

BUDAPESTI MŰSZAKI ÉS GAZDASÁGTUDOMÁNYI EGYETEM
ATOMENERGETIKA TANSZÉK

JANCSOVICS JANKA

Az SPNDYN reaktorfizikai kód alkalmazhatóságának
vizsgálata pálcaszintű zónaszámításokra

OTDK dolgozat

Témavezető:
Dr. Babcsány Boglárka
egyetemi adjunktus
Nukleáris Technikai Intézet



Budapest, 2023

TARTALOMJEGYZÉK

Jelölések jegyzéke	iii
1. Bevezetés.....	1
1.1. Célkitűzések.....	1
1.2. Áttekintés.....	1
1.2.1. Számítások elméleti háttere	1
1.2.1.1. Diffúziós transzportközelítés	3
1.2.1.2. SP ₃ transzportközelítés	3
1.2.1.3. Monte Carlo módszer	5
1.2.2. Alapfeltevések	5
2. Szakirodalmi áttekintés	7
2.1. Benchmarkprobléma bemutatása.....	7
2.2. Szakirodalmi áttekintés és alkalmazott referenciák.....	9
3. Benchmark megoldása az SPNDYN kóddal	11
3.1. Hálóérzékenység-vizsgálat	13
3.2. Diffúziós számítás	17
3.3. SP ₃ számítás.....	21
4. Benchmark megoldása a Serpent 2 kóddal	26
4.1. Transzportmegoldás.....	27
4.2. Csoportállandó-generálás	29
4.3. Számítások a generált csoportállandó-készlettel	33
4.3.1. Diffúziós számítás	34
4.3.2. SP ₃ számítás.....	35
5. Összefoglalás.....	38
5.1. Eredmények	38
5.2. Kitekintés.....	39
6. Felhasznált források	40
1. Melléklet: A diffúziós és SP ₃ megoldások fluxuseloszlásai	42
2. Melléklet: A benchmark pontos geometriája és izotóp-összetétele	46
3. Melléklet: Az összeállított Serpent 2 modell inputja	47
4. Melléklet: A Serpent 2 felhasználásával generált csoportállandó-készlet	51

JELÖLÉSEK JEGYZÉKE

Latin betűk

Jelölés	Megnevezés
$\mathbf{r}$	helyvektor
E	energia
t	idő
Q	általános forrástag
v	neutronsebesség
S	külső forrás
$\mathbf{n}$	felületi normális
$\mathbf{j}$	áramsűrűség-vektor
$\mathbf{J}$	neutronáram
G	energiacsoportok száma
e	referenciától való eltérés
p	normált pálcateljesítmény
N	összes pálca száma
k_{eff}	legnagyobb sztatikus sajátérték
D	diffúziós állandó

Görög betűk

Jelölés	Megnevezés
$\boldsymbol{\Omega}$	irányvektor
φ	szögfüggő neutronfluxus
Σ_t	teljes makroszkopikus hatáskeresztmetszet
χ	hasadási spektrum
ν	hasadásonként keletkező neutronok átlagos száma
Σ_f	hasadási makroszkopikus hatáskeresztmetszet
Σ_s	rugalmas szórési makroszkopikus hatáskeresztmetszet
Σ_{in}	rugalmatlan szórési makroszkopikus hatáskeresztmetszet
Φ	szögfüggetlen neutronfluxus
Σ_{tr}	transzport makroszkopikus hatáskeresztmetszet

Indexek, kitevők

Jelölés	Megnevezés
s	határponthoz tartozó index
l	Legendre-polinom indexe
g, h	energiacsoport futóindexe
n	pálcák futóindexe, mátrix elemeinek indexe
átl	átlagérték
ref	referenciaérték

Megjegyzés:

Dolgozatomban gyakran előkerül a referenciától való eltérés fogalma, amely minden esetben relatív eltérést jelent. Amennyiben nem relatív értelemben fordul elő, úgy a referenciától való abszolút eltérés kifejezést használom.

A benchmark megoldását követően az egyes pálcateljesítményeket meghatározott módon normálni szükséges, így a táblázatokban szereplő kazetta- és pálcateljesítmények már normált értékek.

Legtöbbször a fluxus szót használom a szögfüggetlen neutronfluxussal azonos értelemben; amikor a szögfüggő fluxusra célok, a fluxus jelzőjét mindig feltüntettem.

1. BEVEZETÉS

1.1. Célkitűzések

Dolgozatom fő célja, hogy az SPNDYN reaktorfizikai kód alkalmazhatóságát megvizsgálja pálcaszintű zónaszámítások esetén. Ahogy a reaktorfizikai számítások mögött álló számítási kapacitás növekedett, érdekessé vált a kérdés, hogy különböző determinisztikus transzportközelítések és -kódok milyen módon képesek kezelni olyan problémákat, amelyek nagyobb mértékű térbeli homogenizációt nem tartalmaznak. Atomerőművi zónaelemzések legtöbbször kazetta- vagy pálcacellaszintű homogenizációval készülnek, a címben megjelölt C5G7 benchmarkprobléma azonban ilyen szintű homogenizációt nem alkalmaz, pálcaszintű számítások verifikálására ad lehetőséget. Az UO_2 és MOX üzemanyagkazettákból összeállított zónát tartalmazó benchmarkprobléma kétdimenziós, időfüggetlen esetével dolgoztam munkám során.

Az SPNDYN egy végeselem-módszeren alapuló kódrendszer, amely diffúziós, illetve ún. SP_3 transzportközelítéssel old meg reaktorfizikai problémákat. A kód alkalmazhatóságának vizsgálatán kívül szeretném a két transzportközelítést is összehasonlítani ugyancsak a C5G7 benchmarkproblémán keresztül. A benchmark megoldása során hálóérzékenységi vizsgálatot végeztem, hogy megállapítsam az eredmények hálósűrűségtől való függését.

A benchmark leírásban rendelkezésre bocsátott referencia Monte Carlo megoldáson kívül saját referencia transzportmegoldást is számítottam, valamint saját csoportállandókat generáltam a C5G7 hétcsoport problémához a Serpent 2 Monte Carlo kód segítségével. Ez arról adhat információt, hogy a benchmark probléma kellő részletességgel lett-e specifikálva ahhoz, hogy abból referenciát jól közelítő transzportmegoldás legyen számítható. Emellett vizsgálja a Serpent kód alkalmazhatóságát csoportállandó-generálás terén. A csoportállandók generálása azért különösen fontos, mert a való életben előkerülő problémákhoz általában nem állnak rendelkezésre kész csoportállandó-készletek. Ez a feladatrészt túlmutat a benchmarkon; előkészíti, hogy a valós reaktorfizikai problémamegoldások teljes folyamatát elsajátítsam.

1.2. Áttekintés

Dolgozatomban elsőként az SPNDYN reaktorfizikai kód elméleti háttere, számítási metódusai és az azok által alkalmazott reaktorfizikai közelítések kerülnek bemutatásra. Ezt követi a benchmarkprobléma részletes leírása, szakirodalmi áttekintése, majd a számítások elvégzéséhez szükséges lépések, az alkalmazott programok és használatuk rövid összefoglalója. Összehasonlításra kerül a diffúziós és az SP_3 megoldás a megadott referenciával, valamint a két számítási metódus eredményeit egymáshoz is hasonlítom. Kiértékelem továbbá a hálóérzékenységi vizsgálat eredményeit, és a Serpent 2 kóddal futtatott transzportmegoldás pontosságát, valamint a generált csoportállandók alkalmazhatóságát.

1.2.1. SZÁMÍTÁSOK ELMÉLETI HÁTTERE

Atomerőmű esetén az energiatermelő körfolyamatba bevitt hő a reaktorban felszabadult energiából származik, amely a reaktorzónában megvalósuló szabályozott láncreakció eredménye. A hagyományos, fissionos atomerőművi technológia a maghasadás során felszabaduló energiát használja fel energiatermelésre. Az üzemanyag hasadóképes izotópjainak maghasadása nem spontán, hanem indukált folyamat; neutronok váltják ki, így a neutronter megfelelő leírása lényeges. A neutronter jellemzése során leggyakrabban használt mennyiség a neutronfluxus, a neutronter leírására pedig az alábbi, ún. neutrontranszport-egyenlet szolgál:

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \varphi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}, t)}{\partial t} = -\mathbf{\Omega} \cdot \text{grad} \varphi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}, t) - \Sigma_t(\mathbf{r}, E) \varphi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}, t) + Q(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}, t). \quad (1.1)$$

A fenti egyenlet a folyamatok mérlegét fejezi ki. Az egyenlet bal oldala a neutron-sűrűség időbeli változását fejezi ki. Az egyenlet jobb oldalának első tagja a kiszemelt nyalábból való nettó kifolyást írja le. A második tag jelenti az összes lehetséges magreakciót, amelyben a neutron részt vehet, a harmadik, ún. forrástag pedig a neutrontermelő reakciók összeségét fejezi ki. Az első két tag az adott neutronnyalábban lévő neutronok számát csökkenti, a harmadik viszont növeli. A reaktorfizikában leggyakrabban előforduló neutrontermelő reakciók közé soroljuk a maghasadást, a rugalmas és rugalmatlan szórását, valamint külső forrásból is származhatnak neutronok. (Szatmáry, 2007) A forrás tag kifejtett alakját az (1.2) egyenletben láthatjuk.

$$\begin{aligned} Q(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}, t) = & \frac{\chi(E)}{4\pi} \int_0^\infty \int_{4\pi} v(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E') \varphi(\mathbf{r}, E', \mathbf{\Omega}', t) dE' d\mathbf{\Omega}' + \\ & + \int_{4\pi} \int_0^\infty \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \mathbf{\Omega} \mathbf{\Omega}') \varphi(\mathbf{r}, E', \mathbf{\Omega}', t) dE' d\mathbf{\Omega}' + \\ & + \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} \int_0^\infty \Sigma_{in}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) \varphi(\mathbf{r}, E', \mathbf{\Omega}', t) dE' d\mathbf{\Omega}' + \\ & + S(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}, t) \end{aligned} \quad (1.2)$$

A transzportelméletben a vákuum peremfeltétel a következőképpen fogalmazható meg. Ha adott a geometria egy határpontja $\mathbf{r}_s$ koordinátákkal, akkor erre a pontra az alábbi egyenletben megfogalmazott feltételeknek kell teljesülnie:

$$\varphi(\mathbf{r}_s, E, \mathbf{\Omega}, t) = 0, \text{ ha } \mathbf{n}_s \cdot \mathbf{\Omega} < 0, \quad (1.3)$$

ahol $\mathbf{n}_s$ a felület normálvektora az $\mathbf{r}_s$ pontban (Babcsányi, 2021).

A szimmetria peremfeltételhez először is egy új változót szükséges definiálnunk. A $\mathbf{j}(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}, t)$ mennyiség az áramsűrűség-vektor, amely az $\mathbf{\Omega}$ irányvektor és a szögfüggő fluxus szorzataként adódik. A szimmetriaperemen lévő pontokra a parciális áramsűrűség-vektorok egyenlőségét írjuk elő (Babcsányi, 2021).

A transzportegyenlet egy hétváltozós integro-differenciál egyenlet, amelynek egzakt megoldása csak speciális esetekben létezik. Emiatt gyakorlatban az egzakt megoldás lehetőségével nem számolunk. A transzportegyenlet megoldására alkalmazott módszerek két főbb csoportba sorolhatóak.

- I. A transzportegyenlet egy közelítő változatát oldjuk meg determinisztikus módon.
- II. A transzportegyenletet közvetlenül oldjuk meg Monte Carlo módszer segítségével.

A determinisztikus transzport kódok egyik vitathatatlan előnye, hogy a Monte Carlo módszerekhez képest gyors számításokat tesznek lehetővé. Hátrányuk viszont, hogy kevésbé pontosak. Fontos, hogy az egyes közelítő módszerekhez mindig alkalmazási korlátok tartoznak, így például nem vizsgálható felhasználásukkal tetszőlegesen bonyolult geometriai konstrukció. „A Monte Carlo módszer az egyetlen lehetőség nagyon bonyolult, háromdimenziós geometriájú

rendszerek olyan tárgyalására, amelyben nem okoz gondot a rugalmas szórás anizotropiája.” – fogalmaz Szatmáry Zoltán (2000). A Monte Carlo kódok tehát a vizsgálható problémák körét szélesítik. Azonban ezek a kódok differenciális mennyiségek számítására nem alkalmasak, első sorban integrálok kiszámításában hatékonyak (Szatmáry, 2000).

Az SPNDYN végeelem-módszeren alapuló determinisztikus transzportkód, így az általa használt transzportközelítések részletesebben is bemutatásra kerülnek. A Monte Carlo módszerek elméleti hátterét is röviden kifejtem, hiszen a munkám során használt Serpent 2 kód ezzel a módszerrel dolgozik.

1.2.1.1. Diffúziós transzportközelítés

A diffúzióelmélet a transzportelmélet legismertebb és egyben legegyszerűbb közelítése (Szatmáry, 2007). Diffúziós közelítés esetén a fluxust irányfüggés szerint sorba fejtjük, így a fluxus Ω változóját elhagyhatjuk. A sorfejtést a második tagig végezzük el, ezt az (1.4) egyenlet mutatja.

$$\varphi(\mathbf{r}, E, \Omega, t) = \frac{1}{4\pi} \Phi(\mathbf{r}, E, t) + \frac{3}{4\pi} \Omega \mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t) \quad (1.4)$$

Az (1.4) egyenletből következik, hogy a diffúziós közelítés csak a fluxus lineáris anizotrópiáját veszi figyelembe. A második tagban szereplő $\mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t)$ mennyiség a neutronáram.

A diffúzióegyenletben a nettó kifolyást a neutronáram segítségével írhatjuk fel. Tehát az Ω változót akkor lehetséges kiküszöbölni, ha a neutronáramot a skalárfluxus segítségével ki tudjuk fejezni. Ezt az összefüggést a Fick-törvény tartalmazza, melyet az (1.5) egyenletben láthatunk.

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t) = -D(E) \text{grad}\Phi(\mathbf{r}, E, t) \quad (1.5)$$

A $D(E)$ mennyiség a diffúziós állandó. A Fick-törvény felhasználásával a diffúzióegyenlet az alábbi, (1.6) egyenletben látható alakban írható fel, már a szögfüggetlen, ún. skalárfluxussal.

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, E, t)}{\partial t} = \\ = \text{div}[D(E) \text{grad}\Phi(\mathbf{r}, E, t)] - \Sigma_t(\mathbf{r}, E)\Phi(\mathbf{r}, E, t) + Q(\mathbf{r}, E, t) \end{aligned} \quad (1.6)$$

A diffúzióelméletben a vákuum peremfeltételt az alábbi módon értelmezzük. A geometria peremén a $\mathbf{J}_-(\mathbf{r}_s) - \mathbf{r}_s$ a peremen lévő pont koordinátája – parciális áram értéke legyen zérus, tehát a geometria határán a neutronáram felületi normálissal ellentétes irányú összetevője csak nulla lehet. Ez egy ún. Robin-féle peremfeltétel (Szatmáry, 2000).

A szimmetria peremen pedig a parciális áramok egyenlőségét írjuk elő.

Bár a diffúzióegyenlet már könnyen kezelhető, alkalmazásának meglehetősen szigorú korlátjai vannak. A diffúzióelmélet olyan esetekben ad kellően pontos megoldást, amikor a fluxus és a források térbeli változása gyenge, illetve az abszorpció nem jelentős mértékű. Ez a gyakorlatban homogén anyagban, nagy méretű geometriának a belsejében, határfelületektől és neutronabszorberektől távol teljesül (Babcsányi, 2021).

1.2.1.2. SP_3 transzportközelítés

Az SP_3 módszer a gömbharmonikusok szerinti sorfejtésen alapuló P_L közelítésre épül (Szatmáry, 2000); annak egy egyszerűsített változata. A diffúzióhoz képest az SP_3 egy magasabb rendű transzportközelítés, amely már lineárisnál magasabb rendű anizotrópiát is képes kezelni.

A P_L közelítés a szögfüggő neutronfluxust harmonikus gömbfüggvények segítségével fejt ki, a szórási magfüggvényt pedig Legendre-polinomként. Ezeket a kifejtéseket jelenítik meg az (1.7) és (1.8) egyenletek.

$$\varphi(\mathbf{r}, E, \mathbf{\Omega}, t) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} \sum_{m=-l}^l \Phi_{lm}(\mathbf{r}, E, t) Y_{lm}(\mathbf{\Omega}) \quad (1.7)$$

$$\Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \mathbf{\Omega}' \rightarrow \mathbf{\Omega}) = \sum_{l'=0}^{\infty} \frac{2l'+1}{4\pi} \Sigma_{sl'}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) P_{l'}(\mu_0) \quad (1.8)$$

Az (1.8) egyenletben szereplő μ_0 a szórási szög koszinusza. A fenti kifejtést egy meghatározott $l = L$ rendig végezzük el, ez esetünkben $l = 3$.

A P_L közelítés egyenletei sík geometria esetén felírhatóak egydimenziós diffúzióegyenletek rendszereként. Ez általános geometria esetén nem tehető meg, csak közelítéseket alkalmazva. Ezek segítségével azonban az SP_L egyenletek – most pedig speciálisan az SP_3 egyenletek – hasonló matematikai formára hozhatóak, mint a többcsoport¹ diffúzióegyenletek (Babcsány, 2021). Ilyen formában szerepelnek az (1.9) és az (1.10) egyenletekben.

$$-\text{div}[\mathbf{D}_1 \text{grad} \mathbf{U}_1] + \mathbf{\Sigma}_0 \left(\mathbf{U}_1 - \frac{2}{3} \mathbf{U}_2 \right) = \frac{1}{k_{\text{eff}}} \mathbf{\Sigma}_F \left(\mathbf{U}_1 - \frac{2}{3} \mathbf{U}_2 \right) \quad (1.9)$$

$$-\text{div}[\mathbf{D}_2 \text{grad} \mathbf{U}_2] - \frac{2}{3} \mathbf{\Sigma}_0 \left(\mathbf{U}_1 - \frac{2}{3} \mathbf{U}_2 \right) + \frac{5}{9} \mathbf{\Sigma}_2 \mathbf{U}_2 = -\frac{2}{3} \frac{1}{k_{\text{eff}}} \mathbf{\Sigma}_F \left(\mathbf{U}_1 - \frac{2}{3} \mathbf{U}_2 \right) \quad (1.10)$$

Az egyenletekben szereplő k_{eff} a legnagyobb sztatikus sajátértéket jelenti. A g -edik csoportra vonatkozóan $\mathbf{U}_1$ és $\mathbf{U}_2$ értelmezése a következő, (1.11) és (1.12) egyenletek alapján történik.

$$U_1^g = \Phi_0^g + \Phi_2^g \quad (1.11)$$

$$U_2^g = 3\Phi_2^g \quad (1.12)$$

Tehát az $\mathbf{U}_1$, $\mathbf{U}_2$ vektorok a fluxusmomentumok lineáris kombinációjaként állnak elő (Babcsány, 2021).

Az SP_3 közelítésben a vákuum peremfeltételt az (1.13) és (1.14) egyenletekben foglaltak szerint adhatjuk meg. Legyen $\mathbf{n}_s$ a geometria határán értelmezett felületi normális.

$$\frac{1}{2} \mathbf{U}_1 + \mathbf{n}_s \cdot \mathbf{D}_1 \text{grad} \mathbf{U}_1 - \frac{1}{8} \mathbf{U}_2 = 0 \quad (1.13)$$

$$-\frac{1}{8} \mathbf{U}_1 + \mathbf{n}_s \cdot \mathbf{D}_2 \text{grad} \mathbf{U}_2 - \frac{7}{24} \mathbf{U}_2 = 0 \quad (1.14)$$

Azokban a határpontokban, ahol a vákuum peremfeltétel érvényes, az (1.13) és az (1.14) egyenleteknek teljesülni kell. A vákuum peremfeltétel ilyen leírása a Marshak-peremből származtatható (Babcsány, 2021).

Szimmetria perem esetén a geometria határán a parciális árammomentumok egyenlőségének kell fennállnia.

Az SP_3 egyenletek felírhatóak hasonló matematikai formában, mint a többcsoport diffúzióegyenletek, ezért azok a numerikus eljárások, amelyek a többcsoport diffúzióegyenletek kezelésére alkalmasak, viszonylag egyszerűen tovább-fejleszthetők az SP_3 transzportközelítés megoldására is (Babcsány, 2021). A módszer által használt egyszerűsítés viszont azt is eredményezi, hogy $l \rightarrow \infty$ esetén nem kapjuk vissza a transzportegyenlet egzakt megoldását; az l növelésével nem kapunk szükségszerűen pontosabb végeredményt. Az $l = 3$ esetén kívül még az $l = 5$ és az $l = 7$ SP_L közelítések fordulnak elő, ennél nagyobb l értékek

¹ A többcsoport módszerek elméleti háttére az 1.2.2. szakaszban szerepel.

csak ritkán. Az SP_3 közelítés másik előnyeként említhető, hogy a diffúziónál pontosabbnak bizonyul.

1.2.1.3. Monte Carlo módszer

A neutronok anyagi közegben való haladása és anyagi közeggel való kölcsönhatása valószínűségi alapon írható le. A Monte Carlo módszerek képesek valósághűen szimulálni, hogy a neutron a vizsgált közegben hogyan mozog (Szatmáry, 2000).

Monte Carlo számítás esetén az általunk vizsgálni kívánt folyamathoz egy sztochasztikus modell tartozik, és az általunk meghatározni kívánt fizikai mennyiség a modell egy változójának várható értékeként adódik (Lux–Koblinger, 1991). Kellően sok szimulációt elvégezve tetszőlegesen pontos eredményt érhetünk el. Ebből kifolyólag úgy tekintik, hogy a Monte Carlo módszerek a neutrontranszport-egyenlet közvetlen megoldására alkalmasak.

A módszer alkalmazhatóságát már érintettem az 1.2.1. szakaszban, ahol a módszer időigényességéről is szó esett. Nagy mennyiségű részecske viselkedésének szimulációjához nagyon hosszú számítási idő tartozik, illetve a szimulációk számának növelése az eredményt pontosítja, ezért a determinisztikus transzportkódokhoz képest a Monte Carlo számítások meglehetősen lassúak. Kisebb részecskeszám esetén azonban a statisztikus viselkedés romlik, így ez nem opció a futási idő csökkentésére (Lux–Koblinger, 1991).

1.2.2. ALAPFELTEVÉSEK

A $\phi(\mathbf{r}, E, \Omega, t)$ neutronfluxus szögfüggésének kezelésével már megismertedtünk az 1.2.1.1. és az 1.2.1.2. pontokban.

Tekintve, hogy a kiválasztott benchmarkproblémának egy állandósult állapotbeli esetével dolgoztam, a bemutatott közelítések a fluxus időfüggését nem tárgyalták, statikus egyenletek kerültek felírásra.

Az energiafüggés azonban kifejtésre szorul. A fluxus energiafüggését nem expliciten kezeljük, folytonos energiaváltozóval csak kivételes esetekben oldunk meg reaktorfizikai problémákat. Az energiaváltozót általában diszkretizáljuk (Szatmáry, 2000).

Ezt használjuk ki az ún. többcsoport módszernél (Szatmáry, 2007), amelyet a következőkben röviden bemutatok. Kiinduló lépésként a teljes energiatartományt – amely jellemzően nullától egy elméleti maximumig, 10 MeV-ig tart – felosztjuk G számú intervallumra. Az intervallumok felosztását az (1.15) egyenlet szemlélteti.

$$(0 =)E_G < E_{G-1} < E_{G-2} < \dots < E_2 < E_1 < E_0 (= 10 \text{ MeV}) \quad (1.15)$$

A g -edik energiacsoportot alkotják azok a neutronok, amelyek energiájára igaz a következő, (1.16) egyenlet.

$$E_g < E < E_{g-1} \quad (1.16)$$

A g -edik csoporthoz tartozó fluxust pedig az (1.17) egyenletnek megfelelően definiáljuk.

$$\Phi_g(\mathbf{r}) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} \Phi(\mathbf{r}, E) dE \quad (1.17)$$

Az egyes magreakciókhoz tartozó hatáskeresztmetszetek is függenek az energiától. (Térben is változhatnak, most viszont homogén anyagot tekintünk, és az $\mathbf{r}$ -től való függést nem vizsgáljuk.) A többcsoport módszer a hatáskeresztmetszetek energiafüggését a következőképpen kezeli.

Integráljuk a hatáskeresztmetszet és a fluxus szorzatát a g -edik energia-intervallumon, majd osszuk el a csoportfluxussal.

$$\frac{\int_{E_g}^{E_{g+1}} \Sigma(E) \Phi(\mathbf{r}, E) dE}{\Phi_g(\mathbf{r})} = \Sigma_g \quad (1.18)$$

Az (1.18) egyenlet alapján származtatott Σ_g mennyiség a g -edik energiacsoport csoportállandója az adott magreakcióra vonatkozóan. Ezzel a megközelítéssel származtathatunk hasadási, abszorpciós és egyéb csoportállandókat. Meg kell jegyezni, hogy egyes csoportállandók előállítása ettől eltérhet, ilyen például a diffúziós állandó, illetve a szórás mátrix elemei (Stacey, 2001).

SP₃ közelítés esetén szükség lehet lineárisnál magasabb rendű szórás mátrixokra is. Ezek számításakor a $\Phi_g(\mathbf{r})$ csoportfluxus helyett a megfelelő fluxusmomentum spektrumával dolgozunk.

Minden csoportra felírhatjuk az adott transzportközelítéshez tartozó egyenletet (pl. a diffúzióegyenletet), így egy energiafüggő integro-differenciálegyenlet helyett egy G ismeretlenes differenciálegyenlet-rendszert szükséges megoldani, amely már energiafüggetlen (Szatmáry, 2000). Példaként a többcsoport diffúzióegyenletet mutatom be, amelyet az (1.19) egyenletben láthatunk.

$$\frac{1}{v_g} \frac{\partial \Phi_g(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \text{div}[D_g(\mathbf{r}) \text{grad} \Phi_g(\mathbf{r}, t)] - \Sigma_g^t \Phi_g(\mathbf{r}, t) + Q_g(\mathbf{r}, t) \quad (1.19)$$

A $Q_g(\mathbf{r}, t)$ forrástag kifejtését az (1.20) egyenlet tartalmazza.

$$Q_g(\mathbf{r}, t) = \sum_{g'=1}^G \Sigma_{g' \rightarrow g}^s \Phi_{g'}(\mathbf{r}, t) + f_g \sum_{g'=1}^G v \Sigma_{g'}^f \Phi_{g'}(\mathbf{r}, t) + \sum_{g'=1}^G \Sigma_{g' \rightarrow g}^{\text{in}} \Phi_{g'}(\mathbf{r}, t) + S_g(\mathbf{r}, t) \quad (1.20)$$

A vizsgált benchmark egy hétcsoport probléma (Lewis *et al.*, 2001). Amikor a teljes energiatartomány felosztása nem túl sűrű, inkább a kevés csoport módszer elnevezést használjuk. Az SPNDYN kód kevés csoport módszerrel dolgozik, azonban a fenti összefoglalót az is indokolta, hogy a problémához saját csoportállandókat generáltam.

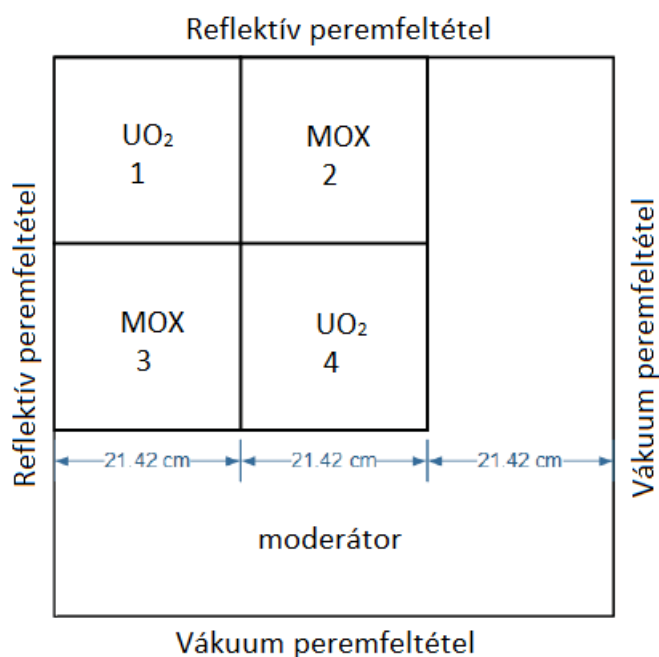
2. SZAKIRODALMI ÁTTEKINTÉS

2.1. Benchmarkprobléma bemutatása

A C5G7 benchmarkprobléma-csoport az OECD Nuclear Energy Agency (NEA) által került kidolgozásra és kibocsátásra. A problémacsoport célja a modern transzportkódok tesztelése olyan esetekben, amikor zónaszámítást kazetta- vagy pálcacellaszintű homogenizáció nélkül szeretnénk végezni (Lewis *et al.*, 2001).

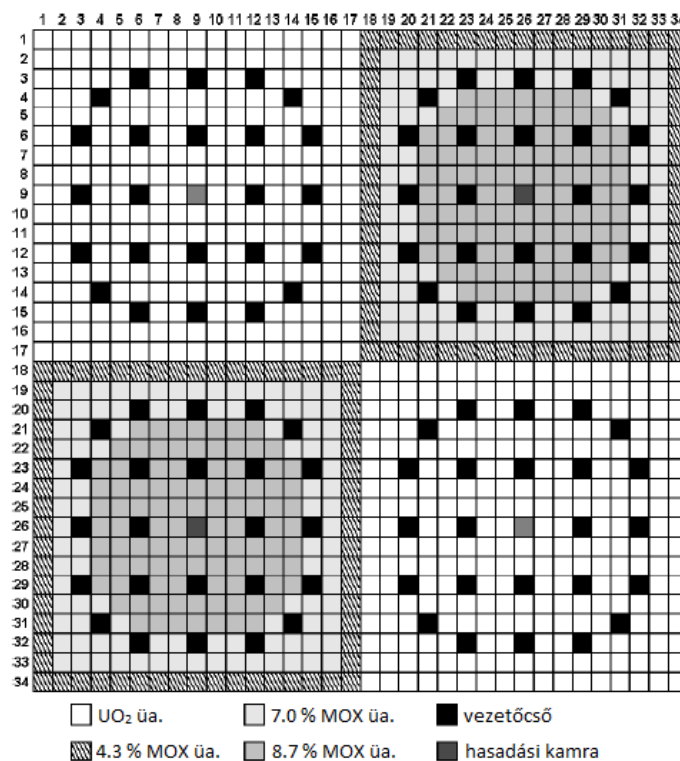
A kódok alkalmazhatóságának vizsgálatára több benchmarkspecifikáció lett kidolgozva; két-, illetve háromdimenziós problémák, ezekre vonatkozóan pedig állandósult állapotbeli, valamint időfüggő esetek (Smith *et al.*, 2003, 2005). Munkám során én specifikusan a benchmark kétdimenziós, időfüggetlen változatával dolgoztam. Ezt mutatom be a következőkben.

A vizsgált benchmark geometriája egy 16 kazettából álló reaktorzónát és az azt körülvevő reflektort foglalja magába. Mivel az összeállítás 90° -os forgásszimmetriával rendelkezik, így elég a geometria negyedével foglalkozni a továbbiakban. A kazetták elrendezését és a reflektor elhelyezkedését az 1. ábra szemlélteti (DeHart *et al.*, 2016).



1. ábra. A benchmark zónája

A reaktorzóna kétféle üzemanyagkazettából épül fel, ezek anyagi összetétele később részletesen is szerepel. A bal oldali és a felső peremen reflektív peremfeltétellel dolgozunk, hiszen az 1. ábrán szereplő geometria csak az összeállítás negyedét mutatja. A jobb oldali és az alsó peremen pedig vákuum peremfeltételt alkalmazunk, mivel a zónát körülvevő moderátor határán a benchmarkleírás szerint vákuum peremfeltétel van értelmezve. A kazetták mérete $21,42 \times 21,42$ cm; a moderátor vastagsága a zóna körül szintén $21,42$ cm. A kazettákban a pálcák 17×17 -es négyzetgrácsba vannak helyezve (Lewis *et al.*, 2001), pontos összeállításuk a 2. ábrán látható.

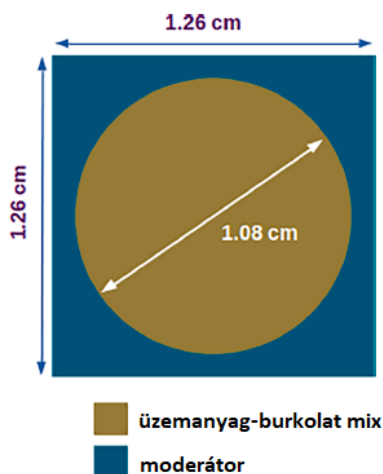


2. ábra. Az üzemanyag-kazetták összeállítása

Minden kazetta 25 darab vezetőcsövet tartalmaz szimmetrikus elrendezésben. A kazetta középpontjában lévő vezetőcső a zónán belüli méréseknek van fenntartva, – jelen esetben a hasadási kamra számára – míg a többi vezetőcsőben a szabályozó- és biztonságvédelmi rudak mozoghatnak. A szabályozó- és biztonságvédelmi rudaknak az általam vizsgált benchmarkspecifikációban nincsen szerepük; időfüggő problémák esetén szükséges velük dolgozni (Smith et al., 2005).

Az UO_2 kazetta esetében minden pálca ugyanolyan összetételű anyagból áll, 3,7%-os dúsítású UO_2 üzemanyagból, míg a MOX kazettában a 2. ábrának megfelelően különböző dúsítású MOX hasadóanyagból készült pálcák foglalnak helyet. A kazettában kívülről befelé haladva 4,3%-os, 7%-os és 8,7%-os dúsítású MOX üzemanyag található (Hou et al., 2015).

Egy pálca és a körülötte levő áramlási csatorna található a 3. ábrán, pontos geometriai méretekkkel feltüntetve (Mira et al., 2022).



3. ábra. A pálcacella geometriája

A vizsgált benchmark egy hétszorosított probléma. A benchmark leírásában minden anyagra megadták az egyes energiacsoportok csoportállandóit (Lewis *et al.*, 2001). Fontos megjegyezni, hogy ezek a csoportállandók nem az üzemanyagra, hanem az üzemanyag-burkolat mixre vonatkoznak – a vezetőcsövek és a hasadási kamra esetén a burkolatot természetesen nem üzemanyag tölti ki. Rendelkezésre állnak csoportállandók az UO_2 -os, illetve a különböző dúsítású MOX-os pálcákhoz, a vezetőcsövekhez, a hasadási kamrákhoz, valamint a moderátorhoz. A megadott csoportállandók a következők.

1. Teljes hatáskeresztmetszet.
2. Transzport hatáskeresztmetszet.
3. Abszorpciós hatáskeresztmetszet.
4. Befogási hatáskeresztmetszet.
5. Hasadási hatáskeresztmetszet.
6. Hasadásonként keletkező neutronok átlagos száma.
7. Hasadási spektrum.
8. Szórási mátrix, amely magában foglalja az egyes szórási hatáskeresztmetszeteket.

A felsorolásban szereplő hatáskeresztmetszetek mindegyike makroszkópikus hatáskeresztmetszetként van értelmezve. Az energiacsoportok felosztását az 1. táblázat mutatja (DeHart *et al.*, 2016).

Csoport	Energiatartomány [eV]
1	$10^7 - 1,36 \cdot 10^6$
2	$1,36 \cdot 10^6 - 9,2 \cdot 10^3$
3	$9,2 \cdot 10^3 - 55,6$
4	$55,6 - 4,1$
5	$4,1 - 0,63$
6	$0,63 - 0,13$
7	$0,13 - 0$

1. táblázat. A hét neutroncsoport energia szerinti felosztása

A benchmarkprobléma kapcsán dokumentálva van az egyes pálcák pontos felépítése geometriai méretekkkel együtt, valamint az anyagok pontos izotóp-összetétele (DeHart *et al.*, 2016). Ezeket és az 1. táblázatban látott energiatartomány szerinti felosztást felhasználva lehetőségünk nyílik saját csoportállandókat generálni a benchmarkproblémához.

2.2. Szakirodalmi áttekintés és alkalmazott referenciák

A C5G7 benchmarkprobléma két- és háromdimenziós időfüggetlen esetét az OECD Nuclear Energy Agency 2001-ben tette közzé (Lewis *et al.*, 2001), majd a benchmark eredményeit 2003-ban publikálta (Smith *et al.*, 2003). Ugyanebben az évben a benchmark háromdimenziós időfüggő specifikációja is megjelent, amelynek az eredményeit két év múlva hozták nyilvánosságra (Smith *et al.*, 2005).

A benchmarkproblémának mind az időfüggetlen (Mira *et al.*, 2022; Yang *et al.*, 2016; Mathur *et al.*, 2015), mind az időfüggő specifikációjáról (Wu *et al.*, 2020; Shen *et al.*, 2019; DeHart *et al.*, 2016) számos cikk és tanulmány született az elmúlt 20 év során.

Az SPNDYN kóddal végzett számításaim kiértékeléséhez és feldolgozásához elsődleges forrásként a NEA 2003-as publikációját használtam fel, amely a két- és háromdimenziós C5G7 benchmarkproblémák eredményeit dolgozza fel (Smith *et al.*, 2003). A továbbiakban a benchmark kétdimenziós esetével foglalkozom.

A publikációban 17 résztvevő eredményei szerepelnek az általam vizsgált problémára vonatkozóan; a kiértékelés során minden megoldást egy referencia transzportmegoldáshoz viszonyítottak. Az egyes résztvevők különböző transzport-közelítéseket és térbeli diszkretizációkat használtak a benchmark megoldása során (*Smith et al.*, 2003).

A résztvevők által használt kódok közül a CRONOS2 szintén diffúziós közelítést alkalmaz, így a saját diffúziós számításaimat a referencia transzportmegoldáson kívül ezzel is összevetettem. SP₃ módszer nem szerepel a résztvevők által alkalmazott kódok transzportközelítései között. A C5G7 benchmarkproblémát vizsgálja azonban SP₃ közelítéssel Steven Thompson doktori disszertációja (2014), amelyben kazetta- és pálcatejeljesítmény, valamint k_{eff} értékek is közölve vannak; ezeket a saját SP₃ számításaimhoz referenciaként használtam.

A kétdimenziós C5G7 benchmarkproblémát számos reaktorfizikai kóddal megoldották, az eredményeket pedig publikálták. A problémát vizsgálták többek között az EVENT kóddal (*Keller–De Oliveira*, 2004). Az EVENT egy végeselem-módszeren alapuló kód, amely P_L transzportközelítéssel dolgozik. Keller és De Oliveira 2004-es tanulmányukban megoldották a vizsgált benchmarkproblémát 13 különböző rendű Legendre polinom felhasználásával, ezek között a P₃ közelítés is szerepelt. Ez lehetőséget nyújt arra, hogy az egyszerűsített P₃ módszer eredményeit összehasonlítsam az eredeti P₃ közelítésével.

Az idei évben is jelent meg cikk a benchmarkkal kapcsolatban, amelyben a problémát a DRAGON5 kód segítségével tanulmányozták (*Mira et al.*, 2022). A DRAGON5 az ún. karakterisztikák módszerével végez reaktorfizikai számításokat; erre a transzportközelítésre általában angol nevén hivatkoznak, amely a „method of characteristics”, rövidítve MOC. Az említett cikkben az egyes energiacsoportok fluxuseloszlásai is meg voltak jelenítve, ezekkel kvalitatívan összevettem az SPNDYN által számított fluxuseloszlásokat. A DRAGON5 által létrehozott fluxuseloszlások azért mérvadóak, mivel a kód eredményei nagyon szoros egyezést mutattak a referencia transzportmegoldással.

Dolgozatomban a benchmarkproblémához saját transzportmegoldást számítottam a Serpent 2 Monte Carlo kód segítségével. A benchmark 2003-as eredményei között találhatóak a determinisztikus transzportközelítések mellett további Monte Carlo transzportmegoldások is (*Smith et al.*, 2003).

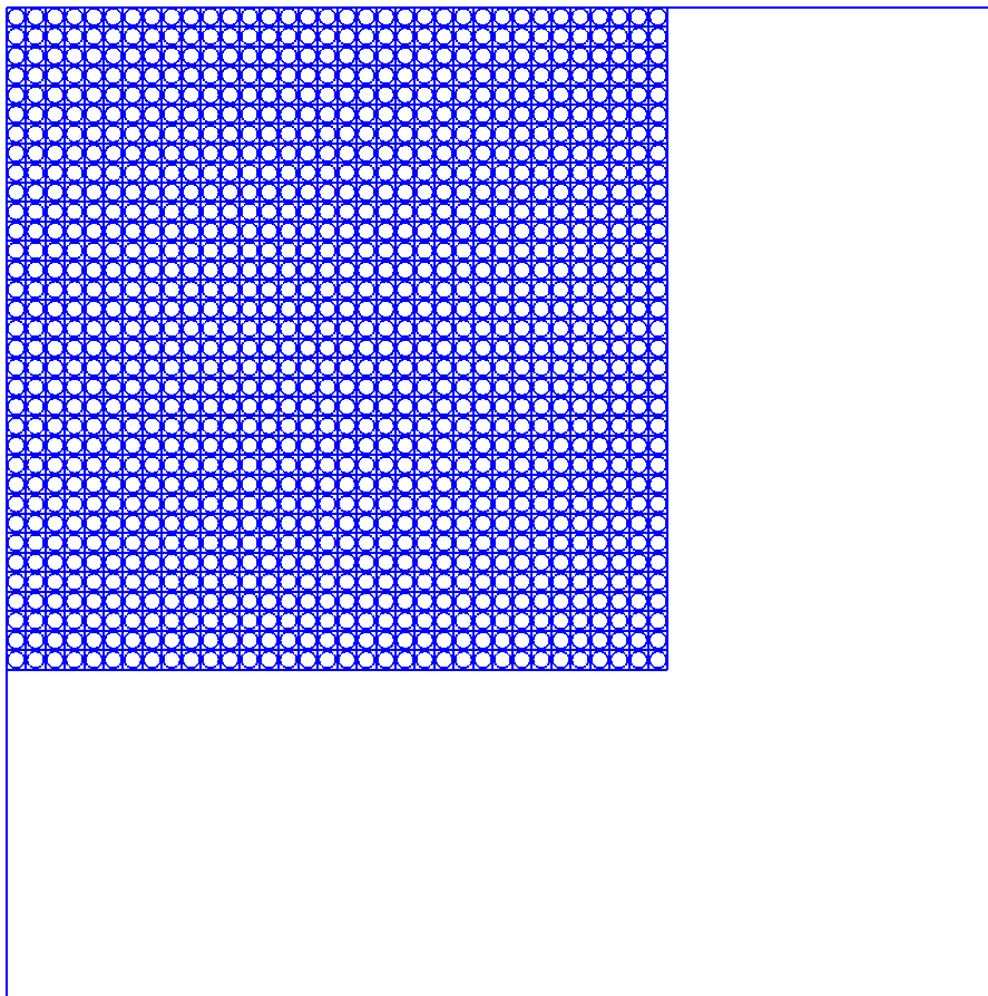
Egyéb Monte Carlo kódokat is felhasználtak a probléma számításához, ilyen például az OpenMC. *Mira et al.* (2022) értekezésében a DRAGON5-tel készült számítások a referencia MCNP megoldás mellett az OpenMC megoldásaihoz is hasonlítva vannak. Megjelenik az OpenMC által számított sajátérték a benchmark-problémára, amely a saját Monte Carlo számításaim pontosságának megítélésékor vált hasznossá.

A benchmark csoportállandóinak reprodukálásáról is több értekezés szól; számunkra releváns ezek közül Jason Hou et al. munkája, amelyben többek között a Serpent 2 kód alkalmazásával generáltak csoportállandókat a kétdimenziós C5G7 benchmarkproblémára (*Hou et al.*, 2015). Meg kell jegyezni, hogy az utóbbi tanulmány a benchmarkproblémának egy kis mértékben módosított változatát vizsgálja, de ezek a módosítások nem kerültek részletes kifejtésre. A legfőbb különbség, hogy nem hét-, hanem négycsoport csoportállandókat generáltak.

3. BENCHMARK MEGOLDÁSA AZ SPNDYN KÓDDAL

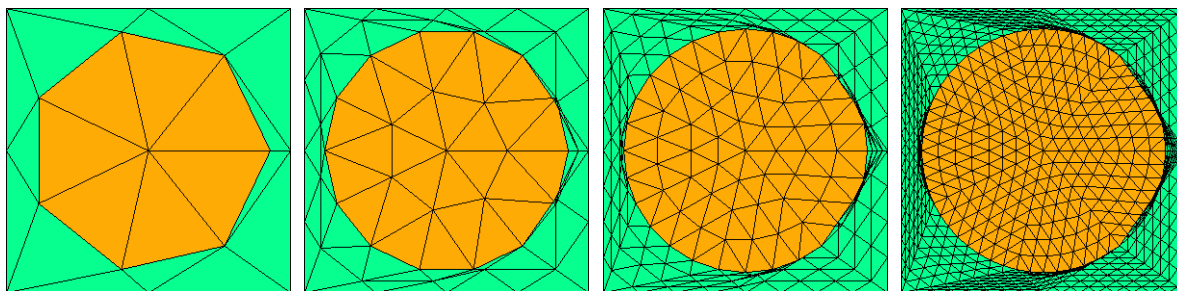
A számításokhoz elsőként a benchmark geometriáját hoztam létre egy három-dimenziós modellező programban; az általam használt program neve Gmsh. A program végelemek-háló készítésére is alkalmas (Geuzaine–Remacle, 2009).

A geometria létrehozása történhet felhasználói felületen keresztül, illetve szkript formájában is, az ismétlődő elemek miatt én az utóbbit választottam. A modellt az 1., 2. és 3. ábrának megfelelően készítettem el. Az azonos anyagot tartalmazó felületelemeket azonos fizikai csoportokba soroltam, ezt az információt a később megalkotott hálófájl is tartalmazza. Az általam összeállított geometria a 4. ábrán látható.



4. ábra. A benchmark modellje a Gmsh programban

Egy-, két- és háromdimenziós hálók kialakítására van lehetőség a programon belül (Geuzaine–Remacle, 2009). A benchmark geometriájához egy kétdimenziós, elsőrendű háromszögelemekből felépülő végelemek-hálót hoztam létre a felhasználói felületen keresztül. Az elkészült háló karakterisztikus hálóméretét tovább finomíthatjuk akár szkriptként, akár a felhasználói felület használatával. Én az utóbbi technikával készítettem négy különböző sűrűségű hálót, – minden sűrítésnél a felületelemek száma közel megnégyszereződött – amelyeket az alábbi, 5-8. ábrák mutatnak.



5 – 8. ábra. Az létrehozott végelem-hálók pálcacellára vonatkozó részlete

5. ábra: 1. háló, 6. ábra: 2. háló, 7. ábra: 3. háló, 8. ábra: 4. háló

A diffúziós és SP_3 számításokat mindegyik hálófájl segítségével elvégeztem, ami a későbbiekben hálózékenységi-vizsgálatra adott lehetőséget. A továbbiakban, amikor ez egyes hálókra hivatkozok, az 1. háló a legritkább, a 4. pedig a legsűrűbb esetet jelenti, a köztes esetek elnevezése értelemszerű. Az ezekhez tartozó nódus-, illetve felületelemszámokat a 2. táblázat tartalmazza.

Háló	Elemszám [-]	Nódusok száma [-]
1.	33866	16934
2.	134844	67423
3.	538136	269069
4.	2150064	1075033

2. táblázat. A végelem-hálók elem- és nódusszáma

A fentiek szerint elkészített hálófájlt az SPNDYN futtatásához szükséges megadni.

A Gmsh-t a hálókészítésen kívül a számítások kiértékelésekor is alkalmaztam, ugyanis a programmal az eredményként kapott megoldások megjeleníthetőek, valamint feldolgozhatóak (pl. felületi integrálok számítása).

A következőben az SPNDYN reaktorfizikai kód rövid bemutatására kerül sor. Az SPNDYN egy végelem-módszeren alapuló kódrendszer, amellyel diffúziós és SP_3 számítások végezhetőek. Működése során két végelem-módszerrel dolgozik; folytonos Galerkin-, illetve hibrid végelem-módszerrel.

A folytonos Galerkin módszer képes időfüggés kezelésére, és tetszőleges geometria vizsgálható segítségével – az SPNDYN olyan végelem-hálókat használ, amelyek vonal-, háromszög- és tetraéderelemekből épülnek fel. A módszer többcsoport problémák számítására is alkalmas (Babcsány, 2021).

Ezzel szemben az SPNDYN-be implementált hibrid végelem-módszer alkalmazási köre limitált; időfüggés kezelésére nem képes, valamint csak kétcsoport problémák kiszámítására használható. A vizsgálható geometriák köre is szűkül, mivel az SPNDYN hibrid végelem-modulja csak hatszöges ráccsal dolgozik. Előnyként említhető viszont, hogy a fluxusugrás-faktorok figyelembevételére lehetőséget ad (Babcsány, 2021).

A kétdimenziós C5G7 benchmarkprobléma, amellyel foglalkoztam, egy hétcsoport probléma statikus esete. A megalkotott háló pedig elsőrendű háromszögelemekből épül fel, így az SPNDYN a fent bemutatott végelem-módszerek közül a folytonos Galerkin módszerrel végezte el a benchmarkhoz tartozó számításokat.

A létrehozott háló-, illetve az összeállított csoportállandófájl elérési útvonalát a számítást vezérlő inputban szükséges megadni. Továbbá ebben az inputban határozhatunk meg konvergenciakritériumokat az effektív sokszorozási tényezőre, a fluxusmomentumokra és a

belső iterációs ciklusokra vonatkozóan. A külső iterációs ciklusok számát is egy általunk meghatározott értékben maximalizálhatjuk.

3.1. Hálóérzékenység-vizsgálat

Az SPNDYN egy végeelem-módszeren alapuló reaktorfizikai kód. A végeelem-módszer első lépése a vizsgált térrész diszkretizálása, a térbeli diszkretizációt a megalkotott végeelem-háló tartalmazza. Különböző végeelem-hálók esetén más és más megoldásokat kapunk adott problémára vonatkozóan. Megváltoztathatjuk például a hálót felépítő elemek típusát, rendjét vagy a háló sűrűségét. Én az utóbbival foglalkoztam, a számítás referenciától való eltérésének hálósűrűségtől való függését vizsgáltam.

A benchmarkprobléma geometriai modelljének elkészítését követően négy különböző sűrűségű végeelem-hálót generáltam, ezt a 3. fejezet elején részletesen tárgyalom. A következőkben a hálóérzékenységi vizsgálat eredményeit mutatom be.

A hálóérzékenység-vizsgálatot mind a diffúziós-, mind az SP₃ számítások esetében elvégeztem. A számítások kiértékelése során ugyanazt a metódust követtem, mint amellyel a benchmarkban résztvevők eredményeiket feldolgozták. A résztvevők a probléma megoldását követően megadták az általuk számított sajátértékeket, illetve a pálcateljesítményeket a negyed zónára vonatkozóan. A pálcateljesítményeket normálták olyan módon, hogy az átlagos pálcateljesítmény értéke 1 legyen, majd minden eredményt egy referencia Monte Carlo számításhoz viszonyítottak. Az összehasonlítás során a következő paraméterek kerültek meghatározásra (Smith *et al.*, 2003):

1. Sajátérték és annak referenciától való előjeles eltérése.
2. A legnagyobb pálcateljesítmény és annak referenciától való előjeles eltérése.
3. A legkisebb pálcateljesítmény és annak referenciától való előjeles eltérése.
4. A legnagyobb referenciától való eltérés a pálcateljesítményekre vonatkozóan.
5. Az egyes kazetták – a belső UO₂, a külső UO₂ és a MOX üzemanyagkazetta – teljesítményei és azok referenciától való előjeles eltérése.
6. A pálcateljesítmények referenciától való eltéréseinek átlaga (AVG) – kiszámításának módja a (3.1) egyenletben látható.

$$AVG = \frac{\sum_N |e_n|}{N} \quad (3.1)$$

A referenciától való előjeles eltérés, e_n meghatározása a (3.2) egyenletnek megfelelően történt.

$$e_n = \frac{p_n - p_{n,ref}}{p_{n,ref}} \quad (3.2)$$

7. A pálcateljesítmények referenciától való eltéréseinek négyzetes középértéke (RMS) – származtatását a (3.3) egyenlet tartalmazza.

$$RMS = \sqrt{\frac{\sum_N e_n^2}{N}} \quad (3.3)$$

8. Átlagos referenciától való eltérés a pálcateljesítményekre vonatkozóan (MRE) – amely a következő, (3.4) egyenlet alapján értelmezendő.

$$MRE = \frac{\sum_N |e_n| \cdot p_n}{N \cdot p_{\text{átl}}} \quad (3.4)$$

9. Pálcák száma, amelyek esetén a pálcateljesítmény értéke 68%-os, 90%-os, 98%-os, valamint 99,8%-os konfidenciaintervallumon belül közelíti a referenciát. Másképp megfogalmazva; azoknak a pálcáknak a száma, amelyekre a számolt pálcateljesítmény értéke a referencia MCNP megoldás 1σ , $1,645\sigma$, $2,326\sigma$, valamint $3,09\sigma$ szórásán belül van.

Először a diffúziós megoldásokat jellemzem a felsorolt mutatók segítségével. Az alábbi táblázatokban (3-8.) a referencia MCNP megoldást és az SPNDYN által számított diffúziós eredményeket láthatjuk. A hálózások számozása ugyanaz, mint a korábbiakban: az 1. háló a legritkább, a 4. a legsűrűbb, a 2. és a 3. pedig a köztes esetek.

Kód	Háló	k_{eff} [-]	Hiba [%]
referencia MCNP	-	$1,18655 \pm 9,5 \cdot 10^{-5}$	-
SPNDYN	1.	1,21761	2,618
SPNDYN	2.	1,19522	0,731
SPNDYN	3.	1,18902	0,208
SPNDYN	4.	1,18209	- 0,376

3. táblázat. A sajátértékek alakulása diffúziós közelítésnél

Kód	Háló	Legnagyobb pálcateljesítmény [-]	Hiba [%]	Legkisebb pálcateljesítmény [-]	Hiba [%]	Legnagyobb hiba [%]
referencia MCNP	-	$2,498 \pm 4,0 \cdot 10^{-3}$	-	$0,232 \pm 1,3 \cdot 10^{-3}$	-	-
SPNDYN	1.	2,372	- 5,03	0,228	- 1,60	7,03
SPNDYN	2.	2,453	- 1,81	0,243	4,98	4,98
SPNDYN	3.	2,468	- 1,18	0,246	6,45	7,54
SPNDYN	4.	2,478	- 0,81	0,242	4,62	6,03

4. táblázat. A jellemző pálcateljesítmények alakulása diffúziós közelítésnél

Kód	Háló	Belső UO_2 kazetta teljesítménye [-]	Hiba [%]	MOX kazetta teljesítménye [-]	Hiba [%]	Külső UO_2 kazetta teljesítménye [-]	Hiba [%]
referencia MCNP	-	$492,8 \pm 0,49$	-	$211,7 \pm 0,38$	-	$139,8 \pm 0,28$	-
SPNDYN	1.	478,4	- 2,92	218,3	3,09	141,1	0,94
SPNDYN	2.	487,5	- 1,08	213,2	0,70	142,1	1,67
SPNDYN	3.	489,1	- 0,74	212,2	0,24	142,4	1,88
SPNDYN	4.	491,2	- 0,33	212,0	0,13	140,8	0,76

5. táblázat. A kazettateljesítmények alakulása diffúziós közelítésnél

Kód	Háló	AVG [%]	RMS [%]	MRE [%]
referencia MCNP	-	0,32	0,34	0,27
SPNDYN	1.	2,71	3,07	2,88
SPNDYN	2.	1,36	1,69	1,22
SPNDYN	3.	1,42	1,86	1,12
SPNDYN	4.	1,11	1,42	0,91

6. táblázat. A jellemző hibaértékek alakulása diffúziós közelítésnél

Kód	Háló	Pálcák száma 68%-os konfi- denciainter- vallumban [-]	Pálcák száma 90%-os konfi- denciainter- vallumban [-]	Pálcák száma 98%-os konfi- denciainter- vallumban [-]	Pálcák száma 99,8%-os konfi- denciainter- vallumban [-]
SPNDYN	1.	18	31	47	54
SPNDYN	2.	50	105	157	205
SPNDYN	3.	49	87	130	185
SPNDYN	4.	72	129	183	241

7. táblázat. Egyes konfidenciaintervallumokba eső pálcák számának alakulása diffúziós közelítésnél

Kód	Háló	Pálcák 68%-os konfidenciainter- vallumban [%]	Pálcák 90%-os konfidenciainter- vallumban [%]	Pálcák 98%-os konfidenciainter- vallumban [%]	Pálcák 99,8%-os konfidenciainter- vallumban [%]
SPNDYN	1.	1,7	2,9	4,5	5,1
SPNDYN	2.	4,7	9,9	14,9	19,3
SPNDYN	3.	4,6	8,2	12,3	17,5
SPNDYN	4.	6,8	12,2	17,3	22,8

8. táblázat. Egyes konfidenciaintervallumokba eső pálcák arányának alakulása diffúziós közelítésnél

Ha a táblázatokban közölt adatokat tekintjük, megállapítható, hogy általánosságban a háló sűrítésével, tehát a geometriát lefedő felületelemek számának növelésével a számítások pontossága nő. Ennek oka, hogy kisebb térbeli diszkretizációt alkalmazva a térbeli változások jobban lekövethetőek. Ennek figyelembevételére már a háló generálásakor van lehetőség, hiszen olyan helyeken, ahol térbeli inhomogenitás van (pl. határfelület), a geometria felosztása lokálisan sűríthető.

A Gmsh program kétdimenziós hálót sokszögekből épít fel, strukturált háló esetén csak egyféle sokszögből (*Geuzaine–Remacle*, 2009) – az általam használt hálófájlok mind strukturált, elsősorban háromszögelemekből felépülő hálók voltak. Ennek megfelelően a program ívelt geometriát is csak sokszögekkel közelít. Minél kisebb felületelemekből áll a háló, annál jobban tudják az elemek a görbületet lekövetni. Ez jól látható, ha az 5. és a 8. ábra közötti különbséget megnézzük, amelyek egy-egy pálcacellát ábrázolnak. Ha ezt a példát tekintjük, akkor az is helyes megállapítás, hogy az 1. háléhoz képest a nagyobb sűrűségűek több hasadóanyagot tartalmaznak. Az üzemanyag-moderátor arány megváltozása a számítási eredményekre is hatással van.

Azonban a háló sűrítésével sem kapunk egyértelműen pontosabb megoldást. Ha a végeelem-hálót sűrítjük, bizonyos hálósűrűség után a számítások eredményei már csak elhanyagolható mértékben fognak változni, ezeket az értékeket már hálófüggetlen eredményeknek tekintjük. Tehát sűrűbb hálókat alkalmazva közelebb juthatunk a hálófüggetlen megoldáshoz. Viszont ezt a megoldást a különböző hálók nem feltétlen aszimptotikus módon közelítik meg. Jelen esetben én ebből a konvergens sorozatból négy pontot emeltem ki, és vizsgáltam. Így előfordulhat olyan eset, hogy egy ritkább háló pontosabb megoldást ad, attól függően, hogy milyen módon konvergálnak az értékek a hálófüggetlen eredményhez. Meg kell jegyezni, hogy jelen dolgozatnak a hálófüggetlenség-vizsgálat nem célja; azt hivatott elemezni, hogy a hálósűrűség növelésével az eredmények referenciától való eltérése hogyan változik, ezzel minimalizálva a diszkretizációs hibát.

Az SP₃ számítások esetében is elvégeztem a hálóérzékenység-vizsgálatot, ennek eredményei a 9-14. táblázatokban jelennek meg. A kiértékelés szempontjai ugyanazok, mint amelyek a diffúziós közelítésnél voltak.

Kód	Háló	k_{eff} [-]	Hiba [%]
referencia MCNP	-	$1,18655 \pm 9,5 \cdot 10^{-5}$	-
SPNDYN	1.	1,21873	2,712
SPNDYN	2.	1,19676	0,860
SPNDYN	3.	1,19050	0,232
SPNDYN	4.	1,18912	0,217

9. táblázat. A sajátértékek alakulása SP₃ közelítésnél

Kód	Háló	Legnagyobb pálcatejesítmény [-]	Hiba [%]	Legkisebb pálcatejesítmény [-]	Hiba [%]	Legnagyobb relatív hiba [%]
referencia MCNP	-	$2,498 \pm 4,0 \cdot 10^{-3}$	-	$0,232 \pm 1,3 \cdot 10^{-3}$	-	-
SPNDYN	1.	2,421	- 3,08	0,215	- 7,33	13,46
SPNDYN	2.	2,496	- 0,07	0,229	- 0,97	4,26
SPNDYN	3.	2,511	0,51	0,232	0,42	3,42
SPNDYN	4.	2,442	- 2,26	0,226	- 2,56	6,38

10. táblázat. A jellemző pálcatejesítmények alakulása SP₃ közelítésnél

Kód	Háló	Belső UO ₂ kazetta teljesítménye [-]	Hiba [%]	MOX kazetta teljesítménye [-]	Hiba [%]	Külső UO ₂ kazetta teljesítménye [-]	Hiba [%]
referencia MCNP	-	$492,8 \pm 0,49$	-	$211,7 \pm 0,38$	-	$139,8 \pm 0,28$	-
SPNDYN	1.	485,6	- 1,47	216,5	2,28	137,4	- 1,72
SPNDYN	2.	494,0	0,24	211,7	- 0,02	138,7	- 0,77
SPNDYN	3.	495,4	0,53	210,8	- 0,44	139,0	- 0,53
SPNDYN	4.	482,0	- 2,20	219,4	3,64	135,2	- 3,27

11. táblázat. A kazettatejesítmények alakulása SP₃ közelítésnél

Kód	Háló	AVG [%]	RMS [%]	MRE [%]
referencia MCNP	-	0,32	0,34	0,27
SPNDYN	1.	2,52	3,18	2,23
SPNDYN	2.	0,82	1,17	0,69
SPNDYN	3.	0,80	1,03	0,71
SPNDYN	4.	3,06	3,26	2,92

12. táblázat. A jellemző hibaértékek alakulása SP₃ közelítésnél

Kód	Háló	Pálcák száma 68%-os konfidenciaintervallumban [-]	Pálcák száma 90%-os konfidenciaintervallumban [-]	Pálcák száma 98%-os konfidenciaintervallumban [-]	Pálcák száma 99,8%-os konfidenciaintervallumban [-]
SPNDYN	1.	35	48	78	94
SPNDYN	2.	118	184	266	334
SPNDYN	3.	90	167	221	315
SPNDYN	4.	0	0	0	0

13. táblázat. Egyes konfidenciaintervallumokba eső pálcák számának alakulása SP₃ közelítésnél

Kód	Háló	Pálcák 68%-os konfidenciainter- vallumban [%]	Pálcák 90%-os konfidenciainter- vallumban [%]	Pálcák 98%-os konfidenciainter- vallumban [%]	Pálcák 99,8%-os konfidenciainter- vallumban [%]
SPNDYN	1.	3,3	4,5	7,4	8,9
SPNDYN	2.	11,2	17,4	25,2	31,6
SPNDYN	3.	8,5	15,8	20,9	29,8
SPNDYN	4.	0	0	0	0

14. táblázat. Egyes konfidenciaintervallumokba eső pálcák arányának alakulása SP₃ közelítésnél

Hasonlóan alakulnak az SP₃ számítások is, mint a diffúziósak; általánosságban igaz, hogy sűrűbb háló pontosabb megoldást eredményez. Ez nem teljesül szükségszerűen a hálózás sűrítésével, hiszen az eredmények nem feltétlenül korlátos módon konvergálnak a hálófüggetlen érték felé.

Azonban ez a tendencia csak az 1-3. hálók esetében figyelhető meg, a legsűrűbb hálóval készült számítás pár paraméter kivételével (pl. sajátérték) sokkal pontatlanabbnak bizonyul, mint bármelyik más SP₃ megoldás. Ennek a pontatlanságnak az oka feltehetőleg a numerikus eljárás folyamatában keresendő. Már a 4. hálóval végzett SP₃ számítás futtatása alatt észleltük, hogy más futtatásokhoz képest nagyon nagy mértékben nőtt a megoldáshoz szükséges időtartam; a számítás különösen sok időt töltött az egyes belső iterációs ciklusokon belül. Valószínűleg az adott csoportállandó-input és végeelem-háló párosítása egy rosszul kondicionált globális együttható mátrixot eredményezett, amelyet a lineáris algebrai egyenletrendszerhez beállított iterációs megoldó függvény nem tudott megfelelően kezelni. Ha az egyes iterációs ciklusok közötti eltéréseket tekintjük, az értékek között nem fedezhető fel egyértelmű konvergencia, így lehetséges, hogy véletlenszerűen teljesültek a futáshoz a vezérlő inputfájlban a számítást megelőzően beállított konvergenciakritériumok, pedig a számítás valójában még nem közelítette meg a konvergens eredményt.

A legsűrűbb hálóval végzett számítás nagyon időigényesnek bizonyult, illetve nem minden esetben ehhez tartozott a referenciát leginkább megközelítő érték. Ebből kifolyólag a diffúziós és SP₃ számítások áttekintésekor elegendőnek tartottam, hogy a 3. háló eredményeivel dolgozzak, mivel a referenciától való eltérése nem jelentősen nagyobb, mint a 4. hálónak, ellenben kedvezőbb számítási idő tartozik hozzá.

Ennek megfelelően a 3.2. és a 3.3. alfejezetben következetesen a 3. végeelem-hálóval végzett számítások jelennek meg, amikor az SPNDYN eredményeire hivatkozok, vagy ezeket meghatározott referenciákkal vetem össze.

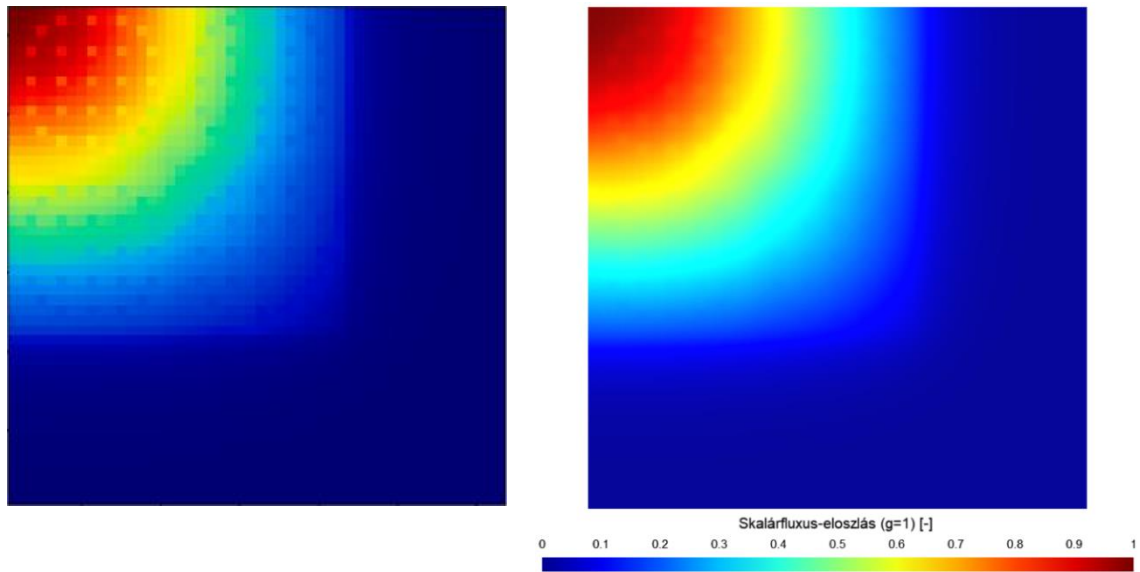
3.2. Diffúziós számítás

A benchmarkproblémát elsőként az SPNDYN kód diffúziós moduljának segítségével oldottam meg.

Először a hét energiacsoportra vonatkozó fluxuselozslásokat mutatom be, amelyek a diffúziós számítások megoldásaként születtek. Mivel a hálóérzékenység-vizsgálat rámutatott, hogy a háló sűrítése ugyan általánosságban növeli az eredmények pontosságát, de nem ad szükségszerűen jobb eredményt minden paraméterre, így azokat a fluxuselozslásokat fogom feltüntetni, amelyek a 3. háló felhasználásával készültek. Az elozslásokat a DRAGON5 kóddal kapott elozslásokhoz viszonyítom, mivel a kód a referencia transzportmegoldással szoros egyezést mutatott (Mira et al., 2022).

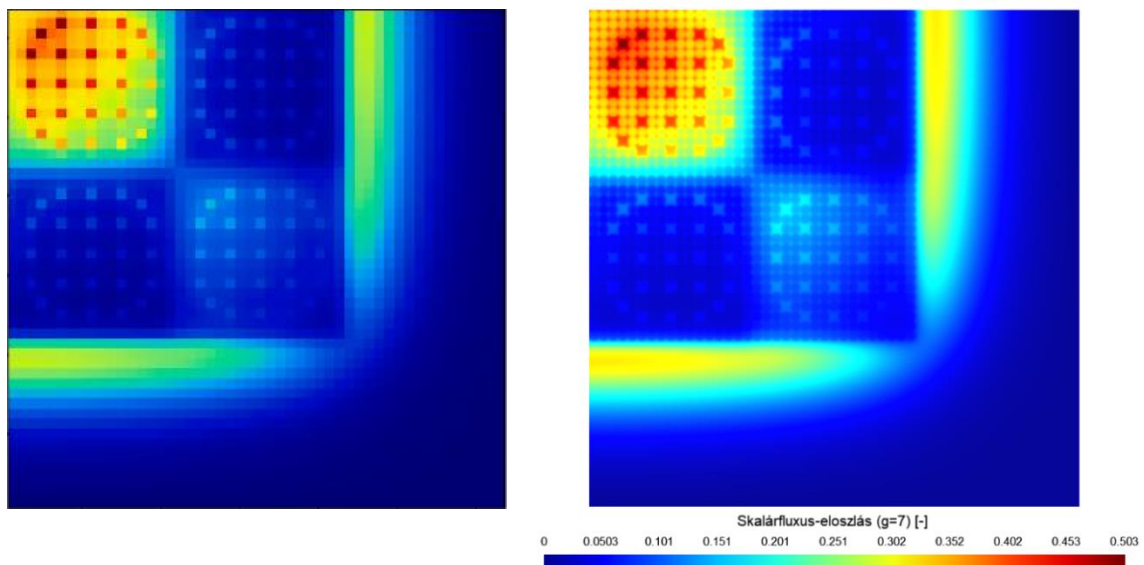
Az alábbi ábrákon (9-12.) az első és a hetedik csoport fluxuselozslásai szerepelnek a vizsgált negyed zónára; az SPNDYN és a DRAGON5 eredményei egymás mellett vannak megjelenítve,

hogy az eloszlások jellege könnyebben összehasonlítható legyen. A hétből ezúttal csak a legnagyobb és legkisebb energiájú neutroncsoport kerül bemutatásra, de az 1. mellékletben minden csoport fluxuselozzlása megtekinthető.



9–10. ábra. Az első energiacsoport fluxuselozzlása a gyors energiacsoport maximumával normálva

9. ábra: DRAGON5 kód megoldása, 10. ábra: SPNDYN kód diffúziós megoldása



11–12. ábra. A hetedik energiacsoport fluxuselozzlása a gyors energiacsoport maximumával normálva

11. ábra: DRAGON5 kód megoldása, 12. ábra: SPNDYN kód diffúziós megoldása

A referenciaként tekintett fluxuselozzlások négyzetes hálón vannak ábrázolva, míg az SPNDYN esetében azon a végelelemhálón, amely segítségével a számítások készültek. Az alkalmazott színskála sem teljesen azonos.

A megjelenítésbeli különbségektől eltekintve azonban a fluxuselozzlások jellegre hasonlóak. A kiértékelés során használt pálcatejesítmények a felületelemekre integrált fluxusokból számíthatók. A fluxuselozzlások ellenőrzése azért hasznos, mert, ha a megoldásban eltéréseket észlelünk, kiszűrhetővé válik, hogy az adatok feldolgozása során vétettünk-e hibát vagy már a számítás bemeneteinek megadásakor (pl. végelelem-háló).

A SPNDYN kód diffúziós eredményeit a referencia MCNP megoldással hasonlítottam össze, ezt tartalmazzák a 15-20. táblázatok. Ezen kívül megjelennek a táblázatokban a CRONOS2 kód eredményei is, mivel ezek szintén diffúziós transzportközelítéssel készültek. Így az általam futtatott számítások referenciától való eltérése megítélhető más diffúziós kódokhoz viszonyítva.

Kód	Háló	$k_{\text{eff}} [-]$	Hiba [%]
referencia MCNP	-	$1,18655 \pm 9,5 \cdot 10^{-5}$	-
SPNDYN	3.	1,18902	0,208
CRONOS2	-	1,18323	- 0,280

15. táblázat. A sajátérték diffúziós megoldásoknál

Kód	Háló	Legnagyobb pálcatejesítmény [-]	Hiba [%]	Legkisebb pálcatejesítmény [-]	Hiba [%]	Legnagyobb relatív hiba [%]
referencia MCNP	-	$2,498 \pm 4,0 \cdot 10^{-3}$	-	$0,232 \pm 1,3 \cdot 10^{-3}$	-	-
SPNDYN	3.	2,468	- 1,18	0,246	6,45	7,54
CRONOS2	-	2,520	0,90	0,241	4,00	5,95

16. táblázat. A jellemző pálcatejesítmények diffúziós megoldásoknál

Kód	Háló	Belső UO_2 kazetta teljesítménye [-]	Hiba [%]	MOX kazetta teljesítménye [-]	Hiba [%]	Külső UO_2 kazetta teljesítménye [-]	Hiba [%]
referencia MCNP	-	$492,8 \pm 0,49$	-	$211,7 \pm 0,38$	-	$139,8 \pm 0,28$	-
SPNDYN	3.	489,1	- 0,74	212,2	0,24	142,4	1,88
CRONOS2	-	495,4	0,53	210,8	- 0,41	138,9	- 0,61

17. táblázat. A kazettatejesítmények diffúziós megoldásoknál

Kód	Háló	AVG [%]	RMS [%]	MRE [%]
referencia MCNP	-	0,32	0,34	0,27
SPNDYN	3.	1,42	1,86	1,12
CRONOS2	-	1,42	1,73	1,21

18. táblázat. A jellemző hibaértékek diffúziós megoldásoknál

Kód	Háló	Pálcák száma 68%-os konfidenciaintervallumban [-]	Pálcák száma 90%-os konfidenciaintervallumban [-]	Pálcák száma 98%-os konfidenciaintervallumban [-]	Pálcák száma 99,8%-os konfidenciaintervallumban [-]
SPNDYN	3.	49	87	130	185
CRONOS2	-	60	101	147	173

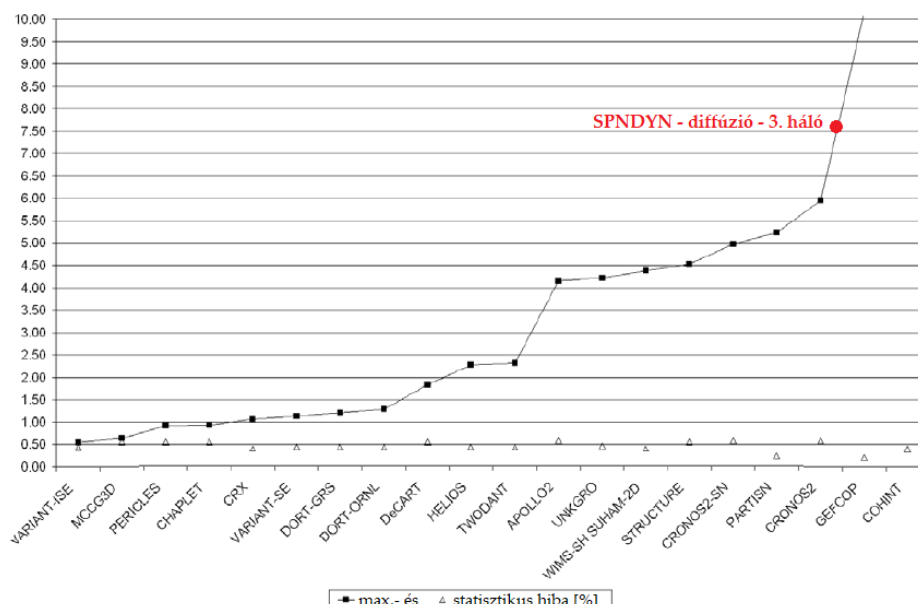
19. táblázat. Az egyes konfidenciaintervallumokba eső pálcák száma diffúziós megoldásoknál

Kód	Háló	Pálcák 68%-os konfidenciaintervallumban [%]	Pálcák 90%-os konfidenciaintervallumban [%]	Pálcák 98%-os konfidenciaintervallumban [%]	Pálcák 99,8%-os konfidenciaintervallumban [%]
SPNDYN	3.	4,6	8,2	12,3	17,5
CRONOS2	-	5,6	9,6	13,9	16,4

20. táblázat. Az egyes konfidenciaintervallumokba eső pálcák aránya diffúziós megoldásoknál

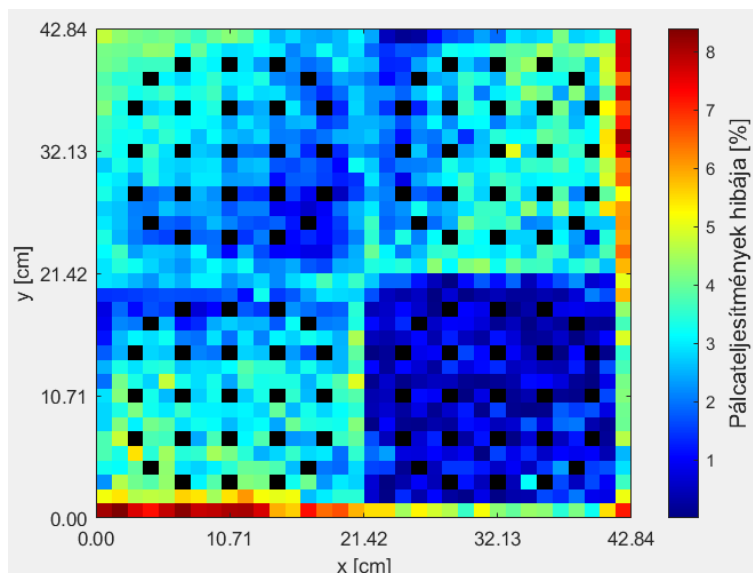
A diffúziós számításokról összességében elmondható, hogy a referencia MCNP megoldástól jobban eltérnek, mint más transzportközelítések. A benchmark résztvevőinél a sajátértékek

relatív hibája jellemzően 0,15% alatt volt, az eseteknek több, mint felében pedig 0,1% alatt. Ehhez viszonyítva az SPNDYN diffúziós számításának hibája 0,2% felett van. A pálcateljesítmények legnagyobb hibája is jelentős a résztvevő kódok átlagához viszonyítva; ha a kódok közötti sorrendbe illesztenénk be, az SPNDYN-nel végzett diffúziós számítás a legpontatlanabb számítások közé tartozna. Ezt a 13. ábra szemlélteti. Hasonló a helyzet az AVG, RMS és MRE értékek esetében (Smith et al., 2003).



13. ábra. A SPNDYN diffúziós megoldása a benchmark résztvevőkhöz viszonyítva

A pálcateljesítmények különösen a határfelületeknél térnek el a megadott referencia transzportmegoldástól, például az eltérő kazetták érintkezési felületeinél, illetve a zóna peremén. A relatív hibák eloszlását a 14. ábrán láthatjuk.



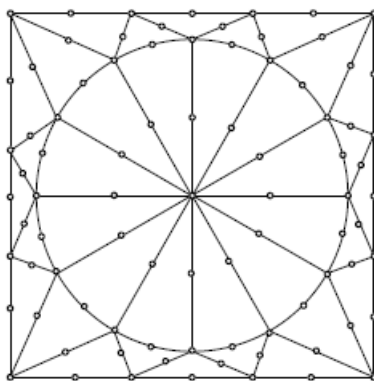
14. ábra. A pálcateljesítmények hibaeloszlása a diffúziós megoldásnál

A referenciától való nagyobb eltérések abból erednek, hogy a diffúzióelmélet a fluxusnak csak a lineáris szögfüggését veszi figyelembe, magasabb rendű anizotrópiát nem. Másfelől a diffúzió csak bizonyos feltételek teljesülésekor ad kellően pontos megoldást; ott, ahol a fluxus helyfüggése gyenge, illetve kis mértékű az abszorpció (Szatmáry, 2000). A vizsgált

geometriáról azonban elmondható, hogy erősen inhomogén, hiszen pálcaszintű számításokra lett specifikálva, és intenzív térbeli változások jellemzik. Az SPNDYN diffúziós eredményei a fenti megfontolások alapján értelmezhetőek, magyarázatot adnak a referenciától való eltérésekre.

A referencia Monte Carlo megoldáshoz való hasonlítás után érdemes azt is megvizsgálni, hogy más diffúziós kódok számításaihoz képest az SPNDYN eredményei hogyan alakulnak. Az összehasonlításra a CRONOS2 reaktorfizikai kód szolgál, amely szintén diffúziós transzportközelítéssel dolgozik. A 15-20. táblázatokban az SPNDYN mellett a CRONOS2 megoldásai is megjelennek.

A táblázatok alapján megállapítható, hogy a két diffúziós számítás hasonló mértékben tér el a referenciától. A két kód általában eltérő előjelű hibákat ad a pálca- és kazettateljesítményekre, valamint a k_{eff} -re. Ez származhat abból, hogy a CRONOS2 más térbeli diszkretizációt alkalmaz, mint az SPNDYN; a végeelem-hálójának egy pálcacellára vonatkozó részletét láthatjuk a 15. ábrán (Smith et al., 2003).



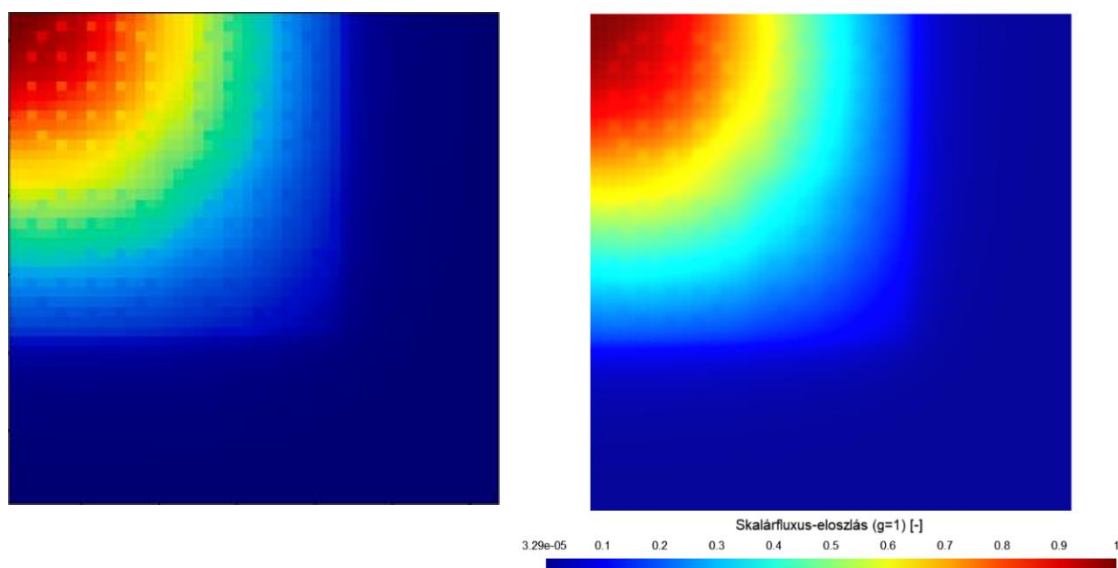
15. ábra. A CRONOS2 kód végeelem-hálójának pálcacellára vonatkozó részlete

A CRONOS2 által használt végeelem-háló másodrendű elemekből épül fel, míg az SPNDYN számára létrehozott háló csak elsőrendű háromszögelemeket tartalmazott. Ahogy a 15. ábrán is jól kivehető, a CRONOS2 számításaihoz tartozó hálóban sokszög elemeken kívül görbült határvonallal rendelkező elemek is megjelennek, mellyel a pálcacellabeli üzemanyag-moderátor térfogatarány jobban közelíthető az SPNDYN számítások esetében alkalmazott strukturált hálózathoz képest.

3.3. SP_3 számítás

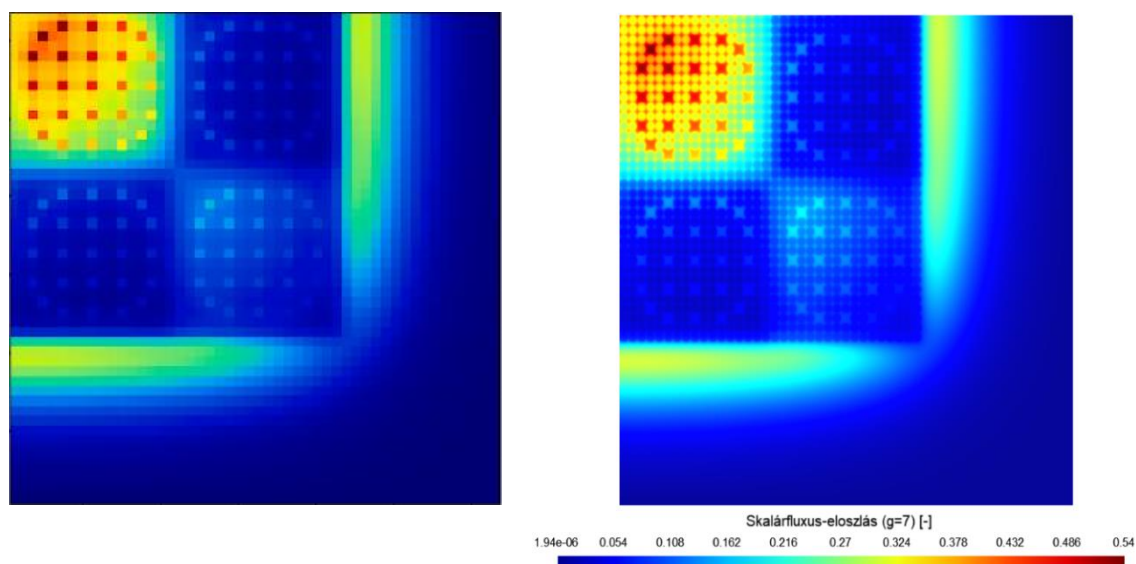
A benchmarkproblémát megoldottam az SPNDYN kód SP_3 moduljának segítségével is. A kiértékelést ismét a fluxuselozslások vizsgálatával kezdem. Az SP_3 közelítés során bevezetett U_1 , U_2 változók a fluxusmomentumok lineáris kombinációjaként álltak elő, számunkra azonban ezek közül a nulladrendű, izotróp fluxusmomentum, vagyis a skalárfluxus eloszlása hordoz információt.

A fluxuselozslásokat ebben az esetben is a DRAGON5 kód eredményeihez hasonlítottam, az SP_3 számítások közül pedig a 3. hálózattal készültek kerülnek bemutatásra. Az első és a hetedik energiacsoportra vonatkozóan jelennek meg fluxuselozslások, a többi energiacsoportra kapott skalárfluxus-elozslás az 1. mellékletben található meg a másodrendű fluxusmomentumokkal együtt. A 16-17. ábrák az első, a 18-19. ábrák a hetedik energiacsoportra vonatkoznak.



16-17. ábra. Az első energiacsoport fluxuselozslása a gyors energiacsoport maximumával normálva

16. ábra: DRAGON5 kód megoldása, 17. ábra: SPNDYN kód SP₃ megoldása



18-19. ábra. A hetedik energiacsoport fluxuselozslása a gyors energiacsoport maximumával normálva

18. ábra: DRAGON5 kód megoldása, 19. ábra: SPNDYN kód SP₃ megoldása

A bemutatott fluxuselozslások jellegre hasonlóak, annak ellenére, hogy a megjelenítésben ismét megjelennek kisebb különbségek. Ennek megállapítása után tovább folytatható az adatok feldolgozása, ugyanis feltételezhető, hogy a számítások bemeneti paraméterei helyesek voltak.

Az SP₃ megoldások kiértékelése során is a 3. hálóval végzett számítások eredményei vannak feltüntetve. Az eredményeket táblázatos formában láthatjuk; az SPNDYN mellett egy másik SP₃ transzportközelítést alkalmazó kód, a NEM jellemző értékei is szerepelnek (Thompson, 2014), valamint a referencia MCNP megoldás. Meg kell jegyezni, hogy a NEM kód eredményeinek közlésekor nem volt megadva minden olyan paraméter, amelyet én a kiértékelés során figyelembe vettem; ez magyarázza a 21-26. táblázatokból hiányzó adatokat.

Kód	Háló	$k_{\text{eff}} [-]$	Hiba [%]
referencia MCNP	-	$1,18655 \pm 9,5 \cdot 10^{-5}$	-
SPNDYN	3.	1,19050	0,333
NEM	-	1,18699	0,037

21. táblázat. A sajátérték SP₃ megoldásoknál

Kód	Háló	Legnagyobb pálcatejesítmény [-]	Hiba [%]	Legkisebb pálcatejesítmény [-]	Hiba [%]	Legnagyobb relatív hiba [%]
referencia MCNP	-	$2,498 \pm 4,0 \cdot 10^{-3}$	-	$0,232 \pm 1,3 \cdot 10^{-3}$	-	-
SPNDYN	3.	2,511	0,51	0,232	0,42	3,42
NEM	-	2,573	3,01	0,233	0,64	7,43

22. táblázat. A jellemző pálcatejesítmények SP₃ megoldásoknál

Kód	Háló	Belső UO ₂ kazetta teljesítménye [-]	Hiba [%]	MOX kazetta teljesítménye [-]	Hiba [%]	Külső UO ₂ kazetta teljesítménye [-]	Hiba [%]
referencia MCNP	-	$492,8 \pm 0,49$	-	$211,7 \pm 0,38$	-	$139,8 \pm 0,28$	-
SPNDYN	3.	495,4	0,53	210,8	- 0,44	139,0	- 0,53
NEM	-	500,1	1,48	208,8	- 1,38	138,3	- 1,06

23. táblázat. A kazettatejesítmények SP₃ megoldásoknál

Kód	Háló	AVG [%]	RMS [%]	MRE [%]
referencia MCNP	-	0,32	0,34	0,27
SPNDYN	3.	0,80	1,03	0,71
NEM	-	2,20	2,63	2,02

24. táblázat. A jellemző hibaértékek SP₃ megoldásoknál

Kód	Háló	Pálcák száma 68%-os konfidenciaintervallumban [-]	Pálcák száma 90%-os konfidenciaintervallumban [-]	Pálcák száma 98%-os konfidenciaintervallumban [-]	Pálcák száma 99,8%-os konfidenciaintervallumban [-]
SPNDYN	3.	90	167	221	315
NEM	-	-	-	102	-

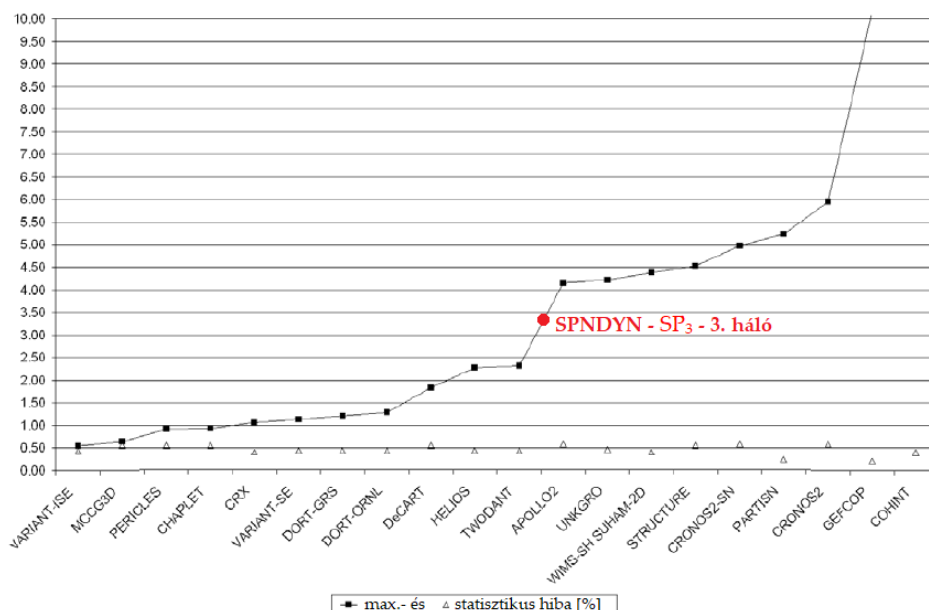
25. táblázat. Az egyes konfidenciaintervallumokba eső pálcák száma SP₃ megoldásoknál

Kód	Háló	Pálcák 68%-os konfidenciaintervallumban [%]	Pálcák 90%-os konfidenciaintervallumban [%]	Pálcák 98%-os konfidenciaintervallumban [%]	Pálcák 99,8%-os konfidenciaintervallumban [%]
SPNDYN	3.	8,5	15,8	20,9	29,8
NEM	-	-	-	9,7	-

26. táblázat. Az egyes konfidenciaintervallumokba eső pálcák aránya SP₃ megoldásoknál

Amennyiben a referencia transzportmegoldáshoz hasonlítjuk az SPNDYN SP₃ számításait, elmondható, hogy a sajátérték tekintetében viszonylag nagy eltérés adódik. A benchmarkban résztvevők eredményeinek átlagához képest jelentősen felülbecsüli az SP₃ közelítés a k_{eff} -et; ez az átlagos relatív eltérés 0,151%. Egyéb paraméterek vonatkozásában viszont egészen jól közelíti az SP₃ megoldás a referenciát; a jellemző hibaértékek (AVG, RMS, MRE), a kazetta- és a nevezetes pálcatejesítmények terén. Ha például a pálcatejesítmények legnagyobb hibája

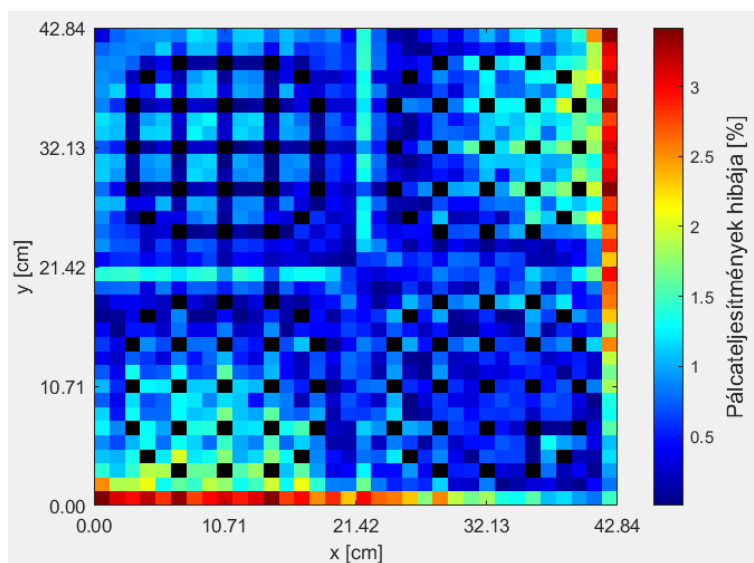
szerint rendezzük sorba a résztvevő kódokat, és ebbe a sorrendbe illesztjük bele az SP₃ megoldást, a következő, 20. ábrán megjelenő tendenciát láthatjuk (Smith et al., 2003).



20. ábra. A SPNDYN SP₃ megoldása a benchmark résztvevőihez viszonyítva

Azok a kódok, amelyek az SP₃ számításoknál jobban közelítették a referencia MCNP megoldást, magasabb rendű transzportközelítésekkel dolgoztak, ilyen például a diszkrét ordináták (S_N) vagy a karakterisztikák módszere (MOC).

A 21-26. és a 15-20. táblázatok összevetése alapján megállapítható, hogy az SPNDYN-nel készült SP₃ számítások a diffúziós megoldásoknál pontosabb eredményt adnak. Az SP₃ a diffúzióelméletnél magasabb rendű transzportközelítés, lineárisnál magasabb rendű szög szerinti fluxusanizotrópia figyelembevételére képes; ennek értelmében a két számítási módszer eredményei között fennálló eltérések magyarázhatóak. A relatív hibák eloszlása is különbözik az SPNDYN diffúziós megoldásánál tapasztalttól. Összeségében kisebbek a hibaértékek, illetve nem koncentrálnak a nagyobb hibák egyértelműen a kazetták közötti határfelületeken. A legmagasabb értékek azonban itt is a zóna peremén fordulnak elő. A zóna negyedére vonatkozó relatív hibaeloszlást a 21. ábra jeleníti meg.

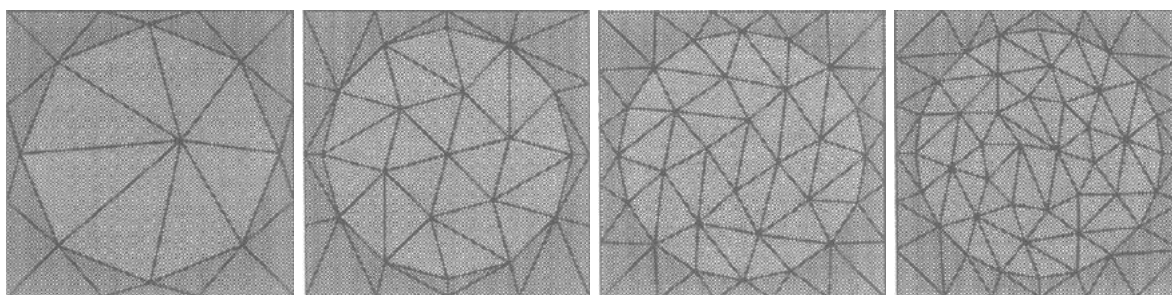


21. ábra. A pálcatelesítmények hibaeloszlása az SP₃ megoldásnál

Az SP_3 számítások esetén is érdekes, hogy az SPNDYN más SP_3 közelítést alkalmazó kódhoz viszonyítva hogyan teljesít. Az összehasonlítás alapjául szolgáló kód neve NEM; a benchmarkprobléma megoldását jellemző paraméterei a 21-26. táblázatokban vannak feltüntetve. A két kód összevetése után megállapíthatjuk, hogy a sajátértéktől eltekintve az SPNDYN eredményei jobban megközelítik a referencia MCNP megoldást. Ezek az eltérések eredhetnek abból, hogy a két kód más konvergenciakritériumokat alkalmazott k_{eff} -re és a fluxusra. Az SPNDYN futtatása során 10^{-6} -os konvergenciakritérium volt előírva a k_{eff} -re, a fluxusmomentumokra pedig 10^{-3} . Ugyanezek a NEM-nél 10^{-5} -es és 10^{-6} -os kritériumok voltak (Thompson, 2014).

Az egyszerűsített P_3 (SP_3) módszer a gömbharmonikusok szerinti sorfejtésen alapuló ún. P_L közelítésből származik (Babcsányi, 2021). Épp ezért érdemes megvizsgálni, hogy az SP_3 transzportközelítés az eredeti P_3 -hoz képest mennyire pontos.

A kétdimenziós C5G7 benchmarkproblémára születtek megoldások az EVENT reaktorfizikai kóddal, amely a gömbharmonikusok szerinti sorfejtés módszerét alkalmazza (Keller–De Oliveira, 2004). A problémát vizsgálták tizenhárom különböző rendű Legendre-polinom segítségével, ahol l értékei a következők voltak: $l = 1, 3, 5, \dots, 25$. Négy különböző sűrűségű végeselem-hálóval készültek számítások, ezeknek egy-egy pálcacellára vonatkozó részletét a 22-25. ábrák mutatják.



22-25. ábra. Az EVENT kód végeselem-hálóinak pálcacellára vonatkozó részlete

22. ábra: 1. háló, 23. ábra: 2. háló, 24. ábra: 3. háló, 25. ábra: 4. háló

Ezek közül én a legsűrűbb, 25. ábrán látható háló eredményeit használtam fel; ezeket az SPNDYN kód SP_3 közelítéssel végzett számításához hasonlítottam, amely az általam alkalmazott jelölés szerinti 3. hálóval készült. A viszonyítást a sajátértékek alapján végeztem el.

Az EVENT P_3 közelítésével 1,18382 k_{eff} érték adódott, az SPNDYN SP_3 közelítésével ugyanez 1,19050 volt. A referencia Monte Carlo megoldás sajátértéke 1,18655, tehát a P_3 eredmény ettől -0,230%-kal tér el, míg az SP_3 0,333%-kal. Ezt alapul véve elmondható, hogy az eredeti P_3 közelítés pontosabbnak mutatkozik, a két közelítés közötti eltérés pedig az SP_3 módszer által alkalmazott egyszerűsítésből származhat.

4. BENCHMARK MEGOLDÁSA A SERPENT 2 KÓDDAL

A C5G7 benchmarkproblémát az SPNDYN mellett a Serpent 2 Monte Carlo kód segítségével is feldolgoztam, amely egy folytonos energiás neutron- és foton transzportkód (*Leppänen*, 2015). Referencia transzportmegoldást számítottam, illetve csoportállandókat generáltam az SPNDYN determinisztikus transzportkód számára.

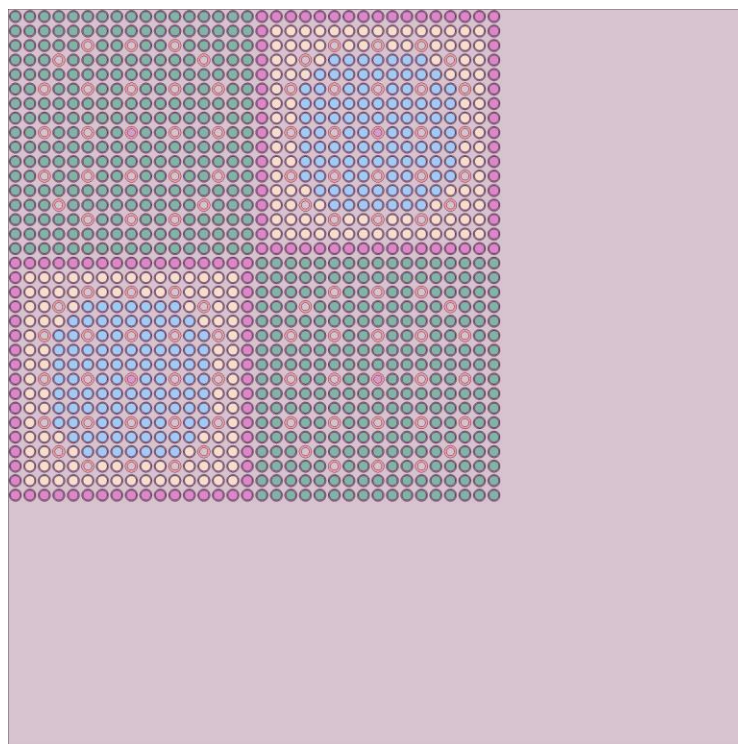
A Serpent 2 kód esetében a geometria megadása a konstruktív, más néven univerzum alapú geometriai modellezés eszközeivel történik. A kívánt modell elemi másodrendű és származtatott görbékből építhető fel, amelyek két- vagy háromdimenziós cellákat alkotnak. A geometriai modell több szintű, ezeket a számítási szinteket nevezzük univerzumoknak (*Leppänen*, 2015).

Mivel a benchmark pontos geometriai felépítése, valamint pontos izotóp-összetétele fellelhető volt, lehetőségem nyílt saját referencia transzportmegoldást számítani és csoportállandókat generálni a benchmarkprobléma számára (*DeHart et al.*, 2016). Ezek a modellépítéshez szükséges információk a 2. mellékletben megtalálhatóak.

Modellalkotáskor elsőként az anyagokat definiáltam izotóp-összetételük alapján, majd a különböző pálcák geometriáját hoztam létre az inputfájlban. Az anyagkönyvtárak elérési útvonalát szintén az inputban szükséges megadni. A pálcákat kazettákba rendeztem; jelen esetben két kazettatípus összeállítása volt szükséges (UO₂, MOX). A kazetták megfelelő rácsba rendezésével a teljes zóna előállt, amely köré megadott vastagságú reflektorréteg került. A reflektor határán vákuum peremfeltételt határoztam meg a benchmarkleírásnak megfelelően.

A csoportállandó-generálást a teljes benchmark-geometria felhasználásával végeztem el. Az energiacsoportok meghatározásakor kész struktúrákat is alkalmazhatunk, vagy megállapíthatjuk magunk az energiatartomány felosztását. Én az utóbbival dolgoztam, az energiahatárokat az 1. táblázat alapján állítottam be. A számítások során használt neutronpopuláció specifikálására is van lehetőség.

Az összeállított negyed zónát a 26. ábra mutatja.



26. ábra. A benchmark Serpent-modellje

Az eddigi számításokkal ellentétben a Serpent 2 kód megoldásai nem egyetlen végeredményként kerülnek megadásra. Ennek oka, hogy a reaktorfizikai problémákat a Monte Carlo kódok sztochasztikus elven oldják meg, így az általunk meghatározni kívánt paraméter a felállított valószínűségi modell egyik változójának várható értékeként adódik (*Lux–Koblinger*, 1991). Ezért, amikor a Monte Carlo számítások eredményeit közlöm, minden érték mellett annak szórását is feltüntetem.

A Serpent 2 felhasználásával saját transzportmegoldást számítottam a kétdimenziós C5G7 benchmarkproblémára vonatkozóan – az eredmények kiértékeléséhez a probléma sajátértéke és az egyes pálcateljesítmények adatai voltak szükségesek. Másrésztől kísérletet tettem a hétszorosított probléma csoportállandó-készletének reprodukálására. Ezeket a csoportállandókat az SPNDYN kód bemeneteként is felhasználtam, egy kiválasztott végeselem-hálózattal diffúziós és SP₃ megoldást készítettem a benchmarkhoz. A benchmarkprobléma Serpent modelljét (a kód inputját) a 3. melléklet tartalmazza.

A Serpent 2 Monte Carlo kód a determinisztikus kódoktól eltérően generál csoportállandókat. Egy lépésben történik a csoportállandó-generálás, míg a determinisztikus kódoknál két szakaszra osztható a folyamat: homogenizációra és kondenzációra. A Serpent 2 a generálás során két csoportfelosztást alkalmaz: egy mikro- és egy makroszerkezetet. Elsőként a köztes sokcsoportos felosztásra számítja a fluxust, illetve az egyes magreakciókat, majd ezeket kondenzálja a kívánt kevész csoportra – ez esetünkben hét (*Leppänen et al.*, 2016). A köztes felosztásnál pedig az alapbeállítás értékével dolgoztam; 70 energiacsoporttal. Fontos továbbá, hogy számításaim az ENDF/B-VII.1-es, folytonos energiás könyvtárral készültek.

4.1. Transzportmegoldás

A determinisztikus transzportmegoldások mellett Monte Carlo módszerrel is vizsgáltam a választott benchmarkproblémát. A Serpent 2 kód számítását szintén ahhoz a referencia transzportmegoldáshoz viszonyítom, amelyhez a benchmarkban résztvevők eredményeit hasonlították (*Smith et al.*, 2003).

Az összehasonlítás alapjául a sajátérték, illetve a pálcateljesítmények szolgálnak. A kiértékelés folyamatát megkönnyíti, hogy a Serpent 2-ben elérhető olyan funkció, amely a pálcateljesítményeket közvetlenül számítja. Így az adatok utólagos feldolgozása során vétett hibák valószínűsége csökkenthető.

A referencia MCNP és az általam végzett Monte Carlo számítás jellemző paramétereit a 27-32. táblázatok foglalják össze.

Kód	k_{eff} [-]	Hiba [%]
referencia MCNP	$1,18655 \pm 9,5 \cdot 10^{-5}$	-
Serpent 2	$1,17120 \pm 8,9 \cdot 10^{-5}$	- 1,294

27. táblázat. A sajátérték a Serpent 2 megoldásánál

Kód	Legnagyobb pálcateljesítmény [-]	Hiba [%]	Legkisebb pálcateljesítmény [-]	Hiba [%]	Legnagyobb relatív hiba [%]
referencia MCNP	$2,498 \pm 4,0 \cdot 10^{-3}$	-	$0,232 \pm 1,3 \cdot 10^{-3}$	-	-
Serpent 2	$2,421 \pm 9,3 \cdot 10^{-3}$	- 3,06	$0,233 \pm 2,2 \cdot 10^{-3}$	0,85	8,10

28. táblázat. A jellemző pálcateljesítmények a Serpent 2 megoldásánál

Kód	Belső UO ₂ kazetta teljesítménye [-]	Hiba [%]	MOX kazetta teljesítménye [-]	Hiba [%]	Külső UO ₂ kazetta teljesítménye [-]	Hiba [%]
referencia MCNP	492,8 ± 0,49	-	211,7 ± 0,38	-	139,8 ± 0,28	-
Serpent 2	479,8 ± 0,15	- 2,65	218,0 ± 0,10	2,97	140,2 ± 0,09	0,34

29. táblázat. A kazettateljesítmények a Serpent 2 megoldásánál

Kód	AVG [%]	RMS [%]	MRE [%]
referencia MCNP	0,32	0,34	0,27
Serpent 2	2,24	2,93	2,57

30. táblázat. A jellemző hibaértékek a Serpent 2 megoldásánál

Kód	Pálcák száma 68%-os konfidenciaintervallumban [-]	Pálcák száma 90%-os konfidenciaintervallumban [-]	Pálcák száma 98%-os konfidenciaintervallumban [-]	Pálcák száma 99,8%-os konfidenciaintervallumban [-]
Serpent 2	44	62	78	96

31. táblázat. Az egyes konfidenciaintervallumokba eső pálcák száma a Serpent 2 megoldásánál

Kód	Pálcák 68%-os konfidenciaintervallumban [%]	Pálcák 90%-os konfidenciaintervallumban [%]	Pálcák 98%-os konfidenciaintervallumban [%]	Pálcák 99,8%-os konfidenciaintervallumban [%]
Serpent 2	4,2	5,9	7,4	9,1

32. táblázat. Az egyes konfidenciaintervallumokba eső pálcák aránya a Serpent 2 megoldásánál

A 27-32. táblázatokban közölt összehasonlítás alapján elmondható, hogy a Serpent 2 számítása – egyéb Monte Carlo számításokhoz képest – jelentős eltérést mutat a megadott referenciától. Egyéb Monte Carlo megoldások találhatóak Smith et al. 2003-as publikációjában, amely az időfüggetlen két- és háromdimenziós benchmark-problémák eredményeit tárgyalja. A résztvevők közül hárman transzportmegoldást is készítettek a benchmarkra vonatkozóan, a felhasznált kódok a következők: VIM, MCNP-LANL, KENO.

Mindhárom kód esetében a sajátérték relatív eltérése 0,05% alatt van, ellenben a Serpent 2 számításánál ez az eltérés -1,294%. A pálcateljesítmények maximális hibájára a felsorolt kódok közül a VIM adja a legnagyobb értéket, ez mindössze 2,20%, míg a Serpent 2 esetében ez 8,10%. A VIM, MCNP-LANL és KENO kódoknál a kazetta-teljesítmények relatív eltérései mind 0,15% alá esnek, a jellemző hibaértékek is kedvezőek (Smith et al., 2003).

A Serpent 2 által számított sajátértéket összevetettem az OpenMC kód megoldásával is (Mira et al., 2022). Az OpenMC a vizsgált benchmarkprobléma sajátértékére $1,18651 \pm 10^{-5}$ eredményt ad. Ez a referencia transzportmegoldáshoz képest $-3,4 \cdot 10^{-3}\%$ -os eltérést jelent. Ha ezt az eltérést a Serpent 2 számításéhoz viszonyítjuk, látható, hogy a kettő között három nagyságrendnyi különbség van.

Összeségében tehát kijelenthetjük, hogy a Serpent 2 megoldása más Monte Carlo kódok eredményeihez képest jóval nagyobb mértékben tér el a referencia MCNP számítástól. A nagyobb eltérés oka, hogy a Serpent 2 az említett Monte Carlo kódokkal ellentétben folytonos energiás számítást végzett. A többi kód, amelyek eredményei bemutatásra kerültek, mind hétszoros problémaként kezelte a benchmarkot.

Mivel a Serpent 2 kizárólag folytonos energiás számításokat tesz lehetővé, így nem tudtam a vizsgálódást tovább folytatni, és a kóddal többszörös Monte Carlo megoldást készíteni a benchmarkproblémára vonatkozóan. A későbbiekben érdemes lehet a benchmarkot olyan

Monte Carlo kóddal reprodukálni, melyben lehetőség van mind folytonos energiás, mind többscsoport neutrontranszport szimulációra.

A transzportmegoldás mellett saját csoportállandó-készletet is generáltam a benchmark csoportállandóinak reprodukálása céljából. Az általam generált csoportállandók felhasználásával készült determinisztikus (diffúziós és SP₃) számításokat azonban nem a benchmark kiértékelése során meghatározott referenciához hasonlítottam (Smith et al., 2003) az energiaváltozó eltérő értelmezése miatt. Viszonyítási alapul a Serpent 2 transzportmegoldása szolgált.

4.2. Csoportállandó-generálás

A C5G7 hétscsoport probléma számára a benchmark leírásában előre meghatározott csoportállandó-készlet szerepel (Lewis et al., 2001). A 2.1. alfejezetben található meg felsorolás formájában, hogy pontosan mely csoportállandók lettek a leírásban definiálva. A vizsgálódásom célja az volt, hogy a hét energiacsoport megadott csoportállandóit reprodukáljam a Serpent 2 Monte Carlo kód segítségével.

A csoportállandó-generálás során a benchmark pontos geometriájával dolgoztam, amely a 26. ábrán látható. Az alábbi anyagi régiókra készültek csoportállandók: a moderátorra, a különböző pálcákra, a vezetőcsőre, valamint a hasadási kamrára. A moderátor kivételével minden anyagi régió esetén a pálcaburkolat és az azt kitöltő anyag (pl. üzemanyag, víz) homogenizálásával történt a csoportállandók létrehozása. Ezt jól szemlélteti a 3. ábra. Fontos továbbá, hogy a termikus szórás a ¹H izotóp esetében figyelembe lett véve.

A generált csoportállandókat és azok referenciától való eltérését egy kiválasztott anyagra vonatkozóan mutatom be, – jelen esetben az UO₂ üzemanyag-burkolat mixre – ugyanis minden anyagi régió esetében hasonló eltérések adódnak, és az összes adat ilyen formán való közlése nagyon hosszadalmas lenne, azonban ezek mellékletként megtekinthetők (4. melléklet). A referencia a benchmarkleírásban megadott csoportállandó-készlet (Lewis et al., 2001).

Az összehasonlítást azokra a paraméterekre végzem el, amelyek később az SPNDYN csoportállandó-inputjában közvetlenül vagy közvetve felhasználásra kerülnek. Ezek a következők:

1. Transzport hatáskeresztmetszet.
2. Teljes hatáskeresztmetszet.
3. Abszorpciós hatáskeresztmetszet.
4. A hasadási hatáskeresztmetszet és a hasadásonként keletkező neutronok átlagos számának szorzata.
5. Hasadási spektrum.
6. Szórási mátrix, amely magában foglalja az egyes szórási hatáskeresztmetszeteket.

A hatáskeresztmetszetek itt is makroszkópikus értelemben szerepelnek.

Az SPNDYN bemeneteként szolgáló csoportállandó-inputfájlban a fenti felsorolás elemein kívül a diffúziós állandót is szükséges megadni minden energiacsoportra vonatkozóan – SP₃ számítás esetében két diffúziós állandó jellegű mátrixot. Ezeket a transzport-, illetve teljes hatáskeresztmetszetekből származtathatjuk. A $v\Sigma_f$ mennyiség pedig egyszerűen a hasadási hatáskeresztmetszet és a hasadásonként átlagosan keletkező neutronszaám szorzataként állítható elő.

A 33-36. táblázatok az UO₂-os pálcához tartozó üzemanyag-burkolat mix csoportállandóit mutatják, valamint azok referenciától való eltéréseit.

Csoport	Σ_{tr}	Hiba [%]	Σ_{tot}	Hiba [%]	Σ_a	Hiba [%]
1	$1,40295 \cdot 10^{-1}$	21,2	$2,12446 \cdot 10^{-1}$	0,0	$7,97159 \cdot 10^{-3}$	0,7
2	$2,86832 \cdot 10^{-1}$	13,0	$3,53749 \cdot 10^{-1}$	0,5	$3,63659 \cdot 10^{-3}$	2,2
3	$3,82802 \cdot 10^{-1}$	20,3	$3,89729 \cdot 10^{-1}$	19,7	$2,71418 \cdot 10^{-2}$	1,4
4	$4,01152 \cdot 10^{-1}$	27,6	$4,11890 \cdot 10^{-1}$	26,4	$9,33704 \cdot 10^{-2}$	3,0
5	$3,14677 \cdot 10^{-1}$	0,9	$3,20807 \cdot 10^{-1}$	0,9	$2,94403 \cdot 10^{-2}$	1,9
6	$3,87325 \cdot 10^{-1}$	2,0	$3,95143 \cdot 10^{-1}$	1,6	$1,01161 \cdot 10^{-1}$	9,1
7	$5,31951 \cdot 10^{-1}$	5,8	$5,56508 \cdot 10^{-1}$	2,5	$2,63929 \cdot 10^{-1}$	6,7

33. táblázat. Az UO_2 üzemanyag-burkolat mix csoportállandói (1)

Csoport	$v\Sigma_f$	Hiba [%]	χ	Hiba [%]
1	$2,05021 \cdot 10^{-2}$	2,2	$5,81326 \cdot 10^{-1}$	1,1
2	$1,99691 \cdot 10^{-3}$	1,5	$4,18297 \cdot 10^{-1}$	1,6
3	$1,46603 \cdot 10^{-2}$	6,7	$3,76714 \cdot 10^{-4}$	11,1
4	$4,77988 \cdot 10^{-2}$	5,8	$1,65272 \cdot 10^{-7}$	40,5
5	$4,28124 \cdot 10^{-2}$	1,2	0	0
6	$1,81346 \cdot 10^{-1}$	10,3	0	0
7	$4,90618 \cdot 10^{-1}$	6,7	0	0

34. táblázat. Az UO_2 üzemanyag-burkolat mix csoportállandói (2)

Csoport	$\Sigma_{s,1 \rightarrow g}$	Hiba [%]	$\Sigma_{s,2 \rightarrow g}$	Hiba [%]	$\Sigma_{s,3 \rightarrow g}$	Hiba [%]	$\Sigma_{s,4 \rightarrow g}$	Hiba [%]
1	$1,57032 \cdot 10^{-1}$	23,1	0	0	0	0	0	0
2	$4,74154 \cdot 10^{-2}$	11,9	$3,48594 \cdot 10^{-1}$	7,4	0	0	0	0
3	$2,49726 \cdot 10^{-5}$	164,6	$1,51836 \cdot 10^{-3}$	6,9	$3,59887 \cdot 10^{-1}$	20,2	0	0
4	$1,91809 \cdot 10^{-8}$	247,7	$8,92920 \cdot 10^{-10}$	71,6	$2,69495 \cdot 10^{-3}$	0,6	$3,12556 \cdot 10^{-1}$	30,9
5	0	0	0	0	0	0	$5,96858 \cdot 10^{-3}$	7,2
6	0	0	0	0	0	0	0	0
7	0	0	0	0	0	0	0	0

35. táblázat. Az UO_2 üzemanyag-burkolat mix szórás mátrixa (1)

Csoport	$\Sigma_{s,5 \rightarrow g}$	Hiba [%]	$\Sigma_{s,6 \rightarrow g}$	Hiba [%]	$\Sigma_{s,7 \rightarrow g}$	Hiba [%]
1	0	0	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0	0
3	0	0	0	0	0	0
4	$9,94246 \cdot 10^{-5}$	20,6	0	0	0	0
5	$2,82219 \cdot 10^{-1}$	4,0	$1,22810 \cdot 10^{-3}$	5,3	0	0
6	$9,04379 \cdot 10^{-3}$	11,8	$2,77402 \cdot 10^{-1}$	4,4	$5,13167 \cdot 10^{-3}$	40,0
7	0	0	$1,53495 \cdot 10^{-2}$	8,7	$2,87481 \cdot 10^{-1}$	5,3

36. táblázat. Az UO_2 üzemanyag-burkolat mix szórás mátrixa (2)

A 33. táblázat alapján megállapítható, hogy a gyors tartományban lévő csoportok esetében a transzport hatáskeresztmetszet a referenciától jelentősen eltér. Nagyobb eltérések fedezhetők

fel a totális hatáskeresztmetszet értékekben is, ezek a számottevő különbségek a 3. és 4. energiacsoportot érintik. Az abszorpciós hatáskeresztmetszetekre a referenciát jól közelítő megoldások adódnak.

A $v\Sigma_f$ szorzat esetében szintén referenciához közeli értékeket kapunk. Ha a vizsgált mennyiség nagyságrendje kicsi, akkor kis abszolút eltérés is nagy relatív hibaértékhez vezethet; a hasadási spektrumban fellépő nagyobb eltérések is ebből erednek.

A szórési mátrixot tekintve pedig elmondható, hogy olyan nagy mértékű eltérés, amely nem a vizsgált fizikai mennyiség nagyságrendjéből ered, jellemzően a mátrix főátlójában fordul elő. Diffúziós számítások esetén a szórési mátrix főátlójában lévő elemek nem kerülnek felhasználásra, így ezek az eltérések az SP₃ eredményeket befolyásolhatják érdemben. A transzport hatáskeresztmetszeteknél tapasztalt eltérések viszont számottevő hatással lehetnek az SPNDYN számítási eredményeire mindkét közelítésnél.

Mivel a referencia csoportállandók generálásának folyamata nincsen részletesen közölve, így a 33-36. táblázatokban látott eltérések eredetét nehéz kiszűrni. Azonban az az információ rendelkezésünkre áll, hogy a benchmarkleírásban meghatározott csoportállandókat az egyes pálcacellák végtelen rácsba való helyezésével állították elő, mégpedig az ütközések valószínűségén alapuló DRAGON kód segítségével. A csoportállandó-generáláshoz a WIMS-AECL 69-csoportos könyvtárat használták fel. (Smith et al., 2003)

Annak érdekében, hogy a Serpent 2 által generált csoportállandókat ne csak más kód eredményeihez hasonlítsam, olyan referenciát kerestem a szakirodalomban, amely a Serpent 2 kód C5G7 benchmarkra vonatkozó csoportállandó-generálásával foglalkozik.

A Serpent 2 Monte Carlo kód felhasználásával vizsgálja a kétdimenziós C5G7 benchmarkproblémát Hou et al. 2015-ös cikke, melyben a benchmark megoldásán kívül csoportállandókat is készítettek az UO₂ és MOX üzemanyagkazettákra. A cikkben közölt Serpent számítások az ENDF/B-VII.0-ás, folytonos energiás könyvtárak felhasználásával készültek. Hogy az általam összeállított Serpent modell helyességét igazoljam, és a kód alkalmazhatóságát tovább elemezzem csoportállandó-generálás tekintetében, a cikkben leírtak szerint újra feldolgoztam a benchmarkproblémát.

Az értekezésben egyértelműen jelezve van, hogy a vitatott benchmarknak egy kis mértékben módosított verziójával foglalkoztak, — ilyen módosítás például az üzemanyag és a burkolat közötti rés elhanyagolása – valamint a csoportállandók létrehozásakor hét energiacsoport helyett csak négy csoportot alkalmaztak. Azokat a változtatásokat, amelyeket pontosan dokumentáltak, a saját Serpent modellemben is végrehajtottam a jobb összehasonlíthatóság szempontjából, viszont nem minden módosítás szerepelt a cikkben részletesen kifejtve. Az egyes csoportokhoz tartozó energiahatárok a 37. táblázatban találhatóak.

Csoport	Energiatartomány [eV]
1	$14,9 \cdot 10^6 - 1,1 \cdot 10^5$
2	$1,1 \cdot 10^5 - 7,1 \cdot 10^3$
3	$7,1 \cdot 10^3 - 2,38$
4	$2,38 - 0$

37. táblázat. A négy neutroncsoport energia szerinti felosztása

Elsőként a problémára kapott sajátértékeket vetem össze, a cikk eredményeit tekintem a következőkben referenciának. A referencia sajátérték $1,17241 \pm 2 \cdot 10^{-4}$, míg a saját Serpent számításaim esetében ez $1,17120 \pm 8,9 \cdot 10^{-5}$, amely -0,103% eltérést eredményez a referenciához képest.

Valós reaktorfizikai problémák esetén általában kazetta- vagy pálcacellaszintű egységekre állítanak elő csoportállandókat. Ez jellemzően úgy történik, hogy a csoportállandó-generálás során a vizsgált kazettát vagy pálcacellát végtelen rácsba helyezik. A cikkben számított csoportállandók is ilyen módon készültek; az UO_2 és a MOX üzemanyag-kazetták határán reflektív peremfeltétel volt értelmezve (Hou et al., 2015). Fontos megjegyezni, hogy végtelen rács alkalmazásakor a fluxus spektrumának kazetta- vagy pálcacellabeli eloszlása a tényleges eloszlástól különbözni fog, ellenben, ha a csoportállandó-generálás folyamán a valós geometriával dolgozunk, figyelembe vesszük a fluxus spektrumának helyfüggését is.

A 38. táblázat az UO_2 és a MOX üzemanyag-kazettákhoz tartozó sajátértékeket jeleníti meg. A 39-42. táblázatokban pedig összehasonlításra kerülnek a teljes, a befogási és a nulladrendű szórási hatáskeresztmetszetek a referenciával, valamint a $v\Sigma_f$ szorzat is. A lenti táblázatok közül a 39. és a 40. az UO_2 kazettára, a 41. és 42. pedig a MOX kazettára vonatkozik. Az értékek megadásakor a referencia csoportállandók pontosságával dolgoztam.

Kazetta	Kód	$k_{\text{eff}} [-]$	Hiba [%]
UO_2	referencia Serpent 2	$1,32970 \pm 2 \cdot 10^{-4}$	-
	Serpent 2	$1,33431 \pm 8 \cdot 10^{-5}$	0,347
MOX	referencia Serpent 2	$1,18129 \pm 2 \cdot 10^{-4}$	-
	Serpent 2	$1,18990 \pm 8 \cdot 10^{-5}$	0,729

38. táblázat. Az üzemanyag-kazetták sajátértéke

Csoport	Σ_t			Σ_c		
	referencia Serpent 2	Serpent 2	Hiba [%]	referencia Serpent 2	Serpent 2	Hiba [%]
1	0,370	0,353	- 4,5	$9,02 \cdot 10^{-4}$	$8,65 \cdot 10^{-4}$	- 4,1
2	0,798	0,763	- 4,4	$3,50 \cdot 10^{-3}$	$3,14 \cdot 10^{-3}$	- 10,4
3	0,910	0,878	- 3,5	$1,98 \cdot 10^{-2}$	$1,89 \cdot 10^{-2}$	- 4,5
4	1,130	1,394	23,4	$3,33 \cdot 10^{-2}$	$3,20 \cdot 10^{-2}$	- 4,0

39. táblázat. Az UO_2 üzemanyag-kazetta csoportállandói (1)

Csoport	$v\Sigma_f$			$\Sigma_{s,0}$		
	referencia Serpent 2	Serpent 2	Hiba [%]	referencia Serpent 2	Serpent 2	Hiba [%]
1	$4,81 \cdot 10^{-3}$	$4,92 \cdot 10^{-3}$	2,4	0,368	0,351	- 4,7
2	$1,44 \cdot 10^{-3}$	$1,37 \cdot 10^{-3}$	- 4,9	0,793	0,759	- 4,3
3	$1,34 \cdot 10^{-2}$	$1,29 \cdot 10^{-2}$	- 3,6	0,885	0,853	- 3,6
4	$1,61 \cdot 10^{-1}$	$1,53 \cdot 10^{-1}$	- 5,3	1,030	1,300	26,2

40. táblázat. Az UO_2 üzemanyag-kazetta csoportállandói (2)

Csoport	Σ_t			Σ_c		
	referencia Serpent 2	Serpent 2	Hiba [%]	referencia Serpent 2	Serpent 2	Hiba [%]
1	0,370	0,353	- 4,6	$9,19 \cdot 10^{-4}$	$8,85 \cdot 10^{-4}$	- 3,7
2	0,801	0,765	- 4,4	$3,65 \cdot 10^{-3}$	$3,26 \cdot 10^{-3}$	- 10,7
3	0,924	0,891	- 3,6	$2,44 \cdot 10^{-2}$	$2,32 \cdot 10^{-2}$	- 5,0
4	1,250	1,451	16,1	$1,10 \cdot 10^{-2}$	$1,10 \cdot 10^{-2}$	- 0,2

41. táblázat. A MOX üzemanyag-kazetta csoportállandói (1)

Csoport	$\nu\Sigma_f$			$\Sigma_{s,0}$		
	referencia Serpent 2	Serpent 2	Hiba [%]	referencia Serpent 2	Serpent 2	Hiba [%]
1	$6,47 \cdot 10^{-3}$	$6,59 \cdot 10^{-3}$	1,9	0,367	0,350	- 4,7
2	$1,93 \cdot 10^{-3}$	$1,87 \cdot 10^{-3}$	- 3,0	0,796	0,762	- 4,3
3	$2,36 \cdot 10^{-2}$	$2,26 \cdot 10^{-2}$	- 4,1	0,892	0,860	- 3,6
4	$2,90 \cdot 10^{-1}$	$2,80 \cdot 10^{-1}$	- 3,3	1,040	1,244	19,6

42. táblázat. A MOX üzemanyag-kazetta csoportállandói (2)

A fenti táblázatokat tekintve megállapítható, hogy az általam futtatott Serpent számítások a referenciával jó egyezést mutatnak. Magasabb eltérések a teljes és a nulladrendű szórási hatáskeresztmetszeteknél fordulnak elő a termikus tartományban; ez mindkét kazetta esetén megfigyelhető. A második csoport befogási hatáskeresztmetszeténél jelentkező 10% körüli hiba nem feltétlen számottevő, ugyanis a vizsgált mennyiség 10^{-3} nagyságrendben mozog, így viszonylag kis abszolút eltérés is nagy relatív hibát eredményezhet.

Mivel a referenciamegoldásnál a benchmarkproblémában eszközölt módosítások nincsenek kellő pontossággal rögzítve (Hou et al., 2015), így az általam futtatott Serpent 2 modellek referenciától való eltérései magyarázhatóak ezekkel a nem közölt változtatásokkal, illetve eltérések származhatnak abból, hogy a számítások különböző hatáskeresztmetszet-könyvtárakat alkalmaztak. Összeségében viszont elmondható, hogy Serpent 2 és Serpent 2 számítás között nem lépnek fel kimagaslóan nagy mértékű különbségek, így az általam összeállított Serpent modell helyesnek feltételezhető.

Ez alapján valószínűsíthető, hogy a benchmark kiírásában meghatározott és az általam generált csoportállandók azért térnek el, mert a benchmark leírásában a csoportállandó-generálás folyamata nincsen megfelelően specifikálva ahhoz, hogy abból a referenciát jól közelítő csoportállandó-készletet lehessen létrehozni.

A módosítások ellenére kijelenthető, hogy a felhasznált publikációban (Hou et al., 2015) megjelenő sajátérték a benchmarkprobléma eredeti referencia MCNP megoldását szintén alul becsüli, ahogy a 4.1. alfejezetben bemutatott Serpent 2 által számított k_{eff} is. Ez ismét arra enged következtetni, hogy a referencia Monte Carlo megoldástól való eltérés abból ered, hogy a Serpent 2 folytonos energiás számítást végzett a benchmark megoldása során, nem pedig többscsoport módszerrel dolgozott.

4.3. Számítások a generált csoportállandó-készlettel

Bár a Serpent 2 által generált csoportállandók a transzport hatáskeresztmetszetek tekintetében jelentősen eltértek a benchmarkban leírtaktól (Lewis et al., 2001), a létrehozott csoportállandó-készletet felhasználtam az SPNDYN determinisztikus transzportkód bemeneteként. A készlet alkalmazásával diffúziós, illetve SP₃ számításokat végeztem a benchmarkproblémára.

A számítások a 3. fejezetben ismertetett végeselem-hálók közül a 3. hálóval készültek. A futtatásokat ugyanolyan beállításokkal, illetve konvergencia-kritériumokkal végeztem, mint amelyeket a korábbi SPNDYN számítások során, a benchmarkleírásban megadott csoportállandók használatakor alkalmaztam.

Az eredmények feldolgozásakor azonban nem a benchmarkprobléma referencia MCNP megoldását veszem viszonyítási alapként (Smith et al., 2003), hiszen a Serpent 2-vel végzett teljes zónás számítások ettől nagyfokú eltérést mutattak, továbbá a generált csoportállandók egy része is jelentősen különbözött a megadottaktól. Az SPNDYN eredményeit a saját

referencia transzportmegoldással vetem össze, amely a Serpent 2 Monte Carlo kód segítségével készült.

A kiértékelés szempontjai a korábbiakhoz képest változatlanok; a sajátértéket, a jellemző kazetta- és pálcateljesítményeket, illetve a nevezetes hibaértékeket hasonlítom össze a választott referenciával.

4.3.1. DIFFÚZIÓS SZÁMÍTÁS

Elsőként az SPNDYN diffúziós moduljának segítségével dolgoztam fel újra a benchmarkproblémát, ezúttal a Serpent 2 által generált csoportállandókból állítottam össze a számításhoz szükséges csoportállandó-inputfájlt. A számítás során ez az egyetlen változtatás, ettől eltekintve ugyanazok a paraméterek kerültek megadásra, mint a korábbi diffúziós megoldások esetén.

Az eredmények pontosságát a Serpent 2 segítségével számított referencia transzportmegoldáshoz hasonlítom. A 43-48. táblázatok ezt az összehasonlítást jelenítik meg.

Kód	Háló	k_{eff} [-]	Hiba [%]
referencia Serpent 2	-	$1,17120 \pm 8,9 \cdot 10^{-5}$	-
SPNDYN	3.	1,17837	0,612

43. táblázat. A sajátérték az új diffúziós megoldásnál

Kód	Háló	Legnagyobb pálcateljesítmény [-]	Hiba [%]	Legkisebb pálcateljesítmény [-]	Hiba [%]	Legnagyobb relatív hiba [%]
referencia Serpent 2	-	$2,421 \pm 9,3 \cdot 10^{-3}$	-	$0,233 \pm 2,2 \cdot 10^{-3}$	-	-
SPNDYN	3.	2,408	- 0,57	0,242	3,77	3,97

44. táblázat. A jellemző pálcateljesítmények az új diffúziós megoldásnál

Kód	Háló	Belső UO_2 kazetta teljesítménye [-]	Hiba [%]	MOX kazetta teljesítménye [-]	Hiba [%]	Külső UO_2 kazetta teljesítménye [-]	Hiba [%]
referencia Serpent 2	-	$479,8 \pm 0,15$	-	$218,0 \pm 0,10$	-	$140,2 \pm 0,09$	-
SPNDYN	3.	482,6	0,58	215,9	- 0,94	141,5	0,93

45. táblázat. A kazettateljesítmények az új diffúziós megoldásnál

Kód	Háló	AVG [%]	RMS [%]	MRE [%]
referencia Serpent 2	-	0,50	0,48	0,42
SPNDYN	3.	1,09	1,31	1,05

46. táblázat. A jellemző hibaértékek az új diffúziós számításoknál

Kód	Háló	Pálcák száma 68%-os konfidenciaintervallumban [-]	Pálcák száma 90%-os konfidenciaintervallumban [-]	Pálcák száma 98%-os konfidenciaintervallumban [-]	Pálcák száma 99,8%-os konfidenciaintervallumban [-]
SPNDYN	3.	231	408	547	707

47. táblázat. Az egyes konfidenciaintervallumokba eső pálcák száma az új diffúziós megoldásnál

Kód	Háló	Pálcák 68%-os konfidenciaintervallumban [%]	Pálcák 90%-os konfidenciaintervallumban [%]	Pálcák 98%-os konfidenciaintervallumban [%]	Pálcák 99,8%-os konfidenciaintervallumban [%]
SPNDYN	3.	21,9	38,6	51,8	67,0

48. táblázat. Az egyes konfidenciaintervallumokba eső pálcák aránya az új diffúziós megoldásnál

A sajátérték tekintetében a diffúziós megoldás jelentősen, 0,612%-kal felül becsüli a referencia k_{eff} -et. A kazetta- és pálcateljesítmények, valamint a jellemző hibaértékek terén valamelyest kisebb eltérések adódnak, mint amelyeket akkor tapasztaltunk, amikor az SPNDYN előre meghatározott csoportállandó-készlettel készült diffúziós számítását viszonyítottuk a megadott referencia MCNP megoldáshoz.

A maximális hiba a 3.1. alfejezetben bemutatott diffúziós megoldásokhoz képest jól láthatóan kisebb, jelen esetben a legnagyobb hiba 3,97% a SPNDYN korábbi 7,54%-ához, és a CRONOS2 5,95%-ához képest. Az egyes konfidenciaintervallumokba eső pálcák hányada is megnövekedett. Amikor a benchmark eredeti csoportállandóival készült diffúziós számítászt elemeztük, a 99,8%-os konfidenciaintervallumba mindössze a pálcák 17,5%-a tartozott bele, míg az új csoportállandó-készlet használatával végzett diffúziós megoldásnál ez 67,0%.

Még egyszer fontos kiemelni, hogy a korábbi diffúziós számításokkal ellentétben ezúttal nem a benchmark leírásában megadott referencia Monte Carlo megoldást tekintetem viszonyítási alapnak (Lewis *et al.*, 2001), hanem a saját Serpent 2 kóddal készített transzportmegoldásomat.

Azért kaphattunk általánosan referenciához közelebbi értékeket, mert a csoportállandó-generálás során ugyanazt a geometriát alkalmaztam, mint amellyel a referencia transzportmegoldás is készült; ezáltal a fluxus spektrumának helyfüggését is figyelembe vettem. Illetve az is lényeges, hogy a csoportállandók létrehozásához és a referencia megoldás számításához ugyanazt a kódot, a Serpent 2-öt használtam fel.

A benchmarkban közölt csoportállandókat a DRAGON kód segítségével generálták, a referencia transzportmegoldást pedig az MCNP Monte Carlo kóddal végezték. A csoportállandó-generálás során a pálcacellák végtelen rácsba való helyezésével állították elő a szükséges paramétereket, így a fluxus spektrumának helyfüggését nem vették teljeskörűen számításba (Smith *et al.*, 2003).

4.3.2. SP₃ SZÁMÍTÁS

A Serpent 2 által generált csoportállandó-készletet felhasználtam a benchmark-probléma SP₃ közelítéssel való megoldásához is. Ahogy a diffúziós számítások esetén, úgy most is ez az egyetlen változtatás a megoldás menetében, ettől eltekintve ugyanazok a paraméterek kerültek megadásra, mint a referencia csoportállandók alkalmazásakor.

Az eredmények pontosságát ismét a Serpent 2 segítségével számított referencia transzportmegoldáshoz viszonyítom. Ezt az összehasonlítást a 49-54. táblázatokban láthatjuk.

Kód	Háló	k_{eff} [-]	Hiba [%]
referencia Serpent 2	-	$1,17120 \pm 8,9 \cdot 10^{-5}$	-
SPNDYN	3.	1,17768	0,553

49. táblázat. A sajátérték az új SP₃ megoldásnál

Kód	Háló	Legnagyobb pálcateljesítmény [-]	Hiba [%]	Legkisebb pálcateljesítmény [-]	Hiba [%]	Legnagyobb relatív hiba [%]
referencia Serpent 2	-	$2,421 \pm 9,3 \cdot 10^{-3}$	-	$0,233 \pm 2,2 \cdot 10^{-3}$	-	-
SPNDYN	3.	2,393	- 1,17	0,242	3,46	5,41

50. táblázat. A jellemző pálcateljesítmények az új SP₃ megoldásnál

Kód	Háló	Belső UO ₂ kazetta teljesítménye [-]	Hiba [%]	MOX kazetta teljesítménye [-]	Hiba [%]	Külső UO ₂ kazetta teljesítménye [-]	Hiba [%]
referencia Serpent 2	-	479,8 ± 0,15	-	218,0 ± 0,10	-	140,2 ± 0,09	-
SPNDYN	3.	481,3	0,32	216,2	- 0,83	142,3	1,50

51. táblázat. A kazettateljesítmények az új SP₃ megoldásnál

Kód	Háló	AVG [%]	RMS [%]	MRE [%]
referencia Serpent 2	-	0,50	0,48	0,42
SPNDYN	3.	1,34	1,74	1,17

52. táblázat. A jellemző hibaértékek az új SP₃ megoldásnál

Kód	Háló	Pálcák száma 68%-os konfi- denciainter- vallumban [-]	Pálcák száma 90%-os konfi- denciainter- vallumban [-]	Pálcák száma 98%-os konfi- denciainter- vallumban [-]	Pálcák száma 99,8%-os konfi- denciainter- vallumban [-]
SPNDYN	3.	243	367	514	662

53. táblázat. Az egyes konfidenciaintervallumokba eső pálcák száma az új SP₃ megoldásnál

Kód	Háló	Pálcák 68%-os konfidenciainter- vallumban [%]	Pálcák 90%-os konfidenciainter- vallumban [%]	Pálcák 98%-os konfidenciainter- vallumban [%]	Pálcák 99,8%-os konfidenciainter- vallumban [%]
SPNDYN	3.	23,0	34,8	48,7	62,7

54. táblázat. Az egyes konfidenciaintervallumokba eső pálcák aránya az új SP₃ megoldásnál

Az összehasonlítás eredményeként elmondható, hogy az SP₃ közelítéssel számított sajátérték felfelé tér el a referenciától, az eltérés százalékban kifejezve 0,553%. A diffúziós számításokhoz képest a kazetta- és pálcateljesítmények terén nagyobb különbségeket figyelhetünk meg. A 4.3.1. szakaszban bemutatott diffúziós megoldásnál a pálcateljesítményekre vonatkozó legnagyobb hiba 4% alatt volt, most pedig közel 5,5%. Az AVG, RMS és MRE jellemző hibaértékek nagyobbak, illetve a 90%-, 98%- és 99,8%-os konfidenciaintervallumokba eső pálcák száma is csökken.

Ennek az oka, hogy az SP₃ megoldás csoportállandó-inputjának készítésekor egyfajta korrekciót alkalmaztam; ez a módosítás az első effektív diffúziós együttható mátrixot érinti.

Ha az elméleti meggondolást követjük, a számításokhoz szükséges első effektív diffúziós együttható mátrixot helyesen a (4.1) egyenlet szerint állíthatjuk elő.

$$\mathbf{D}_1 = \frac{1}{3} (\mathbf{\Sigma}_t - \mathbf{\Sigma}_{s1})^{-1} \quad (4.1)$$

A (4.1) egyenletben szereplő $\mathbf{\Sigma}_t$ diagonális mátrix, amely főátlójában az egyes csoportokra vonatkozó teljes hatáskeresztmetszetek szerepelnek, $\mathbf{\Sigma}_{s1}$ pedig a lineárisan anizotróp szórás mátrix.

A lineárisan anizotróp szórás mátrix elemeit az (1.18) egyenlet alapján származtatjuk, csak a fluxus helyett a megfelelő fluxusmomentummal, vagyis a neutronárammal szükséges súlyozni. A Monte Carlo kódok viszont differenciális mennyiségeket csak nagy bizonytalanságokkal számítanak (Szatmáry, 2000), így a Serpent 2 az elsőrendű szórás mátrix elemeinek előállításakor az áram helyett közelítő megoldásként a fluxussal dolgozik. A Serpent 2 által alkalmazott módszert a (4.2) egyenlet tartalmazza (Leppänen, 2016).

$$\Sigma_{s1}^{gg'} = \frac{\sum_{h \in g} \sum_{h' \in g'} \Sigma_{s1}^{hh'} \Phi_h}{\sum_{h \in g} \Phi_h} \quad (4.2)$$

Az így generált lineárisan anizotróp szórási mátrix használata – szakirodalomban fellelhető referenciák alapján – a számítások pontatlanságát növelné. A Σ_{s1} mátrix közvetlen felhasználásával végeztek számítást például a BME Oktatóreaktorára vonatkozóan a reaktor reaktivitás-tartalékának megállapítása céljából (Ványi *et al.*, 2021). A Serpent 2 által generált elsőrendű szórási mátrix segítségével végzett SP_3 és S_{10} számítások a referencia Serpent 2 transzportmegoldást jelentősen felülbecsülték, akár több ezer pcm-el is.

Az elsőrendű szórási mátrix elemeinek fluxussal, illetve árammal való súlyozását vitatja Böröczki Zoltán *et al.* konferenciájuk (2022), amely a két módszer közötti különbséget a Serpent 2 és az ERANOS ECCO kódokon keresztül mutatja be.

Hogy a lineárisan anizotróp szórási mátrixból származó eltéréseket kiküszöböljem, a D_1 -et az elmélet szerint helyes megoldástól eltérően képeztem. Diagonális mátrixnak tekintettem, és a főátlóban lévő elemeket a (4.3) egyenlet alapján származtattam.

$$D_{n,n} = \frac{1}{3 \cdot \Sigma_{n,n}^{tr}} \quad (4.3)$$

Ez a közelítés az elméleti összefüggés alkalmazásánál pontosabb eredményt ad (Böröczki *et al.*, 2022), összeségében viszont az új csoportállandó-készlettel készült számítások pontosságát az elméletben elvártakhoz képest rontja.

A 49-54. táblázatok adatait összehasonlítottam annak az SP_3 számításnak az eredményeivel is, amelyet a benchmark kiírásában szereplő csoportállandók felhasználásával végeztem el. A két megoldás összehasonlítási alapja más; az utóbbi a benchmarkban megadott referencia MCNP megoldáshoz lett viszonyítva. Elmondható, hogy a referenciától való eltérések mértéke nagyobb, mint a 3.2. alfejezetben bemutatott SP_3 számítás esetén. Ez abból eredhet, hogy a generált csoportállandóknál a transzport- és a teljes hatáskeresztmetszet, valamint a szórási mátrix esetében számottevő eltéréseket tapasztaltunk, és ezek a paraméterek az SP_3 számítás csoportállandó-inputfájljában mind megjelentek valamilyen formában.

A 4.2. és 4.3. alfejezetek értelmében kijelenthető, hogy a Serpent 2 Monte Carlo kóddal generált csoportállandók a referencia csoportállandó-készlettől jelentős eltérést mutatnak. Ennek csupán egyik oka, hogy a csoportállandó-generálás különböző módszerekkel történt, illetve, hogy nem állt rendelkezésre részletes leírás a referencia csoportállandók származtatásáról. Ezekről eltekintve is megállapítható, hogy a Serpent 2 a DRAGON kódtól eltérő módon értelmezi a transzport hatás-keresztmetszetet, a különbség felderítése pedig a jövőben érdekes lehet. A diffúziós számítások összehasonlításával pedig alátámasztottam az a feltevést, miszerint a fluxus spektrumának helyfüggését figyelembevéve a generált csoportállandók pontosabb determinisztikus megoldásokhoz vezethetnek. Az SP_3 számítások összevetése pedig felhívja a figyelmet a Serpent 2 által generált csoportállandók alkalmazásának korlátaira.

5. ÖSSZEFOGLALÁS

5.1. Eredmények

Dolgozatomban bemutattam a kétdimenziós időfüggetlen C5G7 benchmarkproblémát és a benchmarkspezifikáció célját. Felkutattam azokat a szakirodalmi referenciákat, amelyek munkám során relevánsnak bizonyultak.

A benchmarkproblémát determinisztikus transzportközelítésekkel, valamint Monte Carlo módszerrel is vizsgáltam, ezek során megismerkedtem az SPNDYN és a Serpent 2 reaktorfizikai kódok működésével és használatával.

Az SPNDYN végeselem-módszeren alapuló reaktorfizikai kód diffúziós-, illetve SP₃ moduljainak segítségével is elvégeztem a benchmarkhoz tartozó számításokat. Mind a diffúziós, mind az SP₃ számítások esetében hálóérzékenység-vizsgálatot végeztem; tanulmányoztam az eredmények referenciától való eltérését a hálósűrűség függvényében. Négy különböző sűrűségű (nódus- és elemszámú) hálót alkalmaztam a probléma megoldása során, és megállapítottam, hogy általánosságban a referenciától való eltérések a háló sűrítésével csökkennek. Megfigyeltem továbbá, hogy ez a csökkenés nem következik be szükségszerűen, ha a hálózás elemszámát növelem, mivel az eredmények nem feltétlenül korlátos konvergenciával tartanak a hálófüggetlen értékhez.

Megoldottam a benchmarkot diffúziós transzportközelítéssel, és elemeztem az eredményeket egy kiválasztott végeselem-háló esetében. Levontam a következtetést, miszerint a diffúzióelmélet a referencia MCNP megoldáshoz képest nagy eltéréseket ad. A saját diffúziós számításaim megítélése céljából az eredményeimet összevetettem a CRONOS2 reaktorfizikai kód diffúziós megoldásával. A két kód referenciától való eltéréseit hasonló mértékűnek találtam, a tapasztalt kisebb különbségekre pedig magyarázatot adtam.

SP₃ transzportközelítéssel is vizsgáltam a választott benchmarkproblémát; ugyanannak a végeselem-hálónak a felhasználásával készítettem SP₃ megoldást, mint amelyet a diffúziós számításnál is alkalmaztam. Konstatáltam, hogy az SP₃ közelítés a referencia Monte Carlo megoldással nagyobb egyezést mutat, mint a diffúzió, és feltártam ennek okait. Az SP₃ eredményeket a NEM reaktorfizikai kód szintén SP₃ közelítéssel végzett számításaihoz hasonlítottam. Azt tapasztaltam, hogy a két megoldás közelítőleg azonos mértékben tért el a referenciától, valamint következtettem, hogy a két SP₃ számítás között fellépő kisebb eltérések miből származhatnak. Összevettem az egyszerűsített P₃ módszer eredményét a P₃ közelítésével, és megállapítottam, hogy az SP₃ módszer kevésbé pontosnak bizonyul.

Feldolgoztam a benchmarkproblémát a Serpent 2 Monte Carlo kód segítségével, majd a kapott értékeket a korábbiakban is alkalmazott referencia MCNP megoldáshoz viszonyítottam. Az összehasonlítás során jelentős eltéréseket észleltem, az eltérések eredetét pedig bemutattam.

Saját csoportállandó-készletet generáltam a benchmarkra vonatkozóan ugyancsak a Serpent 2 használatával. A létrehozott csoportállandókat összehasonlítottam a benchmarkkiírásban megadottakkal, és számottevő eltéréseket tapasztaltam a transzport hatáskeresztmetszetek esetében. Felhasználtam a generált csoportállandókat az SPNDYN reaktorfizikai kód bemeneteként; diffúziós és SP₃ közelítéssel is megoldottam a benchmarkproblémát. A számítások eredményeinek kiértékeléséhez az általam számított transzportmegoldást választottam referenciaként.

Megállapítottam, hogy az új csoportállandókkal készült diffúziós megoldás jobb egyezést mutat a választott referenciával, mint amelyet az eredeti csoportállandó-készlettel végzett diffúziós számítás mutat a benchmarkleírásban közölt referencia MCNP megoldással. Az SP₃

számítás esetében pedig megfigyeltem, hogy az eredményei a diffúziósnál nagyobb mértékben térnek el a Serpent 2 transzportmegoldásától. Az eltérés okát ismerttettem, továbbá levontam a következtetést, hogy a Serpent 2 Monte Carlo kód csoportállandó-generálás terén milyen körülmények között alkalmazható.

5.2. Kitekintés

A feladat elkészítése során betekintést nyerhettem abba, hogy a determinisztikus transzportközelítések és -kódok hogyan funkcionálnak, amikor kazetta- és pálcacellaszintű homogenizáció nélkül szükséges megoldaniuk reaktorfizikai problémákat. Az egyes determinisztikus közelítésekről kijelenthető, hogy a Monte Carlo módszerekhez képest kevésbé pontosak, de a kedvezőbb számítási idő miatt továbbra is ezeket alkalmazzák atomerőművi zónaelemzéseknél. Két transzportközelítés pontossága között is jelentős eltérés állhat fent, ezt a dolgozatomban bemutatott diffúziós és SP_3 eredmények között tapasztalt különbségek jól szemléltetik. Az SPNDYN kód alkalmazhatóságának felderítése szempontjából célszerű lehet a benchmarkprobléma háromdimenziós, illetve időfüggő specifikációit is megoldani.

Az SPNDYN végeselem-módszeren alapuló reaktorfizikai kóddal végzett hálóérzékenységvizsgálat pedig rávilágít, hogy a végeselem-háló sűrűsége kritikus pont a számítások során. Hogy az eredmények hálósűrűségtől való függését tovább vizsgáljuk, érdemes lehet a jövőben a probléma hálófüggetlen megoldásának megkeresése.

A benchmark Serpent 2 kóddal való feldolgozása kapcsán azt is volt lehetőségem megfigyelni, hogy egy többcsoport és egy folytonos energiás Monte Carlo számítás között milyen jelentős eltérések léphetnek fel. A csoportállandó-generálás elemzéséből leszűrhetjük, hogy a számított csoportállandók értéke nagy mértékben függ a generálás folyamatától, így valós reaktorfizikai problémák megoldása során mindig fontos, hogy milyen módon származtatjuk az adott csoportállandó-készletet. A munkám során azt is megvizsgálhattam, hogy milyen hatással van a csoportállandókra, ha a generálás folyamán a fluxus helyfüggését is figyelembe vesszük.

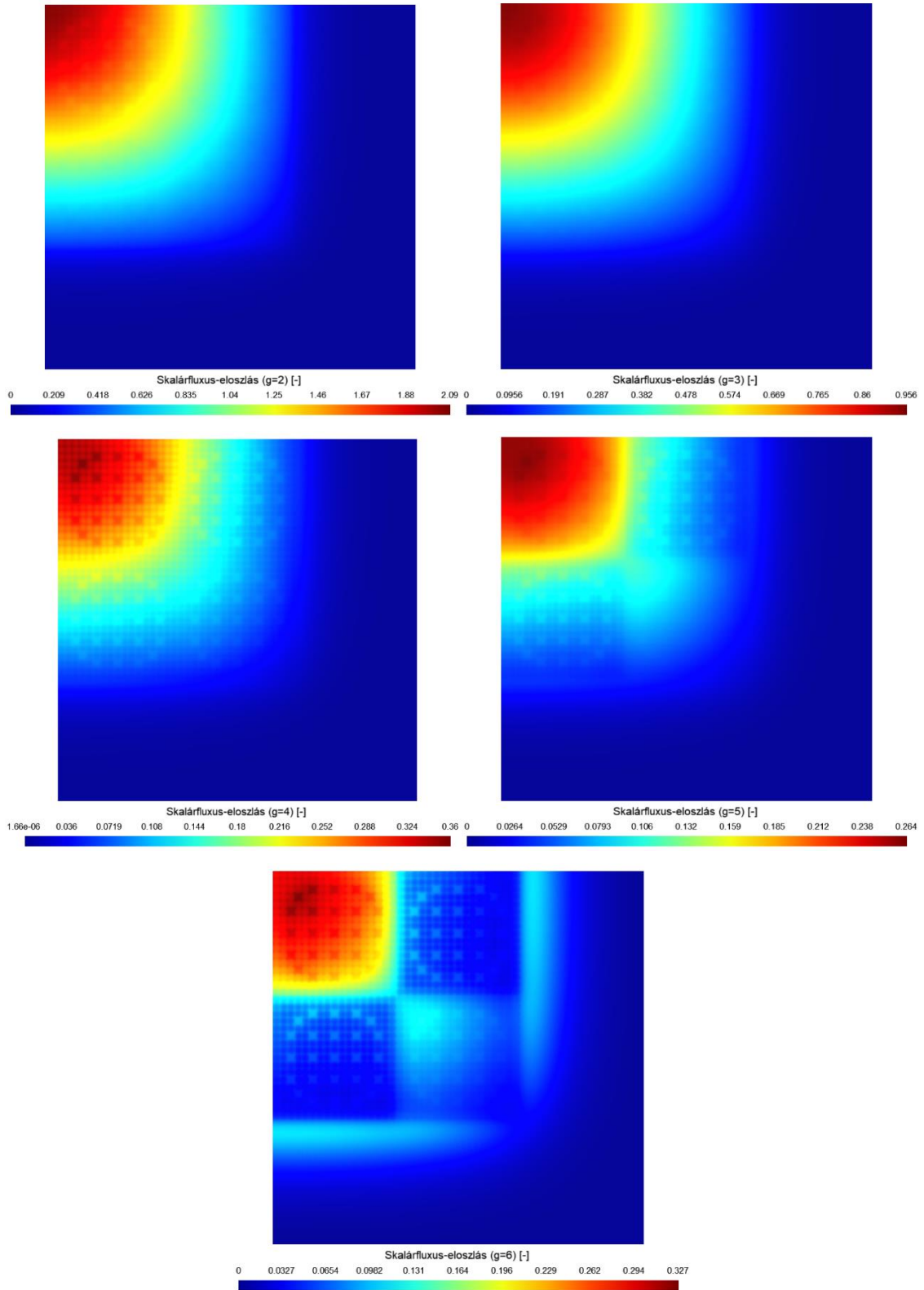
A benchmarkprobléma csoportállandóinak reprodukálása során a Serpent 2 Monte Carlo kód alkalmazhatóságának korlátaira is fény derült; a kapott csoportállandó-készlet jelentősen eltért a megadottaktól. Ez többek között azt is felveti, hogy a Serpent 2 más csoportállandó-generálásra alkalmas kódoktól eltérő módszerrel dolgozik vagy másképpen értelmez egyes paramétereket. Ebből kifolyólag érdemes lehet mélyebben is foglalkozni a Serpent 2 kód számítási hátterével, és ezt más Monte Carlo kódokkal összevetni.

6. FELHASZNÁLT FORRÁSOK

1. BABCSÁNY BOGLÁRKA (2021): *Development of a finite-element-based reactor physics code system for the solution of the simplified P_3 approximation to the neutron transport equation*. Doktori disszertáció. Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Nukleáris Technikai Intézet
2. BÖRÖCZKI, Z. I. – BABCSÁNY, B. – MARÓTI, J. E. – SZIEBERTH, M. (2022): *On the effect of scalar weighting of linearly anisotropic scattering matrices in higher-order transport calculations*. In Proceedings of International Conference on Physics of Reactors 2022 (PHYSOR 2022), Amerikai Egyesült Államok, PA, Pittsburgh, 2022. május 15-20.
3. CHO, J. Y. – JOO, H. G. (2006): *Solution of the C5G7MOX benchmark three-dimensional extension problem by the DeCART direct whole core calculation code*. Progress in Nuclear Energy 48: 456-466
4. DEHART, M. D. – MAUSOLFF, Z. – WEEMS, Z. – POPP, D. – SMITH, K. – SHRIVER, F. – GOLUOGLU, S. – PRINCE, Z. – RAGUSA J. (2016): *Preliminary results for the OECD/NEA time dependent benchmark using Rattlesnake, Rattlesnake-IQS and TDKENO*. INL/EXT-16-39723, Idaho National Laboratory, Nuclear Systems Design and Analysis, Idaho Falls
5. GEUZAIN, C. – REMACLE, J.-F. (2009): *Gmsh: a three-dimensional finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities*. International Journal for Numerical Methods in Engineering 79: 1309-1331
6. HOU, J. – CHOI, H. – IVANOV, K. N. (2015): *Development of an iterative diffusion-transport method based on MICROX-2 cross section libraries*. Annals of Nuclear Energy 77: 335-342
7. LUX, I. – KOBLINGER, L. (1991): *Monte Carlo particle transport methods: Neutron and photon calculations*. CRC Press, Boca Raton, Ann Arbor, Boston
8. LEPPÄNEN, J. – PUSA, M. – VIITANEN, T. – VALTAVIRTA, V. – KALTIAISENAHO, T. (2015): *Overview of methodology for spatial homogenization in the Serpent 2 Monte Carlo code*. Annals of Nuclear Energy 96: 126-136
9. LEPPÄNEN, J. – PUSA, M. – FRIDMAN, E. (2016): *The Serpent Monte Carlo code: Status, development and applications in 2013*. Annals of Nuclear Energy 82: 142-150
10. LEWIS, E. E. – SMITH, M. A. – TSOUFANIDIS, N. – PALMIOTI, G. – TAIWO, T. A. – BLOMQUIST, R. N. (2001): *Benchmark specification for deterministic 2-D/3-D MOX fuel assembly transport calculations without spatial homogenisation (C5G7 MOX)*. NEA/NSC/DOC(2001)4, JT00105087, OECD Nuclear Energy Agency
11. MATHUR, M. – SINGH, S. – KHAN, S. A. – JAGANNATHAN, V. (2015): *Analysis of the 2-D C5G7 MOX benchmark with VISVAM code*. International Journal of Nuclear Science and Engineering (IJNESE) 5: 19-27
12. MIRA, M. – EL HAJJAJI, O. – JAI, O. – EL BARDOUNI, T. – AL ZAIN, J. – EL YAAKOUBI, H. – IDRISSE A. (2022): *Derivations of optimal process MOC parameters and analysis of the 2D C5G7 MOX benchmark using DRAGON5 code*. Nuclear Engineering and Design 388: 1116113

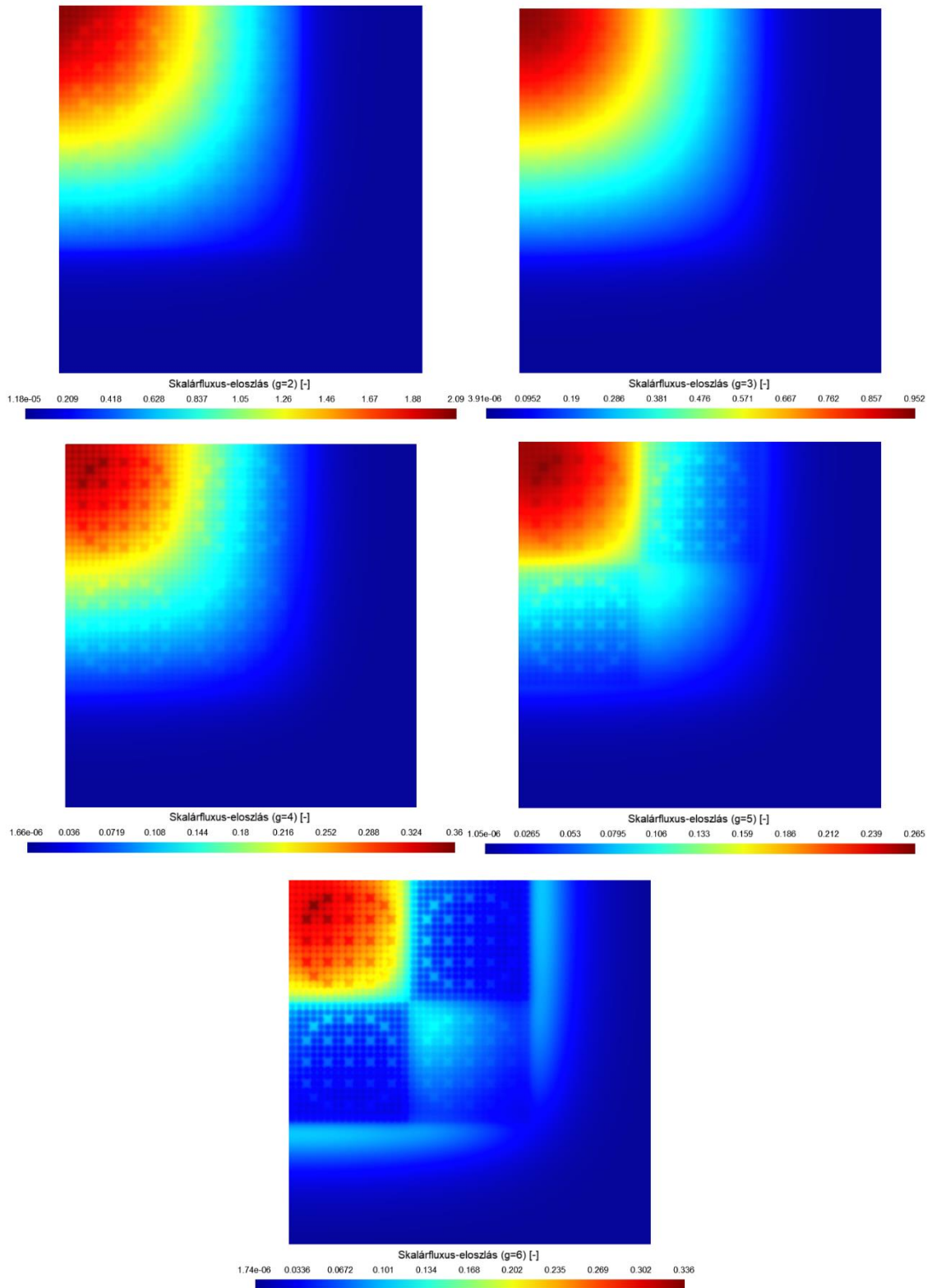
13. SHEN, Q. – WANG, Y. – JABAAY, D. – KOCHUNAS, B. – DOWNAR T. (2019): *Transient analysis of C5G7-TD bechmark with MPACT*. Annals of Nuclear Energy 125: 107-120
14. SMITH, M. A. – LEWIS, E. E. – TSOUFANIDIS, N. – PALMIOTI, G. – TAIWO, T. A. – BLOMQUIST, R. N. (2003): *Benchmark on deterministic transport calculations without spatial homogenization. A 2-D/3-D MOX fuel assembly benchmark*. NEA/NSC/DOC(2003)16, ISBN 92-64-02139-6, OECD Nuclear Energy Agency, Paris
15. SMITH, M. A. – LEWIS, E. E. – TSOUFANIDIS, N. – PALMIOTI, G. – TAIWO, T. A. – BLOMQUIST, R. N. (2005): *Benchmark on deterministic transport calculations without spatial homogenization. MOX fuel assembly 3-D extension case*. NEA/NSC/DOC(2005)16, ISBN 92-64-01069-6. OECD Nuclear Energy Agency, Paris
16. STACEY, W. M. (2001): *Nuclear Reactor Physics*. John Wiley & Sons, INC.
17. SZATMÁRY ZOLTÁN (2000): *Bevezetés a reaktorfizikába*. Egyetemi jegyzet. Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Nukleáris Technikai Intézet
18. SZATMÁRY ZOLTÁN (2007): *Reaktorfizika mérnököknek*. Egyetemi jegyzet. Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Nukleáris Technikai Intézet
19. THOMPSON, S. A. (2014): *Advanced reactor physics methods for heterogeneous reactor cores*. Doktori disszertáció. The Pennsylvania State University, College of Engineering
20. WU, W. – YU, Y. – LUO, Q. – YAO, D. – X. CHAI (2020): *Verification of the 3D capability of OpenMOC with the C5G7 3D extension benchmark*. Annals of Nuclear Energy 140: 107293
21. YANG, X. – BORSE, R. – SATVAT N. (2016): *MOCUM solutions and sensitivity study for C5G7 benchmark*. Annals of Nuclear Energy 97: 242-248
22. VÁNYI, A. SZ. – BABCSÁNY, B. – BÖRÖCZKI, Z. I. – HORVÁTH, A. – HURSIN, M. – SZIEBERTH, M. – CZIFRUS, SZ. (2021): *Steady-state neutronic measurements and comprehensive numerical analysis for the BME training reactor*. Annals of Nuclear Energy 155: 1081044

1. MELLÉKLET: A DIFFÚZIÓS ÉS SP₃ MEGOLDÁSOK FLUXUS-ELOSZLÁSAI



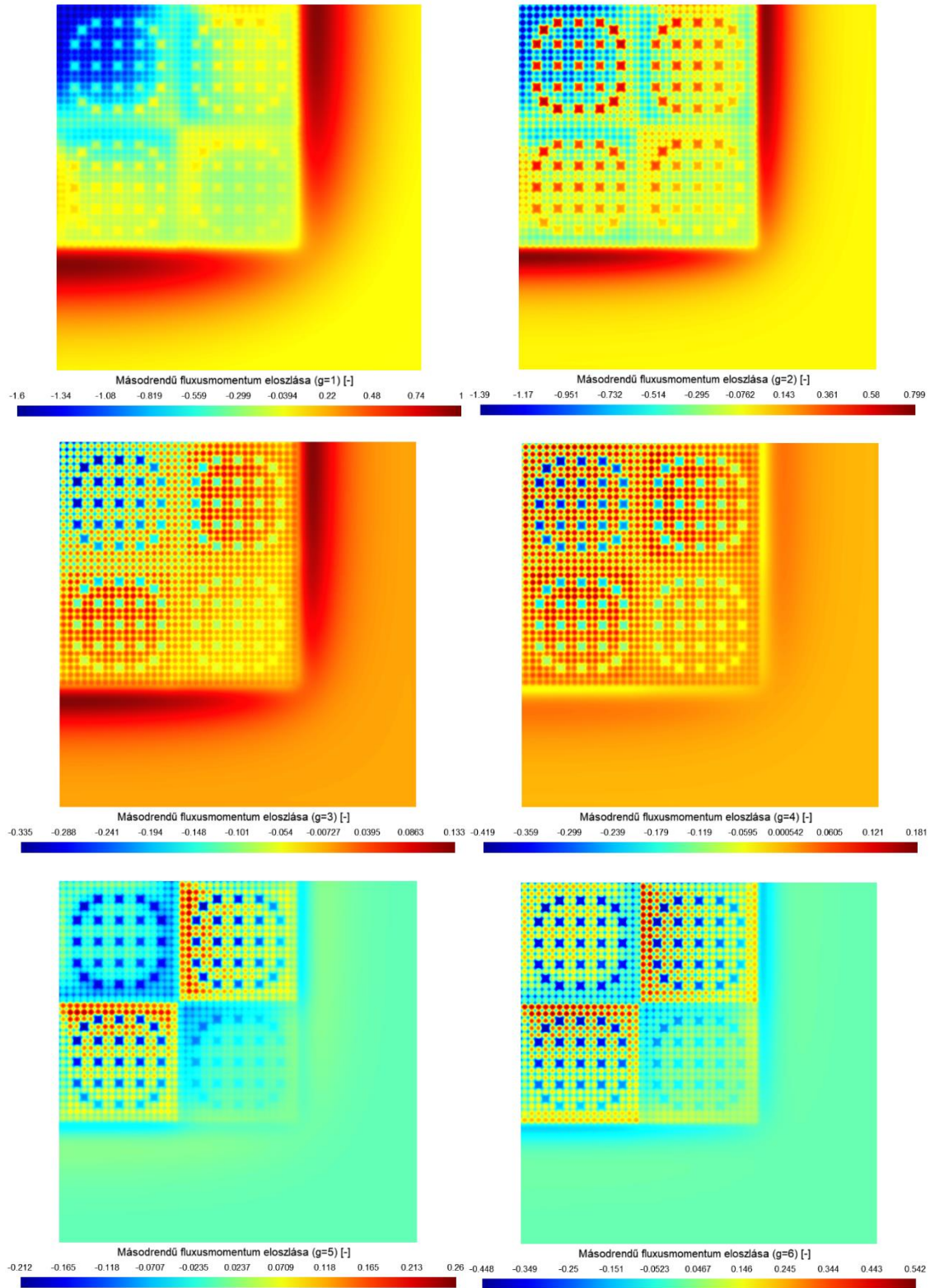
27-31. ábra. A diffúziós megoldás fluxuseloszlásai a gyors energiacsoport maximumával normálva

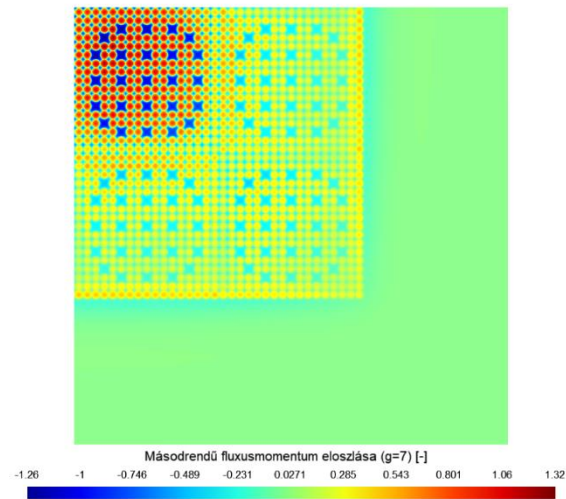
27. ábra: Második energiacsoport, 28. ábra: Harmadik energiacsoport,
29. ábra: Negyedik energiacsoport, 30. ábra: Ötödik energiacsoport, 31. ábra: Hatodik energiacsoport



32-36. ábra. Az SP₃ megoldás fluxuseloszlásai a gyors energiacsoport maximumával normálva

32. ábra: Második energiacsoport, 33. ábra: Harmadik energiacsoport,
 34. ábra: Negyedik energiacsoport, 35. ábra: Ötödik energiacsoport, 36. ábra: Hatodik energiacsoport





37-43. ábra. Az SP_3 megoldás másodrendű fluxusmomentumainak eloszlása a gyors energiacsoport maximumával normálva

37. ábra: Első energiacsoport, 38. ábra: Második energiacsoport, 39. ábra: Harmadik energiacsoport,
 40. ábra: Negyedik energiacsoport, 41. ábra: Ötödik energiacsoport, 42. ábra: Hatodik energiacsoport,
 43. ábra: Hetedik energiacsoport

2. MELLÉKLET: A BENCHMARK PONTOS GEOMETRIÁJA ÉS IZOTÓP-ÖSSZETÉTELE

Anyag	Külső sugár [cm]
üzemanyag	0,4095
rés	0,4180
cirkónium burkolat	0,4751
rés	0,4800
alumínium burkolat	0,5400

55. táblázat. Az üzemanyagpálcák pontos geometriája

Anyag	Külső sugár [cm]
moderátor/hasadási kamra	0,3400
alumínium burkolat	0,5400

56. táblázat. A vezetőcsövek és a hasadási kamrák pontos geometriája

Izotóp	Magsűrűség [10^{24} 1/cm ³]				
	MOX 4,3%	MOX 7,0%	MOX 8,7%	UO ₂	moderátor
²³⁵ U	$5,00 \cdot 10^{-5}$	$5,00 \cdot 10^{-5}$	$5,00 \cdot 10^{-5}$	$8,650 \cdot 10^{-5}$	
²³⁸ U	$2,21 \cdot 10^{-2}$	$2,21 \cdot 10^{-2}$	$2,21 \cdot 10^{-2}$	$2,225 \cdot 10^{-2}$	
²³⁸ Pu	$1,50 \cdot 10^{-5}$	$2,40 \cdot 10^{-5}$	$3,00 \cdot 10^{-5}$		
²³⁹ Pu	$5,80 \cdot 10^{-4}$	$9,30 \cdot 10^{-4}$	$1,16 \cdot 10^{-3}$		
²⁴⁰ Pu	$2,40 \cdot 10^{-4}$	$3,90 \cdot 10^{-4}$	$4,90 \cdot 10^{-4}$		
²⁴¹ Pu	$9,80 \cdot 10^{-5}$	$1,52 \cdot 10^{-4}$	$1,90 \cdot 10^{-4}$		
²⁴² Pu	$5,40 \cdot 10^{-5}$	$8,40 \cdot 10^{-5}$	$1,05 \cdot 10^{-4}$		
²³¹ Am	$1,30 \cdot 10^{-5}$	$2,00 \cdot 10^{-5}$	$2,50 \cdot 10^{-5}$		
O	$4,63 \cdot 10^{-2}$	$4,63 \cdot 10^{-2}$	$4,63 \cdot 10^{-2}$	$4,622 \cdot 10^{-2}$	
H ₂ O					$3,35 \cdot 10^{-2}$
természetes B					$2,78 \cdot 10^{-5}$

57. táblázat. Az benchmarkban alkalmazott anyagok pontos izotóp-összetétele (1)

Izotóp	Magsűrűség [10^{24} 1/cm ³]			
	Zr burkolat	Al burkolat	abszorber	hasadási kamra
természetes Zr	$4,30 \cdot 10^{-2}$			
²⁷ Al		$6,00 \cdot 10^{-2}$		
¹⁰⁷ Ag			$2,27105 \cdot 10^{-2}$	
¹⁰⁹ Ag			$2,27105 \cdot 10^{-2}$	
¹¹⁵ In			$8,00080 \cdot 10^{-3}$	
¹¹³ Cd			$2,72410 \cdot 10^{-3}$	
²³⁵ U				$1,00 \cdot 10^{-8}$
H ₂ O				$3,35 \cdot 10^{-2}$
természetes B				$2,78 \cdot 10^{-5}$

58. táblázat. Az benchmarkban alkalmazott anyagok pontos izotóp-összetétele (2)

3. MELLÉKLET: AZ ÖSSZEÁLLÍTOTT SERPENT 2 MODELL INPUTJA

mat pinUO2	sum tmp 300
92235.03c	8.65E-4
92238.03c	2.225E-2
8016.03c	4.622E-2
mat pin43MOX	sum tmp 300
92235.03c	5E-5
92238.03c	2.21E-2
94238.03c	1.5E-5
94239.03c	5.8E-4
94240.03c	2.4E-4
94241.03c	9.8E-5
94242.03c	5.4E-5
95241.03c	1.3E-5
8016.03c	4.63E-2
mat pin7MOX	sum tmp 300
92235.03c	5E-5
92238.03c	2.21E-2
94238.03c	2.4E-5
94239.03c	9.3E-4
94240.03c	3.9E-4
94241.03c	1.52E-4
94242.03c	8.4E-5
95241.03c	2E-5
8016.03c	4.63E-2
mat pin87MOX	sum tmp 300
92235.03c	5E-5
92238.03c	2.21E-2
94238.03c	3E-5
94239.03c	1.16E-3
94240.03c	4.9E-4
94241.03c	1.9E-4
94242.03c	1.05E-4
95241.03c	2.5E-5
8016.03c	4.63E-2
mat Zrclad	4.3E-2 tmp 300
40090.03c	-0.5145
40091.03c	-0.1122
40092.03c	-0.1715
40094.03c	-0.1783
40096.03c	-0.0280
mat Alclad	sum tmp 300
13027.03c	6E-2
mat abs	sum tmp 300
47107.03c	2.27105E-2
47109.03c	2.27105E-2
48113.03c	8.0008E-3
49115.03c	2.7241E-3

mat fchamber	sum tmp 300 moder lwtr 1001
1001.03c	6.7E-2
8016.03c	3.35E-2
5010.03c	5.5322E-6
5011.03c	2.22678E-5
92235.03c	1E-8

mat mod	sum tmp 300 moder lwtr 1001
1001.03c	6.7E-2
8016.03c	3.35E-2
5010.03c	5.5322E-6
5011.03c	2.22678E-5

therm lwtr lwtr.30t

pin UU_base	
pinUO2	0.4095
void	0.4180
Zrclad	0.4750
void	0.4800
Alclad	

surf cyl1 cylz	0.0 0.0 0.54
----------------	--------------

cell c1UU fill UU_base	-cyl1
cell c2UU mod	cyl1

pin 4M_base	
pin43MOX	0.4095
void	0.4180
Zrclad	0.4750
void	0.4800
Alclad	

surf cyl2 cylz	0.0 0.0 0.54
----------------	--------------

cell c34M fill 4M_base	-cyl2
cell c44M mod	cyl2

pin 7M_base	
pin7MOX	0.4095
void	0.4180
Zrclad	0.4750
void	0.4800
Alclad	

surf cyl3 cylz	0.0 0.0 0.54
----------------	--------------

cell c57M fill 7M_base	-cyl3
cell c67M mod	cyl3

pin 8M_base	
pin87MOX	0.4095
void	0.4180
Zrclad	0.4750
void	0.4800
Alclad	

surf cyl4 cylz 0.0 0.0 0.54

cell c78M fill 8M_base -cyl4

cell c88M mod cyl4

pin gt_base

mod 0.3400

Alclad

surf cyl5 cylz 0.0 0.0 0.54

cell c9gt fill gt_base -cyl5

cell c10 gt mod cyl5

pin fc_base

fchamber 0.3400

Alclad

surf cyl6 cylz 0.0 0.0 0.54

cell c11 fc fill fc_base -cyl6

cell c12 fc mod cyl6

pin ww

mod

lat UO2 1 0.0 0.0 17 17 1.26

UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU
UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU
UU UU UU UU UU gt UU UU gt UU UU gt UU UU UU UU UU
UU UU UU gt UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU gt UU UU UU
UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU
UU UU gt UU UU gt UU UU gt UU UU gt UU UU gt UU UU
UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU
UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU
UU UU gt UU UU gt UU UU gt UU UU gt UU UU gt UU UU
UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU
UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU
UU UU gt UU UU gt UU UU gt UU UU gt UU UU gt UU UU
UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU
UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU
UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU UU

lat MOX 1 0.0 0.0 17 17 1.26

4M 4M 4M 4M 4M 4M 4M 4M 4M 4M 4M 4M 4M 4M 4M 4M 4M
4M 7M 7M 7M 7M 7M 7M 7M 7M 7M 7M 7M 7M 7M 7M 7M 4M
4M 7M 7M 7M 7M gt 7M 7M gt 7M 7M gt 7M 7M 7M 7M 4M
4M 7M 7M gt 7M 8M 8M 8M 8M 8M 8M 8M 7M gt 7M 7M 4M
4M 7M 7M 7M 8M 8M 8M 8M 8M 8M 8M 8M 8M 7M 7M 7M 4M
4M 7M gt 8M 8M gt 8M 8M gt 8M 8M gt 8M 8M gt 7M 4M
4M 7M 7M 8M 8M 8M 8M 8M 8M 8M 8M 8M 8M 8M 7M 7M 4M
4M 7M 7M 8M 8M 8M 8M 8M 8M 8M 8M 8M 8M 8M 7M 7M 4M
4M 7M gt 8M 8M gt 8M 8M fc 8M 8M gt 8M 8M gt 7M 4M
4M 7M 7M 8M 8M 8M 8M 8M 8M 8M 8M 8M 8M 8M 7M 7M 4M
4M 7M 7M 8M 8M 8M 8M 8M 8M 8M 8M 8M 8M 8M 7M 7M 4M
4M 7M gt 8M 8M gt 8M 8M gt 8M 8M gt 8M 8M gt 7M 4M
4M 7M 7M 7M 8M 8M 8M 8M 8M 8M 8M 8M 8M 7M 7M 7M 4M
4M 7M 7M gt 7M 8M 8M 8M 8M 8M 8M 8M 7M gt 7M 7M 4M
4M 7M 7M 7M 7M gt 7M 7M gt 7M 7M gt 7M 7M 7M 7M 4M
4M 7M 7M 7M 7M 7M 7M 7M 7M 7M 7M 7M 7M 7M 7M 4M
4M 4M 4M 4M 4M 4M 4M 4M 4M 4M 4M 4M 4M 4M 4M 4M

lat ass 1 0.0 0.0 4 4 21.42

UO2 MOX MOX UO2
MOX UO2 UO2 MOX
MOX UO2 UO2 MOX
UO2 MOX MOX UO2

surf s1 sqc 0.0 0.0 42.84

surf s2 sqc 0.0 0.0 64.26

cell c13 0 fill ass -s1

cell c14 0 fill ww s1 -s2

cell c15 0 outside s2

set bc 1

set pop 500000 500 50

plot 3 2460 2460 0.0 -64.26 0 0 64.26

mesh 3 2460 2460

set acelib "/share/mcnp/Serpent/xsdata/endfb71/endfb71/oma.xsdata"

set cpd 2

set gcu ww UU_base 4M_base 7M_base 8M_base gt_base fc_base

ene 7group 1 0 0.13E-6 0.63E-6 4.1E-6 55.6E-6 9.2E-3 1.36 1E1

set nfg 7group

4. MELLÉKLET: A SERPENT 2 FELHASZNÁLÁSÁVAL GENERÁLT CSOPORTÁLLANDÓ-KÉSZLET

Csoport	Σ_{tr}	Σ_{tot}	Σ_a	$v\Sigma_f$	χ
1	$1,39939 \cdot 10^{-1}$	$2,12437 \cdot 10^{-1}$	$8,38729 \cdot 10^{-3}$	$2,23373 \cdot 10^{-2}$	$5,92432 \cdot 10^{-1}$
2	$2,86952 \cdot 10^{-1}$	$3,54108 \cdot 10^{-1}$	$3,67759 \cdot 10^{-3}$	$2,50614 \cdot 10^{-3}$	$4,07206 \cdot 10^{-1}$
3	$3,85661 \cdot 10^{-1}$	$3,92957 \cdot 10^{-1}$	$2,81035 \cdot 10^{-2}$	$1,57440 \cdot 10^{-2}$	$3,61520 \cdot 10^{-4}$
4	$4,13674 \cdot 10^{-1}$	$4,20836 \cdot 10^{-1}$	$1,01246 \cdot 10^{-1}$	$6,54255 \cdot 10^{-2}$	$7,71944 \cdot 10^{-8}$
5	$3,69158 \cdot 10^{-1}$	$4,33342 \cdot 10^{-1}$	$1,37948 \cdot 10^{-1}$	$3,05421 \cdot 10^{-2}$	0
6	$6,24200 \cdot 10^{-1}$	$7,22522 \cdot 10^{-1}$	$4,42634 \cdot 10^{-1}$	$7,16623 \cdot 10^{-1}$	0
7	$6,63855 \cdot 10^{-1}$	$6,83329 \cdot 10^{-1}$	$3,97669 \cdot 10^{-1}$	$6,92130 \cdot 10^{-1}$	0

59. táblázat. A 4,7%-os MOX üzemanyag-burkolat mix csoportállandói

Csoport	$\Sigma_{s,1 \rightarrow g}$	$\Sigma_{s,2 \rightarrow g}$	$\Sigma_{s,3 \rightarrow g}$	$\Sigma_{s,4 \rightarrow g}$
1	$1,57096 \cdot 10^{-1}$	0	0	0
2	$4,69372 \cdot 10^{-2}$	$3,48907 \cdot 10^{-1}$	0	0
3	$2,32759 \cdot 10^{-5}$	$1,52289 \cdot 10^{-3}$	$3,62212 \cdot 10^{-1}$	0
4	0	0	$2,63867 \cdot 10^{-3}$	$3,13853 \cdot 10^{-1}$
5	0	0	0	$5,76116 \cdot 10^{-3}$
6	0	0	0	0
7	0	0	0	0

60. táblázat. A 4,7%-os MOX üzemanyag-burkolat mix szórási mátrixa (1)

Csoport	$\Sigma_{s,5 \rightarrow g}$	$\Sigma_{s,6 \rightarrow g}$	$\Sigma_{s,7 \rightarrow g}$
1	0	0	0
2	0	0	0
3	0	0	0
4	$1,18949 \cdot 10^{-4}$	0	0
5	$2,86701 \cdot 10^{-1}$	$1,76480 \cdot 10^{-3}$	0
6	$8,53232 \cdot 10^{-3}$	$2,63667 \cdot 10^{-1}$	$5,00059 \cdot 10^{-3}$
7	0	$1,43307 \cdot 10^{-2}$	$2,80613 \cdot 10^{-1}$

61. táblázat. A 4,7%-os MOX üzemanyag-burkolat mix szórási mátrixa (2)

Csoport	Σ_{tr}	Σ_{tot}	Σ_a	$v\Sigma_f$	χ
1	$1,41549 \cdot 10^{-1}$	$2,15064 \cdot 10^{-1}$	$9,02915 \cdot 10^{-3}$	$2,44573 \cdot 10^{-2}$	$5,92824 \cdot 10^{-1}$
2	$2,89634 \cdot 10^{-1}$	$3,57704 \cdot 10^{-1}$	$4,22218 \cdot 10^{-3}$	$3,83181 \cdot 10^{-3}$	$4,06819 \cdot 10^{-1}$
3	$3,96828 \cdot 10^{-1}$	$4,04408 \cdot 10^{-1}$	$3,35124 \cdot 10^{-2}$	$2,39699 \cdot 10^{-2}$	$3,56991 \cdot 10^{-4}$
4	$4,38218 \cdot 10^{-1}$	$4,44588 \cdot 10^{-1}$	$1,21048 \cdot 10^{-1}$	$9,57716 \cdot 10^{-2}$	$4,63415 \cdot 10^{-8}$
5	$3,95308 \cdot 10^{-1}$	$4,72206 \cdot 10^{-1}$	$1,72670 \cdot 10^{-1}$	$4,55529 \cdot 10^{-2}$	0
6	$7,45003 \cdot 10^{-1}$	$8,73790 \cdot 10^{-1}$	$5,98041 \cdot 10^{-1}$	$9,67328 \cdot 10^{-1}$	0
7	$8,30754 \cdot 10^{-1}$	$8,53189 \cdot 10^{-1}$	$5,71231 \cdot 10^{-1}$	1,01493	0

62. táblázat. A 7,0%-os MOX üzemanyag-burkolat mix csoportállandói

Csoport	$\Sigma_{s,1 \rightarrow g}$	$\Sigma_{s,2 \rightarrow g}$	$\Sigma_{s,3 \rightarrow g}$	$\Sigma_{s,4 \rightarrow g}$
1	$1,58727 \cdot 10^{-1}$	0	0	0
2	$4,72856 \cdot 10^{-2}$	$3,51946 \cdot 10^{-1}$	0	0
3	$2,46847 \cdot 10^{-5}$	$1,53289 \cdot 10^{-3}$	$3,68295 \cdot 10^{-1}$	0
4	0	$3,05537 \cdot 10^{-9}$	$2,60113 \cdot 10^{-3}$	$3,17833 \cdot 10^{-1}$
5	0	0	0	$5,69071 \cdot 10^{-3}$
6	0	0	0	0
7	0	0	0	0

63. táblázat. A 7,0%-os MOX üzemanyag-burkolat mix szórási mátrixa (1)

Csoport	$\Sigma_{s,5 \rightarrow g}$	$\Sigma_{s,6 \rightarrow g}$	$\Sigma_{s,7 \rightarrow g}$
1	0	0	0
2	0	0	0
3	0	0	0
4	$1,23800 \cdot 10^{-4}$	0	0
5	$2,91321 \cdot 10^{-1}$	$2,04319 \cdot 10^{-3}$	0
6	$8,04151 \cdot 10^{-3}$	$2,61083 \cdot 10^{-1}$	$5,38885 \cdot 10^{-3}$
7	0	$1,26405 \cdot 10^{-2}$	$2,76579 \cdot 10^{-1}$

64. táblázat. A 7,0%-os MOX üzemanyag-burkolat mix szórási mátrixa (2)

Csoport	Σ_{tr}	Σ_{tot}	Σ_a	$v\Sigma_f$	χ
1	$1,42533 \cdot 10^{-1}$	$2,16737 \cdot 10^{-1}$	$9,44342 \cdot 10^{-3}$	$2,58340 \cdot 10^{-2}$	$5,92709 \cdot 10^{-1}$
2	$2,91509 \cdot 10^{-1}$	$3,60108 \cdot 10^{-1}$	$4,58321 \cdot 10^{-3}$	$4,70748 \cdot 10^{-3}$	$4,06926 \cdot 10^{-1}$
3	$4,03291 \cdot 10^{-1}$	$4,11132 \cdot 10^{-1}$	$3,67309 \cdot 10^{-2}$	$2,91398 \cdot 10^{-2}$	$3,65206 \cdot 10^{-4}$
4	$4,52204 \cdot 10^{-1}$	$4,58075 \cdot 10^{-1}$	$1,32175 \cdot 10^{-1}$	$1,14135 \cdot 10^{-1}$	$1,41350 \cdot 10^{-7}$
5	$4,10751 \cdot 10^{-1}$	$4,95367 \cdot 10^{-1}$	$1,92978 \cdot 10^{-1}$	$5,49509 \cdot 10^{-2}$	0
6	$8,17466 \cdot 10^{-1}$	$9,60751 \cdot 10^{-1}$	$6,87162 \cdot 10^{-1}$	1,10885	0
7	$9,29503 \cdot 10^{-1}$	$9,53029 \cdot 10^{-1}$	$6,73771 \cdot 10^{-1}$	1,20503	0

65. táblázat. A 8,7%-os MOX üzemanyag-burkolat mix csoportállandói

Csoport	$\Sigma_{s,1 \rightarrow g}$	$\Sigma_{s,2 \rightarrow g}$	$\Sigma_{s,3 \rightarrow g}$	$\Sigma_{s,4 \rightarrow g}$
1	$1,59703 \cdot 10^{-1}$	0	0	0
2	$4,75668 \cdot 10^{-2}$	$3,53980 \cdot 10^{-1}$	0	0
3	$2,53152 \cdot 10^{-5}$	$1,54531 \cdot 10^{-3}$	$3,71882 \cdot 10^{-1}$	0
4	0	0	$2,54809 \cdot 10^{-3}$	$3,20271 \cdot 10^{-1}$
5	0	0	0	$5,65048 \cdot 10^{-3}$
6	0	0	0	0
7	0	0	0	0

66. táblázat. A 8,7%-os MOX üzemanyag-burkolat mix szórási mátrixa (1)

Csoport	$\Sigma_{s,5 \rightarrow g}$	$\Sigma_{s,6 \rightarrow g}$	$\Sigma_{s,7 \rightarrow g}$
1	0	0	0
2	0	0	0
3	0	0	0
4	$1,29428 \cdot 10^{-4}$	0	0
5	$2,94587 \cdot 10^{-1}$	$2,21993 \cdot 10^{-3}$	0
6	$7,71011 \cdot 10^{-3}$	$2,59869 \cdot 10^{-1}$	$5,70107 \cdot 10^{-3}$
7	0	$1,15205 \cdot 10^{-2}$	$2,73603 \cdot 10^{-1}$

67. táblázat. A 8,7%-os MOX üzemanyag-burkolat mix szórási mátrixa (2)

Csoport	Σ_{tr}	Σ_{tot}	Σ_a	$v\Sigma_f$	χ
1	$1,00652 \cdot 10^{-1}$	$1,88795 \cdot 10^{-1}$	$4,82701 \cdot 10^{-4}$	0	0
2	$2,35757 \cdot 10^{-1}$	$4,52252 \cdot 10^{-1}$	$4,64736 \cdot 10^{-5}$	0	0
3	$2,77253 \cdot 10^{-1}$	$6,39330 \cdot 10^{-1}$	$2,55931 \cdot 10^{-4}$	0	0
4	$2,84605 \cdot 10^{-1}$	$6,52573 \cdot 10^{-1}$	$1,10455 \cdot 10^{-3}$	0	0
5	$3,31311 \cdot 10^{-1}$	$6,74679 \cdot 10^{-1}$	$3,33750 \cdot 10^{-3}$	0	0
6	$4,94300 \cdot 10^{-1}$	$8,21329 \cdot 10^{-1}$	$8,04438 \cdot 10^{-3}$	0	0
7	$9,66315 \cdot 10^{-1}$	1,34971	$2,16432 \cdot 10^{-2}$	0	0

68. táblázat. A vezetőcső csoportállandói

Csoport	$\Sigma_{s,1 \rightarrow g}$	$\Sigma_{s,2 \rightarrow g}$	$\Sigma_{s,3 \rightarrow g}$	$\Sigma_{s,4 \rightarrow g}$
1	$1,29073 \cdot 10^{-1}$	0	0	0
2	$5,89600 \cdot 10^{-2}$	$3,99576 \cdot 10^{-1}$	0	0
3	$2,78456 \cdot 10^{-4}$	$5,23180 \cdot 10^{-2}$	$5,38018 \cdot 10^{-1}$	$9,19671 \cdot 10^{-8}$
4	$1,36181 \cdot 10^{-6}$	$2,87904 \cdot 10^{-4}$	$9,37501 \cdot 10^{-2}$	$4,62402 \cdot 10^{-1}$
5	$1,02854 \cdot 10^{-7}$	$1,95459 \cdot 10^{-5}$	$6,20340 \cdot 10^{-3}$	$1,61142 \cdot 10^{-1}$
6	$1,28377 \cdot 10^{-8}$	$2,94351 \cdot 10^{-6}$	$8,97687 \cdot 10^{-4}$	$2,26905 \cdot 10^{-2}$
7	0	$6,70357 \cdot 10^{-7}$	$2,07857 \cdot 10^{-4}$	$5,33275 \cdot 10^{-3}$

69. táblázat. A vezetőcső szórási mátrixa (1)

Csoport	$\Sigma_{s,5 \rightarrow g}$	$\Sigma_{s,6 \rightarrow g}$	$\Sigma_{s,7 \rightarrow g}$
1	0	0	0
2	0	0	0
3	0	0	0
4	$2,44940 \cdot 10^{-5}$	0	0
5	$4,41168 \cdot 10^{-1}$	$1,27050 \cdot 10^{-3}$	0
6	$1,96206 \cdot 10^{-1}$	$5,69378 \cdot 10^{-1}$	$2,47308 \cdot 10^{-2}$
7	$3,39441 \cdot 10^{-2}$	$2,42610 \cdot 10^{-1}$	1,30332

70. táblázat. A vezetőcső szórási mátrixa (2)

Csoport	Σ_{tr}	Σ_{tot}	Σ_a	$v\Sigma_f$	χ
1	$1,00588 \cdot 10^{-1}$	$1,88759 \cdot 10^{-1}$	$4,81785 \cdot 10^{-4}$	$1,34220 \cdot 10^{-8}$	$5,00000 \cdot 10^{-1}$
2	$2,36512 \cdot 10^{-1}$	$4,52023 \cdot 10^{-1}$	$4,64951 \cdot 10^{-5}$	$1,42879 \cdot 10^{-8}$	$5,00000 \cdot 10^{-1}$
3	$2,75985 \cdot 10^{-1}$	$6,38382 \cdot 10^{-1}$	$2,55193 \cdot 10^{-4}$	$1,19601 \cdot 10^{-7}$	0
4	$2,84704 \cdot 10^{-1}$	$6,52974 \cdot 10^{-1}$	$1,10473 \cdot 10^{-3}$	$4,25724 \cdot 10^{-7}$	0
5	$3,31005 \cdot 10^{-1}$	$6,75325 \cdot 10^{-1}$	$3,34042 \cdot 10^{-3}$	$3,44058 \cdot 10^{-7}$	0
6	$4,94395 \cdot 10^{-1}$	$8,23218 \cdot 10^{-1}$	$8,05693 \cdot 10^{-3}$	$1,51122 \cdot 10^{-6}$	0
7	$9,72962 \cdot 10^{-1}$	1,35744	$2,17215 \cdot 10^{-2}$	$4,71982 \cdot 10^{-6}$	0

71. táblázat. A hasadási kamra-burkolat mix csoportállandói

Csoport	$\Sigma_{s,1 \rightarrow g}$	$\Sigma_{s,2 \rightarrow g}$	$\Sigma_{s,3 \rightarrow g}$	$\Sigma_{s,4 \rightarrow g}$
1	$1,29048 \cdot 10^{-1}$	0	0	0
2	$5,89473 \cdot 10^{-2}$	$3,99444 \cdot 10^{-1}$	0	0
3	$2,81755 \cdot 10^{-4}$	$5,22250 \cdot 10^{-2}$	$5,37349 \cdot 10^{-1}$	0
4	$2,08820 \cdot 10^{-6}$	$2,84711 \cdot 10^{-4}$	$9,35007 \cdot 10^{-2}$	$4,62404 \cdot 10^{-1}$
5	0	$1,67294 \cdot 10^{-5}$	$6,16122 \cdot 10^{-3}$	$1,61256 \cdot 10^{-1}$
6	0	$3,12222 \cdot 10^{-6}$	$9,07902 \cdot 10^{-4}$	$2,29809 \cdot 10^{-2}$
7	0	$5,43849 \cdot 10^{-7}$	$2,09789 \cdot 10^{-4}$	$5,23162 \cdot 10^{-3}$

72. táblázat. A hasadási kamra-burkolat mix szórási mátrixa (1)

Csoport	$\Sigma_{s,5 \rightarrow g}$	$\Sigma_{s,6 \rightarrow g}$	$\Sigma_{s,7 \rightarrow g}$
1	0	0	0
2	0	0	0
3	0	0	0
4	$2,42044 \cdot 10^{-5}$	0	0
5	$4,42041 \cdot 10^{-1}$	$1,21964 \cdot 10^{-3}$	0
6	$1,96147 \cdot 10^{-1}$	$5,70366 \cdot 10^{-1}$	$2,48781 \cdot 10^{-2}$
7	$3,37601 \cdot 10^{-2}$	$2,43521 \cdot 10^{-1}$	1,31095

73. táblázat. A hasadási kamra-burkolat mix szórási mátrixa (2)

Csoport	Σ_{tr}	Σ_{tot}	Σ_a	$v\Sigma_f$	χ
1	$9,38744 \cdot 10^{-2}$	$2,19080 \cdot 10^{-1}$	$5,77797 \cdot 10^{-4}$	0	0
2	$2,97816 \cdot 10^{-1}$	$7,82218 \cdot 10^{-1}$	$1,94290 \cdot 10^{-5}$	0	0
3	$5,74600 \cdot 10^{-1}$	1,48320	$3,35538 \cdot 10^{-4}$	0	0
4	$5,85545 \cdot 10^{-1}$	1,50168	$1,91060 \cdot 10^{-3}$	0	0
5	$7,03657 \cdot 10^{-1}$	1,55803	$5,71620 \cdot 10^{-3}$	0	0
6	1,17058	1,97765	$1,48282 \cdot 10^{-2}$	0	0
7	2,34498	3,27200	$3,84306 \cdot 10^{-2}$	0	0

74. táblázat. A moderátor csoportállandói

Csoport	$\Sigma_{s,1 \rightarrow g}$	$\Sigma_{s,2 \rightarrow g}$	$\Sigma_{s,3 \rightarrow g}$	$\Sigma_{s,4 \rightarrow g}$
1	$1,13494 \cdot 10^{-1}$	0	0	0
2	$1,04340 \cdot 10^{-1}$	$6,42980 \cdot 10^{-1}$	0	0
3	$6,64136 \cdot 10^{-4}$	$1,38389 \cdot 10^{-1}$	1,21018	$1,54471 \cdot 10^{-7}$
4	$3,66799 \cdot 10^{-6}$	$7,68320 \cdot 10^{-4}$	$2,52849 \cdot 10^{-1}$	1,00803
5	$2,18405 \cdot 10^{-7}$	$5,18616 \cdot 10^{-5}$	$1,68432 \cdot 10^{-2}$	$4,18360 \cdot 10^{-1}$
6	$4,37449 \cdot 10^{-8}$	$7,52645 \cdot 10^{-6}$	$2,42699 \cdot 10^{-3}$	$5,94837 \cdot 10^{-2}$
7	0	$1,77413 \cdot 10^{-6}$	$5,70076 \cdot 10^{-4}$	$1,38972 \cdot 10^{-2}$

75. táblázat. A moderátor szórási mátrixa (1)

Csoport	$\Sigma_{s,5 \rightarrow g}$	$\Sigma_{s,6 \rightarrow g}$	$\Sigma_{s,7 \rightarrow g}$
1	0	0	0
2	0	0	0
3	0	0	0
4	$3,87574 \cdot 10^{-5}$	0	0
5	$9,63928 \cdot 10^{-1}$	$1,55505 \cdot 10^{-3}$	0
6	$5,01014 \cdot 10^{-1}$	1,20658	$4,40726 \cdot 10^{-2}$
7	$8,73257 \cdot 10^{-2}$	$7,54694 \cdot 10^{-1}$	3,18950

76. táblázat. A moderátor szórási mátrixa (2)