

Technische Universität München
Lehrstuhl für Reaktordynamik und Reaktorsicherheit

**Rechenmodellentwicklung für die Analyse von Reaktivitäts-
transienten mit Neutronentransporttheorie und gekoppelter
Thermofluiddynamik für Hochfluss-Forschungsreaktoren**

Andreas Pautz

Vollständiger Abdruck der von der Fakultät für Elektrotechnik und Informationstechnik
der Technischen Universität München zur Erlangung des akademischen Grades
eines **Doktors der Naturwissenschaften** genehmigten Dissertation.

Vorsitzender: Univ.-Prof. Dr.-Ing. Ulrich Wagner

Prüfer der Dissertation: 1. Univ.-Prof. Dr. phil. Dr.-Ing. E.h. Adolf Birkhofer
2. apl. Prof. Dr. rer. nat. Dr. rer. nat. habil. Klaus Böning

Die Dissertation wurde am 21.09.2001 bei der Technischen Universität München
eingereicht und durch die Fakultät für Elektrotechnik und Informationstechnik am
19.12.2001 angenommen.

Inhaltsverzeichnis

INHALTSVERZEICHNIS	I
DANKSAGUNG	V
1 EINLEITUNG	1
2 THEORETISCHE GRUNDLAGEN DER NEUTRONENTRANSPORTTHEORIE	4
2.1 Einleitung	4
2.2 Das stationäre Problem	5
2.2.1 Der Strömungsterm	6
2.2.2 Beiträge von Streuung und Spaltung	8
2.2.3 Randbedingungen	11
2.3 Lösbarkeit der stationären Transportgleichung	12
2.4 Energiegruppendarstellung der Neutronentransportgleichung	15
2.5 Die zeitabhängige Transportgleichung	23
2.5.1 Verzögerte Neutronen	23
2.5.2 Diskretisierung der Zeitvariablen	26
2.5.3 Alternative Verfahren zur Zeitdiskretisierung	29
2.6 Die Diffusionsnäherung	33
2.7 Rückwirkungsmechanismen	38
2.8 Zusammenfassung	41
3 ENTWICKLUNG EINES ZEITABHÄNGIGEN DIFFUSIONSCODES	42
3.1 Einleitung	42
3.2 Diskretisierung der Ortsvariablen	43
3.3 Die Matrixgleichungen und ihre Eigenschaften	47

3.4	Iterative Lösung der „Within-Group“-Gleichungen	50
3.5	Die Chebyshev-Beschleunigung	58
3.6	Das Zusammenspiel von inneren und äußeren Iterationen	65
3.7	Behandlung des zeitabhängigen Diffusionsproblems	69
3.8	Zeitliche Flußextrapolation	70
3.9	Zusammenfassung	73
4	BEHANDLUNG DES NEUTRONENTRANSPORTPROBLEMS MIT DER DISKRETE-ORDINATEN-METHODE	75
4.1	Übersicht der verfügbaren Rechenmethoden	75
4.2	Diskrete-Ordinaten-Theorie in eindimensionaler Geometrie	79
4.3	Erweiterung auf mehrere Dimensionen	82
4.4	Coarse-Mesh-Rebalancing	91
4.5	Der Quellterm	94
4.6	Zusammenfassung	97
5	ENTWICKLUNG EINER ZEITABHÄNGIGEN VERSION DES NEUTRONENTRANSPORTCODES DORT	98
5.1	Verarbeitung der Eingabedaten	100
5.2	Die Speicherverwaltung	101
5.3	Die Versorgung des Codes mit „Fixed-Source“-Daten	102
5.4	Die Beschleunigung der äußeren Iterationen	104
5.5	Zeitliche Flußextrapolation	108
5.6	Zusammenfassung	110
6	STATIONÄRE ANALYSEN FÜR DEN FRM-II	111

6.1	Systembeschreibung	111
6.2	Erzeugung von Wirkungsquerschnittsbibliotheken	116
6.2.1	Resonanzbehandlung	117
6.2.2	Homogenisierung des Brennstoffs und Wichtung der Materialien	120
6.2.3	Kondensierung der Querschnitte	123
6.2.4	Erzeugung parametrisierter Querschnittsbibliotheken	126
6.3	Stationäre Berechnungen in zwei Raumdimensionen	127
6.3.1	Darstellung der Geometrie des FRM-II	128
6.3.2	Anzahl der verwendeten Energiegruppen	129
6.3.3	Vergleich von Diffusions- und Transportrechnungen	133
6.3.4	Verwendung einer geeigneten Quadratur	137
6.3.5	Simulation der Regelstabstellung	139
6.3.6	Reaktivitätskoeffizienten	144
6.3.7	Punktkinetische Parameter	145
6.4	Zusammenfassung	150
7	KOPPLUNG DER NEUTRONENKINETIK MIT EINEM THERMOHYDRAULIK- MODELL FÜR DEN FRM-II	151
7.1	Berechnungsschema der gekoppelten Analysen	151
7.2	Modellierung des Reaktorkerns mit ATHLET	156
7.3	Thermohydraulische Besonderheiten des FRM-II-Kerns	160
7.4	Fluidodynamik im stationären Betrieb	163
7.5	Zusammenfassung	168
8	BERECHNUNGEN MIT DEM GEKOPPELTEN PROGRAMMSYSTEM	169
8.1	Test des transienten Transportcodes	169
8.2	Auslegungsstörfälle	174
8.2.1	Der Leistungsstörfall	175
8.2.2	Der Notstromfall	181
8.2.3	Ausfall des Sekundärwärmetauschers	184

8.3	Hypothetische Reaktivitätsstörfälle	187
8.3.1	Prompt kritische Transiente mit 3 β -Reaktivitätszufuhr	188
8.3.2	Prompte kritische Transiente mit extremer Reaktivitätszufuhr	194
8.4	Zusammenfassung	198
9	ZUSAMMENFASSUNG	199
ANHANG A: DARSTELLUNG DER FLUßMOMENTE UND ENTWICKLUNG DER STREUQUELLE IN SPHÄRISCHE HARMONISCHE		203
ANHANG B: ERZEUGUNG VON WIRKUNGSQUERSCHNITTSBIBLIOTHEKEN		206
B.1	Datenbasis	206
B.2	Die Nordheim-Methode	210
B.3	Dancoff-Korrekturen	214
B.4	Die Bondarenko-Methode	216
B.5	Kondensierung und Homogenisierung von Querschnitten	219
ANHANG C: BESTIMMUNG VON TRANSPORTQUERSCHNITTEN		224
ANHANG D: INTERPOLATION VON WIRKUNGSQUERSCHNITTEN		228
ANHANG E: DAS QUASISTATIONÄRE VERFAHREN		231
ANHANG F: LITERATURVERZEICHNIS		236

Danksagung

Die vorliegende Arbeit wurde am Lehrstuhl für Reaktordynamik und Reaktorsicherheit der Technischen Universität München angefertigt und durch die Förderinitiative „Kompetenzerhaltung in der Kerntechnik“ unterstützt. Herrn Prof. Dr. Dr.-Ing. E.h. A. Birkhofer, dem Inhaber des Lehrstuhls und wissenschaftlichem Geschäftsführer der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS), gilt mein besonderer Dank. Er hat diese Arbeit angeregt und an ihrem Fortschritt von den ersten Grundgedanken bis zur Fertigstellung großen Anteil genommen.

Ebenfalls herzlich danken möchte ich Herrn Prof. Dr. K. Böning für die Übernahme des Ko-referats und für das rege Interesse, das er zu jedem Zeitpunkt an diesem Projekt bekundet hat.

Diese Arbeit wäre nicht möglich gewesen ohne die Hilfe und Betreuung zahlreicher Kollegen von Lehrstuhl und GRS, die wesentlich zum Gelingen dieses Projekts beigetragen haben. Ganz besonders erwähnen möchte ich an dieser Stelle Herrn Dr. S. Langenbuch, der durch sein Vertrauen, seine freundschaftliche Unterstützung und seine stete Bereitschaft zur Diskussion den Fortgang der Arbeit auch immer dann motiviert hat, wenn es „mal nicht so gut lief“.

Herrn Dr. W. Zwermann gebührt ein großes Dankeschön für die Einführung in die Kunst der Wirkungsquerschnittserzeugung und der Neutronentransportmethoden sowie für die grenzenlose Geduld, mit der er sich meiner gerade als Anfänger angenommen und mich so vor vielen bösen Überraschungen bei der Codeanwendung und –Entwicklung bewahrt hat.

Dr. H. Austregesilo und Dr. K. Velkov danke ich für ihre große Hilfe bei der Entwicklung des gekoppelten Rechenmodells und der Erstellung der ATHLET-Eingabedatensätze. Ohne ihre Erfahrung in der Anwendung großer Systemcodes wäre die Kopplung von Transporttheorie und Fluidodynamik für den FRM-II nicht gelungen.

Viele andere Kollegen haben an meiner Arbeit Anteil genommen. Dankend erwähnen möchte ich hier aus der Abteilung „Reaktorphysik“ die Herren M. Clemente, K.D. Schmidt, J. Leffer und J. Döring sowie die Kolleginnen und Kollegen von der DV-Abteilung und unseren Sekretariaten.

Ich möchte außerdem meinen Freunden an den Oak Ridge National Laboratories (ORNL) danken, allen voran Yousry Azmy, Dave Simpson und Bob Santoro für die freundliche Aufnahme in ihrer Arbeitsgruppe während meines Aufenthalts am ORNL. Die Zusammenarbeit mit ihnen war außerordentlich fruchtbar und hat entscheidend zur Fertigstellung dieser Arbeit beigetragen.

Schließlich möchte ich mich noch bei meiner Familie für die Unterstützung und das Interesse an meiner Arbeit bedanken; das gleiche gilt auch für Sabine, der ich auf diesem Wege für den starken Rückhalt und die große Geduld meinen Dank zukommen lassen möchte.

1 Einleitung

Die Berechnungen für die stationäre nukleare Kernausslegung von Leichtwasserreaktoren und insbesondere die Analysen von Reaktivitätsstörfällen basieren heute weitgehend auf dem Einsatz von Grobgitterverfahren zur Lösung der Neutronendiffusionsgleichungen in zwei Energiegruppen. Diese Rechenmethodik wurde für LWR vor vielen Jahren entwickelt, um die Aufgaben mit der damals verfügbaren Rechenkapazität lösen zu können. Der schnelle Fortschritt bei der Rechnerleistung in den letzten Jahren wurde bisher nur genutzt, um die Durchführung der Berechnungen zu beschleunigen und um Schnittstellenprobleme zwischen Neutronenphysik und Thermofluiddynamik zu lösen, was zur Entwicklung gekoppelter Codesysteme führte.

Die Genauigkeit dieser Modelle ist allerdings durch die Grobgitterdarstellung und die Verwendung weniger Energiegruppen begrenzt. Des Weiteren sind die Diffusionsgleichungen lediglich eine Näherung der allgemeineren Neutronentransportgleichung. Aus diesem Grund besteht ein großes Interesse, in Störfallbetrachtungen auch verstärkt die genaueren Neutronentransportmodelle für die Beschreibung der physikalischen Prozesse im Reaktorkern einzusetzen. Von Bedeutung sind in diesem Zusammenhang z.B. die Analysen zum Auslegungsstörfall des Steuerstabauswurfs in Druckwasserreaktoren, aber auch die Untersuchungen für Forschungsreaktoren mit kompaktem Kern, die sich aufgrund ihrer komplexen Geometrie der Behandlung mit Weniggruppen-Grobgittermethoden entziehen.

Deterministische Neutronentransportcodes lösen die lineare Boltzmann-Gleichung in P_N - oder S_N -Näherung in vielen Energiegruppen; daneben erfolgt die Lösung durch Monte-Carlo-Codes, die die Neutronenreaktionen teilweise sogar in einer kontinuierlichen Energiedarstellung behandeln können. Diese Rechenmodelle werden allerdings bis heute fast ausschließlich für stationäre Berechnungen eingesetzt. Typische Anwendungsbereiche sind z.B. Brennelementberechnungen, Fluenzbestimmungen an Reaktordruckbehältern oder Abschirmungsanalysen für Transportbehälter. Bei Ganzkernberechnungen kommen solche Methoden hingegen nur selten zum Einsatz.

Zielsetzung der vorliegenden Arbeit ist es, die derzeit verfügbaren Neutronentransportcodes hinsichtlich ihres möglichen Einsatzes in nuklearen Störfallanalysen zu untersuchen und auf dieser Grundlage einen zeitabhängigen Neutronentransportcode zu entwickeln, der auch in einer Kopplung mit einem thermohydraulischen Programmsystem eingesetzt werden kann.

Obwohl Monte-Carlo-Verfahren den großen Vorzug besitzen, daß mit ihnen praktisch beliebige Geometrien modelliert werden können, scheiden sie für die Untersuchung von transienten Vorgängen weitgehend aus, da der numerische Aufwand zur genauen Ermittlung klei-

ner Reaktivitätsänderungen aufgrund der inhärenten statistischen Unsicherheiten nicht vertretbar ist. Aus diesem Grund werden im Folgenden ausschließlich deterministische Transportmethoden betrachtet, mit denen Fluß- und Leistungsverteilungen sowie Reaktivitäten prinzipiell bis zu jeder beliebigen Genauigkeit ermittelt werden können. Es ist eine der wesentlichen Aufgaben dieser Arbeit, für die voll implizite, zeitabhängige Lösung der Neutronentransportgleichung effiziente numerische Verfahren zu entwickeln und für eine konkrete Anwendung nachzuweisen, daß mit dieser direkten und genauen Beschreibung der Neutronenprozesse Störfallanalysen mit akzeptablem Rechenaufwand durchgeführt werden können.

Die Arbeit ist folgendermaßen gegliedert:

In Kapitel 2 wird zunächst das zeitabhängige Neutronentransportproblem formuliert. Während der übliche Zugang zur Lösung komplexer transienter Transportprobleme die sog. quasistationäre Näherung ist, wird hier die zeitlich voll implizit diskretisierte Transportgleichung beschrieben, die eine erhebliche Steigerung der Genauigkeit garantiert.

In Kapitel 3 wird ein zeitabhängiges Multigruppen-Diffusionsprogramm vorgestellt, das in dieser Arbeit als Vorstufe zum transienten Neutronentransportcode entwickelt wurde. Es werden die Finite-Differenzen-Formulierung der Diffusionsgleichung und die daraus resultierenden schwach besetzten Gleichungssysteme erläutert, deren Lösung iterativ mit Hilfe eines präkonditionierten Konjugierte-Gradienten-Verfahrens durchgeführt wird. Außerdem werden hier einige effektive Algorithmen zur Beschleunigung der äußeren Iterationen, für eine verbesserte Behandlung der thermischen Energiegruppen und zur zeitlichen Flußextrapolation entwickelt, die fast unverändert in den Transportcode übernommen werden konnten. In Kapitel 4 erfolgt die Bewertung verschiedener stationärer Neutronentransportcodes hinsichtlich ihres Potentials zum Einsatz in zeitabhängigen Rechnungen. Überprüft wurden neben den klassischen Diskrete-Ordinaten-Codes DORT und TWODANT auch Programme, die z.B. integrale Transportmethoden gekoppelt mit einem „Response Matrix“-Formalismus oder „Sphärische-Harmonische“-Entwicklungen kombiniert mit Finiten Elementen verwenden. Bei der Untersuchung dieser Codes an ausgewählten Testbeispielen stellte sich heraus, daß der Diskrete-Ordinaten-Zugang insbesondere für Reaktor Anwendungen aufgrund seiner numerischen Effizienz der aussichtsreichste Kandidat für eine zeitabhängige Erweiterung ist. Für die Einbindung in das transiente Codesystem wurde schließlich der Code DORT ausgewählt. Die numerische Umsetzung der Diskrete-Ordinaten-Methode in DORT wird diskutiert und die grundlegenden Lösungsverfahren in verschiedenen Geometrien sowie die Beschleunigung der inneren Iterationen näher erläutert.

In Kapitel 5 werden die konkreten programmtechnischen Maßnahmen, die für die zeitabhängige Erweiterung des Codes DORT und die Erstellung des gekoppelten Codesystems vorgenommen werden mußten, dargestellt. Dazu gehört insbesondere die Implementierung des

impliziten Zeitdiskretisierungsschemas und der Vorläufergleichungen, die Festlegung verschärfter Konvergenzkriterien, die Verbesserung des iterativen Lösungsverfahrens sowie die Erstellung der Routinen zur Kopplung an die Thermohydraulik.

Der Hochfluß-Forschungsreaktor FRM-II in Garching, der derzeit kurz vor der Inbetriebnahme steht, wurde schließlich ausgewählt, um die numerische Effizienz und die Robustheit des Transportcodes an einem konkreten Anwendungsbeispiel zu demonstrieren. Neben der neutronenkinetischen Simulation ist der FRM-II auch unter thermohydraulischen Gesichtspunkten genau zu modellieren, so daß hier die Kopplung des Neutronentransportprogramms an einen Thermofluiddynamikcode erforderlich ist.

In Kapitel 6 wird nach einer kurzen Systembeschreibung zunächst die für Reaktorberechnungen notwendige Erzeugung der grundlegenden Wirkungsquerschnitte erläutert, mit denen dann verschiedene Parameterstudien für den stationären Zustand des FRM-II durchgeführt werden. So ist die Ermittlung einer geeigneten räumlichen Diskretisierung, die Festlegung der Anzahl benötigter Energiegruppen sowie die Wahl der Quadraturordnung auch unerlässlich für die Transientenanalysen.

Kapitel 7 umfaßt die detaillierte Beschreibung der thermohydraulischen Modellierung des FRM-II-Reaktorkerns mit dem an der GRS (Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit) entwickelten Systemcode ATHLET sowie die Anbindung dieses Modells an den Neutronentransportcode. Mit dem gekoppelten Programmmodell werden dann die Eigenschaften der thermohydraulischen Auslegung im stationären Betrieb bestimmt, insbesondere die Sicherheitsabstände gegen Filmsieden und Strömungsinstabilitäten.

Das abschließende Kapitel 8 umfaßt schließlich die Störfallanalysen für den FRM-II als konkrete Anwendung. Hier wird gezeigt, daß das gekoppelte Programmsystem flexibel genug ist, um sowohl langsame, verzögert kritische Transienten auf langen Zeitskalen zu berechnen, als auch prompt kritische Transienten zu erfassen, bei denen sich alle Systemvariablen innerhalb sehr kurzer Zeiten rapide ändern. Betrachtet wurden daher neben drei Auslegungsstörfällen auch zwei hypothetische Transienten mit extremer Reaktivitätszufuhr, die höchste Anforderungen an die Lösungsverfahren stellen.

2 Theoretische Grundlagen der Neutronentransporttheorie

2.1 Einleitung

In diesem einleitenden Kapitel werden die theoretischen Grundlagen, die zum Verständnis der zeitabhängigen Neutronentransporttheorie erforderlich sind, erarbeitet und verschiedene Ansätze für die Erstellung effizienter numerischer Lösungsverfahren diskutiert. Ausgangspunkt der Analyse ist die Standardformulierung der stationären Transportgleichung als partielle Integro-Differentialgleichung [HEN75, BEL85]; ihre wesentlichen Bestandteile, insbesondere die Strömungs-, Spaltungs- und Streuoperatoren werden kurz diskutiert. Ferner werden die physikalischen und mathematischen Kriterien zur Lösbarkeit untersucht und eine Klassifizierung in Probleme mit fester Quelle („Fixed-Source“) und Kritikalitätsanalysen vorgenommen.

Ausgehend von diesen allgemeinen Betrachtungen wird die Diskretisierung der Energievariablen durchgeführt; das Ergebnis ist die sogenannte Energiegruppenform [LEW85] der Transportgleichung, ein System von partiellen Differentialgleichungen, das die Grundlage der deterministischen Transportcodes bildet. Die üblichen Lösungsverfahren werden dargestellt und das Iterationsschema der inneren und äußeren Iterationen eingeführt. Schließlich wird das bedeutendste Näherungsverfahren, die Diffusionstheorie [GRE68, HEN75, DUD76] abgeleitet und kurz diskutiert.

Dieses Vorgehen ist sinnvoll, da im folgenden Abschnitt gezeigt wird, daß sich das verallgemeinerte, zeitabhängige Problem [STA69] bei adäquater Behandlung der Vorläufer und impliziter Diskretisierung der Zeitvariablen auf eine Folge von Lösungen der stationären Neutronentransportgleichung reduzieren läßt; für die Transientenanalyse kann man daher prinzipiell auf sämtliche Lösungsverfahren zurückgreifen, die im Laufe der letzten Jahrzehnte für das einfachere, stationäre Neutronentransportproblem entwickelt und optimiert worden sind. Diskutiert werden ferner alternative Diskretisierungsschemata für die Zeitableitung.

Die Berücksichtigung der sogenannten Rückwirkungsmechanismen [LAN96, LAN98] ist eines der vorrangigen Ziele der nuklearen Störfallanalyse. Die thermohydraulischen Prozesse im Reaktorkern wirken sich sowohl global als auch lokal auf die Neutronenbilanz aus; dies wiederum führt über die durch Kernspaltungen produzierte Leistung zu einer Änderung der thermodynamischen Zustandsvariablen des Gesamtsystems. Ein realistisches, zeitabhängiges Neutronentransportmodell eines Kernreaktors muß also zwangsläufig die räumlichen Effekte von Thermohydraulik und Neutronenkinetik miteinander koppeln.

2.2 Das stationäre Problem

Die stationäre, lineare Boltzmann-Gleichung für neutrale Teilchen bildet die mathematische Grundlage der sog. deterministischen Transportcodes. Prinzipiell ist diese Gleichung nichts anderes als eine Formulierung der lokalen Teilchenzahlbilanz. Diese wird durch die Neutronendichte N oder in der Reaktorphysik bevorzugt durch den winkelabhängigen Neutronenfluss $\psi = vN$ ausgedrückt (v ist die nichtrelativistische Neutronengeschwindigkeit), der für die 6 unabhängigen Variablen \vec{r} , $\vec{\Omega}$ (Flugrichtung des Neutrons, $|\vec{\Omega}| = 1$) und die Energie E lokal im Phasenraum definiert ist; die differentielle Größe $(1/v)\psi dVd\vec{\Omega}dE$ gibt dann gerade die Anzahl der Neutronen im Volumen dV an, deren Flugrichtung und Energie innerhalb der infinitesimalen Intervalle $d\vec{\Omega}$ bzw. dE liegen. Im dynamischen Gleichgewicht fordert man, daß die Anzahl der pro Zeiteinheit produzierten Neutronen für jedes beliebige Phasenraumvolumen $dVd\vec{\Omega}dE$ identisch ist zu der durch Verlustprozesse verloren gegangener Teilchen. Die entsprechende Bilanzgleichung lautet dann:

$$\underbrace{\vec{\Omega} \cdot \nabla \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)}_{\text{Strömungsterm}} + \underbrace{\Sigma_t(\vec{r}, E) \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)}_{\text{Stoßterm}} = \underbrace{q_{\text{extern}}(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)}_{\text{externe Quelle}} + \underbrace{\int dE' \int d\vec{\Omega}' \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E')}_{\text{Streuterm}} + \underbrace{\chi(E) \int dE' v \Sigma_f(\vec{r}, E') \phi(\vec{r}, E')}_{\text{Spaltterm}} \quad (2-1)$$

Die Ausdrücke auf der linken Seite von Gleichung 2-1 bezeichnen die Verlustprozesse: Der Strömungsterm beschreibt die Reduktion der Teilchenanzahl durch die freie Bewegung der Neutronen, d.h. durch geradliniges Ausströmen aus dem betrachteten Volumen; der Stoß- oder Wechselwirkungsterm ist die totale Anzahl aller pro Zeiteinheit erfolgten Wechselwirkungen. Generell gibt die Größe $\Sigma_x \psi d\vec{\Omega}dEdV$ die Rate, d.h. die Anzahl der pro Zeiteinheit in $dVd\vec{\Omega}dE$ stattfindenden Reaktionen des Typs x an, wobei x für die fundamentalen Prozesse der Absorption (a), Spaltung (f), Streuung (s) bzw. deren Summe (t =total) stehen kann; die makroskopischen Querschnitte Σ können dann als die entsprechenden Wahrscheinlichkeiten pro Einheitsweglänge interpretiert werden, daß die jeweiligen Wechselwirkungen eintreten (bzw. für den totalen Querschnitt, daß irgendeine der genannten Reaktionen eintritt). Jede Wechselwirkung führt aber außer dem „singulären“ Fall der elastischen Vorwärtsstreuung aus dem betrachteten partiellen Phasenraumvolumen $d\vec{\Omega}dE$ heraus; entsprechend ist der Ausdruck $\Sigma_t \psi$ als Verlust zu bilanzieren.

Demgegenüber stehen die Produktionsterme, die die Entstehung von Teilchen in $dVd\vec{\Omega}dE$ charakterisieren. Die drei verschiedenen Anteile sind im einzelnen:

- Der externe Quellterm q , der Neutronen mit einer a priori bekannten, zeitunabhängigen Rate produziert.
- Der Spaltterm, der die Entstehung von Neutronen durch Kernspaltung beschreibt; die Größe ν gibt die mittlere Anzahl von Spaltneutronen pro Spaltung an, das Spaltspektrum χ deren energetische Verteilung.
- Der Streuterm, der die Streuung von Neutronen mit Energien E' und Flugrichtung $\vec{\Omega}'$ in das betrachtete Intervall $d\vec{\Omega}dE$ beschreibt; für Energie und Flugrichtung gilt also nach der Streuung $E \in dE$ und $\vec{\Omega} \in d\vec{\Omega}$. Da sich sowohl die Flugrichtung (für elastische und inelastische Streuung) als auch die Energie (für inelastische Streuung) ändert, ist es notwendig, den makroskopische Streuquerschnitt, der diese Übergänge beschreibt, als doppelt differentielle Größe $\Sigma_s(E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega})$ zu definieren.

Im folgenden werden die angeführten Ausdrücke eingehender diskutiert und teilweise so umformuliert, daß sie einer numerischen Behandlung zugänglich werden.

2.2.1 Der Strömungsterm

Man betrachte zunächst den Differentialoperator $\vec{\Omega} \cdot \nabla$, d.h. die Richtungsableitung des Neutronenflusses entlang der Flugrichtung des Neutrons $\vec{\Omega}$. Auffällig ist, daß in diesen Operator neben der Ableitung nach den Ortskoordinaten auch die Winkelkoordinaten explizit eingehen. Um diesen Transportoperator angemessen darstellen zu können, ist es notwen-

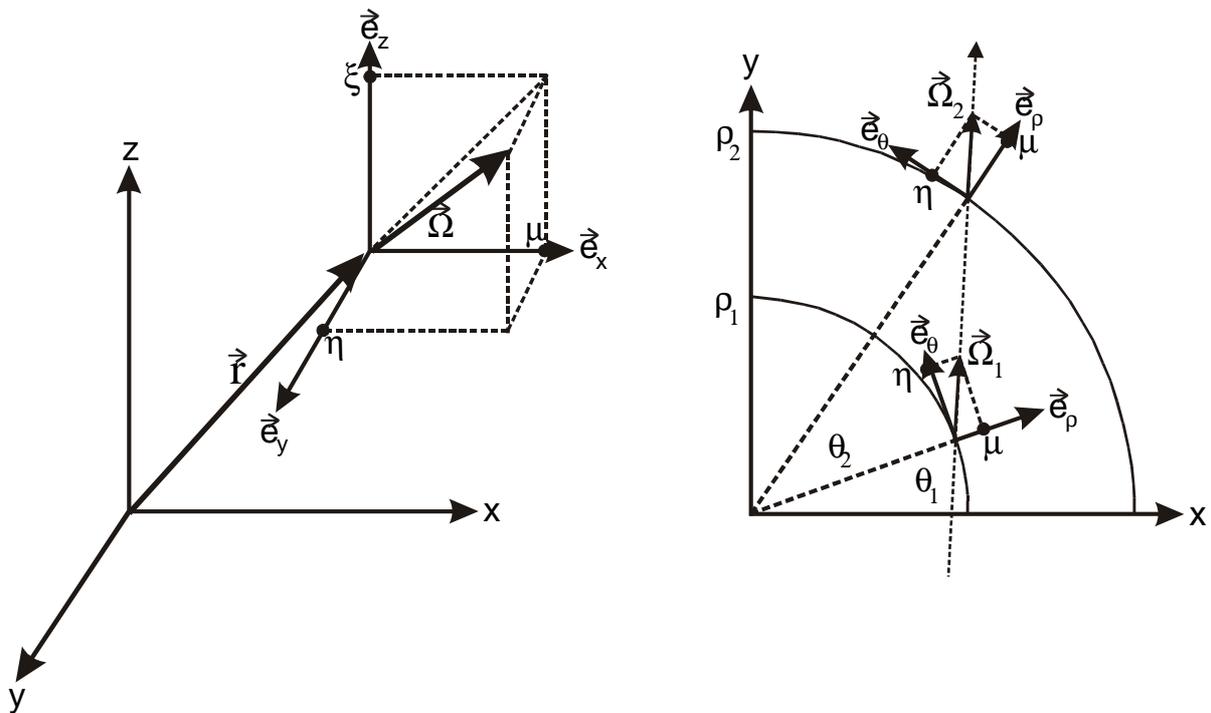


Abbildung 2-1 links: Definition der Winkelkoordinaten in kartesischer Geometrie; rechts: Effekt der sogenannten Angular Redistribution in krummliniger Geometrie

dig, neben dem räumlichen Koordinatensystem auch ein zweites „Winkelkoordinatensystem“ zu verwenden, das sich im Gegensatz zu dem ortsfesten, räumlichen System mit dem Neutron mitbewegt, dabei aber stets orthogonal zu den Koordinatenlinien des ersten Systems bleibt. Die Koordinaten des Flugrichtungsvektors $\vec{\Omega}$ werden dann als Projektion von $\vec{\Omega}$ auf die Achsen eben dieses Systems angegeben.

In kartesischen Koordinaten sind beide Systeme stets kollinear (siehe Abbildung 2-1 links), die Komponenten des Flugrichtungsvektors lauten:

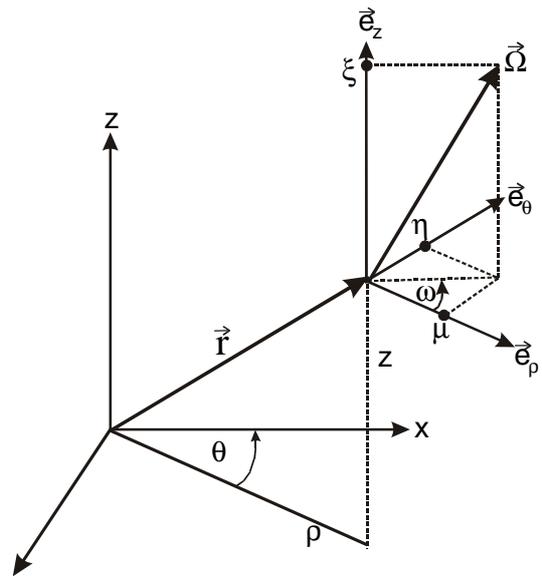


Abbildung 2-2: Definition der Winkelkoordinaten in Zylindergeometrie

$$\mu = \vec{\Omega} \cdot \vec{e}_x \quad \eta = \vec{\Omega} \cdot \vec{e}_y \quad \xi = \vec{\Omega} \cdot \vec{e}_z . \quad (2-2)$$

In ein- bzw. zweidimensionaler Geometrie sind nur die erste bzw. die ersten beiden Winkelkoordinaten notwendig, um die Bewegung eines Neutrons vollständig beschreiben zu können. Der vollständige dreidimensionale Transportoperator in kartesischer Geometrie lautet mit obigen Abkürzungen:

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla = \mu \frac{\partial}{\partial x} + \eta \frac{\partial}{\partial y} + \xi \frac{\partial}{\partial z} . \quad (2-3)$$

In krummlinigen Koordinaten liegen die Dinge etwas komplizierter. Die Orientierung des mitbewegten Winkelkoordinatensystems ändert sich kontinuierlich von Raumpunkt zu Raumpunkt. Damit ändern sich auch die Projektionen des Flugrichtungsvektors auf die Koordinatenachsen, wenn das Neutron sich nicht gerade entlang der Koordinatenlinien des räumlichen, ortsfesten Koordinatensystems bewegt.

Diese Situation ist in Abbildung 2-1 rechts am Beispiel ebener Polarkoordinaten dargestellt und wird als „Angular Redistribution“ bezeichnet. Die Konsequenz aus dieser Tatsache ist, daß im Transportoperator neben den räumlichen auch Ableitungen nach den Winkeln auftauchen, die die Invertierung des Operators erschweren.

Für Zylindergeometrie sind die verwendeten Koordinatensysteme und die zugehörigen Abkürzungen in Abbildung 2-2 dargestellt. Selbst in eindimensionaler Geometrie (d.h. rotations-symmetrisch und in z-Richtung unendlich ausgedehnt) sind stets zwei Winkel, hier ξ, ω nötig, um die Flugrichtung eines Neutrons zu charakterisieren. In Tabelle 2-1 sind die Formen des Transportoperators in Zylindergeometrie für verschiedene Kombinationen der drei räumlichen und der zwei unabhängigen Winkelvariablen zusammengestellt [ALC95].

Räumliche Variable	Winkelvariable	$\Omega \cdot \nabla \psi \quad \left(\mu = \sqrt{1-\xi^2} \cos \omega ; \eta = \sqrt{1-\xi^2} \sin \omega \right)$
ρ	ω, ξ	$\frac{\mu}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho \psi) - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \omega} (\eta \psi)$
ρ, θ	ω, ξ	$\frac{\mu}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho \psi) + \frac{\eta}{\rho} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \omega} (\eta \psi)$
ρ, z	ω, ξ	$\frac{\mu}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho \psi) + \xi \frac{\partial \psi}{\partial z} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \omega} (\eta \psi)$
ρ, θ, z	ω, ξ	$\frac{\mu}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho \psi) + \frac{\eta}{\rho} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} + \xi \frac{\partial \psi}{\partial z} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \omega} (\eta \psi)$

Tabelle 2-1: Explizite Darstellung des Strömungsoperators in Zylindergeometrie für die möglichen Kombinationen der räumlichen Koordinaten und der zwei unabhängigen Winkelvariablen

2.2.2 Beiträge von Streuung und Spaltung

Der integrale Streuoperator ist der Anteil der Transportgleichung, der naturgemäß am schwierigsten zu behandeln ist. Dies hängt insbesondere mit dem doppelt differentiellen Streuquerschnitt $\Sigma_s(E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega})$ zusammen, der sowohl auf die Winkel- als auch auf die Energievariable des gestreuten Neutrons wirkt. Wäre die Streuung im Laborsystem isotrop, so ließe sich das Integral über $d\vec{\Omega}$ ausführen und der Streuoperator lautete:

$$\int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \int_{4\pi} d\vec{\Omega} \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') = \int_{4\pi} d\vec{\Omega} \Sigma_s(E' \rightarrow E) \int_{4\pi} d\vec{\Omega} \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E') =: \int_{4\pi} d\vec{\Omega} \Sigma_s(E' \rightarrow E) \phi(\vec{r}, E'), \quad (2-4)$$

wobei im letzten Schritt der skalare Neutronenfluß ϕ , d.h. der über alle Winkel integrierte winkelabhängige Neutronenfluß ψ , definiert worden ist. Im allgemeinen ist die Annahme isotroper Streuung im Laborsystem jedoch keine gute Näherung.

Um die Anisotropie der Streuquerschnitte zu beschreiben, geht man zunächst von der Annahme aus, daß die gängigen Reaktormateria-

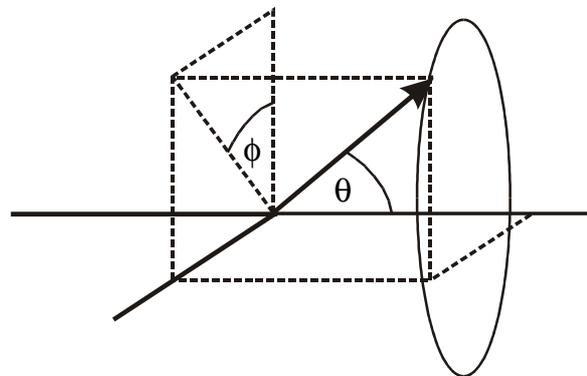


Abbildung 2-3: Definition des Streuwinkels

lien hinsichtlich Neutronenstreuung hinlänglich homogen und isotrop aufgebaut sind (die Ausnahme bilden z.B. regelmäßige, ausgedehnte Kristallgitterstrukturen, in denen Bragg-Beugung an den einzelnen Gitterebenen stattfinden kann). Dann ist nämlich die Streuvertei-

lung nur abhängig vom Relativwinkel θ zwischen $\vec{\Omega}$ und $\vec{\Omega}'$, nicht jedoch vom Azimut (siehe Abbildung 2-3), so daß ein Winkel ausreicht, um die Streuung zu charakterisieren. In der Transporttheorie wird anstelle des Winkels θ meist dessen Cosinus $\mu_0 := \cos \theta = \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}'$ verwandt. Der differentielle Streuquerschnitt lautet dann:

$$\Sigma_s(E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \rightarrow \Sigma_s(E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) = \Sigma_s(E' \rightarrow E, \mu_0). \quad (2-5)$$

Es ist weiterhin üblich, den Streuquerschnitt in der vollständigen Basis der Legendre-Polynome zu entwickeln (nukleare Wirkungsquerschnittsbibliotheken bieten i.allg. die Entwicklungskoeffizienten bis zur fünften oder noch höheren Ordnungen an [JOR00, WRI95]):

$$\Sigma_s(E \rightarrow E', \mu) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \Sigma_{sl}(E \rightarrow E') P_l(\mu_0). \quad (2-6)$$

Aus den bekannten Orthogonalitätsrelationen für die Legendre-Polynome P_l [BRO91] ergibt sich dann der folgende Integralausdruck für die Legendre-Koeffizienten bzw. Legendremomente Σ_{sl} :

$$\Sigma_{sl}(E \rightarrow E') = \int_{-1}^1 d\mu \Sigma_s(E \rightarrow E', \mu) P_l(\mu_0). \quad (2-7)$$

Obwohl mit dem Abbruch der Entwicklung nach maximal fünf Termen offensichtlich ein Informationsverlust verbunden ist, hat sich diese Art der Querschnittsbehandlung bewährt. Schwierigkeiten kann sie lediglich bereiten in extrem anisotropen Situationen [EMM79], wie z.B. in Neutronenstrahlexperimenten. Häufig ist es aber auch vollkommen ausreichend, die Entwicklung bereits nach dem linear anisotropen Term abzuberechnen.

Führt man obigen Ausdruck in den Streuoperator ein, so folgt:

$$\int dE' \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \int dE' \Sigma_{sl}(E' \rightarrow E) \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' P_l(\vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') \quad (2-8)$$

Mit der folgenden Beziehung zwischen den Legendre-Polynomen und den Kugelfunktionen bzw. „Sphärischen Harmonischen“:

$$P_l(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') = \frac{1}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\vec{\Omega}) Y_{lm}(\vec{\Omega}'), \quad (2-9)$$

läßt sich der Streuoperator weiter umformen zu (siehe auch Anhang A):

$$\sum_{l=0}^{\infty} \int dE' \Sigma_{sl}(E' \rightarrow E) \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\vec{\Omega}) \phi_l^m(\vec{r}, E, t) \quad \phi_l^m(\vec{r}, E, t) = \int_{4\pi} d\Omega' Y_{lm}(\vec{\Omega}') \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E, t). \quad (2-10)$$

Hier wurden die sogenannten Flußmomente ϕ_l^m definiert. Mit diesen gelingt es, die Winkelabhängigkeit des Streuoperators allein durch die bekannten Kugelfunktionen auszudrücken. Um die winkelabhängigen Neutronenflüsse ggf. aus den Flußmomenten rekonstruieren zu können, benutzt man die folgende Rücktransformation:

$$\psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \phi_l^m(\vec{r}, E, t) Y_{lm}^*(\vec{\Omega}). \quad (2-11)$$

Außer für die Formulierung des Transportproblems in drei Raumdimensionen ist es allerdings i.allg. nicht notwendig, den Fluß in der vollständigen Basis der komplizierten Kugelfunktionen auszudrücken, da Symmetriebeziehungen es erlauben, die Anzahl der tatsächlich benötigten Flußmomente zu reduzieren. Dies wird im Hinblick auf zylindersymmetrische Probleme in Kapitel 4 und in Anhang A eingehender diskutiert.

Die Darstellung des Spaltterms ist wesentlich einfacher als die des Streuoperators, da die Produktion von Spaltneutronen bei der Kernspaltung im Gegensatz zur Streuung in sehr guter Näherung isotrop verläuft. Dies hängt zusammen mit der Tatsache, daß spaltbare Nuklide generell sehr große Massenzahlen besitzen und die Spaltung vorwiegend durch niederenergetische thermische Neutronen mit Energien <1 keV ausgelöst wird; dadurch ist der Impulsübertrag während des Spaltprozesses vernachlässigbar.

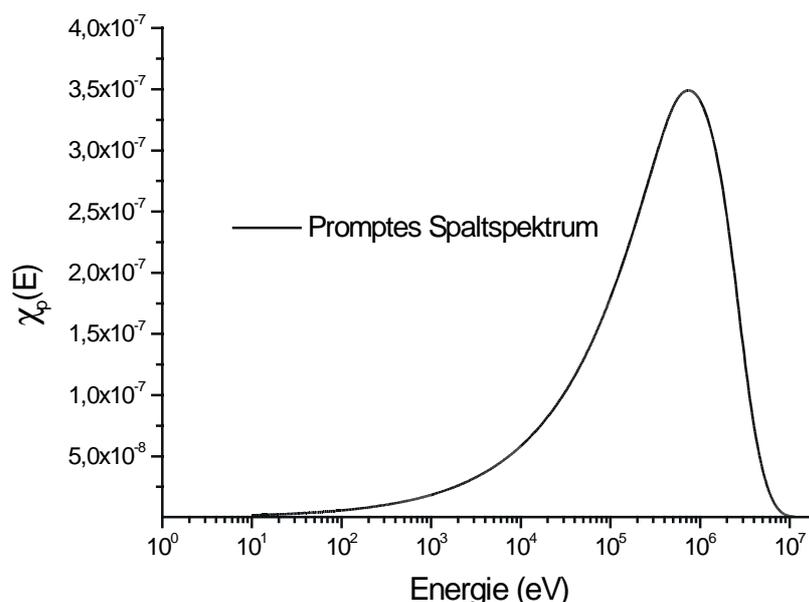


Abbildung 2-4: Promptes Spaltspektrum von U-235

Die Größe $\chi(E)dE$ gibt die Wahrscheinlichkeit an, daß die Spaltneutronen gerade eine Energie $E \in dE$ nach der Kernspaltung besitzen. Manche Transportcodes (z.B. DORT) erlauben es allerdings nicht, dieses Spektrum auch räumlich zu variieren; dies kann u.U. zu erheblichen Fehlern führen, wenn mehrere spaltbare Nuklide in einem Reaktor vorhanden sind (z.B. Pu-239 und U-235 in MOX-Brennelementen), deren Spaltspektren signifikant voneinander abweichen. In Abbildung 2-4 ist als Beispiel das Spektrum von U-235 dargestellt. Es fällt auf, daß die meisten Neutronen bei relativ hohen Energien oberhalb von 1 keV entstehen, mit einem ausgeprägten Maximum bei ca. 1 MeV.

2.2.3 Randbedingungen

Um die Transportgleichung 2-1 mit den in den vorigen Abschnitten erläuterten Beiträgen eindeutig lösen zu können, ist es erforderlich, das Lösungsgebiet mit problemspezifischen Randbedingungen vorzugeben. Die meisten Computercodes zur numerischen Lösung der Transportgleichung bieten mehrere Optionen:

- *Explizite Randbedingungen:* Auf dem Rand Γ (mit der auswärts gerichteten Oberflächennormalen \vec{n}) des Gebiets wird eine bekannte Funktion $\tilde{\Psi}$ für den einlaufenden Fluss vorgeschrieben:

$$\psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) = \tilde{\Psi}(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) \quad \vec{\Omega} \cdot \vec{n} < 0, \quad \vec{r} \in \Gamma.$$

Ein Spezialfall ist die häufig verwendete Vakuumrandbedingung, in der der einlaufende Fluß zu Null gesetzt wird:

$$\psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) = 0 \quad \vec{\Omega} \cdot \vec{n} < 0, \quad \vec{r} \in \Gamma.$$

- *Albedo-Randbedingungen:* Die einlaufenden Flüsse werden zu den auslaufenden in Beziehung gesetzt: der einlaufende Fluß in Richtung $\vec{\Omega}$ ist gleich dem auslaufenden Fluß in Richtung $\vec{\Omega}'$, (die aus $\vec{\Omega}$ durch Spiegelreflektion entsteht), multipliziert mit einer Konstanten, der sog. Albedo α :

$$\psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) = \alpha(E) \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E, t) \quad \vec{\Omega} \cdot \vec{n} < 0, \quad \vec{r} \in \Gamma \quad \vec{n} \cdot \vec{\Omega} = -\vec{n} \cdot \vec{\Omega}'.$$

Ein Spezialfall ist der Fall $\alpha=1$, die reflektierende Randbedingung; alle auf den Rand auftreffenden Teilchen werden in das Gebiet spiegelbildlich zurückreflektiert (siehe Abbildung 2-5).

- *„Weiße“ Randbedingung:* Alle aus dem Gebiet auslaufenden Teilchen kehren unabhängig von ihrer ursprünglichen Flugrichtung mit einer isotropen Verteilung zurück:

$$\psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) = \frac{1}{4} \int_{\vec{n} \cdot \vec{\Omega}' > 0} d\vec{\Omega}' \vec{n} \cdot \vec{\Omega}' \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E, t) \quad \vec{\Omega} \cdot \vec{n} < 0, \quad \vec{r} \in \Gamma.$$

- *Periodische Randbedingungen:* Diese Randbedingung wird insbesondere für periodische Strukturen wie z.B. Brennelemente verwendet. Die Flußverteilung an einer bestimmten Grenzfläche am Ort \vec{r} in dem periodisch aufgebauten Medium ist identisch zu dem an einer geometrisch identischen, aber räumlich verschobenen Position $\vec{r} + \vec{r}_1$ (Abbildung 2-5):

$$\psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) = \psi(\vec{r} + \vec{r}_1, \vec{\Omega}, E, t).$$

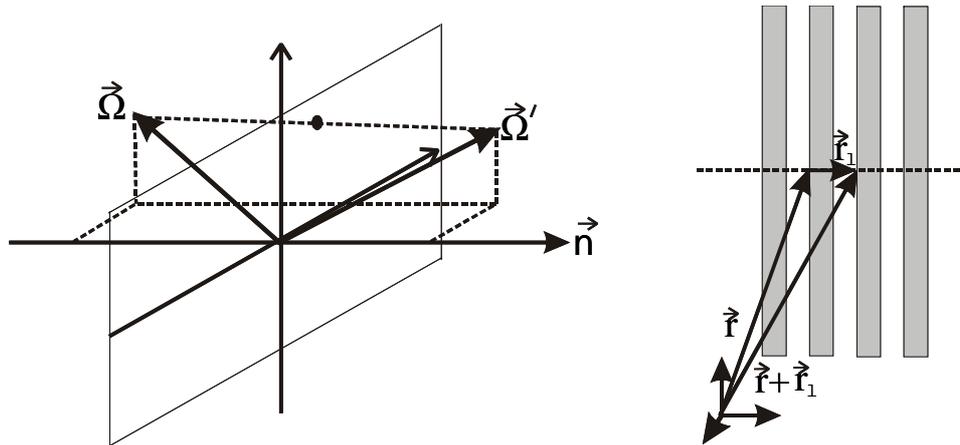


Abbildung 2-5 links: Effekt reflektierender Randbedingungen; rechts: Darstellung periodischer Randbedingungen

2.3 Lösbarkeit der stationären Transportgleichung

Wie bereits in der Einleitung zu diesem Kapitel erwähnt, können die stationären Transportprobleme in zwei große Klassen eingeteilt werden, nämlich in sog. „Fixed-Source“-Probleme und in Kritikalitätsanalysen.

Um diese Begriffe zu klären, betrachte man zunächst ein System, in dem keinerlei spaltbares Material, allerdings eine externe Neutronenquelle vorhanden ist. Die Transportgleichung reduziert sich dann zu:

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) + \Sigma_t(\vec{r}, E) \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = q_{\text{extern}}(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) + \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \int dE' \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E').$$

(2-12)

Die möglichen Prozesse, die in dem Medium stattfinden können, sind Absorption und Streuung. Neutronen aus der Neutronenquelle werden sich also über das System verteilen, indem sie u.U. mehrfach von den Atomkernen des Mediums gestreut werden, bis es schließlich zur Absorption oder zum Verlassen des Systems durch Leakage kommt. Es wird sich also eine gewisse stationäre Neutronenflußverteilung einstellen. Dies ist die übliche Situation in den sog. „Fixed-Source“-Problemen. Typische Beispiele sind etwa Abschirmungsrechnungen für

Gebäude [RHO92] oder Fluenzbestimmungen an Reaktordruckbehältern [REM99], bei denen zunächst ein Quellterm definiert wird, der die Strahlungscharakteristik der externen Quelle angemessen wiedergibt. Diese kann z.B. ein abgebranntes Brennelement in einem Transportbehälter für Nuklearabfall sein oder ein stationärer Reaktor, dessen Neutronen auf die umgebenden Strukturmaterialien treffen. Die Fortschritte in der Rechnerleistung erlauben es mittlerweile, mit stationären Transportcodes wie z.B. TORT so komplizierte Anordnungen wie mehrstöckige Gebäude, die einer externen Bestrahlung ausgesetzt sind, zu berechnen, und dabei selbst feine geometrische Details im Inneren gut wiederzugeben [AZM00].

Die Situation wird komplizierter, wenn zusätzlich spaltbares Material vorhanden ist. Dann muß untersucht werden, ob die Anordnung über- oder unterkritisch ist. Ein System ist genau dann kritisch, wenn eine sich selbst unterhaltende zeitunabhängige Kettenreaktion ohne die Anwesenheit externer Quellen ablaufen kann. Äquivalent dazu ist die Aussage, daß sich die Flußverteilung in einem kritischen System asymptotisch einem Gleichgewicht nähert, wenn zu einem bestimmten Zeitpunkt eine feste Anzahl von Neutronen in das System injiziert worden ist. Existiert ein solcher Zustand nicht, wird die Neutronendichte zeitlich entweder exponentiell zu- oder abnehmen, das System ist dann über- bzw. unterkritisch (siehe Abbildung 2-6 links).

Ähnlich einem kritischen System kann auch in einem unterkritischen System eine stationäre Neutronendichte erzeugt werden, wenn zusätzlich eine externe Quelle vorhanden ist. Im dynamischen Gleichgewicht ist dann die Anzahl der von Quelle und durch Kernspaltung erzeugten Neutronen gleich der Anzahl derer, die durch Leakage oder Absorption dem System verloren gehen. Im kritischen oder überkritischen Zustand wird die Anzahl der produzierten Neutronen stets überwiegen, und wiederum ist ein Gleichgewichtszustand nicht möglich. Mathematisch läßt sich das unterkritische System mit externem Quellterm durch die folgende, inhomogene Transportgleichung beschreiben:

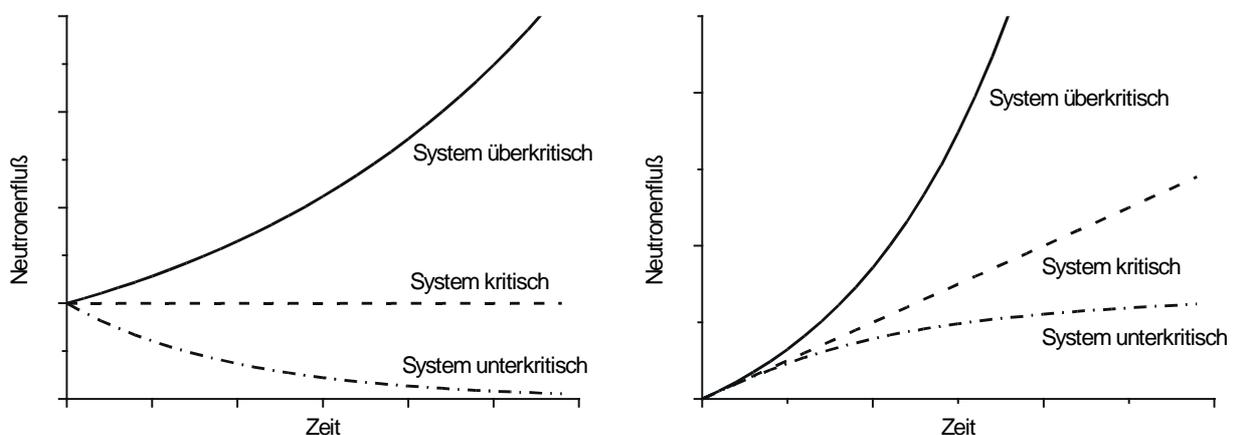


Abbildung 2-6 links: Entwicklung des Neutronenflusses in einem multiplizierenden Medium ohne externe Quelle; rechts: Entwicklung des Flusses bei Anwesenheit einer externen Quelle

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) + \Sigma_t(\vec{r}, E) \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = q_{\text{extern}}(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) + \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') + \chi(E) \int dE' \nu \Sigma_f(E') \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E'). \quad (2-13)$$

Zusätzlich können Randbedingungen vorgegeben werden, die das Einströmen von Neutronen in das System zulassen, z.B. durch die Festlegung einer expliziten Randbedingung, einer sog. „Boundary Source“:

$$\psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) = \tilde{\Psi}(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) \quad \vec{\Omega} \cdot \vec{n} < 0, \quad \vec{r} \in \Gamma. \quad (2-14)$$

Für den quelltermfreien, kritischen Zustand lautet die Transportgleichung hingegen:

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) + \Sigma_t(\vec{r}, E) \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') + \chi(E) \int dE' \nu \Sigma_f(E') \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E'). \quad (2-15)$$

Die Randbedingungen müssen so gewählt sein, daß auch von außen keine Neutronen in das System eindringen können; eine sinnvolle Wahl sind z.B. Vakuumrandbedingungen:

$$\psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) = 0 \quad \vec{\Omega} \cdot \vec{n} < 0, \quad \vec{r} \in \Gamma. \quad (2-16)$$

Unter diesen Voraussetzungen ist Gleichung 2-15 homogen und nur dann lösbar, wenn die geometrischen und Materialeigenschaften des nuklearen Systems von vorne herein so gewählt wurden, daß die Verluste an Neutronen die Produktion durch Spaltung gerade kompensieren, d.h. wenn das System exakt kritisch ist. Dieser Fall wird jedoch in der Praxis praktisch nie auftreten, Gleichung 2-15 ist daher i.allg. nicht lösbar.

Um trotzdem Informationen über den Zustand des Systems zu erhalten, ist es üblich, Gleichung 2-15 in eine Eigenwertgleichung umzuformen:

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) + \Sigma_t(\vec{r}, E) \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \Sigma_s(\vec{r}, E', E, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') + \frac{\chi(E)}{k_{\text{eff}}} \int dE' \nu \Sigma_f(E') \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E'). \quad (2-17)$$

Der hier eingeführte „effektive Multiplikationsfaktor“ k_{eff} bewirkt physikalisch gesprochen eine Umskalierung der mittleren pro Spaltung produzierten Anzahl von Neutronen ν ; diese wird durch den Eigenwert gerade so angepaßt, daß das skalierte System genau kritisch ist. Der Wert von k_{eff} beschreibt also den Kritikalitätszustand einer Spaltstoffanordnung. Es gilt:

$$k_{\text{eff}} \begin{cases} > 1 & \text{überkritisch,} \\ = 1 & \text{kritisch,} \\ < 1 & \text{unterkritisch.} \end{cases}$$

2.4 Energiegruppendarstellung der Neutronentransportgleichung

In ihrer kontinuierlichen Form, Gleichung 2-1, ist die Neutronentransportgleichung analytisch nur für wenige, stark idealisierte Probleme lösbar. Für eine numerische Lösung müssen die sechs Phasenraumvariablen diskretisiert werden. Während sich für Raum- und Winkelvariablen verschiedene methodische Ansätze herausgebildet haben, wird in den deterministischen Transportcodes eine standardisierte Form der Energiediskretisierung verwendet. Diese wird daher zuerst diskutiert.

Ausgangspunkt ist wiederum die vollständige Transportgleichung (die explizite Winkelabhängigkeit der Neutronenflüsse wird für den Moment unterdrückt):

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \psi(\vec{r}, E) + \Sigma_t(\vec{r}, E) \psi(\vec{r}, E) = q_{\text{extern}}(\vec{r}, E) + q_{\text{Streuung}} + \chi(E) \int dE' v \Sigma_f(E') \psi(\vec{r}, E'). \quad (2-18)$$

Der Streuanteil q_{Streuung} kann nun entweder direkt über die winkelabhängigen Flüsse oder über die in Abschnitt 2.2.2 eingeführten Flußmomente definiert werden:

$$q_{\text{Streuung}} = \int dE' \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \int dE' \Sigma_{sl}(E' \rightarrow E) Y_{lm}^*(\vec{\Omega}) \phi_l^m(\vec{r}, E, t). \quad (2-19)$$

Die gesamte für den Neutronentransport relevante Energieskala (10^{-5} eV – 20 MeV) wird nun in G Intervalle $[E_g, E_{g+1}]$, die sogenannten Energiegruppen, eingeteilt. Man beachte, daß die Numerierung der Gruppen absteigend von größeren zu kleineren Energien erfolgt, der Tatsache Rechnung tragend, daß Neutronen bei hohen Energien erzeugt und dann durch Stöße abgebremst bzw. thermalisiert werden. Mit den folgenden Abkürzungen:

$$\int_g dE := \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \quad \Rightarrow \quad \int_0^{\infty} dE' = \sum_{g'=1}^G \int_{g'} dE' \quad g = 1 \dots G \quad (2-20)$$

seien die Gruppenflüsse ψ_g und ϕ_g sowie die Flußmomente definiert durch:

$$\psi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int_g dE \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \quad \phi_g(\vec{r}) = \int_g dE \psi(\vec{r}, E) \quad \phi_{lg}^m(\vec{r}) = \int_g dE \phi_l^m(\vec{r}, E). \quad (2-21)$$

Die Transportgleichung wird nun über jedes dieser Intervalle integriert. Das Ergebnis ist die Transportgleichung in Energiegruppenform, die in folgende Darstellung gebracht werden kann [BEL67]:

$$\left[\vec{\Omega} \cdot \nabla + \Sigma_t^g(\vec{r}) \right] \psi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = q_{\text{Streuung}}(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \chi_g \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_f^{g'}(\vec{r}) \phi_{g'}(\vec{r}) + q_{\text{extern}}^g(\vec{r}, \vec{\Omega})$$

$$q_{\text{Streuung}}(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \sum_{g'=1}^G \int d\vec{\Omega}' \Sigma_s^{gg'}(\vec{r}, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \psi_{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}') = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\vec{\Omega}) \sum_{g'=1}^G \Sigma_{ls}^{gg'}(\vec{r}) \phi_{lg'}^m(\vec{r}), \quad (2-22)$$

vorausgesetzt, man definiert die sogenannten Gruppenwirkungsquerschnitte gemäß:

$$\Sigma_t^g(\vec{r}) = \frac{\int dE' \Sigma_t(\vec{r}, E') \phi(\vec{r}, E')}{\phi_g(\vec{r})} \quad \nu \Sigma_f^g(\vec{r}) = \frac{\int dE' \nu \Sigma_f(\vec{r}, E') \phi(\vec{r}, E')}{\phi_g(\vec{r})} \quad (2-23)$$

$$\Sigma_s^{gg'}(\vec{r}, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') = \frac{\int dE \int dE' \Sigma_s(E' \rightarrow E, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \phi(\vec{r}, E')}{\phi_{g'}(\vec{r})} \quad \Sigma_{ls}^{gg'}(\vec{r}) = \frac{\int dE \int dE' \Sigma_{ls}(E' \rightarrow E) \phi_l^0(\vec{r}, E')}{\phi_{lg'}^0(\vec{r})}$$

sowie das Gruppenspektrum und den Gruppenquellterm:

$$\chi_g = \int_g dE' \chi(E') \quad q_{\text{extern}}^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int_g dE' q_{\text{extern}}(\vec{r}, \vec{\Omega}, E'). \quad (2-24)$$

Man beachte, daß durch diese Umformungen zwar die energieabhängige Transportgleichung auf ein System von G partiellen und von der Energie unabhängigen Differentialgleichungen reduziert worden ist; dieser Schritt ist jedoch zunächst rein formal, da zur Berechnung der Gruppenwirkungsquerschnitte nicht nur die detaillierte energetische Abhängigkeit der makroskopischen Wirkungsquerschnitte $\Sigma(\vec{r}, E)$ bekannt sein muß, sondern darüber hinaus auch die der Neutronenflüsse $\phi(\vec{r}, E)$, also Größen, die erst durch Lösung der Transportgleichung bestimmt werden können und daher a priori nicht bekannt sind.

Tatsächlich ist der Ausgangspunkt jeder Reaktoranalyse die Bestimmung dieser Gruppenquerschnitte. Ist die Gruppenanzahl hinreichend groß, so kann der Neutronenfluß $\phi(\vec{r}, E)$ über die jeweiligen Energieintervalle in guter Näherung als konstant angesehen werden; die Integrale in den Gleichungen 2-23 lassen sich dann ausführen. Aufgrund der ausgeprägten

Resonanzstruktur vieler Nuklide ist die Anzahl der benötigten Energiegruppen aber meistens so groß, daß zwei- oder gar dreidimensionale Probleme nicht mehr in akzeptabler Rechenzeit gelöst werden können. Man beginnt daher mit einem reduzierten Problem niedrigerer Dimension, z.B. der Berechnung des Neutronenflusses in einem unendlich ausgedehnten Medium oder einer eindimensionalen Rechnung, mit der man versucht, das vollständige Problem geometrisch zu approximieren. Die auf diese Weise ermittelten Vielgruppenflüsse können dann verwendet werden, um die Anzahl der Energiegruppen weiter zu verringern. Sind die betrachteten Systeme darüber hinaus räumlich stark inhomogen, so wird die Bestimmung der Gruppengrößen durch Effekte wie die sog. Resonanzselbstabschirmung weiter erschwert. Eine ausführliche Diskussion dieses Sachverhalts findet sich in Anhang B. Im vorliegenden Kapitel werden die Gruppenquerschnitte jedoch als bekannte Größen vorausgesetzt.

Für die weiteren Betrachtungen ist es nützlich, die Energiegruppengleichungen als Operatorgleichungen zu formulieren. Beschränkt man sich zunächst auf nicht multiplizierende Systeme, so lautet die Transportgleichung:

$$\left[\bar{\Omega} \cdot \nabla + \Sigma_t^g(\bar{r}) \right] \psi_g(\bar{r}, \bar{\Omega}) = \sum_{g'=1}^G \int d\bar{\Omega}' \Sigma_s^{gg'}(\bar{r}, \bar{\Omega} \cdot \bar{\Omega}') \psi_{g'}(\bar{r}, \bar{\Omega}') + q_{\text{extern}}^g(\bar{r}, \bar{\Omega}). \quad (2-25)$$

Der Ausdruck auf der linken Seite wirkt nur auf Neutronen, die sich in der Energiegruppe g befinden, während der Streuanteil die Streuung von Neutronen der Gruppen $g' \in (1..G)$ nach Gruppe g beschreibt und damit für die Kopplung der insgesamt G Energiegruppengleichungen verantwortlich ist.

Führt man folgende Operatornotation ein:

$$H_{gg}^{LS} \psi_g := \left(\bar{\Omega} \cdot \nabla + \Sigma_t^g(\bar{r}) \right) \psi_g(\bar{r}, \bar{\Omega}) \quad H_{gg'}^S \psi_{g'} = \int_{4\pi} d\bar{\Omega}' \Sigma_s^{gg'}(\bar{r}, \bar{\Omega} \cdot \bar{\Omega}') \psi_{g'}(\bar{r}, \bar{\Omega}'), \quad (2-26)$$

so nimmt die Transportgleichung für Gruppe g folgende einfache Gestalt an, die auch als Matrixgleichung formuliert werden kann:

$$\sum_{g'=1}^G \underbrace{\left(H_{gg}^{LS} \delta_{gg'} - H_{gg'}^S \right)}_{=: \tilde{H}_{gg'}} \psi_{g'} = q_{\text{extern}}^g \quad \text{oder} \quad \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdot & H_{1g} & \cdot & H_{1G} \\ H_{21} & H_{22} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ H_{g1} & \cdot & \cdot & H_{gg} & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ H_{G1} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & H_{GG} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \psi_g \\ \cdot \\ \psi_G \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_{\text{extern}}^1 \\ \cdot \\ \cdot \\ q_{\text{extern}}^g \\ \cdot \\ q_{\text{extern}}^G \end{pmatrix}. \quad (2-27)$$

Werden hochenergetische Neutronen gestreut, so ist dies generell mit einem Energieverlust verbunden; diesen Sachverhalt bezeichnet man als Abwärtstreuung. Für die Gruppengleichungen bedeutet dies, daß Streuungen für die „schnellen“ ($E_g > 1-3 \text{ eV}$), d.h. hochenergetischen Gruppen nur von kleineren zu größeren Gruppenindizes stattfindet, bzw.

$$H_{gg'}^S = 0 \quad g' > g,$$

Die sogenannten „thermischen“ Gruppen sind hingegen dadurch definiert, daß Streuung zu höheren Energien auftreten kann. Bei niedrigen Neutronenenergien $< 1-3 \text{ eV}$ ist die kinetische Energie der Atomkerne des umgebenden Mediums nämlich von derselben Größenordnung wie die des Neutrons, so daß bei der Streuung u.U. auch ein positiver Impuls- und Energieübertrag an das gestreute Neutron stattfinden kann.

Die obige Matrixgleichung wird also generell von folgender Form sein:

$$\begin{pmatrix} H_{11} & 0 & \cdot & 0 \\ H_{21} & H_{22} & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ H_{31} & H_{32} & H_{33} & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot \\ H_{g1} & \cdot & \cdot & \cdot & H_{gg} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & H_{G-2,G-2} & H_{G-2,G-1} & H_{G-2,G} & \psi_{G-2} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & H_{G-1,G-2} & H_{G-1,G-1} & H_{G-1,G} & \psi_{G-1} \\ H_{G1} & \cdot & \cdot & \cdot & H_{Gg} & \cdot & H_{G,G-2} & H_{G,G-1} & H_{GG} & \psi_G \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \psi_g \\ \cdot \\ \psi_{G-2} \\ \psi_{G-1} \\ \psi_G \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_{\text{extern}}^1 \\ \cdot \\ q_{\text{extern}}^G \end{pmatrix}. \quad (2-28)$$

In diesem Beispiel empfangen nur die Gruppen $G-2$ und $G-1$ Beiträge von Streuungen aus höheren Energiegruppen, d.h. von den Gruppen G bzw. $G-1$. Wäre überhaupt keine Aufwärtstreuung vorhanden, hätte die Matrix untere Dreiecksform und ließe sich durch den folgenden einfachen Algorithmus lösen:

$$\psi_1 = H_{11}^{-1} q_{\text{extern}}^1 \quad (2-29)$$

$$\psi_2 = H_{22}^{-1} (q_{\text{extern}}^2 - H_{21} \psi_1)$$

⋮
⋮

$$\psi_g = H_{gg}^{-1} \left(q_{\text{extern}}^g - \sum_{g' < g} H_{gg'} \psi_{g'} \right).$$

Sind dagegen thermische Gruppen mit signifikanter Aufwärtstreuung vorhanden, muß über diese iteriert werden:

$$\psi_g^{(i+1)} = H_{gg}^{-1} \left(q_g^{ext} - \sum_{g' < g} H_{gg'} \psi_{g'}^{(i+1)} - \sum_{g' > g} H_{gg'} \psi_{g'}^{(i)} \right). \quad (2-30)$$

Sowohl mit als auch ohne Aufwärtsstreuung wird nur der diagonale Operator H_{gg} invertiert; die nicht-diagonalen Operatoren $H_{gg'}, g' \neq g$ wirken stets nur multiplikativ auf jene Neutronenflüsse, die bereits in den vorigen Rechenschritten bzw. der vorigen Iteration bestimmt worden sind. In der Energiegruppendarstellung ist also für jede Energiegruppe lediglich die folgende Gleichung zu lösen:

$$(\vec{\Omega} \cdot \nabla + \Sigma_t) \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \Sigma_s^{gg}(\vec{r}, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}') + S(\vec{r}, \vec{\Omega}). \quad (2-31)$$

Der Strömungs- und Wechselwirkungsbeitrag wirkt nur auf die jeweilige Energiegruppe, der Streuterm enthält lediglich noch den „Selbststreuanteil“ Σ_s^{gg} , behandelt also nur die Neutronen, die auch nach der Streuung noch innerhalb derselben Energiegruppe vorzufinden sind. In dem Quellterm S sind alle anderen Beiträge, d.h. die der externen Quelle sowie die durch Einstreuung aus allen anderen Gruppen $g' \neq g$ absorbiert:

$$S(\vec{r}, \vec{\Omega}) = S_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = q_{\text{extern}}^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \sum_{g' \neq g} \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \Sigma_s^{gg'}(\vec{r}, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}'). \quad (2-32)$$

Gleichung 2-31 ist die sog. „Within-Group“-Gleichung, die effektiv ein monoenergetisches Problem mit bekanntem, festen Gruppenquellterm S_g darstellt. Die Lösung dieses Problems, d.h. die Invertierung des Operators:

$$H\psi = (\vec{\Omega} \cdot \nabla + \Sigma_t)\psi - \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}') \quad (2-33)$$

muß allerdings aufgrund des Integralbeitrages der Selbststreuung iterativ erfolgen; dieses Verfahren, auch bekannt als „Iteration on the Scattering Source“ [CAR68], kann leicht physikalisch interpretiert werden und erlaubt es außerdem, Aussagen über die Konvergenz des Verfahrens zu machen. Die Iterationsvorschrift lautet (mit dem Iterationsindex l):

$$(\vec{\Omega} \cdot \nabla + \Sigma(\vec{r})) \psi^{(l+1)}(\vec{r}, \vec{\Omega}) = q^{(l)}(\vec{r}, \vec{\Omega}) \quad q^{(l)}(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \psi^{(l)}(\vec{r}, \vec{\Omega}') + S(\vec{r}, \vec{\Omega}). \quad (2-34)$$

Sei nun:
$$\psi^{(0)} \equiv 0 \quad \psi^{(l+1)} = \sum_{m=0}^l \tilde{\psi}^{(m)}. \quad (2-35)$$

Eingesetzt in Gleichung 2-34 erhält man:

$$\begin{aligned}
 (\vec{\Omega} \cdot \nabla + \Sigma(\vec{r})) \tilde{\psi}^{(0)}(\vec{r}, \vec{\Omega}) &= S(\vec{r}, \vec{\Omega}) \\
 (\vec{\Omega} \cdot \nabla + \Sigma(\vec{r})) \tilde{\psi}^{(m)}(\vec{r}, \vec{\Omega}) &= \int d\vec{\Omega}' \Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \tilde{\psi}^{(m-1)} \quad m = 1, 2, 3, \dots
 \end{aligned}
 \tag{2-36}$$

Die Gleichung für die nullte Iteration ist gerade die „Within-Group“-Transportgleichung ohne Streuanteil. Der Fluß $\tilde{\psi}^{(0)}$ ist also die Lösung für solche Neutronen, die direkt von der Gruppenquelle S emittiert wurden und noch keine Streuung innerhalb der Gruppe erfahren haben. Für die weiteren Iterationen gilt, daß für jeweils aufeinander folgende Werte von m der Quellterm zur Bestimmung von $\tilde{\psi}^{(m)}$ nur von den Streubeiträgen des Flusses $\tilde{\psi}^{(m-1)}$ herührt. Folgende Interpretation ist möglich: sei $\tilde{\psi}^{(0)}$ der Fluß der Neutronen, die noch nicht gestreut wurden, so repräsentieren $\tilde{\psi}^{(1)}, \tilde{\psi}^{(2)}, \tilde{\psi}^{(m)}$ gerade die Anteile des Neutronenflusses, die 1, 2, ..., m Streuungen erfahren haben. Da der Gesamtfluß $\psi^{(l+1)}$ sich gemäß Gleichung 2-35 aus der Summe aller dieser Beiträge zusammensetzt, sind bis zur $(l+1)$ -ten Iteration alle Neutronen erfaßt worden, die maximal l Streuungen erlebt haben, nachdem sie von der Gruppenquelle S erzeugt worden sind.

Die „Iteration on the Scattering Source“ konvergiert also um so schlechter, je häufiger ein Neutron innerhalb einer Gruppe gestreut wird. Ist hingegen die Absorption groß, oder verläßt das Neutron bereits nach wenigen Stößen die Gruppe durch Auf- oder Abwärtsstreuung (bevorzugt durch Stöße mit leichten Kernen), so wird das Verfahren ausgezeichnet konvergieren. Ein qualitatives Maß für diesen Sachverhalt ist das sog. Streuverhältnis Σ_s / Σ_t , das den Anteil der Selbststreuung an der Gesamtreaktionsrate einer Gruppe angibt. Für $\Sigma_s / \Sigma_t > 0.9$ ist Konvergenz i.allg. erst nach (gewöhnlich unzumutbar) vielen Iterationen zu erreichen; man ist also hier auf effektive Beschleunigungsmechanismen angewiesen, auf die im Zusammenhang mit der Diskrete-Ordinaten-Methode (siehe Abschnitt 4.4) näher eingegangen wird.

Es folgt eine Diskussion der anspruchsvolleren Probleme der Kritikalitätsberechnungen bzw. der unterkritischen multiplizierenden Systeme, in denen zusätzlich der Spaltterm in den Gruppengleichungen zu berücksichtigen ist.

Das zu Gleichung 2-27 analoge Differentialgleichungssystem für den kritischen Fall nimmt nun folgende Form an:

$$\sum_{g'=1}^G \underbrace{\left(H_{gg'}^{LS} \delta_{gg'} - H_{gg'}^S \right)}_{=: H_{gg'}} \psi_{g'} = \frac{1}{k_{\text{eff}}} \chi_g \underbrace{\sum_{g'=1}^G v \Sigma_f^{g'} \int d\vec{\Omega} \psi_{g'}}_{=: F} \tag{2-37}$$

bzw. in Matrixform:

$$\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdot & H_{1g} & \cdot & H_{1G} \\ H_{21} & H_{22} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ H_{g1} & \cdot & \cdot & H_{gg} & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ H_{G1} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & H_{GG} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \psi_G \end{pmatrix} = \frac{1}{k_{\text{eff}}} \begin{pmatrix} \chi_1 \nu \Sigma_f^1 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \chi_1 \nu \Sigma_f^G \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \chi_G \nu \Sigma_f^1 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \chi_G \nu \Sigma_f^G \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \phi_G \end{pmatrix} = \frac{1}{k_{\text{eff}}} \begin{pmatrix} \chi_1 F \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \chi_G F \end{pmatrix}$$

Hier wurde außerdem im letzten Schritt die Spaltdichteverteilung $F = \sum_{g'} \nu \Sigma_f^{g'} \phi_{g'}$ definiert.

Der Operator $H_{gg'}$ auf der linken Seite der Gleichung ist identisch mit dem entsprechenden Operator in der Transportgleichung für nicht-multiplizierende Systeme; im Gegensatz zu diesen findet man jedoch statt eines festen Quellterms auf der rechten Seite den Spaltoperator vor, der ebenfalls auf die Neutronenflüsse wirkt. Dieser Operator ist darüber hinaus vollbesetzt (siehe die Diskussion des Streuoperators) so daß ein einfacher Lösungsalgorithmus wie in Gleichung 2-29 nicht in Frage kommt. Ferner muß der Eigenwert k_{eff} bestimmt werden.

Um die Notation weiter zu vereinfachen, schreibt man Gleichung 2-37 symbolisch als:

$$H\psi = \frac{1}{k_{\text{eff}}} \chi F \quad \Rightarrow \quad \psi = H^{-1} \frac{1}{k_{\text{eff}}} \chi F. \quad (2-38)$$

Integration über alle Winkel und Multiplikation mit $f^T = (\nu \Sigma_f^1, \nu \Sigma_f^2, \dots, \nu \Sigma_f^G)^T$ liefert dann:

$$f^T \int d\bar{\Omega} \psi = \frac{1}{k_{\text{eff}}} f^T \int d\bar{\Omega} H^{-1} \chi F. \quad (2-39)$$

Mit der formalen Definition des Operators $A = f^T \int d\bar{\Omega} H^{-1} \chi$ erhält man dann eine Eigenwertgleichung in der Spaltdichte

$$AF = k_{\text{eff}} F. \quad (2-40)$$

Die übliche Methode zur Lösung dieser Gleichung ist die „Power“-Iteration [GOL96, NAK77]. Ausgehend von einer Schätzung des Eigenwertes $k^{(0)} > 0$ und einer anfänglichen Spaltdichteverteilung $F^{(0)}$ führt man folgende Rechenvorschrift bis zur Konvergenz aus:

$$F^{(i+1)} = \frac{1}{k_{\text{eff}}^{(i)}} AF^{(i)} \quad k_{\text{eff}}^{(i+1)} = k_{\text{eff}}^{(i)} \frac{\int dV \langle F^{(i+1)} | F^{(i+1)} \rangle}{\int dV \langle F^{(i)} | F^{(i)} \rangle} \quad \Rightarrow \quad F^{(n)} = \left(\prod_{i=1}^{n-1} (k_{\text{eff}}^{(i)})^{-1} \right) A^n F^{(0)}. \quad (2-41)$$

Die Bezeichnung $\langle | \rangle$ steht hier für eine beliebige Norm (z.B. Quadratnorm) der Spaltverteilungen. Die letzte Beziehung erklärt den Begriff „Power“-Iteration: der n -te Iterationsschritt entspricht gerade der Anwendung des Operators A^n auf die erste Abschätzung $F^{(0)}$. Die Konvergenzeigenschaften dieser Methode werden in Abschnitt 3.5 näher diskutiert werden. Man beachte, daß Kritikalitätsberechnungen zwei unterschiedliche Iterationszyklen miteinander vereinigen. Für jede Energiegruppe müssen (wie in „Fixed-Source“-Problemen) die Operatoren H_{gg} gemäß der Methode der „Iteration on the Scattering Source“ invertiert werden. Die Power-Iterationsmethode dagegen bezieht sich auf das Gesamtsystem, da eine neue Spaltdichte F erst bestimmt werden kann, wenn alle Gruppenflüsse neu errechnet worden sind. Während man bei den Iterationen zur Lösung der einzelnen Energiegruppengleichungen von den „inneren“ Iterationen spricht, bezeichnet man die wiederholten Power-Iterationen über das gesamte Gleichungssystem als „äußere“ Iterationen. Wie bei der Diskussion der Aufwärtsstreuung erwähnt, ist u.U. noch ein dritter Iterationszyklus notwendig, der dann aber nur über die thermischen Gruppen durchgeführt wird.

Daraus wird ersichtlich, daß Kritikalitätsanalysen im Vergleich mit geometrisch ähnlichen „Fixed-Source“-Problemen i.allg. ein Vielfaches an Rechenzeit benötigen, bis sich schließlich die Flußverhältnisse so eingestellt haben, daß die (ggf. durch den effektiven Multiplikationsfaktor skalierte) Spaltrate gerade der Verlustrate des Systems entspricht.

Die Situation ist vergleichbar für unterkritische, multiplizierende Systeme. Gleichung 2-37 wird lediglich durch einen zusätzlichen konstanten Quellterm modifiziert:

$$\sum_{g'=1}^G \underbrace{\left(H_{gg}^{LS} \delta_{gg'} - H_{gg'}^S \right)}_{=: H_{gg'}} \psi_{g'} = \chi_g \underbrace{\sum_{g'=1}^G v \Sigma_f^{g'} \int d\bar{\Omega} \psi_{g'}}_{=: F} + q_{\text{extern}}^g \quad (2-42)$$

Ein effektiver Multiplikationsfaktor ist nun nicht mehr notwendig, da das System, Unterkritikalität vorausgesetzt, inhomogen und damit auf jeden Fall lösbar ist. Die Methode der Power-Iteration ist aber auch hier anwendbar, wenn man Gleichung 2-42 ebenfalls in eine Form wie Gleichung 2-40 bringt:

$$AF = F + q_{\text{extern}} \quad \Rightarrow \quad F^{(i+1)} = AF^{(i)} - q_{\text{extern}} \quad (2-43)$$

Solche Probleme zeichnen sich dadurch aus, daß (obwohl kein Eigenwert bestimmt werden muß) die Konvergenz häufig noch schlechter ist als bei vergleichbaren Kritikalitätsproblemen, insbesondere wenn das System annähernd kritisch ist. Dieses Verhalten ist grundsätzlich ähnlich zum Verhalten der inneren Iterationen: die Anzahl der benötigten Iterationen entspricht dort gerade der Anzahl der Streuprozesse, die ein Neutron innerhalb einer Energie-

gruppe durchlebte. Bei unterkritischen Systemen stellt sich analog in der ersten Power-Iteration der unmultiplizierte Fluß ein, wie es auch in einem nicht-multiplizierenden Medium der Fall wäre. Darüber hinaus wird aber eine neue Generation von Neutronen produziert, deren Anzahl allerdings (aufgrund der Unterkritikalität) geringer ist als die der extern zugeführten. Diese Spaltneutronen erzeugen wiederum Spaltneutronen mit einer entsprechend reduzierten Anzahl usw. Die Flußverteilung wird sich also asymptotisch an einen Grenzwert annähern, und zwar um so langsamer, je näher das System an der Kritikalität ist. Es sind daher eine Reihe von Extrapolationsmechanismen entwickelt worden, die teilweise eine erhebliche Beschleunigung der Konvergenz der äußeren Iterationen bewirken. Auf diese wird bei der Diskussion der Diffusionstheorie und der Diskrete-Ordinaten-Methode noch näher eingegangen.

2.5 Die zeitabhängige Transportgleichung

Nach der Diskussion der stationären Transportgleichung und der möglichen Lösungsansätze soll nun die vollständige, d.h. zeitabhängige Gleichung erläutert werden. Die Erweiterung auf instationäre Phänomene ist zunächst recht einfach: während für die stationäre Gleichung gefordert wurde, daß sich Verlust- und Produktionsprozesse exakt kompensieren, wird nun das zeitliche Verhalten des Gesamtsystems durch die Differenz von produzierten und verloren gegangenen Neutronen bestimmt:

$$\underbrace{\frac{1}{v(E)} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t)}_{\text{Gesamtänderung}} = \underbrace{-\vec{\Omega} \cdot \nabla \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t)}_{\text{Strömungsterm}} - \underbrace{\Sigma_t(\vec{r}, E) \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t)}_{\text{Stoßterm}} + \underbrace{q_{\text{extern}}(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t)}_{\text{externe Quelle}} + \underbrace{\int dE' \int d\vec{\Omega}' \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E', t)}_{\text{Streuterm}} + \underbrace{\chi(E) \int dE' v \Sigma_f(\vec{r}, E') \phi(\vec{r}, E', t)}_{\text{Spaltterm}}.$$

(2-44)

Hinzu gekommen ist lediglich die Zeitableitung auf der linken Seite der Ableitung, die aber aufgrund der Definition des Flusses $\psi = vN$ gerade die zeitliche Änderung der lokalen Neutronendichte im System darstellt.

2.5.1 Verzögerte Neutronen

Die Gleichung 2-44 beschreibt den Neutronentransport exakt, wenn alle Spaltneutronen prompt, d.h. instantan nach der Kernspaltung freigesetzt werden. Tatsächlich wird aber ein geringer Anteil nicht spontan emittiert, sondern tritt als Folge des β -Zerfalls einer Reihe kurzlebiger Spaltprodukte, der sog. Mutterkerne oder Vorläufer (engl.: Precursor) auf (von

denen bislang etwa 260 identifiziert worden sind). Der Anteil β dieser sog. verzögerten Neutronen an der Gesamtzahl aller Spaltneutronen ist von Isotop zu Isotop unterschiedlich und variiert zwischen 0.2 und 1.7%. Eine Übersicht gibt Tabelle 2-2. Trotz der großen Anzahl der Vorläufer und deren individuell stark unterschiedlichen Zerfallszeiten hat es sich als ausreichend erwiesen, die verzögerten Neutronen in insgesamt sechs Gruppen mit jeweils charakteristischen Zerfallskonstanten λ_i ($i=1..6$) und Anteilen β_i an der Gesamtzahl zu gliedern. Für Uran-235 sind diese in Tabelle 2-3 angegeben.

U^{235}	$\beta = 6.83 \cdot 10^{-3}$
U^{238}	$\beta = 16.6 \cdot 10^{-3}$
Pu^{239}	$\beta = 2.23 \cdot 10^{-3}$
Pu^{241}	$\beta = 5.08 \cdot 10^{-3}$

Tabelle 2-2: Physikalischer Anteil der verzögerten Neutronen [BRA89]

β_i	0.0380	0.1918	0.1638	0.3431	0.1744	0.0890
λ_i (s^{-1})	0.0133	0.0325	0.1219	0.3169	0.9886	2.9544
τ_i (s)	75.2	30.8	8.2	3.16	1.01	0.339

Tabelle 2-3: Relative Anteile, Zerfallskonstanten und Lebensdauern der verzögerten Neutronen für U-235 [BRA89]

Es ist noch anzumerken, daß die verzögerten Neutronen im Mittel bei wesentlich geringeren Energien freigesetzt werden als die prompten Spaltneutronen. Jeder der sechs Gruppen kann ein individuelles Spaltspektrum zugeordnet werden. In Abbildung 2-7 sind diese Spektren für U-235 dargestellt, wobei die Daten aus der derzeit aktuellsten Quelle (ENDF/B-VI) übernommen wurden. Aufgrund der komplizierten Messung ist der Energiebereich in 50-keV-Intervalle eingeteilt worden, in denen die verzögerten Neutronen summarisch detektiert wurden [VIL92].

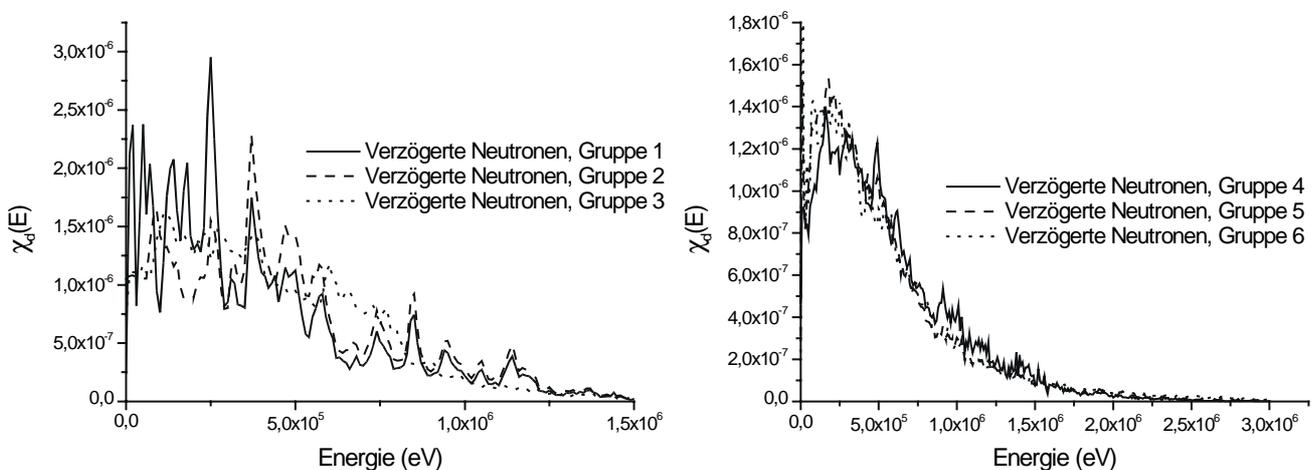


Abbildung 2-7: Energiespektren der sechs Gruppen verzögerter Neutronen

Trotz ihres betragsmäßig kleinen Anteils sind die verzögerten Neutronen von eminenter Bedeutung in der Reaktorkinetik. Tatsächlich ermöglicht erst ihr Vorhandensein die Regelung eines Kernreaktors auf technisch realisierbaren Zeitskalen.

Für die Einbindung der verzögerten Neutronen in die Transportgleichung muß zunächst der Spaltterm modifiziert werden:

$$\chi(E) \int_0^{\infty} dE' v \Sigma_f(\vec{r}, E') \phi(\vec{r}, E', t) \Rightarrow (1 - \beta) \chi_p(E) \int_0^{\infty} dE' v \Sigma_f(\vec{r}, E') \phi(\vec{r}, E', t). \quad (2-45)$$

Die Produktion der verzögerten Neutronen wird von der Zerfallsrate der Mutterkerne bestimmt. Gemäß den Gesetzen des radioaktiven Zerfalls ist diese gerade $\lambda_l C_l$, wobei $C_l(\vec{r}, t)$ jeweils die Konzentration der Mutterkerne der Gruppe l zum Zeitpunkt t darstellt. Die energetische Verteilung wird durch die verzögerten Neutronenspektren χ_d^l bestimmt (das prompte Spektrum wird zur besseren Unterscheidung im weiteren mit χ_p bezeichnet). Der Quellterm für die verzögerten Neutronen lautet dann:

$$q_{\text{verz. Neutronen}}(\vec{r}, E, t) = \sum_{l=1}^6 \chi_d^l(E) \lambda_l C_l(\vec{r}, t). \quad (2-46)$$

Durch das Einfügen dieses Terms in die Transportgleichung wird diese zusätzlich abhängig von der Konzentration der Mutterkerne, d.h. neben der Transportgleichung müssen auch Bestimmungsgleichungen für die sechs Vorläufergruppen aufgestellt werden, so daß insgesamt ein System von 7 partiellen Differentialgleichungen entsteht. Die 6 Gleichungen für die Vorläufer lauten:

$$\frac{\partial}{\partial t} C_l(\vec{r}, t) = -\lambda_l C_l(\vec{r}, t) + \underbrace{\beta_l \int_0^{\infty} dE' v \Sigma_f(\vec{r}, E') \phi(\vec{r}, E', t)}_{=\beta_l F}. \quad (2-47)$$

Diese Gleichungen sind ebenso lokale Bilanzgleichungen wie die Neutronentransportgleichung: Die zeitliche Änderung der Vorläuferkonzentration wird bestimmt durch den radioaktiven Zerfall der Mutterkerne sowie durch deren Neubildungsrate, die proportional zur Spaltdichte F mit den Anteilen β_l als Proportionalitätsfaktoren ist.

Die gesamte Transportgleichung mit allen Anteilen lautet nun:

$$\begin{aligned}
\underbrace{\frac{1}{v(E)} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t)}_{\text{Gesamtänderung}} &= \underbrace{-\vec{\Omega} \cdot \nabla \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t)}_{\text{Strömungsterm}} - \underbrace{\Sigma_t(\vec{r}, E) \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t)}_{\text{Stoßterm}} \\
&+ \underbrace{q_{\text{extern}}(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t)}_{\text{externe Quelle}} + \underbrace{\int dE' \int d\vec{\Omega}' \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E', t)}_{\text{Streuterm}} \\
&+ \underbrace{\chi_p(E)(1-\beta) \int dE' v \Sigma_f(\vec{r}, E') \phi(\vec{r}, E', t)}_{\text{prompter Spaltterm}} + \underbrace{\sum_{l=1}^6 \chi_d^l(E) \lambda_l C_l(\vec{r}, E)}_{\text{verzögerte Neutronen}}.
\end{aligned} \tag{2-48}$$

Es ist Aufgabe der Reaktorkinetik, das System aus Gleichung 2-48 und den Vorläufergleichungen 2-47 zu lösen. Im nächsten Abschnitt wird zunächst die Diskretisierung der Zeitvariablen erläutert.

2.5.2 Diskretisierung der Zeitvariablen

Die Lösung der Gleichung 2-48 ist für realistische nukleare Systeme mit einem erheblichen numerischen Aufwand verbunden. Erste Ansätze gehen zurück bis in die Mitte der siebziger Jahre [LAT71, HIL76], wurden damals aber aufgrund der eingeschränkten Rechenkapazitäten nicht weiter verfolgt und blieben auf eindimensionale, prompt kritische Probleme ohne Berücksichtigung der Vorläufer beschränkt. In einigen neueren Anwendungen [ALC98] konnte zwar gezeigt werden, daß die Diskrete-Ordinaten-Methode in der Lage ist, auch komplizierte dreidimensionale Probleme mit komplexer Geometrie zeitabhängig zu behandeln; betrachtet wurde jedoch nur die Entwicklung nicht-multiplizierender Systeme über sehr kurze Zeiträume, die aufgrund des Fehlens der äußeren Iterationen wesentlich leichter als kritische Systeme zu behandeln sind.

Um die zeitabhängige Transportgleichung 2-48 numerisch behandeln zu können, muß zunächst die Zeitableitung angemessen approximiert werden. Die einfachste und am häufigsten verwendete Näherung ist der folgende Differenzenquotient:

$$\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) \approx \frac{\psi(t + \Delta t) - \psi(t)}{v \Delta t} =: \frac{\psi^{(n+1)} - \psi^{(n)}}{v \Delta t}. \tag{2-49}$$

Die Zeitableitungen der Vorläufergleichungen werden analog diskretisiert:

$$\frac{\partial}{\partial t} C_l(\vec{r}, t) \approx \frac{C_l(t + \Delta t) - C_l(t)}{\Delta t} =: \frac{C_l^{(n+1)} - C_l^{(n)}}{\Delta t}. \tag{2-50}$$

Ferner ist festzulegen, auf welche Art die Transportgleichung zeitlich integriert werden soll. Im Folgenden wird vornehmlich die sog. implizite (Rückwärts-) Diskretisierung der Zeitvariablen

ben verwendet. Die für einen Zeitschritt zu lösende Transportgleichung lautet dann in Operatornotation (zunächst ohne verzögerte Neutronen):

$$\frac{1}{v \Delta t} (\psi^{(n+1)} - \psi^{(n)}) = (\Omega \cdot \nabla + \Sigma_t) \psi^{(n+1)} + \int dE' \int d\bar{\Omega}' \Sigma_s(E' \rightarrow E, \bar{\Omega} \cdot \bar{\Omega}') \psi^{(n+1)} + \chi(E) \int dE' v \Sigma_f(E') \phi^{(n+1)}. \quad (2-51)$$

Die zu ermittelnde Größe $\psi^{(n+1)}$ tritt also sowohl in der diskretisierten Zeitableitung als auch in den Transport-, Streu- und Spaltungsoperatoren auf, während die Lösung aus dem letzten Zeitschritt $\psi^{(n)}$ lediglich als bekannter zusätzlicher Quellterm auftaucht. Zur Lösung muß nun die gesamte rechte Seite invertiert werden, womit der Rechenaufwand zunächst vergleichbar mit der Lösung eines stationären k_{eff} - oder „Fixed-Source“-Problems mit spaltbarem Material ist (siehe Abschnitt 2.3). Wenn also bereits die Lösung des stationären Problems sehr aufwendig ist, so wird die Lösung des zeitabhängigen Systems mit u.U. mehreren tausend Zeitschritten ohne geeignete Beschleunigungsverfahren kaum tragbar sein. Aus diesem Grund ist das implizite Schema bislang in keinen der frei zugänglichen Diskrete-Ordinaten-Codes aufgenommen worden. Da diese Arbeit den Versuch macht, genau diese Lücke zu schließen, wird zunächst die vollständige Transportgleichung mit Vorläufern in impliziter Form hergeleitet.

Mit der folgenden Kurzschreibweise für Transport- und Streuoperator sowie die Spaltdichte F :

$$H^{LS} \psi = \bar{\Omega} \cdot \nabla \psi \quad H^S \psi = \int dE' \int d\bar{\Omega}' \Sigma_s(E' \rightarrow E, \bar{\Omega} \cdot \bar{\Omega}') \psi \quad F = \int dE' v \Sigma_f(E') \phi(E'), \quad (2-52)$$

lauten die implizit diskretisierte Transportgleichung sowie die Gleichungen für die Vorläuferkonzentrationen:

$$\frac{1}{v \Delta t} (\psi^{(n+1)} - \psi^{(n)}) = H^{LS} \psi^{(n+1)} + \Sigma_t \psi^{(n+1)} + H^S \psi^{(n+1)} + \chi_p(E) (1 - \beta) F^{(n+1)} + \sum_{l=1}^6 \chi_d^l(E) \lambda_l C_l^{(n+1)} \quad (2-53)$$

$$\frac{1}{\Delta t} (C_l^{(n+1)} - C_l^{(n)}) = -\lambda_l C_l^{(n+1)} + \beta_l F^{(n+1)}. \quad (2-54)$$

Auflösung der Vorläufergleichung 2-54 liefert:

$$C_l^{(n+1)} = \frac{1}{\Delta t} \gamma_l C_l^{(n)} + \gamma_l \beta_l F^{(n+1)} \quad \gamma_l = \left(\frac{1}{\Delta t} + \lambda_l \right)^{-1}. \quad (2-55)$$

Einsetzen dieser Beziehung in Gleichung 2-53 und Sortieren der verschiedenen Terme nach Zeitschritt n bzw. $n+1$ ergibt dann:

$$H^{LS}\psi^{(n+1)} + \underbrace{\left(\Sigma_t + \frac{1}{v\Delta t}\right)}_{\Sigma'_t} \psi^{(n+1)} + H^S \psi^{(n+1)} + \underbrace{\left[\chi_p(E)(1-\beta) + \sum_{l=1}^6 \chi_d^l \lambda_l \gamma_l \beta_l\right]}_{\chi'(E)} F^{(n+1)} = \underbrace{\sum_{l=1}^6 \chi_d^l \lambda_l \gamma_l \frac{1}{\Delta t} C_l^{(n)} + \frac{1}{v\Delta t} \psi^{(n)}}_{q'} \quad (2-56)$$

bzw.:

$$-\vec{\Omega} \cdot \nabla \psi + \Sigma'_t \psi + \int dE' \int d\Omega \Sigma_s(E' \rightarrow E, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \psi + \chi'(E) \int dE' v \Sigma_f(E') \phi = q'(\vec{r}, E, t). \quad (2-57)$$

Dies ist aber formal genau die Transportgleichung für ein Fixed-Source-Problem in einem multiplizierenden Medium. Hat man also einen Code zur Verfügung, der das stationäre Problem mit einem fest vorgegebenem Quellterm zu lösen vermag, so ist man auch in der Lage, einen Zeitschritt durchzuführen, vorausgesetzt man modifiziert totalen Wirkungsquerschnitt und Spaltspektrum gemäß:

$$\Sigma'_t = \Sigma_t + \frac{1}{v\Delta t} \quad \chi'(E) = (1-\beta)\chi_p(E) + \sum_{l=1}^6 \chi_d^l(E) \lambda_l \gamma_l \beta_l \quad (2-58)$$

und definiert den „Fixed-Source“-Term mit den aus dem vorigen Zeitschritt bereits bekannten Größen $\psi^{(n)}$ und $C_l^{(n)}$:

$$q' = \frac{1}{v\Delta t} \psi^{(n)} + \sum_{l=1}^6 \chi_d^l \lambda_l \frac{1}{\Delta t} \gamma_l C_l^{(n)}. \quad (2-59)$$

Mit den neuen Flüssen kann dann auch die Spaltdichte zum Zeitpunkt $n+1$ und daraus die entsprechenden Vorläuferkonzentrationen bestimmt werden:

$$F^{(n+1)} = \int dE' v \Sigma_f(E') \phi^{(n+1)}(\vec{r}, E') \quad \Rightarrow \quad C_l^{(n+1)} = \frac{1}{\Delta t} \gamma_l C_l^{(n)} + \gamma_l \beta_l F^{(n+1)}. \quad (2-60)$$

Es ist nun ein Leichtes, die zeitdiskretisierte Transportgleichung in die in Abschnitt 2.4 erläuterte Energiegruppendarstellung zu bringen. Definiert man die inversen Gruppengeschwindigkeiten v_g sowie die verzögerten Gruppenspaltspektren über:

$$\frac{1}{v_g} = \frac{\int dE' \frac{1}{v(E')} \phi(\vec{r}, E')}{\phi_g(\vec{r})} \quad \chi_{dg}^l = \int dE' \chi_d^l(E') \quad (2-61)$$

so lautet die Transportgleichung in Energiegruppenform:

$$\left(-\vec{\Omega} \cdot \nabla + \Sigma_g^t\right) \psi_g^{(n+1)}(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \sum_{g'=1}^G \int d\vec{\Omega}' \Sigma_s^{gg'}(\vec{\Omega}, \vec{\Omega}') \psi_{g'}^{(n+1)}(\vec{r}, \vec{\Omega}') + \chi_g' \sum_{g'=1}^G v \Sigma_f^{g'} \phi_{g'}^{(n+1)}(\vec{r}) + q_g'^{(n)}(\vec{r}, \vec{\Omega}) \quad (2-62)$$

mit den Abkürzungen (der Term $q^{(n)}$ signalisiert, daß in dieser Größe nur die aus dem letzten Zeitschritt bekannten Flüsse/Vorläuferkonzentrationen auftauchen):

$$\Sigma_t'^g = \Sigma_t^g + \frac{1}{v_g \Delta t} \quad \chi_g' = (1 - \beta) \chi_p^g + \sum_{l=1}^6 \chi_{dg}^l \lambda_l \gamma_l \beta_l \quad q_g'^{(n)} = \frac{1}{v_g \Delta t} \psi_g^{(n)} + \sum_{l=1}^6 \chi_{dg}^l \lambda_l \frac{1}{\Delta t} \gamma_l C_l^{(n)}(\vec{r}). \quad (2-63)$$

Auch hier ist die formale Ähnlichkeit zur stationären Gruppentransportgleichung offensichtlich. Sämtliche Iterationsverfahren, wie in Abschnitt 2.4 besprochen, können also auch auf die implizit zeitdiskretisierte Form der Transportgleichung angewendet werden. Zur Berechnung eines einzigen Zeitschrittes ist es also ggf. notwendig, in jeder Energiegruppe einige „Iterations on the Scattering Source“ sowie mehrere Power-Iterationen über das Gesamtsystem durchzuführen. Obwohl der Aufwand also zunächst derselbe wie für ein stationäres Problem ist, wird später gezeigt werden, daß aus der Flußverteilung des Zeitschrittes n eine recht gute Abschätzung der Lösung des nächsten Zeitschrittes $n+1$ gewonnen werden kann, so daß die Konvergenz entscheidend verbessert wird und mitunter nur noch eine einzige äußere Iteration und sehr wenige innere Iterationen pro Gruppe notwendig sind. Man erreicht so eine Beschleunigung von häufig mehr als einer Größenordnung gegenüber stationären Problemen.

2.5.3 Alternative Verfahren zur Zeitdiskretisierung

Neben der im letzten Abschnitt ausführlich erläuterten impliziten Methode existieren in der Literatur weitere Verfahren, die nun kurz diskutiert werden sollen. Zur Vereinfachung betrachte man folgende einfache Modellgleichung mit einem zunächst beliebigen Operator H :

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi \quad \Rightarrow \quad \psi(t + \Delta t) = \exp(H\Delta t) \psi(t) \approx \left(\mathbf{1} + H\Delta t + \frac{1}{2!} (\Delta t)^2 H^2 + \dots \right) \psi(t). \quad (2-64)$$

Die Lösung von Gleichung 2-64 kann also formal als wiederholte Anwendung des Zeitentwicklungsoperators $\exp(H\Delta t)$ auf $\psi(t)$ dargestellt werden [VAR65]; da die höheren Potenzen des Operators H jedoch i.allg. nicht zur Verfügung stehen, ist dieses Schema numerisch nur schwer umsetzbar. Es ist daher zu fordern, daß konkrete Zeitdiskretisierungsschemata zumindest die Reihenentwicklung in Gleichung 2-64 bis zu einer möglichst hohen Ordnung $O(\Delta t)$ wiedergeben.

Die allgemeine Form eines Einschritt-Zeitintegrationsverfahrens lautet mit dem Differenzenquotienten (Gleichung 2-49):

$$\frac{\psi^{(n+1)} - \psi^{(n)}}{\Delta t} = \alpha H \psi^{(n+1)} + (1 - \alpha) H \psi^{(n)} \quad \alpha \in [0,1]. \quad (2-65)$$

Diese Gleichung enthält folgende Spezialfälle (angegeben sind jeweils die Differenzenformulierung, die Zeitentwicklungsoperatoren und ggf. deren Reihenentwicklung):

- Vorwärtsdifferenz oder explizites Verfahren, $\alpha = 0$:

$$\frac{\psi^{(n+1)} - \psi^{(n)}}{\Delta t} = H \psi^{(n)} \quad \Rightarrow \quad \psi^{(n+1)} = (\mathbf{1} + \Delta t H) \psi^{(n)}.$$

- Rückwärtsdifferenz oder implizites Verfahren, $\alpha = 1$:

$$\frac{\psi^{(n+1)} - \psi^{(n)}}{\Delta t} = H \psi^{(n+1)} \quad \Rightarrow \quad \psi^{(n+1)} = (\mathbf{1} - \Delta t H)^{-1} \psi^{(n)}$$

$$\psi^{(n+1)} = \left(\mathbf{1} + \Delta t H + \Delta t^2 H^2 + O(\Delta t^3) \right) \psi^{(n)}.$$

- Zentrale Differenz, $\alpha = 0.5$:

$$\frac{\psi^{(n+1)} - \psi^{(n)}}{\Delta t} = \frac{1}{2} H \psi^{(n+1)} + \frac{1}{2} H \psi^{(n)} \quad \Rightarrow \quad \psi^{(n+1)} = \left(\mathbf{1} - \frac{1}{2} \Delta t H \right)^{-1} \left(\mathbf{1} + \frac{1}{2} \Delta t H \right) \psi^{(n)}$$

$$\psi^{(n+1)} = \left(\mathbf{1} + \Delta t H + \frac{1}{2} \Delta t^2 H^2 + O(\Delta t^3) \right) \psi^{(n)}.$$

Im expliziten Verfahren muß lediglich der Operator $\mathbf{1} + \Delta t H$ auf die Lösung des letzten Zeitschrittes $\psi^{(n)}$ angewandt werden, um $\psi^{(n+1)}$ zu erhalten. Dies ist in der numerischen Anwendung gleichbedeutend mit einer Matrizenmultiplikation. Für die implizite und die zentrale

Zeitdiskretisierung sind hingegen eine Inversion bzw. eine Inversion mit einer vorhergehenden Multiplikation notwendig, um in der Zeit voranzuschreiten. Der Rechenaufwand für diese Verfahren wird also generell wesentlich größer als für den expliziten Fall sein. Vergleicht man die Reihenentwicklung der jeweiligen Zeitentwicklungsoperatoren mit der des „exakten“ Operators, Gleichung 2-64, so fällt außerdem auf, daß explizites und implizites Verfahren nur bis zur Ordnung $O(\Delta t)$ korrekt sind, während die Zentralfdifferenz bis zur Ordnung $O(\Delta t^2)$ mit 2-64 übereinstimmt. Das Zentrale-Differenzen-Verfahren wird also im Allgemeinen bei gleicher Genauigkeit größere Zeitschritte erlauben als explizites und implizites Verfahren. Eine Variante der zentralen Differenz ist das sogenannte „Diamond-Differencing“-Schema, das bereits versuchsweise in einem zeitabhängigen Diskrete-Ordinaten-Code eingesetzt wurde [ALC98, BAK96]. Man führt zunächst nur einen halben impliziten Zeitschritt durch:

$$\frac{\psi^{(n+1/2)} - \psi^{(n)}}{\Delta t/2} = H\psi^{(n+1/2)} \quad \Rightarrow \quad \psi^{(n+1/2)} = \left(\mathbf{1} - \frac{1}{2} \Delta t H \right)^{-1} \psi^{(n)}, \quad (2-66)$$

und extrapoliert dann gemäß der sog. „Diamond-Differencing“-Relation zum vollen Zeitschritt:

$$\begin{aligned} \psi^{(n+1/2)} &= \frac{1}{2} (\psi^{(n+1)} + \psi^{(n)}) & \psi^{(n+1)} &= 2\psi^{(n+1/2)} - \psi^{(n)} \quad \Rightarrow \\ \psi^{(n+1)} &= \left(\frac{2}{\mathbf{1} - 1/2 \cdot \Delta t H} - \mathbf{1} \right) \psi^{(n)} = \left(\frac{\mathbf{1} + 1/2 \cdot \Delta t H}{\mathbf{1} - 1/2 \cdot \Delta t H} \right) \psi^{(n)} = \left(\mathbf{1} + \Delta t H + \frac{1}{2} \Delta t^2 H^2 + O(\Delta t^3) \right) \psi^{(n)}. \end{aligned} \quad (2-67)$$

Auch diese Rechenvorschrift ist korrekt bis zur Ordnung $O(\Delta t^2)$ und hat gegenüber der Zentrale-Differenzen-Formulierung den Vorzug, daß die Multiplikation des Flusses $\psi^{(n)}$ mit dem Operator $\mathbf{1} + 1/2 \Delta t H$ entfällt; stattdessen muß nur die Beziehung 2-67 angewandt werden, die keine Matrizenmultiplikation erfordert. Der Aufwand ist also nur geringfügig höher als für das implizite Verfahren.

Alle oben genannten Verfahren erlauben es, durch Wahl entsprechend kleiner Zeitschritte die Genauigkeit beliebig zu erhöhen. Oft ist jedoch ein anderes Kriterium wesentlich restriktiver: die Stabilität des gewählten Verfahrens. In der Stabilitätsanalyse wird die Entwicklung des Fehlers pro Zeitschritt betrachtet und dessen Fortpflanzung über einen längeren Zeitraum untersucht. Bleibt der Fehler auch nach beliebig vielen Zeitschritten unterhalb einer vorgegebenen oberen Schranke, so ist das Verfahren stabil; wird hingegen der Fehler in jedem Zeitschritt um einen „Verstärkungsfaktor“ >1 erhöht, so ist das Verfahren instabil. Die Literatur zur Stabilitätsanalyse ist sehr umfangreich [HAG81, VAR65, AXE96]; es sei daher nur eins ihrer zentralen Resultate zitiert:

Ist der Operator A eine Approximation an den Zeitentwicklungsoperator $\exp(H\Delta t)$, so ist das entsprechende Zeitschrittverfahren $\psi^{(n+1)} = A\psi^{(n)}$ dann stabil, wenn für den größten Eigenwert λ von A (dem sog. spektralen Radius $\rho(A)$), $|\lambda| \leq 1$ gilt. Gilt sogar $|\lambda| < 1$, ist das Verfahren unbedingt stabil, d.h. stabil für beliebige Δt .

Betrachtet man noch einmal die obigen Zeitdiskretisierungen, so gilt für das implizite Verfahren (die Eigenwerte von H seien λ_i):

$$\psi^{(n+1)} = (\mathbf{1} - \Delta t H)^{-1} \psi^{(n)} \quad A = (\mathbf{1} - \Delta t H)^{-1} \quad \Rightarrow \quad \rho(A) = \frac{1}{1 - \Delta t \lambda_i} < 1 \quad \forall \Delta t, \lambda_i, \quad (2-68)$$

ist also unbedingt stabil; ähnliches gilt auch für die zentralen Differenzen sowie für das „Diamond-Differencing“. Für das explizite Verfahren findet man hingegen:

$$\psi^{(n+1)} = (\mathbf{1} + \Delta t H) \psi^{(n)} \quad A = (\mathbf{1} + \Delta t H) \quad \Rightarrow \quad \rho(A) = |1 + \Delta t \lambda_i| < 1 \quad \text{für} \quad \Delta t < \frac{2}{\lambda_{\max}}. \quad (2-69)$$

Hier ist also die maximal zulässige Zeitschrittweite u.U. durch den größten Eigenwert von H empfindlich eingeschränkt. Dies gilt insbesondere für steife Systeme, zu denen auch das Gleichungssystem von Neutronentransportgleichung und Vorläufergleichungen gehört.

Die Erfahrung zeigt, daß die explizite Diskretisierung in vielen Fällen die maximale Zeitschrittlänge so stark einschränkt, daß der Vorteil des geringeren numerischen Aufwands im allgemeinen mehr als zunichte gemacht wird. In fast allen Bereichen der numerischen Mathematik wird daher von unbedingt stabilen impliziten oder höheren (wie den Zentralen Differenzen) Verfahren Gebrauch gemacht. In dieser Arbeit wurden sowohl das im Abschnitt 2.5.2 bereits erläuterte implizite als auch das „Diamond-Differencing“-Verfahren für die zeitabhängigen Transportrechnungen implementiert.

Ein weiteres Verfahren, auf das speziell in der Reaktorphysik häufig zurückgegriffen wird, ist die sogenannte quasistationäre Näherung, die i.allg. wesentlich weniger rechenintensiv als das implizite Berechnungsschema ist und auf der Annahme basiert, daß sich während einer Transiente zwar die Amplituden von Fluß und Leistungverteilung rapide ändern können, das Flußprofil selbst aber zeitlich weitgehend konstant bleibt, d.h. nur langsam variiert. Dann reicht es aus, die aufwendige iterative Lösung der Transportgleichung nur in großen und zeitlich unregelmäßigen Abständen durchzuführen. Dazwischen wird die Entwicklung der Amplitudenfunktion durch Lösen der sog. verallgemeinerten punktkinetischen Gleichungen bestimmt, die durch ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen dargestellt werden und daher mit geringem numerischen Aufwand lösbar sind. Das quasistationäre Verfahren und die Punktkinetik als zwei der wichtigsten Näherungsverfahren der Reaktordynamik werden in Anhang E ausführlich diskutiert; im Zusammenhang mit dem FRM-II wird die Punktkinetik

außerdem zu Vergleichszwecken herangezogen. Auf die Implementierung einer quasistationären Methode wurde in dieser Arbeit verzichtet.

2.6 Die Diffusionsnäherung

In den meisten Reaktoranwendungen ist die detaillierte Winkelabhängigkeit der Neutronenflüsse nur von untergeordneter Bedeutung. Man ist vielmehr interessiert an winkelintegrierten Größen wie den skalaren Flüssen und Neutronenströmen:

$$\phi(\vec{r}, E, t) = \int_{4\pi} d\vec{\Omega} \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) \quad \vec{J}(\vec{r}, E, t) = \int_{4\pi} d\vec{\Omega} \vec{\Omega} \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t). \quad (2-70)$$

Es liegt daher nahe, die Transportgleichung über alle Raumwinkel zu integrieren. Diese Vorgehensweise führt zum in der Reaktorphysik vielleicht wichtigsten Näherungsverfahren, der Diffusionsnäherung. Führt man die Integration über $\int d\vec{\Omega}$ aus, so ergibt sich mit obigen Definitionen:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \underbrace{\nabla \cdot \int d\vec{\Omega} \vec{\Omega} \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)}_{=\nabla \cdot \vec{J}(\vec{r}, t)} + \Sigma_t \phi &= \int dE' \underbrace{\int d\vec{\Omega} \Sigma_s(E' \rightarrow E, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}')}_{=\Sigma_{s0}(E' \rightarrow E)} \int d\vec{\Omega}' \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') \\ + \chi(E) \int dE' \nu \Sigma_f(E') \phi(E') & \\ \Leftrightarrow \frac{1}{v} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} + \Sigma_t \phi &= \int dE' \Sigma_{s0}(E' \rightarrow E) \phi(\vec{r}, E') + \chi(E) \int dE' \nu \Sigma_f(E') \phi(\vec{r}, E'). \end{aligned} \quad (2-71)$$

Eingeführt wurden der Gradient des Neutronenstroms \vec{J} und der führende Term der Legendre-Entwicklung des differentiellen Streuquerschnitts. Die Gleichung hat sich zwar wesentlich vereinfacht, ist aber aufgrund der Anwesenheit der unabhängigen Variable \vec{J} nun unterbestimmt.

Es ist also notwendig, eine zweite Gleichung zu generieren, z.B. durch Integration über $\int d\vec{\Omega} \vec{\Omega}$. Dies liefert:

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \vec{J}}{\partial t} + \nabla \cdot \int d\vec{\Omega} (\vec{\Omega} \vec{\Omega}) \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) + \Sigma_t \vec{J} = \int dE' \Sigma_{s1}(E' \rightarrow E) \vec{J}(\vec{r}, E, t) \quad (2-72)$$

mit dem dyadischen Produkt $(\vec{\Omega} \vec{\Omega})$ und dem zweiten Term der Legendre-Entwicklung des differentiellen Wirkungsquerschnitts, Σ_{s1} . Der Spaltterm liefert aufgrund der isotropen Spaltverteilung keinen Beitrag. Offensichtlich ist durch diese Integration zunächst nichts gewonnen, da der zweite Term der linken Seite eine neue unbekannte Größe enthält. An dieser

Stelle wird die entscheidende Näherung der Diffusionstheorie gemacht: Man unterstellt, daß die Winkelflüsse nur linear anisotrop in $\vec{\Omega}$ sind. Dann kann z.B. die Entwicklung in den Flußmomenten nach dem ersten Term abgebrochen werden:

$$\psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) \approx \sum_{l=0}^1 \sum_{m=-l}^l \phi_l^m(\vec{r}, E, t) Y_{lm}(\vec{\Omega}) = \phi(\vec{r}, E, t) + 3\vec{J}(\vec{r}, E, t) \cdot \vec{\Omega}. \quad (2-73)$$

Hier wurde zunächst Gebrauch davon gemacht, daß das führende Flußmoment nichts anderes als der skalare Fluß ϕ selbst ist. Die Beziehung zwischen Neutronenstrom \vec{J} und den höheren Flußmomenten kann mit der Definition des Stroms, Gleichung 2-70, den Eigenschaften der Sphärischen Harmonischen und den Transformationsvorschriften von Winkelflüssen und Flußmomenten (Gleichungen 2-10 und 2-11) leicht überprüft werden. Mit dieser grundsätzlichen Annahme ergibt sich schließlich:

$$\nabla \cdot \int d\vec{\Omega} (\vec{\Omega} \vec{\Omega}) (\phi + 3\vec{J} \cdot \vec{\Omega}) = \frac{1}{3} \nabla \phi(\vec{r}, t). \quad (2-74)$$

Daraus erhält man das folgende gekoppelte Gleichungssystem, die sog. P_1 – Gleichungen:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} + \Sigma_t \phi &= \int dE' \Sigma_{s0}(E' \rightarrow E) \phi(\vec{r}, E') + \chi(E) \int dE' \nu \Sigma_f(E') \phi(\vec{r}, E') \\ \frac{1}{v} \frac{\partial \vec{J}}{\partial t} + \frac{1}{3} \nabla \phi + \Sigma_t \vec{J} &= \int dE' \Sigma_{s1}(E' \rightarrow E) \vec{J}(\vec{r}, E, t). \end{aligned} \quad (2-75)$$

Der Name rührt daher, daß die Entwicklung des Flusses nach der linearen, ersten Ordnung abgebrochen wurde. Außerdem wird auch die Anisotropie der Streuquerschnitte nur bis zur ersten Ordnung der Legendre-Entwicklung berücksichtigt. Um dieses System weiter zu vereinfachen, kann man zudem die Zeitableitung des Neutronenstroms vernachlässigen, da i.allg. gilt, daß [DUD76]:

$$\frac{1}{|\vec{J}|} \frac{\partial \vec{J}}{\partial t} \ll v \Sigma_t. \quad (2-76)$$

Die Gleichungen 2-75 enthalten nach wie vor zwei Unbekannte, ϕ und \vec{J} . Um eine Beziehung zwischen diesen beiden Größen herzustellen, stellt man zunächst die zweite Gleichung um:

$$\vec{J}(\vec{r}, t) = -D(\vec{r}, E) \nabla \phi(\vec{r}, t) \quad D(\vec{r}, E) = \frac{1}{3} \left[\Sigma_t(\vec{r}, E) - \frac{\int dE' \Sigma_{s1}(E' \rightarrow E) J_i(\vec{r}, E, t)}{J_i(\vec{r}, E, t)} \right]^{-1} \quad i = x, y, z. \quad (2-77)$$

Hier wurde formal ein Diffusionskoeffizient D eingeführt; in dieser Form ist Gleichung 2-77 in vielen Bereichen der Physik als Fick'sches Gesetz bekannt und stellt die gewünschte Verbindung von Flüssen und Strömen her. Allerdings ist die Definition von D zunächst rein formal, da die Flußkomponenten J_i selbst unter dem Integral auftauchen; dadurch wird der Diffusionskoeffizient außerdem richtungsabhängig. Zur Auswertung von Gleichung 2-77 wird man i.allg. darauf angewiesen sein, eindimensionale Vorausrechnungen durchzuführen, die das interessierende System approximieren, um dann mit den so ermittelten angenäherten Strömen den Diffusionskoeffizienten zu bestimmen. Diese Verfahren muß ggf. iterativ erfolgen, bis die Ströme selbstkonsistent mit dem Koeffizienten D vorliegen. Eine Diskussion zur Behandlung der Richtungsabhängigkeit findet man z.B. in [HEN75].

Ist die Streuung jedoch im Laborsystem isotrop (keine gute Näherung, wie bereits in Abschnitt 2.2.2 festgestellt), dann reduziert sich D auf:

$$D(\vec{r}, E) = \frac{1}{3\Sigma_t(\vec{r}, E)}. \quad (2-78)$$

Weniger restriktiv ist die häufig gemachte Annahme, daß die anisotropen Anteile des Streuquerschnitts nur zur elastischen Streuung beitragen:

$$\Sigma_{s1}(E' \rightarrow E) = \Sigma_{s1}(E) \delta(E - E') \quad \Rightarrow \quad D(\vec{r}, E) = \frac{1}{3(\Sigma_t(\vec{r}, E) - \Sigma_{s1}(\vec{r}, E))} =: \frac{1}{3\Sigma_{tr}(\vec{r}, E)}. \quad (2-79)$$

Hier wurde der sog. Transportquerschnitt Σ_{tr} eingeführt. Dies ist die gängigste Form des Diffusionskoeffizienten.

Führt man nun die Fick'sche Beziehung 2-77 in die P_1 -Gleichungen ein, so ergibt sich schließlich die endgültige Form der Neutronendifusionsgleichung, aus der die Ströme J_i eliminiert worden sind:

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla D(\vec{r}, E) \nabla \phi(\vec{r}, t) + \Sigma_t \phi = \int dE' \Sigma_{s0}(E' \rightarrow E) \phi(\vec{r}, E') + \chi(E) \int dE' v \Sigma_f(E') \phi(\vec{r}, E'). \quad (2-80)$$

Man beachte, daß diese Gleichung im Gegensatz zur Transportgleichung eine parabolische Differentialgleichung zweiten Grades ist. Sie wird i.allg. wesentlich weniger Rechenzeit beanspruchen, da die Winkelabhängigkeit ausintegriert wurde. Die wesentliche eingeflossene Näherung ist die Annahme schwacher Anisotropie der Flüsse. Anisotropien werden aber immer dort auftauchen, wo starke Gradienten in der winkelabhängigen Flußverteilung entstehen, also faktisch an jeder Materialgrenzfläche, insbesondere aber in der Nähe von Voidregionen oder starken Absorbern sowie von räumlich eng lokalisierten Neutronenquellen. Dies bedeutet für große homogene Systeme keine wesentliche Einschränkung, für den FRM-II mit seiner komplizierten geometrischen Struktur aber u.U., daß die Diffusionsnäherung größere Abweichungen liefert.

Ohne weitere Diskussion wird noch die Energiegruppenform der stationären Diffusionsgleichung für kritische Systeme angegeben, deren Herleitung vollkommen analog zur Transportgleichung verläuft.

$$\nabla D_g(\vec{r}) \nabla \phi_g(\vec{r}) + \underbrace{\left(\Sigma_t^g(\vec{r}) - \Sigma_s^{gg}(\vec{r}) \right)}_{=:\Sigma_r^g(\vec{r})} \phi_g(\vec{r}) = \sum_{g' \neq g} \Sigma_s^{gg'}(\vec{r}) \phi_{g'}(\vec{r}) + \frac{1}{k_{\text{eff}}} \chi_g \sum_{g'=1}^G v \Sigma_f^{g'}(\vec{r}) \phi_{g'}(\vec{r}). \quad (2-81)$$

Es ist üblich, den totalen Querschnitt sowie den Selbststreuquerschnitt Σ_s^{gg} zum sogenannten „Removal“-Querschnitt Σ_r^{gg} zusammenzufassen. Schreibt man analog zur Transportgleichung:

$$\sum_{g'=1}^G \underbrace{\left(H_{gg}^{LS} \delta_{gg'} - H_{gg'}^S \right)}_{=:H_{gg'}} \psi_{g'} = \frac{1}{k_{\text{eff}}} \chi_g \underbrace{\sum_{g'=1}^G v \Sigma_f^{g'} \phi_{g'}}_{=:F} = \frac{1}{k_{\text{eff}}} \chi_g F \quad (2-82)$$

mit:

$$H_{gg'} = \nabla D_g(\vec{r}) \nabla \phi_g(\vec{r}) + \Sigma_r^g(\vec{r}) \quad \text{für } g = g' \quad \quad H_{gg'} = \Sigma_s^{gg'}(\vec{r}) \phi_{g'}(\vec{r}) \quad \text{für } g \neq g',$$

so ergibt sich formal dieselbe Matrixgleichung wie für die Transporttheorie:

$$\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdot & H_{1g} & \cdot & H_{1G} \\ H_{21} & H_{22} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ H_{g1} & \cdot & \cdot & H_{gg} & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ H_{G1} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & H_{GG} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \phi_G \\ \cdot \\ \phi_G \end{pmatrix} = \frac{1}{k_{\text{eff}}} \begin{pmatrix} \chi_1 F \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \chi_G F \end{pmatrix}. \quad (2-83)$$

Die für jede Energiegruppe zu lösenden „Within-Group“-Gleichungen mit dem jeweils bekannten Gruppenquellterm S_g lauten nun:

$$\nabla D_g(\vec{r}) \nabla \phi_g(\vec{r}) + \Sigma_r^g(\vec{r}) \phi_g(\vec{r}) = S_g(\vec{r}) \quad \quad S_g(\vec{r}) = \sum_{g' \neq g} \Sigma_s^{gg'}(\vec{r}) \phi_{g'}(\vec{r}) + \frac{1}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'=1}^G v \Sigma_f^{g'} \phi_{g'}(\vec{r}). \quad (2-84)$$

Vergleicht man mit der analogen Gleichung der Transporttheorie:

$$\left(\vec{\Omega} \cdot \nabla + \Sigma_t^g \right) \psi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \Sigma_s^{gg}(\vec{r}, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}') + S_g(\vec{r}, \vec{\Omega}), \quad (2-85)$$

so entfällt bei der Diffusionsgleichung offensichtlich der integrale Streuterm; eine „Iteration on the Scattering Source“ ist daher nicht notwendig. Da allerdings die Lösung der räumlich dis-

ketisierten „Within-Group“-Gleichungen vorwiegend durch iterative numerische Verfahren erfolgt, spricht man auch bei der Diffusionsnäherung von inneren Iterationen.

Die Vorgehensweise bei den äußeren Iterationen ist hingegen vollkommen identisch; auch hier findet die Power-Iterationsmethode Anwendung. Der in Abschnitt 2.4 dargestellte Algorithmus kann also unverändert übernommen werden.

Die implizite Diskretisierung der zeitabhängigen Diffusionsgleichung führt schließlich auf die folgenden, den Ausführungen in Abschnitt 2.5 sehr ähnlichen Ausdrücken:

$$\left(\nabla D_g(\vec{r})\nabla + \Sigma_g^{r'}\right)\phi_g^{(n+1)}(\vec{r}) = \sum_{g'=1}^G \Sigma_s^{gg'}(\vec{r})\phi_{g'}(\vec{r}) + \chi_g' \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_f^{g'} \phi_{g'}^{(n+1)}(\vec{r}) + q_g'^{(n)}(\vec{r}, \vec{\Omega}) \quad (2-86)$$

mit:

$$\Sigma_r'^g = \Sigma_r^g + \frac{1}{v_g \Delta t} \quad \chi_g' = (1 - \beta)\chi_p^g + \sum_{l=1}^6 \chi_{dg}^l \lambda_l \gamma_l \beta_l \quad q_g'^{(n)} = \frac{1}{v_g \Delta t} \phi_g^{(n)} + \sum_{l=1}^6 \chi_{dg}^l \lambda_l \frac{1}{\Delta t} \gamma_l C_l^{(n)}(\vec{r}).$$

Die Behandlung der Vorläufergleichungen, die keine Winkelabhängigkeit enthalten, ist in beiden Fällen identisch (siehe Gleichung 2-54).

Ein wesentlicher Schwachpunkt der Diffusionstheorie ist die Darstellung von Randbedingungen. Die Vakuumrandbedingung der Transporttheorie:

$$\psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) = 0 \quad \vec{\Omega} \cdot \vec{n} < 0, \quad \vec{r} \in \Gamma$$

kann durch die naheliegende Beziehung $\phi = 0$ für $\vec{r} \in \Gamma$ offensichtlich nicht korrekt wiedergegeben werden; dann würde nämlich gelten $\psi = 0$ für $\vec{\Omega} \cdot \vec{n} \leq 0 \wedge \vec{\Omega} \cdot \vec{n} > 0$. Man begnügt sich daher i.allg. mit Approximationen, die versuchen, den Fluß bis in das Vakuum zu extrapolieren (zur Definition der Extrapolationslänge d siehe z.B. [GRE98b, DUD76, BEL85]) und daraus Werte für ϕ auf dem Rand Γ abzuleiten. Die allgemeinste Form der Diffusionsrandbedingungen lautet:

$$\alpha \frac{\partial \phi(\vec{r})}{\partial n} + \beta \phi(\vec{r}) = g(\vec{r}) \quad \vec{r} \in \Gamma \quad (2-87)$$

mit den Spezialfällen:

$$\alpha = 1 \quad \beta = \frac{1}{d} \quad g = 0 \quad \text{Vakuum mit } d = \frac{0.71}{\Sigma_{tr}}, \quad (2-88)$$

$$\alpha = 1 \quad \beta = 0 \quad g = 0 \quad \text{reflektierend.}$$

2.7 Rückwirkungsmechanismen

In den letzten Abschnitten wurden lediglich die rein neutronenkinetischen Aspekte der Transportgleichung behandelt. Die Materialeigenschaften des nuklearen Systems wurden durch räumlich variable, aber zeitlich konstante Wirkungsquerschnitte erfaßt. Eine solche Beschreibung ist zulässig für nukleare Systeme, in denen die neutronenkinetischen Vorgänge keinerlei Einfluß ausüben auf die Eigenschaften des umgebenden Mediums, z.B. in Nulleistungsreaktoren oder generell in Systemen mit geringer Neutronenflußdichte. In Systemen mit hoher Leistungsdichte wird man hingegen stets das Zusammenwirken von Neutronenkinetik und thermohydraulischen Prozessen beobachten, dessen Untersuchung Gegenstand der Reaktordynamik ist.

Da die makroskopischen Wirkungsquerschnitte Σ definiert sind durch das Produkt aus lokaler Nuklidichte n und den mikroskopischen Wirkungsquerschnitten σ ,

$$\Sigma_x(\vec{r}, E, T) = n(\vec{r}) \sigma(E, T), \quad (2-89)$$

kann eine Änderung der Neutronenbilanz sowohl hervorgerufen werden durch eine reine Dichteänderung des Mediums als auch durch Änderung der Temperatur T , die sich direkt auf die mikroskopischen Querschnitte auswirkt. In Leistungs- und Forschungsreaktoren spielen die folgenden Effekte eine wichtige Rolle:

- Die Verringerung der Kühlmittel- bzw. Moderatorichte verschlechtert in Leichtwasserreaktoren einerseits die Moderation schneller Neutronen, andererseits werden aber auch weniger thermische Neutronen im Kühlwasser absorbiert (Dichteeffekt).
- Die Neutronen im System haben die Tendenz, mit den Atomkernen der Umgebung, deren Geschwindigkeiten und Energien durch eine Maxwell'sche Verteilung beschrieben wird, ins thermische Gleichgewicht zu gelangen. Eine Erhöhung der Moderatortemperatur wird also auch das Energiespektrum insbesondere der thermischen Neutronen zu höheren Energien verschieben (Spektraleffekt); dieses wirkt sich dann wiederum auf die Spaltdichte aus.
- Eine Änderung der Materialtemperaturen verändert die Breite der Resonanzen des Absorptionsquerschnitts durch den Dopplereffekt; dieser ist besonders ausgeprägt bei schweren Nukliden wie U-238, die eine Vielzahl von Resonanzen vor allem im epithermischen Bereich besitzen.

Ein Leistungsreaktor ist also ein intern rückgekoppeltes System: Die thermohydraulischen Zustandsgrößen beeinflussen über die makroskopischen Wirkungsquerschnitte die Neutronenflüsse und damit die Spalt- und Leistungsdichte im Reaktor, die wiederum eine Änderung der Kühlmittel- und Brennstofftemperaturen bzw. Dichten zur Folge hat.

Bei der Bewertung der Sicherheit eines Reaktors ist strengstens darauf zu achten, daß das System unter o.g. Gesichtspunkten stabil ist. Tritt z.B. während des Betriebs ein Reaktivitätsstörfall mit einer anschließenden Leistungsexkursion auf, so sollte der Reaktor durch die angeführten Rückwirkungsmechanismen einer Leistungserhöhung entgegenwirken, so daß die Rückkehr in einen stationären Zustand bzw. eine schnelle Abschaltung auf technisch realisierbaren Zeitskalen möglich ist.

Die punktkinetische Vorgehensweise zur Beschreibung der Rückwirkungsmechanismen bei transienten Vorgängen ist die Definition von Reaktivitätskoeffizienten, die die differentielle Änderung der Reaktivität ρ in Abhängigkeit von den genannten Parametern angeben:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial \gamma_K} & \quad \text{Kühlmitteldichte,} \\ \frac{\partial \rho}{\partial T_K} & \quad \text{Kühlmitteltemperatur,} \\ \frac{\partial \rho}{\partial T_F} & \quad \text{Brennstofftemperatur.} \end{aligned} \quad (2-90)$$

Diese Koeffizienten werden i.allg. aus stationären Auslegungsrechnungen gewonnen, bei denen zunächst der thermohydraulische Zustand des Reaktors bestimmt wird. Ausgehend von den entsprechenden Parametern werden dann Wirkungsquerschnitte erstellt, mit denen die verschiedenen Größen 2-90 berechnet und dann in den punktkinetischen Gleichungen zur Transientenanalyse weiter verwendet werden können.

Diese Vorgehensweise ist jedoch im Prinzip nicht korrekt: Zunächst ist es fragwürdig, ob die Verwendung der stationären Auslegungsleistungsdichte sinnvoll ist; dies hängt stark von der Art der betrachteten Transiente ab (siehe die Diskussion des quasistationären Verfahrens in Abschnitt E).

Des weiteren ist es recht schwierig, für jeden denkbaren Reaktorzustand eine detaillierte stationäre Rechnung mit neu erzeugten Wirkungsquerschnitten durchzuführen; die Anzahl der benötigten Wirkungsquerschnitte für die komplexen Temperatur- und Dichteverteilungen in einem Reaktorkern ist meist zu groß, außerdem sind die transienten Zustände ja a priori nicht bekannt. Man begnügt sich daher i.allg. mit globalen Koeffizienten, die für vorgegebene oder durch Mittelung über den gesamten Kern errechnete Temperaturen und Fluidichten bestimmt werden. Die Beschreibung von räumlich stark variablen Effekten, wie z.B. lokaler Dampfbildung, ist mit diesen Parametern natürlich nicht mehr möglich.

An diesem Punkt setzen die gekoppelten Verfahren an, die versuchen, den Gesamtzustand eines Reaktors durch Kombination von räumlich aufgelösten Neutronenkinetikrechnungen und thermohydraulischen Berechnungsmethoden zu erfassen. Dieses Verfahren ist für die Störfallanalysen großer Leistungsreaktoren mittlerweile Standard; zum Einsatz kommen dabei umfangreiche „Best-Estimate“-Codes für die Beschreibung der Thermofluidynamik des Kerns (z.B. ATHLET [TES96, WOL88]), sowie Grobgitter-Neutronendiffusionsmethoden

(i.allg. in zwei Energiegruppen, z.B. QUABOX/CUBBOX [LAN77, LAN77a]) zur Bestimmung der lokalen Leistungsverteilung.

Während die Verwendung von Diffusionsmethoden für Leistungsreaktoren meist angemessen ist, versagt diese Näherung bei kleinen, räumlich stark inhomogenen Systemen, wie z.B. beim Kompaktkern des Forschungsreaktors FRM-II, die die Verwendung vieler Energiegruppen und Anwendung von Neutronentransporttheorie erfordern.

In dieser Arbeit wird daher neben der Erstellung eines zeitabhängigen Neutronentransportcodes auch erstmals die Kopplung eines solchen Programms an den in der GRS entwickelten Thermofluiddynamikcode ATHLET durchgeführt.

Das Berechnungsschema ist in Abbildung 2-8 dargestellt. Es kommen drei unterschiedliche Programme zum Einsatz. Die Theorie der Neutronenkinetik ist in den vorigen Abschnitten ausführlich besprochen worden; sie übernimmt die Berechnung der lokalen Leistungs- bzw. Wärmestromdichte, die an den Thermofluiddynamikcode ATHLET übergeben wird. Der Code ATHLET berechnet aus der Geometrie des Systems, den zeitlichen Randbedingungen und dem von der Neutronenkinetik vorgegebenen Wärmestrom die charakteristischen Zustandsvariablen des Systems, hier die Kühlmitteldichte und –temperatur sowie die Temperatur des Brennstoffs. Diese Größen werden weitergegeben an ein Modul zur Wirkungsquerschnittserzeugung, das in Abschnitt 6.2.4 und Anhang D noch ausführlich diskutiert wird. Wünschenswert wäre für jeden Zeitschritt eine vollständige Neuberechnung der Querschnittsdaten aus den zugrunde liegenden nuklearen Datenbanken. Der Rechenaufwand ist jedoch erheblich, so daß man sich i.allg. damit begnügt, aus einem Satz vorgefertigter Daten für diskrete Werte der thermohydraulischen Parameter die für den nächsten Zeitschritt benötigten Werte zu interpolieren, die dann wiederum an das Neutronenkinetikmodul übergeben werden. Man beachte, daß die Transportgleichung aufgrund der Rückwirkungsmechanismen zu einer

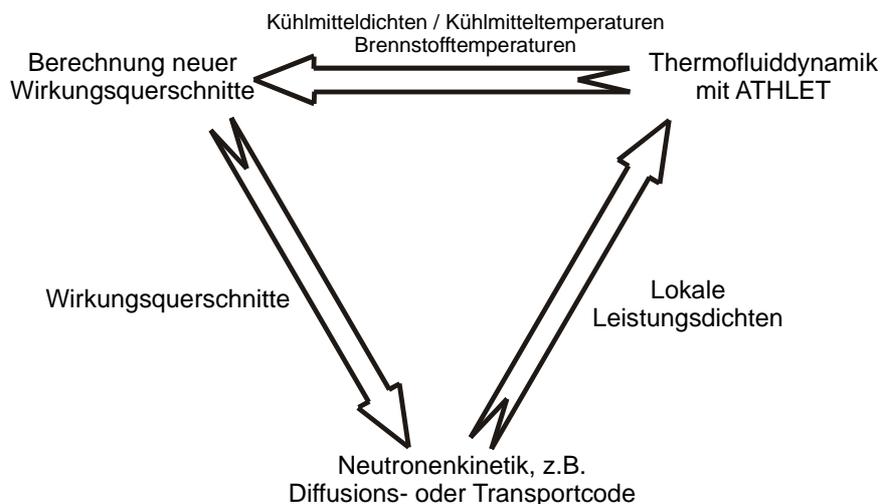


Abbildung 2-8: Berechnungsschema der Transientenanalyse im gekoppelten Programmmodell aus Neutronentransport und Thermohydraulik

nichtlinearen Gleichung wird, da die Wirkungsquerschnitte nicht nur explizite Funktionen der Zeit sind, sondern implizit nun auch vom Neutronenfluß abhängen.

2.8 Zusammenfassung

In dieser Einführung wurden die theoretischen Grundlagen der zeitabhängigen Neutronen-transport- und Diffusionstheorie vorgestellt. Schwerpunkt dieser Arbeit ist die numerische Implementation eines voll impliziten Zeitdiskretisierungsschemas mit Berücksichtigung der Vorläufergleichungen und der thermohydraulischen Rückwirkungseffekte. Ein solch vollständiger Ansatz ist bislang noch für keinen Neutronentransportcode praktisch umgesetzt worden; man bedient sich üblicherweise der quasistationären Näherung, die jedoch z.B. für schnelle Transienten oder räumlich stark inhomogene Reaktivitätseffekte zu erheblichen Unsicherheiten in den Resultaten führen kann.

Es wurde demonstriert, daß die implizite Behandlung der Zeitvariablen auf ein sog. „Fixed-Source“-Problem führt, das prinzipiell mit denselben Lösungsansätzen wie das einfachere, stationäre Transportproblem behandelt werden kann. In diesem Zusammenhang wurden die Begriffe der inneren und äußeren Iterationen eingeführt, deren Einbindung und Optimierung in Diffusions- und Transportcode wesentlicher Gegenstand der folgenden Kapitel sein wird.

3 Entwicklung eines zeitabhängigen Diffusionscodes

3.1 Einleitung

In Kapitel 2 wurde bereits die Neutronendifusionsgleichung aus der Transportgleichung abgeleitet und auf die dabei eingehenden Näherungen hingewiesen. Es wurde ausdrücklich betont, daß gerade für räumlich stark inhomogene Systeme mit größeren Void- und Absorberregionen die Diffusionsnäherung möglicherweise unzuverlässige Resultate liefern wird. Ihr großer Vorteil liegt hingegen in der mathematisch einfacheren Herleitung und Behandlung sowie in dem gegenüber der Transporttheorie wesentlich reduzierten Rechenaufwand. Gerade gekoppelte Berechnungen zur Reaktordynamik werden aus diesen Gründen bis heute mit Diffusionscodes durchgeführt; es ist daher von großem Interesse, beide theoretischen Ansätze an einem realistischen Fallbeispiel, dem FRM-II, studieren zu können und die Diffusionslösungen mit den Transportergebnissen als Referenzlösung zu vergleichen und kritisch zu bewerten.

Als Vorstufe zum Transportcode wurde in dieser Arbeit ein eigenständiger, numerisch hochoptimierter Diffusionscode entwickelt und für das FRM-II-Problem eingesetzt. Neben grundlegenden Erkenntnissen über die Güte der Diffusionsnäherung konnten hier auch einige wertvolle Erfahrungen gesammelt und wichtige Vorarbeiten geleistet werden, die bei der Behandlung des Transportproblems hilfreich waren:

- Das Modul zur Wirkungsquerschnittsinterpolation, sämtliche Routinen zur Kopplung von ATHLET und Neutronenkinetik und die Simulation verschiedener Reaktorkomponenten konnten unverändert übernommen werden.
- Die Beschleunigung der äußeren Iterationen sowie die Behandlung von Aufwärtsstreuung und Vorläufern ist programmtechnisch für Diffusions- und Transporttheorie sehr ähnlich.
- Die Erfahrungen zur Optimierung der Iterationsstrategie konnten zum großen Teil direkt von der Diffusions- auf die Transporttheorie übertragen werden; das Programm war außerdem gerade in der Anfangsphase der Entwicklung des Transportcodes eine hervorragende Testplattform für Parameterstudien, z.B. für die Orts- und Zeitdiskretisierung und die Zeitschrittweitensteuerung.
- Transport- und Diffusionsberechnungen stehen nun als zwei unterschiedliche Optionen in einem Rechencode zur Verfügung; da wesentliche Anteile des Codes in der Programmiersprache C\C++ erstellt wurden, entspricht dieser Code nun auch modernen Pro-

grammierungsparadigmen und läßt sich aufgrund der objektorientierten Struktur sehr einfach verwalten und erweitern. Die älteren, zum großen Teil in FORTRAN77 geschriebenen Teile des Transportcodes DORT wurden ebenfalls in eine hierarchische Klassenstruktur „verpackt“.

Im weiteren Verlauf dieses Kapitels werden die zeitabhängigen Gruppendiffusionsgleichungen zunächst ortsdiskretisiert und die resultierenden linearen Gleichungssysteme in der Form vorgestellt, in der sie in den Diffusionscode implementiert wurden. Zur Lösung dieser Systeme wird eine moderne iterative Methode, ein präkonditioniertes Konjugierte-Gradienten-Verfahren eingesetzt, das sich als sehr effektiv im Vergleich zu klassischen Iterationsverfahren [HAG81, COL82, HAC94, AXE96] erwiesen hat.

Des weiteren werden die im Code verwendeten Verfahren zur Behandlung der äußeren Iterationen, der Aufwärtsstreuung, der Flußextrapolation und zur Zeitschrittweitensteuerung diskutiert, auf die später bei der Behandlung des Transportproblems zurückgegriffen wird.

Außerdem zeichnet sich der Code gegenüber älteren Diffusionsprogrammen dadurch aus, daß verzögerte Neutronenspektren explizit (anstelle der Verwendung eines β_{eff}) eingegeben und zudem das prompte Spaltspektrum ortsabhängig gewählt werden kann.

3.2 Diskretisierung der Ortsvariablen

Die räumliche Diskretisierung wird zur Vereinfachung anhand der stationären Gruppendiffusionsgleichung (der „Within-Group“-Gleichung) demonstriert:

$$-\nabla D_g(\vec{r})\nabla\phi_g(\vec{r}) + \Sigma_g^r(\vec{r})\phi_g(\vec{r}) = S_g(\vec{r}) \quad (3-1)$$

$$S_g(\vec{r}) = \sum_{g' \neq g} \Sigma_s^{gg'}(\vec{r})\phi_{g'}(\vec{r}) + \frac{1}{k_{\text{eff}}} \chi_g \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_f^{g'}(\vec{r})\phi_{g'}(\vec{r}).$$

In der sogenannten Finite-Differenzen-Formulierung wird das Problemgebiet in ein reguläres Gitter von Maschen aufgeteilt, und zwar derart, daß alle Materialgrenzen mit den Maschenoberflächen zusammenfallen. Innerhalb einer Masche werden die Materialeigenschaften als homogen angenommen, d.h. sämtliche Wirkungsquerschnitte sind dort räumlich konstant.

Die Neutronenflüsse werden dann an diskreten Punkten des Gebiets mittels des aus der mathematischen Literatur bekannten 5-Punkt-Sterns [siehe z.B. HAC94] berechnet. Zur Aufstellung der entsprechenden Gleichungen sind zwei Verfahren in Gebrauch [HAS68], so wie in Abbildung 3-1 für eine zweidimensionale Geometrie dargestellt. Es besteht zum einen die Möglichkeit, die Berechnungspunkte in den Maschenmittelpunkten zu zentrieren (im Bild

links); dann koppeln die einzelnen Maschen bzw. Berechnungsvolumina jeweils über ihre Grenzflächen an die vier direkten Nachbarn.

Die zweite Möglichkeit zeigt Abbildung 3-1 rechts: Hier fallen die Berechnungspunkte mit den Schnittpunkten der Gitterlinien bzw. den Mascheneckpunkten zusammen; die zugehörigen Berechnungsvolumina (durch gestrichelte Linien angedeutet) sind nun aber nicht mehr deckungsgleich mit den durch das Gitter definierten Maschen und überdecken u.U. Materialdis-

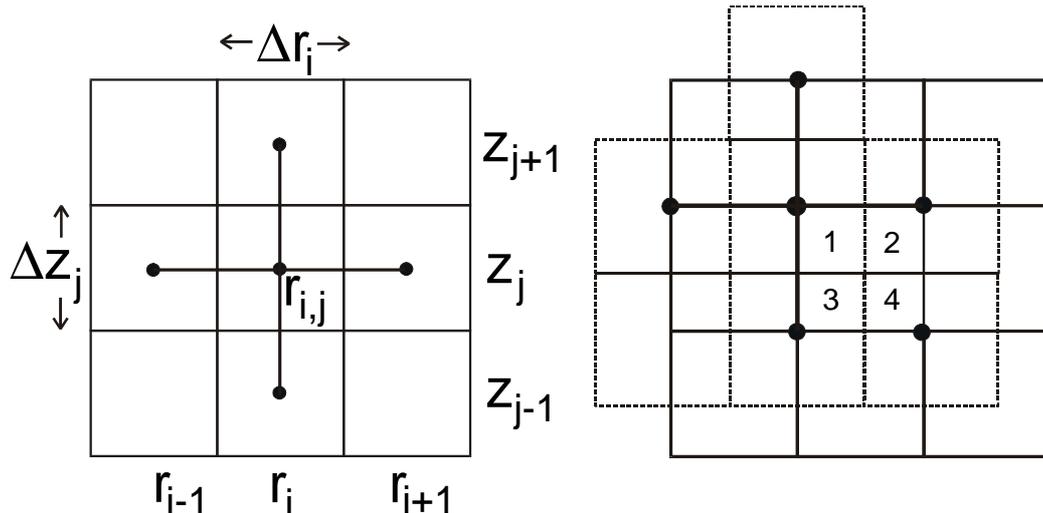


Abbildung 3-1 links: maschenzentrierter 5-Punkt-Stern zur Ortsdiskretisierung der Diffusionsgleichung; rechts: das analoge eckpunktzentrierte Schema

kontinuitäten. Möchte man also über ein Maschenvolumen integrieren (ein Vorgang, der zur Neubestimmung der Gruppenquellen in der Diffusionsgleichung in jeder äußeren Iteration für jede Energiegruppe und alle Maschen durchgeführt werden muß), muß für jede Masche der Beitrag von insgesamt vier Berechnungspunkten berücksichtigt werden (siehe Abbildung 3-1 rechts), während im maschenzentrierten Schema nur der Wert im Maschenmittelpunkt maßgeblich ist. In der Neutronenphysik wird daher das maschenzentrierte Schema bevorzugt.

Zur Herleitung der ortsdiskretisierten Gleichungen, die Gleichung 3-1 in ein lineares, schwach besetztes Gleichungssystem überführen, wird das Problem im Hinblick auf den FRM-II zunächst in Zylindergeometrie betrachtet, so daß der Punkt $r_{i,j}$ (siehe Abbildung 3-1) den Maschenmittelpunkt des Volumens $V_{i,j} = 2\pi\Delta r_i\Delta z_j$ bezeichnet; die einzelnen Bestandteile der Diffusionsgleichung werden dann über dieses Volumen integriert (der Energiegruppenindex wird für den Moment vernachlässigt). Unter Verwendung des Gaußschen Satzes folgt:

$$\int_{V_{i,j}} d^2r (-\nabla D_{i,j} \nabla \phi_{i,j}(\vec{r})) = - \int_{S_V} dA D_{i,j} \vec{n} \cdot \nabla \phi_{i,j}(\vec{r}) =: \sum_{k=1}^4 \bar{J}_{i,j}^k A_{i,j}^k \quad k = i \pm 1/2, j \pm 1/2 \quad (3-2)$$

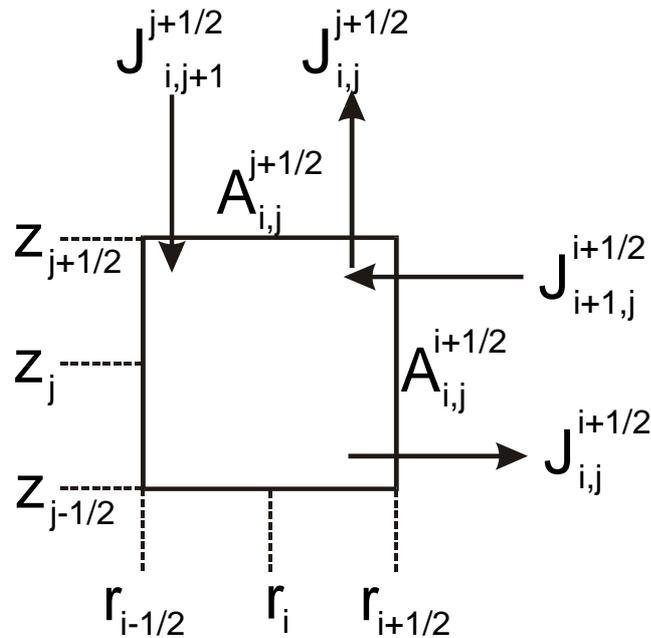


Abbildung 3-2: Definition der Flächen, Koordinaten und Neutronenströme für eine räumliche Masche

mit den über die Oberflächen A^k gemittelten Strömen \bar{J}^k :

$$\bar{J}_{i,j}^k = -\frac{1}{A_{i,j}^k} \int_S dA_{i,j}^k D_{i,j} \bar{n}^k \cdot \nabla \phi_{i,j}(\vec{r}), \quad (3-3)$$

deren Indizierung aus Abbildung 3-2 ersichtlich ist. Diese Formulierung kann ohne weiteres auf drei Dimensionen ausgedehnt werden, wenn man zusätzlich Neutronenströme in azimuthaler Richtung zulässt; dann ergeben sich sechs statt der vier Terme in Gleichung 3-2. Integration der verbleibenden Terme der Diffusionsgleichung liefert:

$$\int_{V_{i,j}} d^2 r \Sigma_{i,j}^r \phi_{i,j}(\vec{r}) =: \Sigma_{i,j}^r \bar{\phi}_{i,j} V_{i,j} \quad \int_{V_{i,j}} d^2 r \Sigma_{i,j}^r S_{i,j}(\vec{r}) =: \bar{S}_{i,j} V_{i,j} \quad (3-4)$$

mit den folgenden Definitionen für die volumengemittelten Flüsse und Gruppenquellterme:

$$\bar{\phi}_{i,j} = \frac{1}{V_{i,j}} \int_{V_{i,j}} d^2 r \phi_{i,j}(\vec{r}) \quad \bar{S}_{i,j} = \frac{1}{V_{i,j}} \int_{V_{i,j}} d^2 r S_{i,j}(\vec{r}). \quad (3-5)$$

Mit den vereinfachenden Annahmen, daß:

- der Neutronenfluß maximal linear zwischen den Maschenoberflächen und den Maschenmittelpunkten variiert und daß
- entlang der Oberflächen Variationen in der Normalenableitung vernachlässigbar sind,

entspricht der Fluß im Maschenmittelpunkt gerade dem volumengemittelten Wert:

$$\bar{\phi}_{i,j} = \phi_{i,j}(r_i, z_j) = \phi_{i,j}, \quad (3-6)$$

und die Ströme können durch die folgenden Differenzenquotienten genähert werden:

$$J_{i,j}^{i\pm 1/2} = -D_{i,j} \frac{\pm(\phi_{i\pm 1/2,j} - \phi_{i,j})}{\Delta r_i / 2} \quad J_{i,j}^{j\pm 1/2} = -D_{i,j} \frac{\pm(\phi_{i,j\pm 1/2} - \phi_{i,j})}{\Delta z_j}, \quad (3-7)$$

mit den evidenten Bezeichnungen $\phi_{i\pm 1/2,j}$ usw. für die Neutronenflüsse auf den Randflächen. Dieselben Beziehungen hätte man erhalten, wenn für Flüsse und Ströme eine mehrdimensionale Taylor-Entwicklung durchgeführt und nach dem linearen Term abgebrochen worden wäre. Fordert man nun, daß die Nettoströme J auf den Randflächen stetig seien:

$$J_{i,j}^{i\pm 1/2} = J_{i\pm 1,j}^{i\pm 1/2} \quad J_{i,j}^{j\pm 1/2} = J_{i,j\pm 1}^{j\pm 1/2}, \quad (3-8)$$

so ergibt sich für die Flüsse ϕ an diesen Positionen:

$$\phi_{i\pm 1/2,j} = \frac{D_{i,j} / \Delta r_i}{D_{i,j} / \Delta r_i + D_{i\pm 1,j} / \Delta r_{i\pm 1}} \phi_{i,j} + \frac{D_{i\pm 1,j} / \Delta r_{i\pm 1}}{D_{i,j} / \Delta r_i + D_{i\pm 1,j} / \Delta r_{i\pm 1}} \phi_{i\pm 1,j} \quad (3-9)$$

$$\phi_{i,j\pm 1/2} = \frac{D_{i,j} / \Delta z_j}{D_{i,j} / \Delta z_j + D_{i,j\pm 1} / \Delta z_{j\pm 1}} \phi_{i,j} + \frac{D_{i,j\pm 1} / \Delta z_{j\pm 1}}{D_{i,j} / \Delta z_j + D_{i,j\pm 1} / \Delta z_{j\pm 1}} \phi_{i,j\pm 1}.$$

Durch Einsetzen dieser Beziehungen in die Differenzenquotienten für J (Gleichung 3-7) lassen sich die Randflüsse $\phi_{i\pm 1/2,j}$ eliminieren; es ergibt sich der folgende einfache Zusammenhang zwischen den Strömen und den Flüssen im Maschenmittelpunkt:

$$J_{i,j}^{i\pm 1/2} = \pm \gamma_{i\pm 1,j} (\phi_{i,j} - \phi_{i\pm 1,j}) \quad J_{i,j}^{j\pm 1/2} = \pm \gamma_{i,j\pm 1} (\phi_{i,j} - \phi_{i,j\pm 1}) \quad (3-10)$$

$$\gamma_{i\pm 1,j} = \frac{1}{\frac{\Delta r_i}{2D_{i,j}} + \frac{\Delta r_{i\pm 1}}{2D_{i\pm 1,j}}} \quad \gamma_{i,j\pm 1} = \frac{1}{\frac{\Delta z_j}{2D_{i,j}} + \frac{\Delta z_{j\pm 1}}{2D_{i,j\pm 1}}}.$$

Damit können die Ströme in Gleichung 3-2 durch die entsprechenden Flüsse ersetzt werden, und die Bestimmungsgleichung für $\phi_{i,j}$ läßt sich allein durch die Flußwerte in den Nachbarmaschen $\phi_{i\pm 1,j\pm 1}$ beschreiben:

$$-a_{i+1,j} \phi_{i+1,j} - a_{i-1,j} \phi_{i-1,j} - a_{i,j+1} \phi_{i,j+1} - a_{i,j-1} \phi_{i,j-1} + (b_{i,j} + \sum_{i,j}^r V_{i,j}) \phi_{i,j} = S_{i,j} V_{i,j} \quad (3-11)$$

mit:

$$\begin{aligned}
 a_{i\pm 1,j} &= A_{i,j}^{i\pm 1/2} \gamma_{i\pm 1,j} & a_{i\pm 1,j} &= A_{i,j}^{j\pm 1/2} \gamma_{i,j\pm 1} \\
 b_{i,j} &= a_{i+1,j} + a_{i-1,j} + a_{i,j+1} + a_{i,j-1}.
 \end{aligned}
 \tag{3-12}$$

So erhält man ein lineares Gleichungssystem, in dem die Kopplung der Flüsse an die Nachbarmaschen durch die Ausdrücke $a_{i\pm 1,j\pm 1}$ bewerkstelligt wird. Innerhalb der Zelle kommen dann noch die Beiträge des Removal-Terms sowie des Gruppenquellterms hinzu.

Für allgemeine Randbedingungen der Form:

$$\alpha \vec{n} \cdot D_{i,j} \nabla \phi_{i,j}(\vec{r}) + \beta \phi_{i,j}(\vec{r}) = 0
 \tag{3-13}$$

ergeben sich durch ähnliche Überlegungen wie für die inneren Punkte folgende Werte für die Nettoströme auf dem Rand des Lösungsgebietes [DER83]:

$$\begin{aligned}
 J_{i,j}^{i\pm 1/2} &= \pm \gamma_{i\pm 1,j}(\phi_{i,j}) & J_{i,j}^{j\pm 1/2} &= \pm \gamma_{i,j\pm 1}(\phi_{i,j}) \\
 \gamma_{i\pm 1,j} &= \frac{1}{\frac{\Delta r_i}{2D_{i,j}} + \frac{\alpha}{\beta}} & \gamma_{i,j\pm 1} &= \frac{1}{\frac{\Delta z_j}{2D_{i,j}} + \frac{\alpha}{\beta}}.
 \end{aligned}
 \tag{3-14}$$

Diese Ausdrücke sind etwas einfacher als die Koeffizienten in Gleichung 3-10, da die Ströme nicht mehr den Nettostrom zwischen zwei benachbarten Volumina angeben, sondern nur noch die Rate festlegen, mit denen Neutronen das Volumen $V_{i,j}$ über den Rand des Problemgebiets verlassen.

Trotz des expliziten Bezuges auf Zylindergeometrie sind die Ausdrücke für die Koeffizienten in Gleichung 3-10 bzw. 3-11 für beliebige zweidimensionale Geometrien gültig; in den Diffusionscode implementiert wurden die gängigsten Optionen (r,z) , (r,θ) und (x,y) . Die zulässigen Randbedingungen sind reflektierend, periodisch, Vakuum- und extrapoliert.

3.3 Die Matrixgleichungen und ihre Eigenschaften

Um die Gleichungen 3-11 in Matrixform zu bringen, ist es zunächst sinnvoll, die Numerierung anzupassen. In einer zweidimensionalen Geometrie mit $i \in [1, I]$ und $j \in [1, J]$ enthält ein rechteckiges, regulär diskretisiertes Lösungsgebiet $N = I \cdot J$ Maschenpunkte. Die doppelt indizierte Numerierung der Koeffizienten $a_{i,j}$ und der Flüsse $\phi_{i,j}$ kann durch die Vorschrift:

$$n = (j-1) \cdot I + i
 \tag{3-15}$$

wohldefiniert ist. Für diese Gleichung gilt ferner, daß stets ein positiver Eigenvektor Φ_0 und ein dazugehöriger positiver Eigenwert $\lambda_0 = k_{\text{eff}}$ existieren, der größer ist als der absolute Betrag jedes anderen Eigenwerts von $\mathbf{M}^{-1}\mathbf{B}$.

Das Eigenwertspektrum von $\mathbf{M}^{-1}\mathbf{B}$ läßt sich weiter einschränken: Während die nicht-singuläre Matrix \mathbf{M}^{-1} nicht degeneriert ist und damit den Rang $N \cdot G$ sowie entsprechend viele Eigenwerte besitzt, hat die Matrix $\mathbf{B} = \chi \mathbf{F}$ lediglich den Rang N ; diese Aussage gilt dann auch für das Produkt $\mathbf{M}^{-1}\mathbf{B}$. Daher werden $N \cdot (G-1)$ Eigenwerte identisch Null sein, so daß sich das Problem formal auf die Berechnung eines N -dimensionalen Problems reduzieren lassen muß.

Bereits in Abschnitt 2.4 wurde gezeigt, daß sich die Transportgleichung von einer Gleichung in den Flüssen zu einer Gleichung in den Spaltdichten Ψ konvertieren ließ; ähnlich kann man auch hier mit symbolischer Matrixnotation die Diffusionsgleichung umschreiben in:

$$\Psi = \mathbf{F}\Phi = \sum_{g=1}^G F_g \phi_g \Rightarrow \mathbf{F}^T \mathbf{M}^{-1} \chi \Psi = k_{\text{eff}} \Psi \Rightarrow \mathbf{Q}\Psi = k_{\text{eff}} \Psi \quad \mathbf{Q} := \mathbf{F}^T \mathbf{M}^{-1} \chi. \quad (3-22)$$

Gleichungen 3-21 und 3-22 sind mathematisch äquivalent; letztere ist aber nur für den Spaltdichtevektor Ψ formuliert, so daß die formale Reduktion auf N Dimensionen gelungen ist und auch nur ebenso viele Eigenwerte existieren können, für die dann gilt:

$$k_{\text{eff}} = \lambda_0 > |\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq \dots \geq |\lambda_N| > 0. \quad (3-23)$$

3.4 Iterative Lösung der „Within-Group“-Gleichungen

Bevor die Lösung des Gesamtproblems diskutiert wird, soll zunächst auf die Invertierung der Operatoren $D_g + \Sigma_g$ eingegangen werden. Die Matrixdarstellung ist bereits in Gleichung 3-18 angegeben worden. Die numerische Mathematik stellt eine Reihe von effizienten Verfahren zur Behandlung großer und schwach besetzter linearer Gleichungssysteme zur Verfügung. Während sich z.B. im Bereich der Fluidodynamik oder Wärmeleitung direkte Verfahren zur Lösung elliptischer oder parabolischer Differentialgleichungen etabliert haben, greift man bei Vielgruppen-Neutronendifusions- und Transportproblemen vorwiegend auf iterative Methoden zurück.

Klassische Iterationsverfahren zur Lösung des Matrixproblems $\mathbf{A}x = b$ versuchen i.allg., die Matrix \mathbf{A} als Summe zweier Matrizen $\mathbf{A} = \mathbf{M} + \mathbf{N}$ darzustellen, und zwar derart, daß die Matrix \mathbf{M} einfach zu invertieren ist. Die Iterationen verlaufen dann nach folgendem Schema:

$$\mathbf{M}x^{(n+1)} = -\mathbf{N}x^{(n)} + b \quad \Rightarrow \quad x^{(n+1)} = \underbrace{-\mathbf{M}^{-1}\mathbf{N}}_{=\mathbf{B}} x^{(n)} + \tilde{b} \quad (3-24)$$

$$\mathbf{B} := -\mathbf{M}^{-1}\mathbf{N} \quad \wedge \quad \tilde{b} = \mathbf{M}^{-1}b,$$

wobei die Konvergenz des Verfahrens wesentlich von den Eigenschaften der Iterationsmatrix \mathbf{B} abhängt. Für die symmetrische und diagonal dominante Matrix $D_g + \Sigma_g$ ist es i.allg. recht einfach zu zeigen, ob eine gewählte Matrixaufspaltung $\mathbf{A} = \mathbf{M} + \mathbf{N}$ auf ein konvergentes Verfahren führt und auch qualitative Aussagen zur Konvergenzgeschwindigkeit zu machen. Tatsächlich sind die beiden Eigenschaften Symmetrie und diagonale Dominanz hinreichend dafür, daß für den spektralen Radius ρ , d.h. den maximalen Eigenwert von \mathbf{B} , $\rho(\mathbf{B}) < 1$ gilt und damit die Iterationsvorschrift 3-24 konvergiert.

Für die Bandmatrizen $A = D_g + \Sigma_g$ bietet es sich z.B. an, eine Aufspaltung in Diagonalanteil sowie in obere und untere Dreiecksmatrix $\mathbf{A} = \mathbf{D} + \mathbf{L} + \mathbf{U}$ durchzuführen, von denen jede für sich genommen leicht invertierbar ist. Dies führt auf die folgenden stationären Verfahren:

- Jacobi-Verfahren:

$$\begin{aligned} \mathbf{D}x^{(n+1)} &= -(\mathbf{L} + \mathbf{U})x^{(n)} + b &\Rightarrow x^{(n+1)} &= -\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{L} + \mathbf{U})x^{(n)} + \tilde{b} \\ \Rightarrow \mathbf{B}_J &= -\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{L} + \mathbf{U}). \end{aligned} \quad (3-25)$$

- Gauß-Seidel-Verfahren:

$$\begin{aligned} (\mathbf{D} + \mathbf{L})x^{(n+1)} &= -\mathbf{U}x^{(n)} + b &\Rightarrow x^{(n+1)} &= -(\mathbf{D} + \mathbf{L})^{-1}\mathbf{U}x^{(n)} + \tilde{b} \\ \Rightarrow \mathbf{B}_{GS} &= -(\mathbf{D} + \mathbf{L})^{-1}\mathbf{U}. \end{aligned} \quad (3-26)$$

- SOR („Successive Overrelaxation“):

$$\begin{aligned} (\mathbf{D} + \omega\mathbf{L})x^{(n+1)} &= (-\omega\mathbf{U} + (1-\omega)\mathbf{D})x^{(n)} + \omega b &\Rightarrow \\ x^{(n+1)} &= (\mathbf{D} + \omega\mathbf{L})^{-1}(-\omega\mathbf{U} + (1-\omega)\mathbf{D})x^{(n)} + (\mathbf{D} + \omega\mathbf{L})^{-1}\omega b &\Rightarrow \\ \mathbf{B}_{SOR} &= (\mathbf{D} + \omega\mathbf{L})^{-1}(-\omega\mathbf{U} + (1-\omega)\mathbf{D}). \end{aligned} \quad (3-27)$$

- SSOR (Symmetric Successive Overrelaxation):

$$\begin{aligned} (\mathbf{D} + \omega\mathbf{L})x^{(n+1/2)} &= (-\omega\mathbf{U} + (1-\omega)\mathbf{D})x^{(n)} + \omega b &\Rightarrow \mathbf{B}_{SOR} &= (\mathbf{D} + \omega\mathbf{L})^{-1}(-\omega\mathbf{U} + (1-\omega)\mathbf{D}) \\ (\mathbf{D} + \omega\mathbf{U})x^{(n+1)} &= (-\omega\mathbf{L} + (1-\omega)\mathbf{D})x^{(n+1/2)} + \omega b &\Rightarrow \mathbf{B}_{BSOR} &= (\mathbf{D} + \omega\mathbf{U})^{-1}(-\omega\mathbf{L} + (1-\omega)\mathbf{D}) \end{aligned} \quad (3-28)$$

$$\mathbf{B}_{SSOR} = \mathbf{B}_{BSOR} \cdot \mathbf{B}_{SOR}.$$

Jacobi- und Gauß-Seidel-Verfahren zeigen meist eine so schlechte Konvergenz, daß sie in der Praxis kaum eingesetzt werden. Das Jacobi-Verfahren kann jedoch effizient durch Konjugierte-Gradienten-Methoden beschleunigt werden und bietet sich aufgrund seiner einfachen Struktur auch zum Einsatz auf parallelen Architekturen an. Das klassische Verfahren für die Lösung symmetrischer Gleichungssysteme ist sicherlich SOR. Die Problematik, die mit diesem einher geht, besteht jedoch in der Wahl eines optimalen Relaxationsparameters $1 \leq \omega \leq 2$; eine effiziente Wahl von ω setzt zumindest eine ungefähre Kenntnis der extrema-

len Eigenwerte der Iterationsmatrix voraus, die außer für wenige einfache Probleme (z.B. dem Poisson-Problem auf einem Rechteck) analytisch nicht bestimmt werden können und während der Iterationen ständig neu ermittelt werden müssen. Die SSOR ist eine zweistufige Erweiterung des einfachen SOR-Verfahrens und ist abgesehen von der Tatsache, daß sie doppelt so viele numerische Operationen wie SOR benötigt, i.allg. auch schlechter konvergent als diese. Im Gegensatz zur einfachen SOR läßt sich jedoch ihre Konvergenz durch den Einsatz von Konjugierten-Gradienten oder durch Chebyshev-Beschleunigungsmechanismen erheblich verbessern, auf die im Zusammenhang mit den äußeren Iterationen noch eingegangen wird.

Die Matrixaufspaltung $\mathbf{A} = \mathbf{D} + \mathbf{L} + \mathbf{U}$ kann auf verschiedene Weisen vorgenommen werden; hier wurde zunächst stillschweigend vorausgesetzt, daß die Matrix \mathbf{A} elementweise zerlegt wird. Es besteht jedoch stets auch die Möglichkeit, die iterativen Verfahren durch blockweise Zerlegung von \mathbf{A} zu definieren. Für die Matrix D_g in Gleichung 3-18 wären dann obere und untere Dreiecksmatrix \mathbf{L} bzw. \mathbf{U} durch die diagonalen Blockmatrizen A_j definiert, während die Diagonalmatrix \mathbf{D} den tridiagonalen Matrizen B_j entspräche. Fast alle iterativen Verfahren haben ein solches Blockäquivalent. Für den Fall der SOR spricht man von SLOR (Successive Line Overrelaxation), da die einzelnen Matrixblöcke jeweils einer Zeile des Lösungsgebiets entsprechen.

Neben der strukturellen Zerlegung der Matrix \mathbf{A} in ihre element- oder blockweisen diagonalen, oberen und unteren Anteile hat sich für zweidimensionale Probleme auch eine Zerlegung korrespondierend zu den zwei räumlichen Richtungen etabliert, die sogenannten ADI-Methoden (Alternate-Direction-Implicit, siehe z.B. [HAG69], [COL82]). Dies sei an der Matrix $D_g + \Sigma_g$ demonstriert:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \mathbf{B}_1 & \mathbf{A}_2 & & & \\ \mathbf{A}_2 & \cdot & \cdot & & \\ & \cdot & \cdot & & \mathbf{A}_J \\ & & & \mathbf{A}_J & \mathbf{B}_J \end{pmatrix}}_{D_g + \Sigma_g} + \text{diag}(\Sigma_r V) = \underbrace{\text{diag}(\mathbf{B}_1, \mathbf{B}_J) + \frac{1}{2} \text{diag}(\Sigma_r V)}_{H + \frac{1}{2} \Sigma} + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & \mathbf{A}_2 & & & \\ \mathbf{A}_2 & \cdot & \cdot & & \\ & \cdot & \cdot & & \mathbf{A}_J \\ & & & \mathbf{A}_J & 0 \end{pmatrix}}_{V + \frac{1}{2} \Sigma} + \frac{1}{2} \text{diag}(\Sigma_r V). \quad (3-29)$$

Durch diese Aufspaltung wird die Matrix effektiv in zwei eindimensionale Probleme zerlegt. Die tridiagonalen Anteile \mathbf{B}_j beschreiben gerade die Kopplung der Maschen an die inner-

halb einer Zeile direkt benachbarten Zellen, d.h. in horizontaler Richtung, während die Einträge in den Matrizen \mathbf{A}_j die Kopplung an die Zeilen ober- und unterhalb, d.h. in vertikaler Richtung vermitteln. Da sowohl die Matrizen $\mathbf{H} + 1/2\Sigma$ als auch $\mathbf{V} + 1/2\Sigma$ tridiagonal sind bzw. durch Permutation in diese Form gebracht werden können, können sie leicht durch Gaußsche Elimination invertiert werden. Der entsprechende zweistufige Algorithmus lautet dann:

$$\begin{aligned} \left(\mathbf{H} + \frac{1}{2}\Sigma + \omega_{n+1}\mathbf{1}\right)x^{(n+1/2)} &= b - \left(\mathbf{V} + \frac{1}{2}\Sigma + \omega_{n+1}\mathbf{1}\right)x^{(n)} \\ \left(\mathbf{V} + \frac{1}{2}\Sigma + \omega_{n+1}\mathbf{1}\right)x^{(n+1)} &= b - \left(\mathbf{H} + \frac{1}{2}\Sigma + \omega_{n+1}\mathbf{1}\right)x^{(n+1/2)}. \end{aligned} \quad (3-30)$$

Im ersten Schritt wird zur Ermittlung von $x^{(n+1/2)}$ nur der horizontale Anteil von \mathbf{A} invertiert, im zweiten nur der vertikale. Die Beschleunigungsparameter ω_{n+1} können in jeder Iteration neu angepaßt werden. Solche Verfahren nennt man nichtstationär, da sich die Iterationsmatrix in jeder Iteration ändert. Die Bestimmung optimaler Parameter ist jedoch naturgemäß schwierig und erfordert ähnlich wie beim SOR-Verfahren eine Ermittlung des maximalen und minimalen Eigenwerts der Iterationsmatrix.

Die meisten Neutronendifusionscodes sind älteren Datums und arbeiten i.allg. mit diesen seit mehreren Jahrzehnten wohlbekannten „klassischen“ Algorithmen. So verwendet der Code DIF2D/DIF3D [DER83] das SLOR-Verfahren, während im Diffusionsmodul von DORT [JOH92] der ADI-Algorithmus implementiert ist. Die in dieser Arbeit verwendete Konjugierte-Gradienten-Methode hat gegenüber den oben angeführten klassischen Verfahren mehrere Vorzüge:

- Es werden keine Beschleunigungsparameter benötigt.
- Die Koeffizientenmatrix muß nicht in einer bestimmten Form, wie z.B. als Bandmatrix vorliegen, sondern kann vollkommen unstrukturiert sein.
- Die Methode kann durch entsprechende „Präkonditionierung“ erheblich beschleunigt werden.
- Sie ist gut geeignet zum Betrieb auf parallelen Architekturen und kann auch auf nicht-symmetrische Probleme erweitert werden.

Diese Gründe sprechen allesamt auch für eine Verwendung in der Neutronenphysik. Tatsächlich existieren einige Veröffentlichungen aus den 80er und 90er Jahren ([YAN93], [SUE91], [SUE89], [AOY85]), in denen die Anwendbarkeit dieser Methode auf das Neutronendifusionsproblem für sehr einfache Systeme mit maximal drei Energiegruppen demonstriert wurde. Leider wurden diese Ansätze nicht weiter verfolgt.

An dieser Stelle wird lediglich die Grundidee der Konjugierte-Gradienten-Methode geschildert; für eine weiterführende Diskussion sei auf die sehr umfangreiche Literatur zu diesem Thema verwiesen (z.B. [CON85], [GOL96], [SAA96], [AXE96]). Anstatt das Gleichungssystem $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ direkt zu untersuchen, betrachtet man das Funktional

$$\phi(x) = \frac{1}{2} x^T A x - x^T b. \quad (3-31)$$

Das Minimum von ϕ ist $-b^T A^{-1} b / 2$ und wird erreicht durch Setzen von $x = A^{-1} b$. Die Minimierung des Funktionals und das Lösen von $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ sind also äquivalente Rechenoperationen. Eine der einfachsten Strategien zur Behandlung von ϕ ist die Methode des „Steepest Descent“ [GOL96]: An einem Punkt x_n fällt die Funktion ϕ am steilsten in Richtung des negativen Gradienten ab: $-\nabla\phi(x_n) = b - Ax_n =: r_n$; hier wurde das sogenannte Residuum r_n definiert. Ist dieses ungleich Null, dann muß ein Wert α existieren, so das gilt: $\phi(x_n + \alpha r_n) < \phi(x_n)$. Mit der Wahl $\alpha = r_n^T r_n / r_n^T A r_n$ nimmt dann der Wert von

$$\phi(x_n + \alpha r_n) = \phi(x_n) - \alpha r_n^T r_n + \frac{1}{2} \alpha^2 r_n^T A r_n \quad (3-32)$$

ein Minimum an. Aus einem Iterationswert x_n wird also durch Suche entlang des Residuumsvektors r_n ein neuer, verbesserter Wert $x_{n+1} = x_n + \alpha r_n$ konstruiert. Der Basisalgorithmus lautet demzufolge:

```

Wähle  $x_0$ , bestimme  $r_0 = b - Ax_0$ ,  $n = 0$ 
while ( $r_n \neq 0$ )
   $n = n + 1$ 
   $\alpha_n = r_{n-1}^T r_{n-1} / r_{n-1}^T A r_{n-1}$ 
   $x_n = x_{n-1} + \alpha_n r_{n-1}$ 
   $r_n = b - Ax_n$ 
end.

```

(3-33)

Es läßt sich zeigen [GOL96], daß für diesen Algorithmus gilt:

$$\phi(x_n) + \underbrace{\frac{1}{2} b^T A^{-1} b}_{=\text{Minimum von } \phi} \leq \left(1 - \frac{\lambda_N(A)}{\lambda_1(A)}\right) \left(\phi(x_{n-1}) + \frac{1}{2} b^T A^{-1} b\right). \quad (3-34)$$

Die Konvergenz des Verfahrens wird also um so schlechter sein, je kleiner das Verhältnis λ_N / λ_1 von kleinstem zu größtem Eigenwert, bzw. je breiter gefächert das Eigenwertspek-

trum der Matrix A ist. Geometrisch gesprochen bedeutet dies, daß die Isoflächen des Funktionals langgestreckte Hyperellipsoide im R^n sind, und die Minimierung dem Aufsuchen des tiefsten Punktes in einem langgestreckten, steilen Tal entspricht. Die Wahl des Gradienten als Suchrichtung entspricht dann anschaulich einem Hin- und Herspringen zwischen den steilsten Punkten an den Wänden dieses Tals. Die Wahl effektiverer Suchrichtungen, der sog. Konjugierten Gradienten p_n , führt schließlich auf folgende, verbesserte Formulierung von 3-33 :

```

Wähle  $x_0$ , bestimme  $r_0 = b - Ax_0, n = 0$ 
while ( $r_n \neq 0$ )
   $n = n + 1$ 
  if  $n = 1$ 
     $p_1 = r_0$ 
  else
     $\beta_n = r_n^T r_{n-1} / r_{n-2}^T r_{n-2}$ 
     $p_n = r_{n-1} + \beta_n p_{n-1}$ 
  end
   $\alpha_n = r_{n-1}^T r_{n-1} / p_{n-1}^T A r_{n-1}$ 
   $x_n = x_{n-1} + \alpha_n p_n$ 
   $r_n = r_{n-1} - \alpha_n A p_n$ 
end.

```

(3-35)

In diesem Verfahren werden nur Vektor-Vektor oder Matrix-Vektor-Produkte ausgewertet, während in den stationären Verfahren (z.B. SOR) stets die Invertierung einer gewissen Matrix, z.B. einer Dreiecks- oder einer tridiagonalen Matrix erforderlich ist. Solche Operationen lassen sich i.allg. nur sequentiell ausführen, z.B. durch Gaußsche Elimination und Rücksubstitution. Die Konjugierte-Gradienten-Methode hingegen ist in der vorgestellten Form hochgradig parallelisierbar.

Unglücklicherweise ist die Konvergenz von Algorithmus 3-35 für viele Probleme so schlecht, daß der Einsatz auf skalaren Architekturen i.allg. nicht in Frage kommt. Diese Schwäche hat zur Entwicklung der sog. Präkonditionierung geführt. Grundidee ist es, anstelle des Gleichungssystems $Ax = b$ das modifizierte System $M^{-1}Ax = M^{-1}b$ zu lösen. Der Präkonditionierer M wird so gewählt, daß

- seine Inverse M^{-1} leicht zu bestimmen ist und
- das Eigenwertspektrum von $M^{-1}A$ besser konditioniert als das von A ist, d.h. die Eigenwerte enger beieinander liegen oder, äquivalent dazu, daß $M^{-1}A \approx \mathbf{1}$ ist.

Es ergibt sich [LAU95] folgender modifizierter Algorithmus:

Wähle x_0 , bestimme $r_0 = b - Ax_0$, $n = 0$

while ($r_n \neq 0$)

 Löse $Mz_n = r_n$

$n = n + 1$

(3-36)

if $n = 1$

$p_1 = z_0$

else

$\beta_n = r_n^T z_{n-1} / r_{n-2}^T z_{n-2}$

$p_n = z_{n-1} + \beta_n p_{n-1}$

end

$\alpha_n = r_{n-1}^T z_{n-1} / p_n^T A p_n$

$x_n = x_{n-1} + \alpha_n p_n$

$r_n = r_{n-1} - \alpha_n A p_n$

end.

Dieses Verfahren ist nur dann effizient, wenn die Lösung des Systems $Mz = r$ nicht den Großteil der Rechenzeit in Anspruch nimmt. Während sich die Konvergenz durch die Präkonditionierung i.allg. drastisch verbessert, leidet darunter die Parallelisierbarkeit, da die zusätzlich erforderliche Invertierung von M meist nur sequentiell durchgeführt werden kann. Tatsächlich wird intensiv nach sog. parallelen Präkonditionierern gesucht, die nicht dieser Beschränkung unterliegen ([ELM89], [CON85]).

Auf den in dieser Arbeit verwendeten skalaren Architekturen hat sich hingegen die Verwendung der sog. unvollständigen Cholesky-Zerlegung [MEI77, MEI81, CON85] sehr gut be-

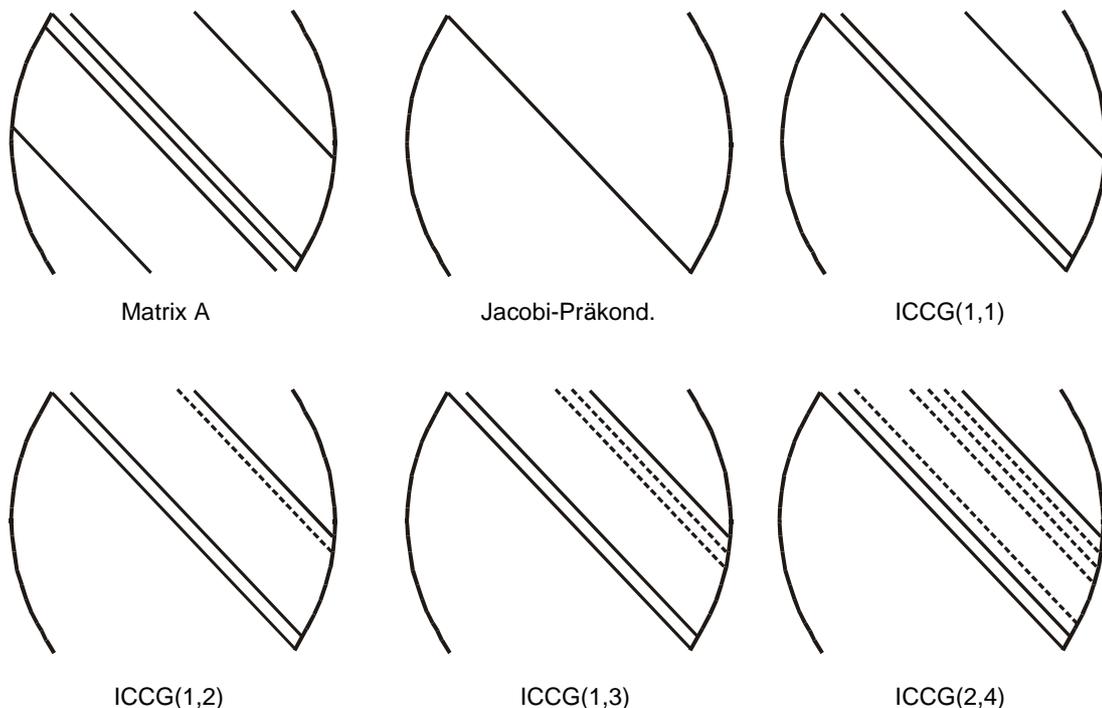


Abbildung 3-3: Besetzungsmuster der verschiedenen unvollständigen Cholesky-Zerlegungen der Koeffizientenmatrix

währt, die sog. ICCG-Präkonditionierung (Incomplete Cholesky Conjugate Gradient). Bei der vollständigen Cholesky-Zerlegung wird versucht, die Matrix A in ein Produkt $A = L^T DL$ zu zerlegen; die Matrizen L, L^T haben obere bzw. untere Dreiecksform, lassen sich also durch Gaußsche Elimination leicht invertieren. Natürlich ist der Aufwand für die vollständige Zerlegung von A genauso groß wie für die direkte Lösung des Gleichungssystems $Ax = b$; ferner werden die Matrizen L, L^T nicht mehr schwach besetzte Matrizen, sondern statt dessen voll besetzt sein.

Bei der unvollständigen Zerlegung wird man daher versuchen, das Besetzungsmuster der zu zerlegenden Matrix A weitgehend auch in den Matrizen L, L^T beizubehalten bzw. nur so weit zu erweitern, wie es der vorhandene Speicherplatz des Rechners erlaubt. Wie bereits gesehen, läßt sich der Diffusionsoperator durch eine symmetrische 5-Band-Matrix darstellen. Die einfachste unvollständige Zerlegung berücksichtigt nur die Hauptdiagonale der Matrix A , man spricht dann vom sog. Jacobi-Präkonditionierer. Komplexere Formen finden sich in der Literatur unter den Bezeichnungen ICCG(a, b), wobei a bzw. b die Anzahlen der zusätzlich berücksichtigten Seitenbänder in der Cholesky-Zerlegung sind (a gibt die Zahl der Bänder in der direkten Nachbarschaft der Hauptdiagonalen an, b die Anzahl der weiter entfernten). In dieser Arbeit wurden die in Abbildung 3-3 dargestellten Zerlegungen implementiert (dargestellt ist jeweils die Form der Matrix L). Je mehr Seitenbänder berücksichtigt werden, desto besser wird die Matrix A durch $L^T DL$ approximiert werden, um so größer wird aber auch der Aufwand für die Invertierung von L sein. Bei der Wahl eines Präkonditionierers ist also

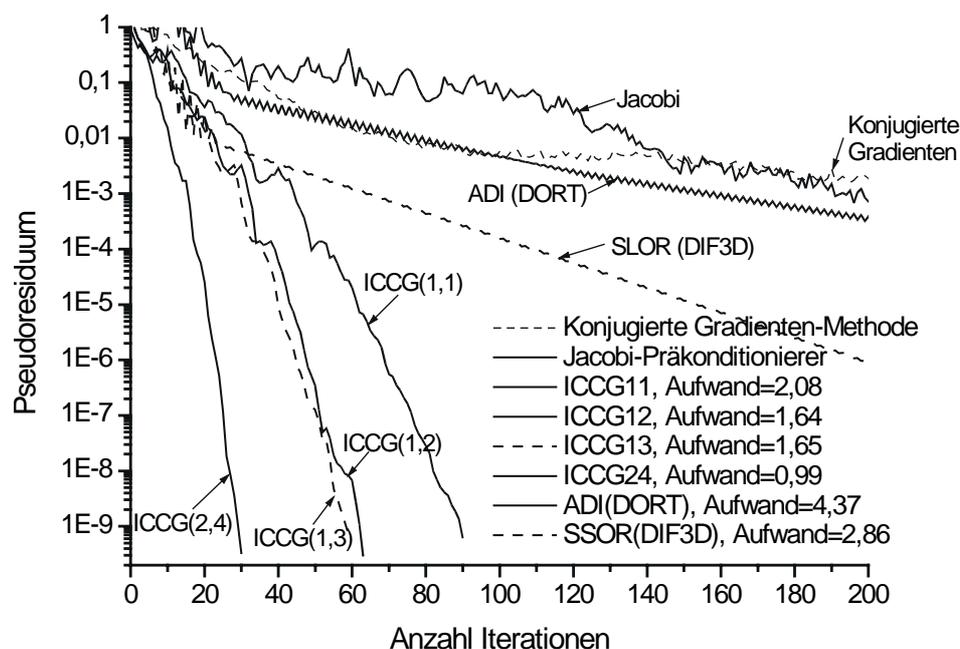


Abbildung 3-4: Effizienz der verschiedenen präkonditionierten Konjugierte-Gradienten-Verfahren im Vergleich mit SOR und ADI am Beispiel des aus der ersten Energiegruppe des FRM-II-Problems resultierenden linearen Gleichungssystems in Diffusionsnäherung.

stets der numerische Aufwand zur Invertierung mit dem erreichten Maß der Konvergenzverbesserung zu vergleichen. Auch die Algorithmen zur Berechnung der ICCG-Zerlegung werden mit zunehmender Anzahl der berücksichtigten Seitenbänder aufwendiger; dieses Problem wird aber in Transientenrechnungen dadurch entschärft, daß eine komplette Neuberechnung i.allg. nicht für jeden einzelnen Zeitschritt notwendig ist.

Der Einfluß der Prädiktionierung ist gerade für das FRM-II-Problem erheblich. In Abbildung 3-4 ist als Beispiel die Konvergenzrate verschiedener iterativer Verfahren für die Invertierung des Diffusionsoperators der ersten Energiegruppe dargestellt. Aufgetragen ist für die herkömmliche Konjugierte-Gradienten-Methode, verschiedene Prädiktionierer sowie für das SOR- und das ADI-Verfahren die Größe des Fehlerresiduums $b - Ax$. Sowohl die nicht-konditionierte als auch die Jacobi-prädiktionierte Methode waren nicht in der Lage, die vorgeschriebene Fehlerreduktion um 10^{-9} zu erreichen, die Konvergenzgeschwindigkeit war zudem außerordentlich langsam. Die aus DIF3D bzw. DORT entnommenen Kurven für die SOR- und ADI-Methode weisen ebenfalls eine Konvergenz erst nach mehreren 100 Iterationen auf, während die effektivste Zerlegung ICCG(2,4) schon nach etwa 30 Iterationen das vorgeschriebene Konvergenzkriterium erreicht hat. Der letztlich ausschlaggebende relative numerische Aufwand ist ebenfalls in Abbildung 3-4 angegeben; man erkennt, daß die ICCG(2,4)-Iterationen offensichtlich einen erheblich höheren Rechenaufwand erfordern; nichtsdestotrotz erhält man eine Beschleunigung um einen Faktor von etwa drei bis vier gegenüber den Programmen DIF3D und DORT. Eine weitere Verbesserung könnte durch die Wahl einer noch höheren Zerlegung oder durch den Übergang zu sog. Block-Prädiktionierern erzielt werden, die z.B. für die parallele Verarbeitung eher angemessen sind [MEU91, GOL96]. Aber auch in der derzeit implementierten Form ist die Leistungsfähigkeit des Konjugierte-Gradienten-Verfahrens ausgezeichnet.

3.5 Die Chebyshev-Beschleunigung

In Abschnitt 3.3 wurde gezeigt, daß das $N \cdot G$ -dimensionale Flußproblem äquivalent zu dem entsprechenden N -dimensionalen Problem in der Spaltdichte ist und daß stets ein maximaler positiver Eigenwert und der zugehörige fundamentale Eigenvektor existieren, die durch das Verfahren der Power-Iteration ermittelt werden können:

$$Q\Psi = \frac{1}{\lambda_0} \Psi \quad \Rightarrow \quad \Psi^{(n)} = \frac{1}{\lambda_0^{(n-1)}} Q\Psi^{(n-1)} \quad \text{mit} \quad \lambda_0^{(n)} = \lambda_0^{(n-1)} \frac{\|\Psi^{(n)}\|_2}{\|\Psi^{(n-1)}\|_2}, \quad (3-37)$$

mit der Quadratnorm der Spaltdichte, $\|\Psi\|$. Ausgehend von einer anfänglichen Schätzung von Eigenwert und Spaltdichteverteilung $\Psi^{(0)}$ und $\lambda^{(0)}$ kann man das Ergebnis der n -ten Iteration auch wie folgt darstellen:

$$\Psi^{(n)} = \left[\prod_{k=0}^n \frac{1}{\lambda_0^{(k-1)}} \right] A^n \Psi^{(0)}. \quad (3-38)$$

Ferner kann man $\Psi^{(0)}$ in der vollständigen Basis der Eigenvektoren x von Q entwickeln:

$$\Psi^{(0)} = \sum_{i=0}^{N-1} c_i x_i. \quad (3-39)$$

Geht man davon aus, daß der Eigenwert λ_0 einigermaßen gut konvergiert ist, kann das Produkt in Gleichung 3-38 auch als $1/\lambda_0^n$ genähert werden und es gilt:

$$\Psi^{(n)} = \left[\prod_{k=0}^n \frac{1}{\lambda_0^{(k-1)}} \right] A^n \sum_{i=0}^{N-1} c_i x_i \approx \frac{1}{\lambda_0^n} \sum_{i=0}^{N-1} c_i (\lambda_i)^n x_i = c_0 x_0 + \sum_{i=1}^{N-1} c_i \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_0} \right)^n x_i \quad n \rightarrow \infty \Rightarrow \quad (3-40)$$

$$\Psi^{(n)} \approx c_0 x_0 + c_1 \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_0} \right) x_1.$$

Asymptotisch wird das Verfahren also gegen ein Vielfaches des fundamentalen Eigenvektors x_0 wie gewünscht konvergieren. Aus Gleichung 3-40 ist ferner ersichtlich, daß die asymptotische Konvergenzrate abhängig von dem Verhältnis der beiden größten Eigenwerte $\sigma = \lambda_1 / \lambda_0$, dem sogenannten Dominanzverhältnis („Dominance Ratio“) ist. Ist dieses Verhältnis ungünstig, d.h. größer als etwa 0.95, wird die Power-Iteration sehr schlecht konvergieren und der Fehler wird sich nach n Iterationen etwa um $O(\sigma^n)$ reduziert haben. So hat man z.B. für $\sigma = 0.95$ nach 100 Iterationen erst eine Reduktion des Residuums $\Psi^{(n)} - \Psi$ um etwa $5 \cdot 10^{-3}$ erreicht.

Bei der Power-Iteration wird der aktuellste Spaltdichtevektor $\Psi^{(n)}$ stets nur aus dem der letzten Iteration, d.h. $\Psi^{(n-1)}$ errechnet. Es stellt sich daher die Frage, ob man einen besseren Lösungsvektor $\tilde{\Psi}^{(n)}$ erhält, wenn man statt dessen eine Linearkombination der Lösungsvektoren früherer Iterationen bildet, die zunächst die allgemeine Form

$$\tilde{\Psi}^{(n)} = \sum_{j=0}^n a_{jn} \Psi^{(j)} \quad (3-41)$$

haben möge. Mit denselben Annahmen wie oben ergibt sich dann:

$$\tilde{\Psi}^{(n)} = \sum_{i=0}^{N-1} c_i \sum_{j=0}^n a_{jn} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_0} \right)^{jn} x_i = \sum_{i=0}^{N-1} c_i P_n \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_0} \right) x_i = c_0 x_0 + \sum_{i=1}^{N-1} c_i P_n \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_0} \right) x_i = c_0 x_0 + \sum_{i=1}^{N-1} c_i P_n(\sigma) x_i, \quad (3-42)$$

wobei ein Polynom P_n mit $P_n(1)=1$ definiert wurde. Für $P_n = x^n$ ergibt sich gerade das Power-Iterationsschema, Gleichung 3-40. Das Polynom soll aber statt dessen so gewählt werden, daß die Reihenentwicklung in Gleichung 3-42 rechts minimiert wird, und zwar möglichst für das gesamte Eigenwertspektrum, also:

$$P_n = \sum_{j=0}^n a_{jn} x^j = \min. \text{ für } x \in [0, \sigma]. \quad (3-43)$$

Für das Intervall wurde hier Null als Untergrenze gewählt, da der kleinste Eigenwert i.allg. nicht bekannt ist. Die bekannten Chebyshev-Polynome [BRO91], die definiert sind durch:

$$C_n(x) = \begin{cases} \cosh(n \operatorname{arcosh}(x)) & x \geq 1 \\ \cos(n \arccos(x)) & x < 1 \end{cases} \quad (3-44)$$

bzw. rekursiv durch:

$$C_0(x) = 1 \quad C_{n+1}(x) = 2xC_n(x) - C_{n-1}(x), \quad (3-45)$$

haben gerade die Eigenschaft, daß $C_n(x)=1$ und $\max_{-1 < x < 1} C_n$ minimiert wird. Umskaliert auf das Intervall $[0, \sigma]$ ergeben sich hieraus die Polynome P_n mit der gewünschten Eigenschaft Gleichung 3-43:

$$P_n(x) = \frac{C_n\left(\frac{2x}{\sigma} - 1\right)}{C_n\left(\frac{2}{\sigma} - 1\right)} \Rightarrow P_{n+1}(x) = 2\left(\frac{2x}{\sigma} - 1\right) \left(\frac{\cosh(n\gamma)}{\cosh((n+1)\gamma)}\right) P_n(x) - \left(\frac{\cosh((n-1)\gamma)}{\cosh((n+1)\gamma)}\right) P_{n-1}(x) \quad \text{für } p > 1 \quad (3-46)$$

mit:

$$P_0(x) = 1 \quad P_1(x) = \frac{\left(\frac{2x}{\sigma} - 1\right)}{\left(\frac{2}{\sigma} - 1\right)} \quad \gamma = \operatorname{arccosh}\left(\frac{2}{\sigma} - 1\right). \quad (3-47)$$

Man beachte, daß es aufgrund der rekursiven Definition der Chebyshev-Polynome nicht nötig ist, alle Spaltdichtevektoren früherer Iterationen in Gleichung 3-41 abzuspeichern; dies würde insbesondere bei schlecht konvergenten Problemen einen erheblichen Speicherauf-

wand bedeuten. Statt dessen erhält man nun durch Anwendung der obigen Gleichungen das folgende verbesserte Power-Iterationsschema [FER77, NAK77]:

$$\Psi^{(n)} = \frac{1}{\lambda_0^{(n-1)}} \mathbf{Q} \tilde{\Psi}^{(n-1)} \quad \Rightarrow \quad \tilde{\Psi}^{(n)} = \tilde{\Psi}^{(n-1)} + \alpha_n (\Psi^{(n)} - \tilde{\Psi}^{(n-1)}) + \beta_n (\tilde{\Psi}^{(n-1)} - \tilde{\Psi}^{(n-2)})$$

$$\alpha_1 = \frac{2}{2-\sigma} \quad \beta_1 = 0 \quad \alpha_n = \frac{4}{\sigma} \left(\frac{\cosh((n-1)\gamma)}{\cosh(n\gamma)} \right) \quad \beta_n = \left(1 - \frac{\sigma}{2} \right) \alpha_n - 1. \quad (3-48)$$

Man führt also zunächst eine unbeschleunigte Power-Iteration aus und verwendet dann die Zwei-Term-Rekursion, um aus $\Psi^{(n)}$, $\tilde{\Psi}^{(n-1)}$ und $\tilde{\Psi}^{(n-2)}$ einen verbesserten Spaltdichtevektor zu konstruieren. Offensichtlich benötigt man für die Anwendung dieses Verfahrens eine brauchbare Abschätzung des Dominanzverhältnisses σ . In [FER77, DER83, HAG67] wird gezeigt, daß mit dem Fehlerresiduum $r^{(n)} = \Psi^{(n)} - \tilde{\Psi}^{(n-1)}$ und der sog. Fehlerzerfallsrate $E^{(n)}$ folgende Beziehung gilt:

$$E^{(n)} = \left(\frac{\langle r_n, r_n \rangle}{\langle r_{n-1}, r_{n-1} \rangle} \right)^{1/2} \quad \Rightarrow \quad \lim_{n \rightarrow \infty} E^{(n)} = \sigma. \quad (3-49)$$

Um einen zuverlässigen Startwert für σ zu erhalten, wird man daher anfangs p (i.allg. mindestens 3 bis 5) unbeschleunigte Power-Iterationen durchführen, um dann erst den Iterationszyklus Gleichung 3-48 zu starten. Von Iteration zu Iteration wird dabei der Grad der angewandten Polynome höher und das Dominanzverhältnis wird durch folgende Beziehung stets mitangepaßt:

$$\sigma^{(n+p)} = \sigma^{(n-1+p)} \frac{1}{2} \left(\cosh \left[\frac{\operatorname{arccosh}(\gamma)}{n-1} \right] + 1 \right) \quad \gamma = C_{n-1} \left(\frac{2 - \sigma^{(n-1+p)}}{\sigma^{(n-1+p)}} \right) E^{(p, n-1)} \quad (3-50)$$

$$\sigma^{(p)} = E^{(p)} \quad E^{(p, n)} = \left(\frac{\langle \Psi^{(p+n)} - \tilde{\Psi}^{(p+n-1)} \rangle}{\langle \Psi^{(p+1)} - \tilde{\Psi}^{(p)} \rangle} \right).$$

Stellt man fest, daß bei höheren Polynomen der Fehlerzerfall $E^{(p, n)}$ erheblich von der theoretisch zu erwartenden Fehlerzerfallsrate abweicht, so wird der Zyklus abgebrochen und mit neuen Polynomen, wiederum beginnend mit solchen ersten Grades, gestartet. Der theoretische Fehler kann nach jeder Iteration ungefähr aus

$$E_{\text{theor.}}^{(n, p)} \approx \left(C_n \left(\frac{2 - \sigma^{(n)}}{\sigma^{(n)}} \right) \right)^{-1} \quad (3-51)$$

bestimmt werden. Ein sinnvolles Abbruchkriterium für den Start eines neuen Chebyshev-Zyklus ist z.B.:

$$\frac{E^{(n,p)}}{E_{\text{theor.}}^{(n,p)}} < 0.7. \quad (3-52)$$

Ein gutes Beispiel für die Effizienz des dargestellten Algorithmus ist in Abbildung 3-5 dargestellt. Hier wurde ein System konstruiert, das ein sehr großes Dominanzverhältnis von $\sigma = 0.977$ besitzt und daher mit der üblichen Power-Iterationsmethode sehr schlecht konvergieren sollte. Tatsächlich ist nach 200 Iterationen der iterative Fehler in der Spaltdichte gerade erst auf 10^{-4} gesunken. Die Chebyshev-Beschleunigung zeigt sich hingegen sehr effektiv: Nach bereits 60 Iterationen ist das Fehlerresiduum kleiner als 10^{-5} . Während der Fehlerzerfall bei der Power-Iteration sehr schnell einen asymptotischen Wert erreicht, erkennt man bei der Chebyshev-Beschleunigung deutlich die aufeinander folgenden Zyklen.

Es sei aber nicht verschwiegen, daß die Chebyshev-Beschleunigung auch gelegentlich fehlschlagen kann; liegt z.B. die erste Abschätzung des Dominanzverhältnisses weit ab vom wahren Wert, wird der erste Zyklus sehr stark fehlerbehaftete Spaltdichtevektoren liefern. Dann bleibt im allgemeine keine andere Möglichkeit, als die Iteration komplett von vorne, d.h. mit unbeschleunigten Iterationen zu starten.

Für Fixed-Source-Probleme wird die Matrixgleichung 3-37 leicht umformuliert: Mit einem zusätzlichen festen Quellterm S und Unterkritikalität vorausgesetzt erhält man zunächst analog zu Gleichung 3-21 folgenden Matrixausdruck für die Flüsse:

$$\mathbf{M}\Phi - \mathbf{B}\Phi = S, \quad (3-53)$$

der Faktor k_{eff} ist nun nicht mehr notwendig. Auch dieses Problem läßt sich wieder auf eine Gleichung in der Spaltdichte reduzieren, wenn man neben der Matrix $\mathbf{Q} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{B}$ den modifizierten Quellterm $V = \mathbf{F}^T S$ definiert; dann gilt:

$$\Psi = (\mathbf{1} - \mathbf{Q})^{-1} V. \quad (3-54)$$

Die Überlegungen, die bereits für Eigenwertprobleme angestellt wurden, gelten sinngemäß auch hier: Das Power-Iterationsschema:

$$\Psi^{(n)} = \mathbf{Q}\Psi^{(n-1)} + V \quad (3-55)$$

wird auch hier gegen die wahre Spaltdichte konvergieren, insbesondere da die Matrizen \mathbf{Q} aus 3-37 und 3-55 denselben spektralen Radius haben. Auch die Chebyshev-Beschleunigung kann aus dem Eigenwertproblem übernommen werden, vorausgesetzt man redefiniert das Dominanzverhältnis als $\sigma = \rho(\mathbf{Q})$. Es gilt auch für die Fehlerreduktion:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} E^{(n)} = \rho(\mathbf{Q}). \quad (3-56)$$

Bereits in Abschnitt 2.4 wurde erwähnt, daß Fixed-Source-Probleme in multiplizierenden Medien die Eigenschaft haben, noch schlechter als das äquivalente Eigenwertproblem zu konvergieren. Während die Konvergenzrate des Eigenwertproblems sich nämlich nach dem Dominanzverhältnis λ_1 / λ_0 richtet, ist das Problem mit fester Quelle gemäß Gleichung 3-56 nur abhängig vom maximalen Eigenwert der Iterationsmatrix \mathbf{Q} , die aber identisch mit der Iterationsmatrix des Eigenwertproblems $\mathbf{M}^{-1}\mathbf{B}$ ist und damit ebenfalls den maximalen Eigenwert k_{eff} besitzt. Ist dieser größer eins, so ist dies konsistent mit der Aussage, daß ein kritisches oder überkritisches System mit einer zusätzlichen festen Quelle keine konvergente Lösung liefern kann.

Die Behandlung nahezu kritischer Systeme ($k_{\text{eff}} = \rho(\mathbf{Q}) \approx 1$) mit fester Quelle gestaltet sich also besonders schwierig, da selbst der Chebyshev-Formalismus häufig nicht ausreicht, das Problem in angemessener Rechenzeit zur Konvergenz zu bringen. Hier behilft man sich mit einem weiteren Mechanismus, der Spaltquellenextrapolation (siehe z.B. [RHO91, DER83]), die dann eingesetzt wird, sobald die unbeschleunigten Power-Iterationen einen asymptotischen Fehlerzerfall anzeigen. Nimmt man an, daß die Lösung des Problems durch den fundamentalen Eigenvektor des äquivalenten kritischen Problems dominiert wird, kann man die exakte Lösung Ψ^∞ im n -ten Iterationsschritt schreiben als:

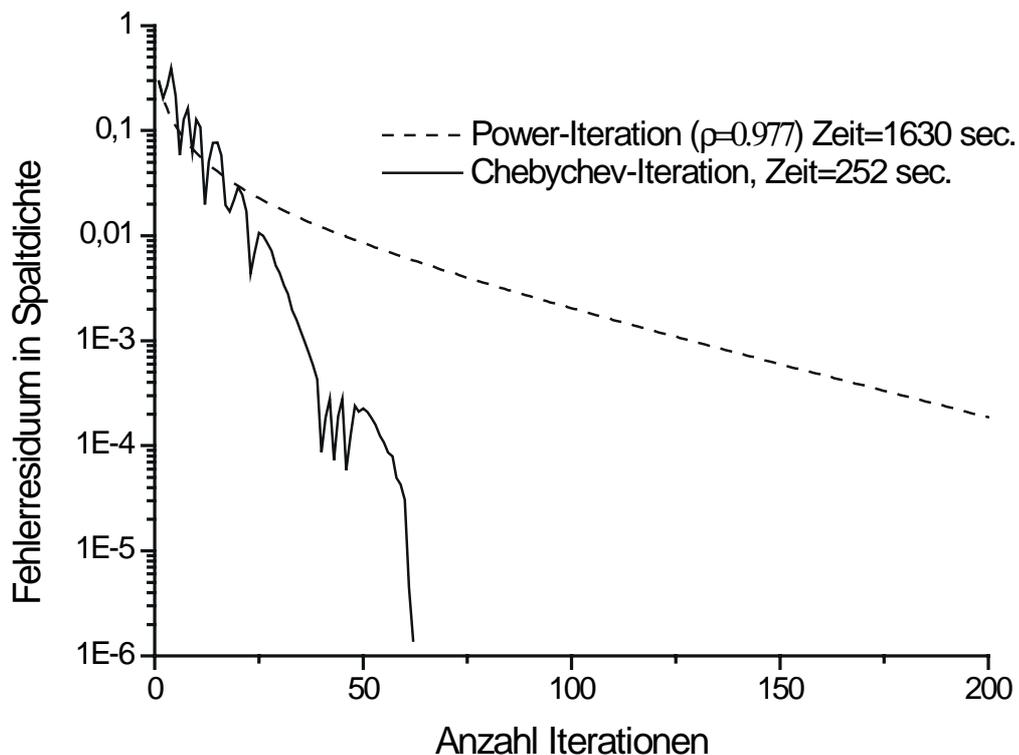


Abbildung 3-5: Effekt der Chebyshev-Beschleunigung auf die Konvergenz der Spaltdichte in einem Eigenwertproblem mit einem sehr großen Dominanzverhältnis von 0,977.

$$\Psi^\infty = \Psi^{(n)} + \rho^n(\mathbf{Q})c\Psi_0, \quad (3-57)$$

wobei die Beimischung des Eigenvektors Ψ_0 proportional zur Fehlerzerfallsrate ρ^n gewählt wurde. Mit dieser Annahme kann man nun durch die Vorschrift:

$$\tilde{\Psi}^{(n)} = \Psi^{(n)} + \frac{\rho}{1-\rho}(\Psi^{(n)} - \Psi^{(n-1)}) \quad (3-58)$$

einen verbesserter Spaltdichtevektor konstruieren, denn dieser Ausdruck ist äquivalent zu:

$$\Psi^{(n)} + \frac{\rho(\mathbf{Q})}{1-\rho(\mathbf{Q})}(\Psi^{(n)} - \Psi^{(n-1)}) = \Psi^\infty - \rho^n c\Psi_0 + \frac{\rho}{1-\rho}(\Psi^\infty - \rho^n c\Psi_0 - \Psi^\infty + \rho^{n-1} c\Psi_0) = \Psi^\infty,$$

also der exakten Lösung. Diese Beziehung gilt natürlich nicht streng, da es schwer zu beurteilen ist, wann die Fehlerzerfallsrate $E^{(n)}$ ihren tatsächlichen asymptotischen Grenzwert ρ gemäß Gleichung 3-56 erreicht. Findet die Extrapolation zu früh statt, kann dies zu verstärkter Beimischung höherer Eigenmoden führen und die Konvergenz des Verfahrens erheblich verschlechtern. Dieser einfache Algorithmus ist also mit Vorsicht einzusetzen. Ferner ist die Annahme, daß die Lösung des Fixed-Source-Problems durch den fundamentalen Eigenvektor des äquivalenten kritischen Problems dominiert wird, nur dann sinnvoll, wenn die Quelle über das gesamte System verteilt ist und die Quellverteilung nicht allzu stark von der sich letztlich einstellenden Flußverteilung abweicht. Wird das System z.B. von Neutronen gespeist, die über den Rand des Systems eindringen (sog. „Boundary Sources“), ist die Annahme 3-57 möglicherweise vollkommen unzulässig. Dies erklärt aber auch, warum sich die Spaltquellenextrapolation in zeitabhängigen Problemen sehr gut bewährt hat, die, wie in Abschnitt 2.4 bereits gezeigt wurde, ebenfalls auf Fixed-Source-Probleme zurückgeführt werden können. Hier tritt nämlich gerade die oben geschilderte Situation ein: Die Spaltverteilung Ψ wird bei langsamen Transienten sehr ähnlich zur stationären Grundmode Ψ_0 sein; dasselbe gilt für den Quellterm, der ja im wesentlichen der mit $(1/\nu\Delta t)$ skalierte Fluß des letzten Zeitschrittes ist. Sind die Zeitschritte nicht zu groß gewählt, ist dieser Beitrag von der Formfunktion her beinahe identisch zur Grundmode des Systems. Ferner sind die Flußabschätzungen in transienten Rechnungen meist so gut, daß die asymptotische Fehlerzerfallsrate ρ schnell erreicht wird.

Die beiden geschilderten Beschleunigungsmechanismen, Chebyshev-Beschleunigung und Spaltdichtenextrapolation, sind sowohl in den Diffusions- als auch in den Transportcode, der in Kapitel 5 beschrieben wird, implementiert worden. Die Dimension der Flußvektoren ist natürlich aufgrund der Winkelabhängigkeit für das Transportproblem erheblich größer als für das Diffusionsproblem. Durch Reduktion auf die Spaltdichte erhält man jedoch zwei formal

äquivalente und von der Dimension her gleiche Probleme, so daß die beschriebenen Mechanismen für beide theoretischen Ansätze funktionieren.

3.6 Das Zusammenspiel von inneren und äußeren Iterationen

Mit der Lösung der „Within-Group“-Gleichungen und den im vorigen Abschnitt erläuterten Beschleunigungsmechanismen kann nun das vollständige Neutronendifusionsproblem gelöst werden. Man betrachte zunächst den Fall ohne Aufwärtsstreuung:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} D_1 + \Sigma_1 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ -T_{21} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & \cdot \\ -T_{G1} & \cdot & \cdot & \cdot & -T_{G,G-1} & D_G + \Sigma_g \end{pmatrix}}_{=: \mathbf{M}} \underbrace{\begin{pmatrix} \phi_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \phi_G \end{pmatrix}}_{=: \Phi} = \frac{1}{k_{\text{eff}}} \underbrace{\begin{pmatrix} \chi_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \chi_G \end{pmatrix}}_{=: \mathbf{B} = \chi \mathbf{F}} \underbrace{\begin{pmatrix} F_1 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & F_G \end{pmatrix}}_{=: \mathbf{F}} \underbrace{\begin{pmatrix} \phi_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \phi_G \end{pmatrix}}_{=: \Phi} = \frac{1}{k_{\text{eff}}} \underbrace{\begin{pmatrix} \chi_1 \Psi \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \chi_G \Psi \end{pmatrix}}_{=: \Psi} \quad (3-59)$$

Die Lösung wird folgendermaßen vonstatten gehen:

- Konstruktion einer anfänglichen Flußschätzung $\Phi^{(0)}$ und der daraus resultierenden Spaltdichte $\Psi^{(0)} = \mathbf{F}^T \Phi^{(0)}$ sowie des Eigenwerts $k_{\text{eff}}^{(0)}$.
- Beginnend mit der äußeren Iteration $n=0$ wird das Problem $\mathbf{M}\Phi^{(n+1)} = \frac{1}{k_{\text{eff}}} \chi \Psi^{(n)}$ durch den folgenden Algorithmus gelöst:

$$\begin{aligned} \phi_1^{(n+1)} &= (D_1 + \Sigma_1)^{-1} \left(\frac{1}{k_{\text{eff}}} \chi_1 \Psi^{(n)} \right) \\ \phi_2^{(n+1)} &= (D_2 + \Sigma_2)^{-1} \left(\frac{1}{k_{\text{eff}}} \chi_1 \Psi^{(n)} - T_{21} \phi_1^{(n+1)} \right) \\ &\cdot \\ &\cdot \\ &\cdot \\ \phi_g^{(n+1)} &= (D_g + \Sigma_g)^{-1} \left(\frac{1}{k_{\text{eff}}} \chi_g \Psi^{(n)} - \sum_{g' < g} T_{gg'} \phi_{g'}^{(n+1)} \right). \end{aligned} \quad (3-60)$$

- Nachdem alle Flüsse $\phi_g^{(n+1)}$ bestimmt worden sind, wird eine neue Spaltquelle $\Psi^{(n+1)}$ bestimmt und ggf. extrapoliert oder Chebyshev-beschleunigt; daraus resultiert dann ein verbesserter Vektor $\tilde{\Psi}^{(n+1)}$ und ein neuer Wert für $k_{\text{eff}}^{(n+1)}$.
- Die äußeren Iterationen werden solange wiederholt, bis Spaltquellen, Gruppenflüsse und effektiver Multiplikationsfaktor hinreichend gut konvergiert sind.

In den inneren Iterationen werden stets die 5-Band-Matrizen $D_g + \Sigma_g$ invertiert; die Streumatrizen $T_{gg'}$ wirken hingegen lediglich multiplikativ auf Flüsse niedrigerer (d.h. höherenergetischer) Energiegruppen. Erst nach Neuermittlung aller Gruppenflüsse wird ggf. die Beschleunigung der Spaltquelle durchgeführt.

Die Aufteilung des Lösungsalgorithmus in zwei vollkommen separat ablaufende Bestandteile, die inneren und äußeren Iterationen, darf jedoch nicht zu der Annahme verleiten, daß diese beiden Verfahren auch numerisch voneinander unabhängig ist. In der Berechnungsvorschrift für die Power-Iteration:

$$\Psi^{(n)} = \frac{1}{\lambda_0^{(n-1)}} \mathbf{Q} \Psi^{(n-1)} \quad \text{mit} \quad \lambda_0^{(n)} = \lambda_0^{(n-1)} \frac{\|\Psi^{(n)}\|_2}{\|\Psi^{(n-1)}\|_2} \quad (3-61)$$

setzt man stillschweigend voraus, daß die Matrix $\mathbf{Q} = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{B}$ exakt berechnet werden kann und dann auf die Spaltdichte $\Psi^{(n-1)}$ angewendet wird. Diese Annahme ist jedoch nicht korrekt, da die Invertierung von \mathbf{M} tatsächlich implizit im inneren Iterationszyklus erfolgt und die Flüsse, Spaltdichten und auch k_{eff} immer mit einem gewissen iterativen Fehler behaftet sein werden; die Matrix \mathbf{Q} selbst liegt während der äußeren Iterationen nie in expliziter Form vor. Auch die für die Chebyshev-Beschleunigung verwendeten Parameter werden so mit fehlerbehafteten Größen belegt. Es stellt sich daher die Frage, wie gut die Gruppenflüsse während der inneren Iterationen in jeder einzelnen Energiegruppe konvergiert sein müssen, bevor eine neue Power-Iteration mit Erfolg gestartet werden kann.

Diese Fragestellung ist von grundlegender Bedeutung für die Leistungsfähigkeit eines iterativen Verfahrens. Sind die Gruppenflüsse nicht ausreichend konvergiert, so wird die Power-Iteration i.allg. keine Asymptotik in der Fehlerzerfallsrate zeigen und eine Beschleunigung wird im besten Fall nicht effizient sein und im schlimmsten Fall das Verfahren fehlschlagen lassen. Sind die Gruppenflüsse sehr gut konvergiert, werden die äußeren Iterationen zwar im Fehlerzerfall nahe an die theoretisch zu erwartenden Raten heranreichen; dafür wird aber bei den inneren Iterationen erheblich Rechenzeit verbraucht, die u.U. nicht benötigt worden wäre. Man muß also stets abwägen zwischen der für die Flüsse vorzuschreibenden Konvergenz und der maximal pro Gruppe zulässigen Rechenzeit.

So wird man für die Gruppenflüsse ein punktweises Konvergenzkriterium ε_p vorschreiben, das erreicht werden muß, bevor die Iterationen in einer Gruppe abgebrochen werden:

$$\varepsilon_p > \max_{i,j} \left(\frac{\phi_{i,j}^{(n)} - \phi_{i,j}^{(n-1)}}{\phi_{i,j}^{(n)}} \right) \quad i \in [1, I] \quad j \in [1, J]. \quad (3-62)$$

Darüber hinaus wird man aber auch eine Anzahl N festlegen, die das zulässige Maximum von inneren Iterationen angibt, die pro Gruppe zulässig ist. Diese Anzahl ist natürlich auch abhängig von der Güte des iterativen Verfahrens, das zur Invertierung von $D_g + \Sigma_g$ verwendet wird, und auch davon, welche Energiegruppe betrachtet wird. Thermische Gruppen mit großem Streuverhältnis Σ_s / Σ_t werden i.allg. schlechter konvergieren als schnelle Energiegruppen; dies ist bereits im Zusammenhang mit der „Iteration on the Scattering Source“ diskutiert worden, gilt aber sinngemäß auch für die Diffusionstheorie.

Diese Aussagen haben lediglich qualitativen Charakter und müssen prinzipiell für jedes Problem erneut überprüft werden. Nur eine sehr effiziente Wahl dieser Parameter garantiert, daß das zeitabhängige Neutronendiffusions- und Transportproblem in akzeptabler Rechenzeit gelöst werden kann.

Es sei hier angemerkt, daß sich das Konjugierte-Gradienten-Verfahren sehr gut bewährt hat. Während für DORT oder DIF3D stets mindestens 10-15 innere Iterationen pro Gruppe vorgeschrieben werden mußten, um die Gruppenflüsse für den FRM-II gut auszukonvergieren, war es bei dem Konjugierte-Gradienten-Verfahren ausreichend, diese Anzahl auf 2-4 zu beschränken; trotz des höheren Aufwands pro Iteration wird das Verfahren dadurch wesentlich effizienter als ADI oder SOR. Dies hängt insbesondere damit zusammen, daß das Konjugierte-Gradienten-Verfahren in der Lage ist, sowohl kurzreichweitige Fehler als auch langreichweitige Störungen sehr gut auszugleichen. Führt man eine Fourier-Analyse [AXE96, HAC94] des räumlichen Fehlers durch, so wird man stets Anteile erhalten, die sich über das gesamte räumliche Gitter erstrecken (niederfrequente Anteile) und solche, die lokal beschränkt sind oder schnell oszillieren. Auf dieser Feststellung beruhen u.a. die Mehrgitter-Verfahren [HAC94], die zunächst auf einem groben Gitter die niedrigen Frequenzen und erst dann auf graduell verfeinerten Gittern die hochfrequenten Anteile des räumlichen Fehlers auskonvergieren. Weder ADI und SOR noch die später zu diskutierenden Verfahren zur Lösung der Transportgleichung haben diese positive Eigenschaft und benötigen daher entsprechend mehr Iterationen als die Konjugierte-Gradienten-Methode oder gute Beschleunigungsverfahren. Ein solches ist das für die Diskrete-Ordinaten-Theorie verwendete „Coarse Mesh Rebalancing“ (siehe Abschnitt 4.4).

Diese Argumente unterstützen außerdem den Einsatz von ausschließlich iterativen Verfahren für die Diffusions- oder Transportgleichung mit vielen Energiegruppen. Selbst wenn ein direktes Verfahren eine „exakte“ Lösung der „Within-Group“-Gleichungen in insgesamt kürzerer Rechenzeit liefern mag als ein vergleichbares iteratives Verfahren, so wird doch letzteres eine brauchbare Flußabschätzung für die nächste Power-Iteration möglicherweise bereits nach wenigen inneren Iterationen liefern und damit auf jeden Fall schneller als das direkte Verfahren sein. Eine hohe Genauigkeit ist erst in den letzten Power-Iterationen erforderlich; bis dahin sind aber Flüsse und Eigenwerte so gut konvergiert, daß wiederum wenige Iterationen ausreichen.

Die Behandlung der Aufwärtsstreuung verkompliziert die Lösung der Neutronendiffusionsgleichungen zusätzlich, da die Matrix 3-59 nicht mehr länger untere Dreiecksform besitzt. Führt man hier einen zusätzlichen „Upscatter“-Index u ein, so wird Gleichung 3-60 des Lösungsalgorithmus modifiziert zu:

$$\phi_g^{(n+1,u)} = (D_g + \Sigma_g)^{-1} \left(\frac{1}{k_{\text{eff}}} \chi_g \Psi^{(n)} - \sum_{g' < g} T_{gg'} \phi_{g'}^{(n+1,u)} - \sum_{g' > g} T_{gg'} \phi_{g'}^{(n+1,u-1)} \right) \quad u = 1 \dots U. \quad (3-63)$$

Über alle thermischen Gruppen, d.h. alle Gruppen, die Aufwärtsstreuung empfangen oder aus denen heraus aufwärts gestreut wird, wird also innerhalb einer äußeren Iteration maximal U -fach iteriert; dabei werden in jeder Upscatter-Iteration u die jeweils aktuellsten verfügbaren Flüsse eingesetzt. Entsprechend erforderlich ist dann auch die mehrfache Invertierung des Matrixoperators $D_g + \Sigma_g$ pro Gruppe. Damit entspricht der Rechenaufwand für eine thermische Gruppe dem U -fachen dessen einer schnellen Gruppe, und ein Problem mit z.B. 10 Gruppen, davon 3 thermischen, wird effektiv zu einem Problem mit $(10-3)+3 \cdot U$ Gruppen. Angesichts der Tatsache, daß sich z.B. für den FRM-II $U = 10-18$ bewährt hat, erhält man einen Eindruck von dem erheblichen numerischen Mehraufwand, den thermische Gruppen verursachen. Dieses Problem wird jedoch dadurch etwas entschärft, daß meist 1-2 innere Iterationen pro Gruppe und pro Upscatter-Iteration ausreichend sind. Ist das Problem bereits gut konvergiert, kann auch die maximale Anzahl der Upscatter-Iterationen reduziert werden (in zeitabhängigen Rechnungen sind i.allg. 2-3 solcher Iterationen hinreichend). Im Transportcode DORT wird das Verfahren der Upscatter-Iterationen standardmäßig nicht angewandt. Thermische Gruppen werden dort genauso behandelt wie schnelle Gruppen und man begnügt sich mit der Methode des sog. „Upscatter-Rebalancing“ [RHO91]. Dieses hat sich allerdings gerade für den FRM-II mit seinem signifikanten Anteil an Aufwärtsstreuung überhaupt nicht bewährt, was unmittelbare Auswirkungen auf die Konvergenz der Power-Iteration und die Effizienz der Beschleunigungsmechanismen hat.

3.7 Behandlung des zeitabhängigen Diffusionsproblems

Der Einfachheit halber wurde bis hierher nur die Lösung der stationären Diffusionsgleichung behandelt. Wie jedoch bereits in Abschnitt 2.6 ausführlich erläutert, ist auch die implizit diskretisierte zeitabhängige Neutronendifusionsgleichung äquivalent zu einer Folge von „Fixed-Source“-Problemen. Die Gruppengleichungen lauten analog zum stationären Fall:

$$-\nabla D_g(\vec{r})\nabla\phi_g^{(n+1)}(\vec{r}) + \left(\Sigma_g^r(\vec{r}) + \frac{1}{v_g\Delta t} \right) \phi_g^{(n+1)}(\vec{r}) = S_g(\vec{r})$$

$$S_g(\vec{r}) = \sum_{g' \neq g} \Sigma_s^{gg'}(\vec{r})\phi_{g'}^{(n+1)}(\vec{r}) + \chi'_g \sum_{g'=1}^G v\Sigma_f^{g'}(\vec{r})\phi_{g'}^{(n+1)}(\vec{r}) + \frac{1}{v_g\Delta t} \phi_g^{(n)} + S_{\text{delayed}}^{(n)} \quad (3-64)$$

$$\chi'_g = (1-\beta)\chi_p^g + \sum_{l=1}^6 \chi_{dg}^l \lambda_l \gamma_l \beta \quad S_{\text{delayed}}^{(n)} = \sum_{l=1}^6 \chi_{dg}^l \lambda_l \frac{1}{\Delta t} \gamma_l C_l^{(n)}(\vec{r})$$

mit den bereits in Abschnitt 2.6 eingeführten Bezeichnungen. Die Vorläufergleichungen (Gleichungen 2-55) sind hier nicht mehr explizit aufgeführt. Die Lösung der Gleichungen für den Zeitschritt $n+1$ erfolgt nun mit denselben Methoden, d.h. innerer und äußerer Iteration sowie Beschleunigungsmechanismen wie im vorigen Abschnitt, allerdings mit zusätzlichen konstanten Quelltermen, die aus den Flüssen bzw. Vorläufern des Zeitschrittes n gebildet werden.

Formal ist dieses Problem bereits in Abschnitt 3.6 diskutiert worden. Die Konvergenz wird wiederum durch den spektralen Radius der Iterationsmatrix $\mathbf{Q} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{B}$ bestimmt, wobei die Matrix \mathbf{M} allerdings durch den zusätzlichen effektiven Absorptionsquerschnitt $(1/v\Delta t)$ auf der Diagonalen modifiziert wird. Ohne diese Modifikation wäre eine Lösung von Gleichung 3-64 auch gar nicht möglich, da ein transientes System i.allg. verzögert oder prompt überkritisch ist und daher ohne den Zusatzterm $\rho(\mathbf{Q}) = k_{\text{eff}} > 1$ gelten würde (streng genommen gilt dies nur für den prompt überkritischen Fall). Man kann daher prinzipiell aus der Kenntnis des Eigenwertes des kritischen bzw. überkritischen Systems auch eine maximale Zeitschrittgröße herleiten. Je stärker das System nämlich überkritisch ist, desto größer muß der Absorptionsquerschnitt $(1/v\Delta t)$ (d.h. desto kleiner Δt) gewählt werden, um wiederum $\rho(\mathbf{Q}) < 1$ zu erreichen. Da in transienten Berechnungen der Eigenwert aber kaum in jedem Zeitschritt zugänglich sein wird, ist diese Feststellung eher von theoretischem Interesse.

Tatsächlich wird man versuchen, Δt so klein zu wählen, daß $\rho(\mathbf{Q})$ genügend weit von eins entfernt ist und Konvergenz bereits nach wenigen äußeren Iterationen (als sinnvoll hat sich hier ein Maximum von etwa 10 äußeren Iterationen pro Zeitschritt herausgestellt) erreicht

wird. Dieses Kriterium ist u.U. wesentlich restriktiver als die Zeitschrittweitenbegrenzung aufgrund von Stabilitäts- oder Genauigkeitsüberlegungen (siehe Abschnitt 2.5.2). Je näher außerdem der spektrale Radius an eins liegt, desto empfindlicher macht sich auch eine geringfügige Abweichung der Beschleunigungsparameter vom optimalen Wert in einer verschlechterten Konvergenz des Gesamtproblems bemerkbar.

Erschwerend kommt hinzu, daß der bei der Berechnung eines Zeitschrittes gemachte Fehler häufig auch noch systematischer Natur ist, und sich daher unter u.U während einer Transiente von Zeitschritt zu Zeitschritt akkumuliert und verstärkt. Wie bereits in Abschnitt 2.4 festgestellt wurde, wird sich ein multiplizierendes Medium mit einer festen Quelle stets nach einem gewissen Zeitraum asymptotisch einem dynamischen Gleichgewicht nähern, und zwar um so langsamer, je schwächer unterkritisch das System ist. Überträgt man diese Überlegung auf einen Zeitschritt während einer Transiente, so wird sich bei einem zu groß gewählten Δt die Spaltverteilung von unten langsam der wahren Spaltdichte nähern. Selbst bei Erreichen eines restriktiven Abbruchkriteriums muß man davon ausgehen, daß möglicherweise noch viele weitere Iterationen nötig gewesen wären, um tatsächlich Konvergenz zu erreichen, und daß jede dieser Iterationen zwar kleine, aber systematisch positive Beiträge zur Spaltdichte geliefert hätte, deren Summe möglicherweise wesentlich größer als das geforderte Abbruchkriterium ist.

Es ist also von essentieller Bedeutung, sicherzustellen, daß die Zeitschritte entsprechend klein und die Abbruchkriterien sehr restriktiv gewählt werden, um zuverlässige Aussagen über die berechnete Transiente zu erhalten. In diesem Zusammenhang ist zu betonen, daß die entscheidenden Verbesserungen, die bei der Konvergenz von sowohl Diffusions- als auch Transportcode erzielt wurden, nicht bloß von theoretischem Interesse, sondern unabdingbare Voraussetzung für die Erstellung eines voll impliziten, zeitabhängigen Codes sind.

3.8 Zeitliche Flußextrapolation

Wie oben erwähnt, ist das zeitabhängige Problem in der Konvergenz wesentlich kritischer als das stationäre Problem. Die Berechnung eines Zeitschrittes wird also ohne Vorkenntnis der Flußverteilung mindestens so rechenzeitaufwendig sein wie für ein äquivalentes Eigenwertproblem; aufgrund der unangenehmen Eigenschaften des „Fixed-Source“-Problems kann der Vergleich sogar noch ungünstiger ausfallen. Ein großer Vorteil iterativer Verfahren ist jedoch, daß bei einer einigermaßen guten Abschätzung der Fluß- und Spaltverteilungen das Problem schon nach wenigen äußeren Iterationen konvergieren kann. Man wird also beim Studium von Transienten stets darauf bedacht sein, aus der Lösung des letzten Zeitschrittes eine möglichst gute Abschätzung für den nächsten Schritt zu gewinnen.

Der Ansatz ist recht einfach: Unterstellt man, daß sich die räumlichen Flüsse in guter Näherung exponentiell in der Zeit verhalten:

$$\phi(t + \Delta t) = \phi(t) \exp(\omega(t)\Delta t), \quad (3-65)$$

so läßt sich die Reaktorperiode ω darstellen durch:

$$\omega(t) = \frac{1}{\Delta t} \ln \left(\frac{\phi(t + \Delta t)}{\phi(t)} \right). \quad (3-66)$$

Der Fluß zum nächsten Zeitpunkt kann dann abgeschätzt werden durch:

$$\tilde{\phi}(t + 2 \cdot \Delta t) = \phi(t + \Delta t) \exp(\omega(t)\Delta t). \quad (3-67)$$

Eine alternative Möglichkeit besteht darin, die Flußänderung linear durch einen Differenzenquotienten zu approximieren und damit zum nächsten Zeitschritt zu extrapolieren:

$$\omega = \frac{\phi(t + \Delta t) - \phi(t)}{\Delta t} \Rightarrow \tilde{\phi}(t + 2 \cdot \Delta t) = \phi(t + \Delta t) + \omega \Delta t = 2\phi(t + \Delta t) - \phi(t), \quad (3-68)$$

eine Methode, die bereits in Abschnitt 2.5.3 als „Diamond-Differencing“-Relation vorgestellt wurde. Beide Ansätze haben sich bei der Transientenanalyse etwa gleich gut bewährt.

Entscheidend ist aber, daß die Reaktorperioden ω unbedingt räumlich und energetisch aufgelöst betrachtet werden müssen; ein globales ω ist keinesfalls ausreichend. Für jede räumliche Masche und für jede Energiegruppe muß also neben den Flüssen ein Wert für die Reaktorperiode errechnet, gespeichert und beim nächsten Zeitschritt gemäß Gleichung 3-68 zur Extrapolation verwendet werden. Trotz des numerischen Aufwands und insbesondere des Speicherbedarfs lohnt dieses Verfahren: Die Konvergenz wird gegenüber einer nicht extrapolierten Flußschätzung um mindestens eine Größenordnung verbessert.

Eine Erweiterung dieses Gedankens stellt die Methode der Periodenfaktorisierung [NAK77] dar, die eine Art Mittelding zwischen der voll impliziten Zeitdiskretisierung und dem quasistationären Verfahren darstellt. Der Fluß wird transformiert durch:

$$\hat{\phi}(t) = \phi(t) \exp(\omega t). \quad (3-69)$$

Einsetzen dieses Ausdrucks in die Diffusions- oder Transportgleichung liefert eine leicht modifizierte Version der Gleichungen, die, da der zeitlich bedingte Zuwachs im wesentlichen durch den Exponentialterm dargestellt wird, leichter zu lösen ist als die ursprüngliche Trans-

portgleichung. Die Perioden ω können dann entweder über die Beziehung 3-66 abgeschätzt werden, oder, wenn ω als globale Reaktorperiode verwendet wird, durch das Lösen der verallgemeinerten punktkinetischen Gleichungen (siehe Anhang E, Gleichungen E-8) bestimmt werden. Die Verwendung einer globalen Reaktorperiode ist jedoch für Situationen, in denen der Fluß räumlich schnell variiert, sicherlich keine gute Lösung, während die Abschätzung 3-66 wiederum eine Näherung bedeutet, die in dieser Arbeit vermieden werden sollte. Verwendet wird also daher nur die einfache Extrapolation, die lediglich die erste Flußabschätzung für das iterative Verfahren liefert, jedoch keinerlei Näherung in den Algorithmus einführt. Von der Implementation einer quasistationären Methode wurde im Rahmen dieser Arbeit abgesehen. Die Erfahrungen [GOL00] zeigen nämlich, daß die Änderung der Formfunktion während eines (bei diesem Zugang naturgemäß großen) Zeitschrittes so erheblich ist, daß die Lösung des letzten Zeitschrittes als Flußschätzung nicht mehr zu gebrauchen ist; man startet gewissermaßen wieder bei „Null“, während man bei der impliziten Methode zum einen frei von den in der quasistationären Methode gemachten Näherungen ist und durch Extrapolation in der Regel ausgezeichnete Flußschätzungen aus den bekannten Flüssen generieren kann.

Schließlich kann die Berechnung der Perioden auch dazu dienen, die Zeitschrittweite zu steuern. Für einfache parabolische Differentialgleichungen auf regelmäßigen Gittern lassen sich zwar analytische Ausdrücke für die maximal zulässige Zeitschrittweite bei vorgegebener Genauigkeit herleiten; werden die Systeme komplizierter, greift man hingegen meist auf empirische Beziehungen und die Erfahrung zurück.

Eine Funktion, bei der man den Abschneidefehler leicht bestimmen kann, ist die Exponentialfunktion als Lösung der Differentialgleichung:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \omega \phi \quad \Rightarrow \quad \frac{\phi^{(n+1)} - \phi^{(n)}}{\Delta t} = \omega \phi^{(n+1)}. \quad (3-70)$$

Im zweiten Schritt wurde die implizite Diskretisierung dieser Gleichung angegeben. Die Lösungen beider Gleichungen sowie deren Reihenentwicklungen lassen sich leicht angeben:

$$\begin{aligned} \phi(t + \Delta t) &= \phi(t) \exp(\omega t) \approx \phi(t) \left(1 + \omega \Delta t + \frac{1}{2!} \omega^2 \Delta t^2 + \frac{1}{3!} \omega^3 \Delta t^3 + \dots \right) && \text{"exakte Lösung"} \\ \phi(t + \Delta t) &= \phi(t) \frac{1}{1 - \omega \Delta t} \approx \phi(t) \left(1 + \omega \Delta t + \omega^2 \Delta t^2 + \omega^3 \Delta t^3 + \dots \right) && \text{"implizite Diskretisierung"}. \end{aligned} \quad (3-71)$$

Der Abschneidefehler ist also von der Form:

$$\tau = |\phi(t)| \frac{1}{2} \omega^2 \Delta t^2 + O(\Delta t^3), \quad (3-72)$$

so daß sich der gesamte Abschneidefehler nach N Iterationen auf:

$$\tau_{\text{ges.}} = |\phi(t)| \frac{1}{2} N \omega^2 \Delta t^2 + O(\Delta t^3) \quad (3-73)$$

belaufen wird. Derselbe Wert folgt auch durch Vergleich der Reihenentwicklungen von:

$$\phi(t + N\Delta t) = \left(\frac{1}{1 - \omega\Delta t} \right)^N \phi(t) \quad \text{und} \quad \phi(t + N\Delta t) \exp(\omega N\Delta t). \quad (3-74)$$

Bei einem gewünschten Absolutfehler von $\tau_{\text{rel.}}$, z.B. 0.001, und einer Transientendauer von $T = N\Delta t$ ergibt sich eine maximal zulässige Zeitschrittweite von:

$$\Delta t_{\text{max.}} = \frac{2\tau_{\text{rel.}}}{\omega^2 T}. \quad (3-75)$$

Bei der Zeitschrittweitensteuerung für die Diffusions- oder Transportgleichung wird für ω der Maximalwert:

$$\omega = \frac{\max(\phi(t + \Delta t) - \phi(t))}{\Delta t} \quad (3-76)$$

der Änderung der skalaren Flüsse angesetzt, und die laut Gleichung 3-75 maximale Zeitschrittweite nochmals um einen Faktor 5 reduziert. Selbst dann ist der errechnete Zeitschritt für normale, verzögert kritische Betriebstransienten immer noch so groß, daß die iterative Lösung sehr viel Zeit in Anspruch nimmt. Die Zeitschrittweite wird sich daher eher nach der Maximalanzahl der äußeren Iterationen richten. Sowohl im Diffusions- als auch im Transportcode besteht auch zusätzlich die Möglichkeit, die Schrittweitensteuerung explizit abzuschalten und feste Zeitschritte vorzugeben, oder zu bestimmten Zeitpunkten (an denen ein Betriebsvorgang, z.B. Steuerstabbewegung o.ä. einsetzt) den Zeitschritt bewußt einzuschränken und dann das System selbst nach einer passenden Zeitschrittweite suchen zu lassen. Ferner wird auch versucht, die Schrittweiten nicht zu stark variieren zu lassen, so daß z.B. von Zeitschritt zu Zeitschritt nur eine Änderung um einen bestimmten Maximalfaktor von etwa 1,2-2,0 stattfinden darf. Bei der noch zu besprechenden Kopplung mit einem Thermohydraulikmodul wird hingegen dieses häufig die Zeitschritte bestimmen. Die Neutronenkinetik schlägt dann lediglich eine maximale Schrittweite vor oder definiert eine Obergrenze.

3.9 Zusammenfassung

Mit den in diesem Kapitel vorgestellten Methoden ist es gelungen, einen hochoptimierten Neutronendiffusionscode zu erstellen, der zur Analyse von Transienten des FRM-II erfolgreich eingesetzt werden konnte. Viele der vorgestellten Ansätze können ohne oder mit geringfügigen Änderungen in den Transportcode übernommen werden, nämlich:

- die Chebyshev-Extrapolation und die Spaltdichteextrapolation,

- die Behandlung der Aufwärtsstreuung,
- die Flußextrapolation und
- die Zeitschrittweitensteuerung.

Nach dem Gesagten ist eine der entscheidenden Voraussetzungen für die Entwicklung eines transienten Transportcodes die Verbesserung der Konvergenz um mehrere Größenordnungen; ist dies gegeben, sind Ergebnisse von hoher Genauigkeit zu erwarten.

Durch die teilweise drastische Einschränkung der Zeitschrittweite durch die iterative Lösungsmethode erscheint es generell nicht besonders sinnvoll, zu höheren Zeitdiskretisierungsschemata überzugehen, da der Genauigkeitsgewinn minimal und der Rechenaufwand größer wird. Relativ leicht erproben läßt sich lediglich das „Diamond-Differencing“-Schema (siehe Abschnitt 2.5.3).

4 Behandlung des Neutronentransportproblems mit der Diskrete-Ordinaten-Methode

4.1 Übersicht der verfügbaren Rechenmethoden

Die Erstellung und der Einsatz eines zeitabhängigen Transportcodes sind eine Herausforderung an die derzeit verfügbaren Rechnerarchitekturen und an die numerischen Methoden zur Lösung der Transportgleichung; bisher beschränkte sich deren Einsatz weitgehend auf das stationäre Transportproblem. Die in dieser Arbeit gesammelten Erfahrungen haben jedoch gezeigt, daß selbst ein so komplexes System wie der FRM-II mit hinreichender Genauigkeit und in akzeptablen Rechenzeiten simuliert werden kann, wenn man in Kauf nimmt, daß eine Transportlösung im Vergleich zur Diffusionslösung etwa eine Größenordnung mehr an Rechenzeit beanspruchen wird.

Um so wichtiger ist die Wahl der „richtigen“, d.h. der für das jeweilige Problem angemessenen Transportmethode. Obwohl letztlich alle verfügbaren Rechencodes die in Kapitel 2 vorgestellte Boltzmann-Gleichung lösen, sind die meisten Programme für spezielle Klassen von Problemen, z.B. Abschirm- oder Kritikalitätsberechnungen, entwickelt und optimiert worden. Je nach dem betrachteten Problemtyp fließen dabei unterschiedliche Näherungen oder numerische Verfahrensweisen ein, deren Gültigkeit bzw. Effizienz von System zu System stark variieren kann. So ist z.B. eine korrekte Behandlung der Aufwärtsstreuung in thermischen Reaktoren wesentlich wichtiger als in schnellen Reaktoren, während bei letzteren durch die große Anzahl benötigter Energiegruppen die Verwendung effektiver Beschleunigungsmechanismen für die äußeren Iterationen geboten ist.

Die sog. Monte-Carlo-Verfahren zeichnen sich gegenüber den deterministischen Codes dadurch aus, daß mit ihnen prinzipiell beliebige Geometrien modelliert werden können. Ferner kann die Energievariable sowohl in Gruppenform (so z.B. im Code KENO [HOL98]) als auch kontinuierlich (wie im Code MCNP [BRI97]) dargestellt werden. Aus diesem Grund verwendet man Monte-Carlo-Resultate zunehmend als Referenzlösungen für komplizierte stationäre Probleme, die von deterministischen Codes geometrisch nur näherungsweise erfaßt werden können. Der Einsatz von Monte-Carlo-Codes in transienten Rechnungen ist jedoch aufgrund der stets vorhandenen statistischen Unsicherheiten nur sehr eingeschränkt möglich und kommt lediglich bei der quasistationären [BEN97], jedoch nicht bei der voll impliziten Rechenvorschrift in Frage. Die weiteren Betrachtungen konzentrieren sich daher auf die Lösung der Neutronentransportgleichung mit deterministischen Transportcodes, für die in den letzten

Jahren eine Reihe verschiedener numerischer Ansätze entwickelt worden sind. Trotz der scheinbar großen Anzahl lassen sich diese grob in drei Klassen einteilen:

- ***Diskrete-Ordinaten-Methode (S_N -Methode):***

Die Diskrete-Ordinaten-Methode ist die am weitesten verbreitete Methode und wurde bereits 1965 von Carlson und Lathrop [CAR65] vorgeschlagen. Sie behandelt die Transportgleichung durch explizite Diskretisierung der Winkelvariablen; die Lösung der Gleichung erfolgt dann separat entlang jeder dieser diskreten Richtungen („Ordinaten“) durch einen räumlichen „Sweeping“-Algorithmus, der die maschenzentrierten Flußwerte rekursiv errechnet. Der große Vorteil dieser Methode ist die relativ einfache Herleitung und die numerische Effizienz, auch im Hinblick auf den Speicherbedarf. Die bekanntesten S_N -Codes sind DORT/TORT (Oak Ridge, [JOH92, RHO97]) und TWODANT/THREEDANT (Los Alamos [ALC95]).

- ***Integrale Transportmethoden:***

Bei den integralen Transportmethoden wird die Winkelabhängigkeit in der Boltzmann-Gleichung zunächst formal ausintegriert. In diesem Ansatz kann die Raum-Winkel-Abhängigkeit prinzipiell bis zu jeder beliebigen Genauigkeit erfaßt werden, wenn man in Kauf nimmt, daß die durchzuführenden Integrationen i.allg. Integrale über komplizierte transzendente Funktionen enthalten, deren Auswertung sehr rechenintensiv ist. Die Behandlung der räumlichen Variablen führt aufgrund der globalen Kopplung zwischen Raum- und Winkelvariablen zu dicht besetzten Matrizen, die die Anwendung auf größere Systeme empfindlich einschränken. Breite Anwendung finden diese Methoden daher gerade bei den sog. Lattice-Codes, die zur Berechnung von kleinen, aber geometrisch komplexen Anordnungen wie z.B. DWR- oder SWR-Brennelementen eingesetzt werden. Zu diesen Codes zählen z.B. HELIOS [CAS91], CASMO [AHL77], DRAGON [MAR92] und APOLLO [SAN87].

- ***Even-Parity-Formulierung:***

Die Even-Parity-Formulierung der Transportgleichung [ACK87] hat gerade in den letzten Jahren verstärktes Interesse erfahren, da sie aus einem Variationsprinzip hergeleitet werden kann. Aus diesem können dann eine Reihe von Approximationstechniken abgeleitet werden, die auf große, schwach besetzte Gleichungssysteme führen, für die mittlerweile hervorragende Lösungsalgorithmen zur Verfügung stehen. Auch die Einbindung Finiter Elemente anstatt der auf reguläre Geometrien beschränkten Finiten Differenzen gelingt bei diesem Zugang recht natürlich und ist einfach durchzuführen. Obwohl anfangs Zweifel bestanden, ob auch Anisotropien angemessen erfaßt werden können, haben inzwischen eine Reihe von Entwicklungen bewiesen [PAL93, PAL95], daß diese Methode in der Genauigkeit der Diskrete-Ordinaten-Formulierung in nichts nachsteht. Die bekanntesten Codes, die auch noch intensiv erweitert und weiterentwickelt werden, sind

VARIANT [LEW96, LEW97, SMI00], CRONOS [LAU90] und EVENT [OLI86, OLI95, OLI96].

Trotz der Aufspaltung in diese drei Klassen sind gerade in den letzten Jahren eine Reihe hybrider Transportcodes entwickelt worden, die versuchen, die Vorteile der verschiedenen Methoden miteinander zu kombinieren. So gelingt es z.B., die Schwächen der Diskrete-Ordinaten-Methode bei „Deep-Penetration“-Problemen durch die Einführung sog. Charakteristiken zu beheben, bei denen Neutronenströme und -Flüsse entlang diskreter Neutronentrajektorien, die den diskreten Ordinatenrichtungen entsprechen, analytisch aufintegriert werden [CHI93, VIL92a]. Die Berechnung periodischer Strukturen, wie z.B. in Kernreaktoren, wird brennelementweise zunächst mit integralen Methoden durchgeführt. Die Kopplung der Nettoströme zwischen den einzelnen Elementen erfolgt dann mit Hilfe des „Response Matrix“-Formalismus [LIN81], der wiederum auf schwach besetzte Systeme führt. Dabei kann der Neutronenfluß über die Grenzflächen entweder als isotrop angesetzt oder durch Diskrete Ordinaten beschrieben werden [TSI95].

Einer solchen Behandlung entzieht sich der FRM-II, da es sich um ein komplexes System mit großen Leakage-Effekten handelt. Zu Beginn dieser Arbeit war daher zu klären, welche der drei oben genannten Methoden für transiente Berechnungen am ehesten geeignet ist und welche Codes frei verfügbar sind. Dabei stellte sich heraus, daß nur ganz wenige Programme überhaupt in der Lage sind, die zeitabhängige, voll implizit diskretisierte Transportgleichung zu lösen. Keines dieser Programme wurde jemals an einen Thermohydraulikcode gekoppelt; außerdem waren die vorhandenen Codes numerisch zu ineffizient, um das komplexe FRM-II-Problem zu lösen.

Die Auswahl reduzierte sich daher auf insgesamt drei Programme:

- Der Code EVENT (Imperial College London, [OLI86, OLI96]), ein Even-Parity-Code mit einer Entwicklung der Flüsse in Sphärische Harmonische (P_N -Näherung), der hervorragend geeignet ist, um komplizierte Strukturen mittels Finiten Elementen nachzubilden und bereits über eine implizite Zeitdiskretisierung verfügt. Für das zylindersymmetrische FRM-II-Problem war der Code jedoch selbst bei stationären Berechnungen den herkömmlichen Diskrete-Ordinaten-Codes weit unterlegen; er wies eine schlechte Konvergenz für Probleme mit signifikanter Aufwärtsstreuung auf und war selbst bei der Lösung der Diffusionsgleichung (die in den P_N -Methoden als einfachster Spezialfall enthalten ist) für den FRM-II um einen Faktor von etwa drei langsamer als der im letzten Kapitel vorgestellte Diffusionscode.
- Der Code CONSUL (Kurchatov-Institut, Moskau, [TSI95, TCH95]), eine Kombination aus integralen Methoden, den sog. Erststoßwahrscheinlichkeiten [SAN82] und einem Diskrete-Ordinaten-Ansatz. Obwohl die Grundlagen dieses Codes theoretisch bestechend und dazu geometrisch sehr anschaulich sind, ist die Struktur der resultierenden Glei-

chungssysteme so ungünstig, daß eine Erweiterung auf ein gekoppeltes Modell aussichtslos erschien, da in jedem Zeitschritt eine große Anzahl komplizierter räumlicher Integrale zur Neuauswertung der Erststoßwahrscheinlichkeiten berechnet werden muß. Auch dieser Code hatte sich schon bei stationären Rechnungen als nicht konkurrenzfähig zu Diskrete-Ordinaten-Codes erwiesen.

- Der Code PARTISN (Los Alamos, [BAK96, ALC98]), eine Weiterentwicklung der Diskrete-Ordinaten-Codes TWODANT/THREEDANT [ALC95], ist speziell auf parallele Architekturen ausgelegt, wie z.B. die Cray T3D. Obwohl die implizit diskretisierte Zeitabhängigkeit im Code integriert ist, fehlt eine Implementierung der verzögerten Neutronen und eine Kopplung an Thermohydraulikmodule. Darüber hinaus ist der Code nicht frei verfügbar. Außerdem liegt der Schwerpunkt der Entwicklungsarbeit derzeit stärker im Bereich von stationären S_N -Rechnungen auf unstrukturierten Gittern als auf zeitabhängigen Methoden.

Daneben existieren eine Reihe mehr oder weniger experimenteller Codes, wie z.B. ATTILA [WAR96] und DANTE [MOR96], die unstrukturierte Gitter verwenden, oder der Code KIN-3D [RIN96], eine zeitabhängige Weiterentwicklung von VARIANT, der allerdings zu Beginn dieses Projektes nur kartesische und hexagonale Geometrien behandeln konnte.

Auch nach der Sichtung verschiedener Codes war es also nicht klar, welcher der Kandidaten verwendet werden sollte. Mit der Zielsetzung, den FRM-II angemessen behandeln zu können, erschien es nicht ratsam, sich an einem experimentellen Code zu versuchen, dessen numerische Eigenschaften u.U. nicht ausgereift oder nicht gut verstanden sind. Der bessere Weg bestand also darin, einen stationären Code durch eine Reihe von programmtechnischen Erweiterungen zeitabhängig zu machen. Da die mit den Codes EVENT, CONSUL, TWODANT und DORT durchgeführten stationären Rechnungen zum FRM-II deutlich die Überlegenheit der Diskrete-Ordinaten-Methode demonstrierten, wurde dieser theoretische Ansatz favorisiert.

Die Entscheidung fiel schließlich auf den Code DORT, da dieser sich speziell für den FRM-II besser bewährt hatte als der Code TWODANT und darüber hinaus dem Anwender wesentlich mehr Eingriffsmöglichkeiten zur numerischen Optimierung bietet.

Die folgenden Abschnitte enthalten eine komprimierte Darstellung der Diskrete-Ordinaten-Theorie in einer und zwei Raumdimensionen; diese dient dann als Ausgangspunkt für die Diskussion der zahlreichen Änderungen und Erweiterungen, die für die Implementierung der Zeitabhängigkeit vorgenommen werden mußten und denen das folgende Kapitel 5 gewidmet ist.

4.2 Diskrete-Ordinaten-Theorie in eindimensionaler Geometrie

Im Folgenden werden nur die einzelnen Gruppengleichungen betrachtet, d.h. die sog. „Within-Group“-Darstellung der Transportgleichung. Die Berücksichtigung der Energieabhängigkeit erfolgt dann über das Schema der äußeren und inneren Iterationen. Die Transportgleichung lautet zunächst:

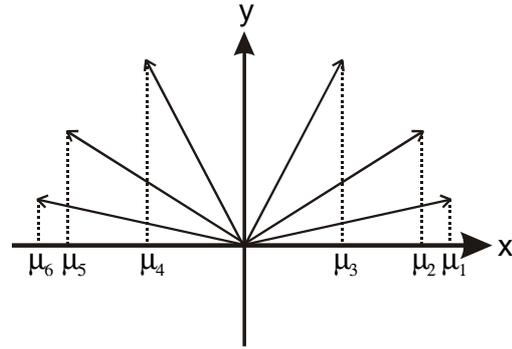


Abbildung 4-1: Darstellung einer S_6 -Quadratur in einer Raumdimension

$$(\vec{\Omega} \cdot \nabla + \Sigma_t) \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \Sigma_s^{g_g}(\vec{r}, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}') + S(\vec{r}, \vec{\Omega}) \quad (4-1)$$

mit dem Gruppenquellterm:

$$S(\vec{r}, \vec{\Omega}) = S_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = q_{\text{extern}}^g(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \sum_{g' \neq g} \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \Sigma_s^{g_g'}(\vec{r}, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}') + \sum_{g'=1}^G \chi_{g'} \nu \Sigma_g^f(\vec{r}) \phi_{g'}(\vec{r}). \quad (4-2)$$

In eindimensionaler kartesischer Geometrie läßt sich Gleichung 4-1 mit der expliziten Darstellung des Transportoperators und der Entwicklung des Streuquerschnitts in Legendre-Polynome dann wie folgt schreiben:

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, \mu) + \Sigma_t(x) \psi(x, \mu) = \underbrace{\sum_{l=0}^L (2l+1) P_l(\mu) \Sigma_{ls}(x) \phi_l(x)}_{=: q(x, \mu)} + S(x, \mu) \quad \phi_l(x) = \int_{-1}^1 d\mu P_l(\mu) \psi(x, \mu).$$

Der kontinuierliche Winkelbereich der Koordinate $\mu \in [-1, 1]$ wird nun in N diskrete Winkel, die sog. Diskreten Ordinaten aufgeteilt, wie in Abbildung 4-1 dargestellt [LEW85]. Man spricht dann auch von einer S_N -Quadratur. Die Winkel werden so gewählt, daß Integralausdrücke über $d\vec{\Omega}$ angemessen durch eine äquivalente Summendarstellung über die diskreten Winkel μ_n wiedergegeben werden können, also z.B. für die skalaren Flüsse und die Flußmomente:

$$\int d\vec{\Omega} \Rightarrow \sum_n w_n \quad \phi(x) = \int d\mu \psi(x, \mu) \Rightarrow \phi(x) = \sum_n w_n \psi_n(x) \quad (4-3)$$

$$\phi_l(x) = \int d\mu P_l(\mu) \psi(x, \mu) \Rightarrow \phi_l(x) = \sum_n w_n P_l(\mu_n) \psi_n(x).$$

Die Wahl der Wichtungsmomente w_n wird zunächst durch die folgenden Normierungsbedingungen eingeschränkt:

$$\sum_{n=1}^N w_n = 1 \quad \sum_{n=1}^N w_n \mu_n = 0. \quad (4-4)$$

In der Wahl der diskreten Winkel μ_n ist man weitgehend frei; i.allg. wird man diese jedoch so wählen, daß sie symmetrisch um $\mu = 0$ sind (wobei dieser Wert aufgrund seines singulären Charakters nie in einen Quadraturatz aufgenommen wird). Angesichts der in den Streutermen immer wiederkehrenden Integrale über Legendre-Polynome wählt man die N Winkel häufig gerade als die N Nullstellen des Legendre-Polynoms N -ten Grades [GAS68]:

$$P_N(\mu_n) = 0 \quad n = 1, \dots, N \quad (4-5)$$

und die korrespondierenden Gewichte derart, daß alle Legendre-Polynome bis zum Grad $N-1$ exakt integriert werden:

$$\int_{-1}^1 d\mu P_l(\mu) = \delta_{l0} \quad \Leftrightarrow \quad \sum_{n=1}^N w_n P_l(\mu_n) = \delta_{l0} \quad l = 0, \dots, N-1. \quad (4-6)$$

Zur Lösung der diskretisierten 1D-Transportgleichung wird das in Abschnitt 2.4 erläuterte Verfahren der „Iteration on the Scattering Source“ verwendet. Gegeben sei also die Flußabschätzung $\psi_n^{(0)}(x, \mu_n)$ und der folgende Quellterm (d.h. die Summe aus Selbststreubeitrag und Gruppenquellterm):

$$q_n^{(0)} = \sum_{l=1}^L (2l+1) \Sigma_{ls} P_l(\mu_n) \phi_l^{(0)}(x, \mu_n) + S_n(x, \mu_n). \quad (4-7)$$

Mit der Iterationsvorschrift:

$$\mu_n \frac{\partial}{\partial x} \psi^{(m+1)}(x, \mu_n) + \Sigma_t(x) \psi^{(m+1)}(x, \mu_n) = q_n^{(m)} \Rightarrow \phi_l^{(m+1)} = \sum_{i=1}^N w_n P_l(\mu_n) \psi^{(m+1)}(\mu_n) \Rightarrow q_n^{(m+1)} \quad (4-8)$$

lassen sich dann sukzessive neue Flüsse und Quellterme generieren. Zur Lösung der Gleichung muß lediglich noch die Ortsvariable diskretisiert werden. Analog zur Diffusionstheorie werden die Maschen so gewählt, daß ganzzahlige Werte i den Index des Maschenmittelpunktes, halbzahlige Indizes $i \pm 1/2$ hingegen linke und rechte Intervallgrenze der insgesamt I Intervalle bezeichnen (Abbildung 4-2). Die Materialeigenschaften seien homogen innerhalb einer Masche und die Flußwerte werden durch den im Mittelpunkt angenommenen Wert approximiert.

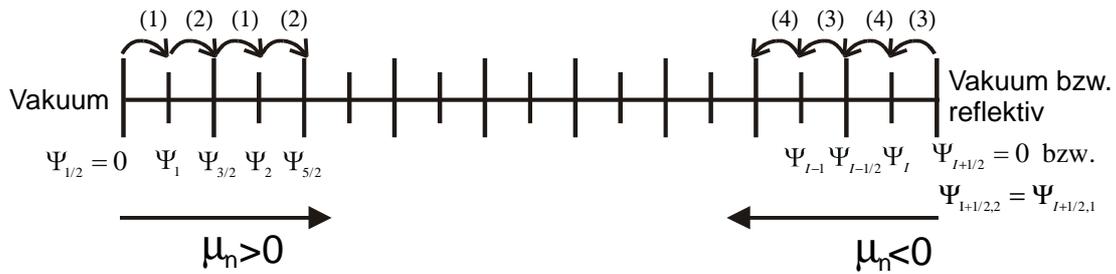


Abbildung 4-2: Eindimensionale räumliche Diskretisierung und die Definition der beiden „Sweeping“-Richtungen

Integration von Gleichung 4-8 über die jeweiligen Intervalle Δx_i liefert dann:

$$\mu_n \left(\psi_{i+1/2}^n - \psi_{i-1/2}^n \right) + \sum_i^t \Delta x_i \psi_i^n = \Delta x_i q_i^n. \quad (4-9)$$

Um eine Beziehung zwischen den Randflüssen und dem Fluß im Mittelpunkt der Masche herzustellen, verwendet man die „Diamond-Differencing“-Relation, die bereits im Zusammenhang mit der zeitlichen Flußextrapolation (siehe Abschnitt 3.8) vorgestellt wurde:

$$\psi_i^n = \frac{1}{2} \left(\psi_{i+1/2}^n + \psi_{i-1/2}^n \right). \quad (4-10)$$

Die Fälle $\mu_n > 0$ und $\mu_n < 0$ müssen separat behandelt werden. Eliminiert man in den obigen Beziehungen $\psi_{i+1/2}^n$ bzw. $\psi_{i-1/2}^n$ durch Einsetzen von Gleichung 4-10 in 4-9, erhält man folgenden rekursiven Algorithmus (die folgenden Gleichungen korrespondieren zu den in Abbildung 4-2 dargestellten Pfeilen):

$$\begin{aligned} (1) \quad \psi_i^n &= \left(1 + \frac{\sum_i^t \Delta x_i}{2|\mu_n|} \right)^{-1} \left(\psi_{i-1/2}^n + \frac{\Delta x_i q_i^n}{2|\mu_n|} \right) & (2) \quad \psi_{i+1/2}^n &= 2\psi_i^n - \psi_{i-1/2}^n \quad \text{für } \mu_n > 0 \\ (3) \quad \psi_i^n &= \left(1 + \frac{\sum_i^t \Delta x_i}{2|\mu_n|} \right)^{-1} \left(\psi_{i+1/2}^n + \frac{\Delta x_i q_i^n}{2|\mu_n|} \right) & (4) \quad \psi_{i-1/2}^n &= 2\psi_i^n - \psi_{i+1/2}^n \quad \text{für } \mu_n < 0. \end{aligned} \quad (4-11)$$

Hat das Intervall aus Abbildung 4-2 z.B. an beiden Seiten Vakuumrandbedingungen, dann gilt:

$$\psi_{1/2}^n = 0 \quad \mu_n > 0 \quad \psi_{I+1/2}^n = 0 \quad \mu_n < 0. \quad (4-12)$$

Damit steht ein geschlossenes iteratives Schema zur Lösung von Gleichung 4-9 zur Verfügung. Startet man z.B. an der linken Seite des Intervalls, wird man ausgehend von $\psi_{1/2}^n = 0$ zunächst die Richtungen $\mu_n > 0$ behandeln, und zwar durch abwechselnde Anwendung von Gleichung 4-11(1) und 4-11(2), bis man schließlich an der rechten Intervallgrenze angelangt ist. Für $\mu_n < 0$ startet man mit $\psi_{I+1/2}^n = 0$ und arbeitet sich von rechts nach links durch das Gitter hindurch, unter Benutzung der Beziehungen 4-11(3) und 4-11(4). Für reflektive Randbedingungen wählt man statt dessen den reflektierten Fluß als Startwert, d.h. $\psi_{I+1/2}(\mu_n) = \psi_{I+1/2}(-\mu_n)$, der bereits aus dem „Sweep“ $\mu_n > 0$ bekannt ist.

Dieser „Sweeping“-Algorithmus ist das Grundprinzip der Diskrete-Ordinaten-Theorie: Ausgehend von physikalischen Randbedingungen startet man an den Rändern des Gebiets und folgt der Richtung des Neutronenstroms in dieses hinein, um dabei die Flußwerte rekursiv über die Beziehungen 4-11 zu ermitteln. Dieser Vorgang muß für alle Winkel μ_n durchgeführt werden. Ist dies abgeschlossen, kann aus den so berechneten Flüssen eine neue Streuquelle berechnet werden, die dann in der nächsten „Iteration on the Scattering Source“ verwendet wird. Es sei hier besonders betont, daß die verschiedenen Ordinaten-Richtungen vollständig voneinander entkoppelt sind, d.h. prinzipiell muß immer nur der letzte berechnete Flußwert während des „Sweeps“ gespeichert werden. Die Berechnung der Flußmomente (die im Gegensatz zu den Winkelströmen zur Erstellung der Streuquelle im Arbeitsspeicher des Rechners vorliegen müssen) kann also durch Aufsummierung Punkt für Punkt und Winkel für Winkel erfolgen. Im Gegensatz zur Diffusionstheorie ist es also nicht notwendig, große Gleichungssysteme iterativ zu lösen; dieser scheinbare Vorteil wird natürlich dadurch relativiert, daß u.U. mehrere „Iterations on the Scattering Source“ durchgeführt werden müssen, von deren Konvergenzverhalten es letztlich abhängt, wie effizient das Verfahren ist.

4.3 Erweiterung auf mehrere Dimensionen

Für kartesische Geometrien ist die Erweiterung des im letzten Abschnitt vorgestellten Schemas auf mehrere Dimensionen recht einfach. Zunächst werden zwei unabhängige Ordinatenrichtungen benötigt, um die Richtung $\vec{\Omega}$ der Neutronentrajektorien zu beschreiben. Bereits in Abschnitt 2.2.1 wurde das sog. Winkelkoordinatensystem eingeführt, in dem der Flugrichtungsvektor durch Projektion von $\vec{\Omega}$ auf die Koordinatenachsen beschrieben wird. Üblich sind die Bezeichnungen μ, η, ξ für die Projektionen auf die $x-, y-$ und z -Achse.

Im Diskrete-Ordinaten-Formalismus verwendet man meistens symmetrische Quadratursätze, um die Winkelkoordinaten durch diskrete Werte darzustellen. Ein solcher Satz ist in Abbildung 4-3 für einen Oktanten der gesamten Einheitskugel [LAT65] dargestellt. Man be-

achte, daß die symmetrischen Quadraturen für alle drei Winkel dieselben Werte der Projektionen auf die jeweiligen Achsen annehmen. Es gilt also $\mu_i = \eta_i = \xi_i$, für alle $i \in 1, N/2$. N gibt die Ordnung der Quadratur, d.h. die S_N -Ordnung an. Reduziert man nämlich die Abhängigkeit des Flusses wiederum auf eine Winkelkoordinate, so sind gerade N Winkel zur Beschreibung notwendig (siehe Abbildung 4-1). Die Winkel aller acht Oktanten werden hingegen für dreidimensionale Systeme ohne geometrische Symmetrien benötigt; die Anzahl der

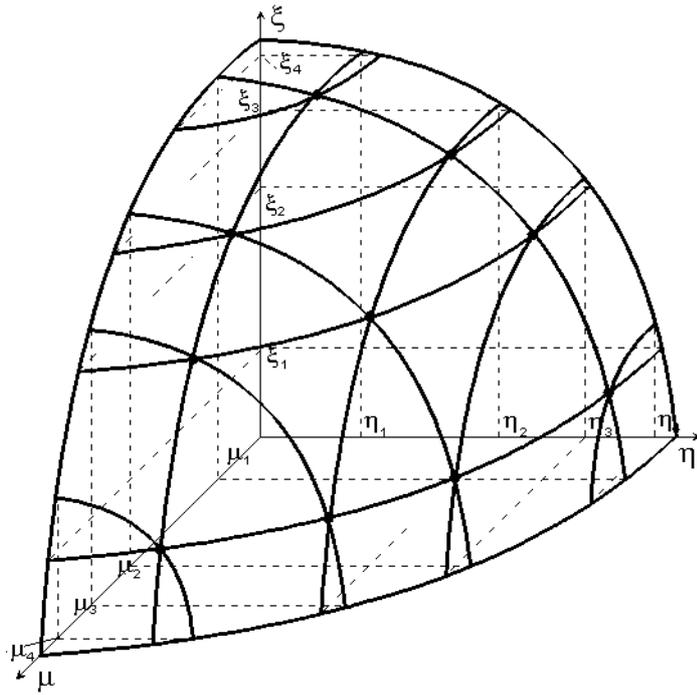


Abbildung 4-3: Darstellung eines Oktanten einer S_8 -Quadratur für mehrere räumliche Dimensionen

Winkel ist dann $N \cdot (N + 2)$; im Beispiel aus Abbildung 4-3 wären dies insgesamt 80 Winkel für ein Problem in XYZ - oder $R\theta Z$ -Geometrie und S_8 -Ordnung. Für rotationssymmetrische Zylindergeometrie werden hingegen nur vier der acht Oktanten verwendet, da die Flußverteilung symmetrisch zur θ -Achse und damit im korrespondierenden Winkel η ist: $\psi(\mu_n, \eta_n, \xi_n) = \psi(\mu_n, -\eta_n, \xi_n)$, was 40 Diskreten Ordinaten im obigen Beispiel entspricht. In zweidimensionaler kartesischer Geometrie lautet die Transportgleichung analog zu den Überlegungen im letzten Abschnitt:

$$\left(\mu_n \frac{\partial}{\partial x} + \eta_n \frac{\partial}{\partial y} + \Sigma_t \right) \psi_n(\vec{r}) = q_n(\vec{r}). \quad (4-13)$$

Die Quellterm muß aufgrund der erweiterten Geometrie durch Sphärische Harmonische ausgedrückt werden, wegen der z -Symmetrie reicht es aber aus, den geraden bzw. Realteil $C_l^m = \Re(Y_{lm})$ der Kugelfunktionen zu betrachten (siehe Anhang A):

$$q_n(\vec{r}) = \sum_{l=0}^L \sum_{m=0}^l C_l^m(\mu_n, \eta_n) \Sigma_{ls}(\vec{r}) \phi_{lm}(\vec{r}) + S_n(\mu_n, \eta_n) \quad \phi_{lm}(\vec{r}) = \sum_{n=1}^{N \cdot (N+2)/2} w_n C_l^m(\mu_n, \eta_n) \psi(\vec{r}, \mu_n, \eta_n). \quad (4-14)$$

Die Summation zur Erstellung der Flußmomente erfolgt nun nur über die vier Oktanten ober- bzw. unterhalb der $\mu\eta$ -Ebene.

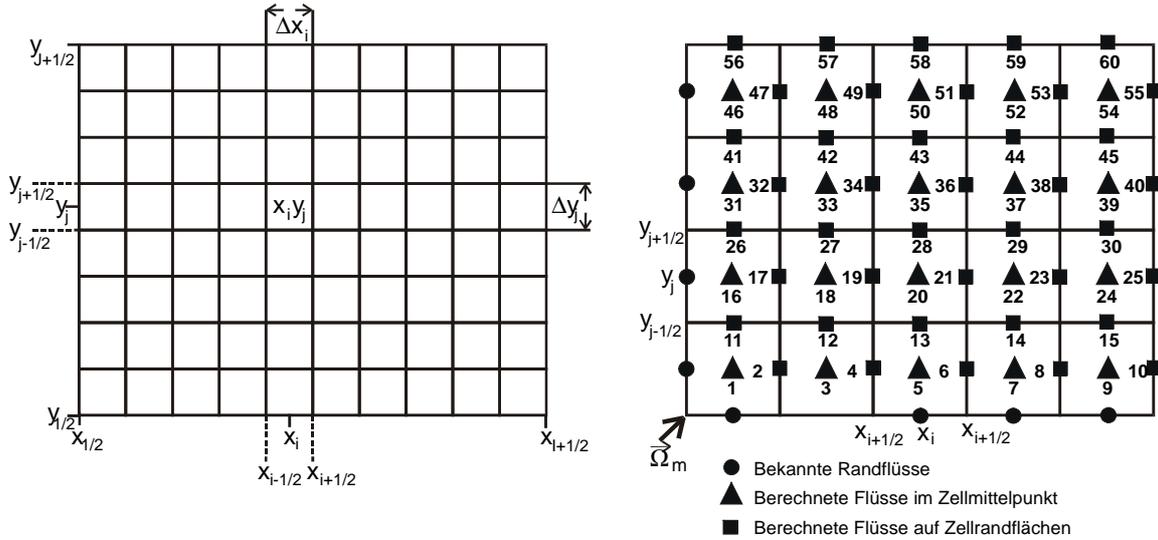


Abbildung 4-4: links: räumliche Diskretisierung für zweidimensionale kartesische Geometrie; rechts: „Sweeping“-Reihenfolge für ein zweidimensionales kartesisches Gitter

Zur räumlichen Diskretisierung wird das Lösungsgebiet in ein reguläres Gitter unterteilt, wobei wie im eindimensionalen Fall halbzahlige Indizes Werte auf den Maschenrändern bezeichnen, während Ganzzahlige eine maschenzentrierte Größe wiedergeben (siehe Abbildung 4-4 links). Gleichung 4-13 wird dann über alle Intervalle Δx_i und Δy_j integriert.

Mit den Bezeichnungen:

$$\psi_{i+1/2,j}^n = \frac{1}{\Delta y_j} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} dy \psi_n(x_{i+1/2}, y), \quad (4-15)$$

$$\psi_{i,j+1/2}^n = \frac{1}{\Delta x_i} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} dx \psi_n(x, y_{j+1/2}) \quad (4-16)$$

und:

$$\psi_{i,j}^n = \frac{1}{\Delta x_i \Delta y_j} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} dx \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} dy \psi_n(x, y) \quad q_{i,j}^n = \frac{1}{\Delta x_i \Delta y_j} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} dx \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} dy q_n(x, y), \quad (4-17)$$

folgt dann die in Raum und Winkel diskretisierte Transportgleichung:

$$\frac{\mu_n}{\Delta x_i} (\psi_{i+1/2,j}^n - \psi_{i-1/2,j}^n) + \frac{\eta_n}{\Delta y_j} (\psi_{i,j+1/2}^n - \psi_{i,j-1/2}^n) + \Sigma_{i,j}^t \psi_{i,j}^n = q_{i,j}^n. \quad (4-18)$$

Um die Unbekannten auf den Randflächen zu eliminieren, fehlt noch wie im eindimensionalen Fall eine Extrapolationsvorschrift, die die Flüsse auf den Randflächen mit denen im Maschenmittelpunkt verknüpft. Dazu verwendet man jeweils eine „Diamond-Differencing“-Relation für die beiden Raumrichtungen:

$$\psi_{i,j}^n = \frac{1}{2} \left(\psi_{i+1/2,j}^n + \psi_{i-1/2,j}^n \right) \quad \text{und} \quad \psi_{i,j}^n = \frac{1}{2} \left(\psi_{i,j+1/2}^n + \psi_{i,j-1/2}^n \right) \quad (4-19)$$

Eine „Iteration on the Scattering Source“ besteht aus vier „Sweeps“, jeweils über das gesamte räumliche Gitter und über jeden Kugeloktanten. Die Verwendung der Beziehungen 4-19 hängt nun davon ab, in welchem der vier Oktanten man sich befindet. Gesetzt den Fall, der erste Sweep findet über die Richtungen statt, für die gilt: $\mu_n > 0, \eta_n > 0$; dann lassen sich mittels:

$$\psi_{i+1/2,j}^n = 2\psi_{i,j}^n - \psi_{i-1/2,j}^n \quad (1) \quad \text{und} \quad \psi_{i,j+1/2}^n = 2\psi_{i,j}^n - \psi_{i,j-1/2}^n \quad (2) \quad (4-20)$$

die Flüsse mit den Indizes $i+1/2, j+1/2$ aus Gleichung 4-18 eliminieren, und man erhält:

$$\psi_{i,j}^n = \left(\Sigma_{i,j}^t + \frac{2\mu_n}{\Delta x_i} + \frac{2\eta_n}{\Delta y_j} \right)^{-1} \left(\frac{2\mu_n}{\Delta x_i} \psi_{i-1/2,j}^n + \frac{2\eta_n}{\Delta y_j} \psi_{i,j-1/2}^n + q_{i,j}^n \right). \quad (4-21)$$

Mit diesen drei Gleichungen läßt sich der Sweep über den ersten Oktanten durchführen (siehe Abbildung 4-4 rechts): Mit den physikalischen Randbedingungen $\psi_{1/2,j}^n = 0$ und $\psi_{i,1/2}^n = 0$ für alle $i \in [1, I], j \in [1, J]$ (angedeutet durch Kreise auf x- und y-Achse in Abbildung 4-4) läßt sich zunächst der Punkt $\psi_{1,1}^n$ über Gleichung 4-21 berechnen; davon ausgehend, können durch abwechselnde Anwendung der Gleichungen 4-21 und 4-20(1) alle halb- bzw. ganzzahligen Flüsse der ersten Zeile des Problemgebiets berechnet werden (Flüsse 1 bis 10 im Bild). Um die in y-Richtung benachbarten Randflüsse (Flüsse 11 bis 15) zu ermitteln, verwendet man die Diamond-Difference-Relation 4-20(2). Damit sind alle Größen der ersten Zeile bekannt und man kann auf dieselbe Art und Weise sämtliche weiteren Zeilen abarbeiten. Die Sweeps durch die anderen Oktanten werden ähnlich, allerdings mit in der Richtung angepaßten Diamond-Difference-Relationen durchgeführt.

Die Behandlung der Diskrete-Ordinaten-Theorie wird im Folgenden für Zylindergeometrie fortgesetzt. Mit den Darstellungen des Transportoperators in Tabelle 2-1 lautet die „Within-Group“-Gleichung:

$$\left(\frac{\mu}{r} \frac{\partial}{\partial r} r - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \omega} \eta + \xi \frac{\partial}{\partial z} + \Sigma_t \right) \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = q(\vec{r}, \vec{\Omega}) \quad \mu = \sqrt{1 - \xi^2} \cos \omega \quad \eta = \sqrt{1 - \xi^2} \sin \omega. \quad (4-22)$$

μ ist nun die Projektion von $\vec{\Omega}$ auf die r -Achse und ξ diejenige auf die z -Achse. Der Winkel ω mißt den Azimut des Flugrichtungsvektors im Winkelkoordinatensystem. Es wurde be-

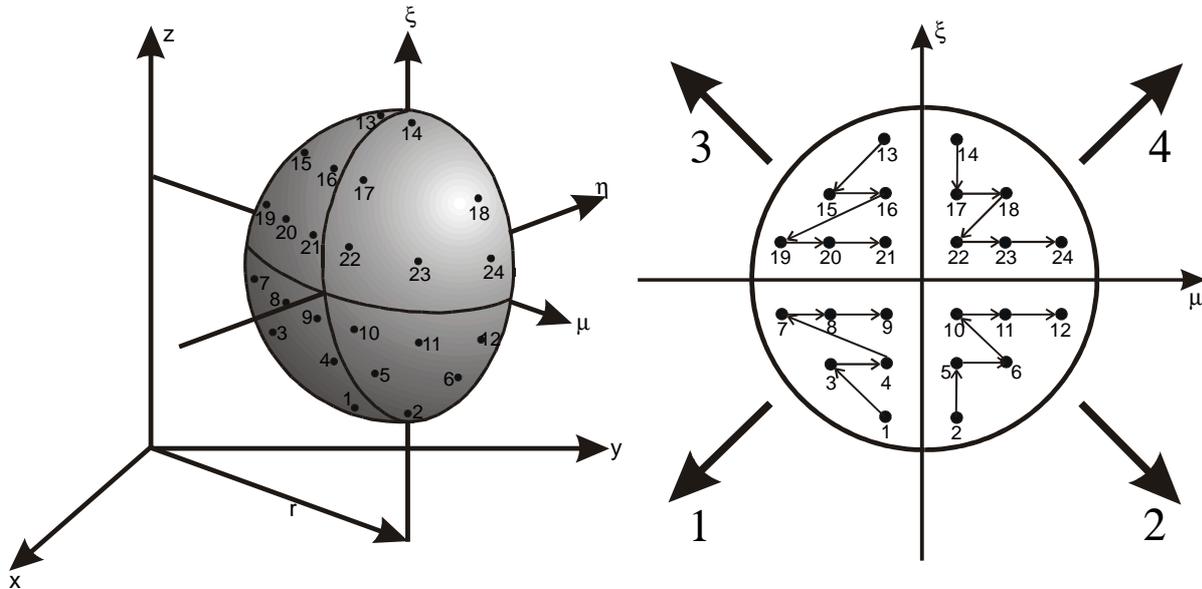


Abbildung 4-5: links: Die vier Kugeloktanten mit der konsistenten Numerierung der Diskreten Ordinaten; rechts: Projektion der Kugeloktanten auf die $\mu\xi$ -Ebene und die vier Sweep-Richtungen

reits in Abschnitt 2.2.1 darauf hingewiesen, daß das Phänomen der „Angular Redistribution“ zusätzliche Winkelableitungen in den Transportoperator einführt, die in kartesischer Geometrie nicht vorzufinden sind. Um die Ableitung nach ω zu bestimmen, ist es daher zunächst sinnvoll, eine spezielle Numerierung der Winkelkoordinaten vorzunehmen. Physikalisch ist dies wie folgt einzusehen: Ein Neutron, das sich geradlinig vom Mantel des Zylinders zu dessen Zentrum fortbewegt, wird seine Projektion auf die z -Achse, d.h. ξ , stets beibehalten, während sich der Wert von μ (siehe Abbildung 2-1) stetig ändern wird. Die Diskrete-Ordinaten-Gleichungen müssen also einen vergleichbaren Fluß von Neutronen in μ -Richtung, nicht jedoch in ξ -Richtung aufweisen. Im Gegensatz zu der kartesischen Form der Transportgleichung, in der alle Richtungen vollständig entkoppelt sind, findet man hier also neben der räumlichen Kopplung auch eine Richtungskopplung vor. Es ist daher sinnvoll, alle Flüsse mit gleichem ξ , aber unterschiedlichen μ - bzw. ω -Werten sukzessive zu gruppieren. Außerdem soll die Anordnung den aufeinander folgenden Sweeps durch die vier Kugeloktanten entsprechen, und zwar in der Reihenfolge:

$$(1) \mu_n < 0, \xi_n < 0 \quad (2) \mu_n > 0, \xi_n < 0 \quad (3) \mu_n < 0, \xi_n > 0 \quad (4) \mu_n > 0, \xi_n > 0. \quad (4-23)$$

Dieser Sachverhalt ist in Abbildung 4-5 für eine S_6 -Quadratur dargestellt. Zu erkennen sind im linken Bild die vier benötigten Kugeloktanten und die Diskreten Ordinaten mit der entsprechenden Numerierung. Das rechte Bild zeigt die Projektion der symmetrischen Quadratur auf die $\mu\xi$ -Ebene mit der Abfolge der vier Sweeps durch das Maschengitter (dicke Pfeile) gemäß Gleichung 4-23, sowie die Reihenfolge der Berechnung der einzelnen Ordinatenrichtungen (dünne Pfeile). Die entsprechende räumliche Situation ist in Abbildung 4-6 für Zylinder-

derkoordinaten dargestellt. Die durch die dicken Pfeile angegebenen Richtungen entsprechen gerade den „Sweeps“ in 4-23. Ganz deutlich tritt hier zutage, daß man sich stets von den physikalischen Randbedingungen in das Gitter hineinarbeitet. Sweep Nummer 1 startet vom Rand der oberen Deckfläche des Zylinders, wo meistens Vakuumrandbedingungen vorliegen, und arbeitet sich dann nach innen bis zum Zylinderzentrum vor. Die ermittelten Randflüsse bei $r_{1/2}$ wer-

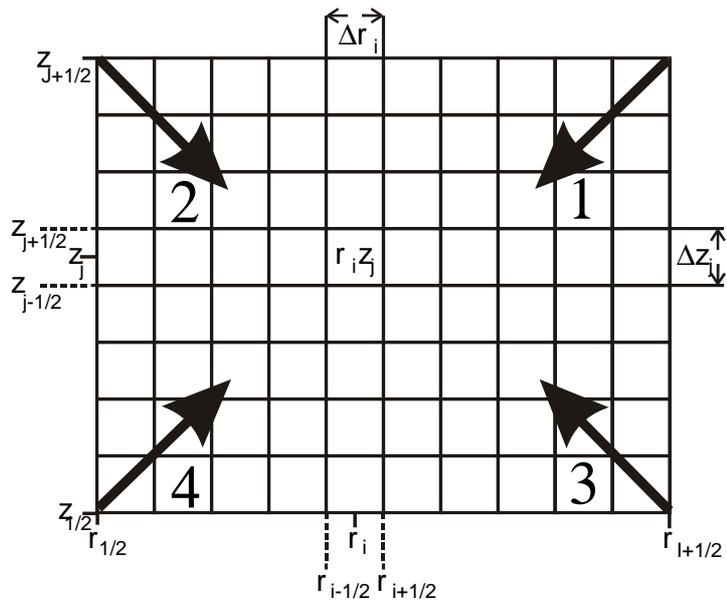


Abbildung 4-6: „Mesh-Sweep“-Schema in räumlicher Darstellung für zweidimensionale Zylindergeometrie

den dort reflektiert ($\mu_n \rightarrow -\mu_n$), um Sweep Nummer 2 zu initialisieren, der nun von innen nach außen läuft. Analog verlaufen die Sweeps 3 und 4.

Trotz der vorhergehenden Betrachtungen ist es nach wie vor nicht klar, wie die Winkelableitung behandelt werden soll. Man wählt daher zunächst den Ansatz [LAT73]:

$$\frac{\mu_n}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \psi_n(\vec{r}) + \frac{\alpha_{n+1/2} \psi_{n+1/2} - \alpha_{n-1/2} \psi_{n-1/2}}{r w_n} + \xi_n \frac{\partial}{\partial z} \psi_n(\vec{r}) + \Sigma_t \psi_n(\vec{r}) = q_n(\vec{r}). \quad (4-24)$$

Hier wurden zunächst recht willkürlich die Redistributionskoeffizienten $\alpha_{n\pm 1/2}$ eingeführt, die für die Kopplung verschiedener Richtungen zuständig sind und die Ableitung nach ω zu approximieren versuchen. (Tatsächlich kann man zeigen, daß eine „naive“ Diskretisierung der Winkelableitung durch einen einfachen Differenzenquotienten die fundamentale Bedingung der Teilchenzahlerhaltung verletzt [LEW85]). Räumliche Integration von Gleichung 4-24 über die räumlichen Maschen des r_z -Gitters liefert dann nach einigen Umformungen:

$$\mu_n w_n \left(A_{i+1/2,j} \psi_{i+1/2,j}^n - A_{i-1/2,j} \psi_{i-1/2,j}^n \right) + \xi_n w_n B_i \left(\psi_{i,j+1/2} - \psi_{i,j-1/2} \right) + \left(A_{i+1/2,j} - A_{i-1/2,j} \right) \times \left(\alpha_{n+1/2} \psi_{i,j}^{n+1/2} - \alpha_{n-1/2} \psi_{i,j}^{n-1/2} \right) + w_n V_{i,j} \Sigma_{i,j}^t \psi_{i,j}^n = w_n V_{i,j} q_{i,j}^n. \quad (4-25)$$

Auch hier wurden wieder die volumen- bzw. oberflächengemittelten Größen $\psi_{i,j}$ und $\psi_{i\pm 1/2,j\pm 1/2}$ eingeführt. Die Größen A, B bezeichnen gerade die Mantel- bzw. Deckflächen der einzelnen Maschenzellen, V ihr Volumen:

$$A_{i\pm 1/2,j} = 2\pi r_{i\pm 1/2} \Delta z_j \quad B_i = \pi \left(r_{i+1/2}^2 - r_{i-1/2}^2 \right) \quad V_{i,j} = B_i \Delta z_j . \quad (4-26)$$

Natürlich wäre Gleichung 4-25 wiederum nichts anderes als eine Bilanzgleichung über die Neutronenanzahl im diskretisierten Phasenraum, tauchte nicht zusätzlich die Kopplung durch die Redistributionsterme auf. Fordert man, daß Gleichung 4-25 für den Fall eines homogenen, unendlich ausgedehnten Mediums gelten muß (d.h. $\psi = \text{const.}$), dann folgt:

$$\mu_n w_n (A_{i+1/2,j} - A_{i-1/2,j}) + (A_{i+1/2,j} - A_{i-1/2,j}) (\alpha_{n+1/2} - \alpha_{n-1/2}) + w_n V_{i,j} \Sigma_{i,j}^t = w_n V_{i,j} q_{i,j}^n \Rightarrow \alpha_{n+1/2} - \alpha_{n-1/2} = -\mu_n w_n . \quad (4-27)$$

Ferner muß berücksichtigt werden, daß die α -Terme gemäß obigen Überlegungen nur Flüsse mit gleichem ξ -Wert miteinander koppeln sollen. Zu diesem Zweck gruppiert man die Winkel Flüsse in M entsprechende Untermengen mit jeweils konstantem ξ , ($U_i, i=1..M$ mit jeweils \tilde{N}_i Elementen) [RHO91]; am Beispiel von Abbildung 4-5:

$$\begin{array}{ll} U_1 = \{1,2\} & \tilde{N}_1 = 2 \\ U_2 = \{3,4,5,6\} & \tilde{N}_2 = 4 \\ U_3 = \{7,8,9,10,11,12\} & \tilde{N}_3 = 6 \\ U_4 = \{13,14\} & \tilde{N}_4 = 2 \\ U_5 = \{15,16,17,18\} & \tilde{N}_5 = 4 \\ U_6 = \{19,20,21,22,23,24\} & \tilde{N}_6 = 6 \end{array} \quad (4-28)$$

und kennzeichnet die Kopplungsterme für den Moment durch ihre Zugehörigkeit zu den jeweiligen Untermengen:

$$\alpha_{n\pm 1/2} \rightarrow \alpha_{n'\pm 1/2}^i \quad n' \in [1, \tilde{N}_i] \quad i \in [1, M]. \quad (4-29)$$

Die Rekursionsbeziehung Gleichung 4-27 gilt dann separat für jede dieser Untermengen. Außerdem müssen sowohl der erste Kopplungsterm $\alpha_{1/2}^i$ als auch der letzte $\alpha_{\tilde{N}_i+1/2}^i$ jeder Untermenge verschwinden, um die Kopplung an Flüsse mit anderen ξ -Werten in anderen U_i zu verhindern. Addiert man mit diesen Voraussetzungen die Rekursionsbeziehung 4-27 auf, so erhält man:

$$\sum_{n'=1}^{\tilde{N}_i} (\alpha_{n'+1/2}^i - \alpha_{n'-1/2}^i) = \alpha_{\tilde{N}_i+1/2}^i - \alpha_{1/2}^i = 0 \quad \Rightarrow \quad \sum_{n' \in U_i} w_{n'} \mu_{n'} = 0, \quad (4-30)$$

eine Beziehung, die bereits bei der Diskussion eindimensionaler Geometrien ohne Herleitung angegeben wurde und die von allen symmetrischen Quadraturansätzen erfüllt wird. Ferner wird aus diesen Betrachtungen klar, daß in der Diskrete-Ordinaten-Theorie keine Stetigkeitsvoraussetzungen an formal aufeinander folgende Winkel Flüsse gefordert werden; so stehen z.B. die Flüsse ψ_2 und ψ_3 aus obigem Beispiel in keiner Beziehung zueinander.

Außerdem wird postuliert, daß die „Diamond-Differencing“-Relationen gültig seien, zum einen für die räumliche Flußextrapolation:

$$\psi_{i,j}^n = \frac{1}{2} \left(\psi_{i+1/2,j}^n + \psi_{i-1/2,j}^n \right) \quad \text{und} \quad \psi_{i,j}^n = \frac{1}{2} \left(\psi_{i,j+1/2}^n + \psi_{i,j-1/2}^n \right), \quad (4-31)$$

aber auch für die Extrapolation der Winkel innerhalb eines ξ -Levels:

$$\psi_{i,j}^n = \frac{1}{2} \left(\psi_{i,j}^{n+1/2} + \psi_{i,j}^{n-1/2} \right). \quad (4-32)$$

Dann kann man ähnlich wie in kartesischer Geometrie eine Rekursionsbeziehung für die verschiedenen räumlichen „Sweep“-Richtungen herleiten; für $\mu_n > 0, \xi_n > 0$ z.B. kann man mit den Gleichungen 4-31 und 4-32 die Flüsse $\psi_{i+1/2,j}^n, \psi_{i,j+1/2}^n$ und $\psi_{i,j}^{n+1/2}$ eliminieren und erhält (mit $n \in [1, \tilde{N}_i]$ wie oben definiert):

$$\begin{aligned} \psi_{i,j}^n = & \left(V_{i,j} \Sigma_{i,j}^t + \mu_n (A_{i+1/2,j} + A_{i-1/2,j}) + 2\xi_n B_i + \frac{1}{w_n} (A_{i+1/2,j} - A_{i-1/2,j}) (\alpha_{n+1/2} + \alpha_{n-1/2}) \right)^{-1} \times \\ & \left(V_{i,j} \Sigma_{i,j}^t + \mu_n (A_{i+1/2,j} + A_{i-1/2,j}) \psi_{i-1/2,j}^n + 2\xi_n B_i \psi_{i,j-1/2}^n + \right. \\ & \left. \frac{1}{w_n} (A_{i+1/2,j} - A_{i-1/2,j}) (\alpha_{n+1/2} + \alpha_{n-1/2}) \psi_{i,j}^{n-1/2} \right), \end{aligned} \quad (4-33)$$

wobei vorausgesetzt wurde, daß Gleichung 4-33 nur für einen bestimmten ξ -Level gilt. Mit den drei Diamond-Difference-Beziehungen und Gleichung 4-33 kann dann der räumliche Sweep ebenso durchgeführt werden wie für kartesische Geometrie, mit dem Unterschied, daß neben $\psi_{i+1/2,j}^n$ und $\psi_{i,j+1/2}^n$ zusätzlich die Flüsse $\psi_{i,j}^{n+1/2}$ bestimmt werden müssen.

Problematisch an Gleichung 4-33 ist lediglich die Tatsache, daß der Fluß $\psi_{i,j}^{1/2}$, also der Startwert eines jeden ξ -Levels, a priori nicht bekannt ist und daher $\psi_{i,j}^1$ nicht aus dieser Gleichung ermittelt werden kann. Die Strategie, die die meisten Diskrete-Ordinaten-Codes (so auch DORT und TWODANT) verfolgen, ist die Einführung zusätzlicher „Startrichtungen“ für jeden ξ -Level (siehe Abbildung 4-7), für die man recht willkürlich fordert [LAT73]:

$$\psi_{i,j}^{3/2} = \psi_{i,j}^1 \quad (4-34)$$

und die die Wichtung $w_n = 0$ erhalten. Diese werden meist so gewählt, daß $\eta_n = 0$ gilt, also

$$\mu_n^2 + \xi_n^2 = 1. \text{ Durch diese Wahl vereinfacht sich Gleichung 4-33 zu:}$$

$$\psi_{i,j}^1 = \left(V_{i,j} \Sigma_{i,j}^t + \mu_n (A_{i+1/2,j} + A_{i-1/2,j}) + 2\xi_n B_i \right)^{-1} \times \quad (4-35)$$

$$\left(V_{i,j} \Sigma_{i,j}^t + \mu_n (A_{i+1/2,j} + A_{i-1/2,j}) \psi_{i-1/2,j}^1 + 2\xi_n B_i \psi_{i,j-1/2}^1 \right).$$

Damit erhält man dann auch für Zylindergeometrie ein geschlossenes Rekursionsschema. Man beachte, daß der Aufwand gegenüber kartesischer Geometrie sowohl durch die Berechnung der halbzahligen Winkelflüsse

$\psi_{i,j}^{n+1/2}$ als auch durch die Definition

von N zusätzlichen Startrichtungen in S_N -Quadratur beträchtlich erhöht wird.

Wie in [TOM80] gezeigt, kann man auf die Verwendung der Startrichtungen verzichten; die Erfahrung zeigt aber, daß dies häufig die Konvergenz des Gesamtproblems verschlechtert.

Die obigen Beziehungen haben noch einen entscheidenden Mangel: Die Rekursionsbeziehung 4-33 liefert zwar stets positive Werte, dies stimmt jedoch nicht für die „Diamond-Differencing“-Beziehungen. Immer dann, wenn z.B. gilt:

$$\psi_{i,j}^n < \max(\psi_{i-1/2,j}^n, \psi_{i,j-1/2}^n, \psi_{i,j}^{n-1/2}), \quad (4-36)$$

wird mindestens eine der Gleichungen:

$$\psi_{i+1/2,j}^n = 2\psi_{i,j}^n - \psi_{i-1/2,j}^n \quad \psi_{i,j+1/2}^n = 2\psi_{i,j}^n - \psi_{i,j-1/2}^n \quad \psi_{i,j}^{n+1/2} = 2\psi_{i,j}^n - \psi_{i,j}^{n-1/2} \quad (4-37)$$

einen negativen Wert liefern. Die Bedingung 4-36 kann dann eintreten, wenn der totale Wirkungsquerschnitt in einer Masche sehr groß ist, also z.B. in der Nähe starker Absorber. Ne-

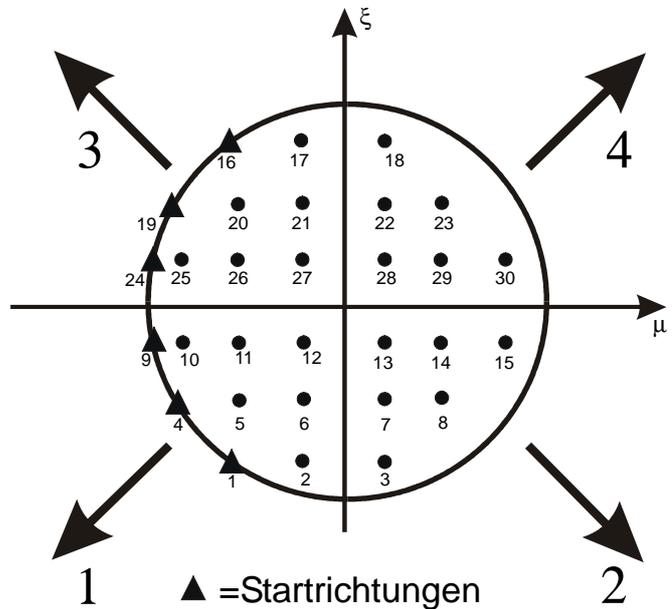


Abbildung 4-7: Definition der zusätzlichen Startrichtungen (angedeutet durch die Dreiecke) in krummliniger Geometrie für eine S_6 -Quadratur

ben der Verfälschung der Ergebnisse können selbst kleinste negative Beiträge dazu führen, daß das gesamte Rechenverfahren instabil wird oder nicht konvergiert. Verschiedene Vorschläge zur Behebung dieses Mangels existieren in der Literatur, von denen der einfachste die Ersetzung der Diamond-Difference-Beziehungen durch die sog. „Step“-Approximation ist [LAT69]:

$$\psi_{i\pm 1/2, j\pm 1/2}^{n\pm 1/2} = \psi_{i,j}^n, \quad (4-38)$$

d.h. alle Randwerte werden durch den Wert im Mittelpunkt beschrieben; während dieses Verfahren garantiert positive Werte liefert, ist es offensichtlich ungenauer als das oben beschriebene, und dies schränkt z.B. die Wahl der Maschengröße empfindlich ein. Generell wird diese Vorgehensweise nicht empfohlen.

In vielen Anwendungen hat sich die Verwendung des linearen Schemas, (d.h. der Flußextrapolation durch die Diamond-Difference-Beziehungen), kombiniert mit einem sog. „Zero-Fixup“-Mechanismus [LAT73] gut bewährt. Immer dann, wenn ein negativer Flußwert errechnet wird, wird dieser zunächst zu Null gesetzt. Um die Neutronenbilanz zu erhalten, muß dann die Bestimmungsgleichung 4-25 mit diesem Wert erneut gelöst werden. Zwar wird diese Vorgehensweise den tatsächlichen Fluß stets unterschätzen, was jedoch in Reaktorproblemen erfahrungsgemäß von untergeordneter Bedeutung ist. Fehleranfällig ist dieses Verfahren dagegen bei der Behandlung von Abschirm- und „Deep Penetration“-Problemen, in denen man mit sehr kleinen Flußwerten z.B. in starken Absorbern oder in großer Entfernung von der Neutronenquelle konfrontiert ist. Der „Zero-Fixup“-Mechanismus kann hier u.U. zu einem erheblichen numerischen Mehraufwand führen. Die Codes DORT und TORT enthalten daher zusätzliche Optionen für Extrapolationsschemata höherer Ordnung, so z.B. das „Gewichtete Differenzen“- und das „Theta-Wichtungs“-Verfahren [RHO97], bei denen positive Flußwerte garantiert sind. Diese Verfahren lieferten allerdings in Kritikalitätsberechnungen für den FRM-II widersprüchliche Ergebnisse (insbesondere bei der Ermittlung des Eigenwerts) und erwiesen sich auch in transienten Berechnungen als ungeeignet. Für Reaktorprobleme ist daher generell die Verwendung der linearen „Zero-Fixup“-Methode zu empfehlen.

4.4 Coarse-Mesh-Rebalancing

Wie bereits in Kapitel 2 erläutert, ist der Erfolg der Methode der „Iteration on the Scattering Source“ sehr stark davon abhängig, wie groß der Selbststreuanteil innerhalb einer Energiegruppe ist, bzw. wie häufig ein Neutron gestreut wird, bevor es durch Absorption, Streuung oder Leckage die Gruppe verläßt. Insbesondere in thermischen Gruppen mit großen Selbst- und Aufwärtsstreuquerschnitten, z.B. in einem Medium mit besonders schweren Nukliden, die den Thermalisierungsprozeß stark verlangsamen, ist die Konvergenz des Verfahrens

häufig so schlecht, daß effektive Beschleunigungsmechanismen eingesetzt werden müssen. Neben rein numerischen Techniken haben sich hier Ansätze bewährt, die das Problem von der physikalischen Seite her angehen, namentlich das sog. Coarse-Mesh-Rebalancing (CMR) [NAK77, MIL78, CEF90] und die Diffusion Synthetic Acceleration (DSA) [ALC77, LAR83]. Beide Techniken sind in den Code DORT implementiert, wobei sich das Coarse-Mesh-Rebalancing für die Anwendung auf den FRM-II bestens bewährt hat und daher im Folgenden skizziert werden soll.

Die Ausgangssituation ist ähnlich der, die bereits im Abschnitt 3.4 im Zusammenhang mit der Konvergenz der Konjugierte-Gradienten-Methode besprochen worden ist. Während die „Iteration on the Scattering Source“ zwar in der Lage ist, Details in den lokalen Flußverteilungen rasch und genau zu erfassen, gelingt es ihr nur schwerlich, Fehler, die sich über größere räumliche Bereiche erstrecken und damit die Teilchenzahlbilanz empfindlich stören, auszukonvergieren. Man sucht also nach einer Methode, die die lokalen Flußverteilungen im wesentlichen unberührt läßt, aber die Amplitude der Flüsse über sog. „Coarse Meshes“ (Grobmaschen) so anpaßt, daß die globale Bilanz des Systems verbessert wird.

Integriert man, wie bei der Herleitung der Diffusionsgleichung, die „Within-Group“-Gleichung zunächst über den gesamten Raumwinkel, so ergibt sich:

$$\nabla \cdot \vec{J}(\vec{r}) + \Sigma_r \phi(\vec{r}) = S(\vec{r}), \quad (4-39)$$

mit dem Neutronenstrom \vec{J} , dem Removal-Querschnitt Σ_r und dem isotropen Anteil des Gruppenquellterms S :

$$\vec{J} = \int d\vec{\Omega} \vec{\Omega} \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) \quad \Sigma_r = \Sigma_t - \Sigma_s \quad S = \int d\vec{\Omega} q(\vec{r}, \vec{\Omega}). \quad (4-40)$$

Nun teilt man das Problemgebiet in eine Anzahl größerer Bereiche, die Grobmaschen V_m , auf und integriert Gleichung 4-39 über jede einzelne dieser Regionen. Unter Benutzung des Gaußschen Satzes folgt dann:

$$\sum_{m'} \int dS \vec{n} \cdot \vec{J} + \int_{V_m} dV \Sigma_r \phi = \int_{V_m} dV S, \quad (4-41)$$

wobei die Integration im ersten Ausdruck über die Grenzflächen des Volumens V_m mit den benachbarten Volumina $V_{m'}$ ausgeführt wird. Definiert man ferner die aus der Masche ein- bzw. auslaufenden Flüsse

$$J_+ = \int_{\vec{n} \cdot \vec{\Omega} > 0} d\vec{\Omega} |\vec{n} \cdot \vec{\Omega}| \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) \quad J_- = \int_{\vec{n} \cdot \vec{\Omega} < 0} d\vec{\Omega} |\vec{n} \cdot \vec{\Omega}| \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) \quad (4-42)$$

läßt sich Gleichung 4-41 auch schreiben als:

$$\sum_{m' S_{mm'}} \int dS J_+ - \sum_{m' S_{mm'}} \int dS J_- + \int_{V_m} dV \Sigma_r \phi = \int_{V_m} dV S. \quad (4-43)$$

Sei nun $\tilde{\psi}^{(l)}$ das Ergebnis der l -ten inneren Iteration; da die Lösung noch nicht auskonvergiert sei, wird dieser Fluß nicht die Bilanzgleichung 4-43 erfüllen. Man wird daher versuchen, die globale Teilchenzahlbilanz dadurch herzustellen, daß man einen verbesserten Fluß $\psi^{(l)}$ konstruiert, indem man die Flüsse $\tilde{\psi}^{(l)}$ für jede Grobmasche mit einer unterschiedlichen Konstanten f_m multipliziert:

$$\psi^{(l)}(\vec{r}, \vec{\Omega}) = f_m \tilde{\psi}^{(l)}(\vec{r}, \vec{\Omega}) \quad \vec{r} \in V_m. \quad (4-44)$$

Zur Erzeugung der Ströme müssen außerdem die Flüsse auf den Grenzflächen bekannt sein; hier definiert man:

$$\begin{aligned} \psi^{(l)}(\vec{r}, \vec{\Omega}) &= f_m \tilde{\psi}^{(l)}(\vec{r}, \vec{\Omega}) & \vec{r} \in S_{mm'}, \vec{n} \cdot \vec{\Omega} > 0 \\ \psi^{(l)}(\vec{r}, \vec{\Omega}) &= f_{m'} \tilde{\psi}^{(l)}(\vec{r}, \vec{\Omega}) & \vec{r} \in S_{mm'}, \vec{n} \cdot \vec{\Omega} < 0. \end{aligned} \quad (4-45)$$

Fordert man nun, daß $\psi^{(l)}$ die Gleichung 4-43 erfülle, findet man schließlich folgende Bestimmungsgleichung für die Konstanten f_m :

$$\left(\int_{V_m} dV \Sigma_r \tilde{\phi}^{(l)} + \sum_{m' S_{mm'}} \int dS \tilde{J}_+^{(l)} \right) f_m - \sum_{m' S_{mm'}} \int dS \tilde{J}_-^{(l)} f_{m'} = \int_{V_m} dV S. \quad (4-46)$$

die Größen $\tilde{\phi}$ und \tilde{J}_\pm können durch Integration der unbeschleunigten Flüsse $\tilde{\psi}^{(l)}$ leicht berechnet werden:

$$\tilde{J}_+^{(l)} = \int_{\vec{n} \cdot \vec{\Omega} > 0} d\vec{\Omega} |\vec{n} \cdot \vec{\Omega}| \tilde{\psi}(\vec{r}, \vec{\Omega}) \quad \tilde{J}_-^{(l)} = \int_{\vec{n} \cdot \vec{\Omega} < 0} d\vec{\Omega} |\vec{n} \cdot \vec{\Omega}| \tilde{\psi}(\vec{r}, \vec{\Omega}) \quad \tilde{\phi}^{(l)} = \int d\vec{\Omega} \tilde{\psi}^{(l)}(\vec{r}, \vec{\Omega}). \quad (4-47)$$

Gleichung 4-46 ist der Diffusionsgleichung formal sehr ähnlich; die Volumina V_m koppeln nur an ihre direkten Nachbarn, so daß das resultierende Gleichungssystem schwach besetzt ist und die resultierenden Matrizen Bandstruktur besitzen. Da die Anzahl der Grobmaschen i.allg. wesentlich geringer sein wird als die Anzahl der Feinmaschen, kann ein solches System mit wenig Aufwand unter Verwendung von Standard-Iterationsmethoden oder sogar mit

direkten Verfahren gelöst werden. Die Lösung in Form der Konstanten f_m wird dann zur Umskalierung der Flüsse in den Grobmaschen verwendet, die dann der nächsten inneren Iteration zugeführt werden.

Dieses Verfahren hat sich in der Praxis gerade für Fixed-Source- und Deep-Penetration-Probleme ausgezeichnet bewährt [RHO79]; der durch die Lösung der Coarse-Mesh-Gleichungen erhöhte numerische Aufwand wird durch eine wesentliche bessere Konvergenz des Gesamtproblems belohnt, Beschleunigungen um einen Faktor 5-10 sind keine Seltenheit. Der Erfolg ist jedoch im wesentlichen von der Wahl eines „guten“ Grobmaschengitters abhängig. Unglücklicherweise existiert für die Wahl eines solchen „Coarse Meshes“ keine allgemeine Regel, so daß man in den meisten Fällen auf die Erfahrung oder schlicht und einfach auf „Probieren“ angewiesen ist.

4.5 Der Quellterm

Um die Behandlung des zeitabhängigen Problems und die daraus resultierenden programmtechnischen Erweiterungen des Codes DORT zu verstehen, ist eine kurze Diskussion des Quellterms in der Transportgleichung notwendig. Ohne näher darauf einzugehen, wurde bei der Beschreibung der inneren Iterationen die folgende Form verwendet:

$$q_{n,g}(\vec{r}, \vec{\Omega}_n) = \sum_{l=0}^L \sum_{m=0}^l C_l^m(\vec{\Omega}_n) \Sigma_{ls}^g(\vec{r}) \phi_{l,g}^m(\vec{r}) + S_{n,g}(\vec{\Omega}_n). \quad (4-48)$$

Der Quellterm setzt sich also zusammen aus einem Selbststreuanteil, der während des inneren Iterationszyklus ständig neu ermittelt wird und einem konstanten Anteil, der gerade den Gruppenquellterm sowie ggf. vorhandene feste Quellen enthält. In seiner kontinuierlichen Form lautet letzterer:

$$S_g(\vec{\Omega}) = \sum_{g' \neq g} \int d\vec{\Omega}' \Sigma_s^{gg'}(\vec{r}, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \psi_{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}') + \chi_g \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_f^{g'} \phi_{g'} + Q_g. \quad (4-49)$$

Im Hinblick auf Gleichung 4-48 ist es notwendig, diesen Quellterm ebenfalls in eine winkeldiskretisierte Form zu bringen. Dazu behandelt man die Einstreuung aus anderen Gruppen ebenso wie den Selbststreuanteil:

$$\sum_{g' \neq g} \int d\vec{\Omega}' \Sigma_s^{gg'}(\vec{r}, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \psi_{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}') \Rightarrow \sum_{l=0}^L \sum_{m=0}^l \sum_{g' \neq g} \Sigma_{ls}^{gg'}(\vec{r}) C_l^m(\vec{\Omega}_n) \phi_{l,g'}^m(\vec{r}), \quad (4-50)$$

wobei die Gruppenflüsse und Streuquerschnitte genauso in ihre entsprechenden Momente entwickelt wurden wie in Gleichung 4-48. Der Spaltterm ist von der Beschreibung her noch einfacher: Da die skalaren Flüsse ϕ_g gerade die führenden Flußmomente sind, kann man schreiben:

$$F_{n,g} = \chi_g \sum_{g'=1}^G v \Sigma_f^{g'} \phi_{0,g'}^0(\vec{r}). \quad (4-51)$$

Setzt man ferner voraus, daß der „Fixed-Source“-Term Q ebenfalls in einer Momentenentwicklung vorliegt:

$$Q_{n,g} = \sum_{l=0}^L \sum_{m=0}^l C_l^m(\vec{\Omega}_n) Q_{l,g}^m(\vec{r}) \quad \text{mit} \quad Q_{l,g}^m(\vec{r}) = \int d\vec{\Omega} C_l^m(\vec{\Omega}) Q_g(\vec{r}, \vec{\Omega}), \quad (4-52)$$

so lautet der Gesamtquellterm für Gruppe g und Ordinate n :

$$q_{n,g}(\vec{r}) = \underbrace{\chi_g \sum_{g'=1}^G v \Sigma_f^{g'} \phi_{0,g'}^0(\vec{r})}_{\text{Spaltung}} + \left. \sum_{l=0}^L \sum_{m=0}^l \left\{ \underbrace{\Sigma_{ls}^{gg}(\vec{r}) C_l^m(\vec{\Omega}_n) \phi_{l,g}^m(\vec{r})}_{\text{Selbststreuung}} + \underbrace{C_l^m(\vec{\Omega}_n) Q_{l,g}^m(\vec{r})}_{\text{Fixed-Source}} + \underbrace{\sum_{g' \neq g} \Sigma_{ls}^{gg'}(\vec{r}) C_l^m(\vec{\Omega}_n) \phi_{l,g'}^m(\vec{r})}_{\text{Einstreuung}} \right\} \right\}. \quad (4-53)$$

Der Quellterm in Diskrete-Ordinaten-Darstellung kann also vollständig durch Momente ausgedrückt werden. Dies wird hier so ausdrücklich betont, weil genau diese Strategie in DORT verfolgt wird.

In seiner Standardform müssen dem Code DORT eine anfängliche Flußschätzung und ggf. eine Quellverteilung in Momentenform übergeben werden [JOH92]; die Übergabe erfolgt normalerweise aus Dateien heraus, die die Fluß- und Fixed-Source-Momente $\phi_{l,g}^m$ bzw. $Q_{l,g}^m$ in einer festgelegten Reihenfolge enthalten. Zu Beginn einer äußeren Iteration werden daraus zunächst die einzelnen Momente der G Gruppenquellterme gebildet:

$$S_{l,g}^m = Q_{l,g}^m + \delta_{l0} \delta_{m0} \chi_g \sum_{g'=1}^G v \Sigma_f^{g'} \phi_{0,g'}^0 + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{ls}^{gg'} \phi_{l,g'}^m. \quad (4-54)$$

Diese Ausdrücke werden dann an die für die innere Iteration zuständigen Routinen weitergeleitet. Dort wird zu Beginn jeder Iteration auf die Terme $S_{l,g}^m$ der Selbststreuanteil addiert:

$$q_{l,g}^m = S_{l,g}^m + \sum_{ls}^{gg} \phi_{l,g}^m. \quad (4-55)$$

Man beachte, daß nach wie vor eine Aufspaltung in Momente vorliegt. Erst mit Beginn des räumlichen Sweeps muß dieser Quellterm zwangsläufig in explizite Winkelanteile entwickelt werden, um ihn z.B. den rekursiven Algorithmen 4-21 oder 4-33 zuführen zu können, und zwar durch die Transformation:

$$q_{n,g}(\vec{r}, \vec{\Omega}_n) = \sum_{l=0}^L \sum_{m=0}^l C_l^m(\vec{\Omega}_n) q_{l,g}^m(\vec{r}). \quad (4-56)$$

Dies ist Gleichung 4-53 in kompakter Form. Da der räumliche Sweep außerdem zeilenweise durchgeführt wird, ist es zu keinem Zeitpunkt notwendig, mehr als eine Zeile der $q_{n,g}$ im Arbeitsspeicher des Rechners zu halten. Dies gilt auch, wie bereits im letzten Abschnitt erwähnt, für die Winkel Flüsse $\psi_{n,g}$; durch die rekursive Berechnungsvorschrift ist eine Abspeicherung der Winkel Flüsse überflüssig, gespeichert werden lediglich die während des Sweeps gemäß folgender Gleichung aufsummierten Flußmomente:

$$\phi_{l,g}^m(\vec{r}) = \sum_{n=1}^N w_n C_l^m(\vec{\Omega}_n) \psi_{n,g}(\vec{r}, \vec{\Omega}_n), \quad (4-57)$$

die in der nächsten inneren Iteration wiederum dazu dienen, den Selbststreuanteil neu zu bestimmen.

Die Vorteile dieser Vorgehensweise sind offensichtlich: Während die Anzahl der Winkel Flüsse in G Energiegruppen für ein $I \times J$ -dimensionales Problem in S_N -Ordnung insgesamt $I \times J \times G \times N \times (N+2)/2$ beträgt, ist die Anzahl der korrespondierenden Momente i.allg. wesentlich geringer; in radialsymmetrischer Zylindergeometrie werden z.B. nur drei Flußmomente zur Darstellung in P_1 -Näherung benötigt, was zu vergleichen ist mit 16 Winkeln für die S_4 -Darstellung. Man wird also in DORT an keiner Stelle die vollständig gespeicherten winkelabhängigen Flüsse $\psi_{n,g}$ vorfinden; gespeichert werden müssen lediglich die Flußmomente $\phi_{l,g}^m$ für alle Maschenpunkte und alle Energiegruppen. Dieses Schema ist zwar für stationäre Rechnungen geeignet; bei den Erweiterungen auf transiente Rechnungen zeigen sich allerdings einige Nachteile, die noch diskutiert werden.

Die Entwicklung in Fluß- und Quellmomente kann allerdings gelegentlich auch für stationäre Rechnungen problematisch sein [EMM79]. Ist z.B. die Tiefe der Entwicklung, d.h. L zu klein, werden wichtige Details des Flusses verlorengehen. So ist u.U. für Strahlexperimente oder zur Beschreibung von Voidregionen eine extrem tiefe Entwicklung notwendig, die möglicherweise mehr Flußmomente als Diskrete Ordinaten erfordert. Ferner ist auch die Darstellung der Streuquerschnitte über eine Legendre-Entwicklung nicht immer angemessen und kann für extrem anisotrope Streuung zu erheblichen Fehlern führen. Trotzdem hat sich dieses Verfahren schon allein deswegen durchgesetzt, weil für sämtliche denkbaren S_N -Quadraturen mit ein und demselben Querschnittssatz gearbeitet werden kann, während eine explizite Darstellung des Streuquerschnitts in Diskreten Ordinaten für jede Quadratur eine Neuberechnung erfordern würde und deswegen auch von keinem Transportcode verwendet wird.

4.6 Zusammenfassung

In der Einleitung zu diesem Kapitel wurden die gängigsten Transportmethoden vorgestellt; bei der Überprüfung verschiedener Lösungsansätze stellte sich heraus, daß die Diskrete-Ordinaten-Methode, wie z.B. in den Codes DORT und TWODANT implementiert, hinsichtlich des FRM-II-Problems numerisch am effizientesten ist. Dies liegt nicht zuletzt an der langjährigen Entwicklungsarbeit, die in diese Codes investiert wurde.

Der Code DORT ist in dieser Arbeit schließlich als Ausgangspunkt für eine zeitabhängige Erweiterung ausgewählt worden. Die Grundlagen der Diskrete-Ordinaten-Theorie wurden ausführlich vorgestellt und dabei die Punkte aufgezeigt, an denen Erweiterungen und Verbesserungen im Code für die Berechnung von Transienten vorgenommen werden müssen. Die konkreten Maßnahmen werden im folgenden Kapitel beschrieben.

5 Entwicklung einer zeitabhängigen Version des Neutronentransportcodes DORT

Die theoretischen Grundlagen der zeitabhängigen Neutronentransportgleichung sind bereits in Kapitel 2 ausführlich diskutiert worden. Vorgestellt wurde neben der zeitlichen und energetischen Diskretisierung auch die explizite Berücksichtigung der für die Reaktorkinetik wichtigen Vorläufergleichungen und die Formulierung als „Fixed-Source“-Problem. Die Erweiterung des Diskrete-Ordinaten-Codes DORT für die Berechnung von Transienten ist Gegenstand dieses Kapitels.

In Abbildung 5-1 ist das Ablaufschema für die Berechnung eines Zeitschrittes im gekoppelten Programmmodell als Flußdiagramm dargestellt. Insbesondere der Erstellung der Quellterme, die im Bild durch grau hinterlegte Kästchen hervorgehoben sind, wird noch erhöhte Aufmerksamkeit gewidmet werden. Darüber hinaus ist das Schema genauso für die Diffusionstheorie gültig, wenn man die (durch gestrichelte Linien angedeuteten) inneren Iterationen durch die entsprechenden Routinen zur Matrixinvertierung (siehe Abschnitt 3.3) ersetzt. Es bietet sich also an, sowohl Transport- als auch Diffusionsprogramm in einem Codegerüst zu implementieren.

Im Bild sind ferner Anfang und Ende des äußeren Iterationszyklus gekennzeichnet, da dies die Punkte sind, in denen der stationäre Code DORT im übergreifenden Codegerüst verankert wird. Alle Routinen, die außerhalb dieser Begrenzungen liegen, sind in dieser Arbeit neu entwickelt worden.

Dies bedeutet jedoch nicht, daß der Code DORT als „Black Box“ behandelt werden konnte. Tatsächlich waren erhebliche Eingriffe in den DORT-Quellcode nötig, um die in Kapitel 2 diskutierten Modifikationen programmtechnisch zu realisieren.

Die vorgenommenen Änderungen werden ausführlich in den folgenden Abschnitten diskutiert werden; es folgt zunächst eine kurze Übersicht:

- Die Verarbeitung der Eingabedaten wurde vom Code DORT auf das umgebende Programmgerüst verlagert, das auch die Eingabe von Daten für das Diffusionsprogramm unterstützt und den Gegebenheiten des FRM-II Rechnung trägt.
- Es wurden mehrere Speicherverwaltungsroutinen im Code DORT ausgetauscht und für transiente Rechnungen erweitert; ferner war es notwendig, den DORT-Code für 64-Bit-Architekturen anzupassen.

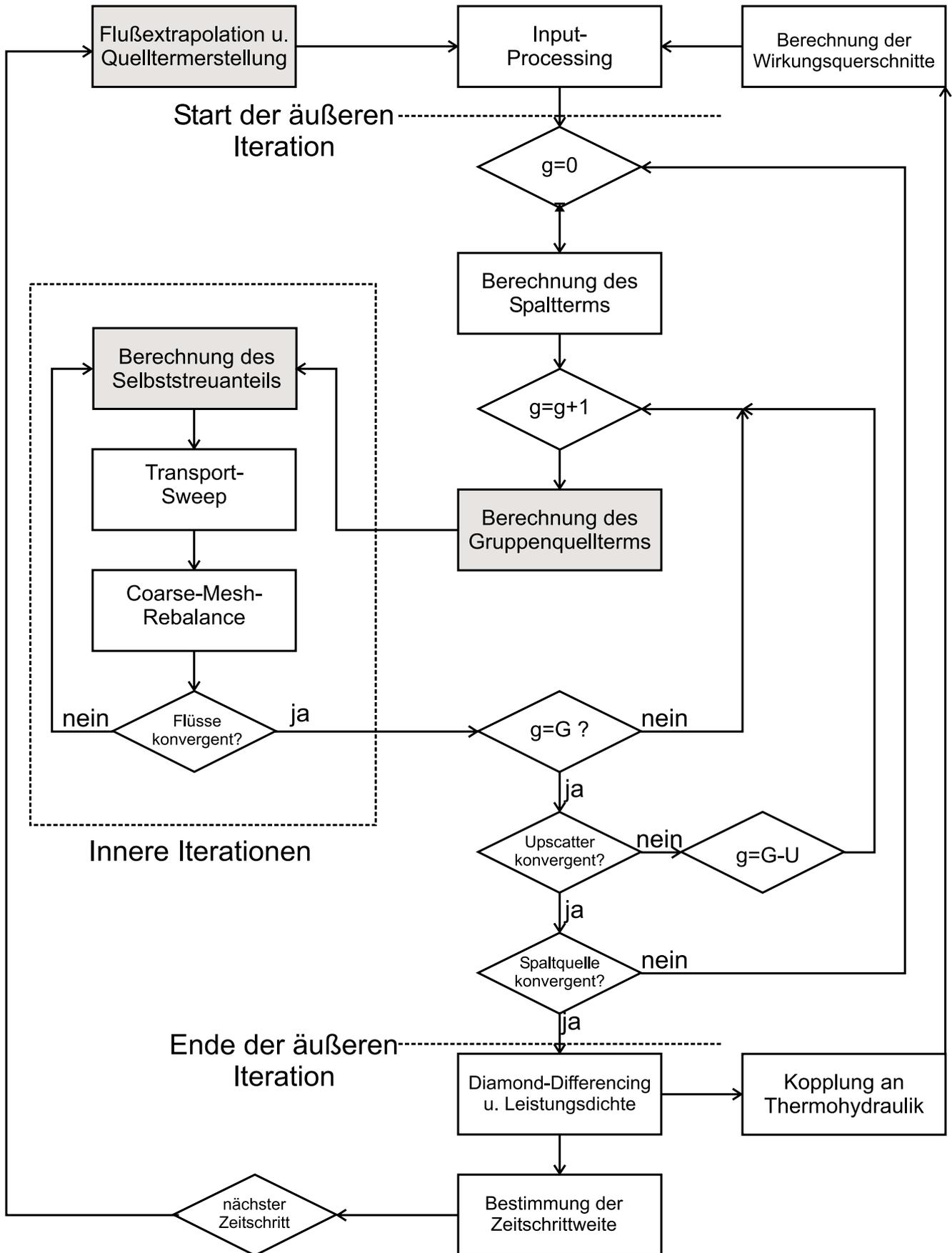


Abbildung 5-1: Flußdiagramm für die Berechnung eines Zeitschrittes im gekoppelten Programmmodell aus DORT und Thermohydraulik

- Für die Verwaltung der Wirkungsquerschnitte wurde ein separates Modul programmiert, das durch Interpolation aus bestehenden Datensätzen Querschnittsdaten für beliebige Betriebszustände eines Reaktors errechnet; dieser Programmteil wird im Zusammenhang mit dem FRM-II (Kapitel 6 bis 8) ausführlicher erläutert werden.
- Die in Kapitel 2 diskutierten Erweiterungen für voll implizite Transientenrechnungen wurden implementiert, also: die Umskalierung des totalen Wirkungsquerschnitts und des Spaltspektrums, die Berechnung expliziter verzögerter Neutronenspektren, sowie der Einbau der „Fixed-Source“-Terme, die die Vorläufer- und Flußbeiträge des letzten Zeitschrittes enthalten.
- Die Iterationsstrategie wurde für den FRM-II optimiert und durch Einbau eines „Upscatter“-Zyklus und einer Chebyshev-Extrapolation weiter verbessert, ähnlich den im Diffusionsprogramm vorgenommenen Maßnahmen.
- Im DORT-Code werden nun auch räumlich aufgelöste Reaktorperioden berechnet, die zur zeitlichen Flußextrapolation und zur Zeitschrittweitensteuerung dienen.
- Der Code ist in der Lage, die Zeitdiskretisierung sowohl voll implizit als auch über das sog. „Diamond-Differencing“ durchzuführen.
- Das gesamte Programmgerüst ist mit dem Thermohydraulikcode ATHLET verknüpft worden und ist damit in der ATHLET-Umgebung ablauffähig. Im DORT-Code selbst werden die für die Kopplung notwendigen Wärmestromdichten bestimmt, die dann zur Berechnung thermofluiddynamischer Zustände des Kerns verwendet werden; die von ATHLET berechneten thermohydraulischen Daten werden an DORT bzw. das Querschnittsmodul zurückgegeben und dort verarbeitet.
- Die Ermittlung punktkinetischer Parameter für Vergleichsrechnungen kann nun ebenfalls mit dem Code DORT ausgeführt werden.

5.1 Verarbeitung der Eingabedaten

Da die Entwicklung des Diffusionscodes zeitlich vor der Entstehung des Transportcodes stattfand, wurde für ersteren eine eigenständige, benutzerfreundliche Eingabe entwickelt. Die Daten zur Systembeschreibung werden in einem Format übergeben, das sich am Eingabeformat von TWODANT und EVENT orientiert. Anstelle des komplizierten FIDO-Formats, das von DORT verwendet wird, erfolgt die Dateneingabe anhand von Schlüsselwörtern. Im Hinblick auf den FRM-II wurden auch einige für diesen Reaktor typische Eingabedaten als Input zugelassen:

- So können im Input Materialbereiche festgelegt werden, die sich mit vorzuziehender Geschwindigkeit räumlich verschieben, z.B. der Steuerstab des FRM-II.

- In der Eingabedatenbeschreibung kann geometrisch festgelegt werden, in welchen Zonen Rückwirkungseffekte, d.h. zeitlich variierende Querschnitte berücksichtigt werden müssen; nur in diesen Zonen werden dann auch Wärmestromdichten berechnet, die an ATHLET übergeben werden.
- Die Neutronengeschwindigkeiten können sowohl für das gesamte Problem durch jeweils einen Wert pro Gruppe spezifiziert werden, als auch analog zu den Wirkungsquerschnitten zonenabhängig und damit räumlich variabel definiert sein.
- Verzögerte Neutronenspektren können entweder direkt eingegeben oder für den FRM-II bzw. für reines U-235 auch im Code berechnet werden.
- Schließlich können, falls erforderlich, im Input Zeitschrittweiten über bestimmte Zeitintervalle festgelegt oder Zeitpunkte definiert werden, zu denen eine Reduktion des nächsten Zeitschrittes eintreten soll, so z.B. bei Start der Steuerstabbewegung, Änderung der Kühlmittelströmung bei Pumpenausfall, oder Übergang des Reaktors von einem stationären in einen transienten Zustand.
- Aus Kompatibilitätsgründen wurde ferner eine Option implementiert, die es erlaubt, aus dem Eingabedatensatz einen äquivalenten DORT-Input im FIDO-Format zu erstellen, der dann auch an Anwender des Standard-DORT-Codes weitergegeben werden kann.

Alle anderen Eingabedaten, so z.B. zur Beschreibung der Geometrie, Struktur der Wirkungsquerschnittsbibliotheken, Definition der Materialien und Eingabe der Konvergenzkriterien und Beschleunigungsparameter entsprechen weitgehend dem TWODANT-Input.

Bei Programmstart werden die DORT-Eingaberoutinen fast vollständig übersprungen; notwendig ist lediglich, daß DORT die Speicherallokierung der verschiedenen Datenfelder für Geometrie, Querschnitte, Quadratursätze, Spaltspektrum usw. zu Beginn vornimmt. Diese werden dann bei transienten Berechnungen zu jedem Zeitschritt mit extern errechneten Werten überschrieben, so daß im Arbeitsspeicher stets die aktuellen Daten vorliegen.

5.2 Die Speicherverwaltung

Die Entwicklung des Codes DORT bzw. seines Vorläufers DOT [RHO73] reicht zurück bis in die 70er Jahre. Zu diesem Zeitpunkt war der verfügbare Arbeitsspeicher der Rechner gemessen an heutigen Maßstäben sehr gering, so daß bei der Programmierung strengstens darauf geachtet wurde, möglichst viele nicht benötigte Daten auf Festspeichermedien auszulagern. So bietet DORT mehrere Speichermodelle an: Bei sehr knapp bemessenem Arbeitsspeicher wird das Lösungsgebiet zeilenweise zerlegt und nur Fluß- und Quelltermmomente einer einzigen Zeile werden im Speicher abgelegt und bearbeitet. Dies erfordert allerdings ein sehr häufiges Nachladen von der Festplatte. Beim „großen“ Speichermodell wer-

den dagegen alle Flußmomente für alle Energiegruppen im Hauptspeicher abgelegt. Die Momente für einen etwaigen Quellterm und die Wirkungsquerschnitte müssen hingegen nach wie vor gruppenweise vom Speichermedium gelesen werden.

Da mittlerweile Arbeitsspeicher selbst für Workstations in der Größenordnung von Gigabytes zur Verfügung steht, haben sich diese Probleme relativiert. Im Code implementiert wurde daher zunächst die Option, alle relevanten Daten, also sowohl Fluß- und Fixed-Source-Momente als auch die Wirkungsquerschnitte in den Hauptspeicher zu verschieben, wodurch die Performance etwas verbessert werden konnte (tatsächlich minimieren die modernen „Disk-Caching“-Systeme den Aufwand für Festplattenzugriffe erheblich).

In transienten Rechnungen müssen jedoch neben Fluß- und Quelltermmomenten auch die expliziten Winkelflüsse sowie die Reaktorperioden in Diskrete-Ordinaten-Darstellung abgespeichert werden, wie im folgenden Abschnitt erläutert wird. Die entsprechenden Datenfelder wurden zusätzlich im Code implementiert. Dadurch vergrößert sich der Speicherbedarf in transienten Rechnungen erheblich gegenüber dem stationären Berechnungsmodus: So werden für ein stationäres Problem in P_1 -Näherung nur $3 \times G \times N$ Werte für die Flußmomente (mit der Anzahl der Maschenpunkte N und G Energiegruppen, siehe auch Abschnitt 4.3) abgespeichert; für ein zeitabhängiges S_4 -Problem benötigt man zusätzlich $16 \times G \times N$ Speicherzellen für die Winkelflüsse sowie dieselbe Anzahl für die räumlich, energetisch und winkelaufgelösten Reaktorperioden. Möchte man darüber hinaus die „Diamond-Differencing“-Zeitdiskretisierung verwenden, kommen noch einmal $16 \times G \times N$ für die Speicherung der Flüsse $\psi^{(n+1/2)}$ zum Zeitpunkt $n+1/2$ hinzu, so daß sich der Gesamtspeicheraufwand auf etwa $\sim 50 \times G \times N$ beläuft.

Für ein zweidimensionales Problem mit 15000 Maschenpunkten und 12 Energiegruppen ergibt sich eine Speicheranforderung von ~ 70 MB, was auf einer Workstation oder einem gut ausgerüsteten Personal Computer durchaus tragbar ist.

5.3 Die Versorgung des Codes mit „Fixed-Source“-Daten

Um mit einem stationären Code zeitabhängige Rechnungen durchführen zu können, muß dem Code DORT in jedem Zeitschritt der „Zeitquellterm“:

$$q_g^{(n)}(\vec{r}, \vec{\Omega}_n) = \frac{1}{v_g \Delta t} \psi_g^{(n)}(\vec{r}, \vec{\Omega}_n) + \sum_{l=1}^6 \chi_{dg}^l \lambda_l \frac{1}{\Delta t} \gamma_l C_l^{(n)}(\vec{r}), \quad (5-1)$$

der die Konzentration der Vorläufer sowie die Flüsse des vergangenen Zeitschritts enthält, als „Fixed-Source“ zur Verfügung gestellt werden. Im stationären DORT-Code müssen solche Quelldaten durch eine Datei mit der entsprechenden Momentenentwicklung übergeben werden; in der transienten Version können diese Daten nun auch direkt aus dem Hauptspeicher eingelesen werden. Eine besondere Behandlung ist für die Flüsse $\psi^{(n)}$ erforderlich, da

diese nicht in Momentenform, sondern gemäß Gleichung 5-1 explizit in der Diskrete-Ordinaten-Darstellung an den nächsten Zeitschritt übergeben werden müssen. Eine solche Eingabeoption ist in DORT jedoch nicht vorgesehen, ebensowenig wie eine Ausgabe der Winkelflüsse.

Tatsächlich war die Implementierung dieses Quellterms der schwierigste Teil der Codeerweiterung. Bereits in Abschnitt 4.3 wurde darauf hingewiesen, daß stets maximal eine Zeile des Problemgebiets im Hauptspeicher des Rechners vorliegt. Diese muß also während des räumlichen Sweeps innerhalb der inneren Iterationen in das externe Datenfeld zur Speicherung aller Winkelflüsse übertragen werden (siehe voriger Abschnitt), dessen Struktur in Abbildung 5-2 dargestellt ist. Ist dies gelungen und ist der Zeitschritt abgeschlossen, werden diese Flüsse mit $(1/v_g \Delta t)$ skaliert und als Quellterm an den nächsten Zeitschritt übergeben. Nun wäre es möglich, diesen Quellterm zunächst in Momente gemäß:

$$Q_{l,g}^m(\vec{r}) \approx \sum_n w_n C_l^m(\bar{\Omega}_n) \frac{1}{v_g \Delta t} \psi^{(n)}(\vec{r}, \bar{\Omega}_n) \quad (5-2)$$

zu entwickeln und dann auf dem herkömmlichen Wege an DORT weiterzuleiten. Die Erfahrungen mit dem Code PARTISN [MOR00] haben aber bereits gezeigt, daß diese Vorgehensweise nicht korrekt ist, da die bei der Entwicklung 5-2 verwendete Approximation die Teilchenzahlbilanz empfindlich stört und so zu Instabilitäten führen kann. Tatsächlich war es mit dieser Methode nicht möglich, den FRM-II über längere Zeitintervalle in einem stationären Zustand zu halten.

Ähnlich wie beim Auslesen der Flüsse mußte also auch hier direkt in die „Sweeping“-Routinen der inneren Iterationen eingegriffen werden, um den Quellterm in expliziter Diskrete-Ordinaten-Darstellung dem Code zuzuführen. Das Prinzip ist in Abbildung 5-2 dargestellt. Die aus den Flüssen $\psi^{(n)}$ gemäß Gleichung 5-1 konstruierten Quellterme werden in einem Datenfeld Gruppe für Gruppe, Zeile für Zeile und Richtung für Richtung abgelegt.

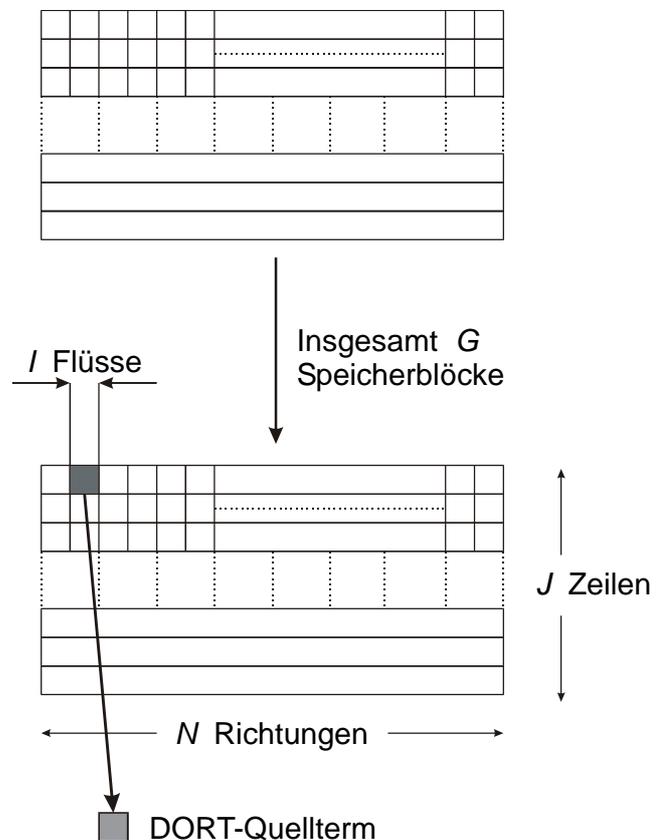


Abbildung 5-2: Speicherorganisation für die Übergabe und Verarbeitung des DORT-Quellterms

Der DORT-Quellterm enthält im Gegensatz dazu jeweils nur eine Richtung einer Zeile des gesamten Problemgebiets (durch den grauen Kasten angedeutet). Während des räumlichen Sweeps muß also für jede Richtung und für jede Zeile wiederholt auf das externe Datenfeld zugegriffen werden. Dies ist insbesondere deswegen kompliziert, weil die verschiedenen Ordinatenrichtungen nicht sequentiell abgearbeitet werden, sondern in der in Abschnitt 4.3 dargestellten Reihenfolge.

Die Behandlung des Vorläufer-Terms:

$$q_{\text{Vorläufer}}^{(n)} = \sum_{l=1}^6 \chi_{dg}^l \lambda_l \frac{1}{\Delta t} \gamma_l C_l^{(n)}(\vec{r}) \quad (5-3)$$

ist hingegen wesentlich einfacher: Da dieser Quellterm isotrop ist, kann er ohne weiteres auf die führenden Quelltermmomente übertragen werden, die üblicherweise von DORT für den „Fixed-Source“-Input verwendet werden.

Diese Aufspaltung der „Gesamtzeitquelle“ in zwei separate und unterschiedlich handzuhabende Teile brachte ein weiteres Problem mit sich: Die Coarse-Mesh-Rebalance-Methode erfordert nämlich im Gegensatz zum räumlichen Sweep die Übergabe des Fixed-Source-Terms in Momentenform; da der Term $(1/(v\Delta t))\psi^{(n)}$ jedoch laut obigen Überlegungen nicht in dieser Form aufbereitet wurde, muß ein zweiter Hilfsquellterm der Form 5-2 parallel mitgeführt werden. Obwohl er für die Zeitintegration eine schlechte Näherung darstellt, ist er für das Coarse-Mesh-Rebalancing hinreichend genau.

Die verbleibenden Erweiterungen des Codes waren relativ einfach implementiert: Die Modifikation des totalen Querschnitts und die Erweiterung des Spaltspektrums

$$\Sigma_t^g = \Sigma_t^g + \frac{1}{v_g \Delta t} \quad \chi_g' = (1 - \beta) \chi_p^g + \sum_{l=1}^6 \chi_{dg}^l \lambda_l \gamma_l \beta \quad (5-4)$$

können bereits während der Querschnittsaufbereitung durchgeführt werden. Die Erzeugung der dabei verwendeten verzögerten Neutronenspektren wird in Abschnitt 6.3.7 erläutert.

5.4 Die Beschleunigung der äußeren Iterationen

Für die Diffusionstheorie wurde die Anwendung der Chebyshev-Extrapolation demonstriert und auf die Vorteile einer mehrfachen Bearbeitung der thermischen Gruppen innerhalb einer äußeren Iteration (dem „Upscatter“-Zyklus) hingewiesen. Der Code DORT verwendet in seiner Standardform zwei einfachere Mechanismen [RHO97]: die Extrapolation der Spaltquelle

mit festem Parameter (siehe Abschnitt 3.5) sowie die sog. „Upscatter-Rebalance“ zur Behandlung der Aufwärtsstreuung.

Bereits in Kapitel 3 wurde betont, daß ein asymptotischer Fehlerzerfall im Power-Iterationsverfahren und damit eine effiziente Spaltquellenextrapolation nur dann möglich ist, wenn für die Lösung des Gesamtsystems:

$$\mathbf{M}^{-1}\mathbf{B}\Phi = k_{\text{eff}}\Phi \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{F}^T\mathbf{M}^{-1}\chi\Psi = k_{\text{eff}}\Psi \quad (5-5)$$

jede einzelne Gruppengleichung bis zu einer bestimmten Genauigkeit gelöst worden ist. Um Aufwärtsstreuung zu berücksichtigen, ist es daher notwendig, mehrfach über die thermischen Gruppen zu iterieren.

Das stattdessen in DORT verwendete Verfahren der „Upscatter-Rebalance“ hat zwar einerseits den Vorteil, daß die Gruppengleichungen auch für thermische Gruppen nur einmal pro äußere Iteration gelöst werden müssen; die Anwendbarkeit dieser Methode vertraut aber darauf, daß das energetische Spektrum der thermischen Neutronen räumlich weitgehend konstant ist. Diese Annahme ist allerdings für den FRM-II unzulässig; die Erfassung der Aufwärtsstreuung durch einen globalen Upscatter-Skalierungsfaktor ist daher eine schlechte Näherung. Die Lösung der thermischen Gruppengleichungen wird also unbefriedigend sein, und dies macht sich wiederum direkt in der Konvergenz der äußeren Iterationen bemerkbar.

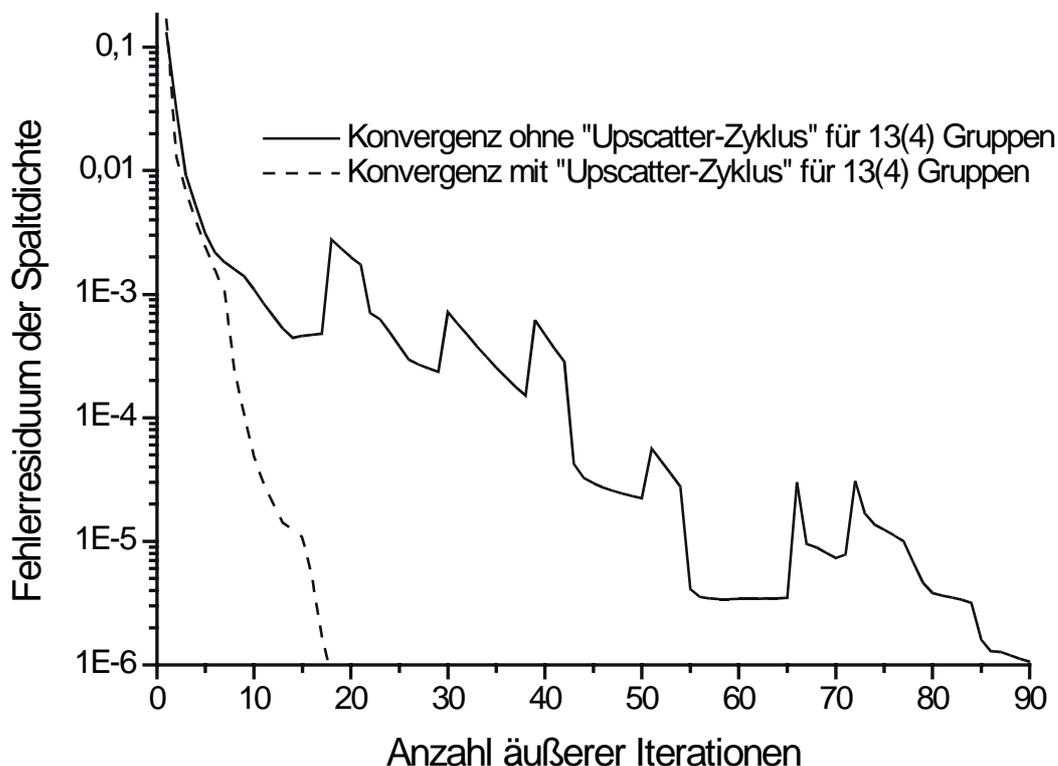


Abbildung 5-3: Effizienz des nachgerüsteten Upscatter-Zyklus in DORT im Vergleich mit der unbeschleunigten Version für das FRM-II-Problem in 13(4) Energiegruppen

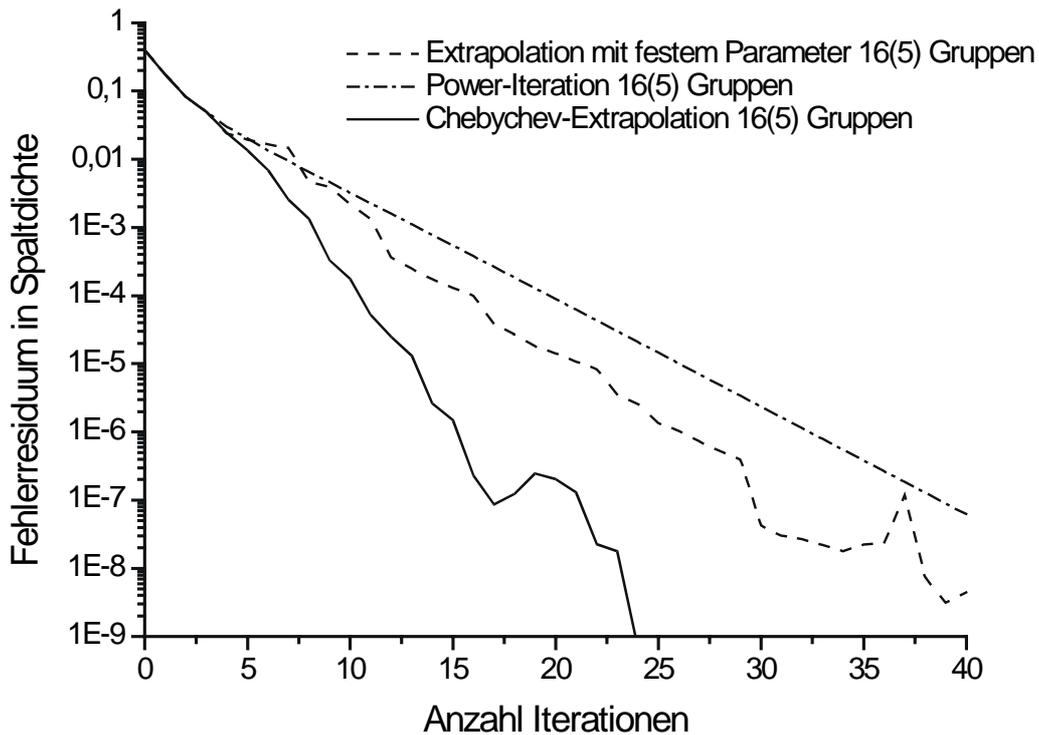


Abbildung 5-4: Vergleich von Power-Iteration, Spaltdichtenextrapolation und Chebyshev-Methode für das FRM-II-Problem in 16(5) Energiegruppen

Als Beispiel ist in Abbildung 5-3 die iterative Fehlerreduktion für eine typische 13(4)-Gruppenrechnung für den FRM-II dargestellt. Diese im weiteren häufig verwendete Schreibweise deutet an, daß in den insgesamt 13 Energiegruppen vier thermische Gruppen enthalten sind. Benutzt man das in DORT implementierte Schema, so ist die Konvergenz sehr schlecht und der Fehlerzerfall zeigt nicht die geringste Asymptotik, so daß der Code gar nicht die Gelegenheit hat, eine Spaltdichteextrapolation durchzuführen bzw. daß diese vollkommen fehlschlägt. Führt man hingegen mehrere Iterationen über die thermischen Gruppen aus, erhält man einen sehr sauberen Zerfall des iterativen Fehlers in den äußeren Iterationen; deren Anzahl reduziert sich außerdem drastisch auf etwa ein Fünftel. Für 2-3 thermische Gruppen hat sich die Upscatter-Rebalance etwas gutmütiger verhalten, für viele (z.B. 10) Gruppen hingegen konnte das FRM-II-Problem überhaupt nicht mehr bis zur gewünschten Konvergenz von 10^{-6} - 10^{-7} in der Spaltdichte gebracht werden.

Das beschriebene Verfahren war auch wesentliche Voraussetzung für den Einsatz der Chebyshev-Extrapolation, die zur Abschätzung des Dominanzverhältnisses ebenfalls eine asymptotische Fehlerzerfallsrate benötigt (siehe Abschnitt 3.5). Die Implementierung konnte direkt aus dem Diffusionsprogramm übernommen werden. In Abbildung 5-4 sind die einfache Power-Iteration, die in DORT standardmäßig vorhandene Extrapolation mit festem Parameter und die „nachgerüstete“ Chebyshev-Methode gegenübergestellt. Die ersten drei Iterationen sind jeweils unbeschleunigte Power-Iterationen; deutlich ist zu erkennen, daß das Power-Iterationsverfahren sehr schnell eine Asymptotik erreicht. Die Tatsache, daß das gesamte Ver-

fahren hier bedeutend schneller konvergiert als in Abbildung 3-5 ($\sigma \approx 0.97$), hängt im wesentlichen mit dem für den FRM-II bedeutend günstigeren Dominanzverhältnis von $\sigma \approx 0.79$ zusammen. Das Bild zeigt aber auch, daß die Chebyshev-Methode nochmals einen Geschwindigkeitsvorteil von etwa 1,5 bis 2 gegenüber dem in DORT implementierten Mechanismus liefert.

Die für eine FRM-II-Berechnung mit 13(4) Gruppen optimierten Parameter zur Beschleunigung der Konvergenz sind in Tabelle 5-1 sowohl für das Diffusions- als auch für das Transportprogramm aufgelistet. Man beachte, daß der Diffusionscode i.allg. mit einer geringeren Anzahl von inneren Iterationen auskommt als DORT. Die Konvergenzkriterien für Flüsse und Spaltdichte sind sehr streng; insbesondere für transiente Rechnungen muß die Spaltdichte auf besser als 10^{-7} konvergiert werden. Geht man über zu einer höheren Energiegruppenanzahl, muß u.U. die Anzahl maximal zulässiger innerer Iterationen pro Gruppe heraufgesetzt werden. Insofern können die in Tabelle 5-1 dargestellten Werte nur als grobe Richtlinie für den Anwender dienen.

Parameter	Diffusionsprogramm	Transportprogramm
Konvergenz k_{eff}	10^{-8}	10^{-8}
Flußkonvergenz	10^{-6}	10^{-6}
Spaltdichtekonvergenz (stationär/transient)	$5 \cdot 10^{-7} / 1 \cdot 10^{-7}$	$5 \cdot 10^{-7} / 1 \cdot 10^{-7}$
Maximale Anzahl innerer Iterationen in schnellen Gruppen (stationär/transient)	4/2	6/4
Maximale Anzahl innerer Iterationen in thermischen Gruppen (stationär/transient)	10/5	15/10
Maximale Anzahl von Upscatter-Iterationen (stationär/transient)	10/2	10/2
Flußdiskriminierung (siehe Abschnitt 5.5)	Keine	10^{-6}

Tabelle 5-1: Optimierte Parameter zur Beschleunigung der Konvergenz der äußeren Iterationen für das FRM-II-Problem in 13(4) Energiegruppen, angegeben für den stationären und den transienten Berechnungsmodus.

5.5 Zeitliche Flußextrapolation

Die Extrapolation der Flüsse von einem Zeitschritt zum nächsten wird analog zu der Vorgehensweise im Diffusionsprogramm durchgeführt. Grundsätzlich besteht auch für den stationären Code DORT die Möglichkeit, eine erste Flußschätzung an den Code zu übergeben; auch dieses erfolgt über eine Momentendarstellung der Gruppenflüsse.

Bei der Erweiterung des Codes wurde folgendermaßen verfahren: Anstatt die von DORT als Lösung des Zeitschrittes n ausgegebenen Flußmomente zu extrapolieren, hat es sich als vorteilhafter erwiesen, direkt auf die während der räumlichen Sweeps abgespeicherten Winkelflüsse in Diskrete-Ordinaten-Darstellung zurückzugreifen. Es wird eine zeitliche Diamond-Differencing-Beziehung für die Extrapolation zum nächsten Zeitschritt verwendet und daraus zunächst eine Abschätzung $\tilde{\psi}$ für die Lösung zum Zeitpunkt $n+1$ erzeugt:

$$\omega_n = \frac{\psi_n^{(n)} - \psi_n^{(n-1)}}{\Delta t_n} \quad \Rightarrow \quad \tilde{\psi}_n^{(n+1)} = \psi_n^{(n)} + \omega_n \Delta t_{n+1} = \underbrace{2\psi_n^{(n)} - \psi_n^{(n-1)}}_{\text{falls } \Delta t_n = \Delta t_{n+1}}, \quad (5-6)$$

was natürlich aufgrund der großen Anzahl von Flüssen einen gewissen Rechenaufwand erfordert, der allerdings angesichts der erreichten massiven Beschleunigung mehr als gerechtfertigt ist. Erst dann werden die Flüsse zwecks Übergabe an DORT in die entsprechende Momentendarstellung konvertiert gemäß:

$$\tilde{\phi}_{l,g}^{m,(n+1)}(\vec{r}) \approx \sum_n w_n C_l^m(\bar{\Omega}_n) \tilde{\psi}_n^{(n+1)}(\vec{r}, \bar{\Omega}_n). \quad (5-7)$$

Bei räumlich nicht zu stark lokalisierten Reaktivitätsstörungen ist diese Näherung für die Flüsse exzellent und es wird u.U. nur eine einzige äußere Iteration benötigt, um Flüsse und Spaltdichten zu konvergieren. Erst bei Vorgängen, bei denen sich Materialeigenschaften auf sehr kurzen Zeitskalen schnell ändern, z.B. bei Dampfbildung im Kern, wird die so produzierte Flußschätzung lokal stark vom wahren Ergebnis abweichen.

Zur Abschätzung der maximal zulässigen Zeitschrittweite wurden ähnlich wie im Diffusionsprogramm (siehe Abschnitt 3.8) lediglich die skalaren Flüsse verwendet. Die zeitaufwendigere Berechnung der Schrittweite aus den einzelnen Winkelflüssen (deren gewichtete Summe gerade den skalaren Fluß als „Mittelwert“ ergibt) ist angesichts der in Reaktorproblemen i.allg. relativ schwachen Anisotropien überflüssig.

Allerdings mußte im Transportprogramm das Flußkonvergenzkriterium (i.allg. $\varepsilon = 10^{-6}$) für betragsmäßig sehr kleine Flüsse etwas gelockert werden. Während der Diffusionscode selbst Flüsse noch problemlos konvergiert, die um neun Größenordnungen unterhalb des maximalen Gruppenwerts liegen, werden in DORT solche Flüsse vom Konvergenztest aus-

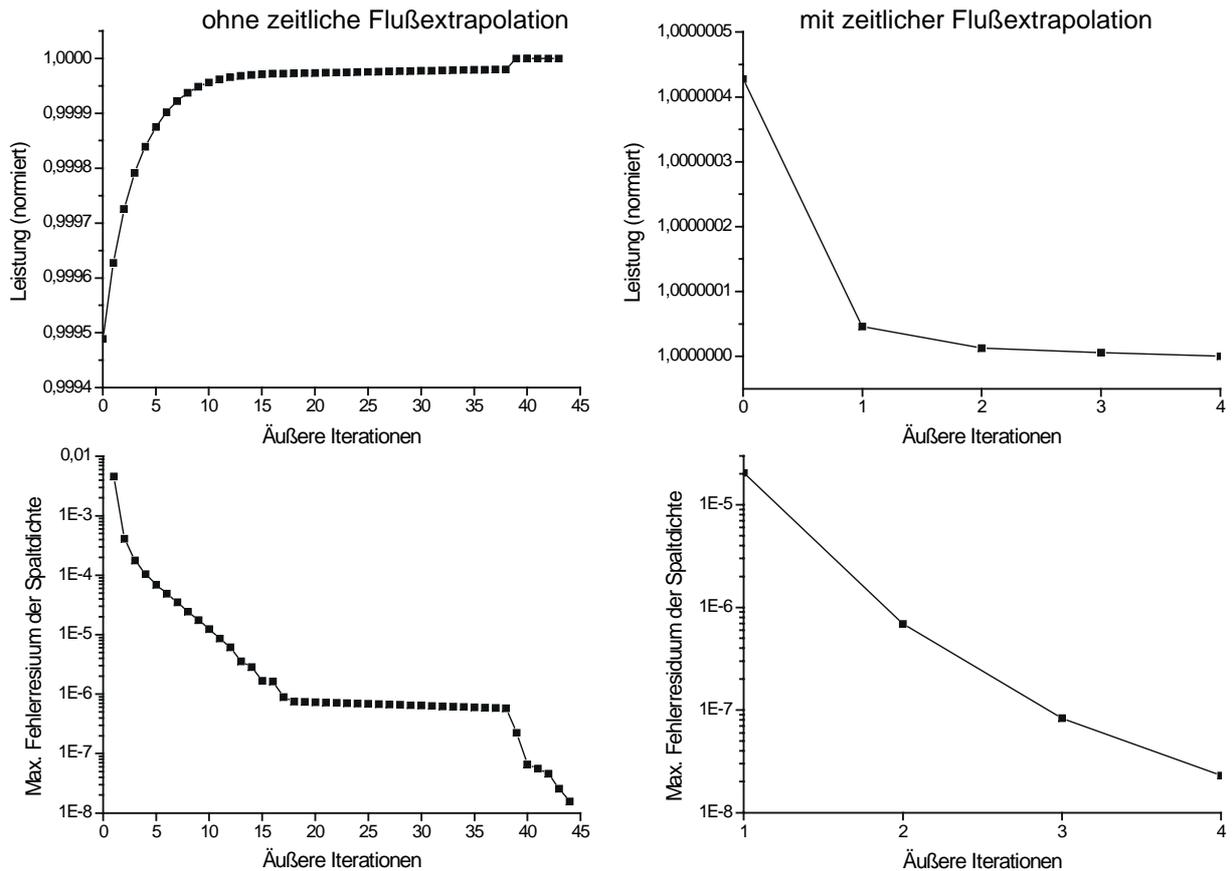


Abbildung 5-5: Effizienz der zeitlichen Flußextrapolation für die Berechnung eines Zeitschritts in einem typischen FRM-II-Problem. Dargestellt ist die Konvergenz der Reaktorleistung (oben) und der Spaltdichte (unten), aufgetragen über der Anzahl äußerer Iterationen. Die Berechnungen links wurden ohne, die rechts mit zeitlich extrapolierten Flüssen durchgeführt.

genommen, die mindestens um einen Faktor 10^{-6} kleiner sind als das Gruppenmaximum. Diese Diskriminierung betrifft beim FRM-II insbesondere die schnellen Flüsse im Moderator tank, die sich nur unter erheblichem numerischen Mehraufwand auf besser als $10^{-4} - 10^{-5}$ konvergieren lassen, allerdings auch so klein sind, daß sie die Teilchenzahlbilanz nicht stören. Es ist offensichtlich, daß diese Flüsse nicht zur Abschätzung der maximalen Zeitschrittweite verwendet werden sollten.

Die durch die zeitliche Flußextrapolation erreichte Beschleunigung ist in Abbildung 5-5 dargestellt. Für eine typische FRM-II-Berechnung wurde hier für einen Zeitschritt die normierte Reaktorleistung und das maximale Fehlerresiduum in der Spaltdichte über der Anzahl der äußeren Iterationen aufgetragen. Auf der linken Seite ist der Iterationsverlauf ohne, auf der rechten Seite mit Extrapolation der Flüsse gezeigt. Werden die nicht-extrapolierten Flüsse des letzten Zeitschritts als Flußschätzung verwendet, so werden im Beispiel etwa 40 Iterationen benötigt, bevor die Spaltdichte auf besser als 10^{-7} konvergiert ist, während bei der Verwendung extrapolierte Flüsse schon vier Iterationen ausreichen. Gut zu erkennen ist außerdem die Asymptotik des Fehlerzerfalls, die charakteristisch für „Fixed-Source“-Probleme und deren generell schlechte Konvergenz ist, wie bereits in Abschnitt 2.3 ausführlich erläutert wurde. Nach der 35. äußeren Iteration wird schließlich eine Spaltdichteextrapolation durch-

geführt (hier mit festem Parameter, deutlich erkennbar an dem „Sprung“ in der Leistung), mit der erst die geforderte Genauigkeit erreicht wird. Führt man vor der Transportrechnung hingegen eine Flußextrapolation durch, so wird die Leistung schon vor der ersten Iteration auf besser als $5 \cdot 10^{-7}$ genau und hier im Beispiel sogar etwas zu groß abgeschätzt, so daß die folgenden Iterationen nur noch zur Korrektur geringfügiger lokaler Fehler in der Spaltdichte benötigt werden.

5.6 Zusammenfassung

Mit den Erweiterungen und Verbesserungen, die im Code DORT vorgenommen wurden, steht nun ein leistungsfähiges, zeitabhängiges Transportprogramm zur Verfügung; die Algorithmen sind dabei so allgemein gehalten, daß neben dem FRM-II auch Probleme mit anderen Geometrien, verschiedenen Energiegruppenanzahlen und beliebigen Streu- und Quadraturordnungen behandelt werden können. Die Konvergenzprobleme, die DORT insbesondere bei thermischen Systemen mit signifikanter Aufwärtsstreuung aufweist, konnten weitgehend behoben werden; durch diese Maßnahmen verbessert sich auch die Effizienz des äußeren Iterationszyklus erheblich. Die Routinen zur Flußextrapolation ermöglichen in der zeitabhängigen Rechnung die Lösung eines voll impliziten Zeitschrittes in Rechenzeiten, die mindestens um eine Größenordnung geringer sind als die für ein äquivalentes stationäres Problem.

6 Stationäre Analysen für den FRM-II

In diesem und den folgenden Kapiteln wird der Einsatz des zeitabhängigen Neutronentransportcodes für ein realistisches und komplexes System, den Forschungsreaktor FRM-II, beschrieben. Diese in Garching bei München errichtete Anlage steht derzeit kurz vor der Inbetriebnahme und wird eine der weltweit leistungsstärksten Neutronenquellen für Forschungszwecke sein. Neben den rein neutronenphysikalischen Aspekten ist dieser Reaktor auch vom thermofluidynamischen Standpunkt her interessant, so daß sich die Erstellung eines gekoppelten Modells von Neutronenkinetik und ATHLET anbietet. Damit wird dann eine sehr genaue Beschreibung des zeitlichen Verhaltens des Gesamtsystems sowohl im Normalbetrieb als auch in Störfallsituationen möglich.

In den folgenden Abschnitten wird zunächst ein Überblick über die Gesamtanlage gegeben, gefolgt von einer kurzen Diskussion der für den FRM-II verwendeten Methoden der Wirkungsquerschnittserzeugung. Anschließend werden eine Reihe von stationären Parameterstudien durchgeführt, die z.B. die Wahl der räumlichen und energetischen Diskretisierung sowie der Quadraturordnung betreffen und die als Leitfaden für transiente Rechnungen dienen. An dieser Stelle wird auch auf die Unterschiede zwischen den Ergebnissen von Transport- und Diffusionsrechnungen eingegangen. Obwohl für zeitabhängige Rechnungen mit einem gekoppelten Programmmodell nicht erforderlich, werden zu Vergleichszwecken auch stationäre Reaktivitätskoeffizienten und punktkinetische Parameter bestimmt.

6.1 Systembeschreibung

Der Forschungsreaktor FRM-II ist konstruktiv eng an den bereits seit 1971 in Betrieb befindlichen Hochflußreaktor HFR in Grenoble [ILL00] angelehnt. Zielsetzung beider Anlagen ist es, einen möglichst hohen und spektral reinen Fluß von thermischen Neutronen zu erzeugen, der darüber hinaus in einem großen Volumen gut zugänglich zur Verfügung stehen soll, um effizient über Strahlrohre an Experimente weitergeleitet zu werden. Dieses wird bei FRM-II und HFR erreicht durch das sogenannte Kompaktkern-Konzept, in dem ein kleiner, hoch angereicherter, aber stark untermoderierter Reaktorkern von einem großen Schwerwassertank als Außenmoderator umgeben wird. Durch die kompakte Auslegung des Kerns entweicht ein großer Anteil der im Kern produzierten schnellen Neutronen durch Leckage und thermalisiert im Moderator. Das Maximum des thermischen Flusses baut sich dann außerhalb des Kerns auf und ist damit experimentellen Einrichtungen gut zugänglich. Eine Minimierung des Kernvolumens wirkt sich also auf die Neutronenbilanz positiv aus; demgegenüber stehen jedoch die Anforderungen einer hohen anfänglichen Überschußreaktivität sowie

der sicheren Kühlbarkeit in jedem Betriebszustand und der Beherrschung von Störfallsituationen, z.B. bei Reaktivitätstransienten oder Kühlmittelverlust.

Diese Zielsetzung führte auf das Kompaktkernkonzept KKE7 [ZHA86, SIE93]. Zwischen zwei Aluminium-Hüllrohren mit 11,8 bzw. 24,3 cm Durchmesser sind 113 evolventenförmige Brennstoffplatten von jeweils 1,36 mm Dicke angeordnet, wie der Querschnitt durch den Reaktorkern (Abbildung 6-1) zeigt. Durch die spezielle Krümmung der Brennstoffplatten wird erreicht, daß die Kühlspalte über den gesamten Radius des Brennelements eine konstante Weite von 2,2 mm aufweisen. Die aktive Gesamtlänge der Platten beträgt 70 cm, ihre aktive Breite etwa 7 cm. Es wird U_3Si_2/Al -Brennstoff mit einer Anreicherung von 93% und einer Dichte von $3,0 \text{ g/cm}^3$ Uran verwendet, so daß sich trotz des

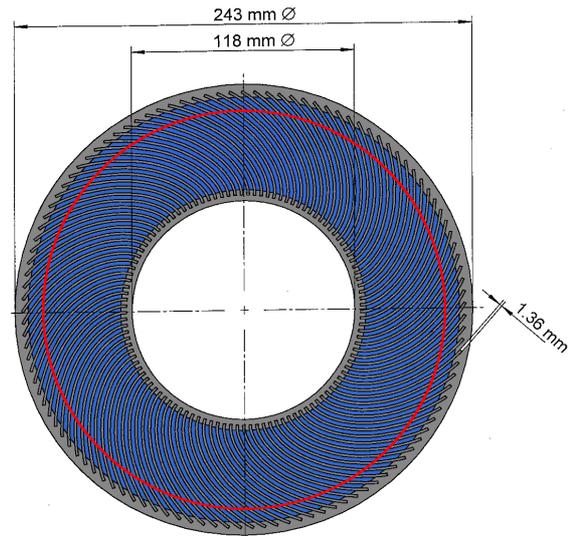


Abbildung 6-1: Der Kompaktkern des FRM-II; die rote Linie gibt die Position des Dichtesprungs an

geringen aktiven Kernvolumens von nur 17,6 Liter etwa 8,1 kg Uran im frischen Kern befinden. Bei einer Nominalleistung des Kerns von 20 MW beträgt die Zyklusdauer rund 52 Tage. Zur Absenkung von Leistungsspitzen am Kernaußenrand ist die Urandichte im Außenbereich der Brennstoffplatten von $3,0$ auf $1,5 \text{ g/cm}^3$ reduziert worden; dieser Bereich ist durch die rote Linie in Abbildung 6-1 gekennzeichnet.

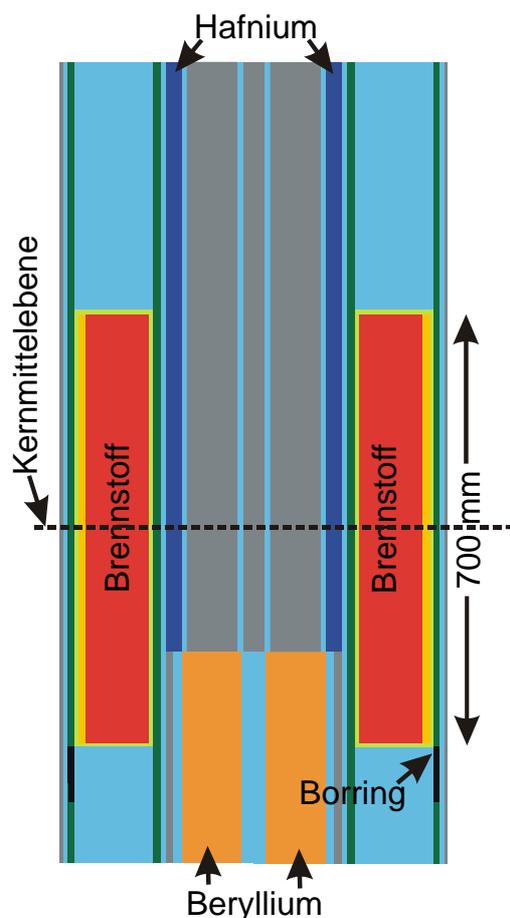


Abbildung 6-2: Längsschnitt durch den Kompaktkern des FRM-II mit Regelstab und Teilen des Zentralkanals

geringen aktiven Kernvolumens von nur 17,6 Liter etwa 8,1 kg Uran im frischen Kern befinden. Bei einer Nominalleistung des Kerns von 20 MW beträgt die Zyklusdauer rund 52 Tage. Zur Absenkung von Leistungsspitzen am Kernaußenrand ist die Urandichte im Außenbereich der Brennstoffplatten von $3,0$ auf $1,5 \text{ g/cm}^3$ reduziert worden; dieser Bereich ist durch die rote Linie in Abbildung 6-1 gekennzeichnet.

Die Regelung des Reaktors erfolgt durch den Regelstab im Zentrum des Brennelements, wie in einem Längsschnitt durch den Kern in Abbildung 6-2 dargestellt. Dieser ist in zwei Bereiche eingeteilt: Im oberen Teil ist auf das Aluminium-Trägermaterial (im Bild grau dargestellt) eine 1 cm dicke Schicht aus Hafnium aufgebracht, die insbesondere im epithermischen Bereich stark neutronenabsorbierend wirkt. Der untere Bereich besteht hingegen aus Beryllium, das über ausgezeichnete Moderationseigenschaften verfügt. Im abgeschalteten Zustand befindet sich der Steuerstab in sei-

ner untersten Stellung; das Kerninnere ist dann ausschließlich mit Hafnium gefüllt und der Reaktor stark unterkritisch. Durch Ziehen des Regelstabes kann der Reaktor angefahren und in der Leistung geregelt werden; ferner wird auf diese Art der Abbrand kompensiert. Als Position des Steuerstabs wird im Folgenden stets die Distanz der Materialgrenzfläche Beryllium-Hafnium von der Kernmittelebene (in Abbildung 6-2 gestrichelt angedeutet) bezeichnet. Im Bild dargestellt ist die Position $-20,0$ cm; dies ist etwa die Stellung, die der Steuerstab für den frischen Kern (BOL) im kritischen Zustand ohne Einbauten im Moderatortank haben würde. Am Zyklusende (EOL) wird sich der Steuerstab etwa bei der Position $+27,0$ cm befinden. Zur Schnellabschaltung des Reaktors kann der Steuerstab von seiner Antriebseinheit durch Lösen einer Magnetkupplung getrennt werden.

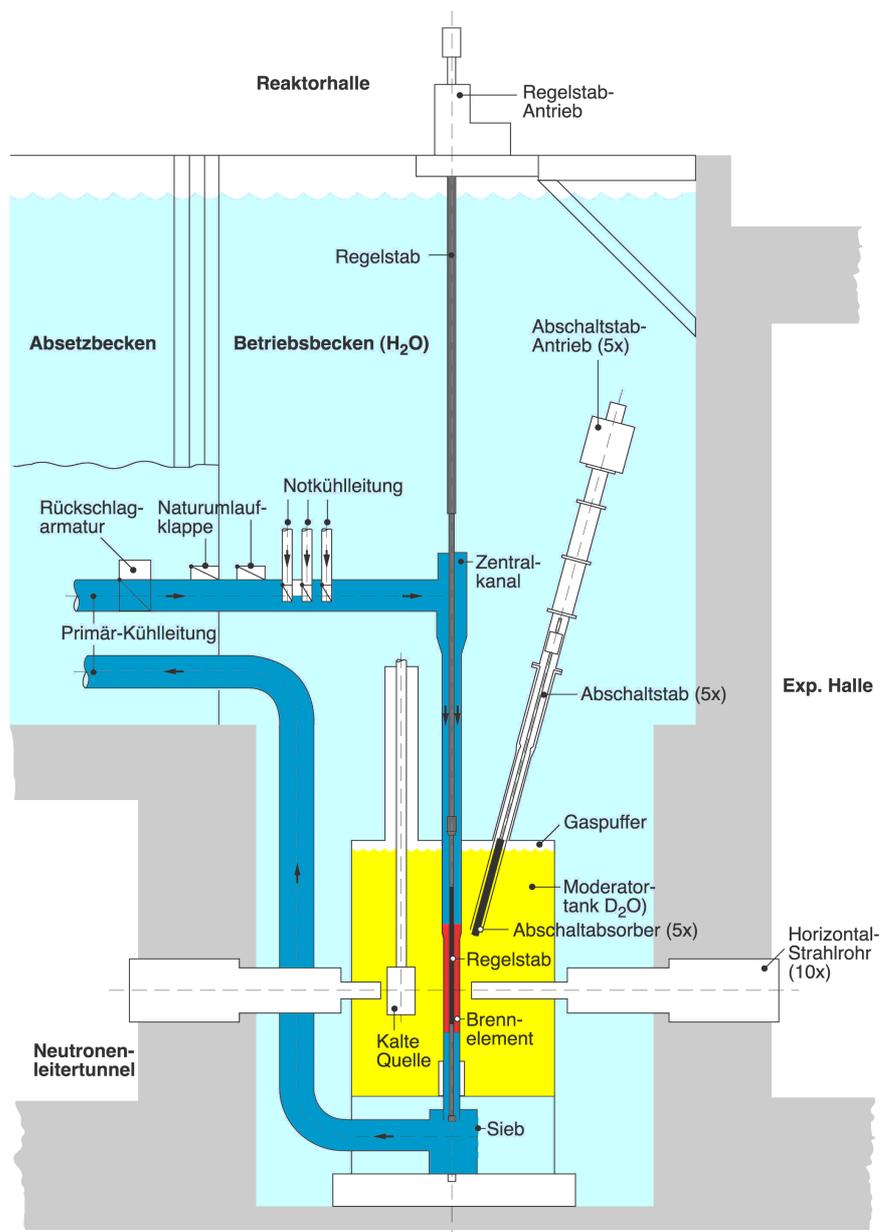


Abbildung 6-3: Schematische Darstellung des Reaktorbeckens des FRM-II mit Moderator-tank, Abschalt-einheit, Zentralkanal und Teilen des Kühlsystems; gezeigt ist außerdem die Position des Kerns sowie der Kalten Quelle und der Strahlrohre.

In Abbildung 6-2 sind ferner das obere und untere „Plenum“ sowie die Kühlkanäle im Regelstab und die Bypassströmungen zum Brennelement dargestellt. Unterhalb der aktiven Brennstoffzone ist außerdem ein abbrennbares Neutronengift in Form eines Borrings angebracht, um lokale Leistungsspitzen an der unteren äußeren Kante des Brennelements, die durch die starke Rückdiffusion von Neutronen aus dem unteren „Plenum“ entstehen würden, zu vermeiden.

Das Gesamtsystem zeigt Abbildung 6-3: dargestellt ist der im Reaktorbecken befindliche Moderator tank mit etwa 2,50 m Durchmesser und 2,50 m Höhe, in dessen Zentrum das Brennelement positioniert ist. Im Tank befinden sich neben zehn horizontalen Neutronenstrahlrohren und der Kalten Quelle weitere experimentelle Einrichtungen, die hier allerdings nicht eingezeichnet sind.

Angedeutet ist außerdem ein Ausschnitt des Primärkühlsystems: Im Zentralkanal, der auch das Brennelement enthält, strömt Leichtwasser mit einem Nominaldurchsatz von 300 kg/s; etwa 91% dieser Menge strömen mit einer Geschwindigkeit von ca. 16-17 m/s von oben nach unten durch den Kern, der Rest verteilt sich auf die Bypasswege des Kerns sowie die Kühlkanäle des Regelstabs. Am unteren Ende steht der Zentralkanal über ein Sieb mit dem umgebenden Reaktorbecken in Verbindung; das Primärkühlsystem ist somit ein halboffenes System, wobei die Verbindung zum Becken als Druckhalter wirkt und der Kreislauf ggf. auch aus dem Becken gespeist wird. Durch die Wasserstandshöhe im Becken von etwa 12 m herrscht am Sieb ein konstanter Druck von rund 2,2 bar. Aus dem Reaktorbecken wird außerdem das System zur Notkühlung des Kerns sowie die Nachwärmeabfuhr durch Naturumlauf betrieben.

Die Kühlung des Reaktorkerns wurde mit großen Sicherheitszuschlägen ausgelegt: Obwohl bei einer Nennleistung von 20 MW die mittlere Leistungsdichte bzw. maximale Wärmestromdichte ($1,14 \text{ MW/l}$ bzw. 500 W/cm^2) im Kern bedeutend höher ist als bei Druck- oder Siedewasserreaktoren ($0,05\text{-}0,1 \text{ MW/l}$ bzw. $100\text{-}160 \text{ W/cm}^2$), beträgt die mittlere Aufheizspanne über die gesamte aktive Zone lediglich 15,5 K; das Kühlwasser ist also am Kernaustritt mit einer mittleren Austrittstemperatur von etwa $52,5 \text{ °C}$ noch weit von der Sättigungstemperatur (etwa 127 °C) entfernt und damit stark unterkühlt; im Nominalbetrieb ist Dampfbildung also trotz des niedrigen Systemdrucks von etwa 11 bar (der Druckabfall über den aktiven Bereich des Kerns beträgt ca. 6 bar) ausgeschlossen.

Neben dem zentralen Regelstab verfügt der FRM-II über ein zweites, unabhängiges Abschaltssystem in Form von fünf Hafnium-Abschaltabsorbern, die bei einer Schnellabschaltung durch vorgespannte Tellerfedern in den Moderator tank eingeschossen werden können (im Bild angedeutet). Auch bei Ausfall des reaktivitätswirksamsten Stabes führt dieses System dem Reaktor genügend negative Reaktivität zu, um ihn unabhängig vom zentralen Regelstab schnell und sicher unterkritisch zu machen.

Mit dieser Auslegung des Reaktors beträgt die maximale ungestörte thermische Neutronenflußdichte etwa $8 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$; am HFR werden Werte von $\sim 1,5 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$ erreicht. Aufgrund der wesentlich geringeren Leistung des FRM-II ist das Fluß-Leistungsverhältnis günstiger als beim HFR, dessen thermische Leistung 57 MW beträgt. Das Maximum des thermischen Flusses wird etwa in einer Entfernung von 12 cm vom äußeren Kernhüllrohr erreicht und ist damit gut zugänglich für Strahlrohrnasen und die Kalte Quelle.

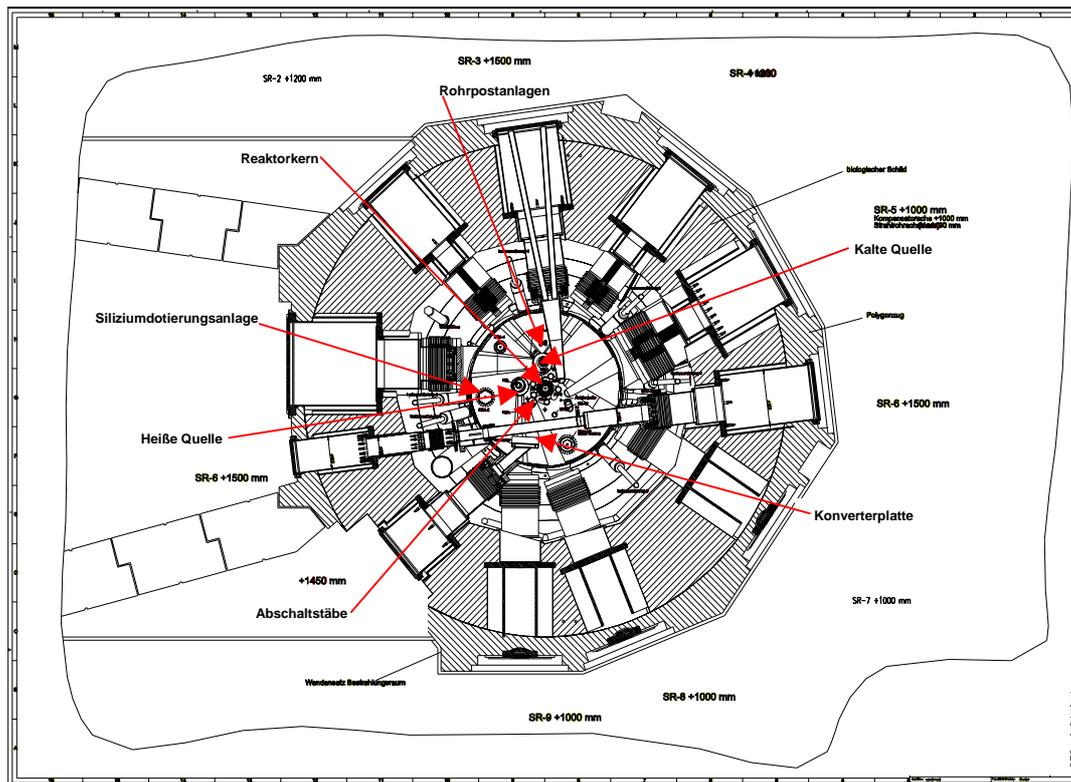


Abbildung 6-4 Draufsicht auf die Strahlrohrgeometrie des FRM-II. Im Zentrum ist der kompakte Reaktorkern mit den fünf umgebenden Abschaltstäben zu erkennen; dargestellt sind ferner die 10 Strahlrohre, heiße und kalte Quelle sowie verschiedene experimentelle Einrichtungen.

Für die Modellierung des Reaktors wird der Reaktorkern bei Zyklusbeginn (BOL) betrachtet, da in diesem Zustand die größte Überschußreaktivität und die höchsten lokalen Leistungsdichten auftreten. Wie stationäre thermohydraulische Untersuchungen zeigen, ist dies auch der für die Kühlung des Kerns ungünstigste Betriebszustand [SIE93].

Außerdem wird das gesamte System vereinfachend als radialsymmetrisch angenommen. Tatsächlich wird im Moderatortank die Geometrie aufgrund der zahlreichen experimentellen Einbauten stark verkompliziert, wovon man sich durch einen Blick auf Abbildung 6-4 überzeugen kann: Deutlich zu erkennen sind hier die zehn tangential zum Kern orientierten Strahlrohre, die fünf Abschaltstäbe sowie die Positionen verschiedener experimenteller Einbauten, z.B. Kalte und Heiße Quelle, Konverteranlage sowie unterschiedliche Bestrahlungseinrichtungen (Rohrpost- und Siliziumdotierungsanlagen).

Eine transporttheoretische Behandlung des FRM-II in drei Raumdimensionen mit einem deterministischen Code wie z.B. TORT oder THREEDANT ist jedoch für Transientenanalysen beim derzeitigen Stand der Rechnertechnik schon allein aufgrund der immensen Rechenzeiten ausgeschlossen. Abgesehen davon läßt sich die Geometrie der Einbauten auch mit einem dreidimensionalen $r\theta_z$ -Modell nur näherungsweise wiedergeben; eine korrekte Modellierung bleibt allein Monte-Carlo-Codes vorbehalten.

Eine Berücksichtigung der Einbauten in einem zweidimensionalen Modell kann nur durch homogene Verschmierung der Einbauten über Teilbereiche des Tanks oder das gesamte Tankvolumen erfolgen, wodurch zumindest globale Parameter wie Reaktivität, prompte Lebensdauer oder die Position des Steuerstabs an die Referenzlösungen von Monte-Carlo-Rechnungen angepaßt werden können.

6.2 Erzeugung von Wirkungsquerschnittsbibliotheken

Der Einsatz deterministischer Transportcodes setzt die Aufbereitung und Bereitstellung geeigneter Wirkungsquerschnitte für das betrachtete System voraus. Bereits in Kapitel 2 wurde darauf hingewiesen, daß die Erstellung von Gruppenquerschnitten i.allg. eine sehr komplexe Aufgabe ist, von deren Qualität letztlich die Güte stationärer und transienter Berechnungen entscheidend abhängt. Insbesondere ist die Querschnittserzeugung häufig ausgesprochen problemabhängig, so daß die anzuwendenden Berechnungsmethoden von System zu System stark variieren können.

Die Querschnittserzeugung für den FRM-II basiert auf den 238/44-Gruppenbibliotheken des Programmsystems SCALE4.4 [JOR00] sowie auf der speziell für das Studium der „Advanced Neutron Source“ (ANS) entwickelten 99-Gruppenbibliothek ANSL-V [FOR90]. Diese Bibliotheken enthalten neben den Gruppenreaktionsquerschnitten zusätzlich eine große Anzahl von Resonanzparametern, die die komplizierte Energieabhängigkeit vor allem schwerer Nuklide im epithermischen Bereich beschreiben. Bevor die Gruppendaten einem deterministischen Transportcode zugeführt werden können, muß zunächst eine Resonanzbehandlung zur Erfassung der sog. Resonanzselbstabschirmung (siehe Anhang B) durchgeführt werden. Ferner ist es häufig erforderlich, die Feingruppenstruktur der grundlegenden Bibliotheken auf eine für mehrdimensionale Transportrechnungen angemessene Anzahl von Energiegruppen zu reduzieren (die sog. „Kondensierung“) und Materialbereiche mit komplexer Struktur geometrisch zu vereinfachen (die sog. „Homogenisierung“). Die theoretischen Grundlagen der zur Querschnittsaufbereitung verwendeten Methoden sind ausführlich in Anhang B geschildert. Diese Methoden erfordern zunächst eine wesentliche geometrische Vereinfachung des Problems, um die Energieabhängigkeit zu erfassen. Auch für den FRM-II muß eine solche Reduktion erfolgen, um schnell und effizient geeignete Gruppenquerschnitte zu erstellen.

Zum Einsatz kommt die in Abbildung 6-5 dargestellte Programmsequenz; alle aufgeführten Codes gehören zum Umfang des Codepakets SCALE 4.4. Mit den Modulen BONAMI und NITAWL wird die in Anhang B diskutierte Behandlung der unaufgelösten und aufgelösten Resonanzen gemäß der Bondarenko- bzw. Nordheim-Methode durchgeführt. Der 1D-Transportcode XSDRNPM dient zunächst dazu, die gewünschten räumlichen Zell-, Regionen- oder Zonenwichtungen für die verschiedenen Nuklide durchzuführen; makroskopische Querschnitte werden dann mit Hilfe des Codes ICE durch Materialmischung erstellt. Ist eine weitere Kondensierung der Querschnitte notwendig, können die vorhandenen makroskopischen Materialdaten erneut XSDRNPM zugeführt werden, mit dem dann z.B. die 238-Gruppenstruktur auf eine für 2D-Transportrechnungen akzeptable Anzahl von 8-20 Energiegruppen reduziert wird.

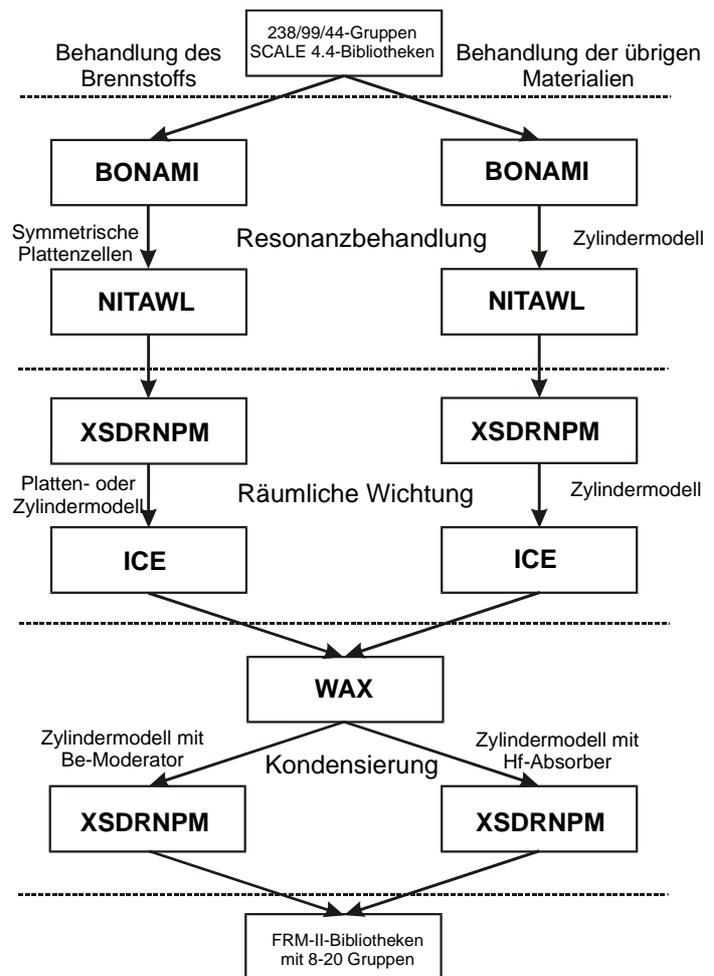


Abbildung 6-5: Die für die Erzeugung von Querschnitten verwendete Programmsequenz; die verschiedenen Module sind Bestandteile des Codepakets SCALE4.4.

6.2.1 Resonanzbehandlung

Sowohl BONAMI als auch NITAWL erfordern die Definition einfacher eindimensionaler Strukturen, auf denen die Resonanzbehandlung durchgeführt wird. Insbesondere bei der Behandlung des Brennstoffes ist es unbedingte Voraussetzung, daß die Geometrie der Brennstoffplatten sowie der Kühlkanäle auf eine eng verwandte Geometrie abgebildet wird, um die räumliche Resonanzselbstabschirmung korrekt zu erfassen. So bietet es sich an, die Kernanordnung durch eine periodische Abfolge symmetrischer 1D-Zellen zu ersetzen (siehe Abbildung 6-6), die jeweils aus der Sequenz Kühlmittel/Cladding/Brennstoff bestehen und in ihren Dicken identisch sind mit den tatsächlichen Abmessungen der Kühlkanäle bzw. Brennstoff/Cladding-Schichten im Kern (d.h. 2.2 mm bzw. 0.6 mm/0.38 mm). Diese Rechnungen müssen sowohl für den Brennstoff mit hoher als auch mit niedriger Dichte separat durchgeführt werden.

Diese Vorgehensweise ist weitgehend Standard und wurde z.B. auch bei den Berechnungen zum HFIR in Oak Ridge und zur ANS [PET00] verwendet. In [RÖH91] wird darüber hinaus argumentiert, daß diese Form der Resonanzbehandlung nicht die erhöhte Entkommwahr-

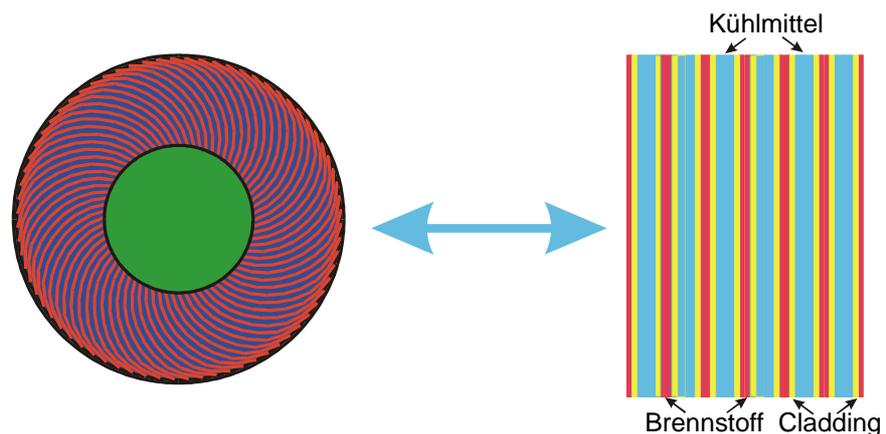


Abbildung 6-6: Übertragung der Evolventengeometrie des FRM-II auf eine vereinfachte 1D-Plattengeometrie zur Resonanzbehandlung und Homogenisierung des Brennstoffbereichs

scheinlichkeit aufgrund des den Kern umgebenden Schwerwassermoderators berücksichtigt und eine Verbesserung in Form eines modifizierten Dancoff-Faktors (siehe Anhang B) vorgeschlagen. Während sich für das unendlich ausgedehnte 1D-Gitter ein Faktor von $C \approx 0.57$ ergibt, wird in [RÖH91] ein Faktor von $C \approx 0.52$ für den Brennstoffbereich hoher bzw. $C \approx 0.43$ für den Bereich niedriger Dichte angegeben. Die Abbildung 6-7 zeigt den totalen Querschnitt des homogenisierten Brennstoffgemisches niedriger Dichte für den von BONAMI/NITAWL errechneten und den in [RÖH91] vorgeschlagenen Wert. Die Abweichungen sind sehr gering; für den Bereich hoher Dichte mit $C \approx 0.52$ sind sie in der Graphik praktisch nicht mehr erkennbar und daher hier auch nicht dargestellt. Nach der Kondensierung des

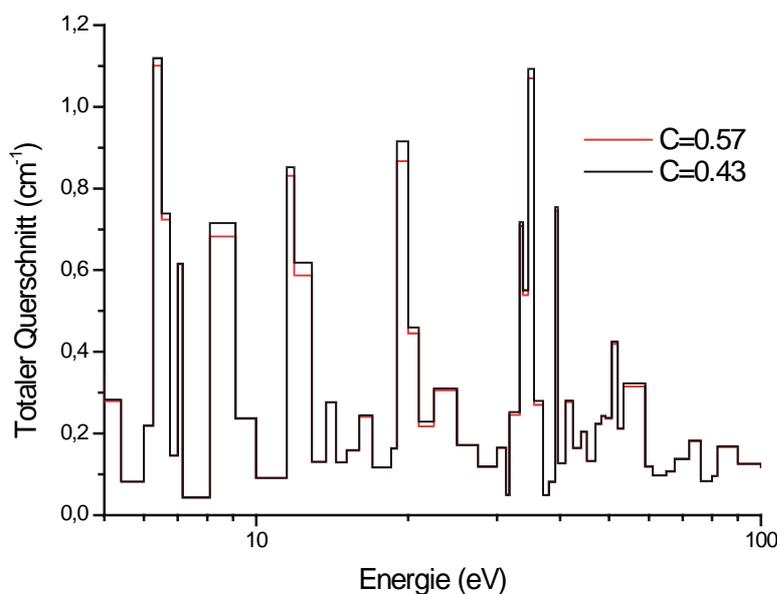


Abbildung 6-7: Darstellung des totalen Querschnitts des homogenisierten Brennstoffgemisches niedriger Dichte im Resonanzbereich für den von BONAMI/NITAWL ermittelten Dancoff-Faktor von $C=0,57$ und für den in [RÖH91] angegebenen Wert von $C=0,43$.

Resonanzbereiches auf wenige Energiegruppen sind die Unterschiede bedeutungslos.

Die Resonanzbehandlung der verbleibenden Reaktormaterialien wird auf einer eindimensionalen Zylindergeometrie durchgeführt. Dazu betrachte man Abbildung 6-8, die die in dieser Arbeit verwendete Materialzonenaufteilung des FRM-II in der r-z-Ebene für den kernnahen Bereich darstellt. Deutlich zu erkennen ist die Brennstoffregion samt ihrer Hüllrohre, der zentrale Regelstab einschließlich

der Kühlkanäle und Teile des umgebenden Schwerwassertanks. Insgesamt hat es sich als ausreichend erwiesen, etwa 15 verschiedene Materialgemische für die Beschreibung des Reaktors zu verwenden.

Da die zweidimensionale Flußverteilung für die Beryllium-modierte untere Hälfte des Reaktors sowohl energetisch als auch räumlich von der Flußverteilung im oberen Kernbereich, in dem das Hafnium dominiert, stark abweicht, definiert man sowohl für die Resonanzbehandlung als auch für die anschließenden 1D-Transportrechnungen zwei separate eindimensionale Modelle für die Bereiche mit Hafnium-Absorber bzw. Beryllium-Moderator. Deren Geometrie wird durch die radialen Schnitte entlang der in Abbildung 6-8 dick gestrichelten Pfeile definiert. Der FRM-II wird also durch zwei zylindrische, axial unendlich ausgedehnte Modelle ersetzt, von denen eines im Zentrum ausschließlich Beryllium, das andere hingegen nur Hafnium enthält.

Während die Resonanzbehandlung für die meisten Strukturmaterialien eher von untergeordneter Bedeutung ist, spielt sie bei dem starken Resonanzabsorber Hafnium eine wichtige Rolle. So hat es sich als notwendig erwiesen, die 1 cm dicke Hafniumschicht nochmals in vier radiale Zonen zu unterteilen, denen jeweils ein individueller Querschnittssatz zugeordnet wird. Bei Verwendung lediglich einer Materialzone traten teilweise erhebliche Eigenwert-Abweichungen in nachfolgenden 2D-Kritikalitätsrechnungen auf. Tatsächlich variiert der Effekt der räumlichen Resonanzselbstabschirmung über diese recht dünne Schicht beträchtlich.

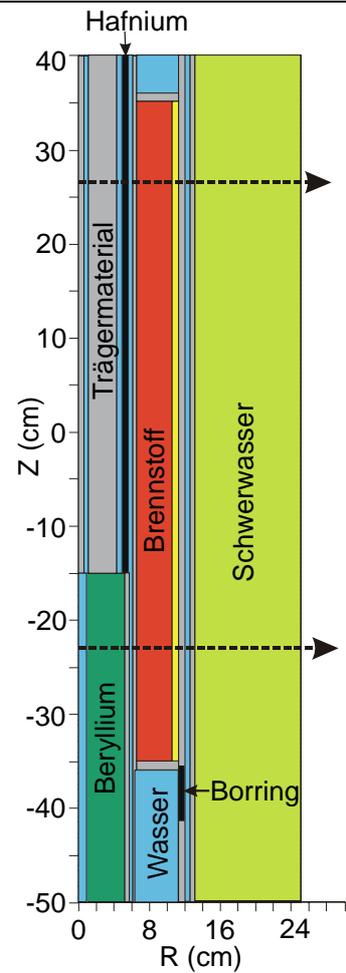


Abbildung 6-8: Materialzonen-Definition des FRM-II in der r - z -Ebene; angedeutet sind die radialen Richtungen, entlang derer 1D-Transportrechnungen durchgeführt werden.

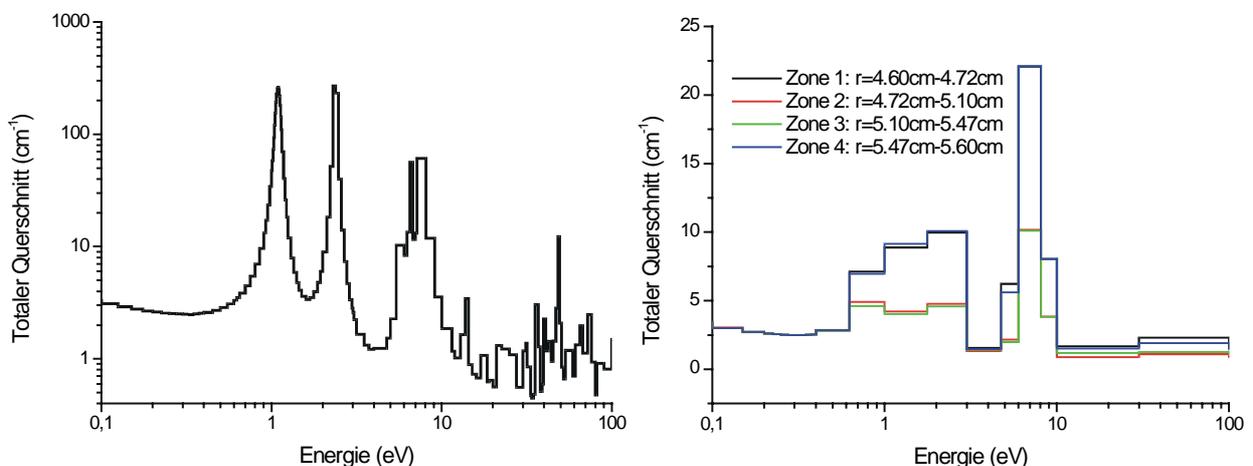


Abbildung 6-9 links: Nicht-abgeschirmter totaler Querschnitt von Hafnium in 238 Gruppen; rechts: Selbstabschirmung der Hafniumresonanzen für verschiedene Zonen der Hafniumschicht (44 Gruppen)

In Abbildung 6-9 ist links der totale Querschnitt von Hafnium vor der Resonanzbehandlung in 238 Energiegruppen dargestellt. Dies sind bereits die gemischten, makroskopischen Querschnitte, da sich Hafnium aus insgesamt 6 verschiedenen Isotopen zusammensetzt. Nach den BONAMI/NITAWL-Rechnungen und einer Kondensation auf 44 Gruppen ergibt sich dann das rechte Bild: Deutlich ist zu erkennen, daß die beiden inneren Zonen 2 und 3 deutlich stärker abgeschirmte Querschnitte haben als die äußeren Zonen, für die die Resonanzentkommwahrscheinlichkeit (siehe Anhang B) bedeutend größer ist.

6.2.2 Homogenisierung des Brennstoffs und Wichtung der Materialien

Die komplizierte Evolventenstruktur des Brennstoffs kann weder in ein- noch in zweidimensionalen Transportprogrammen auf ein reguläres Gitter abgebildet werden. Es ist daher notwendig, den gesamten Brennstoffbereich zu homogenisieren bzw. eine Zellwichtung (siehe Anhang B) über alle enthaltenen Materialien, d.h. Kühlwasser, Cladding und Brennstoff durchzuführen und mit diesen eine Materialmischung durchzuführen. Dazu müssen eindimensionale Transportrechnungen in 238/99/44 Gruppen über eine geeignete Geometrie mit dem Code XSDRNPM durchgeführt werden. Um die Feinstruktur der Brennstoffregion zu erfassen, sind zwei Möglichkeiten denkbar:

- Abbildung des Brennstoffbereichs auf dieselbe 1D-Plattengeometrie, die auch für die Resonanzbehandlung benutzt wurde.
- Ersatz der Evolventenstruktur durch rotationssymmetrische Brennstoffringe und ringförmige, konzentrische Kühlkanäle (Abbildung 6-10).

Die erste Möglichkeit wird standardmäßig von SCALE4.4 zur Zellwichtung verwendet. Man beachte jedoch, daß es mit diesem Zugang nicht möglich ist, die Veränderungen des Flußspektrums aufgrund des benachbarten Schwerwassertanks bzw. des Steuerstabs zu erfassen. Das Spektrum ist also u.U. zu „hart“, da der Rückfluß thermischer Neutronen aus dem Tank in den Brennstoff nicht berücksichtigt wird. Dieser Effekt wird wichtig, wenn man auf sehr wenige Energiegruppen (<10) kondensiert; Kritikalitätsrechnungen für den FRM-II erge-

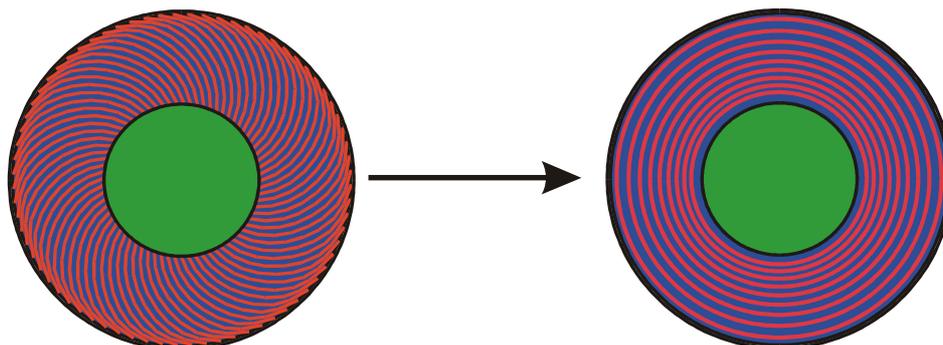


Abbildung 6-10: Ersatz der Evolventenstruktur durch eine äquivalente konzentrische Ringstruktur zur Durchführung der Homogenisierung und Kondensierung der Querschnitte.

ben bei diesem Zugang mit geringer werdender Gruppenanzahl monoton steigende Eigenwerte (Abschnitt 6.3.2).

Der zweite Zugang offenbart diese Schwächen nicht; Evolventenstruktur und der Aufbau des Brennstoffs aus konzentrischen Ringen sollten neutronenkinetisch weitestgehend äquivalent sein. Es muß allerdings streng darauf geachtet werden, daß bei der Umrechnung auf die rotationssymmetrische Geometrie sowohl die Volumenverhältnisse als auch die charakteristischen Plattenabstände und Kühlkanalweiten erhalten bleiben. Tatsächlich entsprechen die Ausmaße des Brennstoffbereiches gerade 12,5 Basiszellen Brennstoff/Cladding/Kühlmittel. Durch die Dichtestaffelung des Brennstoffs kann dieses Schema jedoch nicht ganz genau eingehalten werden, so daß geringfügige Modifikationen der Kühlkanalweiten und Plattenabstände am Rand des Kerns notwendig sind. Ferner ist zu untersuchen, wie stark die Querschnitte variieren, wenn man das Innere des Kerns statt mit Hafnium mit Beryllium füllt. Dies wird im Zusammenhang mit der Kondensierung der Energiegruppen behandelt.

Eine Auswahl der in diesem Modell von XSDRNPM errechneten Gruppenflüsse im Brennstoffbereich ist in Abbildung 6-11 für 6 der insgesamt 238 Flüsse gezeigt. Man beachte, daß die schnellen Flüsse ihre Maxima gerade im Zentrum der konzentrischen Brennstoffringe haben, während die thermischen Flüsse aufgrund der Selbstabschirmung dort ausgeprägte lokale Minima aufweisen. Insgesamt ist der Effekt des „Spatial Self Shielding“ für das FRM-II-Gitter jedoch eher gering (maximal 10% Variation der Flüsse zwischen Moderator und Brennstoff) verglichen z.B. mit den Brennstabgittern in Leichtwasserreaktoren. Dies hängt

damit zusammen, daß die Abstände und Dicken der Platten geringer sind als die mittleren freien Weglängen thermischer und epithermischer Neutronen, die daher mit relativ großer Wahrscheinlichkeit bis tief in die Brennstoffplatten eindringen können, ohne vorher Resonanzabsorption zu erfahren. In Abbildung 6-11 sind ferner deutlich die stark überhöhten thermischen Flußwerte an den Rändern des Kerns zu erkennen, die von der Rückdiffusion thermischer Neuro-

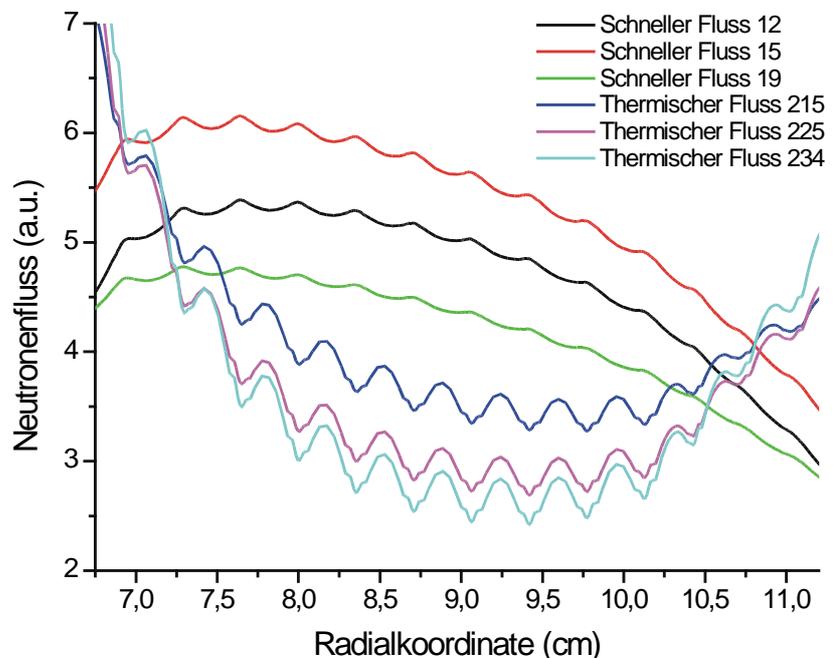


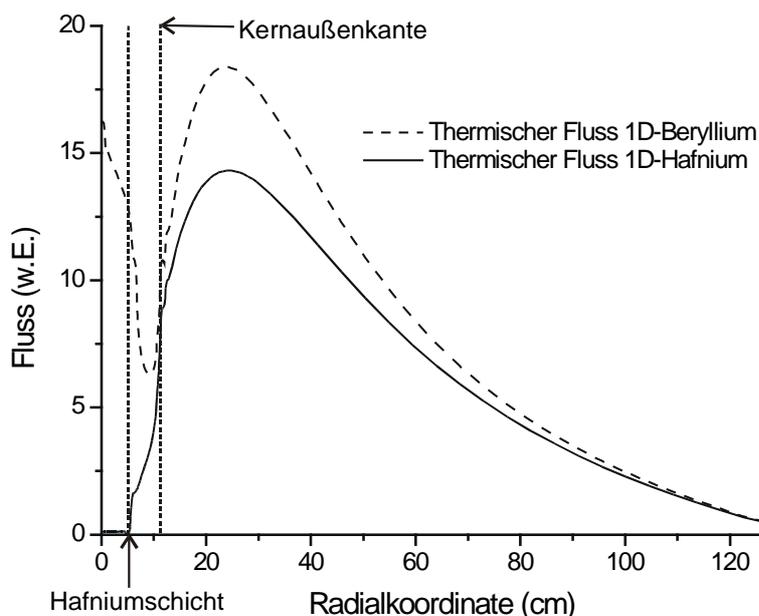
Abbildung 6-11: Ergebnisse einer 238-Gruppenrechnung mit XSDRNPM für den Brennstoffbereich des FRM-II mit konzentrischer Ringstruktur (Beryllium-moderiert); dargestellt sind 6 der 238 Gruppenflüsse, davon 3 im thermischen und 3 im schnellen Bereich.

nen aus dem Schwerwassertank und hier im Bild auch aus dem zentralen Berylliumbereich stammen.

Die Homogenisierung des Brennstoffbereiches wurde vergleichend sowohl mit der einfachen Plattengeometrie als auch mit dem konzentrischen Ringmodell des Kerns ausgeführt. Eine Diskussion des Einflusses dieser beiden Methoden auf 2D-Transportrechnungen folgt im Zusammenhang mit der Energiegruppenkondensierung in Abschnitt 6.3.2. Zur Erstellung von Bibliotheken für transiente Rechnungen wurden beide Ansätze getestet und angewendet.

Die Berechnung der verbleibenden Reaktormaterialien wird ähnlich wie bei der Resonanzbehandlung mit eindimensionalen radialsymmetrischen Modellen des gesamten FRM-II durchgeführt. Dabei ist es zunächst maßgeblich, daß für den Hafnium- und den Beryllium-„Fall“ jeweils separate Querschnittsätze für jedes Nuklid produziert werden, da die räumlichen Wichtungsspektren sich stark unterscheiden und daher zunächst nicht davon ausgegangen werden darf, daß die kondensierten Querschnitte identisch sind. In Abbildung 6-12 sind die thermischen Flüsse (als Summe über alle thermischen Gruppen) für die beiden Fälle dargestellt. Während der Fluß mit Beryllium als Innenmoderator an der Zylinderachse ein lokales Maximum besitzt, wird er dort für die Hafnium-Geometrie unterdrückt; deutlich zu erkennen ist die Flußabsenkung, die in unmittelbarer Nähe der Hafniumabsorberschicht auftritt.

Materialien mit untergeordneter Bedeutung wie Strukturmaterialien können mit diesen Spektren über alle Bereiche, in denen sie auftreten, regionengewichtet (siehe Anhang B) werden. Es wird also nicht unterschieden z.B. zwischen Aluminium, das sich im Brennelementhüllrohr befindet und solchem, das in der Wand des Moderator tanks verarbeitet wurde. Materialien



hingegen, die für die Neutronenbilanz von größerer Bedeutung sind, insbesondere Kühlmittel und Schwerwasser, werden zunächst zonengewichtet; der Schwerwassertank wurde z.B. aufgeteilt in insgesamt vier (kernnahe und kernferne) Bereiche, die Querschnitte des Kühlmittels wurden zunächst für die unterschiedlichen Kühlkanäle individuell beibehalten, ebenso wie die zonengewichteten Haf-

Abbildung 6-12: Die eindimensionalen thermischen Flüsse für den Hafnium- bzw. Beryllium-Bereich des FRM-II, berechnet mit XSDRNPM (alle thermischen Flüsse in einer Gruppe zusammengefasst)

niumquerschnitte.

6.2.3 Kondensierung der Querschnitte

Die letzte Stufe der Querschnittserstellung ist die Kondensierung auf wenige Energiegruppen. Der Wahl der Energieintervalle für die Breitgruppen ist dabei zunächst beliebig viel Spielraum gelassen. Für das Studium der ANS [REN00] wurde die in Tabelle 6-1 dargestellte 20-Gruppen-Struktur vorgeschlagen, die als Ausgangspunkt für eine weitere Kondensierung verwendet wurde. Es wurde besonderer Wert auf die Definition vieler thermischer Gruppen (Energie < 3 eV, hier 10 Gruppen) gelegt. In diesem letzten Schritt werden erneut XSDRNPM-Rechnungen für die zwei oben definierten Geometrien durchgeführt (tatsächlich können räumliche und Energiegruppenwichtung auch in einer einzigen XSDRNPM-Rechnung durchgeführt werden; siehe dazu Anhang B).

Gruppengrenze (eV)	20-Gruppenstruktur	16-Gruppenstruktur	12-Gruppenstruktur
2.00E+07	1	1	1
3.00E+06	2	2	2
1.85E+06	3	3	3
9.00E+05	4	4	4
1.00E+05	5	5	5
1.70E+04		6	
3.00E+03	6	7	6
5.50E+02		8	
1.00E+02	7	9	7
3.00E+01	8	10	8
1.00E+01	9	11	9
3.00E+00	10	12	10
1.77E+00	11		
1.00E+00	12	13	
6.25E-01	13		11
4.00E-01	14		
2.75E-01	15	14	
1.50E-01	16		
5.00E-02	17	15	
1.00E-02	18		12
3.00E-03	19	16	
2.00E-03	20		
1.00E-05			

Tabelle 6-1: Energiegruppenstruktur der 20-Gruppen-Bibliothek. Angegeben sind zusätzlich die Strukturen der für gekoppelte transiente Rechnungen verwendeten 16(5)- und 12(3)-Gruppenbibliotheken, siehe Abschnitt 6.2.4.

Eine erste Bewertung der Güte einer kondensierten Energiegruppenstruktur kann anhand eines Vergleichs des effektiven Multiplikationsfaktors und der resultierenden Leistungsverteilung zwischen Fein- und Breitgruppenrechnung vorgenommen werden. Während zu Beginn dieser Arbeit noch die Ergebnisse der eindimensionalen XSDRNPM-Rechnungen miteinander verglichen wurden, wurde später dazu übergegangen, mit kondensierten Querschnittsätzen unmittelbar zweidimensionale Transportrechnungen durchzuführen. Es zeigte sich nämlich, daß diese weitaus sensitiver gegenüber der Kondensierung auf wenige Gruppen

Gruppenanzahl gesamt/thermisch	XSDRN, P ₃ S ₁₆ Beryllium-Moderator	XSDRN, P ₃ S ₁₆ Hafnium-Absorber
238/90	1,377518	1,134558
44/22	1,378501	1,133232
16/4	1,376934	1,134487
12/3	1,376977	1,133366
MCNP	1,37868 ± 0,00077	1,133976 ± 0,00084

Tabelle 6-2: Vergleich von 1D-Resultaten der Reaktoreigenwerte für die Beryllium- und Hafnium-Konfiguration

sind. Die Ergebnisse dieser Rechnungen werden im nächsten Abschnitt im Rahmen der stationären Betrachtungen zum FRM-II vorgestellt.

Nur der Vollständigkeit halber werden in Tabelle 6-2 noch die Ergebnisse für den effektiven Multiplikationsfaktor der zwei 1D-Geometrien angegeben, gemeinsam mit Referenzwerten aus eindimensionalen Monte-Carlo-Rechnungen (MCNP). Diese Werte sind nicht Buckling-korrigiert und daher sehr hoch; für die Kondensierung werden jedoch die XSDRNPM-Rechnungen mit einer Bucklinghöhe durchgeführt, so daß man einen effektiven Multiplikationsfaktor von etwa eins erhält. Man erkennt, daß selbst bei der Verwendung von nur 12 Energiegruppen mit lediglich 3 thermischen Gruppen die Übereinstimmung von Fein- und Breitgruppenrechnungen sowie den MCNP-Resultaten ausgezeichnet ist.

Offen ist noch die Frage, ob es tatsächlich notwendig ist, mehrere zonengewichtete Querschnittsätze für ein und dasselbe Materialgemisch und einen doppelten Satz für Hafnium- bzw. Beryllium-kondensierte Querschnitte zu verwenden. Diese Frage läßt sich am einfachsten durch Betrachtung der Breitgruppenquerschnitte beantworten. Es zeigt sich, daß diese nicht besonders empfindlich gegenüber ihrer räumlichen Position und auch nicht hinsichtlich des zur Kondensierung verwendeten Flußspektrums (Hafnium/Beryllium) sind.

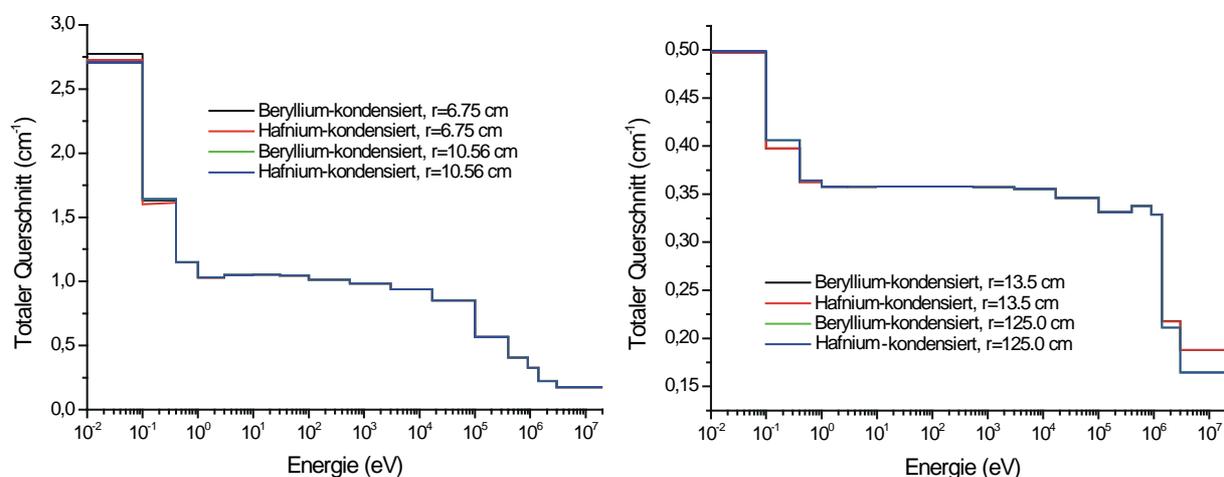


Abbildung 6-13 links: totaler Querschnitt des homogenisierten Brennstoffs hoher Dichte für verschiedene Arten der Kondensierung; rechts: totaler Querschnitt des Schwerwassers für verschiedene Arten der Kondensierung; beide Querschnittsätze enthalten 16 Energiegruppen.

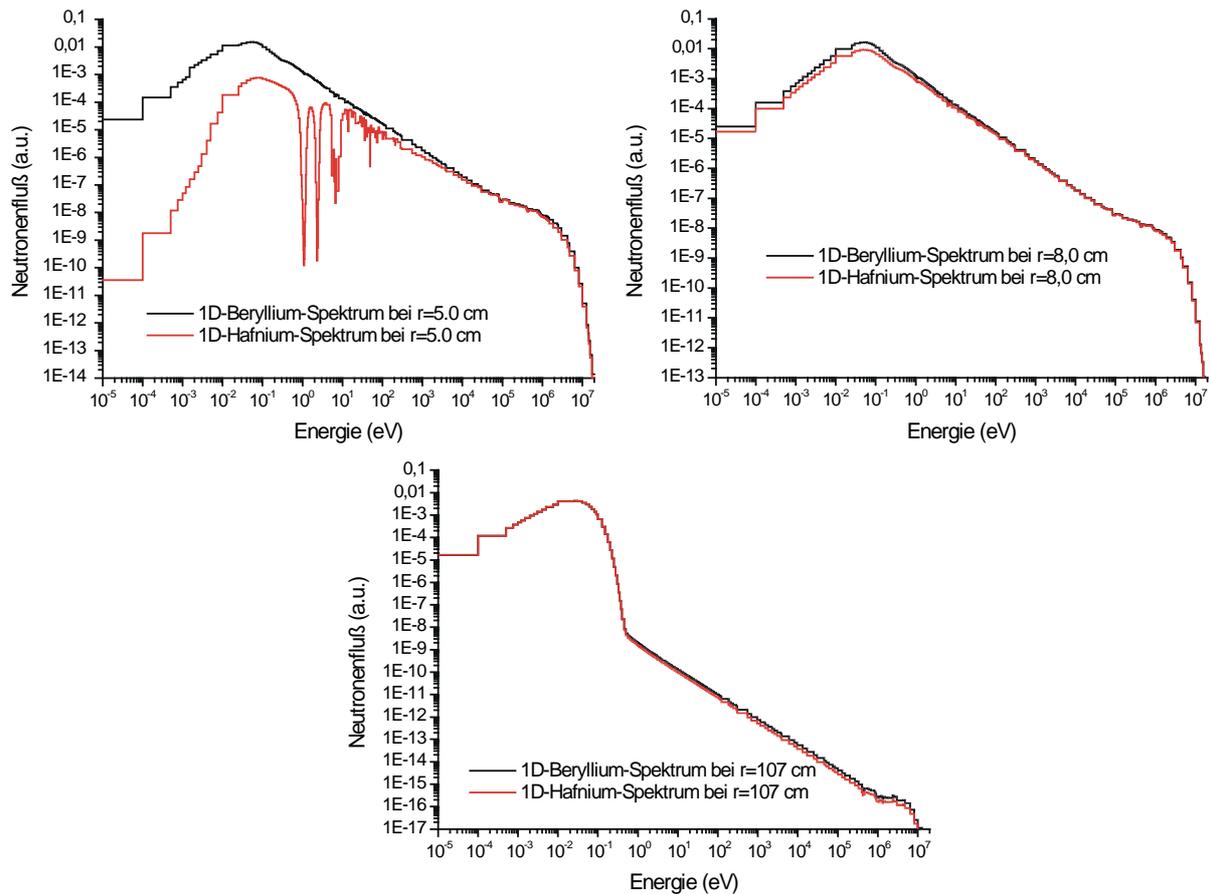


Abbildung 6-14: Vergleich der Energiespektren für 238 Gruppen an drei verschiedenen Positionen und für Hafnium- und Beryllium-Kondensierung; links oben: $r=5$ cm, Bereich der Hafnium-Absorberschicht; rechts oben: $r=8$ cm, Mitte der Brennstoffregion; unten: $r=107$ cm im Moderatortank.

Dies ist exemplarisch am Beispiel des Brennstoffs hoher Dichte und des Schwerwassers in Abbildung 6-13 gezeigt. Dargestellt sind die Querschnitte für jeweils zwei extreme (d.h. möglichst weit räumlich entfernte) Positionen innerhalb einer Materialzone sowie für die Kondensierung mit Hafnium/Beryllium. Die Abweichungen in den thermischen Querschnitten betragen für den Brennstoff maximal 2-3%, für das Schwerwasser differieren lediglich die schnellen Gruppen etwas stärker. Letztere sind jedoch aufgrund des geringen Flusses schneller Neutronen im Moderatortank von untergeordneter Bedeutung. Tatsächlich findet man bei allen beteiligten Materialien dieses Verhalten (außer natürlich für Hafnium und Beryllium, die ohnehin nur in jeweils einer Kondensierungsrechnung vorkommen); es ist also zulässig, für alle Materialien außer Hafnium regionengewichtete Querschnittssätze zu verwenden, so daß man mit relativ wenig Reaktormaterialien auskommt. Dies wurde anhand zweidimensionaler Transportrechnungen überprüft; so ergab z.B. die Repräsentation des Schwerwassers durch einen regionengewichteten Querschnittssatz gegenüber einer Aufteilung in mehrere Materialzonen eine Differenz im Multiplikationsfaktor von $<10^{-4}$, die Verwendung unterschiedlich kondensierter Brennstoffquerschnitte einen noch geringeren Unterschied.

Abbildung 6-14 zeigt schließlich die Energiespektren (238 Energiegruppen) für drei radiale Positionen, wie sie für die 1D-Modelle des FRM-II (mit Hafnium bzw. Beryllium im Zentrum

der Anordnung) berechnet und für die Kondensierung auf wenige Gruppen verwendet wurden. Im Moderatortank (Bild unten) ist das Spektrum zu thermischen Energien verschoben und der Einfluß der unterschiedlichen Materialien im Zentrum der Anordnung macht sich hier faktisch (außer für sehr schnelle Neutronen) nicht mehr bemerkbar. Aber auch in der Mitte der Brennstoffzone (rechts oben), die sich recht nahe am Steuerstab befindet, unterscheiden sich die Spektren nur im thermischen Bereich geringfügig, sind ansonsten aber praktisch deckungsgleich. Dies erklärt die weitgehende Übereinstimmung von Hafnium- bzw. Beryllium-kondensierten Querschnitten in Abbildung 6-13. Wesentliche Unterschiede findet man hingegen an der radialen Position der Absorberschicht (Bild links oben). Während das Energiespektrum mit Beryllium im Zentrum der Anordnung weitgehend identisch ist zu dem Spektrum im Brennstoff, findet man in der Hafnium-Schicht eine starke Flußunterdrückung gerade bei den Energien vor, an denen Hafnium seine ausgeprägten Resonanzen aufweist (siehe die Darstellung des totalen Querschnitts von Hafnium in Abbildung 6-9 links).

6.2.4 Erzeugung parametrisierter Querschnittsbibliotheken

Beim Start der SCALE4.4-Programmsequenz, wie in Abbildung 6-5 dargestellt, müssen für alle im System vorkommenden Nuklide die Dichten und Temperaturen als feste Parameter vorgegeben werden, um einen Querschnittssatz zu generieren. Dieser Zugang ist natürlich i.allg. nicht ausreichend: Möchte man z.B. Rückwirkungskoeffizienten für Brennstofftemperatur oder Kühlmitteldichte ermitteln, muß ggf. eine ganze Reihe solcher Bibliotheken erzeugt werden, die dann sequentiell einem 2D-Transportprogramm zugeführt werden. Die Produktion solcher Querschnitte ist eine zeitraubende Aufgabe, da die Erstellung der Eingabedaten, die Resonanzbehandlung sowie die Homogenisierung und Kondensierung der Querschnitte stets vollständig neu durchgeführt werden müssen.

Noch ungünstiger liegen die Dinge bei der Untersuchung von Transienten in einem gekoppelten Modell. Selbst zur thermohydraulischen Modellierung des relativ kleinen Brennstoffbereichs des FRM-II benötigt man einige hundert Zonen, in denen lokal unterschiedliche Kühlmitteltemperaturen und -dichten sowie Brennstofftemperaturen vorliegen. Prinzipiell muß für jede dieser Zonen separat ein individueller Querschnittssatz erzeugt werden. Da die thermohydraulischen Parameter aber vor Beginn der Transiente nicht bekannt sind, müßte diese Neuberechnung der Querschnitte für jede Zone in jedem Zeitschritt der Transientenrechnung erfolgen. Damit würde jedoch der weitaus größte Anteil der Rechenzeit für die Erzeugung der Bibliotheken verloren gehen; eine solche Lösung ist daher nicht praktikabel.

Der übliche Weg zur Lösung dieses Problems ist die Interpolation von Querschnittsdaten aus vorgefertigten Bibliotheken. Man definiert zunächst (hypothetische) Zustände des Kerns, in denen die wichtigen Parameter über den gesamten thermohydraulisch interessanten Bereich

des Kerns jeweils konstant sind. Jeder dieser Parameter wird dann (unter Festhalten der übrigen Parameter) einzeln variiert und die entsprechenden Daten an die Programmsequenz in Abbildung 6-5 übergeben. Auf diese Weise erzeugt man eine größere Anzahl von Bibliotheken, die den gesamten Variationsbereich der einzelnen Parameter mit einigen diskreten Werten abzudecken versuchen, zwischen denen dann interpoliert werden kann. Dieses Verfahren ist natürlich eine Näherung, da die Wirkungsquerschnitte nie den tatsächlichen thermohydraulischen Zustand des Kerns erfassen, hat sich aber in der Praxis vielfach bewährt.

Für den FRM-II wurden ausschließlich für die Brennstoffzone und für das obere und untere Kühlmittelplenum variable Querschnittsbibliotheken erzeugt. In diesen Bereichen können die folgenden Parameter variieren:

- Brennstofftemperatur,
- Kühlmitteltemperatur,
- Kühlmitteldichte.

Es hat sich als ausreichend erwiesen, für die Brennstofftemperatur drei Stützstellen für den gesamten in Frage kommenden Temperaturbereich (20-600°C) zu definieren. Tatsächlich werden die Temperaturabhängigkeiten der meisten Resonanznuklide in den SCALE4.4-Bibliotheken aus ebenso wenig Werten (i.allg. drei bis fünf) durch Interpolation bestimmt. Für die Kühlmitteltemperaturen und -Dichten wurden jeweils sechs Stützstellen für den Bereich 20-200 °C bzw. 0.0-1.0 g/cm³ angelegt, so daß sich eine Gesamtzahl von 108 Bibliotheken ergibt. Diese liegen in 12 Energiegruppen (mit drei thermischen Gruppen) vor. Für Referenzrechnungen wurden ferner 16(5)-Gruppendaten mit ausgedehnterem Parameterbereich erzeugt, die an insgesamt 300 verschiedenen (5x6x10) Stützstellen berechnet wurden. Dabei wurden die 12(3)-Gruppenbibliotheken mit dem einfachen, die 16(5)-Gruppenbibliotheken hingegen mit dem erweiterten Homogenisierungsschema (siehe Abschnitt 6.2.2) erzeugt; die zugehörigen Energiegruppenstrukturen sind in Tabelle 6-1 angegeben.

Neben der Bereitstellung dieser Basisbibliotheken wurde ein eigenständiges Interpolationsmodul programmiert, daß bei Start einer Transientenberechnung die besagten 108(300) Bibliotheken einliest und durch dreidimensionale Interpolation Querschnitte für jede beliebige Kombination der o.g. thermohydraulischen Parameter erzeugen kann. Eine nähere Beschreibung dieses Moduls, das einen wichtigen Teil des transienten Codessystems darstellt, findet sich in Anhang D.

6.3 Stationäre Berechnungen in zwei Raumdimensionen

Mit den aufbereiteten Wirkungsquerschnitten können nun Transport- und Diffusionsrechnungen für die zweidimensionale, zylindersymmetrische Repräsentation des FRM-II durchgeführt werden. Aus stationären Analysen lassen sich bereits wichtige Schlußfolgerungen be-

treffend der Art der räumlichen Diskretisierung, der Anzahl der verwendeten Energiegruppen, der anzuwendenden S_N -Quadratur etc. ziehen, die für die späteren Transientenrechnungen von Bedeutung sind. Die maßgeblichen Kriterien z.B. bei der Verringerung der Anzahl der räumlichen Gitterpunkte oder Energiegruppen sind der effektive Multiplikationsfaktor sowie Fluß- und Leistungsverteilungen, die im wesentlichen unverändert bleiben müssen.

Außerdem werden in den folgenden Abschnitten die Modellierung der Steuerstabbewegung, die Ermittlung von Reaktivitätskoeffizienten, die Bestimmung der punktkinetischen Parameter sowie Vergleiche von Transport- und Diffusionstheorie vorgestellt.

6.3.1 Darstellung der Geometrie des FRM-II

Obwohl sich die für Transienten wesentlichen neutronenkinetischen und thermohydraulischen Prozesse in dem relativ kleinen Kernvolumen abspielen, ist es bei der geometrischen Beschreibung des FRM-II wichtig, daß auch der umliegende Moderatortank und sogar tanknahe Teile des Reaktorbeckens durch die Modellierung erfaßt werden, da die Thermalisierung von Neutronen im Moderatortank und deren Rückdiffusion in den Kern erheblichen Einfluß auf die Neutronenbilanz im Brennstoff haben.

Der gesamte Rechenbereich erstreckt sich somit über eine Höhe von etwa drei Metern und einen Radius von etwa 140 cm. Das in dieser Arbeit verwendete räumliche Maschengitter ist

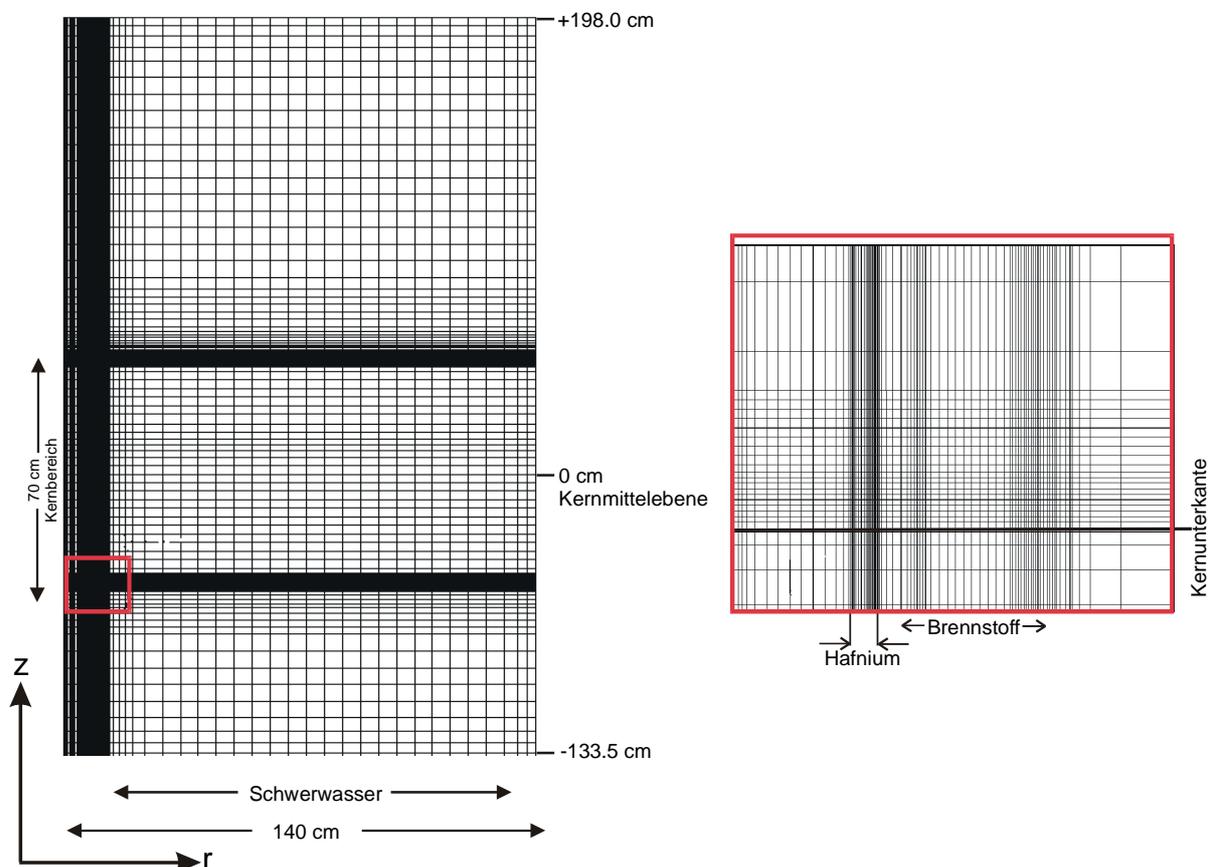


Abbildung 6-15 links: Das für den FRM-II verwendete räumliche Maschengitter; rechts: Ausschnitt aus dem Maschengitter in der Nähe der Kernunterkante

in Abbildung 6-15 dargestellt. Man erkennt deutlich, daß der Bereich von Kern und Zentralkanal in eine große Anzahl feiner radialer Maschen eingeteilt wurde, um die geometrischen Details (Kühlkanäle im Regelstab, Strukturmaterialien, Hafniumschicht etc.) sowie die teilweise steilen Flußgradienten im Kern angemessen wiedergeben zu können. Die radialen Maschenausdehnungen betragen z.B. etwa 0,1 Millimeter im Hafnium sowie 0,5-1,5 mm im Brennstoffbereich. Im Moderatortank hingegen hat sich eine eher grobe Nodalisierung als ausreichend erwiesen (axiale und radiale Maschenausdehnungen von 2-5 cm).

In Abbildung 6-15 rechts wird ein kleiner Ausschnitt des Maschengitters am unteren Kernrand gezeigt. Neben der feinen radialen Einteilung von Hafniumschicht und Brennstoff hat es sich ferner als notwendig erwiesen, auch die axiale Mascheneinteilung am oberen und unteren Kernrand zu verfeinern, da hier durch die Rückdiffusion von Neutronen aus oberem und unterem Plenum ausgeprägte lokale Leistungsspitzen auftreten.

Für die meisten stationären Rechnungen und für die Transientenanalysen wurde ein räumliches Gitter von 110 radialen und 138 axialen Maschen verwendet, wodurch sich die Gesamtanzahl der Gitterpunkte auf etwa 15000 beläuft. Ein in beiden Dimensionen um einen Faktor zwei verfeinertes Gitter (d.h. etwa 60000 Gitterpunkte) lieferte bei Testrechnungen maximale Abweichungen von ca. $8 \cdot 10^{-5}$ im effektiven Multiplikationsfaktor.

Ein offensichtliches Problem der Finite-Differenzen-Formulierung auf einem regulären Gitter ist die Tatsache, daß die Definition eines feinen radialen Gitters im Kernbereich über die gesamte axiale Höhe des Rechengebiets durchgehalten werden muß (siehe die schwarzen „Balken“ in Abbildung 6-15). Das gleiche gilt für die axiale Mascheneinteilung an den Kernrändern, die sich über den gesamten Moderatortank erstreckt. Dadurch werden auch Flüsse in relativ „uninteressanten“ Regionen detailliert aufgelöst, was den Rechenaufwand deutlich erhöht. Eine Darstellung mit einem Finite-Elemente-Programm auf einem unstrukturierten Gitter hätte sicherlich den Vorzug, daß die Maschenanzahl z.B. im Zentralkanal weit ober- bzw. unterhalb des Kerns sowie im Moderatortank erheblich verringert werden könnte.

6.3.2 Anzahl der verwendeten Energiegruppen

Wie bereits in Abschnitt 6.2.3 erwähnt, können die Ergebnisse eindimensionaler XSDRNPM-Vorausrechnungen zur Kondensierung und Homogenisierung nur ein sehr grober Anhaltspunkt für die Qualität der verwendeten Wirkungsquerschnitte sein. Tatsächlich müssen sich die auf wenige Energiegruppen kondensierten Bibliotheken am vollständigen zweidimensionalen Modell bewähren.

Um die Qualität der Datenbasis in Form der grundlegenden 238-, 99- und 44-Gruppenbibliotheken zu bewerten, wurden diese nach einer einheitlichen Resonanzbehandlung zunächst auf die 44-Energiegruppenstruktur der kleinsten Bibliothek kondensiert. Diese Anzahl ist immer noch so groß, daß keine nennenswerten Abweichungen im effektiven Multiplika-

Homogenisierung	238 → 44 Gruppen	99 → 44 Gruppen	44 → 44 Gruppen
Standard	0,998866	0,995352	0,996867
1D-radialsymmetrisch	1,001153	0,997638	0,999197

Tabelle 6-3: Effektiver Multiplikationsfaktor in Abhängigkeit von der Homogenisierung und der zugrunde gelegten Querschnittsbibliothek

onsfaktor und in den resultierenden Leistungsverteilungen zu erwarten sind, aber klein genug, um sie in zweidimensionalen stationären Transportrechnungen verwenden zu können. Ferner wurde sowohl die in Abschnitt 6.2.2 beschriebene „Standard“-Homogenisierung des Brennstoffs als auch das alternative 1D-radialsymmetrische Modell benutzt.

Grundlage der 2D-Transportrechnungen ist das im letzten Abschnitt dargestellte räumliche Maschengitter mit dem Steuerstab etwa in kritischer Position (-15 cm) und der Verwendung einer P_3S_8 -Quadratur. Die resultierenden, bis auf 10^{-7} konvergierten k_{eff} -Werte von sechs DORT-Rechnungen sind in Tabelle 6-3 aufgeführt.

Trotz der Verwendung dreier verschiedener Bibliotheken erhält man für den FRM-II eine ausgezeichnete Übereinstimmung in den Multiplikationsfaktoren; Abweichungen von max. 0,3% sind bei der Verwendung unterschiedlicher Datenbasen keine Seltenheit und hier durchaus akzeptabel. Der systematisch höhere Eigenwert des radialsymmetrischen Homogenisierungsschemas kommt durch die komplizierte Umrechnung des Brennstoffbereiches von Evolventen- in Zylindergeometrie zustande, ist aber ebenfalls zu tolerieren. Da auch die durch die verschiedenen Rechnungen generierten Leistungsverteilungen im Kern in ausgezeichneter Übereinstimmung waren, kann grundsätzlich jede der drei verwendeten Bibliotheken gleichermaßen für den FRM-II eingesetzt werden.

Ausgehend von den 99-Gruppen ANSL-V-Querschnitten wurde dann zunächst auf die in Tabelle 6-1 angegebene 20-Gruppenstruktur kondensiert, die sich allerdings für transiente Transportrechnungen aufgrund der großen Anzahl thermischer Gruppen immer noch als zu komplex erwies und daher weiter kondensiert wurde. Die daraus resultierenden Reaktoreigenwerte sind in Tabelle 6-4 aufgeführt.

Wie bereits oben angemerkt, findet man für den auf einem unendlichen Gitter homogenisierten Brennstoff einen monoton steigenden Eigenwert für abnehmende Gruppenanzahl. Bereits bei acht Gruppen liegt eine Abweichung von etwa 1% gegenüber

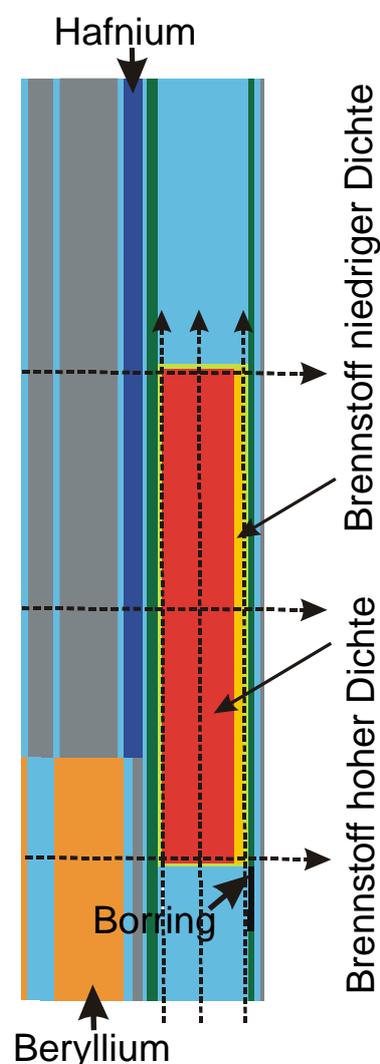


Abbildung 6-16: Der Brennstoffbereich mit dem benachbarten Steuerstab; die Linien definieren axiale und radiale Schnitte.

Gruppenanzahl gesamt/thermisch	Standard-Homogenisierung	Radialsymmetrische Homogenisierung
44(22)	0,995352	0,997638
20(10)	0,996478	0,996447
13(4)	0,997818	0,997794
11(3)	1,000827	0,999526
8(2)	1,005976	0,998557
6(2)	1,010117	0,996980
4(1)	1,020599	1,012638

Tabelle 6-4: Effektiver Multiplikationsfaktor in Abhängigkeit von der Anzahl der Energiegruppen, basierend auf der Querschnittsbibliothek ANSL-V

dem 44-Gruppen-Referenzwert vor, was nicht mehr akzeptabel ist. Dieses Verhalten kann jedoch tatsächlich durch die verbesserte Homogenisierung weitgehend ausgeschaltet werden; erst bei der Verwendung einer einzigen thermischen Gruppe treten auch hier erhebliche Abweichungen auf.

Maßgeblich ist jedoch letztlich, daß die Leistungsverteilung in Breitgruppen-Rechnungen in guter Übereinstimmung mit Feingruppen-Rechnungen ist. Zur Veranschaulichung betrachte man Abbildung 6-16, in der Brennstoffbereich und Steuerstab sowie ein Ausschnitt des Zentralkanals dargestellt sind. Durch die horizontalen und vertikalen Pfeile werden radiale und axiale Schnittrichtungen entlang der Ränder des Brennstoffbereichs bzw. entlang der axialen und radialen Mittelachse desselben definiert. Der homogenisierte Brennstoffbereich besitzt eine Ausdehnung von 4.45 x 70 cm und wird in den DORT-Rechnungen durch insgesamt 32 x 82 Feinmaschen beschrieben. Trägt man die (auf 20 MW normierte) Leistungsdichte im Kern entlang dieser Schnittrichtungen auf, so ergeben sich die in Abbildung 6-17 dargestellten Graphen, die kurz diskutiert werden sollen.

Deutlich zu erkennen ist in allen drei radialen Schnitten die Diskontinuität, die durch die Dichtestaffelung des Brennstoffes hervorgerufen wird. An der Kernunterkante, d.h. im Bereich des Berylliummoderators, nimmt die Leistungsdichte zum inneren Rand hin stark zu, während sie in den hafniumnahen Regionen an dieser Stelle stark unterdrückt wird. Dies ist ebenfalls gut zu erkennen an den drei axialen Schnitten in Abbildung 6-17 rechts unten. Der Hafnium-Absorber macht sich natürlich an der Kerninnenkante am stärksten bemerkbar. Man beachte auch die starken lokalen Leistungsspitzen, die sich an beiden Kernenden, besonders ausgeprägt aber in der Beryllium-moderierten unteren Kernhälfte aufbauen. An diesen Punkten ist die Leistungsdichte um etwa einen Faktor 2,8 gegenüber der mittleren Leistungsdichte im Kern erhöht; diese Regionen sind daher auch thermohydraulisch von großem Interesse. Die Zone mit der größten Wärmestromdichte (die sog. Heißstelle) befindet sich innen an der unteren Kante des Brennstoffbereichs.

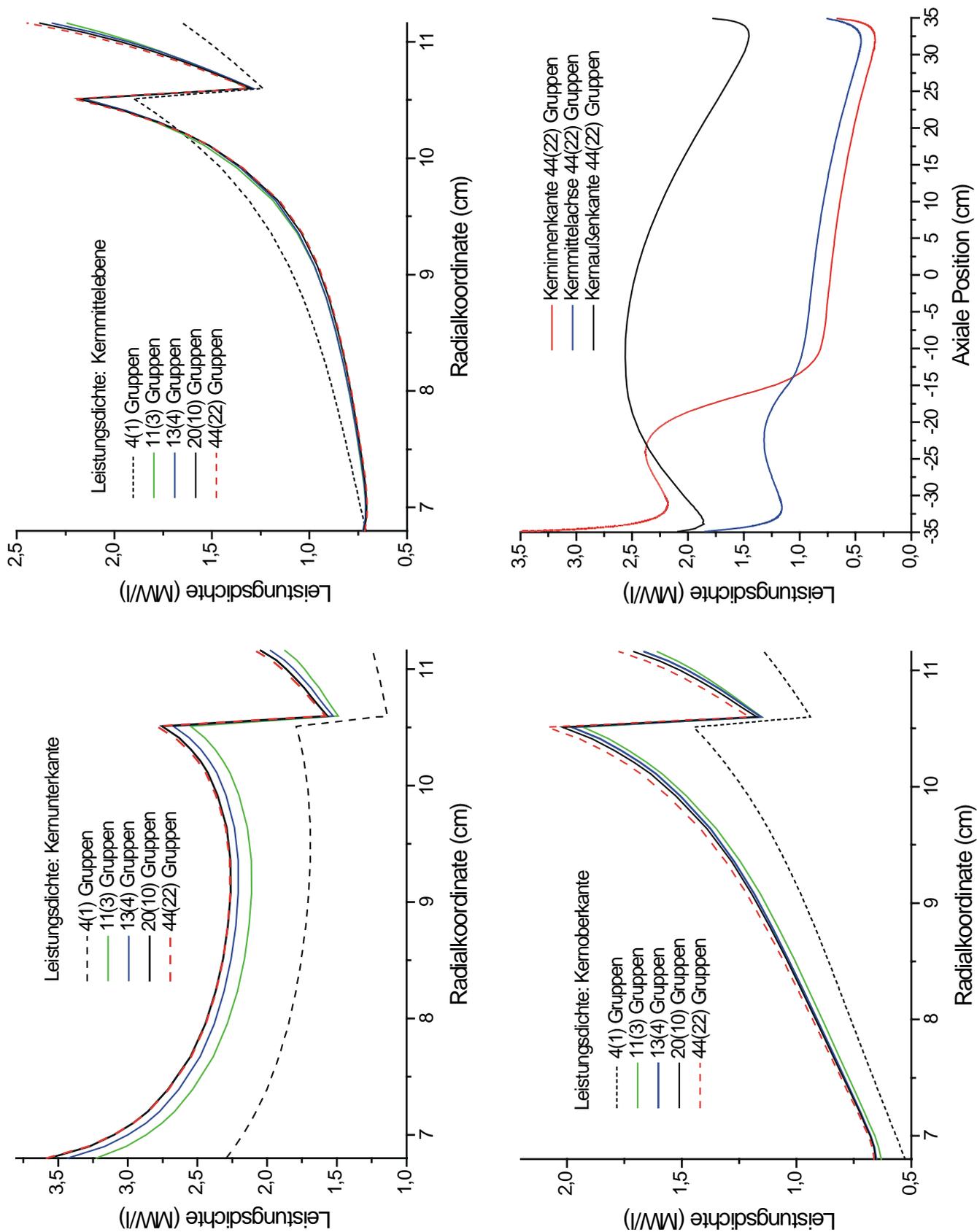


Abbildung 6-17: Radiale Leistungsdichten für verschiedene Gruppenanzahlen; links oben: radiale Leistungsdichten an der Kernunterkante; rechts oben: radiale Leistungsdichten in der Kernmittelebene; links unten: radiale Leistungsdichten an der Kernoberkante; rechts unten: axiale Leistungsdichten in 44 Gruppen für Schnitte entlang der Innen- und Außenkante des Brennstoffs sowie entlang der Mittelachse des Brennstoffbereichs.

Je geringer die Energiegruppenanzahl, desto größer werden die Abweichungen von der mit 44 Gruppen errechneten Leistungsdichte. Dies ist insbesondere am unteren Kernrand zu beobachten, wo die Unterschiede zwischen 44- und 11-Gruppenrechnung bereits 8-10% betragen. Offensichtlich wird der Thermalisierungsprozeß im unteren Plenum sowie die Rückdiffusion von Neutronen in den Kern bei der Verwendung weniger Energiegruppen nicht mehr korrekt erfaßt. Ansonsten beobachtet man jedoch, daß für weite Teile des Kernbereiches die Übereinstimmung sehr gut ist, sichtbar z.B. in der Kernmittelebene, deren Leistungsprofil repräsentativ für den weitaus größten Anteil des Kernvolumens ist. Lediglich die 4-Gruppenrechnung mit nur einer thermischen Gruppe ist nicht in der Lage, die Leistungsverteilung auch nur annähernd richtig zu beschreiben.

Angesichts der stationären Leistungsverteilungen ist es daher akzeptabel, transiente Rechnungen mit den in Abschnitt 6.2.4 und Anhang D beschriebenen parametrisierten Bibliotheken in 12(3) bzw. 16(5) Gruppen durchzuführen, wenn man sich stets vergegenwärtigt, daß an einigen Positionen die Leistungsdichte u.U. um einige Prozent unterschätzt wird. Durch die Verwendung des verbesserten Homogenisierungsschemas ist auch die kritische Steuerstabposition weitgehend unabhängig von der Gruppenanzahl.

Die in Abbildung 6-17 gezeigten Leistungsdichten beschreiben den Zustand ohne Einbauten im Moderatortank. Für den Fall mit Einbauten wird es in azimuthaler Richtung zu mehr oder weniger starken Fluß- und Leistungsdichteverzerrungen kommen, die allerdings mit einem deterministischen 2D-Transportcode nicht erfaßt werden können.

6.3.3 Vergleich von Diffusions- und Transportrechnungen

Die Schwächen der Diffusionstheorie sind bereits an verschiedenen Stellen angedeutet worden; es soll nun kurz dargestellt werden, wie diese sich beim FRM-II bemerkbar machen. Tatsächlich erfüllt der FRM-II einige Bedingungen, die die Diffusionsnäherung bereits fragwürdig erscheinen lassen: Er ist gerade im Kernbereich räumlich sehr inhomogen, der Absorptionsquerschnitt variiert über kurze räumliche Distanzen sehr stark (z.B. zwischen Hafniumschicht und den Kühlkanälen des Regelstabs) und es treten starke Flußgradienten auf. Ferner kann eine hypothetische Voidbildung im Kern oder in den Kühlkanälen starke Abweichungen der Diffusions- von den Transportlösungen hervorrufen.

Ein wesentliches Problem der Diffusionstheorie ist die Definition der Diffusionskoeffizienten, die bereits in Abschnitt 2.6 kurz diskutiert worden ist. Diese können während der Generierung von Wirkungsquerschnitten mit XSDRNPM erzeugt werden; der zugrunde liegende Formalismus ist in Anhang C näher erläutert.

Zunächst wird wiederum das Verhalten der Reaktoreigenwerte bei Kondensierung auf wenige Energiegruppen untersucht. In Tabelle 6-5 werden die Ergebnisse von Transportrech-

Gruppenanzahl	Transport P_3S_8	Diffusion („diagonal“)	Diffusion („konsistent“)
44(22)	0,997638	0,984191	0,997221
20(10)	0,996447	0,980249	0,995215
13(4)	0,997794	0,980329	0,995978
11(3)	0,999526	0,980450	0,998092
8(2)	0,998557	0,980249	0,997550
6(2)	0,996980	0,970715	0,995857
4(1)	1,012638	0,980995	1,024146

Tabelle 6-5: Effektiver Multiplikationsfaktor für Transportrechnungen sowie die diagonale und die „konsistente“ Diffusionsnäherung in Abhängigkeit von der Gruppenanzahl

nungen und Diffusionsresultate für die sog. „diagonale“ und die „konsistente“ Definition des Diffusionskoeffizienten (siehe Anhang C) gegenübergestellt.

Die diagonale Definition, bei der der Diffusionskoeffizient über die einfache Beziehung:

$$D_g = \frac{1}{3(\Sigma_t^g - 1/3 \cdot \Sigma_{s1}^{gg})} \quad (6-1)$$

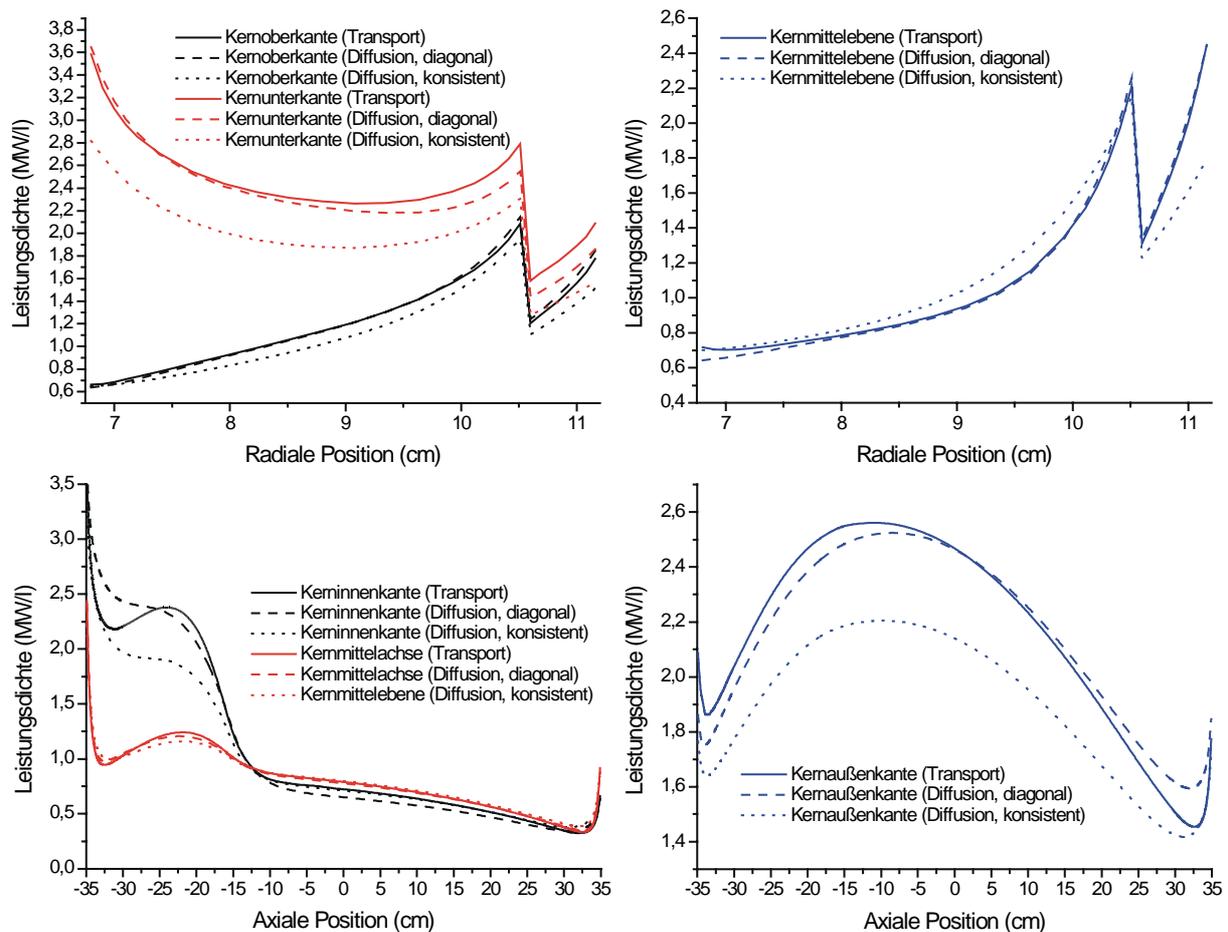


Abbildung 6-18: Vergleich der Leistungsdichten für Transportrechnungen sowie für die diagonale und konsistente Diffusionsnäherung in 20 Energiegruppen; Oben: Radiale Leistungsdichten für drei verschiedene Schnittrichtungen; Unten: Axiale Leistungsdichten für drei verschiedene Schnittrichtungen

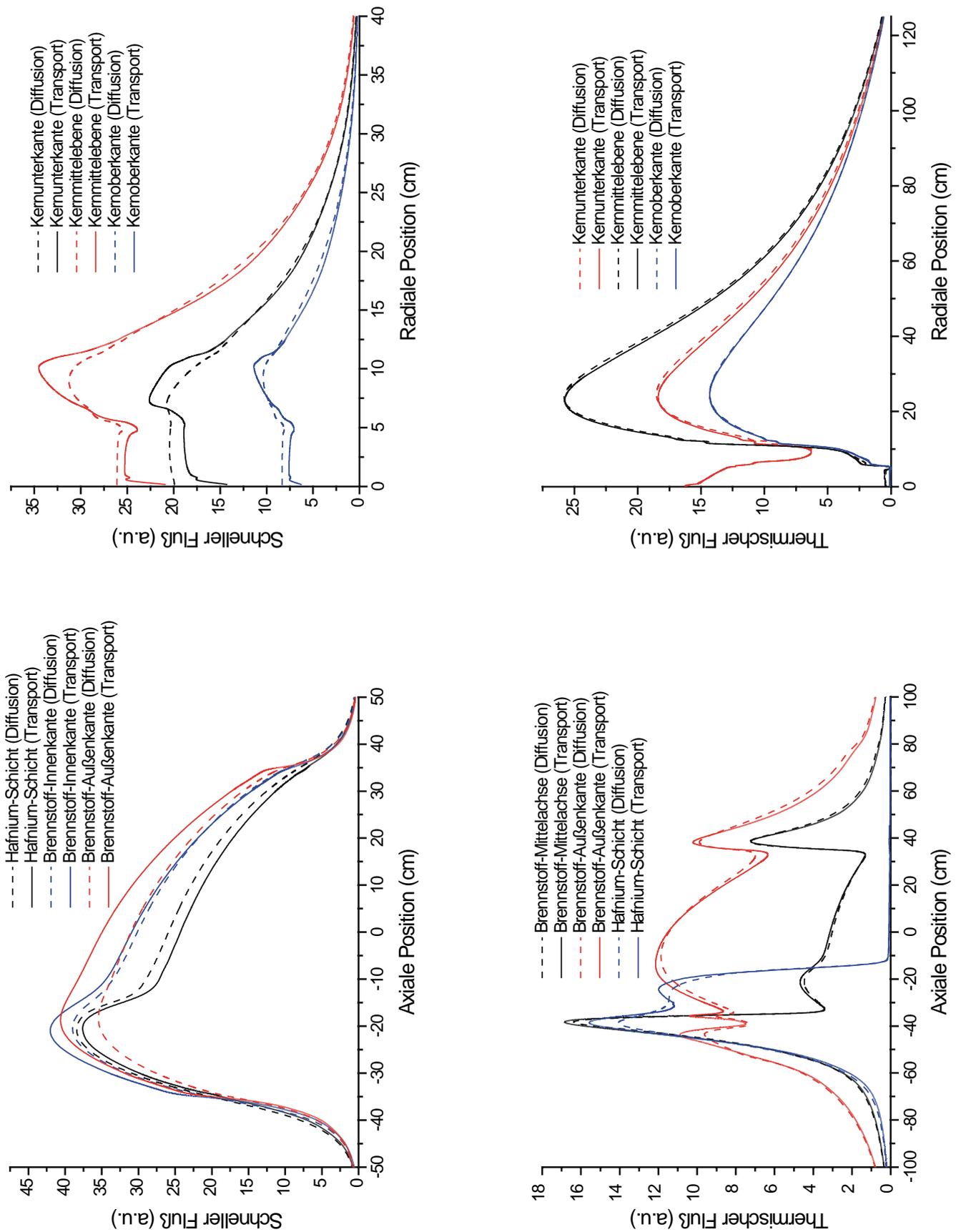


Abbildung 6-19: Vergleiche von schnellen und thermischen Flüssen im FRM-II; Ergebnisse von 20-Gruppen-Diffusions- und Transportrechnungen; die 10 schnellen und 10 thermischen Gruppen wurden jeweils zusammengefasst. Oben: Axiale und radiale Darstellung der schnellen Flüsse für verschiedene Positionen; Unten: Axiale und Radiale Darstellung der thermischen Flüsse.

definiert wird, liefert durchweg Eigenwerte, die um ca. 1,5-2% zu klein gegenüber den Transportresultaten sind. Die konsistente Definition liefert scheinbar befriedigendere Ergebnisse; vergleicht man jedoch die Leistungsverteilungen (in Abbildung 6-18 für eine 20-Gruppenrechnung dargestellt), so erkennt man, daß die „konsistenten“ Ergebnisse wesentlich stärker von den Transportlösungen abweichen als die „diagonalen“ Resultate.

Offensichtlich ist die mit den 1D-Strömen in XSDRNPM durchgeführte Wichtung des konsistenten Transportquerschnitts bzw. der Diffusionskonstanten stark fehlerbehaftet, während der einfache diagonale Querschnitt Werte für die Leistungsdichten liefert, die zumindest in der Kernmittelebene gut mit den Transportresultaten übereinstimmen. Am unteren Kernrand findet man eine ähnlich starke Abweichung, wie sie bereits bei der Kondensierung auf wenige Gruppen angetroffen wurde: Die scharfen Leistungsspitzen am Dichtesprung werden offenbar von der Diffusionstheorie unterschätzt, der vom Diffusionsprogramm in der höchstbelasteten Zone ermittelte Wert ist dagegen in relativ guter Übereinstimmung mit der Transportlösung.

Instruktiv ist außerdem ein Vergleich der Flußverhältnisse im Reaktor. In Abbildung 6-19 sind die schnellen und thermischen Flüsse im FRM-II für jeweils drei axiale und radiale Schnitte in der r-z-Ebene dargestellt. Der Übersichtlichkeit halber sind die 10 schnellen bzw. 10 thermischen Gruppen jeweils zu einer einzigen Gruppe zusammengefaßt worden. Besonders augenscheinlich sind die Unterschiede zwischen Diffusion und Transport bei den schnellen Flüssen: In axialer Schnittrichtung erkennt man hier ausgeprägte Differenzen von mehr als 10% in der Nähe der Materialdiskontinuität Hafnium-Beryllium. Daß die Diffusionstheorie nicht in der Lage ist, die Wirkung des Hafnium-Absorbers richtig einzuschätzen, zeigen auch die radialen Schnitte, in denen die von der Absorberschicht hervorgerufene Flußabsenkung in den Transportlösungen wesentlich ausgeprägter erscheint.

Beim Vergleich der thermischen Flüsse schneidet die Diffusionsnäherung etwas besser ab. Hier findet man Abweichungen gerade dort vor, wo man sie physikalisch erwartet, nämlich an den starken Thermalisierungs-„Peaks“ am oberen und unteren Kernende und in der Nähe des Borrrings, dessen Einfluß im axialen Schnitt entlang der Brennstoffaußenkante gut zu erkennen ist. (Bor ist ein fast reiner $1/v$ -Absorber und absorbiert daher hervorragend im thermischen Energiebereich). Im Moderatortank, wo die thermischen Neutronen eine weitgehend isotrope Verteilung aufweisen, sind Diffusions- und Transportrechnung in guter Übereinstimmung. Die radialen Schnitte entlang der Kernradien zeigen außerdem sehr gut das thermische Maximum, daß sich im Tank bei etwa $r=24$ cm, also weit außerhalb des Kerns, aufbaut.

6.3.4 Verwendung einer geeigneten Quadratur

Die in den stationären Testrechnungen verwendete P_3S_8 -Quadratur benötigt insgesamt (inklusive Startrichtungen) 48 Diskrete Ordinaten. Die Gesamtzahl der Variablen beträgt dann für ein 12-Gruppenproblem mit etwa 15000 Gitterpunkten ($12 \times 15000 \times 48$)=8,64 Millionen; diese Anzahl von Flüssen muß in einer Transiente in jedem Zeitschritt neu bestimmt werden. Dies stellt nicht nur erhebliche Anforderungen an die Prozessorleistung, sondern auch an die Kapazität des Hauptspeichers.

Es stellt sich also die Frage, ob man ggf. mit einer geringeren Quadratur- bzw. Streuordnung auskommt. Getestet wurden neben den symmetrischen S_8 - daher auch

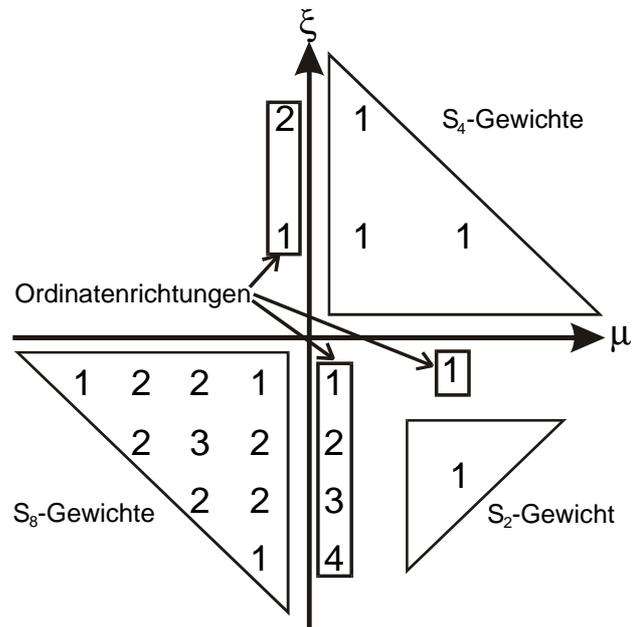


Abbildung 6-20: Numerierung der Ordinatenrichtungen und Gewichte in Tabelle 6-6 für verschiedene Quadraturen

die einfacheren S_4 - und S_2 -Quadraturansätze mit 16 bzw. 6 diskreten Ordinaten (4 bzw. 2 davon jeweils als Startrichtungen). Die zugehörigen Quadraturkomponenten, d.h. die Winkel μ_n und ξ_n sowie die entsprechenden Gewichte w_n sind in Tabelle 6-6 angegeben. Die Numerierung der Winkel und Gewichte für einen Oktanten kann aus Abbildung 6-20 entnommen werden.

Quadratur	n	μ_n, ξ_n	w_n
S_2	1	0,577350	0,250000
S_4	1	0,333333	0,083333
	2	0,881927	
S_8	1	0,218223	0,030247
	2	0,577350	0,022685
	3	0,786802	0,023148
	4	0,951194	

Tabelle 6-6: Gewichte und Ordinaten für die verschiedenen am FRM-II erprobten Quadraturansätze gemäß Abbildung 6-20

In Tabelle 6-7 sind die resultierenden k_{eff} -Werte für eine 20-Gruppenrechnung mit den unterschiedlichen Diskrete-Ordinaten-Sätzen und Streuordnungen P_1 bzw. P_3 angegeben.

Man erkennt, daß lediglich die S_2 -Quadratur Abweichungen von etwa einem halben Prozent liefert, während alle anderen Resultate in hervorragender Übereinstimmung sind.

Quadratur/Streuordnung	k_{eff}
P_1S_2	1,001715
P_1S_4	0,996829
P_3S_4	0,997132
P_1S_8	0,997018
P_3S_8	0,996447

Tabelle 6-7: Effektiver Multiplikationsfaktor des zweidimensionalen FRM-II-Problems für verschiedene Quadraturen und Streuordnungen

Dem Verhalten des Multiplikationsfaktors nach reicht es offenbar, Berechnungen mit der relativ niedrigen S_4 -Quadratur und auch lediglich mit den führenden (d.h. linear anisotropen) Legendre-Koeffizienten der Streuquerschnitte auszuführen. Dies bestätigt sich durch einen Blick auf die schnellen und thermischen Flüsse, die in Abbildung 6-21 exemplarisch für jeweils eine axiale und eine radiale Schnittrichtung durch den Kern dargestellt sind. Zum Vergleich ist nochmals die Diffusionslösung eingezeichnet.

Sowohl für die schnellen als auch die thermischen Flüsse liefern S_4 - und S_8 -Quadratur Flußwerte, die überall bis auf besser als 1% übereinstimmen. Die S_2 -Lösung hingegen kommt bei den schnellen Flüssen eher der Diffusionslösung gleich und versagt im thermischen Bereich offenbar bei der Bestimmung der Flüsse in der Nähe des Borrings.

Zusammenfassend kann man festhalten, daß sich der FRM-II trotz seiner starken Inhomogenitäten und steiler Flußgradienten recht gut durch eine niedrige Winkelapproximation und geringe Streuanisotropien beschreiben läßt. Selbst die Diffusionsnäherung liefert für große

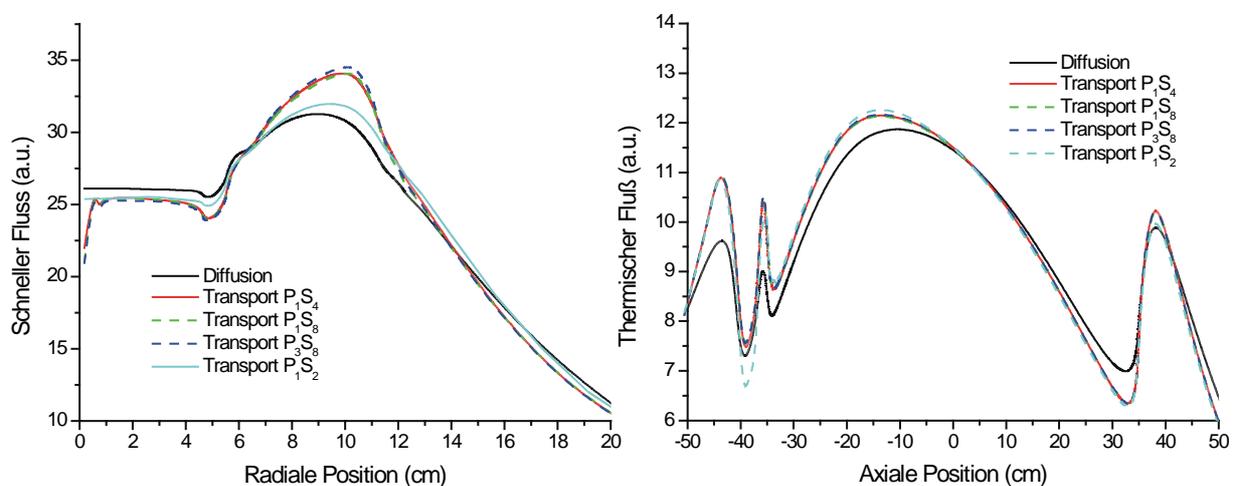


Abbildung 6-21: Flußvergleiche für verschiedene Streu- und Quadraturordnungen; links: Schnelle Flüsse für einen radialen Schnitt entlang der Kernmittelebene; rechts: Thermische Flüsse für einen axialen Schnitt entlang der Kernaußenkante

Bereiche des Kerns akzeptable Flüsse, versagt allerdings bei der Bestimmung des Eigenwerts, der bei der Verwendung der „diagonalen“ Diffusionskonstanten um etwa 2% falsch abgeschätzt wird.

6.3.5 Simulation der Regelstabstellung

Der zentrale Steuerstab ist das wesentliche Regelelement des FRM-II und ist insbesondere für die Berechnung von Reaktivitätstransienten genau zu modellieren. Zur Ermittlung der Regelstabcharakteristik ist es i.allg. ausreichend, einige wenige Transportrechnungen für verschiedene Positionen des Steuerstabs durchzuführen, um so die Veränderung des effektiven Multiplikationsfaktors und daraus die differentielle Stabwirksamkeit zu ermitteln.

Für voll implizite transiente Rechnungen ist es dagegen notwendig, die Bewegung des Steuerstabs möglichst exakt zu erfassen. Bei einer maximalen Fahrgeschwindigkeit von 0,8 mm/s und einer differentiellen Wirksamkeit von $5 \cdot 10^{-4} \text{ mm}^{-1}$ ergibt sich z.B. für einen Zeitschritt von 1 ms eine Reaktivitätsänderung von lediglich $4 \cdot 10^{-7}$ (bei einer Änderung der Stabposition von nur 0.8 μm), die vom Transportcode „erkannt“ werden muß. Dies setzt voraus, daß

- die Regelstabcharakteristik selbst auf sehr kleinen Längenskalen eine „glatte“ Funktion der Stabposition ist und daß diese Position während einer Transientenberechnung quasi-kontinuierlich verändert werden kann, und daß
- die Konvergenz des Transportcodes so gut ist, daß die besagte geringfügige Reaktivitätsänderung nicht in den numerischen Rundungsfehlern untergeht.

Zur Darstellung der Stabbewegung wurden verschiedene Modelle getestet. Die Ausgangssituation ist in Abbildung 6-22 links dargestellt: Auf einem regulären räumlichen Gitter mit regelmäßigen Maschengrößen in z-Richtung soll die Verschiebung der Materialgrenze Hafnium-Beryllium simuliert werden. Die einfachste Möglichkeit ist die Einführung einer zusätzlichen z-Masche, deren eine Begrenzung stets mit der Materialdiskontinuität zusammenfällt, während die andere durch das ursprüngliche Maschengitter gebildet wird. Problematisch an dieser Darstellung ist die Tatsache, daß immer dann, wenn die Regelstabposition annähernd mit dem Maschengitter zusammenfällt, das Volumen der zusätzlichen Masche klein oder sogar Null wird und dann ggf. korrigiert werden muß. Dies kann zu erheblichen Konvergenzproblemen führen, weshalb diese Methode verworfen wurde.

Eine zweite, in der Reaktorphysik häufig angewendete Möglichkeit ist die Materialmischung. Das Maschengitter wird beibehalten, aber in der Masche, in der sich die Steuerstabposition befindet, wird ein zusätzliches Material definiert, dessen Querschnitte aus der Mischung von Hafnium und Beryllium resultieren; die Mischungskoeffizienten ergeben sich durch volumetrische Wichtung mit dem Hafnium-zu-Beryllium-Verhältnis innerhalb der Masche sowie einer zusätzlichen Flußwichtung. Diese Methode wird z.B. von 3D-Programmen zur Ganzkernbe-

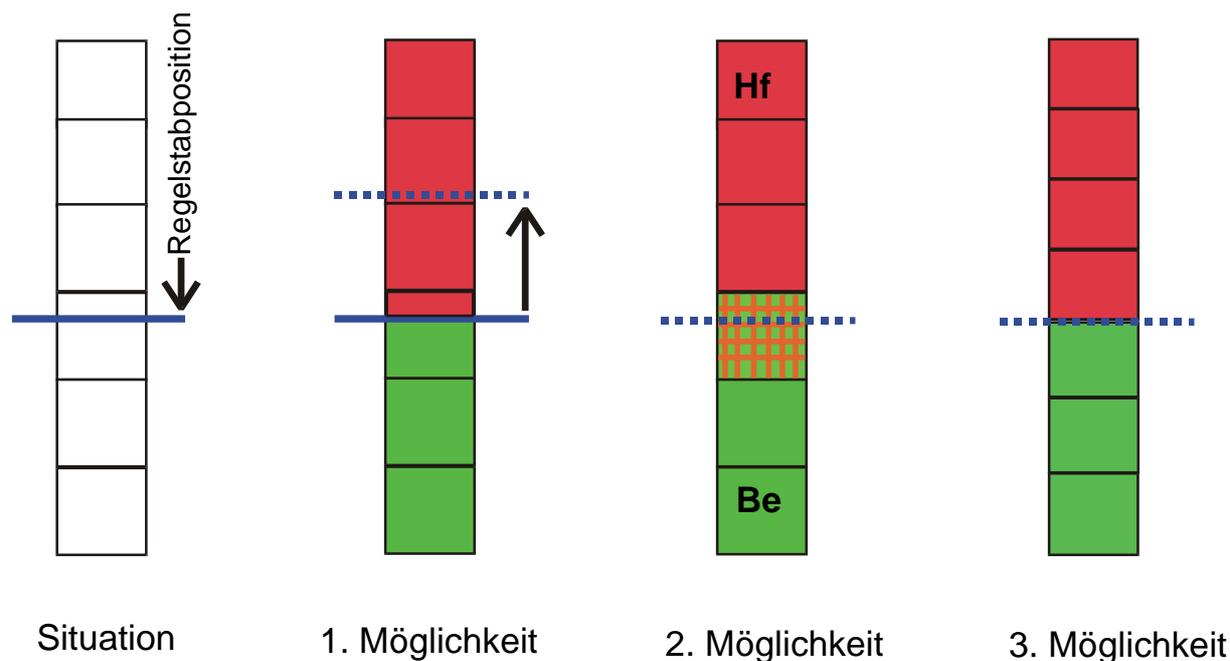


Abbildung 6-22: Zur Modellierung der Steuerstabbewegung; 1. Bild: Ausgangssituation; 2. Bild: „Naive“ Maschenverschiebung; 3. Bild: Simulation der Stabverschiebung durch Materialmischung; 4. Bild: Maschenverschiebung mit Anpassung der Weite der Nachbarmaschen

schreibung (z.B. QUABOX/CUBBOX [LAN76]) verwendet, um die Bewegung von Steuerstabbänken in Leichtwasserreaktoren zu simulieren.

Die letztlich favorisierte Methode stellt Abbildung 6-22 rechts dar. Die Regelstabposition fällt wiederum stets mit dem räumlichen Gitter zusammen. Um kleine Maschenvolumina zu vermeiden, werden im Gegensatz zur ersten Methode die Größen der Nachbarmaschen mit angepaßt, so daß sowohl im Hafnium- als auch im Berylliumteil des Steuerstabs stets regelmäßige Maschengrößen vorliegen. Man beachte, daß diese Methode in einer Transiente in jedem Zeitschritt die Neuberechnung des räumlichen Gitters und der Flüsse erfordert, um die veränderten Reaktionsraten in den jeweiligen Volumina korrekt zu erfassen. Dies wird weiter unten erläutert werden.

In Abbildung 6-23 ist der effektive Multiplikationsfaktor als Ergebnis stationärer Berechnungen in 6(2) Gruppen für verschiedene Regelstabstellungen dargestellt. Deutlich zu erkennen ist, daß die Verwendung der Methode der Materialmischung die Regelstabkurve gewissermaßen „durchhängen“ läßt, während die Verwendung der Maschenverschiebung den gewünschten glatten Verlauf ergibt. Die Punkte, wo die Kurven jeweils aufeinander liegen, sind gerade die Positionen, an denen das ursprüngliche räumliche Gitter mit der Regelstabstellung zusammenfällt.

Verwendet man also die Methode der Materialmischung in Transienten, so kann es zu dem überraschenden Effekt kommen, daß die nominelle differentielle Wirksamkeit des Stabes von etwa $5 \cdot 10^{-4} \text{ mm}^{-1}$ durch die girlandenartige Form der Kurve in Abbildung 6-23 lokal stark über- oder unterschätzt wird. Dieser Effekt kann durch die Definition vieler axialer Maschen

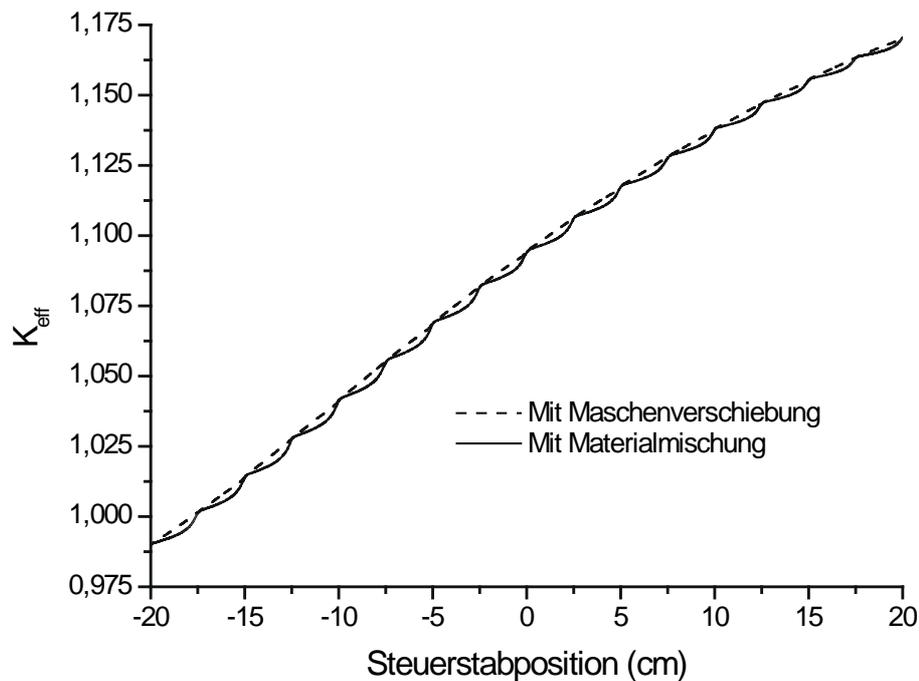


Abbildung 6-23: Regelstabcharakteristik für die Methoden der Materialmischung und der Maschenverschiebung

in dem Bereich, in dem die Stabposition variiert, zwar minimiert, aber nicht vollständig kompensiert werden.

Für die in Transientenberechnungen verwendeten 16(5)-Gruppenbibliotheken ist der vollständige Verlauf der Regelstabkurve in Abbildung 6-24 links gezeigt; zum Vergleich wird hier auch die entsprechende Kurve für die diagonale Diffusionsnäherung dargestellt, deren Verlauf zwar sehr ähnlich zu der Transportlösung ist, aber systematisch um etwa 2% geringere Eigenwerte anzeigt. In der differentiellen Wirksamkeit stimmen die Kurven jedoch recht gut überein. Die maximale Wirksamkeit wird etwa bei der Stabposition -10.0 cm erreicht, ihr absoluter Wert an dieser Stelle beträgt etwa $5,2 \cdot 10^{-4} \text{ mm}^{-1}$, in guter Übereinstimmung mit den in [SIE93] zitierten Werten.

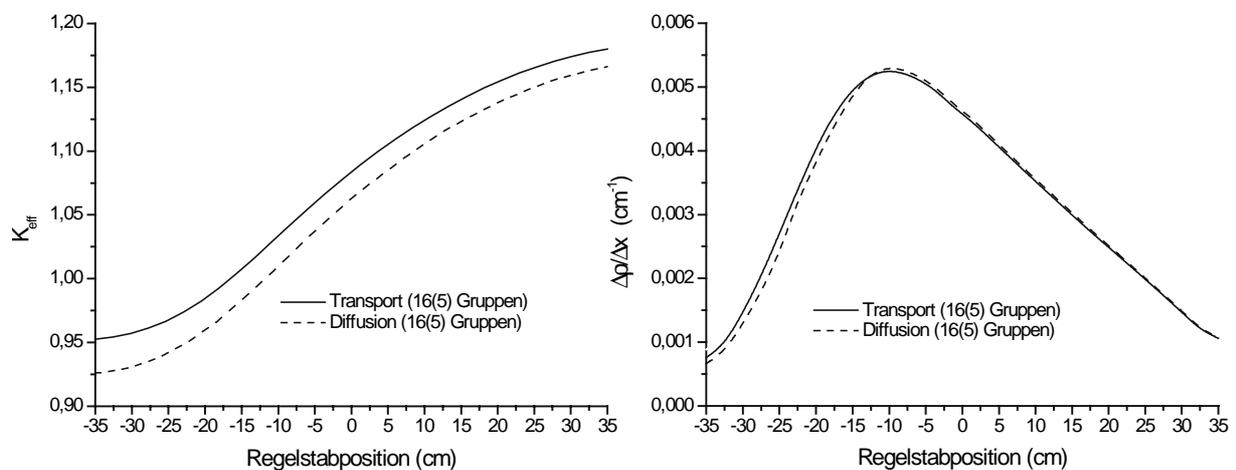


Abbildung 6-24: Regelstabcharakteristik und differentielle Wirksamkeit des FRM-II-Steuerstabes für Diffusions- und Transporttheorie (Ergebnisse einer 16(5)-Gruppenrechnung)

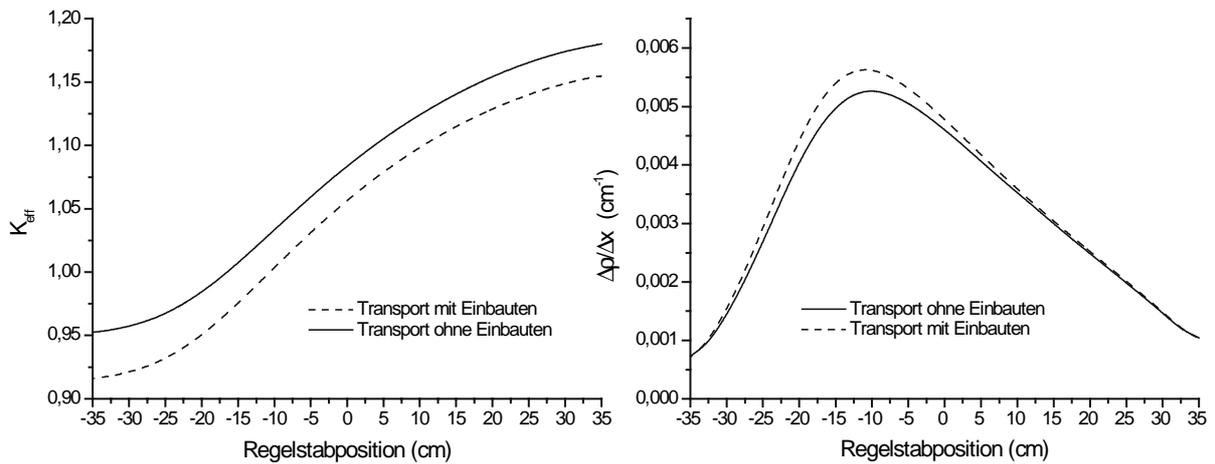


Abbildung 6-25: Vergleich der Regelstabcharakteristik mit und ohne Einbauten im Moderatortank (Ergebnisse einer 16(5)-Gruppenrechnung)

Durch die experimentellen Einbauten im Moderatortank werden sowohl die kritische Regelstabposition als auch die differentielle Wirksamkeit des Regelstabes modifiziert. Um den Einfluß der Schwerwasserverdrängung durch die Strahlrohre sowie die „Vergiftung“ des Tanks durch die Materialien der Einbauten zu berücksichtigen, wurde das Schwerwasser im Tank verdünnt und mit Aluminium vermischt.

Maßgeblich bei der Simulation der Einbauten war allerdings nicht die exakte Reproduktion der Regelstabcharakteristik, wie sie durch Monte-Carlo-Rechnungen für die vollständige 3D-Geometrie des FRM-II bestimmt wurde [GAU96], sondern eine möglichst gute Übereinstimmung der kinetischen Parameter für Transientenrechnungen (siehe Abschnitt 6.3.7). Daher wurde auch nicht die durch die Einbauten tatsächlich hervorgerufene Reaktivitätsminderung von etwa 5% erreicht, sondern nur etwa 3%. Die Kurven für die Fälle mit und ohne Einbauten sind in Abbildung 6-25 gegenübergestellt; die maximale differentielle Wirksamkeit erhöht sich um etwa 8% auf $5,6 \cdot 10^{-4} \text{ mm}^{-1}$, die kritische Position des Regelstabes wandert um etwa 6 cm nach oben.

In Transport- und Diffusionscode wurde ferner ein Regelstab-Suchmodus implementiert, der es erlaubt, die Position des Steuerstabes so zu justieren, daß der Reaktor genau kritisch ist. Tatsächlich starten alle Transientenrechnungen mit einer solchen Suche, um zu gewährleisten, daß der Reaktor sich eingangs in einem stationären Zustand befindet. Nach der Vorgabe des Intervalls für die kritische Regelstabposition

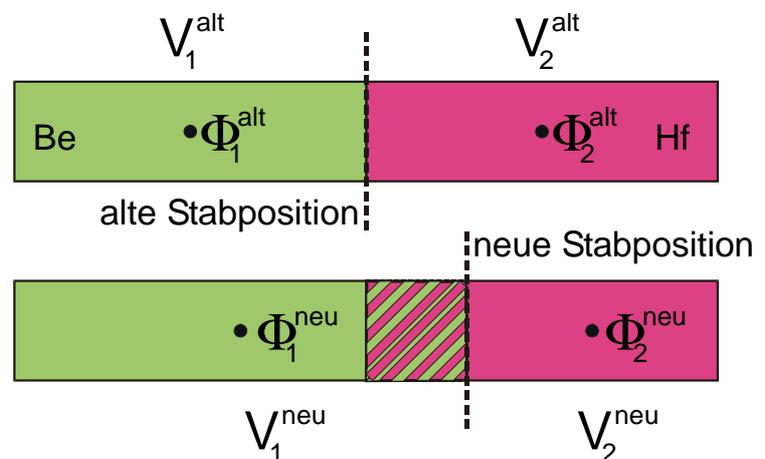


Abbildung 6-26: Zur Definition der Maschenverschiebung in transienten Rechnungen

wird dieses durch einfache Bisektion und mehrere Kritikalitätsrechnungen so weit eingegrenzt, bis die Stabstellung auf besser als 10^{-6} cm bekannt und der effektive Multiplikationsfaktor auf etwa 1.0 ± 10^{-8} konvergiert ist.

Im Vorgriff auf das folgende Kapitel wird an dieser Stelle eine Komplikation diskutiert, die bei der Simulation der Steuerstabbewegung in transienten Rechnungen und dort insbesondere für große Zeitschritte eine Rolle spielt. Wird mit Beginn eines neuen Zeitschrittes in einer Transiente die Steuerstabposition geändert, muß zunächst das Maschengitter der Neutronenkinetik neu berechnet werden. Mit der Änderung der axialen Ausdehnung der Maschen sowie deren Volumina müssen allerdings auch die im letzten Zeitschritt berechneten und als Quellterm an den nächsten Zeitschritt übergebenden Flüsse (siehe auch Kapitel 5) entsprechend der Maschenverschiebung mit angepaßt werden. Es muß also vor der eigentlichen Transportrechnung zur Ermittlung der neuen Flüsse $\psi^{(n+1)}$ eine Abbildung der alten Flüsse $\psi^{(n)}$ auf das neue Maschengitter erfolgen. Dazu betrachte man Abbildung 6-26, in der zwei benachbarte räumliche Maschen vor und nach einer Stabbewegung dargestellt sind. Die alten und neuen Gitterpunkte bleiben jeweils maschenzentriert, sind allerdings vor und nach dem Zeitschritt axial gegeneinander verschoben. Im Code besteht die Option, die neuen Flußwerte $\psi^{(n)}$ an den neuen Positionen durch Interpolation aus den alten Flußwerten an den alten Positionen zu bestimmen. (Dazu wurde die 1D-Interpolationsroutine UVIP3P aus der numerischen Bibliothek TOMS [NIS00] verwendet). Der physikalischere Zugang ist jedoch zu fordern, daß die totalen Reaktionsraten in beiden Maschen vor und nach der Stabverschiebung erhalten bleiben sollen, also z.B. für das Beispiel in Abbildung 6-26:

$$\Sigma_{t,1}^{\text{alt}} V_1^{\text{alt}} \Phi_1^{\text{alt}} + \Sigma_{t,2}^{\text{alt}} V_2^{\text{alt}} \Phi_2^{\text{alt}} = \Sigma_{t,1}^{\text{neu}} V_1^{\text{neu}} \Phi_1^{\text{neu}} + \Sigma_{t,2}^{\text{neu}} V_2^{\text{neu}} \Phi_2^{\text{neu}} \quad \Phi_2^{\text{neu}} = \Phi_2^{\text{alt}} \quad (6-2)$$

Gemäß der impliziten Rechenvorschrift muß die Flußbilanz für $\psi^{(n)}$ vor der Stabbewegung, d.h. mit der Materialkonfiguration des letzten Zeitschrittes, aber auf dem neuen Gitter ausgewertet werden. Die Querschnitte Σ^{neu} ergeben sich dann im obigen Beispiel durch volumetrische Querschnittswichtung der beteiligten Materialien Hafnium und Beryllium zu:

$$\Sigma_{t,1}^{\text{neu}} = \frac{V_1^{\text{alt}} \Sigma_{t,1}^{\text{alt}} + (V_1^{\text{neu}} - V_1^{\text{alt}}) \Sigma_{t,2}^{\text{alt}}}{V_1^{\text{neu}}} \quad \Sigma_{t,2}^{\text{neu}} = \Sigma_{t,2}^{\text{alt}} \quad (6-3)$$

Während bei diesem zweiten Zugang durch die Wahl $\Phi_2^{\text{neu}} = \Phi_2^{\text{alt}}$ offensichtlich die Verschiebung des Maschenzentrums der zweiten Masche nicht korrekt wiedergegeben wird, ist die Erhaltung der Reaktionsrate gegenüber der rein numerischen Interpolation garantiert.

Tatsächlich hat sich herausgestellt, daß außer für sehr große Stabbewegungen innerhalb eines Zeitschrittes die Vernachlässigung dieser Flußanpassung zu keinem sichtbaren Fehler führt. Sie wurde jedoch im Code beibehalten und wird bei jeder Stabverschiebung sowohl für die Flüsse und Flußmomente als auch für die Vorläufer durchgeführt. Der Rechenzeitaufwand ist aufgrund der Tatsache, daß immer nur wenige axiale Maschen von der Stabverschiebung betroffen sind, gering.

6.3.6 Reaktivitätskoeffizienten

Obwohl für die zeitabhängige Transporttheorie nicht erforderlich, wurden für den Vergleich mit der Punktkinetik stationäre Reaktivitätskoeffizienten für Änderungen der Kühlmitteltemperatur und -dichte sowie der Brennstofftemperatur ermittelt. Deren Bestimmung durch stationäre Rechnungen ist jedoch eine Näherung, da die Parameter stets einzeln variiert und über die gesamte Kernaussdehnung als konstant angenommen werden. Prinzipiell stehen die drei Größen thermohydraulisch aber in engem Zusammenhang; eine Änderung der Kühlmitteltemperatur wird sich z.B. immer auch auf die Kühlmitteldichte auswirken; außerdem sind diese Größen gerade für den FRM-II stark ortsabhängig.

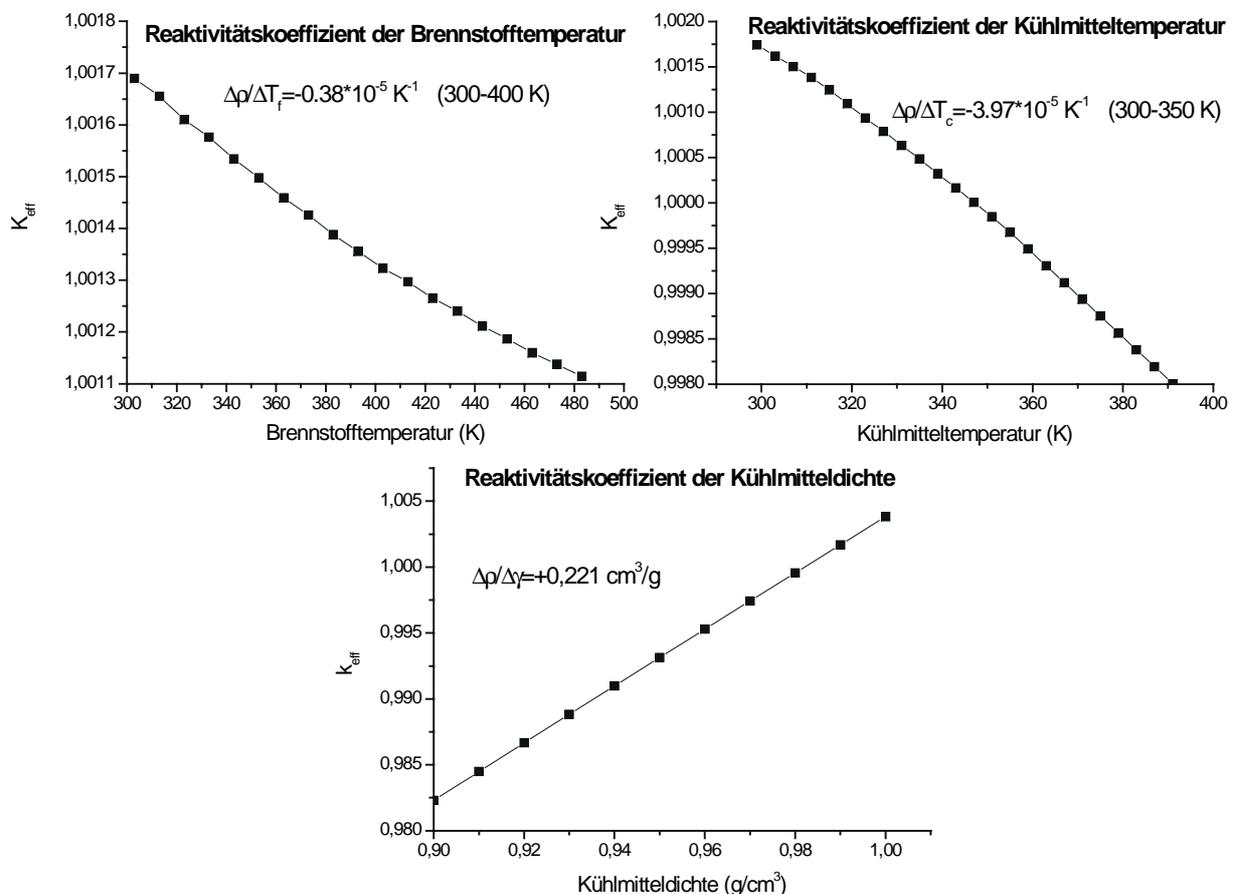


Abbildung 6-27: Die drei wichtigsten Reaktivitätskoeffizienten des FRM-II; links oben: Koeffizient der Brennstofftemperatur; rechts oben: Koeffizient der Kühlmitteltemperatur; unten: Koeffizient der Kühlmitteldichte

In der üblichen Vorgehensweise werden der sog. Spektraleffekt und der Dichteeffekt der Kühlmitteltemperatur zunächst separat behandelt. Der Spektraleffekt beschreibt bei konstanter Nuklidichte die Änderung der Moderationseigenschaften des Kühlmittels durch die temperaturabhängige Modifikation der Streumatrizen des Nuklids. Beim Dichteeffekt, der für den FRM-II besonders ausgeprägt ist, wird hingegen ausschließlich die Auswirkung einer Temperaturänderung auf die Nuklidichte betrachtet.

Die Brennstofftemperatur beeinflusst die Reaktivität über den Dopplereffekt. Da die starke Resonanzabsorption von U-238 bei der Verwendung von hochangereichertem Brennstoff kaum zum Tragen kommt, ist dieser Effekt für den FRM-II aber sehr gering.

Die Änderung des effektiven Multiplikationsfaktors bei Variation einer der drei obigen Parameter ist in Abbildung 6-27 dargestellt. Alle drei Kurven zeigen einen Verlauf, der stückweise durch konstante Reaktivitätskoeffizienten beschrieben werden kann. Diese sind in den Grafiken für die thermohydraulisch relevantesten Intervalle angegeben.

6.3.7 Punktkinetische Parameter

Zur Lösung der punktkinetischen Gleichungen (siehe Anhang E) benötigt man Zahlenwerte für die Lebensdauer der prompten Neutronen Λ sowie für die effektiven Anteile der sechs Gruppen verzögerter Neutronen β_i , $i=1\dots 6$ und deren Summe β_{eff} , die i.allg. nicht identisch ist mit dem physikalischen Anteil β . Durch die Verschiebung der Energiespektren der verzögerten Neutronen zu niedrigeren Energien haben diese nämlich eine größere Chance als die prompten Neutronen, dem Resonanzeinfang zu entkommen und damit eine Kernspaltung auszulösen, was sich durch ein erhöhtes β_{eff} ausdrückt.

In dem zeitabhängigen Transportcode ist es möglich, entweder ein β_{eff} samt dem prompten Spaltspektrum anzugeben oder alternativ das prompte sowie die sechs verzögerten Spektren explizit im Eingabedatensatz zu spezifizieren: der Code ist also prinzipiell frei von den Unsicherheiten, die mit der Bestimmung des effektiven Anteils verzögerter

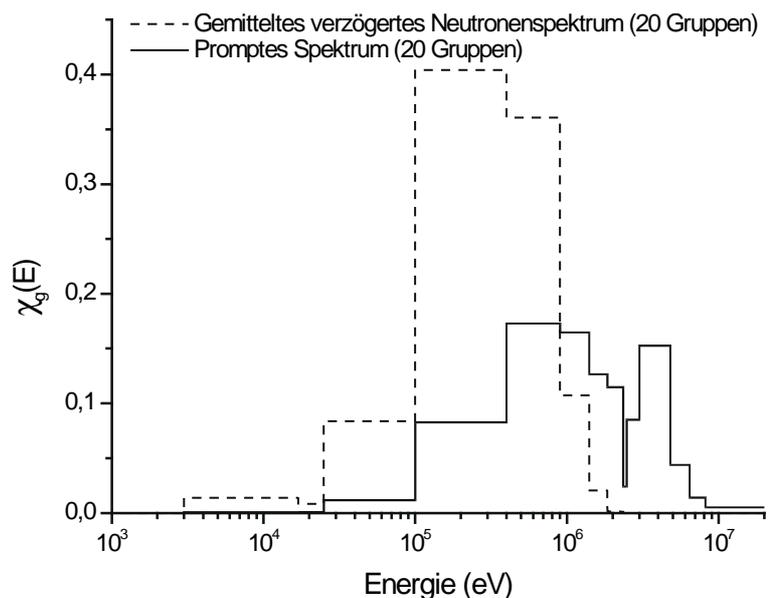


Abbildung 6-28: Gemitteltetes verzögertes Gruppenspektrum und promptes Spaltspektrum für eine 20-Gruppenrechnung

Neutronen einher gehen, setzt dann aber eine Kenntnis der verzögerten Spektren voraus.

Zur Bestimmung der sechs Gruppenspektren wurde auf das in Oak Ridge entwickelte Programm DNSPECT zurückgegriffen [GEH00], das aus der aktuellsten Datenbasis ENDF/B-VI die Punktdaten der Spaltspektren für U-235 extrahiert und durch Integration über frei wählbare Energieintervalle in Gruppenform konvertiert. Die entsprechende Routine wurde in den Transport- und Diffusionscode implementiert, um aus der spezifizierten Energiegruppenstruktur die Gruppenspektren zu ermitteln.

Ein Beispiel hierfür ist in Abbildung 6-28 für eine 20-Gruppenrechnung aufgeführt; der Übersichtlichkeit halber wurde über die sechs Gruppen verzögerter Neutronen gemittelt. Zum Vergleich ist das prompte Spektrum ebenfalls eingezeichnet: Deutlich ist zu erkennen, daß die prompten Neutronen im Mittel bei wesentlich höheren Energien freigesetzt werden.

Mit Hilfe dieser Spektren können nun auch die effektiven Anteile der verzögerten Neutronen gemäß den in Anhang E dargestellten Beziehungen berechnet werden. Die Auswertung dieser komplizierten Berechnungsvorschriften setzt außerdem noch die Kenntnis der adjungierten Funktion voraus. Diese wird standardmäßig von den meisten Transportcodes, so auch von DORT, berechnet. Der zeitabhängige Transportcode erlaubt es nun optional, nach Bestimmung der kritischen Regelstabposition eine zusätzliche adjungierte Rechnung durchzuführen und dann die Integrale über Raum, Winkel und Energie in Gleichung E-9 (Anhang E) durch Summation über alle diskretisierten Variablen zu bestimmen.

Anzahl (thermischer) Energiegruppen	Prompte Lebensdauer ($\mu\text{sec.}$)	Prompte Lebensdauer ($\mu\text{sec.}$), zonenweise	Effektiver Anteil verzögerter Neutronen ($\cdot 10^{-3}$)
4(1)	423,1	617,5	7,0341
11(3)	607,8	641,2	7,4534
12(4)	624,9	645,0	7,4593
16(5)	628,1	650,6	7,4834
20(10)	656,2	659,8	7,5387
44(22)	660,7	660,3	7,5431

Tabelle 6-8: Punktkinetische Parameter für verschiedene Gruppenanzahlen; für die prompte Lebensdauer ist sowohl der globale Gruppenwert als auch der zusätzlich räumlich gewichtete Wert angeführt.

Der effektive Gesamtanteil der verzögerten Neutronen ist in Tabelle 6-8 für verschiedene Gruppenanzahlen angegeben und ist gegenüber dem physikalischen Anteil von $\beta = 6.834 \cdot 10^{-3}$ um etwa 10% erhöht. Die Variation mit einer Anzahl der Energiegruppen >10 ist dabei maximal 1%. Man beachte, daß die 4-Gruppenrechnung nicht in der Lage ist, diese Werte zu reproduzieren, da hier faktisch alle Spaltneutronen in den obersten zwei Gruppen

entstehen und nicht mehr sinnvoll zwischen verzögerten und prompten Neutronen unterschieden werden kann.

Zur Bestimmung des zweiten wichtigen punktkinetischen Parameters, der prompten Lebensdauer, benötigt man gemäß Beziehung E-9 die inversen Neutronengeschwindigkeiten. Diese werden bei der Querschnittserzeugung von XSDRNPM als über das Berechnungsgebiet fluß- und volumengemittelter globaler Gruppenwert errechnet; dies entspricht einer Regionwichtung (siehe Anhang B) über das gesamte Reaktorvolumen. Wie in [DÖD96] angemerkt, ist dies gerade bei der Verwendung weniger Energiegruppen keine gute Näherung, da der Effekt des „Absorption Heating“ in der Nähe starker Absorber das energetische Spektrum der Neutronen zu höheren Energien verschiebt. Es ist also u.U. notwendig, die Neutronengeschwindigkeiten nicht nur gruppenweise, sondern zusätzlich auch ortsaufgelöst zu betrachten. Dies kann im Rahmen der normalen Querschnittserzeugung geschehen, indem man den verschiedenen Materialzonen einer

XSDRNPM-Rechnung zusätzlich den von SCALE4.4 bereit-

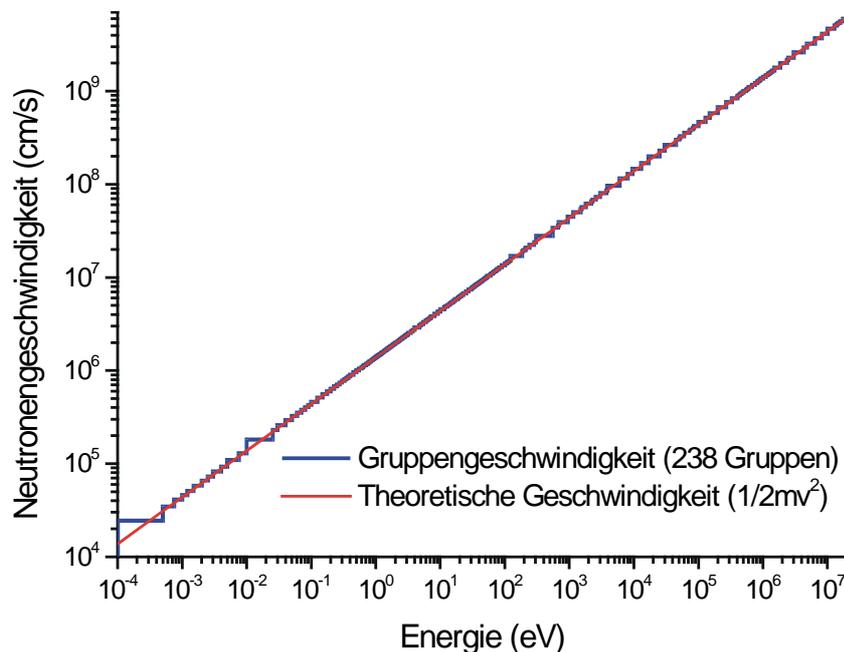


Abbildung 6-29: Neutronengeschwindigkeiten in einer 238-Energiegruppendarstellung; zum Vergleich ist die aus der kinetischen Energie $1/2mv^2$ berechnete Geschwindigkeit zusätzlich angegeben.

gestellten $1/v$ -Absorber (in sehr geringer Konzentration) beimischt. Dadurch bleibt das Flußspektrum im wesentlichen ungestört, die $1/v$ -Querschnitte können nun aber ebenso wie jeder andere Materialquerschnitt auf wenige Gruppen kondensiert und zonengewichtet werden. Normiert werden die Querschnitte dann anhand einer 238-Gruppenrechnung, in der räumliche Effekte keine Rolle spielen und die nichtrelativistische Neutronengeschwindigkeit gemäß $mv^2/2$ berechnet werden kann (siehe Abbildung 6-29).

Für eine 4(1)-Gruppenrechnung sind die in 1D-XSDRNPM-Rechnungen ermittelten Geschwindigkeiten für die Gruppen 3 und 4 in Abbildung 6-30 dargestellt. Entsprechend dem Kondensierungsschema wurden zwei separate Rechnungen mit Hafnium als Absorber bzw. Beryllium als Innenmoderator durchgeführt. Zusätzlich eingezeichnet ist die von XSDRNPM berechnete globale Gruppengeschwindigkeit. Sowohl in Gruppe 3 als auch in Gruppe 4 er-

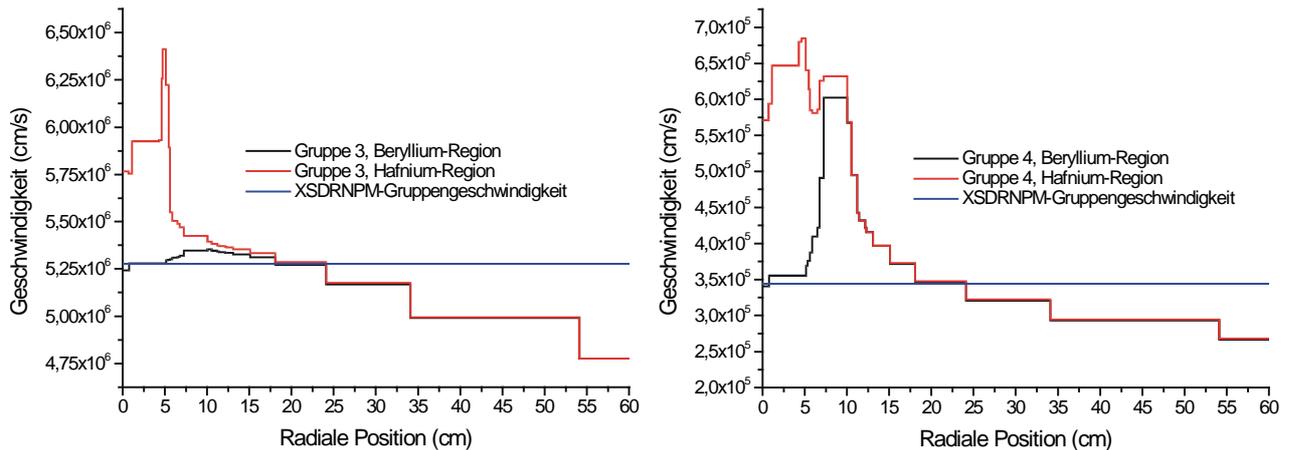


Abbildung 6-30: Räumlich variable Gruppengeschwindigkeiten als Resultat von XSDRNPM-Rechnungen für 4 Gruppen; links: Gruppe 3; rechts: Gruppe 4

kennt man deutlich die starke Überhöhung in der Brennstoffzone und insbesondere in der Hafniumregion. Dadurch variieren die Geschwindigkeiten in der thermischen Gruppe um nahezu einen Faktor drei. Es ist offensichtlich, daß die Verwendung der globalen Geschwindigkeit in 4-Gruppendarstellung bei der Berechnung der prompten Lebensdauer zu erheblichen Fehlern führen kann.

Geht man hingegen zu mehreren (>2) thermischen Gruppen über, ändert sich dieses Bild beträchtlich. Die Gruppengeschwindigkeiten variieren dann über den gesamten Rechenbereich nur noch um max. 20% (wobei sich die maximale Abweichung vor allem in direkter Umgebung des Hafnium-Absorbers ergibt). Trotzdem wurde die optionale Verwendung orts aufgelöster Geschwindigkeiten in den zeitabhängigen Transportcode implementiert. Zur Verfügung gestellt werden muß dann lediglich eine weitere Querschnittsbibliothek mit den zonengewichteten $1/v$ -Querschnitten sowie eine Angabe, in welcher geometrischen Zone welches $1/v$ -„Nuklid“ verwendet werden soll. Nach wie vor besteht natürlich auch die Möglichkeit, globale Gruppengeschwindigkeiten zu verwenden. In den im nächsten Kapitel diskutierten Transientenanalysen werden sowohl globale als auch zonenaufgelöste Geschwindigkeiten verwendet. Während bei prompt kritischen Transienten durchaus signifikante Unterschiede zwischen diesen beiden Verfahrensweisen auftreten, ist der Effekt für verzögert kritische Fälle vernachlässigbar.

Berechnet man schließlich die prompten Lebensdauern mittels der globalen bzw. orts aufgelösten Geschwindigkeiten, ergeben sich die in Tabelle 6-8 eingetragenen Werte. Während die Nutzung der globalen Werte bei Kondensierung auf 11 Gruppen immerhin in Abweichungen von etwa 10% resultiert, reduziert sich diese Differenz auf etwa 3% für die zonengewichteten Geschwindigkeiten. Die prompte Lebensdauer von $660 \mu\text{s}$ (in sehr guter Übereinstimmung mit [BÖN98]) ist groß verglichen mit konventionellen Leichtwasserreaktoren (etwa $60 \mu\text{s}$); dies hängt zusammen mit dem relativ langen Zeitraum, den die Neutronen im Mittel

während der Thermalisierung im Moderatortank verbringen, bevor sie in den Kern zurückdifundieren und dort erneut eine Spaltung auslösen.

Die in Tabelle 6-8 angeführten Parameter gelten durchweg für den kritischen Zustand; variiert man die Steuerstabposition, so ändern sich auch deren Werte. Für die prompte Lebensdauer sieht man dies wie folgt ein: bei weit ausgefahrenem Regelstab, d.h. einem vorwiegend durch Beryllium moderierten Kern, werden sich im Mittel mehr Neutronen im Kern aufhalten und bevorzugt im Beryllium statt im Schwerwasser moderiert werden. Durch die räumliche Nähe des Berylliums zum Brennstoff wird dann auch der Zeitraum bis zur erneuten Absorption, d.h. die Lebensdauer signifikant geringer sein. Ähnlich überlegt man sich für den effektiven Anteil verzögerter Neutronen, daß der „Vorteil“ der verzögerten Neutronen, bei niedrigeren Energien freigesetzt werden, um so mehr ins Gewicht fällt, je geringer die Chance der prompten Neutronen ist, dem Resonanzeinfang zu entkommen. Dies ist aber gerade dann der Fall, wenn im Mittel möglichst wenig Neutronen im Schwerwasser moderiert werden, d.h. bei weit ausgefahrenem Steuerstab. Dann verschiebt sich nämlich die Neutronendichte in Richtung Kern; würden hingegen alle Neutronen im Schwerwasser moderiert werden, so hätten prompte und verzögerte Neutronen die gleiche Chance, eine Kernspaltung hervorzurufen, und es gälte $\beta_{\text{eff}} = \beta$. Die entsprechenden Verläufe der punktkinetischen Parameter sind in Abbildung 6-31 gezeigt.

Für die prompte Lebensdauer mit Berücksichtigung der Einbauten im Moderatortank leitet man aus Monte-Carlo-Rechnungen einen Wert von 390 μs ab. Während dieser Wert bei verzögert kritischen Transienten eine eher untergeordnete Rolle spielt, wird er in prompt

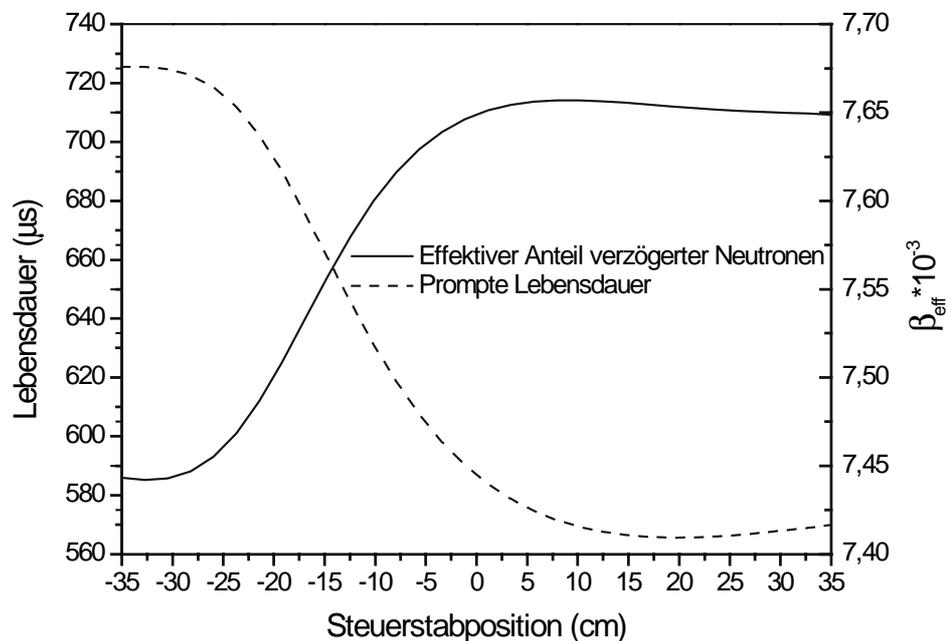


Abbildung 6-31: Abhängigkeit der punktkinetischen Parameter von der Steuerstabposition

kritischen Transienten bestimmend. Um daher dem Einfluß der Einbauten auf die Kinetik des Reaktors zumindest annähernd Rechnung zu tragen, wurde versucht, durch Beimischung von Strukturmaterial und einer entsprechenden Verdünnung des Schwerwassers (um die Vakuumbereiche in den Strahlrohren zu simulieren) die Lebensdauer von 660 auf 390 μs zu

reduzieren. Orientiert man sich an [RÖH90], so erreicht man mit einer Beimischung von 1.3% Aluminium und einer Verdünnung des Moderators um 10% (für das gesamte Schwervasservolumen außerhalb des Zylinders mit $r=25$ cm) tatsächlich einen Wert von $\Lambda = 387 \mu s$.

6.4 Zusammenfassung

Durch stationäre Analysen des FRM-II erhält man bereits wesentliche Hinweise für die Festlegung der Parameter in gekoppelten, zeitabhängigen Berechnungen. So konnte gezeigt werden, daß bei geeigneter Aufbereitung der Wirkungsquerschnitte für eine Energiegruppenanzahl von 12-16 Gruppen (mit 3-5 thermischen Gruppen) und eine recht niedrige Quadraturordnung (P_1S_4) die Flüsse, Leistungsverteilungen und Eigenwerte des FRM-II mit ausreichender Genauigkeit berechnet werden können. Mit diesen Vorgaben wurden umfangreiche Querschnittsbibliotheken erstellt, die den thermohydraulischen Zustand des Kerns abdeckend erfassen. Diese Bibliotheken wurden benutzt, um Reaktivitätskoeffizienten und punktkinetische Parameter für Vergleichsrechnungen zu ermitteln.

Ferner wurde die Modellierung der Steuerstabstellung durch stationäre Rechnungen überprüft. Für die Transientenanalyse ist es von großer Bedeutung, daß dieses Regelement so exakt wie möglich erfaßt wird. Die beste Beschreibung wird mit einer dynamischen Anpassung der Maschenweiten erreicht.

Die Diffusionsnäherung wurde mit den Ergebnissen von Transportrechnungen verglichen. Je nach Aufbereitung der Gruppendiffusionskonstanten erreicht man gute Übereinstimmung von Diffusions- und Transportresultaten entweder für die Reaktoreigenwerte oder für die Leistungsverteilungen. So ergeben sich für die diagonale Diffusionsnäherung zwar Abweichungen von ca. 1,5-2% im effektiven Multiplikationsfaktor, die Leistungsverteilungen im Brennstoff sind aber über weite Teile des Kerns in guter Übereinstimmung. Größere Abweichungen findet man lediglich in den schnellen Flüssen, insbesondere in der direkten Umgebung des Brennstoffs und des Regelstabs.

Zusammenfassend läßt sich festhalten, daß sowohl die erzeugten Querschnitte als auch die geometrische Modellierung des FRM-II durch stationäre Rechnungen gründlich überprüft wurden, um sie in Transientenrechnungen einzusetzen.

7 Kopplung der Neutronenkinetik mit einem Thermohydraulik-Modell für den FRM-II

Für eine realistische Beschreibung von Störfallszenarien des FRM-II ist es unerlässlich, neben den neutronenkinetischen Prozessen im Kern auch die Thermofluidynamik der Kühlmittelströmung und die daraus resultierenden Rückwirkungseffekte angemessen zu erfassen. Die Kopplung des zeitabhängigen Neutronentransportprogramms mit dem an der GRS entwickelten Thermohydraulikcode ATHLET ist Gegenstand des vorliegenden Kapitels. Dargestellt wird zunächst das allgemeine Ablaufschema einer gekoppelten, zeitabhängigen Rechnung und die in beiden Codes notwendigen programmtechnischen Erweiterungen. Anschließend wird die Abbildung der fluiddynamischen Verhältnisse des FRM-II-Kerns auf ein geeignetes ATHLET-Modell beschrieben und die thermohydraulischen Besonderheiten des Systems aufgezeigt, wobei insbesondere auf das bei Forschungsreaktoren wichtige Phänomen der Strömungsinstabilitäten eingegangen wird.

Mit dem gekoppelten Programmmodell wird dann der stationäre Betriebszustand des Reaktors im Detail dargestellt; dieser dient stets als Ausgangspunkt für Transientenberechnungen, denen das anschließende Kapitel 8 gewidmet ist.

7.1 Berechnungsschema der gekoppelten Analysen

Für gekoppelte Transientenanalysen hat es sich als sinnvoll erwiesen, das gesamte Transport- bzw. Diffusionsprogramm als Unterroutine des ATHLET-Codes zu implementieren. Dies hat den großen Vorteil, daß dem Anwender die gesamte ATHLET-Anwenderumgebung samt grafischer Visualisierungswerkzeuge und „Post-Processing“-Tools zur Verfügung steht. Die Routinen zur Einbindung einer mehrdimensionalen Neutronenkinetik in ATHLET wurden bereits zu einem früheren Zeitpunkt für den Code QUABOX/CUBBOX entwickelt [LAN96, LAN98] und konnten mit geringfügigen Modifikationen übernommen werden. Ergänzt werden mußten lediglich die Eingabefelder im ATHLET-Input sowie Programmteile für den Datenaustausch zwischen Neutronenkinetik und Thermohydraulik.

Eine Übersicht über das Berechnungsschema des vollständigen Programmsystems gibt Abbildung 7-1. Jede Analyse beginnt mit einer Startrechnung, in der der stationäre Systemzustand iterativ aus Thermohydraulik und Neutronenkinetik ermittelt wird und dann als Ausgangszustand für die Transientenberechnung dient. Die Berechnungen innerhalb eines transienten Zeitschritts gliedern sich dann zunächst in zwei separate Datenströme:

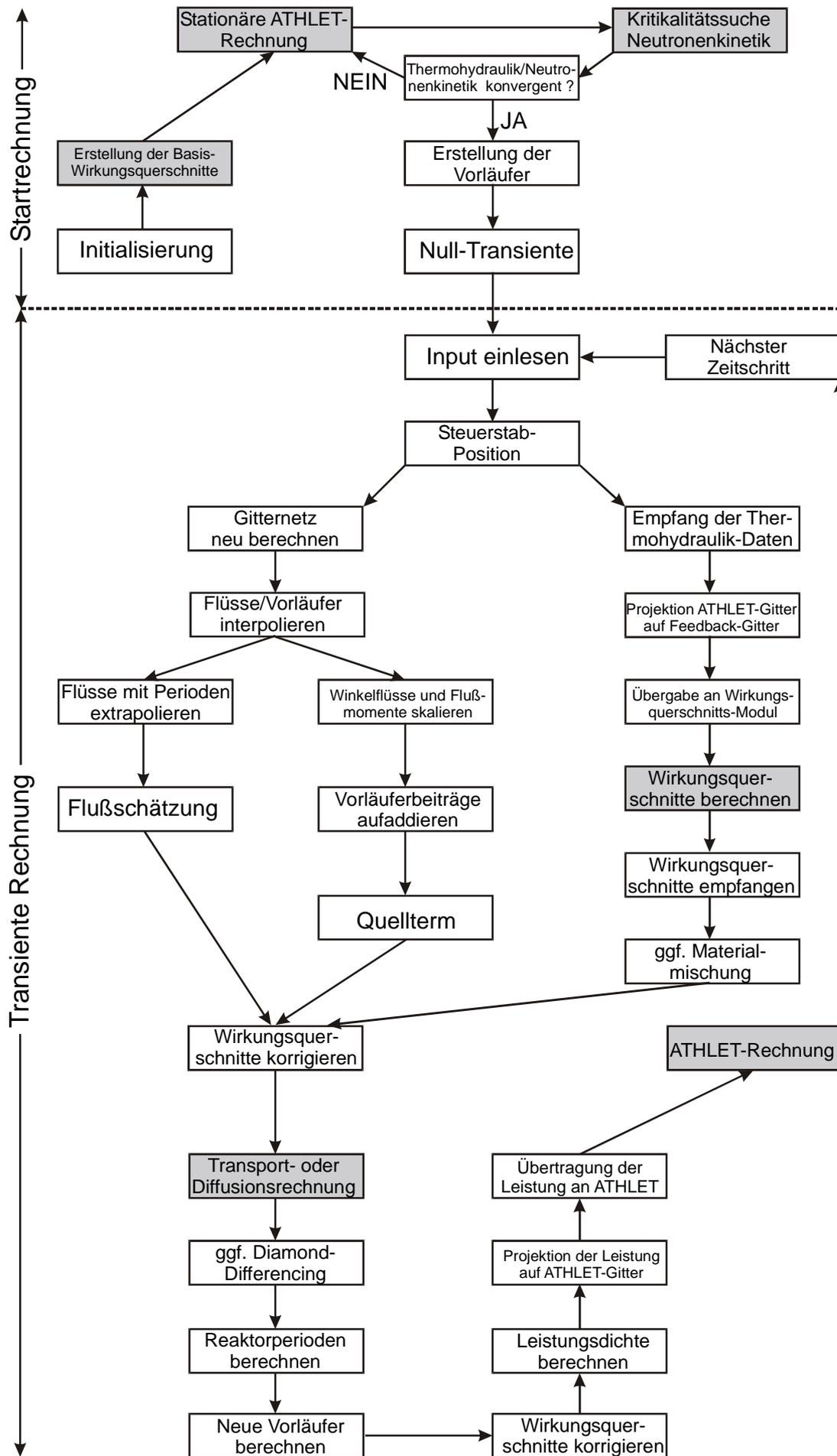


Abbildung 7-1: Ablaufschema der gekoppelten Analysen im DORT/ATHLET-Programmmodell

Im linken Ast in Abbildung 7-1 findet die Vorbereitung der Transport-/Diffusionsrechnung statt, d.h. die Neuberechnung der Geometrie sowie die Erstellung von Flußabschätzung und Quellterm (siehe Kapitel 5), während die rechte Seite die für die Kopplung relevanten Schritte zeigt, d.h. den Datenaustausch zwischen ATHLET, Neutronenkinetik und Wirkungsquerschnittsmodul sowie die Erstellung der Querschnitte. Die darauf folgenden eigentlichen neutronenkinetischen Berechnungen (Diskrete-Ordinaten-Rechnung, Erstellung neuer Reaktorperioden, Ermittlung der Vorläuferkonzentrationen usw.) sind bereits in Kapitel 5 ausführlich diskutiert worden. In jedem Zeitschritt erfolgt schließlich die Übergabe der ermittelten nuklearen Leistungsverteilung an ATHLET und die thermofluiddynamische Berechnung. Die rechenzeitintensiven Programmteile sind im Bild grau hinterlegt.

In der stationären Startrechnung wird dem Code ATHLET zur Verbesserung der Konvergenz bereits im Eingabedatensatz ein ungefähres Leistungsprofil des betrachteten Systems mitgeteilt, das z.B. aus vorab durchgeführten stationären Auslegungsrechnungen stammen kann. So kann ATHLET bereits eine erste Abschätzung der thermohydraulischen Verhältnisse im Reaktorkern ermitteln. Die für die Neutronenkinetik wesentlichen Größen Kühlmitteltemperatur, Kühlmitteldichte und Brennstofftemperatur werden dann weitergereicht an das Modul zur Bestimmung der Wirkungsquerschnitte, das bei Programmstart die Basisbibliotheken einliest und die zur Interpolation notwendigen Polynomfunktionen (siehe Anhang D) errechnet. Für den aktuellen Systemzustand wird nun die entsprechende Querschnittsbibliothek erstellt und an den Transportcode weitergegeben, der damit eine Kritikalitätsrechnung durchführt. Der resultierende Reaktoreigenwert wird i.allg. ungleich eins sein, d.h. der Reaktor ist nicht genau kritisch, wie es beim Start einer Transiente erwünscht wäre. Nach einer entsprechenden Korrektur der Steuerstabposition wird die ermittelte Leistungsdichte an ATHLET zurückgegeben, der daraufhin eine „verbesserte“ Berechnung des Systemzustands durchführt. Dieser Prozeß wird mehrfach durchlaufen; erst wenn der effektive Multiplikationsfaktor hinreichend nahe bei eins liegt, wird eine Steuerstabsuche gestartet, die versucht, die exakt kritische Position des Regelstabs zu ermitteln. Es hat sich gezeigt, daß diese Suche bereits nach der zweiten Iteration zwischen Neutronenkinetik und Thermohydraulik begonnen werden kann. Danach liegen sowohl die thermohydraulischen Zustandsvariablen des Systems als auch der effektive Multiplikationsfaktor, die Neutronenflüsse und die Leistungsdichte im konvergierten Zustand vor. Es sei hier ausdrücklich betont, daß eine gute Konvergenz dieser Startrechnung Voraussetzung für die Transientenanalyse ist. Im Anfangszustand wird der Eigenwert auf 1.0 ± 10^{-8} , die Gruppenflüsse auf besser als $5 \cdot 10^{-7}$ und die Spalt- bzw. Leistungsdichte auf mindestens $5 \cdot 10^{-8}$ konvergiert. Aus der Spaltdichte kann dann auch die stationäre Konzentration der Vorläufer bestimmt werden. Zur korrekten Bestimmung der Leistungsdichte, des Eigenwerts und der Vorläuferanteile ist es ferner wesentlich, daß die verzögerten Spektren bereits in der stationären Rechnung explizit berücksichtigt werden.

Der Zustand des Reaktors wird nun mit einer sog. Nulltransiente, d.h. einer zeitabhängigen Rechnung ohne Änderung des Systemzustandes, „getestet“. Tatsächlich ist der Übergang von der stationären Rechnung in den zeitabhängigen Berechnungsmodus ein kritischer Zeitpunkt während der Transientenanalyse: mathematisch gesehen wird die Berechnungsvorschrift von einem homogenen Eigenwertproblem in ein inhomogenes Problem mit dem Quellterm $(1/v\Delta t)\psi$ umformuliert, der totale Querschnitt und das Spaltspektrum werden (insbesondere bei kleinen anfänglichen Zeitschritten) u.U. drastisch modifiziert. Trotzdem muß die Teilchenzahlbilanz im System genau erhalten bleiben. Bei der Entwicklung des transienten Transportcodes wurde daher streng darauf geachtet, daß das System während der Nulltransiente seinen Zustand weitestgehend beibehält. Folgerichtig sind die innerhalb dieses Zeitraums ermittelten globalen Reaktorperioden ω i.allg. sehr groß: bei einer Rechnung ohne Rückwirkungen, d.h. mit dem Transportprogramm allein, erreicht man Werte von $\omega \approx 10^8$ s und mehr; dies entspricht Reaktorperioden von mehreren Jahren. Im gekoppelten Modell wird dieser Betrag aufgrund der gegenseitigen Beeinflussung von Neutronenkinetik und ATHLET auf $\omega \approx 10^6$ s reduziert; verglichen mit den Zeitskalen, auf denen die Transientenanalysen durchgeführt werden (bis zu 100 Sekunden) ist ein solcher Wert jedoch ausreichend.

Nach Ablauf der Nulltransiente (üblicherweise 10 Sekunden Problemzeit, in denen sich die Leistung des Reaktors i.allg. um weniger als 10 Watt bei Nennleistung ändert) wird der eigentliche transiente Vorgang ausgelöst. Dies kann z.B. geschehen durch Verfahren des Steuerstabs, durch Reduktion des Kühlmitteldurchsatzes oder durch Veränderung der Eintrittstemperatur des Kühlmittels. Es sollte darauf geachtet werden, daß ggf. per Eingabe die maximale Zeitschrittweite unmittelbar vor diesem Zeitpunkt stark reduziert wird, da es sonst geschehen kann, daß der Code mit den während der Nulltransienten errechneten (naturgemäß großen) Zeitschritten versucht, in den instationären Zustand „hinein“ zu rechnen.

Findet während der Transiente eine Steuerstabbewegung statt, so ist ggf. das Gitter der Neutronenkinetik neu zu berechnen und die in Abschnitt 6.3.5 erläuterte Anpassung der Flußwerte des vergangenen Zeitschrittes an das neue Maschengitter vorzunehmen. Erst nach dieser Interpolationsprozedur wird eine Kopie der Flüsse und Momente angelegt, die dann mit $(1/v\Delta t)$ skaliert werden. Diese stehen dann nach Aufaddierung der Vorläuferterme (siehe Abschnitt 4.5) als Quellterm zur Verfügung. Die Originalflüsse werden hingegen mit Hilfe der im letzten Zeitschritt ermittelten Reaktorperioden zum nächsten Zeitschritt extrapoliert (siehe Abschnitt 5.5) und nach Konvertierung in Momentenform dem Transportcode als Flußschätzung übergeben.

Die zweite wesentliche Aufgabe innerhalb eines Zeitschrittes ist die dem Systemzustand angemessene Aufbereitung der Wirkungsquerschnitte, die als separater Datenstrom in Abbildung 7-1 angedeutet ist. Zur Darstellung der Rückwirkungseffekte werden im gekop-

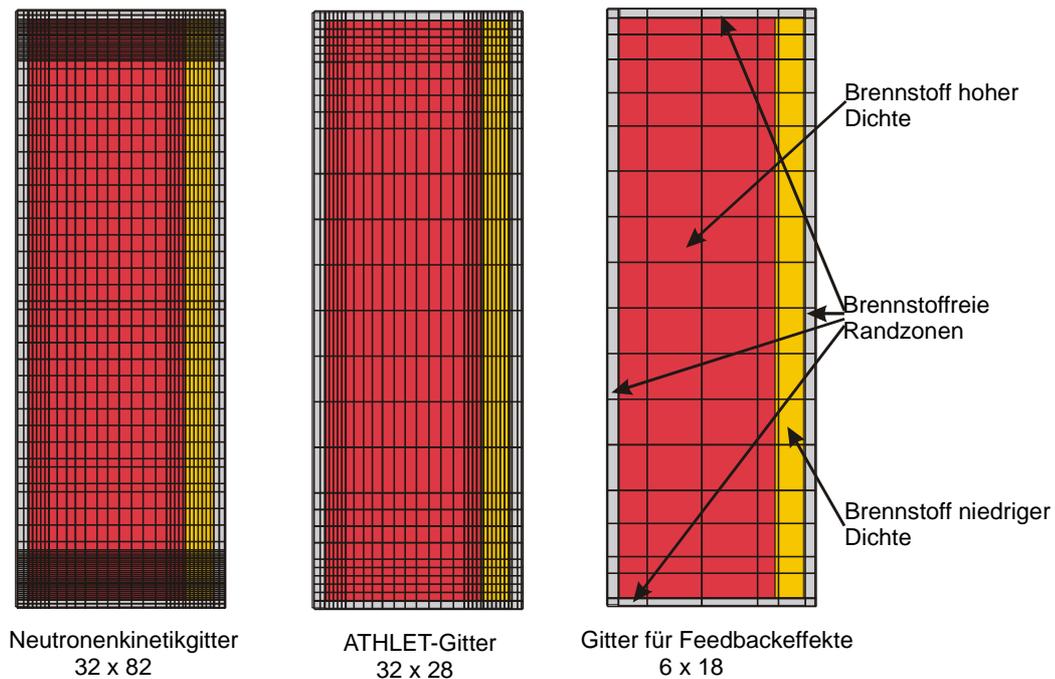


Abbildung 7-2: Die im gekoppelten Programmmodell verwendeten Gitter. Links: das von Transport- und Diffusionscode verwendete Neutronenkinetikgitter; Mitte: die vom ATHLET-Code verwendete Nodalisierung; rechts: die Einteilung des FRM-II-Brennstoffbereichs in Material- bzw. Rückwirkungs-zonen mit jeweils individuellen Querschnittssätzen.

pelten Codesystem insgesamt drei verschiedene Maschengitter zur Beschreibung der Materialregionen verwendet, in denen variable Querschnitte generiert werden sollen. Wie bereits in Abschnitt 6.2.4 beschrieben, wird für den FRM-II nur der Brennstoffbereich samt dem oberen und unteren Plenum einer solchen Behandlung unterzogen.

In Abbildung 7-2 sind diese Gitter veranschaulicht; die Brennstoffbereiche hoher und niedriger Dichte sind rot bzw. gelb hinterlegt. Ferner werden auch die brennstofffreien Randbereiche (im Bild grau) in die Simulation mit einbezogen.

Auf dem feinen Neutronenkinetikgitter wird die lokale Leistungsdichte berechnet, die dann auf das wesentlich gröbere ATHLET-Gitter projiziert werden muß. Der Code ist so flexibel programmiert, daß die Gittereinteilungen nicht miteinander übereinstimmen müssen; ggf. kann über mehrere oder auch nur über Teilmaschen gemittelt werden. Die auf dem ATHLET-Gitter bestimmten thermohydraulischen Parameter müssen dann zur Übergabe an das Wirkungsquerschnittsmodul wiederum über größere Materialbereiche zusammengefaßt und volumengewichtet werden. Diese Regionen sind im rechten Gitter erkennbar; ihre Zahl wurde relativ gering gewählt, um den Aufwand für die Speicherung und Interpolation der Querschnitte in einem erträglichen Maß zu halten, da jeder dieser Zonen ein individueller, separater Querschnittssatz zugewiesen werden muß. Die Einteilung dieser verschiedenen „Rückwirkungs-zonen“ muß im Gegensatz zum ATHLET-Gitter eine echte Vergrößerung des Neutronenkinetikgitters sein, um den einzelnen Feinmaschen eindeutig die entsprechenden Materialien bzw. Querschnitte zuweisen zu können.

Obwohl im obigen Bild scheinbar alle Gitter dieselbe räumliche Ausdehnung besitzen, soll hier nicht unerwähnt bleiben, daß das ATHLET-Gitter sich nicht wie die anderen beiden Gitter radial über den räumlich homogenisierten Brennstoffbereich erstreckt, sondern statt dessen eine Darstellung eines der 113 evolventenförmig gekrümmten Kühlkanäle repräsentiert und daher in radialer Richtung größere Ausmaße (~ 7 cm) besitzt. Dies erschwert zusätzlich die Projektion der Leistungsdichte auf die ATHLET-Maschen und wird im folgenden Abschnitt näher erläutert.

7.2 Modellierung des Reaktorkerns mit ATHLET

Zur Vervollständigung des gekoppelten Modells ist es notwendig, den aktiven Teil des Reaktorkerns in ATHLET zu modellieren. Aufgrund der Rotationssymmetrie ist es ausreichend, lediglich einen der insgesamt 113 Kühlkanäle abzubilden. Hierzu wurde ein Modell mit eindimensionalen Parallelkanälen gewählt, in die der Kühlspace entlang der durch die Brennstoffplatten vorgegebenen Richtung eingeteilt wird.

Die verwendete Geometrie ist in Abbildung 7-3 dargestellt. Der etwa 7 cm breite Kühlkanal wurde in 32 Unterkanäle eingeteilt, und zwar so, daß die Kanalbegrenzungen stets senkrecht zu den Brennstoffplatten orientiert sind. Die Randkanäle 1 und 32 liegen größtenteils innerhalb der brennstofffreien Randzone und sind daher nur schwach beheizt, der Dichtesprung befindet sich in den Unterkanälen 21 und 22. Obwohl nicht zwingend erforderlich, fallen in diesem Modell die Zentren der 32 Kanäle mit den Mittelpunkten der Neutronenkinetikmaschen zusammen. Bei der Übertragung der nodalen Leistungen an ATHLET und der Rückgabe der thermohydraulischen Parameter an die Neutronenkinetik sind nun einige wesentliche Punkte zu beachten, die mit der Evolventenform der Brennstoffplatten zusammen-

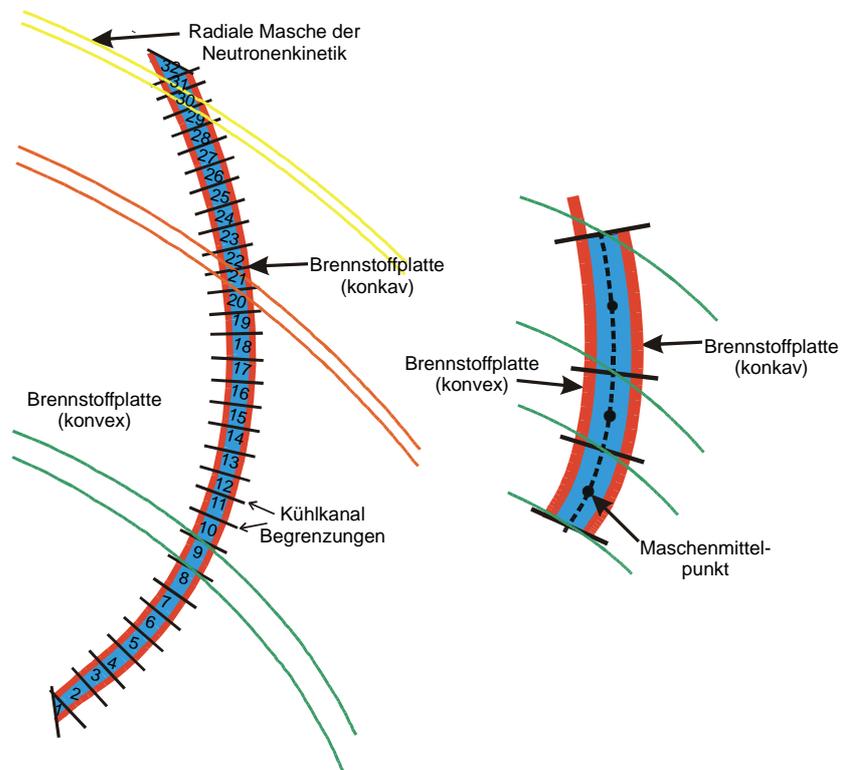


Abbildung 7-3: Definition der Kühlkanäle im ATHLET-Modell

zusammenhängen und deren Vernachlässigung zu erheblichen Fehlern führen kann:

- Durch die Wahl der Kanalbegrenzungen sind die Unterkanäle keine echten Rechteckkanäle, sondern haben eine gekrümmte Trapezform (siehe Abbildung 7-3 rechts), wobei die Differenz der beiden Seitenlängen für einige Kanäle bis zu 10% betragen kann. Es ist daher notwendig, eine Unterscheidung in konvexe und konkave Platte hinsichtlich des Wasserspalts vorzunehmen. Die Beheizung der beiden Seiten wird dadurch unterschiedlich sein.
- Die von der Neutronenkinetik durchgeführte Leistungsberechnung bezieht sich immer auf das rotationssymmetrische, homogenisierte Brennstoffgemisch. Die Leistung wird aber tatsächlich nicht in diesem Gemisch, sondern ausschließlich im uranhaltigen Anteil der Brennstoffplatten freigesetzt, der nur ca. 16% des aktiven Kernbereichs beansprucht; es muß also vorweg eine Skalierung der Leistung um diesen Faktor erfolgen. Aufgrund der Periodizität des FRM-II-Brennstoffgitters darf in die Berechnung der nodalen Leistung außerdem nur der Wert der halben konvexen/konkaven Brennstoffplatte einfließen.
- Die Definition der Unterkanäle deckt sich geometrisch nicht mit der Definition der radialen Maschen der Neutronenkinetik, wie in Abbildung 7-3 ersichtlich, obwohl die Mittelpunkte jeweils zusammenfallen. Die konvexen und konkaven Seiten der Unterkanäle werden daher immer auch von den neutronenkinetischen Nachbarmaschen „mitbeheizt“, wobei die konvexe Seite Beiträge von der radial weiter innen liegenden, die konkave Seite hingegen von der radial außen angrenzenden Masche erhält. Diese Tatsache bewirkt insbesondere Unterschiede in der Nähe des Dichtesprungs und in den Kanälen nahe am Rand des Brennstoffbereichs. So liegt z.B. die konkave Seite von Unterkanal 31 bereits im brennstofffreien Randbereich, die konvexe Seite dagegen wird noch beheizt. Eine Übertragung der 32 radialen Leistungsdichten auf die entsprechenden Unterkanäle erfordert also die beschriebenen Korrekturen.

Es ist daher erforderlich, die Schnittpunkte der Evolventen mit den konzentrischen Kreisringen der Neutronenkinetik zu bestimmen und eine eindeutige Zuordnung der entsprechenden Volumina und der Leistungen an die konvexe und konkave Seite der Unterkanäle vorzunehmen. Diese Berechnungen werden bei Start des gekoppelten Programmsystems durchgeführt und die jeweils anteiligen Faktoren bestimmt, mit denen eine radiale Masche sich an verschiedenen Kühlkanälen „beteiligt“. Dabei wird zunächst explizit zwischen konvexer und konkaver Geometrie unterschieden. Da aber in ATHLET die Definition eines Kühlkanals mit unterschiedlich beheizten Seiten sehr kompliziert ist, wird anschließend der Mittelwert aus beiden Größen gebildet und an ATHLET übergeben. Durch diese Vereinfachung wird über weite Bereiche die tatsächlich an der konvexen Platte auftretende Wärmestromdichte um einige Prozent unterschätzt, während die auf der konkaven Seite überhöht ist; der Gesamtwärmeeintrag ins Kühlmittel, der von der Beheizung durch beide Kanalseiten stammt, wird jedoch auf jeden Fall korrekt wiedergegeben.

In Abbildung 7-4 sind die aus dieser Umrechnung resultierenden (hier axial über den gesamten Kern gemittelten) Wärmestromdichten für die konvexen und konkaven Plattenseiten der 32 Unterkanäle dargestellt, aufgetragen jeweils über die zentrale Länge des Kühlspalts, die in Abbildung 7-3 rechts durch die gestrichelte Linie angedeutet ist. Man erkennt deutlich die gegenseitige Verschiebung der beiden Profile zueinander. Diese Verschiebung bewirkt eine „Verschmierung“ des an ATHLET übergebenen Mittelwerts, der ebenfalls in Abbildung 7-4 eingezeichnet ist, so daß die Leistungsspitzen, die sich am Dichtesprung sowie am Außenrand des Kerns befinden, bis zu einem gewissen Grad abgebaut werden.

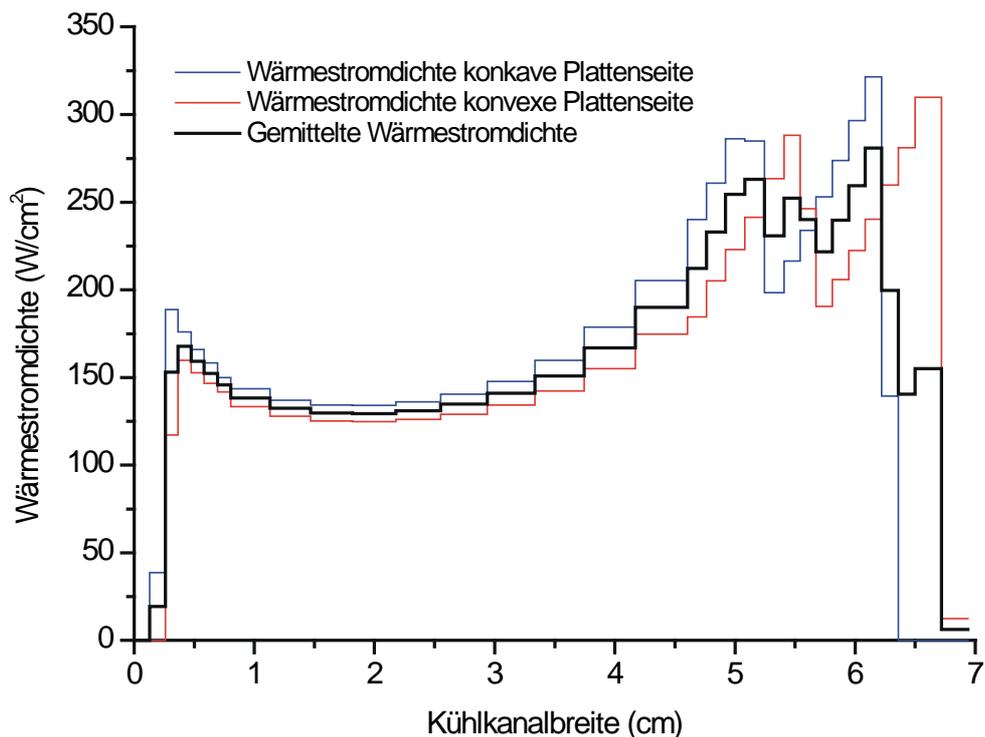


Abbildung 7-4: : Axiale gemittelte Leistungs- bzw. Wärmestromdichte für konvexe und konkave Seite sowie deren Mittelwert, aufgetragen über der Zentrallinie des Kühlkanals

Diese Verschmierung wird besonders augenscheinlich, wenn man die von der Neutronenkinetik ermittelte Leistungsdichte direkt in eine radiale Wärmestromdichte umrechnet, ohne die oben genannten Korrekturen durchzuführen. Ein Vergleich der unkorrigierten Wärmestromdichte mit der korrigierten Form zeigt Abbildung 7-5; neben einem Abbau der Leistungsspitzen wird auch das gesamte Profil etwas in der Breite gedehnt, so daß nun auch die Ränder des Brennstoffbereichs Leistung empfangen, die bei einer direkten radialen Übertragung leistungslos geblieben wären. Außerdem verschiebt sich der sog. „Heißkanal“ weiter ins Kerninnere; in diesem Fall ist es der Kanal 28, der in dem in Abbildung 7-5 dargestellten (axial über den Kern gemittelten) Profil den größten Wärmeeintrag erfährt.

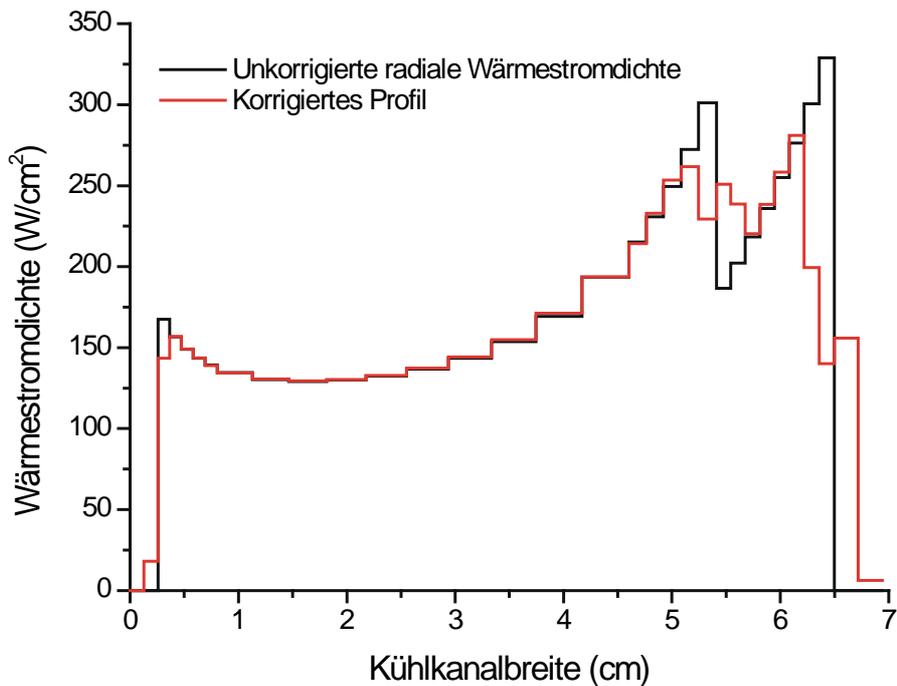


Abbildung 7-5: Aus der Neutronenkinetik direkt ermittelte Wärmestromdichte im Vergleich mit der korrigierten Form

An dieser Stelle muß auf eine der wesentlichen Schwächen des thermohydraulischen Modells hingewiesen werden. Da die Modellierung in ATHLET grundsätzlich eindimensional ist, kann transversale Wärmeleitung entlang der Oberfläche der Brennstoffplatten weder in axialer noch in radialer Richtung erfaßt werden; berechnet wird lediglich der eindimensionale Wärmeübergang vom Inneren der Brennstoffplatte an das Kühlmittel. Die an ATHLET übergebene Leistung wird also direkt in eine Wärmestromdichte umgewandelt. Tatsächlich führt aber die transversale Wärmeleitung zu einem verstärkten Abbau der Leistungsspitzen; da die Leistungs- und damit Temperaturgradienten gerade am Kernaußenrand und an der Heißstelle am größten sind, ist hier mit einer besonders starken Verringerung zu rechnen. Für den stationären Fall sind im Sicherheitsbericht [SIE93] Berechnungen mit einem 3D-Wärmeleitungsmodul durchgeführt worden; dabei stellte sich heraus, daß die Berücksichtigung dieses Effekts die Position des Heißkanals in die Nähe des Dichtesprungs verschiebt. Die Implementierung eines mehrdimensionalen Wärmeleitungsmodells in ATHLET ist jedoch nur sehr schwer zu realisieren und würde insbesondere in Transientenanalysen einen erheblichen zusätzlichen Rechenaufwand bedeuten. Die in dieser Arbeit verwendete Vorgehensweise ist jedoch auf jeden Fall konservativ, da die Wärmestromdichte durch Vernachlässigung der transversalen Wärmeleitung an den kritischen Stellen zu hoch eingeschätzt wird. Man muß lediglich berücksichtigen, daß die Position des Heißkanals u.U. nicht korrekt ist; wie in [SIE93] gezeigt wird, bewegen sich die Wärmestromdifferenzen zwischen den Kanälen am Kernaußenrand und den am Dichtesprung befindlichen im Bereich einiger Prozent; dagegen wird die Wärmestromdichte des in dieser Arbeit ermittelten Heißkanals 28 um etwa 6% höher eingeschätzt als die des Kanals 21 am Dichtesprung.

Die Aufteilung der 32 Unterkanäle in Strömungsrichtung erfolgt in insgesamt 28 axiale Nodes; ähnlich wie in der Neutronenkinetik wurde auch hier darauf geachtet, am oberen und unteren Kernende eine etwas feinere Mascheneinteilung zu wählen, um die Leistungs- und Temperaturspitzen genau zu erfassen. Diese Einteilung ist in Abbildung 7-2 Mitte recht deutlich zu erkennen. Um Druckausgleich zwischen den 32 Parallelkanälen herzustellen und damit einen einheitlichen Druckabfall über den Kern zu gewährleisten, bietet ATHLET die Option, die verschiedenen axialen Maschen durch sog. „Cross Connections“ zu verknüpfen, über die dann ein Queraustausch des Fluids stattfinden kann. Dies ist die einzige Möglichkeit in ATHLET, ein System aus 1D-Parallelkanälen zumindest quasi-zweidimensional zu beschreiben.

Bei der Rückprojektion der thermohydraulischen Parameter auf die „Rückwirkungszone“ zur Bestimmung der Wirkungsquerschnitte wurde umgekehrt vorgegangen wie oben für die Umrechnung der Leistung von Radial- auf Evolventengeometrie. Auch hier muß beachtet werden, daß die Rückwirkungszone nicht deckungsgleich sind mit den ATHLET-Unterkanälen; aufgrund der wesentlich größeren Einteilung in nur 6x18 Zonen sind allerdings etwaige „Verschmierungs“-Effekte durch die Mittelung über mehrere Unterkanäle gering.

7.3 Thermohydraulische Besonderheiten des FRM-II-Kerns

Der Reaktorkern des FRM-II weist hinsichtlich der Thermofluidynamik einige Besonderheiten auf, die ihn von Druck- oder Siedewasserreaktoren wesentlich unterscheiden und die im Folgenden kurz kommentiert werden sollen.

Die Kühlmittelströmung im Kern ist charakterisiert durch sehr hohe Kühlmittelgeschwindigkeiten (~ 17 m/s), einen niedrigen Systemdruck ($\sim 2-11$ bar) und durch eine starke Unterkühlung von etwa 140 K am Kerneintritt und 70 K am Kernaustritt. Darüber hinaus sind die parallelen Kühlkanäle des FRM-II mit 2,2 mm recht schmal und werden auf ihrer gesamten Länge (700 mm) stark und sehr ungleichmäßig beheizt.

Während bei den für Leistungsreaktoren typischen Systemdrücken und Kühlmittelgeschwindigkeiten die kritische Heizflächenbelastung (DNB bei Druckwasserreaktoren, „Dryout“ bei Siedewasserreaktoren) das Kriterium bei der Auslegung darstellt, wird für Hochfluß-Forschungsreaktoren das Einsetzen der Strömungsinstabilität als Auslegungskriterium gewählt.

Für schwach- oder unbeheizte Systeme ist der Druckabfall in einem Fluidkanal eine monoton steigende, i.allg. quadratische Funktion des Durchsatzes. In stark beheizten Systemen kann es hingegen bei Unterschreitung eines bestimmten Massenstroms (oder äquivalent dazu, bei Überschreitung einer gewissen Wärmestromdichte) zu signifikanter Verdampfung und Ausbildung einer Zweiphasenströmung kommen, die trotz sinkenden Durchsatzes zu einer Erhöhung des Druckverlustes über die Kanallänge führt. Diese Druckverluste werden durch die

hohen Reibungs- und Beschleunigungsanteile der Zweiphasenströmung bewirkt, welche die der einphasigen Strömung weit übersteigen.

In Versuchen wurde gezeigt [MOR91], daß die thermohydraulische Instabilität bei niedrigen Systemdrücken (<20 bar) bereits weit unterhalb der Sättigungstemperatur des Fluids im sog. unterkühlten Siedebereich auftreten kann. Diese Situation ist auch für den FRM-II gegeben, da die Plattentemperaturen in Störfallsituationen durchaus die Sättigungstemperatur des Kühlmittels übersteigen können und es dann u.U. zu lokaler Dampfblasenbildung kommt. Steigt die Wärmestromdichte über einen kritischen Wert (OFI=“Onset of Flow Instability“), so beginnen sich die Dampfblasen von der Wand abzulösen und es kann zur Kühlkanalblockade mit anschließender Beschädigung der Kanalwände kommen: Der Durchsatz geht stark zurück und wird zweiphasig, der Wärmeübergang verschlechtert sich drastisch und die kritische Heizflächenbelastung wird überschritten. Solche Situationen sind unbedingt zu vermeiden, und es ist zu zeigen, daß der Reaktor unter allen denkbaren Störfallbedingungen stets sicher unterhalb des OFI-Kriteriums verbleibt.

Die numerische Simulation der Zweiphasenströmung im unterkühlten Siedebereich erfolgt mit einer Reihe empirischer Korrelationen, die jedoch meist nur für sehr eingeschränkte Parameterbereiche gültig sind. Darüber hinaus ist auch die experimentelle Datenbasis nicht besonders breit und teilweise widersprüchlich, so daß sich eine Anpassung der numerischen Beziehungen an Versuchsergebnisse sehr schwierig gestaltet.

Als sichere, wenn auch sehr konservative Auslegungsgrenze gilt das sog. η -Kriterium, das einen Sicherheitsabstand zum Einsetzen von Strömungsinstabilitäten vorhersagt und auch bei der Auslegung des FRM-II angewendet wurde. Der sog. Blasenablöseparameter η , der das mit Strömungsinstabilitäten korrelierte Ablösen der Dampfblasen von einer beheizten Fläche beschreibt, ist zunächst durch die folgende Beziehung definiert:

$$\eta = \frac{(T_S - T_F) \cdot v_F}{\dot{Q}} \quad (7-1)$$

mit der Sättigungstemperatur T_S , der lokalen Fluidtemperatur T_F (jeweils in K), der Fluidgeschwindigkeit v_F (in cm/s) und der Wärmestromdichte \dot{Q} (in W/cm²). Das Minimum dieses lokal definierten Ausdrucks darf einen bestimmten, empirisch zu bestimmenden Grenzwert nicht unterschreiten.

Aus zahlreichen Experimenten, die sich mit der Ermittlung der Stabilitätsgrenzen einer unterkühlten Strömung befassen, konnte η als eine Funktion der Kühlmittelgeschwindigkeit durch eine „Least Square“-Anpassung an die Meßergebnisse abgeleitet werden [MOR91]:

$$\eta_M = 21.3 + 0.008 v_F \quad [\eta] = \text{cm}^3 \cdot \text{K/J} \quad \sigma = 8.76 \text{ cm}^3 \cdot \text{K/J}. \quad (7-2)$$

σ bezeichnet hier die Standardabweichung, die aufgrund der stark streuenden Meßwerte sehr groß ist. Für die Auslegung einer kerntechnischen Anlage muß η_M nach dem 95/95-Kriterium der thermohydraulischen Auslegungsgrundsätze (d.h. mit 95% Sicherheit müssen Strömungsinstabilitäten für 95% aller Kanäle ausgeschlossen werden können) um $1,79\sigma$ angehoben werden [KTA80]. Daraus folgt:

$$\eta_A = 37.0 + 0.008 v_F. \quad (7-3)$$

Die Sicherheit gegen Strömungsinstabilitäten läßt sich nun definieren durch [SIE93]:

$$S_1 = \frac{\eta}{\eta_M} = \frac{(T_S - T_F) \cdot v_F}{21.3 + 0.008 v_F}, \quad (7-4)$$

wobei dann S_1 stets größer sein muß als:

$$S = \frac{\eta_A}{\eta_M} = \frac{37.0 + 0.008 v_F}{21.3 + 0.008 v_F}. \quad (7-5)$$

So gilt z.B. für $v_F = 12 \text{ m/s}$ $S = 1,51$. Da diese Definition geschwindigkeitsabhängig und daher schwer zu veranschaulichen ist, wird es in dieser Arbeit vorgezogen, folgende Definition zu verwenden:

$$S_2 = \frac{\eta}{\eta_A} = \frac{(T_S - T_F) \cdot v_F}{37.0 + 0.008 v_F}, \quad (7-6)$$

die stets $S_2 > 1$ erfüllen muß.

Der zweite thermohydraulisch relevante Parameter, die kritische Wärmestromdichte bzw. der Abstand zum Filmsieden, DNB („Departure from Nucleate Boiling“), wird in ATHLET über die sog. Mirshak-Korrelation [MIR59] bestimmt, die in Experimenten validiert wurde, die den Bedingungen im FRM-II ähnlich sind.

In der Vergangenheit ist der Code ATHLET zur Modellierung zweiphasiger Strömungen in Forschungsreaktoren nur vereinzelt eingesetzt worden, die Validierung des gekoppelten Programmsystems in diesem Strömungsregime ist derzeit noch nicht ausreichend. Es exis-

tieren jedoch bereits einige erfolgversprechende Ansätze [HAI95, SCH00, GEP97], den Code ATHLET auch für Forschungsreaktoren z.B. durch die Aufnahme eines verbesserten Modells für das unterkühlte Sieden zu ertüchtigen.

Für die einphasige Strömung konnten hingegen Standard-Korrelationen für den Druckabfall sowie den Wärmeübergang verwendet werden, die die Verhältnisse im stationären Betrieb ausgezeichnet wiedergeben und in guter Übereinstimmung mit den Rechnungen im Sicherheitsbericht sind [SIE93].

7.4 Fluiddynamik im stationären Betrieb

Bei der Analyse sowohl stationärer als auch transients Vorgänge des FRM-II muß prinzipiell der Zustand des gesamten Systems, d.h. neben dem Kern auch der Primär- und Sekundärkreislauf, erfaßt werden. In dieser Arbeit wurde hingegen nur der Kern, wie in Abschnitt 7.2 beschrieben, modelliert. Dies ist dann zulässig, wenn geeignete thermohydraulische Randbedingungen für die Variablen Druck, Eintrittstemperatur und Massenstrom vorgegeben werden können, wodurch das Verhalten des Primärkreislaufes simuliert wird. Für den stationären Zustand sind dies natürlich konstante Größen, in Transienten, z.B. bei Störungen des Kühlkreislaufs, müssen dagegen plausible zeitliche Verläufe explizit im ATHLET-Eingabedatensatz vorgegeben werden.

Für den stationären Ausgangszustand des Kerns wurden in dieser Arbeit die folgenden Festlegungen getroffen:

- Die im Kern freigesetzte Leistung beträgt bei Vollastbetrieb (20MW) 91% der Gesamtleistung der Anlage, d.h. 18,2 MW. Die verbleibenden 1,8 MW wirken sich durch Aufheizung des Schwerwassertanks, der Strukturmaterialien und des Reaktorbeckens nicht direkt auf die thermohydraulischen Vorgänge im Kern aus. Im Sicherheitsbericht wurde aber gezeigt, daß diese Effekte im Normalbetrieb stets negative Rückwirkungen auf die Reaktivitätsbilanz des Kerns haben; alle folgenden Betrachtungen sind insofern konservativ, da solche Rückwirkungen nicht explizit betrachtet werden.
- Der Durchsatz im Kern beträgt 92% des Gesamtdurchsatzes des Primärkreislaufes (300 kg/s), d.h. 277,2 kg/s. Die übrigen 8% dienen der Kühlung des Regelstabs bzw. strömen durch den Spalt zwischen Brennelement und Zentralkanalrohr. Bei diesem Durchsatz stellt sich eine mittlere Kühlmittelgeschwindigkeit von 16,3 m/s im Kern ein. Die von der Aufheizung des Kühlmittels im Regelstab resultierenden Reaktivitätsrückwirkungen wurden nicht modelliert.
- Die Eintrittstemperatur des Kühlmittels beträgt 37 °C; bei einer Gesamtleistung von 18,2 MW ergibt sich dann eine mittlere Aufheizspanne von 15,7 °C über den aktiven Bereich des Kerns und damit eine mittlere Austrittstemperatur von 52,7 °C.

- Der Austrittsdruck am unteren Brennelementende ist durch die Verbindung des Primärkreislaufes mit dem Reaktorbecken auf 2,2 bar festgelegt. Über den heißen Kern fällt der Druck mit Ein- und Auslaufdruckverlusten von 0,45 bzw. 0,25 bar insgesamt um etwa 6,5 bar ab; über den aktiven Bereich ergeben sich daraus rund 5,8 bar. Unter diesen Bedingungen beträgt die Sättigungstemperatur des Kühlmittels am Kernaustritt ca. 127 °C, am Kerneintritt etwa 172 °C. Die Flüssigkeitsströmung ist also im Nominalbetrieb im Mittel um etwa 74 K am Austritt unterkühlt.
- Für die Wärmeleitfähigkeit und die spezifische Wärmekapazität von Cladding und Brennstoff wurden gemäß [IAE92] die folgenden Stoffwerte zugrunde gelegt, zwischen denen von ATHLET linear interpoliert wird:

Material	Spezifische Wärmekapazität	Wärmeleitfähigkeit
Brennstoff	478 J kg ⁻¹ K ⁻¹ bei T=20°C	117 W kg ⁻¹ m ⁻¹
	596 J kg ⁻¹ K ⁻¹ bei T=500°C	
Cladding	901 J kg ⁻¹ K ⁻¹ bei T=20°C	220 W kg ⁻¹ m ⁻¹
	1122 J kg ⁻¹ K ⁻¹ bei T=500°C	

Tabelle 7-1: Spezifische Wärmekapazität und Wärmeleitfähigkeit für Cladding und Brennstoff des FRM-II-Kerns

- Alle Rechnungen wurden ohne Toleranzen durchgeführt, d.h. sowohl für die Dicken der Brennstoffplatten und der Kühlkanäle als auch für die Lage des Brennstoffs in der Platte und die Uran-Gesamtbeladung wurden die Nennwerte angesetzt.

Mit diesen Annahmen können nun stationäre ATHLET-Rechnungen durchgeführt werden. Die Ergebnisse für die zentralen Brennstofftemperaturen sind in Abbildung 7-6 oben rechts für einige axiale Schnitte entlang der Strömungsrichtung gezeigt; die Heißstelle liegt innerhalb der Unterkanäle 3 und 4, der Dichtesprung innerhalb der Kanäle 20 und 21, während Kanal 28 in diesem Modell den Heißkanal darstellt. An der Heißstelle wird die Maximaltemperatur von 112 °C erreicht. Verwendet man statt Transporttheorie die Diffusionsnäherung, weicht dieser Wert um ca. 3 K nach oben ab, da durch die Normierung des insgesamt etwas flacheren Leistungsprofils der Diffusionstheorie auf 18,2 MW die lokalen Spitzen am unteren Kernende etwas überschätzt werden; ansonsten sind die Unterschiede aber über einen Großteil des Kerns <1K. In Abbildung 7-6 links oben sind außerdem die entsprechenden Fluidtemperaturen eingetragen; deutlich zu erkennen ist der Heißkanal mit der maximalen Aufheizspanne von ~27 K, während die Kanäle 3 und 4 aufgrund ihrer räumlichen Nähe zum Hafnium-Absorber über den Großteil ihrer Ausdehnung einen eher geringen Energieeintrag in das Kühlmittel liefern.

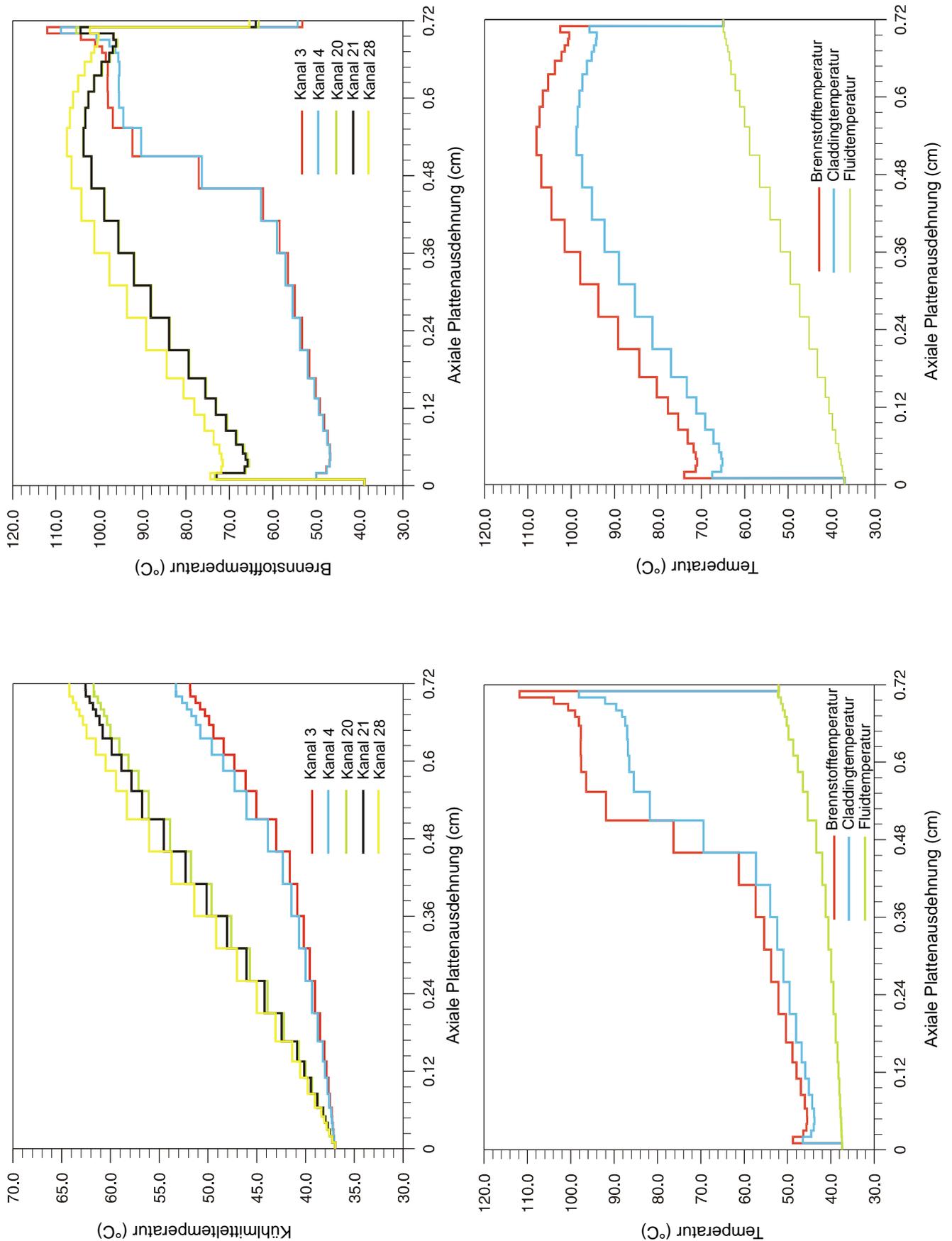


Abbildung 7-6 oben: Kühlmittel- und Brennstofftemperaturen für den stationären Betrieb des FRM-II in einigen ausgewählten Unterkanälen; unten: Brennstoff-, Cladding- und Kühlmitteltemperaturen für den Kanal 3 (mit „Hot Spot“) sowie für den höchstbelasteten Unterkanal 28

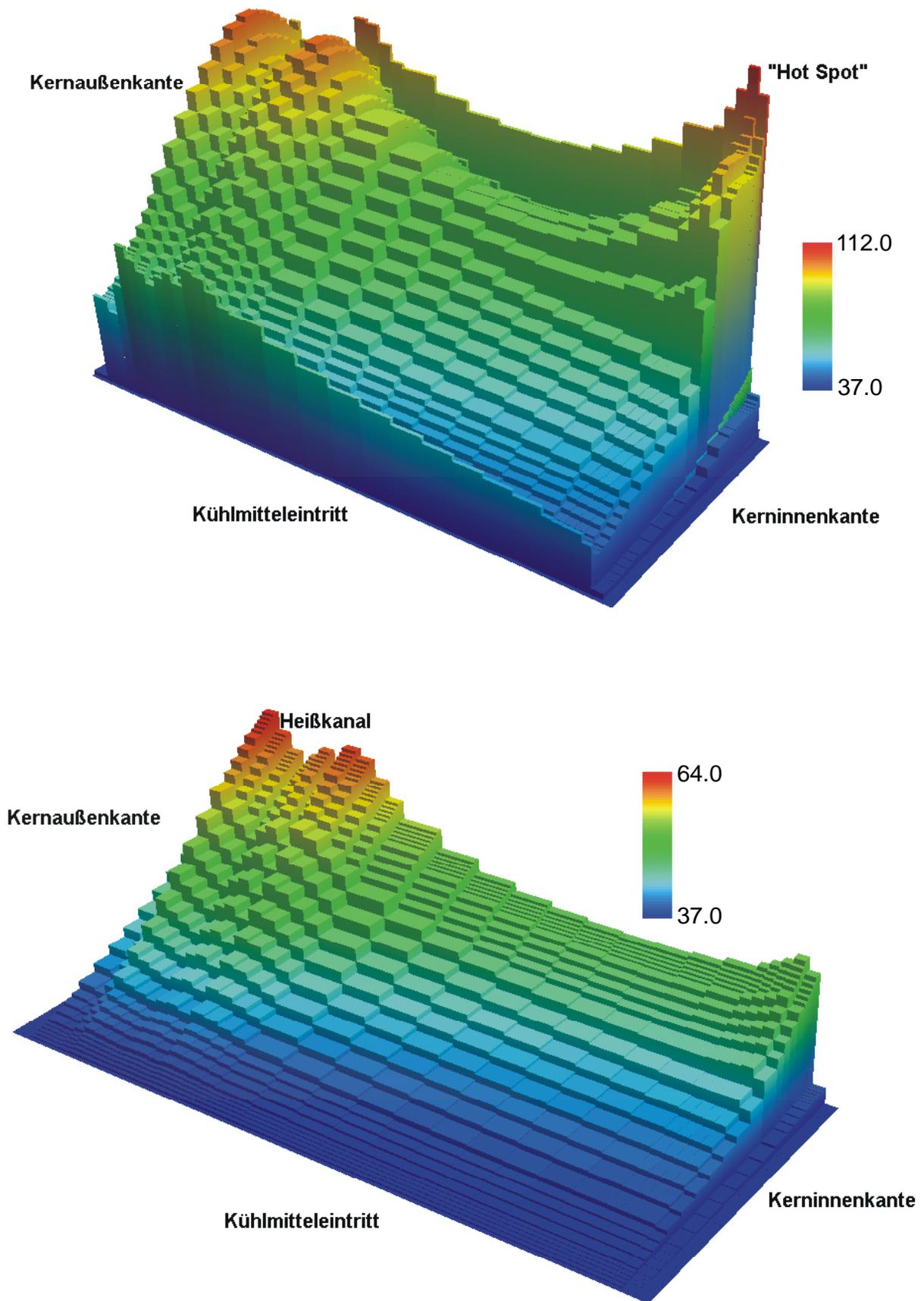


Abbildung 7-7: Darstellung von Brennstoff- (oben) und Kühlmitteltemperatur (unten) für die 32 ATHLET-Kanäle; die Blickrichtung ist vom Kühlmitteleintritt, d.h. vom oberen Plenum zum Austritt gerichtet.

Abbildung 7-6 unten zeigt ferner das Temperaturgefälle zwischen dem Zentrum des Brennstoffbereichs, der Oberfläche des Claddings sowie dem Kühlmittel für die Kanäle 3 (links) und 28 (rechts). Man beachte, daß das Temperaturprofil über die Brennstoffplatten relativ flach verläuft; es ergeben sich zwischen der Zentrallinie und der Oberfläche lediglich Differenzen von etwa 8-11 K.

Eine dreidimensionale Gesamtübersicht über diese Temperaturverläufe gibt Abbildung 7-7. Im oberen Bild, der Brennstofftemperatur, erkennt man sehr ausgeprägt die Heißstelle an der unteren inneren Kante des aktiven Bereichs; durch die direkte Übergabe des Leistungsprofils als Wärmestromdichte an ATHLET (ohne Berücksichtigung der transversalen Wärmeleitung) entspricht dieses Bild auch recht genau der Leistungsdichte in den Brennstoffplatten. Im unteren Bild (Kühlmitteltemperatur) ersichtlich ist die Konzentration der Leistung vorwiegend auf den Außenbereich des Kerns, während die näher am Steuerstab gelegenen Kanäle eine vergleichsweise geringe Aufheizspanne haben. Gekennzeichnet ist ferner der Heißkanal 28. Die Minima der Sicherheiten gegen OFI und DNB befinden sich an der Kernunterkante, da dort neben den lokalen Leistungsspitzen der niedrigste Systemdruck und damit die niedrigste Sättigungstemperatur bzw. Unterkühlung vorliegen. In Tabelle 7-2 sind die Werte an der Heißstelle sowie am Heißkanalausstritt sowohl für Diffusions- als auch Transporttheorie zusammengestellt.

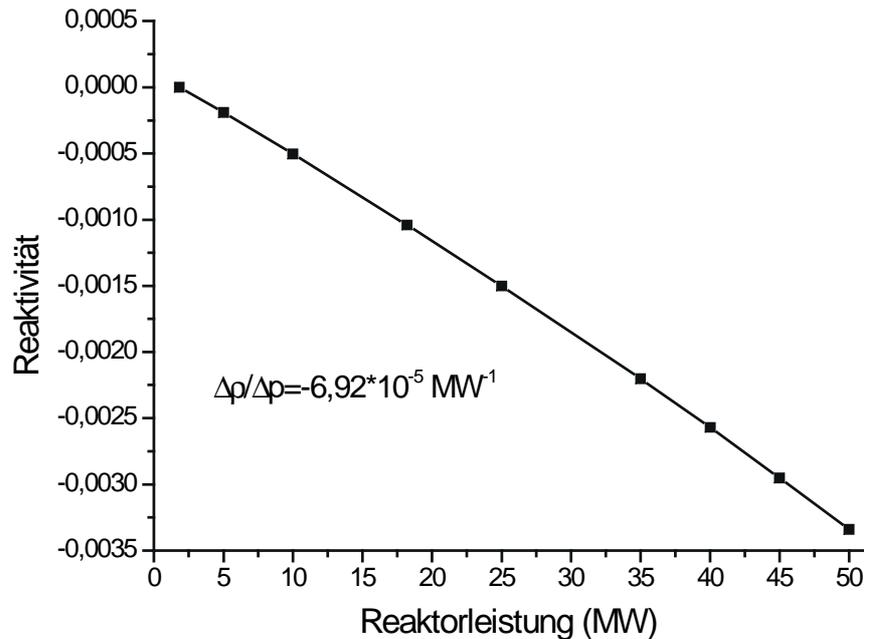
Position / Theorie	Abstand zu DNB	Abstand zu OFI S_1	Abstand zu OFI S_2
Heißstelle / Diffusion	2,333	7,586	5,208
Heißstelle / Transport	2,514	8,227	5,648
Heißkanal / Diffusion	3,560	10,376	7,213
Heißkanal / Transport	3,458	10,075	6,917

Tabelle 7-2: Vergleich der Sicherheiten gegen Strömungsinstabilitäten und Filmsieden für Heißkanal und Heißstelle für Diffusions- und Transporttheorie

Gerade bei der Bewertung der OFI- und DNB-Werte für die Heißstelle ist besondere Vorsicht geboten; obwohl beide Größen an dieser Stelle ihr absolutes Minimum annehmen, sollte man sich vergegenwärtigen, daß gerade an dieser Position die mit Abstand stärksten Temperaturgradienten im Kern auftreten und somit die transversale Wärmeleitung einen wesentlichen Beitrag zum Abbau dieser Temperaturspitze leisten wird.

Schließlich wurde mit stationären Analysen ein Leistungskoeffizient für den FRM-II bestimmt. Bereits in Kapitel 6 wurden Werte für verschiedene Reaktivitätskoeffizienten angegeben; die Erzeugung dieser Größen basierte jedoch auf der Annahme, daß die thermohydraulischen Parameter jeweils einzeln und unabhängig voneinander variieren und über den gesamten Kern einen konstanten Wert annehmen. Die Ableitung eines Leistungskoeffizienten aus die-

sen Größen ist daher zwar möglich, aber u.U. fehlerbehaftet. Der angemessene Weg besteht darin, mehrere stationäre gekoppelte Rechnungen für verschiedene Ausgangsleistungen durchzuführen und die Abnahme der Reaktivität zu bestimmen. Damit ist gewährleistet, daß der Betriebszustand des Kerns korrekt wird. Das Ergebnis



dieser Rechnungen zeigt *Abbildung 7-8: Leistungskoeffizient des FRM-II, bestimmt durch mehrere gekoppelte stationäre Berechnungen auf verschiedenen Leistungsniveaus.*

Abbildung 7-8: der Koeffi-

zient stellt sich in sehr guter Näherung als linear heraus, sein Wert beträgt:

$$\frac{\Delta\rho}{\Delta P} = -6,92 \cdot 10^{-5} \text{ MW}^{-1}. \quad (7-7)$$

Im Sicherheitsbericht [SIE93] wird ein Wert von $-7,0 \cdot 10^{-5} \text{ MW}^{-1}$ angegeben. Auf ähnliche Art und Weise kann auch die Steuerstabbewegung abgeleitet werden, die notwendig ist, um den Reaktor von Nulllast auf Vollast zu fahren. Durch Kritikalitätssuche in diesen beiden Betriebszuständen ergibt sich ein Wert von $\Delta x = 2,19 \text{ mm}$; die Beeinflussung der kritischen Position und der Regelstabcharakteristik durch die experimentellen Einbauten fließt hier jedoch als zusätzliche Unsicherheit ein.

7.5 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde die Funktionsweise des gekoppelten Programmsystems vorgestellt und die Anbindung eines ATHLET-Modells des FRM-II an die Neutronenkinetik erläutert. Mit dieser Modellierung kann der stationäre thermohydraulische Betriebszustand des FRM-II, der auch als Ausgangszustand für transiente Rechnungen dient, sehr genau beschrieben werden. Es ist dabei von großer Bedeutung, daß die Sicherheitsabstände zum Filmsieden und insbesondere zu Strömungsinstabilitäten stets hinreichend groß sind. Dies konnte selbst unter Zugrundelegung konservativer Annahmen für den Auslegungszustand nachgewiesen werden.

8 Berechnungen mit dem gekoppelten Programmsystem

Mit den im letzten Kapitel dargestellten Anfangsbedingungen können nun echte Transienten für den FRM-II initiiert und realistische Störfallanalysen mit dem gekoppelten Programmsystem durchgeführt werden. Im folgenden Abschnitt wird zunächst eine einfache Testtransiente ohne thermohydraulische Rückwirkungseffekte untersucht und daran eine Reihe von Parameterstudien, insbesondere hinsichtlich der Zeitschrittweite und der Energiegruppenanzahl, durchgeführt.

Im Anschluß daran werden drei ausgewählte Auslegungsstörfälle betrachtet, bei denen der Ausfall oder eine Fehlfunktion bestimmter Reaktorkomponenten postuliert wird. Für solche Transienten muß im Rahmen der Auslegung nachgewiesen werden, daß das Gesamtsystem auch unter solchen Bedingungen beherrschbar bleibt und ggf. zuverlässig abgeschaltet werden kann. Dieser Nachweis ist für den FRM-II im Rahmen der Störfallanalysen unter Annahme sehr konservativer Randbedingungen erfolgt. Mit dem nun zur Verfügung stehenden zeitabhängigen Transportcode kann darüber hinausgehend eine „Best Estimate“-Berechnung durchgeführt werden, die eine wesentlich genauere Untersuchung der Vorgänge während eines Störfalls gestattet.

Im letzten Abschnitt werden schließlich zwei Szenarien mit stark hypothetischem Charakter untersucht, bei denen durch eine extrem hohe Reaktivitätszufuhr ein prompt kritischer Transientenverlauf ausgelöst wird. Ziel dieser Analysen ist es, das gekoppelte Programmsystem DORT/ATHLET numerisch zu bewerten und die Einsatzfähigkeit des transienten Transportcodes auch bei schnellen und räumlich stark inhomogenen Reaktivitätsänderungen, so z.B. bei starker Dampfbildung im Kern, zu demonstrieren.

8.1 Test des transienten Transportcodes

Bevor gekoppelte Systemanalysen mit dem vollständigen Programmsystem DORT/ATHLET durchgeführt wurden, ist zunächst die transiente Version des Transportcodes als eigenständiges Modul verschiedenen Parameterstudien unterzogen worden, die im Folgenden vorgestellt werden. Die Hinzunahme der Zeitabhängigkeit erhöht natürlich die Anzahl der möglichen Parameterkombinationen erheblich, so daß sich dieser Abschnitt auf die Untersuchung eines definierten Testproblems beschränkt.

Betrachtet wird eine hypothetische Reaktivitätstransiente des FRM-II, bei der der Steuerstab über einen Zeitraum von 1,5 Sekunden (beginnend bei einer Problemzeit von 1s) mit einer Geschwindigkeit von etwa 0,5 cm/s (d.h. dem ca. sechsfachen der nominellen maximalen

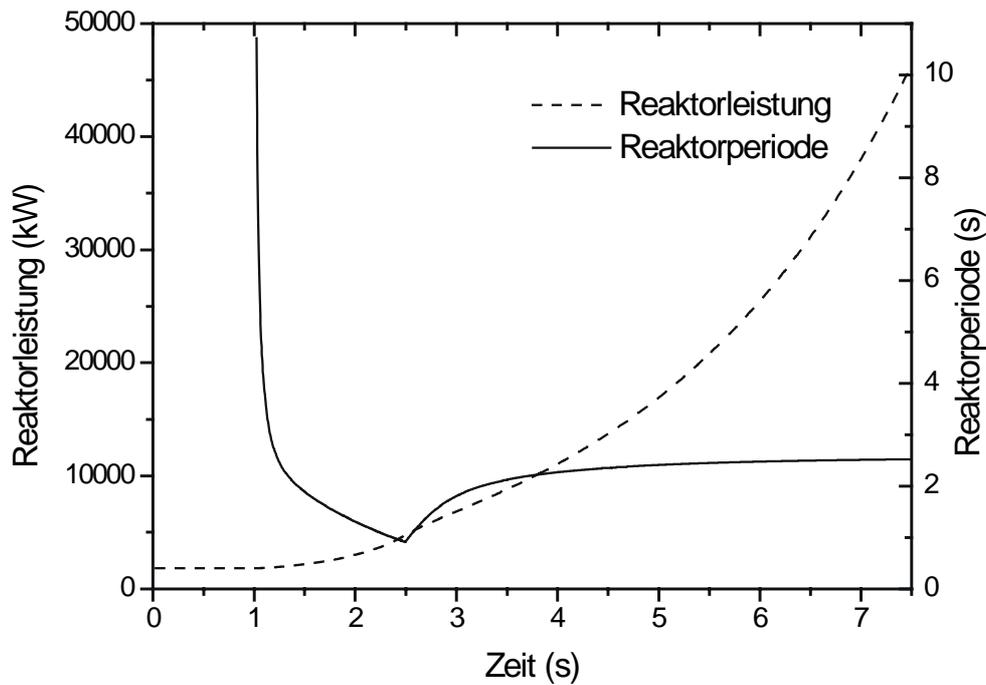


Abbildung 8-1: Verlauf von Reaktorperiode und -Leistung für die in Abschnitt 8.1 betrachtete Testtransiente ohne Rückwirkungen

Geschwindigkeit) ausgefahren wird. Für den effektiven Anteil der verzögerten Neutronen wurde hier $\beta = 0,006$ angesetzt, so daß die in dem besagten Zeitraum zugeführte Reaktivität von $3,75 \cdot 10^{-3}$ etwa $0,625 \beta$ entspricht; es handelt sich also noch um eine verzögert kritische Transiente, aber bereits mit einer erheblichen Reaktivitätszufuhr. Die Ausgangsleistung ist im Beispiel auf 10% der Nennleistung normiert, in der Rechnung werden keine Rückwirkungen berücksichtigt.

In Abbildung 8-1 sind die Leistung und die globale Reaktorperiode für diese „Testtransiente“ dargestellt. Es ergibt sich innerhalb von nur 6,5 s eine beträchtliche Leistungszunahme um einen Faktor von etwa 25. Der Zeitraum, über den die Reaktivitätszufuhr stattfindet, ist besonders deutlich am Verlauf der Reaktorperiode zu erkennen: während der zeitlich linearen Stabbewegung sinkt sie drastisch bis auf einen Minimalwert von ca. 1 s, um sich nach Stillstand des Stabes an einen asymptotischen Wert von etwa 2,5 s anzunähern. Diese Rechnung wurde mit einer P_1S_4 -Quadratur in 20(10) Gruppen und mit räumlich aufgelösten Neutronengruppengeschwindigkeiten durchgeführt. Die Zeitschrittweite wurde auf 5 ms limitiert, auch wenn das Modul zur Schrittweitensteuerung größere Werte zugelassen hätte.

Interessant ist zunächst ein Vergleich mit den Vorhersagen der Punktkinetik. Da der Einfachheit halber $\beta = 0,006$ dem Transportcode als effektiver Anteil verzögerter Neutronen mitgeteilt wurde (d.h. ohne explizite Berücksichtigung der verzögerten Spektren), kann dieser Wert direkt in eine Punktkinetikrechnung übernommen werden, ebenso wie die jeweiligen Anteile der beteiligten 6 Vorläufergruppen. Für die prompte Lebensdauer wurde gemäß Abschnitt 6.3.7 $\Lambda = 660 \mu\text{s}$ eingesetzt. Die Integration der punktkinetischen Gleichungen wurde

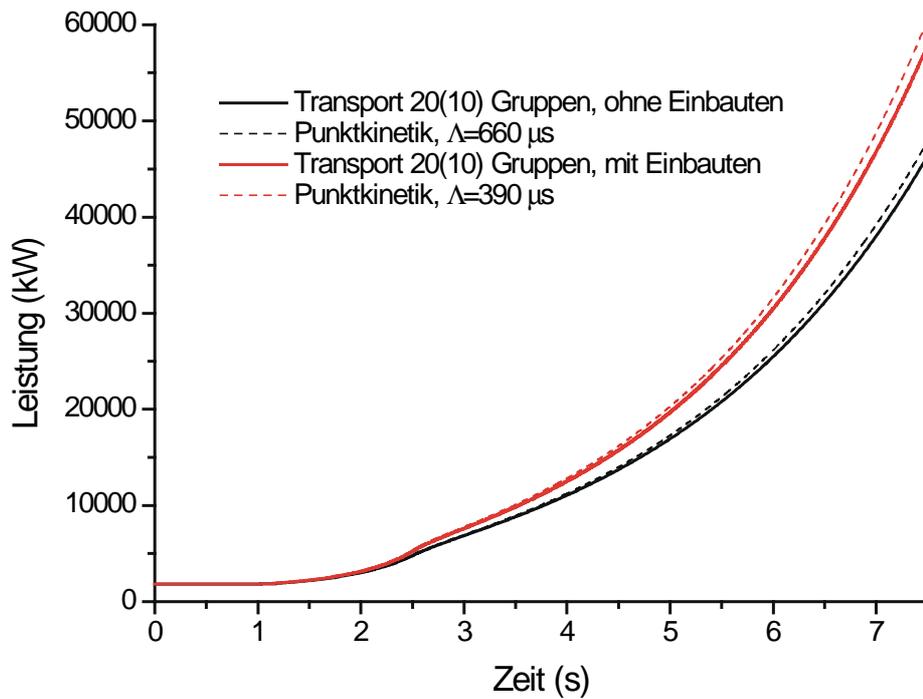


Abbildung 8-2: Vergleich von Punktkinetik und Neutronentransporttheorie für die Testtransiente für die Fälle mit und ohne Moderatorankeinbauten

dann mit einem Standardlösungsmodul für steife Differentialgleichungen aus dem Codepaket GEARB [HIN80] durchgeführt.

Das Ergebnis dieser Berechnungen ist in Abbildung 8-2 gezeigt. Es zeigt sich, daß die Transporttheorie in der Gesamtleistung um ca. 1-2% niedrigere Resultate als die Punktkinetik liefert. Zum Vergleich ist ferner der Leistungsverlauf eingezeichnet, wie er sich bei Berücksichtigung der Moderatorankeinbauten ergeben würde; dieses wurde für die Transporttheorie durch Verdünnung des Schwerwassers und Beimischung von Strukturmaterial erzielt, für die Punktkinetik wurde lediglich die prompte Lebensdauer auf $\Lambda = 387 \mu\text{s}$ herabgesetzt.

Die verschlechterte Moderation der Neutronen im Tank spielt bei dieser Transiente offenbar eine erhebliche Rolle für den Leistungsverlauf; die Abweichungen zwischen Punktkinetik und Transporttheorie sind hingegen vergleichbar zum Fall ohne Einbauten.

Generell findet man, daß die Bedeutung der Lebensdauer um so geringer wird, je langsamer die Transiente abläuft; für die nominelle Fahrgeschwindigkeit von 0,8 mm/s hätte sich für die Gesamtleistung mit und ohne Einbauten lediglich eine Differenz von ca. 1% zwischen den jeweiligen Transportrechnungen ergeben.

Weiterhin ist zu klären, wie groß die Anzahl von Energiegruppen in Transientenstudien mindestens gewählt werden sollte. Durchgeführt wurden daher außer für 20(10) Gruppen auch Transportrechnungen mit 16(5) und 12(3) Gruppen. Um zu gewährleisten, daß die Reaktivitätszufuhr in allen drei Fällen genau $0,625 \beta$ entspricht, wurden zunächst über eine Steuerstabsuche die erforderlichen Anfangs- und Endpositionen des Regelstabs bestimmt, um dann die Fahrgeschwindigkeit entsprechend anzupassen. So findet man aufgrund der ge-

ringfügig unterschiedlichen Regelstabcharakteristiken und Ausgangspositionen für 20 Gruppen eine Geschwindigkeit von $\sim 0,52$ cm/s, für 12 Gruppen hingegen eine von nur $\sim 0,51$ cm/s. Mit dieser Maßnahme ergaben sich für die Leistungsverläufe nur sehr geringe Abweichungen; anstatt daher diese Kurven in einer Grafik zu vergleichen, ist es instruktiver, den während der Transiente insgesamt freigesetzten Energiebeitrag (d.h. das zeitliche Leistungsintegral für den Zeitraum von 0,0 bis 7,5 Sekunden) in Tabelle 8-1 zu betrachten.

Anzahl der Energiegruppen	Freigesetzte Energie (kJ)	Abweichung vom Referenzwert
20(10), Referenzwert	110992	0,00%
16(5)	111350	0,32%
12(3)	111852	0,77%

Tabelle 8-1: Freigesetzte Energie während der Testtransiente für verschiedene Energiegruppenanzahlen

Die Abweichungen zwischen den verschiedenen Rechnungen sind geringer als 1%. Um die mit sinkender Gruppenanzahl systematische Abweichung nach oben zu erklären, beachte man, daß das gleiche Verhalten bereits bei der Auswertung der prompten Lebensdauer in Abschnitt 6.3.7 beobachtet wurde, der Reaktor also offenbar bei der Verwendung weniger Energiegruppen etwas weniger „träge“ erscheint. Insgesamt sind die Differenzen so gering, daß mit ausreichender Genauigkeit auch die 12(3)-Gruppenstruktur für Transientenanalysen verwendet werden kann.

Obwohl also die Berechnungen untereinander sehr gut übereinstimmen, sind bereits zwei Schwachpunkte aufgezeigt worden, die die Analyse des FRM-II erschweren: zum einen verschlechtern die experimentellen Einbauten die Moderation im Schwerwassertank und nehmen somit Einfluß auf die Kinetik des Reaktors, zum anderen ist die Beschreibung der Regelstabbewegung durch die Nichtlinearität der Stabcharakteristik bestimmt und hängt geringfügig von der Gruppenanzahl ab. Letzteres Problem kann bei der Verwendung unterschiedlicher Energiegruppenanzahlen dadurch gelöst werden, daß man einen festen Reaktivitätseintrag vorschreibt und dann durch den Regelstabsuchmodus die entsprechenden Anfangs- und Endpositionen mittels stationärer Rechnungen vorweg bestimmt.

Auf diese Weise lassen sich auch die Unterschiede zwischen Transport- und Diffusionstheorie weitgehend kompensieren. Tatsächlich findet man für die obige Transiente bei identischem Reaktivitätseintrag ähnlich geringe Unterschiede zwischen den beiden theoretischen Ansätzen wie auch bei der Verwendung unterschiedlicher Gruppenanzahlen. Die Differenz zwischen einer 20(10)-Gruppen-Transport- und einer entsprechenden Diffusionsrechnung liegen z.B. bei ca. 0,5% in der freigesetzten Energie.

Die Genauigkeit einer transienten Rechnung wird wesentlich von der Wahl und Kontrolle der Zeitschrittweite bestimmt. Für die Testtransiente wurden daher verschiedene Rechnungen mit jeweils fest vorgegebener Zeitschrittgröße durchgeführt. Um Fehler während der Stabbewegung zu minimieren, wurde während der ersten 1,5 Sekunden in allen Fällen mit maximal 5-ms-Zeitschritten gerechnet. Im anschließenden Zeitraum nach der Stabbewegung wurden dann Schrittweiten von 5-100 ms getestet. Von besonderem Interesse ist es auch zu untersuchen, ob das „Diamond-Differencing“-Verfahren tatsächlich im Vergleich zum voll impliziten Verfahren von höherer Ordnung genau ist (siehe Abschnitt 2.5.3).

Da in den betrachteten Fällen die Abweichungen nicht besonders groß waren, sind die Ergebnisse wiederum in Form des Gesamtenergieeintrages in Tabelle 8-2 zusammengestellt:

Zeitschrittweite (ms)	Energieeintrag (kJ), Implizites Verfahren	Abweichung vom Referenzwert	Energieeintrag (kJ), „Diamond-Differencing“	Abweichung vom Referenzwert
5 (Referenzwert)	110992	0,00%	111193	0,00%
10	111047	0,05%	111375	0,16%
20	111342	0,31%	111917	0,65%
30	111642	0,58%	112477	1,15%
40	111934	0,85%	113008	1,63%
50	112058	0,96%	113493	2,07%
75	112728	1,56%	114491	2,96%
100	113293	2,07%	115565	3,93%

Tabelle 8-2: Während der Testtransiente freigesetzte Energie in Abhängigkeit von der Zeitschrittweite für das voll implizite und das „Diamond-Differencing“-Verfahren

Für Zeitschritte von 5 ms liefern beide Verfahren Werte, die bis auf 0,2% übereinstimmen. Entgegen der Erwartungen zeigt allerdings das „Diamond-Differencing“-Verfahren größere Abweichungen bei wachsender Zeitschrittlänge als das implizite Verfahren, was sich in einem Fehler von fast 4% (für 100 ms Zeitschrittweite) gegenüber 2% im impliziten Verfahren bemerkbar macht.

Um diesen Effekt genauer zu untersuchen, werden die Reaktorperioden betrachtet, da der Leistungsverlauf selbst keine numerische Instabilitäten zeigt. Diese machen sich hingegen in der Periode bemerkbar, wie Abbildung 8-3 anhand eines zeitlichen Teilintervalls der Testtransiente zeigt. Zunächst sind die Abweichungen des Periodenverlaufs vom Betrag her für das Diamond-Differencing-Verfahren größer als für das implizite Verfahren, wie gemäß Tabelle 8-2 zu erwarten. Außerdem zeigt das Diamond-Differencing gerade für kleine Zeitschritte starke Oszillationen, die im impliziten Verfahren erst für Zeitschritte >50 ms, und

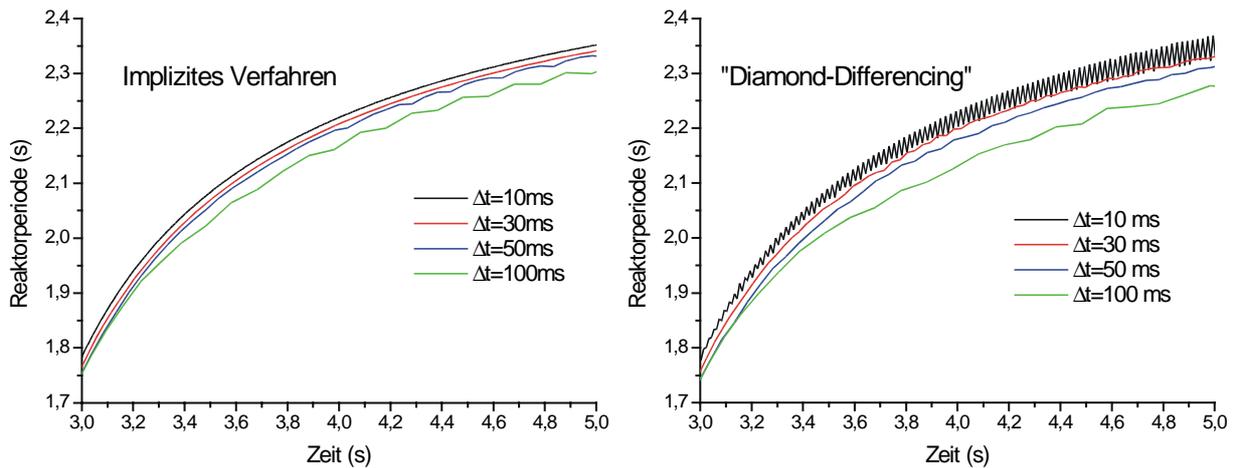


Abbildung 8-3: Reaktorperioden der Testtransiente für implizites und Diamond-Differencing-Verfahren

dann auch nur recht schwach ausgeprägt auftreten. Dies hängt vermutlich damit zusammen, daß die in jedem „Diamond-Differencing“-Zeitschritt durchgeführte Flußextrapolation dazu neigt, den in der Transportrechnung unvermeidlichen iterativen Fehler zu verstärken. Die theoretisch zu erwartende höhere Genauigkeit wäre wahrscheinlich nur dann zu erzielen, wenn das iterative Verfahren „exakte“ Ergebnisse liefern würde.

Aus diesen Gründen wird das voll implizite Verfahren in allen weiteren Berechnungen beibehalten. Die Genauigkeit nur bis zur Ordnung $O(\Delta t)$ fällt bei den ohnehin kleinen Zeitschritten, die die iterative Lösung der Transportgleichung verlangt, nicht weiter ins Gewicht. Tatsächlich benötigte die Berechnung der Testtransiente mit Zeitschritten von 100 ms erheblich mehr Zeit als z.B. mit 20 ms, da die Konvergenz bei derart großen Schrittweiten sehr langsam ist und die effektiven Extrapolationsmechanismen nicht mehr greifen. Es sei hier noch angemerkt, daß bei Übergang zu variablen Δt die im Code enthaltene Schrittweitensteuerung maximal Zeitschritte von ca. 15 ms für die Testtransiente zugelassen hätte, so daß die numerischen Abweichungen gegenüber der 5-ms-Bezugslösung sehr gering ($<0,5\%$) ausgefallen wären.

8.2 Auslegungsstörfälle

Wie bereits in der Einleitung zu diesem Kapitel angekündigt, werden im Folgenden drei ausgewählte Auslegungsstörfälle untersucht, die bereits im Rahmen des Genehmigungsverfahrens für den FRM-II diskutiert worden sind. Im einzelnen werden betrachtet:

- Der Leistungsstörfall: Dem Reaktor wird durch eine Fehlfunktion des Steuerstabantriebs bei niedrigem Leistungsniveau ein unbeabsichtigt hohes Maß an Reaktivität zugeführt.
- Der Notstromfall: Durch Ausfall der Stromversorgung fallen alle Primärkühlmittelpumpen gleichzeitig aus.

- Der Ausfall der sekundären Wärmesenke. Dadurch kommt es zum Anstieg der Kühlmitteleintrittstemperatur am Kern.

Beim FRM-II führen fast alle Signale, die einen abnormen Betriebszustand anzeigen, zu einer Schnellabschaltung des Reaktors. In der Störfallanalyse ist es üblich, eines oder mehrere dieser Anregesignale zu ignorieren und in Grenzfallbetrachtungen die Wirkung des zuletzt ansprechenden Signals zu berücksichtigen. Mit diesen konservativen Annahmen konnte gezeigt werden, daß alle drei genannten Störfälle beherrscht werden und der Kern zu keinem Zeitpunkt in seiner Integrität gefährdet ist.

In dieser Arbeit wird darüber hinaus ein vollständiges Ausfallen der Abschaltvorrichtungen unterstellt. Beim Leistungsstörfall kann so z.B. der Zeitpunkt bestimmt werden, zu dem das letzte Abschaltsignal spätestens greifen müßte, bevor es z.B. zur Ausbildung von Strömungsinstabilitäten oder Überschreitung der kritischen Heizflächenbelastung im Kern kommt.

Störfälle mit Ausfall der Kernkühlung sind beim FRM-II hingegen mit einer negativen Reaktivitätszufuhr verbunden; es ist eine interessante Frage, ob die darauf begründete inhärente Sicherheit des Reaktors ausreicht, auch bei vollständig ausgefallenen Abschaltsignalen das System über längere Zeiträume vor Beschädigungen zu schützen.

Den drei Transienten ist gemeinsam, daß sie alle auf relativ langen Zeitskalen ablaufen. Der Reaktor wird sich also zu keinem Zeitpunkt sehr weit von seiner stationären Grundmode entfernen, d.h. diese Analysen könnten prinzipiell durchaus mit einem quasistationären Code durchgeführt werden. Hier soll hingegen aufgezeigt werden, daß auch ein voll implizites Transportprogramm in der Lage ist, solche Transienten über lange Zeiträume in akzeptabler Rechenzeit zu lösen. Für die Verwendung eines Transportcodes spricht ferner die Tatsache, daß trotz fehlender stark lokaler Effekte nur die zeitabhängige Neutronentransporttheorie wirklich in der Lage ist, die Reaktivitätsbilanz des Reaktors zu jedem Zeitpunkt genau zu erfassen.

8.2.1 Der Leistungsstörfall

Dem sog. Leistungsstörfall liegen die folgenden Annahmen und Anfangsbedingungen zugrunde:

- Der Reaktor befindet sich zu Beginn der Transiente in einem stationären Zustand auf dem relativ niedrigen Leistungsniveau von 10% Nennleistung (1,82 MW).
- Die Temperatur am Kerneintritt beträgt 37 °C, der Durchsatz ist 100% des Nominaldurchsatzes von 277,2 kg/s durch das Brennelement.
- Bei $T=10$ s wird der Steuerstab mit seiner maximalen konstruktiv zugelassenen Geschwindigkeit von 0,8 mm/s ausgefahren; dies entspricht einer Reaktivitätszufuhr von $\approx 4 \cdot 10^{-4} \text{ s}^{-1}$. Durch eine Fehlfunktion des Steuerstabantriebs wird die Geschwindigkeit

bei Eintritt in den sog. Leistungsbereich nicht wie vorgesehen auf 0,08 mm/s reduziert, sondern der Steuerstab fährt unvermindert weiter. Es wird unterstellt, daß die zuerst ansprechenden Abschaltensignale (Periodengrenzwerte im Mittel- und Leistungsbereich, Neutronenflußdichte im Mittel- und Leistungsbereich) ausfallen; das dann wirksam werdende Signal ist die ^{16}N -korrigierte Neutronenflußdichte, die bei 114% Nennleistung eine Reaktorschnellabschaltung auslöst.

- Es soll untersucht werden, wie groß die Verzögerung zwischen der Auslösung des Signals und dem Beginn der Wirkung des Abschaltensystems maximal sein darf; in der technischen Spezifikation wird ein Verzögerungszeitraum von 0,5 Sekunden zwischen Signal und Lösen der Abschaltstabverriegelung sowie weitere 0,6 Sekunden bis zur vollständigen Zufuhr einer negativen Reaktivität von insgesamt -21% angegeben. Im Folgenden wird gezeigt, daß diese Zeitspanne ausreicht, um den Kern vor Strömungsinstabilitäten und damit einer möglichen Beschädigung zu schützen.

Von Interesse ist ein Vergleich der verschiedenen theoretischen Ansätze. Bereits in Abschnitt 8.1 wurde gezeigt, daß bei solch relativ langsamen Transienten keine besonders großen Abweichungen zwischen Punktkinetik und Transporttheorie zu erwarten sind. Dieser Störfall wurde also zunächst unter Vernachlässigung aller Rückwirkungseffekte untersucht. Der entsprechende Leistungsverlauf ist in Abbildung 8-4 durch die rote bzw. rot gestrichelte Linie für Transporttheorie- bzw. Punktkinetik dargestellt. Eine Sekunde nach Überschreitung der zulässigen Höchstleistung zum Zeitpunkt $T=11$ s nach Transientenbeginn beträgt die Gesamtleistung für die etwas ungünstigere Punktkinetik-Vorhersage etwa 37,5 MW. Mit dem Eintreten von Strömungsinstabilitäten ist, wie unten gezeigt wird, bei etwa 48 MW zu rechnen. Selbst unter diesen konservativen Annahmen ist der Störfall also beherrschbar.

Ein wesentlich günstigeres Störfallverhalten ergibt sich, wenn Rückwirkungseffekte in die Berechnungen miteinbezogen werden. Die gekoppelten Transportrechnungen wurden vergleichend mit zwei verschiedenen Rückwirkungsmodellen durchgeführt. Im ersten Modell wurden, wie bereits in Abschnitt 7.1 erläutert, individuelle Querschnittssätze für jede thermohydraulische Zone berechnet und dem Transportprogramm zugeführt. Im zweiten Ansatz sind hingegen die thermohydraulischen Zustandsgrößen zunächst über das gesamte Kernvolumen gemittelt und aus den resultierenden Größen ein einziger globaler Querschnittssatz für den gesamten Reaktorkern errechnet worden. Die zweite Vorgehensweise entspricht im Prinzip der „naiven“ Ermittlung von Reaktivitätskoeffizienten, wie in Abschnitt 7.4 vorgestellt; auch hier wurde der tatsächliche Zustand des Kerns ignoriert und jeweils von konstanten Temperaturen, Dichten etc. über den gesamten aktiven Bereich ausgegangen.

In Abbildung 8-4 sind die mit Zonen- bzw. gemittelten Rückwirkungseffekten ermittelten Leistungsverläufe dargestellt. Vergleichend wurde außerdem die entsprechende Punktkinetikkurve (im Bild gestrichelt) unter Verwendung des in Abschnitt 7.4 bestimmten Leistungs-

koeffizienten errechnet. Da der Leistungskoeffizient durch gekoppelte Rechnungen ermittelt wurde und daher die räumliche Verteilung der thermohydraulischen Größen korrekt erfasst, sind die Vorhersagen von Punktkinetik und Transporttheorie mit Zonen-Rückwirkungseffekten in guter Übereinstimmung; die geringen Abweichungen lassen sich ohne weiteres durch die Unsicherheiten in der Bestimmung der prompten Lebensdauer und des Leistungskoeffizienten erklären.

Definiert man dagegen vereinfachend Mittelwerte der thermohydraulischen Parameter durch volumetrische Wichtung über den gesamten Kern und leitet aus diesen einen einzigen globalen Querschnittssatz für das Kernvolumen ab, so werden die Rückwirkungseffekte offenbar zu klein abgeschätzt, wie durch die blaue Kurve in Abbildung 8-4 gezeigt. Physikalisch lässt sich dieser Effekt wie folgt erklären: Zunächst ist die Aufheizung des Kühlmittels in der unteren Kernhälfte bedingt durch die Kernströmungsrichtung höher als im oberen Teil des Kerns, die lokalen Rückwirkungseffekte während einer Transiente dort also stärker ausgeprägt. Wäre die Leistungsverteilung über den gesamten Kern gleichförmig, würde die Größe der Rückwirkungen angemessen durch einen volumetrischen Mittelwert über das gesamte Kernvolumen wiedergegeben werden. Aufgrund der Konzentration der Leistung auf die untere Kernhälfte spielt diese jedoch für die Reaktivitätsbilanz des Gesamtsystems und damit für die Rückwirkungen eine wichtigere Rolle, als ihr ihrem reinen Volumenanteil nach zu-

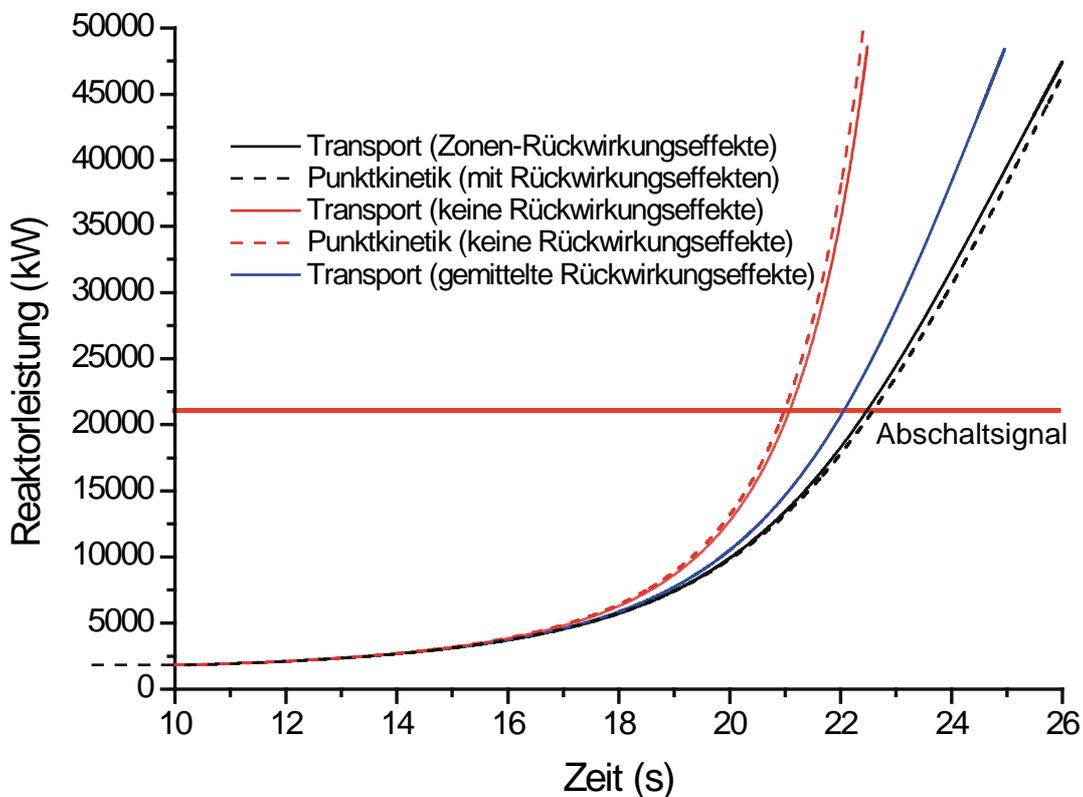


Abbildung 8-4: Leistungsverlauf des Leistungsstörfalls für Transporttheorie und Punktkinetik jeweils mit und ohne Rückwirkungseffekte

kommen würde. Durch Nichtbeachtung dieser Tatsache unterschätzt man die Rückwirkungen und erhält einen zu raschen Leistungsanstieg.

Interessant ist ferner ein Vergleich mit den Vorhersagen der Diffusionstheorie; die entsprechenden Leistungsverläufe für Transport- und Diffusionsrechnung sind in Abbildung 8-5 dargestellt. Aufgrund der Tatsache, daß die Ausgangsposition und die differentielle Wirksamkeit des Regelstabes durch die Diffusionsrechnung nicht korrekt ermittelt werden und somit hier der Reaktivitätseintrag bei identischer Stabgeschwindigkeit geringer eingeschätzt wird als für die entsprechende Transportrechnung, findet man einen insgesamt geringeren Leistungsanstieg. Paßt man hingegen die Geschwindigkeit des Stabes während der Transiente so an, daß die Netto-Reaktivitätszufuhr für Transport- und Diffusionsrechnung identisch ist, sind auch die Leistungsverläufe praktisch deckungsgleich.

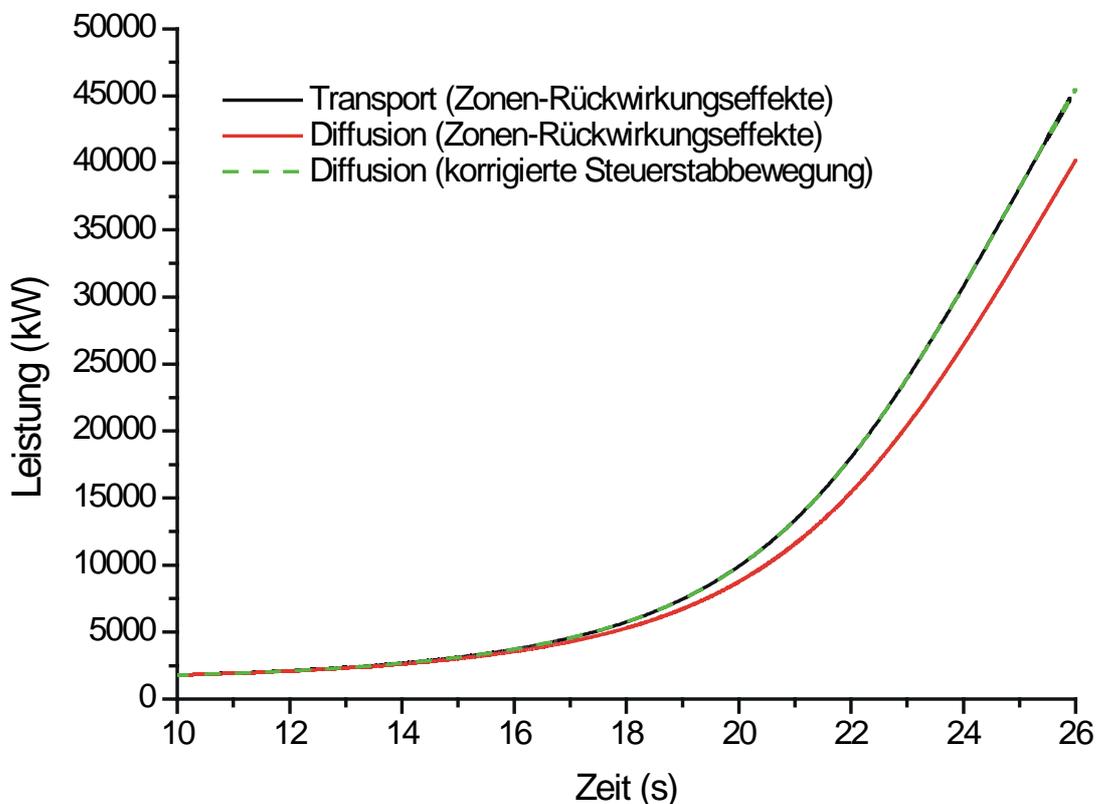


Abbildung 8-5: Vergleich von Diffusions- und Transportrechnung für den Leistungsstörfall; für die Diffusionstheorie ist außerdem der Verlauf mit korrigierter Steuerstabbewegung angegeben.

Abbildung 8-6 zeigt schließlich die Reaktorperiode für Transportrechnungen mit und ohne Rückwirkungseffekte. Deutlich zu erkennen ist das Einsetzen der Rückwirkungen mit zunehmender Leistung und Aufheizung des Kerns, die etwa 11 Sekunden nach Transientenbeginn sogar einen Wiederanstieg der Reaktorperiode bewirken. Legt man als Abschaltsignal den Periodengrenzwert von 7 Sekunden zugrunde, so würde dieses bereits 4 Sekunden nach Transientenbeginn ausgelöst werden; zu diesem Zeitpunkt ist die Reaktorleistung geringer als 3 MW.

Um die gesamte Transiente auch thermohydraulisch bewerten zu können, betrachte man Abbildung 8-7. Die Brennstofftemperatur beträgt 15 Sekunden nach Transientenbeginn maximal 180 °C und ist damit noch weit von der Blistertemperatur der Brennstoffplatten (etwa 450 °C) entfernt. Auch die Kühlmitteltemperatur liegt mit max. 105 °C am Kernaustritt noch deutlich unterhalb der Sättigungstemperatur. Auf-

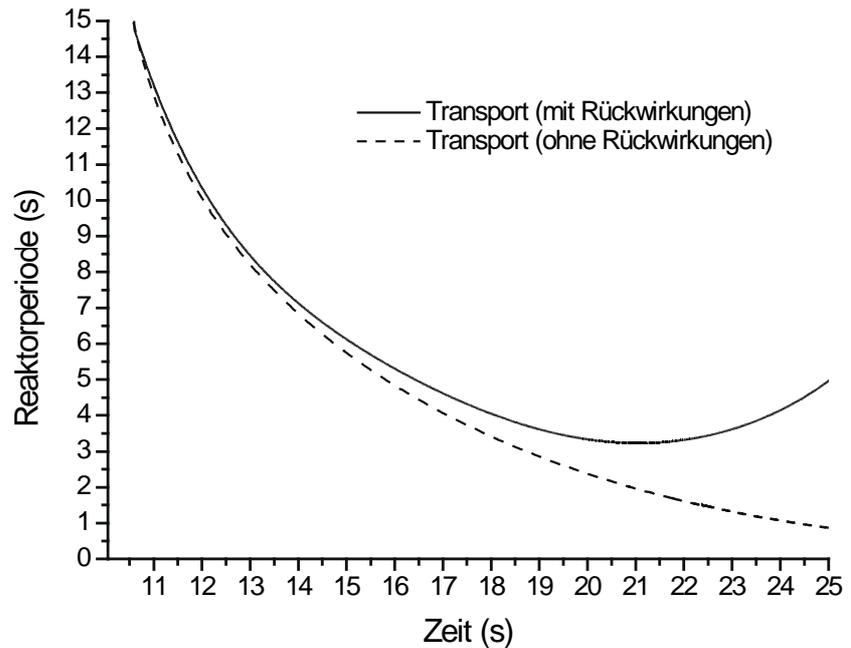


Abbildung 8-6: Reaktorperiode (Leistungsstörfall) für Transporttheorie mit und ohne Rückwirkungen

Aufschluß darüber, ob trotzdem unterkühltes Sieden mit anschließenden Strömungsinstabilitäten auftreten kann, gibt der Parameter η , der in Abbildung 8-7 links oben eingezeichnet ist. Verwendet wird hier die Definition S_2 (siehe Abschnitt 7.3). Bei einer Reaktorleistung von 48 MW (16 Sekunden nach Transientenbeginn) erreicht der Heißkanal Nr. 28 den kritischen Wert von $\eta = 1$, so daß frühestens zu diesem Zeitpunkt mit OFI zu rechnen ist. Kurz danach wird am Austritt von Kanal 28 auch die kritische Heizflächenbelastung (DNB) überschritten (siehe Abbildung 8-7 links unten). Tatsächlich zeigt sich hier wie auch in den folgenden Betrachtungen, daß die zur DNB-Bestimmung verwendete Mirshak-Korrelation häufig Werte liefert, die sehr nahe am OFI-Punkt liegen. Abschätzungen mit der speziell für das Studium der ANS entwickelten Gambill-Weartherhead-Beziehung [SIM91] liegen i.allg. um etwa 10% höher [BÖN98] und beschreiben damit vermutlich die physikalischen Verhältnisse etwas besser.

Legt man den mit Neutronentransporttheorie berechneten Störfallverlauf zugrunde, so ergibt sich insgesamt das folgende Bild: nach der spätest möglichen Anregung des Abschaltsignals 12,5 Sekunden nach Transientenbeginn würden noch etwa 3,5 Sekunden vergehen, bis im höchstbelasteten Unterkanal Strömungsinstabilität auftreten und die kritische Heizflächenbelastung überschritten würde. Für eine Reaktorschnellabschaltung ist dieser Zeitraum selbst unter Zugrundelegung konservativer Annahmen hinsichtlich des Abschaltsystems sicherlich ausreichend.

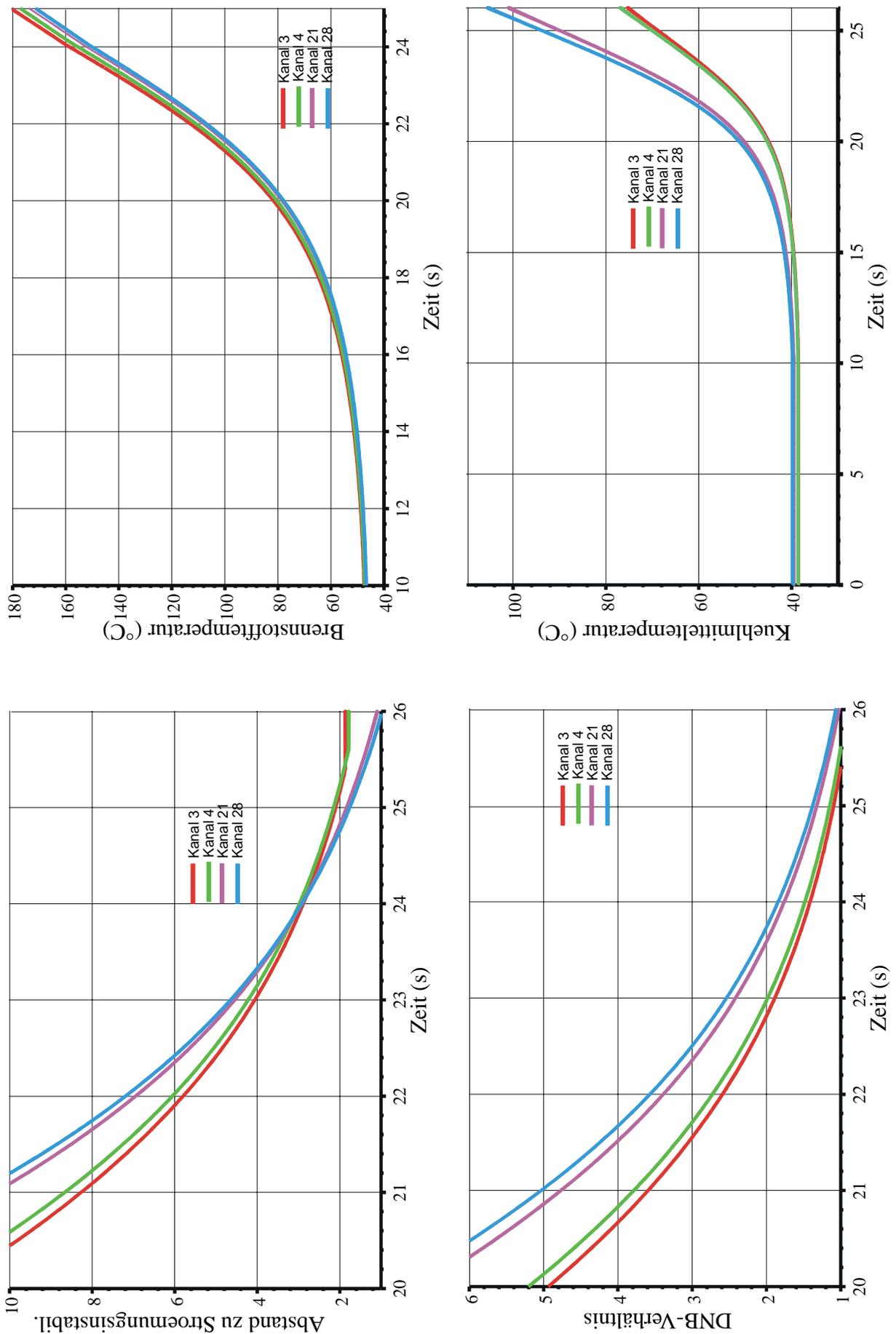


Abbildung 8-7: Thermohydraulische Parameter für den Leistungsstörfall; links oben: Abstand zu Strömungsinstabilitäten; rechts oben: zeitlicher Verlauf der Brennstofftemperatur; links unten: Abstand zu DNB; rechts unten: zeitlicher Verlauf der Kühlmitteltemperatur. Alle Größen werden am Kernaustritt bestimmt.

8.2.2 Der Notstromfall

Beim Notstromfall wird das folgende Szenario unterstellt:

- Der Reaktor ist vor Beginn der Transiente im stationären Zustand bei 100% der Nennleistung von 18,2 MW.
- Die Kühlmittelströmung ist ebenfalls in ihrem nominellen Zustand, d.h. am Kerneintritt herrscht eine Fluidtemperatur von 37 °C bei einem Massendurchsatz von 277,2 kg/s durch den Kern.
- Zum Zeitpunkt $T=10.0$ s fällt die Stromversorgung aller Primärkühlmittelpumpen aus; der Massenstrom geht dann bedingt durch die großen Schwungmassen an den Pumpen relativ langsam (innerhalb von 100 Sekunden) auf etwa 10% zurück. Spätestens zu diesem Zeitpunkt setzt dann das Notkühlssystem ein.
- Die Reaktorschnellabschaltung, die bereits bei einem Durchsatzrückgang auf 85% entsprechend 236,5 kg/s angeregt würde, tritt nicht ein; die Leistungsentwicklung des Reaktors über die gesamte Auslaufzeit der Pumpen soll betrachtet werden.

Der Kerndurchsatz als Funktion der Zeit wurde dem Sicherheitsbericht entnommen und ist in Abbildung 8-8 dargestellt. Als zeitliche Randbedingung mußte daneben auch die zeitliche Entwicklung des Eintrittsdrucks dem Code ATHLET vorgegeben werden. Da das Gesamtsystemverhalten nicht bekannt ist, wurde hier gemäß den Gesetzmäßigkeiten der

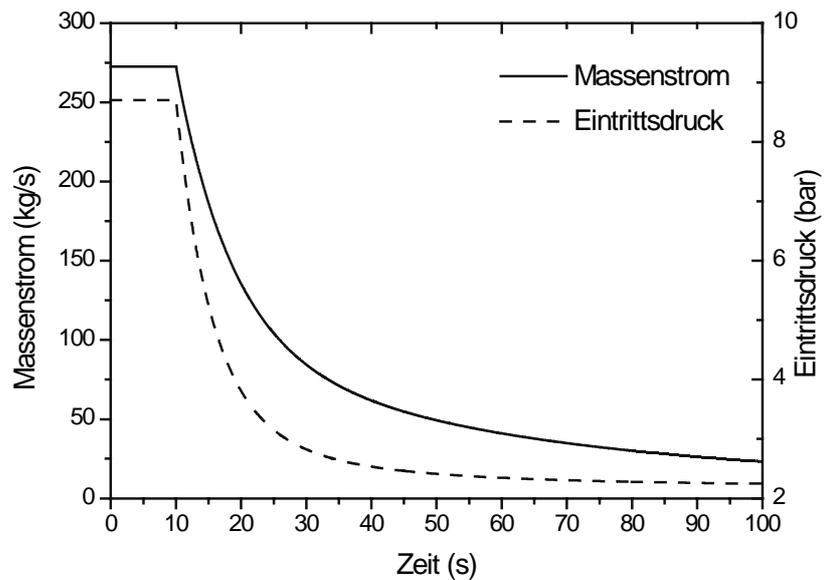


Abbildung 8-8: Zeitlicher Verlauf des Kerndurchsatzes beim Notstromfall

einphasigen Strömung angenommen, daß der Druckabfall über den Kern quadratisch vom Durchsatz abhängt. So fällt der Druck während der Transiente von seinem nominalen Wert am Kerneintritt annähernd auf den am unteren Plenum herrschenden Druck von etwa 2,2 bar ab (siehe Abbildung 8-8). Angesichts dieser Näherung wäre es wünschenswert, den gesamten Primärkreislauf mit der korrekten Berücksichtigung der Pumpenkennlinien darzustellen, um zu einer geschlossenen Darstellung des Störfallverlaufs zu gelangen. So wurde auch nicht berücksichtigt, daß nach frühestens 46 Sekunden Umlaufzeit im Primärkreislauf die erste Front des verringerten und damit stärker aufgeheizten Kühlmittelstroms erneut in den Kern eintritt und damit die Eintrittstemperatur deutlich angehoben wird.

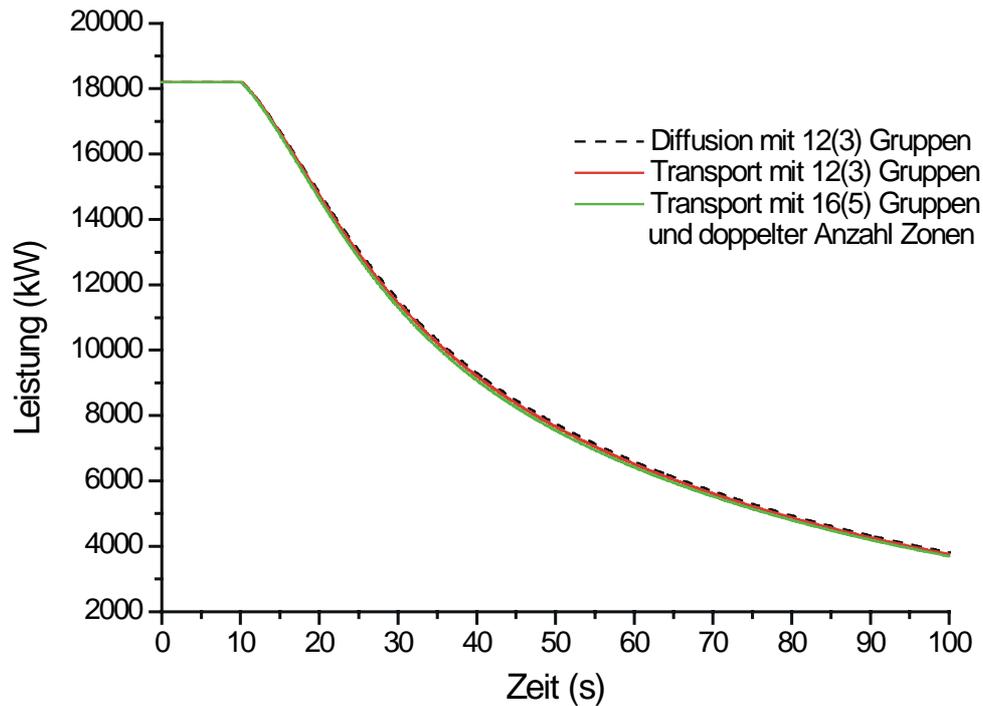


Abbildung 8-9: Leistungsverlauf beim Notstromfall für 12-Gruppen-Diffusions- und Transportrechnungen sowie für eine 16-Gruppen-Transportrechnung mit erhöhter Anzahl von Rückwirkungszonen

Der Leistungsverlauf ist in Abbildung 8-9 für drei verschiedene Vorgehensweisen dargestellt. Neben der Verwendung der 12(3)-Gruppenbibliotheken wurden hier auch die erweiterten 16(5)-Gruppenquerschnitte benutzt. Ferner wurde die Anzahl der Rückwirkungszonen, d.h. die Anzahl der zur Darstellung des Brennstoffbereichs benötigten Materialien in radialer Richtung verdoppelt. Diese Verdopplung hatte keine Auswirkungen auf jeweils zwei Rechnungen mit der gleichen Gruppenzahl; die Unterschiede von max. 1% zwischen der 12- und 16-Gruppentransportrechnung entstehen daher tatsächlich durch die Reduktion der Energiegruppenanzahl und nicht durch die Verfeinerung der Zoneneinteilung. Auch die Übereinstimmung mit den Vorhersagen der Diffusionsnäherung ist ausge-

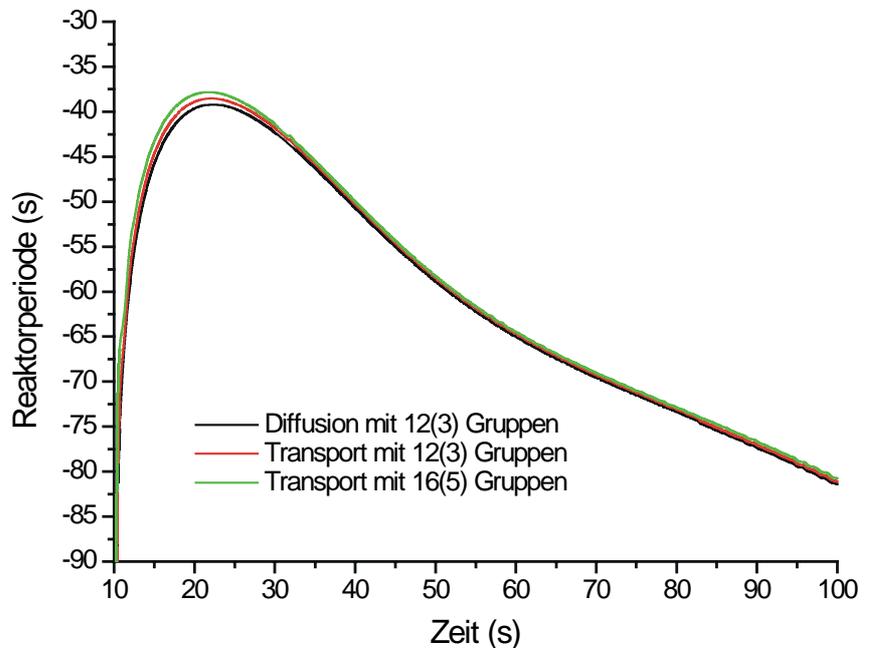


Abbildung 8-10: Die zu Abbildung 8-9 korrespondierenden Reaktorperioden für den Notstromfall

gezeichnet, die Rückwirkungseffekte werden offenbar nur geringfügig kleiner abgeschätzt.

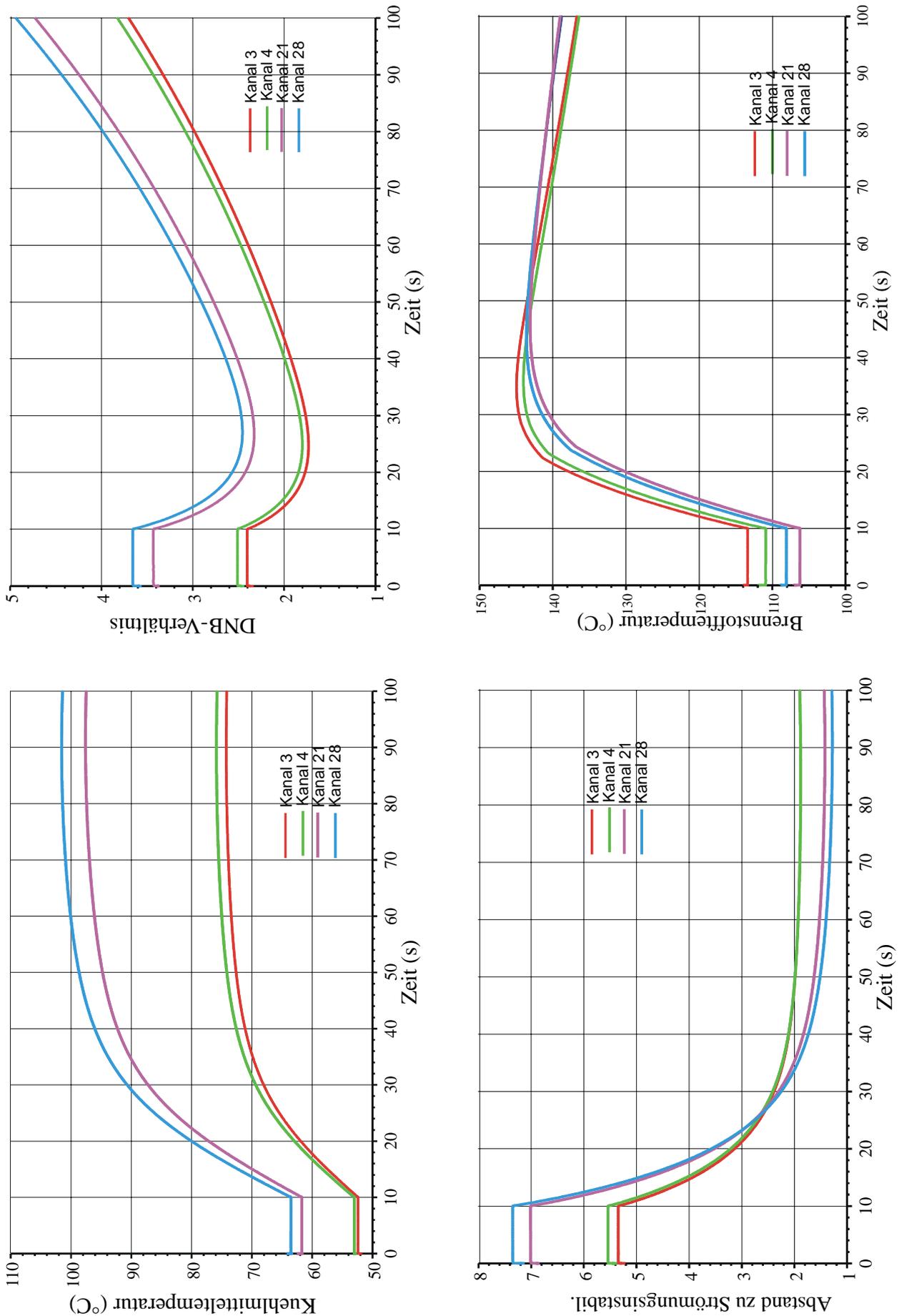


Abbildung 8-11: Thermohydraulische Parameter für den Notstromfall; links oben: zeitlicher Verlauf der Kühlmitteltemperatur; rechts oben: zeitlicher Verlauf des Abstands zu DNB; links unten: zeitlicher Verlauf des Abstands zu OFI; rechts unten: zeitlicher Verlauf der Brennstofftemperatur. Alle Größen werden am Kernaustritt bestimmt.

Ähnlich wie beim Leistungsstörfall sind in Abbildung 8-10 die zugehörigen Reaktorperioden gezeigt, die natürlich aufgrund des schnellen Leistungsabfalls durchweg negativ sind. Bei der numerischen Bewertung sind sie jedoch ein ausgezeichnetes Kriterium für die Güte der Transportrechnung. Tatsächlich ermöglicht erst eine in jedem Zeitschritt sehr gut auskonvergierte Transportrechnung einen zeitlich „glatten“ Verlauf der Reaktorperiode; Unstimmigkeiten aufgrund mangelhafter Konvergenz machen sich hier sofort durch Unstetigkeiten oder Oszillationen bemerkbar.

Abschließend sollen wiederum die thermofluidodynamischen Verhältnisse im Kern betrachtet werden, gezeigt in Abbildung 8-11. Durch die konkurrierenden Prozesse von verschlechterten Kühlbedingungen und Leistungsabnahme durchläuft die Brennstofftemperatur ein relativ flaches Maximum von ca. 145 °C in den Kanälen 3 und 4 (d.h. an der Heißstelle) etwa 20 Sekunden nach Transientenbeginn sowie zeitlich etwas verzögert im Heißkanal 28 bzw. am Dichtesprung (Kanal 21). Die Kühlmitteltemperatur im Heißkanal steigt hingegen monoton mit der Zeit auf einen Wert von ca. 102 °C zum Ende der Berechnung.

Der Abstand zu Strömungsinstabilitäten bleibt für den gesamten betrachteten Zeitraum oberhalb des kritischen Wertes $\eta = 1$. Man erkennt deutlich, daß der Wert für OFI für den Heißkanal Nr. 28 mit der Zeit geringer wird als der für die Heißstelle; bei $T=100$ s gilt dort etwa $\eta = 1,2$. Der Abstand zur kritischen Heizflächenbelastung durchläuft hingegen ein ausgeprägtes Minimum ungefähr zeitgleich mit dem Erreichen der maximalen Brennstofftemperatur und steigt danach auf höhere Werte an. Würde man hingegen das Auftreffen einer Temperaturfront mit erhöhter Eintrittstemperatur berücksichtigen, würde der Abstand zu OFI vermutlich unterhalb von eins sinken. Damit ist jedoch erst nach einer vollständigen Umlaufzeit des Kühlmittels zu rechnen; aufgrund des Auslaufens der Pumpen und dem damit verbundenen Rückgang des Durchsatzes und der Kühlmittelgeschwindigkeit kann man hierfür aus Abbildung 8-8 eine Zeitspanne von rund 180 s ableiten, die etwa um einen Faktor vier größer ist als die nominelle Umlaufzeit (d.h. etwa 46 s), so daß dieser Effekt nicht im obigen Störfallszenario berücksichtigt werden muß.

8.2.3 Ausfall des Sekundärwärmetauschers

Der dritte untersuchte Auslegungsstörfall betrifft den vollständigen Ausfall des sekundären Wärmetauschers. Zugrunde gelegt werden die folgenden Ausgangsdaten:

- Der Reaktor sei zu Beginn im Vollastzustand, analog zum Notstromfall.
- Die Eintrittstemperatur erhöhe sich sprunghaft von 37 auf 52,7 °C, d.h. um eine vollständige Aufheizspanne.
- Es erfolge keine Abschaltung bei einer Kernaustrittstemperatur von >60 °C.

Der Temperatursprung wird durch eine lineare Temperaturrampe mit einer Zeitdauer von 50 ms dargestellt. Die Annahme, daß die Eintrittstemperatur tatsächlich um eine komplette Auf-

heizspanne ansteigt, ist konservativ, da immer mit geringen Temperaturverlusten auch ohne den sekundären Wärmetauscher zu rechnen ist.

Auch bei dieser Transiente wird der Reaktor durch den Rückwirkungseffekt der steigenden Kühlmitteltemperatur bzw. der sinkenden Kühlmitteldichte schnell unterkritisch und die Leistung geht zurück. Der Leistungsverlauf ist für Diffusions- und Transporttheorie in Abbildung 8-12 dargestellt.

Auch hier ist die Übereinstimmung zwischen beiden Modellen ausgezeichnet, die Abweichungen betragen weniger als 1% über den gesamten Transientenverlauf. Dieser Störfall stellt sich in der Tat als wesentlich weniger kritisch heraus als z.B. der Notstromfall, wie auch die Betrachtung der thermohydraulischen Parameter an den höchst belasteten Punkten am Kernaustritt zeigt (Abbildung 8-13). Gut zu erkennen ist das kurzzeitige Maximum in Brennstoff- und Kühlmitteltemperatur, das allerdings aufgrund der schnellen Leistungsabnahme sehr schnell kompensiert wird. Der Abstand zu OFI sinkt daher auch nur kurzfristig auf einen Wert, der unterhalb dem des stationären Zustand liegen, um danach monoton anzusteigen. Für den Transientenverlauf nicht maßgeblich, aber in numerischer Hinsicht interessant ist das Verhalten der Reaktorperiode unmittelbar zu Beginn der Transiente. Durch das Zusam-

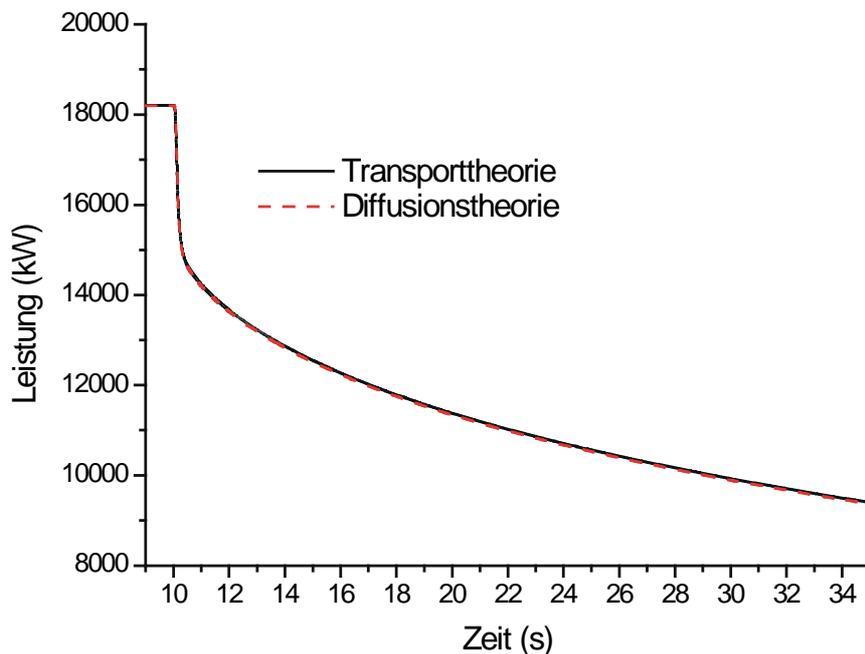


Abbildung 8-12: Leistungsverlauf bei Verlust der sekundären Wärmesenke für Diffusions- und Transporttheorie.

menprallen zweier unterschiedlicher Temperaturschichten errechnet der Code ATHLET geringfügige Druckschwankungen am Kerneintritt von der Größenordnung einiger Hundertstel Bar. Diese sind zwar in der Reaktorleistung kaum zu detektieren, sind aber in der Reaktorperiode durchaus erkennbar.

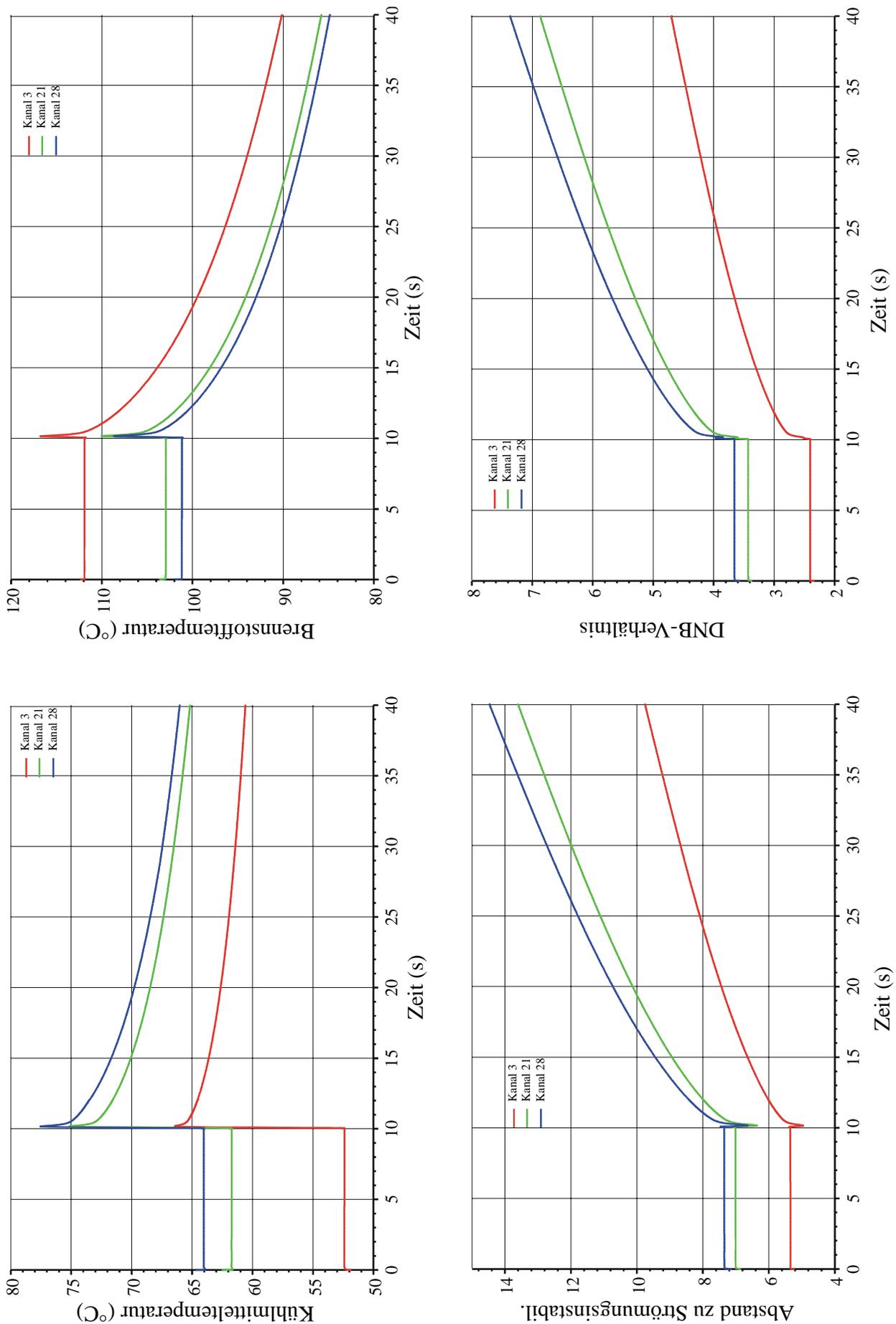


Abbildung 8-13: Thermohydraulische Parameter für den Ausfall der sekundären Wärmesenke; links oben: zeitlicher Verlauf der Kühlmitteltemperatur; rechts oben: zeitlicher Verlauf der Brennstofftemperatur; links unten: zeitlicher Verlauf des Abstands zu OFI; rechts unten: zeitlicher Verlauf des Abstands zu DNB. Alle Größen werden am Kernaustritt bestimmt.

Dies kann als eine Bestätigung dafür gelten, daß der Transportcode in der Lage ist, selbst kleinste Störungen zu berechnen, ohne daß diese in den numerischen Rundungsfehlern „untergehen“. Die in Abbildung 8-14 gezeigten Minima und Maxima des Eintrittsdrucks korrelieren exakt mit den Schwingungen der Reaktorperiode; man beachte, daß der Wert der Reaktorperiode selbst um ca. 5-6 Größenordnungen größer ist als die Schwingungsdauer der gedämpften Schwingung, die im Bild zu beobachten ist. In der Transportrechnung können also selbst solche 10^{-6} -Effekte aufgelöst werden.

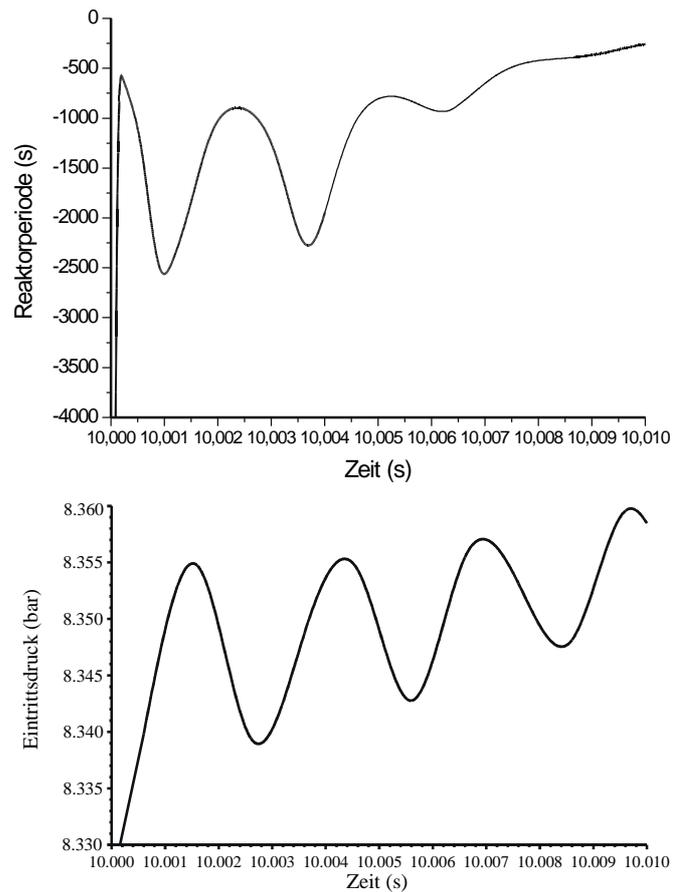


Abbildung 8-14: Druckschwankungen und Reaktorperiode bei Beginn der Transiente (Ausfall des Wärmetauschers)

8.3 Hypothetische Reaktivitätsstörfälle

Die zweite Klasse von Störfällen, die in dieser Arbeit untersucht wurden, sind hypothetische Störfälle, die mit einer großen Reaktivitätszufuhr verbunden sind und bei denen sich alle Systemvariablen auf kurzen Zeitskalen rapide ändern. Betrachtet werden im Folgenden:

- Eine prompt kritische Transiente mit einer Reaktivitätszufuhr von $2,2\% \cong 3\%$. Der schnelle Leistungsanstieg verursacht innerhalb kurzer Zeit massive Dampfbildung im Kern, die einen starken negativen Rückwirkungseffekt zur Folge hat.
- Eine prompt kritische Transiente mit einer Reaktivitätszufuhr von 12% innerhalb eines extrem kurzen Zeitraums von nur 0,2 ms.

Dazu muß grundsätzlich bemerkt werden, daß ein physikalisch plausibler Ereignisablauf zur Einleitung solcher Störfälle beim FRM-II nicht denkbar ist. Im Vordergrund steht auch nicht die genaue Erfassung der Thermofluidodynamik des Reaktorkerns, sondern die Einsatzfähigkeit des zeitabhängigen Transportcodes. In der ersten Transiente wird gezeigt, daß das Transportprogramm in der Lage ist, auch räumlich stark inhomogene Reaktivitätsänderungen und die komplizierten Rückwirkungseffekte durch Dampfbildung auf sehr kurzen Zeitskalen zu behandeln. Bei der Bewertung der Ergebnisse ist dabei zu berücksichtigen, daß die Mo-

dellierung der Zweiphasenströmung in ATHLET für Forschungsreaktoren nicht ausreichend validiert ist.

Bei der zweiten Transiente steht die Untersuchung extrem schneller Vorgänge mit starken räumlichen Änderungen im Vordergrund. Es wird demonstriert, daß das Transportprogramm auf der Basis von Zeitschritten im Sub-Mikrosekundenbereich in der Lage ist, die im Kern stattfindenden Thermalisierungsprozesse zeitlich aufzulösen. Diese schnellen Ausgleichsvorgänge finden i.allg. auf Zeitskalen statt, die sich der quasistationären Betrachtungsweise entziehen; die Verwendung eines voll impliziten Transportcodes ist hier zwingend notwendig.

8.3.1 Prompt kritische Transiente mit 3\$-Reaktivitätszufuhr

Die Ausgangssituation wird wie folgt angenommen:

- Der Kern ist zu Beginn auf 100% Leistungsniveau beim Nennwert des Kühlmitteldurchsatzes.
- Bei $T=10$ s wird die Transiente durch Ziehen des zentralen Regelstabes eingeleitet; dieser wird innerhalb von 50 ms um etwa 4 cm aufwärts bewegt, was dem 1000-fachen der maximal zulässigen Fahrgeschwindigkeit entspricht; die Reaktivitätszufuhr wird durch Anpassung der Stabendposition auf genau 3\$ festgelegt.
- Die Leistung im Kern steigt schnell an, was zur Dampfbildung im Kühlmittel führt, wodurch negative Reaktivität zugeführt wird und die Leistung zurückgeht.

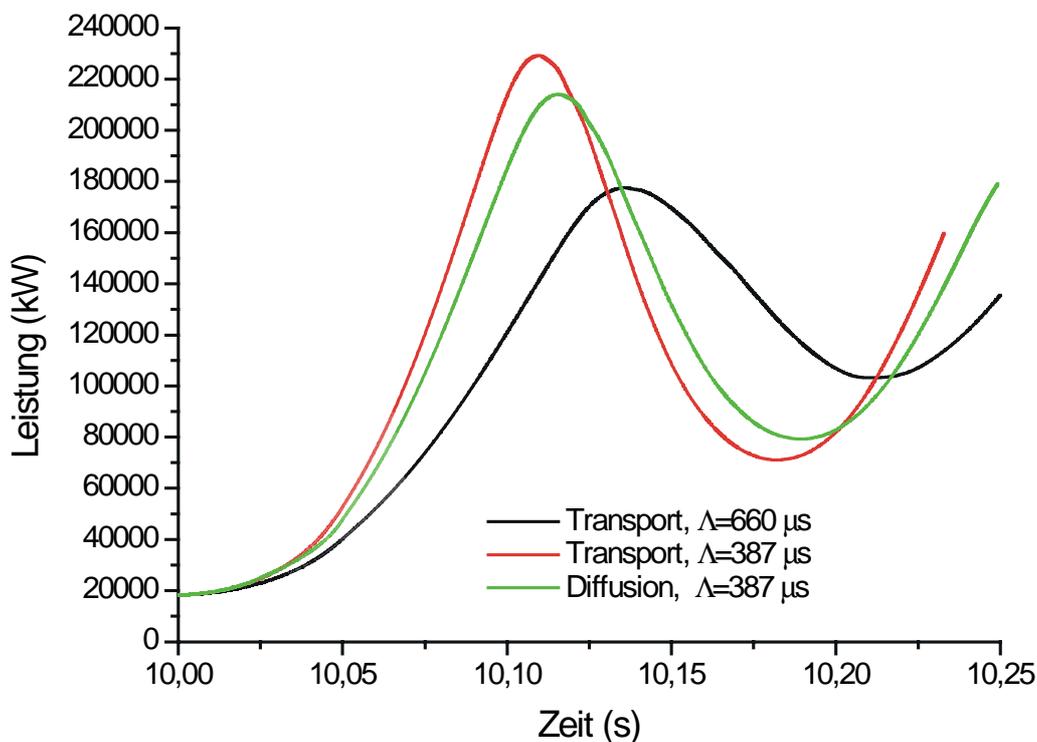


Abbildung 8-15: Leistungsverlauf bei einer prompt kritischen Transiente mit 3\$ Reaktivitätszufuhr; gezeigt werden die Ergebnisse von Transportrechnungen mit und ohne Berücksichtigung der Einbauten sowie einer Diffusionsrechnung mit Einbauten

Im Gegensatz zu den verzögert kritischen Auslegungsstörfällen spielen hier die Einbauten im Moderatortank eine gewichtige Rolle. In Abschnitt 6.3.7 wurde gezeigt, daß die experimentellen Einbauten eine Verringerung der prompten Lebensdauer von $660 \mu\text{s}$ auf $387 \mu\text{s}$ bewirken. Der Leistungsverlauf der 3 β -Transiente ist in Abbildung 8-15 dargestellt: Betrachtet wurde zunächst die Transporttheorie mit und ohne Berücksichtigung der Einbauten, für den Fall mit Einbauten wurde zusätzlich eine Diffusionsrechnung durchgeführt.

Zur Berechnung einer solchen Transiente mußten zunächst die maximal zulässigen Zeitschritte drastisch auf ca. $30 \mu\text{s}$ reduziert werden. Tatsächlich zeigte sich, daß hier der Code ATHLET i.allg. die maximale Zeitschrittweite vorgibt, die im Bereich des Sättigungssiedens durchaus auf weniger als eine Mikrosekunde verringert werden kann. So erforderte die Berechnung von 250 ms Problemzeit eine Gesamtanzahl von 10000 Zeitschritten.

Hier zeigen sich erstmals erhebliche Abweichungen zwischen Diffusionsnäherung und Transporttheorie. Erstere ist offenbar nicht in der Lage, die Rückwirkungen bei stark verringerten Kühlmitteldichten korrekt zu erfassen; der Effekt der Dampfbildung wird hier zu hoch eingeschätzt.

Noch bedeutender ist allerdings der Einfluß der Einbauten: während für den Moderatortank ohne Einbauten die Leistung auf ein Maximum von etwa 170 MW nach 130 ms ansteigt, erreicht der Reaktor mit Einbauten einen Spitzenwert von etwa 230 MW bereits nach 100 ms. Physikalisch ist der weitere Verlauf ebenfalls plausibel: durch die negativen Rückwirkungen geht die Leistung zunächst zurück auf etwa 70 MW; da die Zweiphasenströmung im Kern je-

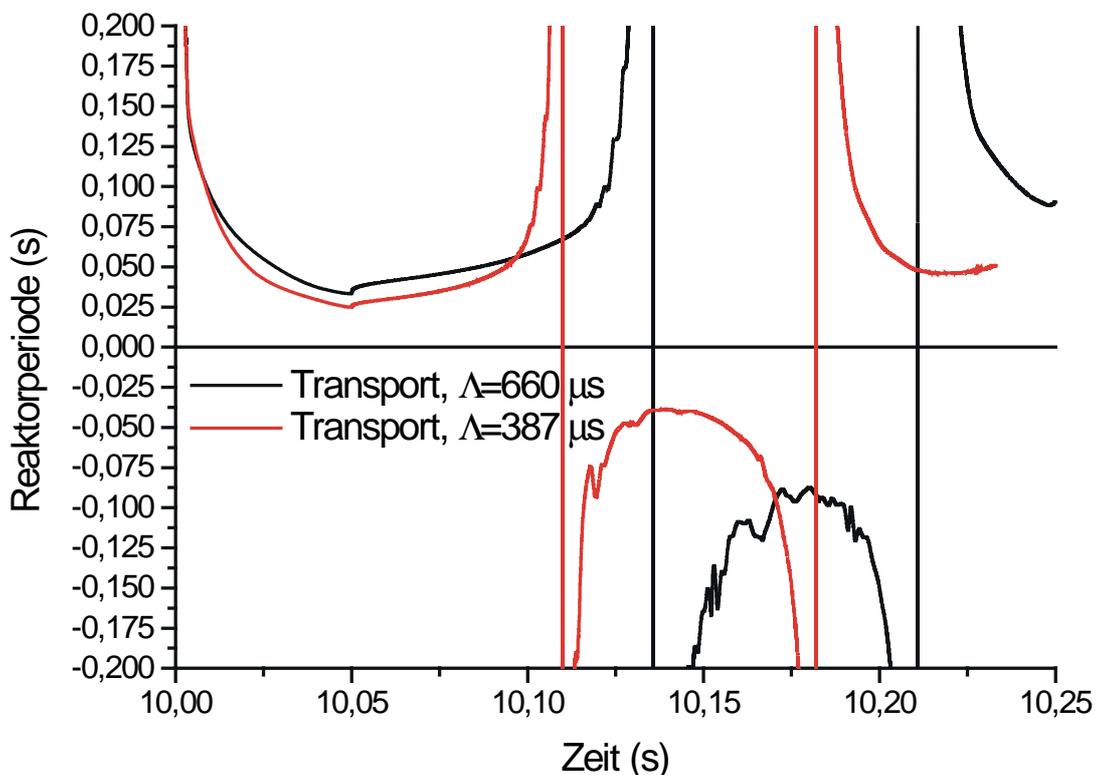


Abbildung 8-16: Reaktorperiode für die 3 β -Transiente, bestimmt aus Transportrechnungen ohne und mit Berücksichtigung der experimentellen Einbauten im Tank ($\Lambda=660 \mu\text{s}$ bzw. $\Lambda=387 \mu\text{s}$).

doch nicht stabil ist und der Regelstab nach wie vor in seiner ausgefahrenen Position verbleibt, kommt es zu einem erneuten Anstieg der Reaktorleistung mit wiederholter Verdampfung des Kühlmittels.

Die Änderung der Reaktivität des Kerns läßt sich sehr gut an der Reaktorperiode veranschaulichen (siehe Abbildung 8-16). Während der Stabbewegung über die ersten 50 ms der Transiente fällt die Periode zunächst auf ihr Minimum von etwa 23 ms (mit Einbauten, 33 ms ohne Einbauten) ab. Solange die Strömung einphasig bleibt (bis etwa 80 ms nach Transientenbeginn) sind die Rückwirkungen nur schwach, die Änderung der Reaktorperiode daher nur gering. Erst mit Einsetzen signifikanter Verdampfung steigt sie rapide an; die „Polstellen“ in Abbildung 8-16 bezeichnen die Zeitpunkte, an denen der Leistungsverlauf umkehrt. An den starken Oszillationen insbesondere bei negativen Periodenwerten erkennt man, daß der Leistungsverlauf in Abbildung 8-15 keineswegs „glatt“ ist, sondern stark durch lokale Rückwirkungseffekte geprägt ist.

Abbildung 8-17 zeigt sehr anschaulich das Verhalten der thermohydraulischen Parameter, z.B. des Dampfgehalts (links oben) für diesen Störfall. Deutlich zu erkennen ist der Zeitpunkt, an dem erstmals Sättigungssieden eintritt (ca. 90 ms nach Transientenbeginn); betroffen sind zunächst die heißesten Kanäle 21 und 28 an der Kernunterkante. Wäre das unterkühlte Sieden korrekt berücksichtigt, würden sich eine signifikante Dampfbildung bereits früher (bei etwa 75 ms), nämlich mit Einsetzen der Strömungsinstabilitäten (OFI) einstellen (siehe links unten), wodurch die Leistungstransiente etwas eher beendet wäre.

Die teilweise starken Oszillationen im Dampfanteil sind bedingt durch das zunehmende Maß an Queraustausch, das zwischen den einzelnen Kanälen stattfindet, um den Druck über die radiale Richtung auszugleichen. Ferner wird in dieser Transiente mehrfach das Regime für den Wärmeübergangskoeffizienten gewechselt: ATHLET verwendet dazu verschiedene Wärmeübergangskorrelationen [LER00], die jeweils für bestimmte Bereiche (parametrisiert nach Überhitzung bzw. Unterkühlung des Fluids und Dampfanteil- bzw. Qualität) tabelliert sind und zwischen denen in Übergangsbereichen interpoliert sind. So findet während der Transiente bis zum ersten Leistungsmaximum ein Übergang vom einphasigen Bereich über das unterkühlte Sieden zum Blasensieden statt, charakterisiert durch einen hohen Nettodampfanteil bei $T=150$ ms nach Transientenbeginn. Nach Durchlaufen des Leistungsminimums bei $T=180$ ms nimmt der Dampfanteil rapide ab; hier beginnt das Regime des Filmsiedens, das durch einen dünnen Dampffilm zwischen beheizter Fläche und Fluid charakterisiert ist. Dadurch verschlechtert sich der Wärmeübergang erheblich und die Wandtemperaturen steigen trotz geringerer Leistung massiv an. Man beachte, daß die Vorschriften zur Berechnung des Abstandes zu DNB in diesem Bereich nicht mehr gültig sind. Ähnliches gilt für die Bestimmung von OFI, das streng genommen nur im unterkühlten Siedebereich physikalische Relevanz besitzt, d.h. für Werte $OFI > 1$.

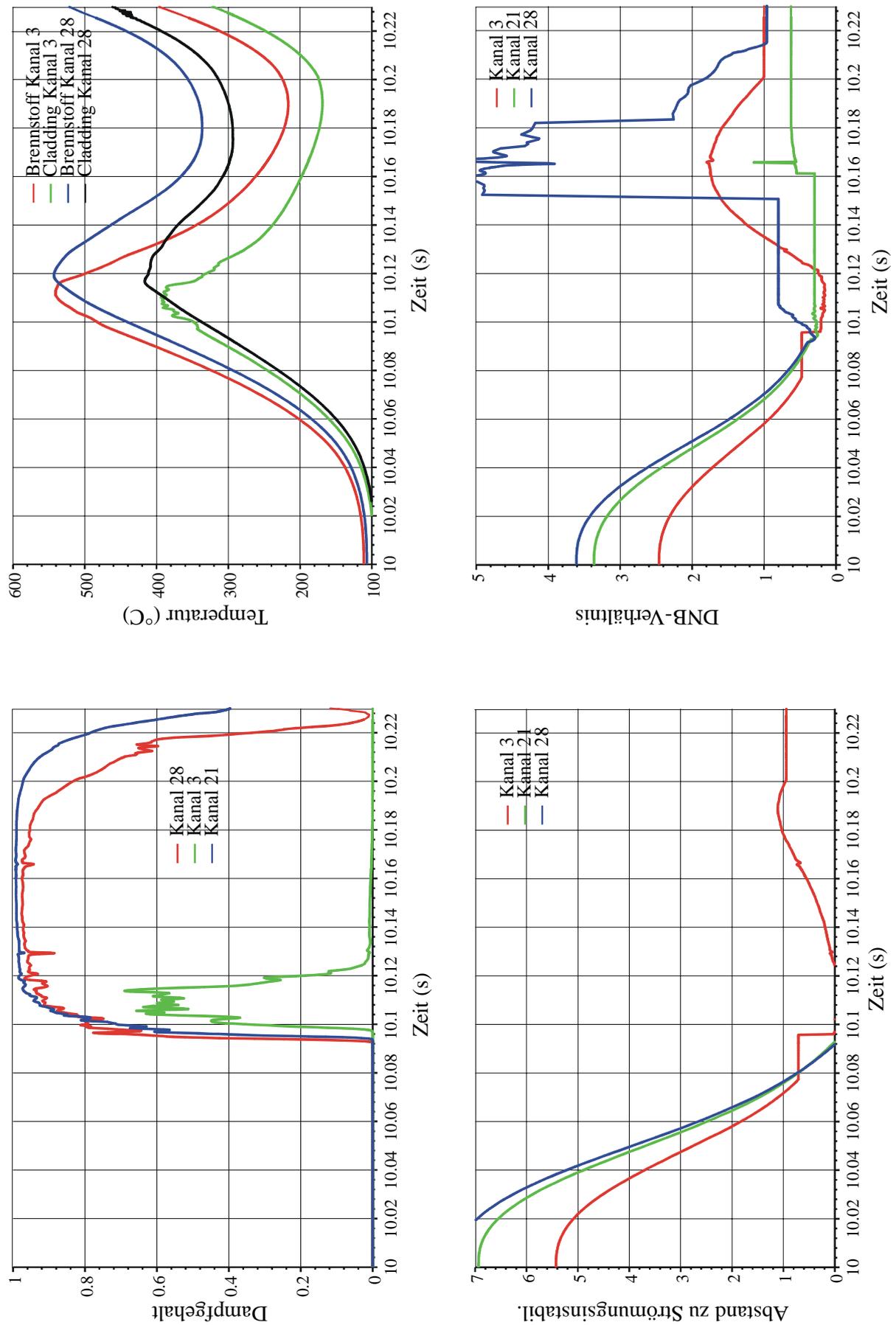


Abbildung 8-17: Thermohydraulische Parameter für die 3\$-Transiente; links oben: Dampfgehalt am Kernaustritt; rechts oben: zeitlicher Verlauf der Brennstofftemperatur; links unten: zeitlicher Verlauf des Abstands zu Strömungsinstabilitäten; rechts unten: zeitlicher Verlauf des Abstands zu DNB.

Die Brennstofftemperatur erreicht erwartungsgemäß bei der maximalen Reaktorleistung ihren ersten Spitzenwert von ca. 550 °C; in den näher am Kerneintritt befindlichen Regionen bleibt hingegen die Plattentemperatur unterhalb des Schmelzpunktes bei etwa 450 °C (man beachte auch die relativ großen Temperaturdifferenz von 150K, die sich nun zwischen Brennstoffzentrum und Cladding aufbaut).

Um das Ausdampfen des Kerns anschaulich darzustellen, wird in Abbildung 8-19 schließlich eine dreidimensionale Darstellung der Kühlmitteldichte in allen 32 Unterkanälen gezeigt. Man erkennt deutlich das Einsetzen der Dampfbildung zunächst am Außenrand der Kernunterkante insbesondere in der Nähe des Heißkanalaustritts. Über einen kurzen Zeitraum tritt auch an der Heißstelle signifikante Dampfbildung ein (siehe auch rechts oben). Während und nach Überschreiten des Leistungsmaximums ist schließlich ein großer Anteil der unteren Kernhälfte ausgedampft. Betrachtet man den zeitlichen Verlauf der über den gesamten Kern gemittelten Kühlmitteldichte (Abbildung 8-18), so kann der maximal während der Transiente erreichte Dampfanteil zu etwa 15 % abgeschätzt werden. Bei der Bewertung dieser Transiente ist neben den Unsicherheiten in den zweiphasigen Wärmeübergangskorrelationen auch zu beachten, daß der Verlauf zusätzlich von den am Kerneintritt gewählten Randbedingungen abhängt. So ist der Massenstrom und der Eintrittsdruck während der gesamten Transiente als konstant angenommen worden; tatsächlich ist jedoch bei diesem System mit Parallelkanalinstabilitäten und der Blockade einzelner Kühlkanäle zu rechnen, die u.U. zu erheblichen Druckoszillationen und Durchsatzschwankungen führen, aber mit dem hier verwendeten Einkanal-Modell ohne explizite Berücksichtigung des Primärkühlmittelkreislaufs nicht erfaßt werden können.

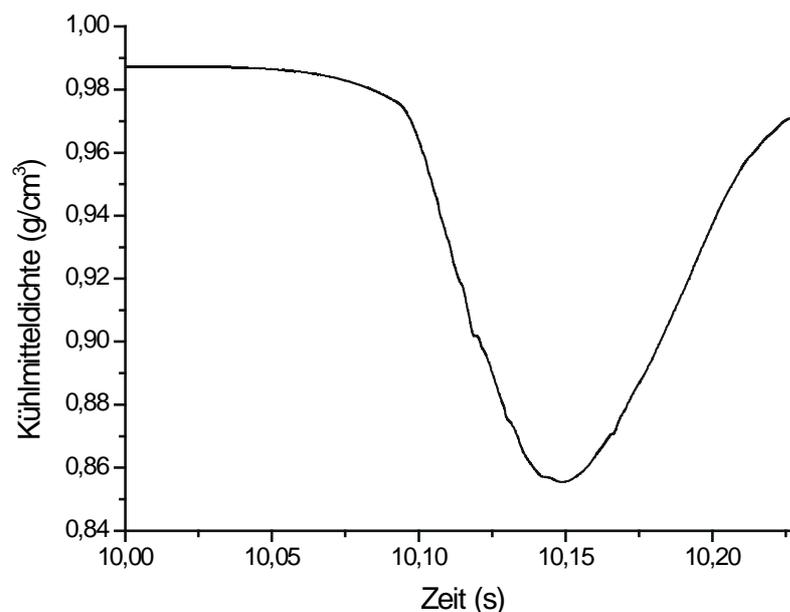


Abbildung 8-18: Über den gesamten Kern gemittelte Kühlmitteldichte während der 3 β -Transiente

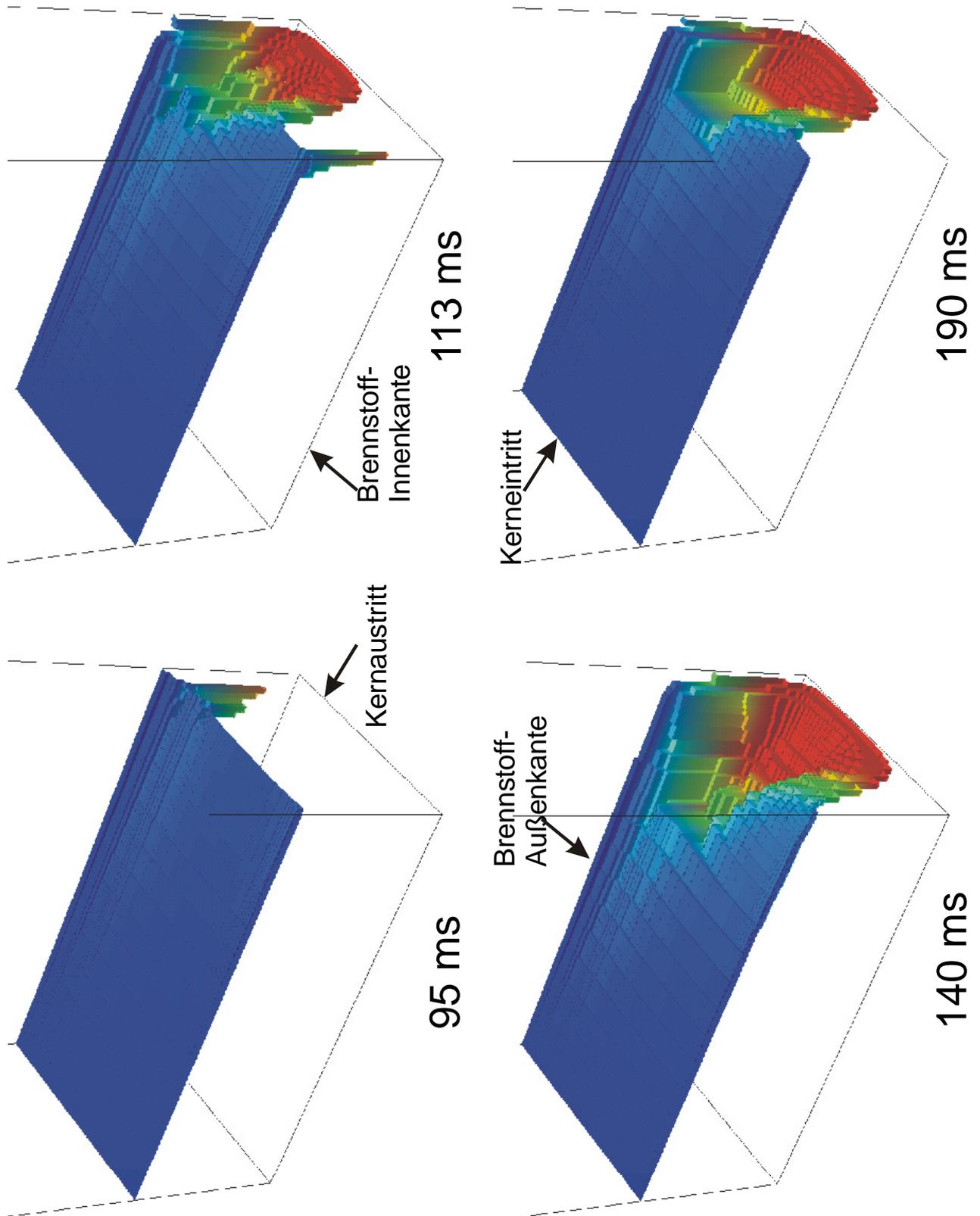


Abbildung 8-19: Darstellung der zeitlichen Entwicklung der Kühlmitteldichte während der 3\$-Transiente; blaue Bereiche entsprechen einer hohen Kühlmitteldichte von annähernd 1 g/cm^3 , rote Bereiche solche niedriger Dichte bzw. hohen Dampfanteils.

8.3.2 Prompt kritische Transiente mit extremer Reaktivitätszufuhr

Die Leistungsfähigkeit des gekoppelten Transportcodes soll nun noch an einer prompt kritischen Transiente mit extremer Reaktivitätszufuhr demonstriert werden; Ziel des Einsatzes ist ausschließlich eine numerische Bewertung des Codes.

Durch Auswurf des Steuerstabs innerhalb eines sehr kurzen Zeitintervalls soll eine Transiente mit einer Reaktivitätszufuhr von insgesamt 12% eingeleitet werden. Folgender Ablauf wurde simuliert:

- Ausgangszustand des Reaktors ist wiederum der Vollastbetrieb bei nominalem Kühlmitteleinsatz.
- Die Steuerstabbewegung findet über einen Zeitraum von nur 0,2 ms statt; in dieser Zeit bewegt sich der Stab um ca. 30 cm aufwärts, entsprechend einer konstanten Geschwindigkeit von 1500 m/s.

Gerade für das Zeitintervall der Stabbewegung muß die Zeitschrittweite sehr stark reduziert werden; als angemessen erwiesen haben sich hier Intervalle von 50-150 Nanosekunden, so daß für die Zeitdauer der Stabbewegung etwa 2000 Zeitschritte benötigt werden. Nach Stillstand des Stabes beträgt die Schrittweite maximal 3 Mikrosekunden, wird allerdings bei Einsetzen der massiven Dampfbildung im Kern von ATHLET so stark herabgesetzt, daß eine Fortsetzung der Rechnung nicht mehr möglich ist.

Da die hier betrachteten Vorgänge im Kern auf Zeitskalen ablaufen, die von derselben Größenordnung sind wie die prompte Lebensdauer, wurde die Ortsabhängigkeit der Neutronengruppengeschwindigkeiten in radialer Richtung in etwa 50 Teilintervalle aufgelöst, um den

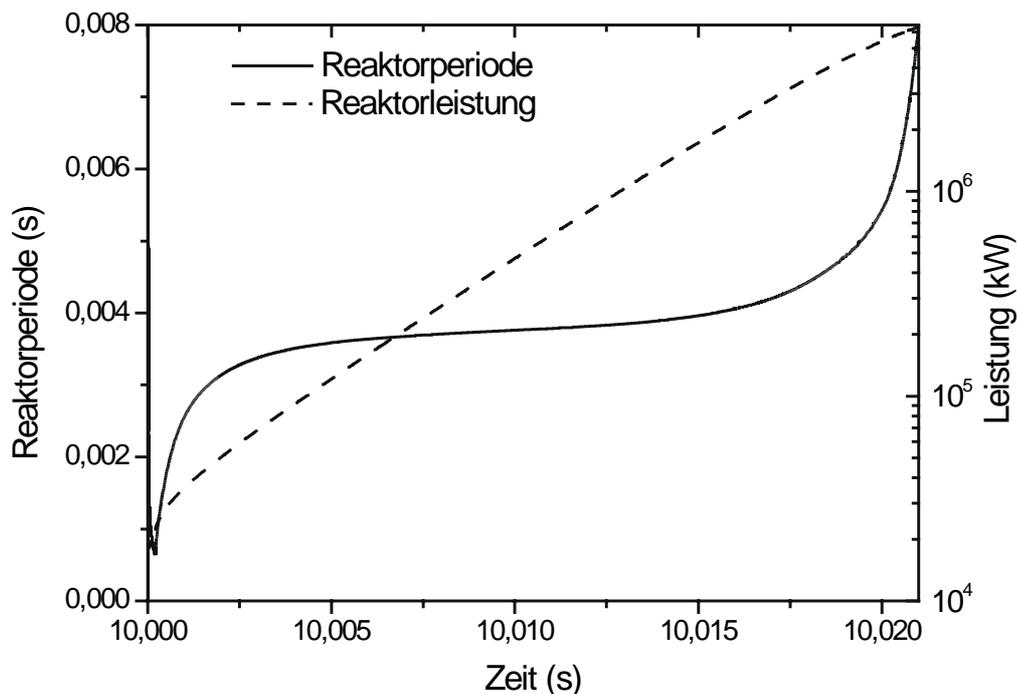


Abbildung 8-20: Leistungsverlauf und Reaktorperiode für eine Transiente mit 12% Reaktivitätszufuhr

bereits erwähnten Effekt des „Absorption Heating“ in der Nähe des Steuerstabs und die im Mittel wesentlich niedrigeren Energien im Schwerwassertank angemessen zu berücksichtigen. Die Rechnung wurde in 16(5) Gruppen ohne Simulation der Einbauten durchgeführt.

Der Leistungsverlauf und die zugehörige Reaktorperiode sind in Abbildung 8-20 dargestellt. Zu erkennen ist zunächst der sehr schnelle Leistungsanstieg auf insgesamt 6,5 GW innerhalb von 20 ms. Interessanter ist jedoch der Verlauf der Reaktorperiode: diese sinkt während der Steuerstabbewegung zunächst rapide ab auf Werte unterhalb einer Millisekunde, um sich anschließend an einen asymptotischen Wert anzuschmiegen, der der freien, fast exakt exponentiellen Zeitentwicklung des Reaktors entspricht. Erst das Einsetzen starker Rückwirkungen durch Dampfbildung etwa 17 ms nach Transientenbeginn läßt den Wert der Periode wieder stark ansteigen und wird ggf. die Leistungsexkursion beenden. Man erkennt ferner, daß die Rückwirkungen im einphasigen Bereich so gut wie keinen Einfluß auf die Kinetik des Reaktors haben; der wesentliche Abschaltmechanismus ist daher der Voideffekt.

Die Punktkinetik sagt für den Ablauf einer prompt kritischen Transiente in einem Reaktor ohne Rückwirkungsprozesse einen Leistungsverlauf gemäß:

$$P \sim \exp\left(\frac{\rho - \beta}{\Lambda} t\right) = \exp\left(\frac{1}{\omega} t\right) \quad \Rightarrow \quad \Lambda = \omega (\rho - \beta) \quad (8-1)$$

voraus; so ergibt sich ein alternatives Rechenverfahren zur Bestimmung einer „dynamischen“ prompten Lebensdauer Λ , die sich aus der asymptotischen Reaktorperiode ω in Abbildung 8-20 ableiten läßt. Λ war bereits in Abschnitt 6.3.7 für verschiedene Steuerstabpositionen aus stationären Betrachtungen gewonnen worden; man sollte beim Vergleich allerdings bedenken, daß solche stationären Rechnungen stets auf der Gültigkeit einer Störungstheorie erster Ordnung beruhen, die bei solch massiven Reaktivitätszufuhren u.U.

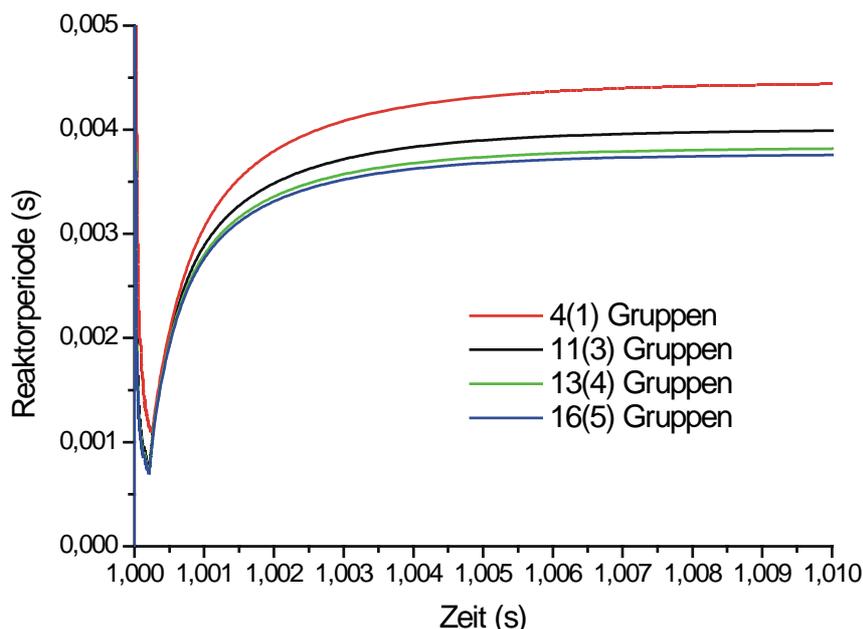


Abbildung 8-21: Asymptotische Reaktorperiode für verschiedene Energiegruppenanzahlen für die prompt kritische Transiente

keine akzeptablen Ergebnisse mehr liefern wird. So ergibt sich aus dem transienten Verhalten bei einer Reaktorperiode von etwa 3,8 ms nun statt der stationären Lebensdauer von ca. 560 μ s (siehe 6.3.7) eine „dynamische“ von 435 μ s, d.h. eine Differenz von rund 20%.

Aber auch in diese alternative rechnerische Bestimmung der Lebensdauer gehen erhebliche Unsicherheiten mit ein. In der vorliegenden Rechnung wurden 16(5) Gruppen benutzt; zur Überprüfung des Einflusses der Gruppenanzahl wurden ferner Rechnungen, allerdings ohne Rückwirkungen, für 4(1), 12(3) und 13(4) Energiegruppen durchgeführt. Der jeweils erreichte asymptotische Werte der Reaktorperiode ist in Abbildung 8-21 abzulesen. Je geringer die Gruppenanzahl, desto höher ist offenbar die Reaktorperiode und damit auch die berechnete prompte Lebensdauer. Dieses Verhalten ist bei der Bestimmung einer „dynamischen“ Lebensdauer zu beachten und ggf. durch Rechnungen mit möglichst vielen Energiegruppen zu überprüfen. Hier im Beispiel erhält man z.B. Differenzen bis zu 15% in der dynamischen Lebensdauer.

Für diese schnelle Transiente ergibt sich ein weiterer interessanter Gesichtspunkt hinsichtlich der Ausbreitung der Neutronen. Auf den betrachteten Zeitskalen sollte es möglich sein, die Propagation zumindest der thermischen Neutronen über das Gesamtsystem zeitlich und räumlich aufzulösen, da deren Gruppengeschwindigkeit nur etwa $3 \cdot 10^5$ cm/s beträgt und so

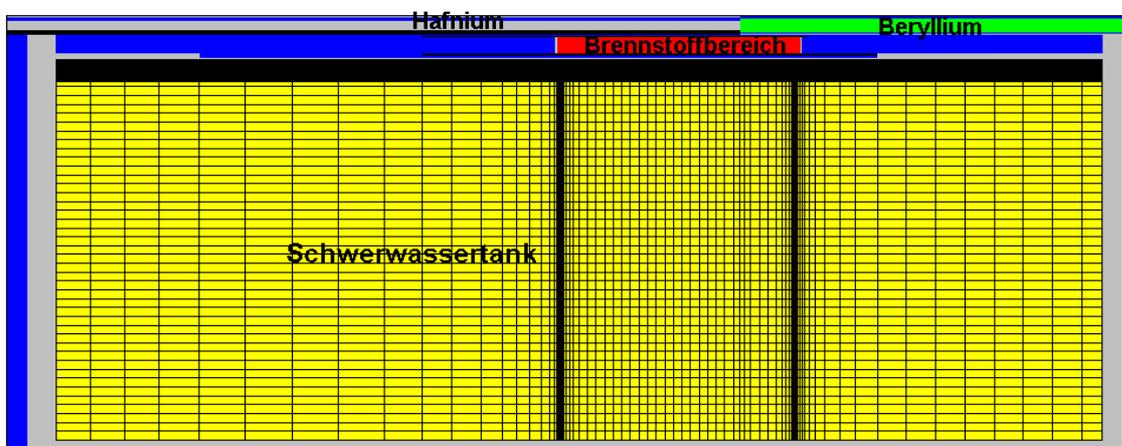


Abbildung 8-22: Materialzoneneinteilung und Gitternetz in der rz-Ebene für den gesamten FRM-II

selbst für eine stoßfreie Durchquerung des Moderatortanks etwa eine Millisekunde benötigt wird. Da die Darstellung der Gruppenflüsse aufgrund des enormen Leistungsanstiegs nicht für eine Veranschaulichung geeignet ist, wurden hier die während der Transiente in jedem Zeitschritt errechneten lokalen „Reaktorperioden“ für die niedrigste thermische Gruppe aufgezeichnet. Ihre inversen Werte sind ein gutes Maß für die zeitliche Änderung des Neutronenflusses.

Zum besseren Verständnis der Vorgänge ist in Abbildung 8-22 nochmals die r-z-Geometrie sowie das gewählte Maschengitter für den FRM-II gezeigt; gekennzeichnet sind insbesondere der Moderatortank sowie die Kernregion mit dem Hafnium- bzw. Berylliumteil des Steuerstabes.

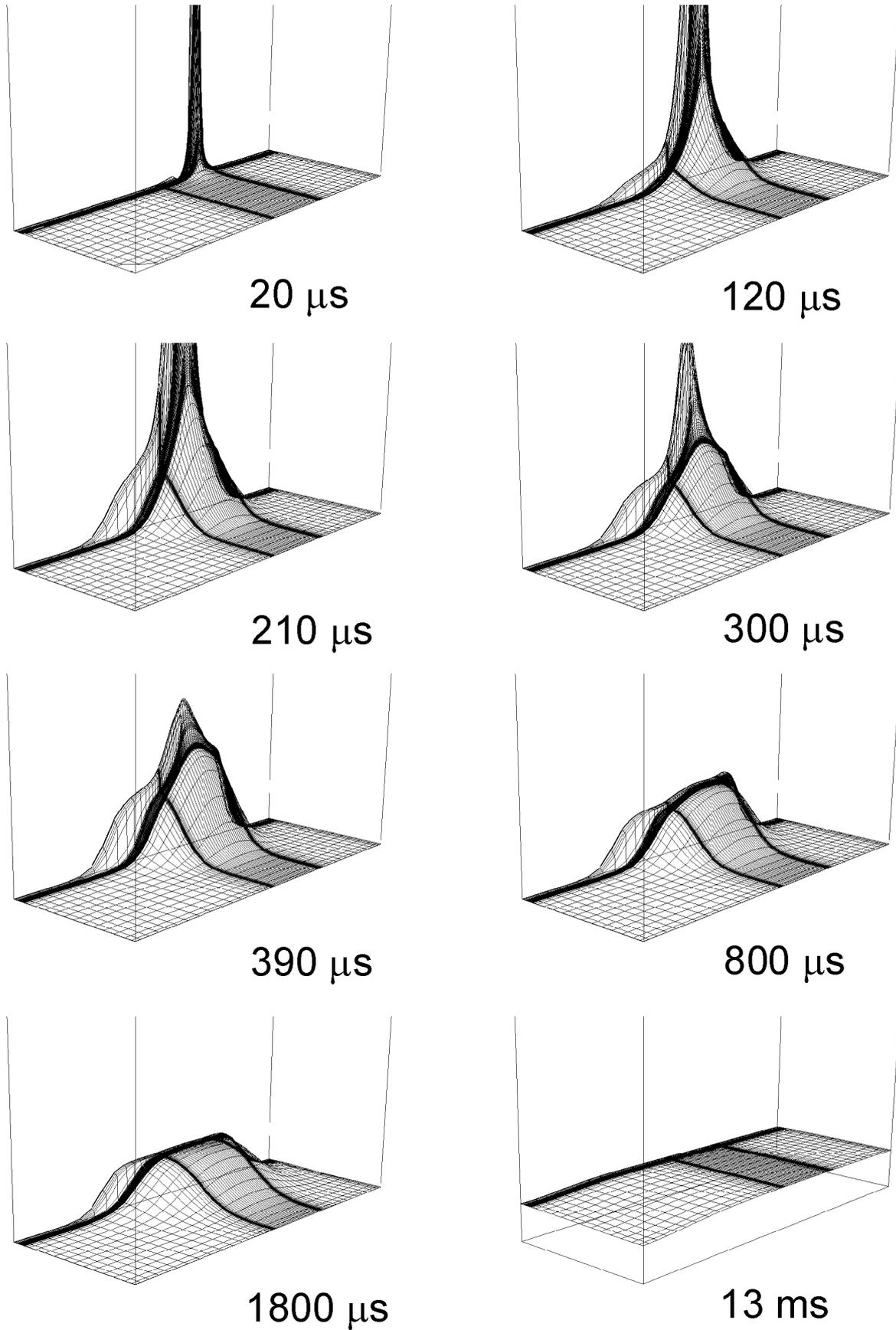


Abbildung 8-23: Darstellung der räumlich aufgelösten inversen Reaktorperiode der thermischen Gruppe für die prompt kritische Transiente; das Gitter entspricht dem in Abbildung 8-22 gezeigte.

Die in Abbildung 8-23 dargestellte Bildsequenz zeigt auf demselben Gitter sehr anschaulich die Ausbreitung der durch die Steuerstabbewegung im Überschuß produzierten Neutronen über das gesamte System. Bei Beginn der Stabbewegung erhöht sich der thermische Fluß zunächst nur in unmittelbarer Nähe der Hafnium-Beryllium-Grenzschicht und dem direkt benachbarten Kühlkanal; mit fortschreitendem Ersatz von Hafnium durch Beryllium im Kern dehnt sich dieser Peak immer weiter entlang der Kernachse, aber auch seitlich in den Brennstoff und den Moderatortank aus. Die Beschränkung auf die unmittelbare Kernumgebung zu Beginn der Transiente und die schnelle Thermalisierung der Neutronen im Beryllium und insbesondere im Kühlwasser erklärt die zunächst rapide abfallende Reaktorperiode; erst wenn die Teilchenzahlbilanz durch einen wesentlichen Anteil von schwerwassermoderierten Neutronen dominiert wird, ist wieder mit einem Anwachsen zu rechnen. Nach Ende der Stabbewegung bei $T=200\ \mu\text{s}$ erfolgt die Ausbreitung der thermischen Neutronen zusehends gleichmäßiger und in alle Raumrichtungen ähnlich. Erst jedoch mit der kompletten Abflachung des Profils nach ca. 13 ms erfolgt der Übergang in den asymptotischen Bereich, in dem die zeitliche Leistungsentwicklung exponentiell verläuft, das räumliche Leistungsprofil unverändert bleibt und die Umverteilung der Neutronen abgeschlossen ist.

8.4 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde der Einsatz des gekoppelten Modells aus Thermofluiddynamik und zeitabhängiger Neutronentransporttheorie für verschiedene Auslegungsstörfälle des FRM-II sowie zwei hypothetische Reaktivitätstransienten beschrieben.

Betrachtet wurden zunächst die Auslegungsstörfälle, in denen sich die räumliche Verteilung des Neutronenflusses nur schwach ändert. Durch die Anwendung von Neutronentransporttheorie können zu jedem Zeitpunkt genaue Aussagen über den Reaktivitätszustand des Kerns und über die thermohydraulischen Variablen des Gesamtsystems gemacht werden können. Es wurden geeignete lokale Rückwirkungsmodelle entwickelt, die für das einphasige Strömungsregime sicherlich ausreichend sind, für zweiphasige Strömungen hingegen noch einer Validierung bedürfen.

Die hypothetischen, prompt kritischen Transienten sollen hingegen die numerischen Fähigkeiten des Transportcodes demonstrieren, auch räumlich stark inhomogene Rückwirkungseffekte auf kurzen Zeitskalen erfassen zu können. So kann z.B. der Effekt massiver lokaler Dampfbildung, aber auch die Umverteilung thermischer Neutronen durch schnelle Änderungen der Kerngeometrie berechnet werden.

9 Zusammenfassung

In dieser Arbeit ist ein neues transientes Neutronentransportprogramm entwickelt worden, das die zeitabhängige Boltzmann-Gleichung in der Diskrete-Ordinaten-Formulierung löst, ohne dabei Einschränkungen oder Näherungen hinsichtlich der Behandlung der Zeitvariablen machen zu müssen. Dies wird durch eine unbedingt stabile, voll implizite Zeitdiskretisierung und eine dynamische Schrittweitenanpassung erreicht.

Grundlage dieses transienten Codesystems ist der stationäre S_N -Code DORT, dessen Entwicklung bis in die 70er Jahre zurück reicht. Aufgrund der umfangreichen Anwendererfahrung gehört er zu den robustesten deterministischen Transportcodes und ist für die unterschiedlichsten Anwendungen validiert worden. DORT wurde im Rahmen dieser Arbeit ausführlich mit anderen stationären Transportcodes verglichen; dabei stellte sich die im Code implementierte Diskrete-Ordinaten-Methode im direkten Vergleich mit P_N - oder integralen Transportmethoden als der numerisch effizienteste Ansatz heraus.

Der Code DORT wurde in ein übergreifendes Programmgerüst eingebunden, das neben den zahlreichen programmtechnischen Erweiterungen für die Implementierung der Zeitabhängigkeit auch eine verbesserte Speicherverwaltung und Eingabedatenaufbereitung enthält. Die Konvergenz des iterativen Lösungsverfahrens wurde um mehrere Größenordnungen verbessert, um die in zeitabhängigen Rechnungen wesentlich schärferen Konvergenzkriterien erfüllen zu können. Dies wurde erreicht durch eine optimierte Iterationsstrategie sowie durch den Einbau von Spaltdichte-Extrapolationsmechanismen und einer verbesserten Behandlung der thermischen Energiegruppen innerhalb des Iterationszyklus. Außerdem wurde durch die Verwendung eines Flußextrapolationsverfahrens der Rechenaufwand für die Lösung eines transienten Zeitschrittes gegenüber einer stationären Rechnung erheblich reduziert.

Zur Erfassung von Rückwirkungseffekten wurde das Neutronentransportprogramm mit dem in der GRS entwickelten Thermofluiddynamikcode ATHLET gekoppelt. Durch die flexible Kopplung können beliebige neutronenkinetische Maschengitter auf die ATHLET-Nodalisation des untersuchten Systems abgebildet werden. Zwischen Neutronenkinetik und Thermohydraulik werden dann während der Transiente die nodalen nuklearen Leistungsdichten sowie die für die Bestimmung der Rückwirkungseffekte wichtigen thermohydraulischen Parameter, z.B. Kühlmitteltemperatur, Kühlmitteldichte und Brennstofftemperatur, in jedem Zeitschritt ausgetauscht. So können zu jedem Zeitpunkt der Transiente genaue Aussagen sowohl über den Reaktivitätszustand und die Neutronenflußverteilungen als auch über die thermohydraulischen Zustandsvariablen gemacht werden. Die Berechnung der nuklearen Wirkungsquerschnitte zur Erfassung der Rückwirkungen wird in einem separaten Modul

durchgeführt, das die zum jeweiligen Systemzustand gehörigen Querschnitte aus vorbereiteten Basisbibliotheken durch Interpolation bestimmt. Durch die Verwendung hochoptimierter Interpolationsroutinen kann dieser rechenintensive Programmteil ebenfalls für jeden Zeitschritt ausgeführt werden.

Insgesamt wurde somit ein Programmsystem entwickelt, das sehr flexibel ist und auf eine breite Klasse von Problemen angewendet werden kann. Zu den besonders hervorzuhebenden Eigenschaften gehören neben den bereits erwähnten:

- Die Verwendung beliebig vieler Energiegruppen; dadurch können sowohl schnelle Systeme, aber durch die optimierte Behandlung der Aufwärtsstreuung auch thermische Reaktoren effizient behandelt werden.
- Die S_N -Quadratur und die Streuordnung können frei vorgegeben werden und sind prinzipiell nur durch die Rechenzeit bzw. durch die Ordnung der Legendre-Entwicklung der verfügbaren Querschnitte limitiert.
- Die Anzahl der (üblicherweise sechs) Vorläufergruppen kann frei festgelegt werden; darüber hinaus können die Energiespektren der verzögerten Neutronen im Code entweder explizit spezifiziert oder durch die Wahl eines β_{eff} berücksichtigt werden.
- Die Neutronengeschwindigkeiten in der zeitabhängigen Transportgleichung können als globale Gruppenwerte spezifiziert werden, es ist aber auch die Verwendung räumlich variabler Gruppengeschwindigkeiten möglich.
- Das Transportprogramm verfügt ferner über eine geometrische Kritikalitätssuche sowie über einen optionalen Berechnungsmodus zur Bestimmung punktkinetischer Parameter, für den zusätzlich die adjungierte Transportgleichung gelöst wird.
- Neben dem Code DORT ist im gekoppelten Programmsystem ein im Rahmen dieser Arbeit entwickelter, hochoptimierter Diffusionscode implementiert. Dieser kann z.B. zu Vergleichen mit Transporttheorie oder für schnelle Vorausrechnungen genutzt werden.

Die Leistungsfähigkeit des gekoppelten Codes wurde anhand des Forschungsreaktors FRM-II als einem realen und anspruchsvollen Anwendungsbeispiel demonstriert. Diese Reaktor-anordnung stellt hohe Anforderungen sowohl an die neutronenkinetische als auch an die fluiddynamische Modellierung. So ist es notwendig, die räumlich stark inhomogene Kompaktkernanordnung nicht nur durch ein sehr fein gewähltes Maschengitter, sondern auch durch eine große Anzahl von Energiegruppen zu beschreiben, um die steilen Flußgradienten und die ungleichmäßige Leistungsverteilung im Kern korrekt zu erfassen. Bedingt durch den großen Anteil an Aufwärtsstreuung und das rechentechnisch ungünstige Streuverhältnis, z.B. $\sigma_S/\sigma_T > 0,9$ im Moderatortank, ist außerdem die in Transientenanalysen erforderliche hohe Konvergenz der Gruppenflüsse ($< 10^{-6}$) und Spaltdichten ($< 10^{-7}$) mit einem erhöhten numerischen Aufwand verbunden. Die Beschreibung von Rückwirkungen wird schließlich durch die

komplexe Modellierung der Kühlmittelströmung in den engen, evolventenförmigen Kühlspalten sowie die aufwendige Berechnung der Wirkungsquerschnitte erschwert.

In dieser Arbeit ist es gelungen, „Best-Estimate“-Analysen für den FRM-II mit dem gekoppelten Programmmodell durchzuführen. Dabei wurden zunächst drei Auslegungsstörfälle des FRM-II betrachtet, namentlich der Leistungsstörfall, der Notstromfall und der Ausfall des Sekundärwärmetauschers. Diesen Störfällen ist gemeinsam, daß sie auf relativ langen Zeitskalen von 5 bis 100 s ablaufen. Obwohl die maximale Zeitschrittweite im voll impliziten Programmmodell durch die Konvergenzgeschwindigkeit des iterativen Lösungsverfahrens limitiert ist, konnten alle drei Transienten mit einigen hundert bis max. 5000 Zeitschritten und entsprechend geringer Rechenzeit berechnet werden.

Besonders zum Tragen kommen die Stärken des gekoppelten Programmsystems bei zwei hypothetischen Reaktivitätsstörfällen des FRM-II. Hier wurden extrem große und in kurzen Zeiten zugeführte Reaktivitäten von 2,2% und 12% betrachtet. Bei diesen Reaktivitätstransienten findet die Änderung der Formfunktion von Neutronenflüssen und Spaltdichten auf sehr kurzen Zeitskalen statt und kann daher durch ein quasistationäres Verfahren nicht erfaßt werden. Mit dem voll impliziten Schema werden dagegen sowohl die räumliche Umverteilung der Neutronen als auch die starken räumlichen Rückwirkungseffekte, z.B. bei lokaler Verdampfung des Kühlmittels, durch die Modellierung korrekt beschrieben.

Zusammenfassend läßt sich feststellen, daß es dank der heute zur Verfügung stehenden Rechnerkapazitäten möglich ist, realistische Störfallanalysen für komplexe zweidimensionale Anordnungen mit Transporttheorie, in vielen Energiegruppen und mit voll impliziter Zeitdiskretisierung durchzuführen.

Eine Erweiterung auf dreidimensionale Geometrien kann durch den Austausch des 2D-Transportcodes DORT gegen den 3D-Code TORT erreicht werden. Aufgrund der ähnlichen Programmstruktur würden dabei große Teile des transienten Codesystems unverändert bleiben. Die Lösungsverfahren für komplexe 3D-Anordnungen lassen sich darüber hinaus erheblich optimieren, wenn man in Betracht zieht, daß die Diskrete-Ordinaten-Methode ein erhebliches Parallelisierungspotential besitzt, da die verschiedenen Ordinatenrichtungen zeilenweise voneinander entkoppeln und so auf mehrere Prozessoren verteilt werden können. Entsprechende Entwicklungsarbeiten zur Anpassung des Codes TORT für „Shared-Memory“-Architekturen existieren bereits.

Eine weitere Verwendung kann der zeitabhängige Neutronentransportcode bei der Berechnung von fortschrittlichen Reaktorkonzepten, wie z.B. den gasgekühlten Hochtemperaturreaktoren oder Anordnungen mit kompaktem Kern, aber auch bei der Untersuchung von schnellen Reaktoren finden. Solche Anlagen werden üblicherweise mit zweidimensionalen, zylindersymmetrischen Modellen dargestellt und sind in ihrer Komplexität, d.h. sowohl hinsichtlich der Anzahl der räumlichen Maschenpunkte als auch der Anzahl der Energiegrup-

pen, vergleichbar mit dem in dieser Arbeit verwendeten FRM-II-Modell. Die entwickelten Rechenmethoden würden sich also für die Transientenanalysen solcher Systeme eignen.

Ein weiteres Anwendungsfeld eröffnet sich für die sog. beschleunigergetriebenen Systeme (ADS=Accelerator Driven Systems), die heute wegen ihrer inhärenten Sicherheitsmerkmale und ihres Potentials zur Transmutation langlebiger Aktinide verstärkt diskutiert und untersucht werden. Zur Simulation solcher Systeme müßte der bestehende Transportcode lediglich um einen festen Quellterm zur Beschreibung der Neutronenkaskade, die durch den Protonenstrahl des externen Beschleunigers erzeugt wird, erweitert werden. Dabei müßte sowohl die energetische Verteilung der Kaskadenneutronen als auch deren Richtungsanisotropie angemessen berücksichtigt werden.

Das Kernstück dieser Arbeit, das zeitabhängige Neutronentransportmodell mit voll impliziter Zeitdiskretisierung und der Kopplung an die Thermohydraulik, hat also neben der Anwendung auf Forschungsreaktoren einen weiten Einsatzbereich für fortschrittliche Reaktorkonzepte, für die nun Störfallanalysen mit erhöhter Genauigkeit durchgeführt werden können.

Anhang A : Darstellung der Flußmomente und Entwicklung der Streuquelle in Sphärische Harmonische

Die Entwicklung des Streuquerschnitts in Legendre-Polynome wurde bereits in Kapitel 2 beschrieben und lautet mit den Momenten Σ_s^l und der maximalen berücksichtigten Streuordnung L :

$$\Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') = \sum_{l=0}^L (2l+1) \Sigma_s^l(\vec{r}, E' \rightarrow E) P_l(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}'). \quad (A-1)$$

Setzt man diesen Ausdruck in die integrale Darstellung der Streuquelle ein:

$$q_{\text{Streu}}(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}) = \int dE' \int d\vec{\Omega}' \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}'), \quad (A-2)$$

dann erhält man mit den Additionstheoremen der Legendre-Polynome und den Eigenschaften der Kugelfunktionen zunächst folgenden Ausdruck in den assoziierten Legendre-Funktionen P_l^m :

$$P_l(\vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') = \frac{1}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\vec{\Omega}') Y_{lm}(\vec{\Omega}) = P_l^0(\xi) P_l^0(\xi') + 2 \sum_{m=1}^l \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\xi) P_l^m(\xi') \cos(m(\omega - \omega')) \quad (A-3)$$

$$P_l^0(\xi) = P_l(\xi)$$

und daraus die Streuquelle:

$$q_{\text{Streu}}(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}) = \int dE \sum_{l=0}^L (2l+1) \Sigma_s^l(\vec{r}, E' \rightarrow E) \left\{ P_l^0(\xi) \int_{-1}^1 d\xi' \int_0^{2\pi} d\omega' P_l^0(\xi') \psi(\vec{r}, E', \xi, \omega) + 2 \sum_{m=1}^l \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\xi) \int_{-1}^1 d\xi' \int_0^{2\pi} d\omega' P_l^m(\xi') \cos K(\omega - \omega') \psi(\vec{r}, E', \xi, \omega) \right\}. \quad (A-4)$$

Die Winkelabhängigkeit wurde hier durch die zwei unabhängigen Winkel ξ und ω in Zylindergeometrie ausgedrückt. Für kartesische Geometrie ist ξ ggf. durch μ zu ersetzen. Verwendung des Additionstheorems $\cos K(\omega - \omega') = \cos K\omega \cos K\omega' + \sin K\omega \sin K\omega'$ und einige algebraische Umformungen liefern dann in kompakter Notation:

$$q_{\text{Streu}}(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}) = \int dE' \sum_{l=0}^L (2l+1) \Sigma_s^l(\vec{r}, E' \rightarrow E) \sum_{m=-l}^l C_l^m(\xi, \omega) \phi_l^m(\vec{r}, E') \quad (\text{A-5})$$

mit:

$$C_l^m(\xi, \omega) = \begin{cases} \left(\frac{(2 - \delta_o^m)(l-m)!}{(l+m)!} \right)^{1/2} P_l^m(\xi) \cos(m\omega) & m \geq 0 \\ \left(\frac{2(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \right)^{1/2} P_l^{|m|}(\xi) \sin(|m|\omega) & m < 0 \end{cases} \quad (\text{A-6})$$

und den Flußmomenten:

$$\phi_l^m(\vec{r}, E) = \int_{-1}^1 d\xi \int_0^{2\pi} d\omega C_l^m(\xi, \omega) \psi(\vec{r}, E, \xi, \omega). \quad (\text{A-7})$$

Die Winkelflüsse ψ können entsprechend ausgedrückt werden durch:

$$\psi(\vec{r}, E, \xi, \omega) = \sum_{l=0}^L \sum_{m=-l}^l C_l^m(\xi, \omega) \phi_l^m(\vec{r}, E). \quad (\text{A-8})$$

Die Funktionen C_l^m sind gerade Real- bzw. Imaginärteil der Kugelfunktionen:

$$C_l^m(\xi, \omega) = \begin{cases} \Re(Y_{lm}) & m \geq 0 \\ \Im(Y_{l|m|}) & m < 0. \end{cases} \quad (\text{A-9})$$

Für Zylindergeometrie gilt $\psi(\xi, \omega) = \psi(\xi, -\omega)$, d.h. die Flußmomente mit negativem m sind identisch Null. Die Entwicklung des Winkelflusses reduziert sich dann zu:

$$\psi(\vec{r}, E, \xi, \omega) = \sum_{l=0}^L \sum_{m=0}^l C_l^m(\xi, \omega) \phi_l^m(\vec{r}, E). \quad (\text{A-10})$$

Daraus folgt, daß für eine Entwicklung bis zur Ordnung $L=1$ drei Flußmomente, für eine Entwicklung bis zur Ordnung $L=3$ bereits zehn Flußmomente gebraucht werden. Allgemein gilt: Anzahl der Flußmomente = $(L+1)(L+2)/2$.

In Tabelle A-1 sind die ersten 10 Funktionen C_l^m , die für eine P_3 -Entwicklung benötigt werden, aufgeführt.

l, m	$C_l^m(\xi, \omega)$
0,0	$P_0(\xi)$
1,0	$P_1(\xi)$
1,1	$P_1^1(\xi)\cos\omega$
2,0	$P_2(\xi)$
2,1	$(\sqrt{3}/2)P_2^1(\xi)\cos\omega$
2,2	$(\sqrt{3}/6)P_2^2(\xi)\cos 2\omega$
3,0	$P_3(\xi)$
3,1	$(\sqrt{6}/6)P_3^1(\xi)\cos\omega$
3,2	$(\sqrt{15}/30)P_3^2(\xi)\cos 2\omega$
3,3	$(\sqrt{10}/60)P_3^3(\xi)\cos 3\omega$

Tabelle A-1: Die ersten 10 Kugelfunktionen

Anhang B : Erzeugung von Wirkungsquerschnittsbibliotheken

Der vorliegende Abschnitt gibt einen kurzen Überblick über die in dieser Arbeit verwendeten Methoden zur Erzeugung von Gruppenwirkungsquerschnitten. Ausgehend von der Datenbasis in Form der ENDF/B-Files wird zunächst die Erstellung der grundlegenden Multigruppenbibliotheken kurz umrissen. Die problemabhängige Aufbereitung dieser Daten umfasst dann zunächst eine Resonanzbehandlung der beteiligten Nuklide sowie die anschließende Homogenisierung und Kondensierung der Querschnitte. Die entsprechende Programmsequenz ist bereits in Kapitel 6 vorgestellt worden; hier werden nun die theoretischen Grundlagen der verwendeten Methoden und die numerische Umsetzung in den verschiedenen Modulen in kompakter Form erläutert.

B.1 Datenbasis

Ausgangspunkt der Querschnittserzeugung sind die sog. „Nuclear Data Files“, in denen heutzutage eine Vielzahl nuklearer Reaktionsdaten zur Verfügung stehen. Diese stammen zu einem wesentlichen Teil aus Experimenten und werden ggf. durch theoretische Ansätze ergänzt, um für alle Nuklide von praktischer Bedeutung den gesamten Energiebereich von 10^{-5} eV bis 20 MeV abzudecken. Die wichtigsten Evaluierungen sind ENDF/B-VI („Evaluated Nuclear Data File“, [END91]), JEF2.2 („Joint European File“, [NOR94]) und JENDL3.2 („Ja-

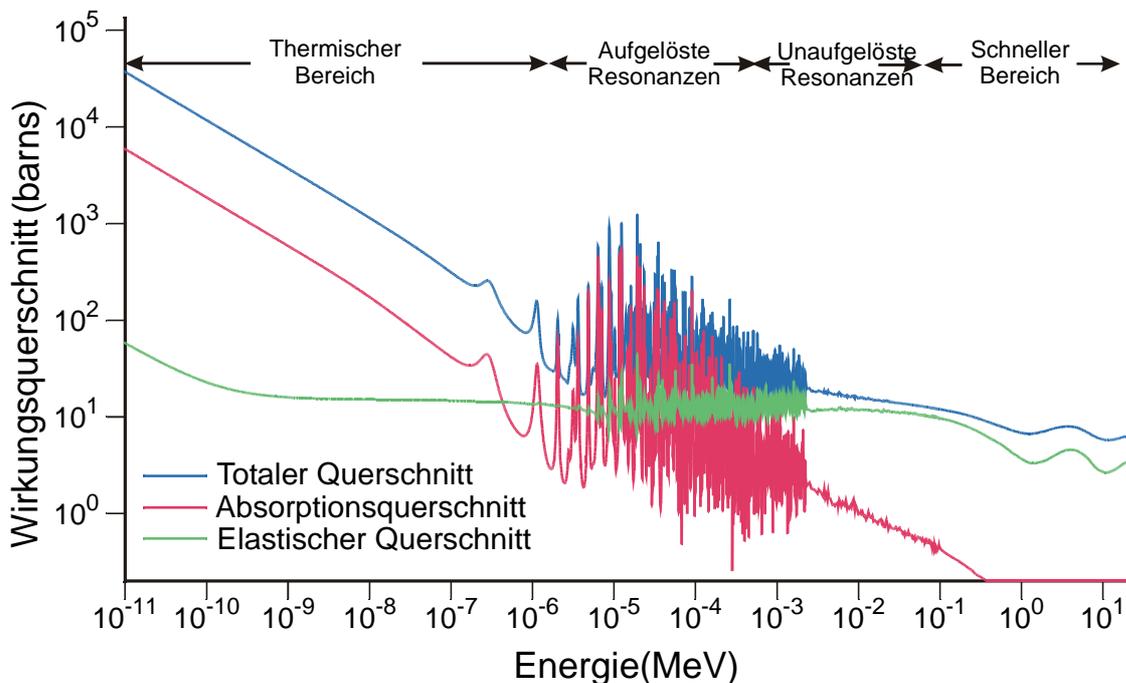


Abbildung B-1: Mikroskopische Querschnitte für U-235: Dargestellt sind der elastische, der Absorptions- und der totale Querschnitt

panese Evaluated Nuclear Data Library“, [NAK95]). In diesen Bibliotheken sind die Daten einheitlich im ENDF6-Format [END00] in sog. „Files“ gespeichert und enthalten:

- Reaktionsquerschnitte, z.B. für Absorption, Spaltung, Photoproduktion etc., die als Punktdaten in der Energie vorliegen. Zwischen den einzelnen Datenpunkten kann mittels in den Files spezifizierter Vorschriften interpoliert werden, so daß die Darstellung kontinuierlich in der Energie ist.
- Beschreibung der Resonanzen: Aufgrund der Vielzahl der nuklearen Resonanzen würde eine punktweise Erfassung des gesamten Resonanzbereichs (siehe Abbildung B-1) gerade für schwere Nuklide einen immensen Speicheraufwand bedeuten; angegeben werden daher statt dessen die Positionen, Spinabhängigkeiten etc. der einzelnen Resonanzpeaks sowie die Halbwertsbreiten für verschiedene Wechselwirkungsprozesse. Eine punktweise Auswertung zur Bestimmung von Selbstabschirmung und Dopplerverbreiterung kann dann durch Rekonstruktion der Resonanzen mit Hilfe des Breit-Wigner- oder Reich-Moore-Formalismus [MAC94] erfolgen.
- Beschreibung der Streuprozesse: Die Verteilung der Streuprodukte in Energie und Winkel wird für elastische und inelastische Prozesse, aber auch für Reaktionen mit Teilchenproduktion (z.B. $(n,2n)$, $(n,3n)$, (n,γ)) tabelliert. Für schnelle und epithermische Prozesse stammen die Daten vorwiegend aus Messungen; im thermischen Bereich werden sie durch analytische Beschreibungen der Streufunktionen für verschiedene Modelle (kohärente und inkohärente Streuung an freien und gebundenen Zuständen in Kristallen, Gasen etc.) ergänzt.

Abbildung B-1 zeigt als Beispiel die punktweise Darstellung von totalem, elastischem und Absorptionsquerschnitt von U-235. Während die Querschnitte für thermische Energien recht gut durch eine $1/v$ -Abhängigkeit beschrieben werden, erkennt man sehr deutlich den ausgeprägten Resonanzbereich. Dieser wird üblicherweise unterteilt in die sog. aufgelösten Resonanzen, die sich eindeutig durch ihre Lage und Breite charakterisieren lassen, und die unaufgelösten Resonanzen, die meist so dicht beieinander liegen, daß ihre Position experimentell nicht exakt bestimmt werden kann. Für letztere werden im ENDF-Format lediglich statistische Durchschnittswerte für die Abstände einzelner Resonanzen und deren Breiten gemeinsam mit sog. Wahrscheinlichkeitstabellen angegeben.

Das ENDF-Format ist allerdings aufgrund seiner kontinuierlichen Energiedarstellung nicht kompatibel mit Transportcodes, die Wirkungsquerschnitte in Energiegruppenform benötigen. Zur Erzeugung von sog. Multigruppenbibliotheken verwendet man daher (i.allg. recht umfangreiche) Produktionscodes wie NJOY [MAC94, NJO00], XLACS [GRE92] oder ETOX [SCH69], die direkt auf die ENDF-Datenfiles zugreifen und folgende Operationen durchführen:

- Nuklidweise Rekonstruktion von Punkt-Querschnitten für die einzelnen aufgelösten Resonanzen durch SLBW oder MLBW (Single- und Multi-Level-Breit-Wigner Beschreibung).
- Dopplerverbreiterung der aufgelösten Resonanzen für eine diskrete Anzahl von Temperaturen.
- Selbstabschirmungsrechnungen für die aufgelösten und unaufgelösten Resonanzen und Bestimmung der sog. „Bondarenko-Faktoren“, die parametrisch von der Temperatur und dem sog. Hintergrund-Querschnitt abhängen (s.u.).
- Extrahierung von temperaturabhängigen thermischen Querschnitten und Streumatrizen für Streuung sowohl an freien Atomen als auch an gebundenen Systemen.
- Erzeugung von Gruppenquerschnitten mit Hilfe von vordefinierten Flußspektren, die als erste grobe Approximation an die interessierenden Systeme zu verstehen sind. Für Reaktorstudien wählt man den Fluß z.B. proportional zum prompten Spaltspektrum χ im schnellen Energiebereich, $\propto 1/E$ im sog. „Abbremsbereich“ (1eV-0.1MeV) und als Maxwell-Boltzmann-Verteilung im thermischen Bereich. Natürlich beschreibt diese Darstellung die tatsächlichen Flußverhältnisse in einem nuklearen System nur sehr grob, so daß die Gruppenanzahl i.allg. recht groß gewählt werden muß, um die eingehenden Fehler zu minimieren und die Bibliothek für eine breite Klasse von Problemen anwendbar zu ma-

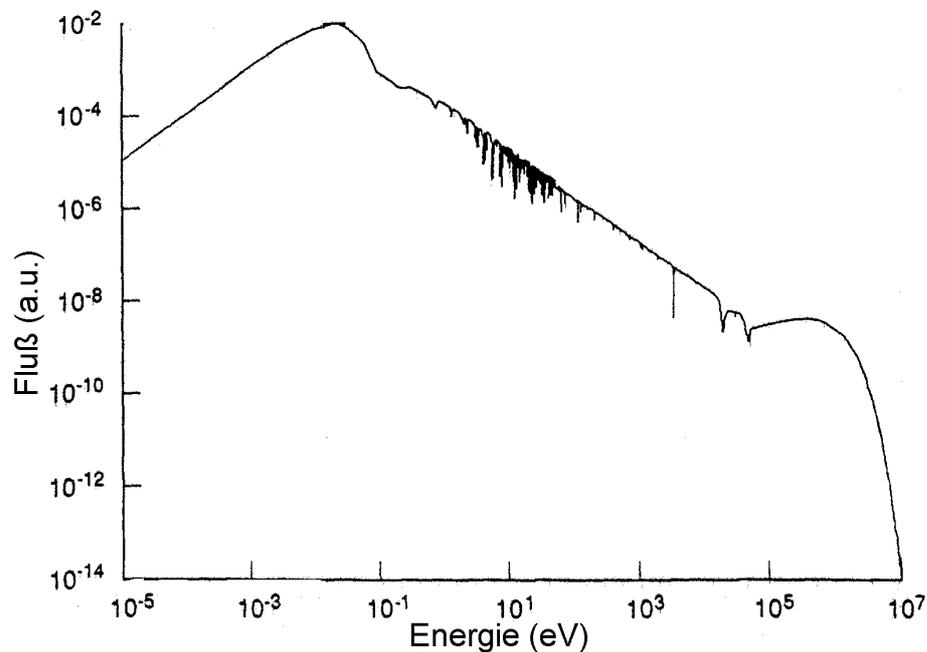


Abbildung B-2: Für die Querschnittswichtung verwendetes Flußspektrum der Bibliothek ANSL-V

chen. Kennt man bereits die Materialzusammensetzung des Systems, kann das Flußspektrum um einige charakteristische Resonanz-„Dips“ der beteiligten Materialien erweitert werden, wie in Abbildung B-2 für die Bibliothek ANSL-V gezeigt [FOR90], die speziell

für das Studium der „Advanced Neutron Source“ (ANS) entwickelt wurde und auf ENDF/B-V-Daten basiert.

Auf diese Weise sind eine große Anzahl von Gruppenbibliotheken für unterschiedlichste Anwendungen generiert worden; Beispiele sind z.B. SCALE 4.4 [JOR00] und SAILOR [SIM84] für Kritikalitätsanalysen von thermischen Systemen wie z.B. Leichtwasserreaktoren, die BUGLE- [WHI96] und VITAMIN C/E-Bibliotheken [ROU87] für gekoppelte Neutron-Gamma-Abschirmungsrechnungen, CASK [MOR72] für die Auslegung von Transportbehältern oder JFS [TAK78] für das Studium schneller Reaktoren. Insgesamt existieren sicherlich einige Hundert solcher Bibliotheken, die je nach Anwendung in der Anzahl der Energiegruppen, der Resonanzbehandlung, den implementierten Nukliden und der Gruppenstruktur stark variieren. Kommerzielle Codes wie HELIOS, CASMO oder WIMS, die speziell für die Berechnung von LWR-Brennelementen benutzt werden, verfügen meist über eigene Querschnittssätze, die insbesondere die beim Abbrand anfallenden Nuklide detailgenau berücksichtigen.

In dieser Arbeit wurden insgesamt drei Bibliotheken zum Studium des FRM-II verwendet:

- Die oben erwähnte Bibliothek ANSL-V, die aufgrund der konzeptionellen Ähnlichkeit von ANS und FRM-II ausgewählt wurde und die typischen Materialien für Forschungsreaktoren in einer 99-Energiegruppendarstellung erfasst, wobei besonders Wert auf eine akkurate Behandlung der thermischen Gruppen gelegt wurde.
- Die 238-Gruppenbibliothek des Codesystems SCALE4.4 [JOR00], die umfangreichste Multigruppenbibliothek, die mit diesem Programm mitgeliefert wird. Sie enthält Daten für alle gängigen Nuklide und eine akkurate Behandlung der Temperaturabhängigkeit der Resonanzdaten und berücksichtigt gleichermaßen schnelle wie auch thermische Gruppen mit hoher Genauigkeit.
- Die 44-Gruppenbibliothek aus SCALE4.4, die durch Kondensation der 238-Gruppenbibliothek mit einem typischen LWR-Spektrum erzeugt wurde. Aufgrund der stark reduzierten Gruppenanzahl ist sie wesentlich leichter handzuhaben und erlaubt ggf. schnelle Vorausrechnungen.

In Abbildung B-3 ist am Beispiel der 238-Gruppenbibliothek der totale Querschnitt von U-235 aufgetragen; hier werden nun die punktwisen ENDF/B-VI-Daten mit den entsprechenden Gruppendaten verglichen. Man erkennt deutlich, daß die Daten für thermische und schnelle Energien sehr gut durch die Gruppenstruktur erfaßt werden. Der Resonanzbereich zeigt hingegen im Bereich der aufgelösten Resonanzen nur noch einige markante Peaks, im Bereich der unaufgelösten Resonanzen ist der Gruppenquerschnitt weitgehend geglättet. Es ist von eminenter Bedeutung, daß speziell diese Energiebereiche einer sog. Resonanzbehandlung unterzogen werden, um den wichtigen Effekt der Resonanzselbstabschirmung korrekt zu erfassen, in den bereits die Materialzusammensetzung sowie die Geometrie des betrachteten Systems eingeht. Dazu werden sowohl die in der 238-Gruppenbibliothek abgespeicher-

ten Resonanzparameter (d.h. Lage und Breite der aufgelösten Resonanzen) als auch die oben bereits erwähnten Bondarenko-Faktoren benötigt.

Die derart erzeugten Querschnitte haben dann prinzipiell das korrekte Format, um direkt an einen deterministischen Transportcode übergeben werden zu können. I.allg. ist die Anzahl der beteiligten Energiegruppen jedoch viel zu groß, um ein zwei- oder gar dreidimensionales Problem in akzeptablen Rechenzeit bewältigen zu können. Man wird also z.B. die 238-Gruppenstruktur auf wesentlich weniger Energiegruppen, z.B. 8-20 für den FRM-II, „kondensieren“ müssen; darüber hinaus ist es manchmal nötig, Materialbereiche mit komplexer geometrischer Struktur (z.B. den Brennstoffbereich des FRM-II) durch eine räumlich homogene Materialzone zu ersetzen.

Die Verfahren der Resonanzbehandlung, Kondensierung und Homogenisierung der Wirkungsquerschnitte sind Thema der folgenden Abschnitte.

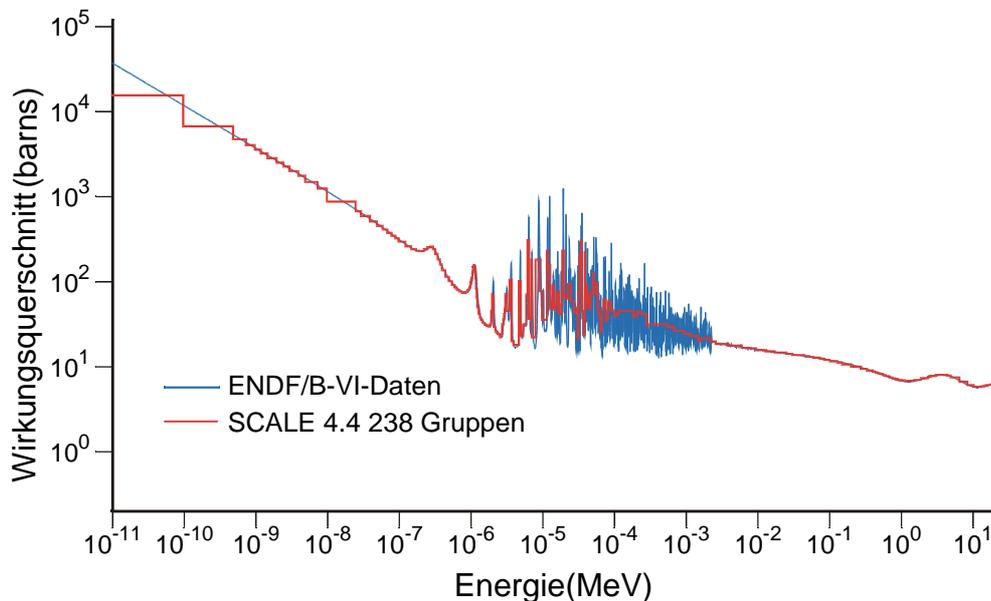


Abbildung B-3: Vergleich von kontinuierlichen Daten und 238-Gruppen-Werten des totalen Wirkungsquerschnitts von U-235

B.2 Die Nordheim-Methode

Es wurde bereits oben erwähnt, daß im epithermischen oder Abbremsbereich der Neutronenfluß in einem unendlich ausgedehnten Medium grob durch eine Funktion $\propto 1/E$ approximiert werden kann. Diese Annahme ist solange gültig, wie das Medium keine ausgeprägte Resonanzstruktur besitzt; ist dies der Fall, so wird der Fluß an den Absorptionsmaxima stark unterdrückt und wird dort ausgeprägte Minima aufweisen; diesen Effekt bezeichnet man als Resonanzselbstabschirmung. Beachtet man ferner, daß in die Definition der Gruppenquerschnitte gemäß Abschnitt 2.4 eine Flußwichtung mit eingeht:

$$\sigma_x^g = \frac{\int_{E_{g-1}}^{E_g} dE' \sigma(E') \phi(E')}{\int_{E_g}^{E_{g-1}} dE' \phi(E')}, \quad (B-1)$$

so ist es evident, daß durch die Gegenwart von Resonanzabsorbieren die Gruppenquerschnitte u.U. wesentlich modifiziert werden. Dieser Effekt wird um so ausgeprägter sein, je größer die Wahrscheinlichkeit dafür ist, daß ein Neutron bei der Abbremsung bzw. Thermalisierung auf ein Resonanznuklid trifft. Zwei Faktoren beeinflussen diesen Prozeß:

- Je größer die Nukliddichte des Resonanzabsorbers im Medium verglichen mit den umgebenden Nichtresonanzmaterialien (oder äquivalent dazu, je geringer der sog. Hintergrund-Querschnitt), desto geringer ist die „Resonanzentkommwahrscheinlichkeit“.
- Ist der Resonanzabsorber nicht homogen im Medium verteilt, sondern in gewissen Materialregionen konzentriert, hat ein Neutron eine größere Chance, beim Abbremsen in Bereichen geringer Absorption dem Resonanzeinfang zu entkommen („Spatial Self-Shielding“-Effekt).

Aufgabe der Nordheim-Methode [NOR61] ist es, die energetische Abhängigkeit des Neutronenflusses in der Umgebung einer Resonanz so gut wie möglich wiederzugeben; die räumliche Abhängigkeit kann dann allerdings aufgrund der großen Anzahl von Energiepunkten nur sehr grob approximiert werden. Man geht daher davon aus, daß das Medium dargestellt werden kann durch eine eindimensionale Brennstoffzone F , in der Resonanzabsorption stattfindet (z.B. ein unendlich ausgedehnter Zylinder oder eine Kugel) sowie einer umgebenden externen Moderatorzone M ; die Flüsse ϕ_M und ϕ_F seien jeweils räumlich konstant, die zugehörigen Volumina mit V_M und V_F bezeichnet. Leckage- und Gittereffekte werden pauschal durch die sog. Erststoßwahrscheinlichkeiten $P_{F \rightarrow M}(E)$ und $P_{M \rightarrow F}(E)$ berücksichtigt. Dies sind gerade die Wahrscheinlichkeiten dafür, daß ein Neutron mit Energie E der Brennstoffregion F entkommt und seinen nächsten Stoß im Moderator M erfährt und umgekehrt. Ferner nimmt man an, daß im epithermischen Bereich die Abbremsung von Neutronen ausschließlich durch elastische Streuung stattfindet. Dann läßt sich die Übergangswahrscheinlichkeit von einer Energie E' zu einer Energie E aus den klassischen Gesetzen der Mechanik herleiten und ist gegeben durch:

$$P(E' \rightarrow E) = \frac{1}{1-\alpha} \frac{1}{E'} dE \quad \text{für } E' \in [E, E/\alpha]$$

$$\alpha = \left(\frac{A-1}{A+1} \right)^2 \quad A = \text{Massenzahl des streuenden Kerns.} \quad (B-2)$$

Die Größe $1-\alpha$ stellt gerade den maximal möglichen relativen Energieverlust dar, den ein Neutron bei der elastischen Streuung an einem Atomkern der Masse A erfahren kann. Die stationäre Neutronentransportgleichung läßt sich nun als System von gekoppelten Integralgleichungen, den sog. Abbremsgleichungen („Slowing-Down-Equations“) formulieren [GRE98a]. Die Bestimmungsgleichung für die Flüsse in der Brennstoffzone lautet:

$$\begin{aligned}
 V_F \Sigma_{tF} \phi_F(E) = & V_F \left[1 - P_{F \rightarrow M}^0(E) \right] \int_E^{E/\alpha_F} dE' \phi_F(E') \Sigma_{sF}(E') \underbrace{\left(\frac{1}{1-\alpha_F} \right) \frac{1}{E'}}_{=P_F(E' \rightarrow E)} \\
 & + V_M \left[P_{M \rightarrow F}^0(E) \right] \int_E^{E/\alpha_M} dE' \phi_M(E') \Sigma_{sM}(E') \underbrace{\left(\frac{1}{1-\alpha_M} \right) \frac{1}{E'}}_{=P_M(E' \rightarrow E)}
 \end{aligned} \tag{B-3}$$

und für die Moderatorzone analog:

$$\begin{aligned}
 V_M \Sigma_{tM} \phi_M(E) = & V_F \left[P_{F \rightarrow M}^0(E) \right] \int_E^{E/\alpha_F} dE' \phi_F(E') \Sigma_{sF}(E') \underbrace{\left(\frac{1}{1-\alpha_F} \right) \frac{1}{E'}}_{=P_F(E' \rightarrow E)} \\
 & + V_M \left[1 - P_{M \rightarrow F}^0(E) \right] \int_E^{E/\alpha_M} dE' \phi_M(E') \Sigma_{sM}(E') \underbrace{\left(\frac{1}{1-\alpha_M} \right) \frac{1}{E'}}_{=P_M(E' \rightarrow E)}.
 \end{aligned} \tag{B-4}$$

Die linke Seite gibt jeweils die Gesamtreaktionsrate $\Sigma_t \Phi$ in der jeweiligen Zone an; auf der rechten Seite findet man die Beiträge der Abwärtsstreuung in Brennstoff- und Moderatorzone. Diese werden für die Brennstoffzone (Gleichung B-3) gewichtet mit den Wahrscheinlichkeiten, daß ein Neutron nicht der Brennstoffzone entkommt ($1 - P_{F \rightarrow M}$) bzw. daß es aus der externen Moderatorzone ($P_{M \rightarrow F}$) in diese eindringt (analoge Überlegungen gelten natürlich für Gleichung B-4).

Für die externe Moderatorzone wird nun die „Narrow Resonance Approximation“ durchgeführt: Es wird unterstellt, daß die Resonanz schmal ist verglichen mit dem gesamten Integrationsintervall $[E, E/\alpha_M]$. Dann ist der Beitrag zum zweiten Integral in Gleichung B-3, den die Integration über die schmale Resonanz liefert, vernachlässigbar, und der Fluß ϕ_M kann für den verbleibenden Anteil des Integrationsintervalls durch seinen asymptotischen Wert $\propto 1/E$ approximiert werden. Der Streuquerschnitt Σ_{sM} ist im epithermischen Energiebereich in guter Näherung gleich dem konstanten Potentialstreuquerschnitt. Mit diesen Annahmen läßt sich das zweite Integral in Gleichung B-3 analytisch auswerten und man erhält:

$$V_M \left[P_{M \rightarrow F}^0(E) \right] \int_E^{E/\alpha_M} dE' \phi_M(E') \Sigma_{sM}(E') \left(\frac{1}{1-\alpha_M} \right) \frac{1}{E'} \Rightarrow V_M P_{M \rightarrow F}(E) \frac{\Sigma_{sM}}{E}. \quad (B-5)$$

Beachtet man ferner die sog. Reziprozitätsrelation [GOL62]:

$$V_M P_{M \rightarrow F} \Sigma_{sM}(E) = V_F P_{F \rightarrow M} \Sigma_{tF}(E), \quad (B-6)$$

lassen sich die obigen Gleichungen schließlich vollständig entkoppeln, und man findet eine Bestimmungsgleichung für den Fluß ϕ_F allein:

$$\sigma_{tF} \phi_F(E) = \left(\frac{1}{E} \right) P_{F \rightarrow M}(E) \sigma_{tF}(E) + \left[1 - P_{F \rightarrow M}^0(E) \right] \int_E^{E/\alpha_F} dE' \phi_F(E') \sigma_{sF}(E') \left(\frac{1}{1-\alpha_F} \right) \frac{1}{E'}. \quad (B-7)$$

Hier wurden, wie bei der Resonanzbehandlung allgemein üblich, die mikroskopischen Querschnitte σ_{xF} eingeführt, die man durch Division der makroskopischen Querschnitte Σ_{xF} durch die Nuklidichte N_F erhält. Man beachte, daß in dieser Gleichung nicht mehr explizit auf die externe Moderatorzone Bezug genommen wird; wesentlich ist lediglich die Bestimmung der Entkommwahrscheinlichkeiten $P_{F \rightarrow M}$. Codes zur Lösung von Gleichung B-7 erlauben es darüber hinaus, zusätzliche Abbremsintegrale für mit dem Brennstoff homogen vermischte Nichtresonanznuklide (sog. interne Moderatoren) zu definieren, so daß auch komplexere Materialzusammensetzungen behandelt werden können. Der Integralterm in obiger Gleichung wird dann zu einer Summe mehrerer Integrale, wobei die Integrationsintervalle jeweils abhängig von der Masse der beteiligten Nuklide sind.

Bei der numerischen Lösung von Gleichung B-7 für ϕ_F wird jede Resonanz separat behandelt, indem sie zunächst punktweise rekonstruiert wird. So gilt für den einfachsten Fall einer Breit-Wigner-Resonanz:

$$\sigma_t(E) \propto \pi g \frac{\Gamma^2}{(E - E_0)^2 + (\Gamma^2/4)} + \sigma_p \quad (B-8)$$

mit dem statistischen Spinfaktor g , Maximum und Breite der Resonanz E_0 bzw. Γ sowie dem konstanten Potentialquerschnitt $\sigma_p = 4\pi a^2$ (a ist die sog. Streulänge). Insbesondere für Resonanzen im thermischen oder nahezu thermischen Bereich muß dieser Ausdruck ggf. dopplerverbreitert werden, indem Gleichung B-8 über das Maxwell'sche Geschwindigkeitsprofil der Absorberatome der Masse M und Temperatur T gemittelt wird:

$$\sigma_t(E, T) \propto \int_0^\infty dV \left(\frac{M}{2\pi kT} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{MV^2}{2kT}\right) \left(\left(\left[\left(\frac{2}{\Gamma} \right) (E - E_0) \right]^2 + 1 \right)^{-1} + \sigma_p \right). \quad (B-9)$$

Für eine ausführliche Diskussion des Dopplereffektes und der analytischen Auswertung von Integralen der Form B-9 sei z.B. auf [LAN00] verwiesen.

Nach der Festlegung geeigneter Maschengrößen für das Integrationsgitter definiert man die obere Integrationsgrenze so weit oberhalb der Resonanz, daß auch der Fluß ϕ_F dort in guter Näherung auf seinen asymptotischen Wert $\propto 1/E$ gesetzt werden kann und integriert Gleichung B-7 mit den Ausdrücken B-8 bzw. B-9 von hohen zu niedrigen Energien. Hat man auf diese Weise die Flüsse für alle Resonanzen innerhalb des Energieintervalls $[E_g, E_{g-1}]$ ermittelt, lassen sich die entsprechenden Gruppengrößen aus Gleichung B-1 bestimmen.

B.3 Dancoff-Korrekturen

Zur Auswertung von Gleichung B-7 benötigt man neben den analytischen Ausdrücken für die Wirkungsquerschnitte auch die Form der Koeffizienten $P_{F \rightarrow M}(E)$. Für eine einzige Brennstoffregion F , die in einen unendlich ausgedehnten Moderator M eingebettet ist, läßt sich für isotrop emittierte Neutronen in kartesischer 1D-Geometrie der folgende Ausdruck herleiten [CAS53, SAU63]:

$$P_{F \rightarrow M}(E) =: P_{F0} = \frac{1}{x} \left(\frac{1}{2} - E_3(x) \right) \quad x = \frac{1}{d \Sigma_{tF}}. \quad (B-10)$$

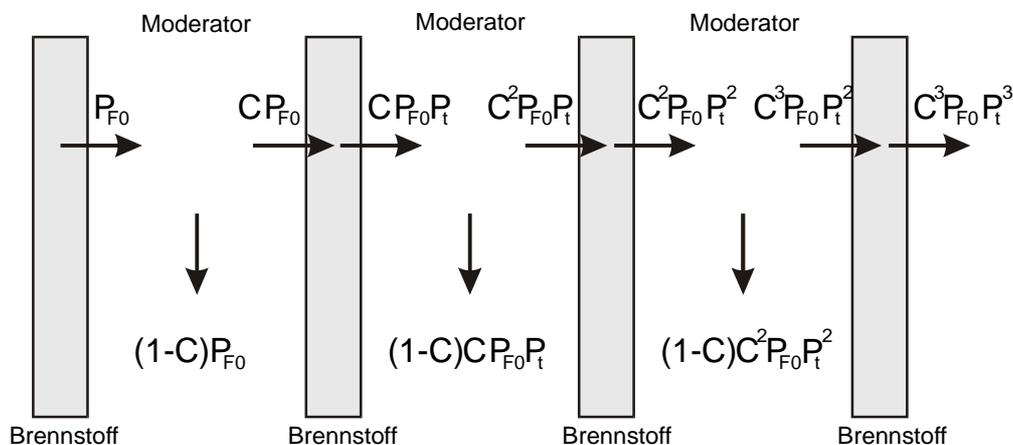


Abbildung B-4: Zur Definition der Entkommwahrscheinlichkeit und des Dancoff-Faktors in Brennstoffgittern

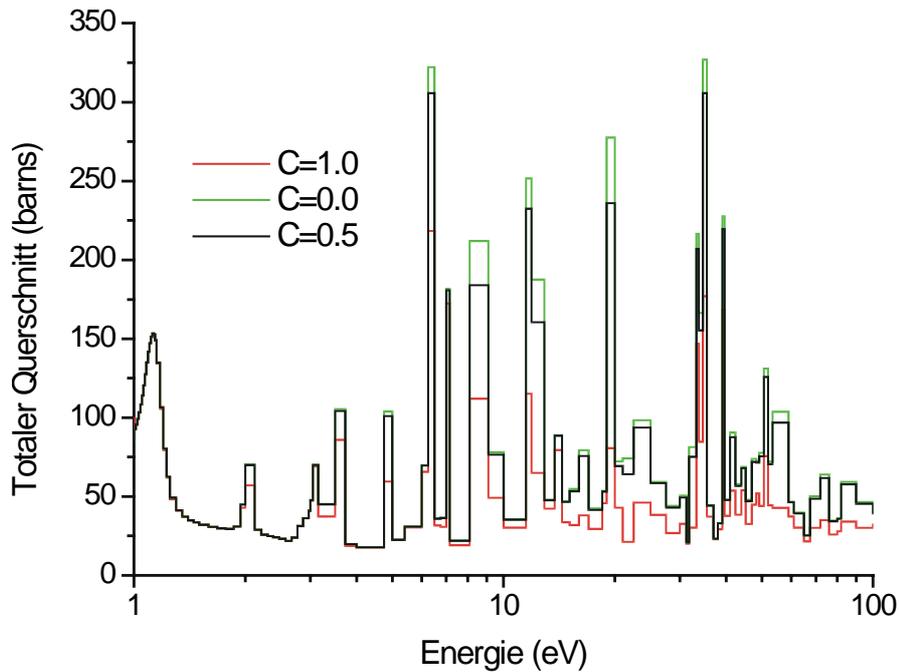


Abbildung B-5: Einfluß des Spatial Self Shielding auf den totalen Querschnitt von U-235 für die Dancoff-Faktoren 0.0, 0.5 und 1.0

d ist die Dicke der eindimensionalen Brennstoffzone, E_3 das Exponentialintegral der 3. Art (Ausdrücke für diese geometrieabhängigen „Entkommwahrscheinlichkeiten“ sind z.B. in [OTT64, SAU63] ausführlich tabelliert). Diese Formulierung geht davon aus, daß ein Neutron, das der Brennstoffregion entkommt, seinen nächsten Stoß auf jeden Fall im Moderator erfahren wird. In der üblichen Situation, in der ein periodisches Gitter von Moderator- und Brennstoffzonen vorliegt (z.B. LWR-Brennelemente oder die Plattengeometrie des FRM-II) besteht hingegen stets eine gewisse Wahrscheinlichkeit C , der sog. Dancoff-Faktor, daß das Neutron den Moderator wechselwirkungsfrei durchläuft und der nächste Stoß wiederum im Brennstoff stattfindet; die Entkommwahrscheinlichkeit $P_{F \rightarrow M}(E)$ muß dann entsprechend modifiziert werden, um diesen Effekt zu berücksichtigen.

Diese Situation ist in Abbildung B-4 für ein unendliches Stabgitter dargestellt. Die Wahrscheinlichkeit, daß ein Neutron aus dem Moderator den Brennstoff stoßfrei durchquert, ist hier mit P_t bezeichnet. Aus dem Bild ergibt sich die Gesamtentkommwahrscheinlichkeit durch folgende unendliche Reihe:

$$P_{F \rightarrow M}(E) = P_{F0}(1-C) \left[1 + CP_t + C^2 P_t^2 + C^3 P_t^3 + \dots \right] = P_{F0}(1-C) \frac{1}{1 - CP_t}. \quad (B-11)$$

Man kann ferner zeigen, daß sich die Wahrscheinlichkeit P_t durch den totalen Querschnitt Σ_{tF} und durch die Strecke \tilde{l} ausdrücken läßt, die isotrop emittierte Neutronen im Mittel in der Brennstoffregion zurücklegen [CAS53]:

$$P_t = 1 - \tilde{\Sigma}_{tF} P_{F0} \quad \Rightarrow \quad P_{F \rightarrow M}(E) = P_{F0} \left(\frac{1 - C}{1 - (1 - \tilde{\Sigma}_{tF} P_{F0}) C} \right). \quad (B-12)$$

Für den Dancoff-Faktor C existieren ebenfalls ausführliche Tabellierungen für unterschiedliche Geometrien in der Literatur (siehe z.B. [KNI78]). Für das symmetrische Brennstoffgitter in Abbildung B-4 gilt z.B. (mit den Dicken von Brennstoff und Moderator d_F und d_M):

$$C = 2E_3((2d_M - d_F)\Sigma_{tM}). \quad (B-13)$$

Die Grenzfälle $C = 0$ bzw. $C = 1$ entsprechen den Fällen, daß der Absorber als isolierte Brennstoffregion in einem unendlichen externen Moderator vorliegt, bzw. einem homogenen Resonanzmedium ohne externen Moderator. Der teilweise erhebliche Einfluß der räumlichen Resonanzselbstabschirmung ist für diese Grenzfälle sowie für $C = 0.5$ in Abbildung B-5 für den Energiebereich 1eV-100eV dargestellt; auch diesem Bild liegen die U-235-Querschnitte der 238-Gruppenbibliothek zugrunde.

B.4 Die Bondarenko-Methode

Mit der Nordheim-Integralmethode lassen sich die Effekte der Selbstabschirmung sowie die korrespondierenden Gruppenquerschnitte gemäß Gleichung B-1 recht genau bestimmen. Die Voraussetzung ist jedoch, daß die Resonanzen in Position und Breite wohlbekannt sind und sich durch Beziehungen wie der Breit-Wigner-Gleichung B-8 hinreichend gut darstellen lassen. Darüber hinaus kann die Nordheim-Methode auch nicht den Einfluß sich überlappender Resonanzen erfassen. Im Bereich der unaufgelösten Resonanzen ist sie daher nicht anwendbar.

Eine wesentlich einfachere und ungenauere, aber rechentechnisch effektive Methode zur Behandlung dieses Bereichs ist der sog. Bondarenko-Formalismus. Bei der Herleitung der Nordheim-Gleichung B-7 wurde bereits von der sog. „Narrow-Resonance“-Approximation Gebrauch gemacht, an jener Stelle jedoch nur für den externen Moderator. Überträgt man diese Vorgehensweise auch auf den Fluß in der Brennstoffregion, erhält man folgenden einfachen Ausdruck für ϕ_F [BON64]:

$$\phi_F(E) \propto \frac{1}{\Sigma_{tF}(E) + \Sigma_{\text{esc}}(E)} \frac{1}{E} \quad \Sigma_{\text{esc}} = \Sigma_{tF} \frac{P_{F \rightarrow M}(E)}{1 - P_{F \rightarrow M}(E)}. \quad (B-14)$$

Der Fluß ist also in diesem Zugang im wesentlichen proportional zum totalen Querschnitt; heterogene Effekte werden pauschal durch einen „Escape“-Querschnitt berücksichtigt. Um

das Gruppenintegral B-1 für einen mikroskopischen Querschnitt σ_i des Nuklids i auszuwerten, schreibt man:

$$\sigma_i^g(T) = \frac{\int_g \frac{dE}{E} \frac{\sigma_i(E, T)}{\Sigma_{tF}(E, T) + \Sigma_{\text{esc}}}}{\int_g \frac{dE}{E} \frac{1}{\Sigma_{tF}(E, T) + \Sigma_{\text{esc}}}}. \quad (\text{B-15})$$

Alle anderen im Brennstoff vorkommenden Nuklide $j \neq i$ werden nun absepariert. Mit der Definition der makroskopischen Querschnitte $\Sigma = N\sigma$ folgt dann:

$$\sigma_i^g(T) = \frac{\int_g \frac{dE}{E} \frac{\sigma_i(E, T)}{N_i \sigma_i^t(E, T) + \sum_{j \neq i} N_j \sigma_j^t(E, T) + \Sigma_{\text{esc}}}}{\int_g \frac{dE}{E} \frac{1}{N_i \sigma_i^t(E, T) + \sum_{j \neq i} N_j \sigma_j^t(E, T) + \Sigma_{\text{esc}}}}. \quad (\text{B-16})$$

Definiert man ferner den sog. Hintergrund-Querschnitt für Nuklid i :

$$\sigma_i^0 = \frac{1}{N_i} \left(\Sigma_{\text{esc}} + \sum_{j \neq i} N_j \sigma_j^t(E) \right), \quad (\text{B-17})$$

so ergibt sich schließlich:

$$\sigma_i^g(\sigma_0, T) = \frac{\int_g \frac{dE}{E} \frac{\sigma_i(E, T)}{\sigma_i^t(E, T) + \sigma_i^0}}{\int_g \frac{dE}{E} \frac{1}{\sigma_i^t(E, T) + \sigma_i^0}}. \quad (\text{B-18})$$

Die Gruppenquerschnitte können also zunächst als parametrische Funktionen des Hintergrund-Querschnitts und der Temperatur für diskrete Werte von σ_0 und T berechnet werden, ohne daß dabei Rücksicht auf die Herkunft von σ_0 genommen werden muß. Ist der Hintergrund-Querschnitt sehr groß ($\sigma_0 \rightarrow \infty$), reduziert sich Gleichung B-18 auf den Grenzfall der sog. „unendlichen Verdünnung“ (Infinite Dilution).

$$\sigma_{g \text{ ID}}^i = \frac{\int_g \frac{dE}{E} \sigma_i(E)}{\int_g \frac{dE}{E}} = \left(\ln(E_{g-1}/E_g) \right)^{-1} \int_g \frac{dE}{E} \sigma_i(E). \quad (\text{B-19})$$

Dieser Wert entspricht dem Fall, in dem aufgrund der niedrigen Konzentration des Nuklides i keine Resonanzselbstabschirmung stattfindet. Ein Beispiel für die typische parametrische Abhängigkeit der Gruppenquerschnitte vom Hintergrund-Querschnitt ist in Abbildung B-6 am Beispiel der 16-Gruppen Hansen-Roach-Bibliothek [JOR00] dargestellt. Gezeigt wird der Einfangquerschnitt von U-238 für die 5 Gruppen im Resonanzbereich 3eV-3keV jeweils mit der Angabe des Infinite-Dilution-Limits.

In den SCALE-Gruppenbibliotheken werden Wirkungsquerschnitte im Bereich der unaufgelösten Resonanzen durch Angabe des „Infinite-Dilution“-Limits sowie durch die schon eingangs erwähnten Bondarenko-Faktoren spezifiziert, die die Werte $\sigma_{g ID}^i$ mit den Werten $\sigma_i^g(\sigma_0, T)$ für endliche σ_0 verknüpfen:

$$\sigma_i^g(\sigma_0, T) = F_g^i(\sigma_0, T) \sigma_{g ID}^i. \quad (B-20)$$

Üblicherweise werden in den SCALE4.4-Bibliotheken für jede Energiegruppe neben $\sigma_{g ID}^i$ diskrete Werte der F_i^g für etwa 5-6 Hintergrund-Querschnitte und 3-5 verschiedene Temperaturen angelegt. Durch teilweise recht komplizierte Interpolationsschemata [KID74] können daraus Querschnitte für beliebige Kombinationen dieser beiden Parameter berechnet werden, wobei die Hintergrund-Querschnitte im Falle eines einzelnen Resonanznuklids durch Gleichung B-17 gegeben sind. Liegen in einem Material hingegen mehrere Nuklide mit Bondarenko-Daten vor, muß die Bestimmung von σ_0 iterativ erfolgen. Für den einfachen Fall von Urndioxid (d.h. U-238, U-235 und O-16) geschieht dies wie folgt: ausgehend von zwei

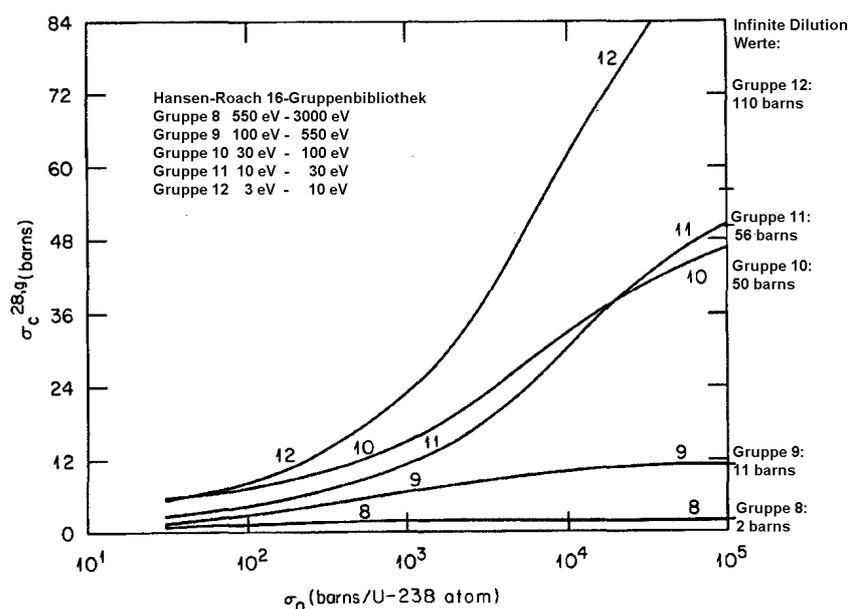


Abbildung B-6: Parametrische Abhängigkeit des Einfangquerschnitts vom Hintergrund-Querschnitt für das Nuklid U-238

anfänglichen Schätzungen für die beiden Hintergrund-Querschnitte $\sigma_0^{235,g,(0)}$ und $\sigma_0^{238,g,(0)}$ führt man die Vorschriften:

$$\begin{aligned}\sigma_t^{235,g,(n)} &= F_t^{235,g} \left(T, \sigma_0^{235,g,(n)} \right) \sigma_{t ID}^{235,g} \\ \sigma_t^{238,g,(n)} &= F_t^{238,g} \left(T, \sigma_0^{238,g,(n)} \right) \sigma_{t ID}^{238,g}\end{aligned}\quad (B-21)$$

und:

$$\begin{aligned}\sigma_0^{235,g,(n+1)} &= \frac{1}{N_{235}} \left(\Sigma_{tF}^{238,g} + \Sigma_{tF}^{16,g} + \Sigma_{\text{esc}} \right) \\ \sigma_0^{238,g,(n+1)} &= \frac{1}{N_{238}} \left(\Sigma_{tF}^{235,g} + \Sigma_{tF}^{16,g} + \Sigma_{\text{esc}} \right)\end{aligned}\quad (B-22)$$

bis zur Konvergenz von σ_0 durch. Der Sauerstoff enthält keine Bondarenko-Faktoren und erscheint daher ausschließlich im Hintergrund-Querschnitt.

Es sei hier ausdrücklich darauf hingewiesen, daß die Erzeugung der Bondarenko-Faktoren und die Erstellung makroskopischer Gruppenquerschnitte mit der Bondarenko-Methode zwei vollkommen separate Prozesse sind. Die beschriebene Vorgehensweise dient lediglich dazu, die Resonanzselbstabschirmung makroskopischer Gruppenquerschnitte in konkreten Materialmischungen korrekt zu ermitteln. Die eigentliche Erstellung der F_i^g hingegen ist ein komplizierter, teils mit großen Ungenauigkeiten behafteter Prozeß, der von Codes wie NJOY oder ETOX durchgeführt wird. Gerade für schnelle Reaktoren, für die die Absorption im un-aufgelösten Resonanzbereich eine erhebliche Rolle spielt, ist die Anwendbarkeit der Bondarenko-Methode fraglich; für thermische Systeme hat sie sich jedoch in den meisten Anwendungen als ausreichend genau erwiesen.

B.5 Kondensierung und Homogenisierung von Querschnitten

Die beschriebenen Methoden zur Resonanzbehandlung erzeugen mikroskopische Querschnitte, die bereits bis zu einem gewissen Grad problemabhängig sind, da sowohl Nordheim- als auch Bondarenko-Methode explizit die Materialmischungsverhältnisse als auch (wenn auch nur sehr grob) die geometrischen Gegebenheiten des betrachteten Systems berücksichtigen, um die räumliche Selbstabschirmung korrekt wiederzugeben.

Prinzipiell müßten aus den verschiedenen mikroskopischen Querschnitten σ_x nun nur noch die makroskopischen Querschnitte Σ_x der verschiedenen Materialien durch die korrekte Mischung der jeweils beteiligten Nuklide ermittelt werden, um Transportrechnungen durchführen zu können:

$$\Sigma_M^x = \sum_{i=1}^m N_i \sigma_i^x \quad (B-23)$$

wenn das Material M gerade aus m verschiedenen Nukliden mit den Kernzahldichten N_i besteht. Zuvor ist es jedoch i.allg. notwendig, die Anzahl der Energiegruppen so weit zu reduzieren, daß mehrdimensionale Transportrechnungen in akzeptabler Rechenzeit durchführbar sind.

Der Grundgedanke dieser Kondensation ist wie folgt: die Querschnitte mehrerer sog. „Feingruppen“ sollen in einem geeignet gemittelten „Breitgruppenquerschnitt“ derart zusammengefaßt werden, daß die integralen Reaktionsraten erhalten bleiben [GRE98b]:

$$\bar{\sigma}_G \int_V d^3r N_D(\vec{r}) \int_G dE \phi(E, \vec{r}) = \int_V d^3r N(\vec{r}) \int_G dE \sigma(E, \vec{r}) \phi(E, \vec{r}) \quad (B-24)$$

$\bar{\sigma}_G$ ist hier der gewünschte mikroskopische Breitgruppenquerschnitt eines Nuklids für eine im Moment nicht näher spezifizierte Reaktion im Energieintervall G . Da die Querschnitte $\sigma(E, \vec{r})$ bereits als Feingruppenquerschnitte vorliegen, läßt sich Gleichung B-24 auch in Gruppenform schreiben:

$$\bar{\sigma}_G \sum_j N_D^j \sum_{g \in G} \phi_g^j = \sum_j N_j \sum_{g \in G} \sigma_g^j \phi_g^j \quad \phi_g^j = \int_{V_j} d^3r \int_g dE \phi(E, \vec{r}). \quad (B-25)$$

Das räumliche Integral ist hier in eine Anzahl von Regionen V_j aufgeteilt worden, in denen das Nuklid mit dem Querschnitt σ_g^j mit den jeweils konstanten Nukliddichten N_j vorliegt (die Differenzierung des mikroskopischen Querschnitts in verschiedene σ_g^j kann dann notwendig werden, wenn ein und dasselbe Nuklid in den verschiedenen Zonen unterschiedliche Temperaturen besitzt; ansonsten gilt $\sigma_g^j = \sigma_g \forall j$).

Ferner wird über alle Feingruppen $g \in G$ summiert. Man beachte, daß in Gleichung B-25 der über V_j gemittelte Feingruppenfluß ϕ_g^j als zusätzlicher Wichtungsfaktor eingeht. Da dieser von Region zu Region variieren kann, bedeutet dies, daß die Breitgruppenquerschnitte für verschiedene Regionen unterschiedlich sein können, obwohl dort ein und dasselbe Nuklid (eventuell sogar mit denselben Konzentrationen N und identischen Temperaturen) vorliegt. Eine korrekte Bestimmung der $\bar{\sigma}_G$ setzt also voraus, daß die Gruppenflüsse ϕ_g^j als Lösung der Transportgleichung bereits bekannt sind. Da dies i.allg. nicht der Fall ist, wird man versuchen, das interessierende mehrdimensionale System durch eine oder mehrere Trans-

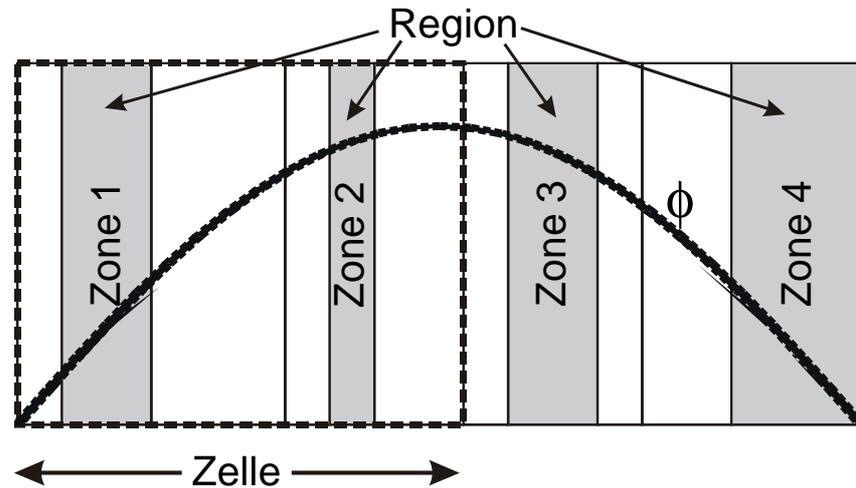


Abbildung B-7: Die verschiedenen Wichtungsoptionen für die Kondensierung und Homogenisierung der Wirkungsquerschnitte

portrechnungen niedrigerer Dimension zu approximieren, um so zumindest genäherte Größen für die Flüsse ϕ_g^j zu erhalten, die dann in das Wichtungsschema B-25 einfließen.

Auf die Größe N_D^j in B-25 wurde bislang nicht näher eingegangen. Diese Größe ist abhängig davon, wie die Regionen V_j ausgewählt werden, über die die Wichtung der Querschnitte σ_g^j stattfinden soll. Dies sei anhand von Abbildung B-7 erläutert, die ein nukleares System mit 11 verschiedenen Materialzonen darstellt, von denen lediglich die vier grau unterlegten das betrachtete Nuklid enthalten sollen.

- Die einfachste Möglichkeit ist die sog. Zonenwichtung. In jeder der vier Materialzonen wird ein individueller Querschnittssatz erzeugt. Mit $N_D^j = N_j \equiv 1$ ergibt sich dann die folgende Wichtungsvorschrift:

$$\bar{\sigma}_G^j = \frac{\sum_{g \in G} \sigma_g^j \phi_g^j}{\sum_{g \in G} \phi_g^j} \quad j=1 \dots 4. \quad (B-26)$$

Diese Vorschrift ist vermutlich die am häufigsten verwendete, insbesondere dann, wenn die Querschnitte direkt auf ein höherdimensionales Problem mit ähnlicher Geometrie übertragen werden sollen. Es ist aber auch dann sinnvoll, wenn der Fluß im System stark variiert oder wenn jede Zone eine andere Temperatur aufweist.

- Regionenwichtung: Ist das Material nur von sekundärer Bedeutung für das System (z.B. Strukturmaterialien), ist es häufig ausreichend, einen gemeinsamen Querschnittssatz für alle Zonen zu erstellen; dann gilt $N_D^j = N_j$ und das entsprechende Wichtungsschema lautet:

$$\bar{\sigma}_G = \frac{\sum_j N_j \sum_{g \in G} \sigma_g^j \phi_g^j}{\sum_j N_j \sum_{g \in G} \phi_g^j} \quad j=1...4. \quad (B-27)$$

- Zellwichtung: Häufig ist es erwünscht, einen größeren inhomogenen Materialbereich mit komplizierter Struktur (z.B. ein LWR-Brennelement) auf eine einzige äquivalente homogene Zone abzubilden („Homogenisierung“). Dies ist insbesondere dann notwendig, wenn der geometrische Aufbau eines Teilsystems zwar näherungsweise in einer oder zwei Dimensionen, aber nicht mehr für das kompliziertere Gesamtsystem dargestellt werden kann (z.B. Brennelement – Reaktorkern). In Abbildung B-7 soll z.B. die durch gestrichelte Linien definierte Zelle homogenisiert werden. N_D^j ist nun die zellgemittelte Nuklidichte:

$$N_D^j = \bar{N} = \frac{\sum_{j \in \text{Zelle}} V_j N_j}{\sum_{j \in \text{Zelle}} V_j}, \quad (B-28)$$

unabhängig davon, ob die Zonen das Nuklid enthalten oder nicht. Das Zellwichtungsschema lautet nun:

$$\bar{\sigma}_G = \frac{\sum_{j \in \text{Zelle}} N_j \sum_{g \in G} \sigma_g^j \phi_g^j}{\bar{N} \sum_{j \in \text{Zelle}} \sum_{g \in G} \phi_g^j}. \quad (B-29)$$

Die Kondensierung der Streumatrizen ist etwas komplizierter. Auch hier fordert man Reaktionsratenerhaltung für Streuung von Breitgruppe G nach G' :

$$N_D(\bar{r}) \bar{\sigma}(G \rightarrow G') \phi_G = \int_V d^3r N(\bar{r}) \int_G dE \phi(E, \bar{r}) \int_{G'} dE' \sigma(E \rightarrow E'). \quad (B-30)$$

Die Wichtungsschemata lauten dann mit den gleichen Bezeichnungen wie oben:

$$\text{Zonenwichtung: } \bar{\sigma}_{G,G'}^j = \frac{\sum_{g \in G} \phi_g^j \sum_{g' \in G'} \sigma^j(g \rightarrow g')}{\sum_{g \in G} \phi_g^j}, \quad (B-31)$$

$$\text{Regionenwichtung: } \bar{\sigma}_{G,G'} = \frac{\sum_j N_j \sum_{g \in G} \phi_g^j \sum_{g' \in G'} \sigma^j(g \rightarrow g')}{\sum_j N_j \sum_{g \in G} \phi_g^j} \quad j=1\dots 4, \quad (\text{B-32})$$

$$\text{Zellwichtung: } \bar{\sigma}_{G,G'} = \frac{\sum_{j \in \text{Zelle}} N_j \sum_{g \in G} \phi_g^j \sum_{g' \in G'} \sigma^j(g \rightarrow g')}{\bar{N} \sum_{j \in \text{Zelle}} \sum_{g \in G} \phi_g^j}. \quad (\text{B-33})$$

Für die höheren Momente der Streumatrizen $\sigma_{GG'}^l$ müßten streng genommen die höheren Flußmomente als Wichtungsfunktionen einfließen. Da diese im Gegensatz zu den skalaren Flüssen jedoch nicht strikt positiv sein müssen, verwendet man meist auch für die höheren Legendre-Momente des Streuquerschnitts die gleichen Gruppenflüsse ϕ_g^j wie für die fundamentalen Querschnitte.

Anhang C : Bestimmung von Transportquerschnitten

In der Diffusionstheorie wird neben den fundamentalen Wirkungsquerschnitten die sogenannte Diffusionskonstante D benötigt, die üblicherweise über den Transportquerschnitt Σ_{tr} definiert wird:

$$D(\vec{r}, E) = \frac{1}{3\Sigma_{tr}(\vec{r}, E)}. \quad (C-1)$$

Unglücklicherweise ist die Definition des Transportquerschnitts nicht frei von Unsicherheiten, da dieser im Gegensatz zu den fundamentalen Querschnitten nicht über die Forderung der Reaktionsratenerhaltung bestimmt werden kann. Vielmehr muß er die Leckage-Effekte in Materialzonen korrekt wiedergeben, und diese werden nicht nur durch die Materialeigenschaften der Zone selbst, sondern auch durch die Geometrie und Zusammensetzung benachbarter Regionen bestimmt. Bereits in Kapitel 2 wurde gezeigt, daß die Diffusionskonstante und damit auch der Transportquerschnitt in mehreren Dimensionen i.allg. sogar richtungsabhängig sein wird, da in diese Größen neben dem skalaren Fluß auch der vektorielle Neutronenstrom eingeht. Die Durchführung von Feingruppenrechnungen für den FRM-II mit zweidimensionalen Transportprogrammen ist aber viel zu aufwendig, so daß diese Richtungsinformationen bei der üblichen eindimensionalen Querschnittsbehandlung verloren gehen.

Der 1D-Transportcode XSDRNPM, der in dieser Arbeit zur räumlichen Wichtung und Energiegruppenkondensierung verwendet wird, bietet die folgenden Optionen zur Generierung eines Transportquerschnitts:

- Die „konsistente“ Methode:

$$\Sigma_{tr}(\vec{r}, E) = \Sigma_t(\vec{r}, E) - \frac{\int dE' \Sigma_{s1}(E' \rightarrow E) J(\vec{r}, E, t)}{3 \cdot J(\vec{r}, E, t)}; \quad (C-2)$$

aufgrund der eindimensionalen Behandlung ist der Neutronenstrom J hier eine skalare Größe, nämlich gerade das erste Flußmoment, daß in 1D-Transportrechnungen leicht bestimmt werden kann. In Energiegruppenform lautet Gleichung C-2:

$$\Sigma_{tr}^g = \Sigma_t^g - \frac{1}{3J_g} \sum_{g'=1}^G \Sigma_{s1}^{gg'} J_{g'}. \quad (C-3)$$

- Die „inkonsistente“ Methode

$$\Sigma_{tr}(\vec{r}, E) = \Sigma_t(\vec{r}, E) - \bar{\mu}_0^s(E) \Sigma_{s0}(E), \quad (C-4)$$

wobei $\bar{\mu}_0$ den mittleren Streuwinkel im Laborsystem bezeichnet:

$$\bar{\mu}_0^s(E) = \int_{-1}^1 d\mu \mu \int_0^\infty dE' \Sigma_s(E' \rightarrow E, \mu). \quad (C-5)$$

In Energiegruppenform und P_1 -Approximation erhält man daraus (siehe [HEN76]):

$$\bar{\mu}_0^{s,g} = \frac{1}{3\Sigma_{s0}^g} \sum_{g'=1}^G \Sigma_{s1}^{gg'} \quad \Rightarrow \quad \Sigma_{tr}^g = \Sigma_t^g - \frac{1}{3} \sum_{g'=1}^G \Sigma_{s1}^{gg'}. \quad (C-6)$$

Häufig vernachlässigt man die nicht-diagonalen Elemente $\Sigma_{s1}^{gg'}, g' \neq g$, so daß sich der folgende einfache Ausdruck ergibt:

$$\Sigma_{tr}^g = \Sigma_t^g - \frac{1}{3} \Sigma_{s1}^{gg} \quad (C-7)$$

der i.allg. immer dann von Diffusionscodes verwendet wird, wenn keine geeigneten Transportquerschnitte zur Verfügung stehen. Diese „diagonale“ Näherung wurde bereits in ihrer kontinuierlichen Form in Kapitel 3 angegeben:

$$\Sigma_{s1}(E' \rightarrow E) = \Sigma_{s1}(E) \delta(E - E') \quad \Rightarrow \quad D(\vec{r}, E) = \frac{1}{3(\Sigma_t(\vec{r}, E) - \Sigma_{s1}(\vec{r}, E))} =: \frac{1}{3\Sigma_{tr}(\vec{r}, E)}. \quad (C-8)$$

Obwohl allgemein angenommen wird, daß Gleichung C-2 die „besten“ Transportquerschnitte liefert, liegt das Problem dieser Darstellung in einer angemessenen Repräsentation der Ströme J in einer Dimension, insbesondere dann, wenn die Querschnitte für ein höherdimensionales System weiterverwendet werden sollen. XSDRNPM verwendet nebst anderen Korrekturen eine Buckling-Modifikation:

$$J_g = \sqrt{(\phi_1^g)^2 + (DB\phi_0^g)^2} \quad (C-9)$$

mit dem ersten Flußmoment ϕ_1 und dem Eingabewert DB^2 (mit dem sog. geometrischen Buckling B).

Führt man nun eine Feingruppen-Transportrechnung zur räumlichen Wichtung und Energiegruppenkondensierung durch, so ergibt sich z.B. für das Zellwichtungsschema (siehe Abschnitt B.5):

$$\text{Konsistente Methode: } \bar{\sigma}_{tr}^G = \frac{\sum_{j \in \text{Zelle}} \sum_{g \in G} \left(J_g \sigma_t^g - \frac{1}{3} \sum_{g'} \sigma_{s1}^{gg'} J_{g'} \right)}{\bar{N} \sum_{j \in \text{Zelle}} \sum_{g' \in G} J_{g'}}, \quad (\text{C-10})$$

$$\text{Inkonsistente Methode: } \bar{\sigma}_{tr}^G = \frac{\sum_{j \in \text{Zelle}} \sum_{g \in G} J_g \left(\sigma_t^g - \frac{1}{3} \sum_{g'} \sigma_{s1}^{gg'} \right)}{\bar{N} \sum_{j \in \text{Zelle}} \sum_{g' \in G} J_{g'}}. \quad (\text{C-11})$$

In der „diagonalen“ Methode wird man i.allg. die flußgewichteten Querschnitte σ_t, σ_{s1} verwenden, wenn die Neutronenströme nicht aus einer vorhergehenden 1D-Transportrechnung bekannt sind:

$$\bar{\sigma}_{tr}^G = \frac{\sum_{j \in \text{Zelle}} N_j \sum_{g \in G} \phi_g^j \left(\sigma_t^g - \frac{1}{3} \sigma_{s1}^{gg} \right)}{\bar{N} \sum_{j \in \text{Zelle}} \sum_{g \in G} \phi_g^j}. \quad (\text{C-12})$$

Für den FRM-II wurden Transportquerschnitte bzw. Diffusionskonstanten für die drei vorgestellten Ansätze erzeugt. Wie in Kapitel 6 erläutert, kann der FRM-II mit Diffusionstheorie allerdings nicht wirklich zufriedenstellend behandelt werden. Tatsächlich konnte mit keiner der oben genannten Beziehungen gleichzeitig der effektive Multiplikationsfaktor und die Leistungsverteilungen so errechnet werden, daß die Übereinstimmung mit Ergebnissen von Transportrechnungen befriedigend ist; daneben erhält man auch unterschiedliche Resultate, wenn man die drei Diffusionsansätze untereinander vergleicht. In der Tat konnten mit der konsistenten Methode zwar Werte für k_{eff} berechnet werden, die durchaus in der Nähe der DORT-Ergebnisse liegen, die Leistungsverteilungen wurden aber dadurch stark verzerrt. Es zeigte sich schließlich, daß die naive diagonale Approximation im Vergleich mit konsistenter und inkonsistenter Methode mindestens gleichwertige oder bessere Ergebnisse lieferte, wenn man Abweichungen im Eigenwert von etwa 1.5-2% im Vergleich mit Transporttheorie in Kauf nimmt.

In Abbildung C-1 sind die Breitgruppen-Transportquerschnitte für die drei genannten Methoden für vier verschiedene Reaktormaterialien dargestellt. Während die Übereinstimmung für Hafnium ausgezeichnet ist, findet man für andere Materialien, z.B. Brennstoff und Schwerwasser, sehr große Abweichungen, die auch die unterschiedlichen Ergebnisse der verschiedenen Diffusionsschemata erklären. Eine echte Abhilfe könnte hier eventuell eine Vorgehensweise schaffen, in der die Feingruppenflüsse von vorne herein mit einem 2D-Transportprogramm anstelle von XSDRNPM kondensiert und gewichtet werden und über die dann

richtungsabhängigen Transportquerschnitte gemittelt wird. Ein solches Verfahren würde die Leakage bzw. die Neutronenströme in mehreren Dimensionen zumindest befriedigend wiedergeben und u.U. bessere Resultate ermöglichen. Unglücklicherweise sind in den Codes DORT und TWODANT solche Optionen nicht enthalten, eine Nachrüstung ist außerdem aufwendig.

Die offensichtlichen Schwierigkeiten bei der Generierung von Diffusionskonstanten sind eine der größten Schwächen der Diffusionstheorie, und damit ein gutes Argument, bei komplizierteren Systemen Transporttheorie zu verwenden. Es soll jedoch hier nicht verschwiegen werden, daß auch in der S_N -Methode u.U. der totale Querschnitt modifiziert werden muß, um konsistent mit den P_N -Streuordnungen zu sein. Die Effekte dieser Korrekturen, z.B. der Diagonal-, Bell-Hansen-Sandmeier- und Cesaro-Korrektur [FAR92] sind jedoch gerade bei Systemen mit eher geringer Anisotropie in den Flüssen vergleichsweise gering.

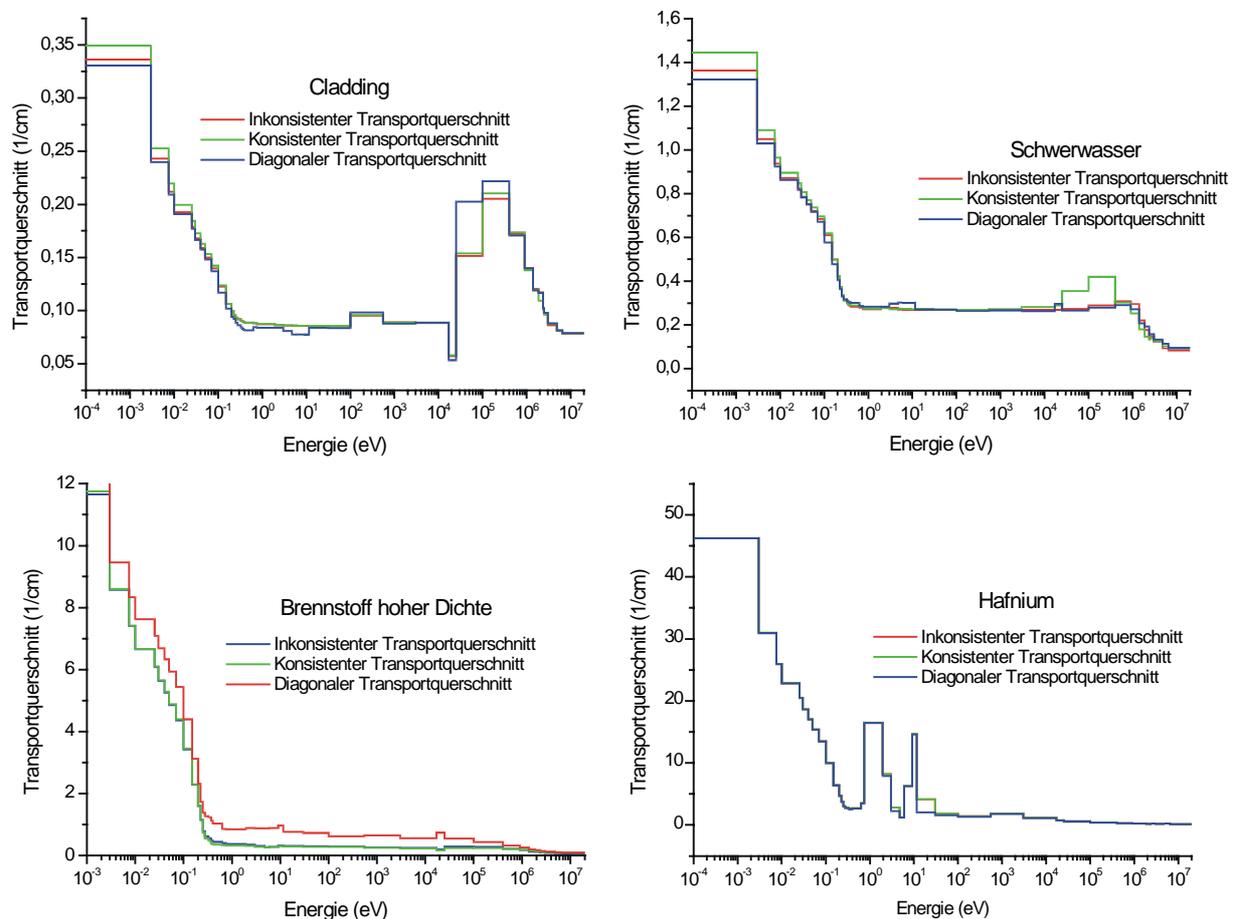


Abbildung C-1: Die Transportquerschnitte für verschiedene Materialien des FRM-II; gezeigt sind der inkonsistente, der konsistente und der diagonale Querschnitt

Anhang D : Interpolation von Wirkungsquerschnitten

Um das gekoppelte Programmsystem aus Neutronenkinetik und Thermofluiddynamik (ATHLET) zu jedem Zeitschritt mit den richtigen Wirkungsquerschnitten versorgen zu können, wurde im Rahmen dieser Arbeit ein eigenständiges Querschnittsinterpolationsmodul programmiert. Dieses liest bei Programmstart die vollständigen FRM-II-Basisbibliotheken in 16(5) bzw. 12(3) Gruppen (siehe Abschnitt 6.2.4) in den Hauptspeicher des Rechners ein. Ferner benötigt es die Information, wie viele Zonen des zu berechnenden Problems mit unterschiedlichen Querschnittssätzen versorgt werden müssen. Für jede dieser Zonen wird von ATHLET während einer Transiente eine individuelle Kombination der thermohydraulischen Parameter

- Brennstofftemperatur
- Kühlmitteltemperatur
- Kühlmitteldichte

errechnet. Diese werden zu jedem Zeitschritt an das Interpolationsmodul weitergereicht und dort zur Bestimmung der Zonenquerschnitte verwendet. Sind im Problem z.B. 100 verschiedene Rückwirkungszone definiert worden, so beläuft sich die Gesamtanzahl der durch Interpolation zu bestimmenden Querschnitte auf $(100 \times \text{Anzahl der Energiegruppen} \times \text{Anzahl der Querschnitte pro Gruppe} \times (\text{Streuordnung}+1))$; dies sind z.B. bei einer P₃-12-Gruppenrechnung mit etwa 25 Querschnitten pro Gruppe 120000 Werte, die für jeden Zeitschritt neu berechnet werden müssen.

Zur dreidimensionalen Interpolation der verschiedenen Parameter wurden zwei verschiedene Routinen ausgewählt, getestet und miteinander verglichen. Diese sind:

- Die Funktion DQD3VL aus der kommerziellen Programmbibliothek IMSL [IMS97]
- Die Funktionen DB3INK/DB3VAL aus der frei verfügbaren Programmbibliothek CMLIB [NIS00]

Die Funktion DQD3VL interpoliert eine Funktion auf einem regulären 3D-Gitter mit frei wählbaren Maschenweiten in x-, y- und z-Richtung durch die Bildung trivariater quadratischer Polynome [BOO78]. Ist der Funktionswert $f(x, y, z)$ gewünscht, so wird zunächst der Gitterpunkt (x_i, y_j, z_k) aufgesucht, der die kürzeste Distanz zu (x, y, z) besitzt. Um die Polynome zu formen, werden insgesamt 10 Punkte benötigt. Sieben davon sind die Werte (x_i, y_j, z_k) , $(x_{i\pm 1}, y_j, z_k)$, $(x_i, y_{j\pm 1}, z_k)$ und $(x_i, y_j, z_{k\pm 1})$. Die restlichen drei werden als Vertices des Oktanten gewählt, in denen der gesuchte Wert (x, y, z) selbst liegt. Ungünstig an dieser Funktion ist die Tatsache, daß bei jedem Aufruf die Polynome neu errechnet werden müssen; dies lässt sich nicht beheben, da aufgrund des proprietären Charakters der Quellcode

nicht zur Verfügung steht. Die Routine hat hingegen den Vorzug, daß sie bis zu einem gewissen Maß auch über das Gitter hinaus extrapolieren kann.

Die Funktion DB3INK verwendet einen anderen Zugang: hier wird die interpolierende Funktion als Tensorprodukt aus drei eindimensionalen B-Splines (d.h. stückweisen Polynomen) ausgedrückt [BOO79]:

$$f(x, y, z) = \sum_{i=1}^{n_x} \sum_{j=1}^{n_y} \sum_{k=1}^{n_z} a_{ijk} U_i(x) V_j(y) W_k(z). \quad (D-1)$$

Die Intervalle, auf denen die stückweisen Polynome U, V, W definiert werden, können vom Anwender frei gewählt werden, ebenso der Grad dieser Polynome. Die Koeffizienten a_{ijk} werden bei Programmstart derart bestimmt, daß die Funktion $f(x, y, z)$ gerade die tabulierten Werte an den Stützstellen (x_i, y_j, z_k) wiedergibt. Dies muß lediglich einmal bei Programmstart geschehen und benötigt auf einer schnellen Workstation lediglich ein bis zwei Minuten für die gesamten FRM-II-Querschnitte. Danach können beliebige zu interpolierende Funkti-

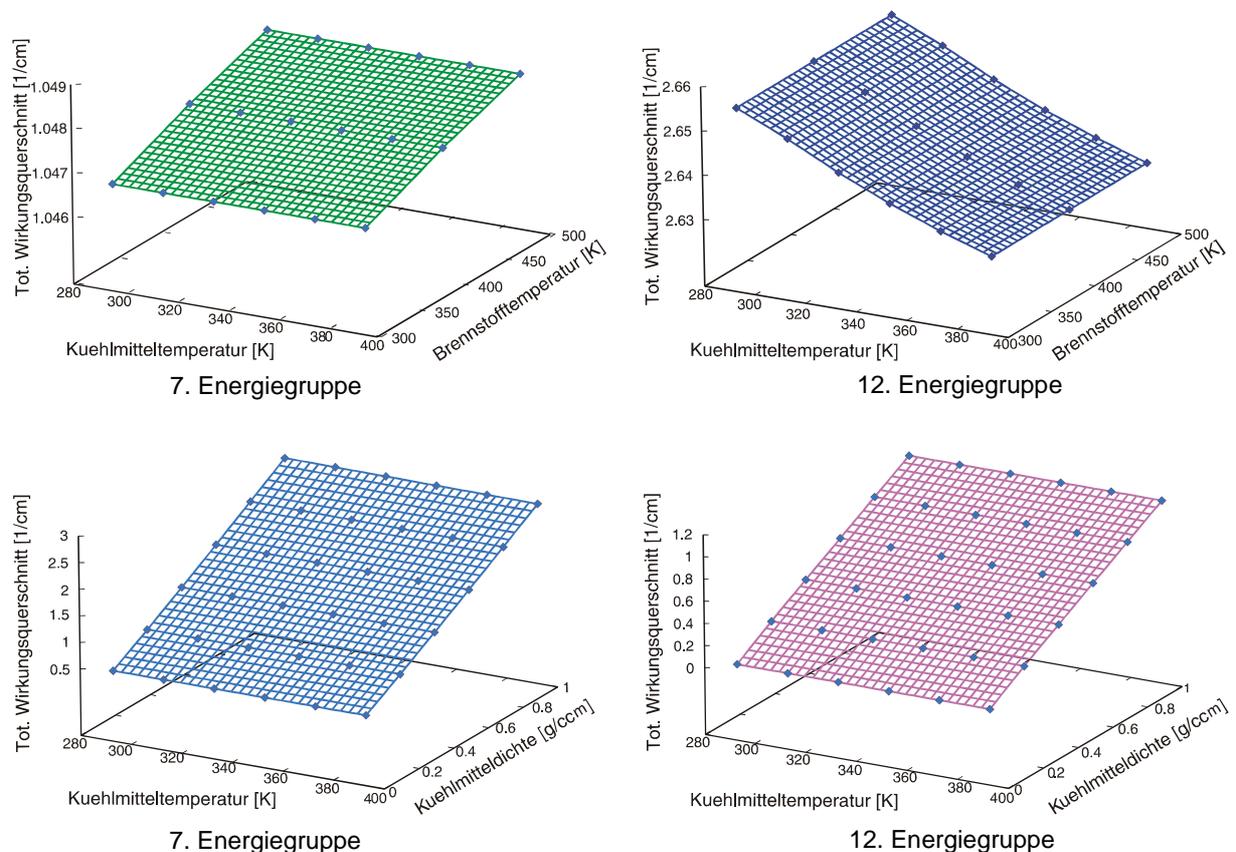


Abbildung D-1: Interpolation der Wirkungsquerschnitte für den Brennstoff hoher Dichte (7. und 12. Energiegruppe), aufgetragen über Kühlmitteldichte und –temperatur sowie Brennstofftemperatur

onswerte durch die Funktion DB3VAL mit den bekannten a_{ijk} sehr schnell berechnet werden. Eine Extrapolation über die durch das Gitter definierten Intervalle hinaus führt jedoch im Gegensatz zu DQD3VL zum Programmabbruch.

Das Modul zur Querschnittsinterpolation wurde nicht als Unteroutine in das Programmgerüst aus Neutronenkinetik und Thermohydraulik eingebunden, sondern wird als eigenständiges Programm betrieben. Der Austausch von Daten wird über die Parallelisierungs-Software PVM („Parallel Virtual Machine“, [GEI94]) bewerkstelligt, die auf Multiprozessormaschinen oder auf einem Netzwerk von UNIX-Workstations ablauffähig ist. So kann optional das Querschnittsmodul auf einem anderen Rechner betrieben werden als die Neutronenkinetik, so daß z.B. die Möglichkeit besteht, Wirkungsquerschnittserzeugung und Transport- oder Thermohydraulikrechnungen parallel anstatt sequentiell ablaufen zu lassen. Voraussetzung für eine Ersparnis an Rechenzeit ist allerdings, daß der Datentransfer über das Netzwerk zu jedem Zeitschritt (d.h. Übertragung von Thermohydraulik-Daten und Wirkungsquerschnitten) hinreichend schnell vonstatten geht und daß die Querschnitte sinnvoll zum nächsten Zeitschritt extrapoliert werden können.

Die durch die beiden Interpolationsmodule errechneten Querschnitte wurden ausgiebig getestet und verglichen. Es zeigte sich, daß fast alle Querschnitte durch maximal quadratische Polynome über den gesamten Parameterbereich ausgezeichnet repräsentiert werden. Auch stimmten die beiden Routinen im direkten Vergleich sehr gut überein; bei Eigenwertberechnungen für verschiedene Kernzustände waren die Differenzen in den Multiplikationsfaktoren nie größer als 10^{-5} .

Einen Eindruck vom Verhalten der Querschnitte unter Variation der Parameter gibt Abbildung D-1, in der die Werte des totalen Querschnitts für eine 12-Gruppenrechnung als Funktion von jeweils zwei der drei Variablen aufgetragen sind. Ausgewählt wurden exemplarisch die Querschnitte der 7. und 12. Energiegruppe des homogenisierten Brennstoffbereichs hoher Dichte. Alle Flächen sind hinreichend linear, so daß eine Interpolation unproblematisch ist; einige Ausnahmen fanden sich lediglich bei den Streumatrizen, wo es teilweise zu größeren Abweichungen kam. Die Beträge dieser Fälle sind hingegen um mehrere Größenordnungen kleiner als die fundamentalen Querschnitte, so daß ihre Beiträge sicher vernachlässigt werden können oder vom Interpolationsmodul (falls unphysikalische negative Werte auftauchen) zu Null gesetzt werden.

Anhang E : Das quasistationäre Verfahren

Das in Abschnitt 2.5.2 vorgestellte implizite Rechenverfahren errechnet zu jedem Zeitpunkt die „exakten“ räumlichen Fluß- und Leistungsprofile in dem betrachteten nuklearen System. Bei stark lokalisierten Störungen wird sich die Formfunktion bzw. das Profil der Flüsse u.U. stark ändern; dann ist in der Tat eine solche, zeitlich fein aufgelöste Transportrechnung angebracht. Für die Mehrzahl der während des Reaktorbetriebs auftretenden Situationen gilt jedoch, daß sich die Formfunktion während einer Transiente nicht allzu weit von der stationären Verteilung entfernt, die durch die niedrigste Eigenmode des kritischen Systems festgelegt wird. Verändern wird sich daher z.B. bei einer Leistungstransiente nicht so sehr das Leistungs- und Flußprofil, sondern lediglich die Amplitude der Flüsse. Es ist daher oft eine gute Näherung, die Leistungsentwicklung eines Reaktors nur über die Änderung der Amplitudenfunktion vorherzusagen, während die Berechnung der tatsächlichen Flußverteilungen im System nur zu Beginn der Transiente oder zu einigen wenigen Zeitpunkten erfolgt. Diese Vorgehensweise ist als quasistationäres Verfahren bekannt [GOL97] und ist bereits in verschiedenen Transportcodes, auch mit einer Kopplung an Thermohydraulikmodule realisiert worden [GOL00, BUC99].

Man wird also versuchen, die Flüsse in einen rein zeitabhängigen, schnell variierenden und einen schwach zeitabhängigen Anteil zu separieren, wobei letzterer die gesamte Winkel-, Raum- und Energieabhängigkeit trägt:

$$\psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, R, t) = T(t) \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t). \quad (E-1)$$

Die Funktion $T(t)$ wird so gewählt, daß ihr Wert gerade die gewichtete Gesamtzahl aller Neutronen im Reaktor angibt:

$$T(t) = \int_V dV \int dE' \int d\vec{\Omega}' \Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') \frac{1}{v(E)} \psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E', t). \quad (E-2)$$

Die Wichtungsfunktion Φ sei zunächst beliebig; ist sie identisch eins, so gibt Gleichung E-2 exakt die Anzahl Neutronen in V an, da $1/v \cdot \psi$ gerade die lokale Neutronendichte im Phasenraum ist.

Setzt man nun den Ausdruck E-1 in Gleichung E-2 ein, ergibt sich eine Normierungsbedingung für die Funktion Ψ :

$$T(t) = \left(\int_V dV \int d\vec{\Omega}' \int dE' \Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') \frac{1}{v(E)} \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E', t) \right) T(t) \quad \Rightarrow \quad \int_V dV \int d\vec{\Omega}' \int dE' \Phi \frac{1}{v(E)} \Psi = 1. \quad (E-3)$$

Obwohl also Ψ generell zeitabhängig sein wird, erfüllt diese Funktion stets diese Normierung. Führt man die Funktionen Ψ und $T(t)$ anstelle von ψ in die zeitabhängige Transportgleichung ein, so erhält man zunächst eine modifizierte Transportgleichung:

$$\frac{1}{v} \frac{1}{T(t)} \frac{dT(t)}{dT} \Psi + \frac{1}{v} \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \vec{\Omega} \cdot \nabla \Psi + \Sigma_t \Psi = \int dE' \int d\vec{\Omega}' \Sigma_s(E' \rightarrow E, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \Psi + (1 - \beta) \chi_p(E) \int d\Omega' \int dE' v \Sigma_f(E') \Psi + \frac{1}{T(t)} S_{\text{delayed}} \quad (E-4)$$

mit dem bereits zeitintegrierten Beitrag der Vorläufer:

$$S_{\text{delayed}}(t) = \int_{-\infty}^t dt' \int dE' \int d\vec{\Omega}' v \Sigma_f(E') T(t') \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E', t') \cdot \sum_{l=1}^6 \beta_l \chi_d^l(E) \lambda_l \exp(-\lambda_l(t-t')). \quad (E-5)$$

In dieser Form ist Gleichung E-4 nach wie vor äquivalent zur ursprünglichen Transportgleichung. Dementsprechend kann die implizite Zeitdiskretisierung ebenso durchgeführt werden wie in Abschnitt 2.5.2 gezeigt. Es ergibt sich:

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \Psi^{(n+1)} + \Sigma_t' \Psi^{(n+1)} = \int dE' \int d\Omega' \Sigma_s(E' \rightarrow E, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \Psi^{(n+1)} + \chi_p(E) (1 - \beta) \int dE' \int d\vec{\Omega}' v \Sigma_f(E') \Psi^{(n+1)} + S \quad (E-6)$$

mit:

$$\Sigma_t' = \Sigma_t + \frac{1}{v \Delta t} + \frac{1}{v T^{(n+1)}} \frac{\partial T^{(n+1)}}{\partial t} \quad S = \frac{S_{\text{delayed}}^{(n+1)}}{T^{(n+1)}} + \frac{1}{v \Delta t} \Psi^{(n)}. \quad (E-7)$$

Diese Gleichung ist wiederum formal ein „Fixed-Source“-Problem in einem multiplizierenden System; die Lösung wird also genauso vonstatten gehen wie in Abschnitt 2.4 besprochen. Neu ist allerdings, daß sowohl der Quellterm S als auch der modifizierte totale Wirkungsquerschnitt Beiträge der Amplitudenfunktion T zum Zeitpunkt $n+1$ enthalten; diese Funktion muß also vor der Lösung der Gleichung E-4 bereits bekannt sein.

Um Bestimmungsgleichungen für $T(t)$ zu erhalten, integriert man zunächst die Transportgleichung mit der Substitution Glg. E-1 über alle Winkel, Energien und das gesamte Reaktorvolumen. Eine genauere Herleitung ist in [DOD76, ASH79] zu finden. Unter Beachtung der Normierungsbedingung Gleichung E-2 findet man schließlich die folgenden Beziehungen für die Amplitudenfunktion und die Vorläuferkonzentrationen, die sog. punktkinetischen Gleichungen:

$$\begin{aligned}\frac{dT(t)}{dt} &= \frac{\rho(t) - \beta(t)}{\Lambda(t)} T(t) + \sum_{l=1}^6 \lambda_l C_l(t) \\ \frac{dC_l(t)}{dt} &= \frac{\beta_l(t)}{\Lambda(t)} T(t) - \lambda_l C_l(t)\end{aligned}\quad (E-8)$$

mit folgenden recht komplizierten Ausdrücken für ρ, β, Λ :

$$\begin{aligned}\rho(t) &= \frac{1}{F(t)} \int_V dV \int dE \int d\vec{\Omega} \Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \left[(\vec{\Omega} \cdot \nabla - \Sigma_t) \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) + \int dE' \int d\vec{\Omega}' \Sigma_s(E' \rightarrow E, \vec{\Omega} \cdot \vec{\Omega}') \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E', t) \right] \\ &+ \left(\chi_p(E)(1 - \beta) + \sum_{l=1}^6 \chi_d^l(E) \beta_l \right) \int dE' \int d\vec{\Omega}' \Sigma_f(E') \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E', t)\end{aligned}$$

$$\beta_l(t) = \frac{1}{F(t)} \int_V dV \int dE \int d\vec{\Omega} \Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \left(\sum_{l=1}^6 \chi_d^l(E) \beta_l \int dE' \int d\vec{\Omega}' \Sigma_f(E') \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E', t) \right) \quad \beta(t) = \sum_{l=1}^6 \beta_l(t)$$

$$\Lambda(t) = \frac{1}{F(t)} \int_V dV \int dE \int d\vec{\Omega} \Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \frac{1}{v(E)} \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) \quad (E-9)$$

$$C_l(t) = \frac{\int_V dV \int dE \int d\vec{\Omega} \Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \chi_d^l(E) C_l(\vec{r}, t)}{\int_V dV \int dE \int d\vec{\Omega} \Phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \frac{1}{v(E)} \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t)}$$

und dem gemeinsamen Vorfaktor $F(t)$:

$$F(t) = \int_V dV \int d\vec{\Omega} \int dE \left((1 - \beta) \chi_p(E) + \sum_{l=1}^6 \beta_l \chi_d^l(E) \right) \int dE' \int d\vec{\Omega}' \Sigma_f(E') \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E', t). \quad (E-10)$$

Die Gleichungen E-8 sind ein System von gewöhnlichen Differentialgleichungen. Die Parameter ρ, β, Λ können aus den Gleichungen E-9 bestimmt werden, wenn die Wichtungsfunktion Φ und die zeitabhängige Formfunktion Ψ bekannt sind.

Die Strategie des quasistationären Verfahrens ist wie folgt: Im Gegensatz zur voll impliziten Methode findet die Neuberechnung der Formfunktion Ψ nur in großen, eventuell unregelmäßigen zeitlichen Abständen (sog. Makrozeitschritten)

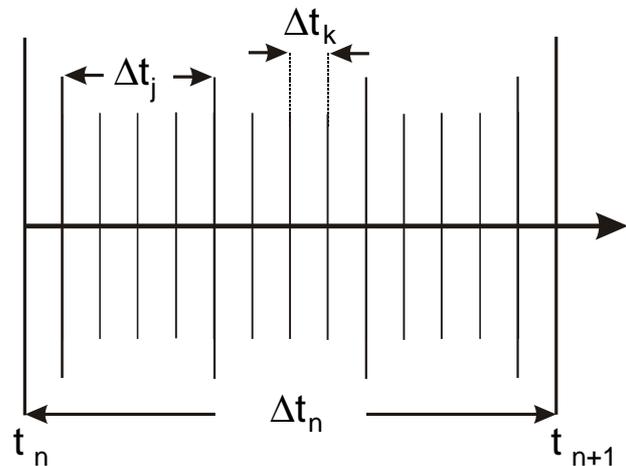


Abbildung E-1: Zeitschritthierarchie für das quasistationäre Verfahren

statt. Dazwischen wird die Entwicklung des Systems durch Lösen der Gleichungen E-8 verfolgt. Transportcodes wie TD-TORT [GOL97], aber auch eine Reihe von Diffusionsprogrammen wie CASSANDRE [ARI82] verwenden dazu eine Zeitschritthierarchie, die in Abbildung E-1 dargestellt ist.

Sei z.B. die Formfunktion $\Psi^{(n)}$ zum Zeitpunkt t_n durch Lösung der Transportgleichung E-4 neu bestimmt worden. Diese wird dann zum nächsten Zeitschritt t_{n+1} extrapoliert, so daß man zunächst eine Näherungslösung $\tilde{\Psi}^{(n+1)}$ erhält, die durch die Normierungsbedingung E-2 eindeutig festgelegt ist. Die Parameter ρ, β, Λ werden dann jeweils für die Zeitintervalle Δt_j bestimmt; die benötigten Formfunktionen können aus $\tilde{\Psi}^{(n+1)}$ und $\Psi^{(n)}$ durch Interpolation bestimmt werden. Mit diesen Parametern können dann die punktkinetischen Gleichungen E-8 auf Mikrozeitschrittbasis Δt_k gelöst werden, wobei ggf. die punktkinetischen Parameter durch Interpolation weiter verfeinert werden. Durch Integration über die Intervalle Δt_k wird dann der Beitrag der verzögerten Neutronen, Gleichung E-5, aus der Amplitudenfunktion $T(t)$ und den interpolierten Formfunktionen errechnet. Nach dieser Prozedur stehen also sowohl die Amplitudenfunktionen $T^{(n+1)}$ als auch der Quellterm $S_{\text{delayed}}^{(n+1)}$ zur Verfügung, so daß nun eine vollständige Neuberechnung der Formfunktion $\Psi^{(n+1)}$ durch erneute Lösung der Transportgleichung erfolgen kann. Mit dieser können dann verbesserte Parameter ρ, β, Λ und damit eine neue Amplitudenfunktion erzeugt werden. Sollten diese Werte erheblich von den vorigen abweichen, muß ggf. die Berechnung der Formfunktion $\Psi^{(n+1)}$ erneut erfolgen; u.U. muß also mehrfach über den Makrozeitschritt Δt_n iteriert werden.

Aus den bisherigen Betrachtungen läßt sich nun eines der bedeutendsten Näherungsverfahren der Reaktorkinetik, die sog. Punktkinetik, herleiten. Unterstellt man nämlich, daß sich die Formfunktion Ψ während einer Transiente nicht ändert, was äquivalent ist zu der Aussage, daß der Reaktor stets in seiner stationären Grundmode verbleibt, so wird die Kinetik des Systems allein durch das Gleichungssystem E-8 bzw. durch die Amplitudenfunktion $T(t)$ geregelt.

Ersetzt man also die langsam variierende Formfunktion Ψ durch das stationäre Äquivalent $\Psi_{\text{stationär}}$, so werden auch die Parameter ρ, β, Λ zu zeitunabhängigen Größen, die bereits aus stationären Analysen des Systems gewonnen werden können. Die Interpretation dieser Größen im Rahmen der Punktkinetik ist hinlänglich bekannt, kann aber auch aus den komplizierten Ausdrücken in Gleichungen E-9 entnommen werden:

So enthält der Zähler der Reaktivität ρ nichts anderes als die über den gesamten Phasenraum integrierte stationäre Transportgleichung (mit der Flußfunktion Ψ) und drückt damit direkt die Differenz der globalen Raten der im System produzierten bzw. verlorengegangenen

Neutronen aus. Der im Nenner auftauchende Ausdruck $F(t)$ beschreibt die Anzahl der pro Zeiteinheit durch verzögerte sowie prompte Prozesse neu erzeugten Neutronen; das Verhältnis dieser beiden Größen ist also ein absolutes Maß dafür, ob und in welchem Ausmaß im System Neutronen im Überschuß produziert werden.

Die effektiven Anteile β_l bzw. der effektive Gesamtanteil der verzögerten Neutronen β stellt das Verhältnis aller durch verzögerte Prozesse produzierten Neutronen zur Gesamtanzahl aller produzierten Neutronen dar. Dieser Anteil entspricht i.allg. nicht exakt dem physikalischen Anteil (siehe Tabelle 2-2) der verzögerten Neutronen, da die Energiespektren χ_d^l und χ_p stark voneinander abweichen.

Die prompte Lebensdauer Λ ist schließlich das Zeitintervall, das ein promptes Neutron von dem Zeitpunkt seiner Entstehung bis zu seinem Verschwinden (d.h. durch Leckage, Absorption) im Mittel existiert. Im Zähler findet man die momentane Teilchenzahldichte, während im Nenner die Rate der pro Zeiteinheit produzierten Neutronen vorzufinden ist.

Notwendig ist lediglich noch die Spezifizierung der Wichtungsfunktion Φ . Ohne an dieser Stelle näher auf die Herleitung einzugehen [HEN76], sei hier erwähnt, daß die zu $\Psi_{\text{stationär}}$ adjungierte Funktion die Eigenschaft hat, die bei der Approximation der zeitabhängigen Funktion $\Psi(t)$ durch $\Psi_{\text{stationär}}$ einfließenden Unsicherheiten in den punktkinetischen Parametern zu minimieren. Physikalisch läßt sich die adjungierte Funktion $\Phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$ als Neutronen-„Importance“ interpretieren, d.h. sie ist ein Maß für die Wahrscheinlichkeit, mit der ein Neutron im Phasenraumelement $dV d\vec{\Omega} dE$ an der nuklearen Kettenreaktion teilnimmt.

Anhang F : Literaturverzeichnis

- [ACK87] R.T. Ackroyd, „Recent Developments in Finite Element Methods for Neutron Transport Theory“, *Advances in Nuclear Science and Technology*, **19**, S. 381-483, (1987)
- [AHL77] A. Ahlin, M. Edenius, „CASMO – A Fast Transport Theory Assembly Depletion Code for LWR Analysis“, *Trans. Am. Nucl. Soc.*, **26**, S. 604, (1977)
- [ALC77] R.E. Alcouffe, „Diffusion Synthetic Acceleration Methods for the Diamond-Differenced Discrete Ordinates Equations“, *Nucl. Sci. Eng.*, **64**, S. 344, (1977)
- [ALC95] R.E. Alcouffe, R.S. Baker, F.W. Brinkley, D.R. Marr, R.D. O'Dell, W.F. Walters, „DANTSYS: A Diffusion Accelerated Neutral Particle Transport Code System“, Los Alamos National Laboratory Report LA-12969-M, (1995)
- [ALC98] R.E. Alcouffe and R.S. Baker, „Time-Dependent Deterministic Transport on Parallel Architectures Using PARTISN“, *Proc.1998 ANS Meeting, Radiation Protection and Shielding Topical Conf.*, Vol. 1, S. 335, Nashville, TN (1998).
- [AOY85] M. Aoyama, S. Uchikawa, „Application of ICCG Methods to Numerical Solutions of Few-Group Neutron Diffusion Equations“, *J. Nucl. Sci. Techn.*, **22**, S. 415-418, (1985)
- [ARI82] B. Arien et al., „CASSANDRE: A two-dimensional Program for Reactor Transient Analysis using the generalised quasistatic method“, *Conf. Sur la Securite des Reacteurs Rapides*, Lyon, July (1982)
- [ASH79] M.Ash, „Nuclear Reactor Kinetics“, McGraw-Hill, New York, (1979)
- [AXE96] O. Axelsson, „Iterative Solution Methods“, Cambridge Univ. Press, New York, (1996)
- [AZM00] Y.Y. Azmy, „What's New with DOORS“, *PHYSOR 2000 Workshop*, May 7, Pittsburgh, PA, (2000)
- [BAK96] R.S. Baker, R.E. Alcouffe, „Time-dependent 3D Deterministic Transport on Parallel Architectures USING DANTSYS/MPI“, *Int. Conf. on 3D Deterministic Radiation Transport Computer Programs*, Dec. 2-3, Paris, (1996)
- [BEL67] G.I. Bell, G.E. Hansen, H.A. Sandmeier, „Multitable Treatments of Anisotropic Scattering in S_N -Multigroup Transport Calculations“, *Nucl. Sci. Eng.*, **28**, S. 376, (1967)
- [BEL85] G. Bell, S. Glasstone, „Nuclear Reactor Theory“, Malabar, Florida, Krieger (1985)
- [BEN97] C.L. Bentley, R. deMiglio. S. Goluoglu, H.L. Dodds, „Development of a Hybrid Stochastic/Deterministic Method for Transient Three-Dimensional Neutron Transport“, *Trans. Am. Nucl. Soc.*, **74**, S. 221, (1997)
- [BON64] I.I. Bondarenko, „Group Constants for Nuclear Reactor Calculations“, Consultants Bureau, New York (1964)
- [BÖN98] K. Böning, F. Gallmeier, W. Gaubatz, V.V. Kuzminov, M. Nuding, Y.V. Petrov, M.S. Onegin, T.I. Smirnova, „Response of the Reactor FRM-II to a postulated Overcriticality taking the Control Rods into Account“, *Bericht TH-34-1998/2248*, Russian Academy of Sciences, Gatchina, (1998)
- [BOO78] C. de Boor, „A Practical Guide To Splines“, Springer, New York, (1978)
- [BOO79] C. de Boor, „Efficient Computer Manipulation of Tensor Products“, *ACM Transactions on Math. Software*, Vol. 5, S. 172-182, (1979)
- [BRA89] M.C. Brady, T.R. England, „Delayed Neutron Data and Group Parameters for 43 Fissioning Systems“, *Nucl. Sci. Eng.*, **103**, S. 129-149, (1989)
- [BRI97] J.F. Briesmeister (Editor), „MCNP – A General Monte Carlo N-Particle Transport Code“, Version 4B, LA-12625-M, März 1997
- [BRO91] I.N. Bronstein, K.A. Semendjajew, „Taschenbuch der Mathematik“, B.G. Teubner, Leipzig, (1991)
- [BUC99] G. Buckel, E. Hesselschwerdt, E. Kiefhaber, „A New SIMMER-III Version with Improved Neutronics Solution Algorithms“, *Forschungszentrum Karlsruhe, Wissenschaftlicher Bericht FZKA 6290*, (1999)

- [CAR65] B.G. Carlson, K.D. Lathrop, „*Transport Theory - The Method of Discrete Ordinates*“, LA-3251-MS, (1965)
- [CAR68] B.G. Carlson, K.D. Lathrop in Kapitel 3 „*Computing Methods in Reactor Physics*“, Editors: H. Greenspan, C.N. Kelber, D. Okrent, Gordan and Breach, New York, (1968)
- [CAS53] K.M. Case, F. de Hoffmann, G. Placzek, „*Introduction to the Theory of Neutron Diffusion*“, Los Alamos Scientific Laboratory, (1953)
- [CAS91] J. Casal, R.J.J. Stamm'ler, E.A. Villarino, A.A. Ferri, „*HELIOS: Geometric Capabilities of a new Fuel Assembly Program*“, Int. Top. Mtg. Advances in Mathematics, Computation and Reactor Physics, Pittsburgh, USA, April 28- May 2, 1991, Vol. 2, S. 1-13, (1991)
- [CEF90] G.R. Cefus, E.W. Larsen, „*Stability Analysis of Coarse Mesh Rebalancing*“, Nucl. Sci. Eng., **105**, S. 31, (1990)
- [CHI93] R.L. Childs, W.A. Rhoades, „*Theoretical Basis of the Linear Nodal and Linear Characteristics Methods in TORT*“, ORNL-TM-12246, Oak Ridge, (1993)
- [COL82] L.H. Colgan in „*Iterative Methods for Solving Large Sparse Linear Systems, in Numerical Solution of Partial Differential Equations*“, Ed. J.Noye, North Holland Publishing Company, New York, (1982)
- [CON85] P. Concus, G.H.Golub, G.Meurant, „*Block Preconditioning for the Conjugate Gradient Method*“, SIAM, J. Sci. Stat. Comput., Vol. **6**(1), S. 220, (1985)
- [DER83] K.L. Derstine, DIF3D: „*A Code to Solve One-, Two- or Three-Dimensional Finite Difference Diffusion Theory Problems*“, ANL-82-64, Argonne National Laboratory, (1983)
- [DOD76] H.L. Dodds, „*Accuracy of the Quasistatic Method for Two-dimensional Thermal Reactor Transients with Feedback*“, Nucl. Sci. Eng., **103**, S. 94-99, (1989)
- [DÖD95] C. Döderlein, „*Kinetik und Dynamik eines Forschungsreaktors mit einem reflektierten Kompaktkern*“, Dissertation, TU München (1995)
- [DUD76] J.J. Duderstadt, L.J. Hamilton, „*Nuclear Reactor Analysis*“, John Wiley and Sons, New York (1976)
- [ELM89] H.C. Elman, E. Agron, „*Ordering Techniques for the Preconditioned Conjugate Gradient Method on Parallel Computers*“, Computer Physics Communications, **53**, S. 253-269, (1989)
- [EMM79] M.B. Emmett, R.L. Childs, W.A. Rhoades, „*A Repair for Scattering Expansion Truncation Errors in Transport Calculations*“, Trans. Am. Nucl. Soc., **33**, S. 719-721, (1979)
- [END00] <http://t2.lanl.gov/endl/title.html>, „*An Introduction to the ENDF Formats*“
- [END91] „*ENDF/B-VI Summary Documentation*“, BNL-NCS-17541 (ENDF-201), 4th Edition, (1991)
- [FAR92] R. E. MacFarlane, "TRANSX 2: A Code for Interfacing MATXS Cross-Section Libraries to Nuclear Transport Codes", Los Alamos National Laboratory Report LA-12312-MS, (July 1992),
- [FER77] D.R. Fergusson, K.L. Derstine, „*Optimised Iteration Strategies and Data Management Considerations for Fast Reactor Finite Difference Diffusion Theory Codes*“, Nucl. Sci. Eng., **64**, S. 593-604, (1977)
- [FOR90] W.E. Ford, „*ANSL-V: ENDF/B-V Based Multigroup Cross Section Libraries for Advanced Neutron Source (ANS) Reactor Studies*“, ORNL-6618, Martin Marietta Energy Systems, Oak Ridge, Sep. (1990)
- [GAL93] F. Gallmeier, „*Neutronenphysikalische Optimierung von experimentellen Einbauten am Forschungsreaktor FRM-II mit Monte-Carlo-Methoden*“, Dissertation, TU München, (1993)
- [GAS68] R. Gast, „*On the Equivalence of the Spherical Harmonics Method and the Discrete Ordinates Method Using Gauss Quadrature for the Boltzmann Equation*“, WAPD-TM-118, Bettis Atomic Power Laboratory, (1968)
- [GAU96] W. Gaubatz, F. Gallmeier, „*Reaktivitätsauswirkungen der experimentellen Einbauten im Moderatortank des FRM-II*“, Interner Bericht der TU München, Zentrale Betriebseinheit der Neuen Forschungsneutronenquelle Garching, OS-Nr:

- 0310, Ident-Nr: 00170, Garching, (1996)
- [GEH00] J. Gehin, private Mitteilung, Oak Ridge, (2000)
- [GEI94] A. Geist, „*Parallel Virtual Machine: A User's Guide and Tutorial for Networked Parallel Computing*“, MIT Press, Boston, (1994)
- [GEP97] J. Geppert, „*Strömungsinstabilität und Grenzen der Kühlbarkeit bei Hochfluß-Forschungsreaktoren*“, Dissertation, TU München, (1997)
- [GOL00] Sedat Goluoglu, private Mitteilung, Oak Ridge (2000)
- [GOL62] R. Goldstein, E.R. Cohen, „*Theory of Resonance Absorption*“, Nucl. Sci. Eng., **13**, S.132-140, (1962)
- [GOL96] G.H. Golub, C.F. Van Loan, „*Matrix Computations*“, John Hopkins Univ. Press, Baltimore, (1996)
- [GOL97] S. Goluoglu, H.L. Dodds, „*Development of a Time-Dependent Three-Dimensional Deterministic Neutron Transport Method*“, Trans. Am. Nucl. Soc., **76**, S. 219, (1997)
- [GRE92] N.M. Greene, W.E. Ford, L.M. Petrie, J.W. Arwood, „*AMPX-77: A Modular Code System for Generating Coupled Multigroup Neutron-Gamma Cross Section Libraries from ENDF/B-VI and ENDF/B-V*“, ORNL/CSD/TM-283, Martin Marietta Energy Systems, Oak Ridge, Oktober (1992)
- [GRE98a] N.M. Greene, L.M. Petrie, R.M. Westfall, „*NITAWL-II: SCALE System Module for Performing Resonance Shielding and Working Library Production*“, ORNL/NUREG/CSD-2/R6, Vol. 2, Sect. F2, September (1998)
- [GRE98b] N.M. Greene, „*XSDRNPM: A One-Dimensional Discrete-Ordinates Code for Transport Analysis*“, ORNL/NUREG/CSD-2/R6, Vol. 2, Sect. F3, September (1998)
- [HAC94] W. Hackbusch, „*Iterative Solution of Large Sparse Linear Systems*“, Springer, New York, (1994)
- [HAG67] L.A. Hageman, R.B. Kellogg, „*Estimating Optimum Relaxation Parameters*“, Nucl. Sci. Eng., **28**, S. 60-68, (1967)
- [HAG69] L.A. Hageman, J.B. Yasinsky, „*Comparison of Alternating-Direction Time-Differencing Methods with Other Implicit Methods for the Solution of the Neutron Group Diffusion Equations*“, Nucl. Sci. Eng., **38**, S. 8-32, (1969)
- [HAG81] L.A. Hageman, D.M. Young, „*Applied Iterative Methods*“, Academic Press, New York, (1981)
- [HAG96] A. Haghghat, G. Sjoden, „*PENTRAN, A 3D Scalable Transport Code with Complete Phase Space Decomposition*“, Trans. Am. Nucl. Soc., **74**, S. 178-179, (1996)
- [HAI95] A. Hainoun, E. Hicken, J. Wolters, „*Modelling of Void Formation in the Subcooled Boiling Regime in the ATHLET Code to simulate Flow Instability for Research Reactors*“, Nucl. Eng. Design, **167**, S. 175-191, (1996)
- [HAN98] N.A. Hanan, S.C. Mo, J.E. Matos, „*Transient Analyses for HEU and LEU Designs of the FRM-II*“, Int. Meeting on Reduced Enrichment for Research and Test Reactors, Sao Paulo, Brasilien, (1998)
- [HAS68] A. Hassit in Kapitel 2 „*Computing Methods in Reactor Physics*“, Editors: H. Greenspan, C.N. Kelber, D. Okrent, Gordan and Breach, New York, (1968)
- [HEN75] A.F. Henry, „*Nuclear Reactor Analysis*“, The MIT Press, Boston, (1975)
- [HIL76] T.E. Hill, W.M. Reed, „*TIMEX: A Time-dependent Explicit Discrete Ordinates Program for the Solution of Multigroup Transport Equations*“, LA-6201-MS, Los Alamos, (1976)
- [HIN80] A.C. Hindmarsh, „*LSODE and LSODI – Two New Initial Value Ordinary Differential Equation Solvers*“, ACM-Signum Newsletters, Vol. 15, No. 4, (1980)
- [HOL98] D.F. Hollenbach, N.M. Petrie, L.F. Landers, „*KENO-VI: A General Quadratic Version of the KENO Program*“, ORNL/NUREG/CSD-2/R6, Vol. 2, Sect. F17, September 1998
- [IAE92] „*Research Reactor Core Conversion Guidebook*“, Volume 4: „*Fuels*“, Appendices I-K, IAEA-TECDOC-643, April (1992)
- [ILL00] http://www.ill.fr/index_ill.html

- [IMS97] IMSL Fortran 90 MP Library Version 3.0, Visual Numerics (1997)
- [JOH92] J.O. Johnson, „A User's Manual for MASH 1.0, A Monte Carlo Adjoint Shielding Code System“, (enthält die DORT-Dokumentation), ORNL/TM-11778, Oak Ridge, (1992)
- [JOR00] W.C. Jordan, S.M. Bowman, „SCALE Cross Section Libraries“, ORNL/NUREG/CSD-2/R6, Vol. 2, Sect. M4, März (1998)
- [KID74] R.B. Kidman, „Improved F-Factor Interpolation Scheme for 1DX“, Trans. Am Nucl. Soc., **18**, S. 156-157, (1974)
- [KIR94] B.L. Kirk, „Progress Report on Deterministic Transport Codes“, Task Group Meeting on Adapting Computer Codes in Nuclear Applications to Parallel Architecture, OECD Chateau de la Muette, August 30-31, (1994)
- [KNI78] J.R. Knight, „SUPERDAN- Computer Programs for Calculating the Dancoff Factor of Spheres, Cylinders and Slabs“, ORNL/CSD/TM-37, Union Carbide Corp., Nucl. Div., Oak Ridge, (1978)
- [KTA80] Sicherheitstechnische Regeln des KTA, „Auslegung der Reaktorkerne von Druck- und Siedewasserreaktoren; Teil 1: Grundsätze der Thermohydraulischen Auslegung“, KTA 3101.1, Fassung 2/80, (1980)
- [LAN00] N.F. Landers, L.M. Petrie, J.A. Buchholz, „The Material Information Processor for SCALE“, ORNL/NUREG/CSD-2/R6, Vol. 2, Sect. M7, März (2000)
- [LAN77] S. Langenbuch, W. Maurer, W. Werner, „Coarse Mesh Flux-Expansion Method for the Analysis of Space-Time Effects in Large Light Water Reactor Cores“, Nucl. Sci. Eng., **63**, S. 437-456, (1977)
- [LAN77a] S. Langenbuch, W. Maurer, W. Werner, „High Order Schemes for Neutron Kinetics Calculations based on Local Polynomial Approximation“, Nucl. Sci. Eng., **64**, S. 508-516, (1977)
- [LAN96] S. Langenbuch et al., „Interface Requirements to Couple Thermal-Hydraulic Codes to 3D Neutronics Codes“, Workshop on Transient Thermal-Hydraulic and Neutronic Code Requirements, Annapolis, 5-8 Nov., (1996)
- [LAN98] S. Langenbuch, „The Coupling of the Thermal Hydraulic System Code ATHLET with 3D Neutronics Systems“, Kerntechnik, **63**, S. 1-2, (1998)
- [LAR81] E.W. Larson, R.E. Alcouffe, „The Linear Characteristic Method for Spatially Discretizing the Discrete Ordinates Equations in xy-Geometry“, Proc. Am. Nucl. Soc. Top. Meeting on Advances in Mathematical Methods for the Solution of Engineering Problems, Vol. I, S. 99-113, München, (1981)
- [LAR83] E.W. Larsen, „Diffusion Synthetic Acceleration Methods for the Discrete Ordinates Equations“, Proc. Am. Nucl. Soc. Conf. On Advances in Reactor Computing, S. 705-725, Salt Lake City, (1983)
- [LAT65] K.D. Lathrop, B.G. Carlson, „Discrete Ordinates Angular Quadrature of the Neutron Transport Equation“, LA-3186, Los Alamos, (1965)
- [LAT69] K.D. Lathrop, „Spatial Differencing of the Transport Equation: Positivity vs. Accuracy“, Comput.Phys, **4**, S. 475, (1969)
- [LAT71] K.D. Lathrop, R.E. Anderson, F.W. Brinkley, „TRANZIT: A Program for Multi-group Time-dependent Transport in r-z Cylindrical Geometry“, LA-4575, Los Alamos, (1971)
- [LAT73] K.D. Lathrop, F.W. Brinkley, „TWOTRAN-II, An Interfaced, Exportable Version of the TWOTRAN Code for Two-dimensional Transport“, LA-4848-MS, Los Alamos, (1973)
- [LAU90] J.J. Lautard, S. Loubiere, C. Fedon-Magnaud, „CRONOS: a Modular Computational System for Neutronics Core Calculations“, IAEA Specialists Meeting, Advanced Computational Methods for Power Reactors, Cadarache, France, September 1990
- [LAU95] H.T. Lau, „A Numerical Library in C“, CRC Press, Ann Arbor, (1995)
- [LER00] G. Lerchl, H. Austregesilo, „ATHLET Mod 1.2, Cycle C, User's Manual, GRS-P-1/Vol. 1, Rev. 2a“, November (2000)
- [LEW85] E.E. Lewis, W. Miller, „Computational Methods of Neutron Transport“, John Wiley and Sons, New York, (1985)

- [LEW96] E.E. Lewis, G. Palmiotti, „*Variational Nodal Formulation of the Spherical Harmonics Equations*“, Nucl. Sci. Eng., **122**, S. 194, (1996)
- [LEW97] E.E. Lewis, G. Palmiotti, „*Simplified Spherical Harmonics in the Variational Nodal Method*“, Nucl. Sci. Eng., **126**, S. 48-58, (1997)
- [LIN81] S.Ö.Lindahl, Z.J. Weiss, „*The Response Matrix Method*“, Advances in Nucl. Science and Tech., **13**, S. 73-154, Plenum Press, New York (1981)
- [LOS01] <http://t2.lanl.gov/data>
- [MAC94] R.E. MacFarlane, D.W. Muir, „*The NJOY Nuclear Data Processing System Version 91*“, LA-12740, Los Alamos, Oktober (1994)
- [MAR92] G. Marleau, A. Hebert, R. Roy, „*New Computational Methods Used in the Lattice Code DRAGON*“, Proc. Int. Topl. Mtg. On Advances in Reactor Physics, Charleston, USA, March 8-11, 1992, American Nuclear Society (1992)
- [MEI77] J.A. Meijerink, H.A. van der Vorst, „*An Iterative Solution Method for Linear Systems of Which the Coefficient Matrix is a Symmetric M-Matrix*“, Math.Comp., Vol.**31**, No. 137, S. 148-162, (1977)
- [MEI81] J.A. Meijerink, H.A. van der Vorst, „*Guidelines for the Usage of Incomplete Decompositions in Solving Sets of Linear Equations as they occur in practical Problems*“, J.Comp.Physics, **44**, S. 134-155, (1981)
- [MEU91] G. Meurant, „*Domain Decomposition Methods for Solving Large Sparse Linear Systems*“, in NATO ASI Series, Vol F.77, Computer Algorithms for Solving Linear Algebraic Equations, ed. E. Spedicato, Springer, Berlin, (1991)
- [MIL78] W.F. Miller, „*Generalised Rebalance: A common Framework for Transport Acceleration Methods*“, Nucl. Sci. Eng., **65**, S. 226, (1978)
- [MIR59] S. Mirshak, W.S. Durant, R.H. Towell, „*Heat Flux at Burn-out*“, Technischer Bericht DP-355, Savannah River Laboratory, (1959)
- [MOR00] J.E. Morel, private Mitteilung (2000)
- [MOR72] G.W. Morrison, E.A. Straker, R.H. Odegaarden: „*A Coupled Neutron and Gamma-Ray Multigroup Cross Section Library for Use in Shielding Calculations*“, Trans. Am. Nuc. Soc., **15**, S.535, (1972)
- [MOR91] U. Moritz, „*Auswertung von Messungen zur thermohydraulischen Instabilität*“, Vortrag zur Jahrestagung Kerntechnik, Bonn, 14.05.1991
- [MOR96] J.E. Morel, J.M. McGhee, R.Roberts, „*DANTE: A 3D-Unstructured-Mesh Finite-Element Transport Code*“, 3D Deterministic Radiation Transport Computer Programs, December 2-3, Paris, France, (1996)
- [NAK77] S. Nakamura, „*Computational Methods in Engineering and Science*“, Wiley, New York, (1977)
- [NAK95] T. Nakagawa, S. Shibata, S. Chiba, T. Fukahori, Y. Nakajima, Y. Kikuchi, „*Japanese Evaluated Nuclear Data Library Version 3 Revision-2: JENDL-3.2*“, J. Nucl. Sci. Technol., **32**(12), S.1259, (1995)
- [NIS00] <http://gams.nist.gov>, „*Guide to available Mathematical Software*“
- [NJO00] <http://t2.lanl.gov/njoy/>, „*Understanding NJOY*“
- [NOR61] L.W. Nordheim, „*The Theory of Resonance Absorption*“, Proc. Symp. Appl. Math., Vol. XI, S. 58, G. Birkhoff, E.P.Wigner, Eds., Am. Math. Soc. (1961)
- [NOR94] C. Nordborg, M. Salvatores, „*Status of the JEF Evaluated Data Library*“, Proc. Int. Conf. on Nuclear Data for Science and Technology, Gatlinburg 1994, S. 680, (1994)
- [OLI86] C.R.E. de Oliveira, „*An Arbitrary Geometry Finite Element Method for Multigroup Neutron Transport with Anisotropic Scattering*“, Prog. In Nuclear Energy, **18**, (1986)
- [OLI95] C. de Oliveira, C.C. Pain, A.J.Goddard, „*Three-Dimensional Time-dependent Finite Element Radiation Transport Methods*“, Proc. of the 5th. Int. Conf. On Nucl. Criticality Safety, Albuquerque, Sep. 17-21, (1995)
- [OLI96] C.R.E. de Oliveira, A.J.H. Goddard, „*EVENT – A Multidimensional Finite Element Spherical Harmonics Radiation Transport Code*“, 3D Deterministic Radiation Transport Computer Programs, December 2-3, Paris, France, (1996)
- [OTT64] J.M. Otter, „*Escape Probability Approximations in Lumped Resonance Absor-*

- bers“, NAA-SR-9744, August (1964)
- [OTT69] K.O. Ott, D.A. Meneley, „Accuracy of the Quasistatic Method of Spatial Reactor Kinetics“, Nucl. Sci. Eng., **36**, S. 402, (1969)
- [PAL93] G. Palmiotti, C.B. Caricco, E.E. Lewis, „Variational Nodal Transport Methods with Anisotropic Scattering“, Nucl. Sci.Eng., **115**, S. 233-243, (1993)
- [PAL95] G. Palmiotti, E.E. Lewis, VARIANT: „Variational Anisotropic Nodal Transport for Multidimensional Cartesian and Hexagonal Geometry Calculation“, Argonne National Laboratory ANL-95/40, (1995)
- [PET00] Lester Petrie, private Mitteilung
- [REM99] I. Remec, „Study of the Neutron Flux and DPA Attenuation in the Reactor Pressure-Vessel Wall“, ORNL/NRC/LTR-99/5, Oak Ridge, (June 1999).
- [REN00] J.P. Renier, private Mitteilung
- [RHO73] W.A. Rhodes, F.R. Mynatt, „The DOT III Two-Dimensional Discrete Ordinates Transport Code“, ORNL/TM-4280, Oak Ridge, (1973)
- [RHO79] W.A. Rhoades, E.T. Tomlinson, „Effectiveness of three Rebalance Methods in Deep-Penetration Problems“, Trans. Am.Nucl.Soc., **33**, S. 717-719, (1979)
- [RHO91] W. Rhoades, R. Childs, „TORT/DORT: Two- and Three-Dimensional Discrete Ordinates Transport“, CCC543, ORNL Radiation Shielding Information Center, Oak Ridge, (1991)
- [RHO92] W.A. Rhoades, R.L. Childs, D.T. Ingersoll, „Radiation Exposure Inside Reinforced Concrete Buildings at Nagasaki“, Health Physics, **63**, 5, S. 510-521, (1992)
- [RHO97] W.A. Rhoades, D.B. Simpson, „The TORT three-dimensional Discrete Ordinates Neutron/Photon Transport Code“, TORT (Version 3), ORNL/TM-13221, Oak Ridge, (1997)
- [RIN96] A. Rineiski, J.Y. Doriath, „KIN3D- A Module that extends the Capabilities of the TGV2 Code For solving the Time-Dependent Diffusion and transport Equation“, Conf. On 3D Deterministic Radiation Transport Computer Programs, December 2-3, Paris, France, (1996)
- [RÖH90] A. Röhrmoser, „Reaktivitätsbilanz, Regelstabcharakteristik und Abbrandzyklus des Kompaktkerns KKE7 bei 20 MW – unter Berücksichtigung der Tankeinbauten“, Interner Bericht der TU München, Zentrale Betriebseinheit der Neuen Forschungsneutronenquelle Garching, OS-Nr: 0300, Ident-Nr: 00116, Garching, (1990)
- [RÖH91] A. Röhrmoser, „Neutronenphysikalische Optimierung und Auslegung eines Forschungsreaktors mittlerer Leistung mit Zielrichtung auf einen hohen Fluß für Strahlrohrexperimente“, Dissertation, TU München (1991)
- [ROU87] R.W. Roussin et al.: „VITAMIN-E - A Coupled 174-Neutron, 38 Gamma-Ray Multigroup Cross-Section Library for Deriving Application-Dependent Working Libraries for Radiation Transport Calculations“, Draft ORNL-RSIC Report (December 1987)
- [SAA96] Y. Saad, „Iterative Methods for Sparse Linear Systems“, International Thomson Publishing, Boston, (1996)
- [SAN82] R. Sanchez, N.J. McCormick, „A Review of Neutron Transport Approximation“, Nucl. Sci. Eng., **80**, S. 481-535, (1982)
- [SAN87] R.Sanchez, J. Mondot, Z. Stankovsky, A. Cossic, I. Zmijarevic, „APOLLO-II: A User-Oriented, Portable, Modular Code for Multigroup Transport Assembly Calculations“, Proc. Int. Top. Mtg. Advances in Reactor Physics, Mathematics and Computation, Paris, France, April 27-30 (1987)
- [SAU63] A. Sauer, „Approximate Escape Probabilities“, Nucl. Sci. Eng., **16**, 329-225, (1963)
- [SCH00] A. Schaffrath, A. Hainoun, „Nachrechnung der Oak Ridge Versuche (THTL) zur thermohydraulischen Instabilität“, Jahrestagung der Kerntechnischen Gesellschaft, Bonn, 22-25 Mai, (2000)
- [SCH69] R.E. Schenter, J.L. Baker, R.B. Kidman, „ETOX- A Code to Calculate Group Constants for Nuclear Reactor Calculations“, BNWL-1002, May (1969)

- [SIE93] „Sicherheitsbericht der Neutronenquelle München FRM-II“, Technische Universität München, Oktober (1993)
- [SIM84] G.L. Simmons: „Analysis of the Browns Ferry Unit 3 Irradiation Experiments“, EPRI NP-3719, (1984)
- [SIM91] M. Siman-Tow, W.R. Gambill, W.R. Nelson, A.E. Ruggles, G.L. Yoder, „Thermal hydraulic Correlation for the Advanced Neutron Source“, 1991 ASME Winter Annual Meeting, Atlanta, Georgia, December 1-6, (1991)
- [SMI00] M.A. Smith, E.E. Lewis, G. Palmiotti, „Whole Core Neutron Transport Calculation without Fuel-Coolant Homogenisation“, PHYSOR 2000, Pittsburgh PA, (2000)
- [STA69] W.M. Stacey, „Space-Time Nuclear Reactor Kinetics“, Academic Press, New York, (1969)
- [SUE89] E. Suetomi, H. Sekimoto, „Conjugate Gradient Like Methods and their Application to Fixed Source Neutron Diffusion Problems“, J. Nucl. Sci Techn. **26**(10), S. 899-912, (1989)
- [SUE91] E. Suetomi, H. Sekimoto, „Conjugate Gradient Like Method and their Application to Eigenvalue Problems for Neutron Diffusion Equation“, Ann. Nucl. Energy, Vol.18, No.4, S. 205-227, (1991)
- [TAK78] H. Takano, A. Hasegawa, M. Nakagawa, Y. Ishiguro, S. Katsuragi: „JAERI Fast Reactor Group Constants Set, Version 2“, JAERI 1255 (1978)
- [TCH95] A.V. Tchibinaev, „Studies of the VVER-Type Reactor Characteristics Based on Comprehensive Approach to Simulation of Physical Processes“, Preprint IAE-5930/5, Moskau, (1995)
- [TES96] V. Teschendorff, H. Austregesilo, G. Lerchl, Methodology, „Status and Plans for Development and Assessment of the Code ATHLET“, Proc. OECD/CSNI Workshop on Transient Thermal-Hydraulic and Neutronic Codes Requirements, Annapolis, USA, November 1996
- [TOM80] E.T. Tomlinson, W.A. Rhoades, W.W. Engle, „Flux Extrapolation Models Used in the DOT-IV Discrete Ordinates Neutron Transport Code“, ORNL/TM-7033, Oak Ridge, (1980)
- [TSI95] V.F. Tsibulsky, A.V. Tchibinaev, „The CONSUL Program for the Complex Calculations of Nuclear Reactors“, VANT, Ser. FTYaR, p. 29-32, (1995)
- [VAR65] R.S. Varga, „Matrix Iterative Analysis“, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, (1965)
- [VIL92] E.A. Villarino, R.J.J. Stamm'ler, A.A. Ferri, J.J. Casal, „HELIOS: Angularly dependent collision probabilities“, Nucl. Sci. Eng., **112**, S.16-31, (1992)
- [VIL92a] M.F. Villani et. Al., „Six Group Decomposition of Composite Delayed Neutron Spectra“, Nucl. Sci. Eng., **111**, S. 422-432, (1992)
- [WAC66] E. Wachspress, „Iterative Solution of Elliptic Systems“, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, (1966)
- [WAR96] T.A. Wareing, J.M. McGhee, J.E. Morel, „A 3D Unstructured Tetrahedral-Mesh S_N -Code“, 3D Deterministic Radiation Transport Computer Programs, December 2-3, Paris, France, (1996) und
T. A. Wareing, J.M. McGhee, J.E. Morel, „ATTILA – A Three Dimensional, Unstructured Tetrahedral Mesh Discrete Ordinates Code“, Trans. Am. Nucl. Soc., Vol. 75, S.146, (1996)
- [WHI96] J.E. White et al.: „BUGLE-96: A Revised Multigroup Cross Section Library for LWR Applications Based on ENDF/B-VI Release 3“ (presented at the American Nuclear Society Radiation Protection & Shielding Topical Meeting, April 21-25, 1996, Falmouth, MA) (1996)
- [WOL88] K.Wolfert et al., „The GRS Thermalhydraulic System Code ATHLET for PWR and BWR Analyses“, Proc. 3rd Int. Top. Meeting on Nucl. Power Plant Thermalhydraulics and Operation, Seoul, 14-17 Nov. (1988)
- [WRI95] R.Q. Wright, J.P. Renier, J.A. Buchholz, „ANSL-V: ENDF/B-V Base Multigroup Cross Section Libraries“, ORNL-6618/S1, Oak Ridge (1995)
- [YAN93] D.Y. Yang, G.S. Chen, H.P. Chou, „Application of Preconditioned Conjugate Gradient Like Methods to Reactor Kinetics“, Ann. Nucl. Energy, Vol.20, No.1, S.

-
- 9-33, (1993)
- [YON93] Y.H.Kim, N.Z.Cho, „*Parallel Solution of the Neutron Diffusion Equation with the Domain Decomposition Method*“, Nucl. Sci. Eng., **114**, S. 252-270, (1993)
- [ZHA86] L. Zhang, „*Neutronenphysikalische Konzeption und Optimierung eines neuartigen Kompaktkerns für Hochfluss-Forschungsreaktoren*“, Dissertation TU München, (1986)