

Abschlussbericht

Reaktorsicherheitsforschung – Vorhabens-Nr.: 1501531

WTZ Russland – Weiterentwicklung und Validierung des Programms TRAMO für Reaktordosimetrie und Ak- tivitätsberechnung

S. Baier, J. Konheiser und E. Pönitz

Technische Universität Dresden

Berichtsdatum: Juni 2021

Gefördert durch:



Bundesministerium
für Wirtschaft
und Energie

Das diesem Bericht zugrundeliegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestages unter dem Förderkennzeichen 1501531 gefördert.

aufgrund eines Beschlusses
des Deutschen Bundestages

Final Report

Reactor Safety Research – Project No.: 1501531

STC Russia – Further development and validation of the TRAMO code for reactor dosimetry and activity calculation

S. Baier, J. Konheiser and E. Pönitz

Technische Universität Dresden

Publication Date: June 2021

Supported by:



The presented project was funded by the German Federal Ministry of Economic Affairs and Energy (BMWi, project no. 1501531) on basis of a decision by the German Bundestag.

on the basis of a decision
by the German Bundestag

Inhaltsverzeichnis

Kurzfassung.....	5
Abstract	6
1 Zielsetzung und Aufgabenstellung	7
1.1 Gesamtziel	7
1.2 Wissenschaftlich-technische Arbeitsziele des Vorhabens	8
2 Vorarbeiten des Projektbewilligten	11
3 Planung und Ablauf des Vorhabens	14
4 Stand von Wissenschaft und Technik zu Projektbeginn	16
5 Eingehende Darstellung	18
5.1 Arbeiten am Programmpaket TRAMO und Beschreibung der Zusatz- und Schnittstellenprogramme	18
5.1.1 Modernisierung des Programmpakets TRAMO	18
5.1.2 Erzeugung von Referenzmodellen.....	19
5.1.3 Inputdatenerzeugung	19
5.1.4 Sourcebiasing und Gewichtsdatenerzeugung.....	20
5.1.5 Quell- und Pindatenerzeugung	22
5.1.6 Das Skript zum Programmablauf	23
5.1.7 Postprocessing und Übergabe an den russischen Partner	24
5.2. Die Materialdatenbank für WWER-440 und WWER-1000	26
5.2.1 WWER-440	28
5.2.2 WWER-1000	30
5.3 Validierung von TRAMO	30
5.3.1 Experimente und Rechnungen zum KKW Greifswald	31
5.3.2 Neutronenfluenzbestimmung durch Aktivierungsmonitore an der RDB-Außenwand	33
5.3.3 Experimentelle Aktivitätsbestimmung an Proben des RDB-Stahls.....	34
5.4 Experimente und Rechnungen zum KKW Kalinin-4.....	40
5.4.1 Experiment.....	40
5.4.2 TRAMO-Modell	41
5.4.3 Vergleich mit TRAMO- und DORT-Rechnungen.....	44
5.5 Das Nutzerhandbuch	49

6	Nutzen	51
7	Zusammenfassung und Schlussfolgerungen.....	52
8	Literaturverzeichnis	54
9	Danksagung	56
	Anhang: TRAMO – Description of Input and Output.....	57

Kurzfassung

WWER-Reaktoren sind in vielen Ländern Osteuropas seit vielen Jahren – oft Jahrzehnten – in Betrieb. Aufgrund des geringeren Abstands zwischen Reaktordruckbehälter (RDB) und dem Reaktorkern ist die Neutronenstrahlung am RDB höher als bei Reaktoren westlicher Bauart. Durch die aktuelle Lebensdauer und die gewährten bzw. geplanten Laufzeitverlängerungen nähern sich die Neutronenfluenzen den maximal zulässigen Werten. Daher ist deren möglichst exakte Vorhersage durch räumlich detaillierte und genaue Berechnungen für den weiteren sicheren Betrieb dieser Reaktoren essenziell. Das gilt ebenso für die seit der Jahrtausendwende gebauten und teilweise schon in Betrieb befindlichen Reaktoren, die eine vorgesehene Betriebszeit von 60 Jahren und mehr haben.

Mit der Weiterentwicklung des Reaktordosimetriecodepakets TRAMO wird der russische Partner SEC NRS in die Lage versetzt, ein zusätzliches Rechenprogramm für Fluenzrechnungen an WWER-Reaktoren nutzen zu können. Dazu wurde TRAMO in modernes FORTRAN überführt und ein Pre- und Postprocessing entwickelt. Das umfasst Programme zur Inputerzeugung, Datentransformation und Aufbereitung der Outputdaten. Des Weiteren wurden generalisierte Inputmodelle für WWER-440- und WWER-1000-Reaktoren zur Nachrechnung von Monitorexperimenten erstellt und eine entsprechende Datenbank mit allen relevanten WWER-Reaktormaterialien erzeugt. Diese wurde an verschiedenen experimentellen Daten und anhand anderer Rechnungen, die z. B. mit dem international anerkannten Monte-Carlo-Code MCNP6 ausgeführt wurden, überprüft. Es konnten sowohl für WWER-440-Reaktoren als auch für WWER-1000-Reaktoren gute Übereinstimmungen erzielt werden. TRAMO kann somit als alternatives Programm für derartige Rechnungen eingesetzt werden.

Durch die Möglichkeit, sowohl Neutronen- als auch Gammatransport zu simulieren, ist die Anwendung des Programmsystems im Bereich nationaler Rückbauprojekte kerntechnischer Anlagen und des Strahlenschutzes möglich. Auf der anderen Seite ist es denkbar, den Quellcode akademischen Einrichtungen wie Universitäten und öffentlich geförderten Forschungsinstituten zur Verfügung zu stellen, damit junge Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler in der Anwendung von Monte-Carlo-Programmen qualifiziert werden. Nur so kann der Erhalt des Fachwissens und des Sachverstands auf dem Gebiet der Transportrechnungen mit Hilfe von Monte-Carlo-Methoden garantiert werden.

Abstract

VVER reactors have been in operation in many Eastern European countries for many years – often decades. Due to the smaller distance between the reactor pressure vessel and the fuel assemblies, the neutron irradiation of the reactor pressure vessel is higher than in Western-type reactors. Due to the current lifetime and the partially planned lifetime extensions, the neutron fluences could approach the maximum permissible values. Therefore, their most accurate prediction by spatially detailed and precise calculations is essential for the continued safe operation of these reactors. This also applies to the reactors built since the turn of the millennium, some of which are already in operation and have an expected operation time of 60 years or more.

With the further development of the reactor dosimetry code package TRAMO, the Russian partner SEC NRS is now able to use an additional computational program for fluence calculations of VVER reactors. For this purpose, TRAMO was converted into modern FORTRAN and a data pre- and post-processing was developed. This includes programs for input generation, data transformation and preparation of output data. Furthermore, generalized input models for VVER-440 and VVER-1000 reactors were created for the recalculation of monitor experiments and a corresponding database with all relevant VVER reactor materials was generated. Both were checked on various experimental data and on the basis of other calculations performed, for example, with the internationally approved Monte Carlo code MCNP6. Good agreement was obtained for both VVER-440 reactors and VVER-1000 reactors. TRAMO can thus be used as an alternative program for such calculations.

The possibility to simulate both neutron and gamma transport allows the application of TRAMO in the field of national decommissioning projects of nuclear facilities and radiation protection. On the other hand, it is conceivable to make the source code available to academic institutions such as universities and publicly funded research institutes so that young scientists can be qualified in the application of Monte Carlo programs. This is the only way to guarantee the preservation of expertise and knowledge in the field of transport calculations using Monte Carlo methods.

1 Zielsetzung und Aufgabenstellung

1.1 Gesamtziel

Die Arbeiten werden auf der Grundlage des Abkommens vom 22. April 1987 über wissenschaftlich-technische Zusammenarbeit (WTZ) bei der friedlichen Nutzung der Kernenergie zwischen dem BMBF und MINATOM durchgeführt. Die Inhalte der Zusammenarbeit werden auf gemeinsamen Koordinierungssitzungen beider Seiten regelmäßig abgestimmt und kontrolliert. Das hier beschriebene Vorhaben basiert auf den Vereinbarungen der Koordinierungssitzungen, die abwechselnd in Russland und Deutschland stattfinden. Im Protokoll der 8. gemeinsamen Koordinierungssitzung vom 10. bis 12. Juni 2015 in Berlin wurden für die weitere Zusammenarbeit im Rahmen des Projekts A. 4.10 folgende Aufgaben definiert:

- Erstellung einer verbesserten TRAMO-Version [1] für die Berechnung von spektralen Neutronen- und Gammafluenzen in Reaktorkomponenten (einschließlich des Reaktordruckbehälters und dessen unmittelbarer Umgebung) von WWER-Reaktoren,
- Bereitstellung einer Datenbibliothek auf Basis von ENDF/B-VII.1 [2], mit deren Hilfe relevante Querschnitte für alle WWER-Reaktortypen berechnet werden können,
- Entwicklung von Pre- bzw. Postprocessing zur automatischen Erzeugung von TRAMO-Eingabedaten für WWER-440, WWER-1000 und WWER-1200,
- Verifikation und Validierung der erstellten Modelle anhand experimenteller Daten,
- Anwenderschulung.

Das Hauptziel dieses Projekts ist die Entwicklung eines Pre- bzw. Postprocessing-Tools für das Programm TRAMO, welches es allgemein nutzbar macht. Damit wäre es den russischen Kollegen möglich, eigenständig Fluenzrechnungen für WWER-Reaktortypen durchzuführen. Dies schließt die Bestimmung von Aktivitäten von Neutronenfluenzmonitoren an der Reaktordruckbehälteraußenwand und von Reaktorkomponenten (retrospektive Reaktordosimetrie) mit ein. Auch eine Verwendung beim Rückbau von kerntechnischen Anlagen ist möglich. Vorhersagen über mögliche Aktivierungen von Anlagenteilen und über die einer sicheren Endlagerung zuzuführenden Materialmengen könnten damit abgeschätzt werden.

Das Vorhaben leistet einen wesentlichen Beitrag zur Umsetzung des Abkommens über die wissenschaftlich-technische Zusammenarbeit zwischen der Bundesrepublik Deutschland und der Russischen Föderation auf den Gebieten der Reaktorsicherheitsforschung und der Endlagerforschung. Das grundsätzliche Anliegen dieser Zusammenarbeit besteht darin, den in Europa üblichen technischen Stand bezüglich der Reaktorsicherheit und der Nachweisverfahren auch für die russischen Kernkraftwerke nutzbar zu machen. Dies wird u. a. durch die enge persönliche Zusammenarbeit von Wissenschaftlern beider Seiten und die gemeinsame Analyse gewonnener Ergebnisse erreicht. Zur Sicherheitsbewertung werden vergleichend die in beiden Ländern bestehenden Regeln und Standards herangezogen.

1.2 Wissenschaftlich-technische Arbeitsziele des Vorhabens

Zurzeit sind in Russland, Bulgarien, Indien und in vielen anderen Staaten WWER-Reaktoren in Betrieb. Neue Kraftwerke dieser Typen sind in Planung oder im Bau. Im Gegensatz zu westeuropäischen Reaktortypen zeichnen sich diese Reaktoren durch eine sehr kompakte Bauweise aus. Der Abstand zwischen Reaktorkern und Reaktordruckbehälter ist hier wesentlich kleiner als in Reaktoren westlicher Bauart. Das hat zur Folge, dass der Reaktordruckbehälterstahl einer höheren Neutronenstrahlung als bei den westlichen Kernreaktoren ausgesetzt wird. Trotz dieser Tatsache wurde bei älteren WWER-Reaktoren kein Voreilprobenprogramm zur Überwachung des Materialzustandes, welches heute zur Standardausrüstung moderner Kernkraftwerke gehört, installiert bzw. nachinstalliert. Deshalb sind genaue Berechnungen der Fluenzen für diese Reaktordruckbehälter sehr wichtig, um ihre aktuelle Neutronenfluenz zu kennen und auf deren Basis die momentanen mechanischen Eigenschaften ableiten zu können. Solche Fluenzrechnungen sind folgerichtig seit langem ein Thema in der russischen Reaktorsicherheitsforschung.

Der russische Partner verfügt über das international genutzte Code-Paket DOORS-3.2 [3]. Die Berechnungen der dreidimensionalen Fluenzverteilungen im Reaktordruckbehälter werden hier mit Hilfe der Synthese-Methode auf Basis des zweidimensionalen Codes DORT durchgeführt [4]. In den vorangegangenen WTZ-Projekten konnte vom russischen Partner gezeigt werden, dass diese Methode auch bei dreidimensionalen Problemstellungen relativ gute Ergebnisse liefern kann, aber gleichzeitig wurden die Grenzen der Methode deutlich. So wurden im Vergleich zu TRAMO und experimentell

generierter Daten deutliche Unterschiede in den Ortsfluenzen berechnet, die außerhalb des Höhenbereichs des Reaktorkerns lagen. Die Verwendung von echten dreidimensionalen Codes ist hier für die Berechnung von genauen Werten unabdingbar.

Deshalb steht seit langen der Wunsch des russischen Partners, im Rahmen der WTZ mit Deutschland das Monte-Carlo-Programm TRAMO für Fluenzrechnungen nutzen zu dürfen. Zurzeit wird dieses Programm ausschließlich am Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR) verwendet. Um eine Nutzung durch andere Wissenschaftler zu ermöglichen, sind Arbeiten am Code sowie in der Vor- und Nachbereitung der Ein- und Ausgabedaten notwendig. Zudem existiert zurzeit kein Handbuch in englischer Sprache.

Das Vorhaben hat deshalb die folgenden vorrangigen Ziele:

- Entwicklung von Pre- bzw. Postprocessing-Tools für TRAMO für die Berechnung spektraler Neutronen- und Gammafluenzen in Reaktorkomponenten und Aktivitäten bzw. Reaktionsraten von an der Außenwand des RDB installierten Fluenzmonitoren,
- Entwicklung und Erzeugung einer umfassenden Datenbank auf Basis der Nukleardatenbibliotheken ENDF/B-VII.1 oder JEFF-3.3 [5],
- Anfertigung eines englischsprachlichen Manuals.

Neben den Arbeiten am Programm selbst ist die Validierung des weiterentwickelten Programms ein wesentlicher Schwerpunkt des Vorhabens. Denn nur sehr gut und an verschiedenen Experimenten und Codes ausgetestete Programme sollten weitergegeben werden. Dafür werden Rechnungen anhand experimenteller Daten, die ein breites Spektrum an möglichen Messungen abdecken, durchgeführt. Die Validierung umfasst sowohl Messungen an verschiedenen Monitormaterialien, die an der Außenseite des RDB befestigt sind (Ex-Vessel-Messungen), als auch Messungen an Reaktordruckbehältermaterial für eine retrospektive Dosimetrie. Zu diesem Zweck konnte auf Neutronenfluenzmessungen an einem in Betrieb befindlichen russischen Kernkraftwerk sowie auf ein Geometriemodell samt notwendiger Leistungsdaten und auf Nachrechnungen mit DORT zurückgegriffen werden.

Um TRAMO auch im thermischen Energiebereich zu validieren, werden Aktivitäten von RDB-Proben der Blöcke 1 und 4 des abgeschalteten Kernkraftwerks Greifswald bestimmt [6]. Diese Proben sind im HZDR verfügbar und können für eine retrospektive Bestimmung der Fluenzen genutzt werden. Damit wäre auch ein Einsatz von TRAMO im Rückbau von kerntechnischen Anlagen denkbar. Mit einer exakten radiologischen

Charakterisierung des RDB und dessen Einbauten wäre eine optimale Zerlegung möglich, was zu einer Reduzierung des endzulagernden Materials führen würde. Die experimentelle Bestimmung der Aktivitäten der Radionuklide sowie der Konzentrationen der Legierungsbestandteile/Verunreinigungen, durch die diese Radionuklide erzeugt werden, erfolgte im akkreditierten Labor für Umwelt- und Radionuklidanalytik des VKTA – Strahlenschutz, Analytik und Entsorgung Rossendorf e. V.

Für die Überprüfung von Neutronenspektren werden Parallelrechnungen mit dem Monte-Carlo-Programm MCNP durchgeführt. Ein weiterer Vorteil ist, dass interne Programmdateien verglichen und somit einzelne Programmroutinen überprüft werden können.

Hierfür werden folgende Ziele im Vorhaben definiert:

- Durchführung von Experimenten vom russischen Partner an laufenden WWER-Reaktoren und Analyse von Reaktordruckbehältermaterial des Kernkraftwerks Greifswald,
- Validierung des Programms auf Basis der gewonnenen Messergebnisse und Durchführung von Vergleichsrechnungen mit MCNP.

2 Vorarbeiten des Projektbewilligten

Die Basis des Codesystems TRAMO bildet das Programm SMO, dessen Entwicklung bereits am Zentralinstitut für Kernforschung der DDR begann. Ziel war es, für die Reaktordosimetrie ein Programmsystem aufzubauen, mit dem man Neutronen- und Gammafluenzen insbesondere im Reaktordruckbehälter und in Reaktoreinbauten bestimmen kann [7]. In den letzten Jahren wurde das Verfahren kontinuierlich am Forschungszentrum Rossendorf/Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf weiterentwickelt, so dass es dem heutigen Stand von Wissenschaft und Technik von Monte-Carlo-Programmen voll entspricht. Dieses System umfasst dabei die hauseigenen Monte-Carlo-Codes TRAMO (Transportrechnungen) und TRAWEL (Berechnungen von Gewichtsdaten) sowie MODAJ (Berechnung von makroskopischen Konstanten) und diverse Dienstleistungs- und Hilfsprogramme. Der Code TRAMO kann reaktortypische achsenparallele Geometrien behandeln, womit sich prinzipiell alle Strukturen eines Reaktors bis zur biologischen Abschirmung modellieren lassen. Für die eigentliche Transportrechnung mit TRAMO berechnet das Programm TRAWEL mit Hilfe eines rekursiven Monte-Carlo-Spiels optimale Zonengewichte und MODAJ die benötigten makroskopischen Datensätze für alle relevanten Materialzusammensetzungen und Temperaturen. Die erforderlichen mikroskopischen Gruppenwirkungsquerschnitte werden mit Hilfe von NJOY [8] und auf Basis evaluierter Kerndatenbibliotheken wie ENDF/B-VII.1 oder JENDL-4.0 [9] bestimmt.

TRAMO ist unter anderem innerhalb früherer WTZ-Projekte validiert und verifiziert worden. So wurden die Ergebnisse sowohl mit Experimenten als auch mit anderen Rechnungen verglichen. Die experimentellen Daten stammen dabei von Aktivierungsmonitoren aus Voreilproben und von Ex-Vessel-Experimenten. Vergleiche mit Rechenergebnissen fanden meistens innerhalb von internationalen Benchmarks wie zum Beispiel dem EU-Projekt REDOS statt [10] und beruhen auf Vergleichen mit DORT/TORT- und MCNP-Rechnungen. Wegen der Konzentration der Reaktordosimetrie auf den schnellen Energiebereich ist hier der Validierungsgrad sehr hoch und TRAMO auf dem aktuellen Stand von Wissenschaft und Technik auf diesem Gebiet. Die Verwendung aktueller Kerndatenbibliotheken sorgt auch in diesem Bereich für laufenden Fortschritt. Eine wichtige Eigenschaft des Codepaketes ist die Möglichkeit der Bereitstellung von bestmöglichen Zonengewichten, die mit Hilfe des Programmes TRAWEL bestimmt

werden können. Durch das hier verwendete rekursive Monte-Carlo-Spiel ist die Erzeugung von optimalen Gewichten in relativ kurzer Zeit möglich, womit eine maximale Beschleunigung einer TRAMO-Rechnung erreicht werden kann.

Der russische Partner hat jahrelange Erfahrungen sowohl auf dem Gebiet der Neutronentransportrechnungen mit Hilfe von deterministischen Programmen als auch der Neutronenflussmessungen an Leistungsreaktoren und deren anschließender Analyse. Bereits für frühere WTZ-Projekte stellte er Daten für WWER-440 und WWER-1000 Reaktoren zur Verfügung. Für das aktuelle Projekt können Daten aus einem weiteren Kernkraftwerk (KKW) genutzt werden. Es handelt sich hierbei um einen weiterentwickelten WWER-1000-Reaktor, an dem Ex-Vessel-Experimente durchgeführt wurden.

In den letzten Jahren wurde auch verstärkt auf dem Gebiet der retrospektiven Reaktordosimetrie gearbeitet. Hintergrund ist, dass die klassischen Fluenzmonitore in den Überwachungsprogrammen hauptsächlich auf Isotope mit einer Halbwertszeit von Tagen bis zu einigen Jahren, wie $^{58}\text{Ni}(n,p)$, $^{54}\text{Fe}(n,p)$, $^{46}\text{Ti}(n,p)$ und $^{63}\text{Cu}(n,\alpha)$ basieren. Selbst $^{93\text{m}}\text{Nb}$ mit rund 16-jähriger Halbwertszeit „speichert“ nur unzureichend die gegenwärtigen Leistungsverläufe von KKWs bei Laufzeiten von mehr als 30 Jahren. Auf der anderen Seite werden mit den jetzt angestrebten Laufzeitverlängerungen Neutronenfluenzen in den RDBs generiert, die in die Nähe der Maximalwerte kommen. In solchen Fällen kann nur eine exakte Vorhersage der Fluenzwerte den zuverlässigen Betrieb der Kernkraftwerke gewährleisten. Daher wird verstärkt versucht, experimentelle Werte zu nutzen, indem direkt aus dem RDB-Stahl Proben gewonnen und ausgemessen werden können. Deshalb wurden innerhalb des WTZ-Projektes 1501331 bereits Aktivitäten von $^{93\text{m}}\text{Nb}$, ^{63}Ni und ^{99}Tc aus RDB-Material des Kernkraftwerks Greifswald bestimmt. Für weitere Untersuchungen stehen entsprechende Materialproben und die Möglichkeiten der Aufbereitung am HZDR zur Verfügung. Neben den eigenen Analyse- und Messeinrichtungen zur Bestimmung von Nuklidkonzentrationen und -aktivitäten kann auch auf die Expertise des VKTA zurückgegriffen werden, welches über große Erfahrungen beim Messen dieser Isotope verfügt.

MCNP ist ein international verwendeter Monte-Carlo-Code für die Bestimmung von Strahlungsfeldern und ursprünglich für die Berechnung von Neutronen- und Gammafeldern entwickelt. Durch seine weltweite Nutzung für Rechnungen an Kernreaktoren ist der Code sehr gut ausgetestet und wird deshalb üblicherweise als Referenzprogramm verwendet. Auch am HZDR besteht jahrelange Erfahrung mit Modellierungen

und Berechnungen mit MCNP. Auf Basis von Vergleichsrechnungen wurde zum Beispiel der thermische Bereich in TRAMO validiert.

3 Planung und Ablauf des Vorhabens

Die Arbeiten des Vorhabens sind unterteilt in:

1. *Erstellung und Entwicklung einer neuen TRAMO-Version mit entsprechenden Pre- bzw. Postprocessing-Tools:*

Eingabe und Ausgabe von TRAMO sollen umgestaltet werden, so dass der russische Partner in der Lage ist, das Programmpaket für die Nachrechnung von Experimenten und damit auch die Berechnung von Neutronenfluenzen im RDB selbstständig zu nutzen. Basis bilden Monitorexperimente an russischen WWER-Reaktoren. Auf deren Grundlage soll ein Inputmodell für die Reaktortypen erstellt und anhand von experimentellen Daten validiert werden. Zusammen mit dem Programm TRAMO soll der russische Partner auch zusätzliche Programme und Schnittstellen erhalten, um z. B. Quelldaten zu transformieren. Zudem soll eine zusätzliche Ausgabedatei nach Wünschen des russischen Partners erstellt werden. In dieser sollen nur die für den Nutzer relevanten Daten und diese in einem geeigneten Format aufgeführt werden. Dies erfordert eine Modernisierung des Programms auf modernes FORTRAN, die Entwicklung der oben genannten Zusatzprogramme, den Aufbau einer geeigneten Datenstruktur, sowie die Erstellung eines Ablaufprogramms mit geeigneten Auswahlmöglichkeiten.

2. *Erzeugung einer umfassenden Datenbank von Materialien der verschiedenen WWER-Typen auf Basis der Nukleardatenbibliothek ENDF/B-VII.1 oder JEFF-3.3:*

Vom Partner werden sämtliche notwendige Daten zur Materialzusammensetzung aller relevanten Bauteile des Reaktorkerns bereitgestellt. Auf Basis der Nukleardatenbibliotheken ENDF/B-VII.1 oder JEFF-3.3 und der Programme NJOY und MODAJ werden makroskopische Konstanten wie Wirkungsquerschnitte in zwei verschiedenen Gruppenstrukturen sowie thermische und elastische Streumatrizen berechnet. Diese Daten werden für die Validierungsrechnungen verwendet und dem russischen Partner für eigene Rechnungen zur Verfügung gestellt.

3. *Planung und Durchführung von neuen Experimenten vom russischen Partner an laufenden WWER-Reaktoren mit anschließender Analyse, Auswertung und*

Evaluierung der Messergebnisse. Bereitstellung von Messergebnissen aus bereits durchgeführten Experimenten sowie Validierung des Programmes auf Basis experimenteller Daten und Vergleichsrechnungen mit MCNP:

Zur weiteren Validierung und Verifizierung von TRAMO werden sowohl von deutscher als auch von russischer Seite neue experimentelle Daten erzeugt und analysiert sowie Vergleichsrechnungen durchgeführt. Zur Validierung stehen am HZDR Trepans aus dem abgeschalteten Kernkraftwerk Greifswald zur Verfügung. Entsprechende Proben sollen chemisch aufbereitet und die Aktivitäten ausgewählter Radionuklide sowie die Konzentrationen der für die Aktivierung relevanten Elemente bestimmt werden. Der russische Partner stellt Ergebnisse von Monitorexperimenten am russischen Kernkraftwerk Kalinin-4 bereit. Beide Experimente sollen mit TRAMO nachgerechnet werden. Zudem sollen ausgewählte Datensätze mit Ergebnissen von MCNP verglichen werden.

4. *Anfertigung eines englischsprachigen Manuals und des Abschlussberichts:*

Zusätzlich zum Codepaket und den Eingabedaten erhält der russische Partner auch ein englischsprachiges Handbuch zur Nutzung.

4 Stand von Wissenschaft und Technik zu Projektbeginn

In vielen Forschungseinrichtungen, so auch beim russischen Partner, werden zweidimensionale S_n -Codes verwendet. Bei dieser wird die winkelabhängige Streuung der Neutronen durch angenäherte diskrete Verteilungen beschrieben. Mit Hilfe einer Synthese-Methode können mit diesen Codes auch dreidimensionale Verteilungen gut berechnet werden, stoßen aber bei einer stark dreidimensionalen Abhängigkeit des Neutronenflusses wie z. B. im Bereich der Kernober- bzw. unterkante an ihre mathematischen Grenzen und weisen mitunter erhebliche Abweichungen von experimentellen Ergebnissen auf. So zeigte ein Vergleich mit Experimenten im Bereich der Supportkonstruktion des RDBs mit der Synthese-Methode größere Abweichungen, hingegen gute Übereinstimmungen mit Ergebnissen, die mit Hilfe von echten dreidimensionalen Programmen erzielt wurden. Deshalb werden zunehmend sowohl dreidimensionale S_n -Codes als auch Monte-Carlo-Codes verwendet.

Zur Validierung von Programmen im schnellen Energiebereich werden Vergleiche von Rechnungen mit experimentellen Daten von Neutronenfluenzmonitoren an der Außenseite des Reaktordruckbehälters herangezogen. In den Monitoren werden während der Bestrahlung Aktivitäten erzeugt, die nach der Entnahme ausgemessen werden können. Diese Aktivitäten entstehen meistens durch Reaktionen mit einem Schwellwert, der typischerweise oberhalb von 1 MeV liegt. Die meistverwendeten Monitore für Aktivitätsmessungen bestehen aus den Nukliden ^{54}Fe , ^{58}Ni , ^{46}Ti oder ^{93}Nb . Nach der Bestrahlung werden diese gammaspektroskopisch ausgemessen. Die dazu verwendeten Verfahren sind etabliert und die Übereinstimmung mit Berechnungen im Bereich von 10%. Die Bestimmung der $^{93\text{m}}\text{Nb}$ -Aktivität erfolgt aufgrund der niedrigen Energie der emittierten Röntgenstrahlung von nur 18 keV heute meistens mit Hilfe der Flüssigszintillationsspektrometrie (LSC-Methode, Liquid Scintillation Counting method). Diese Methode hat sich den in letzten Jahren gegenüber der früher verwendeten Gammaspektrometrie durchgesetzt. Diese Experimente werden von vielen Forschungsgruppen an den verschiedenen Reaktortypendurchgeführt. Es existiert demzufolge eine umfangreiche experimentelle Datenbasis, weshalb in diesem Energiebereich insbesondere die Monte-Carlo-Codes recht gut validiert sind.

Dagegen existieren nur wenige Experimente auf dem Gebiet der retrospektiven Reaktordosimetrie. Im 2002-2005 durchgeführten EU-Projekt RETROSPEC [11] wurde die ^{93m}Nb -Aktivität in der Plattierung von WWER-Reaktoren bestimmt. Andere experimentelle Werte wurden innerhalb eines früheren WTZ-Projektes gewonnen. Neben der ^{93m}Nb -Aktivität wurden hier auch Aktivitäten von ^{63}Ni und ^{99}Tc bestimmt. Die Abweichungen zwischen Experiment und Berechnungen lagen zwischen 10% und 50%. Das ist ein Grund, warum der Validierungsgrad im thermischen und epithermischen Energiebereich weniger gut ist. Wie beschrieben existieren für diesen Energiebereich nur wenige Experimente; unter anderem die Experimente aus Greifswald [6]. Deshalb ist die Validierung von Codes im thermischen und epithermischen Energiebereich auch bezüglich des Aktivitätsaufbaus von Reaktorkomponenten noch nicht weit fortgeschritten.

5 Eingehende Darstellung

5.1 *Arbeiten am Programmpaket TRAMO und Beschreibung der Zusatz- und Schnittstellenprogramme*

5.1.1 Modernisierung des Programmpakets TRAMO

TRAMO wurde unter anderem bereits in früheren WTZ-Projekten für Berechnung von Neutronenfluenzen bei WWER-Reaktoren eingesetzt und ist dementsprechend an diesen Reaktoren validiert. Allerdings wurde das Programm bislang nur im Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf genutzt. Eine ausführliche deutsche Beschreibung zum Aufbau und zur Funktionalität findet man in [12]. Zwar fand in den letzten Jahren eine Weiterentwicklung des Programmes statt, trotzdem basierten zu Projektbeginn noch große Bereiche des Programmes auf FORTRAN-77 und das Programm war nur unter Linux lauffähig. Für das Ziel der Übergabe des Programms an den russischen Partner waren daher zunächst eine Reihe technischer Anpassungen und Verbesserungen nötig. Das nur aus einer Datei mit rund 10000 Zeilen bestehende Programm wurde in einzelne Unterprogramme gesplittet, was eine bessere Handhabung ermöglichte. Es erfolgte zudem unmittelbar eine Portabilität auf Windows mit dem Intel-FORTRAN-Compiler. Alte und nicht mehr dem (FORTRAN-)Standard entsprechende Programmelemente wurden sukzessive entfernt und ersetzt bzw. auf modernes FORTRAN umgestellt. Zudem wurden die Compilersettings und die Laufzeitüberprüfung so sensitiv wie möglich eingestellt. Dabei konnten bereits eine Reihe von kleineren Fehlern entdeckt und beseitigt werden. In den Subroutinen und Funktionen wurden compilerunterstützende Elemente (z. B. intent, pure) eingefügt, um die jeweils intendierte Funktionalität zu überprüfen und für die Entwickler besser sichtbar zu machen. Auch die Lesbarkeit wurde durch die Umstellung auf modernes FORTRAN verbessert. Dazu zählen neben Einrückungen auch intuitivere Darstellungen von Operatoren. Weiterhin wurden so weit wie möglich Sprunganweisungen durch äquivalente Elemente wie Schleifen und bedingte Anweisungen mit Verzweigungen ersetzt.

Um zukünftige Entwicklungsschritte nachvollziehen zu können, wurde ein automatisches Versionskontrollsystem basierend auf GIT und ein Build-System eingerichtet. Jegliche Veränderungen am Quellcode werden nun konsequent eingchecked und anhand von Testbeispielen überprüft. Letztere basieren auf Daten früherer Codevalidie-

rungen und -verifizierungen und werden nach jedem Einchecken in das Versionskontrollsystem abgefahren. Eventuelle Änderungen in den Ausgabedaten werden gemeldet und Fehler können daher sofort nachvollzogen werden.

5.1.2 Erzeugung von Referenzmodellen

Mit dem russischen Partner wurde auf drei Arbeitstreffen ausführlich diskutiert, welchen Funktionalitätsumfang das zu liefernde TRAMO-Paket umfassen soll. Schwerpunkt sollten dabei Nachrechnungen von experimentellen Daten bzw. von Rechnungen mit dem Programm DOORS/DORT in Bezug auf Bestrahlung von Neutronenfluenzmonitoren an der Außenseite eines Reaktordruckbehälters sein. Für WWER-440- und WWER-1000-Reaktoren sollten dabei Standardinputdatensätze erzeugt werden. Diese sollte der russische Partner dann einfach modifizieren können, um selbstständig Rechnungen mit TRAMO durchzuführen. Bezüglich eines WWER-440 wurde sich auf ein Modell des Kernkraftwerks KOLA-3 geeinigt. Angaben zur Geometrie und zur Materialzusammensetzung waren noch aus einem früheren WTZ-Projekt vorhanden. Für das Projekt wurde ein bestehendes Geometriemodell erweitert. Auf die Außenseite des Reaktordruckbehälters kam im Rechenmodell ein Netz mit äquidistanter Höheneinteilung und äquidistanter Winkелеinteilung bestehend aus 22 Höhenschichten und 15 Winkelsegmenten. Bezüglich eines WWER-1000-Modells konnte auf Daten des Kooperationspartners aus dem Kernkraftwerk Kalinin-4 zurückgegriffen werden. Anhand derer wurde ein Geometriemodell erzeugt, wobei hier an der Reaktordruckbehälteraußenwand ein Netz mit 35 Höhenschichten und 20 Winkeln modelliert wurde. Für diese Netze wurden wie weiter unten beschrieben Zonengewichte und Source-biasing-Daten erzeugt. Anhand eigener Daten zu Quell- und Brennstabverteilungen und mit geeigneten Wirkungsquerschnittsdaten konnten Testrechnungen durchgeführt werden. Die Verifizierung des Modells erfolgte an Ergebnissen alter und neuer Rechnungen bzw. Messungen. Die folgenden Abschnitte befassen sich mit den einzelnen Inputdaten, deren Erzeugung und wie diese für eine TRAMO-Rechnung aufbereitet werden müssen.

5.1.3 Inputdatenerzeugung

Wie im vorangegangenen Abschnitt beschrieben wurden für einen WWER-440 und einen WWER-1000 Standardeingabedatensätze erzeugt. Die TRAMO-Basiseingabedatei verfügt über eine Vielzahl von Größen, die jedoch eine zum Teil ziemlich tiefe

Kenntnis des Programms voraussetzen. Für das Hauptaufgabengebiet der Monitorrechnungen sind jedoch nur wenige globale Eingabegrößen für Modifizierungen von Belang. Um dem russischen Partner die Benutzung zu erleichtern, wurde die Möglichkeit geschaffen, ein weiter unten beschriebenes Skript samt übergeordneter Eingabedatei zu verwenden. Sie enthält nur wenige globale Größen, wie die maximale Rechenzeit, die Anzahl der verwendeten Energiegruppen oder Angaben zur Darstellung des Outputs. Die Auswahl ist mit dem russischen Partner abgestimmt und im Benutzerhandbuch detailliert nachzulesen. Mit Hilfe eines kleinen Programms wird aus diesen Eingabedaten und weiteren für den jeweiligen Reaktortyp spezifischen Größen die Basiseingabedatei von TRAMO erzeugt. Diese enthält dann neben den globalen Größen die komplette Geometrie inklusive der verwendeten Materialien sowie eine Auswahl der Energiegruppendarstellung. Für alle definierten Volumenelemente werden in der Ausgabedatei energieintegrierte Neutronenflüsse ausgegeben. Es besteht die Möglichkeit, die spektralen Neutronenflüsse für ausgewählte Volumenelemente ebenfalls auszugeben.

5.1.4 Sourcebiasing und Gewichtsdatenerzeugung

Um statistisch abgesicherte Energiespektren von Fluenzen im RDB und speziell an dessen Außenwand in vertretbaren Rechenzeiten berechnen zu können, ist die Anwendung von varianzreduzierenden Verfahren zwingend erforderlich. Die Nutzung von Teilchengewichten spielt dabei im Rahmen der „Weight-Window-Methode“ eine entscheidende Rolle. Die optimale Anwendung der Methode setzt Datensätze voraus, die TRAMO in die Lage versetzen, Rechnungen entsprechend zu optimieren. Hierfür steht das Programm TRAWEL zur Verfügung. Mit Hilfe rekursiver Monte-Carlo-Technik werden unter Kenntnis der relevanten Ergebnisbereiche energieabhängige Zonengewichte bestimmt, die die eigentlichen Rechnungen dann erheblich beschleunigen können. Für die Bestimmung der Gewichte wird mit TRAWEL praktisch für jede Zone die Einflussfunktion auf das Ergebnisgebiet (z. B. Monitorort) mit einer separaten Monte-Carlo-Rechnung ermittelt. Die Gewichte ergeben sich dann aus der Beziehung

$$G(g,z) = C/E(g,z)$$

$G(g,z)$ bzw. $E(g,z)$ sind das Gewicht bzw. Einflussfunktion in der Energiegruppe g und der Zone z . C ist eine Konstante die so bestimmt werden sollte, dass die Gewichte in den Hauptquellzonen etwa Eins ergeben. Durch die Anwendung der rekursiven Me-

thode ist das Berechnen der Gewichte in vertretbaren Rechenzeiten möglich. Beginnend im Ergebnisgebiet und in der untersten Energiegruppe kann die Rechnung durch die Ausnutzung bereits berechneter Einflussfunktionen extrem beschleunigt werden. Mit Hilfe dieser Verfahren können optimale Gewichte innerhalb einer Rechnung erzeugt werden. Eine mehrstufige Iteration wie zum Beispiel bei dem Weight-Window-Generator in MCNP ist nicht notwendig.

Für die einzelnen Referenzmodelle wurden in Abhängigkeit der Monitoranordnung verschiedene optimierte Parametersätze bestimmt. Dabei nutzt TRAWEL praktisch dieselben Inputdateien wie TRAMO. Grundannahme war dabei, dass in den meisten Fällen die Monitore vertikal oder horizontal angeordnet sind. Außerdem haben die Erfahrungen früherer Rechnungen gezeigt, dass es ausreicht, jeweils für eine vertikale bzw. horizontale Anordnung der Monitore einen Gewichtssatz zu nutzen. Dementsprechend wurden für das Referenzmodell des WWER-440 für horizontal angeordnete Monitore 22 und für vertikal 15 Gewichtssätze erzeugt. Für das WWER-1000-Modell sind es 34 für die horizontal und 20 für die vertikal angeordneten Monitore. Die verschiedenen Gewichtsdatensätze wurden entsprechend abgelegt und könnten in Abhängigkeit des Problems genutzt werden. Diese TRAWEL-Rechnungen wurden mit dem ABBN-78-Gruppensatz (26 Energiegruppen) durchgeführt. Dieser Datensatz wurde speziell auf die Gewichts Berechnung optimiert.

Allgemein bekannt ist, dass der Einfluss der Quellen der äußersten Brennelementreihe auf die Neutronenfluenz im RDB am größten ist. Frühere Rechnungen haben gezeigt, dass für den WWER-440 praktisch 90% und für den WWER-1000 95% der Fluenz durch Quellen aus diesen Brennelementen generiert wird. Deshalb ist die Verwendung eines Sourcebiasings für eine Optimierung der Rechnung sehr sinnvoll und dementsprechend auch für die Referenzmodelle geboten.

Konsequenterweise wurde auch das Sourcebiasing entsprechend der für die Gewichte erfolgten Grundannahme ausgerichtet. Um dieses zu bestimmen, wurde mit Hilfe von TRAMO der Einfluss jeder Brennelementschicht auf jede horizontale bzw. vertikale Monitoranordnung berechnet. Das bedeutet, dass für jede Quellzone die Greensche Funktion bestimmt wurde. Entsprechend wurde eine Vielzahl von Simulationen durchgeführt, bei denen nur in einer Brennelementzone Quellteilchen gestartet wurden. Auf Basis der erzielten Resultate im Ergebnisgebiet wurde dann für jede Anordnung ein optimales Sourcebiasing ermittelt, indem man die jeweiligen Daten zusammengefasst und neu normiert hat. Die Normierung erfolgt so, dass für die Quellzonen mit dem

größten Einfluss ein Wert nahe Eins entsteht und für die anderen Werte größer Eins. Diese Daten wurden gespeichert und stehen TRAMO-Nutzern als Eingabedateien zur Verfügung.

5.1.5 Quell- und Pindatenerzeugung

TRAMO besitzt eine separate Eingabedatei für die Quelldaten und eine separate Datei für die Pinleistungsverteilung innerhalb einer Brennelementschicht. Die Datei der Quelldaten beinhaltet zu Beginn das Energiespektrum der Quellneutronen, wobei eine von den Wirkungsquerschnitten unabhängige Energiegruppenstruktur verwendet werden kann. Danach erfolgt die Eingabe der Quellen für jedes Brennelement und für jede Höhenschicht, wobei die Reihenfolge entsprechend des Geometrieinputs der Brennelemente von außen nach innen erfolgt. Für den üblichen 60°-Sektor wird für die Brennelemente auf der 60°-Achse keine Quellverteilung mitgeliefert. Deshalb werden die Quellen der Brennelemente von der 0°-Achse für jene bei 60° übernommen, um die Randbedingungen adäquat abzubilden. Die Quellen werden auf Basis von Abbranddaten des Kernkraftwerks erzeugt. Dabei sind die Daten für jede Brennelementzone von Beginn und Ende des Operationszyklus und für die Berechnungen der Spaltneutronen waren Funktionen zur Spaltneutronenausbeute gegeben. Letztere wurden für alle Brennelementtypen in Abhängigkeit des Abbrandes über ein Polynom zweiten Grades verfügbar gemacht. Aus diesen Daten wurde eine Neutronenquellverteilung im TRAMO-Format erzeugt und abgespeichert, indem, da keine weiteren Informationen verfügbar waren, ein lineares Abbrennen über die gesamte Laufzeit angenommen wurde. Das Datenformat des russischen Partners für die Quellen unterscheidet sich erheblich vom TRAMO-Format. Deshalb wurde für die notwendige Transformation ein Hilfsprogramm in FORTRAN geschrieben.

Die Struktur der Pinleistungsverteilung in TRAMO entspricht der der Brennstäbe inklusive der Absorberstäbe und des Zentralrohres im Brennelement. Entsprechend werden für den WWER-440 127 und für den WWER-1000 331 Zahlenwerte eingelesen. Der Mittelwert diese Leistungsverteilungen ist dabei Eins. Für jedes Brennelement und für jede Höhenschicht ist die Verteilung innerhalb der Brennelementzonen gegeben und wird als Zahlenfolge abgespeichert. Auch hier sind das Datenformat und die Reihenfolge beim russischen Partner anders, so dass eine Eins-zu-Eins-Transformation der Daten durchgeführt werden muss. Auch hierfür wurde ein FORTRAN-Programm

geschrieben. Beide Transferprogramme sind Bestandteil des im folgenden Abschnitt beschriebenen Skripts und stehen dem russischen Partner zur Verfügung.

5.1.6 Das Skript zum Programmablauf

Der russische Partner möchte TRAMO insbesondere für den Vergleich mit experimentellen Daten aus Monitorexperimenten an WWER-Kernkraftwerken nutzen. Dabei ist eine Reihe von Monitoren senkrecht oder waagrecht an der Außenseite des Reaktordruckbehälters befestigt. Für diesen Standardfall wurde ein Shell-Skript geschrieben. Dieses deckt WWER-440- und WWER-1000-Reaktoren ab und ermöglicht eine schnelle und einfache Handhabung des gesamten TRAMO-Programmpakets. Im Folgenden wird kurz die Funktionalität dieses Skripts beschrieben.

Vor dem Start müssen einige von TRAMO verwendete Daten in einer bestimmten Ordnerstruktur und mit einer bestimmten Syntax (Dateiendung) gespeichert sein. Je nach Ausrichtung und Position der Monitore wurden spezifische Gewichtsdatensätze und Sourcebiasings für alle Winkelsegmente bzw. Höhenschichten erzeugt und hinterlegt. Ebenso wurden Wirkungsquerschnitte und Streumatrizen für verschiedene Energiegruppenstrukturen abgespeichert. Im Moment sind das 47 und 640 Energiegruppen, aber prinzipiell kann jedes Format ausgewählt werden, sofern die Datensätze vorhanden sind. Die Quelldaten und die Pindaten im Format des russischen Partners müssen ebenso hinterlegt sein. Zudem ist die Basiseingabedatei vorab zu erstellen. Die ausführbaren Programme zur Datentransformation müssen ebenfalls abgespeichert sein. Wird das Skript dann gestartet, kann der Nutzer folgende Dinge der Reihe nach auswählen:

- den Reaktortyp,
- die Ausrichtung der Monitore,
- die Position der Monitore (abhängig von der Ausrichtung die Höhe oder der Winkel),
- die Auswahl der Querschnittsbibliotheken,
- eine Beschreibung des Problems (beliebiger String),
- den relevanten 60°-Sektor.

Abhängig von Reaktortyp, Ausrichtung und Position werden die richtigen Sourcebiasing- und Gewichtsdateien ausgewählt und in das Hauptverzeichnis kopiert. Abhängig von der Auswahl der Wirkungsquerschnitte werden die entsprechenden Da-

teilen (thermische Streumatrizen, elastische Streumatrizen, sonstige Wirkungsquerschnitte) ausgewählt. Aus der reduzierten Eingabedatei wird die Standardeingabedatei für TRAMO erzeugt. Je nach gewähltem Sektor werden aus den Dateien für die Quellverteilung zu Beginn und am Ende des Zyklus wie im vorherigen Abschnitt beschrieben Quelldaten für TRAMO erzeugt. Ebenso werden die Brennstabdaten transformiert und in eine Eingabedatei für TRAMO umgewandelt. Danach startet automatisch eine TRAMO-Rechnung mit den erzeugten Dateien. Nach Beendigung der Rechnung wird aus der Standardausgabedatei noch eine komprimierte Ausgabedatei erzeugt. Diese enthält im Wesentlichen die Dosis- und Fluenzwerte in den Volumenelementen der Monitore und in den unmittelbar angrenzenden Volumenelementen. Mit Hilfe dieser können dann relevante Größen wie Aktivitäten oder Reaktionsraten bestimmt werden. Die gesamte Vorgehensweise kann im Benutzerhandbuch nachgelesen werden. Eine Skizze des Programmlaufs zeigt Abbildung 1. Die Sektorauswahl=0 bezieht sich auf eine Ganzkernrechnung. Die schwarzen Pfeile zeigen den zeitlichen Ablauf, die blauen die beim jeweiligen Schritt verwendeten Daten.

Die beschriebenen Ausgabedateien enthalten normierte Fluenzspektren für die ausgewählten Volumenelemente, also typischerweise an der Außenseite des Reaktor-druckbehälters. Im Allgemeinen sind die Spektralwerte im oberen Energiebereich durch die geringe Anzahl an Quellneutronen mit einem großen Fehler behaftet und ein Vergleich mit Messwerten von Fluenzmonitoren schwierig. Deshalb gibt es in TRAMO die Möglichkeit, einen Cutoff für die Neutronenenergie einzuführen, so dass nur die oberen Energiegruppen betrachtet werden. So lassen sich auch hierfür statistisch akzeptable Ergebnisse erhalten. Eine weitere Möglichkeit ist es, auf Mehrprozessormaschinen statistisch unabhängigen Rechnungen zu starten und so quasi-parallele Rechnungen durchzuführen.

5.1.7 Postprocessing und Übergabe an den russischen Partner

Um die Ergebnisse dieser Rechnungen zu vereinen, gibt es ein zusätzliches Programm samt Eingabedatei. In letzterer werden zunächst die Ausgabedateinamen der statistisch unabhängigen Rechnungen zu demselben Problem erfasst. Anschließend erfolgt die Eingabe der Daten der relevanten Zonen (Zonennummer, Höhe, Winkel, Volumen, Oberfläche) und der Positionen (Höhe und Winkel) der Monitore (oder ausgewählter Punkte). Das Programm führt zunächst die Ergebnisse der Rechnungen zusammen. Anschließend erfolgt eine zweidimensionale lineare Interpolation, so dass

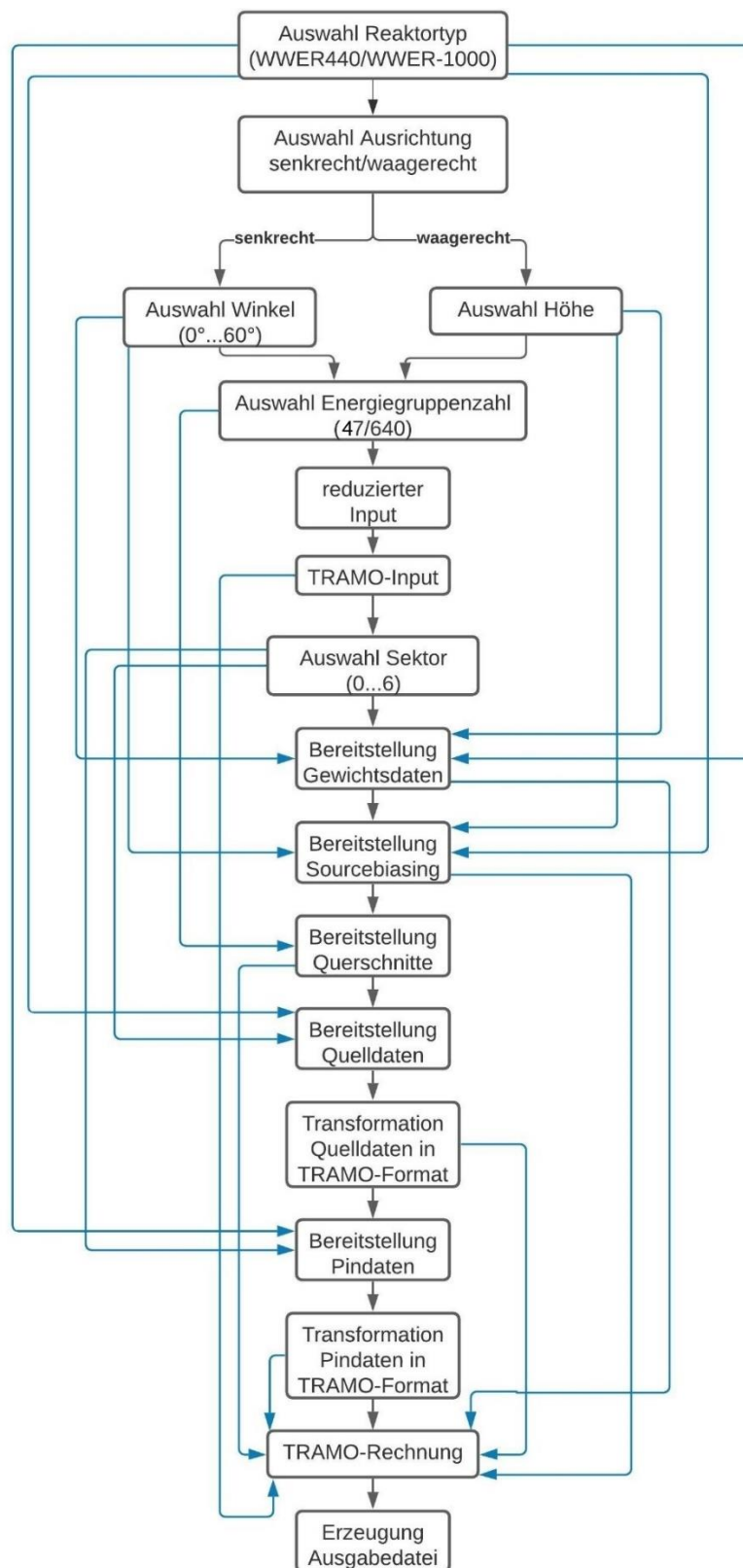


Abbildung 1: Ablaufschema des Shell-Skripts.

Fluenzwerte an den Orten der Monitore berechnet werden. Mit Hilfe eines Excel-Skripts werden dann aus den Fluenzwerten durch Einbeziehung der Wirkungsquerschnitte der Monitormaterialien Reaktionsraten und Aktivitäten berechnet.

Beim Arbeitstreffen im Frühjahr 2019 in Moskau wurde eine erste TRAMO-Paket-Testversion mit dem Skript und allen notwendigen Daten für den WWER-440 auf dem dortigen Computer installiert und getestet. Die Übergabe der aktuellen TRAMO-Version mit allen oben beschriebenen Komponenten war für Anfang 2021 in Moskau geplant, konnte aber aufgrund von Reisebeschränkungen nicht wie geplant durchgeführt werden. Die Übergabe erfolgte schließlich per Cloud und die Schulung des russischen Partners online.

5.2. Die Materialdatenbank für WWER-440 und WWER-1000

Die Grundlage der Aufbereitung der Materialdaten bildet das international verwendete Programm NJOY [8], mit dem mikroskopische Energiegruppenquerschnitte für einzelne Nuklide berechnet werden. Diese können zudem für verschiedene Temperaturen und Verdünnungen erzeugt werden. Das Programm kann dabei auf verschiedene Kerndatenbibliotheken zugreifen. Für das Vorhaben wurden Querschnitte sowohl für die Neutronen einschließlich der Gammaproduktionsdaten als auch für Gammas auf Basis der Kerndaten von ENDF/B-VII.1 und JENDL-4.0 generiert. Die erzeugten Energiestrukturen sind einmal BUGLE-96, ein Standard der Reaktordosimetrie, mit 47 Neutronen- und 20 Gammagruppen und die sehr feine SAND-IIA/CSEWG-Struktur mit 640 Neutronen- und 94 Gammagruppen. Für die Erzeugung der Gruppenquerschnitte wurde als Wichtungsfluss ein typisches Reaktorneutronenspektrum genutzt. Dieses besteht aus dem Watt-Spalt Spektrum im schnellen, einem $1/E$ -Spektrum im epithermischen und einem Maxwellspektrum im thermischen Bereich. Die Übergangsenergien waren 820,8 keV und 0,215 eV. Zur Abschätzung des Effekts der Selbstabschirmung wurde das Bondarenko-Modell verwendet. Dafür wurden für jedes Isotop neun verschiedene Verdünnungsquerschnitte berechnet und als F-Faktoren abgespeichert. Um die Resonanzverbreiterung durch die Temperatur zu berücksichtigen, wurden die Querschnitte für reaktortypische Temperaturen bestimmt. Für die meisten Nuklide wurde eine Temperatur von 550 K, die mittlere Temperatur des Kühlmittels, angenommen. Für die Nuklide des Urandioxids wurde eine Temperatur von 1000 K zugrunde gelegt.

Die inelastischen Übergangsgruppenquerschnitte werden als Legendre-Entwicklung bis P_5 und die elastischen Streuungen als gleichwahrscheinliche Winkelintervalle für eine Anzahl von Energiepunkten dargestellt. Für den thermischen Bereich sind separate Streudaten, bei denen eine Aufstreuung möglich ist, bestimmt worden. Die Bestimmung dieser basiert für die meisten Nuklide auf dem Freigasmodell. Für Isotope, bei denen Alpha/Beta-Faktoren zur Verfügung standen, wurde die thermische Streuung mit Hilfe dieser berechnet. So sind für eine Anzahl von Energiepunkten Sekundärenergieverteilungen abgespeichert und für jede Sekundärenergie entsprechende gleichwahrscheinliche Winkelintervalle. Auch für die Streuung des Wasserstoffes wurden entsprechende Streumatrizen berechnet. Unabhängig davon ist es möglich, diese in TRAMO im Schwerpunktsystem direkt zu berechnen und ins Laborsystem zu übertragen.

Für die Erzeugung dieser mikroskopischen Querschnittsdaten und Streumatrizen wurden entsprechende Tools entwickelt, die eine praktisch automatische Generierung dieser Daten ermöglichen und in einem vorbestimmten Schema ablegen.

In einem zweiten Schritt wurden mit Hilfe des Programms MODAJ auf Basis der von NJOY berechneten mikroskopischen Daten und einer gegebenen Zusammensetzung der Materialien makroskopische Datensätze erzeugt. Die Angaben zur Zusammensetzung der Materialien sind in Tabelle 1 und 2 dargestellt. Dabei wurde für alle Brennelemente ein Material angenommen. Diese Annahme ist möglich, da die zu berechneten Neutronenfluenzen außerhalb des Kerns hauptsächlich durch schnelle Neutronen aus dem Kern erzeugt werden und der Abbrand einen geringen Einfluss auf den Transport von schnellen Neutronen ausübt [13]. In den makroskopischen Querschnitten wurde mit Hilfe der F-Faktoren und der Konzentration der Nuklide die energetische Selbstabschirmung der Nuklide berücksichtigt [14].

Die Daten werden in drei verschiedene Dateien abgelegt. Eine Datei enthält alle notwendigen Querschnittsdaten und die Produktionsmatrizen der Gammas. Diese wird von MODAJ erzeugt. Die Streudaten werden mit separaten Programmen generiert und liegen dann als gesonderte Dateien vor.

5.2.1 WWER-440

Die chemischen Zusammensetzungen der Materialien beruhen auf Angaben aus einem Standardmodell, welches der russische Partner für DORT-Rechnungen entwickelt hat. Im diesem Modell werden 20 verschiedene Materialkompositionen verwendet, welche in Tabelle 1 dargestellt sind. Für die Bestimmung der Dichte des Wassers

Komposition		Zusammensetzung	Volumen- anteile in %
Reaktorkern	1	UO ₂ (²³⁵ U 1,11e-4, ²³⁸ U 6,0e-4, O 1,222e-3)	26,86
		Wasser (294 °C)	52,33
		ZrNb1	19,54
Wasser-1	2	Wasser (280 °C)	100
Reaktoreinbauten	3	Stahl (08Cr18Ni10T)	100
Wasser-2	4	Wasser (267 °C)	100
RDB-Stahl	5	Stahl (15Cr2MoV)	100
Luft	6	(N 80 %, O 20 %, 0,1 MPa, 260 °C)	100
Isolierung	7	Stahl/Luft: Fe=9,62e-3, Cr=2,91e-3, Ni=1,31e-3	
Beton	8	H=2,26e-2, O=3,84e-2, Fe=4,79e-3, Si=2,39e-2	
Support Beton	9	H=5,55e-3, O=3,88e-2, Fe=1,32e-2, Si=1,30e-2 Al=1,91e3, Ca=2,26e-3	
Wasser-ZrNb1*	10	Wasser (299 °C)	50,5
		ZrNb1	19,6
Stahl-Wasser-ZrNb1	11	Stahl (08Cr18Ni10T)	49,3
		Wasser (299 °C)	41,1
		ZrNb1	9,6
Stahl-Wasser-1	12	Stahl (08Cr18Ni10T)	30,2
		Wasser (299 °C)	69,8
Stahl-Wasser-2	13	Stahl (08Cr18Ni10T)	66
		Wasser (299 °C)	34
Stahl-Wasser-3	14	Stahl (08Cr18Ni10T)	13
		Wasser (299 °C)	87
Stahl-Wasser-4	15	Stahl (08Cr18Ni10T)	14
		Wasser (265 °C)	86
Stahl-Wasser-5	16	Stahl (08Cr18Ni10T)	47,2
		Wasser (265 °C)	52,8
Stahl-Wasser-6	17	Stahl (08Cr18Ni10T)	46,5
		Wasser (265 °C)	53,5
Abschirmkassette	19	Stahl (08Cr18Ni10T)	72
		Wasser (282 °C)	28
Aluminum	20		100

Tabelle 1: Volumenanteile und Nuklidkonzentrationen (in 10²⁴ cm⁻³) der Materialkompositionen im WWER-440/213 Modell. (* Der restliche Volumenanteil besteht aus He, das unberücksichtigt blieb.)

Komposition		Zusammensetzung	Volumenanteile in %
Reaktorkern	1	UO ₂ , mit 3% ²³⁵ U	30,909
		Stahl (12Kh18N10T)	1,898
		Wasser (0,728 g/cm ³)	56,032
		ZrNb1	11,161
Stahl-Wasser-ZrNb1	2	Stahl (12Kh18N10T)	6,988
		Wasser (0,753 g/cm ³)	57,49
		ZrNb1	35,52
Stahl-Wasser-ZrNb1	3	Stahl (12Kh18N10T)	33,11
		Wasser (0,753 g/cm ³)	56,74
		ZrNb1	10,15
Stahl-Wasser	4	Stahl (12Kh18N10T)	33,11
		Wasser (0,753 g/cm ³)	66,89
Stahl-Wasser	5	Stahl (12Kh18N10T)	29,95
		Wasser (0,753 g/cm ³)	70,05
Stahl-Wasser	6	Stahl (12Kh18N10T)	6,988
		Wasser (0,753 g/cm ³)	93,01
Stahl-Wasser	7a	Stahl (8Kh18N10T)	70,37
(hom. Eisenreflektor)		Wasser (0,728 g/cm ³)	29,18
Wasser	8	0,728 g/cm ³	100
Reaktoreinbauten	9	Stahl (8Kh18N10T)	100
Wasser Downcomer	10	0,753 g/cm ³	100
RDB-Stahl	11	Stahl (15Kh2NMFA-A)	100
Isolierung	12	Stahl Mix	12,9
		Luft	87,1
Beton	13	Normalbeton	100
Stahl-Wasser-ZrNb1	14	Stahl (12Kh18N10T)	18,98
		Wasser (0,699 g/cm ³)	56,03
		ZrNb1	11,16
		He	30,91
Stahl-Wasser-ZrNb1	15	Stahl (12Kh18N10T)	7,321
		Wasser (0,699 g/cm ³)	61,48
		ZrNb1	31,20
Wasser	16	0,699 g/cm ³	1
Stahl-Wasser	17	Stahl (12Kh18N10T)	18,30
		Wasser (0,699 g/cm ³)	81,70
Stahl-Wasser	18	Stahl (12Kh18N10T)	77,37
		Wasser (0,699 g/cm ³)	22,63
Stahl-Wasser	19	Stahl (12Kh18N10T)	38,60
		Wasser (0,699 g/cm ³)	61,40
Luft	20		100
Stahl-Proben	21	Stahl Mix	43,2
		Wasser (0,699 g/cm ³)	50,00
		Al	6,8
Stahl-Wasser	22	Stahl (12Kh18N10T)	0,804
		Water (0,699 g/cm ³)	99,20
Support	23	Beton mit Bewehrung	100
Abschirmung	24	Borbeton	100

Tabelle 2: Materialkompositionen im WWER-1000-Modell.

wurde ein Druck von 12.26 MPa angenommen. Die Kompositionen (z. B. Stahl-Wasser-1 bis -6) mit verschiedenen Materialien sind Bereiche im Fuß- bzw. im Kopfbereich der Brennelemente, die in den Rechnungen homogenisiert sind. Durch die relativ kleinteilige Struktur ist eine Auflösung nicht sinnvoll. Ergänzend sollte hier noch erwähnt werden, dass im Gegensatz zu den DORT-Rechnungen die Abschirmkassetten in den TRAMO-Rechnungen nicht homogenisiert wurden und Material 19 nicht verwendet wurde. Für beide Stahlsorten wurde eine Dichte von $7,85 \text{ g/cm}^3$ ausgewiesen. Das Hüllenmaterial der Brennstäbe besteht aus einer Zirkonium-Niob-Legierung mit 99 Gewichts-% Zr und 1 Gewichts-% Nb. Die Dichte ist $6,52 \text{ g/cm}^3$. Die Berechnung der makroskopischen Querschnitte erfolgte auf Basis berechneter Kerndichten der einzelnen Isotope der Elemente. Dabei wurde außer für Uran die natürliche Isotopenzusammensetzung zugrunde gelegt. Insgesamt wurden 47 Isotope verwendet. Entsprechend enthielten die dazu generierten Dateien mit den elastischen und thermischen Streudaten Werte für die 47 Isotope.

5.2.2 WWER-1000

Im Standardmodell des WWER-1000 werden 24 verschiedene Materialkompositionen verwendet (Tabelle 2). Die Daten wurden in Rahmen eines früheren WTZ-Projektes bereits zur Verfügung gestellt und jetzt aktualisiert. Auch hier wurden Bereiche, die in den DORT-Rechnungen homogenisiert sind, aufgelöst. So wird das Material 7a nicht verwendet, sondern die Kühlkanäle und die Rippenstruktur des Eisenreflektors als separate Volumina betrachtet. Insgesamt wurden hier 63 Isotope verwendet. Entsprechend waren hier Werte für 63 Isotope in den Streudaten enthalten.

5.3 Validierung von TRAMO

Die Validierung des Programms TRAMO erfolgte sowohl an Experimenten als auch durch den Vergleich mit Rechnungen, die mit anderen Programmen durchgeführt wurden. Für die experimentelle Überprüfung der Programmweiterentwicklung konnten Aktivitätsmessungen von Neutronenfluenzmonitoren und RDB-Stahl-Proben genutzt werden. Entsprechende Messwerte stehen vom KKW Greifwald zur Verfügung. Rechnungen mit dem WWER-1000-Modell wurde anhand von Experimenten validiert, die am russischen KKW Kalinin-4 durchgeführt worden sind.

Der Vergleich mit anderen Rechenergebnissen geschah zum einem mit dem Monte-Carlo Programm MCNP6 und zum anderen mit dem Programm DORT.

5.3.1 Experimente und Rechnungen zum KKW Greifswald

Das Kernkraftwerk Greifswald war bis 1990 im Leistungsbetrieb und bestand aus vier Blöcken des Reaktortyps WWER-440/230. Die maximale Anzahl an Zyklen wurde am Block 1 mit 15 erreicht. Das Problem der hohen Neutronenfluenz im RDB der WWER-440-Reaktoren und der damit verbundenen Versprödung ist bereits frühzeitig erkannt wurden. Deshalb gab es umfangreiche Untersuchungs- und Monitorierungsprogramme an den einzelnen Blöcken. So wurden verschiedene Ex-Vessel-Experimente an den Blöcken realisiert. Nach dem Abschalten des Kraftwerks wurden Materialuntersuchungen auf Basis gewonnener Bohrkerne aus den RDBs durchgeführt. Diese boten eine einmalige Chance, Proben des Originalmaterials für eine radiochemische Analyse zu generieren. Mit Hilfe dieser Experimente ist es auch möglich, die Nutzung des Programms im Bereich des Rückbaues von kerntechnischen Anlagen zu testen, denn die Bestimmung der aus der Neutronenbestrahlung resultierenden Aktivierung, welche schließlich den radiologischen Status der Anlage definiert, stellt einen zentralen Aspekt beim Rückbau eines Kernreaktors dar.

Bereits in früheren Projekten wurden Strahlungstransportrechnungen für die einzelnen Blöcke des Kernkraftwerks Greifswald mit TRAMO durchgeführt. Dabei wurden spektrale Neutronenfluenzen bzw. -flussdichten und daraus Reaktionsraten bzw. Aktivitäten berechnet, die an Ex-Vessel-Experimenten und Stahlproben validiert wurden. Diese Rechnungen wurden nun wiederholt und mit neuen Experimenten überprüft. Dergleichen wurden die Ergebnisse mit Rechnungen, die mit der aktuellen Version von MCNP durchgeführt wurden, verglichen.

Das MCNP-Modell und der Vergleich der Spektren

Um spektrale Untersuchungen durchführen zu können, sind Vergleichsrechnungen mit anderen Programmen praktisch unumgänglich, da Experimente meistens auf den Vergleich von integralen Größen beruhen. Für die Vergleichsrechnungen wurde wie erwähnt das international anerkannte Monte-Carlo Programm MCNP6 eingesetzt. Das dafür entwickelte MCNP-Modell deckt den RDB samt Einbauten und den kompletten Ringwassertank in der gesamten Höhe ab. Es wurde darauf geachtet, dass in den Rechnungen für TRAMO und MCNP einheitliche Daten (Abmessungen, Zusammensetzungen der Legierungen, Massendichten der Materialien usw.) verwendet wurden. Die geringen Unterschiede zwischen den Blöcken sowohl in der Materialzusammensetzung als auch in der Geometrie wurden berücksichtigt. In beiden Fällen wurden die

Rechnungen mit Wirkungsquerschnitten aus der Kerndatenbibliothek ENDF/B-VII.1 durchgeführt.

Abbildung 2 zeigt einen horizontalen und einen vertikalen Schnitt durch das Modell. Als Neutronenquellen wurden externe Quellen verwendet, die dem HZDR vorliegen.

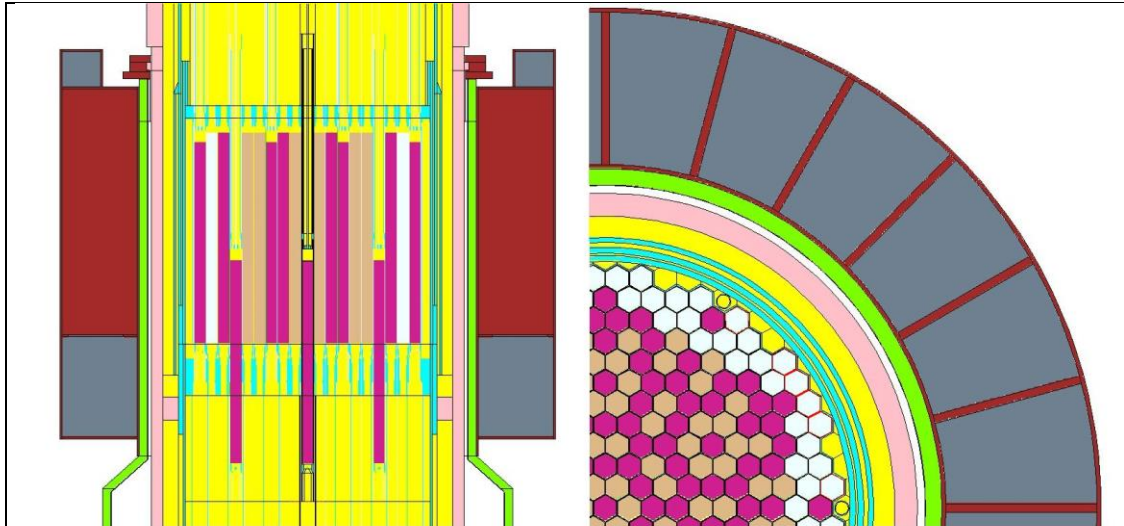
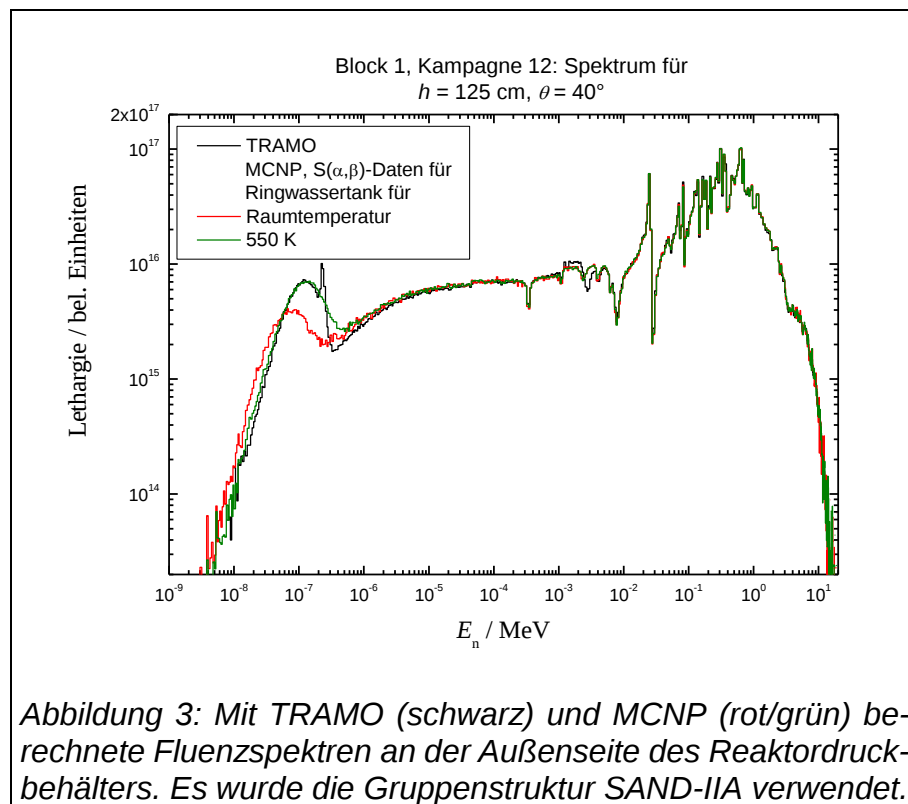


Abbildung 2: Horizontaler und vertikaler Schnitt durch das MCNP6 Modell eines WWER-440.



Diese beruhen auf Abbrandrechnungen, die vom ehemaligen Betreiber ausgeführt wurden. Wie bei den TRAMO-Rechnungen wurden für die Fluenzbestimmung im RDB nur die äußeren drei Reihen Brennelemente verwendet. Der Beitrag der Quellen der inneren Brennelemente auf die Fluenzen des RDB ist vernachlässigbar.

In Abbildung 3 sind die Neutronenspektren einer TRAMO-Rechnung mit der Gruppenstruktur SAND-IIA und einer MCNP6-Rechnung dargestellt. Die Form der Spektren einschließlich der Maxima und Minima, die durch Resonanzen in den Wirkungsquerschnitten verursacht werden, stimmen im Bereich der schnellen und epithermischen Neutronen sehr gut überein. Im Bereich der thermischen Neutronen sind Unterschiede sichtbar, deren Ursache nicht geklärt werden konnte.

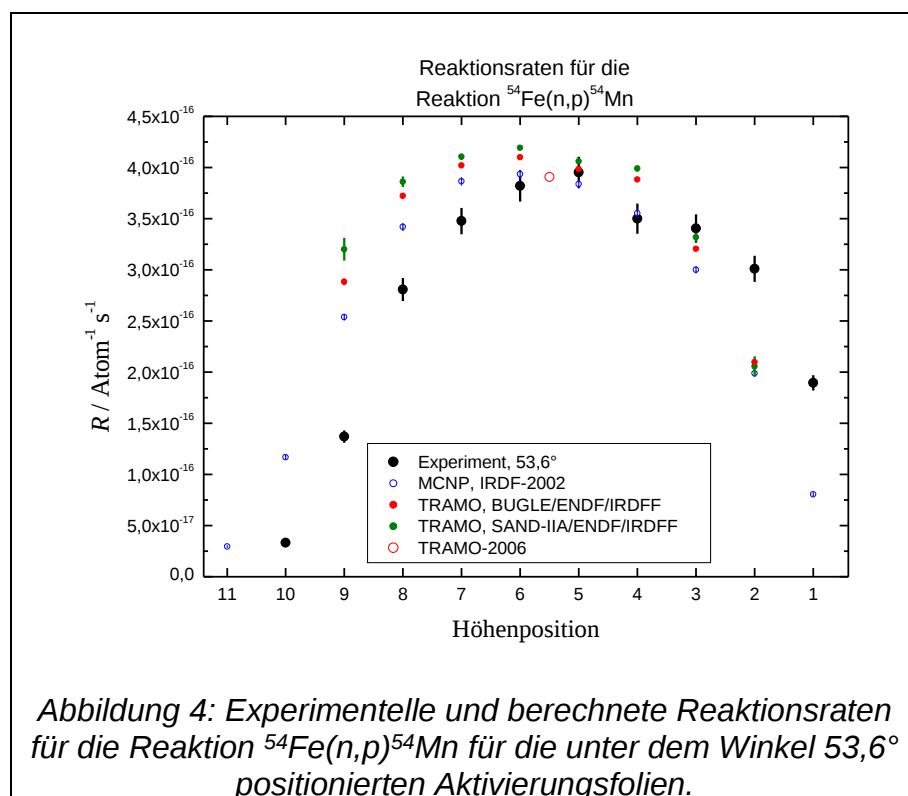
5.3.2 Neutronenfluenzbestimmung durch Aktivierungsmonitore an der RDB-Außenwand

In den 1980er Jahren wurden seitens des Zentralinstituts für Kernforschung Rossendorf mehrere Experimente mit Aktivierungsmonitoren an mehreren Blöcken des KKW Greifswald realisiert. Ein Experiment wurde im 12. Zyklus (1986/1987) des Blockes 1 durchgeführt. Während des Zyklus wurden Neutronenaktivierungsmonitore an der RDB-Außenseite bestrahlt (Ex-Vessel-Dosimetrie). Hier waren in 10 Höhen und 5 Winkeln Aktivierungsmonitore so positioniert, dass diese den gesamten Bereich der aktiven Zone abdeckten. Dabei kamen sieben verschiedene Elemente zum Einsatz und acht Reaktionen wurden ausgewertet. Insgesamt liegen 393 Messwerte in Form von Reaktionsraten vor.

Die Reaktionsraten wurden auf Basis von Reaktionsquerschnitten aus der Bibliothek IRDFF-II [15] bestimmt. Der Vergleich erfolgt gemeinsam mit den Ergebnissen der MCNP-Rechnungen. Als Beispiel sind in Abbildung 4 die Reaktionsraten für die Reaktion $^{54}\text{Fe}(n,p)$ dargestellt. Zusätzlich ist hier ein Datenpunkt dargestellt, der mit einer älteren Version von TRAMO für die Spaltzonenmitte berechnet wurde. Man erkennt, dass die Unterschiede zwischen den berechneten und den experimentellen Reaktionsraten von der Höhenposition abhängig sind. Im Bereich der Spaltzonenmitte besteht eine sehr gute Übereinstimmung. Unterhalb ist $C/E > 1$ und oberhalb $C/E < 1$, wobei die Abweichungen mit zunehmenden Abstand zur Spaltzonenmitte größer werden.

Es wurden mehrere Simulationen durchgeführt, um Ursachen für die Abweichungen zu klären. Da diese Abweichungen sowohl in den MCNP6- als auch in den TRAMO-

Rechnungen registriert wurden, könnte die Ursache in den Experimenten liegen. Es zeigt sich, dass eine Verschiebung der experimentellen Reaktionsraten um eine Höhenposition sowohl bei den für schnelle Neutronen sensitiven (n,p)- und (n,α)- als auch den für langsame und epithermische Neutronen empfindlichen (n,γ)-Reaktionen zu einer guten Übereinstimmung zwischen Rechnung und Experiment führt. Leider ist es nicht mehr möglich, die vermutete Höhenverschiebung zu klären. Der Vergleich der TRAMO-Rechnungen sowohl mit den MCNP-Rechnungen als auch mit den Experimenten zeigt, dass die Überführung von TRAMO in modernes FORTRAN erfolgreich war. Auch das neue Datenmanagement hat sich hier bewährt. Die Unterschiede in den Neutronenspektren im Bereich der thermischen Neutronen müssen noch geklärt werden, auch wenn sie nur einen kleinen Einfluss auf die berechneten Reaktionsraten haben.



5.3.3 Experimentelle Aktivitätsbestimmung an Proben des RDB-Stahls

Wie bereits oben beschrieben, wurden im Zusammenhang von Materialuntersuchungen Aktivitätsbestimmungen an Originalmaterial durchgeführt. Zusätzlich wurden jetzt im Rahmen dieses Vorhabens Aktivitäten ausgewählter Radionuklide von mehreren

Materialproben der Blöcke 1 und 4 in einem akkreditierten Labor des VKTA ausgemessen.

Die Anforderung der retrospektiven Dosimetrie, die Aktivität von Radionukliden zu bestimmen, deren Halbwertszeit in der Größenordnung oder größer als die Dauer der Betriebsphase ist, schränkt die Nuklidauswahl ein. Es wurden die Aktivitäten von ^{63}Ni , $^{93\text{m}}\text{Nb}$, ^{99}Tc und ^{94}Nb gemessen. Nur die Aktivitätsmessung von ^{94}Nb kann gamma-spektrometrisch erfolgen. Die anderen Radionuklide erfordern eine Messung per LSC, wobei Niob wegen der geringen Konzentration mit einem speziellen Verfahren aufkonzentriert werden muss [16]. Eine weitere Herausforderung ist, dass die Radionuklide durch mehrere Kernreaktionen produziert oder die Radionuklide eines Elementes bei der LSC-Methode nicht getrennt gemessen werden können. Im Fall von $^{93\text{m}}\text{Nb}$ wird dieses entweder aus ^{92}Mo oder ^{93}Nb gebildet und unterscheidet sich aufgrund der stark unterschiedlichen Konzentrationen von Molybdän und Niob im RDB-Stahl bzw. der Plattierung, welche Reaktion dominiert. Konzentrationen wurden für die Legierungsbestandteile Cu, Ni, Mo und Nb bestimmt, die für die Produktion der interessierenden Radionuklide relevant sind. Tabelle 3 zeigt die entsprechenden Reaktionen, Halbwertszeiten und die Konzentrationen im RDB-Stahl bzw. der Plattierung.

Legierungsbestandteil	Reaktion	Halbwertszeit in Jahren	Anteil im Stahl (in Plattierung)
Nickel	$^{58}\text{Ni}(n,\gamma)^{59}\text{Ni}$	$7,6 \cdot 10^4$	$\sim 0,2$ ($\sim 10,0$) wt%
	$^{62}\text{Ni}(n,\gamma)^{63}\text{Ni}$	100	
Kupfer	$^{63}\text{Cu}(n,p)^{63}\text{Ni}$		
Niob	$^{93}\text{Nb}(n,\gamma)^{94}\text{Nb}$	20300	1 ppm ($5 \cdot 10^3$ ppm)
	$^{93}\text{Nb}(n,n')^{93\text{m}}\text{Nb}$	16,2	
Molybdän	$^{92}\text{Mo}(n,\gamma)^{93}\text{Mo} \rightarrow ^{93\text{m}}\text{Nb}$		$\sim 0,5$ ($\sim 0,05$) wt%
	$^{98}\text{Mo}(n,\gamma)^{99}\text{Mo} \rightarrow ^{99}\text{Tc}$	$2,1 \cdot 10^5$	

Tabelle 3: Mögliche Nuklide, die entsprechende Reaktion, Halbwertszeit und Anteil im RDB-Stahl bzw. der Plattierung.

Die Proben wurden aus verschiedenen Höhen des RDBs entnommen. Messungen erfolgten für Materialproben aus der Schweißnaht, dem Basismaterial und der Plattierung. Abbildung 5 zeigt einen vertikalen Schnitt durch das Reaktormodell von TRAMO mit den Höhenpositionen der Proben.

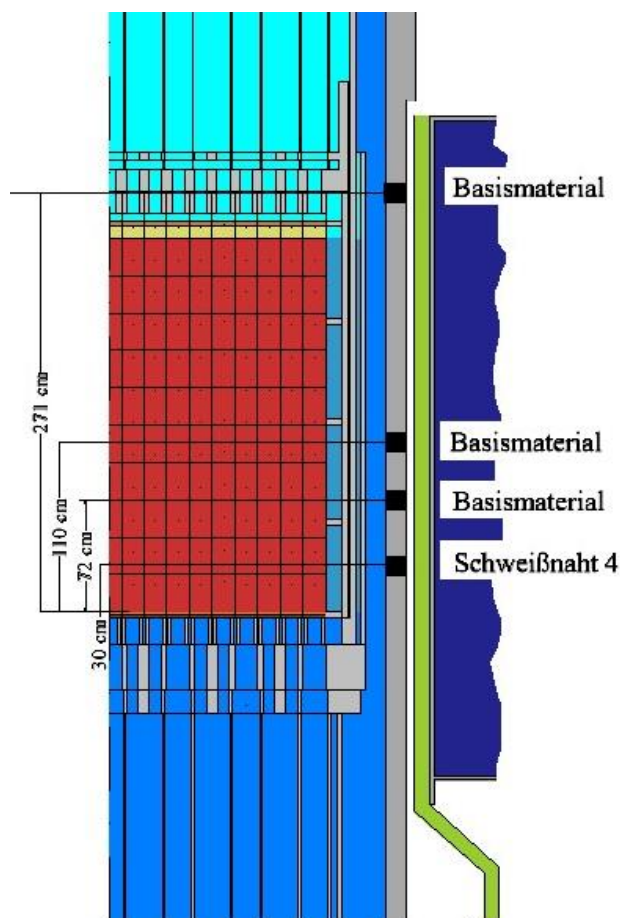


Abbildung 5: Vertikaler Schnitt durch das Reaktormodell von TRAMO mit den Höhenpositionen der Proben.

Insgesamt wurden 14 Proben analysiert. Tabelle 4 zeigt die Messergebnisse. Die dargestellten Aktivitäten beziehen sich auf den Messzeitpunkt. Die Höhenangabe bezieht sich auf die Kernunterkante und die Tiefe auf den Abstand zur RDB-Innenseite (Block 1) bzw. zur Innenseite der Plattierung (Block 4). Die untersuchten Proben stammen von Trepanns, die azimuthal im Bereich des größten Flusses (bei 30°) lagen, mit der Ausnahme der Proben der Höhe 271 cm. Dieser Trepan wurde bei 60° extrahiert. Die angegebenen Messungenauigkeiten lagen zwischen 12 % und 21 % für die LSC-Messungen. Die Unsicherheiten der ^{94}Nb -Aktivitäten, die mittels Gammaspektrometrie bestimmt wurden, sind mit 7 % zwar deutlich kleiner, aber diese konnten nur für die beiden Proben aus der Plattierung bestimmt werden. Für die anderen 12 Proben wurden nur Obergrenzen der spezifischen Aktivität bestimmt.

Höhe in cm	Tiefe in cm	Spezifische Aktivität in Bq/g			
		^{59/63} Ni	^{93m} Nb	⁹⁴ Nb	⁹⁹ Tc
Block 1					
30	0,8	135000	250	<350	35
	13.1	5300	41	<20	9,0
		3100	46	<43	7,5
72	0,8	33000	560	<320	65
	13,2	3700	67	<24	15,9
		3000	75	<32	15
271	0,1	10800	370	<22	1,7
	13,9	290	7,7	<1,2	2,5
Block 4					
110	0,4	1,11*10 ⁷	1,13e5	11200	12,2
		1,27*10 ⁷	9,90e4	11400	9,2
	7,4	5500	134	< 53	21
		16700	115	< 41	26
	14,1	1920	78	< 34	13,0
		1890	51	< 23	15,2

Tabelle 4: Spezifische Aktivitäten der im Rahmen dieses Projekts untersuchten Materialproben aus Reaktordruckbehältern des KKW Greifwald.

Um die Reproduzierbarkeit der Messungen zu untersuchen, wurden an mehreren Positionen zwei Proben gemessen. Es zeigte sich, dass die Konzentrationen und spezifischen Aktivitäten in den meisten Fällen im Rahmen der Unsicherheiten übereinstimmten. Die größte Abweichung zeigen die Aktivitätsmessungen von ^{59/63}Ni für Block 4, in der Höhe von 110 cm und der Tiefe von 7,4 cm, die sich trotz nahezu gleicher Konzentrationen der Legierungsbestandteile um einen Faktor 3 unterscheiden. Auffällig sind auch die Messwerte für ^{59/63}Ni für die Höhen 30 cm und 72 cm für Block 1, Tiefe 0,8 cm. Aufgrund der etwas größeren Neutronenfluenz (Nähe zum Fluenzmaximum) und der nur geringfügig unterschiedlichen Nickel- und Kupferkonzentrationen in Basismaterial und Schweißnaht ist zu erwarten, dass die spezifische Aktivität für die Probe aus der Höhe 72 cm größer ist als die für diejenige aus der Höhe 30 cm. Auch die beiden Proben für Block 1, Höhe 271 cm sind die Messwerte widersprüchlich. Da der Trepan aus einer Höhe deutlich oberhalb der Spaltzone stammt, sind hier kleinere

Aktivitäten zu erwarten. Die meisten gemessenen Aktivitäten bestätigen diese Erwartung, nicht jedoch die an der Innenseite gemessene ^{93m}Nb -Aktivität.

Für die TRAMO-Rechnungen wurden bereits aus einem früheren Projekt entwickelte Geometriemodelle mit entsprechenden Anpassungen genutzt. Das hat den Vorteil, dass ein Teil der erzeugten Inputfiles wie zum Beispiel die Gewichte und Quellen direkt genutzt werden konnten. Deshalb wurden die Rechnungen für den Block 1 mit 47 und für den Block 4 mit 640 Energiegruppen durchgeführt. Die verwendete Kerndatenbibliothek war ENDF/B-VII.1. Für die MCNP6-Rechnungen wurde das oben beschriebene Modell und Punktdaten auf Basis von ENDF/B-VII.1 genutzt. Die Quellen wurden für diese Rechnungen entsprechend übertragen. Erwähnt werden sollte hier noch, dass für den Block 1 wegen des Einsatzes von Abschirmkassetten im äußeren Bereich des Kernes für die Zyklen 12 bis 15 separate Geometriemodelle existieren und diese Zyklen daher in TRAMO getrennt berechnet wurden. Wegen geplanter weiterführender Untersuchungen wurden mit MCNP separate Rechnungen für jeden Zyklus durchgeführt. Für die Bestimmung der Aktivitäten wurde, wenn verfügbar, IRDFF2 benutzt, ansonsten ENDF/B-VII.1. Tabelle 5 zeigt die C/E-Verhältnisse zu den TRAMO- und MCNP-Ergebnissen der Blöcke 1 und 4.

Der Vergleich zeigt, dass sowohl die mit TRAMO als auch MCNP berechneten spezifischen Aktivitäten die gemessenen tendenziell unterschätzen und die C/E-Verhältnisse stark streuen. Entgegen diesem Trend sind die C/E-Verhältnisse für $^{59/63}\text{Ni}$ für Block 1, Tiefe 0,8 cm, deutlich größer als 1. Das verstärkt die Vermutung, dass der Messwert zu niedrig ist. In Bezug auf die beiden Proben für Block 1, Höhe 271 cm, zeigen die Rechnungen mit TRAMO und MCNP, dass die $^{59/63}\text{Ni}$ -Aktivität an der Innenseite größer ist als an der Außenseite, lassen aber sowohl für ^{93m}Nb und ^{99}Tc erwarten, dass die Aktivität an der Innenseite nur wenig größer ist als die an der Außenseite.

Auffällig ist die gute Übereinstimmung der gerechneten und gemessenen ^{93m}Nb -Aktivitäten für die Plattierung des Blocks 4. Durch die hohe Nb- und niedrige Mo-Konzentration in der Plattierung wird praktisch die gesamte Aktivität durch die Reaktion $^{93}\text{Nb}(n,n')^{93m}\text{Nb}$ erzeugt, während im RDB-Stahl und Schweißgut die Produktion durch $^{92}\text{Mo}(n,\gamma)$ dominiert. Die inelastische Reaktion wird hauptsächlich von Neutronen ausgelöst, die eine Energie über 1 MeV besitzen. Hier zeigt sich der gute Validierungsgrad der Programme im Energiebereich größer 1 MeV, dagegen besteht bei der Simulation der thermischen Neutronen Verbesserungspotential.

Höhe in cm	Tiefe in cm	Verhältnis der berechneten zu den gemessenen spezifischen Aktivitäten (C/E-Verhältnis)							
		TRAMO				MCNP6			
		^{59/63} Ni	^{93m} Nb	⁹⁴ Nb	⁹⁹ Tc	^{59/63} Ni	^{93m} Nb	⁹⁴ Nb	⁹⁹ Tc
Block 1									
30	0,8	0,47	0,51		0,74	0,83	0,59		0,96
	13,1	0,46	0,92		0,60	0,37	0,96		0,64
		0,75	0,77		0,71	0,60	0,80		0,75
72	0,8	2,23	0,42		0,73	3,67	0,41		0,86
	13,2	0,71	0,89		0,75	0,53	0,91		0,74
		0,87	0,76		0,79	0,65	0,81		0,79
271	0,1	0,52	0,03		1,03	0,47	0,02		1,15
	13,9	1,83	0,75		0,54	1,04	0,89		0,64
Block 4									
110	0,4	0,52	0,97	0,59	0,32	0,58	0,99	0,67	0,36
		0,45	1,16	0,61	0,36	0,51	1,20	0,69	0,41
	7,4	0,56	0,62		0,85	0,80	0,80		1,10
			0,73		0,68	0,27	0,94		0,88
	14,1	1,46	0,54		0,66	0,85	0,72		0,87
		1,52	0,83		0,56	0,88	1,13		0,76

Tabelle 5: C/E-Verhältnisse zu den TRAMO- und MCNP-Ergebnissen der Blöcke 1 und 4.

Bei der Beurteilung der C/E-Verhältnisse ist jedoch auch zu berücksichtigen, dass die experimentellen Herausforderungen bei der retrospektiven Dosimetrie erheblich größer sind als bei der Ex-Vessel-Dosimetrie. Da die thermischen Neutronen in den ersten Zentimetern des RDBs weitgehend absorbiert werden, kann eine Unsicherheit der Tiefenangabe von 1 mm bereits eine Änderung der Aktivität – reaktionsabhängig – um 5 % oder mehr bewirken.

Mit ⁹⁴Nb wurde ein Radionuklid identifiziert, das für die retrospektive Reaktordosimetrie interessant ist. Die Halbwertszeit ist mit 20300 Jahren sehr groß gegenüber der Betriebsphase des Reaktors. Die spezifische Aktivität kann mittels Gammaspektrometrie

mit vergleichsweise kleinen Unsicherheiten bestimmt werden. Da Niob mit einer Konzentration von $\geq 0,5$ Massen-% in der Plattierung enthalten ist, ist die produzierte Aktivität groß genug für eine Messung ohne eine Abtrennung anderer Radionuklide.

Unter den hier gegebenen Randbedingungen kann man die ermittelten C/E-Verhältnisse durchaus als annehmbar ansehen. Die Ergebnisse zeigen, dass eine Verwendung von TRAMO bei der Bestimmung von Aktivitäten im Zusammenhang mit dem Rückbau von kerntechnischen Anlagen möglich ist. Bei weiterführenden Arbeiten sollte versucht werden, die möglichen Fehlerquellen zu minimieren, zum Beispiel indem weitere Nuklide für einen Vergleich herangezogen werden.

5.4 Experimente und Rechnungen zum KKW Kalinin-4

5.4.1 Experiment

Der Block 4 des Kernkraftwerks Kalinin wurde im Jahr 2012 in Betrieb genommen. Es handelt sich um einen WWER-1000-Reaktor der Baureihe 320. In diesem Block werden TVSA-PLUS-Brennelemente verwendet. Diese haben einen längeren Brennstoffbereich bei gleicher Brennelementlänge, was durch die Reduzierung der Kopf- bzw. Fußelemente erreicht wird. Die Installation und Bestrahlung von Neutronenaktivierungsdetektoren am Reaktordruckbehälter wurden während des zweiten Zyklus durchgeführt. In diesem Zyklus waren an allen Positionen TVSA-PLUS-Brennelemente im Einsatz [17].

Die Detektoren wurden auf speziell entworfene Gestelle montiert, auf denen diese dann in vertikaler und azimuthaler Richtung des Reaktors ausgerichtet wurden. Das Gestell wurde im Spalt zwischen der Außenfläche des Reaktorbehälters und der ersten Wärmedämmung eingebaut, die sich auf der biologischen Abschirmung befindet. Die vertikal ausgerichteten Detektoren waren über die gesamte Höhe des Reaktorkerns und azimuthal bei einem Winkel von $59,6^\circ$ (bezogen auf die Standardsymmetrie der WWER Reaktoren von 60°) angebracht. Die horizontal ausgerichteten Monitore deckten einen Azimut von etwa 40° ab und waren in einer Höhe von 151 cm relativ zum Boden des aktiven Kerns befestigt. Der zweite Zyklus und damit das Experiment fanden im Zeitraum 2013-2014 statt. Die Dauer der Bestrahlung betrug 448 Kalendertage mit 419,1 Effektivtagen. Die für die in den Rechnungen verwendete Quellenverteilung wurde auf Basis der Abbranddaten ermittelt. Dabei wurden detaillierte Angaben zur Abbrandverteilung und der Leistungsverteilung in den Brennelementen – jeweils für den Beginn und das Ende des Reaktorzyklus – bereitgestellt. Die Werte waren für 60

Höhenschichten pro Brennelement gegeben. Die Einteilung von 60 äquidistanten Höhenschichten für jedes Brennelement wurde für das TRAMO-Inputmodell übernommen, so dass keinerlei Interpolationen notwendig waren. Außerdem war für jede Schicht eine Leitungsverteilung der Brennstäbe gegeben.

Die Winkel der Monitore in waagerechter Anordnung waren $3,3^\circ$, $12,7^\circ$, $23,8^\circ$, $29,7^\circ$, $36,8^\circ$, $41,8^\circ$, $53,3^\circ$, die Höhen bei senkrechter Anordnung 89,5 cm, 123,9 cm, 173,0 cm, 242,8 cm, 296,0 cm, 372,9 cm, 400,6 cm, 447,7 cm. Es wurden vier verschiedene Monitormaterialien eingesetzt. $^{54}\text{Fe}(n,p)$ und $^{63}\text{Cu}(n,\alpha)$ waren an sämtlichen Positionen, $^{93}\text{Nb}(n,n')$ und $^{58}\text{Ni}(n,p)$ nur an zwei Positionen installiert. Alle eingesetzten Monitormaterialien sind Standardmonitore, die in der Reaktordosimetrie seit langem für die Bestimmung von Neutronenfluenzen im schnellen Energiebereich genutzt werden. Die gemessenen Aktivitäten wurden ausschließlich durch Schwellwertreaktionen generiert. So hat die $^{54}\text{Fe}(n,p)$ -Reaktion einen Schwellwert von rund 2 MeV und $^{63}\text{Cu}(n,\alpha)$ von rund 5 MeV. $^{58}\text{Ni}(n,p)$ hingegen deckt einen Bereich bis etwa 0,5 MeV und $^{93}\text{Nb}(n,n')$ bis etwa 0,03 MeV ab. Der Vergleich bis in den thermischen Bereich hinein war somit nur von Code zu Code möglich.

5.4.2 TRAMO-Modell

Grundlage des Inputmodells für TRAMO war ein bereits für Rovno-3 entwickelte Modell, das einen 60° -Sektor des Reaktors beschreibt. Dabei richtet sich das Modell weitestgehend an die Vorgaben des russischen Partners. Abbildung 6 zeigt den vertikalen Schnitt des Reaktormodells. Die Nummerierung entspricht den verwendeten Materialien aus Tabelle 2. Das Modell entspricht dem, welches der russische Partner in DORT verwendet. Durch exakte Dimensionsangaben konnte eine sehr genaue Modellierung mit TRAMO erfolgen. In TRAMO ist die Modellierung senkrechter Körper mit Polygonen als Grundfläche sowie mit unterschiedlicher Schichtung von Materialien möglich. Deshalb wurde die Struktur des Eisenreflektors (in Abbildung 6 mit Material 7a bezeichnet und in Abbildung 7 grau dargestellt) in TRAMO nicht homogenisiert, sondern mit Hilfe von Polygonen und Flächen so wiedergegeben, dass die Materialverteilung praktisch der Realität entspricht. So wurden sowohl die Kühlkanäle als auch die Kühlrippenstruktur (hellgrau in Abbildung 7 oben sowie vertikal im unteren Bild dargestellt) in den Rechnungen berücksichtigt. Damit wurden fast alle Einbauten des Reaktors mit ihren realen Geometrien und Materialien in den TRAMO Rechnungen berücksichtigt. Lediglich die Brennelemente inklusive der Fuß- und Kopfbereiche und die Regionen

über und unter der aktiven Zone wurden wie vom russischen Partner vorgegeben homogenisiert. Diese wurden, mit Ausnahme der Spaltzone, wie in früheren Projekten durch homogenisierte Zylinder angenähert.

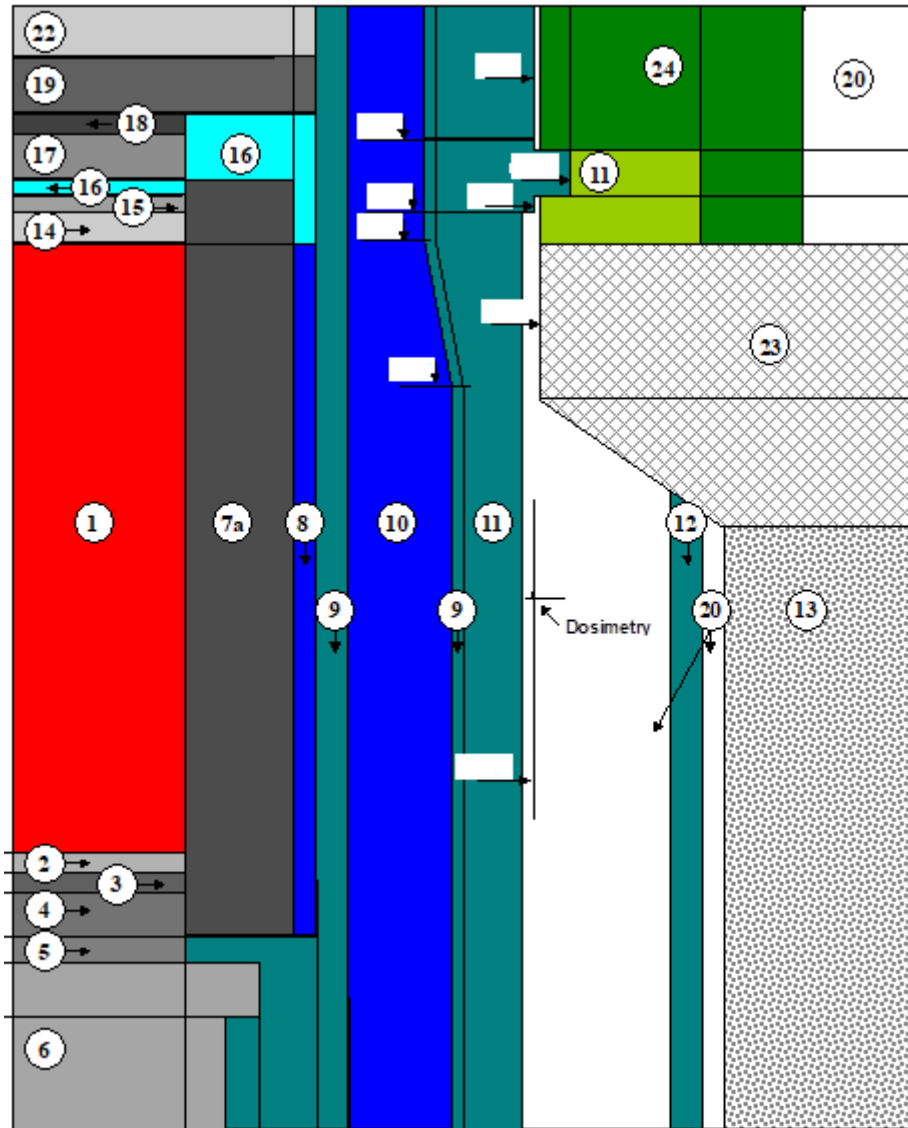


Abbildung 6: Seitenansicht des Reaktormodells des Kernkraftwerks Kalinin-4.

Die Aufbereitung der Querschnittsdaten und Streumatrizen der Reaktormaterialien wurde in Abschnitt 5.2 beschrieben. Um einen Vergleich mit DORT-Rechnungen zu ermöglichen, wurden die Rechnungen mit der BUGLE-47-Energiegruppen-Struktur ausgeführt.

Um die varianzreduzierenden Methoden (siehe Abschnitt 5.1.3) effektiv nutzen zu können, wurden separate Rechnungen für die horizontale und für die vertikale Anordnung der Monitore durchgeführt. Dabei ist das TRAMO-Modell selbst identisch. Lediglich die

Gewichte und Sourcebiasings mussten ausgetauscht werden. Um den statistischen Fehler zu minimieren, wurden pro Anordnung 13 statistisch unabhängige Rechnungen durchgeführt, einige davon nur für die oberen Energiegruppen (konkret die oberen 3, 8, 15 und 31 Energiegruppen). Die Reaktionsraten wurden mit Hilfe der berechneten Neutronenfluenzen und der Reaktionsquerschnitte des Monitormaterials bestimmt. Letztere entstammen der Bibliothek IRDF-2002 [18].

Das sehr detaillierte generalisierte Modell umfasst insgesamt etwa 8400 Volumenelemente, was sich in der Rechenzeit bemerkbar machte. So mussten für Fehler von weniger als 3% in den Gruppenflüssen mehrere Tage bis zu einer Woche Rechenzeit auf einem normalen PC veranschlagt werden.

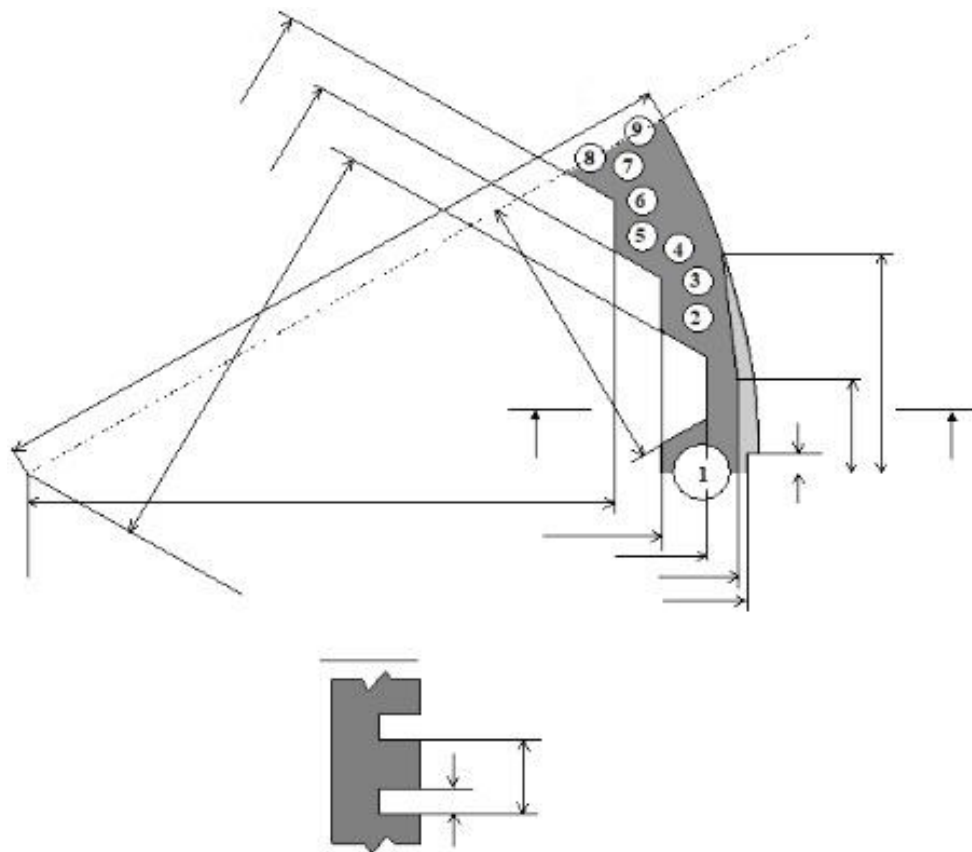


Abbildung 7: 30°-Schema des Eisenreflektors.

5.4.3 Vergleich mit TRAMO- und DORT-Rechnungen

Zusätzlich zu den experimentellen Daten konnte auch auf Ergebnisse von Rechnungen mit DORT für sämtliche Monitororte zugegriffen werden, so dass auch ein Vergleich mit Ergebnissen, die mit diesem Code berechnet wurden, möglich war.

Horizontale Monitore

Tabelle 6 zeigt den Vergleich der Reaktionsraten mit den Experimenten und die Vergleiche von TRAMO- und DORT-Rechnungen für die verschiedenen Monitororte und -materialien.

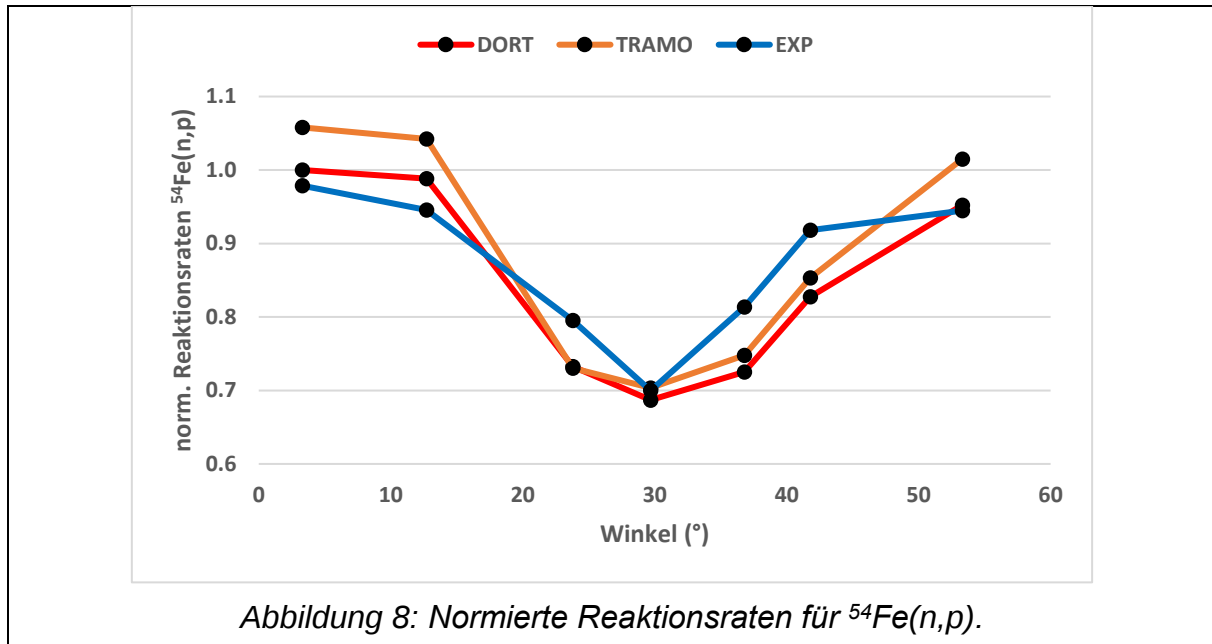
Winkel	C/E		C _{TRAMO} /C _{DORT}
	DORT	TRAMO	
⁵⁴ Fe(n,p)			
3,3°	1,02	1,08	1,06
12,7°	1,05	1,10	1,06
23,8°	0,92	0,92	1,00
29,7°	0,98	1,01	1,02
36,8°	0,89	0,92	1,03
41,8°	0,90	0,93	1,03
53,3°	1,01	1,07	1,07
⁶³ Cu(n,α)			
3,3°	1,08	1,06	0,99
12,7°	1,12	1,09	0,97
23,8°	0,97	0,89	0,92
29,7°	1,02	0,95	0,93
36,8°	0,94	0,89	0,95
41,8°	0,96	0,91	0,95
53,3°	1,02	1,02	1,00
⁵⁸ Ni(n,p)			
29,7°	0,95	0,98	1,03
53,3°	0,97	1,04	1,07
⁹³ Nb(n,n')			
29,7°	0,87	0,92	1,06
53,3°	0,90	0,97	1,08

Tabelle 6: C/E- und C/C- Reaktionsratenverhältnisse Monitore bei 252,6 cm.

Es konnten gute bis sehr gute Übereinstimmungen im Vergleich zum Experiment erzielt werden. Die maximalen Abweichungen betragen 11% bei TRAMO und 13% bei DORT. Grundsätzlich sind die von TRAMO berechneten Reaktionsraten ein wenig hö-

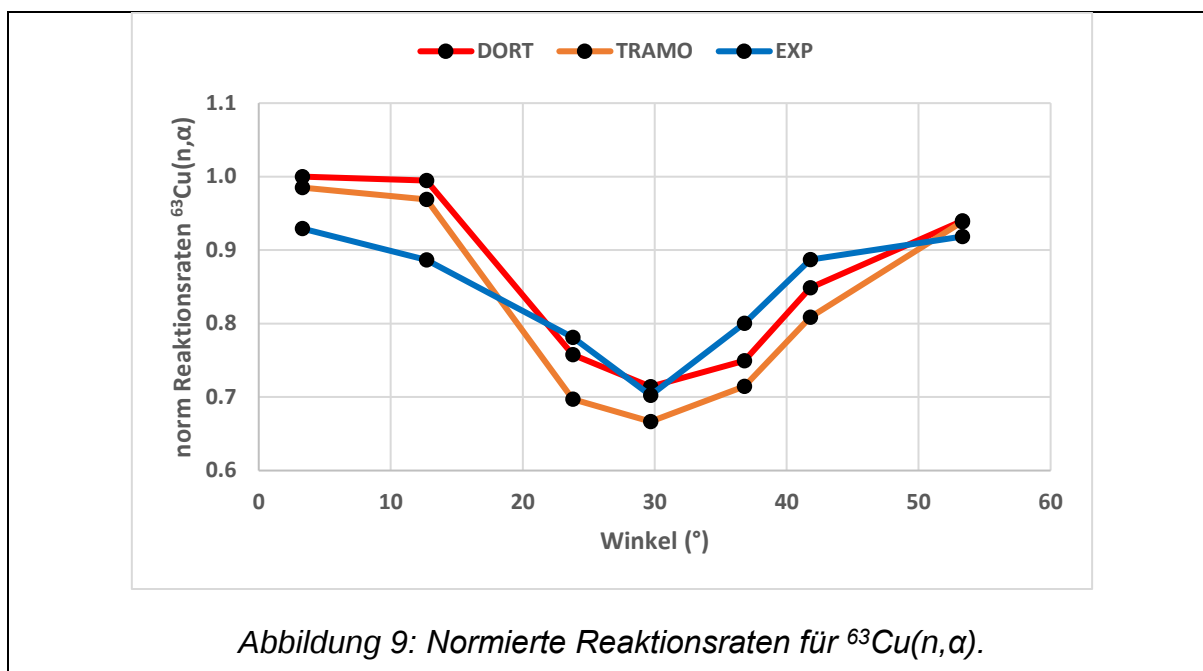
her als bei DORT. Ein Vergleich der berechneten Spektren zeigt, dass eine große Abweichung in der Energiegruppe von 10 MeV bis 12 MeV existiert, deren Ursache noch nicht geklärt werden konnte. Wegen der unterschiedlichen Schwellwerte der Reaktionen der Monitormaterialien sind die Auswirkungen auf die Reaktionsraten sehr unterschiedlich. Der Effekt auf die Reaktionsraten liegt z. B. bei $^{54}\text{Fe}(n,p)$ bei rund 2% und bei $^{63}\text{Cu}(n,\alpha)$ bei etwa 8%. Unabhängig davon konnte gezeigt werden, dass die Werte gut übereinstimmen, wenn man bedenkt, dass in früheren Untersuchungen ein möglicher Gesamtfehler von bis zu 30% [13, 19] ermittelt wurde.

Die Abbildung 8 und Abbildung 9 zeigen die normierten Reaktionsraten für die einzelnen Winkel. Normiert wurde dabei auf die von DORT berechnete Reaktionsrate des Monitors bei 3.3° . Neben dem typischen sinusförmigen Verlauf spiegeln die Werte die Verhältnisse der eben besprochenen Tabellen mit dem Minimum bei 30° wider. Das Minimum entsteht einerseits durch den hier vorhandenen größeren Abstand zum Reaktorkern und andererseits durch die größere Absorption des Eisenreflektors. Gut zu erkennen ist auch die Asymmetrie der Quellverteilung in Bezug auf den Winkel 30° durch die unterschiedlichen Reaktionsraten an den Sektorrändern.



In Tabelle 7 sind berechnete integrierte Fluenzen für bestimmte Neutronenenergiebereiche verglichen worden. Dabei sind insbesondere jene für $>1,0$ MeV und $>0,5$ MeV relevant. 1,0 MeV wird in westlichen Ländern, 0,5 MeV in osteuropäischen Ländern als Schwellenwert für die zu möglicher Versprödung führenden Neutronenenergien

festgelegt. Die Übereinstimmung ist auch hier sehr gut mit fast durchgehend Abweichungen von weniger als 10%, wobei TRAMO in der Regel etwas höhere Werte berechnet. Bei diesen integrierten Fluenzwerten ist die Abweichung in der dritten Energiegruppe durch den hier größeren zusammengefassten Energiebereich vernachlässigbar.



Winkel	total	E > 0,1 MeV	E > 0,5 MeV	E > 1 MeV	E > 3 MeV
3,3°	1,09	1,10	1,13	1,12	1,05
12,7°	1,06	1,08	1,11	1,11	1,05
23,8°	1,03	1,04	1,05	1,04	0,99
29,7°	1,01	1,04	1,06	1,06	1,02
36,8°	1,07	1,05	1,08	1,07	1,03
41,8°	1,07	1,05	1,08	1,06	1,02
53,3°	1,01	1,05	1,08	1,09	1,06

Tabelle 7: Vergleich der Fluenzwerte TRAMO/DORT für verschiedene Energiebereiche bei horizontaler Monitoranordnung.

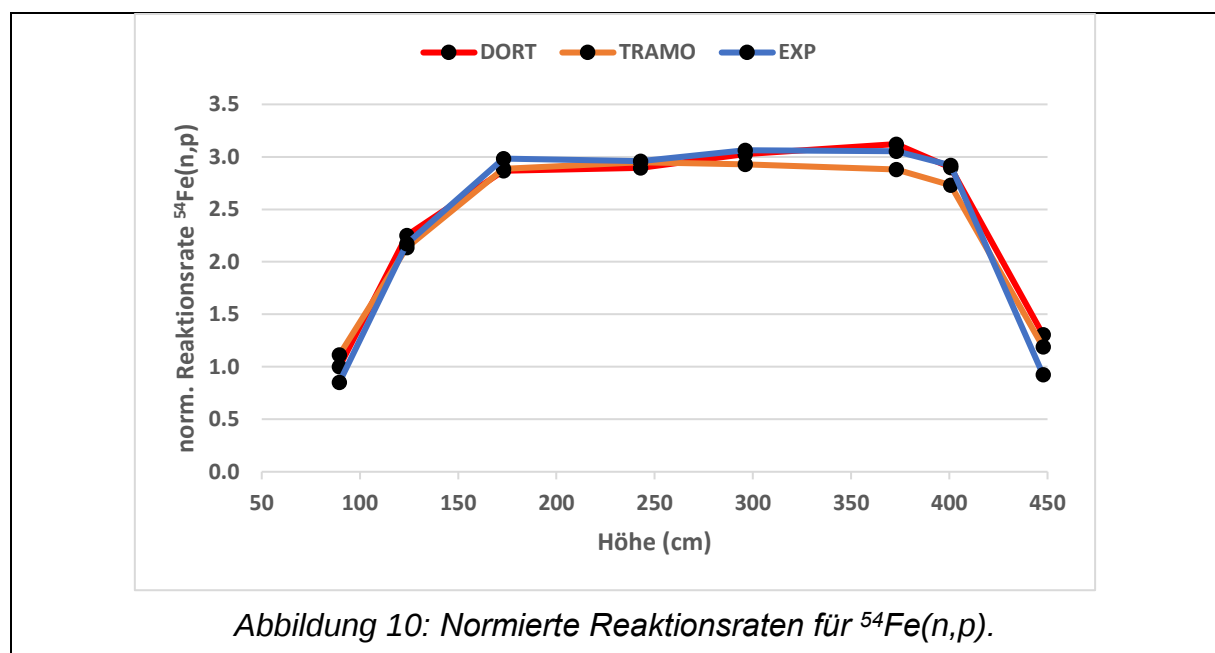
Vertikale Monitore

Für die vertikalen Monitore sind die analogen Tabellen und Abbildungen aufgeführt. Tabelle 8 zeigt die Vergleiche der Reaktionsraten der beiden Programme mit den experimentellen Werten und untereinander. Grundsätzlich zeigt sich ein ähnliches Verhalten wie bei den horizontal angeordneten Monitoren. Die Abweichungen der Codes untereinander und auch gegenüber dem Experiment liegen bei weniger als 15%. Eine

Ausnahme bilden die Werte an der Kernunterkante und im oberen Kernbereich. Hier überschätzen beide Codes den experimentellen Wert erheblich.

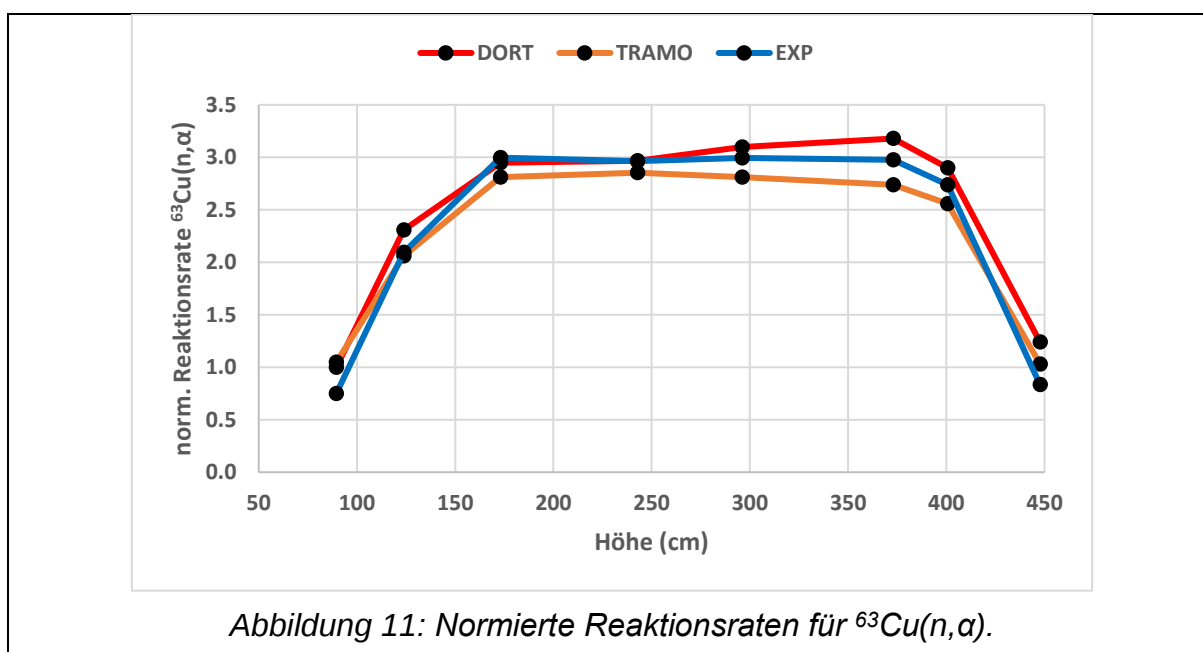
Höhe (cm)	C/E		C _{TRAMO} /C _{DORT}
	DORT	TRAMO	
⁵⁴ Fe(n,p)			
89,5	1,17	1,31	1,11
123,9	1,04	0,98	0,95
173,0	0,96	0,97	1,01
242,8	0,98	1,00	1,02
296,0	0,99	0,96	0,97
372,9	1,02	0,94	0,92
400,6	0,99	0,94	0,94
447,7	1,41	1,28	0,91
⁶³ Cu(n,α)			
89,5	1,33	1,40	1,05
123,9	1,10	0,98	0,89
173,0	0,98	0,94	0,95
242,8	1,00	0,96	0,96
296,0	1,03	0,94	0,91
372,9	1,07	0,92	0,86
400,6	1,06	0,93	0,88
447,7	1,49	1,23	0,83

Tabelle 8: C/E- und C/C- Reaktionsratenverhältnisse für Monitore bei 59,6°.



Da beide Codes Abweichungen in die gleiche Richtung zeigen, ist möglicherweise die Geometrie bzw. die Materialzusammensetzung der homogenisierten Bereiche in diesen Gebieten nicht adäquat modelliert. Eine bessere Modellierung der Bereiche in TRAMO könnte hier zu besseren Ergebnissen führen.

Die Reaktionsraten in den Abbildungen Abbildung 10 und Abbildung 11 zeigen ähnliche Tendenzen, wobei die weiter auseinanderlaufenden Kurven bei $^{63}\text{Cu}(n,\alpha)$ wieder auf das oben angesprochen Problem der Energiegruppe 10 MeV-12 MeV zurückzuführen sind. Das Höhenprofil der Reaktionsrate gibt praktisch die Quellverteilung im nächsten Brennelement wieder. Interessant ist der Vergleich der verschiedenen Integralwerte, die in Tabelle 9 dargestellt sind.



Höhe (cm)	total	E > 0,1 MeV	E > 0,5 MeV	E > 1 MeV	E > 3 MeV
89,5	1,09	1,09	1,13	1,14	1,12
123,9	1,01	0,99	1,01	1,00	0,95
173,0	1,00	1,03	1,05	1,05	1,00
242,8	1,01	1,04	1,06	1,06	1,01
296,0	0,97	1,00	1,02	1,01	0,96
372,9	0,96	0,99	0,99	0,97	0,92
400,6	1,00	1,02	1,02	0,99	0,94
447,7	1,25	1,25	1,18	1,04	0,90

Tabelle 9: Vergleich der Fluenzwerte TRAMO/DORT für verschiedene Energiebereiche bei vertikaler Monitoranordnung.

Bei allen bis auf den obersten Monitor ist die Übereinstimmung exzellent. Beim obersten Monitor wird die Übereinstimmung besser mit den integrierten Fluenzen hin zu höheren Energien. Es wird vermutet, dass die Ursache in der unterschiedlichen Modellierung des Eisenreflektors liegen könnte. Der oberste Bereich des Reflektors reicht von 456 cm bis 489 cm und besteht in TRAMO entsprechend der Realität aus Edelstahl, während DORT ein Wasser-Stahl-Gemisch modelliert. Die höhere Absorption von Stahl gegenüber Wasser hat auch noch im Bereich des Reaktordruckbehälters einen signifikanten Einfluss und sorgt damit bei TRAMO für eine geringere Fluenz. Ob dieser Effekt verantwortlich ist, könnten TRAMO-Vergleichsrechnungen mit homogenisiertem Eisenreflektor zeigen.

5.5 Das Nutzerhandbuch

Um das TRAMO-Programmpaket externen Nutzern zugänglich zu machen, ist ein Nutzerhandbuch notwendig. Entsprechend der Hinweise des russischen Partners sind dabei sowohl sämtliche Eingabe- und Ausgabedaten als auch die Nutzung von TRAMO allein und innerhalb des Shell-Skripts beschrieben.

Der russische Partner möchte hauptsächlich Monitorexperimente verschiedener Kernkraftwerke mit Standarddesigns (WWER-440 bzw. WWER-1000) nachrechnen. Dafür ist eine detaillierte Kenntnis von TRAMO nicht nötig, sondern er kann die bereitgestellten Daten nutzen. Entsprechend wurde das Handbuch gestaltet. Gleich am Anfang wird daher erläutert, wie die Ordner- und Datenstruktur auszusehen hat, welche Auswahlmöglichkeiten der Nutzer hat und wo die relevanten Ausgabedateien zur Nachbereitung zu finden sind.

Teil zwei beschäftigt sich mit der übergeordneten Geometrieingabedatei, mit Hilfe derer der Nutzer geringfügige Modifikationen bezüglich der Monitorrechnungen vornehmen kann. Diese betreffen insbesondere globale Variablen, z. B. die maximale Rechenzeit oder die Zonen mit erweiterter Ausgabe.

Der dritte Teil beinhaltet eine Beschreibung der Eingabedaten, wenn TRAMO im „Expertenmodus“ genutzt wird und detailliertere Informationen vom Nutzer eingegeben werden müssen. Zunächst wird der Aufruf einer TRAMO-Rechnung erläutert. Danach erfolgen eine Beschreibung sämtlicher möglicher Größen und deren Wertebereiche. Das betrifft insbesondere die Basiseingabedatei, die neben globalen Größen das Geometriemodell generiert. Die einzelnen Variablen sind dabei verlinkt, so dass gegebenenfalls direkt eine fragliche Größe nachgeschlagen werden kann. Weiterhin werden

die Struktur der Sourcebiasingdatei, der Querschnittsdatendateien, und der Gewichtsdatendatei beschrieben. Quell- und Pindaten werden in weiteren separaten Eingabedateien hinterlegt und können vom Nutzer nach Bedarf editiert werden. Auch hierzu sind Erklärungen angegeben.

Als Letztes erfolgt eine detaillierte Beschreibung der Ausgabedatei. In dieser sind auch Eingabe- und daraus abgeleitete Größen (z. B. kumulierte Quelle) aufgeführt, so dass der Nutzer mögliche Fehler in den Eingabedateien erkennen kann. Am Schluss der Ausgabedatei finden sich dann die eigentlichen Ergebnisse. Diese sind für die einzelnen Volumenelemente verschiedene normierte Neutronenflüsse und Dosiswerte. Für im Vorfeld ausgewählte Volumenelemente können auch energiegruppenspezifische Werte ausgegeben werden. Diese Datei kann dann zur weiterführenden Aufbereitung (z. B. Fluenzwerte an vordefinierten Punkten) herangezogen werden.

6 Nutzen

Die Bereitstellung eines validierten Monte-Carlo-Programms für Fluenzrechnungen im RDB trägt zur Verbesserung der Sicherheitsbewertung insbesondere von russischen Kernkraftwerken bei. Gerade für die Bewertung von möglichen Laufzeitverlängerungen dieser Kernkraftwerke ist es essentiell, die genaue Neutronenfluenz und damit den Versprödungszustand der Komponenten zu kennen. Außerdem könnte der Code z. B. für Aktivierungsanalysen in Rückbauprojekten verwendet werden, denn exakte Vorausberechnungen der Aktivitätsentwicklungen von Reaktorkomponenten sind nur auf der Basis von genauen Fluss-/Fluenzrechnungen möglich.

Durch das jetzt verfügbare Pre- bzw. Postprocessing ist es dem russischen Partner möglich, unabhängig Monte-Carlo-Rechnungen durchzuführen und den Code zusätzlich zu dem von ihm eingesetzten deterministischen Programm DORT zu nutzen. Somit ist ein Vergleich von spektralen Ergebnissen, die experimentell nicht oder nur eingeschränkt messbar sind, möglich.

Denkbar ist auch, dass die entwickelten Methoden und Programme grundsätzlich auch von anderen internationalen Partnern im Bereich der Reaktordosimetrie genutzt werden können. Ebenso ist eine Verwendung in nationalen Projekten – hier im Zusammenhang mit Rückbauprojekten kerntechnischer Anlagen – möglich. Durch die nicht-kommerzielle Ausrichtung des Programms kann es bei Bedarf akademischen Einrichtungen (Universitäten, öffentlich geförderten Forschungsinstituten) z. B. im „Kompetenzverbund Kernenergie“ zur Verfügung gestellt werden, damit Studentinnen und Studenten in der Anwendung von Monte-Carlo-Programmen qualifiziert werden.

Auch für den deutschen Partner besteht in der Entwicklung des Codes ein unmittelbarer Nutzen. Durch die Neugestaltung der Eingabe und Nutzung ist die Verwendung jetzt einfacher und den Code besser strukturiert. Weiterhin wurde durch ein Shell-Skript, mit dem neben der eigentlichen Berechnung vorbereitende Schritte zur Inputerstellung automatisiert wurden, ein wesentlicher Schritt in Richtung Anwendung durch neue interne und externe Nutzer gegangen.

Die durchgeführten Arbeiten samt den Ergebnissen von Validierungsrechnungen sollen auf dem 18. Internationalen Symposium für Reaktordosimetrie (voraussichtlich November 2021) präsentiert werden. Es ist weiterhin geplant, einen Artikel in einer referierten Zeitschrift zu publizieren.

7 Zusammenfassung und Schlussfolgerungen

Innerhalb des Projekts wurde das Programmpaket TRAMO modernisiert und weiterentwickelt, so dass es für den russischen Partner SEC NRS selbstständig für Neutronenfluenzrechnungen in WWER-Reaktoren genutzt werden kann.

Neben einer technischen Modernisierung des Transportcodes TRAMO stand die Erstellung von Standardinputdatensätzen für WWER-440- und WWER-1000-Reaktoren zur Nachrechnung von Monitorexperimenten im Mittelpunkt. Um eine reibungslose Nutzung seitens des Partners zu gewährleisten, wurde eine umfangreiche Datenbank angelegt. Die Datenbank umfasst Wirkungsquerschnitte und Streudaten aller WWER-Materialien sowie Gewichts- und Sourcebiasingdatensätze für eine Anzahl von waagerechten und senkrechten Monitoranordnungen. Zudem wurden mehrere Hilfsprogramme geschrieben, um einen ordnungsgemäßen Transfer von Daten zu ermöglichen. Für eine optimale Handhabung wurde ein Shell-Skript geschrieben, mit Hilfe dessen komplette Rechnungen von der Auswahl der Anordnungen über die Auswahl der Materialdatenbanken bis hin zur Aufbereitung der TRAMO-Ausgabedateien durchgeführt werden können. Die Standardinputdatensätze wurden anhand von experimentellen Daten aus den Kernkraftwerken Greifswald und Kalinin-4 sowie anhand von Vergleichsrechnungen mit DORT und MCNP überprüft.

Für das Kernkraftwerk Greifswald erfolgte der Vergleich zum einen mit einem in den 1980er Jahren durchgeführten Ex-Vessel-Experiment auf Basis von Neutronenfluenzmonitoren, zum anderen mit Materialproben aus den RDBs der Blöcke 1 und 4, für die die Aktivitäten ausgewählter langlebiger Radionuklide im Rahmen dieses Projekts gemessen wurden. Bei der Simulation der Aktivitätsbestimmung der Neutronenfluenzmonitore konnte eine gute Übereinstimmung zwischen Rechnung und Experiment für die meisten Monitore erreicht werden. Bei den Monitoren im Bereich der Ober- und Unterkannte des Kerns traten größere Abweichungen auf. Es wird vermutet, dass eine Fehlpositionierung der Monitore vorliegt. Bei den Simulationen der Aktivitäten aus den Materialproben zeigte sich, dass hohen Anforderungen sowohl an die experimentellen Daten als auch an die Rechnungen, insbesondere im Energiebereich der thermischen Neutronen, gestellt werden. Trotz dieser Herausforderungen konnten zum Großteil gute Übereinstimmungen zwischen Experiment und Rechnung erzielt werden. Der Nachweis einer möglichen Anwendung des Programmes für die Bestimmung von Ak-

tivitäten in Verbindung mit den Rückbau von kerntechnischen Anlagen konnte dokumentiert werden. Als interessantes Radionuklid für die retrospektive Reaktordosimetrie wurde ^{94}Nb identifiziert. Es hat eine sehr lange Halbwertszeit und kann – zumindest in der niobhaltigen Plattierung der WWER – mittels Gammaskpektrometrie gemessen werden.

Für die Überprüfung der Funktionalität des Standardinputdatensatzes für einen WWER-1000-Reaktor standen Monitorexperimente am Kernkraftwerk Kalinin-4 und Vergleichsrechnungen mit dem Programm DORT zur Verfügung. Die Ergebnisse von TRAMO zeigen gute bis sehr gute Übereinstimmung mit den experimentellen Werten und jenen der DORT-Rechnungen. Die Abweichungen lagen bei beiden Monitoranordnungen typischerweise bei weniger als 10 %.

Die erzielten Ergebnisse zeigen, dass das Programmpaket TRAMO geeignet ist, zuverlässig akkurate Neutronenfluenzen für die gängigen WWER-Reaktoren zu berechnen und daher für den russischen Partner eine unabhängige Codealternative ist. Das gesamte Codepaket wurde dem russischen Partner zur selbstständigen Nutzung zur Verfügung gestellt.

Die Entwicklungen von TRAMO zu einem gesamtheitlichen Transportcodepaket sind damit allerdings noch nicht abgeschlossen. Um dies zu erreichen, sollte die Gewichtsdatenerzeugung/ein Weight-Window-Generator optional in das Ablaufschema eingebaut werden. Ein graphisches Programm zur Eingabe des geometrischen Modells würde dem Nutzer die Inputerstellung erheblich erleichtern. Monte-Carlo-Methoden sind prädestiniert für Parallelisierung. Weshalb auch das Vorhandensein dieser Möglichkeit die erforderlichen Rechenzeiten deutlich verkürzen kann, zumal Mehrkernprozessoren auch im Desktopbereich inzwischen Standard sind. Schlussendlich ist es sinnvoll, die Abdeckung der Standardinputdatensätze für alle WWER-Reaktortypen (WWER-1200, WWER-TOI) zu vervollständigen.

8 Literaturverzeichnis

- [1] J. Konheiser, S. Mittag und S. Zaritsky, „Neutron fluence calculations for embrittlement surveillance specimens in VVER-1000,“ *Annals of Nuclear Energy* 36(8), pp. 1235-1241, 2009.
- [2] M. B. Chadwick et al., „ENDF/B-VII.1 Nuclear Data for Science and Technology: Cross Sections, Covariances, Fission Product Yields and Decay Data,“ *Nuclear Data Sheets*, Bd. Issue 12, Nr. Volume 112, pp. 2887-2996, December 2011.
- [3] W. Rhoades und R. Childs, „TORT/DORT: Two- and Three-Dimensional Discrete Ordinates Transport,“ CCC-543, RSIC, ORNL, TN, 1991.
- [4] S. Baier, J. Konheiser, P. Borodkin, A. Gazetdinov und N. Khrennikov, „Monte Carlo Calculation Procedure and its Implementation for Radiation Load Estimation on Russian VVER Reactor Equipment,“ in *Proceedings of the Sixteenth Symposium on Reactor Dosimetry*, Santa Fe, USA, 7.-12.5.2017.
- [5] A. J. M. Plompen et al., „The joint evaluated fission and fusion nuclear data library, JEFF-3.3,“ *The European Physical Journal A*, Nr. 56, 181, 2020.
- [6] U. Rindelhardt, H.-W. Viehrig, J. Konheiser und J. Schuhknecht, „Weld material investigations of a VVER-440 reactor pressure vessel: Results from the first trepan taken from the former Greifswald NPP,“ *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 2009.
- [7] G. Borodkin, N. Khrennikov, J. Konheiser und K. Noack, „Neutron dosimetry study in the region of the support structure of a VVER-1000 type reactor,“ *Reactor Dosimetry State of the Art 2008*, New Jersey London Singapore: World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 13 978-981-4271-10-3, 688-699, 2008, doi: 10.1142/9789814271110_0084., 2008.
- [8] R. MacFarlane und A. Kahler, „Methods for Processing ENDF/B-VII with NJOY,“ *Nuclear Data Sheets*, Bd. Volume 111, pp. 2739-2890, 2010.
- [9] K. Shibata et al., *J. Nucl. Sci. Technol.* 48(1), pp. 1-30, 2011.
- [10] A. Ballesteros und et al., „Reactor Dosimetry: Accurate Determination and Benchmarking of Radiation Field Parameters, relevant for Pressure Vessel Monitoring (REDOS),“ European Commission FIKS-CT-2001-00120, Brussel, 2004.
- [11] T. Seren und T. Kekki, „Retrospective dosimetry based on Nb extraction and counting, VTTs contribution to the RETROSPEC project,“ VTT Research notes 2203, Espoo, 2003.
- [12] H.-U. Barz und J. Konheiser, „Monte-Carlo Programm TRAMO - Möglichkeiten und Anleitung zur Nutzung,“ FZR Bericht-245, Rossendorf, 1998.
- [13] H. U. Barz, B. Boehmer, J. Konheiser und I. Stephan, „Monte Carlo Calculations of Neutron Fluence Spectra, Activation Measurements, Uncertainty Analysis and Spectrum Adjustment for the KORPUS Dosimetry Benchmark,“ in *Reactor Dosimetry*, ASTM STP 1398, John G. Williams, David W. Vehar, Frank H. Ruddy, and David M. Gilliam, Eds., American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, PA, 2000.
- [14] I. I. Bondarenko, *Group constants for nuclear reactor calculations*, Ney York: Consultants Bureau, 1964.

- [15] A. Trkov et al., *IRDF-II: A New Neutron Metrology Library*, arXiv:1909.03336v2[nucl-th], 2019.
- [16] H. Karnani, Chemical methods for the use of niobium from pressure vessel cladding as a fast neutron dosimeter, Espoo, Finland: VTT Technical Research Centre of Finland, 1986.
- [17] A. Borodkin, A. Gazetdinov und N. Khrennikov, „Approaches for Estimation of Radiation Damage Parameters on VVER Equipment and Their Implementation during Monitoring Procedure,“ in *Reactor Dosimetry: 16th International Symposium, ASTM STP1608*, M. H. Sparks, K. R. Depriest, and D. W. Vehar, Eds., ASTM International, West Conshohocken, PA, pp. 241–255, <http://dx.doi.org/10.1520/STP160820170118> DOI: 10.1520/STP1608-EB, 2018.
- [18] O. Bersillon et al., „A. International Reactor Dosimetry File 2002 (IRDF-2002),“ IAEA, Vienna, 2006.
- [19] B. Boehmer, G. Borodkin, J. Konheiser, K. Noack, E. Polke, A. Rogov und P. Vladimirov, „Neutron and Gamma Fluence and Radiation Damage Parameters of Ex-core Components of Russian and German Light Water Reactors,“ in *11th International Symposium on Reactor Dosimetry*, Brussels, 2004 .

9 Danksagung

Die Projektmitarbeiter danken dem russischen Partner SEC NRS und dort insbesondere Pavel Borodkin für überaus wertvolle Diskussionen und Vorschläge zum Funktionsumfang und damit zur Weiterentwicklung des TRAMO-Programmpakets sowie für die Analyse und den Vergleich der Ergebnisse der TRAMO-Rechnungen mit den experimentellen Werten und jenen der DORT-Rechnungen.

Anhang: TRAMO – Description of Input and Output

Das ist das Benutzerhandbuch zum Programmpaket TRAMO, wie es dem russischen Partner übergeben wurde.

1 Shell Script

For standard monitor experiments a Shell-script was written to automatize the calculation process. The following steps have to be done before usage:

1.1 Folder structure

- the files run.sh and script_input.sh in the main folder
- file tramo.exe in the main folder
- file calc_weightnumber in the main folder
- folder bias_ with subfolders VVER1000 and VVER440 including the source biasing file bias.h01 ... bias.hmn for horizontal monitor settings and according heights and files bias.w01 ... bias.wmn for vertical monitor positions and according angles
- folder weights_ with similar subfolders as bias to get zone- and energy-dependent weights
- folder data including folders 47, 640, VVER1000 and VVER440 and files spect 505 and spect 388
 - 47 includes files for 47 energy groups structure
 - group (cross section data)
 - group.ace (elastic scattering matrices)
 - group.th (thermal scattering matrices)
 - folder 640 contains similar data for 640 energy groups
 - VVER1000 contains files for VVER-1000
 - pburb.0...6 and pbure.0...6 with pin distributions (BOC and EOC, respectively); 1...6 belong to the according 60°-sector, 0 is a 360°-sector
 - burhoc.0...6 and bureoc.0...6 according source distributions
 - Hi.0...6 v-factors
 - VVER440 contains similar files for VVER-440
 - spect 505 and spect 388 are neutron spectrum data used for VVER-440 and VVER-1000, respectively

- folder pinDistribution includes file SEC_wbas.exe, which transforms pin data from SEC format to TRAMO format
- folder sourceDistribution includes file source_preparation.exe, which transforms source data from SEC format to TRAMO format
- folder Output includes file output_generation.exe for producing compact output file
- folder input contains subfolders VVER1000 and VVER440 with files input – the superior input file
- folder Datenaufbereitung is demo folder with Excel-files to further generate output values, e.g. reaction rates; not yet standardized

1.2 Usage

While running the script, some choices can be made by the user:

- reactor: 1=VVER440/230, 2=VVER1000
- direction (of the monitors): 1=vertical, 2=horizontal
- angle(°)/height(cm – from bottom of the TRAMO model) depending on the direction
- number of groups – actually 47 or 640
- description: sting, which describes the problem
- sector: 0...6

After that, calculation starts and output files rbase... and output.dat are produced.

2 Superior geometry input

There is an input file to generate the input file base with the command: `core_gesamt <input>`. The file <input> contains basic geometrical data – at the moment only for and is organized as follows:

- string: If string="vver440 213" a VVER440-213 60° standard sector will be calculated.
- tim
- kbias
- source_n, source_g
- nvar
- iig
- idru

If string is not "vver440 213" the following values have to be given. Otherwise default values will be set.

- assembly lattice distance in cm
- number of layer for each assembly (i=1...59)
- height of every layer for each assembly (new record for each assembly) (i=1...59, j=1...ie2)
- material number of each layer for each assembly (new record for each assembly) (i=1...59, j=1...ie2)

3 Input

TRAMO has to be executed as follows: TRAMO.exe base group weights bias <string> <initial pseudo random number> <path, where group data is located>

The first four command line arguments are related to the following input files, which are needed to run TRAMO:

3.1 base

This file contains the basic input data. In the upper part global parameters are listed. After the keyword geodata information about the different bodies are listed.

- Record 1
 - tim: maximum calculation time in minutes
 - kbias: indicator for source biasing
 - 0: no source biasing
 - 1: given zone-dependent source distribution
 - 2: given source distribution must be divided by given numbers for each zone; new source distribution is normalized
 - source_n:
 - >0.0: sources of neutrons
 - =0.0: no sources of neutrons (neutron by gamma reaction)
 - =-1.0: no calculation of neutrons (for pure gamma calculation)
 - source_g:
 - >0.0: sources of gammas
 - =0.0: no sources of gammas (gammas by neutron reaction)
 - =-1.0: no calculation of gammas (for pure neutron calculation)
 - only (source_g>0 & source_n≤0) or (source_g_0 & source_n>0) is possible

- nvar: parameter for special treatment of layers with different structure
 - 0: simple variant, all bodies in the layer will be treated
 - 1: the examined body numbers are read for every layer boundary
 - 2: the examined body numbers are calculated

The following six variables are only necessary, if the body structure is not given after the keyword geodata

- (isch): number of layers with different body structure
- (i1): number of different bodies. Each body contains different vertical zones.
- (i2): total number of geometrical zones
- (ikoes): number of bodies with sector classification
- (kzons): total number of sectors of those bodies
- (hhq): upper boundary
- isymh: symmetry parameter in vertical direction
 - 0: no height symmetry
 - 1: $z=0$ is symmetry axis in vertical direction
- isymw: sector symmetry parameter
 - 0: no symmetry
 - 1: mirror symmetry
 - 2: rotational symmetry
- pro1: sector in degrees, if isymw=1
- non: number of generation particles
- iig: number of generations (can be smaller, if tim is reached)
- iasam: number of maximum splitting particles
- (ifl): number of bodies for calculation of results. Only necessary, if the body structure is not given after the keyword geodata.
- (ifk): region for calculation of results. Only necessary, if the body structure is not given after the keyword geodata.
- nog7: number of groups for expectation estimation (starting from the highest energy)
- it6: control parameter for the biasing source particles
 - 0: no energy biasing nor adjustment at specified weights for the source particles
 - 1: energy biasing & additional adjustment at specified weights

- ≥1: only energy biasing
- wgrenz: weight limit. If weights are >wgrenz, the particle will be neglected
- (ipol): number of bodies with a polygon basis. Only necessary, if the body structure is not given after the keyword geodata.
- (ipols): total number of sides of those bodies (must be >3). Only necessary, if the body structure is not given after the keyword geodata.
- igreen: control parameter
 - 0: usual calculation
 - 1: only results for one source zone
 - 2: as 1, but an inner distribution given by the fuel pins (normalized to 1) is assumed
 - 3: as 0, but source distribution is given by the fuel pins
 - ≥1: number of generation neutron must be equal to the number of fuel pins.
- chan: all given neutron weights are multiplied by chan to achieve another normalization
- chag: all given gamma weights are multiplied by chag to achieve another normalization
- kkrum: number of regions with irregular vertical body
- lpout: print parameter
 - 0: no control print
 - 1: control print after every generation
- abschluss "end" specifies end of first record; only necessary, if the body structure is given after the keyword geodata.
- . Record 1a
 - idru: extended output is written for given zones. The syntax is "n1 n2-n3 n4-n5 n6 ..." (with exactly one white space between the terms).
- Record 2
 - isowinkvert: angle distribution of sources
 - 0: isotrope
 - 1: use of a distribution
- Record 3
 - irefo: irefo>0 means black surface at the upper boundary of the sector; only if isymw=1

- irefu: irefu>0 means black surface at the lower boundary of the sector; only if isymw=1
- Record 4
 - rele: fuel pin radius; only if igreen=2 or 3
 - gab: Fuel pin (grid) distance; only if igreen=2 or 3
 - x34, y34: center coordinates of the specific fuel assembly; only if igreen=2
 - katego: Number of fuel pins with stick structure only if igreen=3
 - nrow: property for the number fuel pin rows within an assembly
 - The number of fuel pins is $nro=3*nrow*(nrow+1)$ for VVER fuel assemblies.; only if igreen=2 or 3
- Record 5
- nr_neu: number of neutron energy structure
- nr_gam: number of gamma energy structure
- nr_rat: number of reaction rates energy structure (not used)
 - -1: SAND IIA with 640 energy groups
 - -2: VITAMIN J with 175 energy groups
 - -3: BUGLE 96 with 47 neutron energy groups
 - -4: CSEWG with 94 gamma energy groups
 - -5: VITAMIN E with 38 gamma energy groups
 - -6: BUGLE 96 with 20 gamma energy groups
- Record 6
 - nr_neu+nr_gam lines
 - nr_enz: If nr_enz<0 |nr_enz| is the number of the standard structure, provided in the code
 - If nr_enz>0 the energy group structure has to be given in this file: energy(i,j): i=1...nr_neu+nr_gam lines, j=1...nr_enz
- . Record 7
 - nogr7: number of groups for evaluation of expectation value estimation results; only if nog7>0

After the keyword geodata the different bodies are described as follows:

- isch: number of horizontal layers

- hsch, ik (i=1...isch): height of the upper boundary of the layer and number of bodies within the layer
- for every body different information are given dependent on the type of the body
- record 1
 - ie1: control parameter
 - |ie1|>1: body has a sector classification
 - ≥1: this body and every following body until ie2>0 were (automatically) included in an artificial cylinder to increase the calculation speed. To be used, if there are many tight compact bodies within this body.
 - r1: radius for cylinders, inner radius for hexagons; otherwise 0.0 has to be set
 - aa1: x-coordinate of the center of the cylinder or the hexagon or a corner of an irregular body
 - bb1: according y-coordinate
 - jex: identification number of the body
 - 0: cylinder
 - 1: free hexagon
 - 2: hexagon has at least one free side and at least one side is adjacent to another body
 - 3: all sides of the hexagon are adjacent to another body
 - >3: irregular polygon with jex-1 corners
 - ie2: number of different layers of this body
- record 2

read only if ie1<0; read |ie1| times

 - iss: number of layers within the sector element
 - alac: sector angle
- record 3 read ie2 times
 - h: height (cm); h<0 means zone with pin structure (only for igreen=3). The first zone with h<0 indicates the first zone with source neutrons (equivalent to irei>4).
 - mat: material number
 - irei:

- first time $|j_{rei}| > 4$: From this zone on there are source neutrons
 - first $i_{rei} = 3$ determines, that this body is black for all particles.
 - $i_{rei} < 0$
 - $i_{rei} < 0$: all fission events to be treated as additional source terms
- iupf: parameter regarding the regular boundary in vertical direction; only if $k_{krum} > 0$
- record 4
read only if $j_{ex} > 3$; read $j_{ex} - 1$ times
 - axx: x-coordinate of the corner of a polygon
 - bxx: y-coordinate of the corner of a polygon
- record 5
for cylinders without inner cylinders or only one inner cylinder with identical axis is an additional height restriction $H(r) = H_0 + (r - r_{af}) \cdot a_{ste}$ possible. r is the radial distance from the axis. Record is read only if $i_{upf6} = 0$; read i_{e2} times.
 - aste:
 - raf:
 - iopf: characterization of the zone
 - -1: irregular lower vertical boundary
 - 1: irregular upper vertical boundary
 - 2: irregular upper and lower vertical boundary

If $i_{green} = 2$ the normalized power distribution for assemblies with $power > 0$ (initial weights of rods) has to be given within the file base – after the record with $isch$ and ik . For $i_{green} = 3$ this data are provided in the file 3.7.

3.2 bias

This file contains source biasing numbers. Starting from the outer fuel assemblies with $source > 0$ the bias is given for each fuel assembly and every layer.

3.3 group

This file contains information about different cross section models and the cross sections and is organized as follows:

- the first 14 numbers (integer, although they are given as real) have the following meanings:
 - ngn: number of neutron groups in the library
 - ngg: number of neutron groups in the library
 - nm: number of materials

- nomis: sum of isotopes of all materials (???)
- lpl: order of Legendre polynomial expansion (scattering)
- nois: number of different isotopes
- nogin: number of groups for inelastic scattering
- nn2: number of groups for n2n scattering
- nmax: max. downscattering
- iwastoff:
 - 0: isotropic
 - 1: scattering of H from the library
- (kform): parameter to choose between formatted/unformatted; not used anymore
- inonly: parameter for elastic scattering
 - 1: scattering from library
 - other: isotrop
- iprodn: neutron production data available
- iprodg: > 0: gamma production data available
- ngr: (i=1...nogin) number of transfer groups of inelastic scattering
- ggree: (i=1...ngg+ngn+2, iff ngg>0 and ngn>0, otherwise i=1...ngn+ngg+1) upper energy boundaries in eV
- if8: (i=1...nm+1) address array dependent on number of isotopes per composition; (only if lpl≤0 or inonly≠0)
- atw: (i=1...nois) atomic weight of isotopes (referring to neutrons); (only if lpl≤0 or inonly6=0)
- s_{total}: (i=1...nm, j=1...ngn+ngg) XS_{total}
- f0: (i=1...nm, j=1...ngn+ngg) $v * XS_{fission}/XS_{total}$
- reac_{gew}: (i=1...nm, j=1...nn2) $(XS_{n2n} + XS_{n3n})/XS_{total}$
- f6: (i=1...(ngn+ngg)*nomis) reaction probabilities of the isotopes in the composite (XS_{Total} *isotope concentration, normalized and sorted); (only if inonly=1)
- reac_{gew_{cap}}: (i=1...nm, j=1...ngg+ngn) probability of elastic reaction: $XS_{elastic} = (XS_{total} + XS_{n2n} + 2*XS_{n3n})$
- f4: (i=1...nm, j=1...nogin) values for $(XS_{inelastic} + 2*XS_{n2n} + 3*XS_{n3n})/(XS_{total} + XS_{n2n} + 2*XS_{n3n})$; (only if nogin>0)

- scatmatrix: (l_p=1...l_p+1, i=ij...ij1 with ij1(j)=ij1(j-1)+ngr(j)*nm, j=1...n_{gin}) transition probabilities of inelastic reactions (between groups); (only if n_{gin}>0 and ngr(j)>0)
- obsolete input (i=1...nm*(ngn+ngg))
- f9n: (i=1...nm, j=1...used gamma+neutron groups) total production of neutron groups; (only if i_{prodn}≥0)
- f55n: (k=1...ngn, j=1...used gamma+neutron groups, i=1...nm) Spectra of production of neutron of groups and compositions; (only if i_{prodn}≥0)
- f9g: (i=1...nm, j=1...used gamma+neutron groups) total production of gamma groups; (only if i_{prodg}≥0)
- f55g: (k=1...ngg, j=1...used gamma+neutron groups, i=1...nm) spectra of production of neutron of groups and compositions; (only if i_{prodg}≥0)

3.4 group.ace

This file contains the elastic angular distributions of all isotopes and is organized as follows:

- list of isotopes and their properties including the number of energy points
- "." (indicator for input; TRAMO is reading data after ".")
- maximum number of numbers for a single isotope, number of isotopes, iwastoff
- for each isotope:
 - energy points
 - equally probable cosine bins for each energy (incl. -1.0 and 1.0)

3.5 group.th

This file contains the thermal angular distributions of all isotopes is organized as follows:

- preface with useful information including the list of isotopes
- list of isotopes
- "." (indicator for input; TRAMO is reading data after ".")
- number of isotopes, primary energy points, angle interval points (=18), maximum secondary energy, total number of values
- primary energy points
- the first address of isotopes and primary energy
- for each isotope:
 - number of secondary energy points as real number)

- probabilities of secondary energy points
- secondary energies and equally probable cosine bins (incl. -1.0 and 1.0)

3.6 qbasen

This file contains the sources is organized as follows:

- number of groups, type of source (0=equal distribution within the group, 1=watt distribution, nothing else implemented yet)
- ipow fine: indicator of extra distribution of sources
 - 0: no extra distributions of sources
 - 1: fine distributions
- energy boundaries ($i=1 \dots \text{number of groups}+1$)
- source spectrum ($i=1 \dots \text{number of groups}$)
- source spectrum biasing ($i=1 \dots \text{number of groups}$) - only if $it6 > 0$
- height partition of fine distribution ($i=1 \dots \text{ipow fine}$), fine distribution ($i=1 \dots \text{ipow fine}$)
- probabilities of the source zones (assembly-wise, then layer-wise) ($i=1 \dots i2$)

3.7 wbas

This file contains the normalized power distribution for assemblies with power > 0 (initial weights of rods):

Fuel-assembly-wise and then every layer and then pin-wise. Only needed, if $igreen=3$. If $igreen=2$ this data are read from the file base.

3.8 weights

This file contains the weights of neutron and energy groups and is organized as follows:

- nogwein: number of neutron weights
- neutron energy group boundaries ($i=1 \dots \text{nogwein}+1$)
- nogweig: number of gamma weights
- gamma energy group boundaries ($i=1 \dots \text{nogweig}+1$); not included, if $\text{nogweig} < 0$
- energy-independent zone weights ($i=1 \dots i2$)
- zone-independent group weights ($i=1 \dots \text{nogwein}+\text{nogweig}$)
- energy-dependent and zone-dependent weights
 $(i=1 \dots (\text{nogwein}+|\text{nogweig}|)*i2, \text{ if } \text{nogweig} \geq 0, \text{ else } i=1 \dots (\text{nogwein}+\text{nogweig}-1)*i2$
 – neutron weights are used for the gammas)

4 Output

Main output file is rbase001. If this file already exists (e.g. old calculation) the file rbase002 (and so on) is written.

4.1 General information

- some information about the used files
- allocation of XS groups to weight groups
- basic data
 - some global numbers
 - ignore line with izan, izen, ischi, izdz
 - information about the bodies in every layer – errors can be ignored
 - geometrical description
 - i: body number
 - r: radius
 - aa1, bb1: center coordinates
 - r12: value for determination of intersections
 - zj: how many bodies are within this body
 - j: which number has first inner body
 - u: surrounding body
 - k: first zone of all included bodies
 - jex: 0=cylinder 1, 2, 3 different kinds of hexagons, 4...n polygons
 - jan: parameter to determine the corners (not for cylinder)
 - kuk: 1=irregular polygon
 - fd: top surface
 - fmk: curved surface area
 - vk: volume
 - for special bodies there are angle sectors (degree)
 - axial distribution, regions, compositions
 - h: height
 - mat: material number
 - frei: first zone with source>0
 - fmz: curved surface area
 - vz: volume
 - source: cumulated source
 - ignore last two columns
 - . structure of connected hexagons

- jan:
- mr1: adjacent hexagons

4.2 Print of input data

- energy structure of the sources (resulting particles statistically distributed)
- dose factors for every energy group
- group and zone weights
- structure of polygon bodies
 - x, y: coordinates of the corner
 - length: length of the side
 - u, v: cosine of the angles with respect to x and y axis
 - mr2: number of the adjacent body

4.3 Results

For every region the following is printed:

- . some information, i.e. body type, radius, heights of the upper and lower boundary and composition
- . volume values (error in parentheses)
 - dose (collision estimation, flight estimation)
 - total flux (collision estimation, flight estimation)
- . cover and lateral surface values (error in parentheses)
 - cover dose (flight estimation)
 - cover total flux (flight estimation)
 - lateral surface dose (flight estimation)
 - lateral surface total flux (flight estimation)
- . values for the basis (error in parentheses)
 - basis dose (flight estimation)
 - basis total flux (flight estimation)

Extended output (current for every group) can be written for certain zones defined in idru.