive Untergrundquerschnitt ist bei diesen Rechnungen $b_{\nu J} = 400 \, \widetilde{O}_{p\nu}$. Die Abbildung zeigt, daß sich die Ergebnisse für A g,a,1,2 um weniger als 0.5% unterscheiden, sofern 5 oder mehr Standardspektren zur Approximation von $\Psi_{\nu mn}$ benutzt werden. Für A g,e,1,2 ist die Übereinstimmung sogar noch besser.

Abb. 1b zeigt die Abhängigkeit der Reaktionskoeffizienten vom größten fiktiven Untergrundquerschnitt b_{yJ}. In diesem Falle ist stets mit 10 Standardspektren gerechnet worden, so daß man eine gute Approximation von Ψ_{ymn} im Intervall $\widetilde{O}_{py} < \widetilde{O}_{y} < b_{yJ}$ erwarten kann.

- 24 -

Aus der Abb. ist ersichtlich, daß schon mit $b_{\gamma J} = 100 \, \sigma_{p\gamma}$ ziemlich genaue Resultate erzielt werden. Das ist zunächst überraschend, da für ²³⁸U 100 $\sigma_{p\gamma} \approx 1000$ b viel kleiner als der maximale Wirkungsquerschnitt (≈ 40 000b) in Gruppe 19 ist. Jedoch ist in der Gruppe eine ganze Reihe von Resonanzen mit weniger hohen Spitzenquerschnitten enthalten, die auch einen großen Beitrag zu den Reaktionskoeffizienten liefern. Darüberhinaus geschieht der größte Teil der Resonanzreaktionen in den Flanken der Resonanzen. Schließlich ist zu erwarten, daß die Approximation von $\gamma_{\gamma mn}$ (σ_{γ}) auch für etwas höhere Werte von σ_{γ}' als $b_{\gamma T}$ gut ist.

Generell demonstrieren die Abbildungen 1a und 1b, daß die Zahl und Wahl der Standardspektren nicht kritisch in die Berechnung der Reaktionskoeffizienten eingeht, sofern man die Zahl der Terme und $b_{y,I}$ nicht zu klein wählt.

5. Diffusionskorrekturen

Bei der Auswertung der Gleichungen (3.2) bis (3.4) erhält man unter anderem das Verhältnis k_{∞} (Gitter) zwischen der Produktionsrate (Erzeugung von Spaltneutronen pro Zeiteinheit) und der Absorptionsrate in der Einheitszelle des unendlich ausgedehnten Gitters. Vergleicht man dieses Verhältnis mit der entsprechenden Größe für eine fiktive Zelle des unendlich ausgedehnten homogenen Mediums, so hat man in der Differenz

 $\Delta k_{\infty} = k_{\infty} \text{ (Gitter)} - k_{\infty} \text{ (hom)}$ (5.1)

eine integrale Aussage über den Einfluß des heterogenen Zellaufbaus auf die Multiplikationseigenschaften des Mediums. Nun liefern die einzelnen Energiegruppen gewöhnlich sehr unterschiedliche Beiträge zu Δk_{∞} (vergl. Abb.16), so daß das Verhältnis zwischen Produktionsrate und Absorptionsrate empfindlich von der globalen Form des Spektrums abhängt. Diese Form wird aber – besonders bei schnellen Reaktoren – deutlich von Ausflußverlusten im endlichen Reaktor mitbestimmt, die wir bisher vernachlässigt haben.

- 25 -

Die Berücksichtigung der Ausflußverluste ist auch dann wichtig, wenn Zellrechnungen zur Interpretation von Folienmessungen im Reaktor herangezogen werden sollen, die Information über das Spektrum und die räumliche Feinstruktur des Neutronenflusses liefern.

Zur Einführung von Diffusionskorrekturen gehen wir von der Bilanzgleichung (5.6) für die einzelne Energiegruppe im unendlichen Gitter aus. Man erhält sie, wenn man die rechte Seite von (3.2) in einen Quellbeitrag

$$S_{k,n} = \sum_{m=1}^{N} \sum_{g=1}^{G} Q_{g,m} \lambda \chi_{k} \gamma_{g} A_{g,f,m,n} + \sum_{m=1}^{N} \sum_{g \neq k} Q_{g,m} A_{g,k,m,n}$$
(5.2)

von Neutronen aufspaltet, die noch nicht in der Gruppe k gestreut wurden und in einen Rest

$$Q_{k,n} - S_{k,n} = \sum_{m=1}^{N} Q_{k,m} A_{k,k,m,n}$$
 (5.3)

Dieser Rest ist Streuprozessen in Gruppe k zuzuordnen, nach denen die gestreuten Neutronen die Gruppe k nicht verlassen.

Die Definitionsgleichung (3.1) für die Reaktionskoeffizienten liefert die Beziehung

$$A_{k,k,m,n} = \frac{1}{\Delta u_{k}} \int_{\Delta u_{k}} w \sum_{k,k,n} \frac{P_{mn}}{\Sigma_{n}} du$$

$$= \frac{1}{\Delta u_{k}} \int_{\Delta u_{k}} w \left[\sum_{n} - \sum_{rem,n} \right] \frac{P_{mn}}{\Sigma_{n}} du$$

$$= \frac{1}{\Delta u_{k}} \int_{\Delta u_{k}} w P_{mn} du - A_{k,rem,m,n} \qquad (5.4)$$

Der Index "rem" kennzeichnet hier "Removal-Prozesse", bei denen die Neutronen aus der Gruppe entfernt werden. Löst man (5.3) nach $S_{k,n}$ auf und summiert über alle Zonen, so ergibt sich nach Einsetzen von (5.4)

$$\sum_{n=1}^{N} S_{k,n} = \sum_{n=1}^{N} Q_{k,n} + \sum_{n=1}^{N} \sum_{m=1}^{N} Q_{k,m} A_{g,rem,m,n} -$$

$$-\sum_{m=1}^{N} Q_{k,m} \frac{1}{\Delta u_{k}} \int_{\Delta u_{k}} w \sum_{n=1}^{N} P_{mn} du \qquad (5.5)$$

Der letzte Term dieser Gleichung ist nichts anderes als $\sum_{m=1}^{N} Q_{k,m}$, da $\sum_{m=1}^{N} P_{mn}$ energieunabhängig gleich 1 ist und da die Wichtungsfunktion m=1 w so normiert ist, daß ihr Mittelwert in jederEnergiegruppe 1 ist.

Zieht man die Beziehung (3.3) hinzu, so ergibt sich

$$\sum_{n=1}^{N} S_{k,n} = \sum_{n=1}^{N} F_{k,rem,n}$$
(5.6)

Gl. (5.6) besagt, daß die Zahl der Removal-Prozesse in der Zelle in jeder Gruppe ebenso groß ist wie die Zahl der Neutronen, die durch Spaltung in der Gruppe entstehen oder durch Streuprozesse in anderen Gruppen in die betrachtete Gruppe befördert werden.

Im endlichen, stationären Reaktor erfordert die Neutronenbilanz eine Erweiterung von (5.6), nämlich

$$\sum_{n=1}^{N} S_{k,n} = \sum_{n=1}^{N} F_{k,rem,n} + \int div j_k dV$$
(5.7)
$$V_{Zelle}$$

Diese Erweiterung ist unmittelbar einleuchted; der zweite Term in (5.7) stellt den Nettostrom der Gruppe k dar, der die Zelle durch ihre Oberfläche verläßt.

Für homogene Medien kann man div j $_{\rm k}$ im Rahmen der Diffusions-theorie aus

div
$$j_k = -D_k \Delta \phi_k = D_k B_k^2 \phi_k$$
 (5.8)

- 27 -

berechnen, wobei D_k die Diffusionskonstante für die Gruppe k und $B_k^2 = -\Delta \not A / \not B_k$ die Flußwölbung ist, die in großen unreflektierten Reaktoren praktisch orts- und energieunabhängig ist.

Wendet man (5.7) auf eine fiktive Zelle eines homogenen Reaktors an, so ergibt sich

$$S_{k} = F_{k,rem} + D_{k}B_{k}^{2} \int \phi_{k}dV$$

$$V_{Zelle}$$
(5.9)

oder auch

$$S_{k} = (\Sigma_{k,rem} + D_{k}B_{k}^{2}) \int \phi_{k}dV$$

$$V_{Zelle}$$
(5.10)

Bei gleicher Quellstärke S_k unterscheidet sich der Gruppenfluß $\emptyset_k(B^2)$ im endlichen Medium vom Fluß \emptyset_k im unendlich ausgedehnten Medium um den Faktor

$$\frac{\emptyset_{k}(B^{2})}{\emptyset_{k}^{\infty}} = \frac{F_{k,rem}^{\infty}}{F_{k,rem}^{\infty} + D_{k}B_{k}^{2} \int \emptyset_{k}^{\infty}dV}$$
(5.11)

Nach Benoist /13/ lassensich die Diffusionsverluste im heterogenen Fall näherungsweise durch

$$\int_{\mathbf{V}_{Zelle}} d\mathbf{i}\mathbf{v} \, \mathbf{j}_{\mathbf{k}} d\mathbf{V} = \overline{\mathbf{D}}_{\mathbf{k}} \mathbf{B}_{\mathbf{k}}^2 \sum_{m=1}^{N} \boldsymbol{\emptyset}_{\mathbf{k}m} \mathbf{v}_{m}$$
(5.12)

beschreiben, wann die mittlere Diffusionskonstante \bar{D}_{μ} der Zelle aus

$$\overline{D}_{k} \sum_{m=1}^{N} \phi_{km} v_{m} = \sum_{m=1}^{N} \phi_{km} v_{m} \sum_{n=1}^{N} \frac{P_{mn}}{3\Sigma_{k,n}}$$
(5.13)

berechnet wird. Die Flußwölbung B_k^2 ist im heterogenen Fall für die in Abschnitt 2.2 erwähnte Makrofunktion zu bestimmen, die die globale Ortsabhängigkeit des Gruppenflusses beschreibt.

Mit (5.12) kann man ganz analog zu (5.11) einen Korrekturfaktor

$$\frac{\emptyset_{k,n}^{(B^2)}}{\emptyset_{k,n}^{\infty}} = \frac{\sum_{m=1}^{N} F_{k,rem,n}^{\infty}}{\sum_{m=1}^{N} F_{k,rem,m}^{k} + \overline{D}_{k} B_{k}^{2} \sum_{m=1}^{N} \emptyset_{k,m}^{\infty} V_{m}}$$
(5.14)

bestimmen, der gewährleistet, daß die Bilanzgleichung (5.7) erfüllt ist. Die Rückwirkung dieses Korrekturfaktors auf die Quellstärke S in anderen Energiegruppen läßt sich ohne Schwierigkeit berechnen.

Die Anwendung von (5.14) setzt voraus, daß der Einfluß der globalen Diffusion in Gruppe k auf die räumliche Verteilung der Reaktionsraten dieser Gruppe in der Gitterzelle vernachlässigt werden kann. Davon abgesehen, ermöglichen die Diffusionskorrekturen eine weitgehend konsistente Berechnung von Reaktionsraten und Diffusionsverlusten im Zuge einer Zellrechnung.

Allerdings setzt Gl. (5.13) voraus, daß die Anisotropie der Diffusionseigenschaften in der Zelle vernachlässigt werden kann. Wenn die Anisotropie berücksichtigt werden muß, ist es notwendig, Diffusionskonstanten $\overline{D}_{k,x}$, $\overline{D}_{k,y}$ und $\overline{D}_{k,z}$ für Komponenten $B_{k,x}^2$, $B_{k,y}^2$ und $B_{k,z}^2$ der Flußwölbung B_k^2 zu berechnen, die den drei Fundamentalrichtungen im Gitter zugeordnet sind. In (5.12) ist dann

$$\bar{D}_{k}\bar{B}_{k}^{2} = \bar{D}_{k,x}B_{k,x}^{2} + \bar{D}_{k,y}B_{k,y}^{2} + \bar{D}_{k,z}B_{k,z}^{2}$$
(5.15)

einzusetzen. Die Diffusionskonstanten für die Fundamentalrichtungen können /13/ aus ähnlichen Gleichungen wie (5.13) berechnet werden, nur treten statt P modifizierte Stoßwahrscheinlichkeiten

$$P_{mn,\xi} = 3\Sigma_n \int dV_n \int \frac{dV_m}{V_m} \frac{e^{-\mathcal{C}(\kappa,\kappa')}}{4\pi |\kappa'-\kappa'|^2} \Omega_{\xi}^2$$
(5.16)

(vergl. (2.7) und (2.8)) auf, in denen Ω_{ξ} der Cosinus des Winkels zwischen der Fundamentalrichtung ξ und dem Vektor $\pi'-\pi'$ ist. Ein Vergleich von (5.16) mit (2.7) und (2.8) zeigt, daß

$$3 P_{mn} = P_{mn,x} + P_{mn,y} + P_{mn,z}$$
 (5.17)

- 29 -

ist, womit sich

6.

$$3\overline{D}_{k} = \overline{D}_{k,x} + \overline{D}_{k,y} + \overline{D}_{k,z}$$
(5.18)

ergibt. Daraus folgt, daß man mit Gl. (5.13) zur Berechnung von \overline{D}_k auch dann auskommt, wenn sich zwar $\overline{D}_{k,x}$, $\overline{D}_{k,y}$ und $\overline{D}_{k,z}$ unterscheiden, wenn aber die Richtungskomponenten der Flußwölbung

$$B_{k,x}^2 = B_{k,y}^2 = B_{k,z}^2 = B_{k,z}^2 = B_{k}^2/3$$
 (5.19)

gleich sind ((5.18) und (5.19) gewährleisten, daß (5.15) erfüllt ist). Es ist daher zu erwarten, daß die Fehler, die mit der Vernachlässigung der Anisotropie der Diffusionskonstanten entstehen, solange klein sind, als sich die Richtungskomponenten der Flußwölbung nicht wesentlich unterscheiden.

Heterogenitätskorrekturen für Wirkungsquerschnitte

Die in den vorangehenden Abschnitten beschriebenen Methoden wurden in einem FORTRAN-Programm ZERA (Zellrechnung mit Resonanz-Abschirmung) verwendet. Das Programm liefert bei vorzugebender Geometrie und Zusammensetzung der Zelle Reaktionsraten und Flüsse für jede Energiegruppe und Zone der Zelle. Die Flußwölbung B² kann (auch gruppenabhängig) vorgegeben oder vom Programm selbst so berechnet werden, daß ein gewünschter Eigenwert λ erreicht wird. Für $\lambda = 1$ (das ist die Bedingung für einen kritischen Reaktor) kann daher die materielle Flußwölbung B_m^2 ermittelt werden, aus der man auf die kritische Größe des Gitters schließen kann. Bei vorgegebener Größe des Gitters (d.h. bei vorgegebener Flußwölbung) wird mit $k_{eff} = 1/\lambda$ der statische effektive Multiplikationsfaktor des Gitters berechnet.

Bei den meisten Reaktoren hat man es mit Anordnungen zu tun, die nicht aus einem einzigen regelmäßigen Gitter bestehen. Gewöhnlich sind Reflektoren vorhanden. Auch das Core ist häufig in mehrere Zonen unterteilt, die sich in der Zusammensetzung und Gitterstruktur unterscheiden.

- 30 -

In Corezonen, die groß gegenüber der mittleren freien Weglänge der Neutronen sind, stellt sich im kritischen Reaktor in ausreichender Entfernung von den Rändern der Corezone die materielle Flußwölbung B_m^2 des Globalflusses und damit das "Eigenspektrum" der betreffenden Corezone ein. Daher können Zellrechnungen mit B_m^2 physikalisch sinnvolle Aussagen über die räumliche Feinstruktur des Neutronenspektrums und der Reaktionsraten im Innern einzelner Gitterzonen im Reaktor liefern. Diese Aussagen genügen jedoch nicht, wenn man an integralen Eigenschaften eines Mehrzonenreaktors, etwa an der mittleren Lebensdauer oder am effektiven Multiplikationsfaktor, interessiert ist.

Um in dieser Richtung weiterzukommen, wurde das Programm ZERA so erweitert, daß es die Berechnung "heterogenitätskorrigierter" Gruppenquerschnitte $\sum_{g,\alpha}^{*}$ erlaubt. Diese Querschnitte können bei anschließenden Multigruppen-Diffusionsrechnungen verwendet werden, in denen die globale Ortsabhängigkeit der Gruppenflüsse β_g^* und der zugehörige Eigenwert berechnet wird.

Die Rechenvorschrift für
$$\sum_{g,\alpha}^{*}$$
 ist

$$\underset{n=1}{\overset{N}{\underset{n=1}{\overset{N}{\underset{m=1}{\overset{N}{\underset{m=1}{\overset{M}{\atop{n}}}}}}}} = \underbrace{\sum_{g,\alpha}^{N} ist}$$
(6.1)

Die für die Berechnung der Diffusionskonstanten benötigten Transportquerschnitte werden mit Hilfe von (5.13) aus

$$\Sigma_{g,tr}^* = \frac{1}{3\overline{D}_g}$$
(6.2)

berechnet.

 Σ_g^*

Die Anwendung von (6.1) bedeutet, daß die mit Hilfe von Diffusionsrechnungen ermittelte Reaktionsdichte



- 31 -

mit der mittleren Reaktionsdichte in einer Einheitszelle des jeweiligen Gitters übereinstimmt, wobei p_g^* als der über die Zelle gemittelte Gruppenfluß

$$\frac{\sum_{n=1}^{N} \phi_{g,n} v_{n}}{\sum_{n=1}^{N} v_{n}}$$

zu interpretieren ist.

Die Benutzung heterogenitätskorrigierter Gruppenquerschnitte in Diffusionsrechnungen erlaubt unter anderem (bei einem Vergleich mit Rechnungen für homogenisierte Reaktorzonen) die Berechnung der Ortsabhängigkeit von Heterogenitätseffekten im Reaktor.

Allerdings muß erwähnt werden, daß dabei die Fehler nicht vermieden werden können, diemit der Anwendung der Diffusionstheorie in der Nähe von Grenzflächen zwischen den einzelnen Zonen im Reaktor gemacht werden.

7. Methoden zur Berechnung von Stoßwahrscheinlichkeiten

Sowohl für die Bestimmung der Reaktionskoeffizienten als auch für die Bestimmung der mittleren Diffusionskonstanten für die Zelle (aus Gl. (5.13)) sind Methoden erforderlich, die die Berechnung der Stoßwahrscheinlichkeiten P_{mn} mit erträglichem Aufwand gestatten. Um die charakteristischen Symmetrieeigenschaften verschiedener Typen der Zellgeometrie ausnutzen zu können, ist es sinnvoll, für unterschiedliche Geometrietypen unterschiedliche Methoden zu verwenden.

In der Literatur ist eine ganze Reihe (z.B. /14/ bis /21/) von Verfahren zur Berechnung von Stoßwahrscheinlichkeiten zu finden; einige von ihnen wurden mit gewissen Modifikationen im Zellprogramm ZERA benutzt. Sie sollen im folgenden kurz beschrieben werden.

- 32 -

7.1 Approximation für Plattenzellen

Für eine <u>isolierte</u> Plattenzelle lassen sich die Integrationen in (2.7) analytisch ausführen und liefern einen Ausdruck für die Stoßwahrscheinlichkeiten P_{ik} = $\sum_{k} \psi_{ik}$, in dem Exponentialintegrale

$$E_{3}(x) = \int_{1}^{\infty} \frac{dt}{t^{3}} e^{-xt}$$
(7.1)

auftauchen:

$$P_{ik}(isol.) = \frac{1}{2x_{i}} \left\{ E_{3}(x_{a}) - E_{3}(x_{a} + x_{i}) - E_{3}(x_{a} + x_{k}) + E_{3}(x_{a} + x_{i} + x_{k}) \right\}$$
(7.2)

Hier sind x_i , x_k und x_a die optischen Dicken^{*)} der Platten i, k, und der Platten zwischen i und k (siehe Skizze).

$$\begin{vmatrix} \mathbf{i} \\ \mathbf{x}_{\mathbf{i}} \\ \mathbf{i} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \mathbf{k} \\ \mathbf{x}_{\mathbf{k}} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \mathbf{i} \\ \mathbf{x}_{\mathbf{i}} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \mathbf{k} \\ \mathbf{x}_{\mathbf{k}} \end{vmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{k} \\ \mathbf{x}_{\mathbf{i}} \\ \mathbf{x}_{\mathbf{i}} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \mathbf{k} \\ \mathbf{x}_{\mathbf{k}} \end{vmatrix}$$

Wenn die Zelle nicht isoliert ist, müssen zusätzlich die Beiträge der Platten k in benachbarten Zellen zu P_{ik} berücksichtigt werden. Betrachten wir beispielsweise den Beitrag der Platte k in der linken Nachbarzelle. Er ist analog zu (7.2)

$$\frac{1}{2x_{i}} \left\{ E_{3}(x_{a}+x_{z}) - E_{3}(x_{a}+x_{i}+x_{z}) - E_{3}(x_{a}+x_{k}+x_{z}) + E_{3}(x_{a}+x_{i}+x_{k}+x_{z}) \right\}$$
(7.3)

Analoge Ausdrücke ergeben sich für die Platten k aus den weiter entfernten Zellen, wobei die Argumente der E_3 -Funktionen jeweils um den Betrag x_z größer und die Beiträge selbst immer kleiner werden. Solange x_z nicht wesentlich kleiner al 1 ist, konvergiert die Summe der Einzelbeiträge ziemlich schnell, und man kann P_{ik} als endliche Summe von Einzelbeiträgen der Form (7.3) berechnen.

Eleganter und mit weniger Aufwand lassen sich die Beiträge der Nachbarzellen berücksichtigen, wenn man von einer Approximation der Exponentialintegrale als Summe von Exponentialfunktionen ausgeht:

*) $z_{\bullet}B_{\bullet}$ ist $x_{i} = \sum_{i} d_{i}$, wobei d_{i} die geometrische Dicke der Platte i ist.

- 33 -

$$E_{3}(\mathbf{x}) \approx \sum_{p=1}^{p} a_{p} e^{-b_{p}\mathbf{x}}$$
(7.4)

Dann ist die Summierung der Einzelbeiträge durch Umformung in geometrische Reihen in geschlossener Form möglich und führt zu

$$P_{ik} = \frac{1}{2x_{i}} \sum_{p=1}^{P} a_{p} \frac{1-e^{-b_{p}x_{k}}}{1-e^{-b_{p}x_{z}}} (1-e^{-b_{p}x_{i}})(e^{-b_{p}x_{a}}+e^{-b_{p}(x_{z}-x_{a}-x_{i}-x_{k})})$$
(7.5)

Es ist zu erkennen, daß Gl. (7.5) die Reziprozitatsbeziehung

$$x_{i}P_{ik} = x_{k}P_{ki}$$
(7.6)

erfüllt. Im Grenzfall unendlich dünner Platten ergibt (7.5) den richtigen "homogenen" Grenzwert

$$P_{ik}(hom) = x_k / x_z$$
(7.7)

-Gleichung (7.5) hat einen so einfachen Aufbau, daß sie auch für Routinerechnungen verwendet werden kann. Dabei enthält sie keine Annahmen über die Winkelverteilung der Neutronen an Platten- oder Zellgrenzen.

Im Programm ZERA wird mit P = 7 Termen bei der Approximation (7.4) gerechnet, wobei die Parameter:

a 1	=	0.5			^b 1	=	2
^a 2	Ξ	2.45			^ъ 2	=	4/3
a ₃	=	2.45		-	^b 3	=	1.4
a_4	=	2.89	•	10-2	b4	=	4
a 5	≒	2.89	٠	10-2	Ъ ₅	=	9
a_6	=	3.56	•	10-4	^b 6	=	29.4
a.,	=	3.56	•	10 ⁻⁴	b ₇	=	81.9

verwendet werden. Damit werden $E_3(x)$ und $E_3(0)-E_3(x)$ im Bereich 0.002 $\leq x \leq 2$ mit einer relativen Genauigkeit von maximal einigen Promille approximiert. Für x > 2 werden die relativen Fehler für $E_3(x)$ etwas größer. Das kann aber in Kauf genommen werden, da $E_3(x)$ dann selbst sehr klein wird.

- 34 -

7.2 Approximation für andere Geometrietypen

Zur Behandlung von Stabgittern werden in ZERA Approximationen für drei Geometrietypen verwendet. Alle drei Typen enthalten eine oder eine Reihe konzentrischer zylindrischer Zonen. Sie unterscheiden sich nur durch die Form der äußersten Zone (zylindrische, quadratische oder hexagonale Berandung). Zur Behandlung der inneren Zonen werden die von Bonalumi /22 / vorgeschlagenen Methoden verwendet. Die Wechselwirkung zwischen benachbarten Zellen wird mit Hilfe von Transmissionswahrscheinlichkeiten für die äußerste Zone berücksichtigt. Für quadratische und hexagonale Berandungen der äußersten Zone werden dabei Approximationen von Sauer /23/ benutzt.

- 35 -

8. <u>Anwendungsbeispiele</u>

8.1

Räumliche Feinstruktur von Flüssen und Reaktionsraten in thermischen Reaktoren

Das erste Anwendungsbeispiel bezieht sich auf die räumliche Verteilung von 238 U-Einfangreaktionen innerhalb eines metallischen Uranstabes in einem thermischen Leichtwassergitter. Es handelt sich um ein hexagonales Gitter mit einer Schlüsselweite von 1.44 cm. Der Durchmesser der Uranstäbe beträgt 2 r₁ = 0.983 cm.

Die ausgezogene Kurve in Abb. 2 zeigt experimentelle Ergebnisse von Smith et al. /24/ für die Reaktionsdichte zwischen 3 eV und 10 keV als Funktion des Abstandes T von der Oberfläche des Stabes (im Zentrum des Stabes ist $T = r_1$). Die gestrichelte Linie in Abb. 2 stellt die Ergebnisse von Monte-Carlo-Rechnungen dar, die ebenfalls aus /24/ entnommen wurden. Die strichpunktierte Linie zeigt die Ergebnisse von Zellrechnungen mit dem Programm ZERA, die mit ABN-Querschnitten /12/ durchgeführt wurden. Um die Ortsabhängigkeit der ²³⁸U-Einfangdichte zu ermitteln, wurde der Stab in 12 konzentrische Zonen unterteilt. Alle Kurven sind auf eine Reaktionsdichte 1 im Zentrum des Stabes normiert.

Bei diesem Anwendungsbeispiel spielt das Hauptproblem dieser Arbeit, nämlich die Ortsabhängigkeit der Selbstabschirmung von Resonanzquerschnitten, eine wichtige Rolle. Abb. 2 zeigt, wie stark diese Abhängigkeit in der Nähe der Oberfläche ist.

Die Übereinstimmung der ZERA-Resultate mit den experimentellen Ergebnissen und denen der Monte-Carlo-Rechnungen ist überraschend gut. Das gilt auch für die Gesamtzahl der Neutronen, die zwischen 3eV und 10 keV im Uranstab absorbiert werden: ZERA liefert eine Zahl von 0.3140 gegenüber einem Monte-Carlo-Resultat von 0.3075, wenn ein Neutron in dem Energiebereich unterhalb 10 keV abgebremst wird.

Ein weiteres Beispiel, das die Art der Aussagen demonstriert, die das Zellprogramm für thermische Reaktorgitter liefert, bezieht sich auf die zylindrisierte Zelle des Schwerwasserreaktors FR2 mit metallischen Natururanstäben. In Abb. 3 ist die Ortsabhängigkeit des

- 36 -

Neutronenflusses innerhalb einer Zelle für einige Energiegruppen dargestellt, in denen der Resonanzcharakter der ²³⁸U-Wirkungsquerschnitte stark ausgeprägt ist. Interessant ist die deutliche Flußaufwölbung im Moderator im 100 eV-Energiegebiet und darunter, wo der Hauptteil der Resonanzabsorption stattfindet.

Abb. 4 zeigt das Neutronenspektrum in einigen Zonen der FR2-Zelle mit oxydischen Brennelementen, die aus einem Bündel von 7 Stäben bestehen. Bei der Rechnung wurde der zentrale Stab des Bündels als einzelne Zone behandelt, während die übrigen 6 Stäbe als zusammenhängende Ringzone betrachtet wurden. Die Zonenaufteilung der Zelle ist in der Abbildung skizziert. Die Abbildung zeigt unter anderem die Abweichung des Spektrums vom asymptotischen 1/E-Spektrum ($\emptyset(u) = const.$) im oberen Resonanzbereich, die bei der Berechnung der Resonanzdurchgangswahrscheinlichkeit gewöhnlich nicht berücksichtigt wird.

Ohne näher darauf einzugehen, sei erwähnt, daß man aus der Reaktionsratenverteilung, die das Zellprogramm liefert, Gitterparameter (etwa die Resonanzdurchgangswahrscheinlichkeit oder den Schnellspaltfaktor) berechnen kann, die konsistent mit der Berechnung der Diffusionsverluste sind.

8.2 Räumliche Feinstruktur von Flüssen und Reaktionsraten in SNEAK-3A-1-Zellen

In der schnellen Null-Energie Anordnung SNEAK / 7 / wurde eine Reihe von Experimenten durchgeführt, die Aussagen über die Wirkung der heterogenen Zellstruktur auf das Spektrum, auf die Reaktivität und auf die räumliche Feinstruktur von Flüssen und Reaktionsraten liefern. In diesem Teilabschnitt werden einige Ergebnisse mit ZERA-Rechnungen verglichen, die durch Folienaktivierung gewonnen wurden. Für ihre Interpretation ist es zweckmäßig, sie in drei Klassen einzuteilen:

 Folienaktivierungen, an denen vorwiegend hochenergetische Neutronen beteiligt sind. Dazu gehören die von K. Burkart /25/ durchgeführten Messungen der Feinstruktur der ¹⁰³Rh(n,n')-

- 37 -

Aktivierung innerhalb einer SNEAK-Zelle (Abb. 5), die im wesentlichen durch Neutronen mit Energien erfolgt, die oberhalb von 200 keV liegen. Dazu gehört auch die von R. Böhme /25/ gemessene Feinstruktur der 238 U-Spaltungen (Spaltschwelle \approx 1.4 MeV), die in Abb. 6 dargestellt ist. Die Abbildungen zeigen die Reaktionsdichten in jeweils zwei Zellkonfigurationen, die sich in der Anordnung der einzelnen Platten in der Einheitszelle, nicht aber in der mittleren Zusammensetzung der Zelle unterscheiden. Die Anordnung der Platten, deren Dicke 0.314 cm beträgt, ist in Abb. 5 skizziert.

Die Rechnungen, deren Ergebnisse ebenfalls in den Abbildungen 5 und 6 dargestellt sind, wurden mit dem SNEAK-Querschnittsatz 26/ durchgeführt. Sie stimmen gut mit den experimentellen Ergebnissen überein.

- 2. Aktivierungen von Folien, die sowohl durch hoch- als auch durch niederenergetische Neutronen erfolgen. In diese Klasse gehören die Messungen der Einfangrate von 238 U (Abb. 7) und die der Spaltrate von 235 U (Abb. 8). Während Messungen und Rechnungen, die in Abb. 7 dargestellt sind, befriedigend übereinstimmen, zeigen sich deutliche Unterschiede in Abb. 8. Nun findet aber gerade in 235 U eine ziemlich scharfe Kompensation gegenläufiger Tendenzen für die Ortsabhängigkeit der Spaltdichte statt: bei hohen Energien ist die Spaltdichte (ähnlich wie die von 238 U) im Zentrum der Uranplatten am höchsten, während sie für Energien E < 1 keV dort am geringsten ist. Daher können die in Abb. 8 gezeigten Diskrepanzen zwischen Rechnung und Experiment durch relativ geringe Fehler bei der Berechnung der globalen Form des Spektrums verursacht sein.
- 3. Folienaktivierungen mit der Sandwich-Methode, die nach geeigneten Korrekturen diskreten Neutronenenergien zugeordnet werden können. Die in den Abbildungen 9 bis 12 gezeigten Zelltraversen für Resonanzaktivierungen sind Ergebnisse von Messungen die von W. Mayer /27 / in SNEAK-3A-1 durchgeführt wurden. Es handelt sich um Messungen mit Indium-, Gold-, Wolfram- und Kupferfolien. Die Energien der Hauptresonanzen sind in der jeweiligen Abbildung aufgeführt. Die Übereinstimmung der Rechnungen mit den experimentellen Daten kann mit Ausnahme der Kurve für Kupfer als gut bezeichnet werden.

8.3 Heterogenitätseffekte auf die Reaktivität in SNEAK-3A-1

Abb. 13 zeigt die gemessenen und berechneten Reaktivitätseffekte, die durch Verwendung unterschiedlicher Einheitszellen (bei gleicher mittlerer Zusammensetzung der Zelle) in den zentralen 21 Brennelementen in SNEAK-3A-1 verursacht werden. Die Ergebnisse sind als Funktion der Länge 1 der Einheitszelle dargestellt (1₁ ist die Länge der Normalzelle). Die benutzten Zellstrukturen und die Lage der Experimentierzone im Core sind in der Abbildung skizziert.

Die in Abb. 13 und in den beiden folgenden Abbildungen dargestellten theoretischen Ergebnisse wurden in drei Schritten gewonnen: Zunächst wurden mit Hilfe der gleichen Zellrechnungen, die auch zur Interpretation der Feinstrukturmessungen benutzt wurden, heterogenitätskorrigierte Wirkungsquerschnitte für die Normalzelle, die "einfach gebündelte" und für die "doppelt gebündelte" Zelle berechnet. Im zweiten Schritt wurden 26-Gruppen-Diffusionsrechnungen durchgeführt, wobei die korrigierten Querschnitte für die Normalzelle in der Testzone zur Verwendung gelangten. Die Resultate dieser Diffusionsrechnungen bildeten den Ausgangszustand für anschließende Störungsrechnungen, in denen die Differenz in den Heterogenitätskorrekturen für die verschiedenen Zellen behandelt wurde.

Abb. 13 zeigt, daß die berechneten Reaktivitätsunterschiede bis auf etwa 10% mit den experimentellen Ergebnissen übereinstimmen.

Die Abbildungen 14 und 15 zeigen die Abhängigkeit der Heterogenitätseffekte von der axialen Ausdehnung der durch Änderung der Einheitszellen modifizierten Testzone und die von der radialen Position der Elemente mit gebündelten Zellen. Der Zielsetzung dieser Experimente sowie ihrer Interpretation liegen folgende Erwägungen zugrunde:

Wenn die Änderung der Zellstruktur zu einer Änderung der Diffusionskonstanten führt, werden in den Randgebieten des Cores negative Reaktivitätsbeiträge auftreten, die nach der Störungstheorie proportional zu

- 39 -

$$-(\int D_x \operatorname{grad}_x \emptyset \operatorname{grad}_x \emptyset^+ + \int D_y \operatorname{grad}_y \emptyset \operatorname{grad}_y \emptyset^+ + \int D_z \operatorname{grad}_z \emptyset \operatorname{grad}_z \emptyset^+) \qquad (8.1)$$

sind. δD_x , δD_y und δD_z sollen die Änderungen der Diffusionskonstanten in den drei Fundamentalrichtungen bedeuten, \emptyset^+ ist der adjungierte Fluß. Der Gruppenindex wurde hier weggelassen.

In SNEAK sind die Platten senkrecht zur z-Achse, d.h. zur Achse des Reaktors geschichtet. Die radiale Ausdehnung der in Abb. 14 skizzierten Testzone ist so gering, daß die erstenbeiden Terme in (8.1) keine wesentliche Rolle spielen, weil der Fluß und der adjungierte Fluß in radialer Richtung innerhalb der Testzone fast flach verlaufen. Mit wachsender axialer Ausdehnung der Testzone steigt jedoch grad $_{z}^{\emptyset}$ grad $_{z}^{\emptyset^{+}}$, so daß sich zunehmend negative Reaktivitätsbeiträge bemerkbar machen sollten, die proportional zu δD_{z} sind. Umgekehrt werden sich mit wachsender Radialposition der Elemente mit modifizierten Zellen zunehmend negative Beiträge zeigen, die proportional zu $\delta D_{x} = \delta D_{y}$ sind.

Zur Interpretation der in den Abbildungen 14 und 15 gezeigten experimentellen Ergebnisse ist es daher erforderlich, Aussagen über δD_z und δD_x zu machen. Wir wollen uns hier mit einer Schätzung begnügen, die den berechneten (ausgezogenen) Kurven zugrundeliegt:

 $d D_{\mathbf{x}} = d D_{\mathbf{y}} = \frac{3}{4} d \overline{D}$ $d D_{\mathbf{z}} = 0$ (8.2)

 $d\bar{D}$ ist hier die Änderung der Zell-Diffusionskonstante, die mit Hilfe von (5.13) berechnet wird.

Die Schätzung (8.2) hat ihre Begründung in folgender Überlegung:

In einer Plattenzelle ist der Unterschied $d\bar{D}$ gegenüber der homogenisierten Zelle auf besonders lange Flugwege zurückzuführen, die die Neutronen in Platten mit solchen Transportquerschnitten zu erwarten haben, die kleiner als der mittlere Transportquerschnitt in der Zelle sind. Offensichtlich sind dabei besonders große Flugwege für solche Neutronen wahrscheinlich, die unter sehr flachen Winkeln gegen die

Plattenoberfläche in eine neutronenoptisch dünne Platte eintreten. Dagegen werden Neutronen, die unter größeren Winkeln gegen die Plattenoberfläche in eine optisch dünne Platte treten, bald auf eine Platte mit größerem Transportquerschnitttreffen, wenn die Zelldicke nicht wesentlich größer als eine mittlere freie Weglänge in der homogenisierten Zelle ist. Diese Überlegung läßt sich auch auf die Differenz $d\overline{D}$ für zwei unterschiedlich heterogene Zellen übertragen und bedeutet, daß $d\overline{D}_z$ wesentlich kleiner als $d\overline{D}_x$ und $d\overline{D}_y$ ist, wenn die Zelldicke klein gegenüber der mittleren freien Weglänge in der

$$d\overline{D} = \frac{dD_x}{3} + \frac{dD_y}{3} + \frac{dD_z}{3}$$
(8.3)

ist (vergl. 5.18), ergibt sich mit $\delta D_z/\delta D_x \ll 1$

$$dD_{\mathbf{x}} \approx \frac{3}{4} d\overline{\mathbf{D}}.$$

Abb. 14 zeigt, daß der relative Verlauf der Heterogenitätseffekte mit wachsender Höhe der gebündelten Testzone sehr gut durch die Rechnungen (mit $O_z = 0$) wiedergegeben wird. Die absoluten Werte unterscheiden sich wie in Abb. 13 um etwa 10%.

Die berechnete Kurve für die Radialabhängigkeit der Heterogenitätseffekte (Abb. 15) zeigt in der Nähe des Reflektors relativ größere Unterschiede zu den experimentellen Ergebnissen als im Zentrum des Reaktors. Trotzdem werden die charakteristischen Züge dieser Abhängigkeit – insbesondere der Vorzeichenwechsel in der Nähe des Reflektors – richtig beschrieben. Die gestrichelten Kurven in Abb. 15 unterscheiden sich von den ausgezogenen dadurch, daß die Änderungen in den radialen Diffusionskonstanten hier nicht berücksichtigt wurden. Mit ihnen kann der gemessene Vorzeichenwechsel nicht verstanden werden.

Abb. 16 vermittelt einen Eindruck über die Beiträge der einzelnen Energiegruppen zu den Reaktivitätsänderungen, die mit dem Übergang von normalen Zellen zu gebündelten Zellen in der zentralen Zone von SNEAK-3A-1 verbunden sind. In der Abbildung ist die Änderung der Spaltrate (multipliziert mit der Spaltausbeute γ), die Änderung der Absorptionsrate sowie die jeweilige Differenz (der Nettogewinn an Neutronen) für jede Energiegruppe aufgetragen. Es ist zu erkennen, wie kompliziert die Energieabhängigkeit der Heterogenitätseffekte ist.

- 41 -

8.4 Einfluß der Heterogenität auf die Lebensdauer, Beispiel SUAK (Anordnung UH 1A)

In schnellen Reaktoren mit relativ weichen Spektren wird die mittlere Lebensdauer wesentlich durch Neutronen mitbestimmt, deren Energien unterhalb 10 keV liegen. Im heterogenen Gitter macht sich in diesem Energiebereich die stärkere Selbstabschirmung der Resonanzen gegenüber dem homogenen Fall dadruch bemerkbar, daß mehr Neutronen zu niedrigeren Energien gelangen. Das führt zu einer Erhöhung der mittleren Lebensdauer.

Derartige Erhöhungen wurden indirekt (durch Bestimmung der Abklingkonstanten & bei Experimenten mit gepulsten Quellen) in der unterkritischen Anordnung SUAK gemessen /28/. Abb. 17 zeigt einige Ergebnisse für unterschiedlich heterogene Zellen. Die Normalzelle (Dicke d₁) ist in der Abbildung skizziert. Die durch d = 2d₁ und d = 4d₁gekennzeichneten Zellen entstanden jeweilsdurch Verdopplung der Dicke der einzelnen Platten. In Abb. 17 ist die relative Änderung $\&/\alpha_1$ der Abklingskonstanten in Abhängigkeit von d/d₁ aufgetragen.

Zum Vergleich zeigt die Abbildung berechnete Ergebnisse, die mit Hilfe des beschriebenen Zellprogramms erhalten wurden und gut mit dem experimentellen Verlauf von $^{\alpha}\!/^{\alpha}_{1}$ übereinstimmen.

8.5 Heterogenitätswirkung auf das Flutverhalten des Referenzreaktors D1

Im letzten Anwendungsbeispiel geht es um die Auswirkung von Heterogenitätseffekten auf das Flutverhalten eines schnellen Leistungsreaktors; des dampfgekühlten Referenzreaktors D1 /29/. Abb. 18 zeigt die Ergebnisse von ZERA-Rechnungen für k_{eff} in Abhängigkeit von der Dampfdichte \mathcal{O}_{H_2O} im Core. Die hexagonale Einheitszelle ist in der Abbildung skizziert. Ein Vergleich mit der ausgezogenen Kurve für das homogenisierte Core zeigt, daß die Vernachlässigung der Heterogenitätseffekte bei hohen Dampfdichten zu Fehlern von mehreren Prozent für k_{eff} führt. Es ist vorwiegend die Änderung in der Selbstabschirmung der Resonanzquerschnitte, die zu derart großen Reaktivitätsänderungen führt.

- 42 -

Literaturverzeichnis

- /1/ M.F. James, D.J. Matthews: "A Perturbation Method for Multigroup Neutron Transport Calculations in Plane Lattices" AEEW-R 219
- /2/ M.M.F. Storrer et al.: "Heterogeneity Calculation for Fast Reactors by a Perturbation Method" American Nucl. Society -Winter Meeting, San Francisco (1964)
- /3/ D. Meneghetti: "Calculation of Heterogeneity Effects in ZPR III Fast Assemblies Using the DSN Program" ANL-6218
- /4/ H. Kuroi et al.: "Heterogeneity Study for Intermediate Energy Core Program" Symposium on Fast Reactor Physics and Related Safety Problems (IAEA) SM-101/29, Karlsruhe (1967)
- /5/ L. Dresner: "Resonance Absorption in Nuclear Reactors" Pergamon Press (1960)
- /6/ G.J. Bell: "A Simple Treatment for Effective Resonance Cross-Sections in Dense Lattices" Nucl. Sci. Eng. 5, 138 (1959)
- /7/ P. Engelmann et al.: "Aufbau und Versuchseinrichtungen der schnellen kritischen Anordnung Karlsruhe, SNEAK, KFK-471 (1966)
- /8/ E.P. Wigner, A.M. Weinberg: "The Physical Theory of Neutron Chain Reactors", The University of Chicago Press (1958)
- /9/ E.P. Wigner et al.: J. Appl. Phys. 26, 260 (1955)
- /10/ D.C. Leslie, G.J. Hill, A. Jonsson: "Improvements to the Theory of Resonance Escape in Heterogeneous Fuel, I. Regular Arrays of Fuel Rods", Nucl. Sci. Eng. 22, 1, 78 (1965)
- /11/ A. Khairallah et al.: "Heterogeneite dans l'assemblage 1-A de Masurca" IAEA-Symposium on Fast Reactor Physics and Related Safety Problems, SM-101/57, Karlsruhe (1967)
- /12/ L.P. Abagjan et al.: "Gruppenkonstanten schneller und intermediärer Neutronen für die Berechnung von Kernreaktoren" KFK-tr-144 (Übersetzung)
- /13/ P. Benoist: "Théorie du coefficient de diffusion des neutron dans un réseau comportant des cavités" CEA-R-2278 (1964)
- /14/ A. Jonsson: "A One-Group Collision Probability Routine for Annular Systems", AEEW-R-253 (1963)
- /15/ A. Müller: "Stoßwahrscheinlichkeiten in Zylindergeometrie" Nukleonik, 4, 1 (1962)

- /16/ Y. Fukai: "Comparison of Flux Ratio Calculations in Lattices by Integral Transport Theory" Nucl. Sci. Eng. 13, 345 (1962)
- /17/ H. Kiesewetter: "Zur Berechnung der Stoßwahrscheinlichkeiten in regulären Stabgittern" Kernenergie 6, 3 (1963)
- /18/ E.M. Pennington: "Collision Probabilities in Cylindrical Lattices" Nucl. Sci. Eng. 19, 215 (1964)
- /19/ J.E. Beardwood, A.J. Clayton: "The Solution of the Transport Equation by Collision Probability Methods" ANL 7050 (1965)
- /20/ D.C. Leslie, A. Jonsson: "The Calculation of Collision Probabilities in Cluster-Type Fuel Elements" Nucl. Sci. Eng. 23, 272 (1965)
- /21/ J. Carlvik: "A Method for Calculating Collision Probabilities in General Cylindrical Geometry and Applications to Flux Distributions and Dancoff Factors" A/Conf. 28/P/681
- /22/ R. Bonalumi: "Neutron First Collision Probabilities in Reactor Physics", Energia Nucleare 8, 326 (1961)
- /23/ A. Sauer: "Approximate Escape Probabilities" Nucl. Science and Eng. <u>16</u>, 329 - 335 (1963)
- /24/ G. Smith, J. Hardy, D. Klein: "Comparison of Measurements with a Monte Carlo Calculated Spatial Distribution of Resonance Neutron Capture in a Uranium Rod" Nucl. Sci. Eng. 8, 449 (1960)
- /25/ D. Stegemann et al.: "Physics Investigations of a 670 l Steam Cooled Fast Reactor System in SNEAK, Assembly 3A-1" KFK-627 (1967)
- /26/ H. Küsters et al.: "The Group Cross Section Set KFK-SNE AK. Preparation and Results" KFK-628 (1967)
- /27/ W. Mayer (Persönl. Mitteilung)
- /28/ F. Mitzel: "Untersuchungen über instationäre Neutronenfelder in schnellen multiplizierenden Systemen" Ext. Bericht INR-4/67-14
- /29/ A. Müller et al.: "Referenzstudie für den 1000 MWe dampfgekühlten schnellen Brutreaktor (D1)" KFK-392 (1966)

- 44 -







Abb.4 Spektrum in verschiedenen Zonen der FR2 - Zelle

Abb. 7 ²³⁸U - Einfangtraversen in SNEAK - 3A / 1 - Zellen



Abb. 5 ¹⁰³ Rh(n,n')-Aktivierungstraversen in SNEAK- 3A/1 - Zellen





Ŷţ H Ŧ Ŧ

Abb.8 ²³⁵U - Spaltratentraversen in SNEAK - 3A/1 - Zellen

0,96

0.94

0,92





Gebündelter Teil der Corehöhe H

Abb. 15 Bündeleffekt pro Element als Funktion der radialen Position der gebündelten Elemente





Abb. 16 Energieabhängige Heterogenitätswirkungen auf die Absorptions - und Spaltrate in SNEAK 3A-1

Abb. 17 Abhängigkeit der Zerfallskonstante d. von der Zelldicke (SUAK - UH 1A)





Abb.18 k_{eff} in Abhängigkeit von der Dampfdichte g_{H20} im Referenzreaktor D1

