

C. Beckert

**Entwicklung eines 3D  
Neutronentransportcodes auf der  
Basis der Ray-Tracing-Methode und  
Untersuchungen zur Aufbereitung  
effektiver Gruppenquerschnitte  
für heterogene LWR-Zellen**

BMWA Projekt 150 1225  
Abschlussbericht Teil 3



Wissenschaftlich-Technische Berichte

**FZR-446**

Januar 2006

C. Beckert

**Entwicklung eines 3D Neutronentransportcodes auf der  
Basis der Ray-Tracing-Methode und Untersuchungen  
zur Aufbereitung effektiver Gruppenquerschnitte  
für heterogene LWR-Zellen**

**BMWA Projekt 150 1225**

**Abschlussbericht Teil 3**

## **Abschlussbericht**

### **Final Report**

Reaktorsicherheitsforschung-Vorhaben-Nr./

Reactor Safety Research-project No.:

**150 1225**

Vorhabensstiel: **Methodenentwicklung zur Analyse von Störfall-szenarien mit Frischdampfleck und Borverdünnung mit Hilfe des Codesystems ATHLET-DYN3D**

Project Title: **Development of methods for the analysis of accident scenarios with steam line breaks and boron dilution by the help of the code system ATHLET-DYN3D**

Autoren / Author(s): **C. Beckert**

Projektleiter / Project leader: **U. Rohde**

Dienststelle der Autoren /

Performing Organisation: **Forschungszentrum Rossendorf e.V.  
Institut für Sicherheitsforschung**

Berichtsdatum / Publication Date: **Januar 2006**

Berichts-Nr. / Report-No.: **FZR-446**

Das diesem Bericht zugrundeliegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Wirtschaft und Technologie unter dem Förderkennzeichen 150 1225 gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei den Autoren.

## Kurzfassung

Die klassische deterministische Neutronentransportberechnung des gesamten Reaktorkerns thermischer Reaktoren, in der die Energiegruppennäherung verwendet wird, lässt sich in drei Stufen einteilen: In der Stufe 1 werden Vielgruppennäherungen für alle Energiegruppen erzeugt, in der Stufe 2 werden aus den Vielgruppennäherungen mit Zellcodes Weniggruppennäherungen berechnet und in Stufe 3 wird mit den Weniggruppennäherungen die Neutronenfeldberechnung über einem groben Raumgitter für den gesamten Reaktorkern ausgeführt. Die Datenaufbereitung der Neutronenwirkungsquerschnitte in Stufe 2 erfolgt standardmäßig mit 2D-Zellcodes. Ziel dieser Arbeit war es, einen 3D-Zellcode zu entwickeln, mit diesem Code 3D-Effekte zu untersuchen und die Notwendigkeit einer 3D-Datenaufbereitung der Neutronenwirkungsquerschnitte zu bewerten.

Zur Berechnung des Neutronentransports wurde die Methode der Erstoßwahrscheinlichkeiten gewählt, die mit der Ray-Tracing-Methode berechnet werden. Die mathematischen Berechnungsmethoden wurden im Zwei- und Dreidimensionalen formuliert, die numerischen Lösungsverfahren erstellt und die Algorithmen in den 2D/3D-Zellcode TransRay implementiert. Für den Geometrieteil des Programms wurde das Geometriemodul eines Monte-Carlo-Codes genutzt. Aufgrund der hohen Rechenzeiten für das Ray-Tracing wurde dieses in der 3D-Variante von TransRay parallelisiert.

Das Programm TransRay wurde an einfachen 2D-Testaufgaben verifiziert. Unterschiedliche Datensätze makroskopischer Vielgruppenwirkungsquerschnitte, die Eingangsdaten von TransRay sind, wurden getestet.

Für einen Druckwasser-Referenzreaktor wurden folgende 3D-Probleme untersucht: Ein teilweise eingetauchter Regelstab und Void (bzw. Moderator mit geringerer Dichte) um einen Brennstab als Modell einer Dampfblase im Moderatorgebiet. Alle Probleme wurden zum Vergleich der Ergebnisse auch mit den Standardprogrammen HELIOS (2D) und MCNP (3D) nachgerechnet. Die Abhängigkeit des Multiplikationsfaktors  $k_{\infty}$  und der gemittelten Zweigruppenwirkungsquerschnitte von der Eintauchtiefe des Regelstabes beziehungsweise von der Höhe der Dampfblase um den Brennstab wurden untersucht. Die dreidimensional berechneten Zweigruppenquerschnitte wurden mit drei üblichen Näherungen verglichen: Die lineare Interpolation, die Interpolation mit zusätzlicher Flusswichtung und die Homogenisierung.

Bei einer Zellhöhe von 24 cm, welche einer typischen Höhe eines Nodes im Programm DYN3D (Code der Stufe 3) entspricht, zeigte sich beim 3D-Problem des eingetauchten Regelstabes, dass die Interpolation mit Flusswichtung eine gute Näherung ist. Demnach ist eine 3D-Datenaufbereitung gemittelter Zweigruppenquerschnitte nicht notwendig. Beim Testfall des einzelnen Brennstabes, der von Void (bzw. Moderator geringerer Dichte) umgeben ist, zeigte sich, dass die drei Näherungen für die Zweigruppenquerschnitte unzureichend sind. Demnach ist eine 3D-Datenaufbereitung notwendig. Die einzelne Brennstabzelle mit Void kann als der Grenzfall eines Reaktors angesehen werden, der über die gesamte horizontale Ebene gevoidet ist. Für Phasengrenzflächen über einen größeren Bereich des Reaktors kann also eine 3D-Datenaufbereitung gemittelter Zweigruppenquerschnitte notwendig sein.

TransRay könnte zur dreidimensionalen Datenaufbereitung effektiver Neutronengruppenwirkungsquerschnitte für das reaktordynamische Programm DYN3D verwendet werden. Für diese Verwendung müssten jedoch TransRay weiter ausgebaut und die Rechenzeiten der dreidimensionalen Rechnungen deutlich reduziert werden. Neben der Datenaufbereitung kann TransRay zur Untersuchung anderer, spezieller Fragestellungen, die mit dreidimensionalen Effekten des Neutronentransports verbunden sind, angewandt werden.

## Abstract

The classic deterministic neutron transport calculation for the whole reactor core of thermal reactors using the energy-group approximation can be divided into three sequential steps: In the first step, multi-group data are generated, in the second step, few-group data are calculated on the basis of the multi-group data using cell codes and in the third step, the neutron field calculation is carried out for the whole reactor core by means of the few-group data provided by step 2. In such a way, the neutron flux distribution over a relative coarse space mesh and for few energy groups can be calculated. According to common practice, the neutron cross sections in step 2 are generated with 2D cell codes. The aim of this work was to develop a 3D cell code, to investigate 3D effects with this code and to evaluate the necessity to calculate the few-group cross sections three-dimensionally.

For the neutron transport calculation the method of first collision probabilities was chosen, which are calculated by using the ray-tracing method. The mathematical methods of calculation were formulated in two and three dimensions, the numerical solution procedures were created and the algorithms were implemented into the 2D/3D cell code TransRay. For the part of the geometry description, the geometry-module of a Monte-Carlo code was explored. Since the Ray-Tracing consumes most of the computing time, it was parallelised in the 3D version of TransRay.

The code TransRay was verified by calculating simple 2D test cases. Different data sets of macroscopic multi-group cross sections, which are input-data of TransRay, were tested. For a pressurised water reactor the following 3D problems were investigated: A partially inserted control rod and void (moderator with a lower density respectively) around a fuel rod as a model for a steam bubble in the moderator region. For comparison of the results all problems were additionally recalculated by the codes HELIOS (2D) and MCNP (3D). The dependence of the multiplication factor  $k_{\infty}$  and the averaged two-group cross sections on the insertion depth of the control rod and the height of the steam bubble around the fuel rod respectively was investigated. The two-group cross sections, which were calculated three-dimensionally, were compared with three approximations: The linear interpolation, the interpolation with an additional flux-weighting and the homogenisation.

Using a cell height of 24 cm, which is a typical height of a node in DYN3D (code of the third step), the interpolation with an additional flux-weighting showed satisfactory prediction for the 3D problem of the inserted control rod compared to the full 3D simulations. Thus a 3D data preparation of averaged two-group cross sections is not necessary. For the test case of the single fuel rod, which is surrounded by void or moderator with a lower density respectively, all three approximations were not sufficient. Thus a 3D data preparation is necessary. The case of a single fuel rod surrounded by void can be considered as the limiting case of a reactor, in which a stratified water level has formed in the core. Thus, in the case of the occurrence of interfaces separating two phases (water and steam) over a larger region of the reactor a 3D data preparation of averaged two-group cross sections can be necessary.

In future, TransRay could be used for the three-dimensional data-preparation of effective neutron cross sections for reactor calculation codes like DYN3D. However, for this purpose TransRay has to be improved, and the computing time for the three-dimensional calculations must be reduced noticeably. Besides the data-preparation, TransRay can be applied for the investigation of other, special problems, which are closely connected with three-dimensional effects of the neutron transport.

## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>7</b>
1.1	Zielstellung	7
1.2	Stand von Wissenschaft und Technik	8
1.3	Ableitung der wissenschaftlichen Einzelzielsetzungen und Auswahl der Methoden	12
<b>2</b>	<b>Theorie</b>	<b>21</b>
2.1	Die Transportgleichung zur Beschreibung des Neutronenflusses	22
2.1.1	Die Transportgleichung	22
2.1.2	Die Behandlung der Energieabhängigkeit des Neutronenflusses mit der Energiegruppennäherung	24
2.1.3	Neutronentransportprobleme mit gegebener Quelle und ohne Spaltquelle	31
2.1.4	Kritikalitätsrechnungen	33
2.1.4.1	Die Eigenwertform der Transportgleichung	33
2.1.4.2	Lösung der Eigenwertform der Transportgleichung	34
2.2	Eine integrale Transportmethode zur Bestimmung des Neutronenflusses: Die Methode der Stoßwahrscheinlichkeiten	35
2.2.1	Die integrale Transportgleichung	35
2.2.2	Die Formulierung der Stoßwahrscheinlichkeiten	37
2.2.2.1	Die Formulierung der Stoßwahrscheinlichkeiten im 3-dimensionalen	37
2.2.2.2	Die Gleichungen für 2-dimensionale Probleme	41
2.3	Lösung der Stoßwahrscheinlichkeitsgleichungen	44
2.3.1	Bestimmung der Koeffizienten mit der Ray-Tracing-Methode	44
2.3.1.1	Die Ray-Tracing-Methode im 3-dimensionalen	44
2.3.1.2	Die Ray-Tracing-Methode im 2-dimensionalen	49
2.3.2	Lösung des linearen Gleichungssystems	51
2.3.2.1	Berechnung einer Zelle im unendlich ausgedehnten Gitter	53
2.3.2.2	Die Interface-Current-Methode zur Kopplung mehrerer Zellen	54
2.4	Berechnung der Neutronengruppenflüsse und des Multiplikationsfaktors $k_{\infty}$ als Lösungen der Eigenwertgleichung (äußere Iteration)	55
2.5	Anwendung: Berechnung effektiver Neutronengruppenwirkungsquerschnitte für die Zelle	59
<b>3</b>	<b>Entwicklung des Programms TransRay</b>	<b>62</b>
3.1	Einleitung: Geometrieeingabe, Datenaufbereitung, Ray-Tracing-Methode	62
3.2	Struktur von TransRay2D und TransRay3D	64
3.3	Die Äußere Iteration in TransRay	68

<b>4</b>	<b>Verifikation des Programms TransRay</b>	<b>70</b>
4.1	Aufbereitung makroskopischer Gruppenwirkungsquerschnitte für TransRay	71
4.2	Das Babcock und Wilcox UO <sub>2</sub> Kritikalitäts-Benchmark (2D-Problem)	74
4.2.1	Bemerkungen zu Konvergenz und Rechenzeiten und erste Überprüfung der Ergebnisse von TransRay	75
4.2.2	Vergleich unterschiedlicher Aufbereitungen der makroskopischen Gruppenwirkungsquerschnitte für TransRay	80
<b>5</b>	<b>Zellrechnungen an einem Druckwasser-Referenzreaktor</b>	<b>92</b>
5.1	Berechnung der unendlich langen Brennstabzelle (2D-Problem)	95
5.2	Berechnung von 3D-Problemen	96
5.2.1	Vorbemerkungen zu den Randbedingungen, dem 3D-Geometriemodell in TransRay und den Näherungen für gemittelte Gruppenquerschnitte	96
5.2.2	Ein teilweise eingetauchter Regelstab von Brennstäben umgeben	102
5.2.3	Teilweise Void anstelle des Moderators um einen Brennstab	113
5.2.3.1	Teilweise Void um einen Brennstab mit den 8 nächsten Nachbarbrennstäben ohne Void	114
5.2.3.2	Teilweise Void um einen einzelnen Brennstab	118
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>132</b>
<b>7</b>	<b>Ausblick</b>	<b>139</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>140</b>
	<b>Anhang A -1</b>	<b>144</b>

# 1 Einleitung

## 1.1 Zielstellung

Das wissenschaftliche Ziel des Gesamt-Vorhabens bestand in der Entwicklung einer Methodik für die Durchführung von Analysen zu Frischdampfleck- und Borverdünnungsstörfällen mit Hilfe von gekoppelten neutronenkinetisch-thermohydraulischen Systemcodes mit realistischer Berücksichtigung der Kühlmittelvermischung im Reaktordruckbehälter [21].

Darüber hinaus sollte in einer Erweiterung des Vorhabens die Notwendigkeit einer Bereitstellung von Wirkungsquerschnittsdaten auf der Basis von 3D Neutronentransportrechnungen bewertet werden. Dazu war im Rahmen einer Dissertation ein 3D-Zellcode auf der Basis der Ray-Tracing-Technik zu entwickeln. Der Teil 3 des Abschlussberichts bezieht sich auf diese Erweiterung des Vorhabens. Das Teilvorhaben umfasste die Aufgabenstellungen:

- Entwicklung eines parallelen 3D-Zellcodes auf der Basis der Ray-Tracing-Technik,
- Untersuchung der Notwendigkeit einer 3D-Datenaufbereitung; Vergleich mit Monte-Carlo- und 2D-Transportrechnungen.

Die Datenaufbereitung der Neutronenwirkungsquerschnitte für Reaktorcodes, mit denen konventionelle thermische Reaktoren berechnet werden, erfolgt standardmäßig mit 2D-Zellcodes, die den Neutronentransport mit deterministischen Methoden zweidimensional berechnen. Am Forschungszentrum Rossendorf (FZR) wird dazu das kommerzielle Programm HELIOS benutzt, um auch Daten für das am FZR entwickelte und international genutzte dreidimensionale Programm DYN3D aufzubereiten, welches die 3D-Neutronenkinetik in Diffusionsnäherung nach der nodalen Methode mit zwei Energiegruppen berechnet. Insbesondere werden mit HELIOS auch Wirkungsquerschnitte für methodische Rechnungen zur Analyse von Störfällen mit Frischdampfleck und Borverdünnung für einen Referenzreaktor generiert [34]. Dabei ist zum einen das zu erwartende Spektrum der Variation der Rückkopplungsparameter Brennstofftemperatur, Moderatortemperatur und -dichte sowie Borsäurekonzentration zu berücksichtigen. Zum anderen können dreidimensionale Effekte bei der Datengenerierung dort eine Rolle spielen, wo große Gradienten im Neutronenfluss und seinem Spektrum zu erwarten sind.

Das Programm HELIOS löst für zweidimensionale reaktortypische Geometrien die integrale Neutronentransportgleichung in bestimmten Geometriezellen. Die dabei benötigten Matrixelemente, die Stoßwahrscheinlichkeiten, berechnet das Programm nach der Ray-Tracing-Methode [25]. Ein Ziel des Vorhabens bestand darin, einen auf dieser integralen



Transportmethode basierenden Zellcode für dreidimensionale Geometrien zu entwickeln, wobei der Teil der Ray-Tracing-Methode parallelisiert wurde, um die hohen Rechenzeiten zu reduzieren. In Anwendungen auf dreidimensionale Problemstellungen wurden die Ergebnisse des Transportcodes mit denjenigen von entsprechenden Monte-Carlo-Rechnungen verglichen und an Hand von zwei Testfällen letztlich die Notwendigkeit einer dreidimensionalen Datenaufbereitung bewertet.

Für diese Aufgabe war es sinnvoll Anordnungen von Brennelementzellen zu untersuchen, bei denen dreidimensionale Effekte bei der Datengenerierung eine große Rolle spielen können. Solche Effekte sind insbesondere dort zu erwarten, wo starke Flussgradienten auftreten oder wo die anisotrope Streuung eine größere Rolle spielt. In beiden Fällen ist statt der Diffusionsnäherung die Transporttheorie anzuwenden. Geeignete Kandidaten sind zum Beispiel Brennelementzellen, in denen Absorbergrenzen oder Dampfblasen auftreten. Mit einem reaktordynamischen Programm wie DYN3D müssen solche Fälle zum Beispiel behandelt werden, wenn das Neutronenfeld beim Ein- oder Ausfahren der Regelstäbe oder bei einem Borverdünnungsstörfall berechnet wird. Im ersten Fall sind die Enden der eingetauchten Regelstäbe scharfe Absorbergrenzen. Beim Borverdünnungsstörfall kann eine relativ scharf begrenzte Borverdünnungsfront den Reaktorkern durchlaufen, welche eine sich bewegende Absorbergrenze darstellt. Dampfblasen können bei einem Störfall auch in Form von lokal begrenztem Kühlmittelsieden auftreten. In dieser Arbeit werden der Fall eines eingetauchten Regelstabes und Void (bzw. Moderator mit geringer Dichte) um einen Brennstab als Modell einer Dampfblase betrachtet. Mit der Auswahl der Testfälle zur Bewertung einer 3D Datenaufbereitung wird der Bezug zum ersten Teil des Vorhabens hergestellt.

Die Arbeiten führten zu einer Dissertation. Außerdem steht mit dem Code ein Werkzeug zur Verfügung, das für fortführende Untersuchungen erweitert und angewandt werden kann.

## **1.2 Stand von Wissenschaft und Technik**

Die Kette der klassischen Neutronentransportberechnung des gesamten Reaktorkerns [22] von konventionellen thermischen Reaktoren wird nun erläutert, um die Funktion der Zellcodes innerhalb dieser Kette zu verdeutlichen. Die grundlegende Methode bei der Bestimmung des Neutronentransportes im gesamten Reaktorkern ist die stufenweise Lösung der Transportgleichung mit dem Neutronenfluss als gesuchter Funktion in den unabhängigen Variablen Ort, Bewegungsrichtung, Energie und Zeit. Die Kette der klassischen Neutronentransportberechnung des gesamten Reaktorkerns lässt sich grob in drei Stufen einteilen:

1. In der ersten Stufe werden aus gemessenen Daten der Neutron-Kern-Wechselwirkungen (kurz Kerndaten genannt), die in sogenannten evaluierten Kerndatenbibliotheken (z. B. ENDF/B, JEF oder JENDL) stehen, mikroskopische Vielgruppendaten oder Punktdaten erzeugt. Bei den Punktdaten sind die kernphysikalischen Daten direkt an sogenannten Energiepunkten, d. h. für bestimmte Neutronenenergien, gegeben. Die Werte der kernphysikalischen Größen für Neutronenenergien zwischen zwei Energiepunkten werden durch geeignete Interpolation erhalten. Gruppendaten werden erzeugt, wenn die Energieabhängigkeit des Neutronenflusses mit Energiegruppen, oft als Gruppen bezeichnet, beschrieben wird. Die Verwendung von Gruppendaten ist üblich für die klassische deterministische Neutronentransportberechnung des gesamten Reaktorkerns. Bei der Erstellung von Gruppendaten muss von vornherein ein Neutronenspektrum angenommen werden, welches problemabhängig gewählt und mit dem innerhalb jeder Energiegruppe der mikroskopische Wirkungsquerschnitt gewichtet wird. Bei Punktdaten werden die Resonanzen besser dargestellt.

2. In der zweiten Stufe werden mit diesen Vielgruppendaten beziehungsweise den Punktdaten Weniggruppendaten erzeugt. Dabei werden mit so genannten Zellcodes Transportrechnungen über Zellen (das sind Anordnungen von einzelnen Brennelementzellen oder ganze Brennelemente) ausgeführt und die Wirkungsquerschnitte homogenisiert und auf wenige Energiegruppen kondensiert. Die Mittelungsvorschrift zur Berechnung dieser so genannten effektiven Wirkungsquerschnitte der homogenen Mischung kann zum Beispiel, wie in dieser Arbeit, so gewählt werden, dass die Neutronen-Reaktionsraten innerhalb der homogenisierten Volumina und kondensierten Energiegruppen in der nachfolgenden Berechnungsstufe 3 gut approximiert werden. Im Grunde genommen kann dieser Prozess der Homogenisierung und Kondensierung von Gruppenquerschnitten in mehreren Schritten ausgeführt werden.

3. In der dritten Stufe wird schließlich mit den aus der Stufe 2 gelieferten Weniggruppendaten die Neutronenfeldberechnung, oftmals in Diffusionsnäherung, für den gesamten Reaktorkern ausgeführt. Berechnet werden dabei der Neutronenfluss und der effektive Multiplikationsfaktor des Reaktors als Eigenwert. Die Neutronenflussverteilung über einem relativ groben Raumgitter und für wenige Energiegruppen ist dann das Endergebnis aller Stufen der Neutronenfeldberechnung. Daraus können dann die Leistungsverteilung und weitere physikalische Größen für den Reaktor abgeleitet werden.

Zusammengefasst gilt für die klassische deterministische Neutronentransportberechnung des gesamten Reaktorkerns, in der ausschließlich Gruppendaten verwendet werden, dass in Stufe 1 die Vielgruppendaten für alle Energiegruppen erzeugt werden und in den Stufen 2 und 3 die Neutronentransportgleichung mit Gruppendaten stufenweise gelöst wird.

Die Unterteilung in Stufe 2 und 3 ist notwendig, da eine 3D-Transportrechnung für den gesamten Reaktorkern mit vielen Energiegruppen und feinem Raumgitter die Kapazität der zur Verfügung stehenden Computer gegenwärtig noch wesentlich überschreitet. Allerdings treten in diesem Verfahren Ungenauigkeiten auf beim Übergang von der Zellrechnung zur Berechnung des gesamten Reaktorkerns. Mit der sich immer mehr verbessernden Rechen-technik wird versucht, den Reaktorkern immer genauer mit Transportprogrammen zu behandeln oder die Stufen 2 und 3 in einem Code zu integrieren. Ein Beispiel ist der Code CASMO [23]. CASMO ist ein Zellcode, der die Methode der Charakteristiken verwendet. Im angekündigten Code CASMO-4E sollen die Stufen 2 und 3 zusammengefasst werden. Der gesamte Reaktorkern soll berechnet werden, zunächst noch in zwei Raumdimensionen [49]. Eine weitere Variante zur Transportberechnung des gesamten Reaktorkerns ist die Kopplung der Methode der Charakteristiken in der horizontalen Ebene mit einer  $S_n$  ähnlichen Methode in axialer Richtung [11]. Diese Methode wird in dem Code CRX [10] angewandt.

Auch Monte-Carlo-Methoden finden immer mehr Anwendung innerhalb der Kette zur Berechnung des Neutronentransports im gesamten Reaktor. Beispiele für Monte-Carlo-Codes sind KENO [19], in welchem die Energieabhängigkeit mit Energiegruppen beschrieben wird, und MCNP [7], welcher üblicherweise Punktdaten verwendet, die für viele Isotope mit dem Code mitgeliefert werden.

Am Forschungszentrum Rossendorf (FZR) wird in der ersten Stufe für die Erzeugung der Gruppendaten das Programm NJOY [27] benutzt. Daraufhin können mit dem Programm TRANSX [26] zusammen mit den problemabhängigen Kerndichten der Isotope die makroskopischen Gruppenquerschnitte berechnet werden. NJOY wird auch angewandt zur Berechnung der Punktdaten für den Monte-Carlo-Code MCNP.

In der zweiten Stufe wird am FZR das zweidimensionale Zell- und Abbrandprogramm HELIOS [51] benutzt. HELIOS verwendet die mit dem Programm mitgelieferten und nach der Stufe 1 bestimmten Gruppendaten. Der Neutronentransport wird bestimmt mit der Methode der Erststoßwahrscheinlichkeiten, die mit der Ray-Tracing-Methode berechnet werden. Weitere Zellcodes, die u. a. die Methode der Erststoßwahrscheinlichkeiten verwenden, sind WIMS8 (AEA Technology Winfrith), DRAGON (École Polytechnique de Montréal), RESMOD (IKE Stuttgart), APOLLO-2 (CEA Cadarache and Saclay) und GTRAN2 (Department of Nuclear Engineering, University of California, Berkeley). Bei den Codes DRAGON [33] und GTRAN2 wurden Versuche unternommen, die Erststoßwahrscheinlichkeiten mit der Ray-Tracing-Methode in drei Dimensionen zu berechnen. Der Code GTRAN2 berechnete zunächst die Erststoßwahrscheinlichkeiten mit der Ray-Tracing-Technik für allgemeine

2D-Geometrien, wobei der Teil für das Ray-Tracing parallelisiert wurde [46]. Später wurde in GTRAN2 die Erststoßwahrscheinlichkeitsmethode auf drei Dimensionen erweitert [47, 48] und einschließlich der 2D-Variante in den Code MAGGENTA [53] integriert. Zusätzlich wurde die Methode der Charakteristiken, welche auch im bereits weiter oben erwähnten 2D-Zellcode CASMO [23] angewandt wird, in 2D eingeführt [15, 16, 41] und anschließend in das Code-System MAGG-SCALE [40] integriert [41]. Dieses koppelt den Code MAGGENTA, welcher die Erststoßwahrscheinlichkeitsmethode für allgemeine 2D- und 3D-Geometrien anwendet, mit dem Code-System SCALE [37]. In den Zellcode DRAGON, mit dem die quadratische Brennelementgeometrie von CANDU-Reaktoren berechnet wird, wurde ebenfalls die Erststoßwahrscheinlichkeitsmethode in drei Dimensionen eingeführt [42]. Für CANDU-Reaktoren ist eine 3D-Behandlung notwendig, da zum Beispiel die Regelstäbe senkrecht zu den Kanälen der Brennelemente stehen. Auch in DRAGON wurde inzwischen die Methode der Charakteristiken eingeführt [43]. Es wird versucht, die Methode der Charakteristiken auf allgemeine dreidimensionale Geometrien anzuwenden [54].

Für die Berechnung des gesamten Reaktorkerns (Berechnungsstufe 3) von Leichtwasserreaktoren und ihres transienten Verhaltens wurde am FZR der reaktordynamische Code DYN3D [17, 18] entwickelt. Unter Verwendung der mit HELIOS generierten effektiven Zweigruppenkonstanten wird mit DYN3D eine reaktordynamische Berechnung des gesamten Reaktorkerns in Zweigruppen-Diffusionsnäherung nach der nodalen Methode ausgeführt. DYN3D wird eingesetzt zur Sicherheitsbewertung von Leichtwasserreaktoren. Zwei weitere Beispiele nodaler Programme, mit denen die dritte Stufe ausgeführt wird, sind QUABOX-CUBOX [24] und PANBOX [6].

Der Code DYN3D behandelt die 3D-Neutronenkinetik für quadratische und hexagonale Brennelementgeometrie. Die Neutronenkinetik ist gekoppelt mit einem Zweiphasen-Thermohydraulik-Modell. Der Reaktorkern wird in ein grobes Raumgitter unterteilt. Jedes Raumelement (Node) entspricht einem bestimmten Höhenabschnitt eines Brennelements. Als Eingangsdaten benötigt DYN3D über jedes Node gemittelte Zweigruppenwirkungsquerschnitte für Neutronen.

Diese Querschnitte werden mit dem 2D-Programm HELIOS erzeugt. Der zweidimensionale Neutronentransport wird berechnet mit reflektierenden Randbedingungen und vielen Energiegruppen (190 oder 47) für ein Brennelement. Für das Brennelement werden jeweils unterschiedliche Zustände betrachtet, die sich in Abbrand, Brennstofftemperatur, Kühlmitteltemperatur, -dichte und Borkonzentration unterscheiden. Am Ende dieser Zellrechnungen werden effektive Zweigruppenkonstanten für das Brennelement durch Homogenisierung und

Kondensation auf zwei Energiegruppen generiert. Das Programm HELIOS entspricht dem heutigen Standard deterministischer Zellcodes.

### **1.3 Ableitung der wissenschaftlichen Einzelzielsetzungen und Auswahl der Methoden**

Die zweidimensionale Berechnung der gemittelten Zweigruppenwirkungsquerschnitte ist in der Regel ausreichend, da die Geometrie und die Materialzusammensetzung der Brennelemente in den meisten Fällen weitestgehend unabhängig von der vertikalen Richtung des Reaktorkerns ist. Bei dieser 2D-Behandlung wird also für eine horizontale Ebene des Reaktors die Rechnung ausgeführt und in der vertikalen Richtung wird angenommen, dass sich die für das betrachtete Brennelement definierte Stabstruktur nach oben und nach unten bis ins Unendliche fortsetzt. In allen Fällen, in denen diese Annahmen nicht erfüllt sind, ist dieses Standardmodell nur eine Näherung. Bei Brennelementen mit dreidimensionaler Abhängigkeit in der geometrischen Anordnung oder in der Materialzusammensetzung wird gegebenenfalls zwischen den in unterschiedlichen Ebenen zweidimensional berechneten Werten geeignet interpoliert.

Aufgabe war es nun, für ausgesuchte 3D-Fälle die Zweigruppenwirkungsquerschnitte dreidimensional zu berechnen und damit die Notwendigkeit einer 3D-Datenaufbereitung zu bewerten. Dazu sollten sowohl ein 2D- als auch ein 3D-Zellcode entwickelt werden, die beide dasselbe Lösungsverfahren wie HELIOS verwenden. Unter Verwendung derselben Methode zur Berechnung des Neutronentransportes ist es somit möglich, auf einer einheitlichen Datengrundlage in 2D- und 3D-Vergleichsrechnungen die Notwendigkeit einer dreidimensionalen Datenaufbereitung für die Reaktordynamik zu bewerten. Die Zielstellung des Teil-Vorhabens lässt sich daher in zwei Aufgaben einteilen:

1. Entwicklung eines 2D/3D-Zellcodes zur Berechnung des Neutronentransports in Anordnungen von Brennelementzellen unter Verwendung der Methode der Erststoßwahrscheinlichkeiten, die mit der Ray-Tracing-Methode berechnet werden.
2. Bewertung der Notwendigkeit einer dreidimensionalen Datenaufbereitung gemittelter Zweigruppenwirkungsquerschnitte für Reaktorcodes mit dem entwickelten Zellcode für ausgesuchte 3D-Fälle.

Für die erste Aufgabe wurde der Zellcode TransRay [4] in einer zweidimensionalen Variante TransRay2D und einer dreidimensionalen Variante TransRay3D entwickelt. TransRay2D verwendet die zwei- und TransRay3D die dreidimensionale Ray-Tracing-Methode. Für die zweite Aufgabe konnte somit auf einer einheitlichen Datengrundlage in Vergleichsrechnun-

gen zwischen TransRay2D und TransRay3D die Notwendigkeit einer dreidimensionalen Datenaufbereitung für die Reaktordynamik bewertet werden.

Die Wahl der in TransRay verwendeten Transportmethode lässt sich zunächst wie folgt begründen: Da HELIOS am FZR zur Datenaufbereitung für das reaktordynamische Programm DYN3D benutzt wird, war es nahe liegend, dass für den zu entwickelnden Zellcode die gleiche Transportmethode gewählt wurde. Damit beruhen die Vergleichsrechnungen zwischen TransRay und HELIOS grundsätzlich auf derselben Transportmethode.

Ob die Methode der Erststoßwahrscheinlichkeiten für die zweite Aufgabe dieser Arbeit geeignet ist, lässt sich nach einer Unterteilung der allgemein verwendeten Transportmethoden beurteilen. Grundsätzlich gibt es zur Behandlung der Neutronentransportgleichung deterministische und Monte-Carlo-Methoden. Die deterministischen Transportmethoden können in drei Kategorien unterteilt werden, je nachdem welche Form der Transportgleichung zugrunde gelegt wird [25]:

- Integrodifferentialform der Transportgleichung,
- Integrale Transportgleichung,
- Even-Parity-Form der Transportgleichung.

Für die erste Kategorie ist die Diskrete-Ordinaten-Methode zur numerischen Lösung der integro-differentialen Form der Transportgleichung das hauptsächlich angewandte Verfahren. Es gibt viele zwei- und dreidimensionale Standardprogramme, die auf dieser Methode für diverse Anwendungen beruhen. Bei der zweiten Kategorie, den integralen Transportmethoden, ist die Methode der Formulierung der Stoßwahrscheinlichkeiten die meist benutzte im Gegensatz zu den diskreten integralen Transportmethoden und den Kollokationsmethoden. Die Methode der Charakteristiken gewinnt hier mehr und mehr an Bedeutung. Die Even-Parity-Form der Transportgleichung wurde erst nach den anderen beiden Formen intensiv für numerische Rechnungen betrachtet. Bei ihr hat sich am meisten die Anwendung von Variationsmethoden durchgesetzt, aus denen eine Vielzahl von Approximationstechniken abgeleitet werden können.

Aufgrund der Ausführungen des letzten Absatzes werden nun die in den beiden ersten Kategorien einzuordnenden und am häufigsten verwendeten Methoden und die zur dritten Kategorie zählenden Methoden verglichen:

- Diskrete-Ordinaten-Methoden,
- Stoßwahrscheinlichkeitsmethoden,
- Even-Parity-Methoden.

Aus physikalischen Gesichtspunkten lässt sich allgemein sagen, dass die auf der Integrodifferentialform basierenden Methoden am besten geeignet sind für optisch große Medien, während die integralen Transportmethoden am besten für optisch dünne Medien arbeiten. Schwierigkeiten bei der Integrodifferentialform machen das Auftreten von negativen Flüssen und Ray-Effekten. Finite-Elemente-Methoden für die Winkeldiskretisierung, wie sie mehr bei Even-Parity-Methoden angewandt werden, mildern diese Ray-Effekte, eliminieren sie jedoch nicht.

Bezüglich der numerischen Behandlung der drei Methoden werden folgende Kriterien betrachtet, Ortsdiskretisierung, Winkeldiskretisierung, Rechenzeit und Behandlung der anisotropen Streuung:

#### Ortsdiskretisierung

Bei den Diskrete-Ordinaten-Methoden werden üblicherweise Finite Differenzen und bei den Even-Parity-Methoden Finite Elemente eingesetzt. Die Beschreibung komplizierterer Geometrien ist bei den Finiten Elementen standardmäßig besser entwickelt, während man bei den am meisten verwendeten Finite-Differenzen-Methoden noch auf reguläre Gitter angewiesen ist. Die mathematische Beschreibung irregulärer Gitter mit Finiten Differenzen ist bedeutend schwieriger. Auch bei den Diskrete-Ordinaten-Methoden werden vermehrt Finite Elemente eingeführt. Bei den Finiten Differenzen wird der Flusswert eines Gitterpunktes mit den Flusswerten benachbarter Gitterpunkte verknüpft. Bei der Finiten-Elemente-Methode werden die Flusswerte auf den Eckpunkten der finiten Elemente miteinander gekoppelt. Die Ortsdiskretisierung der Stoßwahrscheinlichkeitsmethode hingegen entspricht genau der vorgegebenen Geometrieunterteilung. Dies ist ein bedeutender Vorteil gegenüber den beiden anderen Methoden, da es erstens keine Geometrie einschränkungen gibt, zweitens der nach der Geometrie eingabe zusätzliche Diskretisierungsformalismus entfällt und drittens eine weitere Ungenauigkeit im Ergebnis verschwindet, die sich bei den beiden anderen Methoden durch die Approximation gegebener Geometrien ergibt.

Die Stoßwahrscheinlichkeitsmethode ist von vornherein so angelegt, sämtliche Stoßwahrscheinlichkeiten zu bestimmen, d. h. alle Ortspunkte untereinander zu verknüpfen, um die räumlich gemittelten Flusswerte von jedem Volumenelement zu bestimmen.

### Winkeldiskretisierung

Bei den Diskrete-Ordinaten-Methoden wird die Winkelabhängigkeit des Neutronenflusses so behandelt, dass die Transportgleichung für diskrete Richtungen gelöst wird. Sie werden auch  $S_n$ -Methoden genannt,  $n$  steht hierbei für die Anzahl der diskreten Winkelrichtungen. Legendre ( $P_N$ ) Entwicklungen oder andere Approximationen können bei der Formulierung Diskreter-Ordinaten-Methoden mit integriert werden. Bei den integralen Transportmethoden wird der winkelabhängige Neutronenfluss über alle Bewegungsrichtungen integriert. Berechnet wird demnach der über alle Bewegungsrichtungen integrierte Fluss. Die Stoßwahrscheinlichkeitsmethoden verwenden in der Regel zusätzlich an den Zellrändern die Neutronenströme, die in Winkelbereiche unterteilt werden können. Bei den Even-Parity-Methoden werden Winkeldiskretisierungen wie zum Beispiel diskrete Ordinaten, bilineare Finite Elemente oder Entwicklungen in Sphärische Harmonische verwendet.

### Rechenzeit

Die Verwendung Finiter-Differenzen- oder Finiter-Elemente-Methoden führt zu dünn besetzten Matrizen, während die Stoßwahrscheinlichkeitsmatrizen voll besetzt sind. Die Rechenzeit und auch der Speicherplatzbedarf sind demnach in großen Systemen bei der Stoßwahrscheinlichkeitsmethode bedeutend höher.

Der bedeutendere Zuwachs an Rechenzeit bei der Stoßwahrscheinlichkeitsmethode gegenüber den beiden anderen Methoden ergibt sich allerdings aus der Berechnung der Koeffizienten des zu lösenden Gleichungssystems. Während die Koeffizienten bei der Finiten-Differenzen und der Finiten-Elemente-Methode einfache Konstanten sind, die durch die Geometrie und Materialzusammensetzung gegeben sind und mit geringem Aufwand schnell berechnet werden, sind die Stoßwahrscheinlichkeiten Mehrfachintegrale, die durch einen zeitaufwendigen Algorithmus bestimmt werden müssen. Meistens wird dazu die Ray-Tracing-Methode verwendet. Der Übergang von zwei- zu dreidimensionalen Rechnungen bedeutet eine zusätzliche starke Rechenzeiterhöhung.

Mit der Interface-Current-Methode kann jedoch die Größe der Stoßwahrscheinlichkeitsmatrizen und damit auch die Anzahl der zu bestimmenden Koeffizienten des zu lösenden Gleichungssystems deutlich reduziert werden.

### Behandlung der anisotropen Streuung

Die Integrodifferentialform und damit auch die Diskrete-Ordinaten-Methode erlauben die Behandlung der anisotropen Streuung mit einer beliebigen Ordnung durch eine Modifizierung



des Stoßterms, ohne die numerische Lösung übermäßig zu verkomplizieren. Im Gegensatz dazu erhöht sich bei der Integralform der Transportgleichung die Anzahl der zu lösenden Gleichungen dramatisch mit zunehmendem Grad der Anisotropie. Die Berücksichtigung der Anisotropie macht die Struktur der Even-Parity-Transportgleichung komplizierter als die der integrodifferentialen Form. Trotz alledem wurde die anisotrope Streuung bei einigen zweidimensionalen Even-Parity-Methoden erfolgreich angewandt.

Da die Stoßwahrscheinlichkeitsmethode erstens bei der Ortsdiskretisierung die Geometrie genau abbildet und zweitens sämtliche Flusswerte über die Stoßwahrscheinlichkeiten miteinander koppelt, dadurch aber volle Matrizen entstehen, liefert sie gerade bei kleinen Systemen effizient genaue Ergebnisse. Daher wird sie sehr häufig in Zellcodes (wie bei den oben aufgelisteten Codes APOLLO, HELIOS, WIMS, ...) verwendet. Da die Ziele die Untersuchung einer dreidimensionalen Datenaufbereitung für die Reaktordynamik und von lokalen Transporteffekten in Brennelementzellen sind, ist die Wahl der Stoßwahrscheinlichkeitsmethode für den Zellcode TransRay gerechtfertigt. Der im vierten Punkt erwähnte Nachteil dieser Methode bei der Behandlung der Anisotropie höheren Grades spielt bei der Datenaufbereitung für das Programm DYN3D eine geringere Rolle, da DYN3D Leichtwasserreaktoren behandelt, d. h., der größere Anteil der relevanten Kernreaktionen läuft im Bereich niedriger Neutronenenergien ab. Mit abnehmender Neutronenenergie nähert sich aber gerade die elastische Streuung mehr einer isotropen Verteilung an. Daher wird oftmals bei diesen Zellrechnungen isotrope (wie in TransRay) oder anisotrope Streuung in erster Näherung betrachtet.

Die Diskrete-Ordinaten- und Even-Parity-Methoden werden angewandt zur Berechnung größerer Bereiche des Reaktorkerns. Durch die sich immer mehr verbessernde Rechen-technik wird auch vermehrt versucht, die Grobgitterverfahren zur Berechnung des gesamten Reaktorkerns durch diese beiden Methoden zu ersetzen, auch dreidimensional. Bei der Gesellschaft für Reaktorsicherheit (GRS) werden dafür die deterministischen Transportprogramme DOORS [2] (Modul DORT für 2D-Rechnung und Modul TORT für 3D-Rechnung) und DANTSYS [1] mit der Diskrete-Ordinaten-Methode eingesetzt. Die Grobgitterverfahren verwenden in der Regel die nodale Methode mit Diffusionsnäherung.

Bei den integralen Transportmethoden gewinnt die Methode der Charakteristiken gegenüber der Stoßwahrscheinlichkeitsmethode immer mehr an Bedeutung. Bei beiden Methoden entspricht die Ortsdiskretisierung genau der vorgegebenen Geometrieunterteilung. Beide Methoden sind numerische Integrationen, die entlang gerader Linien ausgeführt werden, die durch die gesamte Geometrie gezogen werden. Geraden sind die Charakteristiken der Boltzmann-Gleichung.

Die Methode der Charakteristiken hat den Nachteil, dass die Flexibilität bei der Auswahl der geraden Linien eingeschränkt ist. Bei periodischen oder Reflexionsrandbedingungen zum Beispiel müssen alle geraden Linien vom Startpunkt solange durch die Geometrie geführt werden, bis sie wieder am Startpunkt ankommen.

Andererseits hat die Methode der Charakteristiken den Vorteil, dass in ihr mittels numerischer Integrationen weniger Elemente zu bestimmen sind, insbesondere bei großen Problemen mit vielen Regionen. So geben auch Wu und Roy [54] als den wesentlichen Vorteil bei der Methode der Charakteristiken gegenüber der Stoßwahrscheinlichkeitsmethode an, dass die vollen Stoßwahrscheinlichkeitsmatrizen wegfallen. Sie erwarten, dass die Methode der Charakteristiken die Stoßwahrscheinlichkeitsmethode im Code DRAGON ersetzen wird, sobald sie vollständig in DRAGON integriert und validiert ist [54]. Hat z. B. die zu behandelnde Geometrie  $n$  Regionen, so werden mit der Methode der Charakteristiken direkt mit der numerischen Integration entlang der geraden Linien die  $n$  Neutronenflüsse berechnet, die über alle Bewegungsrichtungen integriert sind. Bei der Stoßwahrscheinlichkeitsmethode hingegen müssen, wenn  $m$  die Anzahl der Flächen bei der Unterteilung des Randes der Geometrie ist, insgesamt  $n^2+2mn+m^2$  Stoßwahrscheinlichkeiten bei der numerischen Integration berechnet werden. Aufgrund der optischen Reziprozitätsbeziehungen (siehe Gleichung (109) auf Seite 47) kann diese Anzahl nahezu halbiert werden.

Eine Möglichkeit, innerhalb der Stoßwahrscheinlichkeitsmethode die Dimension der Stoßwahrscheinlichkeitsmatrizen zu reduzieren, ist die Interface-Current-Methode. Dabei wird die zu berechnende Geometrie in Teilregionen unterteilt. Für die jeweiligen Teilregionen werden dann die nun kleineren Stoßwahrscheinlichkeitsmatrizen berechnet und die Teilregionen werden gekoppelt über die ein- und austretenden Neutronenströme der jeweils benachbarten Teilregionen.

Die Interface-Current-Methode ist u. a. in APOLLO [44], HELIOS, DRAGON und MAGGENTA implementiert. In APOLLO wurde eine allgemeine Interface-Current-Methode entwickelt, welche die Stoßwahrscheinlichkeitsmethode und  $S_n$ -Berechnungen koppelt [50]. In DRAGON werden die Stoßwahrscheinlichkeiten mit dem dreidimensionalen Ray-Tracing berechnet, symmetrische Interface-Current-Gleichungen formuliert und diese iterativ mit einem ADI-Verfahren (alternate direction implicate) gelöst [42]. Als Approximation der Stoßwahrscheinlichkeitsmethode betrachten Marleau et al. [31, 32] die  $J_{\pm}$ -Technik, in der jeder homogenen Region eine Stoßwahrscheinlichkeitsmatrix zugeordnet ist, d. h., jede homogene Region wird unabhängig von der heterogenen gesamten Geometrie analysiert. Diese homogenen Regionen werden dann ebenfalls mit einer Interface-Current-Technik gekoppelt. Ist  $n$  die

Anzahl der unabhängigen Regionen, so ist bei der  $J_{\pm}$ -Technik die Anzahl der zu berechnenden Stoßwahrscheinlichkeiten linear in  $n$ . Auch in TransRay wurde die Interface-Current-Methode eingebaut.

Neben deterministischen Methoden kann der Neutronentransport auch mit der Monte-Carlo-Methode behandelt werden. Die Geometrie wird wie bei der Stoßwahrscheinlichkeitsmethode exakt wiedergegeben. Für die Berechnung von Wirkungsquerschnitten, die über die Zelle und über große Energiebereiche gemittelt werden, bereiten Monte-Carlo-Programme hinsichtlich Rechenzeit und Speicherplatz im allgemeinen keine Probleme, da die Neutronenflüsse nicht explizit in der feinen Energie- und Raumdiskretisierung berechnet werden müssen. Will man aber Transporteffekte (z. B. lokale Voideffekte) untersuchen, die sich zum Beispiel aus nur kleinen Änderungen in der materiellen oder geometrischen Konfiguration des zu betrachtenden Systems ergeben, so muss man Ergebnisse verschiedener Rechnungen miteinander vergleichen, d. h., es ist gerade die Differenz zwischen den Ergebnissen interessant. In diesem Falle muss dann die statistische Genauigkeit der Ergebnisse der einzelnen Rechnungen so hoch sein, dass auch die Differenz genau genug ausgewiesen werden kann. Dieser Umstand kann zu nicht mehr realistischen Rechenzeiten führen. Ebensolche Schwierigkeiten ergeben sich für die Monte-Carlo-Methode, wenn man explizit an den Neutronenflüssen in der Feindiskretisierung und nicht nur an gemittelten Daten interessiert ist, was meistens auch beim Studium dieser Effekte notwendig ist. Diese Lücken, die sich durch die prinzipiellen Schwächen der Monte-Carlo-Methode auftun, muss eine deterministische Berechnungsmethode mit abdecken.

Die Methode der Stoßwahrscheinlichkeiten, die mit der Ray-Tracing-Methode berechnet werden, wurde als die Methode der Berechnung des Neutronentransports im Zellcode TransRay gewählt. Die Ausführungen in den vorangehenden Absätzen begründen bzw. rechtfertigen diese Wahl. Es werden nun Bemerkungen erstens zur analytischen Berechnung der Stoßwahrscheinlichkeiten und zweitens zur Parallelisierung der Ray-Tracing-Methode angeführt:

Die Stoßwahrscheinlichkeiten sind Volumen- und Oberflächenintegrale, d. h. im Zweidimensionalen zwei- bis vierfache Integrale und im Dreidimensionalen vier- bis sechsfache Integrale. Die am meisten angewandte Methode zur Berechnung der Stoßwahrscheinlichkeiten ist die deterministische Ray-Tracing-Methode, bei der alle Integrale durch analytische Integration entlang des Weges der Neutronenbewegung als zweifache Integrale im Zwei- und als vierfache Integrale im Dreidimensionalen ausgedrückt und numerisch berechnet werden. Diese Methode wird auch im Programm TransRay verwendet.

Für bestimmte Geometrien wird versucht, diese Integrale analytisch auf noch weniger Dimensionen zu reduzieren. Zum Beispiel wurden in 2D für Zylindergeometrien 1964 von Carlvik [8] zweifache Integrale auf eine Dimension reduziert. Im Dreidimensionalen wurden die Integrale zur Berechnung der Stoßwahrscheinlichkeiten für Hexaeder und endliche Zylinder zum Teil auf einfache und zweifache Integrale reduziert [9, 30]. Nach Marleau et al. [30] werden die vereinfachten Formeln für die Transmissionswahrscheinlichkeiten bei Hexaedern und endlichen Zylindern hauptsächlich angewandt bei der bereits erwähnten  $J_{\pm}$ -Technik, welche eine Approximation der Stoßwahrscheinlichkeitsmethode ist.

Garcia [14] betrachtet im Dreidimensionalen die vier- bis sechsfachen Integrale der Stoßwahrscheinlichkeiten ohne Reduzierung der Dimension und berechnet sie für einfache homogene Testfälle mit einer Methode, die an das Quelle-Senken-Verfahren (source-sink method) erinnert.

Bei Verwendung der Stoßwahrscheinlichkeitsmethode zur Bestimmung des Neutronenfeldes in Brennelementzellen, wobei die Stoßwahrscheinlichkeiten mit der Ray-Tracing-Methode berechnet werden, benötigt der Teil für das Ray-Tracing deutlich die meiste Rechenzeit. Glücklicherweise eignet sich innerhalb der Stoßwahrscheinlichkeitsmethode das Ray-Tracing am besten zur Parallelisierung. So benötigt auch beim Code GTRAN2 der Teil für das Ray-Tracing mit Abstand die längste Rechenzeit bei der Berechnung großer und komplizierter geometrischer Anordnungen. Daher wurde in GTRAN2 der Teil für das Ray-Tracing parallelisiert [46]. Um mit der zweidimensionalen Stoßwahrscheinlichkeitsmethode standardmäßig größere räumliche Bereiche analysieren zu können, wurde die Parallelisierung dieser Methode auch von Fuentes und Turinsky untersucht und erfolgreich getestet [13]. Damit TransRay Anordnungen von maximal 9 Brennelementzellen untersucht werden, allerdings beim Übergang vom zwei- zum dreidimensionalen Ray-Tracing die Rechenzeit quadratisch zunimmt, wurde im Rahmen dieser Arbeit vorerst nur die dreidimensionale Version TransRay3D parallelisiert. Die Rechenzeiten für serielle Rechnungen wurden somit bei entsprechender paralleler Rechnung auf demselben Rechner drastisch reduziert.

Für die zweite Aufgabe, die Bewertung der Notwendigkeit einer dreidimensionalen Datenaufbereitung, war es sinnvoll Anordnungen von Brennelementzellen zu untersuchen, bei denen dreidimensionale Effekte bei der Datengenerierung eine große Rolle spielen können. Solche Effekte sind insbesondere dort zu erwarten, wo starke Flussgradienten auftreten oder wo die anisotrope Streuung eine größere Rolle spielt. In beiden Fällen ist statt der Diffusionsnäherung die Transporttheorie anzuwenden. Geeignete Kandidaten sind zum Beispiel Brennelementzellen, in denen Absorbergrenzen oder Dampfblasen auftreten. Mit einem reaktordy-

namischen Programm wie DYN3D müssen solche Fälle zum Beispiel behandelt werden, wenn das Neutronenfeld beim Ein- oder Ausfahren der Regelstäbe oder bei einem Borverdünnungsstörfall berechnet wird. Im ersten Fall sind die Enden der eingetauchten Regelstäbe scharfe Absorbergrenzen. Beim Borverdünnungsstörfall kann eine relativ scharf begrenzte Borverdünnungsfront den Reaktorkern durchlaufen, welche eine sich bewegende Absorbergrenze darstellt. Dampfblasen können bei einem Störfall auch in Form von lokal begrenztem Kühlmittelsieden auftreten. In dieser Arbeit werden der Fall eines eingetauchten Regelstabes und Void (bzw. Moderator mit geringer Dichte) um einen Brennstab als Modell einer Dampfblase betrachtet.

Im zweiten Teil des Vorhabens wurden mit den drei Programmen HELIOS [51], MCNP [7] und TransRay Anordnungen von Brennelementzellen mit quadratischem Querschnitt berechnet, und zwar das Babcock und Wilcox UO<sub>2</sub> Kritikalitäts-Benchmark [45] und Brennelementzellen eines Druckwasser-Referenzreaktors. Für diesen Reaktor wurden folgende 3D-Probleme mit den Programmen HELIOS, MCNP und TransRay untersucht [5]: Ein teilweise eingetauchter Regelstab und Void (bzw. Moderator mit geringer Dichte) um einen Brennstab als Modell für eine Dampfblase im Moderatargebiet. Die TransRay- und MCNP-Ergebnisse der 3D-Rechnungen wurden mit den Werten verglichen, die sich aus üblichen Näherungen ergaben. Aus diesem Vergleich wurde dann für die betrachteten 3D-Fälle die Notwendigkeit einer dreidimensionalen Datenaufbereitung effektiver Zweigruppenwirkungsquerschnitte bewertet.

## 2 Theorie

Zur Beschreibung des Neutronenfeldes in den zu untersuchenden Anordnungen von Brennelementzellen wird die Transporttheorie angewendet. Die fundamentale Gleichung, die den Neutronentransport beschreibt, ist die sogenannte Neutronentransportgleichung, die vom Typ der Boltzmann-Gleichung ist. Ziel ist es, diese Gleichung zu lösen mit dem Neutronenfluss als gesuchter Funktion in den unabhängigen Variablen Ort, Bewegungsrichtung, Energie und Zeit.

In Abschnitt 2.1 wird diese Gleichung beschrieben. Die Energieabhängigkeit des Neutronenflusses wird in Form von Energiegruppen behandelt. Danach wird die Eigenwertform der Neutronentransportgleichung betrachtet, die bei der Kritikalitätsrechnung im Programm TransRay verwendet wird.

In Abschnitt 2.2 wird aus der Transportgleichung eine integrale Transportgleichung hergeleitet, die anschließend über alle Bewegungsrichtungen integriert wird. Das Resultat ist eine integrale Transportgleichung für den über alle Bewegungsrichtungen integrierten Fluss. Unter Verwendung der Flat-Source- und Flat-Current-Approximation wird diese Gleichung mittels der Stoßwahrscheinlichkeitsmethode durch ein lineares Gleichungssystem beschrieben.

Die Koeffizienten des linearen Gleichungssystems sind die Stoßwahrscheinlichkeiten, deren Berechnung mit der deterministischen Ray-Tracing-Methode im Zwei- und Dreidimensionalen in Abschnitt 2.3 dargelegt wird. Dabei wird zusätzlich der Fall berücksichtigt, dass Voidgebiete in den Brennelementzellen vorhanden sein können. Anschließend wird das Gleichungssystem gelöst für den Fall einer Zelle in einem unendlich ausgedehnten Gitter solcher Zellen und für den Fall der Kopplung mehrerer Zellen nach der Interface-Current-Methode.

In Abschnitt 2.4 wird die inverse Potenzmethode dargestellt, welche in TransRay als äußere Iteration verwendet wird, um den Multiplikationsfaktor und die Neutronengruppenflüsse, d. h. den größten Eigenwert und den zugehörigen Eigenvektor der Eigenwertgleichung, zu berechnen.

Zum Schluss werden in Abschnitt 2.5 die Mittelungsvorschriften für die effektiven Wirkungsquerschnitte formuliert. Diese gemittelten Neutronenwirkungsquerschnitte werden aus den berechneten Neutronengruppenflüssen und den makroskopischen Vielgruppenquerschnitten, die Eingangsdaten des Programms TransRay sind, berechnet. Wird diese Mittelung bei gleichbleibenden Randbedingungen in mehreren Schritten ausgeführt, so garantiert die Mittelungsvorschrift, dass die Neutronen-Reaktionsraten innerhalb der Volumina und E-

nergiegruppen, über die in einem Berechnungsschritt gemittelt wurde, im folgenden Berechnungsschritt erhalten bleiben.

Die Notation in Kapitel 2 ist stark angelehnt an Lewis [25].

## 2.1 Die Transportgleichung zur Beschreibung des Neutronenflusses

### 2.1.1 Die Transportgleichung

Es wird nun die Neutronentransportgleichung einschließlich der in ihr auftretenden Terme beschrieben: Im Vergleich zur Diffusionsgleichung ist die Transportgleichung eine verbesserte Beschreibung der Neutronenbilanz. Die zentrale Größe, die das Neutronenfeld beschreibt, ist der Neutronenfluss

$$\Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) = v \cdot n(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t), \quad (1)$$

wobei  $v$  der Mittelwert der Beträge der Neutronengeschwindigkeiten ist und  $n(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t)$  die Dichte der Neutronenanzahl. Die Größe  $n(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) dV d\Omega dE$  gibt die Anzahl der Neutronen an im Volumenelement  $dV$  um den Ort  $\vec{r}$ , deren Bewegungsrichtungen im Kegel  $d\Omega$  um den Einheitsvektor  $\vec{\Omega}$  liegen und die eine Energie im Energieintervall  $dE$  bei  $E$  haben zur Zeit  $t$ . Die zeitlich abhängige Neutronenbilanz innerhalb des Elements  $dV d\Omega dE$  lautet demnach nach Gleichung (1)

$$\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) dV d\Omega dE = \text{Gewinne} - \text{Verluste}. \quad (2)$$

Neutronenverluste entstehen erstens dadurch, dass Neutronen aus dem Volumenelement  $dV$  entweichen. Dies wird beschrieben mit dem Term  $\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) dV d\Omega dE$ . Zweitens gehen Neutronen verloren durch Stöße. Dies wird beschrieben mit dem Term  $\sigma(\vec{r}, E) \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) dV d\Omega dE$ .  $\sigma$  ist hierbei der totale makroskopische Wirkungsquerschnitt. Neutronengewinne ergeben sich aus den in  $dV$  gestreuten Neutronen, die eine beliebige Primärenergie  $E'$  und eine beliebige Bewegungsrichtung  $\vec{\Omega}'$  haben und nach dem Stoß im Energieintervall  $dE$  und Richtungsintervall  $d\Omega$  liegen. Weitere Gewinne resultieren aus den Spaltneutronen und aus möglicherweise vorhandenen externen Neutronenquellen. Der Streuanteil

$$q_s(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) dV d\Omega dE = \int_0^{\infty} dE' \int d\Omega' \sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E', t) dV d\Omega dE \quad (3)$$

ist proportional dem differentiellen Streuquerschnitt  $\sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega})$ . Bezüglich der Bewegungsrichtungen hängt dieser Querschnitt nur vom Produkt  $\vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}$  ab, d. h.  $\sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \equiv \sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega})$ .

Der Einheitsvektor  $\vec{\Omega}$  kann beschrieben werden durch den Azimutalwinkel  $\omega$  und den Polarwinkel  $\theta$  (siehe auch Abbildung 2, Seite 48). Das Raumwinkelement erhält die Form  $d\Omega = d\omega d\theta \sin\theta$  und Integration über alle Raumwinkel liefert  $\int d\Omega = \int d\omega \int d\theta \sin\theta = 4\pi$ . Analog zum Streuanteil sei der Spaltneutronenanteil im Element  $dV d\Omega dE$  gegeben durch  $q_f(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) dV d\Omega dE$ . Die Bewegungsrichtung der Spaltneutronen ist nahezu isotrop verteilt. Bei Annahme dieser isotropen Verteilung der Spaltneutronen entfällt also auf das Raumwinkelement  $d\Omega$  nach der Spaltung der Anteil  $d\Omega/4\pi$ . Der Spaltneutronenanteil in  $dV d\Omega dE$  ist demnach gegeben durch  $\frac{1}{4\pi} q_f(\vec{r}, E, t) dV d\Omega dE$ . Er ist proportional  $v\sigma_f(\vec{r}, E')$ , wobei  $\sigma_f(\vec{r}, E')$  der Spaltquerschnitt und  $v(E')$  die mittlere Anzahl an Spaltneutronen ist, die bei der Spaltung durch ein Inzidenzneutron mit der Energie  $E'$  entstehen. Wenn das Spaltspektrum  $\chi(E, \vec{r})$  als unabhängig von der Neutroneninziidenzenergie  $E'$  betrachtet wird, ist der Anteil an Spaltneutronen gegeben durch

$$\frac{1}{4\pi} q_f(\vec{r}, E, t) dV d\Omega dE = \frac{1}{4\pi} \chi(E, \vec{r}) \int_0^\infty dE' v\sigma_f(\vec{r}, E') \Phi(\vec{r}, E', t) dV d\Omega dE, \quad (4)$$

wobei  $q_f(\vec{r}, E, t) dV dE$  die Zahl aller in das Element  $dV dE$  emittierten Spaltneutronen ist und  $\Phi(\vec{r}, E, t) = \int d\Omega \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t)$ . Wird nun noch die Quelledichte  $q_{ex}(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t)$  der externen Quellen betrachtet, so setzt sich die gesamte Quelledichte aus den drei Beiträgen zusammen,  $q = q_s + \frac{1}{4\pi} q_f + q_{ex}$ . Die allgemeine Form der Transportgleichung mit dem Neutronenfluss  $\Psi$  als gesuchter Funktion lautet demnach

$$\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) + \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) + \sigma(\vec{r}, E) \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) = q(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) \quad (5)$$

Sie ist vom Typ der Boltzmann-Gleichung. Da in Kapitel 4 und 5 nur stationäre Rechnungen gemacht werden, ist der Ausgangspunkt die zeitunabhängige Transportgleichung:

$$[\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} + \sigma(\vec{r}, E)] \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = q(\vec{r}, \vec{\Omega}, E). \quad (6)$$



### 2.1.2 Die Behandlung der Energieabhängigkeit des Neutronenflusses mit der Energiegruppennäherung

Zur Vereinfachung der Schreibweise wird in dieser Arbeit ab jetzt der Begriff Quelldichte nicht mehr verwendet und stattdessen nur noch von der Quelle gesprochen.

In der Einleitung (Seite 8) wurde die Kette der klassischen Neutronentransportberechnung des gesamten Reaktorkerns beschrieben. Diese Kette wurde in drei Stufen eingeteilt. Zusammengefasst gilt für diese drei Stufen, falls ausschließlich Gruppendaten verwendet werden, dass in Stufe 1 die Vielgruppendaten für alle Energiegruppen erzeugt werden und in den Stufen 2 und 3 die Neutronentransportgleichung mit Gruppendaten stufenweise gelöst wird.

Mit dem im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Code TransRay werden Zellrechnungen ausgeführt, d. h. Rechnungen der Stufe 2. Dabei wird in einer Zelle, welche eine Anordnung von Brennelementzellen ist, der Neutronentransport berechnet. Die Energieabhängigkeit des Neutronenflusses wird mit der Energiegruppennäherung behandelt. Bei dieser Näherung wird der betrachtete Energiebereich in  $n$  Intervalle ( $n = \text{Anzahl der Energiegruppen}$ ) unterteilt, wobei für die Energiegrenzen gilt  $E_n = 0$ ,  $E_g < E_{g-1}$  und  $E_0$  sei groß genug, so dass die Anzahl der Neutronen mit höheren Energien vernachlässigbar ist. Das Ergebnis einer Zellrechnung mit TransRay sind die Neutronengruppenflüsse und der Multiplikationsfaktor  $k_{\infty}$ . Der Gruppenfluss (Gleichung (33)) wird in diesem Abschnitt erklärt, der Multiplikationsfaktor in Abschnitt 2.1.4.

Um in Kapitel 2 das Lösungsverfahren, mit dem in TransRay die Gruppenflüsse berechnet werden, mathematisch zu beschreiben, wird nun die Transportgleichung für den  $g$ -ten winkelabhängigen Gruppenfluss

$$\Psi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int_g dE \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \quad (7)$$

formuliert ( $g = 1, \dots, n$ ), wobei zur Abkürzung die Schreibweise

$$\int_g dE = \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \quad (8)$$

verwendet wird. Integration der Transportgleichung (6) von  $E_g$  bis  $E_{g-1}$  liefert

$$\begin{aligned}
\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \int_g dE \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) + \int_g dE \sigma(\vec{r}, E) \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) &= \int_g dE q(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \\
&= \int_g dE (q_s(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) + \frac{1}{4\pi} q_f(\vec{r}, E) + q_{ex}(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)) \\
&= \sum_{g'=1}^n \int_g dE \int_{g'} dE' \int d\Omega' \sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') \\
&\quad + \frac{1}{4\pi} \sum_{g'=1}^n \int_g dE \chi(E, \vec{r}) \int_{g'} dE' v \sigma_f(\vec{r}, E') \Phi(\vec{r}, E') + \int_g dE q_{ex}(\vec{r}, \vec{\Omega}, E).
\end{aligned} \tag{9}$$

Ziel ist es, Gleichung (9) in der üblichen Form mit den makroskopischen Vielgruppenwirkungsquerschnitten und den winkelabhängigen Gruppenflüssen aufzuschreiben. Diese Querschnitte werden von TransRay als Eingangsdaten für die Zellrechnung benötigt. Die mathematische Formulierung dieser Querschnitte, die in der Stufe 1 erzeugt werden, wird nun beschrieben. Dabei wird die Annahme gemacht, dass unter bestimmten Voraussetzungen die Energieabhängigkeit des Neutronenflusses näherungsweise separierbar ist:

In der Zelle sind die Materialien (Brennstoff, Hüllen, Wasser) heterogen verteilt und die Querschnitte der Nuklide variieren im allgemeinen mit der Energie innerhalb der Gruppen. Aus der Forderung, dass mit dem im Ort und in der Energie diskretisierten Rechenmodell (Unterteilung der Zelle in Volumina  $v_i$  und der Energie in die Gruppen  $g$ ) möglichst gut das Verhalten des Neutronenfeldes in der Zelle beschrieben werden soll, kann abgeleitet werden, dass die makroskopischen Vielgruppenwirkungsquerschnitte durch geeignete Mittelungen über die Volumina  $v_i$  und über die Energiegruppen  $g$  berechnet werden müssen. Die Mittelungen werden dabei so formuliert, dass jeweils bestimmte Größen erhalten bleiben. Das heißt, die berechneten Gruppenquerschnitte sind dazu geeignet, in der nachfolgenden Gruppentransportrechnung diese Größen vorherzusagen. So bleibt z. B. bei der Mittelungsvorschrift von Parker [39] die Zeitabfallskonstante und bei der Mittelungsvorschrift von Marchuck [29] der Multiplikationsfaktor erhalten.

Ziel von Katsuragi et al. [20] ist es, die Gruppenquerschnitte so zu berechnen, dass sie geeignet sind, möglichst viele relevante Größen vorherzusagen. Sie betrachten die zeitabhängige Transportgleichung und die dazu adjungierte Gleichung mit der Responsfunktion  $\epsilon$  eines Detektors. Der Energiebereich wird in Gruppen eingeteilt, in denen u. a. der totale Wirkungsquerschnitt  $\bar{\sigma}$ , die Streuquerschnitte  $\bar{\sigma}_s$  und die Responsfunktion  $\bar{\epsilon}$  konstant sind. Für dieses modellierte System mit Konstanten innerhalb der Energiegruppen werden entsprechend die zeitabhängige Transportgleichung und die dazu adjungierte Gleichung mit der Responsfunktion  $\bar{\epsilon}$  formuliert. Für die Mittelungsvorschrift wird gefordert, dass das Produkt aus der Res-

ponsfunktion mit dem Neutronenfluss, welches über den gesamten Bereich von Zeit, Ort, Energie und Bewegungsrichtung der Neutronen integriert wird, erhalten bleibt. Ist  $\Psi$  der Neutronenfluss des eigentlichen Systems und  $\bar{\Psi}$  der des modellierten System, so lautet demnach die Forderung

$$\iiint \varepsilon \cdot \Psi \, dt dV dE d\Omega = \iiint \bar{\varepsilon} \cdot \bar{\Psi} \, dt dV dE d\Omega . \quad (10)$$

Das heißt, die gesamte Zählrate eines Detektors bleibt erhalten.

Aus der Forderung (10) leiten Katsuragi et al. her, dass

$$\int dE [ (\bar{\sigma} - \sigma) \Psi - \int_0^{\infty} dE' \int d\Omega' (\bar{\sigma}_s - \sigma_s) \Psi ] = 0 \quad (11)$$

ist. Damit gilt nach Integration von (11) über Ort und Bewegungsrichtung der Neutronen

$$\iiint dr dE d\Omega [ (\bar{\sigma} - \sigma) \Psi - \int_0^{\infty} dE' \int d\Omega' (\bar{\sigma}_s - \sigma_s) \Psi ] = 0 . \quad (12)$$

Wird nun der betrachtete Energiebereich in die Energiegruppen  $g$  und das Volumen  $V$  in die Teilvolumina  $v_i$  unterteilt, in denen die Gruppenquerschnitte als konstant angesehen werden, so folgt

$$\begin{aligned} \sum_i \sum_g \iiint_{v_i, E_g} dr dE d\Omega [ (\bar{\sigma}_{i,g} - \sigma(\vec{r}, E)) \Psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \\ - \sum_{g'} \int_{E_{g'}} dE' \int d\Omega' (\bar{\sigma}_{i,g' \rightarrow g}(\vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) - \sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega})) \Psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') ] = 0 . \end{aligned} \quad (13)$$

Damit wird als Mittelung für den totalen Querschnitt gewählt

$$\bar{\sigma}_{i,g} = \frac{\int dr \int dE \sigma(\vec{r}, E) \int d\Omega \Psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})}{\int_{v_i} \int_g dr \int dE \int d\Omega \Psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})} . \quad (14)$$

Im Programm TransRay wird isotrope Streuung angenommen. Unter dieser vereinfachenden Annahme ergibt sich als Mittelungsvorschrift für die Streuquerschnitte

$$\bar{\sigma}_{i,g' \rightarrow g} = \frac{\int dr \int dE \int_{g'} dE' \sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E) \int d\Omega' \Psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}')}{\Delta E_g \int_{v_i} \int_{g'} dr \int dE' \int d\Omega' \Psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}')} . \quad (15)$$

Die Produktionswirkungsquerschnitte werden von Katsuragi et al. nicht explizit aufgeschrieben, sondern sie stehen implizit in der Transportgleichung im Quellterm  $S$  bzw. in der Trans-

portgleichung des modellierten Systems im Quellterm  $\bar{S}$ , der ebenfalls in jeder Energiegruppe konstant ist. Analog zur Herleitung von (14) und (15) lässt sich die Mittelungsvorschrift für die Produktionswirkungsquerschnitte herleiten:

$$\bar{\chi}_{i,g} \cdot \overline{v\sigma_{f,i,g'}} = (\bar{\chi} \overline{v\sigma_f})_{i,gg'} = \frac{\int_{v_i} \int_g d\mathbf{r} \int dE \chi(\bar{\mathbf{r}}, E) \int_{g'} dE' v\sigma_f(\bar{\mathbf{r}}, E') \int d\Omega' \Psi(\bar{\mathbf{r}}, E', \bar{\Omega}')}{\Delta E_g \int_{v_i} \int_{g'} d\mathbf{r} \int dE' \int d\Omega' \Psi(\bar{\mathbf{r}}, E', \bar{\Omega}')} \quad (16)$$

Im Programm TransRay wird Gleichung (9) zugrunde gelegt, d. h., für alle Energiegruppen  $g$  wird die Transportgleichung betrachtet, die über die Gruppe  $g$  integriert wird. Mit den nur über die Energie gemittelten Gruppenquerschnitten entspricht dies Gleichung (27). Genau genommen wird in TransRay die Eigenwertgleichung behandelt, die über die  $g$ -te Energiegruppe integriert wird

$$[\bar{\Omega} \cdot \bar{\nabla} + \sigma_g(\bar{\mathbf{r}})] \Psi_g(\bar{\mathbf{r}}, \bar{\Omega}) = \sum_{g'=1}^n \sigma_{gg'}(\bar{\mathbf{r}}) \int d\Omega' \Psi_{g'}(\bar{\mathbf{r}}, \bar{\Omega}') + \frac{1}{4\pi k} \chi_g(\bar{\mathbf{r}}) \sum_{g'=1}^n v\sigma_{fg'}(\bar{\mathbf{r}}) \Phi_{g'}(\bar{\mathbf{r}}). \quad (17)$$

Die Notation in (17) ist analog zur Notation in der Gruppentransportgleichung (27). Integration von (17) über das Volumen  $v_i$ , in dem die Gruppenquerschnitte konstant sind, liefert

$$\int_{v_i} \bar{\Omega} \cdot \bar{\nabla} \Psi_g(\bar{\mathbf{r}}, \bar{\Omega}) dV + \sigma_{i,g} \Psi_{i,g}(\bar{\Omega}) = \sum_{g'=1}^n \sigma_{i,gg'} \Phi_{i,g'} + \frac{1}{4\pi k} \chi_{i,g} \sum_{g'=1}^n v\sigma_{fi,g'} \Phi_{i,g'}. \quad (18)$$

Im Gegensatz zur Gruppentransportgleichung (27) betrachten Katsuragi et al. die Transportgleichung (5), die nicht über die Energiegruppe  $g$  integriert wurde. Es wird nun anstelle dieser Transportgleichung die entsprechende Eigenwertgleichung für das modellierte System betrachtet, bei dem die Gruppenwirkungsquerschnitte in jeder Energiegruppe konstant sind. Integration dieser Eigenwertgleichung über die  $g$ -te Energiegruppe und über das Volumen  $v_i$  liefert

$$\int_{v_i} \bar{\Omega} \cdot \bar{\nabla} \Psi_g(\bar{\mathbf{r}}, \bar{\Omega}) dV + \bar{\sigma}_{i,g} \Psi_{i,g}(\bar{\Omega}) = \sum_{g'=1}^n \Delta E_g \bar{\sigma}_{i,gg'} \Phi_{i,g'} + \frac{1}{4\pi k} \Delta E_g \bar{\chi}_{i,g} \sum_{g'=1}^n \overline{v\sigma_{fi,g'}} \Phi_{i,g'}. \quad (19)$$

Koeffizientenvergleich von (18) und (19) liefert die Mittelungsvorschriften für die Gruppenquerschnitte der Gruppengleichungen. Mit (14) lautet demnach die Mittelungsvorschrift für die totalen Wirkungsquerschnitte

$$\sigma_{v_i,g} = \frac{\int_{v_i} \int_g dV \int dE \sigma(\bar{\mathbf{r}}, E) \int d\Omega \Psi(\bar{\mathbf{r}}, E, \bar{\Omega})}{\int_{v_i} \int_g dV \int dE \int d\Omega \Psi(\bar{\mathbf{r}}, E, \bar{\Omega})}. \quad (20)$$

Nach (15), d. h. unter der Annahme isotroper Streuung, ist die Mittelungsvorschrift für die Streuquerschnitte

$$\sigma_{v_i, g' \rightarrow g} = \frac{\int dV \int dE \int dE' \sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E) \int d\Omega' \Psi(\vec{r}, E', \Omega')}{\int dV \int_{v_i} dE' \int_{g'} d\Omega' \Psi(\vec{r}, E', \Omega')} \quad (21)$$

und nach (16) ergibt sich für die Produktionswirkungsquerschnitte

$$\chi_{v_i, g} \cdot v\sigma_{f, v_i, g'} = (\chi v\sigma_f)_{v_i, gg'} = \frac{\int dV \int dE \chi(\vec{r}, E) \int dE' v\sigma_f(\vec{r}, E') \int d\Omega' \Psi(\vec{r}, E', \Omega')}{\int dV \int_{v_i} dE' \int_{g'} d\Omega' \Psi(\vec{r}, E', \Omega')} \quad (22)$$

Die Vorschriften (20), (21) und (22) werden auch in der zweiten Stufe im Programm TransRay angewandt. Das Programm HELIOS verwendet standardmäßig in analoger Weise die Vorschrift (20) für die totalen Wirkungsquerschnitte und die Vorschrift (21) für die Streuquerschnitte. Für die Produktionswirkungsquerschnitte  $v\sigma_{f, v_i, g}$  verwendet HELIOS die Vorschrift (20). Mittels dieser Vorschriften werden aus den makroskopischen Vielgruppenwirkungsquerschnitten und den mit TransRay bzw. HELIOS berechneten Gruppenflüssen Weniggruppenquerschnitte für die Zelle berechnet. In Abschnitt 2.5 werden diese Querschnitte berechnet, indem über die gesamte Zelle  $V$  und über wenige Gruppen  $G$  gemittelt wird. In Kapitel 4 und 5 werden zwei Gruppen betrachtet, d. h. eine schnelle Energiegruppe  $G = 1$  und eine thermische  $G = 2$ . Für das Spaltspektrum wird angenommen, dass es ortsunabhängig ist, d. h.  $\chi(\vec{r}, E) \equiv \chi(E)$ . Die Grenze zwischen der schnellen und der thermischen Gruppe wird so gewählt, dass  $\int_{G=1} \chi(E) dE = 1$  und  $\int_{G=2} \chi(E) dE = 0$  ist. Damit stimmt für die Produktionswirkungsquerschnitte  $v\sigma_{f, v_i, G}$  für  $G = 1$  und  $G = 2$  die Vorschrift (20), die HELIOS verwendet, mit der Vorschrift (22), die TransRay verwendet, überein. In Kapitel 4 und 5 werden zusätzlich die gemittelten Absorptionsquerschnitte betrachtet, für die TransRay und HELIOS die Vorschrift (20) anwenden. Damit stimmen bei beiden Programmen die Mittelungsvorschriften für alle Zweigruppenwirkungsquerschnitte überein, deren Ergebnisse in Kapitel 4 und 5 verglichen werden.

Der exakte, transporttheoretische Neutronenfluss  $\Psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$  des nichtdiskretisierten Reaktorkerns, und damit auch der Zelle, ist nicht bekannt. Da der makroskopische Querschnitt eines Nuklids separiert werden kann, d. h., dass  $\sigma^{(j)}(\vec{r}, E) = \rho^{(j)}(\vec{r}) \cdot \tilde{\sigma}^{(j)}(E)$  ist, wobei

$\rho^{(j)}$  die Kerndichte und  $\tilde{\sigma}^{(j)}$  der mikroskopische Querschnitt des Nuklids  $j$  ist, und  $\sigma(\vec{r}, E) = \sum_j \sigma^{(j)}(\vec{r}, E)$ , kann z. B. für den totalen Wirkungsquerschnitt die Mittelungsvorschrift (20) umgeschrieben werden:

$$\sigma_{v_i, g} = \sum_j \sigma_{v_i, g}^{(j)} = \sum_j \frac{v_i}{V_i} \frac{\int dV \rho^{(j)}(\vec{r}) \int dE \tilde{\sigma}^{(j)}(E) \int d\Omega \Psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})}{\int dV \int dE \int d\Omega \Psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})}. \quad (23)$$

In Volumina, in denen die Materialien heterogen angeordnet sind, ist i. a. die Orts- und Energieabhängigkeit des Flusses nicht separierbar, d. h., an verschiedenen Ortspunkten liegt ein anderes Neutronenspektrum vor. Es wird nun angenommen, die Energieabhängigkeit des Flusses sei separierbar, d. h.  $\Psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = f(\vec{r}, \vec{\Omega}) \cdot g(E)$ . Nach der Definition des  $g$ -ten winkelabhängigen Gruppenflusses in Gleichung (7) gilt somit für den winkelabhängigen Fluss

$$\Psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \Psi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) \cdot \frac{g(E)}{\int_g g(E) dE} \quad \text{für } E \in E_g. \quad (24)$$

Mit  $\varphi(E) = \frac{g(E)}{\int_g g(E) dE}$  für  $E \in E_g$  gilt dann für die  $\sigma_{v_i, g}^{(j)}$  in (23)

$$\sigma_{v_i, g}^{(j)} = \tilde{\sigma}_g^{(j)} \cdot \frac{v_i}{V_i} \frac{\int dV \rho^{(j)}(\vec{r}) \int d\Omega \Psi_g(\vec{r}, \vec{\Omega})}{\int dV \int d\Omega \Psi_g(\vec{r}, \vec{\Omega})} \quad \text{mit} \quad \tilde{\sigma}_g^{(j)} = \int_g dE \tilde{\sigma}^{(j)}(E) \varphi(E). \quad (25)$$

$\tilde{\sigma}_g^{(j)}$  ist der über die Energiegruppe  $g$  mit  $\varphi(E)$  gemittelte mikroskopische Wirkungsquerschnitt des Nuklids  $j$ . Mit weiteren Näherungsannahmen über  $\varphi(E)$  werden in der ersten Stufe solche Gruppenquerschnitte z. B. von dem Programm NJOY [27] aus Kerndatenbibliotheken wie z. B. ENDF/B-VI, die die Energieabhängigkeit der mikroskopischen Wirkungsquerschnitte angeben, berechnet.

In einem Volumen, in dem die Nuklide homogen gemischt sind, liegt im zentralen Bereich, der ausreichend weit von den Rändern entfernt ist, sogar ein orts- und winkelunabhängiger Fluss (auch als asymptotischer Fluss bezeichnet) vor,  $\Psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \propto g(E)$ , d. h.,  $\Psi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \text{konstant}$  und es ist einfach

$$\sigma_{v_i, g}^{(j)} = \tilde{\sigma}_g^{(j)} \cdot \frac{1}{V_i} \int_{V_i} \rho^{(j)}(\vec{r}) dV. \quad (26)$$

Der zweite Faktor in (26) ist eine effektive Kerndichte, die sich in diesem Naherungsfall dadurch ergibt, dass das Nuklid  $j$  gleichmaig uber das gesamte Volumen verteilt wird.

In den heterogen angeordneten Zellen liegt kein orts- und winkelunabhangiges Neutronenspektrum vor und die Mittlungen mussen entsprechend Gleichung (23) ausgefuhrt werden. Wird die Diskretisierung der Zelle in Raum und Energie so fein gemacht, dass in einem Raum-Energie-Element  $(v_i, g)$  die Separierbarkeit des Neutronenflusses, d. h. Gleichung (24), „ausreichend gut“ erfullt ist, so konnen die fur die Feinteilung gemittelten Querschnitte des Nuklids  $j$  nach der Gleichung (25) berechnet werden.

In fortgeschrittenen Datenaufbereitungssystemen wird die Feindiskretisierung bezuglich der Energievariablen selbst in Teilschritten ausgefuhrt. Dabei ist die Tendenz, dass mit hoherer Energiediskretisierung einfachere Geometriemodelle bis hin zum einfachen Modell eines im Wasser befindlichen Brennstabes verwendet werden. Mit abnehmender Energiediskretisierung werden die Geometriemodelle zunehmend komplizierter, bis hin zu einer nahezu exakten Nachbildung der Zelle. Dabei werden in der Berechnung in einer bestimmten Energiediskretisierung die zuvor in der hoheren Diskretisierungsstufe berechneten gemittelten Wirkungsquerschnitte verwendet.

Unter der naherungsweisen Annahme, dass der Neutronenfluss nach Gleichung (24) separiert werden kann, folgt nach Gleichung (9) die Transportgleichung fur den  $g$ -ten winkelabhangigen Gruppenfluss

$$\begin{aligned} [\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} + \sigma_g(\vec{r})] \Psi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \sum_{g'=1}^n \int d\Omega' \sigma_{gg'}(\vec{r}, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) \Psi_{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}') + \\ \frac{1}{4\pi} \chi_g(\vec{r}) \sum_{g'=1}^n v \sigma_{fg'}(\vec{r}) \Phi_{g'}(\vec{r}) + q_g^e(\vec{r}, \vec{\Omega}) \end{aligned} \quad (27)$$

mit den Gruppenwirkungsquerschnitten

$$\sigma_g(\vec{r}) = \int_g dE \sigma(\vec{r}, E) \varphi(E), \quad (28)$$

$$\sigma_{gg'}(\vec{r}, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) = \int_g dE \int_{g'} dE' \sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) \varphi(E'), \quad (29)$$

$$v \sigma_{fg'}(\vec{r}) = \int_{g'} dE' v \sigma_f(\vec{r}, E') \varphi(E') \quad (30)$$

und den Definitionen

$$\chi_g(\vec{r}) = \int_g dE \chi(E, \vec{r}) \quad \text{und} \quad (31)$$

$$q_g^e(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int_g dE q_{ex}(\vec{r}, \vec{\Omega}, E). \quad (32)$$

$\Phi_g(\vec{r})$  in Gleichung (27) ist der Gruppenfluss. Für die Gruppenflüsse  $\Phi_g(\vec{r})$  gilt:

$$\Phi_g(\vec{r}) = \int dE \Phi(\vec{r}, E) = \int dE \int d\Omega \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = \int d\Omega \int dE \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = \int d\Omega \Psi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}). \quad (33)$$

Wird von den Querschnitten  $\sigma_g$ ,  $\sigma_{gg'}$  und  $v\sigma_{fg}$  exemplarisch der totale makroskopische Gruppenwirkungsquerschnitt  $\sigma_g(\vec{r})$  aus Gleichung (28) betrachtet, so schreibt sich dieser Querschnitt mit  $\sigma(\vec{r}, E) = \sum_j \sigma^{(j)}(\vec{r}, E) = \sum_j \rho^{(j)}(\vec{r}) \cdot \tilde{\sigma}^{(j)}(E)$  in der Form

$$\sigma_g(\vec{r}) = \sum_j \rho^{(j)}(\vec{r}) \int dE \tilde{\sigma}^{(j)}(E) \varphi(E) = \sum_j \rho^{(j)}(\vec{r}) \cdot \tilde{\sigma}_g^{(j)} \quad (34)$$

mit den in Gleichung (25) definierten mikroskopischen Gruppenquerschnitten  $\tilde{\sigma}_g^{(j)}$ , die in der ersten Stufe berechnet werden. In Gleichung (25) steht als zweiter Faktor die Kerndichte  $\rho^{(j)}$  des Nuklids  $j$ , die mit dem winkelabhängigen Gruppenfluss gewichtet wird und über das Volumen  $v_j$  und alle Bewegungsrichtungen gemittelt wird. In Gleichung (34) steht hingegen unter dem Summenzeichen nur die Kerndichte  $\rho^{(j)}$ , da die Transportgleichung (6) bisher lediglich über die Energiegruppen  $g$  integriert wurde.

Gleichung (27) liefert insgesamt für  $g = 1, 2, \dots, n$   $n$  Gleichungen. Sie kann umgeschrieben werden in die Form

$$\left[ \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} + \sigma(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int d\Omega' \sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}') + s(\vec{r}, \vec{\Omega}), \quad (35)$$

wobei der Gruppenindex  $g$  entfernt wurde, da er nur als ein Parameter erscheint.

Die  $g$ -te Gruppenquelle ist

$$s(\vec{r}, \vec{\Omega}) = s_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \sum_{g' \neq g} \int d\Omega' \sigma_{gg'}(\vec{r}, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) \Psi_{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}') + \frac{1}{4\pi} \chi_g(\vec{r}) \sum_{g'} v \sigma_{fg'}(\vec{r}) \Phi_{g'}(\vec{r}) + q_g^e(\vec{r}, \vec{\Omega}), \quad (36)$$

und

$$\sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) = \sigma_{gg}(\vec{r}, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}). \quad (37)$$

### 2.1.3 Neutronentransportprobleme mit gegebener Quelle und ohne Spaltquelle

Im Programm TransRay wird die stationäre Neutronenflussverteilung einer Anordnung mit spaltbarem Material mittels der Eigenwertform der Transportgleichung berechnet (siehe Abschnitt 2.4). Dabei wird die Eigenwertgleichung mit der inversen Potenzmethode iterativ ge-



löst. Zur Veranschaulichung wird nun die Vorgehensweise innerhalb eines Iterationsschrittes kurz und rein formal beschrieben:

Jeder Iterationsschritt entspricht der Lösung der Transportgleichung mit einer gegebenen Quelle und ohne Spaltquelle. In diesem Fall nehmen die Gleichungen (35) für die Gruppen  $g = 1, \dots, n$  folgende Form an:

$$\left[ \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} + \sigma_g(\vec{r}) \right] \Psi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) - \sum_{g'=1}^n \int d\Omega' \sigma_{gg'}(\vec{r}, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) \Psi_{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}') = q_g^e(\vec{r}, \vec{\Omega}). \quad (38)$$

Im Programm TransRay wird zur Vereinfachung angenommen, dass isotrope Streuung und isotrope Quellen vorliegen. Mit diesen Annahmen lautet Gleichung (38)

$$\left[ \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} + \sigma_g(\vec{r}) \right] \Psi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) - \sum_{g'=1}^n \sigma_{gg'}(\vec{r}) \Phi_{g'}(\vec{r}) = q_g^e(\vec{r}). \quad (39)$$

Es wird nun formal der Operator

$$H_g = \int d\Omega \left[ \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} + \sigma_g(\vec{r}) \right]^{-1} \quad (40)$$

definiert. Unter der Annahme, dass  $H_g$  ein linearer Operator ist (siehe auch Lewis [25]), schreibt sich Gleichung (39) wie folgt:

$$\Phi_g(\vec{r}) - \sum_{g'=1}^n H_g(\sigma_{gg'}(\vec{r}) \Phi_{g'}(\vec{r})) = H_g q_g^e(\vec{r}). \quad (41)$$

Mit

$$H_{gg'} = \delta_{gg'} - H_g \sigma_{gg'} \quad \text{und} \quad Q_g^e = H_g q_g^e \quad (42)$$

schreibt sich das Gleichungssystem (41) in der Form

$$\begin{bmatrix} H_{11} & \cdots & H_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{n1} & \cdots & H_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_1 \\ \vdots \\ \Phi_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q_1^e \\ \vdots \\ Q_n^e \end{bmatrix} \quad (43)$$

oder kompakter  $\mathbf{H} \vec{\Phi} = \vec{Q}^e. \quad (44)$

Falls keine Aufstreuung der Neutronen von Gruppen  $g'$  niedrigerer zu Gruppen  $g$  höherer Energie vorhanden ist, bzw. berücksichtigt wird, so ist  $H_{gg'} = 0$ , d. h.

$$H_{gg'} = 0 \quad \text{für} \quad g' > g. \quad (45)$$

In diesem Fall kann das Gleichungssystem sukzessive von der ersten bis zur letzten Energiegruppe gelöst werden:

$$\begin{aligned}
\Phi_1 &= H_{11}^{-1} Q_1^e, \\
\Phi_2 &= H_{22}^{-1} (Q_2^e - H_{21} \Phi_1), \\
&\vdots \\
\Phi_g &= H_{gg}^{-1} (Q_g^e - \sum_{g'=1}^{g-1} H_{gg'} \Phi_{g'}), \\
&\vdots \\
\Phi_n &= H_{nn}^{-1} (Q_n^e - \sum_{g'=1}^{n-1} H_{ng'} \Phi_{g'}).
\end{aligned} \tag{46}$$

Falls Aufstreuung behandelt wird, muss eine Nachiteration erfolgen. Dazu kann das Gauß-Seidel-Verfahren verwendet werden:

$$\Phi_g^{(k+1)} = H_{gg}^{-1} (Q_g^e - \sum_{g'=1}^{g-1} H_{gg'} \Phi_{g'}^{(k+1)} - \sum_{g'=g+1}^n H_{gg'} \Phi_{g'}^{(k)}). \tag{47}$$

Bei der in Abschnitt 2.4 angewendeten iterativen Lösung der Eigenwertgleichung wird die inverse Potenzmethode oft als äußere Iteration und alle Iterationen zur Lösung des Gleichungssystems (43) für jede Energiegruppe als die inneren Iterationen bezeichnet.

## 2.1.4 Kritikalitätsrechnungen

### 2.1.4.1 Die Eigenwertform der Transportgleichung

Physikalisch ist eine Anordnung mit spaltbarem Material kritisch, falls eine selbsterhaltende zeitunabhängige Kettenreaktion in Abwesenheit externer Neutronenquellen vorhanden ist. Es liegt dann eine stationäre Neutronenverteilung vor, in der die Rate der Neutronenproduktion gleich der Rate der absorbierten und aus der Anordnung entweichenden Neutronen ist. Falls mehr Neutronen produziert werden als verloren gehen, wird die Anordnung überkritisch genannt, im umgekehrten Fall unterkritisch. Es liegt dann keine stationäre Neutronenverteilung vor.

Mathematisch ist die Anordnung kritisch, falls eine zeitunabhängige nichtnegative Lösung zur Transportgleichung ohne externe Quellen

$$[\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} + \sigma(\vec{r}, E)] \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = q_s(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) + \frac{1}{4\pi} q_f(\vec{r}, E) \tag{48}$$

existiert mit geeigneten Randbedingungen.

Für Kritikalitätsrechnungen wird  $v$ , die mittlere Anzahl an Neutronen pro Spaltung, so eingestellt, dass eine zeitunabhängige Lösung obiger Gleichung existiert. Dazu wird  $v$  durch  $v/k$  ersetzt und es wird die Eigenwertform von (48) erhalten:

$$\left[ \vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} + \sigma(\vec{r}, E) \right] \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = q_s(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) + \frac{1}{4\pi} \frac{1}{k} q_r(\vec{r}, E). \quad (49)$$

In dieser Eigenwertgleichung ist  $k$  der Eigenwert. Die Lösung  $\Psi_k$  dieser Gleichung ist dann die zu  $k$  gehörige Eigenfunktion.

Aufgrund der physikalischen Definition der Kritikalität ist ersichtlich, dass jede Kettenreaktion kritisch gemacht werden kann, falls die Anzahl der Neutronen pro Spaltung zwischen Null und unendlich eingestellt werden kann. Folglich wird es einen größten Wert  $k_{\max}$  geben, für den eine nichtnegative Lösung existiert. Dieser größte Eigenwert wird bezeichnet als effektiver Multiplikationsfaktor  $k_{\text{eff}}$  bzw. für eine unendlich ausgedehnte Anordnung, wie z. B. bei Zellproblemen mit Reflexionsrandbedingungen, als Multiplikationsfaktor  $k_{\infty}$ . Würde nun  $\nu$ , die tatsächliche mittlere Anzahl an Neutronen pro Spaltung, auf  $\nu/k_{\max}$  eingestellt werden, so wäre das System im Gleichgewicht (kritisch). Mit diesem  $k_{\max}$  wird also das System „künstlich“ kritisch gemacht und die dazugehörige Lösung der Flüsse ist demnach die Lösung zu diesem kritisch gemachten System. Der Wert von  $k_{\max}$  gibt also an, ob die berechnete Anordnung mit spaltbarem Material kritisch, über- oder unterkritisch ist, und zwar gilt:

$$k_{\text{eff}} \text{ (bzw. } k_{\infty}) \begin{cases} > 1 & \text{überkritisch,} \\ = 1 & \text{kritisch,} \\ < 1 & \text{unterkritisch.} \end{cases} \quad (50)$$

#### 2.1.4.2 Lösung der Eigenwertform der Transportgleichung

Aus der Eigenwertform (49) der Transportgleichung werden in Abschnitt 2.4 der größte Eigenwert, d. h. der Multiplikationsfaktor  $k_{\infty}$  der Zelle, und der Eigenvektor, d. h. die zu  $k_{\infty}$  gehörigen Neutronengruppenflüsse, berechnet. In diesem Abschnitt wird nur kurz und formal der Lösungsweg skizziert.

Wird in (35) in der Gruppenquelle der Spaltterm  $\frac{1}{4\pi} \chi_g(\vec{r}) \sum_{g'} \nu \sigma_{fg'}(\vec{r}) \Phi_{g'}(\vec{r})$  berücksichtigt, so steht in (41) auf der rechten Seite der zusätzliche Term

$\frac{1}{4\pi} \sum_g H_g (\chi_g(\vec{r}) \nu \sigma_{fg'}(\vec{r}) \Phi_{g'}(\vec{r}))$ . Werden nun die Operatoren

$$F_{gg'} = \frac{1}{4\pi} H_g \chi_g(\vec{r}) \nu \sigma_{fg'}(\vec{r}) \quad (51)$$

definiert, so ergibt sich statt (44) die allgemeine Form

$$\mathbf{H} \vec{\Phi} = \mathbf{F} \vec{\Phi} + \vec{Q}^e. \quad (52)$$

Da in der Eigenwertform (49) der Transportgleichung keine externen Quellen erscheinen, gilt  $\bar{Q}^e = \bar{0}$ . Demnach lautet diese Eigenwertform mit dem Eigenwert  $k$

$$\mathbf{H} \bar{\Phi} = \frac{1}{k} \mathbf{F} \bar{\Phi} \quad \text{bzw.} \quad k \bar{\Phi} = \mathbf{H}^{-1} \mathbf{F} \bar{\Phi}. \quad (53)$$

In Abschnitt 2.4 werden nach der inversen Potenzmethode der größte Eigenwert  $k$  des Operators  $\mathbf{H}^{-1} \mathbf{F}$ , d. h. der Multiplikationsfaktor  $k_\infty$  der Zelle, und der dazugehörige Eigenvektor  $\bar{\Phi}(k_\infty)$  bestimmt.

## 2.2 Eine integrale Transportmethode zur Bestimmung des Neutronenflusses: Die Methode der Stoßwahrscheinlichkeiten

### 2.2.1 Die integrale Transportgleichung

Betrachtet wird nun die zeitunabhängige Transportgleichung (6) in der energiediskretisierten Form (35):

$$[\bar{\Omega} \cdot \bar{\nabla} + \sigma(\bar{r})] \Psi(\bar{r}, \bar{\Omega}) = q(\bar{r}, \bar{\Omega}) \quad (54)$$

$$\text{mit} \quad q(\bar{r}, \bar{\Omega}) = \int d\Omega' \sigma_s(\bar{r}, \bar{\Omega}' \cdot \bar{\Omega}) \Psi(\bar{r}, \bar{\Omega}') + s(\bar{r}, \bar{\Omega}).$$

Zum Zweck der Herleitung der integralen Transportgleichung wird in die Richtung  $-\bar{\Omega}$  zurückgeschaut, aus der die Neutronen kommen. Dazu wird der Ortspunkt  $\bar{r}' = \bar{r} - \lambda \bar{\Omega}$  betrachtet (siehe Abb. 1).

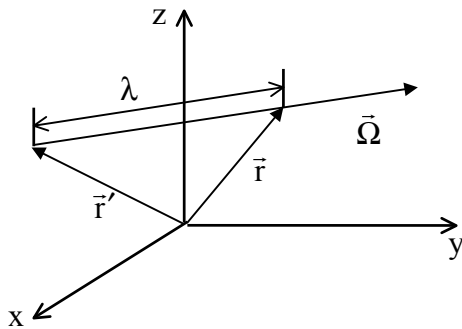


Abbildung 1

Mit der Beziehung  $\bar{\Omega} \cdot \bar{\nabla} \Psi(\bar{r} - \lambda \bar{\Omega}, \bar{\Omega}) = - \left. \frac{d\Psi(\bar{r} - l\bar{\Omega}, \bar{\Omega})}{dl} \right|_{l=\lambda}$  schreibt sich dann Gleichung (54)

in der Form

$$- \left. \frac{d\Psi(\bar{r} - l\bar{\Omega}, \bar{\Omega})}{dl} \right|_{l=\lambda} + \sigma(\bar{r} - \lambda \bar{\Omega}) \Psi(\bar{r} - \lambda \bar{\Omega}, \bar{\Omega}) = q(\bar{r} - \lambda \bar{\Omega}, \bar{\Omega}). \quad (55)$$

Die Funktion  $f(\lambda) = e^{-\int_0^\lambda \sigma(\vec{r}-R'\vec{\Omega})dR'}$  hat die Eigenschaft  $f'(\lambda) = -\sigma(\vec{r}-\lambda\vec{\Omega})f(\lambda)$ . Multiplikation von (55) mit  $f(\lambda)$ , Verwendung dieser Eigenschaft von  $f$  und anschließende Integration über die Variable  $\lambda$  von  $\lambda = 0$  bis  $\lambda = R$  liefert

$$\Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int_0^R q(\vec{r}-\lambda\vec{\Omega}, \vec{\Omega}) \cdot e^{-\int_0^\lambda \sigma(\vec{r}-R'\vec{\Omega})dR'} d\lambda + \Psi(\vec{r}-R\vec{\Omega}, \vec{\Omega}) \cdot e^{-\int_0^R \sigma(\vec{r}-R'\vec{\Omega})dR'}. \quad (56)$$

In Analogie zur Fortpflanzung des Lichtes wird der optische Weg zwischen  $\vec{r}$  und  $\vec{r}-\lambda\vec{\Omega}$  eingeführt:

$$\tau(\vec{r}, \vec{r}-\lambda\vec{\Omega}) = \int_0^\lambda \sigma(\vec{r}-R'\vec{\Omega})dR'. \quad (57)$$

Integraltransportmethoden werden vorzugsweise zur Lösung von Transportproblemen angewandt, bei denen der Effekt der anisotropen Streuung klein ist. Werden isotrope Streuung und isotrope externe Quellen angenommen, so wird auch die Gruppenquelle in (36) isotrop,  $s(\vec{r}, \vec{\Omega}) \rightarrow s(\vec{r})$ . Wie in (4), wo bei der Isotropie der Spaltneutronen auf das Raumwinkelelement  $d\Omega$  der Anteil  $d\Omega/4\pi$  entfiel, entfällt auch in der Gruppenquelle auf den Streuanteil und den Anteil der externen Quellen der Anteil  $d\Omega/4\pi$ . Nach (54) gilt dann

$$q(\vec{r}, \vec{\Omega}) \equiv \frac{1}{4\pi} Q(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi} \sigma_s(\vec{r}) \Phi(\vec{r}) + s(\vec{r}), \quad (58)$$

wobei  $Q(\vec{r}) dV$  die Anzahl an Quellneutronen in  $dV$  und  $\sigma_s(\vec{r})$  der isotrope Streuwirkungsquerschnitt innerhalb der Energiegruppe ist.

Aus der Definition des optischen Weges  $\tau$  aus (57) und Einsetzen der Gleichung (58) in Gleichung (56) ergibt sich für den winkelabhängigen Neutronengruppenfluss mit isotroper Streuung und isotroper Quelle folgende integrale Gleichung:

$$\Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \int_0^R Q(\vec{r}-\lambda\vec{\Omega}) e^{-\tau(\vec{r}, \vec{r}-\lambda\vec{\Omega})} d\lambda + \Psi(\vec{r}-R\vec{\Omega}, \vec{\Omega}) e^{-\tau(\vec{r}, \vec{r}-R\vec{\Omega})}. \quad (59)$$

Ein Transportproblem ist korrekt gestellt, wenn der Fluss, der durch die Oberfläche in das Volumen eintritt, bekannt ist. In Gleichung (59) kann  $R$  als der Abstand des im Volumen befindlichen Punktes  $\vec{r}$  zur Oberfläche des Volumens in Richtung entgegen der Neutronenbewegung gewählt werden, d. h. als der Abstand von  $\vec{r}$  zum Punkt  $\vec{r}-R(\vec{r}, \vec{\Omega})\vec{\Omega}$ , an dem die Neutronen in das Volumen eintreten. Bei gegebenen Randbedingungen ist somit

$\Psi(\vec{r} - R\vec{\Omega}, \vec{\Omega})$  in Gleichung (59) bekannt und das Problem reduziert sich darauf,  $\Psi(\vec{r}, \vec{\Omega})$  durch die Quelle  $Q$  auszudrücken.

## 2.2.2 Die Formulierung der Stoßwahrscheinlichkeiten

Der Ausgangspunkt zur Herleitung der Stoßwahrscheinlichkeitsgleichungen ist nun die integrale Transportgleichung (59). Bei der Herleitung der Gleichungen für zweidimensionale Probleme in Abschnitt 2.2.2.2 (Seite 41) wird der Vektor  $\vec{r}$  nur in der x-y-Ebene betrachtet und von den Vektoren  $\vec{\Omega}$  und  $\vec{r} - R\vec{\Omega}$  die jeweiligen Projektionen auf die x-y-Ebene. Da bei 2D-Problemen der winkelabhängige Gruppenfluss  $\Psi$  und die Quelle  $Q$  unabhängig von der z-Komponente sind, können sie ersetzt werden durch ihre Werte in der x-y-Ebene.

### 2.2.2.1 Die Formulierung der Stoßwahrscheinlichkeiten im 3-dimensionalen

Als Approximation wird im Programm TransRay angenommen, dass der am Rand eintretende Fluss (und damit auch der winkelabhängige Gruppenfluss) isotrop ist ( $P_0$ -Entwicklung), d. h.

$$\Psi(\vec{r} - R\vec{\Omega}, \vec{\Omega}) \approx \tilde{\Psi}(\vec{r} - R\vec{\Omega}) \quad \text{für} \quad \vec{n} \cdot \vec{\Omega} < 0, \quad (60)$$

wobei  $\vec{n}$  die äußere Normale des Randes  $S$  ist. Betrachtet wird nun der Gruppenstrom, der durch den Rand in das System hineintritt:

$$J_-(\vec{r}) \equiv \int_{\vec{\Omega} \cdot \vec{n} < 0} |\vec{\Omega} \cdot \vec{n}| \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) d\Omega \quad \text{für} \quad \vec{r} \in S. \quad (61)$$

Damit folgt mit der Approximation (60)

$$J_-(\vec{r} - R\vec{\Omega}) \approx \int_{\vec{\Omega} \cdot \vec{n} < 0} |\vec{\Omega} \cdot \vec{n}| \tilde{\Psi}(\vec{r} - R\vec{\Omega}) d\Omega = \pi \tilde{\Psi}(\vec{r} - R\vec{\Omega}) \quad (62)$$

und die Integraltransportgleichung (59) lautet

$$\Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \int_0^R Q(\vec{r} - R'\vec{\Omega}) \exp[-\tau(\vec{r}, \vec{r} - R'\vec{\Omega})] dR' + \frac{1}{\pi} J_-(\vec{r} - R\vec{\Omega}) \exp[-\tau(\vec{r}, \vec{r} - R\vec{\Omega})]. \quad (63)$$

Es wird nun über alle Einheitsrichtungen  $\vec{\Omega}$  integriert. Dazu wird  $\vec{\Omega}$  durch den Azimutalwinkel  $\omega$  und den Polarwinkel  $\theta$  beschrieben (Abbildung 2, Seite 48) und das Raumwinkелеlement erhält die Form  $d\Omega = d\omega d\theta \sin\theta$ .

Die Gleichung für den Gruppenfluss lautet dann

$$\begin{aligned} \Phi(\vec{r}) = & \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\omega \int_0^\pi d\theta \int_0^R dR' \sin \theta \, Q(\vec{r} - R' \vec{\Omega}) \exp[-\tau(\vec{r}, \vec{r} - R' \vec{\Omega})] \\ & + \int_0^{2\pi} d\omega \int_0^\pi d\theta \sin \theta \exp[-\tau(\vec{r}, \vec{r} - R \vec{\Omega})] \frac{1}{\pi} J_-(\vec{r} - R \vec{\Omega}). \end{aligned} \quad (64)$$

Die beiden Mehrfachintegrale in Gleichung (64) können geschrieben werden in Form eines Volumenintegrals über das Volumen  $V$  und eines Oberflächenintegrals über den Rand  $S$ . Mit Einführung der neuen Variablenvektoren  $\vec{r}' = \vec{r} - R' \vec{\Omega}$  und  $\vec{r}'' = \vec{r} - R \vec{\Omega}$  transformieren sich die Integrale in (64) zu

$$\Phi(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi} \int_V \frac{\exp[-\tau(\vec{r}, \vec{r}')] Q(\vec{r}') dV'}{\|\vec{r} - \vec{r}'\|^2} + \int_S \frac{\exp[-\tau(\vec{r}, \vec{r}'')] \frac{1}{\pi} J_-(\vec{r}'') dS''}{\|\vec{r} - \vec{r}''\|^2}. \quad (65)$$

Falls der eintretende Gruppenstrom  $J_-$  bekannt ist, kann Gleichung (65) mit (58) gelöst werden mittels der Methode, die in Abschnitt 2.3 beschrieben wird. Falls zum Beispiel Reflexionsrandbedingungen

$$J_+(\vec{r}) = J_-(\vec{r}) \quad \text{für} \quad \vec{r} \in S \quad (66)$$

oder eine allgemeinere Beziehung zwischen  $J_+$  und  $J_-$  am Rand gilt, kann (65) nur gelöst werden, falls eine zusätzliche Gleichung existiert, die den Gruppenstrom der Neutronen, die das Gebiet verlassen,

$$J_+(\vec{r}) \equiv \int_{\vec{\Omega} \cdot \vec{n} > 0} \vec{\Omega} \cdot \vec{n} \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) d\Omega \quad \text{für} \quad \vec{r} \in S, \quad (67)$$

in Beziehung bringt mit  $\Phi$  und  $J_-$ . Einsetzen von  $\Psi$  aus (63) in (67) ergibt

$$\begin{aligned} J_+(\vec{r}) = & \frac{1}{4\pi} \int d\omega \int d\theta \, \vec{n} \cdot \vec{\Omega} \sin \theta \int_0^R dR' Q(\vec{r} - R' \vec{\Omega}) \exp[-\tau(\vec{r}, \vec{r} - R' \vec{\Omega})] \\ & + \int d\omega \int d\theta \, \vec{n} \cdot \vec{\Omega} \sin \theta \exp[-\tau(\vec{r}, \vec{r} - R \vec{\Omega})] \frac{1}{\pi} J_-(\vec{r} - R \vec{\Omega}), \end{aligned} \quad (68)$$

wobei über den Bereich  $(\omega, \theta)$  integriert wird, für den  $\vec{n} \cdot \vec{\Omega} > 0$  ist. Wie in (65) können wieder die Variablenvektoren  $\vec{r}' = \vec{r} - R' \vec{\Omega}$  und  $\vec{r}'' = \vec{r} - R \vec{\Omega}$  eingeführt werden und (68) schreibt sich wie (65) in der Form

$$J_+(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi} \int_V \vec{n} \cdot (\vec{r} - \vec{r}') \frac{\exp[-\tau(\vec{r}, \vec{r}')] Q(\vec{r}') dV'}{\|\vec{r} - \vec{r}'\|^3} + \int_S \vec{n} \cdot (\vec{r} - \vec{r}'') \frac{\exp[-\tau(\vec{r}, \vec{r}'')] \frac{1}{\pi} J_-(\vec{r}'') dS''}{\|\vec{r} - \vec{r}''\|^3}. \quad (69)$$

Das Volumen  $V$  wird nun in Teilvolumina  $V_i$  und der Rand  $S$  in Segmente  $S_j$  unterteilt, so dass

$$V = \bigcup_i V_i \quad S = \bigcup_j S_j, \quad (70)$$

wobei ein Teilvolumen  $V_i$  ein Material enthalten soll. Die beiden Gleichungen (65) und (69) für  $\Phi$  und  $J_+$  werden nun über die Raumvariable integriert, so dass jeweils auf der linken Seite der räumlich gemittelte Gruppenfluss beziehungsweise austretende Gruppenstrom steht:

$$\Phi_i = \frac{1}{V_i} \int dV \Phi(\vec{r}) \quad \text{und} \quad J_{+j} = \frac{1}{S_j} \int dS J_+(\vec{r}). \quad (71)$$

Auf den rechten Seiten der Gleichungen (65) und (69) werden  $Q$  und  $J_-$  durch die räumlich gemittelten Werte approximiert

$$Q(\vec{r}) \approx Q_i = \frac{1}{V_i} \int dV' Q(\vec{r}') \quad \text{für} \quad \vec{r} \in V_i, \quad (72)$$

$$J_{-j}(\vec{r}) \approx J_{-j} = \frac{1}{S_j} \int dS' J_-(\vec{r}') \quad \text{für} \quad \vec{r} \in S_j. \quad (73)$$

Die Näherung für die Quelle  $Q$  wird auch als Flat-Source-Approximation bezeichnet und die Näherung für den Strom  $J_-$  entsprechend als Flat-Current-Approximation. Somit gehen (65) und (69) über in

$$\Phi_i = \sum_{i'} \frac{1}{V_i} \int dV \frac{1}{4\pi} \int dV' \frac{\exp[-\tau(\vec{r}, \vec{r}')] }{\|\vec{r} - \vec{r}'\|^2} Q_{i'} + \sum_{j'} \frac{1}{V_i} \int dV \frac{1}{\pi} \int dS' \frac{\exp[-\tau(\vec{r}, \vec{r}')] }{\|\vec{r} - \vec{r}'\|^2} J_{-j'}$$

und

$$J_{+j} = \sum_{i'} \frac{1}{S_j} \int dS \frac{1}{4\pi} \int dV' \vec{n} \cdot (\vec{r} - \vec{r}') \frac{\exp[-\tau(\vec{r}, \vec{r}')] }{\|\vec{r} - \vec{r}'\|^3} Q_{i'} \quad (74)$$

$$+ \sum_{j'} \frac{1}{S_j} \int dS \frac{1}{\pi} \int dS' \vec{n} \cdot (\vec{r} - \vec{r}') \frac{\exp[-\tau(\vec{r}, \vec{r}')] }{\|\vec{r} - \vec{r}'\|^3} J_{-j'}$$

Für jede Energiegruppe werden diese beiden Gleichungen nun in Form der Stoßwahrscheinlichkeitsgleichungen geschrieben. Dazu wird die erste Gleichung mit  $V_i \sigma_i$  multipliziert, so dass links die Gruppenstoßrate in  $V_i$  steht und die zweite Gleichung mit  $S_j$ , so dass links die Gruppenentweichrate durch  $S_j$  steht:

$$\sigma_i V_i \Phi_i = \sum_{i'} P[V_i \leftarrow V_{i'}] V_{i'} Q_{i'} + \sum_{j'} P[V_i \leftarrow S_{j'}] S_{j'} J_{-j'}, \quad (75)$$

$$S_j J_{+j} = \sum_{i'} P[S_j \leftarrow V_{i'}] V_{i'} Q_{i'} + \sum_{j'} P[S_j \leftarrow S_{j'}] S_{j'} J_{-j'}, \quad (76)$$

wobei



$$P[V_i \leftarrow V_{j'}] = \frac{\sigma_i}{4\pi V_{j'} V_i} \int dV \int_{V_{j'}} dV' \frac{\exp[-\tau(\vec{r}, \vec{r}')] }{\|\vec{r} - \vec{r}'\|^2}, \quad (77 \text{ a})$$

$$P[V_i \leftarrow S_{j'}] = \frac{\sigma_i}{\pi S_{j'} V_i} \int dV \int_{S_{j'}} dS' \frac{\exp[-\tau(\vec{r}, \vec{r}')] }{\|\vec{r} - \vec{r}'\|^2}, \quad (77 \text{ b})$$

und

$$P[S_j \leftarrow V_{j'}] = \frac{1}{4\pi V_{j'} S_j} \int dS \int_{V_{j'}} dV' \vec{n} \cdot (\vec{r} - \vec{r}') \frac{\exp[-\tau(\vec{r}, \vec{r}')] }{\|\vec{r} - \vec{r}'\|^3}, \quad (78 \text{ a})$$

$$P[S_j \leftarrow S_{j'}] = \frac{1}{\pi S_{j'} S_j} \int dS \int_{S_{j'}} dS' \vec{n} \cdot (\vec{r} - \vec{r}') \frac{\exp[-\tau(\vec{r}, \vec{r}')] }{\|\vec{r} - \vec{r}'\|^3}. \quad (78 \text{ b})$$

Da  $V_{j'} Q_{j'}$  die Quellrate in  $V_{j'}$  und  $S_{j'} J_{-j'}$  die Eintrittsrate durch  $S_{j'}$  ist, lassen sich die Ausdrücke (77) als Stoß- und (78) als Entweichwahrscheinlichkeiten interpretieren. Dabei ist  $P[V_i \leftarrow V_{j'}]$  gerade die Erststoßwahrscheinlichkeit, d. h. die Wahrscheinlichkeit, dass ein Neutron, welches aus  $V_{j'}$  kommt, seinen nächsten Stoß in  $V_i$  hat. Analog ist  $P[V_i \leftarrow S_{j'}]$  die Wahrscheinlichkeit, dass ein Neutron, welches durch  $S_{j'}$  eingetreten ist, seinen nächsten Stoß in  $V_i$  hat.  $P[S_j \leftarrow V_{j'}]$  und  $P[S_j \leftarrow S_{j'}]$  sind die entsprechenden Entweichwahrscheinlichkeiten.

Falls in  $V_i$  Void ist, ist  $\sigma_i = 0$  und es ist stattdessen Gleichung (74) nur mit  $V_i$  zu multiplizieren. Anstelle von (75) steht dann

$$V_i \Phi_i = \sum_{j'} C[V_i \leftarrow V_{j'}] V_{j'} Q_{j'} + \sum_{j'} C[V_i \leftarrow S_{j'}] S_{j'} J_{-j'}, \quad (79)$$

wobei statt der Stoßwahrscheinlichkeiten in (77 a) und (77 b) nun die Koeffizienten

$$C[V_i \leftarrow V_{j'}] = \frac{1}{4\pi V_{j'} V_i} \int dV \int_{V_{j'}} dV' \frac{\exp[-\tau(\vec{r}, \vec{r}')] }{\|\vec{r} - \vec{r}'\|^2} \quad \text{und} \quad (80 \text{ a})$$

$$C[V_i \leftarrow S_{j'}] = \frac{1}{\pi S_{j'} V_i} \int dV \int_{S_{j'}} dS' \frac{\exp[-\tau(\vec{r}, \vec{r}')] }{\|\vec{r} - \vec{r}'\|^2} \quad (80 \text{ b})$$

die Gewichte der Quellrate in  $V_{j'}$  und der Eintrittsrate durch  $S_{j'}$  zum räumlich integrierten Gruppenfluss in  $V_i$  repräsentieren. Im Gegensatz zu den Stoßwahrscheinlichkeiten können diese Gewichte größer als 1 sein. Im Programm TransRay werden, wenn geometrische Anordnungen mit Voidbereichen behandelt werden, diese Gewichte verwendet. In Abschnitt 2.3.2, wenn das lineare Gleichungssystem mit den Stoßwahrscheinlichkeiten gelöst wird, wird die Bedeutung der Verwendung der Koeffizienten aus Gleichung (80 a) und (80 b) kurz erläutert.

Um die Gleichungen in (75) (bzw. (79)) und (76) zu lösen, wird die Quelle  $Q$  in (58) betrachtet, die in (72) durch das räumliche Mittel  $Q_i$  approximiert wurde (Flat-Source-Approximation). Für  $Q_i$  ergibt sich

$$Q_i = \frac{1}{V_i} \int_{V_i} Q(\vec{r}) dV = \frac{1}{V_i} \int_{V_i} \sigma_s(\vec{r}) \Phi(\vec{r}) dV + \frac{1}{V_i} \int_{V_i} s(\vec{r}) dV = \sigma_{si} \Phi_i + s_i. \quad (81)$$

Wird nun  $Q_i$  in die Stoßwahrscheinlichkeitsgleichungen (75) (bzw. (79)) und (76) eingesetzt, ergibt dies  $A+B$  Gleichungen, wenn  $A$  die Anzahl der  $V_i$  und  $B$  die Anzahl der  $S_j$  ist. Es gibt demnach  $A+2B$  Unbekannte, die  $\Phi_i$  für  $i = 1, \dots, A$ , die  $J_{+j}$  für  $j = 1, \dots, B$  und die  $J_{-j}$  für  $j = 1, \dots, B$ . Es werden also  $B$  zusätzliche Gleichungen benötigt. Diese ergeben sich aus den Randbedingungen, z. B. Vakuumrandbedingungen ( $J_{-j} = 0$ ) oder Reflexionsrandbedingungen ( $J_{-j} = J_{+j}$ ), aus komplexeren Beziehungen zwischen den ein- und austretenden Strömen von unterschiedlichen Rändern oder aus Stetigkeitsbedingungen an den Grenzflächen benachbarter Gebiete.

### 2.2.2.2 Die Gleichungen für 2-dimensionale Probleme

Ausgangspunkt zur Herleitung der zweidimensionalen Stoßwahrscheinlichkeitsgleichungen ist wie im Dreidimensionalen die integrale Transportgleichung (59). Der Ortsvektor  $\vec{r}$  wird nur in der  $x$ - $y$ -Ebene betrachtet. Es sei  $\vec{\Omega}_p$  der Einheitsvektor in Richtung der Projektion von  $\vec{\Omega}$  auf die  $x$ - $y$ -Ebene. Die Projektion von  $\vec{r} - \lambda \vec{\Omega}$  auf die  $x$ - $y$ -Ebene ist dann  $\vec{r} - \tilde{\lambda} \vec{\Omega}_p$ , wobei  $\tilde{\lambda} = \lambda \sin \theta$  und  $\theta$  wieder der Polarwinkel ist (siehe auch Abbildung 2, S. 48). Da der winkelabhängige Neutronengruppenfluss  $\Psi$  und die Quelle  $Q$  ortsunabhängig von der  $z$ -Komponente sind, können sie durch ihre Werte in der  $x$ - $y$ -Ebene ersetzt werden

$$Q(\vec{r} - \lambda \vec{\Omega}) = Q(\vec{r} - \tilde{\lambda} \vec{\Omega}_p)$$

und (82)

$$\Psi(\vec{r} - R \vec{\Omega}, \vec{\Omega}) = \Psi(\vec{r} - \tilde{R} \vec{\Omega}_p, \vec{\Omega}),$$

wobei  $\tilde{R} = R \sin \theta$  ist.

Für den optischen Weg aus (57) ergibt sich

$$\tau(\vec{r}, \vec{r} - \lambda \vec{\Omega}) = \frac{\tau(\vec{r}, \vec{r} - \tilde{\lambda} \vec{\Omega}_p)}{\sin \theta}. \quad (83)$$

Wird dies nun alles in (59) eingesetzt und die Integrationsvariable  $\tilde{\lambda}$  verwendet, ergibt sich eine von der Ortskoordinate  $z$  unabhängige Integralgleichung

$$\Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{\tilde{R}} \frac{Q(\vec{r} - \tilde{\lambda} \vec{\Omega}_p)}{\sin \theta} e^{-\frac{\tau(\vec{r}, \vec{r} - \tilde{\lambda} \vec{\Omega}_p)}{\sin \theta}} d\tilde{\lambda} + \Psi(\vec{r} - \tilde{R} \vec{\Omega}_p, \vec{\Omega}) e^{-\frac{\tau(\vec{r}, \vec{r} - \tilde{R} \vec{\Omega}_p)}{\sin \theta}}, \quad (84)$$

wobei  $\tilde{R} = \tilde{R}(\vec{r}, \vec{\Omega}_p)$  der Abstand vom auf die x-y-Ebene projizierten Eintrittspunkt der Neutronen zum Punkt  $\vec{r}$  ist. Wie im Dreidimensionalen wird der eintretende Fluss approximiert, als sei er isotrop, und der durch den Rand eintretende Gruppenstrom wird eingeführt. Analog zu (63) ergibt sich

$$\Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{\tilde{R}} \frac{Q(\vec{r} - \tilde{\lambda} \vec{\Omega}_p)}{\sin \theta} e^{-\frac{\tau(\vec{r}, \vec{r} - \tilde{\lambda} \vec{\Omega}_p)}{\sin \theta}} d\tilde{\lambda} + \frac{1}{\pi} J_-(\vec{r} - \tilde{R} \vec{\Omega}_p) e^{-\frac{\tau(\vec{r}, \vec{r} - \tilde{R} \vec{\Omega}_p)}{\sin \theta}}. \quad (85)$$

Wird nun wieder über  $d\Omega = d\omega d\theta \sin\theta$  integriert, wobei im Zweidimensionalen für  $\omega$  der Winkel zwischen der x-Achse und  $\vec{\Omega}_p$ , der Projektion von  $\vec{\Omega}$  auf die x-y-Ebene, gewählt wird (Abbildung 3, Seite 50), ergibt sich analog zu (64)

$$\Phi(\vec{r}) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\omega \int_0^{\tilde{R}} d\tilde{\lambda} \text{Ki}_1[\tau(\vec{r}, \vec{r} - \tilde{\lambda} \vec{\Omega}_p)] Q(\vec{r} - \tilde{\lambda} \vec{\Omega}_p) + \frac{2}{\pi} \int_0^{2\pi} d\omega \text{Ki}_2[\tau(\vec{r}, \vec{r} - \tilde{R} \vec{\Omega}_p)] J_-(\vec{r} - \tilde{R} \vec{\Omega}_p), \quad (86)$$

wobei die Bickley-Naylor Funktionen [25] eingeführt wurden:

$$\text{Ki}_n(x) \equiv \int_0^{\pi/2} d\theta \sin^{n-1} \theta e^{-x/\sin \theta}. \quad (87)$$

Die Fläche des betrachteten Systems sei  $A$  und  $L$  sei der Rand von  $A$ . Analog zu (65) im Dreidimensionalen lässt sich (86) als Summe eines Flächenintegrals über  $A$  und eines Kurvenintegrals über den Rand  $L$  schreiben

$$\Phi(\vec{r}) = \frac{1}{2\pi} \int_A dA' \frac{\text{Ki}_1[\tau(\vec{r}, \vec{r}')] }{\|\vec{r} - \vec{r}'\|} Q(\vec{r}') + \frac{2}{\pi} \int_L dL'' \frac{\vec{n}'' \cdot (\vec{r}'' - \vec{r})}{2\pi \|\vec{r}'' - \vec{r}\|^2} \text{Ki}_2[\tau(\vec{r}'', \vec{r})] J_-(\vec{r}''), \quad (88)$$

wobei  $\vec{r}' = \vec{r} - \tilde{R}' \vec{\Omega}_p$ ,  $\vec{r}'' = \vec{r} - \tilde{R} \vec{\Omega}_p$  und  $\vec{n}''$  die äußere Normale an  $dL''$  ist. Analoge Ausdrücke zu (68) und (69) ergeben sich für den austretenden Gruppenstrom

$$J_+(\vec{r}) = \frac{1}{2\pi} \int d\omega \vec{n} \cdot \vec{\Omega}_p \int_0^{\vec{r}} d\vec{R}' \text{Ki}_2[\tau(\vec{r}, \vec{r} - \vec{R}'\vec{\Omega}_p)] Q(\vec{r} - \vec{R}'\vec{\Omega}_p) + \quad (89)$$

$$\frac{2}{\pi} \int d\omega \vec{n} \cdot \vec{\Omega}_p \text{Ki}_3[\tau(\vec{r}, \vec{r} - \vec{R}\vec{\Omega}_p)] J_-(\vec{r} - \vec{R}\vec{\Omega}_p)$$

oder als Summe eines Integrals über die Fläche A und den Rand L geschrieben

$$J_+(\vec{r}) = \frac{1}{2\pi} \int_A dA' \vec{n} \cdot (\vec{r} - \vec{r}') \frac{\text{Ki}_2[\tau(\vec{r}, \vec{r}')] }{2\pi \|\vec{r} - \vec{r}'\|^2} Q(\vec{r}') + \quad (90)$$

$$\frac{2}{\pi} \int_L dL'' \vec{n} \cdot (\vec{r} - \vec{r}'') \vec{n}'' \cdot (\vec{r}'' - \vec{r}) \frac{\text{Ki}_3[\tau(\vec{r}, \vec{r}'')] }{\|\vec{r}'' - \vec{r}\|^3} J_-(\vec{r}'').$$

Wie im Dreidimensionalen wird nun die Fläche A in Teilflächen gleichen Materials und der Rand L in Randsegmente unterteilt. Die beiden Gleichungen (88) und (90) werden wiederum über die Raumvariable integriert und Q und  $J_-$  werden durch die räumlich gemittelten Werte approximiert (Flat-Source- und Flat-Current-Approximation). Wie im Dreidimensionalen ergeben sich dann die Stoßwahrscheinlichkeitsgleichungen

$$\sigma_i A_i \Phi_i = \sum_{i'} P[A_i \leftarrow A_{i'}] A_{i'} Q_{i'} + \sum_{j'} P[A_i \leftarrow L_{j'}] L_{j'} J_{-j'} \quad (91)$$

und

$$L_j J_{+j} = \sum_{i'} P[L_j \leftarrow A_{i'}] A_{i'} Q_{i'} + \sum_{j'} P[L_j \leftarrow L_{j'}] L_{j'} J_{-j'}, \quad (92)$$

wobei

$$P[A_i \leftarrow A_{i'}] = \frac{\sigma_i}{2\pi A_{i'}} \int dA \int dA' \frac{\text{Ki}_1[\tau(\vec{r}, \vec{r}')] }{\|\vec{r} - \vec{r}'\|}, \quad (93 a)$$

$$P[A_i \leftarrow L_{j'}] = \frac{2\sigma_i}{\pi L_{j'}} \int dA \int dL' \vec{n}' \cdot (\vec{r}' - \vec{r}) \frac{\text{Ki}_2[\tau(\vec{r}, \vec{r}')] }{\|\vec{r}' - \vec{r}\|^2}, \quad (93 b)$$

und

$$P[L_j \leftarrow A_{i'}] = \frac{1}{2\pi A_{i'}} \int dL \int dA' \vec{n}' \cdot (\vec{r} - \vec{r}') \frac{\text{Ki}_2[\tau(\vec{r}, \vec{r}')] }{\|\vec{r} - \vec{r}'\|^2}, \quad (94 a)$$

$$P[L_j \leftarrow L_{j'}] = \frac{2}{\pi L_{j'}} \int dL \int dL' \vec{n} \cdot (\vec{r} - \vec{r}') \vec{n}' \cdot (\vec{r}' - \vec{r}) \frac{\text{Ki}_3[\tau(\vec{r}, \vec{r}')] }{\|\vec{r}' - \vec{r}\|^3}. \quad (94 b)$$

Falls in  $A_i$  Void ist, ist  $\sigma_i = 0$  und es ist analog zu (79)

$$A_i \Phi_i = \sum_{i'} C[A_i \leftarrow A_{i'}] A_{i'} Q_{i'} + \sum_{j'} C[A_i \leftarrow L_{j'}] L_{j'} J_{-j'} \quad (95)$$

statt (91) zu verwenden mit

$$C[A_i \leftarrow A_{j'}] = \frac{1}{2\pi A_{j'} \int_i} \int_{j'} dA' \frac{Ki_1[\tau(\vec{r}, \vec{r}')] }{\|\vec{r} - \vec{r}'\|} \quad \text{und} \quad (96 \text{ a})$$

$$C[A_i \leftarrow L_{j'}] = \frac{2}{\pi L_{j'} \int_i} \int_{j'} dL' \vec{n}' \cdot (\vec{r}' - \vec{r}) \frac{Ki_2[\tau(\vec{r}, \vec{r}')] }{\|\vec{r}' - \vec{r}\|^2}. \quad (96 \text{ b})$$

Zu diesen Koeffizienten C gelten entsprechend die Bemerkungen zu den Koeffizienten C aus (80 a) und (80 b) im Dreidimensionalen.

## 2.3 Lösung der Stoßwahrscheinlichkeitsgleichungen

### 2.3.1 Bestimmung der Koeffizienten mit der Ray-Tracing-Methode

Aus den Stoßwahrscheinlichkeitsgleichungen (75) und (76) werden nun die Koeffizienten, die Stoß- und Entweichwahrscheinlichkeiten (77) und (78), bestimmt. Im Fall von Void werden die Koeffizienten (80) berechnet. Im Programm TransRay wird eine deterministische Methode angewandt, die Ray-Tracing-Methode.

#### 2.3.1.1 Die Ray-Tracing-Methode im 3-dimensionalen

Die Stoß- und Entweichwahrscheinlichkeiten (77) und (78) sind Integrale über vier bis sechs Variablen. Zunächst werden einige Integrationen analytisch ausgeführt, so dass sich alle Ausdrücke als Integrale über vier Variablen darstellen lassen. Dazu wird entlang der Richtungen geschaut, aus der die Neutronen kommen. Es werden die Gleichungen (64) und (68) betrachtet, in denen  $\Phi$  und  $J_+$  als Integrale über die Variablen stehen, die den Weg der Neutronenbewegung beschreiben. Mit dem gleichen Verfahren wie in Abschnitt 2.2.2.1 ergeben sich für (77 a), (77 b), (78 a) und (78 b)

$$P[V_i \leftarrow V_{j'}] = \frac{\sigma_i}{4\pi V_{j'} V_i} \int dV \iint_{j'} d\omega d\theta \int_{R_1}^{R_2} dR' \sin \theta \exp[-\tau(\vec{r}, \vec{r} - R'\vec{\Omega})], \quad (97 \text{ a})$$

$$P[V_i \leftarrow S_{j'}] = \frac{\sigma_i}{\pi S_{j'} V_i} \int dV \iint_{j'} d\omega d\theta \sin \theta \exp[-\tau(\vec{r}, \vec{r} - R\vec{\Omega})] \quad (97 \text{ b})$$

$$P[S_j \leftarrow V_{j'}] = \frac{1}{4\pi V_{j'} S_j} \int dS \iint_{j'} d\omega d\theta \int_{R_1}^{R_2} dR' \vec{n} \cdot \vec{\Omega} \sin \theta \exp[-\tau(\vec{r}, \vec{r} - R'\vec{\Omega})], \quad (98 \text{ a})$$

$$P[S_j \leftarrow S_{j'}] = \frac{1}{\pi S_{j'} S_j} \int dS \iint_{j'} d\omega d\theta \vec{n} \cdot \vec{\Omega} \sin \theta \exp[-\tau(\vec{r}, \vec{r} - R\vec{\Omega})]. \quad (98 \text{ b})$$

Im Fall von Void in  $V_i$  sind statt (97) entsprechend zu (80 a) und (80 b) die Koeffizienten

$$C[V_i \leftarrow V_{i'}] = \frac{1}{4\pi V_{i'} V_i} \int dV \iint_{i'} d\omega d\theta \int_{R_1}^{R_2} dR' \sin \theta \exp[-\tau(\vec{r}, \vec{r} - R'\vec{\Omega})], \quad (99 \text{ a})$$

$$C[V_i \leftarrow S_{j'}] = \frac{1}{\pi S_{j'} V_i} \int dV \iint_{j'} d\omega d\theta \sin \theta \exp[-\tau(\vec{r}, \vec{r} - R\vec{\Omega})] \quad (99 \text{ b})$$

zu berechnen. In diesen Gleichungen ist  $\vec{r} - R_1\vec{\Omega}$  der nächste und  $\vec{r} - R_2\vec{\Omega}$  der entfernteste Randpunkt von  $V_{i'}$  zum Punkt  $\vec{r}$  auf der Geraden durch  $\vec{r}$  mit Richtung  $\vec{\Omega}$ . Die Integrale über  $\omega$  und  $\theta$  sind über die Winkel zu nehmen, die  $V_{i'}$  beziehungsweise  $S_{j'}$  erfassen.

Nun wird die Reduzierung der Anzahl an Integrationen, die numerisch ausgeführt werden, am Beispiel von  $P[V_i \leftarrow V_{i'}]$  gezeigt. Die anderen Wahrscheinlichkeiten werden analog behandelt. Das Integral über  $R'$  kann analytisch ausgeführt werden. Es gilt mit der Definition (57) des optischen Weges

$$\tau(\vec{r}, \vec{r} - R'\vec{\Omega}) = \tau(\vec{r}, \vec{r} - R_1\vec{\Omega}) + (R' - R_1)\sigma_{i'}, \quad (100)$$

womit folgt:

$$\int_{R_1}^{R_2} \exp[-\tau(\vec{r}, \vec{r} - R'\vec{\Omega})] dR' = \frac{1}{\sigma_{i'}} (\exp[-\tau(\vec{r}, \vec{r} - R_1\vec{\Omega})] - \exp[-\tau(\vec{r}, \vec{r} - R_2\vec{\Omega})]). \quad (101)$$

Wird dies in den Ausdruck für  $P[V_i \leftarrow V_{i'}]$  in (97 a) eingesetzt und die Integrationsreihenfolge vertauscht, ergibt sich

$$P[V_i \leftarrow V_{i'}] = \frac{\sigma_i}{4\pi\sigma_{i'} V_{i'}} \iint_{i'} d\omega d\theta \sin \theta \int_{V_i} dV (\exp[-\tau(\vec{r}, \vec{r} - R_1\vec{\Omega})] - \exp[-\tau(\vec{r}, \vec{r} - R_2\vec{\Omega})]). \quad (102)$$

Das Volumenintegral kann nun für Neutronen ausgeführt werden, die sich in eine bestimmte Richtung bewegen. Danach werden die Integrale über  $\omega$  und  $\theta$  (Abbildung 2, Seite 48) berechnet. Um entlang des Weges der Neutronenbewegung zu integrieren, wird das Koordinatensystem so gedreht, dass eine Koordinate parallel zu  $\vec{\Omega}$  ist und somit die anderen beiden Koordinaten die Ebene senkrecht zur Neutronenbewegung aufspannen. Das gedrehte Koordinatensystem wird nun so gewählt:

- a) Drehe die z-Achse um den Winkel  $\omega + \pi$ , das gedrehte Koordinatensystem sei  $(x', y', z')$ .
- b) Drehe die  $x'$ -Achse um den Winkel  $\pi - \theta$ , das gedrehte Koordinatensystem sei  $(\xi, \eta, \zeta)$ .

Ein Punkt  $(x, y, z)$  des ursprünglichen Koordinatensystems hat dann im neuen Koordinatensystem die Koordinaten

$$\begin{pmatrix} \xi \\ \eta \\ \zeta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\cos \omega & -\sin \omega & 0 \\ -\sin \omega \cos \theta & \cos \omega \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \omega \sin \theta & -\cos \omega \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}. \quad (103)$$

Das Volumenintegral kann nun folgendermaßen ausgedrückt werden:

$$\int_{V_i} dV = \int_{\xi_i^<}^{\xi_i^>} d\xi \int_{\eta_i^<}^{\eta_i^>} d\eta \int_{\zeta_i^<}^{\zeta_i^>} d\zeta, \quad (104)$$

wobei die Grenzen für  $\xi$ ,  $\eta$  und  $\zeta$  Funktionen von  $\omega$  und  $\theta$  sind. Mit den neuen Koordinaten schreibt sich (102) nun

$$P[V_i \leftarrow V_{i'}] = \frac{\sigma_i}{4\pi\sigma_{i'}V_{i'}} \iint_{i'} d\omega d\theta \sin \theta \int_{\xi_i^<}^{\xi_i^>} d\xi \int_{\eta_i^<}^{\eta_i^>} d\eta \int_{\zeta_i^<}^{\zeta_i^>} d\zeta \left( \exp[-\tau(\vec{r}, \vec{r} - R_1\vec{\Omega})] - \exp[-\tau(\vec{r}, \vec{r} - R_2\vec{\Omega})] \right). \quad (105)$$

Die  $\zeta$ -Integration kann analytisch ausgeführt werden, da die optischen Wege im Integranden alle entlang von Wegen parallel zur  $\zeta$ -Achse liegen. Es sei  $\tau_i = \tau_i(\xi, \eta)$  der optische Weg durch das Volumen  $V_i$  und  $\tau_{ii'} = \tau_{ii'}(\xi, \eta)$  der optische Weg zwischen  $V_i$  und  $V_{i'}$ . Da  $\tau_i(\xi, \eta) = \sigma_i(\zeta_i^> - \zeta_i^<)$  ist, folgt

$$\begin{aligned} \tau(\vec{r}, \vec{r} - R_1\vec{\Omega}) &= \sigma_i(\zeta_i^> - \zeta) + \tau_{ii'}(\xi, \eta), \\ \tau(\vec{r}, \vec{r} - R_2\vec{\Omega}) &= \sigma_i(\zeta_i^> - \zeta) + \tau_{ii'}(\xi, \eta) + \tau_{i'}(\xi, \eta). \end{aligned} \quad (106)$$

Damit ergibt sich für die Erststoßwahrscheinlichkeit

$$P[V_i \leftarrow V_{i'}] = \frac{1}{4\pi\sigma_{i'}V_{i'}} \iint_{i'} d\omega d\theta \sin \theta \int_{\xi_i^<}^{\xi_i^>} d\xi \int_{\eta_i^<}^{\eta_i^>} d\eta \left\{ \exp(-\tau_{ii'}) - \exp(-(\tau_i + \tau_{ii'})) - \exp(-(\tau_{ii'} + \tau_{i'})) + \exp(-(\tau_i + \tau_{ii'} + \tau_{i'})) \right\} \text{ für } i \neq i'. \quad (107)$$

Analoge Ausdrücke ergeben sich für  $P[V_i \leftarrow V_i]$  und die anderen Stoß- und Entweichwahrscheinlichkeiten in (77) und (78):

$$\begin{aligned}
P[V_i \leftarrow V_i] &= 1 - \frac{1}{4\pi\sigma_i V_i} \iint d\omega d\theta \sin\theta \int_{\xi_i^<}^{\xi_i^>} \int_{\eta_i^<}^{\eta_i^>} d\xi d\eta \{1 - \exp(-\tau_i)\}, \\
P[V_i \leftarrow S_j] &= \frac{1}{\pi S_j} \iint d\omega d\theta \sin\theta \int_{\xi_j^<}^{\xi_j^>} \int_{\eta_j^<}^{\eta_j^>} d\xi d\eta \{\exp(-\tau_{ij}) - \exp(-(\tau_i + \tau_{ij}))\}, \\
P[S_j \leftarrow V_i] &= \frac{1}{4\pi\sigma_i V_i} \iint d\omega d\theta \sin\theta \int_{\xi_j^<}^{\xi_j^>} \int_{\eta_j^<}^{\eta_j^>} d\xi d\eta \{\exp(-\tau_{ji}) - \exp(-(\tau_{ji} + \tau_i))\}, \\
P[S_j \leftarrow S_j] &= \frac{1}{\pi S_j} \iint d\omega d\theta \sin\theta \int_{\xi_j^<}^{\xi_j^>} \int_{\eta_j^<}^{\eta_j^>} d\xi d\eta \exp(-\tau_{jj}).
\end{aligned} \tag{108}$$

Die folgenden Bemerkungen sind anzufügen:

- Die Wahrscheinlichkeiten sind ausgedrückt als Integrale über vier Variablen, die zwei Winkelvariablen  $\omega$  und  $\theta$ , die die Richtung der Neutronenbewegung beschreiben (Abbildung 2, Seite 48), und die zwei Ortsvariablen  $\xi$  und  $\eta$ , die die Ebene senkrecht zur Neutronenbewegung aufspannen.
- Die numerische Berechnung der Integrale wird gewöhnlich mit Ray-Tracing bezeichnet.
- Bei diesem Verfahren werden alle Wahrscheinlichkeiten gleichzeitig berechnet, indem für jeden festen Wert ( $\omega$ ,  $\theta$ ) in der Quadratur eine Menge von parallelen Linien gezeichnet und für jede Linie der Beitrag zu all den Stoß- und Entweichwahrscheinlichkeiten berechnet wird, deren entsprechenden Gebiete und Oberflächen die Linie durchquert.
- Eine Reduzierung der Berechnungen ergibt sich bei Verwendung
  - a) von Symmetrieeigenschaften der Geometrie und
  - b) der optischen Reziprozitätsbeziehungen

$$\begin{aligned}
\frac{1}{V_i\sigma_i} P[V_i \leftarrow V_j] &= \frac{1}{V_j\sigma_j} P[V_j \leftarrow V_i], \\
\frac{1}{S_j} P[S_j \leftarrow V_i] &= \frac{1}{4V_i\sigma_i} P[V_i \leftarrow S_j], \\
\frac{1}{S_j} P[S_j \leftarrow S_i] &= \frac{1}{S_i} P[S_i \leftarrow S_j].
\end{aligned} \tag{109}$$



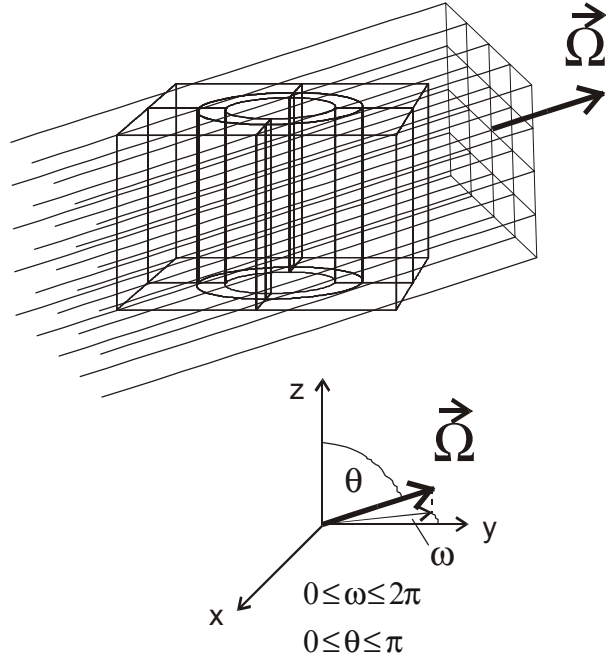


Abbildung 2: Parallele Strahlen durch eine Zelle beim dreidimensionalen Ray-Tracing.

Im Fall von Void in  $V_i$  sind statt der Stoßwahrscheinlichkeiten (97) die Koeffizienten (99) zu berechnen. Falls in  $V_i$  Void ist, können  $P[V_i \leftarrow V_i]$ , bzw.  $C[V_i \leftarrow V_i]$ , und  $P[S_j \leftarrow V_i]$  für alle  $i$  und  $j$  identisch Null gesetzt werden, da dann auch die Quelle  $Q_i$  aus (72) identisch Null ist und somit die entsprechenden Terme in den Stoßwahrscheinlichkeitsgleichungen (75), bzw. (79), und (76) keinen Beitrag liefern. Die Werte für  $P[V_i \leftarrow V_i]$ , bzw.  $C[V_i \leftarrow V_i]$ , und  $P[S_j \leftarrow V_i]$  bleiben außerdem beschränkt. Das heißt zusammengefasst

$$\text{Void in } V_i \Rightarrow \text{setze } P[S_j \leftarrow V_i] \equiv 0,$$

$$\text{kein Void in } V_i \text{ und Void in } V_i \Rightarrow \text{setze } P[V_i \leftarrow V_i] \equiv 0, \quad (110)$$

$$\text{Void in } V_i \text{ und Void in } V_i \Rightarrow \text{setze } C[V_i \leftarrow V_i] \equiv 0.$$

Für den Fall Void in  $V_i$  und kein Void in  $V_i$  ergibt sich für die Koeffizienten in (99 a) und (99 b) analog zu den Ausdrücken (107) und (108)

$$C[V_i \leftarrow V_i] = \frac{1}{4\pi\sigma_i V_i} \iint_{\xi_i^<}^{\xi_i^>} d\omega d\theta \sin\theta \int_{\eta_i^<}^{\eta_i^>} d\xi \int_{\eta_i^<}^{\eta_i^>} d\eta (\zeta_i^> - \zeta_i^<) \{ \exp(-\tau_{ii}) - \exp(-(\tau_{ii} + \tau_i)) \}, \quad (111 \text{ a})$$

$$C[V_i \leftarrow S_j] = \frac{1}{\pi S_j} \iint_{\xi_j^<}^{\xi_j^>} d\omega d\theta \sin\theta \int_{\eta_j^<}^{\eta_j^>} d\xi \int_{\eta_j^<}^{\eta_j^>} d\eta (\zeta_i^> - \zeta_i^<) \exp(-\tau_{ij}). \quad (111 \text{ b})$$

### 2.3.1.2 Die Ray-Tracing-Methode im 2-dimensionalen

Zur Berechnung der Stoß- und Entweichwahrscheinlichkeiten (93) und (94) müssen zwei bis vier Integrationen über Bickley-Naylor-Funktionen (siehe Gleichung (87)) ausgeführt werden. Manche Integrationen können wieder analytisch bestimmt werden, so dass für jede Wahrscheinlichkeit schließlich zwei numerische Integrationen erforderlich sind. Wie im Dreidimensionalen (Gleichungen (97) und (98)) können die Stoß- und Entweichwahrscheinlichkeiten geschrieben werden als Integrale über die Variablen, die den Weg der Neutronenbewegung beschreiben. Werden analog zu den Koordinaten (103) die neuen Koordinaten

$$\begin{pmatrix} \xi \\ \zeta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \omega & -\cos \omega \\ -\cos \omega & -\sin \omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \quad (112)$$

eingeführt (für  $\omega$  siehe Abb. 3 auf Seite 50), ergeben sich entsprechend der Herleitung der 3D-Gleichungen (107) und (108) die folgenden 2D-Gleichungen

$$P[A_i \leftarrow A_{i'}] = \frac{1}{2\pi\sigma_{i'}A_{i'}} \int d\omega \int_{\xi_i^<}^{\xi_i^>} d\xi \left\{ \text{Ki}_3(\tau_{i'}) - \text{Ki}_3(\tau_i + \tau_{i'}) - \text{Ki}_3(\tau_{i'} + \tau_{i'}) + \text{Ki}_3(\tau_i + \tau_{i'} + \tau_{i'}) \right\} \quad \text{für } i \neq i', \quad (113)$$

und

$$\begin{aligned} P[A_i \leftarrow A_i] &= 1 - \frac{1}{2\pi\sigma_i A_i} \int d\omega \int_{\xi_i^<}^{\xi_i^>} d\xi \left\{ \text{Ki}_3(0) - \text{Ki}_3(\tau_i) \right\}, \\ P[A_i \leftarrow L_{j'}] &= \frac{2}{\pi L_{j'}} \int d\omega \int_{\xi_{ij'}^<}^{\xi_{ij'}^>} d\xi \left\{ \text{Ki}_3(\tau_{ij'}) - \text{Ki}_3(\tau_i + \tau_{ij'}) \right\}, \\ P[L_j \leftarrow A_{i'}] &= \frac{1}{2\pi\sigma_{i'} A_{i'}} \int d\omega \int_{\xi_j^<}^{\xi_j^>} d\xi \left\{ \text{Ki}_3(\tau_{ij'}) - \text{Ki}_3(\tau_{ij'} + \tau_{i'}) \right\}, \\ P[L_j \leftarrow L_{j'}] &= \frac{2}{\pi L_{j'}} \int d\omega \int_{\xi_j^<}^{\xi_j^>} d\xi \text{Ki}_3(\tau_{jj'}). \end{aligned} \quad (114)$$

Die Bickley-Naylor-Funktion  $\text{Ki}_3$  (Gleichung (87)) wird in TransRay nach Fuentes und Turinsky [13] durch ein rationales Polynom approximiert. Es hat die Form:

$$\text{ki}_3(x) = \frac{a_0 + a_1 x + \dots + a_6 x^6}{1 + b_1 x + \dots + b_6 x^6}. \quad (115)$$

Wie im Dreidimensionalen Fall sind die analogen Bemerkungen anzufügen:

- Die Wahrscheinlichkeiten sind ausgedrückt als Integrale über zwei Variablen, die Winkelvariable  $\omega$ , die die Richtung der Neutronenbewegung beschreibt (Abbildung 3), und die Ortsvariable  $\xi$ , die senkrecht zur Neutronenbewegung steht.
- Bei diesem Verfahren werden alle Wahrscheinlichkeiten gleichzeitig berechnet, indem für jeden festen Wert  $\omega$  in der Quadratur eine Menge von parallelen Linien gezeichnet wird und für jede Linie der Beitrag zu all den Stoß- und Entweichwahrscheinlichkeiten berechnet wird, deren entsprechenden Gebiete und Randkurven die Linie durchquert.
- Eine Reduzierung der Berechnungen ergibt sich bei Verwendung von Symmetrieeigenschaften der Geometrie und der optischen Reziprozitätsbeziehungen

$$\frac{1}{A_i \sigma_i} P[A_i \leftarrow A_j] = \frac{1}{A_j \sigma_j} P[A_j \leftarrow A_i],$$

$$\frac{1}{L_j} P[L_j \leftarrow A_i] = \frac{1}{4A_i \sigma_i} P[A_i \leftarrow L_j], \quad (116)$$

$$\frac{1}{L_j} P[L_j \leftarrow L_i] = \frac{1}{L_i} P[L_i \leftarrow L_j].$$

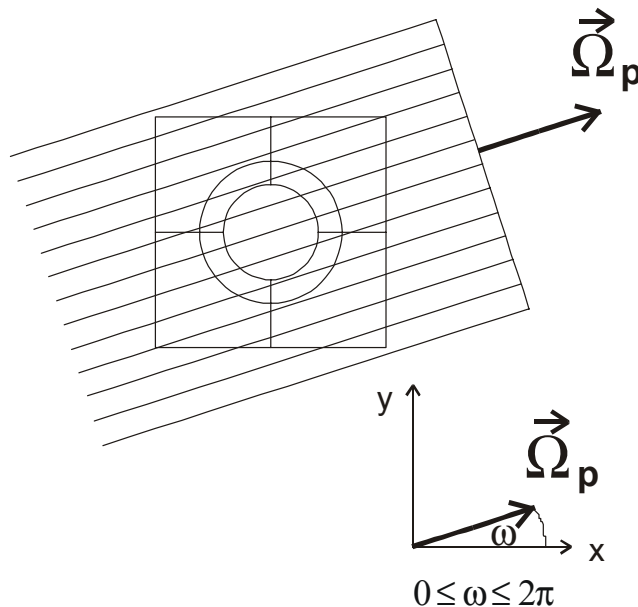


Abbildung 3: Parallele Strahlen durch eine Zelle beim zweidimensionalen Ray-Tracing.

Im Fall von Void gelten analoge Betrachtungen wie im Dreidimensionalen, so dass gilt

$$\begin{aligned} \text{Void in } A_{i'} &\Rightarrow \text{setze } P[L_j \leftarrow A_{i'}] \equiv 0, \\ \text{kein Void in } A_i \text{ und Void in } A_{i'} &\Rightarrow \text{setze } P[A_i \leftarrow A_{i'}] \equiv 0, \\ \text{Void in } A_i \text{ und Void in } A_{i'} &\Rightarrow \text{setze } C[A_i \leftarrow A_{i'}] \equiv 0 \end{aligned} \quad (117)$$

analog zu (110). Für den Fall Void in  $A_i$  und kein Void in  $A_{i'}$  ergibt sich analog zu den Ausdrücken (113) und (114)

$$\begin{aligned} C[A_i \leftarrow A_{i'}] &= \frac{1}{2\pi\sigma_{i'}A_{i'}} \int d\omega \int_{\xi_i^<}^{\xi_i^>} d\xi (\zeta_i^> - \zeta_i^<) \{Ki_2(\tau_{ii'}) - Ki_2(\tau_{ii'} + \tau_{i'})\}, \\ C[A_i \leftarrow L_{i'}] &= \frac{2}{\pi L_{i'}} \int d\omega \int_{\xi_i^<}^{\xi_i^>} d\xi (\zeta_i^> - \zeta_i^<) Ki_2(\tau_{ij'}). \end{aligned} \quad (118)$$

Die Bickley-Naylor-Funktion  $Ki_2$  (Gleichung (87)) wird in TransRay durch ein rationales Polynom approximiert, das selbst entwickelt wurde. Es hat dieselbe Form wie  $ki_3$  in Gleichung (115).

### 2.3.2 Lösung des linearen Gleichungssystems

Nachdem die Wahrscheinlichkeiten  $P[V_i \leftarrow V_{i'}]$ , u.s.w. in (75) und (76) bestimmt wurden, bzw. bei Void die Koeffizienten  $C[V_i \leftarrow V_{i'}]$  und  $C[V_i \leftarrow S_{i'}]$  in (79), bleibt das Problem der Lösung eines linearen Gleichungssystems. Dazu werden zunächst die Gleichungen (75) (bzw. (79)), (76) und (81) in eine kompaktere Matrixform geschrieben. Es werden Vektoren definiert, deren Komponenten die Gruppenstoßraten, bzw. bei Void der räumlich integrierte Gruppenfluss in  $V_i$ ,

$$\bar{\Phi}_i = \begin{cases} \sigma_i V_i \Phi_i & \text{falls kein Void in } V_i, \\ V_i \Phi_i & \text{falls Void in } V_i, \end{cases} \quad (119)$$

die aus- und eintretenden Gruppenströme,

$$\bar{\mathbf{j}}_{+j} = S_j \mathbf{J}_{+j} \quad \text{und} \quad \bar{\mathbf{j}}_{-j} = S_j \mathbf{J}_{-j}, \quad (120)$$

und die über  $V_i$  integrierten Gruppenquellen mit den  $s_i$  aus Gleichung (81) sind,

$$\bar{\mathbf{s}}_i = V_i s_i. \quad (121)$$

Die Quelle mit der  $i$ -ten Komponente  $\bar{Q}_i \equiv V_i Q_i$ , die durch (81) gegeben ist, schreibt sich dann in der Vektorform

$$\bar{\mathbf{Q}} = \mathbf{M}\bar{\boldsymbol{\phi}} + \bar{\mathbf{s}}, \quad (122)$$

falls die Diagonalmatrix der Streuwirkungsquerschnitte folgendermaßen definiert wird:

$$\mathbf{M}_{ii'} = \begin{cases} \delta_{ii'} \frac{\sigma_{si'}}{\sigma_{r'}} & \text{falls kein Void in } V_i, \\ 0 & \text{falls Void in } V_i. \end{cases} \quad (123)$$

Indem die Matrizen der Stoßwahrscheinlichkeiten definiert werden,

$$\{\mathbf{P}_{VV}\}_{ii'} = \begin{cases} \mathbf{P}[V_i \leftarrow V_{i'}] & \text{falls kein Void in } V_i, \\ \mathbf{C}[V_i \leftarrow V_{i'}] & \text{falls Void in } V_i, \end{cases} \quad (124)$$

und entsprechend die Matrizen  $\mathbf{P}_{VS}$ ,  $\mathbf{P}_{SV}$  und  $\mathbf{P}_{SS}$ , können die Gleichungen mit den Stoßwahrscheinlichkeiten (75) (bzw. (79)) und (76) in der kompakten Form geschrieben werden:

$$\bar{\boldsymbol{\phi}} = \mathbf{P}_{VV}\bar{\mathbf{Q}} + \mathbf{P}_{VS}\bar{\mathbf{j}}_- \quad (125 \text{ a})$$

$$\bar{\mathbf{j}}_+ = \mathbf{P}_{SV}\bar{\mathbf{Q}} + \mathbf{P}_{SS}\bar{\mathbf{j}}_- \quad (125 \text{ b})$$

Bei der Herleitung dieser Gleichungen sind viele Vereinfachungen angenommen worden: Die Gruppenwirkungsquerschnitte sind innerhalb eines jeden Raumelements  $V_i$  ortsunabhängig. Die Quellen innerhalb eines jeden Raumelements  $V_i$  und die eintretenden Gruppenströme durch jedes einzelne Oberflächenelement  $S_j$  sind ortsunabhängig (Flat-Source- und Flat-Current-Approximation). Die Quellen, die Streuung und der durch den Rand eintretende Neutronenfluss sind isotrop. Diese Annahmen im Programm TransRay verkürzen die Rechenzeiten, insbesondere bei dreidimensionalen Rechnungen.

In Abschnitt 2.5 wird die Berechnung effektiver Wirkungsquerschnitte, die über eine Zelle gemittelt sind, als Anwendung betrachtet. Diese Zellen sind Anordnungen von Brennelementzellen und oftmals in einem Gitter aus ähnlichen oder gleichen Zellen enthalten. Daher werden in den nächsten beiden Abschnitten 2.3.2.1 und 2.3.2.2 die Gleichungen verwendet, um erstens eine Zelle im unendlich ausgedehnten Gitter solcher Zellen und zweitens mehrere Zellen zu berechnen, die über die ein- und austretenden Neutronengruppenströme miteinander gekoppelt sind (Interface-Current-Methode). Die in Kapitel 4 und 5 betrachteten Zellen sind so klein, dass sie ohne Unterteilung in Teilgebiete, d. h. ohne Interface-Current-Methode, behandelt wurden. Die Interface-Current-Methode aus Abschnitt 2.3.2.2 ist im Programm

TransRay implementiert und wurde auch für einige Fälle getestet. Dabei stimmten die Ergebnisse mit der in Abschnitt 2.3.2.1 betrachteten Methode (eine Zelle im unendlich ausgedehnten Gitter gleichartiger Zellen) gut überein.

### 2.3.2.1 Berechnung einer Zelle im unendlich ausgedehnten Gitter

Die Berechnung einer Zelle im unendlich ausgedehnten Gitter identischer Zellen induziert Reflexions- oder periodische Randbedingungen an allen Rändern. Für Reflexionsrandbedingungen gilt:

$$\bar{\mathbf{j}}_- = \bar{\mathbf{j}}_+. \quad (126)$$

Wenn dies für die betrachtete Energiegruppe in (125 a) und (125 b) eingesetzt wird, können die ein- und austretenden Ströme eliminiert und die Stoßraten in Abhängigkeit der Quelle ausgedrückt werden:

$$\bar{\boldsymbol{\phi}} = [\mathbf{P}_{VV} + \mathbf{P}_{VS}(\mathbf{I} - \mathbf{P}_{SS})^{-1}\mathbf{P}_{SV}] \bar{\mathbf{Q}}. \quad (127)$$

Dieses Verfahren der Elimination der Gruppenströme wird im Programm TransRay angewandt. Um schließlich den Vektor der Gruppenstoßraten  $\bar{\boldsymbol{\phi}}$  und damit die Flussverteilung in Abhängigkeit von den Gruppenquellen (121) zu erhalten, wird für die Quelle  $\bar{\mathbf{Q}}$  Gleichung (122) eingesetzt, so dass

$$\mathbf{H}\bar{\boldsymbol{\phi}} = \tilde{\mathbf{s}} \quad (128)$$

$$\text{mit } \mathbf{H} = \mathbf{I} - [\mathbf{P}_{VV} + \mathbf{P}_{VS}(\mathbf{I} - \mathbf{P}_{SS})^{-1}\mathbf{P}_{SV}] \mathbf{M} \quad \text{und} \quad \tilde{\mathbf{s}} = [\mathbf{P}_{VV} + \mathbf{P}_{VS}(\mathbf{I} - \mathbf{P}_{SS})^{-1}\mathbf{P}_{SV}] \tilde{\mathbf{s}}.$$

Das lineare Gleichungssystem (128) muss für jede Energiegruppe gelöst werden. Dies geschieht in TransRay mit dem Gauß-Jordan-Verfahren oder iterativ mit dem Jacobi- oder dem Gauß-Seidel-Verfahren. Falls kein Void vorhanden ist, so ist die Matrix  $\mathbf{H}$  unzerlegbar und diagonaldominant. Damit konvergieren das Jacobi- und das Gauß-Seidel-Verfahren [52]. Sind nun Voidgebiete vorhanden, so ist bei Verwendung der Koeffizienten aus Gleichung (80) innerhalb der Matrix  $\mathbf{H}$  die Diagonaldominanz von  $\mathbf{H}$  nicht gewährleistet.

Die eben erwähnten Iterationsverfahren im Programm TransRay gehören zu den inneren Iterationen, da sie innerhalb der äußeren Iteration, der inversen Potenzmethode, ausgeführt werden. Auch bei der inversen Potenzmethode spielt die Unzerlegbarkeit der Iterationsmatrix eine Rolle. Auf die entsprechende Konvergenzaussage wird kurz in Abschnitt 2.4 eingegangen.

### 2.3.2.2 Die Interface-Current-Methode zur Kopplung mehrerer Zellen

V sei das gesamte Gebiet, das berechnet wird. Bei der Interface-Current-Methode wird V in Teilgebiete unterteilt und die Teilgebiete werden miteinander verkoppelt über die ein- und austretenden Neutronenströme jeweils benachbarter Teilgebiete. Es werden nun die austretenden Gruppenströme als eine Funktion der eintretenden Gruppenströme mittels einer Matrix beschrieben. Damit können diese Ströme an jeder Grenzfläche der Teilgebiete berechnet werden und danach die Gruppenflüsse oder andere Größen für das gesamte Gebiet V bestimmt werden.

Indem (122) in (125 a) und (125 b) eingesetzt wird und aus den beiden neuen Gleichungen der Vektor der Gruppenstoßraten  $\vec{\phi}$  eliminiert wird, der sich ergibt zu

$$\vec{\phi} = (\mathbf{I} - \mathbf{P}_{VV}\mathbf{M})^{-1}(\mathbf{P}_{VV}\vec{s} + \mathbf{P}_{VS}\vec{j}_-), \quad (129)$$

wird nach einigen Umformungen erhalten

$$\vec{j}_+ = \mathbf{B}\vec{s} + \mathbf{R}\vec{j}_- \quad (130)$$

$$\text{mit } \mathbf{B} = \mathbf{P}_{SV}[\mathbf{I} + \mathbf{M}(\mathbf{I} - \mathbf{P}_{VV}\mathbf{M})^{-1}\mathbf{P}_{VV}] \quad \text{und} \quad \mathbf{R} = [\mathbf{P}_{SS} + \mathbf{P}_{SV}\mathbf{M}(\mathbf{I} - \mathbf{P}_{VV}\mathbf{M})^{-1}\mathbf{P}_{VS}].$$

$\mathbf{R}$  wird auch als Responsmatrix bezeichnet. Die austretenden Gruppenströme  $\vec{j}_+$  können also aus der Gruppenquelle  $\vec{s}$  (Gleichung (121)) und den eintretenden Gruppenströmen  $\vec{j}_-$  berechnet werden.

Falls das gesamte Gebiet V nun in N Teilgebiete, bzw. N Zellen, unterteilt ist, ergibt sich für jede Zelle eine solche Gleichung:

$$\vec{j}_+^{(i)} = \vec{j}_s^{(i)} + \mathbf{R}^{(i)}\vec{j}_-^{(i)} \quad \text{mit} \quad \vec{j}_s^{(i)} = (\mathbf{B}\vec{s})^{(i)} \quad \text{für} \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (131)$$

Diese Gleichungen können nun für alle Zellen in Blockdiagonalform geschrieben werden

$$\begin{bmatrix} \vec{j}_+^{(1)} \\ \vec{j}_+^{(2)} \\ \vdots \\ \vec{j}_+^{(N)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{R}^{(1)} & & & \\ & \mathbf{R}^{(2)} & 0 & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \mathbf{R}^{(N)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vec{j}_-^{(1)} \\ \vec{j}_-^{(2)} \\ \vdots \\ \vec{j}_-^{(N)} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \vec{j}_s^{(1)} \\ \vec{j}_s^{(2)} \\ \vdots \\ \vec{j}_s^{(N)} \end{bmatrix} \quad (132)$$

oder kompakter

$$\vec{j}_+ = \tilde{\mathbf{R}}\vec{j}_- + \tilde{\mathbf{j}}_s. \quad (133)$$

$\tilde{\mathbf{R}}$  ist die globale Responsmatrix.

Die Gruppenströme, die eine Zelle verlassen, treten in eine andere ein. Zusammen mit den Randbedingungen an der äußeren Oberfläche des gesamten Problemgebietes kann dies mit der Verbindungsmatrix  $\tilde{\mathbf{C}}$  ausgedrückt werden:

$$\tilde{\mathbf{j}}_- = \tilde{\mathbf{C}} \tilde{\mathbf{j}}_+. \quad (134)$$

Falls eine Komponente von  $\tilde{\mathbf{j}}$  auf einem äußeren Rand mit Vakuum Randbedingung liegt, enthält die entsprechende Zeile von  $\tilde{\mathbf{C}}$  nur Nullen, falls sie auf einem mit Reflexionsrandbedingung liegt, steht in der Diagonalen eine 1 und falls sie auf einer inneren Grenzfläche liegt, ist in dieser Zeile ein nicht diagonales Element der Matrix  $\tilde{\mathbf{C}}$  gleich 1. Mittels (134) kann  $\tilde{\mathbf{j}}_-$  aus (133) eliminiert werden

$$\tilde{\mathbf{j}}_+ = \tilde{\mathbf{R}} \tilde{\mathbf{C}} \tilde{\mathbf{j}}_+ + \tilde{\mathbf{j}}_s \quad \text{oder} \quad (135)$$

$$[\mathbf{I} - \tilde{\mathbf{R}} \tilde{\mathbf{C}}] \tilde{\mathbf{j}}_+ = \tilde{\mathbf{j}}_s.$$

Das Gleichungssystem (135) wird im Programm TransRay iterativ gelöst. Je nachdem welches Konvergenzkriterium erfüllt ist, wird das Gauß-Seidel-Verfahren oder das Jacobi-Verfahren angewandt. Für die Iterationsmatrix gelten dieselben Aussagen wie zur Matrix  $\mathbf{H}$  in Gleichung (128).

Wenn (135) für die austretenden Gruppenströme  $\tilde{\mathbf{j}}_+$  gelöst ist, sind mit (134) auch die eintretenden Gruppenströme  $\tilde{\mathbf{j}}_-$  bestimmt und die Gruppenstoßraten in (129) können berechnet werden. Mit diesen Gruppenstoßraten kann die Gruppenquelle der nächst kleineren Energiegruppe berechnet werden. Bei Aufstreuung muss nachiteriert werden.

## 2.4 Berechnung der Neutronengruppenflüsse und des Multiplikationsfaktors $k_\infty$ als Lösungen der Eigenwertgleichung (äußere Iteration)

Für eine Zelle mit spaltbarem Material wird nun, wie in Abschnitt 2.1.4.2 kurz skizziert wurde, die Eigenwertform (49) der Transportgleichung gelöst, um den größten Eigenwert, d. h. den Multiplikationsfaktor  $k_\infty$ , und den dazugehörigen Eigenvektor, die Neutronengruppenflüsse, zu berechnen.

Die Gruppenquelle (36) hat bei isotroper Streuung die Form

$$s_g(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi} \sum_{g' \neq g} \sigma_{gg'}(\vec{r}) \Phi_{g'}(\vec{r}) + \frac{1}{4\pi k} \chi_g(\vec{r}) \sum_{g'} \nu \sigma_{fg'}(\vec{r}) \Phi_{g'}(\vec{r}). \quad (136)$$



Betrachtet werden nun für jede Gruppe  $g$  die innerhalb eines Volumens  $V_i$  gemittelten Streuquerschnitte  $\sigma_{gg'}^{(i)}$ , Produktionsquerschnitte  $v\sigma_{fg}^{(i)}$  und Spaltspektren  $\chi_g^{(i)}$ . Wenn Gleichung (136) über  $V_i$  integriert wird, schreibt sich somit die über  $V_i$  integrierte Gruppenquelle  $s_g^{(i)}$  wie folgt:

$$s_g^{(i)} = \frac{1}{4\pi} \sum_{g' \neq g} \sigma_{gg'}^{(i)} V_i \Phi_{i,g'} + \frac{1}{4\pi k} \chi_g^{(i)} \sum_{g'} v\sigma_{fg'}^{(i)} V_i \Phi_{i,g'}. \quad (137)$$

Werden nun die Vektoren

$$\vec{\mathbf{f}}^{(i)} = (v\sigma_{f1}^{(i)}, \dots, v\sigma_{fn}^{(i)}) \quad (138)$$

definiert für  $i=1, \dots, I$ , wobei  $n$  die Anzahl der Energiegruppen und  $I$  die Anzahl der Volumina sei, so folgt

$$s_g^{(i)} = \frac{V_i}{4\pi} \left( \sum_{g' \neq g} \sigma_{gg'}^{(i)} \Phi_{i,g'} + \frac{1}{k} \chi_g^{(i)} \vec{\mathbf{f}}^{(i)} \cdot \vec{\Phi}^{(i)} \right) \quad (139)$$

mit  $\vec{\Phi}^{(i)} = (\Phi_{i,1}, \dots, \Phi_{i,n})$ . In dieser Gleichung ist  $\vec{\mathbf{f}}^{(i)} \cdot \vec{\Phi}^{(i)}$  die Spaltneutronendichte in  $V_i$ , d. h. die mittlere Anzahl an Spaltneutronen pro Volumen, die im  $i$ -ten Volumen produziert werden.

Wird nun  $\frac{1}{k} \chi_g^{(i)} \vec{\mathbf{f}}^{(i)} \cdot \vec{\Phi}^{(i)}$  für  $i=1, \dots, I$  als feste Größe betrachtet, so kann nach der Methode, die in Abschnitt 2.1.3 rein formal beschrieben wurde, nach den räumlich gemittelten Neutronengruppenflüssen  $\Phi_{i,g}$  aufgelöst werden.

Dies lässt sich formal schreiben in der Form

$$\mathbf{H} \cdot \begin{pmatrix} \Phi_{1,1} \\ \Phi_{2,1} \\ \vdots \\ \Phi_{1,1} \\ \vdots \\ \Phi_{1,n} \\ \vdots \\ \Phi_{1,n} \end{pmatrix} = \frac{1}{k} \begin{pmatrix} \chi_1^{(1)} \vec{\mathbf{f}}^{(1)} \cdot \vec{\Phi}^{(1)} \\ \chi_1^{(2)} \vec{\mathbf{f}}^{(2)} \cdot \vec{\Phi}^{(2)} \\ \vdots \\ \chi_1^{(1)} \vec{\mathbf{f}}^{(1)} \cdot \vec{\Phi}^{(1)} \\ \vdots \\ \chi_n^{(1)} \vec{\mathbf{f}}^{(1)} \cdot \vec{\Phi}^{(1)} \\ \vdots \\ \chi_n^{(1)} \vec{\mathbf{f}}^{(1)} \cdot \vec{\Phi}^{(1)} \end{pmatrix}, \quad (140)$$

wobei  $\mathbf{H}$  eine  $(I \cdot n \times I \cdot n)$  Matrix ist. Analog können eine  $(I \cdot n \times n)$  Matrix  $\mathbf{X}$  mit den Gruppenspaltspektren und eine  $(n \times I \cdot n)$  Matrix  $\vec{\mathbf{F}}$  mit den Produktionsgruppenwirkungsquer-

schnitten definiert werden. Mit dem entsprechenden  $(I \cdot n \times 1)$  Vektor  $\vec{\Phi}$  und der  $(I \cdot n \times I \cdot n)$  Matrix  $\mathbf{F} = \mathbf{X} \cdot \vec{\mathbf{F}}$  kann nun wie in (53) kompakter geschrieben werden:

$$\mathbf{H} \vec{\Phi} = \frac{1}{k} \mathbf{F} \vec{\Phi}. \quad (141)$$

Multiplikation von Gleichung (141) mit der inversen Matrix  $\mathbf{H}^{-1}$  liefert

$$\vec{\Phi} = \frac{1}{k} \mathbf{H}^{-1} \mathbf{F} \vec{\Phi} \quad \text{oder} \quad (142)$$

$$k \vec{\Phi} = \mathbf{H}^{-1} \mathbf{F} \vec{\Phi}.$$

Das heißt, erfüllen  $k$  und  $\vec{\Phi}(k)$  die Eigenwertgleichung (142), so ist  $k$  Eigenwert der  $(I \cdot n \times I \cdot n)$  Matrix  $\mathbf{H}^{-1} \mathbf{F}$  und  $\vec{\Phi}(k)$  der zu  $k$  gehörige Eigenvektor. Die Aufgabe einer Zellrechnung mit dem Programm TransRay besteht nun darin, den größten Eigenwert  $k$ , d. h. den Multiplikationsfaktor  $k_\infty$  der Zelle, und den dazugehörigen Eigenvektor  $\vec{\Phi}(k_\infty)$  zu bestimmen. Dies erfolgt in der äußeren Iteration nach der inversen Potenzmethode [35]. Diese Iteration ( $i = 1, 2, \dots$ ) wird wie folgt durchgeführt:

- 1) Setze Anfangswerte  $\vec{\Phi}_1$  und  $k_1$ .
- 2) Bestimme  $\vec{\Phi}_{i+1} = \frac{1}{k_i} \mathbf{H}^{-1} \mathbf{F} \vec{\Phi}_i$ . (143)
- 3) Setze  $k_{i+1} = k_i \frac{\vec{e} \mathbf{F} \vec{\Phi}_{i+1}}{\vec{e} \mathbf{F} \vec{\Phi}_i}$  mit dem  $(1 \times I \cdot n)$  Vektor  $\vec{e} = (1, \dots, 1)$ .

Als Abbruchkriterium wird gewählt

$$\left| \frac{k_{i+1} - k_i}{k_{i+1}} \right| < \varepsilon_1 \quad \text{und} \quad \max_j \left| \frac{(\vec{\Phi}_{i+1})_j - (\vec{\Phi}_i)_j}{(\vec{\Phi}_{i+1})_j} \right| < \varepsilon_2. \quad (144)$$

Die Schritte 2 und 3 werden wiederholt bis die Abbruchbedingungen (144) erfüllt sind. Konvergieren die Folgen  $(k_i)$  und  $(\vec{\Phi}_i)$ , so sind ihre Grenzwerte das Resultat für  $k_\infty$  und  $\vec{\Phi}(k_\infty)$  einer Zellrechnung mit TransRay.

Der Schritt 2 entspricht der Lösung der Transportgleichung mit einer gegebenen Quelle ohne Spaltung wie in Abschnitt 2.1.3 beschrieben. Dabei wird Gleichung (141), in der auf der rech-

ten Seite der Term  $\frac{1}{k_i} \mathbf{F} \vec{\Phi}_i$  steht, nach dem Vektor  $\vec{\Phi}$  auf der linken Seite aufgelöst, der dann auf  $\vec{\Phi}_{i+1}$  gesetzt wird.

Ist  $\vec{\omega}$  ein  $(1 \times I \cdot n)$  Vektor und wird Gleichung (142) mit  $\vec{\omega} \cdot \mathbf{F}$  multipliziert, so gilt  $\vec{\omega} \mathbf{F} \mathbf{H}^{-1} \mathbf{F} \vec{\Phi} = k \vec{\omega} \mathbf{F} \vec{\Phi}$  oder  $k = \frac{\vec{\omega} \mathbf{F} \mathbf{H}^{-1} \mathbf{F} \vec{\Phi}}{\vec{\omega} \mathbf{F} \vec{\Phi}}$ . In Schritt 3 wird  $k_{i+1}$  auf den Wert  $\frac{\vec{\omega} \mathbf{F} \mathbf{H}^{-1} \mathbf{F} \vec{\Phi}_i}{\vec{\omega} \mathbf{F} \vec{\Phi}_i} = k_i \frac{\vec{\omega} \mathbf{F} \vec{\Phi}_{i+1}}{\vec{\omega} \mathbf{F} \vec{\Phi}_i}$  gesetzt mit  $\vec{\omega} = \vec{e}$ , d. h.

$$k_{i+1} = k_i \frac{\vec{\omega} \mathbf{F} \vec{\Phi}_{i+1}}{\vec{\omega} \mathbf{F} \vec{\Phi}_i} \quad \text{mit} \quad \vec{\omega} = \vec{e} = (1, \dots, 1). \quad (145)$$

Der Vektor  $\vec{\omega}$  ist im Grunde genommen frei wählbar, allerdings hängt die Konvergenzgeschwindigkeit der Folge  $(k_i)$  von  $\vec{\omega}$  ab. Nach Lewis [25] und Nakamura [35] ist die Wahl  $\vec{\omega} = \vec{e} = (1, \dots, 1)$  üblich, wobei Nakamura als Spezialfall die eindimensionale Zweigruppen-Diffusionsgleichung betrachtet. Schnellere Konvergenz wird oftmals erreicht durch die Wahl  $\vec{\omega} = \vec{\Phi}_{i+1}^T$  oder  $\vec{\omega} = (\mathbf{F} \vec{\Phi}_{i+1})^T$ .

Zu Konvergenzeigenschaften von inneren Iterationen, die innerhalb eines jeden Schrittes der äußeren Iteration in TransRay verwendet werden, wurde bereits etwas in Abschnitt 2.3.2 im Anschluss an Gleichung (128) gesagt. Insbesondere wurde der Fall des Vorhandenseins von Voidbereichen betrachtet.

Bei der äußeren Iteration sind die Eigenschaften der Matrix  $\mathbf{H}^{-1} \mathbf{F}$  aus der Eigenwertgleichung (142) von Bedeutung. Für die in TransRay betrachteten Zellrechnungen, die nach den beiden Methoden aus Abschnitt 2.3.2 ausgeführt werden, ist die quadratische Matrix  $\mathbf{H}^{-1} \mathbf{F}$  unzerlegbar. Im allgemeinen ist  $\mathbf{H}^{-1} \mathbf{F}$  auch nichtnegativ. Für die Matrix  $\mathbf{H}^{-1} \mathbf{F}$  ist demnach folgende Aussage aus dem Satz von Perron und Frobenius zuständig: *Eine nichtnegative quadratische Matrix, die unzerlegbar ist, hat einen positiven reellen Eigenwert, der gleich dem Spektralradius der Matrix ist. Weiterhin gehört zu diesem Eigenwert ein positiver Eigenvektor* [52]. Die äußere Iteration nach der inversen Potenzmethode liefert aber gerade den größten Eigenwert der Matrix  $\mathbf{H}^{-1} \mathbf{F}$  und den dazugehörigen Eigenvektor. Erfüllt also die Matrix  $\mathbf{H}^{-1} \mathbf{F}$  aus (142) die Eigenschaften des Satzes von Perron und Frobenius, so garantiert dieser Satz die Existenz eines größten positiven Eigenwerts und eines dazugehörigen positiven Eigenvektors, d. h. eine positive Fundamentalmode des Flusses, was aus physikalischen Gründen zu fordern ist.

## 2.5 Anwendung: Berechnung effektiver Neutronengruppenwirkungsquerschnitte für die Zelle

In der Einleitung (Seite 8) wurde die Kette der klassischen Neutronentransportberechnung des gesamten Reaktorkerns in drei Stufen eingeteilt. Werden ausschließlich Gruppendaten verwendet, so gilt: In Stufe 1 werden die Vielgruppendaten für alle Energiegruppen erzeugt. In Stufe 2 werden mit diesen Vielgruppendaten mit Zellrechnungen Weniggruppendaten erzeugt. In Stufe 3 wird schließlich mit den aus der Stufe 2 gelieferten Weniggruppendaten die Neutronenfeldberechnung für den gesamten Reaktorkern ausgeführt.

Nach Abschnitt 2.1.2 müssen in Stufe 1 effektive Wirkungsquerschnitte für viele Gruppen, sogenannte Vielgruppenwirkungsquerschnitte, nach den Mittelungsvorschriften (20), (21) und (22) berechnet werden. Mit diesen Querschnitten wird dann in der zweiten Stufe eine Zellrechnung mit dem Programm TransRay ausgeführt. Dabei werden in TransRay die Methoden angewandt, deren mathematische Formulierung in den vorangehenden Abschnitten des Kapitels 2 beschrieben wurde. Nach Abschnitt 2.4 sind die Neutronengruppenflüsse und der Multiplikationsfaktor  $k_{\infty}$  der Zelle das Ergebnis dieser Rechnung.

Als Anwendung des in Abschnitt 2.4 berechneten Neutronenfeldes wird in diesem Abschnitt gezeigt, wie aus den berechneten Gruppenflüssen und den makroskopischen Vielgruppenwirkungsquerschnitten effektive Wirkungsquerschnitte für wenige Gruppen, sogenannte Weniggruppenquerschnitte, für die Zelle berechnet werden.

Zuerst wird die Mittelungsvorschrift für die Weniggruppenquerschnitte formuliert. Als Beispiel werden die Zweigruppenquerschnitte betrachtet, die das Programm DYN3D [18] als Eingangsdaten benötigt. Das Programm berechnet in der dritten Stufe die Flussverteilung im gesamten Reaktorkern. Für so eine Rechnung wird der Reaktorkern in ein grobes Raumgitter unterteilt. Als Eingangsdaten benötigt DYN3D über jedes Raumelement (Node) gemittelte Zweigruppenwirkungsquerschnitte für Neutronen. Das Programm setzt voraus, dass die Wirkungsquerschnitte, die den Transport der Neutronen in einem Node bestimmen, innerhalb des Nodes und innerhalb einer Energiegruppe konstant sind, d. h., dass für beide Energiegruppen  $G$  und für alle Nodes  $V$  Tabellen effektiver Neutronengruppenwirkungsquerschnitte der Art

$$\sigma_{V,G}^r \quad (146)$$

für alle Reaktionstypen  $r$  und für alle Materialzusammensetzungen vorliegen.

Mit dem im Ort und in der Energie diskretisierten Rechenmodell (Unterteilung des Reaktorkerns in Nodes  $V$  und der Energie in die Gruppen  $G$ ) soll das Verhalten des Neutronenfeldes im eigentlich vorhandenen, nichtdiskretisierten Reaktorkern möglichst gut be-

geschrieben werden. Wie für die Vielgruppenquerschnitte kann daraus abgeleitet werden, dass die Zweigruppenquerschnitte aus (146) mit denselben Mittelungsvorschriften (20), (21) und (22) berechnet werden müssen. Die Vorschriften für die Mittelungen über die Nodes V und über die Energiegruppen G für den totalen Wirkungsquerschnitt, den Streuquerschnitt und den Produktionsquerschnitt lauten demnach

$$\sigma_{V,G} = \frac{\int_V dV \int_G dE \sigma(\vec{r}, E) \int d\Omega \Psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})}{\int_V dV \int_G dE \int d\Omega \Psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})}, \quad (147)$$

$$\sigma_{V,G' \rightarrow G} = \frac{\int_V dV \int_G dE \int_{G'} dE' \sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E) \int d\Omega' \Psi(\vec{r}, E', \Omega')}{\int_V dV \int_{G'} dE' \int d\Omega' \Psi(\vec{r}, E', \Omega')}, \quad (148)$$

$$\chi_{V,G} \cdot \nu \sigma_{fV,G} = (\chi \nu \sigma_f)_{V,GG'} = \frac{\int_V dV \int_G dE \chi(\vec{r}, E) \int_{G'} dE' \nu \sigma_f(\vec{r}, E') \int d\Omega' \Psi(\vec{r}, E', \Omega')}{\int_V dV \int_{G'} dE' \int d\Omega' \Psi(\vec{r}, E', \Omega')}. \quad (149)$$

Es wird nun als Beispiel die Mittelungsvorschrift (147) betrachtet. Im Nenner steht der über das Node V und die Energiegruppe G integrierte Neutronenfluss  $\Phi_{V,G} \equiv \int_V dV \int_G dE \int d\Omega \Psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ . Im Zähler steht die über das Node V und die Energiegruppe

G integrierte totale Reaktionsrate  $R \equiv \int_V dV \int_G dE \sigma(\vec{r}, E) \int d\Omega \Psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ . Daraus folgt, dass

$\sigma_{V,G} \cdot \Phi_{V,G} = R$  ist. Demnach garantiert die Mittelungsvorschrift (147), dass mit dem effektiven Querschnitt  $\sigma_{V,G}$  und dem Gruppenfluss  $\Phi_{V,G}$ , die in der Zellrechnung berechnet werden, die Reaktionsrate im Node V innerhalb der Energiegruppe G erhalten bleibt. Dadurch wird gewährleistet, dass die Neutronen-Reaktionsrate in V und G in der nachfolgenden Berechnungsstufe 3 gut approximiert wird. Die Berechnung der  $\sigma_{V,G}$  erfolgt oftmals in mehreren Schritten, wobei die Mittelung analog zu Gleichung (147) erfolgt, d. h., in jedem Schritt einer Zellrechnung über die Zelle V bleibt die Reaktionsrate in V und G erhalten.

Für die Zellrechnung mit TransRay wird die Zelle V in die Teilvolumina  $v_i$  unterteilt. Für jedes  $v_i$  werden in der ersten Stufe die Vielgruppenwirkungsquerschnitte nach den Vorschriften (20), (21) und (22) berechnet. Das Ergebnis der Zellrechnung mit TransRay sind nach Abschnitt 2.4 die Gruppenflüsse

$$\Phi_{i,g} = \int_{v_i} dV \int_g dE \Phi(\vec{r}, E). \quad (150)$$

Mit diesen Gruppenflüssen und den makroskopischen Vielgruppenwirkungsquerschnitten können schließlich die Mittelungen nach den Gleichungen (147), (148) und (149) ausgeführt werden

$$\sigma_{V,G} = \frac{\sum_{v_i \in V} \sum_{g \in G} \sigma_{i,g} \Phi_{i,g}}{\sum_{v_i \in V} \sum_{g \in G} \Phi_{i,g}}, \quad (151)$$

$$\sigma_{V,GG'} = \frac{\sum_{v_i \in V} \sum_{g \in G} \sum_{g' \in G'} \sigma_{i,gg'} \Phi_{i,g'}}{\sum_{v_i \in V} \sum_{g' \in G'} \Phi_{i,g'}}, \quad (152)$$

$$(\chi \nu \sigma_f)_{V,GG'} = \frac{\sum_{v_i \in V} \left( \sum_{g \in G} \chi_{i,g} \right) \cdot \left( \sum_{g' \in G'} (\nu \sigma_f)_{i,g'} \Phi_{i,g'} \right)}{\sum_{v_i \in V} \sum_{g' \in G'} \Phi_{i,g'}}. \quad (153)$$

### 3 Entwicklung des Programms TransRay

#### 3.1 Einleitung: Geometrieingabe, Datenaufbereitung, Ray-Tracing-Methode

Um die detaillierte Neutronenflussverteilung in Zellen, d. h. in Anordnungen von Brennelementzellen, zu berechnen, wurde das Neutronentransport- und Zellprogramm TransRay geschrieben. Dafür wurden nach den in Kapitel 2 formulierten Berechnungsmethoden numerische Lösungsverfahren entwickelt und die Algorithmen für TransRay implementiert.

Um den Aufwand für die Entwicklung von TransRay zu reduzieren, wurde für den Geometrieaufbereitungsteil das Geometriemodul des Monte-Carlo-Codes MORSE-CGA [36] gewählt. Das Geometriemodul ist hinreichend allgemein, effektiv hinsichtlich Rechenzeit und sehr gut ausgetestet.

Die Simulation eines Neutronenfluges wurde für die Ray-Tracing-Methode angepasst, so dass die notwendigen Daten erhalten werden, um die Stoßwahrscheinlichkeitsmatrizen (siehe Gleichung (113) und (114) in 2D und Gleichungen (107) und (108) in 3D) berechnen zu können. Das heißt erstens, dass in TransRay die Geometrie analog zum Geometrie-Input von MORSE-CGA eingegeben wird. Zweitens müssen die nötigen Daten beim Ray-Tracing aus den entsprechenden Prozeduren von MORSE-CGA entnommen werden: Im Gegensatz zur Monte-Carlo-Methode, bei der das Schicksal vieler einzelner Neutronen möglichst realistisch in alle Bewegungsrichtungen der Neutronen durchgespielt wird, wird bei der deterministischen Ray-Tracing-Methode (siehe Abschnitt 2.3.1) eine numerische Integration entlang gerader Linien durch die Zelle ausgeführt. Dabei wird für jede Bewegungsrichtung der Neutronen  $\vec{\Omega}$ , die gewählt wird für die Diskretisierung innerhalb der numerischen Integration, eine Schar von parallelen Linien durch die Zelle gezogen (siehe Abb. 3 in 2D und Abb. 2 in 3D). Das heißt, in TransRay wird für jede Linie ein Neutron gestartet, das sich geradlinig und stoßfrei durch die Geometrie bewegt. Für jede Linie werden dann die nötigen Daten aus dem Programm MORSE-CGA entnommen, d. h. die Nummern der Regionen, die durchquert werden, und die Weglängen durch die Regionen.

Zuerst wurde so das zweidimensionale Ray-Tracing entwickelt, indem alle Daten auf einem Feld abgespeichert wurden. Da dies beim dreidimensionalen Ray-Tracing zu Speicherproblemen führt, werden hier nach einer gewissen Anzahl von Linien die Daten sofort zur anteiligen Berechnung der Stoßwahrscheinlichkeitsmatrizen verwertet. So entstanden eine zweidimensionale und eine dreidimensionale Version des Programms, TranRay2D und TransRay3D.

Für die Transportrechnung benötigt TransRay makroskopische Gruppenwirkungsquerschnitte. Die notwendige Datenaufbereitung dieser Querschnitte erfolgt durch konventionelle Programme. Für die TransRay-Rechnungen in dieser Arbeit wurden zwei Varianten gewählt:

- 1) Die mikroskopischen Wirkungsquerschnitte für die jeweiligen Isotope wurden mit dem Programm NJOY [27] erzeugt aus der Datenbibliothek ENDF/B-VI [28]. Unter Einbeziehung der Kerndichten der unterschiedlichen Materialien wurden dann die makroskopischen Wirkungsquerschnitte mit dem Programm TRANSX [26] bestimmt.
- 2) Es wurden die im Programm HELIOS [51] aufbereiteten makroskopischen Wirkungsquerschnitte verwendet, mit denen HELIOS letztendlich auch die Transportrechnung ausführt.

Bei der Berechnung der Stoßwahrscheinlichkeitsmatrizen im Zweidimensionalen (siehe Gleichungen (113) und (114)) muss für jede zu bestimmende Matrixkomponente ein Zweifachintegral numerisch ausgeführt werden. Die beiden Integrationsvariablen sind der Winkel  $\omega$ , der die Richtung der Neutronenbewegung beschreibt, und die Ortsvariable  $\xi$ , die senkrecht zur Neutronenbewegung steht.

Zur Quadratur wird eine deterministische Methode, die Ray-Tracing-Methode verwendet. Bei diesem Verfahren werden alle Wahrscheinlichkeiten gleichzeitig berechnet, indem für jeden Wert  $\omega$  eine Schar von parallelen Linien durch die gesamte Zelle gezogen wird und für jede Linie der Beitrag zu all den Stoß- und Entweichwahrscheinlichkeiten berechnet wird, deren entsprechenden Gebiete und Randkurven die Linie durchquert.

Falls also im Zweidimensionalen in der Quadratur  $n_\omega$  Winkel und für jeden Winkel  $n_\xi$  Werte für die Ortsvariable gewählt werden, müssen insgesamt  $n_\omega \cdot n_\xi$  Strahlen ausgewertet werden. Beim dreidimensionalen Ray-Tracing kommen als Integrationsvariablen hinzu der Polarwinkel  $\theta$  und eine zweite Ortsvariable  $\eta$ . Falls also zusätzlich  $n_\theta$  Winkel und  $n_\eta$  Werte für die Diskretisierung der Ortsvariablen  $\eta$  verwendet werden, müssen insgesamt  $n_\omega \cdot n_\theta \cdot n_\xi \cdot n_\eta$  Strahlen betrachtet werden. Falls  $n_\omega = n_\theta$  und  $n_\xi = n_\eta$ , ist also bei  $n$  Strahlen im Zweidimensionalen die Anzahl der Strahlen für die entsprechende dreidimensionale Rechnung gleich  $n^2$ .

Zusätzlich wird die Anzahl der Teilvolumina und Randflächensegmente bei einer entsprechenden dreidimensionalen Rechnung in der Regel höher sein und damit sind auch die Stoßwahrscheinlichkeitsmatrizen größer. Der Übergang vom zwei- zum dreidimensionalen Ray-Tracing führt also zu einer erheblichen Rechenzeiterhöhung.

Allgemein benötigt bei der Verwendung der Stoßwahrscheinlichkeitsmethode zur Berechnung der Zellen das Ray-Tracing zur Ermittlung der Stoßwahrscheinlichkeiten mit gro-



ßem Abstand die meiste Rechenzeit. Glücklicherweise eignet sich innerhalb der Stoßwahrscheinlichkeitsmethode das Ray-Tracing am besten zur Parallelisierung. Da mit TransRay in Kapitel 4 und 5 kleine Zellen untersucht werden, wurde im Rahmen dieser Arbeit vorerst nur die dreidimensionale Version TransRay3D parallelisiert. Dabei berechnet jeder Prozessor einen Winkelbereich des Azimutalwinkels  $\omega$ . Da  $\omega$  die äußerste Variable der Vierfachintegrale ist, bedeutet dies, dass jeder Prozessor einen Teil von jedem Integral bestimmt und die Teile dann aufsummiert werden. Die Rechenzeiten für serielle Rechnungen wurden somit bei entsprechender paralleler Rechnung auf demselben Rechner drastisch reduziert. Mit der Parallelisierung der Ray-Tracing-Methode beschäftigten sich unter anderem auch Fuentes und Turinsky [13] und Slater und Vujic [46].

### 3.2 Struktur von TransRay2D und TransRay3D

Die Grobstruktur beider Programmversionen ist in Abbildung 4 gezeigt. Zur Eingabe der Geometrie und zur Gewinnung der Daten, die zur Berechnung der Stoßwahrscheinlichkeitsmatrizen beim Ray-Tracing nötig sind, wurde das Monte-Carlo-Programm MORSE-CGA verwendet (CGA = combinatorial geometry with array capability). Wie in diesem Programm ist in TransRay2D und TransRay3D *MORSER* die Hauptprozedur. *MORSER* ruft *MORSE* auf, die Prozedur, die in MORSE-CGA den gesamten Input und das Teilchenspiel beinhaltet. Für TransRay wurde der Geometrie-Input übernommen und das Teilchenspiel der Ray-Tracing-Methode angepasst, wie es in Abschnitt 3.1 skizziert wurde.

Die in TransRay zu behandelnden Geometrien ergaben sich aus der Aufgabenstellung, als Zellen Anordnungen von Brennelementzellen zu untersuchen. Daher wurde TransRay vorerst für in der x-y-Ebene unendliche Gitter geschrieben, und zwar für rechteckige Gitter. Das heißt, im Zweidimensionalen ist der Rand einer Zelle ein Rechteck und im Dreidimensionalen die Oberfläche eines Quaders. Innerhalb des Rechtecks beziehungsweise Quaders sind beliebige geometrische Anordnungen zulässig.

Nach Abschnitt 2.3.2 sind zwei verschiedene Anordnungen von Zellen möglich: Bei der ersten Variante wird nach Abschnitt 2.3.2.1 eine einzelne Zelle im unendlichen Gitter gleicher Zellen betrachtet, d. h., es wird nur die eine Zelle berechnet. Die zweite Variante, die Kopplung mehrerer Zellen mit der Interface-Current-Methode nach Abschnitt 2.3.2.2, umfasst im Zwei- und Dreidimensionalen in der x-y-Ebene die acht unmittelbar benachbarten Zellen. Im Dreidimensionalen können dabei mehrere Zellen beliebiger Höhe in z-Richtung gekoppelt werden.

Es sind jeweils unterschiedliche Randbedingungen möglich. Bei der ersten Variante sind an allen Seitenflächen der Zelle Reflexionsrandbedingungen vorgesehen. Die zweite Variante kann an den Randflächen in der x-y-Ebene mit periodischen und in der z-Richtung mit Vakuum- oder Reflexionsrandbedingungen gerechnet werden.

Bei den in Kapitel 4 und 5 betrachteten Fällen haben die Zellen „relativ wenig“ Raumelemente. Daher konnten alle Fälle mit der ersten Variante berechnet werden, d. h. als eine Zelle im unendlichen Gitter gleichartiger Zellen. Für einige dieser Fälle wurde die zweite Variante (Interface-Current-Methode) getestet und die Ergebnisse stimmten gut mit denen der ersten Variante überein. Allerdings ist die zweite Variante in TransRay noch nicht ausreichend getestet. Ihr Anwendungsgebiet liegt mehr bei der Berechnung von Geometrien mit „vielen“ Raumelementen.

Die Hauptprozedur *MORSER* ruft vier Prozeduren auf. Bei TransRay3D wird statt *MORSE* entweder eine Version *MORSE0* oder *MORSE1* aufgerufen, wobei *MORSE1* bei der Berechnung Symmetrien in der Anordnung der Brennelementzellen ausnutzt, wie zum Beispiel bei der Berechnung eines gesamten Brennelements mit oder ohne Wasserspalt. Im Weiteren werden beide Varianten unter dem Namen *MORSE* zusammengefasst. In der Prozedur *geometry* werden noch einige Informationen zur Zellgeometrie eingelesen. Die Prozedur *groupflux* bestimmt die Neutronengruppenflüsse und den Multiplikationsfaktor  $k_{\infty}$  mittels des in Abschnitt 2.4 beschriebenen Iterationsverfahrens. Die Prozedur *meancross* führt dann die in Abschnitt 2.5 beschriebene Querschnittsmittelung aus.

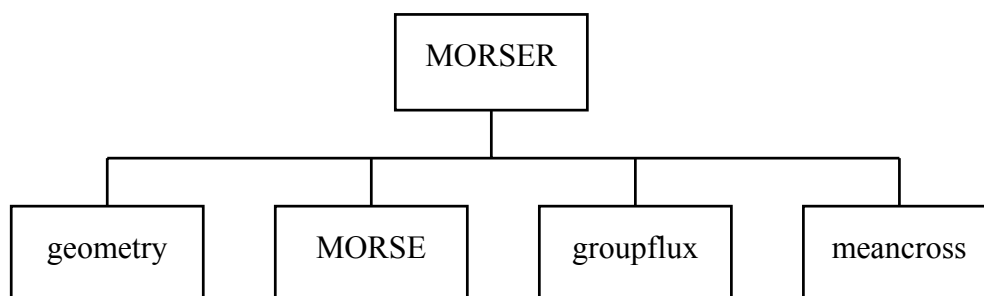


Abbildung 4: Hauptprozedur *MORSER* in TransRay mit aufgerufenen Prozeduren

In der Prozedur *MORSE* findet die Geometrieaufbereitung, das Ray-Tracing und die Berechnung der Stoßwahrscheinlichkeitsmatrizen statt. Falls nur eine Zelle im unendlich ausgedehnten Gitter nach Abschnitt 2.3.2.1 betrachtet wird, werden die Neutronengruppenflüsse in der Prozedur *groupflux* aus Gleichung (128) berechnet. Bei der Kopplung mehrerer Zellen nach Abschnitt 2.3.2.2 werden die Gruppenflüsse in *groupflux* aus Gleichung (135) über die Ströme berechnet. Daher werden in *MORSE* nach der Berechnung der Stoßwahrscheinlich-

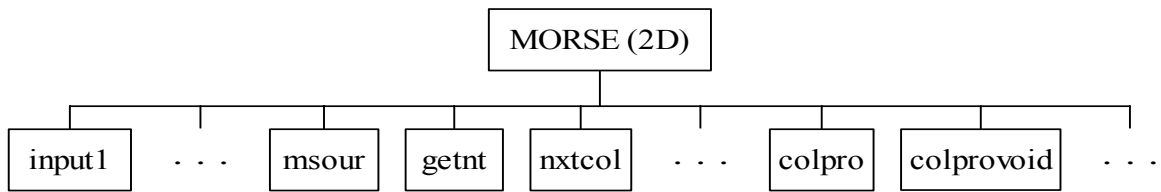


Abbildung 5: Prozedur *MORSE* in TransRay2D mit aufgerufenen Prozeduren

keitsmatrizen die Matrizen bestimmt, die in den darauf folgenden Gleichungen betrachtet werden, wie zum Beispiel die globale Responsmatrix aus Gleichung (132) bzw. (133) bei der Kopplung mehrerer Zellen. In TransRay3D werden im Falle der Ausnutzung von Symmetrien in der Anordnung der Brennelementzellen nur Teile der Stoßwahrscheinlichkeitsmatrizen berechnet und die Responsmatrix erst in *groupflux* bestimmt.

Die Prozeduren *input1*, *msour*, *getnt* und *nxtcol* in TransRay (siehe Abbildung 5, bzw. Abbildung 6 für TransRay3D) sind Prozeduren aus MORSE-CGA. *input1* bereitet die Geometriedaten auf. In *msour* werden die Startparameter für die Neutronen festgelegt. In TransRay werden die Startpunkte so gewählt, dass sie für jeden Wert in der Winkel- und Ortsdiskretisierung beim Ray-Tracing auf der Ebene (im Zweidimensionalen auf der Geraden) senkrecht zur Neutronenbewegung liegen (siehe Abb. 2, S. 48 in 3D und Abb. 3, S. 50 in 2D). In *getnt* wird dann sukzessive ein Neutron nach dem anderen aus dem Neutronensatz geholt und in *nxtcol* wird das „Schicksal“ des stoßfrei fliegenden Neutrons durchgespielt, bis alle Neutronen behandelt wurden. Dabei wird jedes Neutron durch die Zelle geschickt, ohne seine Richtung zu ändern, und die benötigten Daten der durchquerten Regionen der Zelle werden entnommen, Regionnummer und Weglänge durch die Region. Nachdem sich ein Neutron vollständig durch die Zelle bewegt hat, verschwindet es.

Auf diese Art und Weise wird für jeden Wert in der Diskretisierung beim Ray-Tracing eine Schar von parallelen Linien durch die Zelle gezogen. In *colpro* beziehungsweise in *colprovoid*, falls Void in irgendeiner Region ist, werden die Stoßwahrscheinlichkeitsmatrizen berechnet.

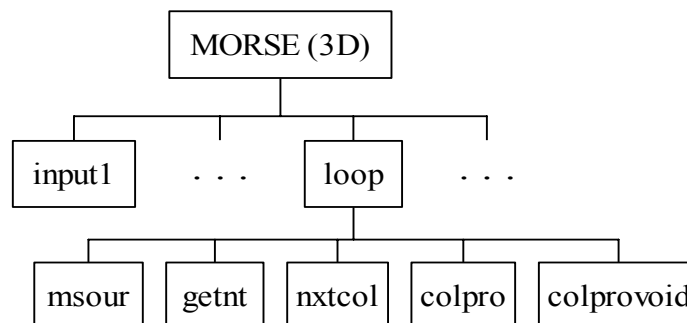


Abbildung 6: Prozedur *MORSE* in TransRay3D mit aufgerufenen Prozeduren

Die Prozeduren *msour*, *getnt*, *nxtcol*, *colpro* und *colprovoid* sind in TransRay3D in der Prozedur *loop* zusammengefasst (siehe Abbildung 6). Die Prozedur *loop* ist parallelisiert, so dass jeder Prozessor einen Anteil des Azimutalwinkels zur Berechnung der Stoßwahrscheinlichkeitsmatrizen behandelt.

In TransRay2D werden alle zur Berechnung der Stoßwahrscheinlichkeitsmatrizen benötigten Daten auf ein Feld geschrieben, während in TransRay3D aus Speicherplatzgründen immer nach einer bestimmten Anzahl von Strahlen die entsprechenden Beiträge zu den Stoßwahrscheinlichkeitsmatrizen berechnet werden. Diese Vorgehensweise wird auch in TransRay2D notwendig sein, wenn größere Geometrien behandelt werden sollen.

Nach dem Ray-Tracing in der Prozedur *MORSE* werden die Neutronengruppenflüsse und der Multiplikationsfaktor  $k_{\infty}$  der Zelle in der Prozedur *groupflux* (siehe Abbildung 4) nach der in Abschnitt 2.4 beschriebenen äußeren Iteration berechnet. Diese Prozedur (siehe Abbildung 7) bestimmt zunächst im Fall der Kopplung mehrerer Zellen in der Prozedur *connect* die Verbindungsmatrix aus Gleichung (134) und führt in *outeriter* die äußere Iteration aus. Falls die Gruppenflüsse iterativ bestimmt werden, wird in der Prozedur *convcheck* für alle Energiegruppen geprüft, ob die Konvergenzbedingungen für das Gauß-Seidel-Verfahren erfüllt sind, und falls nicht, ob die des Jacobi-Verfahrens erfüllt sind. Mit Startwerten für die Gruppenflüsse und den Eigenwert  $k$  (siehe Schritt 1 in (143), Seite 57) beginnt dann die äußere Iteration. Je nachdem werden dann die Flüsse in der Prozedur *inneriter* iterativ berechnet oder in der Prozedur *oneflux* mit dem Gauß-Jordan-Verfahren. In der Prozedur *kvalue* wird der nächste Wert für den Eigenwert berechnet.

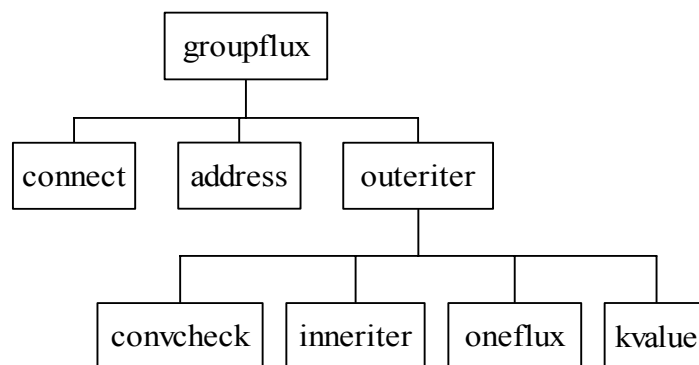


Abbildung 7: Prozedur *groupflux* in TransRay zur Bestimmung der Gruppenflüsse mit aufgerufenen Prozeduren

### 3.3 Die Äußere Iteration in TransRay

Nach dem Ray-Tracing werden in der Prozedur *outeriter* die Gruppenflüsse und der Multiplikationsfaktor  $k_{\infty}$  der Zelle berechnet. Das dafür angewandte Iterationsverfahren besteht aus der äußeren Iteration nach Abschnitt 2.4 und den inneren Iterationen. Die äußere Iteration wird nach der inversen Potenzmethode ausgeführt. Alle Iterationen innerhalb eines äußeren Iterationsschrittes sind die inneren Iterationen, wie zum Beispiel das in Abschnitt 3.1 erwähnte Gauß-Seidel-Verfahren zur Berechnung der Gruppenflüsse innerhalb einer Energiegruppe.

Der Ablauf der äußeren Iteration in TransRay (siehe auch Seite 57) ist in Abbildung 8 in Form eines Flussdiagramms beschrieben: Mit einem Startwert  $k(1)$  für den Eigenwert und  $\Phi(1)$  für die Gruppenflüsse (Schritt 1 in (143)) startet die äußere Iteration und die Gruppen-

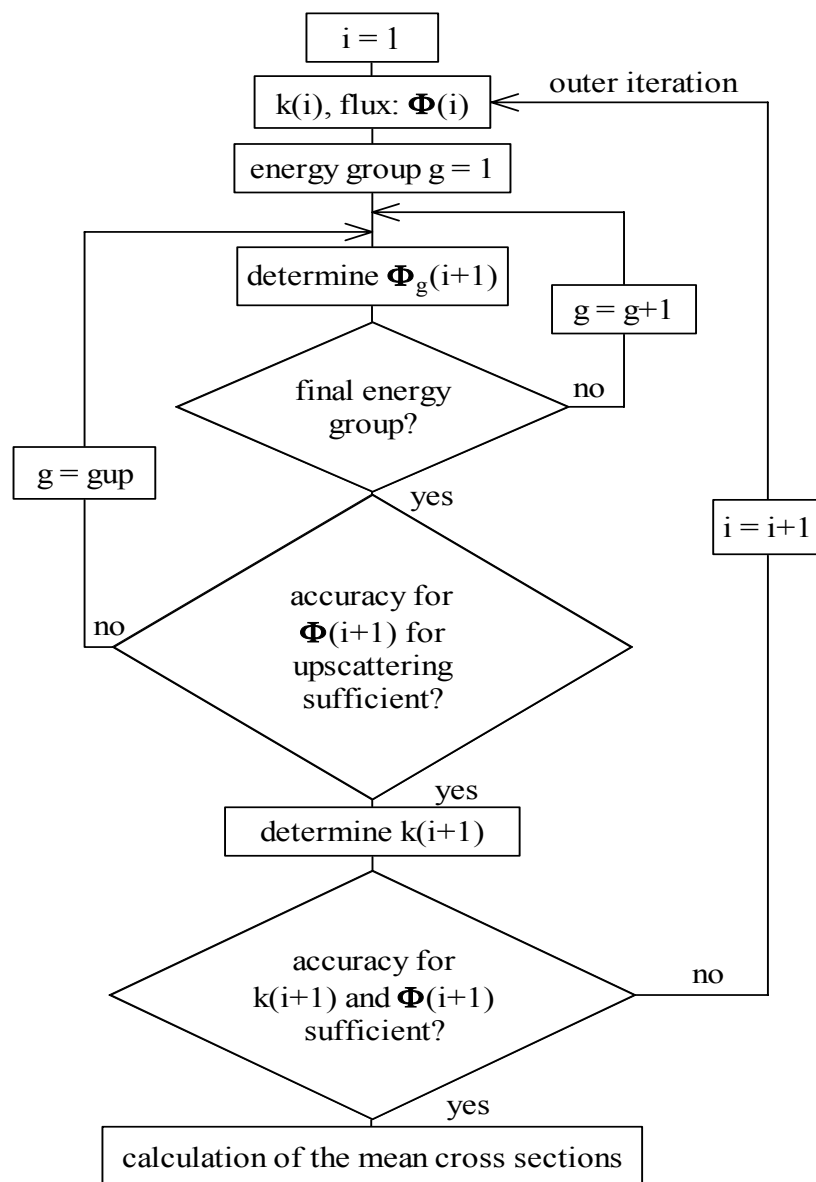


Abbildung 8: Flussdiagramm der äußeren Iteration in der Prozedur *outeriter* in TransRay

flüsse werden sukzessiv von der ersten bis zur letzten Energiegruppe berechnet (siehe auch Gleichung (46)). Falls Aufstreuung vorhanden ist, wird beim Überschreiten einer bestimmten Toleranz nachiteriert mit dem Gauß-Seidel-Verfahren nach Gleichung (47). Dabei werden nochmals die Gruppenflüsse von der kleinsten Energiegruppe  $g_{up}$ , bis zu der Aufstreuung existiert, bis zur letzten Energiegruppe berechnet. Wenn die Genauigkeit für die Gruppenflüsse erreicht ist, wird der nächste Wert  $k^{(i+1)}$  für den Eigenwert nach Schritt 3 in (143) berechnet. Falls dann die Genauigkeiten für  $k^{(i+1)}$  und  $\Phi^{(i+1)}$  in der äußeren Iteration, d. h. die Abbruchbedingungen (144), erfüllt sind, können mit den berechneten Gruppenflüssen solche Größen wie über die Zelle gemittelte Querschnitte nach Gleichung (151), (152) und (153) in Abschnitt 2.5 bestimmt werden, ansonsten muss nochmals iteriert werden. Jede Iteration wird abgebrochen, falls eine bestimmte Anzahl an Iterationen erreicht ist.

## 4 Verifikation des Programms TransRay

In der Einleitung wurden die beiden Aufgaben dieser Arbeit formuliert. Bisher wurde die erste Aufgabe behandelt, d. h. die Entwicklung des zwei- und dreidimensionalen Neutronen-transport- und Zellprogramms TransRay. In diesem Kapitel wird TransRay im Vergleich zu den Programmen HELIOS [51] und MCNP [7] verifiziert. Dazu wird zunächst die Notwendigkeit erläutert, eine möglichst gemeinsame Datengrundlage makroskopischer Wirkungsquerschnitte für die Zellrechnungen zu verwenden. Im anschließenden Kapitel 5 wird die zweite Aufgabe behandelt, d. h. die Bewertung der Notwendigkeit einer dreidimensionalen Datenaufbereitung gemittelter Zweigruppenquerschnitte.

Als Zellen werden die in der Einleitung beschriebenen Anordnungen von Brenn- und Regelstabzellen untersucht. In allen Fällen werden der Multiplikationsfaktor  $k_{\infty}$  der Zelle und die über die Zelle gemittelten makroskopischen Zweigruppenwirkungsquerschnitte der schnellen und thermischen Gruppe berechnet, und zwar der totale, die Absorptions-, Streu- und Produktionsquerschnitte:  $\sigma_{\text{total}1}$ ,  $\sigma_{\text{total}2}$ ,  $\sigma_{\text{abs}1}$ ,  $\sigma_{\text{abs}2}$ ,  $\sigma_{1 \rightarrow 1}$ ,  $\sigma_{1 \rightarrow 2}$ ,  $\sigma_{2 \rightarrow 1}$ ,  $\sigma_{2 \rightarrow 2}$ ,  $\nu\sigma_{f1}$  und  $\nu\sigma_{f2}$  (1: schnelle Gruppe, 2: thermische Gruppe). Die Gruppengrenze wird bei 3.9279 eV gewählt. Die Ergebnisse für die gemittelten Zweigruppenquerschnitte sind selbstverständlich abhängig von der Wahl der Gruppengrenze. Diese Abhängigkeit wurde nicht untersucht.

Die TransRay-Ergebnisse werden verglichen mit den Ergebnissen der Programme HELIOS und MCNP. Im Programm HELIOS, das das 2D-Ray-Tracing verwendet, sind die Querschnitte in internen Vielgruppenbibliotheken enthalten, die aus der Datenbibliothek ENDF/B-VI [28] erzeugt werden. Das dreidimensionale Monte-Carlo-Programm MCNP verwendet neben ENDF/B-VI auch andere Bibliotheken. Die Aufbereitung der makroskopischen Gruppenwirkungsquerschnitte für TransRay erfolgte zunächst mit der Programmkette NJOY [27] und TRANSX [26] aus der Datenbibliothek ENDF/B-VI. Die mit TransRay erzielten Ergebnisse unterschieden sich allerdings zu sehr von den Ergebnissen, die die Programme HELIOS und MCNP lieferten. Daher wurden für die weiteren TransRay-Rechnungen als Eingangsdaten die makroskopischen Gruppenwirkungsquerschnitte aus HELIOS verwendet. Damit war auch ein direkter Vergleich der beiden Programme HELIOS und TransRay auf Grundlage einheitlicher Daten möglich. Die Ergebnisse der drei Programme HELIOS, MCNP und TransRay zeigten nun eine gute Übereinstimmung.

Auf allgemeine Aussagen zur Aufbereitung der makroskopischen Gruppenwirkungsquerschnitte für TransRay wird kurz in Abschnitt 4.1 eingegangen. Dabei werden auch die Datenaufbereitungen mit der Programmkette NJOY-TRANSX und mit dem Programm HELIOS betrachtet.

In Abschnitt 4.2 werden die 2D- und 3D-Version des Programms TransRay an einem zwei-dimensionalen Problem überprüft, am Babcock und Wilcox UO<sub>2</sub> Kritikalitäts-Benchmark [45]. Diese Zellrechnungen ergaben eine erste Einschätzung über die Korrektheit von TransRay, Konvergenz und Rechenzeiten. In Abschnitt 4.2.1 sind für diese TransRay-Rechnungen, die auf einem Rechnersystem von Hewlett-Packard ausgeführt wurden, die Rechenzeiten angegeben. Weiterhin wird für diese Rechnungen das Konvergenzverhalten des Multiplikationsfaktors  $k_{\infty}$  und der gemittelten Zweigruppenwirkungsquerschnitte bei Erhöhung der Anzahl der Strahlen beim Ray-Tracing gezeigt.

Die folgenden TransRay-Rechnungen, für die immer dieselbe 47-Gruppenstruktur der makroskopischen Querschnitte verwendet wurde (Gruppengrenzen siehe Anhang A - 1), wurden auf einem Linux-Cluster seriell ausgeführt. Obwohl die 3D-Rechnungen auf dem HP-Rechner, der 8 Prozessoren hatte, parallel ausgeführt wurden, waren die Rechenzeiten auf dem Cluster kürzer, da dessen Prozessoren ungefähr 12mal schneller waren. Nichtsdestoweniger ist eine Parallelisierung von TransRay3D sinnvoll aufgrund der langen Rechenzeiten für das dreidimensionale Ray-Tracing.

Für das Babcock und Wilcox UO<sub>2</sub> Kritikalitäts-Benchmark werden in Abschnitt 4.2.2 die makroskopischen Querschnitte zum einen mit der Programmkette NJOY-TRANSX und zum anderen mit HELIOS aufbereitet. Diese Querschnitte und die mit ihnen berechneten Ergebnisse für die Neutronenspektren, den Multiplikationsfaktor und die gemittelten Zweigruppenquerschnitte werden verglichen. Aus diesem Vergleich wird abgeleitet, welcher Gruppendatensatz für die 3D-Zellrechnungen mit TransRay verwendet wird.

#### **4.1 Aufbereitung makroskopischer Gruppenwirkungsquerschnitte für TransRay**

Die beiden Vorgehensweisen zur Erzeugung der makroskopischen Gruppenwirkungsquerschnitte für TransRay werden beschrieben:

##### **1) Programmkette NJOY-TRANSX**

NJOY ist ein Programmpaket, das aus Bibliotheken eingeschätzter Kerndaten punktweise Wirkungsquerschnitte und Gruppenwirkungsquerschnitte erzeugt. Es behandelt Neutronen, Photonen und geladene Teilchen. Unter anderem werden mit NJOY auch energiepunktweise Querschnitte für das Programm MCNP berechnet. Als Ausgangsdaten zur Bestimmung der makroskopischen Gruppenwirkungsquerschnitte für das Programm TransRay wurde die Kerndatenbibliothek ENDF/B-VI verwendet. Unter Vorgabe der Gruppenstruktur und der Materialzusammensetzungen der unterschiedlichen Materialzonen innerhalb der TransRay-Geometrie-Eingabe wurden mit NJOY die mikroskopischen Gruppenwirkungsquerschnitte



für alle Nuklide in den Materialien erzeugt. Das Programm TRANSX berechnet dann aus den mikroskopischen die makroskopischen Querschnitte für alle Materialmischungen.

## 2) HELIOS

Das Programm HELIOS, Version 1.8 [51], enthält intern einen 190-Gruppen- und einen 47-Gruppensatz mikroskopischer Querschnitte für Neutronen. Diese sind ebenfalls mit Hilfe von NJOY aus der Kerndatenbibliotheken ENDF/B-VI erzeugt worden. In dieser Arbeit wird für die TransRay-Rechnungen, deren makroskopischen Querschnitte mit HELIOS aufbereitet werden, die 47-Gruppenstruktur gewählt. Diese Wahl hat grundsätzlich den Vorteil, dass die TransRay-Rechnungen mit 47 Gruppen bedeutend schneller sind als mit 190 Gruppen, was sich insbesondere bei den dreidimensionalen Rechnungen bemerkbar macht.

Zur Erzeugung dieser 47-Gruppensatz mit HELIOS werden zwei Varianten gewählt (siehe Abb. 9): In Variante A werden für die betrachteten Nuklide direkt die mikroskopischen Wirkungsquerschnitte (WQ) aus dem jeweiligen 47-Gruppensatz in HELIOS entnommen und mit den entsprechenden Kerndichten die makroskopischen Querschnitte berechnet. In Variante B wird für das gegebene Problem eine Vorausberechnung mit HELIOS gemacht, um makroskopische Wirkungsquerschnitte zu erzeugen. Mit diesen Querschnitten wird jede HELIOS-Transportrechnung standardmäßig ausgeführt.

A: HELIOS mikr. WQ in 47-Gruppenstruktur + Kerndichten  
→ makr. WQ in 47-Gruppenstruktur → TransRay-Rechnungen mit 47 Gruppen

B: Problemspezifische Vorausberechnung mit HELIOS mit

B1: 47-Gruppenstruktur → TransRay-Rechnungen mit 47 Gruppen

B2: 190-Gruppenstruktur → Kondensation mit HELIOS auf 47- Gruppenstruktur  
→ TransRay-Rechnungen mit 47 Gruppen

Abbildung 9: Schema der zwei Varianten A und B zur Aufbereitung der makroskopischen Gruppenwirkungsquerschnitte in der 47-Gruppenstruktur mit HELIOS für die TransRay-Rechnungen. Für B gibt es die Varianten B1 und B2.

Alle HELIOS-Ergebnisse in dieser Arbeit wurden aus diesen Rechnungen mit 190 Gruppen erzeugt. Für Variante B werden zwei Möglichkeiten angewandt: Bei Variante B1 werden diese makroskopischen Wirkungsquerschnitte der Vorausberechnung für 47 Gruppen als Eingangsdaten für TransRay genommen. In Variante B2 wird eine Transportrechnung in HELIOS mit 190 Gruppen ausgeführt und die makroskopischen Gruppenwirkungsquerschnitte

werden von 190 auf 47 Gruppen kondensiert. Dieser kondensierte 47-Gruppensatz wird dann als Eingabe in TransRay verwendet.

In Abschnitt 4.2 wird am Beispiel des Babcock und Wilcox  $\text{UO}_2$  Kritikalitäts-Benchmarks die Datenaufbereitung nach Variante B2 mit der nach Variante A und der Datenaufbereitung mit der Programmkette NJOY-TRANSX verglichen. Für die betrachteten Fälle in Kapitel 5 wird zur Datenaufbereitung der makroskopischen Gruppenwirkungsquerschnitte für TransRay die Variante B2 gewählt. Somit beruhen die HELIOS- und TransRay-Rechnungen in Kapitel 5 auf der Grundlage einheitlicher Daten.

Variante B hat gegenüber A den Vorteil, dass in der Vorausberechnung die Geometrie des zu behandelnden Problems eingeht. Die Variante B2 hat gegenüber der Variante B1 den Vorteil, dass durch die Verwendung von 190 Gruppen zunächst die Abhängigkeit der Querschnitte von der Energie genauer beschrieben wird. Allerdings hat B2 gegenüber B1 den Nachteil, dass das HELIOS-Ergebnis der Zellrechnung mit 190 Gruppen nicht unmittelbar mit dem TransRay-Ergebnis bei einer Rechnung mit von 190 auf 47 kondensierten Gruppen vergleichbar ist. Da die TransRay-Ergebnisse der dreidimensionalen Rechnungen, welche das 2D-Programm HELIOS nicht ausführen kann, mit denen des Programms MCNP verglichen werden, ist die Wahl der Variante B2 sinnvoll, da in ihr gegenüber den Varianten A und B1 die meiste „Information“ enthalten ist, d. h. die Geometrie des Problems und 190 statt 47 Gruppen. Um die Ergebnisse von TransRay3D und MCNP zu vergleichen, soll ja gerade der Fehler durch die Gruppennäherung in TransRay möglichst klein gehalten werden, so dass die Daten aus der besten problembezogenen Aufbereitung zu entnehmen sind.

In Abschnitt 5.2 werden mit TransRay 3D-Probleme berechnet. Mit dem 2D-Programm HELIOS können aber nur makroskopische Gruppenwirkungsquerschnitte für zweidimensionale geometrische Anordnungen erzeugt werden. Die Verwendung dieser zweidimensional erzeugten Querschnitte für die Berechnung der 3D-Probleme mit TransRay erfolgte folgendermaßen:

Bei allen berechneten geometrischen Anordnungen waren die Brenn- und Regelstabzellen in z-Richtung ausgerichtet. Sollte nun mit TransRay eine dreidimensionale Geometrie berechnet werden, die eine z-Abhängigkeit hatte, so wurde diese Geometrie in Höhenabschnitte unterteilt. Jeder Höhenabschnitt war dabei unabhängig in z-Richtung, d. h. stellte für sich ein 2D-Problem in der x-y-Ebene dar. Für jeden Höhenabschnitt, der eine unterschiedliche 2D-Geometrie in der x-y-Ebene hatte, wurden dann mit HELIOS die Querschnitte erzeugt. Bei den dreidimensionalen Problemen wurden dann bei der TransRay-Rechnung die

zweidimensional erzeugten makroskopischen Gruppenwirkungsquerschnitte in die entsprechenden Höhenabschnitte der betrachteten dreidimensionalen Geometrie eingesetzt.

Die Ergebnisse der dreidimensionalen Rechnung mit TransRay sind dabei abhängig von der gewählten Unterteilung in Höhenabschnitte. Es muss also vorher überlegt werden, welche Höhenunterteilung physikalisch sinnvoll ist.

Hier wird letztendlich deutlich, dass die Eingangsdaten für eine dreidimensionale Transportrechnung mit TransRay eigentlich bereits vorher dreidimensional aufbereitet werden müssten. Eine andere Variante wäre, zwischen HELIOS und TransRay zu iterieren. Das heißt, mit den zweidimensional erzeugten Daten von HELIOS wird eine dreidimensionale Transportrechnung mit TransRay ausgeführt und mit der berechneten Flussverteilung werden dann wieder die neuen Gruppenquerschnitte zweidimensional in HELIOS erzeugt u.s.w.. Dieser Iterationsprozess müsste dann bis zur Konvergenz durchgeführt werden. Bei den in dieser Arbeit betrachteten Fällen wurde dies noch nicht gemacht. Trotzdem zeigten die Ergebnisse der dreidimensionalen Rechnungen mit TransRay eine gute Übereinstimmung mit den Ergebnissen der 3D-Rechnung mit MCNP.

## **4.2 Das Babcock und Wilcox UO<sub>2</sub> Kritikalitäts-Benchmark (2D-Problem)**

Die Babcock und Wilcox Experimente sind enthalten in einer Benchmark-Sammlung von Sitaraman [45] für das Monte-Carlo-Programm MCNP. Die Experimente wurden bei Raumtemperatur ausgeführt. Die UO<sub>2</sub> Brennstäbe (Anreicherung 2.5 %) waren in einem quadratischen Gitter angeordnet (Gitterpunktweite = 1.6256 cm). Die Hülle bestand aus Aluminium. Da die Anordnung des Babcock und Wilcox UO<sub>2</sub> (B&W-UO<sub>2</sub>) Experiments kritisch war, galt für den effektiven Multiplikationsfaktor  $k_{\text{eff}} = 1$ . Kritikalität wurde erreicht durch Anpassung der Borkonzentration. Dabei war das Experiment so angeordnet, dass sich das zentrale Testgebiet wie ein System ohne Leakage verhielt, d. h.  $k_{\text{eff}} \approx k_{\infty}$ . Die Rechnung bei Sitaraman mit dem Programm MCNP3B ergab 0.9995 (0.0014), wobei der Wert in den Klammern den relativen statistischen Fehler angibt, d. h. die Standardabweichung vom berechneten Mittelwert.

Für die Verifikation der zwei- und dreidimensionalen Version von TransRay an diesem 2D-Problem wird eine einzelne Brennstabzelle berechnet mit Reflexionsrandbedingungen. Es wird die Stabgeometrie ohne den Spalt zwischen den UO<sub>2</sub>-Pellets und der Hülle betrachtet, wobei der Brennstoff in den Spalt verschmiert wurde.

In Abschnitt 4.2.1 sind die Ergebnisse der ersten TransRay-Rechnungen auf dem HP-Rechner zum B&W-UO<sub>2</sub>-Kritikalitäts-Benchmark zu sehen. Sie ergaben eine erste Einschätzung über die Korrektheit, Konvergenz und Rechenzeiten von TransRay. Die Ergebnisse

für den Multiplikationsfaktor und die gemittelten Zweigruppenquerschnitte werden mit denen von HELIOS verglichen. In Abschnitt 4.2.2 werden die Unterschiede gezeigt, die sich ergeben, indem der 47-Gruppensatz zum einen mit der Programmkette NJOY-TRANSX und zum anderen mit dem Programm HELIOS aufbereitet wurde. Daraus wird abgeleitet, welcher Gruppensatz für die 3D-Zellrechnungen mit TransRay verwendet wird.

#### 4.2.1 Bemerkungen zu Konvergenz und Rechenzeiten und erste Überprüfung der Ergebnisse von TransRay

Zur Überprüfung von TransRay wurden Rechnungen durchgeführt mit dem 34-Gruppensatz makroskopischer Querschnitte, der mit der Programmkette NJOY und TRANSX erzeugt wurde und dessen Gruppenstruktur der in HELIOS 1.5 entspricht.

Mit TransRay2D wurde der Wert für  $k_{\infty}$  im Zweidimensionalen unter Verwendung von 60, 100 und 200 Winkeln beim Ray-Tracing berechnet (zur Ray-Tracing-Methode im Zweidimensionalen siehe Abbildung 3, Seite 50). Abbildung 10 zeigt die Ergebnisse für  $k_{\infty}$  bei Verwendung unterschiedlicher Anzahlen von Strahlen pro Winkel.

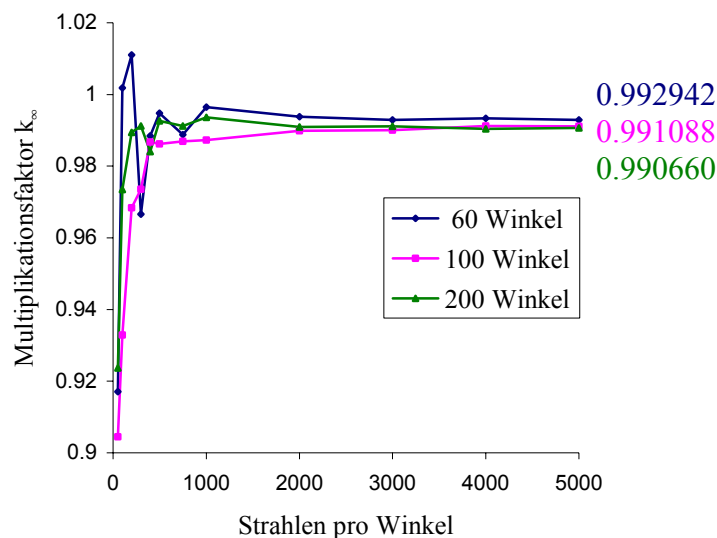


Abbildung 10: Mit TransRay2D berechnete Werte für den Multiplikationsfaktor  $k_{\infty}$  für das B&W-UO<sub>2</sub> Experiment mit unterschiedlicher Anzahl an Winkeln und Strahlen beim Ray-Tracing.

Die Berechnung des Babcock und Wilcox UO<sub>2</sub> Benchmarks ergab also eine erste Einschätzung der Anzahl an Strahlen, die im Programm TransRay zu verwenden sind, um Konvergenz zu erreichen. Dabei konvergiert das Ergebnis in diesem Fall nicht zur exakten Lösung 1.0, was auf den Einfluss der Gruppendaten zurückzuführen ist.

Die Abbildungen 11 und 12 zeigen die Ergebnisse für die nach (151) gemittelten totalen makroskopischen Wirkungsquerschnitte der schnellen und der thermischen Gruppe (Gruppenbreite = 3.9279 eV).

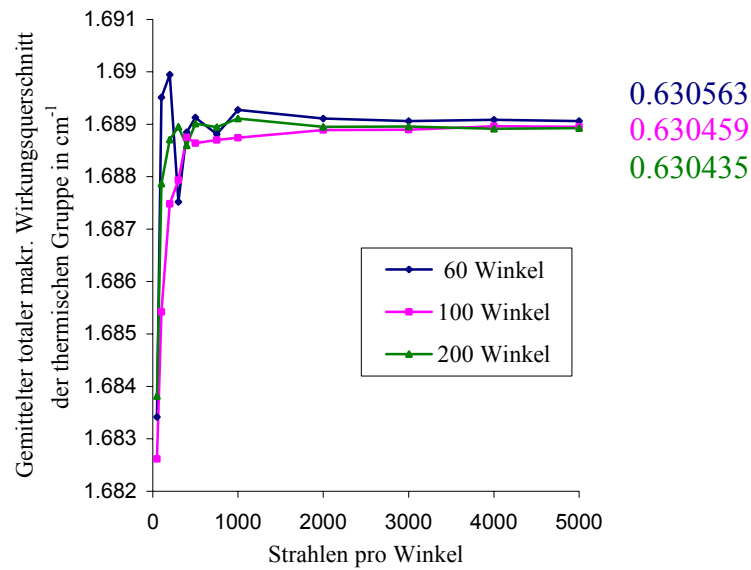


Abbildung 11: Mit TransRay2D berechnete Werte für den gemittelten totalen makr. Wirkungsquerschnitt der schnellen Gruppe für das B&W-UO<sub>2</sub> Experiment mit unterschiedlicher Anzahl an Winkeln und Strahlen beim Ray-Tracing.

Die Werte für die gemittelten Querschnitte konvergieren schneller als die für den Multiplikationsfaktor  $k_{\infty}$ . Dies ist auch in der Abbildung 13 zu sehen, die die relativen Fehler der gemittelten totalen Zweigruppenwirkungsquerschnitte und des Multiplikationsfaktors zeigt bei der Rechnung mit 200 Winkeln bezogen auf den Wert, der sich bei Verwendung von 5000 Strahlen pro Winkel ergibt.

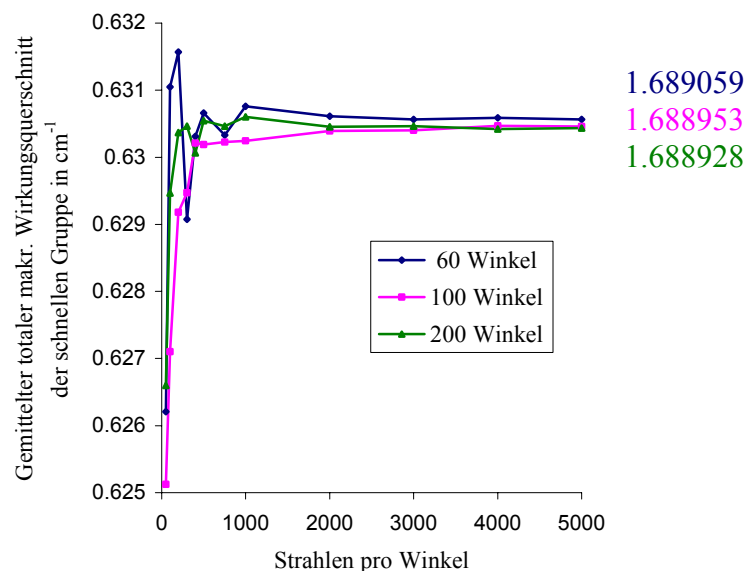


Abbildung 12: Mit TransRay2D berechnete Werte für den gemittelten totalen makr. Wirkungsquerschnitt der thermischen Gruppe für das B&W-UO<sub>2</sub> Experiment mit unterschiedlicher Anzahl an Winkeln und Strahlen beim Ray-Tracing.

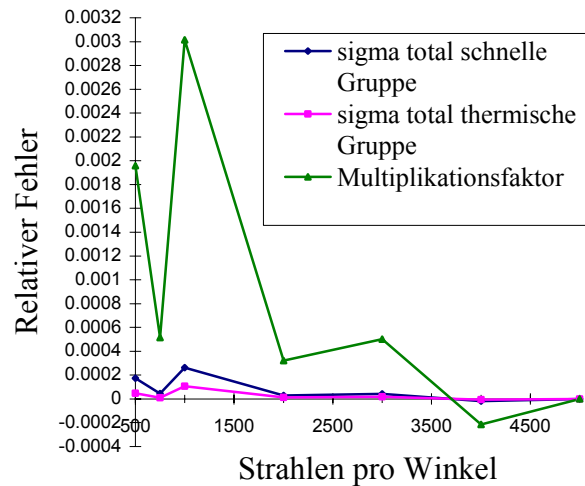


Abbildung 13: Relativer Fehler der mit TransRay2D berechneten Werte bei 200 Winkeln bezogen auf den letzten Wert (5000 Strahlen pro Winkel).

In TransRay sind die Rechenzeiten sehr lang. Abbildung 14 zeigt die CPU-Zeiten nach Verwendung des HP-Rechners für das Ray-Tracing bei der zweidimensionalen Rechnung. TransRay kann, was die Rechenzeit angeht, noch wesentlich verbessert werden. Dieser Punkt wird in dieser Arbeit allerdings nicht weiter behandelt. Zu sehen ist jedenfalls, dass wie erwartet die CPU-Zeit linear mit der Anzahl der Strahlen für das Ray-Tracing ansteigt. Die CPU-Zeiten für die äußere Iteration nach Abschnitt 2.4 sind aufgrund der Einfachheit der berechneten Geometrie sowohl bei der zwei- als auch bei der dreidimensionalen Rechnung zu vernachlässigen.

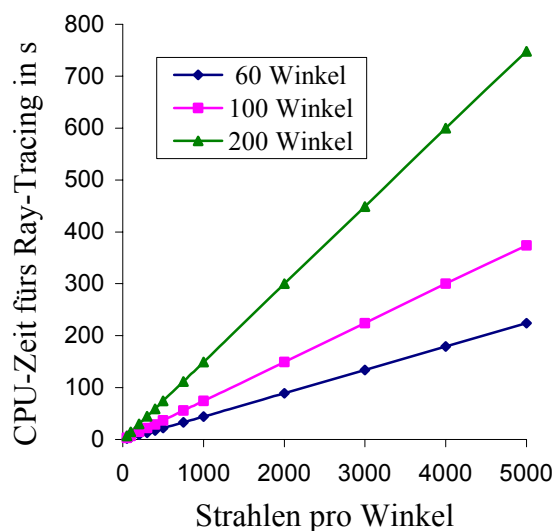


Abbildung 14: CPU-Zeit auf dem HP-Rechner für das Ray-Tracing bei zweidimensionaler Rechnung

Um TransRay3D zu testen, wurde das 2D-Problem auch dreidimensional berechnet. Dabei wurden die Symmetrien der Zelle ausgenutzt, um nur einen Teilbereich der Zelle zu berechnen und somit die langen Rechenzeiten zu reduzieren. So wurde beim Ray-Tracing durch die Geometrie der einfachen Brennstabzelle für den Azimutalwinkel  $\omega$  nur der Bereich  $0 \leq \omega \leq \pi/4$  betrachtet und für den Polarwinkel  $\theta$  nur der Bereich  $0 \leq \theta \leq \pi/2$  (zu  $\omega$  und  $\theta$  siehe Abbildung 2, Seite 48). Die der Abbildung 10, d. h. der zweidimensionalen Berechnung des Multiplikationsfaktors  $k_\infty$  entsprechende Abbildung für die 3D-Rechnung, ist Abbildung 15. Wie bei der zweidimensionalen Rechnung mit TransRay2D konvergieren auch die dreidimensional gemittelten Querschnitte entsprechend schneller. Die entsprechenden 3D-Abbildungen sind hier nicht aufgeführt.

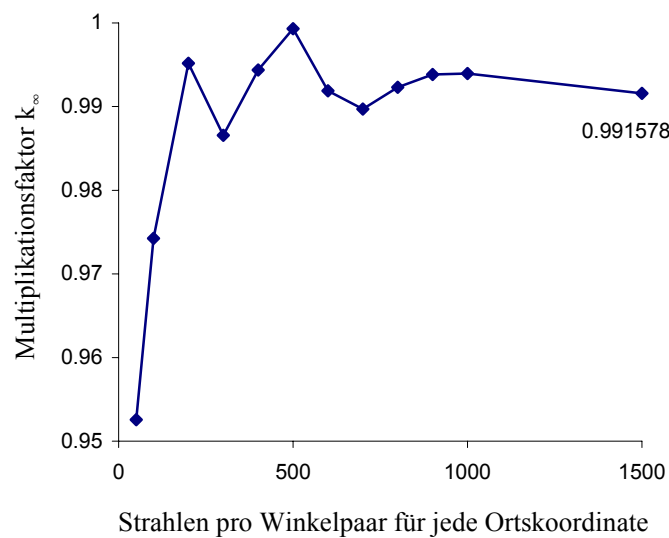


Abbildung 15: Mit TransRay3D berechnete Werte für den Multiplikationsfaktor  $k_\infty$  für das B&W-UO<sub>2</sub> Experiment mit 60 Winkeln für  $0 \leq \omega \leq \pi/4$  und 40 Winkeln für  $0 \leq \theta \leq \pi/2$ .

Beim 2D-Ray-Tracing gibt es zwei und beim 3D-Ray-Tracing vier Integrationsvariablen. Daher nimmt die Anzahl der Strahlen für das Ray-Tracing bei der dreidimensionalen Rechnung, um eine genügende Genauigkeit zu erhalten, im Verhältnis zum Zweidimensionalen quadratisch zu. Die CPU-Zeiten für das Ray-Tracing steigen linear mit der Anzahl der verwendeten Strahlen. Die entsprechend hohen Werte der CPU-Zeiten für das Ray-Tracing bei der dreidimensionalen Berechnung von  $k_\infty$  auf dem HP-Rechner sind in Abbildung 16 gegeben. Die Kurve zeigt einen quadratischen Verlauf, da eine lineare Erhöhung des Wertes auf der Abszisse eine quadratische Zunahme an Strahlen bedeutet. Aufgrund der hohen Rechenzeiten

wurde die dreidimensionale Version von TransRay für diesen HP-Rechner parallelisiert. Der Linux-Cluster, auf dem die nachfolgenden Rechnungen ausgeführt wurden, ist zirka 12mal schneller als der HP-Rechner. Trotzdem wird eine Optimierung von TransRay hinsichtlich der Rechenzeiten notwendig sein, wenn das Programm häufiger verwendet werden soll, insbesondere zur Berechnung größerer Zellen.

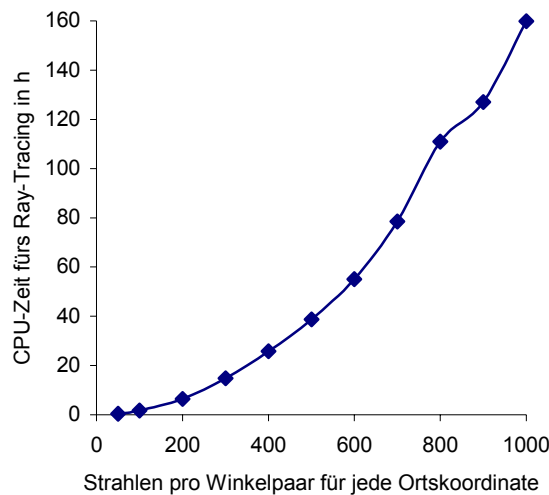


Abbildung 16: CPU-Zeit auf dem HP-Rechner fürs Ray-Tracing bei dreidimensionaler Rechnung (60 Winkel für  $0 \leq \omega \leq \pi/4$  und 40 Winkel für  $0 \leq \theta \leq \pi/2$ )

Das Ergebnis einer Vergleichsrechnung der mit TransRay2D und TransRay3D berechneten Werte für  $k_{\infty}$  und die gemittelten Querschnitte nach Gleichung (151) bis (153) zeigt Tabelle 1. Wiederum wurde der 34 Gruppensatz verwendet mit 18 thermischen Gruppen und der Gruppengrenze bei 3.9279 eV, der mit der Programmkette NJOY-TRANSX aufbereitet wurde. Bei der zweidimensionalen Rechnung wurden 400 Winkel und 5000 Strahlen pro Winkel gewählt. Bei der dreidimensionalen Rechnung wurden gewählt für den Azimutalwinkel im Bereich  $0 \leq \omega \leq \pi/4$  64 Winkel, für den Polarwinkel im Bereich  $0 \leq \theta \leq \pi/2$  40 Winkel und für jedes Winkelpaar je 1000 Strahlen für beide Ortskoordinaten.

Weiterhin sind in Tabelle 1 die mit dem Programm HELIOS berechneten Werte enthalten. Dabei wurde ein 45 Gruppensatz verwendet, dessen Gruppengrenzen die des 34 Gruppensatzes enthielten. Die Werte für den Multiplikationsfaktor  $k_{\infty}$  der zweidimensionalen Rechnung mit TransRay2D und der dreidimensionalen Rechnung mit TransRay3D weichen zu stark von dem erwarteten Wert 1 ab. Besonders groß sind die Abweichungen der TransRay-Werte bezogen auf die HELIOS-Werte für die gemittelten Wirkungsquerschnitte der schnellen Gruppe 1.



Trotzdem dienen diese ersten Rechnungen zur Einschätzung der Konvergenz der Ergebnisse, der Rechenzeiten und der Korrektheit der zwei- und dreidimensionalen Versionen von TransRay. Im nächsten Abschnitt 4.2.2 wird die Datenaufbereitung für TransRay am Beispiel des B&W-UO<sub>2</sub> Benchmarks näher untersucht. Die Ergebnisse der Rechnungen in diesem Abschnitt mit TransRay, HELIOS und MCNP werden deutlich besser übereinstimmen.

	<b>TransRay2D</b>		<b>TransRay3D</b>		<b>HELIOS</b>
	Wert mit rel. Fehler bez. auf den HELIOS Wert		Wert mit rel. Fehler bez. auf den HELIOS Wert		
$k_{\infty}$	0.99002	-1.83 %	0.99271	-1.56 %	1.00845
$\sigma_{total1}$	0.63040		0.63034		
$\sigma_{total2}$	1.68889		1.69773		
$\sigma_{abs1}$	8.31107E-03	-6.35 %	8.26806E-03	-6.83 %	8.87432E-03
$\sigma_{abs2}$	9.68489E-02	-0.93 %	9.65893E-02	-1.20 %	9.77626E-02
$\sigma_{1 \rightarrow 1}$	0.59840		0.59831		
$\sigma_{1 \rightarrow 2}$	2.36922E-02	-10.43 %	2.37582E-02	-10.18 %	2.64512E-02
$\sigma_{2 \rightarrow 1}$	2.22841E-05		2.21575E-05		
$\sigma_{2 \rightarrow 2}$	1.59202		1.60112		
$v\sigma_{f1}$	5.24124E-03	-8.58 %	5.24682E-03	-8.48 %	5.73303E-03
$v\sigma_{f2}$	0.108105	-2.15 %	0.107093	-3.06 %	0.110479

Tabelle 1: Vergleich der mit TransRay (34 Gruppen, Aufbereitung mit NJOY-TRANSX) zwei- und dreidimensional und mit HELIOS (45 Gruppen) berechneten Werte für  $k_{\infty}$  und für die gemittelten Zweigruppenwirkungsquerschnitte (in cm<sup>-1</sup>, Gruppengrenze bei 3.9279 eV).

#### 4.2.2 Vergleich unterschiedlicher Aufbereitungen der makroskopischen Gruppenwirkungsquerschnitte für TransRay

Die TransRay-Ergebnisse des vorangegangenen Abschnitts 4.2.1 unterschieden sich deutlich von den Ergebnissen der Programme HELIOS und MCNP [7]. Aufgrund dieser Unterschiede in den Ergebnissen von TransRay, HELIOS und MCNP, die sich auch bei den in Kapitel 5 betrachteten Fällen ergaben, wurden alle Rechnungen wiederholt. Für TransRay wurden nun die makroskopischen Gruppenwirkungsquerschnitte von HELIOS 1.8 als Eingangsdaten verwendet. Damit war ein direkter Vergleich der beiden Programme auf einer einheitlichen Datengrundlage möglich (siehe auch Abschnitt 4.1).

Am Beispiel des B&W-UO<sub>2</sub> Kritikalitäts-Benchmarks sollen nun die Ergebnisse bei unterschiedlicher Datenaufbereitung für das Programm TransRay demonstriert werden. Bei der Datenaufbereitung mit der Programmkette NJOY-TRANSX und bei der mit HELIOS wird dieselbe 47-Gruppenstruktur (Anhang A - 1) verwendet. Dabei werden, wie auch für das

Programm MCNP, für alle Nuklide dieselben Kerndichten angenommen. Allen drei Varianten, NJOY-TRANSX, HELIOS und MCNP, liegt die Kerndatenbibliothek ENDF/B-VI zu Grunde. Es werden jeweils die Kerndaten der Nuklide bei Raumtemperatur gewählt. Für die MCNP-Rechnung werden Punktdaten verwendet. Bei der Datenaufbereitung für TransRay mit HELIOS 1.8 werden die zwei Varianten A und B2 verwendet (siehe Abbildung 9).

In Tabelle 1 weichen die TransRay-Werte deutlich von den HELIOS-Werten ab. In Tabelle 2 stimmen die Werte der TransRay-Rechnung, für die der neue mit NJOY-TRANSX aufbereitete 47-Gruppensatz verwendet wurde, besser mit den HELIOS-Werten überein. Trotzdem wird in den folgenden Erläuterungen bis zum Ende dieses Abschnittes 4.2.2 deutlich, warum für die TransRay-Rechnungen in Kapitel 5 die Datenaufbereitung mit HELIOS nach Variante B2 erfolgte.

Zunächst werden für die 47 Gruppen die makroskopischen Gruppenwirkungsquerschnitte betrachtet, die für das Programm TransRay aufbereitet wurden. In den folgenden Abbildungen werden dabei die HELIOS-Daten nach Variante A auch als „47 Gruppen Grunddaten“ und die nach Variante B2 als „190 auf 47 Gruppen kondensiert“ bezeichnet. TransRay benötigt dabei für jede Materialzone  $i$  und für jede Gruppe  $g = 1, \dots, 47$  als Eingangsdaten neben den Gruppenspaltenspektren  $\chi_{i,g}$  totale makroskopische Gruppenwirkungsquerschnitte  $\sigma_{\text{total},i,g}$ , Überganggruppenwirkungsquerschnitte  $\sigma_{i,g \rightarrow g'}$  für  $g' = 1, \dots, 47$  und Produktionsgruppenwirkungsquerschnitte  $(v\sigma_f)_{i,g}$ .

Es wird wiederum die Geometrie der B&W-UO<sub>2</sub> Zelle betrachtet, bei der der Brennstoff in den Spalt zwischen Brennstoff und Hülle verschmiert wurde. Das heißt, es gibt drei unterschiedliche Materialbereiche, den für den Brennstoff (UO<sub>2</sub>), die Hülle (Al) und den Moderator (boriertes Wasser). Für die folgenden Rechnungen in diesem Abschnitt wurden die Bereiche der B&W-UO<sub>2</sub> Zelle mit gleichem Material nicht weiter unterteilt. Folglich hatte die Geometrieunterteilung drei Materialzonen mit den eben erwähnten Materialien, d. h.  $i = 1$  (UO<sub>2</sub>),  $i = 2$  (Al) und  $i = 3$  (boriertes Wasser). Für diese drei Materialzonen wurden nun makroskopische Gruppenwirkungsquerschnitte erzeugt, neben den eben erwähnten Gruppendaten auch die Absorptionsgruppenwirkungsquerschnitte.

Bei den mit HELIOS erzeugten Gruppendaten mittels der Varianten A und B2 gab es nahezu keine Unterschiede. Da bei den Grunddaten im Gegensatz zu den von 190 auf 47 Gruppen kondensierten Daten die Heterogenität der B&W-UO<sub>2</sub> Zelle nicht eingeht, bedeutet dies, dass die Berücksichtigung der Heterogenität der Zelle bei diesem Experiment für die Datenaufbereitung in HELIOS keine Rolle spielt.

Bis auf die Übergangsgruppenwirkungsquerschnitte unterschieden sich die mit NJOY-TRANSX beziehungsweise HELIOS erzeugten Daten für die Aluminiumhülle und den Moderator nicht wesentlich. Signifikante Unterschiede zwischen den aufbereiteten Gruppendaten mit NJOY-TRANSX und mit HELIOS ergaben sich jedoch für den Brennstoff. Die Unterschiede bei den Übergangsquerschnitten bei den drei Materialien entsprachen sich qualitativ. Daher werden nun lediglich die für den Brennstoff erzeugten Daten weiter betrachtet.

Die Gruppenspaltpektren und die Produktionsgruppenwirkungsquerschnitte stimmten bei allen Datenaufbereitungen gut überein. Auch die Unterschiede beim totalen und beim Absorptionsgruppenwirkungsquerschnitt waren akzeptabel. In Abbildung 17 für den makroskopischen Absorptionsgruppenwirkungsquerschnitt  $\sigma_{abs,1,g}$  ( $g = 1, \dots, 47$ ) unterscheidet sich jedoch der NJOY-TRANSX-Wert von den HELIOS-Werten insbesondere in der Gruppe 19 von 6.476 eV bis 7.3382 eV. Die Gruppe 19 enthält die breite Resonanz von U-238 bei 6.67 eV. Die Datenaufbereitung mit NJOY-TRANSX berechnet dabei den Wert deutlich höher. Offenbar berücksichtigt die Datenaufbereitung in HELIOS stärker die Selbstabschirmung der breiten Resonanz des U-238.

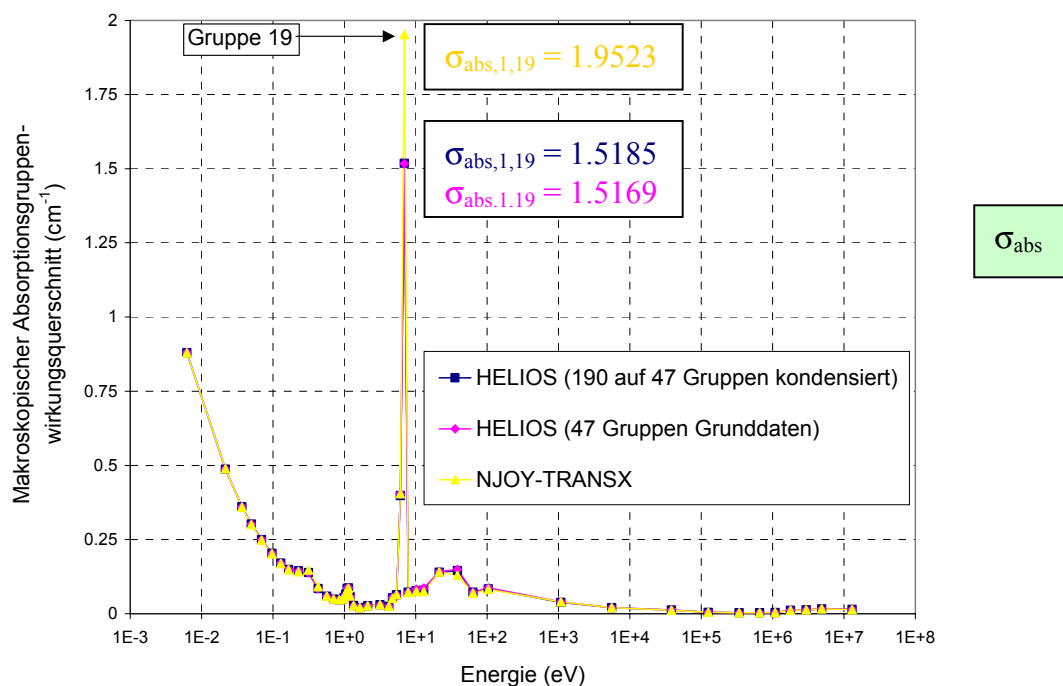


Abbildung 17: Mit HELIOS und NJOY-TRANSX aufbereitete makroskopische Absorptionsgruppenwirkungsquerschnitte für 47 Gruppen im Brennstoff der B&W UO<sub>2</sub> Zelle.

Der höhere Wert für  $\sigma_{abs,1,19}$  bei NJOY-TRANSX trägt mit dazu bei, dass der Flussverlauf in Abbildung 22 in diesem Energiebereich etwas niedriger ist als bei den entsprechenden Trans-

Ray-Rechnungen mit den HELIOS-Daten und als bei der HELIOS-Rechnung. Der MCNP-Wert liegt in der Mitte. Genau genommen wird in Abbildung 22 der normierte Neutronenfluss in Abhängigkeit der Lethargie  $u(E) = \ln(E_0/E)$  dargestellt, wobei  $E_0$  die obere Energiegrenze des betrachteten Gruppensatzes ist. Ist  $\Phi$  der Neutronenfluss, so gilt mit  $u_{g-1} = u(E_{g-1})$

und  $u_g = u(E_g)$   $\int_{E_g}^{E_{g-1}} \Phi(E) dE = \int_{u_{g-1}}^{u_g} \Phi(u) du$ . Folglich ist der Mittelwert für  $\Phi(u)$  im Lethargieinter-

vall von  $u_{g-1}$  bis  $u_g$  gleich  $\frac{1}{(u_g - u_{g-1})} \int_{u_{g-1}}^{u_g} \Phi(u) du = \frac{1}{(u_g - u_{g-1})} \int_{E_g}^{E_{g-1}} \Phi(E) dE = \frac{1}{\ln \frac{E_{g-1}}{E_g}} \int_{E_g}^{E_{g-1}} \Phi(E) dE$ .

In Abbildung 22 ist aber gerade dargestellt die Größe  $\frac{1}{\log \frac{E_{g-1}}{E_g}} \cdot \frac{\frac{1}{V_1} \Phi_{1,g}}{\sum_{i=1}^3 \sum_{g=1}^{47} \frac{1}{V_i} \Phi_{i,g}}$  für  $g = 1, \dots, 47$

mit den Feingruppenflüssen  $\Phi_{i,g}$  aus Gleichung (150). Da  $\log(x) = \ln(x)/\ln(10)$  ist, stellen die Werte in der Abbildung 22 den normierten „lethargiedifferentiellen“ Neutronenfluss „ $\Phi(u)$  normiert“ im Brennstoff dar. Da  $\frac{dE}{du} = -E$  beziehungsweise  $\frac{du}{dE} = -\frac{1}{E}$ , ist  $\Phi(u) = E \cdot \Phi(E)$ .

Die Darstellung des normierten „lethargiedifferentiellen“ Neutronenflusses über einer logarithmischen Energieskala ist in der Reaktorphysik üblich. Das Neutronenspektrum der B&W-UO<sub>2</sub> Zelle in Abbildung 22 stellt ein typisches Neutronenspektrum eines Druckwasserreaktors dar (siehe z. B. auch [12]).

Wie bereits gesagt, traten die größten Unterschiede zwischen den Datenaufbereitungen mit NJOY-TRANSX und HELIOS bei den Übergangsruppenwirkungsquerschnitten auf. Aufgrund der besseren Überschaubarkeit werden nun nicht die einzelnen Übergangsruppenwirkungsquerschnitte  $\sigma_{1,g \rightarrow g'}$  für  $g = 1, \dots, 47$  und  $g' = 1, \dots, 47$  betrachtet, sondern die Streu-, die Ausstreu-, die Einstreu- und die Gruppenwirkungsquerschnitte innerhalb der Gruppen.

Die Streugruppenwirkungsquerschnitte können berechnet werden nach  $\sigma_{\text{Streu},1,g} = \sigma_{\text{total},1,g} - \sigma_{\text{abs},1,g}$  beziehungsweise  $\sigma_{\text{Streu},1,g} = \sum_{g'=1}^{47} \sigma_{1,g \rightarrow g'}$  für  $g = 1, \dots, 47$ . Der Kurvenverlauf für  $\sigma_{\text{Streu},1,g}$  ist in Abbildung 18 zu sehen. Nur innerhalb der Gruppen 19 bis 7, d. h. im Energiebereich von 6.476 eV bis 497.87 keV, liegen die relativen Abweichungen zwischen den HELIOS- und den NJOY-TRANSX-Werten über 1%.

Im Programm JANIS [38] liegen die Energiebereiche der aufgelösten und unaufgelösten Resonanzen von U-235 und U-238 unterhalb der Energieobergrenze von Gruppe 8 von 183.16 keV. Die Vermutung liegt daher nahe, dass die Unterschiede zwischen der Datenaufbereitung mit NJOY-TRANSX und der in HELIOS unter anderem daher rühren, dass die Resonanzen von U-235 oder U-238 unterschiedlich behandelt werden. Die Resonanzen von O-16 sind in JANIS aufgelöst. Die erste Resonanz von O-16 ist eine Streuresonanz und liegt bei einer Energie von 435 keV. Diese Energie liegt im Energiebereich der Gruppe 7 von 183.16 keV bis 497.87 keV. Die weiteren Resonanzen von O-16 liegen über 1 MeV. Aufgrund der Unterschiede in den Gruppenwirkungsquerschnitten der Gruppe 7, die auch in Abbildung 19 und Abbildung 20 zu sehen sind, und aufgrund der Differenzen im Flussverlauf im Energiebereich dieser Gruppe (Abbildung 22) kann vermutet werden, dass auch diese Streuresonanz vom O-16 bei der Erzeugung der effektiven Gruppenwirkungsquerschnitte mit der Kette NJOY-TRANSX und mit HELIOS unterschiedlich behandelt wird.

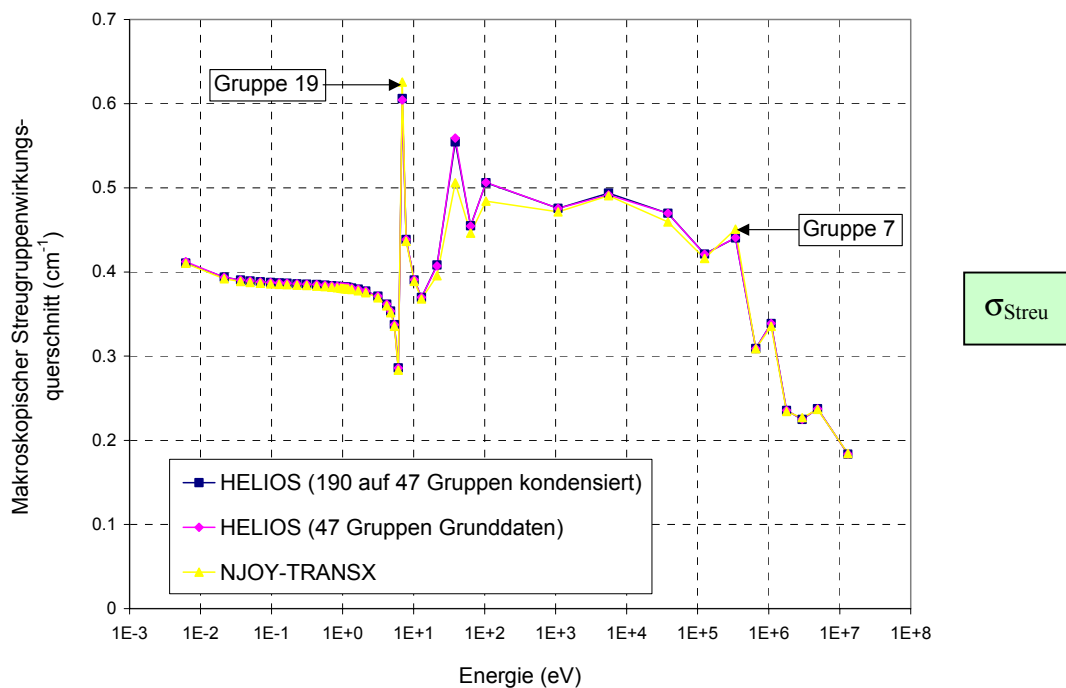


Abbildung 18: Makroskopische Streugruppenwirkungsquerschnitte für 47 Gruppen im Brennstoff der B&W UO<sub>2</sub> Zelle nach Datenaufbereitung mit HELIOS und NJOY-TRANSX.

Als nächstes werden für den Brennstoff die Streugruppenwirkungsquerschnitte innerhalb der 47 Gruppen, d. h.  $\sigma_{1,g \rightarrow g}$  für  $g = 1, \dots, 47$  (Abbildung 19), die Ausstreugruppenwirkungsquerschnitte

$\sigma_{\text{Ausstreu},l,g} = \sum_{g'=1, g' \neq g}^{47} \sigma_{1,g \rightarrow g'}$  für  $g = 1, \dots, 47$  (Abbildung 20) und die Einstreugruppenwir-

kungsquerschnitte  $\sigma_{\text{Einstreu},1,g'} = \sum_{g=1, g \neq g'}^{47} \sigma_{1,g \rightarrow g'}$  für  $g' = 1, \dots, 47$  (Abbildung 21) betrachtet. Wie

beim Streugruppenwirkungsquerschnitt in Abbildung 18 treten auch in Abbildung 19 bis 21 von Gruppe 19 bis 7 deutliche Unterschiede zwischen der Datenaufbereitung mit NJOY-TRANSX und HELIOS auf.

Im Gegensatz zu Abbildung 18 sind allerdings in Abbildung 19 bis 21 auch deutliche Differenzen im thermischen Bereich von Gruppe 39 bis 37 (0.18443 eV bis 0.50323 eV) zu sehen. Genau in diesem Energiebereich ist in Abbildung 22 der Flussverlauf bei Verwendung der NJOY-TRANSX-Daten deutlich niedriger. Für diesen niedrigeren Flussverlauf spricht auch die Tatsache, dass in diesem Energiebereich bei den NJOY-TRANSX-Daten nach Abbildung 19 die Streuung innerhalb der Gruppen 39 bis 37 deutlich niedriger ist und die Ausstreuung aus diesen Gruppen nach Abbildung 20 deutlich höher ist. Beim Streugruppenwirkungsquerschnitt in Abbildung 18, der die Summe dieser beiden Gruppenwirkungsquerschnitte aus Abbildung 19 und Abbildung 20 ist, kompensieren sich diese Unterschiede.

Bei der Gruppe 19, in der sich die breite Resonanz des U-238 bei 6.67 eV befindet, unterscheiden sich die beiden mit HELIOS aufbereiteten Daten in Abbildung 19 und Abbildung 20. Das heißt, dass nach HELIOS für eine Transportrechnung mit der 47-Gruppenstruktur in diesem Energiebereich die Datenaufbereitung mit den 47 Gruppen Grunddaten korrigiert werden muss. In dem hier konkreten Fall der B&W-UO<sub>2</sub> Zelle scheint diese Korrektur allerdings nicht notwendig, da die Flussverläufe bei den TransRay-Rechnungen mit den Grunddaten und mit den von 190 auf 47 Gruppen kondensierten Daten quasi identisch sind (siehe Abbildung 22).

Weiterhin ist in Abbildung 19 zu sehen, dass NJOY-TRANSX die Streuung innerhalb der Gruppe 7, in der sich die Streuresonanz von O-16 bei 435 keV befindet, deutlich höher berechnet. Andererseits ist bei den NJOY-TRANSX-Daten die Ausstreuung aus Gruppe 7 deutlich geringer, was in Abbildung 20 zu sehen ist. Beides trägt dazu bei, dass der Fluss, den TransRay mit den NJOY-TRANSX-Daten berechnet hat, in dieser Gruppe 7 deutlich über den quasi identischen Flusswerten der anderen Rechnungen liegt.

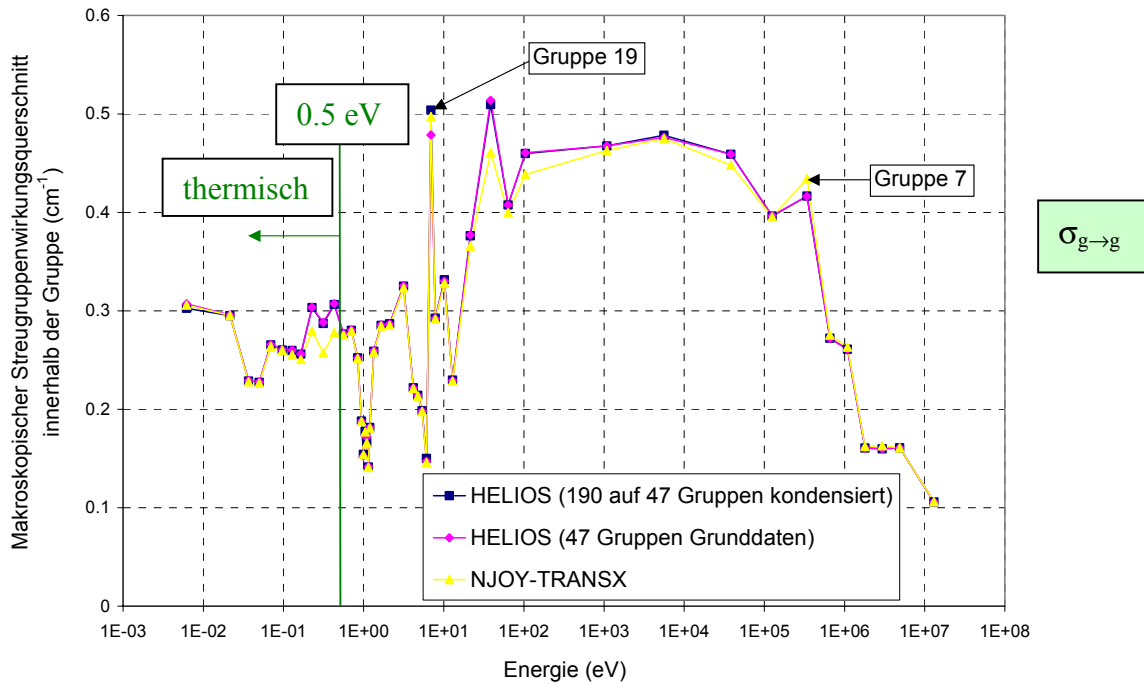


Abbildung 19: Makroskopische Streugruppenwirkungsquerschnitte innerhalb der Energiegruppen für die 47 Gruppen im Brennstoff der B&W UO<sub>2</sub> Zelle nach Datenaufbereitung mit HELIOS und NJOY-TRANSX.

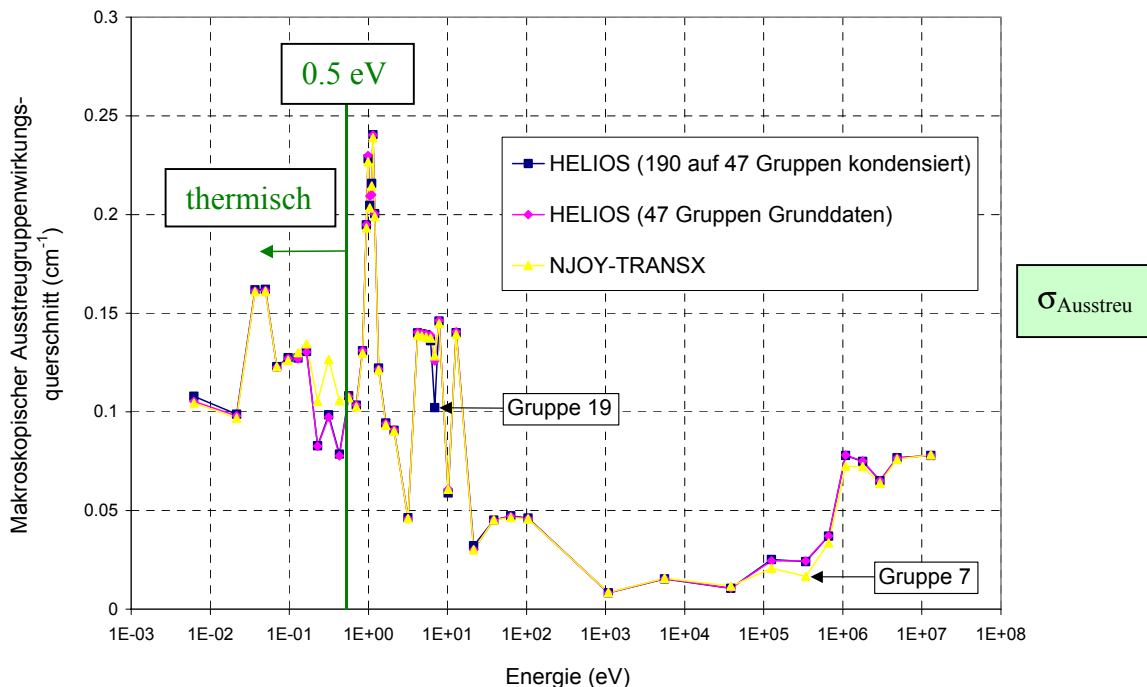


Abbildung 20: Makroskopische Ausstreugruppenwirkungsquerschnitte für 47 Gruppen im Brennstoff der B&W UO<sub>2</sub> Zelle nach Datenaufbereitung mit HELIOS und NJOY-TRANSX.

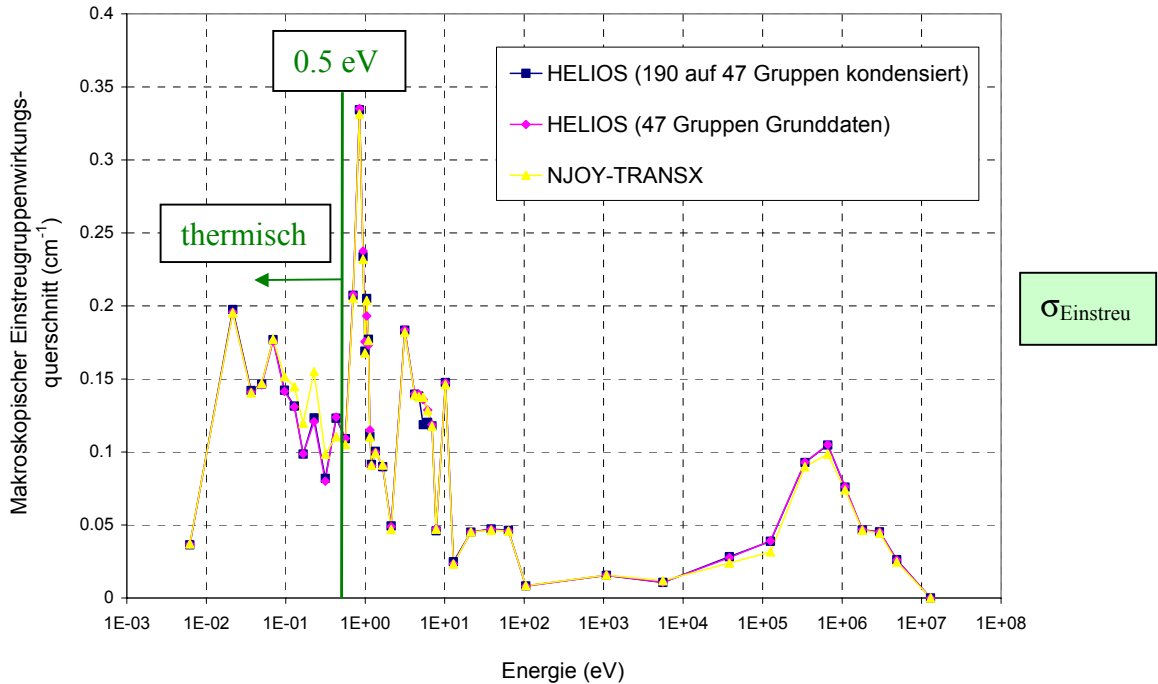


Abbildung 21: Makroskopische Einstreugruppenwirkungsquerschnitte für 47 Gruppen im Brennstoff der B&W UO<sub>2</sub> Zelle nach Datenaufbereitung mit HELIOS und NJOY-TRANSX.

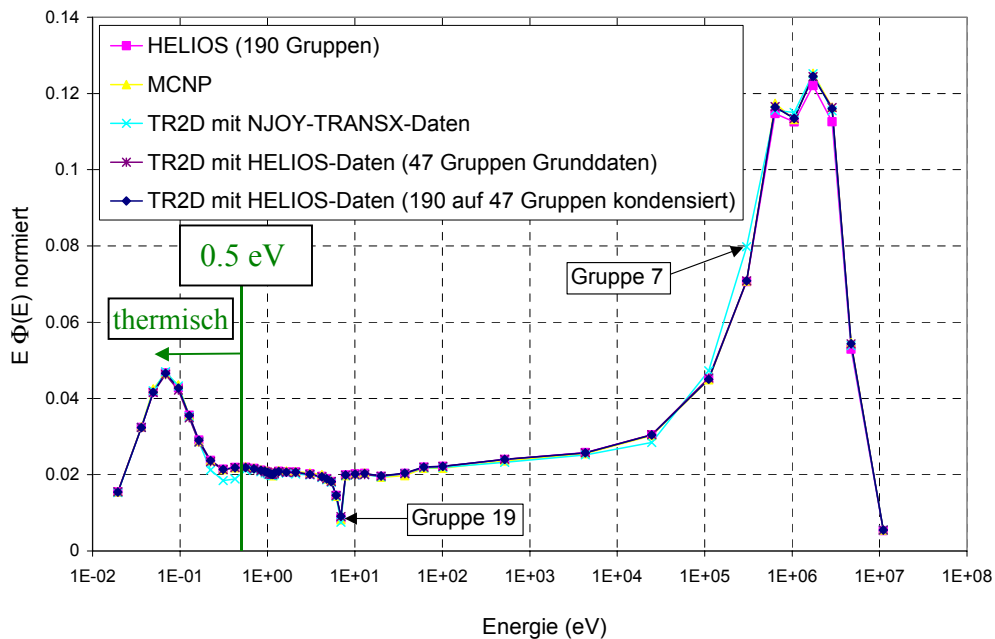


Abbildung 22: Normiertes Neutronenspektrum im Brennstoff der B&W UO<sub>2</sub> Zelle berechnet mit TransRay (HELIOS- und NJOY-TRANSX-Daten), HELIOS und MCNP.

Der Vergleich mit den drei 47-Gruppensatzdaten hat demonstriert, dass die Aufbereitung der Vielgruppenwirkungsquerschnitte, die die Grundlage einer Gruppentransportrechnung sind, wichtig und oftmals schwierig ist und dass sie einen wesentlichen Bestandteil einer jeden Gruppentransportrechnung ausmacht. Der mit der Programmkette NJOY-TRANSX aufbereitete Datensatz zeigte dabei deutliche Unterschiede zu den beiden mit HELIOS aufbereite-



ten Datensätzen. Das Neutronenspektrum, das mit TransRay mit den NJOY-TRANSX-Daten berechnet wurde, zeigt deutliche Abweichungen zu allen anderen Neutronenspektren, die ihrerseits gut übereinstimmen (Abbildung 22). Da mit den Vielgruppenwirkungsquerschnitten und dem Neutronenspektrum die gemittelten Querschnitte nach Gleichung (151) bis (153) berechnet werden, muss für dieses einfache 2D-Problem des B&W-UO<sub>2</sub> Benchmarks eine möglichst gute Übereinstimmung dieser Größen gefordert werden, wenn im folgenden Kapitel 5 TransRay mit den Programmen HELIOS und MCNP verglichen wird.

In Tabelle 2 sind die Ergebnisse für den Multiplikationsfaktor  $k_{\infty}$  und die gemittelten Zweigruppenwirkungsquerschnitte bei Verwendung der Programme HELIOS, MCNP und TransRay gegeben. Bei den TransRay Rechnungen sind dabei die Ergebnisse zu sehen für die drei diskutierten 47-Gruppensätze. Die Ergebnisse der dreidimensionalen TransRay-Rechnung wurden mit den HELIOS-Daten erhalten, die von 190 auf 47 Gruppen kondensiert wurden (Variante B2 aus Abbildung 9). Dabei ist zu sehen, dass bei den gemittelten Zweigruppenwirkungsquerschnitten die Übereinstimmung von TransRay2D und TransRay3D sehr gut ist. Dies galt auch für die anderen beiden 47-Gruppensätze. Die entsprechende Abweichung beim Multiplikationsfaktor  $k_{\infty}$  ist größer. Wie auch in Abschnitt 4.2.1 zu sehen ist, konvergierte der Wert für  $k_{\infty}$  langsamer. Auch die Neutronenspektren der zwei- und dreidimensionalen Rechnung stimmten gut überein. Demnach wurde am 2D-Problem des B&W-UO<sub>2</sub> Benchmarks demonstriert, dass TransRay2D und TransRay3D Ergebnisse liefern, die gut übereinstimmen.

Die Ergebnisse der TransRay-Rechnungen mit den HELIOS-Daten nach Variante B2 stimmen am besten mit denen der HELIOS-Rechnung mit 190 Gruppen überein. Die entsprechenden Abweichungen zu den HELIOS-Werten liegen unter 1 % bis auf den Wert für  $\nu\sigma_{f1}$  (1.28 %). Bemerkenswert muss allerdings, dass die Eingabedaten bei den HELIOS-Rechnungen den Eingabedaten und den Möglichkeiten von TransRay angepasst wurden. Bei den Eingabedaten von TransRay betrifft dies zum Beispiel die Geometrieunterteilung. Weiterhin wurde den Möglichkeiten von TransRay entsprechend in HELIOS die Richtungsabhängigkeit der Ströme an den Rändern nicht berücksichtigt.

Aber auch wenn das MCNP-Ergebnis in Tabelle 2 als Referenzlösung gewählt wird, so liegen bis auf den Wert für  $\nu\sigma_{f2}$  nur bei den TransRay-Rechnungen, bei denen die HELIOS-Daten nach Variante B2 verwendet wurden, die relativen Abweichungen unter 1 %. Bei  $\nu\sigma_{f2}$  liegt die relative Abweichung unter 2 %.

Der Multiplikationsfaktor, der mit TransRay mit den NJOY-TRANSX-Daten berechnet wurde, weicht um  $-793$  pcm vom Wert des Experiments ab ( $k_{\text{Exp.}} = 1$ ). Diese Abweichung ist inakzeptabel.

Am 2D-Problem des B&W-UO<sub>2</sub> Benchmarks zeigte sich also eine sehr gute Übereinstimmung der mit TransRay, HELIOS und MCNP gemittelten Zweigruppenquerschnitte, insbesondere wenn für TransRay die makroskopischen Gruppenquerschnitte nach Variante B2 verwendet wurden. Die Übereinstimmung an diesem einfachen 2D-Problem ist notwendig dafür, dass im folgenden Kapitel 5 der Unterschied zwischen einer 3D-Aufbereitung und den Näherungen gemittelter Zweigruppenquerschnitte untersucht werden kann. Denn erst durch den Abgleich der Datenbasis ist sicher, dass ein solcher Unterschied nicht durch ungleiche Gruppendaten der Transportprogramme vorgetäuscht wird, sondern wirklich eine Folge eines 3D-Effektes ist. Von den drei Datensätzen ist dafür der nach Variante B2 besonders gut geeignet.

Zu den mit MCNP berechneten gemittelten Zweigruppenwirkungsquerschnitten ist noch zu sagen, dass die Werte für  $k_{\infty}$ ,  $\sigma_{\text{total1}}$ ,  $\sigma_{\text{total2}}$ ,  $\sigma_{\text{abs1}}$ ,  $\sigma_{\text{abs2}}$ ,  $\nu\sigma_{f1}$  und  $\nu\sigma_{f2}$  mit den Standardausgaben aus MCNP erhalten werden können. Für die Übergangsquerschnitte  $\sigma_{i \rightarrow j}$  ( $i, j = 1, 2$ ) ist dies nicht der Fall. Zur Bestimmung von  $\sigma_{1 \rightarrow 2}$  wurden die beiden Bilanzgleichungen für die zwei Energiegruppen betrachtet:

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{abs1}}\Phi_1 + \sigma_{1 \rightarrow 2}\Phi_1 &= \sigma_{2 \rightarrow 1}\Phi_2 + \frac{\chi_1}{k_{\infty}}(\nu\sigma_{f1}\Phi_1 + \nu\sigma_{f2}\Phi_2), \\ \sigma_{\text{abs2}}\Phi_2 + \sigma_{2 \rightarrow 1}\Phi_2 &= \sigma_{1 \rightarrow 2}\Phi_1 + \frac{\chi_2}{k_{\infty}}(\nu\sigma_{f1}\Phi_1 + \nu\sigma_{f2}\Phi_2).\end{aligned}\tag{154}$$

Die über die gesamte Geometrie gemittelten Neutronenflüsse der schnellen und thermischen Gruppe,  $\Phi_1$  und  $\Phi_2$ , sind ebenfalls mit den Standardausgaben aus MCNP zu erhalten. Für die in der Reaktordynamik oft gebrauchte Aufteilung in nur zwei Gruppen mit so niedriger Gruppengrenze, so dass  $\chi_1 = 1$  und  $\chi_2 = 0$  ist, folgt

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{abs1}}\Phi_1 + \sigma_{1 \rightarrow 2}\Phi_1 &= \sigma_{2 \rightarrow 1}\Phi_2 + \frac{1}{k}(\nu\sigma_{f1}\Phi_1 + \nu\sigma_{f2}\Phi_2), \\ \sigma_{\text{abs2}}\Phi_2 + \sigma_{2 \rightarrow 1}\Phi_2 &= \sigma_{1 \rightarrow 2}\Phi_1.\end{aligned}\tag{155}$$

Dies sind somit zwei Gleichungen mit den beiden Unbekannten  $\sigma_{1 \rightarrow 2}$  und  $\sigma_{2 \rightarrow 1}$ , die offensichtlich linear abhängig sind. Somit sagt (155) unter anderem aus, dass sich der Multiplikationsfaktor abschätzen lässt als Verhältnis der gewonnenen zu den verlorenen Neutronen mit-

tels  $k_{\infty} = \frac{\nu\sigma_{f1}\Phi_1 + \nu\sigma_{f2}\Phi_2}{\sigma_{abs1}\Phi_1 + \sigma_{abs2}\Phi_2}$ . Bei der Gruppengrenze von 3.9279 eV kann jedoch angenom-

men werden, dass der Aufstreugruppenwirkungsquerschnitt  $\sigma_{2 \rightarrow 1} = 0$  ist. Dies war zum Beispiel in Kapitel 4 und 5 bei allen Rechnungen mit HELIOS-Daten der Fall. Aus der zweiten Bilanzgleichung in (155) lässt sich demnach  $\sigma_{1 \rightarrow 2}$  unter Vernachlässigung der Aufstreuung abschätzen zu

$$\sigma_{1 \rightarrow 2} \approx \sigma_{abs2} \frac{\Phi_2}{\Phi_1}. \quad (156)$$

Die erste Bilanzgleichung in (155) kann durch Einsetzen des Wertes von  $\sigma_{1 \rightarrow 2}$  als Kontrollgleichung verwendet werden. Werden nun die Gleichungen

$$\begin{aligned} \sigma_{total1} &= \sigma_{abs1} + \sigma_{Streu1} = \sigma_{abs1} + \sigma_{1 \rightarrow 1} + \sigma_{1 \rightarrow 2} \quad \text{und} \\ \sigma_{total2} &= \sigma_{abs2} + \sigma_{Streu2} = \sigma_{abs2} + \sigma_{2 \rightarrow 1} + \sigma_{2 \rightarrow 2} \end{aligned} \quad (157)$$

betrachtet, so folgt unter der erneuten Annahme  $\sigma_{2 \rightarrow 1} = 0$ , dass

$$\begin{aligned} \sigma_{1 \rightarrow 1} &= \sigma_{total1} - \sigma_{abs1} - \sigma_{1 \rightarrow 2} \quad \text{und} \\ \sigma_{2 \rightarrow 2} &= \sigma_{total2} - \sigma_{abs2}. \end{aligned} \quad (158)$$

Die angegebenen MCNP-Werte für  $\sigma_{1 \rightarrow 2}$ ,  $\sigma_{1 \rightarrow 1}$  und  $\sigma_{2 \rightarrow 2}$  in Tabelle 2 und in allen folgenden Darstellungen des Kapitels 5 wurden nach (156) und (158) berechnet.

Folgendes Fazit lässt sich aus den Ergebnissen des Abschnitts 4.2.2 ziehen:

Selbst bei diesem recht einfachen 2D-Problem des B&W-UO<sub>2</sub> Benchmarks, bei dem es keine großen Flussgradienten gibt, wie zum Beispiel bei den später in Abschnitt 5.2 betrachteten Fällen mit Absorbern oder mit Voidbereichen, zeigen sich schon deutliche Unterschiede in den TransRay-Ergebnissen bei Verwendung unterschiedlicher Datensätze makroskopischer Gruppenwirkungsquerschnitte. Mit dem HELIOS-Datensatz, der nach Variante B2 (Abbildung 9) erzeugt wurde, stimmten die TransRay-Ergebnisse am besten mit denen von HELIOS und MCNP überein. Dieser wird im folgenden Kapitel 5 verwendet. Damit beruhen die weiteren TransRay- und HELIOS-Rechnungen auf einer einheitlichen Datengrundlage.

Daten	NJOY-TRANSX 47-Gruppensdaten		HELIOS 47-Gruppen- Grunddaten		HELIOS von 190 auf 47 Gruppen kondensier- te Daten				HELIOS 190-Grup- pendaten	MCNP Punktdaten		
	TransRay2D	TransRay2D	TransRay2D	TransRay2D	TransRay2D	TransRay2D	TransRay3D	TransRay3D	HELIOS	MCNP		
$k_{\infty}$	9.9207E-01	-0.88%	1.0024E+00	0.15%	1.0010E+00	0.01%	1.0024E+00	0.15%	1.0009E+00	9.9909E-01	-0.18%	
Abweichung von $k_{Exp.}=1$	-793 pcm		241 pcm		103 pcm				90 pcm		-91 pcm	
$\sigma_{total1}$ ( $cm^{-1}$ )	6.2379E-01	-1.43%	6.3244E-01	-0.06%	6.3226E-01	-0.09%	6.3221E-01	-0.09%	6.3281E-01	6.3033E-01	-0.39%	
$\sigma_{total2}$ ( $cm^{-1}$ )	1.7048E+00	0.25%	1.7016E+00	0.06%	1.6993E+00	-0.08%	1.7047E+00	0.24%	1.7006E+00	1.6938E+00	-0.40%	
$\sigma_{abs1}$ ( $cm^{-1}$ )	8.7797E-03	-1.44%	9.0993E-03	2.15%	8.9858E-03	0.87%	8.9551E-03	0.53%	8.9081E-03	8.9183E-03	0.11%	
$\sigma_{abs2}$ ( $cm^{-1}$ )	9.8835E-02	0.80%	9.8100E-02	0.05%	9.8087E-02	0.04%	9.7906E-02	-0.14%	9.8047E-02	9.7128E-02	-0.94%	
$\sigma_{1 \rightarrow 1}$ ( $cm^{-1}$ )	5.8905E-01	-1.38%	5.9695E-01	-0.05%	5.9675E-01	-0.09%	5.9668E-01	-0.10%	5.9727E-01	5.9485E-01	-0.40%	
$\sigma_{1 \rightarrow 2}$ ( $cm^{-1}$ )	2.5963E-02	-2.51%	2.6393E-02	-0.90%	2.6523E-02	-0.41%	2.6571E-02	-0.23%	2.6632E-02	2.6558E-02	-0.28%	
$\sigma_{2 \rightarrow 1}$ ( $cm^{-1}$ )	2.2805E-05		0.0000E+00		0.0000E+00		0.0000E+00		0.0000E+00			
$\sigma_{2 \rightarrow 2}$ ( $cm^{-1}$ )	1.6060E+00	0.21%	1.6035E+00	0.06%	1.6013E+00	-0.08%	1.6068E+00	0.26%	1.6026E+00	1.5967E+00	-0.37%	
$\nu\sigma_{f1}$ ( $cm^{-1}$ )	5.5443E-03	-1.98%	5.8031E-03	2.59%	5.7261E-03	1.23%	5.7290E-03	1.28%	5.6565E-03	5.7286E-03	1.27%	
$\nu\sigma_{f2}$ ( $cm^{-1}$ )	1.1011E-01	-0.02%	1.1068E-01	0.49%	1.1029E-01	0.14%	1.0962E-01	-0.47%	1.1014E-01	1.0846E-01	-1.52%	

Tabelle 2: Vergleich der mit TransRay, HELIOS und MCNP berechneten Werte für  $k_{\infty}$  und für die gemittelten Zweigruppenwirkungsquerschnitte (1: schnelle Gruppe, 2: thermische Gruppe, Gruppengrenze bei 3.9279 eV) beim B&W-UO<sub>2</sub> Benchmark. Für die TransRay-Rechnungen wurden drei verschiedene 47-Gruppensätze verwendet. In Prozent ist die relative Abweichung zum entsprechenden Wert der HELIOS-Rechnung angegeben.

## 5 Zellrechnungen an einem Druckwasser-Referenzreaktor

Kapitel 5 enthält nur noch die Ergebnisse der TransRay-Rechnungen, deren Eingangsdaten, die makroskopischen Querschnitte, mittels HELIOS erzeugt wurden. All diese Rechnungen wurden an derselben Kernkonfiguration eines Druckwasser-Referenzreaktors durchgeführt. Die Daten wurden im Wesentlichen aus einem Entwicklungsbericht zu diesem Reaktor entnommen. Dabei wurden die Daten der Kernausslegung für den ersten Zyklus verwendet. Die Anreicherung im Uran des Brennstoffs ( $\text{UO}_2$ ) betrug 1.9 %. Im Brennstoff wurde eine Temperatur von 800 K angenommen und in allen anderen Materialbereichen eine Temperatur von 587.2 K. Die Borkonzentration im Moderator (boriertes Wasser) betrug 960 ppm. Informationen über die betrachteten Materialien und die verwendeten Bibliotheken bei den MCNP-Rechnungen sind in Tabelle 3 zu sehen.

In diesem Kapitel werden wiederum für alle betrachteten Fälle die Ergebnisse der Programme HELIOS, MCNP und TransRay miteinander verglichen. Die Datenaufbereitung für die TransRay-Rechnungen erfolgte mit HELIOS nach der Variante B2 (Abb. 9). Die HELIOS-Rechnungen wurden alle mit dem 190-Gruppensatz ausgeführt. Folglich beruhen alle folgenden TransRay- und HELIOS-Rechnungen auf einer einheitlichen Datengrundlage.

Die dreidimensional berechneten Zweigruppenquerschnitte werden mit üblichen Näherungen verglichen. Drei Näherungen werden betrachtet: Die einfachste 2D-Näherung ist die lineare Interpolation zwischen den zweidimensional berechneten Werten des vollständig gezogenen und des vollständig eingefahrenen Regelstabes, bzw. des Brennstabes, der nur mit Moderator und nur mit Void umgeben ist. Bei der zweiten Näherung werden diese zweidimensional berechneten Werte mit berechneten Neutronengruppenflüssen zusätzlich gewichtet. Als Dritte wird die 2D-Näherung betrachtet, bei der der Regelstab bzw. das Void mit dem Moderator homogenisiert wird.

Zuerst wird in Abschnitt 5.1 das 2D-Problem der unendlich langen Brennstabzelle berechnet. Nach der Überprüfung des Programms TransRay an zweidimensionalen Problemen werden in Abschnitt 5.2 erstmals die dreidimensionalen Probleme behandelt. Zunächst werden in Abschnitt 5.2.1 Vorbemerkungen zu den Randbedingungen, dem 3D-Geometriemodell in TransRay und den drei verwendeten Näherungen zur Berechnung der gemittelten Zweigruppenquerschnitte gemacht. Danach werden die beiden 3D-Modelle betrachtet: Der eingetauchte Regelstab und die Brennstabzelle mit der „Dampfblase“ im Moderatorgebiet. Die Abhängigkeit des Multiplikationsfaktors  $k_\infty$  und der gemittelten Zweigruppenwirkungsquerschnitte von der Eintauchtiefe des Regelstabes beziehungsweise von der Höhe der

Dampfblase um den Brennstab werden untersucht. Die dreidimensional berechneten Zweigruppenquerschnitte werden mit den Näherungen verglichen und aus diesem Vergleich wird die Notwendigkeit einer 3D-Aufbereitung gemittelter Zweigruppenwirkungsquerschnitte bewertet.

Materialzone (mit verwendeter Temperatur)	Materialien	Dichte in g/cm <sup>3</sup>	Kerndichten in Teilchen cm <sup>-3</sup> 10 <sup>24</sup>	Massenprozent	Verwendete MCNP-Bibliotheken	
						Temp. in K (Quelle, Jahr)
Brennstoff (800 K)	UO <sub>2</sub> (U-235 1.9 % wt angereichert)	10.96 theor. 10.412 (95 %) <b>10.0368</b> (verschmiert)	U-235: 4.30689E-04 U-238: 2.19563E-02 O-nat: 4.47739E-02	U-235: 1.6748 % U-238: 86.4734 % O-nat: 11.8518 %	U-235 U-238 O-16	800 (B-VI.2, 89) 800 (B-VI.2, 93) 880.8 (B-V.0, 72)
Brennstabhülle (587.2 K) Führungsrohr (587.2 K)	Zirkonium Zr	$\rho_{Zr} = 6.51 \text{ g/cm}^3$	Zr-nat: 4.29758E-02	Zr-nat: 100 %	Zr-nat	587.2 (B-V:X-5, 76)
Moderator (587.2 K)	Boriertes Wasser (Borkonzentration 960 ppm)	<b>0.70472</b> (p = 153.24 bar, T = 310.1°C)	H-nat: 4.70694E-02 O-nat: 2.35347E-02 B-10: 7.49937E-06 B-11: 3.01859E-05	H-nat: 11.1791 % O-nat: 88.7249 % B-10: 0.0177 % B-11: 0.0783 %	H-1 S(α,β): H-1 in leichtem Wasser O-16 B-10 B-11	587.2 (B-V.0, 77) 600 (ENDF, 85) 587.2 (B-V.0, 72) 587.2 (B-V.0, 77) 293.6 (B-VI.0, 89)
Absorberstab (587.2 K)	Ag, In, Cd	10.17 <b>9.9864</b> (verschmiert)	Ag-107: 2.31213E-02 Ag-109: 2.14809E-02 In-nat: 7.85671E-03 In-113: 3.37053E-04 In-115: 7.51966E-03 Cd-nat: 2.67498E-03	Ag-nat: 80 %  In-nat: 15 %  Cd-nat: 5 %	Ag-107 Ag-109 In-nat  Cd-nat	293.6 (B-VI.0, 83) 293.6 (B-VI.0, 83) 293.6 (B-VI.0, 90)  300 (LLNL, <92)
Absorberstahl- hülle (587.2 K)	SS347	<b>7.9</b>	Fe-nat: 5.82280E-02 Cr-nat: 1.59205E-02 Ni-nat: 9.48362E-03 Mn-55: 1.72329E-03 N: 1.73226E-03	Fe-nat: 68.35 wt % Cr-nat: 17.40 wt % Ni-nat: 11.70 wt % Mn-55: 1.99 wt % N: 0.51 wt % Summe=99.95 wt %	Fe-nat Cr-nat Ni-nat Mn-55 N-14	300 (T2:X-5, 89) 293.6 (B-V.0, 77) 293.6 (B-V.0, 77) 293.6 (B-VI.0, 88) 293.6 (T-2, 92)

Tabelle 3: Verwendete Materialdaten für die Rechnungen zum Druckwasser-Referenzreaktor.

## 5.1 Berechnung der unendlich langen Brennstabzelle (2D-Problem)

Abbildung 23 zeigt einen horizontalen Querschnitt durch die Brennstabzelle des Druckwasser-Referenzreaktors. Es sind die Maße für die Brennstabzelle mit den Materialzonen für den Brennstoff, die Hülle und den Moderator angegeben. Der Brennstoff wurde dabei in den Spalt zwischen den Brennstoffpellets und der Hülle verschmiert.

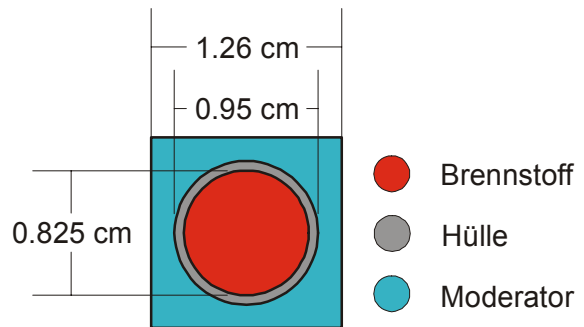


Abbildung 23: Brennstabzelle des Druckwasser-Referenzreaktors (verhältnisgleich)

Bei der Berechnung einer solchen Brennstabzelle in einem Bereich, der in allen drei Raumrichtungen weit genug vom Rand des Reaktors entfernt ist, kann näherungsweise die unendliche Brennstabzelle angenommen werden. Das heißt, dass die einzelne Brennstabzelle in diesem Bereich in allen drei Raumrichtungen mit Reflexionsrandbedingungen berechnet wird. Da die Material- und Geometriebedingungen der Brennstabzelle unabhängig von der vertikalen Richtung sind, handelt es sich um ein zweidimensionales Problem.

Das Problem wurde mit TransRay zwei- und dreidimensional berechnet. Die Ergebnisse der HELIOS-, MCNP- und TransRay-Rechnungen für den Multiplikationsfaktor  $k_{\infty}$  und

	TransRay2D Wert mit rel. Abweichung zum HELIOS-Wert		TransRay3D Wert mit rel. Abweichung zum HELIOS-Wert		MCNP Wert mit rel. Abweichung zum HELIOS-Wert		HELIOS
$k_{\infty}$	1.0701E+00	-0.21%	1.0748E+00	0.23%	1.0738E+00	0.13%	1.0724E+00
$\sigma_{\text{total1}}$	5.1171E-01	-0.03%	5.1187E-01	0.01%	5.0557E-01	-1.22%	5.1184E-01
$\sigma_{\text{total2}}$	1.1591E+00	-0.10%	1.1598E+00	-0.04%	1.1405E+00	-1.70%	1.1603E+00
$\sigma_{\text{abs1}}$	8.9840E-03	0.93%	8.9830E-03	0.92%	8.9100E-03	0.10%	8.9009E-03
$\sigma_{\text{abs2}}$	5.8946E-02	0.12%	5.8924E-02	0.08%	5.8201E-02	-1.15%	5.8877E-02
$\sigma_{1 \rightarrow 1}$	4.8528E-01	-0.02%	4.8541E-01	0.00%	4.7917E-01	-1.28%	4.8539E-01
$\sigma_{1 \rightarrow 2}$	1.7444E-02	-0.55%	1.7474E-02	-0.38%	1.7484E-02	-0.32%	1.7540E-02
$\sigma_{2 \rightarrow 1}$	0.0000E+00		0.0000E+00				0.0000E+00
$\sigma_{2 \rightarrow 2}$	1.1002E+00	-0.11%	1.1009E+00	-0.04%	1.0823E+00	-1.73%	1.1014E+00
$\nu\sigma_{f1}$	4.9501E-03	0.81%	4.9501E-03	0.81%	4.9600E-03	1.01%	4.9104E-03
$\nu\sigma_{f2}$	7.8850E-02	0.20%	7.8789E-02	0.12%	7.7700E-02	-1.26%	7.8695E-02

Tabelle 4: Vergleich der mit TransRay zwei- und dreidimensional, mit HELIOS und mit MCNP berechneten Werte für  $k_{\infty}$  und für die gemittelten Zweigruppenwirkungsquerschnitte (in  $\text{cm}^{-1}$ , 1: schnelle Gruppe, 2: thermische Gruppe, Gruppengrenze bei 3.9279 eV) bei der unendlich langen Brennstabzelle des Druckwasser-Referenzreaktors.



die gemittelten Zweigruppenwirkungsquerschnitte stehen in Tabelle 4. Die relativen Abweichungen der TransRay-Ergebnisse zu den HELIOS-Ergebnissen liegen unter 1 %. Bei den Absorptions- und Produktionsquerschnitten sind die relativen Abweichungen für die schnelle Gruppe größer als die für die thermische Gruppe. Insbesondere fällt auf, dass wie bei den TransRay-Werten in Tabelle 2 beim B&W-UO<sub>2</sub> Benchmark (Spalte: HELIOS von 190 auf 47 Gruppen kondensierte Daten) die TransRay-Werte für  $\nu\sigma_{f1}$  deutlich näher am MCNP-Wert liegen als am HELIOS-Wert.

Bisher wurde das Programm TransRay an den beiden zweidimensionalen Problemen der B&W-UO<sub>2</sub> Zelle und der unendlich langen Brennstabzelle des Druckwasser-Referenzreaktors überprüft. Dabei stimmen die Ergebnisse von TransRay2D und TransRay3D gut überein und TransRay stimmt gut mit HELIOS und MCNP überein. Als Fazit dieser Verifikation von TransRay lässt sich formulieren, dass TransRay und die verwendete Datenbasis für die nun folgenden Untersuchungen von 3D-Zelleffekten geeignet sind.

## **5.2 Berechnung von 3D-Problemen**

In der Einleitung wurden die beiden Hauptaufgaben dieser Arbeit formuliert. Die erste Hauptaufgabe umfasst die Entwicklung und Verifikation von TransRay. Die zweite Hauptaufgabe beinhaltet die Untersuchung von 3D-Problemen. Der Darstellung der Ergebnisse werden Bemerkungen zu folgenden Punkten vorangestellt:

- 1) Die Randbedingungen für die Zellrechnungen.
- 2) Das 3D-Geometriemodell, das in TransRay verwendet wird.
- 3) Übliche Näherungen zur Berechnung der gemittelten Zweigruppenquerschnitte, mit denen in den darauf folgenden Abschnitten die dreidimensional berechneten Zweigruppenquerschnitte verglichen werden.

### **5.2.1 Vorbemerkungen zu den Randbedingungen, dem 3D-Geometriemodell in TransRay und den Näherungen für gemittelte Gruppenquerschnitte**

#### 1) Die Randbedingungen für die Zellrechnungen:

In den 2D-Zellcodes, mit denen Zellen, d. h. Anordnungen von einzelnen Brennelementzellen oder ganze Brennelemente, in der horizontalen Ebene des Reaktors berechnet werden, werden oftmals Reflexionsrandbedingungen an den Rändern der Zelle angenommen. Ist der betrachtete Bereich der Zelle weit genug vom Rand des Reaktors entfernt, ist dies in vielen Fällen eine gute Näherung.

In den folgenden Abschnitten werden die 3D-Probleme des eingetauchten Regelstabes und der Brennstabzelle mit der „Dampfblase“ im Moderatorgebiet untersucht. Dabei werden

ebenfalls an den äußeren Rändern der Zelle Reflexionsrandbedingungen angenommen. Dies ist in axialer Richtung eine unrealistische Bedingung, insbesondere für den eingetauchten Regelstab. Beim Void-Testfall entsprechen die Reflexionsrandbedingungen an den Rändern in z-Richtung der unendlichen Fortsetzung von Voidblasen in z-Richtung. Die in dieser Arbeit zu untersuchende Frage ist jedoch, wie sich die gemittelten Zweigruppenquerschnitte unterscheiden, wenn sie dreidimensional oder durch übliche Näherungen berechnet werden. Bei der Verwendung von Reflexionsrandbedingungen können die entscheidenden Tendenzen in den Unterschieden erkannt werden.

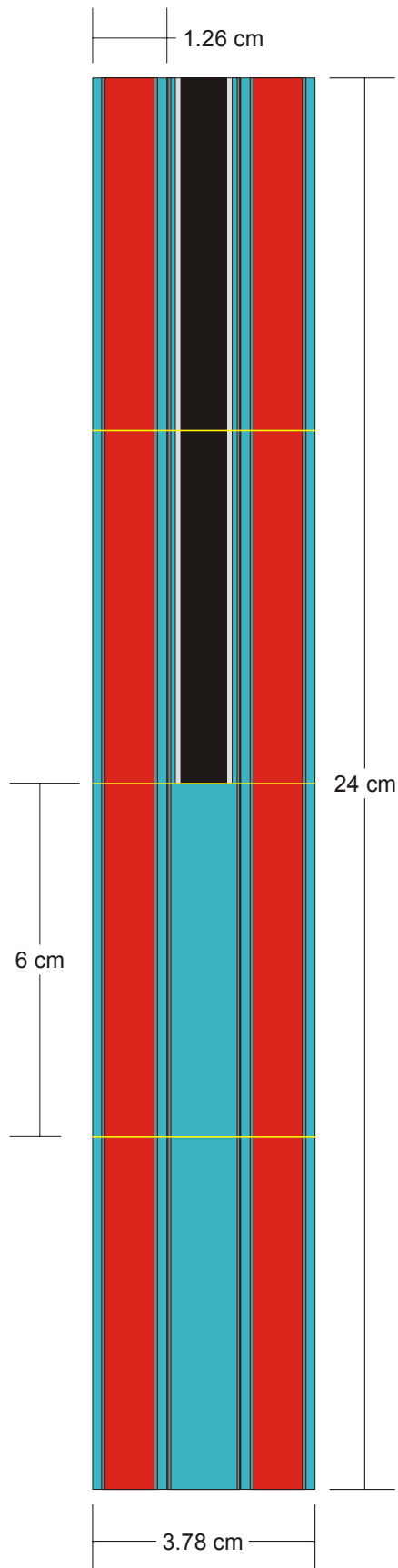
Mit TransRay2D werden die 2D-Probleme des vollständig eingetauchten und des gezogenen Regelstabes bzw. des Brennstabes, der nur mit Moderator und nur mit Void umgeben ist, unter Verwendung von Reflexionsrandbedingungen nach der in Abschnitt 2.3.2.1 beschriebenen Methode berechnet, d. h. als Zelle im unendlichen Gitter gleicher Zellen. Werden bei den 3D-Problemen diese Randbedingungen auch in axialer Richtung angenommen, so können in den 3D-Rechnungen mit TransRay die Flüsse nach demselben „einfachen“ Algorithmus berechnet werden.

Die Verwendung realistischer Randbedingungen in axialer Richtung bleibt trotzdem eine offene Frage, die untersucht werden müsste. Eine Möglichkeit realistischere Randbedingungen zu erzeugen ist, die in die 3D-Zelle eintretenden Ströme  $\vec{j}_L$  aus einer vorher auszuführenden 3D-Berechnung des Reaktors zu bestimmen, diese in Gleichung (125 a) einzusetzen und somit aus dieser Gleichung die Flüsse zu berechnen.

## 2) Das 3D-Geometriemodell in TransRay:

Jede dreidimensionale Zelle, deren Geometrie oder Materialzusammensetzung abhängig von der vertikalen Richtung waren und die mit TransRay berechnet wurde, wurde in Höhenschichten unterteilt, die jeweils unabhängig in vertikaler Richtung waren, d. h. für sich ein 2D-Problem darstellten. Diese Unterteilung war notwendig, da die makroskopischen Gruppenwirkungsquerschnitte mit dem Programm HELIOS aufbereitet wurden, welches nur zweidimensionale geometrische Anordnungen berechnen kann. Abbildung 24 zeigt für den 3D-Testfall des halb eingetauchten Regelstabes einen vertikalen Querschnitt durch die Zelle, die in vier Höhenschichten von jeweils 6 cm unterteilt ist.

Allerdings sind die TransRay-Ergebnisse abhängig von der gewählten Unterteilung in Höhenschichten. Es muss also vorher überlegt werden, welche Höhenunterteilung physikalisch sinnvoll ist. Wie bereits in Abschnitt 4.1 gesagt wurde, müssten die Eingangsdaten für eine 3D-Transportrechnung mit TransRay eigentlich bereits vorher dreidimensional aufbereitet werden oder es müsste zumindest zwischen HELIOS und TransRay iteriert werden. Die



TransRay-Ergebnisse in Kapitel 5 zeigten jedoch bei den gewählten Unterteilungen in Höhengschichten mit den MCNP-Ergebnissen eine gute Übereinstimmung.

Beim Void-Testfall führte eine Unterteilung der 24 cm hohen Zelle in kleinere Höhengschichten, zum Beispiel 1 cm- statt 6 cm-Höhengschichten am Übergangsbereich vom Void zum Moderator, zu schlechteren TransRay-Ergebnissen. Dies ist insofern verständlich, dass aufgrund der 2D-Datenaufbereitung in den 1 cm-Höhengschichten mit gleicher Geometrie auch dieselben Gruppenwirkungsquerschnitte verwendet werden, was natürlich nicht stimmt. Bei Verwendung der 6 cm-Höhengschichten mittelt sich der Fehler offenbar mehr oder weniger über einen größeren Raumbereich betrachtet heraus. Dieser Punkt wird in dieser Arbeit nicht weiter untersucht. Die Ergebnisse in Abschnitt 5.2 sind trotzdem qualitativ ausreichend, um Aussagen zu machen über den Einfluss von 3D-Effekten auf die Berechnung des Multiplikationsfaktors  $k_{\infty}$  und der gemittelten Zweigruppenwirkungsquerschnitte einer heterogenen Zelle mit Regelstäben oder Voidbereichen.

### 3) Die Näherungen für die gemittelten Querschnitte:

Folgende Näherungen zur Berechnung der gemittelten Zweigruppenquerschnitte werden für die beiden 3D-Probleme des eingetauchten Regelstabes und der Brennstabzelle mit der Dampfblase im Moderatorbereich betrachtet:

- Lineare bzw. „geometrische“ Interpolation,
- Interpolation mit Flusswichtung,
- Homogenisierung.

Die 2D-Näherung a ist die einfachste Näherung.

Sie wird oftmals als grobe Abschätzung verwendet, d. h.,

Abbildung 24: Druckwasser-Referenzreaktor: Regelstabzelle mit  $\frac{1}{2}$  eingetauchtem Regelstab mit 2 benachbarten Brennstabzellen (verhältnisgleich; vertikaler Schnitt); entsprechend der Geometrieingabe in TransRay mit Unterteilung in 6 cm-Höhengschichten.

die in 2D-Rechnungen gemittelten Querschnitte der 2D-Fälle werden lediglich linear interpoliert. Die 2D-Fälle der beiden 3D-Probleme, die in dieser Arbeit behandelt werden, sind der gezogene und der vollständig eingetauchte Regelstab bzw. der Brennstab, der nur mit Moderator derselben Dichte und nur mit Void umgeben ist.

Die Näherung b ist keine reine 2D-Näherung, da in ihr eine zusätzliche 3D-Rechnung in grober Orts- und Energiediskretisierung (zwei Volumina und zwei Gruppen) ausgeführt wird. Sie wird üblicherweise beim Fall eingetauchter Regelstäbe angewandt.

Die 2D-Näherung c wird allgemein als einfache Näherung verwendet, wenn die Geometrie und Materialzusammensetzung der Zelle im Wesentlichen unabhängig von der vertikalen Richtung sind, jedoch die Dichte der Materialien abhängig in dieser Richtung ist. Daher wird sie üblicherweise angewandt, wenn nur die Dichte des Moderators abhängig von der vertikalen Richtung ist wie zum Beispiel beim hier untersuchten Fall von Dampfblasen im Moderatorgebiet der Brennstabzelle.

Die drei Näherungen werden nun mathematisch formuliert. In diesem Abschnitt wird für die Zelle das Symbol  $V$  und für einzelne Teilbereiche werden die Symbole  $V_i$  und  $W_j$  verwendet. Zur Vereinfachung bezeichnen diese Symbole sowohl das räumliche Gebiet als auch das Volumen des Gebiets.

Am Beispiel eingetauchter Regelstäbe werden zuerst die Näherungen a und b beschrieben, mit denen der über das Volumen  $V$  und die Energiegruppe  $G$  gemittelte Gruppenwirkungsquerschnitte  $\sigma_{V,G}$  approximiert wird, der eigentlich nach der Mittelungsvorschrift in Gleichung (147) bestimmt werden müsste. Das einfachste Verfahren zur Berechnung der  $\sigma_{V,G}$  besteht darin, jeweils eine 2D-Transportrechnung für die beiden Fälle der vollständig eingetauchten bzw. gezogenen Regelstäbe auszuführen. Nach der Mittelungsvorschrift in Gleichung (147) werden so die gemittelten Gruppenwirkungsquerschnitte mit Regelstäben ( $\sigma_{V,G}^R$ ) und ohne Regelstäbe ( $\sigma_{V,G}^0$ ) erhalten. Die Höhe des Volumens  $V$  sei  $H$  und die Eintauchtiefe der Regelstäbe sei  $h$ . Oftmals wird zur Abschätzung der  $\sigma_{V,G}$  die einfache Näherung a verwendet, d. h. die lineare Interpolation zwischen den zweidimensional berechneten Werten:

$$\sigma_{V,G}(h) = \frac{\sigma_{V,G}^R \cdot h + \sigma_{V,G}^0 \cdot (H - h)}{H}. \quad (159)$$

Hat das Volumen  $V$  die Grundfläche  $F$ , so entspricht diese lineare Interpolation genau der Wichtung von  $\sigma_{V,G}^R$  mit dem Volumen  $F \cdot h$  des Bereichs mit Regelstäben und von  $\sigma_{V,G}^0$  mit dem Volumen  $F \cdot (H - h)$  des Bereichs ohne Regelstäbe. Gleichung (159) ist somit eine rein „geometrische“ Interpolation.

Bei der Näherung b, die u. a. zur Aufbereitung der Zweigruppenquerschnitte für das Programm DYN3D angewandt wird, wird bei der Interpolation zwischen den Werten von  $\sigma_{V,G}^R$  und  $\sigma_{V,G}^0$  eine zusätzliche Wichtung mit Flüssen ausgeführt. Dazu werden zwei benachbarte Volumina  $V^R$  und  $V^0$  betrachtet. In  $V^R$  werden die Gruppenquerschnitte  $\sigma_{V,G}^R$  und in  $V^0$  die Gruppenquerschnitte  $\sigma_{V,G}^0$  angenommen, d. h., die Regelstäbe sind in  $V^R$  vollständig eingetaucht und reichen genau bis zur benachbarten Grenzfläche mit  $V^0$ . Mit DYN3D wird dann eine zusätzliche 3D-Rechnung ausgeführt, in der Ort und Energie grob diskretisiert sind, d. h., die Querschnitte sind über das gesamte Volumen  $V^R$  bzw.  $V^0$  gemittelt und es werden zwei Energiegruppen betrachtet ( $G = 1$  und  $2$ ). Aus dieser Rechnung werden die über die jeweiligen Volumina räumlich gemittelten Flüsse  $\Phi_{V^R,G}$  und  $\Phi_{V^0,G}$  bestimmt. Die Interpolation zwischen den Werten von  $\sigma_{V,G}^R$  und  $\sigma_{V,G}^0$  erfolgt dann nach

$$\sigma_{V,G}(h) = \frac{\sigma_{V,G}^R \cdot h \cdot \Phi_{V^R,G} + \sigma_{V,G}^0 \cdot (H-h) \cdot \Phi_{V^0,G}}{h \cdot \Phi_{V^R,G} + (H-h) \cdot \Phi_{V^0,G}}. \quad (160)$$

Die Näherung b in Gleichung (160) wird in den folgenden Abschnitten mit TransRay modelliert. Im Fall des eingetauchten Regelstabes werden dazu aus den beiden 2D-Fällen des vollständig eingetauchten und des gezogenen Regelstabes die gemittelten Querschnitte mit Regelstab  $\sigma_{V,G}^R$  und ohne Regelstab  $\sigma_{V,G}^0$  nach der Mittelungsvorschrift (147) mit TransRay2D berechnet. Ist  $H$  die Höhe der Zelle, die mit feiner Orts- und Energiediskretisierung dreidimensional berechnet wurde, so wird diese Zelle grob in nur zwei Volumina  $V^R$  und  $V^0$  mit jeweils einer Höhe von  $H/2$  unterteilt. Mit den Querschnitten  $\sigma_{V,G}^R$  in  $V^R$  und  $\sigma_{V,G}^0$  in  $V^0$  wird dann mit TransRay3D eine dreidimensionale Transportrechnung ausgeführt, in der also Ort und Energie grob diskretisiert sind, d. h. zwei Volumina  $V^R$  und  $V^0$  und zwei Energiegruppen. Die über  $V^R$  und  $V^0$  räumlich gemittelten Flüsse  $\Phi_{V^R,G}$  und  $\Phi_{V^0,G}$  werden berechnet und die Interpolation nach Vorschrift (160) ausgeführt.

Die Näherung a wird auch für den Void-Testfall betrachtet. Sie wird wie beim Regelstab-Testfall ausgeführt, nur statt dass der Querschnitte  $\sigma_{V,G}^R$  mit Regelstab und  $\sigma_{V,G}^0$  ohne Regelstab die entsprechenden Querschnitte  $\sigma_{V,G}^{\text{Void}}$  mit 0 % und  $\sigma_{V,G}^{\text{Moderator}}$  mit 100 % Moderator zweidimensional mit TransRay berechnet werden.

Die Näherung b beim Void-Testfall wird analog zum Regelstab-Testfall behandelt, d. h., es werden die entsprechenden räumlich gemittelten Flüsse  $\Phi_{V^{\text{Void}},G}$  und  $\Phi_{V^{\text{Moderator}},G}$  be-

rechnet, mit denen dann die Interpolation nach der Vorschrift (160) erfolgt, wobei  $h$  hier die Höhe des Voidbereichs ist.

Der Code SIMULATE [3] sei hier als ein Beispiel eines Programms erwähnt, das ebenfalls eine zusätzliche Flusswichtung der gemittelten Querschnitte betrachtet, wenn Heterogenitäten in der vertikalen Richtung auftreten. Dabei wird eine 1D-Rechnung in vertikaler Richtung ( $z$ -Koordinate) ausgeführt, um eine Flussfunktion  $\Phi(z)$  zu bestimmen. Das Homogenisierungsmodell in SIMULATE erhält die Neutronenbilanzen innerhalb der Node-Heterogenitäten in  $z$ -Richtung. Mit einem Gruppenwirkungsquerschnitt  $\bar{\sigma}_G(z)$ , der nur von der  $z$ -Koordinate abhängt, wird die Mittelung über das Node  $V$  wie folgt ausgeführt:

$$\sigma_{V,G} = \frac{\int_0^H \bar{\sigma}_G(z) \cdot \Phi_G(z) dz}{\int_0^H \Phi_G(z) dz} . \quad (161)$$

Weiterhin werden in vertikaler Richtung Diskontinuitätsfaktoren an den Nodegrenzen berechnet. Die homogenisierten Gruppenwirkungsquerschnitte aus (161) und die Diskontinuitätsfaktoren werden dann für die 3D-Diffusionsberechnung des gesamten Reaktorkerns verwendet.

Als letzte Näherung wird in diesem Abschnitt die 2D-Näherung  $c$  betrachtet, d. h. die Homogenisierung. Die Zelle  $V$ , die eine 3D-Abhängigkeit in der Geometrie oder der Materialzusammensetzung hat, ist nach Gleichung (70) in Teilvolumina  $V_i$  unterteilt, d. h.

$V = \bigcup_{i=1}^n V_i$ , wobei jedes  $V_i$  genau ein Material  $m_i$  enthält. Jedes Material  $m_i$  setzt sich zusammen aus einzelnen Nukliden, d. h., die Kerndichte des  $i$ -ten Materials ist  $n_i = \sum_j n_j^{(i)}$ , wobei  $n_j^{(i)}$  die Kerndichte des Nuklids  $j$  ist.

Einige Teilvolumina  $V_i$  werden nun vereinigt. Werden die  $V_i$  geeignet nummeriert, so schreibt sich die neue Unterteilung der Zelle  $V$  in der Form  $V = \bigcup_{j=1}^{j=m} W_j$  mit  $W_j = \bigcup_{i=k_{j-1}}^{k_j} V_i$ ,

$1 = k_0 < k_1 < \dots < k_m = n$  und  $m < n$ . In  $W_j$  wird die Kerndichte  $N_j = \frac{1}{W_j} \sum_{i=k_{j-1}}^{k_j} V_i n_i$  angenommen.

Sind in einem Teilvolumen  $W_j$  mehrere Teilvolumina  $V_i$  vereinigt, so werden also alle Nuklide aus den  $V_i$  in  $W_j$  vereinigt und die Vorschrift für die Kerndichte  $N_j$  entspricht einer Homogenisierung der Materialien  $m_i$  in  $W_j$ .

Die neue Unterteilung wird so gewählt, dass die resultierende Zelle nur noch zweidimensional abhängig von der Geometrie und der Materialzusammensetzung ist. Durch die Homogenisierung wird also das eigentliche 3D-Problem in ein 2D-Problem umgewandelt, das anschließend berechnet wird. Das Ergebnis dieser Rechnung sind der Multiplikationsfaktor  $k_\infty$  und die über die Zelle  $V$  und die Energiegruppe  $G$  gemittelten Gruppenwirkungsquerschnitte  $\sigma_{V,G}$  dieses 2D-Problems.

Mit dieser Näherung werden in dieser Arbeit der Multiplikationsfaktor  $k_\infty$  und die gemittelten Zweigruppenquerschnitte für den Void-Testfall berechnet. Dabei wird der Void-Bereich  $V_{\text{Void}}$  mit dem Moderatorbereich  $V_{\text{Mod}}$  homogenisiert, d. h.

$$V_{\text{hom}} = V_{\text{Mod}} \cup V_{\text{Void}} \quad \text{und} \quad N_{\text{hom}} = \frac{V_{\text{Mod}}}{V_{\text{hom}}} n_{\text{Mod}}, \quad (162)$$

wobei  $N_{\text{hom}}$  die Kerndichte des homogenisierten Volumens  $V_{\text{hom}}$  ist und  $n_{\text{Mod}}$  die Kerndichte des Moderators.

Beim teilweise eingetauchten Regelstab wird der Stab, d. h. der Absorber  $V_{\text{Abs}}$  und die Hülle  $V_{\text{Hülle}}$ , mit dem Moderator  $V_{\text{Mod}_U}$  unterhalb des Stabes, der im Fall des vollständig eingetauchten Stabes verdrängt ist, homogenisiert:

$$V_{\text{hom}} = V_{\text{Abs}} \cup V_{\text{Hülle}} \cup V_{\text{Mod}_U} \quad \text{und} \quad N_{\text{hom}} = \frac{1}{V_{\text{hom}}} (V_{\text{Abs}} n_{\text{Abs}} + V_{\text{Hülle}} n_{\text{Hülle}} + V_{\text{Mod}_U} n_{\text{Mod}}). \quad (163)$$

### 5.2.2 Ein teilweise eingetauchter Regelstab von Brennstäben umgeben

Als erstes 3D-Problem wird ein eingetauchter Regelstab, der von acht Brennstäben umgeben ist, mit unterschiedlichen Eintauchtiefen betrachtet.

Jedes Brennelement des Druckwasser-Referenzreaktors besteht aus 264 Brennstäben und 25 Führungsrohren, von denen 24 für die Regelstäbe verwendet werden. Diese 289 Elemente sind in einem  $17 \times 17$  quadratischen Gitter angeordnet (siehe Abbildung 25).

Mit den Programmen HELIOS, MCNP und TransRay wurde nun eine Regelstabzelle mit den acht benachbarten Brennstabzellen berechnet. Ein zweidimensionaler Schnitt in der x-y-Ebene mit und ohne Regelstab ist in Abbildung 26 zu sehen.

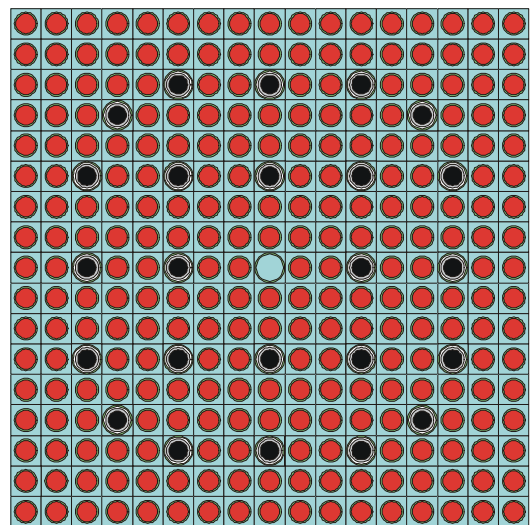


Abbildung 25: Brennelement des Druckwasser-Referenzreaktors mit Regelstäben (verhältnismäßig; horizontaler Schnitt).

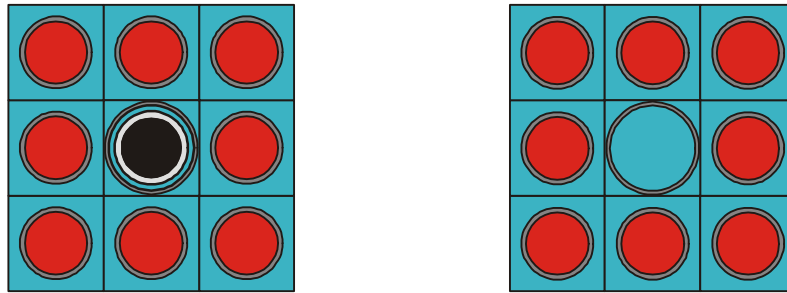


Abbildung 26: Druckwasser-Referenzreaktor: Regelstabzelle mit und ohne Regelstab (Absorber mit Hülle) mit 8 Nachbarbrennstabzellen (verhältnismäßig; horizontaler Schnitt).

Zweidimensional mit HELIOS und TransRay2D und dreidimensional mit MCNP und TransRay3D wurden die beiden zweidimensionalen Probleme des vollständig eingetauchten und des gezogenen Regelstabes aus Abbildung 26 berechnet. Des Weiteren wurden dreidimensional mit MCNP und TransRay3D die Fälle des  $\frac{1}{4}$ ,  $\frac{1}{2}$ , und  $\frac{3}{4}$  eingetauchten Regelstabes betrachtet, um die Abhängigkeit des Multiplikationsfaktors  $k_{\infty}$  und der gemittelten Zweigruppenwirkungsquerschnitte von der Eintauchtiefe des Regelstabes zu untersuchen.

Abbildung 27 zeigt die Abmessungen der Regelstabzelle mit Regelstab.

Der Abstand der Regelstabspitze zum Zellrand in z-Richtung wurde nach der Abschätzung von mindestens drei mittleren freien Weglängen gewählt. Die mittlere freie Weglänge ist mit  $\lambda = 1/\sigma_{\text{total}}$  gegeben. Aus den Rechnungen der beiden zweidimensionalen Probleme des voll eingetauchten und des gezogenen Regelstabes wurden dabei die gemittelten makroskopischen totalen Wirkungsquerschnitte der schnellen und thermischen Gruppe betrachtet. Der kleinste der vier Werte ergab sich dabei für die schnelle Gruppe beim voll eingetauchten Regelstab:  $\sigma_{\text{total}} \approx 0.51 \text{ cm}^{-1}$ . Damit ist in beiden Gruppen für den voll eingetauchten und den gezogenen Regelstab die mittlere freie Weglänge kleiner als 1.97 cm. Der Abstand der Spitze des Regelstabes zu den beiden Rändern in z-Richtung wurde daher mit mehr als

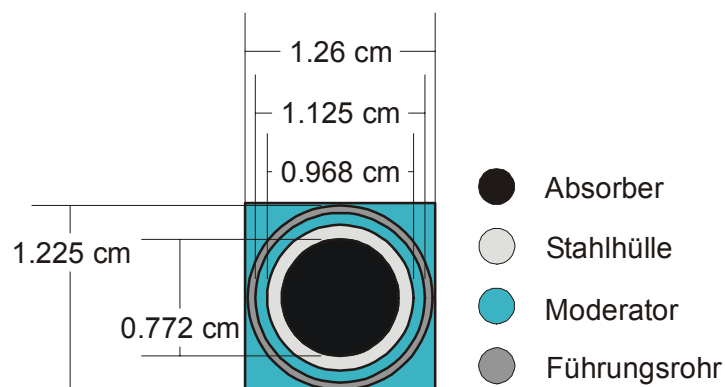


Abbildung 27: Regelstabzelle des Druckwasser-Referenzreaktors mit Regelstab (verhältnismäßig; horizontaler Schnitt).



drei mittleren freien Weglängen zu 6 cm gewählt. Da die Fälle des zu  $\frac{1}{4}$ ,  $\frac{1}{2}$  und  $\frac{3}{4}$  eingetauchten Regelstabes berechnet wurden, betrug die Höhe der Regelstabzelle und der benachbarten Brennstabzellen in z-Richtung 24 cm. Dies entspricht ungefähr der Höhe eines Nodes im Programm DYN3D [18].

Ein Querschnitt der berechneten Geometrie in der x-z-Ebene bei  $y = 0$  beim  $\frac{1}{2}$  eingetauchten Regelstab ist in Abbildung 24 zu sehen. In der realen Geometrie ist die Regelstabspitze durch eine Edelstahlschicht abgeschlossen. Der Einfachheit halber ist sie weggelassen. Für die Untersuchung der Abhängigkeit des Multiplikationsfaktors und der Zweigruppenwirkungsquerschnitte von der Eintauchtiefe des Regelstabes spielt die Berücksichtigung dieser Edelstahlschicht keine Rolle.

Mit MCNP werden unterschiedliche Zellhöhen betrachtet (0.1, 1, 10, 24 und 100 cm). Diese Rechnungen dienen zum einen dazu, die Abhängigkeit des Multiplikationsfaktors  $k_{\infty}$  und der gemittelten Zweigruppenwirkungsquerschnitte von der Zellhöhe zu untersuchen. Die entsprechenden Kurvenverläufe werden exemplarisch für den Multiplikationsfaktor dargestellt. Zum anderen werden die gemittelten Zweigruppenquerschnitte dieser MCNP-Rechnungen mit der Näherung (160) verglichen, die mit TransRay berechnet wurde. Daraus wird abgeschätzt, für welche Zellhöhen die Anwendung dieser Näherung geeignet ist. Für beide Aufgaben ist eine dreidimensionale Rechnung mit TransRay3D in der Feindiskretisierung in Ort und Energie nicht notwendig. Um das aufwändige 3D-Geometriemodell in TransRay nicht für alle Zellhöhen verwenden zu müssen und um den Fehler zu vermeiden, der sich durch dieses Modell und durch die Gruppennäherung in TransRay ergibt, wurden die Rechnungen mit unterschiedlichen Zellhöhen mit MCNP ausgeführt.

Die Notwendigkeit einer 3D-Datenaufbereitung gemittelter Zweigruppenwirkungsquerschnitte wird mit TransRay nur für die Zellhöhe von 24 cm untersucht. Dafür werden die gemittelten Zweigruppenquerschnitte, die mit TransRay mit der feinen Diskretisierung berechnet wurden, mit denen der drei Näherungen aus dem vorangehenden Abschnitt verglichen. Die lineare Interpolation (159) und die Interpolation mit Flusswichtung (160) werden mit TransRay berechnet. Die Näherung (160), für die mit TransRay eine zusätzliche 3D-Rechnung in Zweigruppennäherung durchgeführt wird, kann nicht mit HELIOS oder MCNP berechnet werden. Mit MCNP wurde die 3D-Zelle nach Gleichung (163) homogenisiert und für die resultierende 2D-Zelle wurden der Multiplikationsfaktor  $k_{\infty}$  und die gemittelten Zweigruppenquerschnitte berechnet.

Die räumliche Mittelung der Zweigruppenwirkungsquerschnitte erfolgte einmal über die gesamte Zelle, d. h. die Regelstabzelle und die 8 benachbarten Brennstabzellen, und ein-

mal nur über die Regelstabzelle. Bei der Mittelung nur über die Regelstabzelle wurden die Flüsse in der Regelstabzelle aus den Rechnungen für die gesamte Zelle verwendet. Dabei konnten die MCNP-Werte für  $\sigma_{1 \rightarrow 1}$  und  $\sigma_{1 \rightarrow 2}$  nicht nach Gleichung (156) und (158) berechnet werden, da Gleichung (154) für die einzelne Regelstabzelle nicht anwendbar ist.

Da die Ergebnisse der zweidimensionalen Rechnungen mit TransRay2D und der entsprechenden dreidimensionalen Rechnungen mit TransRay3D durchweg gut übereinstimmen, sind der Übersicht halber die Ergebnisse mit TransRay2D teilweise weggelassen.

Abbildung 28 zeigt die berechneten Werte für den Multiplikationsfaktor  $k_{\infty}$  bei einer Zellhöhe von 24 cm. Die MCNP- und die TransRay3D-Kurve verlaufen in guter Näherung linear. Die Beträge der relativen Abweichungen der mit den beiden Programmen berechneten Kurvenwerte liegen unter 2.8 %. Beim 2D-Fall des gezogenen Regelstabes liegen die Beträge der relativen Abweichungen der HELIOS-, MCNP- und TransRay-Ergebnisse für den Multiplikationsfaktor unter 0.29 %. Beim 2D-Fall des vollständig eingetauchten Regelstabes liegen sie unter 1.9 %. Demnach stimmen die Ergebnisse der drei Programme gut überein.

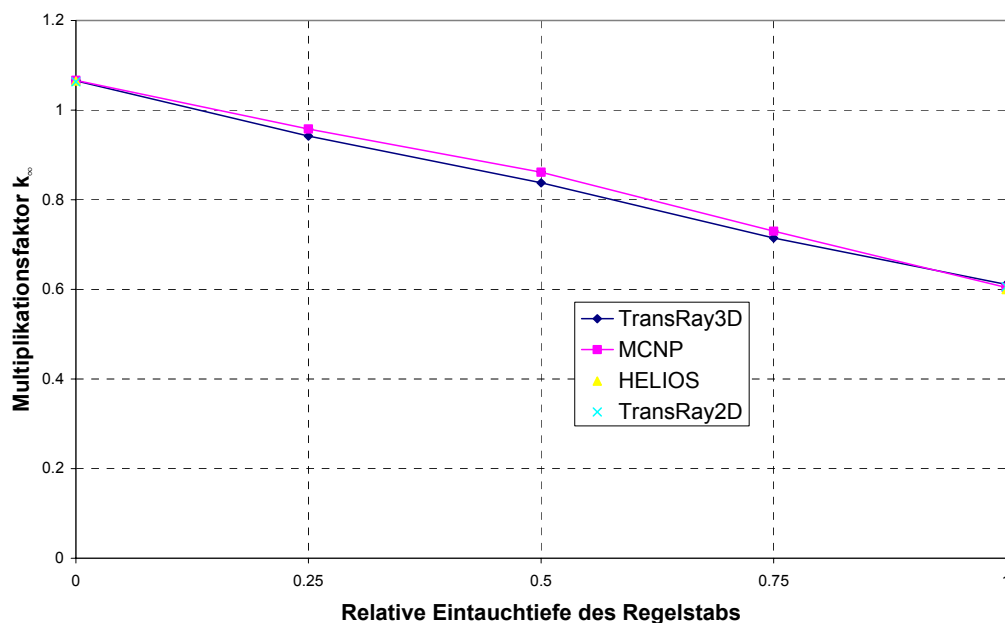


Abbildung 28: Der mit MCNP, HELIOS und TransRay berechnete Multiplikationsfaktor  $k_{\infty}$  für die Regelstabzelle mit den 8 nächsten Nachbarbrennstabzellen des Druckwasser-Referenzreaktors in Abhängigkeit von der Eintauchtiefe des Regelstabes.

Die MCNP-Rechnungen mit unterschiedlichen Zellhöhen zeigen deutlich die Abhängigkeit des Multiplikationsfaktors  $k_{\infty}$  von der Zellhöhe (Abbildung 29). Mit zunehmender Zellhöhe erhöht sich der Multiplikationsfaktor. Der Kurvenverlauf für den nach Gleichung (163) homogenisierten Regelstab ist konvex und er ist der Grenzfall für immer kleiner werdende Zell-

höhen. Dies ist physikalisch verständlich, da bei homogenisiertem Regelstab der Effekt der Selbstabschirmung geringer ist und mehr Material des Regelstabes zur Absorption der Neutronen zur Wirkung kommt.

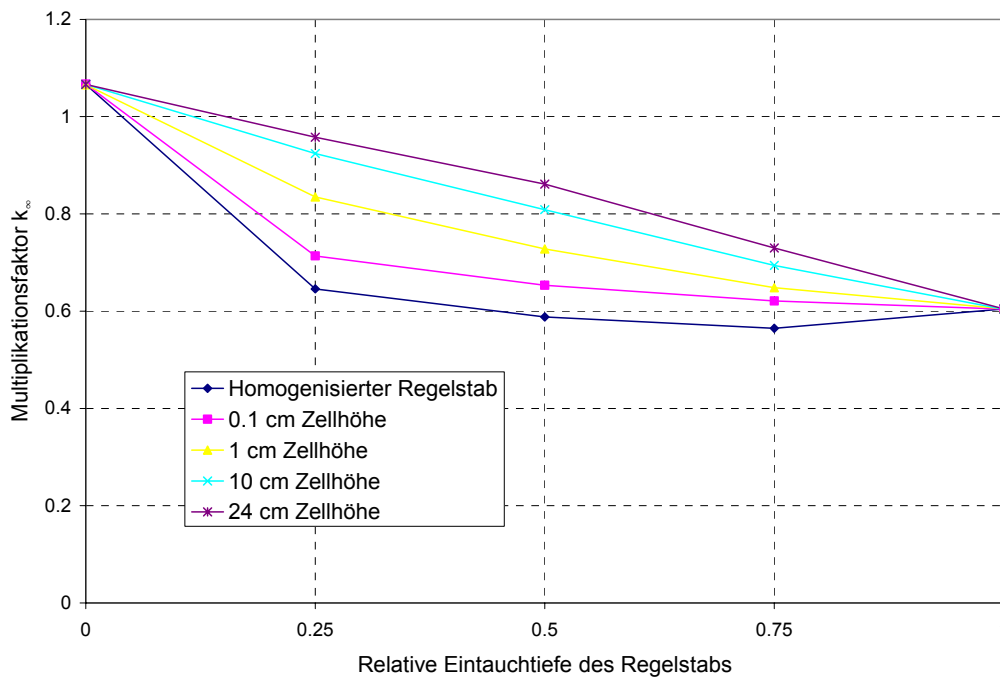


Abbildung 29: Der mit MCNP berechnete Multiplikationsfaktor  $k_{\infty}$  für die Regelstabzelle mit den 8 nächsten Nachbarbrennstabzellen in Abhängigkeit der Eintauchtiefe des Regelstabes für unterschiedliche Zellhöhen und für den homogenisierten Regelstab.

Wie die Kurvenverläufe beim Multiplikationsfaktor verlaufen bei allen mit MCNP betrachteten Zellhöhen die Kurven für die gemittelten Zweigruppenwirkungsquerschnitte ebenfalls entweder durchgehend linear, konkav oder konvex.

Nun werden die Ergebnisse für die gemittelten Zweigruppenquerschnitte bei der Zellhöhe von 24 cm gezeigt. Es zeigte sich trotz Verwendung unterschiedlicher Eingangsdaten einerseits in MCNP und andererseits in TransRay und HELIOS eine gute Übereinstimmung der Ergebnisse bei Verwendung dieser drei Programme. Die entsprechenden Beträge der relativen Abweichungen der TransRay-Ergebnisse bei den beiden 2D-Problemen des vollständig gezogenen und eingetauchten Regelstabes zu den HELIOS-Ergebnissen lagen bei  $\sigma_{\text{abs}2}$  unter 1.5 % und bei den anderen gemittelten Zweigruppenquerschnitten unter 0.9 %. Die Beträge der relativen Abweichungen der TransRay-Ergebnisse zu den MCNP-Ergebnissen lagen unter 3.32 %. Nur für den Fall, dass über die Regelstabzelle ohne die benachbarten Brennstabzellen gemittelt wurde, traten für die gemittelten Absorptionswirkungsquerschnitte der schnellen und der thermischen Gruppe größere relative Abweichungen der TransRay-Ergebnisse zu den MCNP-Ergebnissen auf (bis zu 15.1 %). Die größten Abweichungen traten dabei bei den

3D-Problemen des  $\frac{1}{4}$ ,  $\frac{1}{2}$  und  $\frac{3}{4}$  eingetauchten Regelstabes auf, wobei TransRay gegenüber MCNP den Einfluss des Absorbers auf den gemittelten Absorptionswirkungsquerschnitt generell überschätzte.

Nur die Regelstabzelle hat eine dreidimensionale Abhängigkeit in der Geometrie und in der Materialzusammensetzung und nicht die benachbarten Brennstabzellen. Der wesentliche 3D-Effekt im Neutronenspektrum und in den Wirkungsquerschnitten ist daher in der Regelstabzelle gegeben. Da die größten Abweichungen der TransRay- zu den MCNP-Ergebnissen bei den 3D-Problemen auftraten, insbesondere wenn nur über die Regelstabzelle gemittelt wurde, liegt daher die Vermutung nahe, dass diese Abweichungen im Wesentlichen auf das mit TransRay verwendete 3D-Geometriemodell (siehe Abschnitt 5.2.1) zurückzuführen sind. In diesem Modell werden zweidimensional erzeugte Gruppendaten verwendet. Wie bereits in Abschnitt 4.1 gesagt wurde, müssten die Eingangsdaten für eine dreidimensionale Transportrechnung mit TransRay eigentlich bereits vorher dreidimensional aufbereitet werden.

In diesem Abschnitt wird allerdings die Notwendigkeit einer 3D-Datenaufbereitung nur für die Zweigruppenquerschnitte bewertet, die über die Regelstabzelle und die acht benachbarten Brennstabzellen gemittelt werden. Da hier die Beträge der relativen Abweichungen der TransRay- zu den MCNP-Ergebnissen unter 3.32 % lagen, ist diese Verifikation mit MCNP zufriedenstellend, um mit TransRay diese Notwendigkeit für eine typische Nodehöhe im Programm DYN3D zu bewerten.

Für die Zweigruppenquerschnitte werden nun die Näherungen nach der linearen Interpolation (159) und nach der Interpolation mit einer zusätzlichen Flusswichtung (160) betrachtet, die mit TransRay berechnet wurden. Die relativen Abweichungen dieser interpolierten Werte zu den mit TransRay3D nach den Mittelungsvorschriften (147), (148) und (149) dreidimensional berechneten Zweigruppenwirkungsquerschnitte sind in Tabelle 5 gegeben. Grundsätzlich ist die Interpolation mit der zusätzlichen Flusswichtung besser als die lineare Interpolation. Die Beträge der relativen Abweichungen der Näherung (160) liegen unter 0.82 %, d. h., die TransRay-Interpolation mit der Flusswichtung ist sehr gut geeignet als Näherung der mit TransRay in der Feindiskretisierung dreidimensional berechneten Zweigruppenquerschnitte (siehe auch Abbildung 30, Abbildung 31 und Abbildung 34). Da mit Ausnahme von  $\sigma_{\text{abs}2}$  die Beträge der relativen Abweichungen der Zweigruppenquerschnitte, die mit der linearen Interpolation berechnet wurden, unter 1.3 % liegen, ist die Abhängigkeit dieser Querschnitte von der Eintauchtiefe des Regelstabes in guter Näherung linear.

Rel. Ein- tauchtiefe	Lineare Interpolation (159)			Interpolation mit Flusswichtung (160)		
	0.25	0.5	0.75	0.25	0.5	0.75
$\sigma_{total1}$	-0.05%	-0.10%	-0.06%	-0.01%	-0.04%	-0.01%
$\sigma_{total2}$	-0.44%	-0.83%	-0.59%	0.09%	-0.04%	0.10%
$\sigma_{abs1}$	0.63%	1.30%	0.69%	-0.24%	0.15%	-0.16%
$\sigma_{abs2}$	4.10%	6.84%	4.33%	-0.30%	0.82%	-0.20%
$\sigma_{1 \rightarrow 1}$	-0.04%	-0.09%	-0.06%	-0.01%	-0.03%	-0.01%
$\sigma_{1 \rightarrow 2}$	-0.51%	-1.12%	-0.70%			
$\sigma_{2 \rightarrow 2}$	-0.68%	-1.29%	-0.94%	0.11%	-0.09%	0.12%
$v\sigma_{f1}$	-0.14%	-0.28%	-0.18%	-0.03%	-0.12%	-0.06%
$v\sigma_{f2}$	-0.66%	-1.28%	-0.90%	0.16%	-0.04%	0.20%

Tabelle 5: Die relativen Abweichungen der mit TransRay nach den Interpolationen (159) und (160) berechneten Zweigruppenquerschnitten zu den mit TransRay dreidimensional in der Feindiskretisierung berechneten Zweigruppenquerschnitten.

Mit MCNP wurden wie beim Multiplikationsfaktor  $k_{\infty}$  in Abbildung 29 die gemittelten Zweigruppenwirkungsquerschnitte für den nach Gleichung (163) homogenisierten Regelstab berechnet. Wie bei  $k_{\infty}$  war für die Zweigruppenquerschnitte der Kurvenverlauf für den homogenisierten Regelstab der Grenzfall für immer kleiner werdende Zellhöhen. Die Abweichungen dieser Querschnitte zu den dreidimensional berechneten Querschnitten waren völlig inakzeptabel. Es bestätigte sich also, dass die 2D-Näherung der Homogenisierung für den Fall des eingetauchten Regelstabes die schlechteste der drei Näherungen ist und nicht angewendet werden sollte.

In Abbildung 30 sind die über die gesamte Zelle gemittelten Querschnitte der thermischen Gruppe  $\sigma_{abs2}$  und  $v\sigma_{f2}$  zu sehen. Die Krümmungen der MCNP- und der TransRay3D-Kurve bei  $v\sigma_{f2}$  sind nahezu gleich, die Kurven sind allerdings etwas zueinander versetzt. Die Kurven zu  $\sigma_{abs2}$  sind zwar kaum versetzt, TransRay überschätzt allerdings wie gesagt gegenüber MCNP den Einfluss des Absorbers auf den thermischen Absorptionswirkungsquerschnitt. Die relativen Abweichungen der TransRay-Werte zu den MCNP-Werten bleiben allerdings unter 3.32 %.

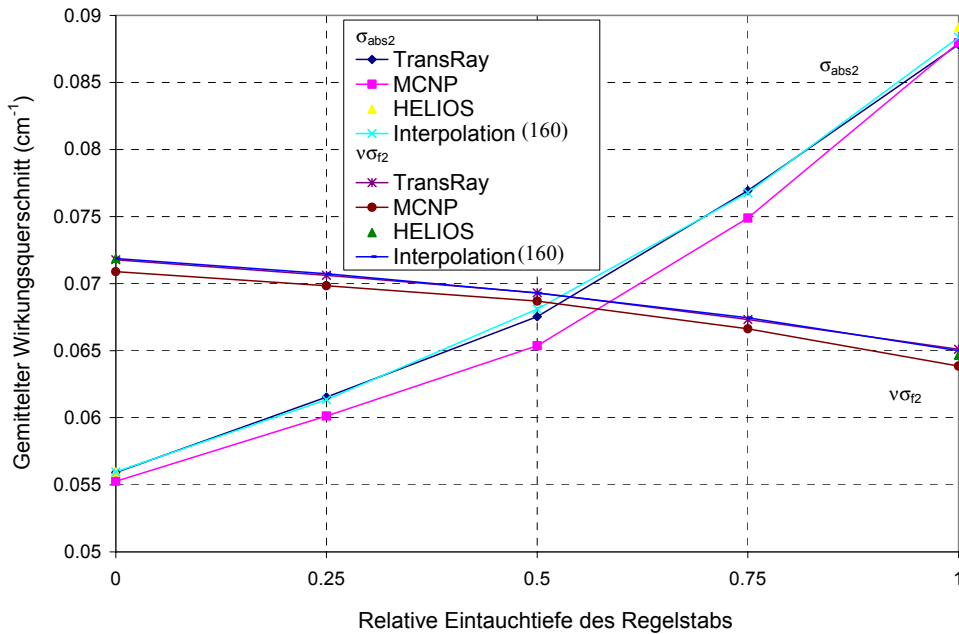


Abbildung 30: Der mit MCNP, HELIOS und TransRay berechnete Absorptions- und Produktionswirkungsquerschnitt gemittelt über die thermische Gruppe und die gesamte Zelle (Regelstabzelle und 8 nächste Nachbarbrennstabzellen, Zellhöhe = 24 cm). Zum Vergleich die TransRay-Werte nach dem Interpolationsmodell nach Gleichung (160).

In Abbildung 31 sind die Absorptionswirkungsquerschnitte der schnellen Gruppe  $\sigma_{abs1}$  und die Abstreuwirkungsquerschnitte  $\sigma_{1 \rightarrow 2}$  zu sehen, die einmal über die gesamte und einmal nur über die Regelstabzelle gemittelt wurden. Die über die gesamte Zelle gemittelten Querschnitte verlaufen in diesem Maßstab linear. Wie beim über die gesamte Zelle gemittelten thermischen Absorptionswirkungsquerschnitt in Abbildung 30 verläuft die Kurve für den schnellen Absorptionswirkungsquerschnitt, der nur über die Regelstabzelle gemittelt wurde, ebenfalls konvex. Das heißt, auch hier würde eine lineare Interpolation zwischen den zweidimensional berechneten Werten den Einfluss des Absorbers überschätzen. TransRay überschätzt gegenüber MCNP auch für die schnelle Gruppe den Einfluss des Absorbers auf den gemittelten Absorptionswirkungsquerschnitt.

Am deutlichsten ist der konvexe Kurvenverlauf bei der Zellhöhe von 24 cm beim nur über die Regelstabzelle gemittelten Absorptionswirkungsquerschnitt der thermischen Gruppe (Abbildung 32). Auch hier überschätzt TransRay gegenüber MCNP den Einfluss des Absorbers. Die lineare Interpolation nach Gleichung (159) zwischen den mit TransRay zweidimensional berechneten Werten überschätzt hier die mit TransRay dreidimensional berechneten Werte um bis zu 92.5 %.

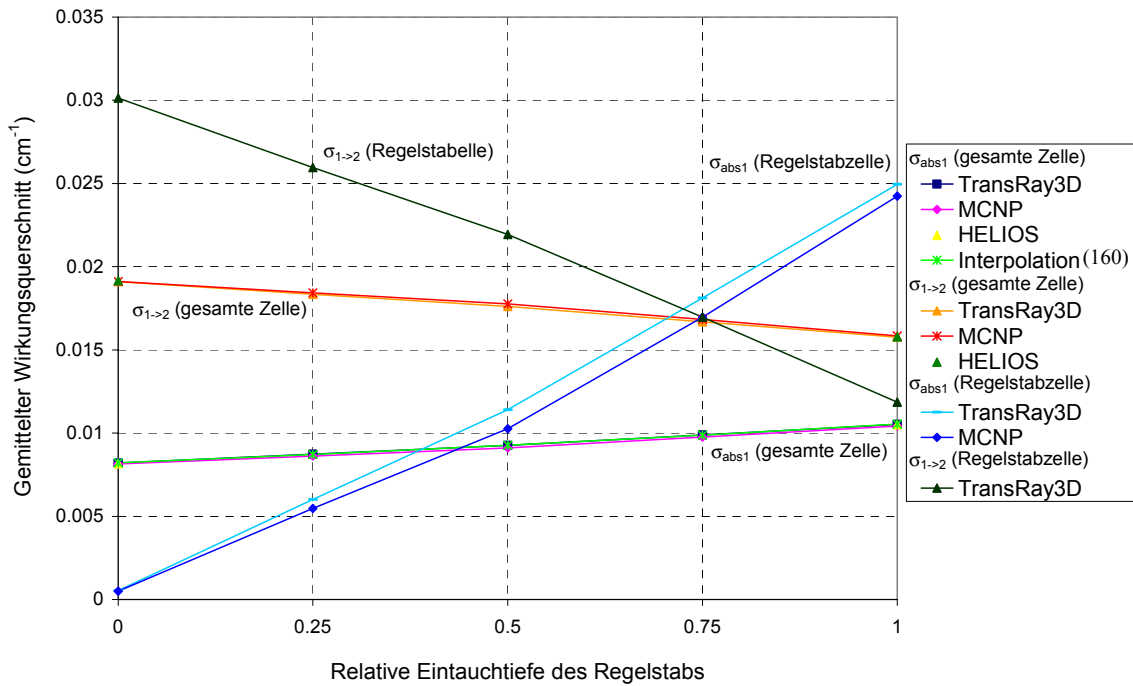


Abbildung 31: Absorptionswirkungsquerschnitt der schnellen Gruppe und Abstreuwirkungsquerschnitt jeweils über die gesamte Zelle und nur über die Regelstabzelle gemittelt. Zum Vergleich sind für  $\sigma_{abs1}$  (gesamte Zelle) die TransRay-Werte nach dem Interpolationsmodell nach Gleichung (160) gegeben.

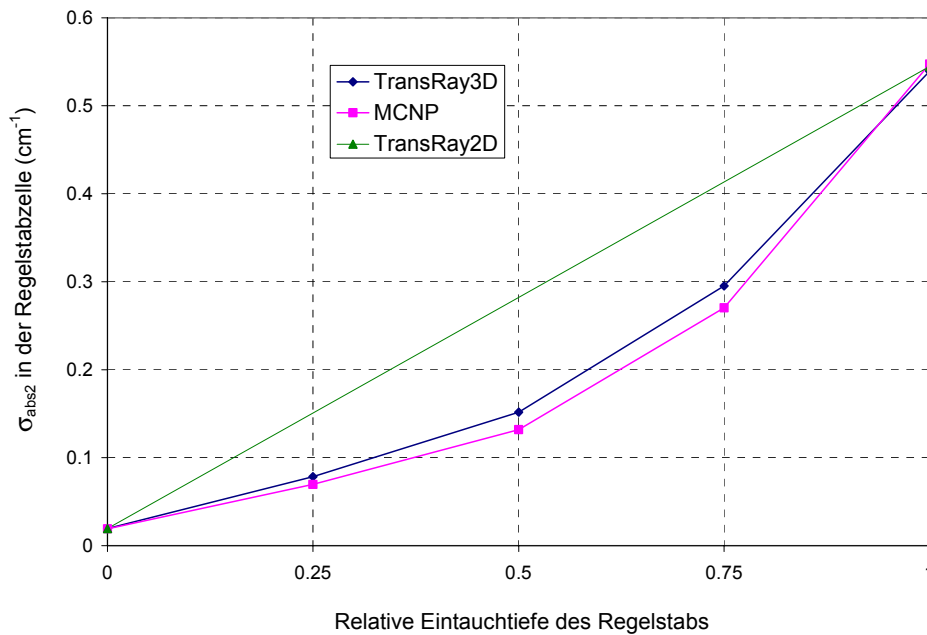


Abbildung 32: Der mit MCNP und TransRay berechnete Absorptionswirkungsquerschnitt über die thermische Gruppe und nur über die Regelstabzelle gemittelt. Die beiden Werte von TransRay2D sind linear interpoliert.

Beim Streuwirkungsquerschnitt innerhalb der thermischen Gruppe in Abb. 33 ist der Kurvenverlauf bei den nur über die Regelstabzelle gemittelten Werten deutlich konkav.

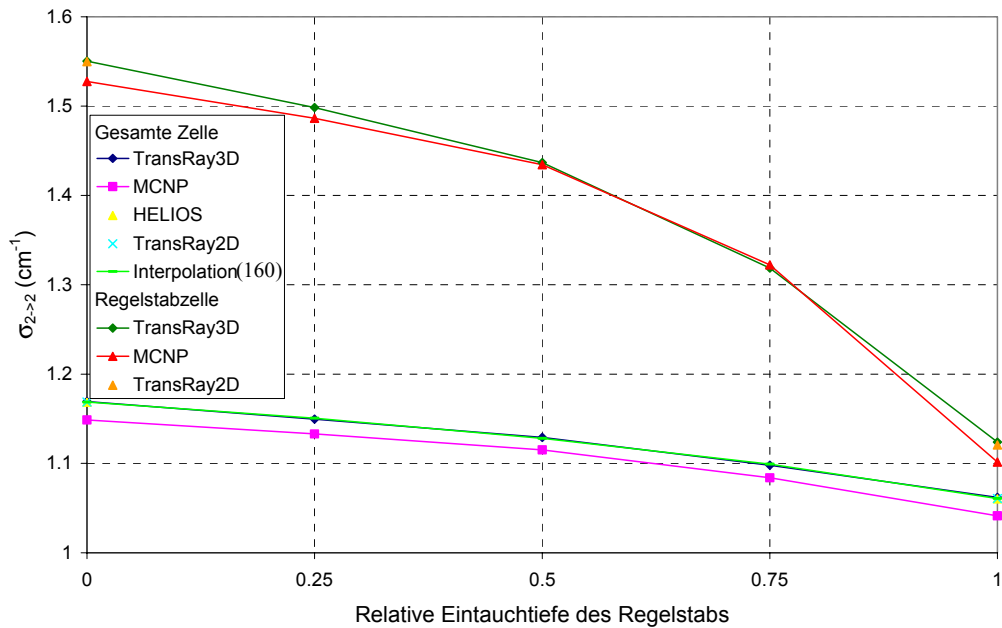


Abbildung 33: Streuwirkungsquerschnitt innerhalb der thermischen Gruppe über die gesamte Zelle und nur über die Regelstabzelle gemittelt. Zum Vergleich für  $\sigma_{2 \rightarrow 2}$  (gesamte Zelle) die TransRay-Werte nach dem Interpolationsmodell nach Gleichung (160). Die MCNP-Werte wurden nach Gleichung (158) berechnet aus den Standardausgaben von MCNP.

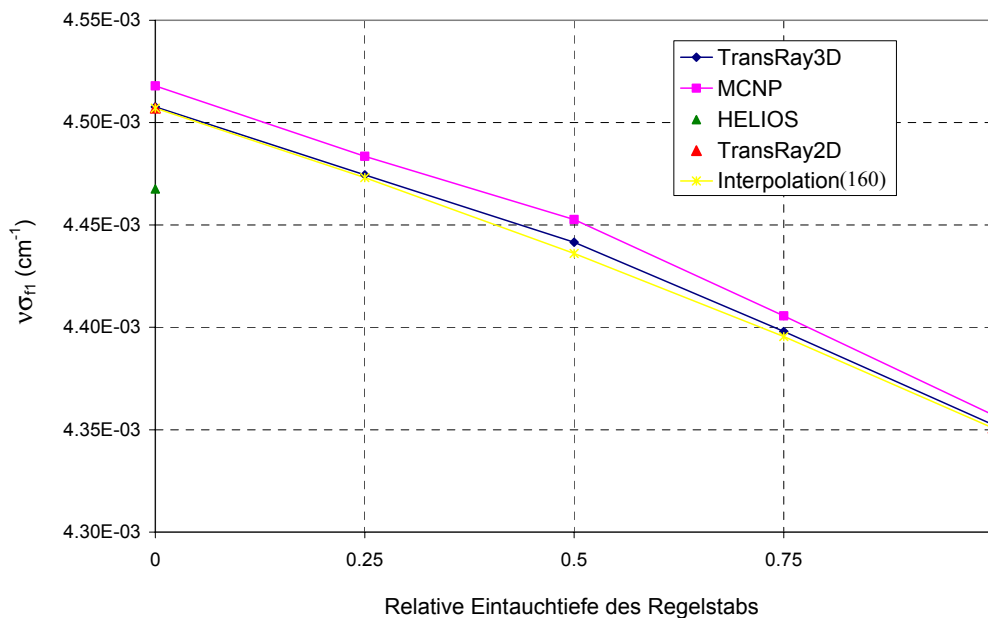


Abbildung 34: Der mit MCNP, HELIOS und TransRay berechnete Produktionswirkungsquerschnitt der schnellen Gruppe gemittelt über die gesamte Zelle. Zum Vergleich die TransRay-Werte nach dem Interpolationsmodell nach Gleichung (160).



Wie beim Babcock und Wilcox  $\text{UO}_2$  Benchmark in Tabelle 2 und bei der unendlich langen Brennstabzelle des Druckwasser-Referenzreaktors in Tabelle 4 liegen auch hier beim Produktionswirkungsquerschnitt der schnellen Gruppe die TransRay-Werte näher an den MCNP- als an den HELIOS-Werten (siehe Abbildung 34). Die Beträge der relativen Abweichungen der TransRay2D-Werte zu den MCNP-Werten liegen unter 0.24 %, die zu den HELIOS-Werten betragen 0.89 % bzw. 0.80 %. Das ist ungefähr dieselbe Größenordnung wie in Tabelle 2 und Tabelle 4.

Mit TransRay wurde die Näherung (160) auf dieselben Zellhöhen (0.1, 1, 10, 24 und 100 cm) angewandt, die mit MCNP betrachtet wurden. Für die gemittelten Zweigruppenwirkungsquerschnitte lagen die Beträge der relativen Abweichungen der interpolierten TransRay-zu den MCNP-Werten bei Zellhöhen von 10 und 24 cm in der Regel unter 2 %. Für die Zellhöhen 0.1 und 100 cm traten allerdings deutlich höhere Abweichungen auf. Bei diesen beiden Zellhöhen war die mit MCNP berechnete Abhängigkeit der gemittelten Zweigruppenwirkungsquerschnitte von der Eintauchtiefe des Regelstabs in der Regel deutlich nichtlinear. Das TransRay-Modell mit der Interpolationsvorschrift (160) war also im Vergleich zu MCNP besser geeignet bei Zellhöhen, bei denen geringere Abweichungen von der Linearität auftraten.

Aus den Untersuchungen zu den DWR-Brennstabzellen mit teilweise eingetauchtem Regelstab lässt sich folgendes Fazit ziehen:

Bei der Zellhöhe von 24 cm, welche ungefähr der Höhe eines Nodes im Programm DYN3D entspricht, zeigte sich für das 3D-Problem des eingetauchten Regelstabes, der von den acht benachbarten Brennstäben umgeben ist, dass die mit TransRay in der Feindiskretisierung dreidimensional berechneten gemittelten Zweigruppenquerschnitte sehr gut mit der Näherung (160), die ebenfalls mit TransRay berechnet wurde, übereinstimmen. Diese Näherung war dabei die beste der drei betrachteten. Anhand der TransRay-Ergebnisse lässt sich also bewerten, dass eine 3D-Datenaufbereitung gemittelter Zweigruppenquerschnitte in der Feindiskretisierung in Ort und Energie nach den Vorschriften (147), (148) und (149) nicht notwendig ist. Für die Querschnittsmittelung kann stattdessen zwischen den zweidimensional berechneten Werten für den gezogenen und den vollständig eingetauchten Regelstab nach Vorschrift (160) interpoliert werden. Für den Multiplikationsfaktor  $k_\infty$  und für die gemittelten Zweigruppenwirkungsquerschnitte mit Ausnahme von  $\sigma_{\text{abs}2}$  kann in guter Näherung nach Gleichung (159) linear interpoliert werden. Die Näherung des homogenisierten Regelstabes nach (163) ist nicht anwendbar.

Die Unterschiede in den MCNP- und den TransRay-Ergebnissen beim  $\frac{1}{4}$ ,  $\frac{1}{2}$  und  $\frac{3}{4}$  eingetauchten Regelstab lassen sich vermutlich im Wesentlichen auf das 3D-Geometriemodell in TransRay zurückführen. Es wäre sinnvoll, für den Testfall des eingetauchten Regelstabes die Vielgruppenquerschnitte für die TransRay-Rechnungen dreidimensional aufzubereiten.

Aus dem Vergleich der TransRay-Interpolation nach Gleichung (160) mit MCNP-Rechnungen für unterschiedliche Zellhöhen (0.1, 1, 10, 24 und 100 cm) lässt sich abschätzen, dass die Interpolation mit zusätzlicher Flusswichtung (160) eine umso bessere Näherung ist, je weniger die Abhängigkeit der Zweigruppenquerschnitte von der Eintauchtiefe des Regelstabes von der Nichtlinearität abweicht. Für die Zellhöhen von 10 und 24 cm traten geringere Abweichungen von der Linearität auf und die Übereinstimmung der Näherung mit den MCNP-Ergebnissen war sehr gut.

### **5.2.3 Teilweise Void anstelle des Moderators um einen Brennstab**

Als zweites 3D-Problem wird Void um einen Brennstab untersucht. Dies ist ein Modell für eine Dampfblase im Moderatorgebiet. In Abschnitt 5.2.3.1 wird eine Brennstabzelle mit den acht nächsten Nachbarbrennstabzellen betrachtet. Der Moderator um den Brennstab der mittleren Brennstabzelle wird dabei in der Höhe nach und nach durch Void ersetzt. In Abschnitt 5.2.3.2 wird eine einzelne Brennstabzelle betrachtet, in der der Moderator um den Brennstab in der Höhe nach und nach zum einen durch Void und zum anderen durch Moderator mit geringerer Dichte ersetzt wird (10 %, 1 % und 0.1 % der eigentlichen Dichte).

Der Multiplikationsfaktor  $k_{\infty}$  der Zelle und die über die Zelle gemittelten Zweigruppenquerschnitte werden berechnet und die Abhängigkeit dieser Größen von der Höhe des Voids beziehungsweise des Moderators mit geringerer Dichte um den Brennstab untersucht. Wie beim Testfall des eingetauchten Regelstabes im vorhergehenden Abschnitt wird insbesondere für die Zellhöhe von 24 cm die Notwendigkeit einer 3D-Datenaufbereitung der Zweigruppenquerschnitte im Vergleich zu den drei Näherungen aus Abschnitt 5.2.1 bewertet.

### 5.2.3.1 Teilweise Void um einen Brennstab mit den 8 nächsten Nachbarbrennstäben ohne Void

Es wurden analog zum Fall des eingetauchten Regelstabes mit HELIOS, MCNP, TransRay2D und TransRay3D die beiden zweidimensionalen Probleme berechnet, bei denen der mittlere Brennstab nur von Moderator und nur von Void umgeben ist, und mit MCNP und TransRay3D die dreidimensionalen Probleme, bei denen der Moderator der mittleren Brennstabzelle in der Höhe zu  $\frac{1}{4}$ ,  $\frac{1}{2}$

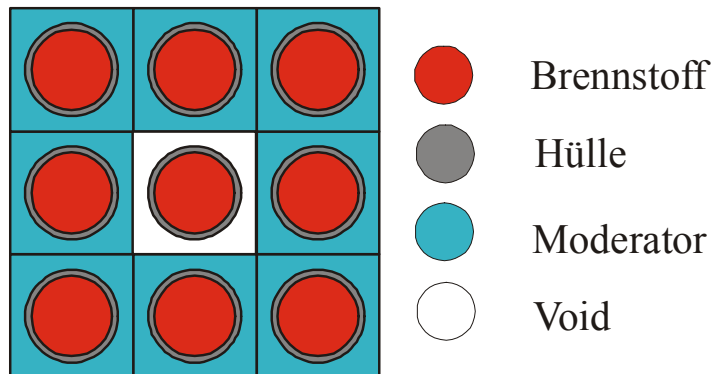


Abbildung 35: Brennstab von Void umgeben mit 8 Nachbarbrennstäben.

und  $\frac{3}{4}$  durch Void ersetzt wurde. Abbildung 35 zeigt einen horizontalen Querschnitt durch einen Höhenbereich, in dem der Moderator durch Void ersetzt wurde.

Wie beim Fall des eingetauchten Regelstabes in Abschnitt 5.2.2 wurde die Zellhöhe so gewählt, dass der Abstand der Zellränder in z-Richtung zur Ebene, in der das Void und der Moderator aneinandergrenzen, mindestens zirka drei mittlere freie Weglängen beträgt. Der kleinste über die gesamte Zelle gemittelte totale Wirkungsquerschnitt der zweidimensionalen Rechnungen ist  $\sigma_{\text{total}} = 0.4756 \text{ cm}^{-1}$  (Gruppe 1: schnelle Gruppe) für den Void-Fall, die größte entsprechende dreifache mittlere freie Weglänge also 6.3 cm. Die Höhe der Zelle bei  $\frac{1}{4}$ ,  $\frac{1}{2}$  und  $\frac{3}{4}$  Voidanteil in der mittleren Brennstabzelle wurde wie beim Fall des eingetauchten Regelstabes zu 24 cm gewählt.

Zunächst wird die Abhängigkeit des Multiplikationsfaktors  $k_{\infty}$  von der relativen Höhe des Voidbereichs ( $H_{\text{rel}}$ ) in der mittleren Brennstabzelle betrachtet. Die Beträge der relativen Abweichungen der TransRay-Werte zu den MCNP-Werten liegen unter  $318 \text{ pcm} = 0.318 \%$  und zu den HELIOS-Werten unter  $192 \text{ pcm} = 0.192 \%$ . Es zeigt sich bei allen Berechnungen von zweidimensionalen Problemen, dass die  $k_{\infty}$ -Werte der dreidimensionalen Rechnungen mit TransRay3D immer etwas über denen der zweidimensionalen Rechnungen mit TransRay2D lagen. Hier betragen die relativen Abweichungen der dreidimensional berechneten Werte zu den zweidimensional berechneten Werten für den Fall ohne Void ( $H_{\text{rel}} = 0$ )  $0.195 \%$  und für den Fall mit vollständigem Voidanteil im Volumenbereich des Moderators der mittleren Brennstabzelle ( $H_{\text{rel}} = 1$ )  $0.214 \%$ . Die TransRay3D-Werte für  $H_{\text{rel}} = \frac{1}{4}$ ,  $\frac{1}{2}$  und  $\frac{3}{4}$  liegen fast auf der Geraden durch die TransRay2D-Werte.

Für die gemittelten Zweigruppenwirkungsquerschnitte liegen die Beträge der relativen Abweichungen der TransRay-Werte zu den MCNP-Werten unter 1.9 % und zu den HELIOS-Werten unter 0.82 %. Die Beträge der relativen Abweichung der Zweigruppenquerschnitte, die nach der 2D-Näherung (159) mit TransRay linear interpoliert wurden, zu denen, die dreidimensional mit TransRay in der feinen Diskretisierung in Ort und Energie nach den Vorschriften (147), (148) und (149) berechnet wurden, liegen unter 0.14 %.

Analog zur 3D-Testaufgabe des eingetauchten Regelstabes sind mit TransRay und MCNP die Zweigruppenwirkungsquerschnitte berechnet worden, die nur über das Gebiet der mittleren Brennstabzelle mit dem Void gemittelt wurden. Für die Mittelung wurden dabei die Flüsse in der mittleren Brennstabzelle aus den Rechnungen für die gesamte Zelle (alle 9 Brennstabzellen) verwendet. Für  $\sigma_{\text{totali}}$ ,  $\sigma_{\text{absi}}$ , und  $v\sigma_{fi}$  ( $i = 1, 2$ ) liegen die Beträge der relativen Abweichungen der TransRay-Ergebnisse zu den MCNP-Ergebnissen bei anteiligem Void unter 2.1 % und bei vollem Voidanteil unter 4.7 %. Die Beträge der relativen Abweichungen der Querschnitte, die mit TransRay nach Gleichung (159) linear interpoliert wurden, zu denen, die mit TransRay in der Feindiskretisierung dreidimensional berechnet wurden, liegen für  $\sigma_{\text{total2}}$ ,  $\sigma_{1 \rightarrow 2}$  und  $\sigma_{2 \rightarrow 2}$  unter 2.8 % und für die anderen Querschnitte unter 0.6 %.

Aufgrund der guten Übereinstimmung der mit TransRay dreidimensional berechneten Zweigruppenquerschnitte mit denen, die mit TransRay nach Gleichung (159) linear interpoliert wurden, wurden die anderen beiden Näherungen aus Abschnitt 5.2.1 (Interpolation mit Flusswichtung (160) und Homogenisierung) nicht betrachtet. Wird die Abhängigkeit der gemittelten Zweigruppenwirkungsquerschnitte von der relativen Höhe des Voidbereichs betrachtet, so liegen also bei der Zellhöhe von 24 cm die Werte dieser Querschnitte mit guter Näherung alle auf Geraden. Für den Fall der Brennstabzelle mit Void, die von 8 Brennstabzellen ohne Void umgeben ist, ist demnach eine 3D-Datenaufbereitung nicht notwendig und es kann im Wesentlichen nach Gleichung (159) linear geometrisch interpoliert werden.

Eine leichte Abweichung von der Linearität zeigen die Kurvenverläufe für  $v\sigma_{f2}$  (Abbildung 36) und, wenn nur über die mittlere Brennstabzelle gemittelt wird, auch für  $v\sigma_{f1}$  (Abbildung 37) und  $\sigma_{2 \rightarrow 2}$ . In diesen beiden Abbildungen ist die Abhängigkeit von  $v\sigma_{f1}$  und  $v\sigma_{f2}$  von der relativen Höhe des Voidbereichs für die Werte gezeigt, die über die gesamte Zelle (alle 9 Brennstabzellen) und die nur über die mittlere Brennstabzelle gemittelt wurden. Falls, wie in diesen beiden Abbildungen, bei den MCNP-Werten für die gemittelten Zweigruppenwirkungsquerschnitte, die sich aus Summen und Quotienten ergeben, wie sie bei der Querschnittsmittelung in Gleichung (151) auftreten, Fehler mit angegeben werden, so erfolgte

die Fehlerabschätzung nach dem Gaußschen Fehlerfortpflanzungsgesetz unter der Annahme, dass die Größen nicht zueinander korreliert sind.

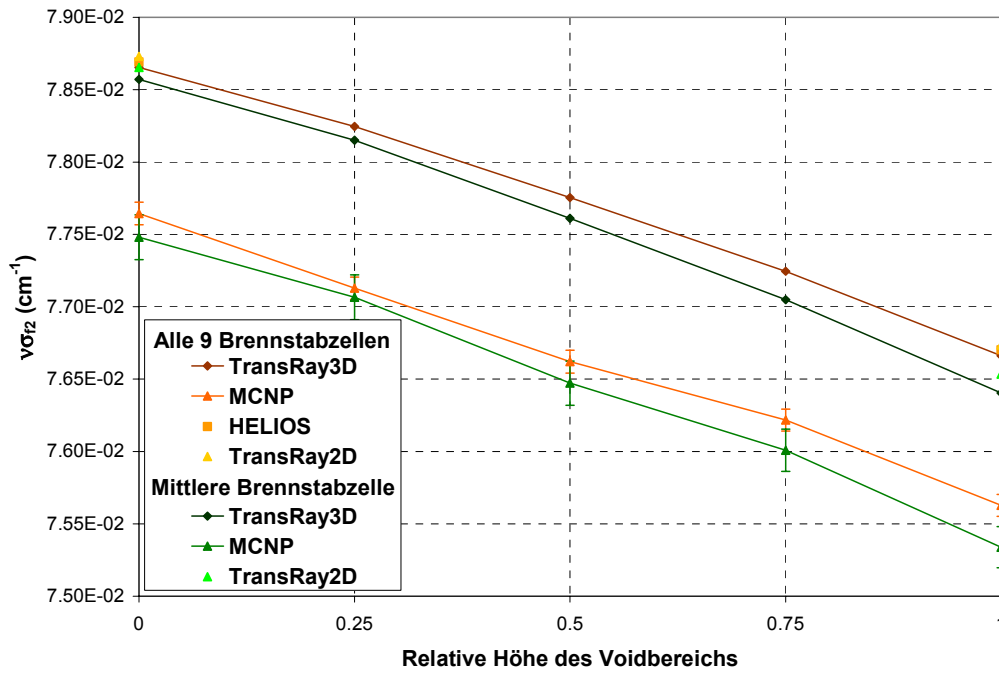


Abbildung 36: Der mit MCNP, HELIOS und TransRay berechnete Produktionswirkungsquerschnitt der thermischen Gruppe  $v\sigma_{f2}$  gemittelt über die gesamte Zelle (alle 9 Brennstabzellen) und nur über die mittlere Brennstabzelle gemittelt.

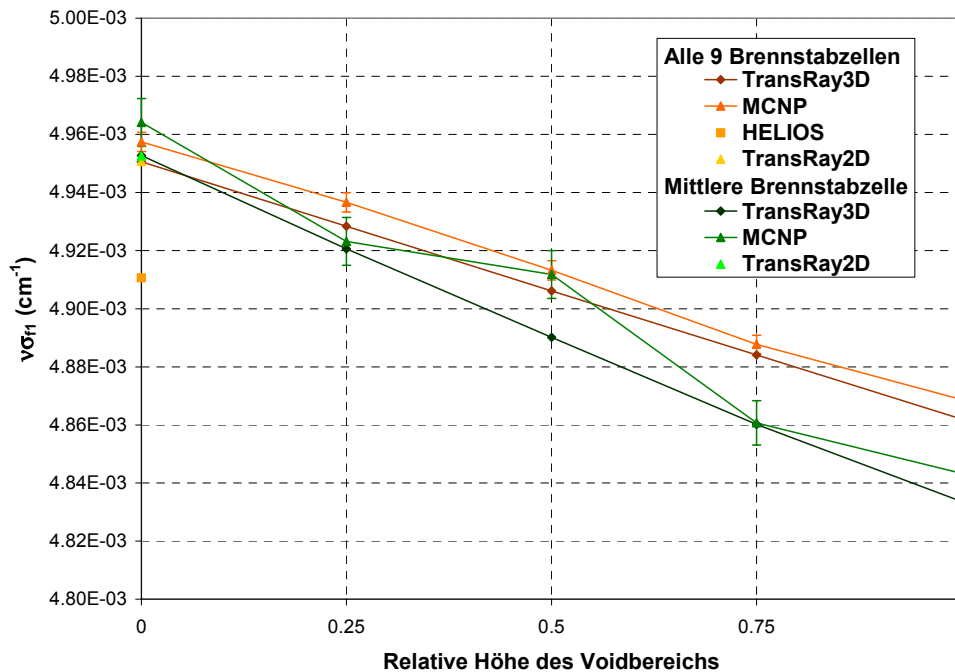


Abbildung 37: Der mit MCNP, HELIOS und TransRay berechnete Produktionswirkungsquerschnitt der schnellen Gruppe  $v\sigma_{f1}$  gemittelt über die gesamte Zelle (alle 9 Brennstabzellen) und nur über die mittlere Brennstabzelle gemittelt.

Wie beim Testfall des eingetauchten Regelstabes in Abschnitt 5.2.2 wurde mit MCNP der Einfluss der Zellhöhe auf den Multiplikationsfaktor  $k_{\infty}$  und die gemittelten Zweigruppenwirkungsquerschnitte untersucht. Dafür wurden zusätzlich die Zellhöhen von 10 und 100 cm betrachtet. Für den Multiplikationsfaktor zeigte sich keine Abhängigkeit von der gewählten Zellhöhe. Ein eindeutiger Kurvenverlauf für den Multiplikationsfaktor war allerdings wegen des Fehlers nicht zu erkennen. Der Betrag des relativen  $1\sigma$ -Fehlers lag zwar für alle betrachteten Zellhöhen unter  $0.06\% = 60$  pcm, allerdings ist die Änderung im Multiplikationsfaktor bei zunehmenden Voidanteil auch sehr gering.

Bei den gemittelten Zweigruppenwirkungsquerschnitten zeigte sich ebenfalls keine Abhängigkeit von der gewählten Zellhöhe für  $\sigma_{\text{total}1}$ ,  $\sigma_{\text{abs}1}$ ,  $v\sigma_{f1}$  und  $v\sigma_{f2}$ . Dies galt sowohl bei Mittelung über die gesamte Zelle (alle 9 Brennstabzellen) als auch bei Mittelung nur über die mittlere Brennstabzelle mit dem Void.

Eine leichte Abweichung von der Linearität mit zunehmender Zellhöhe ist bei  $\sigma_{\text{total}2}$ ,  $\sigma_{\text{abs}2}$ ,  $\sigma_{1\rightarrow 2}$  und  $\sigma_{2\rightarrow 2}$  zu sehen. Für alle betrachteten Zellhöhen gilt jedoch, dass die Abhängigkeit der gemittelten Zweigruppenquerschnitte in guter Näherung linear ist.

Fazit aus den Rechnungen zur Brennstabzelle mit Void, die von Brennstabzellen ohne Void umgeben ist:

Für den 3D-Fall der Brennstabzelle mit Void im Moderatorbereich, die von den 8 benachbarten Brennstabzellen ohne Void umgeben ist, zeigte sich eine gute Übereinstimmung der Ergebnisse für den Multiplikationsfaktor  $k_{\infty}$  und die gemittelten Zweigruppenquerschnitte bei Verwendung der drei Programme HELIOS, MCNP und TransRay.

Bei einer Zellhöhe von 24 cm, welche ungefähr der Höhe eines Nodes im Programm DYN3D [18] entspricht, ist die Abhängigkeit der Zweigruppenwirkungsquerschnitte von der Höhe des Voidbereichs in sehr guter Näherung linear. Das heißt, eine 3D-Datenaufbereitung der Zweigruppenwirkungsquerschnitte ist nicht notwendig und es kann stattdessen für eine Querschnittsmittelung in sehr guter Näherung zwischen den zweidimensional berechneten Werten für den Fall mit bzw. ohne Moderator in der zentralen Brennstabzelle linear nach Gleichung (159) interpoliert werden.

Für eine Zellhöhe von 10 cm ist die Abhängigkeit der Zweigruppenwirkungsquerschnitte ebenfalls in sehr guter Näherung linear. Dies gilt im Wesentlichen auch für eine Zellhöhe von 100 cm. Damit kann abgeschätzt werden, dass für den Void-Testfall eine 3D-Datenaufbereitung der Zweigruppenwirkungsquerschnitte im Bereich typischer Nodehöhen, die in DYN3D verwendet werden, nicht notwendig ist.

### 5.2.3.2 Teilweise Void um einen einzelnen Brennstab

Als nächstes 3D-Problem wird ein einzelner Brennstab betrachtet, um den das Moderatormaterial in der Höhe nach und nach durch Void ersetzt wird. Somit erhöht sich gegenüber dem Void-Testfall im vorangegangenen Abschnitt der relative Anteil des Voids am gesamten Volumen der Zelle. Bei Verwendung der Reflexionsrandbedingungen (siehe auch Abschnitt 5.2.1) entspricht das Problem der einzelnen Brennstabzelle mit Void einer Anordnung unendlich vieler Brennstäbe, die in der Höhenschicht, in der der Moderator durch Void verdrängt ist, vollständig gevoidet sind. Die einzelne Brennstabzelle ist somit der Grenzfall des Void-Testfalls im vorangegangenen Abschnitt, bei dem keine 3D-Effekte bei den gemittelten Zweigruppenquerschnitten zu sehen waren. Es wird nun untersucht, ob für diesen Grenzfall 3D-Effekte auftreten.

Für die einzelne Brennstabzelle wurden analog zum vorangegangenen Abschnitt die 2D-Probleme des nur von Moderator und nur von Void umgebenen Brennstabs mit den drei Programmen HELIOS, MCNP und TransRay und die 3D-Probleme des zu  $\frac{1}{4}$ ,  $\frac{1}{2}$  und  $\frac{3}{4}$  in der Höhe durch Void verdrängten Moderators für eine Zellhöhe von 24 cm mit den beiden Programmen MCNP und TransRay berechnet. Die Ergebnisse für den Multiplikationsfaktor  $k_{\infty}$  und die gemittelten Zweigruppenwirkungsquerschnitte dieser drei Programme werden miteinander verglichen und die Abhängigkeit dieser Größen von der Höhe des Voidanteils um den Brennstab untersucht.

Mit MCNP wurden beim 2D-Problem des nur von Void umgebenen Brennstabs nur die gemittelten Querschnitte  $\sigma_{\text{total1}}$ ,  $\sigma_{\text{abs1}}$ ,  $\sigma_{1 \rightarrow 1}$  und  $v\sigma_{f1}$  der schnellen Gruppe berechnet, da der Neutronenfluss im thermischen Bereich praktisch gleich Null war. Ein Neutronensplitting zur Reduzierung der Varianz im thermischen Bereich wurde in MCNP nicht durchgeführt.

Die Ergebnisse für die gemittelten Zweigruppenwirkungsquerschnitte, die mit TransRay in der Feindiskretisierung dreidimensional nach den Mittelungsvorschriften (147), (148) und (149) berechnet wurden, werden mit den drei Näherungen aus Abschnitt 5.2.1 verglichen. Mit TransRay werden die lineare Interpolation (159) und die Interpolation mit zusätzlicher Flusswichtung (160) betrachtet. Mit HELIOS wird die 2D-Näherung der Homogenisierung betrachtet, bei der das Void mit dem Moderator nach Gleichung (162) homogenisiert wird. Dabei entsprechen  $\frac{1}{4}$ ,  $\frac{1}{2}$  und  $\frac{3}{4}$  relative Höhe des Voidbereichs in der mittleren Brennstabzelle einer Dichte von 75, 50 und 25% der eigentlichen Moderatordichte. Da für TransRay die Daten mit HELIOS aufbereitet werden, bei dieser Aufbereitung HELIOS eine vollständige Transportrechnung ausführt und die Ergebnisse der 2D-Rechnungen mit HELIOS und TransRay grundsätzlich sehr gut übereinstimmen, wurde die dritte Näherung der Homogenisierung

gleich mit den HELIOS-Ergebnissen betrachtet und keine zusätzliche TransRay-Rechnung mit homogenisiertem Moderator ausgeführt. Aus dem Vergleich der gemittelten Zweigruppenquerschnitte, die zum einen dreidimensional in der Feindiskretisierung und zum anderen mit den drei Näherungen berechnet wurden, wird für die einzelne Brennstabzelle mit Void die Notwendigkeit einer 3D-Aufbereitung dieser Querschnitte bewertet.

Wie beim Regelstab-Testfall werden mit MCNP unterschiedliche Zellhöhen betrachtet (0.1, 1, 10, 24, 50, 75 und 100 cm). Analog dienten diese Rechnungen dazu, zum einen die Abhängigkeit des Multiplikationsfaktors  $k_{\infty}$  und der gemittelten Zweigruppenwirkungsquerschnitte von der Zellhöhe zu untersuchen und zum anderen abzuschätzen, für welche Zellhöhen eine 3D-Datenaufbereitung notwendig ist. Als Grenzfall immer kleiner werdender Zellhöhen wird analog zu HELIOS auch mit MCNP die 2D-Näherung der Homogenisierung betrachtet. Die Beträge der relativen Abweichungen der MCNP- zu den HELIOS-Ergebnissen für die Zweigruppenquerschnitte, die mit dieser Näherung berechnet wurden, liegen unter 3.1 %.

Zusätzlich wurde mit TransRay ein einzelner Brennstab betrachtet, um den der Moderator in der Höhe nach und nach anstelle von Void durch Moderator mit geringerer Dichte ersetzt wird (10 %, 1 % und 0.1 % der eigentlichen Dichte). Die Fälle des Moderators mit geringerer Dichte entsprechen eher dem realen Fall einer Dampfblase im Moderatorbereich der Brennstabzelle. Void ist der Grenzfall, bei dem die Moderatordichte gleich Null ist.

Beim betrachteten Druckwasser-Referenzreaktor hat bei Nominalleistung der Moderator (boriertes Wasser) eine Temperatur von 310.1°C und einen Druck von 153.24 bar. Wasser hat bei dieser Temperatur und bei diesem Druck eine Dichte von 0.70472 g/cm<sup>3</sup>. Die Sättigungstemperatur von Wasser bei diesem Druck beträgt 343.9°C und die Dichte vom Satteldampf 0.10018 g/cm<sup>3</sup>. Das heißt, bei diesem Druck liegt der Moderator bei den betrachteten Dichten von 10, 1 und 0.1 % in Form von Dampf vor bei entsprechend höheren Temperaturen.

Für den Multiplikationsfaktor  $k_{\infty}$  liegen die Beträge der relativen Abweichungen der TransRay-Werte zu den MCNP-Werten unter 1.2 % bei bis zu  $\frac{3}{4}$  relativer Höhe des Voids im Moderatorbereich. Bei vollem Voidanteil liegt die relative Abweichung des TransRay-Werts zum MCNP-Wert für TransRay2D bei 1.4 % und für TransRay3D bei 3.2 %. Die Beträge der relativen Abweichungen der TransRay-Werte zum HELIOS-Wert beim 2D-Problem des Brennstabes, der nur mit Moderator umgeben ist, liegen unter 0.23 %. Beim 2D-Problem des Brennstabes, der nur von Void umgeben ist, beträgt die relative Abweichung des TransRay-Werts zum HELIOS-Wert für TransRay2D -0.0235 % und für TransRay3D 1.72 %. Die ent-



sprechende Abweichung des HELIOS-Werts zum MCNP-Wert liegt beim Brennstab mit Moderator bei -0.13 % und beim Brennstab mit Void bei 1.4 %.

In Abbildung 38 sind die mit HELIOS, MCNP und TransRay berechneten Werte für den Multiplikationsfaktor  $k_{\infty}$  zu sehen. Die beiden TransRay2D-Werte sind linear interpoliert. Für die Zellohhe von 24 cm zeigen die MCNP- und TransRay3D-Werte die Abhängigkeit des Multiplikationsfaktors von der relativen Höhe des Voids im Moderatorbereich der Brennstabzelle. Im Gegensatz zum Multiplikationsfaktor für den Fall der Brennstabzelle mit Void, die von den 8 benachbarten Brennstabzellen ohne Void umgeben ist, zeigt sich in Abbildung 38 eine eindeutig nichtlineare Abhängigkeit des Multiplikationsfaktors vom Voidanteil im Moderatorbereich. In Abbildung 38 sind zusätzlich die HELIOS-Werte für die 2D-Probleme angegeben, bei denen der Moderator mit dem Void nach Gleichung (162) homogenisiert wurde. Die Differenzen zwischen den Ergebnissen des 3D-Problems und der Rechnung mit homogenisiertem Moderator sind durch 3D-Effekte bedingt.

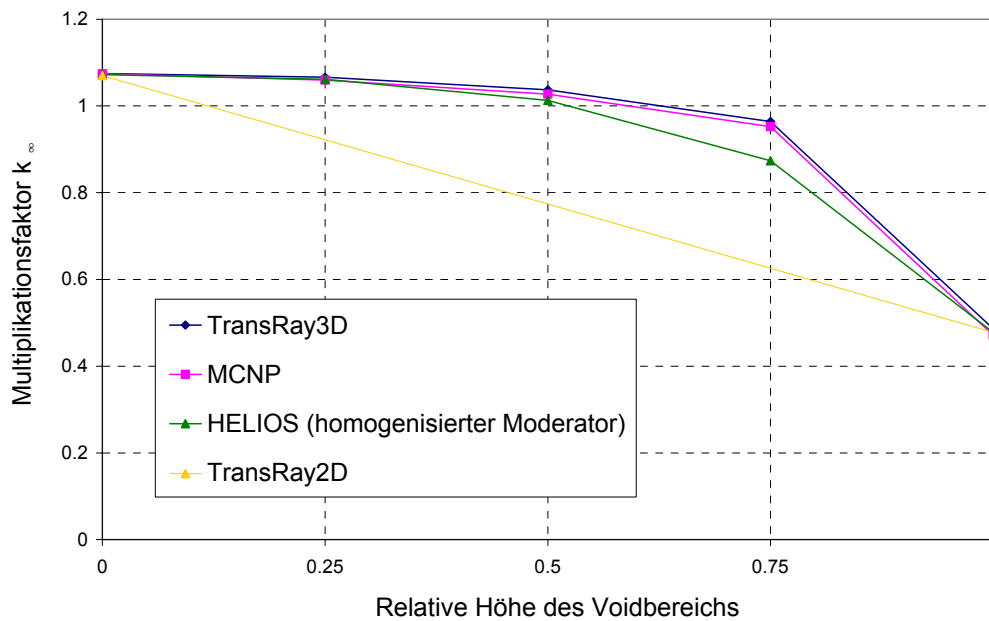


Abbildung 38: Der Multiplikationsfaktor  $k_{\infty}$  in Abhängigkeit vom Voidanteil im Moderatorbereich der Brennstabzelle.

Abbildung 39 zeigt die MCNP-Ergebnisse für den Multiplikationsfaktor  $k_{\infty}$  bei unterschiedlichen Zellohhen (0.1, 1, 10, 24, 50, 75 und 100 cm) und für den homogenisierten Moderator. Die Werte aus den Rechnungen für die 2D-Fälle mit Moderator mit geringerer Dichte wurden zusätzlich eingetragen. Dabei entsprechen 10, 1 und 0.1 % der eigentlichen Moderatordichte einem Voidanteil von 90, 99 und 99.9 %. Im Gegensatz zum Fall der Brennstabzelle mit Void, die von den 8 benachbarten Brennstabzellen ohne Void umgeben ist, zeigt der Multiplikationsfaktor eine Abhängigkeit von der bis zu 100 cm gewählten Zellohhe. Bei einem Voidanteil von  $\frac{1}{4}$ ,  $\frac{1}{2}$  und  $\frac{3}{4}$  erhöht sich in der Regel der Multiplikationsfaktor bei zunehmender

Zellhöhe. Wie beim homogenisierten Regelstab in Abbildung 29 ist der Kurvenverlauf von  $k_{\infty}$  für den nach Gleichung (162) homogenisierten Moderator der Grenzfall für immer kleiner werdende Zellhöhen.

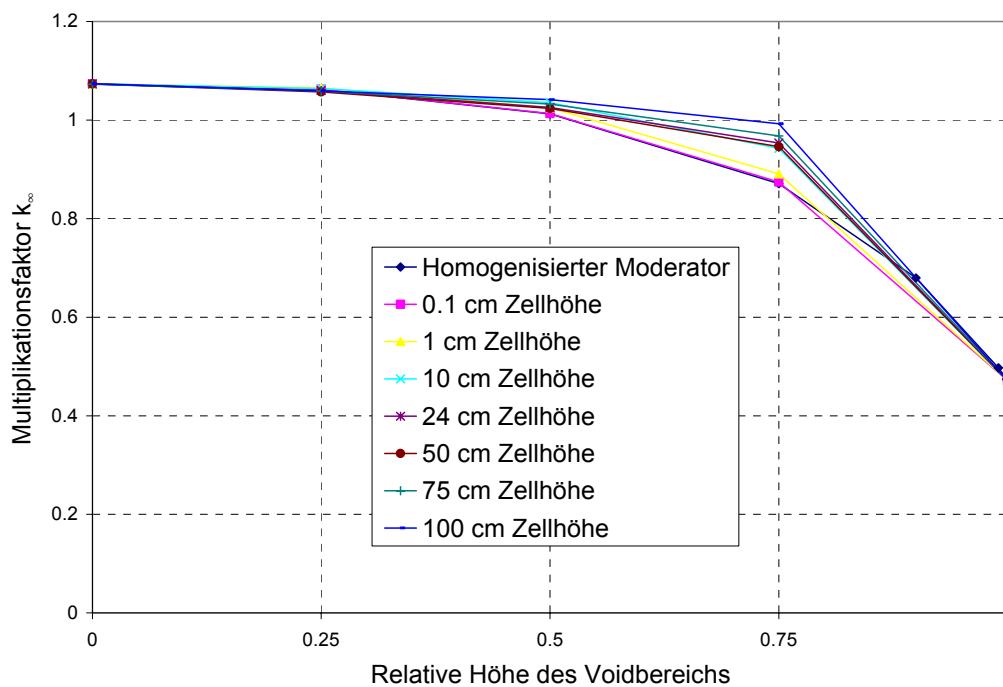


Abbildung 39: Der mit MCNP berechnete Multiplikationsfaktor  $k_{\infty}$  in Abhängigkeit vom Voidanteil im Moderatorbereich der Brennstabzelle für unterschiedliche Zellhöhen und für den homogenisierten Moderator.

Es werden nun die gemittelten Zweigruppenquerschnitte bei der Zellhöhe von 24 cm behandelt. Die Beträge der relativen Abweichungen der TransRay-Werte zu den MCNP-Werten liegen für  $v\sigma_{f1}$  unter 5.6 % und für die anderen Querschnitte unter 3.3 %. Die Beträge der relativen Abweichungen der TransRay-Werte zu den HELIOS-Werten beim 2D-Problem des Brennstabes, der nur mit Moderator umgeben ist, liegen unter 0.93 %. Beim 2D-Problem des Brennstabes, der nur von Void umgeben ist, liegen die Beträge der relativen Abweichungen der TransRay2D-Werte zu den HELIOS-Werten unter 0.13 %. Dies bestätigt, dass die TransRay2D- und die HELIOS-Ergebnisse bei den 2D-Problemen in den meisten Fällen sehr gut übereinstimmen. Die entsprechenden Beträge der relativen Abweichungen der TransRay3D-Werte zu den HELIOS-Werten liegen für  $\sigma_{1 \rightarrow 2}$  bei 5 % und für die anderen Querschnitte unter 0.71 %. Dies bestätigt die in den meisten Fällen gute Übereinstimmung von TransRay3D und HELIOS bei den 2D-Problemen. Die Werte für  $\sigma_{1 \rightarrow 2}$  liegen im Bereich von  $10^{-9} \text{ cm}^{-1}$ , d. h., die absolute Abweichung des TransRay3D-Werts zum HELIOS-Wert ist klein. Da das Neutronenspektrum mit zunehmendem Void härter wird, wird der Anteil der Neutronen, die vom schnellen in den thermischen Energiebereich streuen geringer und  $\sigma_{1 \rightarrow 2}$  konvergiert fast gegen Null. Die Beträge der relativen Abweichungen der mit HELIOS zu den mit MCNP be-

rechneten Zweigruppenquerschnitten liegen beim Brennstab nur mit Moderator unter 1.8 % und beim Brennstab nur mit Void unter 3.2 %.

Die TransRay3D-Werte weichen etwas mehr von den HELIOS-Werten ab als die TransRay2D-Werte. Dies ist auf numerische Effekte beim Übergang von der zwei- zur dreidimensionalen Behandlung zurückzuführen. Trotz alledem ist die Übereinstimmung von TransRay mit HELIOS sehr gut.

Für alle betrachteten Querschnitte liegen also die Beträge der relativen Abweichungen der TransRay-Werte zu den HELIOS- und MCNP-Werten unter 5.6 %. Demnach wurde TransRay im Vergleich zu den Programmen HELIOS und MCNP verifiziert und es kann im folgenden mit TransRay die Notwendigkeit einer 3D-Aufbereitung der Zweigruppenquerschnitte für die Zellhöhe von 24 cm bewertet werden.

Es werden nun die Zweigruppenquerschnitte, die mit den drei Näherungen aus Abschnitt 5.2.1 berechnet wurden, mit denen verglichen, die mit TransRay3D dreidimensional in der Feindiskretisierung nach den Mittelungsvorschriften (147), (148) und (149) berechnet wurden. Tabelle 6 zeigt die relativen Abweichungen der drei Näherungen zu den mit TransRay3D berechneten Zweigruppenquerschnitten. Keine Näherung ist für alle Zweigruppenquerschnitte geeignet. Wird für alle betrachteten Voidhöhen gefordert, dass der Betrag der relativen Abweichung maximal 10 % beträgt, so ist die lineare Interpolation für  $\sigma_{total1}$ ,  $\sigma_{abs1}$ ,  $\sigma_{1\rightarrow1}$  und  $\sigma_{1\rightarrow2}$ , die Interpolation mit Flusswichtung für  $\sigma_{total1}$ ,  $\sigma_{abs1}$  und  $\sigma_{1\rightarrow1}$  und die Homogenisierung für  $\sigma_{total1}$  und  $\sigma_{1\rightarrow1}$  geeignet.

Rel. Höhe des Voids	Lineare Interpolation (159)			Interpolation mit Flusswichtung (160)			Homogenisierter Moderator nach Gleichung (162)		
	0.25	0.5	0.75	0.25	0.5	0.75	0.25	0.5	0.75
$\sigma_{total1}$	2.18%	3.87%	2.88%	1.88%	3.37%	2.40%	2.38%	4.10%	2.78%
$\sigma_{total2}$	-9.94%	-26.25%	-40.55%	-3.78%	-16.17%	-29.82%	-11.46%	-29.20%	-44.32%
$\sigma_{abs1}$	-3.28%	-4.06%	-7.53%	-3.57%	-4.55%	-8.00%	9.07%	24.38%	35.57%
$\sigma_{abs2}$	-14.35%	-31.90%	-48.93%	-8.68%	-22.98%	-40.32%	-3.43%	-11.05%	-21.43%
$\sigma_{1\rightarrow1}$	2.23%	3.93%	2.99%	1.93%	3.44%	2.53%	2.31%	3.91%	2.53%
$\sigma_{1\rightarrow2}$	4.01%	7.80%	8.84%				0.32%	-3.91%	-21.57%
$\sigma_{2\rightarrow2}$	-9.69%	-25.92%	-39.99%	-3.50%	-15.76%	-29.12%	-11.92%	-30.28%	-45.83%
$\nu\sigma_{f1}$	-8.23%	-12.43%	-18.19%	-8.53%	-12.92%	-18.66%	6.07%	20.10%	32.96%
$\nu\sigma_{f2}$	-16.60%	-35.38%	-54.20%	-10.85%	-26.45%	-45.79%	-0.78%	-5.49%	-15.63%

Tabelle 6: Die relativen Abweichungen der Zweigruppenquerschnitte, die mit TransRay nach den Interpolationen (159) und (160) und mit HELIOS für den homogenisierten Moderator berechnet wurden, zu denen, die mit TransRay dreidimensional in der Feindiskretisierung berechnet wurden.

Das heißt, unter dieser Forderung ist für den hier betrachteten Void-Testfall die ungeeignetste der drei Näherungen die der Homogenisierung, die nach Abschnitt 5.2.1 üblicherweise als einfache Näherung angewandt wird, wenn nur die Dichte des Moderators abhängig von der vertikalen Richtung ist. Die bessere Eignung der linearen Interpolation besagt allerdings nur, dass die Abhängigkeit der Querschnitte der schnellen Gruppe  $\sigma_{\text{total}1}$ ,  $\sigma_{\text{abs}1}$ ,  $\sigma_{1 \rightarrow 1}$  und  $\sigma_{1 \rightarrow 2}$  von der Höhe des Voids im Wesentlichen (Betrag der relativen Abweichung unter 10 %) linear verläuft. Für die Querschnitte der thermischen Gruppe ist die Interpolation mit Flusswichtung immer besser als die lineare Interpolation. Wird allerdings eine Näherung als inakzeptabel definiert, wenn für mindestens eine Voidhöhe die relative Abweichung größer als 25 % ist, so sind bei allen betrachteten Querschnitten der thermischen Gruppe die beiden Interpolationen inakzeptabel und für  $\sigma_{\text{abs}2}$  und  $v\sigma_{f2}$  ist nur die Näherung der Homogenisierung akzeptabel.

Die Querschnitte, deren relativen Abweichungen aus Tabelle 6 im vorangegangenen Absatz diskutiert wurden, werden nun in den folgenden Abbildungen gezeigt. Zusätzlich sind die MCNP-Werte angegeben, so dass jeweils fünf Kurven dargestellt werden: Die beiden dreidimensional (TransRay3D in der Feindiskretisierung und MCNP) und die nach den drei Näherungen berechneten Querschnitte. Die Abbildungen veranschaulichen die Abhängigkeit der gemittelten Zweigruppenquerschnitte von der relativen Höhe des Voidbereichs und die Eignung der Näherungen.

Die TransRay-Ergebnisse für die gemittelten Querschnitte der schnellen Gruppe  $\sigma_{\text{total}1}$  und  $\sigma_{1 \rightarrow 1}$  zeigen in guter Näherung einen linearen Verlauf über der Höhe des Voidbereichs (relative Abweichung zur linearen Interpolation in Tabelle 6 zwischen 2 und 4 %). Der lineare Verlauf wird durch MCNP in guter Näherung bestätigt. Da die Kurvenverläufe der beiden Querschnitte qualitativ gleich sind und  $\sigma_{1 \rightarrow 1}$  mit MCNP aus  $\sigma_{\text{total}1}$  nach Gleichung (158) berechnet wird, werden nur die Kurven für  $\sigma_{\text{total}1}$  gezeigt (Abbildung 40).

Die mit TransRay3D in der Feindiskretisierung dreidimensional berechneten Kurven für den gemittelten Absorptionsquerschnitt der schnellen Gruppe  $\sigma_{\text{abs}1}$  und den gemittelten Streuquerschnitt  $\sigma_{1 \rightarrow 2}$  verlaufen wie gesagt in grober Näherung ebenfalls linear (Abbildung 41 und Abbildung 42). Die Abweichungen der Näherung der Homogenisierung zu diesen TransRay3D-Werten sind in beiden Abbildungen deutlich zu sehen.

Die Werte für  $v\sigma_{f1}$  hingegen zeigen einen eindeutig nichtlinearen Verlauf (Abbildung 43). Wie bei  $\sigma_{\text{abs}1}$  werden die Werte für  $v\sigma_{f1}$ , die mit TransRay3D und MCNP dreidimensional berechnet wurden, durch die Näherung der Homogenisierung überschätzt und durch die beiden Interpolationen unterschätzt. Alle drei Näherungen weichen deutlich von der TransRay3D- bzw. MCNP-Kurve ab.

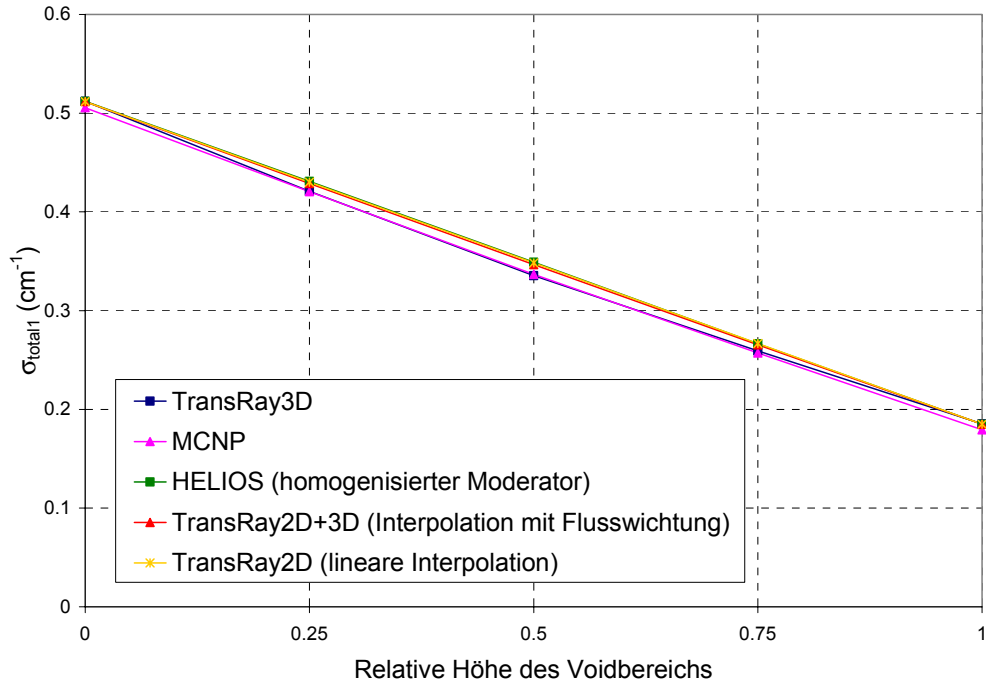


Abbildung 40: Der mit TransRay3D in der Feindiskretisierung und mit MCNP dreidimensional berechnete gemittelte totale Wirkungsquerschnitt der schnellen Gruppe  $\sigma_{total1}$  in Abhängigkeit von der relativen Höhe des Voidbereichs. Zum Vergleich sind die Kurven der drei Näherungen gegeben (Näherung mit nach (162) homogenisiertem Moderator, Interpolation mit Flusswichtung (160) und lineare Interpolation (159)).

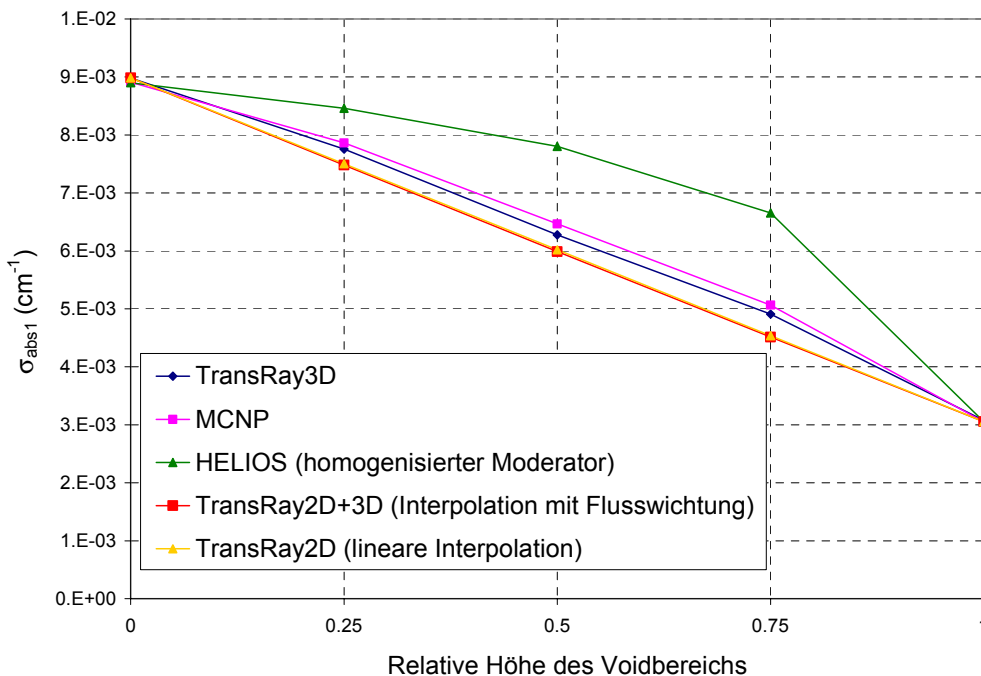


Abbildung 41: Der mit TransRay3D in der Feindiskretisierung und mit MCNP dreidimensional berechnete gemittelte Absorptionsquerschnitt der schnellen Gruppe  $\sigma_{abs1}$  in Abhängigkeit von der relativen Höhe des Voidbereichs. Zum Vergleich sind die Kurven der drei Näherungen gegeben (Näherung mit nach (162) homogenisiertem Moderator, Interpolation mit Flusswichtung (160) und lineare Interpolation (159)).

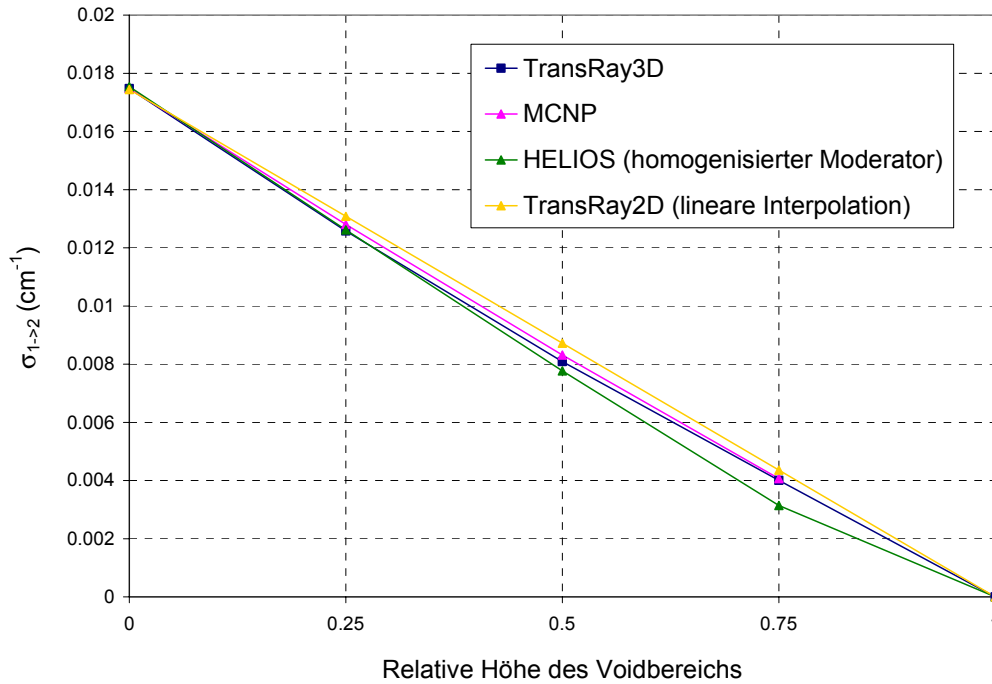


Abbildung 42: Der mit TransRay3D in der Feindiskretisierung und mit MCNP dreidimensional berechnete gemittelte Streuquerschnitt  $\sigma_{1 \rightarrow 2}$  in Abhängigkeit von der relativen Höhe des Voidbereichs. Zum Vergleich sind die Kurven von zwei Näherungen gegeben (Näherung mit nach (162) homogenisiertem Moderator und die lineare Interpolation (159)).

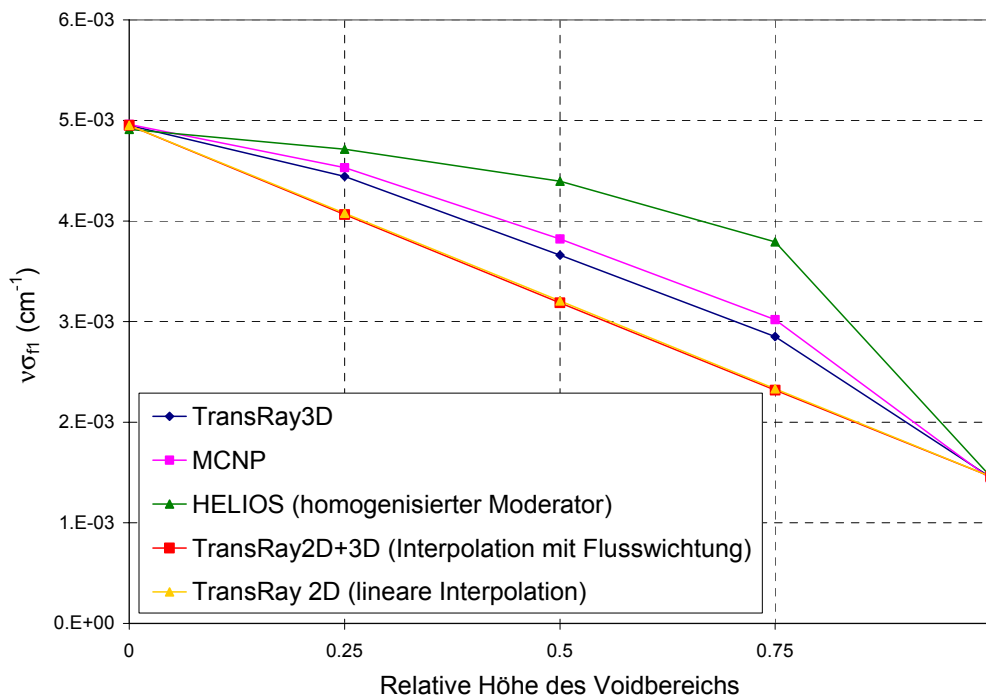


Abbildung 43: Der mit TransRay3D in der Feindiskretisierung und mit MCNP dreidimensional berechnete gemittelte Produktionswirkungsquerschnitt der schnellen Gruppe  $v\sigma_{f1}$  in Abhängigkeit von der relativen Höhe des Voidbereichs. Zum Vergleich sind die Kurven der drei Näherungen gegeben (Näherung mit nach (162) homogenisiertem Moderator, Interpolation mit Flusswichtung (160) und lineare Interpolation (159)).

Bei den gemittelten Querschnitten der thermischen Gruppe  $\sigma_{\text{total}2}$ ,  $\sigma_{\text{abs}2}$ ,  $\sigma_{2 \rightarrow 2}$ , und  $v\sigma_{f2}$  zeigen sich eindeutig nichtlineare Verläufe. Die TransRay3D-Kurven für diese vier Querschnitte unterscheiden sich qualitativ nicht wesentlich. Dies gilt ebenfalls für die MCNP-Kurven und die Kurven der beiden Interpolationen (159) und (160). Nur die Näherung der Homogenisierung verläuft für  $\sigma_{\text{total}2}$  und  $\sigma_{2 \rightarrow 2}$  qualitativ deutlich anders als für  $\sigma_{\text{abs}2}$  und  $v\sigma_{f2}$ .

Da die fünf Kurvenverläufe der beiden Querschnitte  $\sigma_{\text{total}2}$  und  $\sigma_{2 \rightarrow 2}$  jeweils qualitativ sehr ähnlich sind und  $\sigma_{2 \rightarrow 2}$  mit MCNP aus  $\sigma_{\text{total}2}$  nach Gleichung (158) berechnet wird, werden nur die Kurven für  $\sigma_{\text{total}2}$  gezeigt (Abbildung 44). In Abbildung 45 und Abbildung 46 ist zu sehen, dass für  $\sigma_{\text{abs}2}$  und  $v\sigma_{f2}$  die Homogenisierung die beste der drei Näherungen ist.

Exemplarisch sind in Abbildung 44 und Abbildung 45 zum Vergleich die linearen Kurvenverläufe für  $\sigma_{\text{total}2}$  und  $\sigma_{\text{abs}2}$  aus dem vorangegangenen Abschnitt eingetragen, die mit TransRay3D in der Feindiskretisierung dreidimensional berechnet wurden. Das heißt die Werte einmal gemittelt über alle 9 Brennstabzellen und einmal nur gemittelt über die mittlere der 9 Brennstabzellen mit dem Void (VZ = Voidzelle). Deutlich sind die Unterschiede zu den Querschnitten zu sehen, die mit TransRay3D in der Feindiskretisierung bzw. mit MCNP über die einzelne Brennstabzelle mit Void gemittelt wurden.

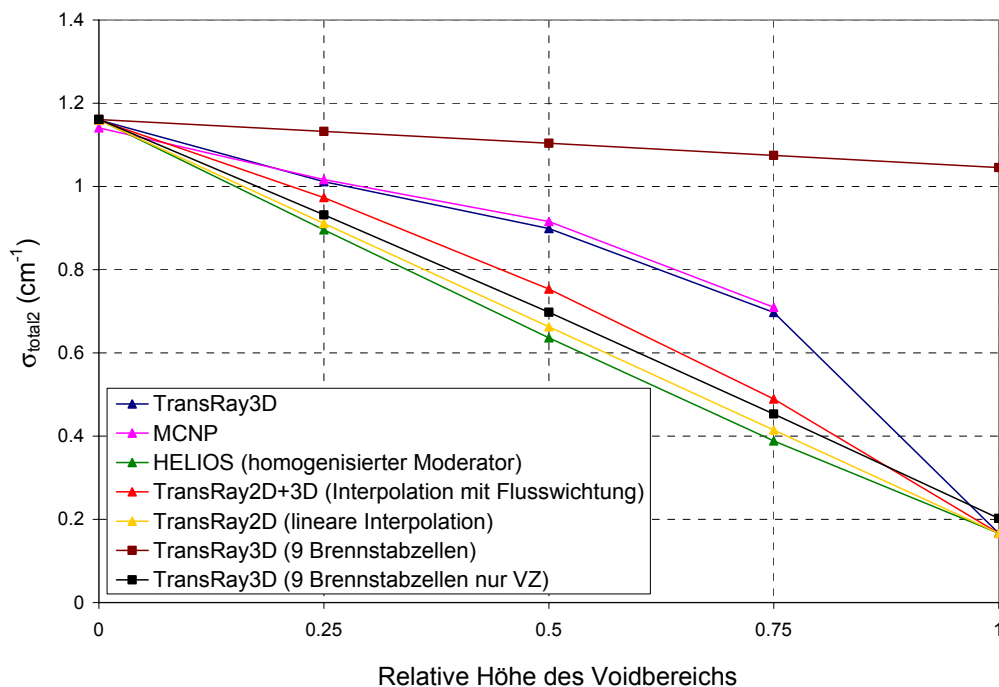


Abbildung 44: Der mit TransRay3D in der Feindiskretisierung und mit MCNP dreidimensional berechnete gemittelte totale Wirkungsquerschnitt der thermischen Gruppe  $\sigma_{\text{total}2}$  in Abhängigkeit von der relativen Höhe des Voidbereichs. Zum Vergleich sind die Kurven der drei Näherungen und die TransRay3D-Werte für die Brennstabzelle mit den 8 nächsten Nachbarn aus Abschnitt 5.2.3.1 gegeben, gemittelt über die gesamte Zelle (alle 9 Brennstabzellen) und nur über die mittlere Brennstabzelle (VZ = Voidzelle).

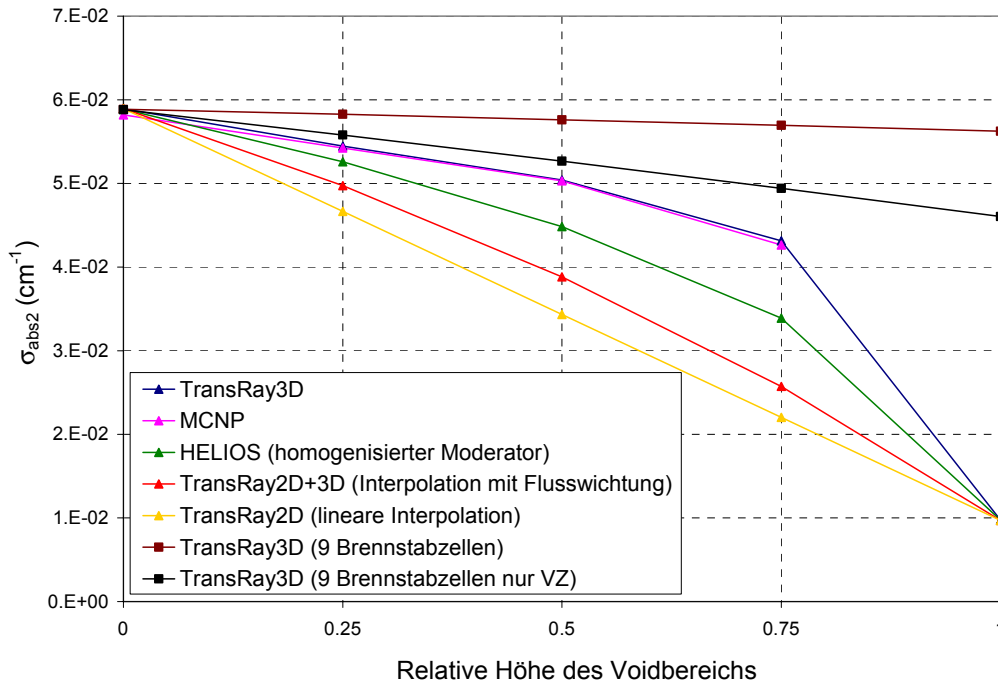


Abbildung 45: Der mit TransRay3D in der Feindiskretisierung und mit MCNP dreidimensional berechnete gemittelte Absorptionsquerschnitt der thermischen Gruppe  $\sigma_{abs2}$  in Abhängigkeit von der relativen Höhe des Voidbereichs. Zum Vergleich sind die Kurven der drei Näherungen und die TransRay3D-Werte für die Brennstabzelle mit den 8 nächsten Nachbarn aus Abschnitt 5.2.3.1 gegeben, gemittelt über die gesamte Zelle (alle 9 Brennstabzellen) und nur über die mittlere Brennstabzelle (VZ = Voidzelle).

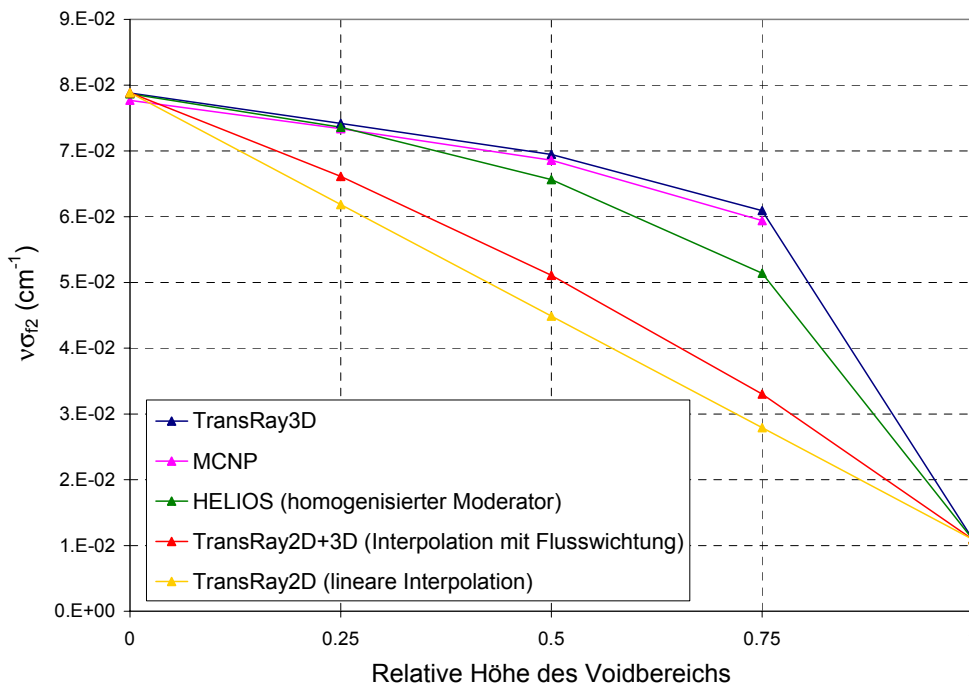


Abbildung 46: Der mit TransRay3D in der Feindiskretisierung und mit MCNP dreidimensional berechnete gemittelte Produktionswirkungsquerschnitt der thermischen Gruppe  $v\sigma_{f2}$  in Abhängigkeit von der relativen Höhe des Voidbereichs. Zum Vergleich sind die Kurven der drei Näherungen gegeben (Näherung mit nach (162) homogenisiertem Moderator, Interpolation mit Flusswichtung (160) und lineare Interpolation (159)).



Wie in den beiden vorangehenden Abschnitten wurde mit MCNP der Einfluss der Zellhöhe auf die gemittelten Zweigruppenwirkungsquerschnitte untersucht. Dafür wurden wiederum Zellhöhen bis zu 100 cm betrachtet: 0.1, 1, 10, 24, 50, 75 und 100 cm. Im Gegensatz zum Fall der Brennstabzelle mit Void, die von den 8 benachbarten Brennstabzellen ohne Void umgeben ist, zeigen alle betrachteten gemittelten Zweigruppenquerschnitte eine Abhängigkeit von der Zellhöhe. Dabei ist es in der Regel so, dass die für Zellrechnungen oft verwendete lineare Interpolation für die Querschnittsmittelung nach Gleichung (159) zwischen den zweidimensional berechneten Werten für die beiden 2D-Fälle nur mit Moderator und nur mit Void im Moderatorbereich der Brennstabzelle die Werte der 3D-Fälle ( $\frac{1}{4}$ ,  $\frac{1}{2}$  und  $\frac{3}{4}$  relative Höhe des Voidbereichs) unterschätzen würde.

Wie die lineare Interpolation (159) ist die einfache 2D-Näherung, bei der der Moderator nach Gleichung (162) homogenisiert wird, unabhängig von der Zellhöhe. Aufgrund der deutlichen Abhängigkeit der gemittelten Zweigruppenquerschnitte von der Zellhöhe ist somit auch diese Homogenisierung grundsätzlich ungeeignet.

Die einzige der drei Näherungen, die die Zellhöhe berücksichtigt, ist die Interpolation mit Flusswichtung (160). Dies geschieht, indem eine zusätzliche 3D-Rechnung in Grobdiskretisierung (zwei Volumina und zwei Gruppen) durchgeführt wird. Mit TransRay wurde diese Interpolation auf dieselben Zellhöhen angewandt, die mit MCNP betrachtet wurden. Die Beträge der relativen Abweichungen dieser interpolierten Werte zu den mit MCNP dreidimensional berechneten Zweigruppenquerschnitten waren zum Teil sehr groß. Im Vergleich zu den MCNP-Werten wurde mit diesem Interpolationsmodell die nichtlineare Abhängigkeit der gemittelten Zweigruppenquerschnitte von der Höhe des Voidbereichs schlecht oder gar nicht wiedergegeben. Das heißt, auch für diese Näherung konnte abgeschätzt werden, dass sie unzureichend ist.

Es wird nun im Vergleich zum Void-Fall die Variante betrachtet, dass der Moderator um den Brennstab in der Höhe nach und nach anstelle von Void durch Moderator mit geringerer Dichte ersetzt wird (10 %, 1 % und 0.1 % der eigentlichen Dichte). Für eine Zellhöhe von 24 cm wurden analog zum Void-Testfall mit MCNP und TransRay3D die 3D-Fälle untersucht, bei denen der Moderator zu  $\frac{1}{4}$ ,  $\frac{1}{2}$  und  $\frac{3}{4}$  in der Höhe durch Moderator mit geringerer Dichte verdrängt ist. Die 2D-Fälle, bei denen der Brennstab nur von Moderator mit geringerer Dichte umgeben ist, wurden dreidimensional mit MCNP und TransRay3D und zweidimensional mit HELIOS und TransRay2D berechnet. Die Beträge der relativen Abweichungen der TransRay-Ergebnisse zu den HELIOS-Ergebnissen liegen unter 4 %, die der TransRay-

Ergebnisse zu den MCNP-Ergebnissen unter 8 %. Dabei sind für alle Testfälle mit reduzierter Moderatorichte die Abweichungen fast ausnahmslos am größten, wenn der Brennstab vollständig von Moderator mit geringerer Dichte umgeben ist. Grundsätzlich ist die Übereinstimmung der drei Programme also gut.

Die Abhängigkeit des Multiplikationsfaktors und der gemittelten Zweigruppenwirkungsquerschnitte von der Höhe des Bereichs mit Moderator mit geringerer Dichte entspricht in allen Fällen qualitativ der Abhängigkeit dieser Größen von der Höhe des Voidbereichs beim Void-Testfall. Bei bis zu 75 % Anteil an Moderator mit geringerer Dichte bzw. 75 % Anteil an Void zeigten die Werte auch quantitativ im Wesentlichen keine großen Unterschiede. Beim Brennstab, der nur von Moderator geringerer Dichte bzw. nur von Void umgeben ist, zeigten sich größere Unterschiede. In Tabelle 7 sind die TransRay2D-Werte für alle betrachteten Moderatorichten (100 %, 10 %, 1 % und 0.1 % der eigentlichen Dichte) und den Void-Fall dargestellt. Mit abnehmender Moderatorichte fallen der Multiplikationsfaktor und alle Zweigruppenquerschnitte stetig (Ausnahme:  $\sigma_{2 \rightarrow 1} \equiv 0$ ). Die stärkste absolute Abnahme in Tabelle 7 ist dabei immer beim Schritt von 100 % auf 10 % Moderatorichte.

	100 % Dichte	10 % Dichte	1 % Dichte	0.1 % Dichte	Void
$k_{\infty}$	1.0701E+00	6.8359E-01	5.0339E-01	4.8034E-01	4.7758E-01
$\sigma_{\text{total1}}$	5.1171E-01	2.1637E-01	1.8763E-01	1.8520E-01	1.8495E-01
$\sigma_{\text{total2}}$	1.1591E+00	2.5100E-01	1.7618E-01	1.6873E-01	1.6650E-01
$\sigma_{\text{abs1}}$	8.9840E-03	5.2415E-03	3.3790E-03	3.0894E-03	3.0557E-03
$\sigma_{\text{abs2}}$	5.8946E-02	2.3440E-02	1.3108E-02	1.1536E-02	9.7226E-03
$\sigma_{1 \rightarrow 1}$	4.8528E-01	2.1036E-01	1.8424E-01	1.8211E-01	1.8189E-01
$\sigma_{1 \rightarrow 2}$	1.7444E-02	7.6600E-04	9.7185E-06	3.3178E-07	1.2081E-09
$\sigma_{2 \rightarrow 1}$	0	0	0	0	0
$\sigma_{2 \rightarrow 2}$	1.1002E+00	2.2756E-01	1.6307E-01	1.5719E-01	1.5677E-01
$\nu\sigma_{f1}$	4.9501E-03	2.9560E-03	1.6941E-03	1.4849E-03	1.4605E-03
$\nu\sigma_{f2}$	7.8850E-02	3.5263E-02	1.7563E-02	1.4729E-02	1.0921E-02

Tabelle 7: Mit TransRay2D berechnete Werte für den Multiplikationsfaktor  $k_{\infty}$  und die gemittelten Zweigruppenquerschnitte beim 2D-Fall des nur von Void bzw. Moderator (100 %, 10 %, 1 % und 0.1 % der eigentlichen Dichte) umgebenen Brennstabes.

Für die Variante des Moderators mit geringerer Dichte wurde die Notwendigkeit einer 3D-Datenaufbereitung anhand eines Vergleichs der 3D-Rechnungen zu den drei Näherungen aus Abschnitt 5.2.1 nicht untersucht. Aufgrund der qualitativ und zum großen Teil auch quantitativ guten Übereinstimmung dieser Variante zu der Variante mit Void ist folgendes für die drei Näherungen zu erwarten:

- 1) Die lineare Interpolation (159) der Zweigruppenquerschnitte ist die geradlinige Verbindung des Wertes in der Spalte für 100 % Dichte in Tabelle 7 mit dem entsprechenden Wert des betrachteten Falls (10 %, 1 %, 0.1 % Dichte oder Void). Da jeweils zwischen diesen beiden Werten die 3D-Kurvenverläufe, die die Abhängigkeit der Zweigruppenquerschnitte von der Höhe des Bereichs mit Void bzw. mit Moderator mit geringerer Dichte beschreiben, qualitativ gleich sind, gelten für den Fall des Moderators mit geringerer Dichte qualitativ dieselben Aussagen wie für den Void-Fall.
- 2) Bei der Interpolation mit Flusswichtung (160) wird mit den Werten aus der Spalte für 100 % Dichte in Tabelle 7 und mit den Werten der Spalte des jeweils betrachteten Falls eine zusätzliche 3D-Rechnung in Grobdiskretisierung (2 Volumina, 2 Gruppen) ausgeführt. Da die stärkste absolute Abnahme der Querschnitte in Tabelle 7 beim Schritt von 100 % auf 10 % Moderatorichte ist, ist zu erwarten, dass sich auch diese Interpolation bei den Fällen mit geringerer Moderatorichte verhält wie beim Void-Fall.
- 3) Beim Void-Testfall beträgt die Dichte des nach Gleichung (162) homogenisierten Moderators bei  $\frac{1}{4}$ ,  $\frac{1}{2}$  und  $\frac{3}{4}$  relativer Voidhöhe 75, 50 und 25 % der eigentlichen Dichte. Für die Fälle, bei denen der Moderator durch Moderator mit 10 %, 1 %, und 0.1 % der eigentlichen Dichte verdrängt wird, betragen die entsprechenden Dichten des homogenisierten Moderators 77.5, 55 und 32.5 %, 75.25, 50.5 und 25.75 % bzw. 75.025, 50.05 und 25.075 % der eigentlichen Moderatorichte. Es ist demnach zu erwarten, dass bei der 2D-Näherung der Homogenisierung für die Fälle mit 1 % und 0.1 % Moderatorichte kaum Unterschiede und für den Fall mit 10 % Moderatorichte keine signifikanten Unterschiede gegenüber dem Void-Fall auftreten.

Wie für die einzelne Brennstabzelle, deren Moderator in der Höhe durch Void verdrängt wird, wurde mit MCNP für die einzelne Brennstabzelle, deren Moderator in der Höhe durch Moderator mit 1% der eigentlichen Dichte verdrängt wird, der Einfluss der Zellhöhe auf den Multiplikationsfaktor  $k_{\infty}$  und die gemittelten Zweigruppenwirkungsquerschnitte untersucht. Dafür wurden dieselben Zellhöhen betrachtet wie beim Void-Testfall. Wie bereits für die Zellhöhe von 24 cm in diesem Abschnitt erwähnt wurde, entsprach auch für die anderen Zellhöhen die Abhängigkeit des Multiplikationsfaktors und der gemittelten Zweigruppenquerschnitte von der Höhe des Bereichs mit Moderator mit 1 % der eigentlichen Dichte qualitativ der Abhängigkeit dieser Größen von der Höhe des Voidbereichs. Demnach ist wie beim Void-Testfall zu erwarten, dass beim Fall des Moderators mit 1% der eigentlichen Dichte die drei Näherungen für Zellhöhen bis 100 cm grundsätzlich ungeeignet sind.

Es lässt sich folgendes Fazit aus den Rechnungen zur einzelnen Voidzelle ziehen:

- 1) Beim Testfall der einzelnen Brennstabzelle, in der der Moderator in der Höhe nach und nach durch Void verdrängt wird, wurden für eine Zellhöhe von 24 cm, welche eine typische Nodehöhe im Code DYN3D ist, die Zweigruppenquerschnitte, die mit TransRay in der Feindiskretisierung dreidimensional berechnet wurden, mit den drei Näherungen der linearen Interpolation, der Interpolation mit Flusswichtung und der Homogenisierung verglichen. Dieser Vergleich zeigt, dass alle drei Näherungen unzureichend sind und stattdessen eine 3D-Datenaufbereitung der Zweigruppenquerschnitte notwendig ist.
- 2) Die mit MCNP berechneten Werte für den Multiplikationsfaktor  $k_{\infty}$  und für alle betrachteten gemittelten Zweigruppenquerschnitte zeigen eine Abhängigkeit von der bis zu 100 cm gewählten Zellhöhe. Es wurde abgeschätzt, dass für Zellhöhen bis 100 cm und damit für typische Nodehöhen in DYN3D, eine 3D-Datenaufbereitung notwendig ist.
- 3) Für eine Zellhöhe von 24 cm war die Abhängigkeit des Multiplikationsfaktors und der gemittelten Zweigruppenquerschnitte von der Höhe des Bereichs mit Moderator geringerer Dichte (10, 1 und 0.1 % der eigentlichen Dichte) qualitativ gleich der Abhängigkeit dieser Größen von der Höhe des Voidbereichs beim Void-Testfall. Es wurde abgeschätzt, dass wie beim Fall mit Void eine 3D-Datenaufbereitung bei den Fällen mit geringerer Moderatordichte, bei der der Moderator in Form von Dampf vorliegt, notwendig ist.
- 4) Bei allen Fällen, in denen der Moderator in der Höhe durch Moderator geringerer Dichte (10, 1 und 0.1 % der eigentlichen Dichte) bzw. durch Void verdrängt wird, ist die Abhängigkeit des Multiplikationsfaktors bzw. der gemittelten Zweigruppenquerschnitte von der Zellhöhe qualitativ gleich. Für den Fall, dass der Moderator in der Höhe durch Moderator mit 1 % der eigentlichen Dichte verdrängt wird, wurde wie beim Void-Testfall abgeschätzt, dass eine 3D-Datenaufbereitung der Zweigruppenquerschnitte für Zellhöhen bis 100 cm notwendig ist.

Allgemein bedeutet dies, dass für Phasengrenzflächen über einen größeren Bereich des Reaktors eine 3D-Datenaufbereitung gemittelter Zweigruppenquerschnitte notwendig sein kann.

## 6 Zusammenfassung

In der Einleitung wurde die klassische deterministische Neutronentransportberechnung des gesamten Reaktorkerns beschrieben und in drei Stufen eingeteilt. Falls ausschließlich Gruppendaten verwendet werden, so werden in der Stufe 1 die Vielgruppendaten für alle Energiegruppen erzeugt, in der Stufe 2 werden aus den Vielgruppendaten mit den Zellcodes Weniggruppendaten berechnet und in Stufe 3 wird mit den Weniggruppendaten die Neutronenfeldberechnung über einem groben Rauggitter für den gesamten Reaktorkern ausgeführt.

In der zweiten Stufe erfolgt die Berechnung der Weniggruppendaten für Reaktorcodes, mit denen konventionelle thermische Reaktoren berechnet werden, standardmäßig mit 2D-Zellcodes, die den Neutronentransport mit deterministischen Methoden zweidimensional berechnen. Ziel dieser Arbeit war es, einen 3D-Zellcode zu entwickeln, mit diesem Code 3D-Effekte zu untersuchen und die Notwendigkeit einer 3D-Datenaufbereitung von Weniggruppendaten (Zweiggruppenwirkungsquerschnitten) zu bewerten. Aus dieser Zielstellung wurden in der Einleitung die zwei Aufgaben für diese Arbeit formuliert:

- a. Entwicklung eines 2D/3D-Zellcodes zur Berechnung des Neutronentransports in Anordnungen von Brennelementzellen unter Verwendung der Methode der Erststoßwahrscheinlichkeiten, die mit der Ray-Tracing-Methode berechnet werden.
- b. Bewertung der Notwendigkeit einer dreidimensionalen Datenaufbereitung gemittelter Zweigruppenwirkungsquerschnitte für Reaktorcodes mit dem entwickelten Zellcode für ausgesuchte 3D-Fälle.

Bezüglich der ersten Aufgabe wurde der 2D/3D-Zellcode TransRay geschrieben und verifiziert. Dazu wurde zunächst die integrale Transportmethode der Stoßwahrscheinlichkeiten, die mit der Ray-Tracing-Methode berechnet werden, im Zwei- und Dreidimensionalen mathematisch formuliert. Die 2D- und die 3D-Formulierung wurden äquivalent gewählt, so dass die 2D- und 3D-Rechnungen mit TransRay auf einem möglichst einheitlichen Algorithmus verglichen werden konnten. Diese Algorithmen zur Berechnung des Neutronenfeldes einschließlich der Anwendung, effektive Gruppenwirkungsquerschnitte zu berechnen, wurden in Kapitel 2 mathematisch formuliert.

Nach diesen formulierten Berechnungsmethoden wurden numerische Lösungsverfahren erstellt und die Algorithmen in der Programmiersprache FORTRAN in das Neutronentransportprogramm TransRay implementiert. In Kapitel 3 wurden kurz die Datenaufbereitung, die Geometrieingabe und das Ray-Tracing in TransRay beschrieben. Weiterhin wurden die

Funktionen der entscheidenden Prozeduren von TransRay, ihre Struktur innerhalb von TransRay und der Ablauf der äußeren Iteration in TransRay, welche nach der inversen Potenzmethode erfolgt, anhand eines Flussdiagramms beschrieben.

In allen untersuchten Fällen wurden der Multiplikationsfaktor  $k_{\infty}$  der Zelle und die über die Zelle gemittelten makroskopischen Zweigruppenwirkungsquerschnitte der schnellen und thermischen Gruppe berechnet, und zwar der totale, die Absorptions-, Streu- und Produktionsquerschnitte. Die Gruppengrenze wurde bei 3.9279 eV gewählt. Die Ergebnisse für die gemittelten Zweigruppenquerschnitte sind selbstverständlich abhängig von der Wahl der Gruppengrenze. Diese Abhängigkeit wurde nicht untersucht.

Alle Fälle wurden mit den drei Programmen HELIOS [51], MCNP [7] und TransRay berechnet. Unter anderem wurden somit Vergleichsrechnungen zwischen zwei Methoden zur Berechnung des Neutronentransports gemacht. Einmal mit der integralen Transportmethode der Stoßwahrscheinlichkeiten, die mit der deterministischen Ray-Tracing-Methode berechnet werden, und einmal mit der Monte-Carlo-Methode. Erstere wird vom 2D-Programm HELIOS und vom 2D/3D-Programm TransRay und Zweite vom 3D-Code MCNP verwendet.

Zuerst wurde TransRay am 2D-Problem des Babcock und Wilcox UO<sub>2</sub> (B&W-UO<sub>2</sub>) Kritikalitäts-Benchmarks überprüft. Anschließend wurde TransRay im Vergleich zu den Programmen HELIOS und MCNP an diesem Benchmark verifiziert. Unter anderem wurden dafür unterschiedliche Datensätze von makroskopischen Vielgruppenwirkungsquerschnitten, die Eingangsdaten von TransRay sind, getestet. Selbst bei diesem recht einfachen 2D-Problem des B&W-UO<sub>2</sub> Benchmarks, bei dem es keine großen Flussgradienten gibt, wie zum Beispiel bei den später betrachteten Fällen mit Absorbern oder mit Voidbereichen, zeigten sich schon deutliche Unterschiede in den TransRay-Ergebnissen bei Verwendung unterschiedlicher Datensätze makroskopischer Gruppenwirkungsquerschnitte. Mit dem HELIOS-Datensatz, der nach Variante B2 in Abbildung 9 erzeugt wurde, stimmten die TransRay-Ergebnisse am besten mit denen von HELIOS und MCNP überein. Diese Übereinstimmung, die sehr gut war, war notwendig dafür, dass in dem folgenden Kapitel 5 der Unterschied zwischen den Näherungen und einer 3D-Aufbereitung gemittelter Zweigruppenquerschnitte untersucht werden konnte. Denn erst durch den Abgleich der Datenbasis war sicher, dass ein solcher Unterschied nicht durch ungleiche Gruppendaten der Transportprogramme vorgetäuscht wird, sondern wirklich eine Folge eines 3D-Effektes ist. Von den drei Datensätzen war dafür der nach Variante B2 besonders gut geeignet. Dieser Datensatz wurde für alle folgenden TransRay-Rechnungen in dieser Arbeit verwendet. Damit beruhten die TransRay- und HELIOS-Rechnungen auf einer einheitlichen Datengrundlage.

Für alle weiteren Rechnungen wurden die Daten derselben Kernkonfiguration eines Druckwasserreferenzreaktors gewählt. Zuerst wurde das 2D-Problem der unendlich langen Brennstabzelle betrachtet. Auch bei diesem 2D-Problem stimmten die Ergebnisse von TransRay2D und TransRay3D sehr gut überein und TransRay stimmte sehr gut mit HELIOS und MCNP überein. Fazit dieser Verifikation von TransRay war, dass TransRay und die verwendete Datenbasis für die folgenden Untersuchungen von 3D-Zelleffekten geeignet waren.

Anhand von 3D-Problemen wurde nun die zweite Aufgabe dieser Arbeit behandelt, d. h., die Notwendigkeit einer 3D-Datenaufbereitung gemittelter Zweigruppenwirkungsquerschnitte zu bewerten. Es wurden die 3D-Probleme eines eingetauchten Regelstabs und einer Brennstabzelle mit einer „Dampfblase“ im Moderatorgebiet behandelt. Die Ergebnisse der drei Programme HELIOS, MCNP und TransRay stimmten auch hier im Wesentlichen gut bis sehr gut überein. Die Abhängigkeit des Multiplikationsfaktors  $k_{\infty}$  und der gemittelten Zweigruppenwirkungsquerschnitte von der Eintauchtiefe des Regelstabes beziehungsweise von der Höhe der Dampfblase um den Brennstab wurden untersucht. Die Zweigruppenwirkungsquerschnitte, die mit TransRay in der Feindiskretisierung nach den Mittelungsvorschriften (147), (148) und (149) dreidimensional berechnet wurden, wurden mit denen üblicher Näherungen verglichen. Aus diesem Vergleich wurde die Notwendigkeit einer 3D-Aufbereitung gemittelter Zweigruppenwirkungsquerschnitte bewertet.

Für die dreidimensionalen Rechnungen wurden an allen Rändern der Zelle Reflexionsrandbedingungen angenommen. Dies ist in axialer Richtung eine unrealistische Bedingung, insbesondere für den eingetauchten Regelstab. Beim Void-Testfall entsprechen die Reflexionsrandbedingungen an den Rändern in z-Richtung der unendlichen Fortsetzung von Voidblasen in z-Richtung. Die in dieser Arbeit zu untersuchende Frage war jedoch, wie sich die gemittelten Zweigruppenquerschnitte unterscheiden, wenn sie dreidimensional oder durch die üblichen 2D-Näherungen berechnet werden. Bei der Verwendung von Reflexionsrandbedingungen können die entscheidenden Tendenzen in den Unterschieden erkannt werden.

Weiterhin musste für die 3D-Rechnungen mit TransRay die dreidimensionale Zelle geeignet in Teilvolumina unterteilt werden. In jedem Teilvolumen wurden dabei Wirkungsquerschnitte angenommen, die mit HELIOS zweidimensional erzeugt wurden. Bei diesem Modell wurde also die dreidimensionale Geometrie der Zelle berücksichtigt. Allerdings ist dieses 3D-Geometriemodell in TransRay nur eine Näherung, da bei der zweidimensionalen Erzeugung der Querschnitte mit HELIOS die vertikalen Heterogenitäten in der Zelle nicht berücksichtigt werden konnten.

Drei Näherungen für die gemittelten Zweigruppenwirkungsquerschnitte wurden verwendet: Die lineare Interpolation (159), die Interpolation mit zusätzlicher Flusswichtung (160) und die Homogenisierung. Die lineare Interpolation ist die einfachste 2D-Näherung, bei der zwischen den zweidimensional berechneten Werten des gezogenen und des vollständig eingefahrenen Regelstabs, bzw. des Brennstabes, der nur mit Moderator und nur mit Void umgeben ist, linear interpoliert wird. Bei der Interpolation mit Flusswichtung werden diese zweidimensional berechneten Werte zusätzlich mit Neutronengruppenflüssen gewichtet. Diese Flüsse wurden mit TransRay in Grobdiskretisierung (2 Volumina und 2 Energiegruppen) dreidimensional berechnet. Diese Näherung ist daher keine reine 2D-Näherung. Sie konnte nur mit TransRay und nicht mit HELIOS und MCNP ausgeführt werden. Die Homogenisierung ist eine 2D-Näherung, bei der der Regelstab nach Gleichung (163) bzw. das Void mit dem Moderator nach Gleichung (162) homogenisiert wurde.

Als 3D-Probleme wurden folgende Anordnungen von Brennelementzellen untersucht: Als erstes Modell wurde ein eingetauchter Regelstab mit unterschiedlichen Eintauchtiefen betrachtet, der von 8 Nachbarbrennstäben umgeben ist. Bei der Zellhöhe von 24 cm, welche ungefähr der Höhe eines Nodes im Programm DYN3D [18] entspricht, zeigte sich bei diesem 3D-Problem, dass die mit TransRay in der Feindiskretisierung dreidimensional berechneten gemittelten Zweigruppenquerschnitte sehr gut mit der Näherung der Interpolation mit Flusswichtung (160) übereinstimmten. Diese Näherung war die beste der drei betrachteten. Anhand der TransRay-Ergebnisse lässt sich also bewerten, dass eine 3D-Datenaufbereitung gemittelter Zweigruppenquerschnitte in der Feindiskretisierung in Ort und Energie nach den Vorschriften (147), (148) und (149) nicht notwendig ist. Für die Querschnittsmittelung kann stattdessen zwischen den zweidimensional berechneten Werten für den gezogenen und den vollständig eingetauchten Regelstab nach Vorschrift (160) interpoliert werden. Für den Multiplikationsfaktor  $k_{\infty}$  und für die Zweigruppenquerschnitte mit Ausnahme des gemittelten Absorptionswirkungsquerschnitts der thermischen Gruppe  $\sigma_{\text{abs}2}$  kann in guter Näherung nach Gleichung (159) linear interpoliert werden. Die Näherung des homogenisierten Regelstabes nach (163) ist nicht anwendbar.

Die Unterschiede in den MCNP- und den TransRay-Ergebnissen beim eingetauchten Regelstab lassen sich vermutlich im Wesentlichen auf das 3D-Geometriemodell in TransRay zurückführen. Es wäre sinnvoll, für den Testfall des eingetauchten Regelstabes die Vielgruppenquerschnitte für die TransRay-Rechnungen dreidimensional aufzubereiten.

Aus dem Vergleich der TransRay-Interpolation nach Gleichung (160) mit MCNP-Rechnungen für unterschiedliche Zellhöhen (0.1, 1, 10, 24 und 100 cm) ließ sich abschätzen,



dass die Interpolation mit zusätzlicher Flusswichtung (160) eine umso bessere Näherung ist, je weniger die Abhängigkeit der Zweigruppenquerschnitte von der Eintauchtiefe des Regelstabes von der Nichtlinearität abweicht. Für die Zellhöhen von 10 und 24 cm traten geringere Abweichungen von der Linearität auf und die Übereinstimmung der Näherung mit den MCNP-Ergebnissen war sehr gut.

Als zweites Modell wurde eine Brennstabzelle untersucht, in der der Moderator in der Höhe nach und nach durch Void ersetzt wird als Modell für eine Dampfblase im Moderatorbereich. Für das zweite Modell wurden zwei Fälle behandelt: Als erster Void-Testfall wurde eine Brennstabzelle mit Void untersucht, die von 8 Brennstabzellen ohne Void umgeben ist. Als zweiter Void-Testfall wurde eine einzelne Brennstabzelle mit Void untersucht. Bei beiden Testfällen zeigte sich eine gute bis sehr gute Übereinstimmung der Ergebnisse für den Multiplikationsfaktor  $k_{\infty}$  und die gemittelten Zweigruppenquerschnitte bei Verwendung der drei Programme HELIOS, MCNP und TransRay.

Beim ersten Void-Testfall war bei einer Zellhöhe von 24 cm die Abhängigkeit der Zweigruppenwirkungsquerschnitte von der Höhe des Voidbereichs in sehr guter Näherung linear. Das heißt, eine 3D-Datenaufbereitung der Zweigruppenwirkungsquerschnitte ist nicht notwendig und es kann stattdessen für eine Querschnittsmittelung in sehr guter Näherung zwischen den zweidimensional berechneten Werten für den Fall mit bzw. ohne Moderator in der zentralen Brennstabzelle linear nach Gleichung (159) interpoliert werden.

Für eine Zellhöhe von 10 cm ist die Abhängigkeit der Zweigruppenwirkungsquerschnitte ebenfalls in sehr guter Näherung linear. Dies gilt im Wesentlichen auch für eine Zellhöhe von 100 cm. Damit konnte abgeschätzt werden, dass für diesen Void-Testfall eine 3D-Datenaufbereitung der Zweigruppenwirkungsquerschnitte im Bereich typischer Nodehöhen in DYN3D nicht notwendig ist.

Beim zweiten Void-Testfall wurde eine einzelne Brennstabzelle mit Void untersucht. Somit erhöhte sich gegenüber dem ersten Void-Testfall der relative Anteil des Voids am gesamten Volumen der Zelle. Bei Verwendung der Reflexionsrandbedingungen entsprach dieses Problem der einzelnen Brennstabzelle mit Void einer Anordnung unendlich vieler Brennstäbe, die in der Höhenschicht, in der der Moderator durch Void verdrängt ist, vollständig gevoidet sind. Die einzelne Brennstabzelle ist somit der Grenzfall des ersten Void-Testfalls, bei dem keine 3D-Effekte bei den gemittelten Zweigruppenquerschnitten zu sehen waren. Für die einzelne Brennstabzelle wurde zusätzlich die Variante untersucht, dass der Moderator in der Höhe nach und nach anstelle von Void durch Moderator mit geringerer Dichte ersetzt wurde (10 %, 1 % und 0.1 % der eigentlichen Dichte). Beim betrachteten Druckwasserreferenzreak-

tor liegt der Moderator bei diesen Dichten in Form von Dampf vor bei entsprechend höheren Temperaturen. Für den zweiten Void-Testfall der einzelnen Brennstabzelle ergaben sich folgende wesentlichen Resultate:

- 1) Für eine Zellhöhe von 24 cm waren die drei Näherungen für die Zweigruppenwirkungsquerschnitte im Vergleich zu den Querschnitten, die mit TransRay in der Feindiskretisierung dreidimensional berechnet wurden, unzureichend. Demnach ist eine 3D-Datenaufbereitung der gemittelten Zweigruppenquerschnitte notwendig.
- 2) Die mit MCNP berechneten Werte für den Multiplikationsfaktor  $k_{\infty}$  und die betrachteten gemittelten Zweigruppenquerschnitte zeigten eine Abhängigkeit von der bis zu 100 cm gewählten Zellhöhe. Es wurde abgeschätzt, dass für Zellhöhen bis 100 cm und damit auch für typische Nodehöhen in DYN3D, eine 3D-Datenaufbereitung notwendig ist.
- 3) Für eine Zellhöhe von 24 cm war die Abhängigkeit des Multiplikationsfaktors und der gemittelten Zweigruppenquerschnitte von der Höhe des Bereichs mit Moderator geringerer Dichte (10, 1 und 0.1 % der eigentlichen Dichte) qualitativ gleich der Abhängigkeit dieser Größen von der Höhe des Voidbereichs beim Void-Testfall. Es wurde abgeschätzt, dass wie beim Fall mit Void eine 3D-Datenaufbereitung bei den Fällen mit geringerer Moderatordichte notwendig ist.
- 4) Bei allen Fällen, in denen der Moderator in der Höhe durch Moderator geringerer Dichte (10, 1 und 0.1 % der eigentlichen Dichte) bzw. durch Void verdrängt wird, ist die Abhängigkeit des Multiplikationsfaktors bzw. der gemittelten Zweigruppenquerschnitte von der Zellhöhe qualitativ gleich. Für den Fall, dass der Moderator in der Höhe durch Moderator mit 1 % der eigentlichen Dichte verdrängt wird, wurde wie beim Void-Testfall abgeschätzt, dass eine 3D-Datenaufbereitung der gemittelten Zweigruppenquerschnitte für Zellhöhen bis 100 cm notwendig ist.

Die Differenzen zwischen den Ergebnissen des jeweiligen 3D-Problems und denen der 2D-Näherung der Homogenisierung sind durch 3D-Effekte bedingt. 3D-Effekte können also für starke axiale Heterogenitäten, z. B. die Enden eingetauchter Regelstäbe oder eine über größere Bereiche im Reaktorkern ausgebildete Phasengrenzfläche, relevant sein.

Bei der Zellhöhe von 24 cm war die Näherung der Interpolation mit Flusswichtung (160) gut geeignet, um die Abhängigkeit der Zweigruppenwirkungsquerschnitte von der Eintauchtiefe des Regelstabes zu beschreiben. Für den Void-Testfall der einzelnen Brennstabzelle erwiesen sich alle drei Näherungen als ungeeignet. Aus dem Vergleich der Zweigruppenwirkungsquerschnitte, die mit TransRay in der Feindiskretisierung dreidimensional berechnet wurden, zu denen der drei Näherungen ließ sich demnach bewerten, dass bei Brenn-

stabzellen, die über einen größeren Bereich gevoidet sind, eine 3D-Datenaufbereitung gemittelter Zweigruppenwirkungsquerschnitte eher erforderlich ist, als bei Anordnungen von Brennstabzellen mit eingetauchten Regelstäben. Die einzelne Brennstabzelle mit Void kann als der Grenzfall eines Reaktors angesehen werden, der über die gesamte horizontale Ebene gevoidet ist. Für Phasengrenzflächen über einen größeren Bereich des Reaktors kann also eine 3D-Datenaufbereitung gemittelter Zweigruppenquerschnitte notwendig sein.

## 7 Ausblick

Die Verwendung realistischer Randbedingungen in axialer Richtung bleibt eine offene Frage, die untersucht werden müsste. Eine Möglichkeit realistischere Randbedingungen zu erzeugen ist, die in die 3D-Zelle eintretenden Ströme  $\vec{j}$  aus einer vorher auszuführenden 3D-Berechnung des Reaktors zu bestimmen, diese in Gleichung (125 a) einzusetzen und somit aus dieser Gleichung die Flüsse zu berechnen.

Für das 3D-Geometriemodell in TransRay müssten die Eingangsdaten für eine dreidimensionale Transportrechnung eigentlich bereits vorher dreidimensional aufbereitet werden. Eine Möglichkeit wäre, zwischen HELIOS und TransRay zu iterieren. Das heißt, mit den zweidimensional erzeugten Daten von HELIOS wird eine dreidimensionale Transportrechnung mit TransRay ausgeführt und mit der berechneten Flussverteilung werden dann wieder die neuen Gruppenquerschnitte zweidimensional in HELIOS erzeugt u.s.w.. Dieser Iterationsprozess müsste dann bis zur Konvergenz durchgeführt werden.

Die Rechenzeiten bei den 3D-Rechnungen mit TransRay waren deutlich höher als die Rechenzeiten bei den entsprechenden MCNP-Rechnungen. Bei der Entwicklung von TransRay wurde allerdings der Schwerpunkt nicht darauf gelegt, möglichst schnelle Algorithmen zu erstellen. Für die weitere Verwendung von TransRay müssten daher die implementierten Algorithmen optimiert werden.

TransRay könnte zur dreidimensionalen Datenaufbereitung effektiver Neutronengruppenwirkungsquerschnitte für das reaktordynamische Programm DYN3D verwendet werden. Am Beispiel eingetauchter Regelstäbe bedeutet dies im Detail, dass für die Rechnungen mit DYN3D effektive Querschnitte vorher für die Eintauchtiefen der Regelstäbe in das betrachtete Node dreidimensional berechnet werden und in der Wirkungsquerschnittsbibliothek von DYN3D zur Verfügung stehen müssen. Entsprechend könnte die Querschnittsbibliothek bezüglich der anderen betrachteten dreidimensionalen Probleme erweitert werden. Für diese Verwendung von TransRay müssten jedoch das Programm weiter ausgebaut und die Rechenzeiten der dreidimensionalen Rechnungen deutlich reduziert werden.

Neben der Datenaufbereitung kann TransRay zur Untersuchung anderer, spezieller Fragestellungen, die mit dreidimensionalen Effekten des Neutronentransports verbunden sind, angewandt werden.

## Literaturverzeichnis

- [1] Alcouffe, R. E., Baker, R. S., Brinkley, F. W., Marr, D. R., O'Dell, R. D., Walters, W. F., *DANTSYS: A Diffusion Accelerated Neutral Particle Transport Code System*, Los Alamos National Laboratory Report LA-12969-M, 1995.
- [2] Azmy, Y. Y., *What's New with DOORS*, PHYSOR 2000 Workshop, Pittsburgh, May 7-11, (2000).
- [3] Bahadir, T., Lindahl, S.-O., Palmtag, S., Smith, K., *SIMULATE-4: New Nodal Code Development Activities*, Studsvik Scandpower, CMS/FMS User's Group, April 2004.
- [4] Beckert, C., *TransRay - ein dreidimensionaler Zellcode auf der Grundlage der Ray-Tracing Technik*, Jahrestagung Kerntechnik 2001, Dresden, 15.-17. Mai 2001, Tagungsbericht S. 51-54, 2001.
- [5] Beckert, C., Koch, R., *Reactor Cell Calculations with the Codes HELIOS, MCNP and TransRay and Comparison of the Results*, Annual Meeting on Nuclear Technology 2005, Nürnberg, May 10-12, 2005, Proceedings on CD-ROM.
- [6] Böer, R., Böhm, R., Finnemann, H., Müller, R., *The Coupled Neutronics and Thermal Hydraulics Code System PANBOX for PWR Safety Analysis*, Kerntechnik, 57, No. 1, p. 49, 1992.
- [7] Briesmeister, J. F., Editor, *MCNP a General MONTE CARLO N-Particle Transport Code*, Version 4A, LA 12625 M, November 1993.
- [8] Carlvik, I., *A Method for Calculating Collision Probabilities in General Cylindrical Geometry and Applications to Flux Distributions and Dancoff Factors*, International Conference on the Peaceful Use of Atomic Energy 3, P/681, 1964.
- [9] Carlvik, I., *Collision Probabilities for Finite Cylinders and Cuboids*, Nuclear Science and Engineering, 30, p. 150-151, 1967.
- [10] Cho, N. Z., Hong, S. G., *CRX: A code for Rectangular and Hexagonal Lattices Based on the Method of Characteristics*, Ann. of Nucl. Energy, 25, 547, 1998.
- [11] Cho, N. Z., Lee, G. S., Park, C. J., *Refinement of the 2D/1D Fusion Method for 3D Whole-Core Transport Calculation*, Proceedings of the ANS Winter Meeting, 87, p. 417, Washington D. C., Nov. 17-21, 2002.
- [12] Emendörfer, D., Höcker, K. H., *Theorie der Kernreaktoren*, Bibliographisches Institut Mannheim/Wien/Zürich, 1982.
- [13] Fuentes, E., Turinsky, P. J., *Parallel Implementation of Integral Transport Methods*, Nuclear Science and Engineering, 121, 277-285, 1995.
- [14] Garcia, R. D. M., *A Numerical Method for Computing Collision, Escape and Transmission Probabilities in Three Dimensions*, Nuclear Science and Engineering, 144, p. 200-210, 2003.
- [15] Goldberg, L., *GTRAN2 Adaptation of the Characteristics Method*, Master Thesis, University of California at Berkeley, UCBNE-NRP-951, 1995.
- [16] Goldberg, L., Vujic, J., Leonard, A., Stackowski, R., *The Method of Characteristics in General Geometry*, Trans. Am. Nucl. Soc., 73, 173, 1995.

- [17] Grundmann, U., Rohde, U., *DYN3D – Three Dimensional Core Model for Steady-State and Transient Analysis of Thermal Reactors*, Proceedings of the 2000 ANS International Topical Meeting on Advances in Reactor Physics and Mathematics and Computation into the Next Millennium (PHYSOR 2000), Pittsburgh (USA), May, 7 – 11, 2000.
- [18] Grundmann, U., Rohde, U., Mittag, S., Kliem, S., *DYN3D Version 3.2 – Code for Calculation of Transients in Light Water Reactors (LWR) with Hexagonal or Quadratic Fuel Elements – Description of Models and Methods*, Research Center Rossendorf, Scientific Technical Report, FZR-434, August 2005.
- [19] Hollenbach, D. F., Petrie, N. M., Landers, L. F., *KENO-VI: A General Quadratic Version of the KENO Program*, ORNL/NUREG/CSD-2/R6, Vol. 2, Sect. F17, September 1998.
- [20] Katsuragi, S., Ishiguro, Y., Kato, O., *Group Constants for a Fast Reactor and Sodium Void Effects*, JAERI 1109, July 1966.
- [21] Kliem, S.; Grundmann, U.; Rohde, U., *Methodenentwicklung zur Analyse von Störfall-szenarien mit Frischdampfleck und Borverdünnung mit Hilfe des Codesystems ATHLET-DYN3D*, Abschlussbericht zum BMWA-Projekt 150 1225 Teil 2; Report FZR-438, Rossendorf, Oktober 2005, ISSN 1437-322X
- [22] Koch, R., *Hierarchie der klassischen deterministischen Reaktorberechnungen*, 2004 (unveröffentlicht).
- [23] Knott, D., et al., *CASMO-4 Methodology Manual*, STUDSVIK/SOA-95/02, Studsvik of America, 1995.
- [24] Langenbuch, S., Maurer, W., *QUABOX/CUBOX-HYCA-Q2. Ein dreidimensionales Kernmodell mit parallelen Kühlkanälen für Leichtwasserreaktoren*, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit mbH., Bericht GRS-A-672, Februar 1982.
- [25] Lewis, E. E., Miller Jr., W. F., *Computational Methods of Neutron Transport*, A Wiley-Interscience Publication, John Wiley and Sons, Inc., 1984.
- [26] MacFarlane, R. E., *TRANSX-2: A Code for Interfacing MATXS Cross-section Libraries to Nuclear Transport Codes*, LA-12312-MS, Los Alamos Scientific Laboratory, New Mexico, 1992.
- [27] MacFarlane, R. E., Muir, D. W., *The NJOY Nuclear Data Processing System Version 91*, Los Alamos National Laboratory, LA-12740-M, 1994.
- [28] McLane, V., *ENDF-102 Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data File ENDF-6*, BNL-NCS-44945-01/04-Rev., Brookhaven National Laboratory, April 2001.
- [29] Marchuck, G. I., *Numerical Methods in Nuclear Reactor Calculations*, Constants Bureau INC, New York, 1959.
- [30] Marleau, G., Roy, R., Hébert, A., *Analytic Reductions for Transmission and Leakage Probabilities in Finite Tubes and Hexahedra*, Nuclear Science and Engineering, **104**, 209-216, 1990.
- [31] Marleau, G., Vergain, M. L., Hébert, A., Roy, R., *Computation of the DPI Collision Probabilities for Spherical and Cylindrical Geometries*, Ann. Nucl. Energy, Vol. **17**, No. 3, pp. 119-134, 1990.
- [32] Marleau, G., Hébert, A., *Analysis of Cluster Geometries Using the DPI Approximation of the  $J_{\pm}$  Technique*, Nuclear Science and Engineering, **111**, 257-270, 1992.

- [33] Marleau, G., Hébert, A., Roy, R., A User's Guide for DRAGON. Report IGE-174 Rev. 3, École Polytechnique de Montréal, 1997.
- [34] Mittag, S.; Grundmann, U.; Koch, R.; Semmrich, J., *Erzeugung und Nutzung von Bibliotheken von Zwei-Gruppen-Diffusionsparametern zur Berechnung eines KWU-Konvoi-Reaktors mit dem Reaktordynamik-Programm DYN3D*, Abschlussbericht Teil 1 zum BMWA-Projekt 150 1225, Report FZR-438, Rossendorf, April 2002, ISSN 1437-322X
- [35] Nakamura, S., *Computational Methods in Engineering and Science*, Wiley, New York, 1977.
- [36] Oak Ridge National Laboratory, *MORSE-CGA a General Purpose Monte Carlo Multigroup Neutron and Gamma-Ray Transport Code System with Array Geometry Capability*, Version 2, RSIC Computer Code Collection, CCC-474, July 1993.
- [37] Oak Ridge National Laboratory, *SCALE 4.3, Modular Code System for Performing Standardized Computer Analysis for Licensing Evaluation*, CCC-545, Oak Ridge, TN, 1995.
- [38] OECD Nuclear Energy Agency, *Janis User's Guide*, Version 2.1, July 2004.
- [39] Parker, K., *Physics of Fast and Intermediate Reactors*, Vol. 1, p. 207, IAEA, 1962.
- [40] Postma, T., Vujic, J., *MAGG-SCALE: Development of Computational Methodology for Advanced Reactor Concepts*, Proc. of the Joint International Conference on Mathematical Methods and Supercomputing for Nuclear Applications, Saratoga Springs, NY, October 5-10, 1997. Vol. 1, p. 616-625, 1997.
- [41] Postma, T., Vujic, J., *The Method of Characteristics in General Geometry with Anisotropic Scattering*, Proc. Int. Conf. Mathematics and Computation, Reactor Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications, Madrid, Spain, Sept 27-30, 1999, p. 1215, 1999.
- [42] Roy, R., Hébert, A., Marleau, G., *A Transport Method for Treating Three-dimensional Lattices of Heterogeneous Cells*, Nucl. Sci. Eng., **101**, 217-225, 1989.
- [43] Roy, R., et al., *The Cyclic Characteristics Method*, Int. Conf. Physics of Nuclear Science and Technology, Long Island, 5-8 October, 1998.
- [44] Sanchez, R., Mondot, J., *Specifications détaillées APOLLO-2*, Note SERMA-T 1632, Commissariat à l'Énergie Atomique, 1983.
- [45] Sitaraman, S., *MCNP: Light Water Reactor Critical Benchmarks*, GE Nuclear Energy, NEDO-32028, March 1992.
- [46] Slater, S. M., Vujic, J. L., *P4 Parallelization of General Geometry Ray Tracing in Computational Physics*, Proceedings of the Conference on High Performance Computing 1994.
- [47] Slater, S. M., *Parallel Solutions of the Neutron Transport Equation in Two- and Three-Dimensions by Collision Probability Method*, PhD Dissertation, University of California, Berkeley, 1997.
- [48] Slater, S. M., Vujic, J., *Parallel Solutions of the Neutron Transport Equation in Three-Dimensions by Collision Probability Method*, Trans. Am. Nucl. Soc., **78**, 112, 1998.
- [49] Smith, K. S., Rhodes, J. D., *FULL-CORE, 2-D, LWR CORE CALCULATIONS WITH CASMO-4E*, Proceedings of the Int. Conf. PHYSOR 2002, Seoul, Korea, October 7-10, 2002.

- [50] Stankovski, Ž., *Refinement of the Substructure Method for Integral Transport Calculations*, Nuclear Science and Engineering, **92**, 255-260, 1986.
- [51] Studsvik® Scandpower, *HELIOS Methods*, Version 1.8, 20 November 2003.
- [52] Varga, R. S., *Matrix Iterative Analysis*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1962.
- [53] Vujic, J. L., Slater, S. M., MAGGENTA: *Multiassembly General Geometry Neutron Transport Code*, Proc. Int. Conf. Mathematics and Computations, Reactor Physics and Environmental Analysis, Portland, Oregon, April 30–May 4, 1995, Vol. 2, p. 1168, American Nuclear Society, 1995.
- [54] Wu, G. J., Roy, R., *A New Characteristic Algorithm for 3D Transport Calculations*, Annals of Nuclear Energy, **30**, 1-16, 2003.



**Anhang A - 1: Obere Energiegruppengrenzen des 47 Gruppendatensatzes**

<b>Energie- gruppe</b>	<b>Obere Energiegruppen- grenze in eV</b>	<b>Energie- gruppe</b>	<b>Obere Energiegruppen- grenze in eV</b>
1	2.0000E+07	25	2.3824E+00
2	6.0653E+06	26	1.8554E+00
3	3.6788E+06	27	1.4574E+00
4	2.2313E+06	28	1.2351E+00
5	1.3534E+06	29	1.1664E+00
6	8.2085E+05	30	1.1254E+00
7	4.9787E+05	31	1.0722E+00
8	1.8316E+05	32	1.0137E+00
9	6.7379E+04	33	9.7100E-01
10	9.1188E+03	34	9.1000E-01
11	2.0347E+03	35	7.8208E-01
12	1.3007E+02	36	6.2506E-01
13	7.8893E+01	37	5.0323E-01
14	4.7851E+01	38	3.5767E-01
15	2.9023E+01	39	2.7052E-01
16	1.3710E+01	40	1.8443E-01
17	1.2099E+01	41	1.4572E-01
18	8.3153E+00	42	1.1157E-01
19	7.3382E+00	43	8.1968E-02
20	6.4760E+00	44	5.6922E-02
21	5.7150E+00	45	4.2755E-02
22	5.0435E+00	46	3.0613E-02
23	4.4509E+00	47	1.2396E-02
24	3.9279E+00		