KfK 3912 September 1985

Neuere Methoden zur Berechnung der anisotropen Neutronendiffusion in Zellgittern schneller Reaktoren

E.A. Fischer

Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik Projekt Schneller Brüter

Kernforschungszentrum Karlsruhe

KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE

Institut für Neutronenphysik und Reaktortechnik Projekt Schneller Brüter

KfK 3912

Neuere Methoden zur Berechnung der anisotropen Neutronendiffusion in Zellgittern schneller Reaktoren

E. A. Fischer

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

Als Manuskript vervielfältigt Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH ISSN 0303-4003

Zusammenfassung

Zunächst wird auf die in der Literatur viel diskutierte Definition von (richtungsabhängigen) homogenisierten Zell-Diffusionskoeffizienten eingegangen. Es wird gezeigt, daß - im Gegensatz zu Aussagen in der Literatur - für ein unendlich ausgedehntes Gitter eine eindeutige Definition möglich ist, bei der die einzelnen Beiträge zur Neutronenbilanz erhalten bleiben. Die Partialströme an den Zellgrenzen bleiben dabei jedoch nicht erhalten. Für praktische Rechnungen werden stets vereinfachte Definitionen benutzt, die aber für Zellgitter schneller Reaktoren genau genug sind.

Bei schnellen Reaktoren spielt die Berechnung von Diffusionskoeffizienten für Void-Gitter unter Berücksichtigung der Buckling-Abhängigkeit eine wichtige Rolle. Die in den letzten Jahren entwickelten Methoden werden kurz vorgestellt. Bei KfK stehen für idealisierte Zellgitter (ohne Einbauten) ausreichend genaue Methoden zur Verfügung, auf die etwas näher eingegangen wird.

Recent Methods for Calculating Anisotropic Neutron Diffusion in Fast Reactor Lattice Cells

Abstract

Different ways of defining (anisotropic) homogenized diffusion coefficients for lattice cells are discussed. It is demonstrated that - contrary to statements made in the literature - in the case of an infinite lattice, a unique definition is possible, which preserves the single contributions to the neutron balance. However, the partial currents at the cell edges are not preserved. Usually simplified definitions are used for practical calculations; they are accurate enough for fast reactor lattices.

The calculation of diffusion coefficients for voided fast reactor lattices, including the buckling dependence, is an important issue. The methods developed in recent years will be briefly presented. At KfK, sufficiently accurate methods are available for idealized lattices (without structural parts). These methods are discussed in some detail.

1. Einleitung, Problemstellung

Das Problem der anisotropen Diffusion ist einerseits so alt wie die Reaktorphysik selbst, wenn man bedenkt, daß es zum ersten Mal bereits 1949 von Behrens /1/ behandelt, und durch eine klassische Arbeit von Benoist, die 1964 /2/ erschien, zu einem gewissen ersten Abschluß gebracht wurde. Andererseits gibt es bis heute immer wieder Überlegungen, die zu einer Verbesserung der Methoden führen. Erst 1984 erschienen in NSE 2 Publikationen von Benoist, die als wesentliche Beiträge zu dem Streaming-Problem in schnellen Reaktoren anzusehen sind. Damit ist ein Anlaß gegeben, den Stand der Technik kurz zusammenzufassen, wobei außer auf den internationalen Stand auch auf die bei KfK verfügbaren Methoden eingegangen wird. Dabei werden neuere Entwicklungen, die für schnelle Reaktoren noch keine Bedeutung erlangt haben, nur am Rande gestreift.

Die folgenden Ausführungen gehen zum Teil auf einen Kolloquiumsvortrag zurück, der im Mai 1984 im INR gehalten wurde.

Das Problem der anisotropen Diffusion im Gitter ist ein Teilproblem der Zellhomogenisierung: Für ein Stabgitter (SNR-300, MASURCA) oder ein Plattengitter (z. B. SNEAK) werden <u>äquivalente</u> homogene Gruppenkonstanten (Wirkungsquerschnitte und Diffusionskoeffizienten) gesucht. Der Grund dafür ist der, daß die globale Core-Berechnung (in Diffusionsnäherung) die Zell-Feinstruktur nicht sinnvoll auflösen kann. Während die zellgemittelten Wirkungsquerschnitte im Prinzip einfach durch Flußwichtung gebildet werden, ist die Bestimmung der Diffusionskoeffizienten (DK) sehr viel komplizierter; offensichtlich ist auch, daß die Diffusion <u>anisotrop</u> ist, d. h. das Gitter ist in der parallelen Richtung (zu Stäbchen oder Platten) <u>durchläs</u>siger als in der senkrechten.

Die bereits erwähnte klassische Arbeit von Benoist /2/ führte (in ihrer nullten Näherung) zu einer einfachen Formel für den DK, die als erste Näherung auch heute noch viel verwendet wird. Der DK ist dabei richtungsabhängig, aber vom Buckling unabhängig. Bei schnellen Reaktoren mit Na ist diese Formel in allen Fällen ausreichend genau. Sie ist z. B. in unserem Zell-Code KAPER enthalten, und soll hier angegeben werden

$$\mathcal{D}_{k} = \frac{\sum_{n} \mathcal{V}_{h} \phi_{h} \sum_{m} \mathcal{P}_{hm}}{3 \sum_{n} \mathcal{V}_{h} \phi_{h}}$$
(1)

Dabei ist k die Richtung (axial oder radial), die P_{nm}^k sind "gerichtete" Stoßwahrscheinlichkeiten, die von Benoist eingeführt wurden, die Indizes laufen über die Zonen der Zelle. Σ_m ist der totale Querschnitt in Zone m (bei anisotroper Streuung der Transportquerschnitt).

Die neueren Entwicklungen (etwa der letzten Dekade), die uns hier interessieren, befassen sich mit folgenden Punkten:

- Man hat erkannt, daß verschiedene Definitionen des Zell-DK möglich sind, die zum Teil gewisse Inkonsistenzen aufweisen. Sie unterscheiden sich nach dem Grad der Annäherung, oder in der Aufgliederung der Neutronenbilanz. Zu nennen sind hier insbesondere die Arbeiten von Gelbard /3/ und Hughes /4/. Obwohl die Unterschiede der verschiedenen Definitionen für Zellgitter schneller Reaktoren numerisch unbedeutend sind, wird hierauf in Abschnitt 2 eingegangen, wobei darauf hingewiesen wird, daß im Prinzip eine eindeutige Definition aus der Transportgleichung möglich ist. Dieser Punkt wurde bisher in der Literatur nicht beachtet.

Die diskutierten Definitionen basieren zunächst auf der "Buckling-Methode", d. h. man nimmt an, daß der globale Fluß die Form exp(ißr) hat. Eine Verallgemeinerung stellt die "asymptotische" Methode dar /5,6,7/, bei der die Form der globalen Flußverteilung zunächst unbestimmt bleibt; man leitet dann eine Diffusionsgleichung für diese Verteilung ab. Die Ergebnisse stimmen weitgehend mit denen der Buckling-Methode überein /5/. Aus dieser Methode ergeben sich einige neue Argumente zur Bewertung der verschiedenen Definitionen /6,7/, die aber für die Anwendungen von untergeordneter Bedeutung sind. Deshalb wird auf die asymptotische Methode nicht näher eingegangen.

- Eine weitere Entwicklungsrichtung ist für schnelle Reaktoren sehr viel wichtiger: Bei Void-Gittern (Na-Void-Konfigurationen, Gasbrüter) muß die Buckling-Abhängigkeit des DK berücksichtigt werden. Die einfache Benoist-Formel (1) versagt in diesem Fall. Methoden für Void-Zellen wurden von Köhler und Ligou /8/, Eisemann /9/, Benoist /10/, Fischer /11/, Gho /12/ entwickelt. Auf die wesentlichen Züge dieser verschiedenen Methoden wird in Abschnitt 3 eingegangen. Bei KfK stehen für idealisierte Gitter (ohne Einbauten wie Elementkästen, Abstandshalter) ausreichend genaue Methoden zur Verfügung.
- Die Behandlung von Superzellen (zylindrische Kastenwände, Kontrollstab) und 2-dimensionalen heterogenen Anordnungen (Kastenwände, Mixed-pin-Zellen) wurde ebenfalls weiter entwickelt. Zu nennen sind Arbeiten von Rowlands und Eaton /13/, Gho /12/ und Nakagawa und Inoue /14/, sowie die Routinen für 2-dimensionale Stoßwahrscheinlichkeiten PIJ (UKAEA), PRONACE und COROT (beide CEA). KfK hat in diesem Punkt den internationalen Stand noch nicht erreicht. Da z. Zt. noch Diskussionen über das weitere Vorgehen im Gange sind, wird auf diesen Punkt hier nicht näher eingegangen.

2. Verschiedene Definitionen des Zell-Diffusionskoeffizienten

In diesem Abschnitt wird auf verschiedene Definitionen des Zell-Diffusionskoeffizienten und ihre Eigenschaften eingegangen. Eine einheitliche Ableitung der Definitionen von Benoist /2/, Deniz /15/ und Gelbard /3/ wurde von Hughes /4/ publiziert, und die folgenden Ausführungen werden sich z. T. auf diese Arbeit stützen. Hughes weist insbesondere auch auf die mit den verschiedenen Definitionen verbundenen Inkonsistenzen hin und erweckt, wie z. B. auch Gelbard /3/, den Eindruck, daß eine in sich konsistente Definition nicht möglich sei. Diese Auffassung beruht jedoch darauf, daß im Rahmen der angewandten Methode, einer Reihenentwicklung nach dem Buckling B², gewisse Parameter unzweckmäßig definiert wurden. So wurde z. B. k_∞ als der Eigenwert des "unbuckled lattice", d. h. der O^{ten} Näherung, definiert. Für die Zellrechnung ist jedoch die Definition als "Produktionsrate/Absorptionsrate" zweckmäßiger, und auch physikalisch sinnvoller, da die Raten im Prinzip meßbar sind.

Im folgenden wird gezeigt, daß man bei Verwendung einer geeigneten Nomenklatur im Rahmen der Buckling-Methode auf eine in sich konsistente Definition des Diffusionskoeffizienten geführt wird, die zu einer exakten Lösung der Transportgleichung (mit isotroper Streuung) im Fundamentalmode gehört. Diese Aussage gilt jeodch nur im Innern von periodischen Zellgittern. Der Diffusionskoeffizient gibt dann den korrekten Nettostrom an den Grenzen zweier Zellen an. Eine konsistente Definition der Partialströme ist jedoch nicht möglich /16/. Das bedeutet, daß an Grenzflächen zwischen Gittern verschiedener Zusammensetzung systematische Fehler auftreten können. Diese Fehler werden in dem Code GITAN /17/ vermieden, der eine exakte Behandlung von Grenzflächen ermöglicht. Die folgenden Ausführungen beschränken sich jedoch, wie z. B. auch Hughes /4/, auf die zellgemittelten Größen von unendlich ausgedehnten Gittern.

Um eine exakte Lösung im Fundamentalmode zu erhalten, ist es nötig, die in der Literatur weitgehend übliche Reihenentwicklung nach B^2 zu vermeiden. Dies ist ohne Schwierigkeiten möglich, wenn man von der integralen Transportgleichung ausgeht.

Der Einfachheit halber gehen wir (wie z. B. auch Hughes) von einer monoenergetischen Behandlung eines Plattengitters aus. Es wird die Annahme gemacht, daß die Einheitszelle symmetrisch ist, und daß die Core-Mitte (für die x = 0 sein soll) mit einem Zellmittelpunkt zusammenfällt. Da sich einige der Definitionen nur für den Fall des Diffusionskoeffizienten senkrecht zu den Plättchen unterscheiden, interessieren wir uns für diesen Fall, und nehmen an, daß das Buckling parallel zu den Plättchen Null ist. Es wird weiter angenommen, daß die Streuung isotrop ist.

Da später auf das homogene Core als Referenzfall zurückgegriffen wird, sollen die Gleichungen für diesen Fall kurz angegeben werden. Wir beschränken uns auf nur eine Raumdimension. Die integrale Transportgleichung lautet

$$\phi(x) = (\Sigma_{x} + \lambda \vee \Sigma_{f}) \int dx' p(x'x) \phi(x')$$
⁽²⁾

Dabei ist die Stoßwahrscheinlichkeit p durch das Exponentialintegral gegeben

$$p(x'_{1}x) = \frac{1}{2} E_{1} (\Sigma I x' - xI)$$

 $\lambda = 1/k_{eff}$ ist der Eigenwert.

Für die übliche Definition des Diffusionskoeffizienten geht man zunächst in (2) zur Diffusionsnäherung über

$$-\frac{1}{3\Sigma}\frac{d^{2}\phi}{dx^{2}}+(\lambda v\Sigma_{f}-\Sigma_{a})\phi=0$$

und identifiziert dann D mit dem Koeffizienten von ϕ^{II} , nämlich $1/3\Sigma$.

Alternativ kann man auch die Fundamental-Lösung von (2) in der Form

$$\phi(x) = \phi_0 \exp(iBx)$$

suchen. Einsetzen in (2) führt auf folgende Bilanzgleichung, die auch die Beziehung zwischen dem Buckling und dem Eigenwert darstellt

$$\lambda v \tilde{\Sigma}_{f} = \tilde{\Sigma}_{a} + \frac{1}{B} \left(\frac{1}{a \tan B/\Sigma} - \frac{\Sigma}{B} \right) \cdot \tilde{B}^{2}$$
(3)
$$D(B)$$

In dieser Gleichung stellt der letzte Term die Leckage dar. Schreibt man sie als DB^2 , dann wird man auf folgende Definition des Diffusionskoeffizienten (DK), geführt

$$\mathcal{D}(\mathcal{B}) = \frac{1}{\mathcal{B}} \left(\frac{1}{a \tan \beta/\Sigma} - \frac{\Sigma}{\mathcal{B}} \right)$$
(4)

Dies ist also ein "transport-korrigierter", B^2 -abhängiger DK, der für die Fundamental-Lösung der Transportgleichung die Leckage richtig wiedergibt. Entwickelt man den Ausdruck (4) nach B^2 und bricht nach dem ersten Term ab, dann erhält man wieder 1/32. Aus (3) folgt unmittelbar, daß in dieser Näherung der Eigenwert nur bis zur Ordnung B^2 genau ist. Dies gilt natürlich auch, wenn man die entsprechende Entwicklung für ein Zellproblem durchgeführt, wie z. B. in /6/ betont wird.

Für die Behandlung eines Zellgitters geht man wieder von der integralen Transportgleichung aus

$$\phi(\mathbf{x}) = \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{x}' p(\mathbf{x}', \mathbf{x}) Q(\mathbf{x}')$$
(5)

Die totale Quelle Q(x) setzt sich aus Streu- und Spalttermen, evtl. auch aus einer äußeren Quelle oder, im Multigruppenfall, einer Moderationsquelle zusammen. G1. (5) ist also allgemeiner als G1. (2).

Wie bereits erwähnt, wird die Einheitszelle symmetrisch angenommen. Die Core-Mitte (für die x = 0 sein soll) fällt mit einem Zellmittelpunkt zusammen. In der x-Richtung (d. h. senkrecht zu den Plättchen) soll ein Buckling existieren. Streng genommen muß man auch annehmen, daß zwischen $x = -\pi/2B$ und $x = +\pi/2B$ eine ganze Anzahl von Zellen liegt; jedoch geht diese Annahme in die Endformeln nicht ein. Zu beachten ist, daß für periodische Gitter mit unsymmetrischer Zelle (z. B. Fig. 2) im allgemeinen kein Buckling in der x-Richtung existiert. Zellrechnungen sind dann nur näherungsweise gültig. Bei stark heterogenen Zellen kann der makroskopische Fluß erheblich von einer cos-Verteilung abweichen /18/.

Der übliche Lösungsansatz der Buckling-Methode besteht nun darin, erstens die Quelle als Produkt einer globalen Verteilung exp(iBx) und einer "Mikroverteilung" q(x) mit der Periodizität des Gitters darzustellen, also

$$Q(x) = Q(x) \exp(i 3x)$$
⁽⁶⁾

Zweitens denkt man sich das Gitter unendlich ausgedehnt. Die Quelle Q(x) verschwindet also nicht außerhalb des "realen" Reaktorkerns, sondern wird periodisch bis ins Unendliche fortgesetzt.

Dieser Ansatz wurde bereits von Benoist /2/ verwendet, und liegt heute fast allen praktisch anwendbaren Methoden zugrunde. Seine Berechtigung liegt in der mathematischen Vereinfachung, die durch die Beschränkung auf den Fundamentalmode erzielt wird. Wir werden hier nur diese Buckling-Methode verwenden, obwohl die ungewohnte Annahme von (unphysikalischen) negativen Flüssen (durch die periodische Fortsetzung) die Kritik der Reaktorphysiker geradezu herausfordert. Andererseits wurde auch durch die allgemeinere "asymptotische" Methode keine wesentliche Verbesserung erreicht. Insbesondere ist es nicht gelungen, zu einer theoretisch sauberen Definition des DK für endliche Gitter zu gelangen /7/. Im Anhang wird kurz darauf eingegangen, inwieweit nach Meinung des Autors "unphysikalische" Annahmen (wie negative Flüsse) berechtigt oder sinnvoll sind. Hier sei nur darauf hingewiesen, daß man unter den obigen Voraussetzungen auf eine exakte Lösung der Transportgleichung (5) geführt wird. Gerade dieser Punkt soll im folgenden gezeigt werden.

Es ist noch zu bemerken, daß die komplexe Schreibweise in (6) zur Beschreibung der Leckage senkrecht zum Gitter sehr bequem ist. Sie ist so zu verstehen, daß q(x) als reell angenommen wird, und jeweils nur die Realteile von Q, ϕ etc. physikalische Bedeutung haben. Wir führen nun den Neutronenstrom J(x) ein, der durch die Gleichung

$$J(x) = \int dx' \vec{p}(x',x) Q(x')$$
(7)

mit

$$\widetilde{p}(x'_{i}x) = \begin{cases} \frac{1}{2} E_{2}(l\ell_{x'x}l) & x' < x' \\ -\frac{1}{2} E_{2}(l\ell_{x'x}l) & x' > x' \end{cases}$$

gegeben ist. Dabei ist E_2 das Exponentialintegral 2. Ordnung, $1_{x'x}$ ist der Abstand zwischen x' und x, gemessen in freien Weglängen. $\tilde{p}(x'x)$ ist offensichtlich der gerichtete (unkollidierte) Neutronenstrom in x, der von einer Einheitsquelle in x' herrührt. Über die Beziehung

$$\frac{d\tilde{p}(x,x)}{dx} = -\Sigma(x)p(x,x) \qquad \text{fur } x' \neq x$$

läßt sich leicht die folgende Gleichung ableiten

$$Q = \Sigma \phi + div \mathcal{J}$$
⁽⁸⁾

Die Neutronenbilanz in der Zelle folgt durch Integration von (8) über das Zellvolumen. Wir wollen die Bilanz für den Fall eines Kritikalitätsproblems ohne äußere Quelle in der Ein-Gruppen-Näherung anschreiben. Dazu setzen wir

$$Q = (\Sigma_s + \lambda v \Sigma_f) \phi$$

und erhalten direkt durch Integration von (8) über das Zellvolumen

$$\lambda \int v \Sigma_{f} \phi dV = \int \Sigma_{a} \phi dV + \int div \int dV \qquad (9)$$

cell cell cell

Aus dieser Bilanzgleichung folgen beinahe zwangsläufig die Definitionen der zellgemittelten Größen $\overline{\Sigma}_{y}$ (y = s,a,f) und des Diffusionskoeffizienten senkrecht zu den Plättchen, D_L:

$$\overline{\Sigma}_{y} = \frac{\int \Sigma_{y} \phi dV}{\int \phi dV} , \quad \overline{D}_{I} = \frac{\int div \,\overline{J} dV}{B^{2} \int \phi dV}$$
(10)

$$k_{o} = v \overline{\Sigma}_{f} / \overline{\Sigma}_{a}, \quad M^{2} = \mathcal{D}_{L} / \overline{\Sigma}_{a}$$
 (11)

Der so definierte Zell-Diffusionskoeffizient hat folgende Eigenschaften

- Für ein Gitter mit symmetrischer Einheitszelle gibt dieser DK die wahre Leckage aus der Zelle für den Fundamentalmode der Transportgleichung wieder. Da die Definition, wie erwähnt, praktisch direkt aus der Neutronenbilanz folgt, ist es zunächst verwunderlich, daß sie nicht schon in den diskutierten früheren Arbeiten mindestens als Ausgangspunkt für einfachere Näherungen verwendet wurde. Die Erklärung ist vermutlich die, daß in all diesen Arbeiten /2,3,4/ schon von Anfang an die Reihenentwicklung nach B² verwendet wird.
- Man überzeugt sich sehr einfach davon, daß im homogenen Grenzfall (d. h. im Fall "Zelldicke gegen Null") der oben definierte DK direkt in den "homogenen" Wert (4) übergeht.
- Die definierten Größen erfüllen die Bilanzgleichung, die sich auch in der Form

$$\lambda k_{p} = 1 + M^{2}B^{2}$$

schreiben läßt.

Die obigen Aussagen haben jedoch scheinbar noch einen Haken. Die Integration über das Zellvolumen in den Definitionsgleichungen (10) bedeutet in unserer Geometrie eine Integration über x von -a bis +a, wo also x = a die Zellgrenze, x = 0 der Zellmittelpunkt ist. Nun hat, wie zuerst Gelbard /3/ hervorhob, jede symmetrische Zelle zwei Symmetrieebenen, und jede von beiden kann als "Zellmittelpunkt" betrachtet werden (Fig. 1). Man erhält also zwei DK's, die voneinander verschieden sind. Diese Zweideutigkeit ist jedoch nicht in einer Schwäche der Modellierung zu suchen, sondern ein realer physikalischer Effekt. Der Strom J(x) variiert innerhalb der Zelle, und der "wahre" DK wird davon abhängen, ob der Nettostrom in der Position "Mitte des Plättchens I" oder "Mitte des Plättchens III" (in Fig. 1) gesucht ist - zwei durchaus physikalisch verschiedene Fragestellungen. In diesem Sinne ist die obige Definition also (bei gegebener Geometrie) als eindeutig anzusehen. (Nach Definition haben wir es in unserem Modell mit einer <u>ganzen</u> Anzahl von Zellen zu tun. Aber auch der Strom am Rand eines Plättchens ist nach (7) berechenbar). Der Unterschied zwischen den beiden DK's kann also nicht weginterpretiert, sondern allenfalls "weggenähert" werden.

Man hat also folgende Möglichkeiten:

- a) Man kann den Zellrandpunkt so wählen, daß die wahre Geometrie der Randzelle des Gitters möglichst gut angenähert wird.
- b) Man wird die Zweideutigkeit "wegnähern", z. B. nach der Methode von Köhler /19/, die mit der Anwendung einer einfacheren Definition des DK äquivalent ist; d. h. man benutzt die Definition (19) statt (16), siehe unten. Bei schnellen Reaktoren ist in praktisch wichtigen Fällen diese "Wegnäherung" mit einer so geringfügigen Änderung verbunden, daß sie i. a. gerechtfertigt ist.
- Für die obige Definition wurde der Produktansatz (6) noch gar nicht explizit verwendet. Implizit steckt er jedoch drin, da nur mit (6) die Definition (10) für jede beliebige Zelle denselben Wert annimmt. Es zeigt sich, daß der Ansatz (6) auch auf eine Produktdarstellung von φ und J führt

$$\phi(x) = \phi(x) \exp(i\beta x), \quad J(x) = j(x) \exp(i\beta x)$$

Die Transportgleichung (5) lautet dann

$$\varphi(x) = \int dx' p(x'x) q(x') exp(iB(x'-x))$$
(12)

und die Gleichung für den Strom wird

$$j'(x) = \int dx' \tilde{p}(x'x) q(x') exp(iB(x'-x'))$$
(13)

Der Zell-DK ist über die Größen J und φ definiert und damit (wie übrigens auch im homogenen Fall) von B² abhängig. Es ist zu beachten, daß die Lösungen von (12) und (13) zu exakten Lösungen der Transportgleichung (5) gehören. Im Plattenfall ist übrigens die Lösung von (12) nicht sehr aufwendig, und kann von einem modifizierten Zellprogramm geleistet werden.

Die weitaus meisten Reaktorberechnungen werden in Diffusionsnäherung durchgeführt, und es ist die Aufgabe der Zell-Homogenisierung, geeignete Konstanten für die Diffusionsgleichung bereitzustellen. Dafür ist die Genauigkeit, die in den oben definierten Größen steckt, gar nicht nötig. Ebenso wie man im homogenen Fall im allgemeinen nicht mit dem "exakten" DK (4) rechnet, sondern in einer Reihenentwicklung nach B nur den führenden Term beibehält, wird man auch versuchen, für die zellgemittelten Größen durch Reihenentwicklung nach B einfachere Näherungen zu erhalten.

Zu beachten ist, daß die im folgenden durchgeführte Reihenentwicklung in gewissen Fällen, wenn leere Kühlkanäle vorliegen, nicht konvergiert. Diese Fälle werden im nächsten Abschnitt ausführlich diskutiert. Für den hier behandelten Fall des senkrechten DK im Plattengitter konvergiert die Entwicklung immer. Bei Erweiterung auf andere Geometrien ist jedoch zuerst die Konvergenz zu prüfen.

Wir führen nun folgende Reihenentwicklungen ein

$$\begin{aligned} \phi(x) &= (\varphi_0 + i B \varphi_1 - \frac{B^2}{2} \varphi_2) (1 + i B x - \frac{B^2}{2} x^2) \\ \mathcal{J}(x) &= (j_0 - i B j_1) (1 + i B x - \frac{B^2}{2} x^2) \end{aligned}$$

wobei die arphi und j Funktionen von x sind.

Nun berechnen wir

$$div = \frac{d}{dx} \left[(j_0 - i B j_1) (1 + i B x - \frac{B^2}{2} x^2) \right]$$

und erhalten die Leckage L durch Integration über die Zelle, und einige anschließende Umformungen

$$\mathcal{L} = \int div \int dx = \mathcal{B}^2 \left[\int j_1 dx + \int x \frac{dj_1}{dx} dx \right]$$

$$(14)$$

$$(14)$$

Die Bilanzgleichung (9) nimmt in dieser Näherung, die fortan als "Diffusionsnäherung" bezeichnet wird, die Form an

$$\int div \int dv = \int (\lambda v \Sigma_{f} - \Sigma_{a}) \left(\varphi_{0} - \frac{B^{2}}{2} (x^{2} \varphi_{0} + 2x \varphi_{f} + \varphi_{2})\right) dV \quad (15)$$

$$cell \qquad cell$$

Daraus folgt die Definition des DK in der Diffusionsnäherung (Diffusions-Approximation, DA)

$$\mathcal{D}_{L} = \frac{\int j_{1} dx + \int x \frac{dj_{1}}{dx} dx}{\int \phi^{\mathcal{D}A} dx}$$
(16)

Die zugehörigen Wirkungsquerschnitte sind

$$\overline{\Sigma}_{y}^{DH} = \frac{\int \overline{\Sigma}_{y} \phi^{DH} dx}{\int \phi^{DH} dx}$$
(17)

wobei der Fluß in dieser Näherung durch

$$\phi^{\mathcal{D}\mathcal{P}} = \varphi_0 - \frac{\mathcal{B}^2}{2} \left(\chi^2 \varphi_0 + 2\chi \varphi_1 + \varphi_2 \right) \tag{18}$$

gegeben ist.

Die hier definierten Größen sind innerhalb der erforderlichen Genauigkeit, d. h. bis zu Termen proportional zu B^2 in der Neutronenbilanz, in sich konsistent, und geben die wahre Leckage bzw. die wahren Raten an. Sie sind außerdem mit den Größen k_w und M² verträglich. Wenn die Position des Zellmittelpunkts aus physikalischen Gründen festliegt, sind sie auch eindeutig. Sie sollten also im Prinzip für Diffusionsrechnungen verwendet werden.

- Zunächst ist ein Kommentar zur Normierung angebracht. In (16) und (17) wurde, wie dies physikalisch naheliegt, auf den bucklingabhängigen Zellfluß (in Diffusionsnäherung) normiert. Es ist zu bemerken, daß für eine Gleichung der Form (15) ohne äußere Quelle die Normierung im Prinzip beliebig ist. Man kann z. B. auf den bucklingunabhängigen Fluß $arphi_{
m O}$ normieren. Die Definition der Verhältnisse k und M² bleibt dabei erhalten. Damit wird man nach Hughes /4/ auf die als "Benoist corrected" bezeichneten Größen geführt, die sich also nur in der Normierung von unseren unterscheiden. Zu beachten ist jedoch, daß bei Anwesenheit von Quellen, die nicht aus der betrachteten Energiegruppe stammen (als z. B. Moderationsquelle im Multigruppenfall) nur unsere Definition (17) auf den wahren Zellfluß führt. Die Normierung auf $arphi_{_{
m O}}$ stört die Bilanz zwischen Quellneutronen und Stoßrate bzw. Leckage. Die Definition "Benoist corrected" entspricht also nicht der richtigen Flußnormierung. Dies gilt jedoch nur für die Wirkungsquerschnitte (17). Da der Leckage-Term proportional zu B 2 ist, kann der DK auf $\phi^{ extsf{DA}}$ oder auf $arPhi_{ extsf{O}}$ normiert werden. Im Rahmen der hier behandelten Näherung sind beide Definitionen gleichwertig.

Hughes kam in seiner Arbeit zu dem Schluß, daß im Rahmen der Definition "Benoist corrected" die "Migration area" M^2 nicht mit D/Σ_a übereinstimmt; es ist eine Korrektur erforderlich, um eins in das andere überzuführen. Dieses Ergebnis widerspricht scheinbar unserer Behauptung der Konsistenz der obigen Definitionen (16) und (17). Der Schluß von Hughes ist jedoch dadurch bedingt, daß seine Definition von k_{∞} (als Eigenwert des Gitters für B = 0) und die daran geknüpfte Definition von M^2 für die Gitterberechnung nicht zweckmäßig sind. Zweckmäßiger, weil mit der Definition der zellogemittelten Größen verträglich, ist unsere Definition (11). Im Anhang wird dieser Punkt im einzelnen erläutert. Zu bemerken ist, daß im homogenen Fall beide Definitionen identisch sind.

Für Routinerechnungen wäre eine Auswertung der angegebenen Definitionen relativ aufwendig. Um die Wirkungsquerschnitte nach (17) zu berechnen, müssen außer der Flußverteilung φ_0 für B = 0 auch die Verteilungen φ_1 und φ_2 berechnet werden, außerdem sind die Wirkungsquerschnitte B²-abhängig. Die meisten praktisch angewandten Methoden basieren deshalb auf einer einfachen Definition, die als "Benoist uncorrected" (BU) bekannt ist /4/. Man kann zeigen /4/, daß in der Bilanz (15) folgende Terme einander gleich sind

$$\int x \frac{dj_1}{dx} dx = -\frac{1}{2} \int (\lambda v \Sigma_f - \Sigma_a) (x^2 \varphi_0 + 2x \varphi_1) dx$$

Läßt man diese Terme weg, dann kommt man auf die Definition

$$\begin{aligned}
\overline{\mathcal{D}}_{\perp} &= \frac{\int j_{\perp} dx}{\int \varphi_{0} dx} \tag{19} \\
\overline{\mathcal{L}}_{y} &= \frac{\int \overline{\mathcal{L}}_{y} \left(\varphi_{0} - \frac{\overline{\mathcal{B}}^{2}}{2}\varphi_{2}\right)}{\int \varphi_{0} dx} \tag{20}
\end{aligned}$$

Diese Größen erfüllen die Bilanz und führen daher auf den (bis zur Ordnung B²) richtigen Eigenwert. Die Einzelterme der Bilanzgleichung, d. h. die Leckage aus der Zelle bzw. die Raten werden jedoch nicht richtig wiedergegeben. Der DK (19) stellt jedoch eine wichtige physikalische Größe dar: Sie führt auf die quadratisch gemittelte Diffusionslänge, d. h. den Weg, den ein Neutron von der Entstehung bis zur Absorption zurücklegt. Der DK (19) läßt sich weiter vereinfachen; mit einigen zusätzlichen Annahmen wird man auf die Formel (1) geführt, die in dem Zellprogramm KAPER verwendet wird.

Die Mittelung der Wirkungsquerschnitte in KAPER ist B²-unabhängig, also nochmals vereinfacht gegenüber (20). Die richtige Normierung der Gruppenflüsse bei gegebenen Moderationsquellen erhält man aus folgender Überlegung: Die Bilanz

$$\int \sum \phi dV + \int div \int dV = \int Q dV$$

ell cell cell

cell kann geschrieben werden

$$\overline{\Sigma}\overline{\phi} + D\overline{S}^2\overline{\phi} = \overline{Q}$$

Mit dem DK aus (1) und dem gemittelten $\overline{\Sigma}$ erhält man die richtige Normierung, wenn die Stoßwahrscheinlichkeiten mit dem Faktor

$$\frac{\overline{\Sigma}}{\overline{\Sigma} + \mathcal{D}\mathcal{B}^2}$$
(21)

multipliziert werden. Die Flußverteilung in der Zelle ist also ϕ_0 , die Flußnormierung wird durch den Faktor (21) richtigestellt.

Eine weitere Definition des DK, die auf Deniz und Gelbard zurückgeht, wird ebenfalls in /4/ diskutiert. Dabei werden in der Bilanzgleichung alle B^2 -abhängigen Terme der "Leckage" zugeschlagen, so daß die Wirkungsquerschnitte in Strenge von B^2 unabhängig werden. Auf diese Definition soll jedoch hier nicht näher eingegangen werden.

Zu betonen ist, daß die Unterschiede zwischen den verschiedenen Definitionen für die optisch dünnen Zellen schneller Reaktoren (solange die Zellen mit Natrium gefüllt sind) meist vernachlässigbar klein sind. Die obigen Diskussionen haben daher im Rahmen der Physik schneller Reaktoren nur die Bedeutung einer prinzipiellen Klarstellung. Im Unterschied dazu können sich diese Definitionen für große Graphitreaktoren wesentlich unterscheiden. Ein anderes, für die praktische Rechnung viel wichtigeres Problem bei schnellen Reaktoren ist die Behandlung von Void-Zellen, bei denen die Entwicklung nach B^2 u. U. nicht konvergiert. Darauf wird im nächsten Abschnitt eingegangen. 3. Anisotrope Diffusion in Void-Gittern $(B^2$ -abhängig)

In diesem Abschnitt wird an Hand der im INR-Kolloquium gezeigten Folien zunächst die Problemstellung erläutert, danach werden die vorliegenden Methoden bzw. Codes kurz vorgestellt. Dabei wird grundsätzlich ein ideales Gitter betrachtet, d. h. Einbauten wie Elementkästen etc. werden nicht berücksichtigt.

Erläuterung der Problemstellung am Beispiel der parallelen Leckage in einem Plattengitter.

- Gegeben: Idealisiertes (unendlich ausgedehntes) Plattengitter mit Buckling in z-Richtung (Fig. 2, Folie 1).
- Annahmen: Fundamentale Annahme der Zell-Homogenisierung: Faktorisierung der Quelldichte in eine globale Verteilung und eine Mikro-Verteilung mit der Periodizität der Zelle (Folie 2, Gl. (1)). Die totale Quelle q(x) ist die Summe aus Spalt-, Streu- und Moderationsquelle.

- Zusätzliche Annahme: Isotrope Streuung

In der integralen Transportgleichung (2) ist $\widetilde{\Sigma R}$ die optische Weglänge zwischen Quellpunkt r' und Aufpunkt r. Die Integrationen laufen über das als unendlich ausgedehnt anzusehende Gitter. In der Schreibweise (3) für die Stoßdichte wird klar, wie die Stoßwahrscheinlichkeit P zu definieren ist. Die Bilanzgleichung (4) führt zur Definition des DK D_Z über die Leckage (Folie 3).

Im Prinzip kann aus Gl. (3) und (5) der DK <u>exakt</u> berechnet werden; die Rechnung ist jedoch aufwendig. Die klassische Auswertung erfolgt deshalb über eine Reihenentwicklung von $\cos(B\Delta z)$ bis zu Termen B². In dieser Näherung ist die obige Definition äquivalent zu der von Benoist. Während das Integral in (3) stets konvergiert, divergiert jedoch der Term mit $(\Delta z)^2$ in der Reihenentwicklung im Void-Fall. Um dies zu zeigen, nimmt man ein 2-Zonen-Gitter an mit q = 0 und Σ = 0 in Zone 2. Um die Divergenz zu sehen, führt man zweckmäßig eine Variablen-Transformation durch. Die Rechnung läuft rein formal und ist in Folie 4 skizziert. Also: B²-unabhängige Behandlung versagt im Void-Fall.

Allgemeiner als hier gezeigt gilt:

- Versagt immer dann, wenn Void-<u>Ebenen</u> vorhanden sind (z. B. Gasbrüter) (Folie 1, Fig. 3)
- Funktioniert aber bei leeren zylindrischen Kühlkanälen (z. B. Kontrolstab-Follower), bei denen unendlich lange Flugwege nur in einer Richtung existieren (nicht in einer Ebene).

Damit ist die Notwendigkeit klar, für Void-Gitter die B²-Abhängigkeit zu berücksichtigen. Dieser Punkt wurde zuerst von Köhler und Ligou bei ihren Arbeiten für Gasbrüter erkannt /8/.

Ich möchte nun einen Überblick über die Methoden geben, die für Void-Gitter entwickelt wurden.

In Folie 5 sind die verschiedenen Methoden und ihre wichtigsten Eigenschaften zusammengestellt. Einige davon sollen etwas näher erläutert werden.

A. Plattengitter (z. B. SNEAK)

Beim Plattengitter weicht der senkrechte DK nur wenig (typisch ≤ 0.5 %) vom homogenen Wert ab; er kann nach der Standard-Formel (1) im ersten Abschnitt berechnet werden.

Das Problem ist die Berechnung des parallelen DK im Void-Fall.

Die eigene Methode (Fischer 1981, /11/) geht davon aus, die Funktion $\cos(B\Delta z)$ <u>nicht</u> in eine (divergente!) Potenzreihe zu entwickeln, sondern durch <u>periodische</u> Funktionen anzunähern; die Konvergenz bleibt dabei erhalten. Folie 6 zeigt das Prinzip. Die Taylor-Entwicklungen der beiden Seiten stimmen bis zur Ordnung C² überein. Die Integration der Näherungsfunktionen führt auf die Exponentialintegrale E₁ und E₃ (allerdings mit komplexen Argumenten), deren mathematische Eigenschaften gut untersucht sind. Damit liegt eine Näherung vor, die

- auch für Void-Zellen konvergiert (und natürlich für den Na-in-Fall)
- auf mathematisch gut handhabbare Funktionen führt, und damit erlaubt, praktisch beliebige Plattenzellen zu behandeln.

Diese Methode wird in dem Code PARDON angewendet, der gegenwärtig als Stand-alone-Code vorliegt.

Typische Ergebnisse für eine 2-Plättchen-Zelle sind in Folie 7 gezeigt. Plättchendicken: 0.6 cm/0.6 cm. Summe der Querschnitte $\Sigma_1 + \Sigma_2 = 0.4 =$ const, d. h. D_{hom} hat für alle Fälle denselben Wert.

B. Stabgitter (SNR-300, Gasbrüter)

Die Geometrie eines Stabgitters ist viel komplizierter als ein Plattengitter.

Die einfachste (klassische) Methode besteht in der Zylindrisierung der Zelle (Folie 1, Fig. 3), d. h. der Einführung eines zylindrischen Zellrandes mit weißen Randbedingungen. Das Problem ist damit erheblich vereinfacht und künstlich eindimensional gemacht, die B²-Abhängigkeit ist unterdrückt. Die klassische Benoist-Formel (1) (Abschnitt 1) kann dann angewandt werden, mit folgendem Produktansatz für die Stoßwahrscheinlichkeiten:

$$P_{ij}(gitter) = P_{ij} + P_{ib}P_{bj}\left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} P_{bb}\right]$$

dabei ist P_{ib} die Wahrscheinlichkeit, daß ein Neutron aus Zone i die Zellgrenze ("boundary") erreicht; P_{bj} und P_{bb} sind die Wahrscheinlichkeiten, daß ein in die Zelle eindringendes Neutron einen Stoß in Zone j macht, bzw. die Zelle ohne Stoß durchläuft.

- Die Methode liefert gute Ergebnisse für Na-gefühlte Zellen.

- Im Void-Fall ist sie nicht gut begründet. Die 2-D-Void-Ebenen werden künstlich abgeschnitten. Die fiktive Zellgrenze liegt im Void-Bereich. Annahmen über isotropen Fluß sind deshalb fragwürdig.

Verbesserung:

Eine genaue Behandlung z. B. des 6-Eck-Gitters erfordert ein aufwendiges numerisches Verfahren, bei dem für jede Flugbahn die Schnittpunkte mit den Brennstäben für die Berechnung der Länge des Flugweges gesucht werden müssen. Danach ist über die Winkelverteilung der Flugbahnen zu integrieren.

Solche Methoden sind in der Literatur bekannt (DIFFAX, Eisemann, Benoist 84). Es soll nun geprüft werden, welche Wege gangbar sind, um bei KfK eine geeignete Methode zu etablieren.

- Im Prinzip kann die Entwicklung nach periodischen Funktionen auf den Stabgitter-Fall ausgedehnt werden. Dies wurde jedoch wegen des dazu nötigen Aufwandes nicht durchgeführt.
- DIFFAX: Im Prinzip verfügbar, aber Austesten und verschiedene Erweiterungen nötig (behandelt nur den Void-Fall).
- Eisemann: Läuft bei KfK, aber B²-Abhängigkeit ist unterdrückt, und niemand weiß wie. Damit ist die physikalische Bedeutung der Ergebnisse nicht recht klar.
- Ein gut gangbarer Ausweg ergab sich, als Benoist vor kurzem eine Methode vorschlug, die auch für Void-Zellen gilt (axial und radial) (Benoist 84) /11/, die allerdings noch eine spezifische Näherung enthält.

Um dies zu erläutern, muß die Benoist-84-Methode kurz diskutiert werden. Ausgangspunkt ist eine sinngemäß erweiterte klassische Benoist-Formel, die für den 2-Zonen-Fall in Folie 8 angegeben ist. Nur die <u>eine</u> Größe P_{cc} ist B-abhängig.

Um den Void-Fall handlicher zu formulieren, werden die Größen Q_k und Q'_k eingeführt. Sie sind auch im Void-Fall ungleich Null. Benoist widmet der

Berechnung von Q_k (das B²-abhängig berechnet werden muß) große Sorgfalt. Diese Größe ist durch ein 4-faches Integral definiert (Folie 8). g(ρ) ist die Sehnenlängeverteilung im Moderator in der x-y-Ebene. g(ρ) hat einen "asymptotischen" und einen "endlichen" Teil. Der asymptotische Teil ist dafür verantwortlich, daß für den Fall B=0, Σ_c =0 der DK unendlich groß wird. Das mittlere Quadrat der Sehnenlängen ist ebenfalls unendlich, d. h. $\rho^2 \rightarrow \infty$. g_o(ρ) ist recht umständlich aus geometrischen Überlegungen (Schnittpunkte mit Stäben) zu berechnen.

Zur näherungsweisen Berechnung von Q_z macht Benoist einen Ansatz (Folie 8), bei dem die B-Abhängigkeit nur im $\lim_{C} \Sigma \to 0$ (im asymptotischen Teil) mitgenommen wird.

Der Term Q'_k erfaßt die Neutronen, die durch mindestens einen Brennstab gehen. Diese Größe kann für B = 0 berechnet werden. Benoist verwendet in der Arbeit zunächst den üblichen Produktansatz. Im Anhang gibt er jedoch eine verbesserte Darstellung an, bei der der Produktansatz nur in der x-y-Ebene gemacht wird. Darauf kann aber nicht näher eingegangen werden.

Der Grund, weshalb diese Methode hier vorgestellt wurde, ist folgender: Hier wird mit der Sehnenlängenverteilung $g(\rho)$ für die Kühlmittel-Zone gearbeitet; die Verteilung wird numerisch für diese komplizierte Geometrie berechnet.

Nun kann man auf eine alte, schon etwas "angestaubte" Arbeit von Sauer zurückgreifen /20/, in der einfache <u>analytische</u> Näherungen für komplizierte Sehnenlängenverteilungen vorgeschlagen wurden. Für die Kühlkanalzone eines 6-Eck-Gitters wird eine einfache Exponential-Funktion für f(1) angegeben (Folie 9), wobei t ein Anpassungsparameter ist.

Vorstellung: - 1 < t kommt nicht vor - die Funktion nimmt ab für große 1

t wird nach Sauer so angepaßt, daß das logarithmische Moment der Verteilung, $\ln 1/\overline{1}$, mit numerisch (und Monte Carlo) genau berechneten Werten übereinstimmt. Es liegt nun nahe, die Benoist-Methode unter Verwendung der Sauer'schen Ideen zu vereinfachen. Dazu muß ein geeigneter Ansatz für $g(\rho)$ gemacht werden. Man kann dafür die näherungsweise Verteilung (Folie 9) annehmen, die folgende Eigenschaften hat:

- Der 1. Term zeigt das richtige asymptotische Verhalten (große ρ)
- Der 2. Term ist (nach Sauer) eine brauchbare Näherung für relativ kleines $\boldsymbol{\rho}$
- Sehnenlängen < t kommen nicht vor.

Dieser Ansatz wurde bei KfK durchgeführt; er umfaßt

- Anpassung von t (nach Sauer) an numerisch berechnete Dancoff-Faktoren
- Ausarbeitung der Benoist-Formeln /10/ mit der obigen Verteilung (zusätzliche Annahme: D_Z unabhängig von B_r, D_r unabhängig von B_Z).
 <u>Wichtig</u>: Verbesserte Berechnung von Q_z'
- Programmierung der Formeln.

Ohne auf Einzelheiten einzugehen, will ich die B_Z -Abhängigkeit von D_Z angeben, wie sie aus dieser Gleichung resultiert:

$$D_{2}(B_{2}) = \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{\varepsilon^{2}}{s} \left[\frac{1}{2} \ln \frac{4}{B_{2}^{2} t^{2}} - \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right]$$

Dabei ist s der Abstand der Stabmitten, ε die Dicke der "Void-Ebenen" (Fig. 3). Diese Formel stimmt im wesentlichen mit der von Köhler-Ligou /8/ angegebenen überein; allerdings ist t durch $\varepsilon/2$ zu ersetzen.

Ergebnisse für D_{Z} eines Gasbrüters (Folie 10)

- Als Referenzlösung ist der Code DIFFAX anzusehen, der eine vollnumerische Berechnung für D_Z liefert.
- Die vereinfachte Benoist-Methode gibt (im interessanten Bereich) sehr gute Übereinstimmung mit DIFFAX.
- Die Zylindrisierung unterschätzt den DK. (Die Werte in Folie 10 wurden nicht durch strenge Zylindrisierung, sondern durch näherungsweise Berechnung von Dancoff-Faktoren für den Kühlkanal erhalten).

Damit haben wir eine Methode verfügbar, die für <u>idealisierte</u> Void-Gitter gute Ergebnisse liefert.

Zu beachten ist: Einbauten (z. B. Elementkästen) sowie "shift" vermindern den DK. Die berechneten Werte sind also als obere Grenzwerte aufzufassen.

Zusammenfassung zum Punkt "Void-Gitter"

- Die anistrope Diffusion in idealisierten Void-Gittern (Platten und Stäbe) kann mit den heute bekannten (z. T. aufwendigen) Methoden berechnet werden.
- Bei KfK steht für Plattengitter ein vollwertiges und flexibles Verfahren (PARDON) zur Verfügung. Für quadratische und hexagonale Stabgitter wurde eine wenig aufwendige Näherung (2-Zonen) durch Vereinfachung der Methode von Benoist entwickelt, die aber recht genaue Ergebnisse liefert.

Anhang A. Kommentar zur Buckling Methode

Die Buckling-Methode geht davon aus, daß die Flußverteilung (oder auch Quellverteilung) in einem als unendlich ausgedehnt gedachten Gitter als Produkt einer globalen Verteilung cos Bx und einer "Zellfeinstruktur" angesetzt werden kann. Die Methode kann wohl als etabliert gelten. Um jedoch zu vermeiden, daß der Gedanke an negative Flüsse Unruhe unter den Reaktorphysikern auslöst, sollen hier einige Kriterien angegeben werden, die nach Ansicht des Autors für die Brauchbarkeit einer Näherungsmethode zur Lösung der Neutronen-Transportgleichung zu stellen sind. Dabei dürfte Einigkeit darüber herrschen, daß trotz der heutigen Computer-Kapazitäten noch Näherungsmethoden nötig sind.

Eine Methode erscheint mir gerechtfertigt, wenn sie folgende Kriterien erfüllt:

- A. Die Methode beschreibt die wahre physikalische Flußverteilung in bestimmten, wichtigen Bereichen des Reaktors in guter Näherung.
- B. Die Methode führt zu einer erheblichen Reduktion des für die Lösung der Gleichungen erforderlichen Rechenaufwandes.
- C. Als Nachteil wird in Kauf genommen, daß es Bereiche gibt, die i. a. weniger wichtig sind, in denen die Methode schlechte N\u00e4herungen bzw. unphysikalische Ergebnisse liefert.

Aus C folgt, daß der Vorteil der einfacheren Lösung damit bezahlt werden muß, daß man für jede Klasse von Problemstellungen die Gültigkeit der Methode überprüft, und daß bei unsachgemäßer Anwendung Fehlinterpretationen der Ergebnisse möglich sind.

Es scheint mir wichtig, sich klarzumachen, daß der Reaktorphysiker tagtäglich mit einer solchen Methode umgeht, nämlich der Diffusionsnäherung. Häufig ist er sich dabei gar nicht dessen bewußt, wie "unphysikalisch" gewisse Begriffe wie Extrapolationslänge, Fluß Null am Corerand eigentlich sind. Die Gefahr von Fehlinterpretation, z. B. bei Kontrollstabrechnungen, ist wohl allgemein bekannt. Und nun zur Bucklingsmethode:

- Sie liefert mit Sicherheit gute Ergebnisse in Bereichen, in denen der Fluß näherungsweise die Verteilung des Fundamentalmodes hat (Punkt A).
- Sie stellt eine erhebliche Vereinfachung dar. Man muß sich klar machen, daß sie als einzige (neben der praktisch fast als äquivalent anzusehenden asymptotischen Methode) eine <u>exakte</u> Lösung der Transportgleichung über die Gl. (6) in Abschnitt 2 liefert (Punkt B). Würde man die Integration nur bis zu der Grenze ausdehnen, an der der globale Fluß "Null wird", dann müßte man komplizierte und undurchsichtige Randeffekte berücksichtigen. Übrigens stellt bereits die Idee, die Integration bis zu dieser Grenze auszudehnen, eine Fehlinterpretation der Diffusionsnäherung dar!
- Auch hier gibt es offensichtlich Bereiche, in denen die Näherung nicht gilt (Punkt C).

Zweifellos gilt die Methode nicht (wie übrigens auch die Diffusionsnäherung) in der Nähe von Zonenrändern. Randeffekte werden auftreten, und wurden auch schon untersucht /17/. Es ist jedoch zu erwarten, daß bei schnellen Reaktoren Fehler nur in kleinen Bereichen in der Nähe von Rändern auftreten, weil die Zelldicke im allgemeinen nur einen Bruchteil der freien Weglänge ausmacht, so daß sich die periodische Mikroverteilung bis nahe an den Rand fortsetzt. Überdies ist zu erwarten, daß kleine Abweichungen von der Verteilung des Fundamentalmodes die Gültigkeit der Methode nicht wesentlich beeinträchtigen.

Um Mißverständnisse zu vermeiden: Diese Aussage bezieht sich nur auf die Behandlung periodischer Zellgitter. Die Erfassung von Einbauten (z. B. Elementkästen) ist ein wichtiger Punkt, und hier ist eine Verbesserung unserer Methoden wünschenswert. Das Ergebnis von Hughes /4/, nach dem der DK "Benoist corrected" nicht gleich $M^2 \Sigma_a$ ist (Gleichung (16) in /4/), kann nach Ansicht des Autors durch zweckmäßige Definition von k_{∞} und M^2 vermieden werden. Die Argumentation wird im folgenden kurz umrissen.

Hughes geht von der Gleichung

$$\underbrace{\mu \frac{\partial \underline{F}}{\partial x} + \Sigma \underline{F} - \Sigma_{s} \underline{\Phi}_{s}}_{S \underline{\Phi}} = \frac{\nu \Sigma_{f}}{keff} \underline{\Phi}_{s} \qquad (B-1)$$

aus, und erhält mit dem Ansatz

$$\underline{\Phi} = \varphi exp(\lambda Bx)$$

die Gleichung

$$S \varphi + i B \mu \varphi = \frac{v \xi_f}{keff} \varphi_0$$
 (B-2)

Bei kleinem B liegt eine Lösung dieser Eigenwertgleichung durch Störungsrechnung nahe. Die ungestörte Gleichung lautet

$$S \varphi = \frac{v \Sigma_f}{k_0} \varphi_0 \tag{B-3}$$

Der Eigenwert k $\mathop{\rm des}_{O}$ ungestörten Problems ist nicht identisch mit dem k $_{\infty}$ des gestörten Problems.

Entwickelt man φ nach Potenzen von B und setzt in (B-2) ein, dann tritt die Differenz auf

$$\left(\frac{1}{k_{eff}} - \frac{1}{k_{o}}\right) v \xi_{f} \varphi_{o} = \frac{5k}{k_{eff} k_{o}} v \xi_{f} \varphi_{o}$$

Die Eigenwert-Differenz δk ist $\sim B^2$; also $\delta k = c B^2$. Wir definieren nun nicht, wie Hughes, $M^2 = c$, sondern

$$M^{2} = \mathcal{D}^{BC} / \overline{\Sigma}_{a}$$
 (B-4)

Die Gleichung (16) bei Hughes wird dann

$$\frac{\mathcal{D}^{BC}}{\overline{z_{a}}} = C + \frac{1}{2\overline{z_{a}}\overline{\varphi_{o}}} \int (\overline{z_{a}} - \frac{v\overline{z_{f}}}{k_{o}})(x^{2}\varphi_{o} + 2x\overline{y_{o}} + y_{o})dV$$

Diese Cleichung gibt also, zusammen mit (B-4), die Beziehung zwischen M^2 und dem Koeffizienten c. Aus der Bilanzgleichung folgt

$$k_{p} = 1 + M^{2}B^{2} = v\overline{z}_{f}/\overline{z}_{a}$$

d. h. k ist das Verhältnis von Reaktionsraten in der (gestörten) Zelle.

- /1/ D. J. Behrens, Proceedings of the Phys. Society, Section A, Vol. 62, 607 (1949)
- /2/ P. Benoist, "Théorie du Coefficient de Diffusion des Neutrons dans un Réseau Comportant des Cavités," CEA-R-2278 (1964). Siehe auch Nucl. Sci. Eng. 34, 285 (1968)
- /3/ E. M. Gelbard, Nucl. Sci. Eng. 54, 327 (1974)
- /4/ R. P. Hughes, Nucl. Sci. Eng. 67, 85 (1978)
- /5/ E. W. Larsen und R. P. Hughes, Nucl. Sci. Eng. 73, 274 (1980)
- /6/ R. T. Chiang und J. J. Dorning, Trans. ANS 33, 779 (1979)
- /7/ J. V. M. Rao und S. M. Lee, Nucl. Sci. Eng. 82, 71 (1982)
- /8/ P. Köhler und J. Ligou, Nucl. Sci. Eng. 54, 357 (1974)
- /9/ E. Eisemann, "Anisotrope Diffusion bei gasgekühlten schnellen Brutreaktoren," KfK-1577 (1972)
- /11/ E. A. Fischer, Nucl. Sci. Eng. 78, 227 (1981)
- /12/ C. J. Gho, "Homogénisation du Coefficient de Diffusion," Disse tation, Université Scientifique et Médicale, Grenoble (1983)
- /13/ J. L. Rowlands, C. Eaton, Nucl. Sci. Eng. 76, 263 (1980)
- /14/ M. Nakagawa, H. Inoue, Nucl. Sci. Eng. 83, 214 (1983)

- /15/ V. C. Deniz, "A New Consistent Definition of the Homogenized Diffusion Coefficient of a Lattice," Proc. of the IAEA Specialists's Meeting Homogenizsation Methods in Reactor Physics, Lugano (1978), IAEA-TECDOC-231, p. 521
- /16/ R. J. J. Stamm'ler and M. J. Abbate, "Methods of Steady-State Reactor Physics in Nuclear Design", Academic Press, London (1983)
- /17/ R. Böhme, "Integrale Transporttheorie mit linearer Anisotropie der Streuung zur Berechnung der Neutronenverteilung in endlichen Plattenanordnungen Schneller Reaktoren," KfK-2501 (1977)
- /18/ E. M. Gelbard and R. Lell, Nucl. Sci. Eng. 63, 9 (1977)
- /19/ P. Köhler, Nucl. Sci. Eng. 57, 333 (1975)
- /20/ A. Sauer, Nucl. Sci. Eng. 16, 329 (1963)



Fig. 1: ZPPR Test Problem Configurations, Showing Two Sets of "Cell Boundaries." Plates of Types I, II and III Alternate in an Infinite Lattice.



Fig. 2 : Periodisches Plattengitter mit parallelem B



Fig. 3: Hexagonales Stabgitter

Beispiel: Parallele Leckage im Plattengitter

Annahme: - isotrope Streuung

- Fundamental-Mode, d. h.
$$q(x,z) = q(x)\cos Bz$$
 (1)

Integrale Transportgleichung

$$\begin{aligned}
\phi(\tau) &= \int d\mathcal{V}' q(\tau') \frac{e^{-\tilde{\Sigma}R}}{4\tilde{\kappa}R^2} \\
\int_{\mathcal{Z}}(\tau) &= \int d\mathcal{V}' q(\tau') \mathcal{D}_{2} \frac{e^{-\tilde{\Sigma}R}}{4\tilde{\kappa}R^2}
\end{aligned}$$
(2)

.

$$\Sigma(x)\phi(x) = \cos Bz \int dx' q(x') \int dy' \int dz' \frac{\Sigma(x)e^{-\Sigma R}}{4\pi R^2} \cos (B\Delta z) \quad (3)$$

$$J_{z}(x) = \sin Bz \int dx' q(x') \int dy' \int dz' \cos \sqrt{\frac{e^{-\Sigma R}}{4\pi R^2}} \sin (B\Delta z)$$

$$R^{2} = (\Delta x)^{2} + (\Delta y)^{2} + (\Delta z)^{2}$$

<u>Bilanz</u>:

$$\int \Sigma(x) \phi(x,z) d\mathcal{V} + \int J_{z}(x,z) dS = \int q(x,z) d\mathcal{V}$$

$$\overset{\text{StoBrate}}{\overline{\Sigma}_{t} \overline{\varphi} \mathcal{V}} \qquad \overset{\text{Leckage}}{\mathcal{D} \mathcal{B}^{2} \overline{\varphi} \mathcal{V}} \qquad \overset{\text{Quelle}}{q \mathcal{V}}$$

$$(4)$$

Definition von \overline{D}_z durch die Annahme:

$$D_z B^2 \overline{\phi} V = Leckage$$

Daraus:

$$\frac{D_2 B^2}{\overline{z} + D_2 B^2} = \frac{1}{2} - \frac{\int dx \int dx' q(x') P(x', x; B)}{\int dx q(x)}$$

Klassische Auswertung über Reihenentwicklung:

- Diese Methode ist äquivalent zu Benoist (1964).
- Im Void-Fall divergiert wegen Faktor Δz^2 das Integral für den Fluß (zu zeigen über Variablen-Transformation, siehe Folie 4).
- Die Reihenentwicklung, die auf ein B²-unabhängiges D_z führt, ist also im Void-Fall nicht gültig.



(5)

Divergenz der Reihenentwicklung im Void-Fall

(für den Fall einer 2-Zonen-Plattenzelle mit $\Sigma_2 = 0$)

Reihenentwicklung:

 $(B \Delta 2) = 1 - \frac{1}{2} (B \Delta 2)^2$

Variablentransformation

$$t = \frac{R}{\Delta x} = \frac{1}{\cos \vartheta}; \quad S = \Delta x t_g \vartheta$$

$$\Delta z = g \cos \varphi = \Delta x t_g \vartheta \cos \varphi = \Delta x (t^2 - 1)^{1/2} \cos \varphi$$

(siehe Figur auf Folie 6)

Quelle in Zone 1: $q = \Sigma_{1}\phi$, in Zone 2: q = 0Beitrag zum Leckage-Term (x' in Zone 1, x in Zone 2)

$$\mathcal{D}\mathcal{B}^{2}\phi(r) = \frac{\omega \mathcal{B}^{2}}{4\pi} \sum_{A} \phi \int dx' \int d\varphi \int \frac{dt}{t} e^{-\sum_{A} (x_{A} - x')t} \frac{(\mathcal{B}\Delta x)^{2}}{2} (t^{2} - 1) \cos^{2}\varphi$$

$$= \frac{\sum_{A} \phi}{8} \mathcal{B}^{2} \omega \mathcal{B}\Delta^{2} \int \frac{dt}{t} (t^{2} - 1) \int du (u + \delta x)^{2} e^{-\sum_{A} t u}$$
mit $u = x_{A} - x'; \ \delta x = x - x_{A}; \ \Delta x = u + \delta x$

Der Term mit $(\delta x)^2$ wird

$$(5x)^2 \int \frac{dt}{t} (t^2 - 1) \frac{1}{\Sigma_1 t} (1 - e^{-\Sigma_1 t x_1}) \longrightarrow \infty$$

Dieser Beitrag wird unendlich groß, also divergiert die Reihenentwicklung.

	Köhler-Ligou (1973)	Eisemann (1972)	Benoist (1984)	Fischer (1981)	Gho (1984)	Benoist- Fischer (1984)
Geometrie	Stab (DIFFAX)	Stab	Flatte + Stab	Platte (PARDON)	Stab (TRIFFAX)	Stab
Kühlmittel- Dichte	0	0	beliebig	beliebig	beliebig	beliebig
Zahl der Zonen	2	2	(2) (>2 möglich)	beliebig	(2)	2
Berücksich- tigte B ²	B ² _{ax}	unterdrückt	beide	в ² 11	beide	beide
Methode	num.Intergr. integr. Transport-Gl.	num.Integr.	Sehnenläng Vert.(num.)	Entwicklung nach period. Fkt.	num.Integr. (Verallg. von DIFFAX)	appr.Seh- nenlängen- verteilung (nach Sauer)
Streuung	isotrop	anisotrop	isotrop	isotrop	isotrop	isotrop

.

Eigene Methode: Entwicklung von cos(BAz) nach periodischen Funktionen

Konvergenz auch im Void-Fall gesichert



$$\mathcal{P}(x', x; B) = \frac{\Sigma(x)}{2} \operatorname{Re}\left[E_{1}\left(l + \frac{iB\Delta x}{\sqrt{2}}\right) + E_{3}(l) - E_{3}\left(l + \frac{iB\Delta x}{\sqrt{2}}\right)\right]$$

mit $E_{n} = \int_{1}^{\infty} \frac{dt}{t^{n}} e^{-xt}$

Gut handhabbare und bekannte Funktionen (Exponentialintegrale)



Fig. 1 Normalized Parallel Diffusion Coefficient in a 2-Region Slab Cell vs. Cross Section in Region 2

Methode Benoist 1984 (Stabgitter, 2 Zonen)

$$D_{k} = \frac{1}{3\Sigma_{u}} \left\{ 1 + \frac{V_{c}}{V_{t}} \left(1 - \frac{\Sigma_{c}}{\Sigma_{u}} \right) \left[1 + \left(1 - \frac{\Sigma_{c}}{\Sigma_{u}} \right) \frac{\Sigma_{u}}{\Sigma_{c}} P_{cc,k} \left(B \right) \right] \right\}$$

$$P_{cc,k} = \frac{l_{c}\Sigma_{c}}{2} \left(Q_{k} + Q_{k}' \right)$$

Q_k reduzierte Stoßwahrscheinlichkeit, Neutronen verlassen den Kühlkanal nicht

 Q_k' reduzierte Stoßwahrscheinlichkeit, Neutronen durchlaufen Stäbe

$$\begin{aligned} & \overline{n}_{2} \\ & (\Sigma_{c}, \overline{B}_{2}) = \frac{24}{\pi l_{c}^{2}} \int d\vartheta \cos^{2}\vartheta \int dg g^{2}g(g) \\ & \int \eta d\eta \int d\xi \exp\left[-\int \eta \left(\Sigma_{c} + i \overline{B}_{2} \cos\vartheta\right)g/\sin\vartheta\right] \end{aligned}$$

$$g(g) = g_0 + g_{as}$$

 $gas = \begin{cases} 0 & g < t \\ H/g^3 & g > t \end{cases}$
Zu beachten: $g^2 \rightarrow \infty$

Näherung:

$$Q_{Z}(\Sigma_{c}, B_{Z}) \approx Q_{Z}(\Sigma_{c}, 0) + \frac{\int Q_{Z}(\Sigma_{c}, \alpha_{Z})}{\lim \Sigma_{c} \to 0} \qquad \alpha_{Z} = \frac{B_{Z}}{\Sigma_{c}}$$

Anpassung von $g(\rho)$

Ansatz f(1) für Moderatorzone (Sauer):

$$f(l) = \begin{cases} 0 & l < t \\ e^{-(l-t)/\overline{\ell}} & l > t \end{cases}$$

t (bzw. t/ $\overline{1}$) ist ein freier Parameter.

Eigener Ansatz (Vereinfachung der Benoist-Methode):



- Anpassung von t (nach Sauer) an numerisch berechnete Dancoff-Faktoren

- Ausarbeitung der Formeln mit dieser Verteilung $\begin{bmatrix} D_z & \text{unabhängig von } B_r; D_r & \text{unabhängig von } B_z \end{bmatrix}$

- Programmierung der Formeln.

Damit kann D_z,D_r für idealisiertes Stabgitter bei KfK berechnet werden.

