## Forschungszentrum Karlsruhe

in der Helmholtz-Gemeinschaft

Wissenschaftliche Berichte

FZKA 7428

# Analyse eines Druckwasserreaktors mit überkritischem Wasser als Kühlmittel

Bastian Vogt

Institut für Kern- und Energietechnik

Von der Fakultät für Energie-, Verfahrens- und Biotechnik der Universität Stuttgart genehmigte Dissertation

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

2008

Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

Forschungszentrum Karlsruhe GmbH Postfach 3640, 76021 Karlsruhe Mitglied der Hermann von Helmholtz-Gemeinschaft Deutscher Forschungszentren (HGF)

> ISSN 0947-8620 um:nbn:de:0005-074282

# Analyse eines Druckwasserreaktors mit überkritischem Wasser als Kühlmittel

Von der Fakultät für Energie-, Verfahrens- und Biotechnik der Universität Stuttgart zur Erlangung des akademischen Grades eines Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.) genehmigte Abhandlung.

vorgelegt von

Bastian Vogt

aus Wiesbaden

Hauptberichter:

Prof. Dr.-Ing. habil. E. Laurien Universität Stuttgart

Mitberichter:

Prof. Dr.-Ing. T. Schulenberg Universität Karlsruhe (TH)

Tag der mündlichen Prüfung: 02.07.2008

Fakultät für Energie-, Verfahrens- und Biotechnik der Universität Stuttgart Institut für Kernenergetik und Energiesysteme - Abteilung für Thermofluiddynamik-

### 2008

# Vorwort

Diese Arbeit entstand im Rahmen meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Angestellter der EnBW Kernkraft GmbH am Institut für Kern- und Energietechnik des Forschungszentrums Karlsruhe GmbH.

Dem Leiter der Abteilung Thermofluiddynamik des Instituts für Kernenergetik und Energiesysteme der Universität Stuttgart, Herrn Prof. Dr.-Ing. habil. E. Laurien danke ich besonders für die Übernahme des Hauptreferats dieser Arbeit und in diesem Zusammenhang speziell für die vertrauensvolle Zusammenarbeit und das große Interesse an dieser Arbeit.

Herrn Prof. Dr.-Ing. T. Schulenberg, Leiter des Instituts für Kern- und Energietechnik am Forschungszentrum Karlsruhe und Koreferent dieser Arbeit gilt mein herzlicher Dank, da sein persönlicher Einsatz und die stete Bereitschaft zur fachlichen Diskussion sehr zum Gelingen beigetragen haben.

Der EnBW Kernkraft GmbH danke ich aufrichtig für die finanzielle Unterstützung, wodurch diese Arbeit erst ermöglicht wurde. Darüber hinaus möchte ich mich besonders bei Frau. Dipl.-Päd. A. Schölch, Herrn Dr.-Ing. M. Möller, Herrn Dipl.-Ing. L. Vogel, Herrn Dipl.-Ing. K. Kirschenmann und Herrn Dr.-Ing. M. Rauth für die freundliche und kompetente Betreuung seitens des Kernkraftwerks Philippsburg und für die gute Zusammenarbeit bedanken.

Für ihre fachliche Hilfe und die wertvollen Ratschläge bedanke ich mich bei den Mitarbeitern des Instituts für Kern- und Energietechnik und besonders bei Herrn Priv.-Doz. Dr.-Ing. habil. A. G. Class, Herrn Dr.-Ing. J. Starflinger, Herrn Dr.-Ing. G. Grötzbach und Herrn Dr.-Ing. L. Meyer.

Allen Doktoranden, Diplom- und Studienarbeitern danke ich für ihren Einsatz, ihre Hilfsbereitschaft und die heiteren Kaffeepausen. Speziell danke ich meinem Büromitbewohner Herrn Dipl.-Phys. Toni Ortega Gómez und meinem ebenfalls von der EnBW finanzierten Doktorandenkollegen Herrn Dipl.-Ing. K. Fischer für die richtige Mischung aus produktiver Zusammenarbeit und unterhaltsamem Arbeitsklima.

Mein herzlichster Dank geht an meine Familie für die uneingeschränkte Unterstützung die sie mir während meiner gesamten Ausbildungszeit gegeben hat. Vor allem danke ich von ganzem Herzen meiner Freundin Edel, die mir über all die Jahre stets den Rücken gestärkt hat und tatkräftig bei Korrektur und Fertigstellung dieser Arbeit geholfen hat.

# Kurzfassung

Im Rahmen dieser Arbeit wird ein mit überkritischem Wasser gekühlter Druckwasserreaktor (SDWR) konzipiert und bezüglich seiner Wirtschaftlichkeit, Effizienz und technischen Machbarkeit untersucht. Der Schwerpunkt liegt dabei auf der Entwicklung der dazu notwendigen Auslegungs- und Analysemethoden. Im SDWR soll überkritisches Wasser bei einem Systemdruck von 25 MPa als Kühlmittel im Primärkreislauf Verwendung finden. Die Aufheizung im Reaktorkern erfolgt ausgehend von einer Eintrittstemperatur von 280 °C auf eine Kernaustrittstemperatur von 380 °C und liegt damit wesentlich höher als bei heutigen Druckwasserreaktoren (DWR). Wie in der Arbeit gezeigt wird, bewirkt die Verwendung von überkritischem Wasser mit den beschriebenen Parametern Vorteile bezüglich Effizienz und Wirtschaftlichkeit und zeigt aufgrund der besonderen Physik des Kühlmittels positive Sicherheitseigenschaften, da kritische Phänomene der Zweiphasenströmung (z.B. Siedekrise) ausgeschlossen sind. Im Gegenzug ergibt sich durch die hohe Aufheizung des Kühlmittels im Kern ein starker Dichteunterschied zwischen Einund Austritt des Kerns und motiviert so zur Verwendung eines komplizierten Brennelements mit getrennten Moderator- und Kühlmittelkanälen in Gegenströmung. Dieser Umstand verlangt nach einer neue Kernauslegungsmethode, welche eine detaillierte Berücksichtigung der komplizierten Brennelementgeometrie ermöglicht und gleichzeitig die thermohydraulisch-neutronische Kopplung der Reaktorphysik berücksichtigt. Eine solche Methode wurde durch eine Verknüpfung des kommerziellen Neutronikprogramms MCNP5 mit einer modifizierten Version des Thermohydraulikprogramms STAFAS entwickelt und auf den SDWR-Reaktorkern angewendet. Dabei konnte neben Leistungs-, Massenstrom- und Temperaturverteilung auch das thermisch höchst belastete Brennelement ermittelt werden, welches in nachfolgenden Unterkanalanalysen genauer untersucht wurde. Der so genannte Unterkanalansatz, der dabei Anwendung findet, zeichnet sich durch eine wesentlich detaillierte räumliche Auflösung aus und erlaubt somit die Berechnung von lokalen, sicherheitsrelevanten Daten wie Kühlmittel-, Brennstoff- und Hüllrohrtemperaturen. Voraussetzung für die Unterkanalanalyse ist die Kenntnis der individuellen Leistungsverteilung der einzelnen Brennstäbe im heißesten Brennelement. Die dazu notwendige Interpolationsmethode zur Berechnung der lokalen Leistung aus der vergleichsweise groben Kernberechnung ist ebenfalls Gegenstand der Arbeit. Darüber hinaus benötigt die Unterkanalsimulation entsprechend des dabei gelösten Satzes von volumetrisch gemittelten Gleichungen verschiedene thermohydraulische Modelle. Aufgrund der speziellen Physik des überkritischen Wassers und der komplexen Brennelementgeometrie, existieren für diesen Strömungsfall keinerlei experimentell validierte Unterkanalmodelle, wie sie beispielsweise zur Berücksichtigung von Druckverlust, Querströmung und turbulenter Durchmischung verwendet werden müssen. Aus diesem Grund wurden im Rahmen der Arbeit fundierte dreidimensionale CFD-Untersuchungen (RANS / URANS) der Kühlmittelströmung im Stabbündel mit dem kommerziellen Programm Star-CD durchgeführt. Die CFD-Ergebnisse wurden zunächst anhand experimenteller Korrelationen validiert und anschließend für die Erstellung von neuen Modellen für die Unterkanalanalyse verwendet.

# Abstract

### Analyses of a Supercritical Water Cooled Pressurized Water Reactor

A Supercritical Water Cooled Pressurized Water Reactor (SDWR) has been investigated in terms of technical feasibility, efficiency and economic features. In this context the main focus of this work is on the development of suitable methods for the different analysis steps. The SDWR reactor concept includes a primary coolant loop with water under supercritical pressure conditions (system pressure 25 MPa) and a heat up in the reactor core from 280 °C up to 380 °C. Due to these relatively high thermodynamic conditions the SDWR provides considerable advantages in the area of efficiency and economy compared to conventional pressurized water reactors. Additionally the physics of the supercritical water (single phase flow) shall result in favourable safety features because unwanted twophase flow phenomena like DNB and Dry-Out are excluded. On the other hand the high heat up of the coolant leads to a rather large coolant density change between the inlet and the outlet of the core. This requires the use of a complicated fuel assembly design with separated channels for the counter current flow of coolant and moderator in the reactor core. This complicated design and the strong property change of the supercritical water in the core give rise to the development of an new coupled thermal hydraulic - neutronic core calculation method. Therefore the neutronic code MCNP5 and a modified version of the thermal hydraulics code STAFAS have been coupled and successfully applied on the reactor core of the SDWR. As a result characteristic data like the distribution of power, temperature and coolant mass flow in the core has been evaluated assembly wise. Additionally the hottest fuel assembly in the core has been determined for a subsequent sub channel analyses which provides a more detailed spatial resolution. This allows the determination of local safety-relevant data e.g. fuel, cladding and coolant temperatures. Furthermore this work includes the implementation of a new method for the interpolation of the detailed pin wise power distribution from the rather coarse core calculations which is need as an input for the sub channel analyses. In the sub channel approach a volumeaveraged set of transport equations is solved. Thus, local thermal hydraulic phenomena which occur within the averaging volume (e.g. pressure loss due to friction, fluid mixing due to turbulence) have to be considered by additional models. In general such models are strongly dependent on the flow case and do not exist for the given fluid properties and the complicated sub channel geometry. For this reason extensive CFD calculations (RANS / URANS) of the coolant flow in rod bundles have been done with the commercial programm Star-CD. The CFD results have been validated against experimental correlations and suitable models for the sub channel approach have been evaluated.

# Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung						
	1.1	Motivation	1				
	1.2	Stand von Forschung und Entwicklung	3				
	1.3	Ziel und Gliederung der Arbeit	19				
<b>2</b>	Gru	Indlagen der Thermohydraulik	21				
	2.1	Numerische Strömungsmechanik (CFD)	23				
		2.1.1 Erhaltungsgleichungen	23				
		2.1.2 Turbulenzmodellierung	25				
		2.1.3 Numerische Methoden	28				
		2.1.4 Randbedingungen	30				
		2.1.5 Netzerzeugung und Netzverfeinerung	33				
	2.2	Thermohydraulische Modelle für die Kern- und Unterkanalberechnung	37				
		2.2.1 Erhaltungsgleichungen	38				
		2.2.2 Brennstabmodell	48				
		2.2.3 Schließungsterme und Korrelationen	49				
		2.2.4 Lösungsalgorithmus in STAFAS	55				
	2.3	Poröses Medien Modell für die Berechnung der Spaltströmung	59				
3	Grundlagen der Neutronik 6						
0	3.1	Monte-Carlo Methode	64				
		3.1.1 Lösungsalgorithmus	66				
		3.1.2 Ergebnisbestimmung in MCNP5	67				
		3.1.3 Erweiterte Modelle in MCNP5	68				
4	Kor	nzept eines Druckwasserreaktors mit überkritischem Wasser	71				
<b>5</b>	$\operatorname{Gek}$	coppelte Kernberechnung	77				
	5.1	Kerndesign und RDB-Konzept	77				
	5.2	MCNP5 Modell des Kerns	79				
	5.3	STAFAS Modell des Kerns	81				
	5.4	Kopplung	82				
	5.5	Ergebnisse der gekoppelten Rechnung	85				
6	Detaillierte Unterkanalanalyse des heißesten Brennelements 9						
	6.1	Flussverteilung und Interpolationsverfahren für die lokale Stableistung	95				
	6.2	Ergebnisse der Unterkanalanalyse	98				
7	And	Analyse der Spaltströmung mittels eines Ansatzos für parösa Modian 107					
1	7.1	Numerisches Modell	108				

	7.2	Ergebnis der Analyse	110		
8	<b>Ber</b> 8.1 8.2 8.3 8.4	echnung der Strömung im Unterkanal mit CFDAxialer Druckverlustkoeffizient $C_f$ SekundärströmungenLateraler Druckverlustkoeffizient $C_{jk}$ Turbulenter Austauschkoeffizient $\beta$	<b>113</b> 113 116 118 128		
9	Zusammenfassung und Ausblick 1				
Nomenklatur					
Abkürzungsverzeichnis					
Literatur					
A	<b>Anh</b> A.1 A.2 A.3	ang Heißkanalfaktoranalyse	<b>161</b> 161 162 164		

# 1 Einleitung

## 1.1 Motivation

Zunehmender technischer Fortschritt und steigende Bevölkerungszahlen werden in den nächsten Jahren zu einer stark ansteigenden Nachfrage nach Energie auf der Erde führen. Um dieser Herausforderung zu begegnen, wird weltweit an den unterschiedlichsten Projekten geforscht und entwickelt. Diese haben zum Ziel, die Energieversorgung der Zukunft zu gestalten. Dabei ist klar, dass die einzelnen Länder unterschiedliche Strategien entsprechend ihrer Ressourcenlage entwickeln müssen. Für die Bundesrepublik Deutschland liegt dabei die Zukunft in der auch heute schon gegebenen Diversifizierung der Primärenergieträger, dem sogenannten Energiemix. Die gegenwärtige Verteilung der Primärenergiequellen in Deutschland ist in Abb. 1.1 dargestellt.



Abbildung 1.1: Aufschlüsselung von Primärenergie und Stromerzeugung nach Quellen [BRD, 2006].

Es zeigt sich, dass der größte Teil des Primärenergiebedarfs nach wie vor über fossile Energieträger gedeckt wird, wobei der Mineralölanteil auf Grund des Kraftfahrzeugverkehrs dominiert. Relevant für den Kontext dieser Arbeit ist speziell die Erzeugung elektrischer Energie. Auch hier ist die Abhängigkeit der Stromerzeugung von fossilen Brennstoffen wie Erdgas, Steinkohle und Braunkohle mit einem Gesamtanteil von ca. 60% groß. Angesichts der aktuellen Diskussion um CO<sub>2</sub>-neutrale Energieerzeugungsformen und der Endlichkeit der fossilen Ressourcen wird klar, dass eine Umschichtung auf andere Technologien stattfinden muss. Dabei spielen Faktoren wie Umweltverträglichkeit, CO<sub>2</sub>-Neutralität, Nachhaltigkeit, Effizienz, Wirtschaftlichkeit und Sicherheit aber auch Grundlastfähigkeit und Verfügbarkeit eine wichtige Rolle. Die regenerativen Energiequellen wie Windkraft, Solartechnik, Biomasse oder auch Geothermie eignen sich entweder aufgrund ihrer schwankende Verfügbarkeit nicht zur Absicherung der elektrischen Grundlast oder stehen technologisch noch am Anfang ihrer Entwicklung, so dass ein Einsatz in großem Maßstab noch relativ weit in der Zukunft liegt. Eine Ausnahme stellt die Wasserkraft dar, die zwar alle genannten Anforderungen erfüllt, deren wirtschaftlich nutzbaren Potentiale aber in Europa zum größten Teil (ca. 97% [43]) bereits ausgeschöpft sind.

Mit der Kerntechnik hingegen steht eine Technologie zur Verfügung, die sich seit mehreren Jahrzehnten weltweit zuverlässig im Einsatz befindet. Die Vorteile der Kerntechnik ergeben sich aus der weitgehend CO<sub>2</sub>-neutralen Energieerzeugung, der hohen Verfügbarkeit, der hohen Versorgungssicherheit mit Kernbrennstoffen und der hohen Wirtschaftlichkeit. Letzteres leitet sich u.a. aus der Tatsache ab, dass die Stromgestehungskosten in einem Kernkraftwerk zum großen Teil aus den betriebsunabhängigen Kapitalkosten entstehen. Dadurch ergibt sich eine relative Unabhänigkeit der Stromgestehungskosten vom Preis des Kernbrennstoffs (Uranpreis geht nur mit ca. 14% in die Stromgestehungskosten ein) und somit ein relativ konstanter Strompreis, der weniger stark von den Brennstoffpreisen abhängig ist, wie es bei der Verstromung von Kohle und Gas der Fall ist.

Vor dem gegebenen Hintergrund sollte in der Bundesrepublik Deutschland und weltweit an der Kerntechnik festgehalten und die Erforschung und Entwicklung fortschrittlicher Reaktorkonzepte vorangetrieben werden.

## 1.2 Stand von Forschung und Entwicklung

Im Jahr 2000 wurde eine aus 13 Teilnehmerstaaten bestehende Forschungskooperation gegründet um die Entwicklung fortschrittlicher Reaktorsysteme zu fördern und zu koordinieren. Hierfür wurden insgesamt 6 aussichtsreiche Reaktorsysteme ausgewählt und zur weiteren Erforschung empfohlen. Unter diesen befinden sich auch die mit überkritischem Wasser gekühlten thermischen Leichtwasserreaktoren (Supercritical Water Cooled Reactor SCWR). Als Beispiel wurde das in Abb. 1.2 abgebildete Konzept mit einem Direktkreislauf und einer Aufheizung des Kühlmittels auf 500°C bei einem Druck von 25 MPa im Reaktor vorgeschlagen. Die Entwicklungsziele der als "Generation IV" (GEN-IV) bezeichneten Forschungsinitiative gehen dabei in Richtung von:

- Sicherheit
- Nachhaltigkeit
- Wirtschaftlichkeit
- Zuverlässigkeit und Verfügbarkeit
- Proliferationssicherheit



Abbildung 1.2: Prinzipskizze des im Rahmen des GEN-IV vorgeschlagenen Supercritical Water Cooled Reactor-Konzepts (SCWR) mit Direktkreislauf und einer Kühlmittelaufheizung auf 500°C Kernaustrittstemperatur.

#### Reaktorkonzepte mit überkritischem Wasser

Der Startschuss zur Entwicklung der ersten überkritischen Leichtwasserreaktoren fiel jedoch nicht erst mit der Gründung von GEN-IV, sondern wurde schon in den späten fünfziger Jahren begonnen (Oka [64]). Dabei tat sich die US-amerikanische Firma Westinghouse in den Jahren 1957 - 1968 mit der Untersuchung von drei unterschiedlichen Reaktorkonzepten hervor. Beim ersten 1957 veröffentlichten "Supercritical pressure water cooled Reactors" (SCR) Konzept handelt es sich um einen relativ kleinen Reaktor mit einer Leistung von 21,1 MW. Dieser wurde in drei unterschiedlichen Ausführungen untersucht: als Direktkreislauf (Turbinendampf direkt aus dem Reaktor), als gedrosselter Direktkreislauf und als Zweikreislauf (Turbinendampf aus zwischengeschaltetem Dampferzeuger). Bei allen drei Ausführungen handelte es sich um wassermoderierte Druckröhrenreaktoren, die mit einem thermischem Neutronenspektrum betrieben wurden und auf einem einheitlichen BE-Design basierten.

Ein thermisches Neutronenspektrum bedeutet, dass die Spaltungen im Reaktor vorzugsweise durch Neutronen geringer kinetischer Energie verursacht werden, die sich im thermischen Gleichgewicht mit ihrer Umgebung befinden. Damit es genügend solcher Neutronen im Reaktor gibt, wird ein so genannter Moderator benötigt, der die bei der Spaltung entstehenden schnellen Neutronen durch Abbremsen ins thermische Gleichgewicht bringt. Uber diesen Mechanismus sind Moderation und Leistungsentwicklung im thermischen Reaktor stets miteinander gekoppelt. Wird in einem Reaktor Wasser als Moderator und Kühlmittel zugleich verwendet, entstehen daraus sowohl Vorteile als auch Nachteile. Von Vorteil ist, dass die Dichte von Wasser bei steigender Temperatur fällt (Abb. 1.3) und sich dadurch weniger Moderator im Reaktor befindet. Dadurch werden die Neutronen weniger moderiert und die im Kern erzeugte Wärmeleistung sinkt. Dieser Selbstregelungseffekt ist eines der Hauptargumente für diese Art von Reaktor. Umgekehrt ergibt sich aus diesem Effekt aber auch ein Problem, da das Wasser als Kühlmittel mit niedriger Temperatur und hoher Dichte unten in den Kern eintritt und oben mit hoher Temperatur und niedriger Dichte wieder austritt. Dadurch entsteht eine inhomogenen Moderation im Kern und infolgedessen auch eine inhomogene Leistungserzeugung.

Ein ganz ähnliches Problem ergab sich beim SCR. Die Notwendigkeit einer zusätzlichen Moderation im Kern ergab sich hier durch die durchweg geringe Dichte des heißen Kühlmittels. Die Lösung war die Verwendung von zwei getrennten Wasserkreisläufen für Moderatorwasser und Kühlwasser. Beim Brennelement (BE) des SCR handelt es sich um ein hexagonal angeordnetes 7-Stabbündel in einer thermisch isolierten Druckröhre. Die Aufheizung im Kern erfolgt zwischen 460 °C auf 537 °C und findet dabei bei einem Systemdruck 27,9 MPa oberhalb der pseudo-kritischen Temperatur  $T_{pc} = 395$  °C statt. Der Moderator erhitzt sich dagegen bei seinem Kerndurchlauf nur von 250 °C auf 268 °C und kann so aufgrund seiner relativ hohen Dichte die Neutronen effektiv moderieren. Ein weiteres Konzept mit dem Namen SCOTT-R [95] wurde von Westinghouse ab 1962 entwickelt. Es wurde gleichfalls ein thermischer Druckröhrenreaktor mit einem Direktkreislauf entworfen. Als Moderator wurde hierbei die Option Graphit untersucht, da dieses seine Dichte mit der Temperatur kaum ändert und so zu einer entsprechend konstanteren Moderation und Leistungsentfaltung führt. Parallel dazu wurde ebenfalls von Westinghouse der SC-PWR [110] untersucht. Im Gegensatz zu den bisher erwähnten Konzepten war dies kein Druckröhrenreaktor sondern ein Konzept mit Reaktordruckbehälter (RDB) und einem offenen Stabbündel ohne Kästen als BE, wie es in heutigen Druckwasserreaktoren (DWR) üblich ist. Nahezu zeitgleich wurde in den USA bis 1959 das "Supercritical Pressure Power Reactor"-Konzept durch die Firma General Electric (GE) untersucht [25]. Es war als Druckröhrenreaktor mit vierfachem Durchlauf des Kühlmittels durch den Kern konzipiert. Dabei wurde das Kühlmittel im Reaktorkern bei einem mittleren Druck von 37,9 MPa ausgehend von einer Kerneintrittstemperatur von 273 °C auf 621 °C aufgeheizt.

Gegen Ende der sechziger Jahre wurde die Forschung an den Reaktoren mit überkritischem Wasser eingestellt, weil diese sie sich nicht gegen die damals konkurrierenden Druck- und Siedewasserreaktorkonzepte durchsetzen konnten. Die Gründe hierfür lagen meist bei der oftmals höheren technischen Komplexität der überkritischen Systeme und des damit verbunden Kostenaufwands für Entwicklung, Konstruktion und Bau der Anlagen. Zusätzlich erwartete man Schwierigkeiten durch die hohen Drücke und Temperaturen im Reaktorkern.



Abbildung 1.3: Dichte und Wärmekapazität bei einem Druck von 25 MPa. Daten von Wagner und Kruse [107].

In den neunziger Jahren wurden die Idee des mit überkritischem Wasser gekühlten und moderierten Reaktors zeitgleich in Russland (B500SKDI-Konzept, Kuchatov Institut, 1992) und Japan (SCLWR-Konzept, Universität Tokyo, 1992) erneut aufgegriffen. Der japanische Ansatz sieht ein Konzept mit Reaktordruckbehälter und Direktkreislauf vor, welches den aktuellen Siedewassereaktoren sehr ähnlich ist. Das überkritische Wasser mit einem Druck von 25 MPa wird dabei im Kern von 280 °C auf 500 °C erhitzt. Die hohen Kernaustrittstemperaturen (KAT) führen zu einer starken Vereinfachung des Anlagenkonzepts durch die Einsparung von Wasserabscheidern, Dampftrocknern und Rezirkulationspumpen u.a. und damit zu einer spürbaren Verringerung der projektierten Anlagenkosten (Oka [65]). Gerade durch die hohe Aufheizung in einem einzigen Kerndurchlauf ergeben sich hohe Dichteunterschiede für das gleichzeitig als Moderator fungierende Kühlwasser (vgl. Abb. 1.3). Wie schon erwähnt ergibt sich somit eine große Inhomogenität der Moderation und damit der Leistungsentwicklung über die axiale Höhe des Reaktorkerns. Um diesem Effekt entgegen zu wirken, wurden unterschiedliche Vorschläge mit dem Zweck der zusätzlich Moderation der oberen Kernbereiche erarbeitet (Wasser, Feststoffe). Durchsetzen konnte sich das Konzept von Dobashi et al. [19], 1998 mit abwärtsströmendem Wasser in zusätzlichen Moderatorkanälen in hexagonalen BE. Ein Wechsel zu einem neuen quadratischen BE-Design mit 36 Moderatorkästen wurde 2001 aufgrund zu hoher radialer Heißkanalfaktoren durch Yamaji [113] vorgeschlagen. Basierend auf diesem Design wurden 2003 ebenfalls von Yamaji [114] eine gekoppelte thermohydraulisch-neutronische Kernberechnungen mit einem deterministischen Neutronik-Programm durchgeführt. Die Ergebnisse zeigten zu hohe Temperaturen im Kern und führten zu einem verbesserten Kernkonzept, bei dem das Kühlmittel in zwei Durchläufen durch den Kern aufgeheizt wird. Für dieses Design führten Kamei et al. [42] gekoppelte Kernberechnungen mit dem deterministischen Neutronikcode SRAC (Japan Atomic Energy Research Institute, JAE-RI) und dem thermohydraulischen Code SPROD (Universität Tokyo) durch. Die Berechung mit SARC umfassten neben stationären Analysen unter anderem eine Abbrandsimulation des gesamten Kerns während eines Beladezyklus. Auf der thermohydraulischen Seite wurde jedes der BE als eindimensionaler Strömungskanal mit thermischer Kopplung an die Wasserkästen betrachtet. Bei den durchgeführten Berechnungen wurde besonderes Augenmerk auf die die Entwicklung der sicherheitstechnisch relevanten Größen wie z.B. die Formfaktoren der Leistung oder die Hüllrohr- und Kernaustrittstemperatur während des Abbrandzykluses gelegt. Eine detaillierte Auflösung der Kühlmittelströmung auf Unterkanalebene wurde von Yamaji et al. [115] durchgeführt. Die dazu benötigten lokalen Daten wie z.B. die Leistungsverteilung der Stäbe im BE wurden aus der Ganzkernrechnung interpoliert. Durch die Untersuchung wurde eine unerwartet starke Inhomogenität in der Temperatur- und Massenstromverteilung des Kühlmittels und in der Verteilung der Hüllrohrtemperatur festgestellt. Dies zeigte die Notwendigkeit einer detaillierten Analyse der BE. Dies gilt in besonderem Maße für BE gilt, die in der Kernberechnung große Leistungsgradienten bzw. hohe mittlere KAT aufweisen.

Das japanische SCLWR-Konzept und das BE-Design von [114] war auch die Grundlage einer Machbarkeitsstudie die vom US-Department of Energy (DOE) initiiert und von verschieden amerikanischen Institutionen (Idaho National Labratory (INL), Westinghouse etc.) durchgeführt wurde (Abschlussbericht [48]). Zur thermohydraulischen Analyse des Konzepts wurden Parameterstudien für den Kern und ein einzelnes BE mit dem Thermohydraulik Programm VIPRE-W durchgeführt. Zielsetzung war dabei zunächst die Erweiterung des Codes auf überkritische Kühlmittel und die Erstellung eines thermohydraulischen Kernmodells zur späteren Kopplung mit Neutronikprogrammen. Der Einfluss des thermisch gekoppelten abwärtsströmenden Moderatorwassers wurde nicht im Kernmodell berücksichtigt. Für die thermohydraulischen Detailanalysen des BE beschränkte man sich auf die Abschätzung von verschieden Leistungsprofilen ohne eine Kopplung mit der Neutronik zu realisieren. Im Gegenzug wurden die neutronische Analysen des BE unter Abschätzung einer Temperatur- und Dichteverteilung des Kühlmittels im BE durchgeführt. Hierfür wurde der probabilistische Neutronikcode MCNP und der Abbrandcode ORIGEN2 benutzt. Während der Untersuchung stand die Berechnungen der sicherheitsrelevanten Reaktivitätskoeffizienten für Dichte und Temperatur sowie die Gestaltung eines Steuerstabdesigns mit einer wirksamen Abschaltung des Systems im

Mittelpunkt. Der Abschlussbericht dieser Studie [48] hebt zusätzlich die Bedeutung der Heißkanalfaktoren bei Systemen mit hoher Kernaustrittstemperatur hervor (vgl. Kap. A.1) und zieht aus diesem Grund bezüglich der Machbarkeit dieses Konzepts negative Schlüsse.

Das Konzept eines mit überkritischem Wasser gekühlten Reaktors wird in Europa seit 2000 unter dem Namen "High Performance Light Water Reactor" (HPLWR) untersucht. Die erste Designstufe des HPLWR sah einen Leichtwasser moderierten, thermischen Reaktorkern vor, in dem das aufwärts strömende Kühlmittel von 280 auf 500 °C aufgeheizt wird. Um die Probleme der inhomogenen Moderation aufgrund des hohen Dichtegradienten im Kern zu kompensieren, wurde auch hier auf ein Konzept mit zusätzlichem, abwärts strömendem Moderatorwasser gesetzt. Entsprechend dieser Vorgabe entwickelte Hofmeister et al. [32] ein quadratisches BE (Abb. 1.4) mit zentralem Wasserkasten, welcher von insgesamt 40 Brennstäbe in zwei Reihen umgeben wird.



Abbildung 1.4: BE-Design nach Hofmeister et al. [32] mit abwärts strömendem Moderator und aufwärts strömendem Kühlmittel.

Diese Anordnung wird von einem weiteren Kasten umschlossen, der den Strömungsbereich des Kühlmittels abschließt. Aufgrund der Anordnung der BE im Kern mit einem Abstand von 10 mm ergibt sich in den Spalten zwischen den BE ein weiterer Strömungsbereich. Sowohl hier als auch im zentralen Wasserkasten (Moderatorkasten) befindet sich abwärts strömendes Moderatorwasser mit dem Zweck die Moderation im Kern und damit die Leistung zu homogenisieren. Ein erster konstruktiver Vorschlag zur komplizierten Handhabung von kaltem Moderatorwasser und heißem Kühlmittel ober- und unterhalb des Kerns wird ebenfalls in [33] beschrieben. Unter den gegebenen Randbedingungen erstellten Fischer et al. [23] ein Designkonzept für den Reaktordruckbehälter mit den dazu gehörenden Kerneinbauten. Dabei wurde besonders auf eine Isolierung des RDB von dem ca. 500 °C heißen Dampf Wert gelegt. Für das BE-Design wurden erste gekoppelte thermohydraulische-neutronische Rechnungen von Waata ([33]) durchgeführt. Dabei wurde ein 1/8 Ausschnitt des BE mit dem Neutronikprogramm MCNPX und mit dem von Cheng [18] entwickelten Unterkanalprogramm STAFAS berechnet. Besonderes Augenmerk wurde bei den Simulationen auf die Homogenität der Aufheizung im Querschnitt und auf die axiale Leistungsverteilung im Kern gelegt. Die Moderatorströmung im Spalt und in den Moderatorkästen wurde dabei durch Wärmeleitung thermisch an das Kühlmittel in den Unterkanälen gekoppelt. Zusätzlich erlaubte die Implementierung eines Brennstabmodells in STAFAS die Evaluierung der Hüllrohrtemperaturen für den berechneten Fall. Eine Berücksichtigung der Leistungsgradienten im Kern durch die endlichen Kerngeometrie sowie durch unterschiedlichen U-235 Anreicherungen im Kern konnten durch diese Berechung nicht berücksichtigt werden.

#### Grundgedanke des SDWR (Super DruckWasserReaktor) - Konzepts

Eine Revision der bis 2006 erstellten Arbeiten zum HPLWR in Schulenberg und Starflinger [79] legte den Fokus auf die schon von amerikanischer Seite betonten Heißkanalfaktoren. Als Konsequenz ergab sich im wesentlichen die Schlußfolgerung, dass die hohe Aufheizung des Kühlmittels auf 500 °C im HPLWR nur durch mehrere Kerndurchläufe mit dazwischen liegender Vermischung realisierbar ist. Dies ergibt sich auch aus dem in Abb. 1.5 gezeigten Diagramm in dem die maximalen Kernaustrittstemperatur (KAT) über die mittlere KAT aufgetragen ist. Für die gezeigte Kurve wurden die im Anhang A.1 gezeigten Daten mit einem geschätzten Heißkanalfaktor von 1,98, eine Kerneintrittstemperatur von 280 °C, einem Systemdruck von 25 MPa sowie ein einmaliger Durchlauf des Kühlmittels durch den Kern zugrunde gelegt. Für den HPLWR resultiert eine maximale KAT von ca. knapp unter 1200 °C.



Abbildung 1.5: Maximale Kernaustrittstemperaturen berechnet durch Heißkanalfaktoranalyse bei einem Druck von 25 MPa und einer Kerneintrittstemperatur von 280 °C bei einstufiger Aufheizung

Zusätzlich zeigt sich aus der Darstellung in Abb. 1.5, dass bei einer mittlerer KAT unterhalb des pseudo-kritischen Temperatur von 384 °C die Heißkanalanalyse nur einen geringen Anstieg der maximalen KAT ergibt. Dieses Verhalten ist auf den Verlauf der spezifischen Wärmespeicherkapazität zurückzuführen, welche im Bereich des pseudo-kritischen

9

Punkts ein ausgeprägtes Maximum aufweist (vgl. Abb. 1.3) und somit Leistungsexkursionen des Reaktors hervorragend dämpft. Dies ist der Grundgedanken, der zu dem in dieser Arbeit vorgestellten und untersuchten SDWR-Konzept (SDWR) führt.

Abgesehen von den erwarteten Vorteilen durch die Wahl eines Betriebspunkts von 380 °C bei einem Druck von 25 MPa birgt die Verwendung von überkritischem Wasser als Kühlmittel den Vorteil, dass die isobare Aufheizkurve nicht mehr durch das 2-Phasengebiet verläuft, d.h. das Kühlmedium ist stets einphasig und Siedephänome treten nicht auf. Man verspricht sich davon vor allem, dass das Auftreten sicherheitsrelevanter Effekte der 2-Phasenströmung wie das Filmsieden (Departure of Nucleate Boiling, DNB) oder das Austrocknen der Hüllrohre (Dry Out) physikalisch ausgeschlossen ist. Vor allem der DNB ist bei gegenwärtigen Leichtwasserreaktoren ein bekanntes und gefürchtetes Phänomen. Es tritt auf, wenn eine gewisse kritische Heizleistung auf der Hüllrohrfläche überschritten wird und sich dadurch ein ortsfestes Dampfpolster bilden kann. Dieses Dampfpolster schirmt die zu kühlende Hüllrohrwand vom noch flüssigen Medium in der Mitte des Kühlmittelkanals ab und bewirkt dadurch einen starken Anstieg der Hüllrohrtemperatur bis zum Durchbrennen des Stabes. Zwar treten auch bei der einphasig überkritischen Kühlmittelströmung aufgrund der starken Stoffgradienten um den pseudo-kritischen Punkt ähnliche Phänomene auf, führen in der Regel aber zu einem geringeren Anstieg der Hüllrohrtemperatur. Die genauen Mechanismen des "Heat Transfer Deterioration" (HTD) genannte Phänomens sind noch nicht vollständig verstanden und gegenwärtig Gegenstand intensiver Forschung.

Darüber hinaus sind auch wirtschaftliche Vorteile beim Betrieb einer solchen Anlage zu erwarten, weil aufgrund der signifikant höheren KAT von 380 °C ein besserer Wirkungsgrad zu erwarten ist (vgl. ca. 320 °C KAT beim EPR). Aufgrund der gewählten Kühlmitteleintrittstemperatur von 280 °C ergibt sich zudem eine Vergrößerung der Aufheizspanne im Kern auf 100 °C. Dadurch muss zum Transport der selben Menge Energie durch das Kühlmittel ein wesentlich kleinerer Kühlmittelmassenstrom verwendet werden. Dies sollte zu kleineren Anlagenkomponenten (Pumpen, Rohrleitungen etc.) und damit ebenfalls zu einer verbesserten Wirtschaftlichkeit führen. Zur Überprüfung der erwarteten Verbesserung müssen grundlegende Untersuchungen durchgeführt, die eine Festlegung der Eckdaten des Konzepts (Anlagenschema, Massenströme etc.) sowie eine erste Berechnung der thermodynamischen Abläufe und des Wirkungsgrads umfassen.

#### Gekoppelte thermohydraulisch-neutronische Kernberechnung

Für weiterführende Analysen des SDWR sind vor allem die Vorgänge im Reaktorkern von Bedeutung. Die bereits erwähnte Steigerung der Aufheizung im Kern gegenüber aktuellen Siede- und Druckwasserreaktorsystemen wird auch eine relativ starke Änderung der Dichte über die Kernhöhe um den Faktor 1,7 mit sich bringen. Dadurch, dass die Effektivität der Neutronenmoderation und damit die nuklear erzeugte Leistung direkt von der Dichteverteilung des Wassers abhängt, muss diese in einer sorgfältige Analyse des Reaktorkerns berücksichtigt werden. Im Allgemeinen wird das durch Kopplung von Neutronikmit Thermohydraulikprogrammen realisiert. Dabei berechnet das Neutronikprogramm die Energiefreisetzung durch die nukleare Kettenreaktion und das Thermohydraulikprogramm die dadurch erzielte Aufheizung des Wasserinventars im Kern. Beispiele für gekoppelte Programmsysteme, die bereits zur Untersuchung von Leichtwasserreaktoren mit überkritischen Wasser eingesetzt wurden, sind die schon erwähnten Programme MCN-PX/STAFAS [106] zur Untersuchung eines HPLWR-Brennelements und SARC/SPROD [42] zur Berechnung des SCLWR-Kerns. Darüber hinaus wurde das am FZK entwickelte deterministische Neutronikprogramm KAPROS/KARBUS mit dem bekannten eindimensionalen Thermohydraulikprogramm RELAP5 gekoppelt, um damit Rechnungen für das BE-Design von [19] durch zuführen und die Ergebnisse mit MCNP Ergebnisse zu validieren [12]. Für das gleiche BE-Design testen auch Rimpault et al. [73] das Thermohydraulikprogramm FLICA mit dem Hintergrund einer späteren Kopplung. Am ungarischen Kernforschungszentrum KFKI wird die Kopplung des deterministischen Programms KA-RATE mit dem japanischen SPROD zur Berechnung von verschiedenen BE-Designs [73] und für Kernberechnungen getestet [53]. In der Arbeit von Mori [58] wurde der Monte-Carlo Code MCNPX an das einfache Thermohydraulikprogramm MXN gekoppelt und zur Analyse von Leistungsverteilung, Kritikalität und Reaktivitätskoeffizienten für einen im schnellen Neutronenspektrum betriebenen "Supercritical Water Fast Reactor" (SCFR) verwendet.

Im Rahmen dieser Arbeit wird eine Kopplung des kommerziellen Neutronikprogramms MCNP5 mit einem passenden Thermohydraulikprogramm erstellt und für eine Analyse des SDWR-Konzepts verwendet. Da kein passender Thermohydraulikcode für diese Anwendung verfügbar ist, muss ein solcher auf Basis des am IKET verfügbaren Unterkanalprogramms STAFAS erstellt werden. Dabei muss vor allem der großen Anzahl an Strömungskanälen mit aufwärts und abwärts gerichteter Strömung Rechnung getragen werden. Darüber hinaus muss zur Erzeugung einer homogenen Austrittstemperatur der Kühlmittelmassenstrom in den einzelnen BE an die jeweilige BE-Leistung angepasst werden. Dies wird durch die Auslegung von Drosselstellen (z.B. Blenden) am Eintritt der BE erreicht. Ziel der gekoppelten Kernberechnung für eine neues Reaktorkonzept ist neben dem Test der Methode die Ermittlung von stationären Daten für:

- Leistungsprofile in axiale und radiale Richtung im Kern.
- Formfaktoren der Leistung für eine detailliertere Heißkanalanalyse.
- Ermittlung des heißesten und kritischsten BE zur weiteren Untersuchung.
- Neutronenflussverteilung im Kern zur anschließenden Interpolation der lokalen Stableistung für das kritische BE.
- Bewertung des SDWR-Konzepts und des BE-Designs.

### Unterkanalanalyse kritischer Brennelemente

Nicht alle relevanten Daten eines neuen Reaktorkonzepts lassen sich aus der relativ grob auflösenden Kernberechnung ermitteln. Werte für Hüllrohrtemperaturen, Brennstofftemperaturen und andere sicherheitsrelevante Parameter lassen sich nur durch eine detaillierte Analyse ausgewählter BE des Kerns bestimmen. Das bedeutet für den Berechnungsansatz, dass im Gegensatz zur Kernsimulation nicht mehr alle Unterkanäle eines BE homogenisiert werden dürfen, sondern dass jeder Unterkanal als eigener eindimensionaler Strömungskanal modelliert werden muss (vgl. Abb. 1.4). Basis der Unterkanalanalyse ist ein Satz von volumetrisch gemittelten Erhaltungsgleichungen für parallel verlaufende und untereinander über schmale Spalte verbundene Strömungskanäle. Dabei werden Effekte, die innerhalb dieser Zellen auftreten nur durch entsprechende Modelle und Korrelationen berücksichtigt statt explizit mitberechnet zu werden. Einige Beispiele sind die turbulente Vermischung zwischen Kanälen, Druckverlust bei Querströmung, Druckverluste in Strömungsrichtung durch Reibung oder Abstandshalter, Wärmeübertragung an der Wand (vgl. Kap. 2.2). Im Vergleich zur thermohydraulischen Simulation im Rahmen einer Kernberechnung, erlaubt der räumlich feiner auflösende Unterkanalansatz die Bestimmung wichtiger lokaler Daten im simulierten BE. Zur Durchführung dieser Rechnungen ist am IKET das schon erwähnte STAFAS verfügbar und kann nach kleineren Modifikationen verwendet werden.

Ziel der Analyse ist die Ermittlung von lokalen Daten innerhalb des heißesten BE unter realistischen Reaktorbedingungen. Letzteres bedeutet, dass die durch die Kernberechnung ermittelte Verteilung der Leistung, des Neutronenflusses und des Kühlmittelmassenstroms als Randbedingung für die Detailanalyse dienen. Dabei ist besonders die lokale Stableistung innerhalb des BE nicht direkt aus der Kernsimulation bestimmbar, sondern muss durch ein noch zu entwickelndes Interpolationsverfahren berechnet werden.

#### Verwendung von CFD in der Reaktorauslegung

Der Unterkanalansatz mit volumetrisch gemittelten Erhaltungsgleichungen und diversen Modellen zur Berücksichtigung einzelner Strömungsphänomene ist Ansatzpunkt für eine noch detailliertere Berechnung der Strömung in den Unterkanälen mit CFD (Computational Fluid Dynamics). In diesem Zusammenhang wurden schon die Modelle für turbulente Durchmischung, Druckverlust und Wärmeübergang genannt. Die dabei in der Unterkanalanalyse verwendeten Modellkoeffizienten stammen häufig aus Korrelationen, die in der Vergangenheit für spezifische Geometrien und Strömungsbedingungen empirisch ermittelt wurden. Für die Auslegung von neuen Reaktortypen wie dem SDWR, müssen die für Druck- und Siedewasserreaktoren zulässigen Korrelationen überprüft werden. Dabei unterscheiden sich die BE der neuen Reaktorgeneration nicht nur in Bezug auf wesentlich kleinere p/d-Verhältnisse (Verhältnis aus Stababstand p und Stabdurchmesser d) und durch geänderte Stoffeigenschaften sondern z. B. auch in der größeren Anzahl an Abstandshaltern (Himmel [31]), die zu Druckdifferenzen zwischen den Unterkanälen und damit zu größeren Querströmungen führen können.

Die Standardmethode zur Bestimmung und Validierung solcher Modelle ist die Durchführung von Experimenten an skalierten Geometrien und unter möglichst realistischen Reaktorbedingungen. Aufgrund des hohen Drucks und der hohen Temperaturen sind solche Experimente für überkritisches Wasser allerdings teuer und aufwendig, so dass der Bedarf an alternativen Methoden existiert. Die numerische Berechnung der Strömung im Brennstabbündel mit CFD (Computational Fluid Dynamics) ist dabei sicherlich eine der aussichtsreichsten Methoden. Dabei wird der Fluidraum der Kühlmittelströmung mit einem feinen Gitter aus Rechenzellen vernetzt, und die Strömungsvariablen Geschwindigkeit, Druck und Temperatur durch numerische Lösung der Erhaltungsgleichungen von Impuls, Energie und Masse in jeder Zellen lokal bestimmt. Die räumliche Auflösung ist dabei im Gegensatz zu den zuvor beschriebenen Methoden wesentlich genauer. Trotz allem verwendet auch diese Methode zur Berücksichtigung mikroskopischer und stochastischer Vorgänge (z.B. Turbulenz) Modelle, die sich aufgrund des komplexen Strömungscharakters im Stabbündel ständig in der Weiterentwicklung und Testphase befinden. Die in dieser Arbeit durchgeführte detailliert CFD-Analyse soll anhand einer charakteristischen Geometrie die Möglichkeiten der Methode zur Bestimmung und Verifikation wichtiger Koeffizienten der Unterkanalmodelle evaluieren. Dazu müssen die wesentlichen Phänomene der Bündelströmung korrekt wiedergegeben werden. Eine Übersicht über die relevanten Arbeiten zu diesem Thema wird in der folgenden Literaturübersicht gegeben.

#### Druckverlust bei Axialströmung im Bündel

Der Druckverlust im Stabbündel wird in der Literatur häufig über die Bestimmung eines Druckverlustkoeffizienten berücksichtigt und unter Verwendung eines hydraulischen Durchmessers  $d_h$  auf den Druckverlust von Rohren bezogen. Die Richtigkeit letzterer Annahme wurde durch Analysen von Deissler in verschiedenen Arbeiten bestätigt (Tong [92]). Bekannte Korrelationen für die Berechnung von Druckverlustkoeffizienten in hydraulisch glatten Rohren sind die von Blasius [10] für den Reynoldszahlenbereich 2300 < ${
m Re} < 30000$  und die von McAdams [55] für höhere Reynoldszahlen  $30000 < {
m Re} < 1000000$ . Um die Einflüsse der Stabbündelgeometrie genauer zu untersuchen, haben Presser [70] Experimente zum Druckverlust in parallel angeströmten Stabbündeln durchgeführt. Dabei wurde eine Korrelation für Reynoldszahlen 50000 < Re < 500000 entwickelt, die auch einen Korrekturfaktor für unterschiedliche p/d-Verhältnisse beinhaltet. Einen theoretischen Ansatz zur Bestimmung des axialen Druckverlustkoeffizienten hat Rehme [71] entwickelt. Mit diesem ist es möglich turbulente Verlustkoeffizienten für verschieden Geometrien unter Zuhilfenahme einiger Geometriefaktoren zu ermitteln. Diese Methode wurde unter anderem von Cheng und Todreas angewendet, um Korrelationen für Eck-, Randund Zentralkanäle im BE zu berechnen [89]. Für den in dieser Arbeit berechneten Fall sind die Ergebnisse von Marek et al. [54] interessant, die auf Basis eigener Experimente eine Korrekturformel für den Verlustkoeffizienten für Stabbündel in quadratischer Anordnung entwickelt haben. Sie gilt für verschiedene p/d-Verhältnisse und in einem Reynoldszahlen Bereich 10000 < Re < 300000.

Der Fall von Druckverlust von Strömungen mit überkritischem Wasser wurde in der ehemaligen Sowjetunion im Rahmen der Forschung für überkritische Druckröhrenreaktoren experimentell behandelt. Obwohl die meisten Arbeiten sich vorrangig mit dem Thema Wärmeübergang beschäftigen wurde meistens auch der Druckverlust von beheizten Rohren untersucht. Die vorhandene Literatur wurde von Cheng und Schulenberg [17] und Löwenberg [51] gesichtet und zusammengefasst. Grundlegende Arbeiten wurden von Filonenko [21] für die isotherme Strömung von Wasser in Rohren durchgeführt. Dabei wurde eine Wärmeübergangskorrelation etabliert, die auch von nachfolgenden Arbeiten mit überkritischem Wasser (z.B. Petukhov et al. [67]) empfohlen wird. Popov [69] hat durch Vergleiche mit seinen Experimenten einen Korrekturfaktor für beheizte Strömung entwickelt. Dabei wurden die Einflüsse der beheizten Wand durch Dichtebzw. Viskositätsverhältnisse zwischen Wand und Kernströmung korreliert. Nachfolgend hat [69] diesen Korrekturfaktor durch theoretische Analysen für überkritisches Wasser nochmals vereinfachen können. Die gleichen Verhältnisse der Fluideigenschaften, aber mit anderen Koeffizienten, wurden durch Petrov und Popov [66] mit Experimenten an gekühltem überkritischem CO<sub>2</sub> validiert. Zusätzlich lies sich der isotherme Fall mit Filonenkos Druckverlustformel gut wiedergeben. Die jüngst von Grabezhnaya und Kirillov [26] durchgeführten Experimente mit überkritischem Wasser in beheizten Rohren konnten diese Ergebnisse nochmals bestätigen [69]. Ein kurzer Vergleich der erwähnten und verfügbaren Korrelationen zur Berechnung des Druckverlustkoeffizienten für die axiale Strömung findet sich in Kapitel 2.2.3 dieser Arbeit.

#### Druckverlust bei Querströmung im Bündel

Die ersten experimentellen Untersuchungen mit guter Dokumentation und Datengrundlage zum Thema Druckverlust von quer angeströmten Rohrbündeln wurden in den 30iger Jahren von Brandt [11], Grimson [27] und Jakob [40] an verschieden Bündel in versetzter und fluchtender Anordnung untersucht. Hauptunterschied zwischen den dabei erstellten Korrelationen ist dabei die Wahl unterschiedlicher Bezugsgrößen sowie die Wahl unterschiedlicher Definitionen der Reynoldszahl.

Durch Definition eines volumetrischen Durchmessers  $d_v$  und durch Einführung der Längsund Querteilung ( $p_l$  und  $p_q$ ) als Korrekturfaktoren für den Druckverlustbeiwert haben Gunter und Shaw [28] erstmals eine allgemeine Korrelation für verschieden Bündelanordnungen gefunden. Als Basis für ihre Untersuchung haben sie bis dahin bekannte experimentelle Daten zusammengefasst und zur Validierung ihrer Korrelation benutzt. Hammeke et al. [29] haben vor allem Experimente im hohen Reynoldszahlenbereich mit Luft und CO<sub>2</sub> durchgeführt. Dabei fanden sie, dass ab einer gewissen Reynoldszahl  $Re_{krit}$ der Reibungsbeiwert für Stabbündel in fluchtender Anordnung konstant bleibt. Später haben Zukauskas et al. [15] auf Basis eigener Experimente eine ganze Reihe von Daten in Form von Diagrammen veröffentlicht, wobei sie allerdings auf die Erstellung von Korrelationen verzichtet haben. Die Experimente wurden mit verschiedenen Fluiden (Luft, Wasser und Öl) durchgeführt und decken einen weiten Bereich von Reynoldszahlen und p/d-Verhältnissen ab.



Abbildung 1.6: Querdruckverlustkoeffizient  $C_{jk}$  für verschiedene p/d-Verhältnisse in Abhängigkeit der lateralen Reynolds-Zahl (Definition für Re vgl. Gl. A.3) nach Gaddis und Gnielinski [24].

Einen guten Überblick über die Druckverlustphänomene und deren Unterteilung in Reibungsverluste und Formverluste sowie über die aktuelle Literatur darüber gibt Žukauskas in Kakaç [41]. Dabei verzichten sie weiterhin auf die Erstellung von Korrelationen und ziehen Diagrammen zur Darstellung der Ergebnisse vor. Da diese Vorgehensweise jedoch zur Verwendung in Computerprogrammen wenig geeignet ist, haben Gaddis und Gnielinski [24] 1985 die bis dato verfügbaren Daten (Abb. 1.6) zur Entwicklung einer neuen Korrelation genutzt, welche sowohl unterschiedliche als auch anisotrope p/d-Verhältnisse in Längs- und Querrichtung berücksichtigt.

Bei allen bisher genannten Untersuchungen wurden Stabbündel unter reiner Querströmung untersucht. Der überlagerte Fall von Axialströmung und Querströmung, wie er im Stabbündel des Reaktors vorkommt wurde nur selten untersucht. Erstmalig haben Berringer et al. [8] den Unterschied zwischen reiner Querströmung und dem Fall von Axialströmung mit überlagertem, wesentlich kleinerem Querströmungsanteil aufgezeigt. Sie äußerten dabei die Vermutung, dass der Druckverlust in Querrichtung nicht allein von den geometrischen Verhältnissen abhängt, sondern ebenso von der hohen Geschwindigkeit in axiale Richtung (von Berringer "Beschleunigungseffekt" genannt) mitbestimmt wird und dadurch den Druckverlustkoeffizienten in Querrichtung um ein vielfaches ansteigen lässt. Um diesen Effekt zu berücksichtigen korrigierten sie die Verlustkorrelation mit einem Faktor, der unter anderem die Axialgeschwindigkeit in den Unterkanälen beinhaltet. Der selben Auffassung waren auch Todreas und Rogers [91], die schlussfolgerten, dass der Druckverlustkoeffizient eine starke Abhängigkeit vom Verhältnis der Quergeschwindigkeit zur Axialgeschwindigkeit im Unterkanal hat. Sie beziehen sich dabei auf die Untersuchungen von St. Pierre [86], der eine Abweichung des Querwiderstandes um bis zu zwei Größenordnungen insbesondere bei kleinen Quer- und hohen Axialgeschwindigkeiten feststellte. Sie verdeutlichen, dass eine Untersuchung der Abhängigkeit des Querdruckverlust von der axial Strömung empfehlenswert ist. Tong [93] stellte für die Geometrie von Siedeund Druckwassereaktorstabbündeln fest, dass die Variation des lateralen Druckverlustkoeffizienten nicht zu größeren Abweichungen in der simulierten Druck- und Temperaturverteilung im BE führt. Rowe [77] war der gleichen Meinung, schränkte aber ein, dass dieser Sachverhalt nicht für kleine p/d-Verhältnisse gilt. Die Ansätze zur Klärung dieser Thematik wurden nicht weiterverfolgt, so dass in den aktuellen Werken über Thermohydraulik im Reaktor (z.B. Todreas und Kazimi [90] und Tong [94]) die Korrelationen von Jakob [40] von 1938 und Gunter und Shaw [28] 1945 empfohlen werden. In aktuellen Thermohydraulikprogrammen zur Berechnung von Druck- und Siedewasserreaktoren wird der Querdruckverlust häufig durch einen konstanten Druckverlustkoeffizienten von 0,5 berücksichtigt.

Das BE des in dieser Arbeit untersuchten SDWR (vgl. Abb.1.4) hat im Vergleich zu Siede- und Druckwasserreaktor-BE eine unterschiedliche Geometrie und ein stark verkleinertes p/d-Verhältnis. Darüber hinaus besteht es zum Teil aus thermohydraulisch unausgeglichenen Unterkanälen. Das bedeutet, dass z.B. benachbarte Unterkanäle stark unterschiedliche hydraulische Durchmesser haben bzw. verschieden stark aufgeheizt werden [106] und dadurch vermehrt Querdruckdifferenzen entstehen können. Aufgrund der gegensätzlichen Angaben in der Literatur und der ungeklärten Stärke und Bedeutung der Querströmung und des daraus resultierenden Druckverlusts, ist dies eins der in dieser Arbeit mit CFD untersuchten Modelle.

#### Sekundärströmung und turbulente Durchmischung im Rohrbündel

#### Experimentelle Untersuchungen

Eine erste Zusammenfassung der Arbeiten zum Thema Rohrbündelströmungen und turbulenter Austausch wurde 1968 von Todreas und Rogers [91] gegeben. Dabei zeigten sie unter anderem die relative Unabhängigkeit der turbulenten Durchmischung vom p/d-Verhältnis verschiedener Stabbündel auf. Im Anschluss vermuteten Skinner et al. 1969 [83] auf Basis eigener experimenteller Daten, dass so genannte Sekundärströmungen für diesen Effekt verantwortlich sind. Als Sekundärströmungen bezeichnet man allgemein Strömungen, die sich in einer Ebene senkrecht zur Hauptströmungsrichtung zeigen und durch sekundäre Effekte (z.B. durch Anisotropie der Turbulenz) entstehen. Bei der Durchführung eigener Experimente 1972 beobachteten auch Singh und St. Pierre [82] eine verbesserte Mischung zwischen benachbarten Unterkanälen trotz abnehmendem p/d-Verhältnis und vermuteten ebenfalls die Sekundärströmungen als Ursache dieses Effekts.

Rowe et al. [78] beobachteten 1974 die Intensivierung der Turbulenz im Unterkanal mit abnehmendem p/d und damit eine Verstärkung der Sekundärströmungen. Darüber hinaus waren sie die ersten, die das Vorhandensein von großskaligen Oszillationen im Spaltbereich des Unterkanals feststellten. Sie rechneten diesem pulsierenden Strömungsphänomen bei der Durchmischung eine untergeordnete Rolle zu und verbanden die gute Durchmischung bei kleinen p/d-Verhältnissen nach wie vor mit den Sekundärströmungen. Diese transportieren ihrer Meinung nach in großem Umfang Fluid von der Mitte des Unterkanals in den Spalt und damit in Richtung des benachbarten Unterkanals. Obwohl die Stärke der Sekundärströmungen experimentell noch nicht bestimmt werden konnte, galt gleiches für Rogers und Tahir 1975 [76], die ebenfalls die charakteristische Oszillationen innerhalb des Spaltes experimentell nachwiesen. Erst in den 80ziger Jahren wurden die Sekundärströmungen zunächst von Seale [81] und später von Vonka [105] gemessen und ihre maximale Zirkulationsgeschwindigkeit mit ca. 1,0% - 1,5% der Hauptströmungsgeschwindigkeit im Unterkanal bestimmt. Darüber hinaus wurde die Struktur der Sekundärströmung und ihre Zirkulation innerhalb geschlossener Zellen eindeutig mittels Laser Doppler Anemometrie (LDA) nachgewiesen.

Aufgrund der geschlossenen Struktur der Zellen, die stets innerhalb eines Unterkanals zirkulieren, folgerte Rehme 1992 [72], dass der Beitrag der Sekundärströmung zur ungerichteten turbulenten Durchmischung gering ist. Im Gegensatz dazu haben weiterführende Untersuchungen zum bereits erwähnten Phänomen der pulsierenden Strömung durch Hooper und Rehme 1983 [34] dessen Wichtigkeit für die turbulente Durchmischung aufgezeigt. Es ergab sich, dass kohärente Wirbelstrukturen im Unterkanal existieren, welche mit der Hauptströmung transportiert werden und eine intermittierende Querströmung mit wechselnder Richtung von einem Unterkanal in den benachbarten zur Folge haben. Diese Strukturen konnten von Meyer und Rehme [56] in einem quadratischen Strömungskanal mit Spalt sichtbar gemacht werden (Abb. 1.7).

Frequenz und Stärke der pulsierenden Strömung wurde nachfolgend von Möller 1989 [57] untersucht. Er erstellte u.a. Frequenzspektren für die Querströmung im Spalt, wie sie in Abb. 1.8 zu sehen sind und, betrachtetet die Verschiebung des Maximums der Frequenzspektren bei Variation der Geometrie und der Strömungsparameter.



Abbildung 1.7: Makroskopische Wirbelstrukturen im Spalt eines axial durchströmten Kanals [56].



Abbildung 1.8: Entdimensioniertes Spektrum der pulsierenden Querströmung im Spalt zwischen zwei Unterkanälen [57].

#### Numerische Ansätze mit CFD

die Pulsationsfrequenz mit der axialen Reynoldszahl und dem p/d-Verhältnis des Stabbündels verbanden. Zusätzlich zeigte sich, dass anders als bei normalen turbulenten Wirbeln diese Strukturen nicht in kleinere Wirbel zerfallen, sondern durch den Gradienten der Axialgeschwindigkeit zwischen Spalt und Kernströmung im Unterkanal angetrieben werden. Aufgrund ihres ungerichteten Charakters wirken sie sich allerdings ähnlich wie die turbulen-Durchmischung aus, so dass beide Effekte te zusammengefasst als turbulenter Austausch verallgemeinert werden. Jüngere Untersuchungen von Krauss und Meyer 1998 [44] ergaben, dass die Wirbelstrukturen in Stabbündeln jeweils mit einer bestimmten Phasenverschiebung zueinander in den Spalten existieren und sich somit ein relativ kompliziertes Netz von miteinander kommunizierenden Wirbelsystemen im Stabbündel mit mehreren Unterkanälen ausbildet.

Dadurch konnte er Korrelationen erstellen, welche

Die Versuche, die turbulente Stabbündelströmung mit Sekundärströmung und konsistenten Wirbeln durch CFD-Simulationen zu bestimmen, begannen deutlich später als die experimentellen Untersuchungen. Entscheidend war dabei sowohl die Verbesserung numerischer Modelle und die zunehmend verfügbare Rechenkapazität. Eine große Rolle spielt dabei bis jetzt die Wahl des richtigen Turbulenzmodells. Die ersten Versuche machte Seale [80] 1979 unter Verwendung eines isotropen k -  $\varepsilon$  Modells nach Launder und Spalding [46]. Dabei sollten die Sekundärströmung und die turbulente Durchmischung im BE eines gasgekühlten Reaktors gerechnet werden. Die Ergebnisse waren im Vergleich mit den zuvor gesammelten experimentellen Daten nicht zufrieden stellend. Eine Verbesserung wurde durch die Verwendung eines anisotropen Turbulenzmodells (d.h. Turbulenz wird nicht als skalare Größe sondern richtungsabhängig berücksichtigt) erzielt, und es konnten zumindest einige der experimentellen Daten relativ gut wiedergeben werden (z.B. Verteilung der Wandschubspannung).

Später haben Vergleiche von Rock und Lightstone 2001 [75] mit unterschiedlichen Turbulenzmodellen ergeben, dass nur anisotrope Turbulenzmodelle wie Reynolds-Spannungs-Modelle (RSM) oder anisotrope k- $\varepsilon$  Modelle die Berechnung der Sekundärströmungen im Unterkanalquerschnitt ermöglichen. Denn nur diese berücksichtigen die Anisotropie der Turbulenz in wandnähe, welche zur Berechnung der Sekundärströmungen wichtig ist. Bei späteren Versuchen von Suh und Lightstone 2004 [88] gelang es durch Verwendung von RSM-Modellen Struktur und Stärke der Sekundärströmungen akkurat zu berechnen. Die richtige Berechnung der turbulenten Vermischung gelang allerdings nicht. Der Grund war, dass durch die stationären Berechnungen das stark instationäre Phänomen der pulsierenden Querströmung nicht dargestellt werden konnte. Die Berechnung diese Phänomens gelang erstmals Chang und Tavoularis 2005 [14] unter Verwendung eines instationären Unsteady Reynolds-Averaged Navier Stokes Ansatzes (URANS) und eines RSM-Modell. Die Berechnungen wurden am Beispiel eines einzelnen Brennstabs durchgeführt, welcher asymmetrisch in einem Kanal mit trapezförmige Querschnitt angeordnet war. Durch Vergleich mit ebenfalls durchgeführten Experimenten konnte gezeigt werden, dass Frequenz und Stärke der pulsierende Strömungen gut wiedergegeben werden.

Weitere Versuche zur Berechnung der Bündelströmung mit CFD bzw. RANS-Modellen (Reynolds-Averaged Navier Stokes) wurden jüngst von Baglietto [1] durchgeführt. Dabei wurden unterschiedliche Geometrien mit quadratischer (Hooper und Rehme) und dreieckiger (Meyer) Anordnung gerechnet und mit den passenden Experimenten validiert. Bei den Berechnungen wurde das von Baglietto und Ninotaka [3] verbesserte anisotrope, quadratische k - $\varepsilon$  - Turbulenzmodell benutzt. Die Ergebnisse dieser stationären CFD Rechnungen zeigen gute Übereinstimmung bei der Vorhersage von Wandschubspannungen, Geschwindigkeitsverteilung und im Falle der beheizten Experimente von Meyer auch von der Temperaturverteilung auf der Brennstabwand. In einer weiteren Arbeit zeigt Baglietto [2] Vergleiche zwischen stationären und instationären CFD Rechnungen, wobei herausgefunden wird, dass für relative große p/d-Verhältnisse p/d > 1, 1 stationäre Berechnungen sehr gute Ergebnisse bei der Berechnung der Wandschubspannung liefern, während bei kleineren p/d die Oszillation der Strömung eine bedeutendere Rolle spielt und nur instationäre Rechnungen (URANS) zu guten Ergebnissen führen. Dies deckt sich mit den Aussagen von Möller und von Hooper und Rehme wonach Intensität und Frequenz der pulsierenden Querströmung mit kleiner werdendem p/d ansteigen.

Die gegebene Übersicht beinhaltet einen Großteil der verfügbaren Literatur zu den schon erwähnten Themen des axialen und lateralen Druckverlusts, sowie der turbulenten Durchmischung. Daraus lassen sich einige wichtige Dinge zusammenfassen:

• Die Sekundärströmungen existieren als abgeschlossene Zellen innerhalb eines Unterkanals und transportieren kein Fluid in benachbarte Kanäle. Obwohl deren Auswirkung auf die Durchmischung allgemein als gering eingeschätzt wird, ist ihre generelle Bedeutung bezüglich der Bündelströmung noch ungeklärt. Um die Sekundärströmungen in einer CFD Analyse berücksichtigen zu können, müssen anisotrope Turbulenzmodelle benutzt werden.

- Das axiale Druckverlustverhalten der Kühlmittelströmung wurde experimentell ausgiebig untersucht. Dadurch ergibt sich eine Vielzahl unterschiedlicher Korrelationen die zunächst sowohl zum Zweck des Einsatzes im Unterkanalprogramm STAFAS untereinander verglichen werden müssen als auch später als Verifikation für die durchgeführten CFD Rechnungen dienen.
- Der Druckverlust von quer angeströmten Rohrbündeln ist ebenfalls schon häufiger Gegenstand von experimentellen Untersuchungen gewesen. Dabei wurde vor allem der Fall der reinen Querströmung untersucht, da dieser bei der Auslegung von Kreuzstromwärmetauschern relevant ist. Der in der Reaktortechnik vorkommende überlagerte Fall von starker Axialströmung und schwacher Querströmung wurde bislang wenig untersucht, bzw. geeignete Experimente sind nicht verfügbar. Es ist allerdings bekannt, dass der Querdruckverlustkoeffizient des überlagerten Falls sich um bis zu 2 Größenordnungen vom reinen Querströmungsfall unterscheiden kann.
- Durch Geschwindigkeitsgradienten zwischen der schnellen Axialströmung im Kern des Unterkanals und der langsamere Axialströmung im Spaltbereich des Unterkanals werden konsistente Wirbelsysteme erzeugt, die sich im Spalt durch eine oszillierende Quergeschwindigkeit äußern. Dabei wird in großem Umfang Masse von einem Unterkanal in den benachbarten transportiert. Bei mehreren parallelen Unterkanälen wie es in BE der Fall ist, entsteht ein voneinander abhängiges System von phasenverschobenen Wirbeln. Dies ist der dominante Effekt für die turbulente Durchmischung zwischen benachbarten Unterkanälen und muss bei CFD Rechnungen mit dem Ziel zur Bestimmung des turbulenten Queraustausch unbedingt berücksichtigt werden. Dazu muss aufgrund des transienten Charakters der Wirbel eine instationäre CFD Rechnung durchgeführt werden.

## 1.3 Ziel und Gliederung der Arbeit

Ziel dieser Arbeit ist die Analyse eines Druckwasserreaktors mit überkritischem Wasser als Kühlmittel hinsichtlich Wirtschaftlichkeit, Sicherheit und technischer Machbarkeit.

In einem ersten Schritt wird für das in der Einleitung grob umrissene SDWR-Konzept ein geeignetes Anlagenlayout erstellt. Darauf aufbauend wird durch eine erste thermodynamische Auslegung der erwartete positive Effekt der erhöhten Kühlmitteltemperaturen auf Effizienz und Kosten der Anlage überprüft. Die daraus ermittelten Eckdaten wie Kühlmittelmassenstrom, thermische Leistung etc. dienen anschließend als Randbedingung für eine gekoppelte thermohydraulisch-neutronische Kernberechnung mit dem Ziel, die stationäre Leistungs- und Neutronenflussverteilung im Kern, sowie die Massenstrom- und Temperatur- und Dichteverteilung des Kühlmittels und des Moderators zu berechnen.

Aus thermohydraulischer Sicht liegt der Schwerpunkt auf der Erstellung bzw. Erweiterung des für Unterkanalsimulationen geeigneten Thermohydraulikprogramms STAFAS für die Simulation des SDWR-Reaktorkerns. Änderungen gegenüber der bereits vorhandenen Grundversion des Programms ergeben sich insbesondere durch die große Anzahl an Brennelementen (BE) mit stark unterschiedlichen Kühlmittelmassenströmen und der ebenfalls in großer Zahl vorhandenen Strömungskanäle mit abwärts strömendem Moderatorwasser (Moderatorkästen und Spaltkanal), welche thermisch an das Kühlmittel gekoppelt sind. Zusätzlich wird für die Kernauslegung die Möglichkeit zur Definition von Einlassblenden implementiert, um damit die Verteilung des Kühlmittelmassenstrom auf die einzelnen BE bezüglich einer homogenen Aufheizung steuern zu können. Die Grundlagen des modifizierten thermohydraulischen Programms finden sich in Kap. 2.2. Spezielles Augenmerk gilt dabei den Schließungstermen und Modellen, die zur Berücksichtigung verschiedener physikalischer Effekte in STAFAS verwendet werden. Darüber wird eine umfassende Literaturrecherche durchgeführt, um möglichst passende Modelle für den jeweiligen Strömungsfall zur Verfügung zu haben. Eine Übersicht zu diesem wichtigen Thema und den verfügbaren Modellen und Korrelationen findet sich in Kap. 2.2.3.

Auf neutronischer Seite der gekoppelten Kernberechnung kommt das kommerzielle Programm MCNP5 zum Einsatz. Hauptaufgabe ist in diesem Zusammenhang die Erstellung eines numerisch effektiven Simulationsmodells zur Berechnung der Leistungs- und Neutronenflußverteilung im Kern mit der Möglichkeit zur Kopplung mit dem Thermohydraulikprogramm. Anders als die bisher verwendeten Kernberechnungsprogramme, die mit deterministischen Methoden arbeiten, verfolgt MCNP5 einen probabilistischen Ansatz. Die Funktionsweise des Programms und die für diese Arbeit erweiterten Modelle zu Berücksichtigung des Temperatureffekts im Brennstoff und der Streuung von Neutronen in Wasser werden in Kap. 3 näher erläutert.

Die Kopplung zwischen MCNP5 und der modifizierten STAFAS Version muss ersetzt werden, da die vorhandene Version ausschließlich für die Berechnung eines 1/8 BE verwendbar ist. Die erforderlichen Funktionen werden als zusätzlicher Programmteil in STAFAS eingearbeitet und umfassen sowohl die Verarbeitung der in MCNP5 errechneten Leistung, als auch die automatische Erzeugung des MCNP5 Eingabedatensatzes für den nächsten Berechnungsschritt (vgl. Kap. 5.4). Als Ergebnis der gekoppelten Rechnung erhält man die stationäre Leistungs-, Temperatur- und Neutronenflussverteilung im Reaktorkern (Kap. 5). Darüber hinaus ist es möglich mit einem in MATLAB programmierten Interpolationsverfahren die Verteilung der lokalen Stableistung in ausgewählten BE zu bestimmen (Kap. 6.1). Diese Leistungsverteilung wird anschließend in Kap. 6 für detaillierte Unterkanalanalysen verwendet und erlaubt die Auswertung sicherheitsrelevanter lokaler Parameter wie Hüllrohr-, Brennstoff- und Kühlmitteltemperatur im thermisch höchst belasteten (heißesten) BE des Kerns.

Zusätzlich wird im Rahmen dieser Arbeit die Kühlmittelströmung im Stabbündel mit CFD untersucht. Ziel dieser Berechnungen ist die Verifikation der CFD-Methode zur akkuraten Berücksichtigung bestimmter Strömungseigenschaften der Bündelströmung und gegebenenfalls die Bestimmung von Korrelationen bzw. Modellkoeffizienten für die Verwendung in den numerisch effizienteren Unterkanalmodellen. Die Berechnungen konzentrieren sich zum einen auf die Untersuchung des Druckverlustverhaltens der Strömung in längs und quer angeströmten Stabbündeln (Kap. 8.1 und Kap. 8.3) und zum anderen auf die Untersuchung des Mischungsverhaltens der Kühlmittelströmung zwischen benachbarten Unterkanälen (Kap.8.4). Bei Letzterem müssen instationäre CFD Rechnungen durchgeführt werden, da besonders auf die richtige Wiedergabe des instationären Effekts der pulsierenden Querströmung geachtet werden muss. Die benötigten Grundlagen für die sowohl stationär (RANS) als auch instationär (URANS) durchgeführten Rechnungen finden sich in Kap. 2.1.

Da bei der Modellierung der Thermohydraulik im Kern die abwärts gerichtete Strömung des Moderatorwassers zwischen den Brennelementen als eindimensionaler, homogener Strömungskanal modelliert wird, wird in Kap. 7 eine Verifikation dieser Annahme durchgeführt. Dabei kommt ein Ansatz für poröse Medien zum Einsatz, dessen Grundlagen in Kap. 2.3 erläutert werden.

Eine Zusammenfassung der Ergebnisse sowie ein Ausblick auf zukünftige Arbeiten findet sich im abschließenden Kap. 9.

# 2 Grundlagen der Thermohydraulik

Im Rahmen dieser Arbeit werden unterschiedliche thermohydraulische Analysemethoden verwendet. Bevor die Grundlagen und Ansätze dieser Methoden im Detail vorgestellt werden, sollen sie zunächst zur besseren Unterscheidung voneinander abgegrenzt werden. Eine Übersicht über die Methoden, deren Anwendung und die erforderliche räumliche Diskretisierung wird in Tab. 2.1 gegeben.

Methode	Erhaltungsgleichung (EG)	Typische Zellgröße	Programm	Anwendung
CFD	Reynoldsgleichungen	$< 0,5 \mathrm{~mm}$	Star-CD	Strömung innerhalb eines Unterkanals
Unterkanal	stat., volumen- gemittelte EG	$\approx 10 \text{ mm}$	STAFAS	Strömung innerhalb eines BE
Kanal	stat., volumen- gemittelte EG	$\approx 80 \text{ mm}$	STAFAS	Strömung innerhalb des Reaktorkerns
Poröse Medien	inst., volumen- gemittelte EG	$\approx 40 \text{ mm}$	COMSOL	Strömung innerhalb des Moderatorspalts

Tabelle 2.1: Vergleich verschiedener thermohydraulischer Analysemethoden. EG : Erhaltungsgleichungen.

Der detaillierteste Ansatz, der in dieser Arbeit zur Berechnung einer Strömung verwendet wird, ist die CFD-Methode (RANS). Diese dient zur Simulation der Strömung innerhalb der Unterkanäle. Durch Unterteilung des Unterkanalquerschnitts in mehrere tausend Zellen, können sehr detaillierte Informationen aus der CFD-Analyse gewonnen werden. Dabei auftretende Phänomene wie Geschwindigkeitsgrenzschichten, Reibung an der Wand etc. werden weitgehend ohne Modelle (außer den Turbulenzmodellen) berechnet. Die RANS-Methode benötigt aufgrund der feinen räumlichen Auflösung einen hohen numerischen Aufwand und eignet sich deshalb wenig zur Analyse von Strömungen in weitläufigen Geometrien.

Aus diesem Grund werden in dieser Arbeit auch volumengemittelte Ansätze verwendet. Zu dieser Klasse gehören der Unterkanalansatz und der Ansatz für poröse Medien. Beiden ist gemein, dass die Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie über ein allgemeines Volumen aus Feststoff und Fluid gemittelt werden. Dadurch ist eine wesentlich gröbere räumliche Auflösung und damit eine Verringerung des numerischen Aufwands möglich. Zu bedenken ist bei dieser Methode, dass keine Strömungseigenschaften berücksichtigt werden, die durch Effekte innerhalb des Mittelungsvolumens (z.B. Druckverlust durch Reibung- und Formwiderstand) erzeugt werden. Zu deren Berücksichtigung



Abbildung 2.1: Vergleich der räumlichen Auflösung der thermohydraulischen Analysemethoden im Kern.

müssen anwendungsspezifische und geometrieabhängige Modelle verwendet werden. Die Grundform der volumetrisch gemittelten Methoden ist der Ansatz für poröse Medien. Diese kann durch Definition der Modelle für den Widerstand der Strömung im porösen Medium auf unterschiedliche Geometrie angewendet werden. Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Methode auf die Moderatorwasserströmung durch die Spalte zwischen den BE im Kern angewendet. Dabei wurde das Softwarepaket COMSOL benutzt, welches die notwendigen Löser für das Problem beinhaltet.

Durch Spezialisierung des volumetrischen Ansatzes auf die Stabbündelgeometrie, lässt sich daraus das sogenannte Unterkanalmodell herleiten. Die Methode wird im Rahmen dieser Arbeit als klassische Unterkanalberechnung angewendet. Dabei wird jeder Unterkanal des BE als eigener eindimensionaler Strömungskanal modelliert. Da die Kanäle in diesem Fall miteinander verbunden sind, tauschen sie über besondere Mischungsterme Impuls, Energie und Masse aus. Für diese Anwendung wurde von Cheng [18] der Unterkanalcode STAFAS entwickelt. Darüber hinaus wird der Ansatz zur Berechnung der Strömung im Reaktorkern verwendet. Dafür werden alle Unterkanäle innerhalb eines BE zu einem homogenisierten, eindimensionalen Strömungskanal zusammengefasst. Aufgrund der räumlichen Trennung der BE durch die BE-Kästen entfällt die Mischung zwischen den Strömungskanälen. Dieser so genannte Kanalmodus wurde im Rahmen der vorliegenden Arbeit für die Kernberechnung in STAFAS implementiert und angewendet.

In den nachfolgenden Kapiteln werden die wichtigsten Grundlagen zu den unterschiedlichen Methoden gegeben. Diese umfassen die benötigten Grundgleichungen, die Lösungsmethoden und die gegebenenfalls verwendeten Modelle.

## 2.1 Numerische Strömungsmechanik (CFD)

### 2.1.1 Erhaltungsgleichungen

In diesem Kapitel werden die benötigten Grundgleichungen erläutert, die zur CFD-Analyse der Unterkanalströmung notwendig sind. Im Fall der adiabaten Strömung sind dies die Impulsgleichung und die Kontinuitätsgleichung. Zusätzlich wird in der Arbeit die Ausbreitung von zusätzlichen skalaren Größen (Markerkonzentration) in der Strömung simuliert, so dass deren Transportgleichung ebenfalls erläutert wird.

### Impulserhaltung

Aufgrund der kompakten Darstellung werden die nachfolgenden Gleichungen in der sogenannten Tensorschreibweise aufgeführt. Durch eine Impuls- und Kräftebilanz am Volumenelement  $dV = dx_1 \cdot dx_2 \cdot dx_3$  ergibt sich die allgemeine Impulsgleichung für kompressible Medien zu

$$\frac{\partial (\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \rho u_j u_i - \tau_{ij} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + S_I \quad , \tag{2.1}$$

wobei  $\rho$  für die Dichte des Fluids und  $u_i$  mit i=1,2,3 für die Geschwindigkeiten in die drei Raumrichtungen  $x_i$  stehen. Zusätzlich treten dabei der Spannungstensor  $\tau_{ij}$ , der Druck p sowie eine Impulsquelle  $S_I$  auf. Unter Verwendung des dreidimensionalen Stokeschen Reibungsansatzes für newtonsche Medien können die Schub- und Normalspannungen des Spannungstensors  $\tau_{ij}$  als Funktion der Geschwindigkeitsgradienten und der molekularen Viskosität  $\mu$  ausgedrückt werden:

$$\tau_{ij} = 2\mu S_{ij} - \frac{2}{3}\mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad . \tag{2.2}$$

Die in der Thermohydraulik des Reaktors auftretenden Strömungen sind meist stark turbulent (Re  $\approx 10^5$ ). Im Allgemeinen charakterisieren sich turbulente Strömung dadurch, dass ihre Strömungsgrößen einer 3-dimensionalen zeitabhängigen Schwankung (Fluktuationen) aufweisen. Die Simulation einer turbulenten Strömung mit direkter (Direct Numerical Simulation, DNS) oder teilweiser (Large Eddy Simulation, LES) Auflösung dieser turbulenten Fluktuationen ist zwar grundsätzlich möglich, aber nur durch einen sehr hohen numerischen Aufwand realisierbar. In der normalen CFD geht man deshalb dazu über, die Wirkung der Turbulenz auf die Strömung (erhöhter Impuls- und Wärme und Stofftransport) über empirische Modelle zu berücksichtigen. Dazu müssen die Gleichungen für Massenerhaltung und Impulserhaltung umgeschrieben werden, wobei die zeitabhängigen Signale der Strömungsgrößen in einen zeitlich gemittelten Wert und eine Schwankungsgröße zerlegt werden. Am Beispiel der Geschwindigkeit  $u_1$  in  $x_1$ - Richtung bedeutet das

$$u_1(x_i, t) = \overline{u_1}(x_i) + u'_1(x_i, t) \quad .$$
(2.3)

Diese Zerlegung (Reynoldsansatz) wird analog für die Geschwindigkeitskomponenten  $u_2$ und  $u_3$  sowie für den Druck p durchgeführt. Aufgrund der Inkompressibilität des in dieser Arbeit behandelten Strömungsfalls kann die Dichte  $\rho$  als konstant angenommen werden. Einsetzen des Reynoldsansatzes 2.3 in Gleichung 2.1 und 2.2 sowie anschließende zeitliche Mittelung der einzelnen Terme (am Beispiel  $u_1$ ) über ein geeignet große Zeitintervall T gemäß

$$\overline{u_1}(x_i) = \frac{1}{T} \cdot \int_0^T u_1(x_i, t) dt \quad ,$$
(2.4)

führt auf

$$\underbrace{\frac{\partial (\rho u_i)}{\partial t}}_{\text{zeitl. Änderung}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_j u_i)}_{\text{Konvektionsterm}} = \underbrace{-\frac{\partial p}{\partial x_i}}_{\text{Druckterm}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} \left(2\mu S_{ij} - \frac{2}{3}\mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij}\right)}_{\text{mol. Reibungssterm}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} \left(-\rho \cdot \overline{u'_i u'_j}\right)}_{\text{turb. Reibungssterm}} + \underbrace{S_I}_{\text{Impulsquelle}} . \quad (2.5)$$

Bei diesem Rechenschritt wurde zusätzlich verwendet, dass die zeitliche Mittelung einer Schwankungsgröße per Definition Null ergibt. Darüber hinaus wurde auf die Kenntlichmachung der nun zeitlich gemittelten Größen  $u_i$  und p durch einen Überstrich verzichtet. Vergleicht man Gleichung 2.5 mit den Gleichungen 2.1 und 2.2 so sieht man, dass der Term

$$\tau_{ij}' = -\rho \overline{u_i' u_j'} = \begin{pmatrix} -\rho \overline{u_1' u_1'} & -\rho \overline{u_1' u_2'} & -\rho \overline{u_1' u_3'} \\ -\rho \overline{u_2' u_1'} & -\rho \overline{u_2' u_2'} & -\rho \overline{u_2' u_3'} \\ -\rho \overline{u_3' u_1'} & -\rho \overline{u_3' u_2'} & -\rho \overline{u_3' u_3'} \end{pmatrix}$$
(2.6)

hinzugekommen ist.  $\tau'_{ij}$  enthält die 9 Produkte der Schwankungsgeschwindigkeiten und beschreibt zusätzliche turbulente Widerstandsterme, welche auch oft als "Reynoldsche Scheinbare Schub- und Normalspannungen" bezeichnet werden. Aus Symmetriegründen gilt  $\tau'_{ij} = \tau'_{ji}$ , so dass die Impulsgleichungen um insgesamt 6 neue Terme erweitert werden. Die Behandlung dieser Terme bei der Berechnung mit RANS ist Aufgabe eines Turbulenzmodells und wird in Kap. 2.1.2 näher erläutert.

### Kontinuitätsgleichung

Über eine Massenbilanz am Volumenelement dV lässt sich die allgemeine Kontinuitätsgleichung für inkompressible Strömungen herleiten:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_1)}{\partial x_1} + \frac{\partial (\rho u_2)}{\partial x_2} + \frac{\partial (\rho u_3)}{\partial x_3} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = S_M \quad .$$
(2.7)

Die Variable  $S_M$  steht für Quellen der Masse innerhalb des betrachteten Volumenelements dV. Die zeitliche gemittelte Kontinuitätsgleichung ergibt sich für inkompressible, adiabate Strömungen (d.h.  $\rho = \text{konstant}$ ) durch Zerlegung der Strömungsgrößen in einen zeitlich gemittelten Anteil und einen Schwankungsanteil (vgl. Gl. 2.3) sowie durch anschließende zeitliche Mittelung gemäß Gleichung 2.4 zu

$$\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \frac{\partial u_3}{\partial x_3} = \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = S_m \quad , \tag{2.8}$$

dabei wird wieder auf die Kenntlichmachung der nun zeitlich gemittelten Geschwindigkeiten  $u_i$  durch Überstreichen verzichtet. Im Vergleich zur Impulsgleichung 2.5 treten hier keine zusätzlichen turbulenten Schwankungsterme auf, die modelliert werden müssen.

### Transportgleichung für skalare Größen

Die allgemeine Transportgleichung für die Konzentration C eines beliebigen, masselosen Skalars (Marker), welches der Strömung direkt folgt und keine Einfluss auf die Strömung nimmt, (d.h. passiv ist) ist definiert als:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho C\right) + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho u_j C\right) + \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho \left[-D\frac{\partial C}{\partial x_j}\right]\right) = S_C \quad . \tag{2.9}$$

Dabei entspricht C der Skalarkonzentration in der Form des Massenbruchs in der Einheit [kg/kg] und D dem molekularen Diffusionskoeffizienten des Skalars im transportierenden Fluid. Analog zur Impulsgleichung muss auch in der Transportgleichung des Markers die Wirkung der Turbulenz modelliert werden. Formal wird dazu wieder der Reynoldsansatz für die Strömungsgrößen  $u_i$  und C eingesetzt, anschließend zeitlich gemittelt und die zeitlich gemittelten Schwankungsterme gekürzt. Wie bei der Impulsgleichung, reduziert sich die Wirkung der Turbulenz auf einen Vektor  $C'_i$  der die Produkte der Schwankungsgrößen beinhaltet. Die zeitlich gemittelte Transportgleichung ergibt sich damit zu

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial t}(\rho C)}_{\text{seitl. Änderung}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j C)}_{\text{Konvektionsterm}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho\left[-D\frac{\partial C}{\partial x_j}\right]\right)}_{\text{mol. Diffusionsterm}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\rho \cdot \overline{u'_j C'}\right)}_{\text{turb. Diffusionterm}} = \underbrace{S_C}_{\text{Quelle}} , \quad (2.10)$$

mit

$$C'_{i} = \rho \cdot \overline{u'_{i}C'} = \begin{pmatrix} \rho \cdot \overline{u'_{1}C'} \\ \rho \cdot \overline{u'_{2}C'} \\ \rho \cdot \overline{u'_{3}C'} \end{pmatrix} \quad . \tag{2.11}$$

Der turbulente Durchmischungsterm  $C'_i$  berücksichtigt den zusätzlichen Transport des Markers durch turbulenten Fluktuationen im Fluid und muss im Rahmen eines Turbulenzmodells zusätzlich modelliert werden.

### 2.1.2 Turbulenzmodellierung

Wie aus Kapitel 2.1.1 hervorgeht, wird zur Simulation turbulenter Strömungen ein Turbulenzmodell für den Reynoldschen Scheinschubspannungstensor  $\tau'_{ij}$  (Gl.2.6) in der Impulsgleichung und für den turbulenten Durchmischungsvektor  $C'_{ij}$  (Gl.2.11) in der Skalargleichung verwendet. Generell gibt es viele unterschiedliche Modelle, die sich sowohl im Ansatz und Rechenaufwand als auch in der Stabilität der numerischen Lösung stark unterscheiden. Wie im Kapitel 1.2 gezeigt, herrschen im Stabbündel komplizierte Strömungsverhältnisse mit einer besonders im Wandbereich starken Anisotropie (Richtungsabhängigkeit) der Turbulenz. Um die akkurate Berechnung dieser Strömungen zu ermöglichen, muss ein passendes Turbulenzmodell gewählt werden. Die Klasse von Turbulenzmodellen, welche für diese Arbeit in Frage kommen, sind die so genannten Transportmodelle. Dem Namen nach werden eine oder mehrere Transportgleichungen zur Modellierung der Turbulenzterme benötigt. Man unterscheidet im Wesentlichen:

- Reynoldsspannungsmodelle (RSM)
- Wirbelviskositätsmodelle (WVM)

#### Reynoldsspannungsmodelle

Bei den Reynoldsspannungsmodellen wird eine Transportgleichung für jede der 6 Einzelkomponenten des turbulenten Schubspannungstensors  $\tau'_{ij}$  (Gl. 2.6) gelöst. Dies bedingt zwar einen stark erhöhten numerischen Aufwand, ermöglicht aber gleichzeitig eine richtungsabhängige Berechnung der Turbulenz. Es ist bekannt, dass zum einen die verwendeten Transportgleichungen sehr viele Koeffizienten beinhalten, die z.T. auf den jeweiligen Strömungsfall angepasst werden müssen und dass zum anderen RSM häufig zu Konvergenzproblemen in der numerischen Lösung führen.

#### Wirbelviskositätsmodelle

Den Wirbelviskositätsmodellen liegt die einfache Annahme zugrunde, dass die Wirkung der Turbulenz in der Impulsgleichung durch eine zusätzliche, künstliche Viskosität  $\mu_t$ berücksichtigt werden kann. Bei der so genannten Wirbelviskosität  $\mu_t$  handelt es sich also nicht um eine Stoffeigenschaft, sondern um einen zusätzlichen Diffusionsterm der vom Turbulenzgrad der Strömung abhängt und deshalb lokal berechnet werden muss. Ein gängiges Verfahren zur lokalen Bestimmung von  $\mu_t$  ist das k- $\varepsilon$  Modell. Bei diesem 2-Gleichungsmodell wird je eine Transportgleichung für die turbulente kinetische Energie kund die Dissipation  $\varepsilon$  gelöst werden. Die Transportgleichungen für k und  $\varepsilon$  sind Standard und können beispielsweise in Oertel und Laurien [63] bzw. in Star-CD [13] nachgelesen werden. Um der Anisotropie der Turbulenz im Fall der Bündelströmung Rechnung zu tragen, schlagen Baglietto und Ninokata [3] vor, den normalen lineare Gradientenansatz (Boussinesq-Ansatz) zur Modellierung der turbulenten Scheinschubspannungen durch einen quadratischen Gradientenansatz zu ersetzen. Dabei werden aus Gründen der Übersichtlichkeit die Begriffe der gemittelten Wirbelstärke  $\Omega_{ij}$  ("mean vorticity tensor")

$$\Omega_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \tag{2.12}$$

und der gemittelten Verzerrung ("mean strain")

$$S_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \tag{2.13}$$

des Strömungsfeldes benutzt. Der verwendete Ansatz zur Modellierung der Reynoldsspannungen lautet im Detail:

$$\rho \overline{u'_{i}u'_{j}} = k \left[ \frac{2}{3} \left( \frac{\mu_{t}}{k} \frac{\partial u_{k}}{\partial x_{k}} + \rho \right) \delta_{ij} - \frac{\mu_{t}}{k} S_{ij} + C_{1} \frac{\mu_{t}}{\varepsilon} \left[ S_{ik} S_{kj} - \frac{1}{3} \delta_{ij} S_{kl} S_{kl} \right] \right]$$

$$+ k \left[ C_{2} \frac{\mu_{t}}{\varepsilon} \left[ \Omega_{ik} S_{kj} + \Omega_{jk} S_{ki} \right] + C_{3} \frac{\mu_{t}}{\varepsilon} \left[ \Omega_{ik} \Omega_{jk} + \frac{1}{3} \delta_{ij} \Omega_{kl} \Omega_{kl} \right] \right]$$

$$(2.14)$$

Die Koeffizienten  $C_1, C_2$  und  $C_3$  wurden von [4] durch eine DNS Rechnungen bestimmt und für diese Arbeit übernommen. k und  $\varepsilon$  sind definiert als:

$$k = \frac{1}{2}\overline{u'_{i}u'_{i}} = \frac{1}{2}\left(\overline{u'_{1}}^{2} + \overline{u'_{2}}^{2} + \overline{u'_{3}}^{2}\right)$$
(2.15)

bzw.

$$\varepsilon = \nu \cdot \frac{\partial u'_i}{\partial x_k} \cdot \frac{\partial u'_i}{\partial x_k}$$
(2.16)
und beschreiben die kinetische Energie k, die in der Schwankungsbewegung steckt bzw. den Zerfall der Turbulenz durch die Dissipation  $\varepsilon$ . Die Wirbelviskosität  $\mu_t$  berechnet sich in Abhängigkeit dieser beiden Größen durch:

$$\mu_t = f_\mu C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad . \tag{2.17}$$

Hierbei ist  $C_{\mu}$  keine Konstante wie im Standard k- $\varepsilon$ -Modell, sondern als Funktion der Geschwindigkeitsgradienten in der Strömung definiert (vgl. [13]). Die Funktion  $f_{\mu}$  zur Dämpfung von  $\mu_t$  in der Nähe der Wand nimmt bei der Low-Reynolds-Formulierung in Abhängigkeit vom Wandabstand Werte zwischen 0 und 1 an. Bei der High-Reynolds-Formulierung ist  $f_{\mu} = 1$  weil der betreffende Bereich von der Wandfunktion überblendet wird. Genaue Werte für  $f_{\mu}$  und  $C_{\mu}$  sind von der jeweiligen Formulierung des Turbulenzmodells abhängig.

Das somit komplette Modell wurde schon ausgiebig auf dessen Anwendbarkeit zur Berechung von Bündelströmungen validiert. Baglietto [1] hat Berechnungen der Bündelströmung für hexagonale und quadratische Bündel durchgeführt und dabei die Wandschubspannung auf der Stabfläche mit experimentellen Ergebnissen von Hooper und Wood [35] bzw. mit Krauss und Meyer [44] verglichen. Dabei konnte der charakteristische Spannungsverlauf in Umfangsrichtung des Stabes gut wiedergegeben werden. Zusätzlich konnten auch die Sekundärströmungen reproduziert und in einer Stärke wiedergeben werden, wie sie von experimentellen Untersuchungen an ähnlichen Geometrien bekannt sind (ca. 1 - 1,5% der Axialströmung nach [81], [105]). In Baglietto und Ninokata [4] und Baglietto und Ninokata [3] wurde zu Validierungszwecken ein Stabbündel mit den Experimenten von Mantlik et al. [52] verglichen. Dabei wurden die axialen Geschwindigkeitsprofile und die Wandschubspannungen im Unterkanal mit guter Übereinstimmung zum Experiment berechnet. Aufgrund der vorhandenen Validierung und der guten numerischen Eigenschaften wird dieses  $k-\varepsilon$ -Modell auch in der vorliegenden Arbeit verwendet.

Wie in Kap. 2.1.1 erwähnt muss auch für den turbulenten Stofftransport Gl. 2.11 ein Modell verwendet werden. Zur Zeit kommt hierfür in allen kommerziellen CFD Codes ein sehr einfaches Modell zum Einsatz, welches den turbulenten Stofftransport proportional zum turbulenten Impulstransport setzt. Es gilt

$$C'_{i} = \rho \cdot \overline{u'_{i}C'} = -\frac{\mu_{t}}{Sc_{t}} \cdot \frac{\partial C}{\partial x_{i}} \quad .$$
(2.18)

Dabei ist  $Sc_t$  die turbulente Schmidt-Zahl, welche das Verhältnis aus turbulenten Stofftransport zu turbulentem Impulstransport beschreibt. Für viele turbulente Strömungen führt eine turbulente Schmidt-Zahl von  $Sc_t = 0,9$  zu guten Ergebnissen. Allerdings ist der turbulente Stofftransport dadurch isotrop modelliert, was besonders bei einer starken Anisotropie der Turbulenz (z.B. bei der Rohr- oder Bündelströmung in Wandnähe) zu falschen Ergebnissen führen kann. Besonders beim betrachteten Fall der Bündelströmung wurde in verschiedenen experimentellen Arbeiten (z.B. [44]) eine lokale turbulente Schmidt-Zahl mit Werten bis zu 4-5 ermittelt.

# 2.1.3 Numerische Methoden

Dieses Kapitel soll einen kompakten Überblick über die Methoden liefern, die zur Lösung der in Kap. 2.1.1 formulierten Gleichungen benötigt werden.

# 2.1.3.1 Diskretisierungsverfahren

Diskretisierungsverfahren werden in der CFD benutzt, um räumliche und zeitliche Funktionen an diskreten Stellen in Raum oder Zeit zu approximieren bzw. zu interpolieren. Dabei wird die differentielle Formulierung der Erhaltungsgleichungen (Gl. 2.5 und Gl. 2.7) durch Differenzengleichungen ersetzt und dabei benötigte Werte auf Zwischengitterstellen approximiert. Einen Überblick über die dazu benötigten Verfahren geben Noll [60] oder Ferziger und Perić [20].

# Räumliche Diskretisierung

Wie die meisten CFD Codes arbeitet das in dieser Arbeit benutzte Programm Star-CD nach der Finiten Volumen Methode (FVM). Dies bedeutet, dass das Rechengebiet mit einem Netz von Volumenzellen (VZ) ausgefüllt wird. Die Knoten des Netzes definieren dabei die Grenzen der VZ. Die Strömungsgrößen werden in der Mitte der VZ durch Bilanzen von Impuls, Masse und ggf. Energie berechnet. Dies geschieht indem die Flüsse der Strömungsgrößen auf dem Rand der VZ integriert werden. Durch die Tatsache, dass die Lage der Punkte in den die Variablen  $u_i$  und p der Strömungsgrößen definiert sind (Mitte der VZ) verschieden ist von der Lage auf denen die Flüsse berechnet werden (Rand der VZ), wird ein räumliches Interpolationsverfahren benötigt. Diese Verfahren werden räumliche Diskretisierungsverfahren (DV) genannt. Folgende Verfahren wurden in dieser Arbeit verwendet:

- Upwind Differencing Scheme (UD); Verfahren erster Ordnung
- Monotone Advection and Reconstruction Scheme (MARS); Verfahren zweiter Ordnung
- Quadratic Upstream Interpolation of Convective Kinematics (QUICK); Verfahren dritter Ordnung

Diese Verfahren unterscheiden sich hauptsächlich in ihrem Fehlerverhalten. Bei Verfahren erster Ordnung verhält sich der Fehler bei abnehmender Gitterweite linear, bei Verfahren zweiter Ordnung quadratisch und bei Verfahren dritter Ordnung kubisch. Das bedeutet also, dass DV mit höherer Ordnung bei feinerer räumlicher Auflösung eine höhere Konvergenzrate haben und deshalb ein DV möglichst hoher Ordnung bevorzugt verwendet werden sollte. Diesem Vorteil steht der leicht erhöhte numerische Aufwand und das unter Umständen problematische Konvergenzverhalten der Rechnung gegenüber. In Rahmen dieser Arbeit wurde, wenn nicht anders erwähnt, das QUICK - Verfahren (Leonard [49]) verwendet. Beim QUICK - Verfahren wird eine quadratische Näherung durch drei Punkte des Strömungsgebiets (zwei Punkte stromauf und ein Punkt stromab des Interpolationspunktes) gelegt. Somit werden Terme zweiter Ordnung noch berücksichtigt und der Diskretisierungsfehler konvergiert mit dritter Ordnung (Leonard [50]).

# Zeitliche Diskretisierung

Werden instationäre Rechnungen durchgeführt, dann wird zusätzlich zum räumlichen DV noch eine zeitliche Diskretisierung notwendig. Aufgabe des zeitlichen DV ist die Extrapolation der Strömungsvariablen vom zuletzt berechneten Zeitschritt n zum nächsten Zeitschritt n+1. Im Falle der zeitabhängigen Rechnungen der Bündelströmung mit Star-CD wird das Crank-Nicolson-Verfahren verwendet, weil es sich um das Verfahren mit der höchsten Ordnung (zweiter Ordnung in der Zeit) handelt und somit tendenziell zu den geringsten Diskretisierungsfehlern führt.

# 2.1.3.2 Lösungsverfahren

Wie in den vorangehenden Kapitel gezeigt, muss in der CFD ein gekoppeltes System von Differentialgleichungen gelöst werden. In dieser Arbeit sind dies die drei Impulsgleichungen und die Kontinuitätsgleichung. Da simultanes Lösen dieser vier Gleichungen nach den Variablen  $u_1$ ,  $u_2$ ,  $u_3$  und p nur schwer möglich ist, wird ein ein iteratives Verfahren angewendet.

# Lösungsverfahren SIMPLE

Beim "Semi-Implicite Method for Pressure Linked Equations"-Verfahren (SIMPLE) werden zunächst mit einem geschätzten Druckfeld p\* die drei Impulsgleichungen nach den Geschwindigkeiten  $u*_i$  gelöst. Ergebnis dieser Rechnung ist ein Geschwindigkeitsfeld  $u*_i$ , welches den Impulsgleichungen genügt. Gefordert ist allerdings ein Geschwindigkeitsfeld, welches auch der Kontinuitätsgleichung genügt. Deshalb wird mit dem so gefundenen Werten für  $u*_i$  eine Druckkorrekturgleichung (enthält Kontinuitätsbedingung) gelöst, um das geschätzte Druckfeld und die Geschwindigkeiten zu korrigieren. Damit erfolgt eine erneute Berechnung des Geschwindigkeitsfeldes  $u*_i$ . Konvergenz wird erreicht, wenn die so ermittelten Geschwindigkeiten  $u_i$  gleich oder sehr nahe an den Geschwindigkeiten  $u*_i$ liegen [60].

# Lösungsverfahren PISO

Zur Lösung der transienten Rechnungen wird ein sehr ähnliches Verfahren wie das SIM-PLE verfahren eingesetzt. Der Hauptunterschied liegt darin, dass nicht nur einer sondern mehrere Druckkorrekturschritte durchgeführt werden. Dadurch kann der bei der Druckkorrektur gemachte Fehler reduziert werden, bis ein internes Konvergenzkriterium erreicht ist und der Lösungsalgorithmus fortgesetzt wird. Dadurch ist das PISO ("Pressure Implicite with Spilitting of Operators") Verfahren im Allgemeinen genauer, effektiver und stabiler als das SIMPLE und wird deshalb standardmäßig bei transienten Rechnungen mit Star-CD eingesetzt [13].

Die Lösung der Transportgleichung für den passiven Marker ist frei von Rückkopplungen auf Impuls- oder Kontinuitätsgleichung. Somit kann die Konzentrationsverteilung des Markers mit dem konvergierten Geschwindigkeitsfeld der gekoppelten Berechnung erfolgen.

# 2.1.3.3 Numerische Fehlerbetrachtung

Eine numerische Simulation unterliegt unterschiedlichen Fehlern. Zum einen sind da die Unterschiede, die ein bestimmtes mathematisches Modell zur Wirklichkeit aufweist. Dieser Fehler wird im Allgemeinen als Modellfehler bezeichnet und wird über die Validierung der Modelle kontrolliert bzw. quantifiziert. Hinzu kommen weitere Fehler durch das numerische Verfahren, welches benutzt wird, um die mathematischen Modelle zu lösen. Im Falle der CFD-Rechnung ist neben den Rundungsfehlern, und dem Abbruchfehler der Diskretisierungsfehler der wichtigste. Darunter wird der Fehler verstanden, der durch die Approximation der Werte mittels eines DV entsteht. Dieser ist nicht nur abhängig von der Ordnung des zeitlichen oder räumlichen Diskretisierungsverfahrens, sondern auch von der lokalen zeitlichen oder räumlichen Diskretisierung. Generell gilt jedoch, dass sowohl in der räumlichen als auch zeitlichen Betrachtung Bereiche mit hohen Gradienten fein aufgelöst werden sollten, während in Bereichen kleiner Gradienten eine gröbere Diskretisierung gewählt werden kann. Die räumliche Diskretisierung wird umfassend in Kapitel Netzerzeugung (2.1.5) beschrieben. In Bezug auf die zeitliche Diskretisierung ist ein geeigneter Zeitschritt  $\Delta t$  für die Berechnung zu wählen. Zu dessen Bestimmung wird häufig das Stabilitätskriterium von Courant, Friedrich und Lewy (CFL-Zahl) verwendet (Gl. A.8). Um eine stabiles Verfahren zu gewährleisten muss für die instationäre Rechnung  $CFL \leq 100$  [13] gelten.

# 2.1.4 Randbedingungen

Die in Kapitel 2.1.1 eingeführten Gleichungen lassen sich mit den in Kapitel 2.1.3 beschriebenen Methoden in Abhängigkeit der Bedingungen auf dem Rand des Rechengebiets lösen. Die in dieser Arbeit verwendeten Randbedingungen (RB) sollen zum Verständnis der Ergebnisse hier kurz beschrieben werden. Die Randbedingungen untergliedern sich generell in die zwei unterschiedlichen Typen Dirichlet und Neumann. Der Unterschied besteht darin, dass im Falle der Dirichlet-RB bestimmte Werte für die Strömungsvariablen am Rand vorgegeben werden, wo hingegen bei der Neumann-RB Gradienten für die Strömungsgrößen am Rand definiert sind.

# Zyklische Randbedingungen

Grundlage der zyklischen RB ist die strömungsmechanische Kopplung zweier Randflächen des Strömungsgebiets  $A_1$  und  $A_2$  gleicher integraler Größe. Bei Verwendung von gleichen Netztopologien auf den beiden Flächen kann eine direkte Kopplung der einzelnen Zellflächen  $A_{1,j}$  und  $A_{2,j}$  aus denen die Flächen  $A_1$  und  $A_2$  bestehen gemäß

$$u_i(A_{1,j}) = u_i(A_{2,j}) \qquad p(A_{1,j}) = p(A_{2,j}) \qquad (2.19)$$

definiert werden. Es werden also Geschwindigkeit und Druck auf den Zellflächenpaaren j gleich gesetzt. Alle Skalare wie die turbulente kinetische Energie k, die Dissipation  $\varepsilon$  oder die Skalarkonzentration nehmen ebenfalls gleiche Werte auf den Zellflächenpaaren an. Für jedes zyklische Flächenpaar muss die Verschiebung durch einen einzeln eindeutigen Translationsvektor angegeben werden können, der für alle Zellflächen innerhalb einer Randfläche gleich ist.

# Teilweise zyklische Randbedingungen

Eine Variante der zyklischen RB sind die teilweise zyklische Randbedingungen. Der Unterschied besteht darin, dass bestimmte Strömungsgrößen zusätzlichen Bedingungen unterworfen werden können. In Star-CD sind zwei unterschiedliche Arten implementiert. Die erste Variante erlaubt die Definition einer fixen Druckdifferenz  $\Delta p$  auf den Zellflächenpaaren  $(A_{1,j} \text{ und } A_{2,j})$ . Die Druckbedingung in Gleichung 2.19 lautet dann

$$p(A_{1,j}) = p(A_{2,j}) + \Delta p \tag{2.20}$$

Die zweite Variante erlaubt die Festlegung eines fixen integralen Massenstroms  $\dot{m}(A)$ , der die beiden zyklischen Randflächen des Strömungsgebiets durchströmt. Dies bedeutet es gelten die Bedingungen 2.19 mit der zusätzliche Bedingung zur Erhaltung des integralen Massenstroms

$$\dot{m}(A) = \int_{A_1} \rho u_i n_i \, dA = \int_{A_2} \rho u_i n_i \, dA \tag{2.21}$$

wobei  $(u_i n_i)$  der Geschwindigkeit senkrecht zur Grenzfläche entspricht.

#### Symmetrische Randbedingungen

Symmetrische Randbedingung bedeuten, dass die Geschwindigkeiten quer zur Symmetriefläche verschwinden. Es gilt also für den Geschwindigkeitsvektor  $u_i$ 

$$(u_i n_i) = 0 \tag{2.22}$$

Für alle anderen Strömungsgrößen werden die Werte auf dem Rand aus dem nächstgelegen Knotenpunkt bestimmt.

# Wand mit Haftbedingung

Unter der Haftbedingung versteht man dass, die Geschwindigkeit des Fluids unmittelbar an der Wand gleich der Wandgeschwindigkeit  $u_{i,w}$  ist.

$$u_i = u_{i,w} \tag{2.23}$$

Im vorliegenden Fall sind die Wände stets unbewegt, so dass  $u_{i,w} = 0$  gilt. Der Übergang von der Kernströmung zur Wand hin wird zusammenfassend als Grenzschicht bezeichnet und untergliedert sich in drei Bereiche, in denen Strömungsvariablen wie die Geschwindigkeit oder dessen turbulente Schwankung eine starke Änderung erfahren. In Abb. 2.2 sind diese Übergänge am Beispiel des Geschwindigkeitsprofils  $u^+$  in Abhängigkeit des Wandabstands  $y^+$  dargestellt.  $u^+$  und  $y^+$  sind dabei dimensionslose Parameter und sind definiert als (Oertel und Laurien [63], Versteeg and Malalasekera [99]):

$$u^{+} = \frac{u}{u_{\tau}} \qquad \qquad y^{+} = \frac{\rho \Delta y \ u_{\tau}}{\mu} \qquad (2.24)$$

mit der Schubspannungsgeschwindigkeit  $u_{\tau} = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}}$  und der mittleren Wandschubspannung  $\tau_w$  und dem Wandabstand  $\Delta y$ .

Unmittelbar an der Wand liegt eine Fluidschicht, in der die turbulenten Schwankungen der Geschwindigkeit soweit durch den Wandeinfluß gedämpft werden, dass die molekulare Viskosität eine dominante Rolle spielt. Diese Schicht reicht von  $y^+ = 0$  bis zu einem Wert von ungefähr  $y^+ = 5$  und wird viskose Unterschicht genannt. Innerhalb dieser Schicht erfährt die Geschwindigkeit  $u^+$  einen starken linearen Anstieg. Aufgrund des dadurch vorhandenen starken Gradienten erfolgt eine starke Turbulenzproduktion. Diese wird durch

ein Maximum der Dissipation  $\varepsilon$  aufgrund des stark dämpfenden Wandeinflußes zunächst ausgeglichen. Am Rand der viskosen Schicht bei  $y^+ = y_m^+$  kann ein starker Anstieg der turbulenten Schwankungsbewegung beobachtet werden, wobei jedoch die Komponente senkrecht zur Wand vergleichsweise schwach ansteigt. Dies liegt daran, dass die Turbulenz hauptsächlich in Hauptströmungsrichtung erzeugt wird und dann eine Umverteilung in die stark gedämpfte, senkrechte Richtung stattfindet. Die Schwankungen parallel zur Wand sind also wesentlich größer, und es herrscht somit eine starke Anisotropie in den Schwankungsbewegungen [99].



Abbildung 2.2: Dimensionsloses Geschwindigkeitsprofil und unterschiedliche Diskretisierung des wandnahen Bereichs.

Außerhalb der viskosen Schicht existiert ein Übergangsbereich, in dem die Dominanz der viskosen Effekte stark abnimmt und turbulente Effekte eine zunehmende Rolle spielen. Aufgrund des Verlaufs der Geschwindigkeit, wird diese Schicht im Bereich zwischen  $30 < y^+ < 500$  [99] oft als logarithmischer Bereich bezeichnet. Es ist deutlich zu sehen, dass auch hier noch starke Gradienten der Geschwindigkeit  $u^+$  vorliegen, so dass die Produktion der Turbulenz nach wie vor hoch ist. Der anisotrope Charakter der Turbulenz bleibt erhalten.

Die beiden bisher beschriebenen Schichten decken ungefähr 20 % der gesamten Grenzschicht  $\delta$  ab. Die restlichen 80% nimmt ein trägheitsdominierter Bereich ein, indem viskose Effekte keine Rolle mehr spielen und in dem der Geschwindigkeitsgradient von  $u^+$ relativ schwach ist. Dies bewirkt die kontinuierliche Verringerung der Schwankungsgrößen auf den Turbulenzgrad der Aussenströmung zum Rand der Grenzschicht hin. Dabei verschwindet auch die durch die Wand erzeugte Anisotropie der Turbulenz. Zur Berücksichtigung der komplizieretn Strömungsverhältnisse in Wandnähe werden je nach Turbulenzmodell unterschiedliche Strategien verfolgt.

# Low-Reynolds-Turbulenzmodell

Bei direkter Auflösung der Geschwindigkeitsgrenzschicht wird die unmittelbar an der Wand liegende Zellschicht im wesentlichen genauso behandelt wie eine Zelle in der freien Strömung abseits der Wand. Unterschiedlich ist, dass die Fluidgeschwindigkeit auf der Wandgrenzfläche zu  $u_{i,w}$  gesetzt wird und dass die Dissipation  $\varepsilon$  in der Wandzelle Werte annimmt, die deren lokales Maximum an der Grenzfläche zu viskosen Unterschicht berücksichtigt. Dadurch kann sichergestellt werden, dass die turbulenten Schwankungen zur Wand hin verschwinden ("Wall Damping") und die Unterschicht tatsächlich ein viskoses Strömungsverhalten aufweist. Bei direkter Auflösung der Grenzschicht ist außerdem zu beachten, dass die erste Zellschicht genügend nahe an der Wand liegt um die viskose Unterschicht richtig zu approximieren (nach [3]  $y^+ \leq 1$ ). Zusätzlich müssen sich mindestens 5 Zellen innerhalb der viskosen Schicht und des logarithmischen Bereichs befinden um diese ausreichend genau abzubilden.

# High-Reynolds-Turbulenzmodell

Zur Verringerung der Rechenzeit kann ein so genanntes High - Reynolds - Turbulenzmodell verwendet werden. Dabei wird die Grenzschicht nicht detailliert aufgelöst, sondern der Verlauf der Geschwindigkeit und anderer Strömungsvariablen in der Nähe der Wand durch Wandfunktionen vorgegeben. Es können also die Zellen eingespart werden, welche normalerweise zur Auflösung der Geschwindigkeitsgrenzschicht an der Wand notwendig wären. Da die Grenzschicht an der Wand wie schon eingangs erwähnt, in zwei unterschiedliche Bereiche eingeteilt wird (logarithmischer Bereich und Übergangsbereich in Abb. 2.2 wurden zusammengefasst), muss auch die Wandfunktion zunächst den laminaren, linearen Teil berücksichtigen und ab einem Übergangswert, der unter anderem von der Wandrauhigkeit abhängt, in den logarithmischen Teil übergehen. Dazu werden nach Launder und Spalding [46] die Funktionen

$$u^{+} = \begin{cases} y^{+} & , \quad y^{+} \leq y_{m}^{+} \\ \frac{1}{\kappa} \ln (Ey^{+}) & , \quad y^{+} > y_{m}^{+} \end{cases}$$
(2.25)

verwendet, wobei der Schnittpunkt beider Gleichungen für glatte Wände bei  $y_m^+ = 11.53$ liegt. Diese Funktion wird in den Berechnungszellen unmittelbar an der Oberfläche angewendet. Da es sich nicht um flexible Profile handelt, muss statt dessen die Dicke der Wandzellschicht soweit angepasst werden, bis die Zellmittelpunkte der Bedingungen  $30 < y_p^+ < 100$  genügen (vgl. Abb. 2.2). Dies ist eine wichtige Bedingung um mit High-Reynolds-Modellen die Vorgänge an der Wand richtig berechnen zu können.

# 2.1.5 Netzerzeugung und Netzverfeinerung

Das Berechnungsnetz dient der Definition der räumlichen Stützpunkte, an denen die partiellen Differentialgleichungen gelöst werden. Wichtig ist bei der Netzgestaltung, die Anpassung des Netzes an die zu erwartende Strömung. Dies bedeutet, dass z.B. an Stellen mit hohen Gradienten der Strömungsvariablen (z.B. Wandgrenzschicht, Ablösegebiete, Bereiche mit hoher Verwirbelung der Strömung) eine relativ feines Netz erzeugt werden muss, damit diese Phänomene richtig aufgelöst und nicht durch numerische Diffusion zerstört werden. Unter numerische Diffusion versteht man dabei den Verlust von Details der Strömung (zumeist scharfe Änderungen der Strömungsvariablen), welcher durch die volumetrisch gemittelte Berechnung und die angewendeten Interpolationsverfahren innerhalb einer Zelle entsteht. Theoretisch gibt es viel unterschiedliche Zellformen mit denen das Fluidvolumen ausgefüllt werden kann. Die gängigsten sind Hexaeder, Tetraeder und Prismen sowie eine Vielzahl unterschiedlicher Oktaeder. Welche Zelltypen im einzelnen zulässig sind, entscheidet deren Implementierung im CFD Code. Bei der Netzgenerierung ist die Wahl des Zelltypus häufig ein Kompromiss zwischen zeitlichem Aufwand zur Erzeugung des Netzes und numerischer Effizienz und Genauigkeit. Am deutlichsten treten die Unterschiede beim Vergleich von Tetrateder- und Hexaedernetzen zu Tage. Während die Erzeugung eines Tetraedernetz aufgrund der variablen Zellform gut automatisierbar und innerhalb eines kurzen Zeitraums fertig ist, hat das Netz im Mittel eine höhere Speichernutzung, ist numerisch weniger stabil und liefert aufgrund der regellosen Ausrichtung der Zellen zur Strömung ungenauere Ergebnisse. Hexaeder Netze dagegen bedürfen eines großen Aufwands bei der Erstellung, welche meist von Hand oder allenfalls semiautomatisch geschieht. Vorteil diese Netztypus ist die hohe Speichereffektivität im Vergleich zu Tetraedernetzen und bei richtiger Anordnung der Blöcke die genau Auflösung der Strömung mit parallelen Zellen. Zudem bringt die strukturierte Anordnung der Zellen in Blöcken Vorteile bei der Rechenzeit und erlaubt eine einfache Skalierung der Netze zur Untersuchung verschiedener räumlicher Auflösungen. In den letzten Jahren haben alle Entwickler kommerzieller CFD Code die Entwicklung unterschiedlicher Netzformen, mit dem Zweck die Vorteile der einzelnen Zelltypen zu kombinieren, vorangetrieben. Der Trend geht dabei häufig zu so genannten Hybridnetzen, bei denen unterschiedliche Zelltypen in einem Netz verwendet werden (z.B. Tetraeder in der Kernströmung und wandparallele Prismen zur genauen Grenzschichtauflösung).



Abbildung 2.3: Blockaufteilung und Netztopologie für ein Low-Reynolds  $k - \varepsilon$  Turbulenzmodell.

Aufgrund der numerischen Genauigkeit und des in dieser Geometrie vertretbaren Generierungsaufwands wurden im Rahmen dieser Arbeit blockstrukturierte Netze aus Hexaederzellen verwendet. Die Blockstruktur des Netzes ist in einer Schnittebene normal zur  $x_3$ -Achse der Unterkanalgeometrie in Abb. 2.3 zu sehen. Es wurden zunächst eine ringförmige Blockstruktur von drei Blöcken je viertel Stab definiert, um die Grenzschicht an den Brennstäben richtig auflösen zu können und um eine gleich bleibende Zelldicke über die gesamte Stabfläche garantieren zu können. Verbunden sind diese Strukturen mit einem zentralen Block, der die Mitte des Unterkanals auffüllt.

Zur Abschätzung des numerischen Fehlers wurde eine Netzverfeinerungsstudie durchgeführt. Dabei wird die Sensitivität einer charakteristischen Strömungsvariablen gegenüber der Veränderung der räumlichen Auflösung untersucht. Ergebnis der Untersuchung ist die Approximation der exakten Lösung durch Verwendung einer Richardson-Extrapolation (siehe z.B. in Roache [74]). Damit kann der numerische Fehler für ein bestimmtes Gitter ermittelt werden und somit eine Abwägen zwischen Rechenzeit bzw. numerischem Aufwand und der benötigten Genauigkeit der Lösung erfolgen. Generell ist das Fehlerverhalten der charakteristischen Strömungsvariablen proportional zum führenden Fehlerglied der Rechnung. Dabei ist zu beachten, dass die Netzkonvergenz aus der Netzverfeinerungstudie die Summe aller Fehler in der Simulation wieder gibt.

Als charakteristische Variable wurde im vorliegenden Fall der Quermasssenstrom durch die Spaltfläche B gewählt (vgl. Abb. 2.3). Dieser ergibt sich aufgrund einer Druckdifferenz von 5 Pa die zwischen den teilweise zyklischen Randbedingungen auf den Spaltflächen A und C aufgeprägt wurde. In axiale Richtung wurden ebenfalls teilweise zyklische Randbedingungen mit einem integralen Massenstrom von 0,160 kg/s benutzt. Das numerische Modell entspricht somit dem aus Kap. 8.3 und verwendet das in Abb. 2.3 gezeigte Netz.

Insgesamt werden mit dem UD-, dem MARS- und dem QUICK-Verfahren drei verschiedene Diskretisierungsverfahren (vgl. Kap. 2.1.3.1) getestet. Für jedes dieser Verfahren wurden fünf verschiedene Netze gerechnet, wobei das gröbste Netz (Netz (1)) ca. 40000 Zellen umfasst. Die feineren Netze (2) - (5) enthalten dann 125%, 170%, 240% bzw. 277% mehr Zellen, so dass ein breiter Bereich unterschiedlicher räumlicher Auflösungen abgedeckt ist. In Abb. 2.4 sind die Ergebnisse der Netzverfeinerungstudie für die Verfahren MARS und QUICK zu sehen. Auf die Darstellung der Ergebnisse mit dem UD-Verfahren wird verzichtet, weil eine stetige Konvergenz der Lösung nur mit den feinsten Gittern gefunden werden konnte und die Datengrundlage für eine Fehlerapproximation somit nicht gegeben war. Dies liegt daran, dass für ein Verfahren 1.Ordnung ungleich mehr Zellen verwendet werden müssen, um eine gute Darstellung scharfer Gradienten zu ermöglichen und damit zu stetig konvergierenden Lösungen mit feiner werdendem Gitter zu führen. Diese Ergebnisse bestätigen und unterstreichen die in der Literatur häufig zu findende Empfehlung zur Verwendung von Verfahren höherer Ordnung. Das Diagramm Abb. 2.4 zeigt die mittlere Geschwindigkeit  $\overline{u_2}$  durch die Spaltfläche B über die mittlere Gitterweite  $\Delta x$  aufgetragen. Diese ist definiert als:

$$\Delta x = \sqrt[3]{\frac{V_f}{n_c}} \quad , \tag{2.26}$$

mit der Zellanzahl  $n_c$  und dem vernetzten Fluidvolumen  $V_f$ . Um die Fehlerordnung der Verfahren darzustellen und um die exakte Lösung einfacher approximieren zu können, wurde das MARS-Verfahren über die quadratische Gitterweite  $\Delta x^2$  und das QUICK-Verfahren über die kubische Gitterweite  $\Delta x^3$  auf getrennten Abszissen aufgetragen. Durch



Abbildung 2.4: Vergleich verschiedener Netze und Diskretisierungsverfahren.

grafische Auswertung kann die diskretisierungsfehlerfreie Lösung für eine unendlich feines Gitter  $\overline{u_2}_{\Delta x=0}$  approximiert werden. Diese ergibt sich beim MARS-Verfahren zu 0.04426 m/s und beim QUICK-Verfahren zu 0.04428 m/s. Die extrapolierten Werte sind mit einer Abweichung von 0,05% von einander praktisch gleich. Zur Bestimmung der Fehler der einzelnen Netze wurde eine gemittelte Lösung von  $\overline{u_2}_{\Delta x=0} = 0,04427m/s$  zugrunde gelegt. Unter Abwägung der Genauigkeit und der Rechenzeit wurde Netz (2) mit einer Zellzahl von 50000 und einer mittleren Gitterweite von  $\Delta x = 0,140mm$  ( $\Delta x^2 = 0,0196$ bzw.  $\Delta x^3 = 0,002744$ ) für die nachfolgenden Rechnungen in Kap. 8.1 und Kap. 8.3 ausgewählt. Für dieses Netz ergibt sich der Diskretisierungsfehler für das QUICK-Verfahren mit 2,6% und für das MARS-Verfahren mit 0,9% (vgl. Abb. 2.4). Der Widerstand in einer Bündel- oder Rohrströmung ist stark abhängig von der richtigen Auflösung der Wandschicht und der damit verbundenen richtigen Berechnung der Wandschubspannungen. Bei Verwendung eines High-Reynolds-Modells mit Wandschicht genügt die Auswertung der  $y^+$ -Werte um eine adäquate Wandschichtauflösung zu gewährleisten. Bei Low-Reynolds-Modellen muss zum einen die Lage des ersten Gitterpunktes an der Wand bestimmt werden  $(y^+ < 1)$  und zusätzlich für eine ausreichend feine Auflösung der Gradienten an der Wand gesorgt werden. Zur Überprüfung dieser Bedingungen für das ausgewählte Netz (2) wurde das dimensionslose Geschwindigkeitsprofil an der Brennstabwand untersucht und über den logarithmischen dimensionslosen Wandabstand  $y^+$  aufgetragen. Die Daten stammen von einer Rechnung aus Kap. 8.1 für einen Massenstrom von 0,160 kg/s. Dies entspricht einer mittleren Massenstromdichte von ca. 2330  $kg/sm^2$  und einer mittleren Axialgeschwindigkeit von ca. 3 m/s. In Abb. 2.5 ist deutlich zu sehen, dass die viskose Unterschicht unmittelbar an der Wand mit einer ausreichenden Zellzahl > 5 aufgelöst wird und auch sonst die räumliche Auflösung die vorhandenen Gradienten ausreichend wiedergibt.



Abbildung 2.5: Grenzschichtauflösung an einem Brennstab unter Verwendung eines Low-Reynolds-Turbulenzmodells.

# 2.2 Thermohydraulische Modelle für die Kern- und Unterkanalberechnung

In Kap. 5 und 6 dieser Arbeit wird eine gekoppelte Kernberechnung bzw. eine detaillierte Unterkanalanalyse des heißesten BE durchgeführt. Die Berechnungen umfassen neben einen neutronischen Teil auch einen thermohydraulischen Teil in dem die Aufheizung des Kühlmittels und der daran thermisch gekoppelten Strukturen berechnet wird. Die Grundlagen zum Verständnis des dabei verwendeten Unterkanalansatzes sollen in den folgenden Abschnitten gegeben werden.

Wie schon in Kapitel 1.2 erwähnt, kommt ein Satz von volumengemittelten Erhaltungsgleichungen zum Einsatz. Dies ermöglicht die Berechnung des thermohydraulischen Zustand in einem Reaktorkern innerhalb weniger Sekunden oder Minuten, während beispielsweise eine CFD-Rechnung, wenn überhaupt möglich, Tage oder Wochen benötigen würde. Die starke Verkürzung der Rechenzeit ist allerdings auch mit einen Verlust an Informationen verbunden. Dieser entsteht hauptsächlich durch die volumetrischen Mittelung der Erhaltungsgleichungen von Masse, Impuls und Energie. Dadurch gehen Strömungsphänomenen innerhalb des Mittelungsvolumens (z.B Druckverlust durch Reibung und Formwiderstand) zunächst verloren. Um deren Auswirkungen auf das makroskopische Strömungsverhalten dennoch berücksichtigen zu können, müssen sogenannte Schließungsterme verwendet werden.

Um die Vereinfachungen, die dem Unterkanalansatz zu Grunde liegen verstehen, zu können, ist es notwendig die Herleitung der Unterkanalgleichungen kurz nachzuvollziehen. Dies ergibt sich im besonderen Maße, da im zweiten Teil dieser Arbeit ausgewählte Modelle und Schließungsterme des Unterkanalansatzes mit CFD berechnet werden sollen. Dafür muss die genaue Definition der einzelnen Terme bekannt sein. Dazu wird die Herleitung ausgehend von den schon beschriebenen allgemeinen Erhaltungsgleichungen bis zu dem im Unterkanalcode STAFAS implementierten Gleichungssatz in Kap. 2.2.1 durchgeführt. Die dabei benötigten Modelle bzw. Schließungstermen werden während der Herleitung erarbeitet. Ergänzende Literatur zu Herleitung und Schließungstermen findet sich in Todreas und Kazimi [89],[90], Tong und Weisman [94], Steward et al.[87] Wheeler et al. [109] oder Cheng et al. [18]

# 2.2.1 Erhaltungsgleichungen

Zur Herleitung der volumengemittelten Erhaltungsgleichungen für Unterkanalprogramme müssen zunächst einige Rechenregeln für die Volumenmittelung definiert werden. Der formale Mittelungsoperator  $\langle \rangle$  bedeutet für eine beliebige Größe B

$$\langle B \rangle = \frac{1}{V_t} \int \int \int_{V_t} B \, dV \quad . \tag{2.27}$$

 $\langle B \rangle$  bedeutet also, dass die Größe B über das Volumen  $V_t$  gemittelt ist. Bei  $V_t$  handelt es sich um eine Volumen, welches sowohl Feststoffanteile  $V_s$  (z.B. Brennstäbe, Wände etc.) als auch Fluidvolumen  $V_f$  enthält. Deshalb gilt für den Fall, dass B eine reine Fluidgröße (z.B. Druck, Dichte etc.) ist folgende Beziehung:

$$\frac{1}{V_t} \int_{V_t} B \ dV = \frac{1}{V_t} \int_{V_f} B \ dV \quad . \tag{2.28}$$

Das Integral über das gemischte Volumen  $V_t$  kann in diesem Fall also in ein Integral über den Fluidraumanteil  $V_f$  umgeschrieben werden. Bei der Mittelung der Navier-Stokes-Gleichungen wird jeder Term einzeln gemäß Gleichung 2.27 gemittelt. Die dabei auftretenden volumetrisch gemittelten Divergenzen (z.B. im Konvektionsterm von Gleichung 2.1) werden entsprechend dem Theorem nach Slattery [84] behandelt:

$$\left\langle \frac{\partial B_i}{\partial x_i} \right\rangle = \frac{\partial}{\partial x_i} \left\langle B_i \right\rangle + \frac{1}{V_T} \int_{A_{FS}} B_i n_i \, dA \quad . \tag{2.29}$$

In diesem Fall ist  $B_i$  eine allgemeine skalare oder vektorielle Größe und  $n_i$  der Normalenvektor auf die Fläche dA. Die hintere Komponente der Gleichung beschreibt die Anteile von  $B_i$  (z.B. Druck p oder Schubspannungen  $\tau_{ij}$ ), die auf den Grenzflächen zwischen Fluid und Feststoff  $A_{fs}$  (z.B. Hüllrohroberfläche) innerhalb des Volumens  $V_t$  wirken. Zusätzlich bedeutet der Gaußsche Integralsatz für ein Skalar B

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \int_{V_f} B \ dV = \int_{A_f} B n_i \ dV \tag{2.30}$$

und für einen Vektor B

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \int_{V_f} B_i \, dV = \int_{A_f} B_i n_i \, dA \tag{2.31}$$

Abgesehen von der nun eingeführten Volumenmittelung treten bei den Unterkanalgleichungen auch flächengemittelte Größen auf. Ein Beispiel dafür sind die Flüsse durch die Aus- und Eintrittsflächen der Unterkanalzelle. Für die mit  $\{\}$  gekennzeichnete Flächenmittelung einer Größe *B* über die Fläche  $A_t$  gilt

$$\{B\} = \frac{1}{A} \int \int_{A_t} B \, dA \tag{2.32}$$

### Massenerhaltung

Die formale Anwendung der Volumenmittelung auf die allgemeine Kontinuitätsgleichung 2.7 führt auf

$$\left\langle \frac{\partial \rho}{\partial t} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) \right\rangle = 0 \quad . \tag{2.33}$$

Für den zeitlichen Term  $\left\langle \frac{\partial \rho}{\partial t} \right\rangle$  kann gezeigt werden (vgl. [90]), dass der Mittelungsoperator und der Ableitungsoperator vertauscht werden dürfen.

$$\left\langle \frac{\partial \rho}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial \left\langle \rho \right\rangle}{\partial t} \tag{2.34}$$

Aus dem konvektiven Transportterm  $\left\langle \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) \right\rangle$  wird unter Verwendung von Gl. 2.29

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) \right\rangle = \frac{\partial}{\partial x_i} (\langle \rho u_i \rangle) + \frac{1}{V_t} \int_{A_{fs}} \rho u_i n_i \, dA \quad . \tag{2.35}$$

da die Brennstäbe als unbeweglich definiert sind, fordert die Haftbedingung, dass die lokale Geschwindigkeit  $u_i = 0$  auf der Flüssigkeit-Feststoffgrenzfläche  $A_{fs}$ . Somit fällt der zweite Term auf der rechten Seite von Gl. 2.35 weg und es folgt für Gl. 2.35 unter Verwendung des Integralsatzes Gl. 2.31

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) \right\rangle = \frac{\partial}{\partial x_i} (\langle \rho u_i \rangle) = \frac{1}{V_T} \frac{\partial}{\partial x_i} \int_{V_T} \rho u_i \, dV = \frac{1}{V_T} \int_{A_f} \rho u_i n_i \, dA \quad .$$
(2.36)

Einsetzen von Gl. 2.34 und Gl. 2.36 in Gl. 2.33 ergibt die integrale Form der allgemeinen volumengemittelten Kontinuitätsgleichung

$$\underbrace{\frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial t}}_{\text{zeitl. Aenderung}} + \underbrace{\frac{1}{V_T} \int_{A_f} \rho u_i n_i \, dA}_{\text{Konvektionsterm}} = 0 \quad . \tag{2.37}$$

Wendet man Gleichung 2.37 nun auf die in kartesischen Koordinaten definierte Unterkanalgeometrie (vgl. Abb. 2.6) an, dann ergibt sich

$$V_f \frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial t} + {}_{x_1} \Delta \left( \{ \rho u_1 \} s_{jk}^{x_1} \Delta x_3 \right) + {}_{x_2} \Delta \left( \{ \rho u_2 \} s_{jk}^{x_2} \Delta x_3 \right) + {}_{x_3} \Delta \left( \{ \rho u_3 \} A_{f,3} \right) = 0 \quad , \quad (2.38)$$

wobei  $A_{f,3}$  der Strömungsquerschnitt in die  $x_3$ -Richtung (axial) ist und  $s_{jk}^{x_i}$  die entsprechende Spaltbreite. Die Operatoren  $x_i \Delta$  bedeuten dabei die Massenbilanz über die jeweilige Koodinatenrichtung und die Produkte aus Dichte und Geschwindigkeit { $\rho u_i$ }



Abbildung 2.6: Axialströmung und Queraustausch im Unterkanal.

bezeichnen die Massenstromdichte. Die Größen sind in diesem Fall über die Austrittsfläche aus dem Kontrollraumvolumen flächengemittelt, und werden deshalb in Klammern  $\{ \}$  geschrieben. Zur weiteren Vereinfachung wird im Unterkanalansatz nicht zwischen den unterschiedlichen Querrichtungen  $x_1$  und  $x_2$  unterschieden. Das bedeutet, dass die Strömung nur noch als eindimensionale Strömung mit richtungslosen Querkomponenten betrachtet wird und es folgt für die flächengemittelten Querkomponenten

$$\{\rho u_i\} = \frac{1}{A_{f,i}} \int_{A_{f,i}} \rho u_i \, dA = G_{x_i} = G_{jk} \tag{2.39}$$

Dies ist ein gängiger Ansatz bei Unterkanalprogrammen und ist für Bündelströmung geeignet, deren dominante Strömungsrichtung längs der Stäbe (axial) geht. Für die Unterkanalgleichung 2.37 folgt daraus, dass die quer gerichteten Massenstromdichten  $\{\rho u_i\}$  nicht richtungsabhängig, sondern nur als Summe der gerichteten, skalaren, flächengemittelten Austauschmassenströme  $G_{jk}$  zwischen dem Unterkanal j und benachbarten Unterkanälen k zusammengefasst werden. Berücksichtigt man zusätzlich den eventuell auftretenden überlagerten turbulenten Massentransport zwischen den Unterkanälen, dann ergibt sich die Kontinuitätsgleichung für den Unterkanal j zu

$$\underbrace{V_f \frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial t}}_{\text{oith}} + \underbrace{\sum_{k=1}^{K} \left[ \left( G_{jk} + G'_{j \leftrightarrow k} \right) s_{jk} \Delta x_3 \right]}_{\text{konvekt}} + \underbrace{\sum_{k=1}^{K} \left[ \left( G_{jk} + G'_{j \leftrightarrow k} \right) s_{jk} \Delta x_3 \right]}_{\text{avialer Transport}} + \underbrace{\sum_{k=1}^{K} \left[ \left( G_{jk} + G'_{j \leftrightarrow k} \right) s_{jk} \Delta x_3 \right]}_{\text{avialer Transport}} + \underbrace{\sum_{k=1}^{K} \left[ \left( G_{jk} + G'_{j \leftrightarrow k} \right) s_{jk} \Delta x_3 \right]}_{\text{avialer Transport}} + \underbrace{\sum_{k=1}^{K} \left[ \left( G_{jk} + G'_{j \leftrightarrow k} \right) s_{jk} \Delta x_3 \right]}_{\text{avialer Transport}} + \underbrace{\sum_{k=1}^{K} \left[ \left( G_{jk} + G'_{j \leftrightarrow k} \right) s_{jk} \Delta x_3 \right]}_{\text{avialer Transport}} + \underbrace{\sum_{k=1}^{K} \left[ \left( G_{jk} + G'_{j \leftrightarrow k} \right) s_{jk} \Delta x_3 \right]}_{\text{avialer Transport}} + \underbrace{\sum_{k=1}^{K} \left[ \left( G_{jk} + G'_{j \leftrightarrow k} \right) s_{jk} \Delta x_3 \right]}_{\text{avialer Transport}} + \underbrace{\sum_{k=1}^{K} \left[ \left( G_{jk} + G'_{j \leftrightarrow k} \right) s_{jk} \Delta x_3 \right]}_{\text{avialer Transport}} + \underbrace{\sum_{k=1}^{K} \left[ \left( G_{jk} + G'_{j \leftrightarrow k} \right) s_{jk} \Delta x_3 \right]}_{\text{avialer Transport}} + \underbrace{\sum_{k=1}^{K} \left[ \left( G_{jk} + G'_{j \leftrightarrow k} \right) s_{jk} \Delta x_3 \right]}_{\text{avialer Transport}} + \underbrace{\sum_{k=1}^{K} \left[ \left( G_{jk} + G'_{j \leftrightarrow k} \right) s_{jk} \Delta x_3 \right]}_{\text{avialer Transport}} + \underbrace{\sum_{k=1}^{K} \left[ \left( G_{jk} + G'_{j \leftrightarrow k} \right) s_{jk} \Delta x_3 \right]}_{\text{avialer Transport}} + \underbrace{\sum_{k=1}^{K} \left[ \left( G_{jk} + G'_{j \leftrightarrow k} \right) s_{jk} \Delta x_3 \right]}_{\text{avialer Transport}} + \underbrace{\sum_{k=1}^{K} \left[ \left( G_{jk} + G'_{j \leftrightarrow k} \right) s_{jk} \Delta x_3 \right]}_{\text{avialer Transport}} + \underbrace{\sum_{k=1}^{K} \left[ \left( G_{jk} + G'_{j \leftrightarrow k} \right) s_{jk} \Delta x_3 \right]}_{\text{avialer Transport}} + \underbrace{\sum_{k=1}^{K} \left[ \left( G_{jk} + G'_{j \leftrightarrow k} \right) s_{jk} \Delta x_3 \right]}_{\text{avialer Transport}} + \underbrace{\sum_{k=1}^{K} \left[ \left( G_{jk} + G'_{j \leftrightarrow k} \right) s_{jk} \Delta x_3 \right]}_{\text{avialer Transport}} + \underbrace{\sum_{k=1}^{K} \left[ \left( G_{jk} + G'_{j \leftrightarrow k} \right) s_{jk} \Delta x_3 \right]}_{\text{avialer Transport}} + \underbrace{\sum_{k=1}^{K} \left[ \left( G_{jk} + G'_{j \leftrightarrow k} \right) s_{jk} \Delta x_3 \right]}_{\text{avialer Transport}} + \underbrace{\sum_{k=1}^{K} \left[ \left( G_{jk} + G'_{j \leftrightarrow k} \right) s_{jk} \Delta x_3 \right]}_{\text{avialer Transport}} + \underbrace{\sum_{k=1}^{K} \left[ \left( G_{jk} + G'_{j \leftrightarrow k} \right) s_{jk} \Delta x_3 \right]}_{\text{avialer Transport}} + \underbrace{\sum_{k=1}^{K} \left[ \left( G_{jk} + G'_{j \leftrightarrow k} \right) s_{jk} \Delta x_3 \right]}_{\text{avialer Transport}} + \underbrace{\sum_{k=1}^{K} \left[ \left( G_{jk} + G'_{j \leftrightarrow k} \right) s_{jk} \Delta x_3 \right]}_{\text{a$$

zeitl. Änderung konvekt. und turb. Queraustausch axialer Transport

Die Summe über  $(G_{jk} + G'_{j \leftrightarrow k}) s_{jk} \Delta z$  beschreibt den Stoffaustausch mit den benachbarten Unterkanälen k. Dabei bezeichnet  $G'_{j \leftrightarrow k}$  die Masse, die durch turbulente Schwankungen von k nach j und umgekehrt transportiert wird. Berücksichtigt man die statistische Natur der Turbulenz, gilt für einphasige Fluide ([90])

$$G'_{jk} = G'_{kj} \tag{2.41}$$

und deshalb:

$$G'_{j \leftrightarrow k} \equiv G'_{jk} - G'_{kj} = 0$$
 . (2.42)

Es ergibt also keinen Netto-Stofftransport durch die turbulenten Schwankungen, so dass der turbulente Austauschterm in der Kontinuitätsgleichung weg fällt. Für stationäre Probleme schreibt sich die Kontinuitätsgleichung für den Unterkanal j also als

$$\sum_{k=1}^{K} \left[ G_{jk} s_{jk} \Delta x_3 \right] + {}_{x_3} \Delta \dot{m}_j = 0 \quad .$$
(2.43)

# Impulserhaltung

Bei der Herleitung der Impulsgleichung müssen analoge Schritte, wie bei der Herleitung der Kontinuitätsgleichung durchgeführt werden. Durch formale Anwendung der Volumenmittelung 2.27 auf die allgemeine Impulsgleichung Gl. 2.1 folgt zunächst

$$\left\langle \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i u_j) \right\rangle = -\left\langle \frac{\partial p}{\partial x_i} \right\rangle + \left\langle \frac{\partial}{\partial x_i} (\tau_{ij}) \right\rangle + \left\langle \rho \right\rangle g_i \quad . \tag{2.44}$$

Wobei der Gravitationster<br/>m $\langle\rho\rangle\,g_i$ als Impulsquelle hinzugekommen ist. Der zeitliche Term<br/> kann wieder zu

$$\left\langle \frac{\partial \rho u_i}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial \left\langle \rho u_i \right\rangle}{\partial t} \tag{2.45}$$

vereinfacht werden. Für die drei Terme mit den Ableitung  $\frac{\partial}{\partial x_i}$  folgt mit Gl. 2.29

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i u_j) \right\rangle = \frac{\partial}{\partial x_i} \left\langle \rho u_i u_j \right\rangle \quad , \tag{2.46}$$

da  $u_i = 0$  auf der Flüssig-Feststoff-Grenzfläche  $A_{fs}$  (Haftbedingung) bzw.

$$\left\langle \frac{\partial p}{\partial x_i} \right\rangle = \frac{\partial}{\partial x_i} \left\langle p \right\rangle + \frac{1}{V_T} \int_{A_{fs}} pn_i \, dA \quad , \qquad (2.47)$$

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial x_i} \tau_{ij} \right\rangle = \frac{\partial}{\partial x_i} \left\langle \tau_{ij} \right\rangle + \frac{1}{V_T} \int_{A_{fs}} \tau_{ij} n_i \, dA \quad . \tag{2.48}$$

Analog zur Herleitung der Kontinuitätsgleichung folgt gemäß Gl. 2.31 für die verbleibenden Ableitungsterme in Gl. 2.46 bis Gl. 2.48

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left\langle \rho u_i u_j \right\rangle = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{1}{V_T} \int_{V_F} \rho u_i u_j \, dV \right) = \frac{1}{V_T} \int_{A_f} \rho u_j \left( u_i n_i \right) \, dA \tag{2.49}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \langle p \rangle = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{1}{V_T} \int_{V_F} p \ dV \right) = \frac{1}{V_T} \int_{A_f} p n_i \ dA \tag{2.50}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \langle \tau_{ij} \rangle = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{1}{V_T} \int_{V_F} \tau_{ij} \, dV \right) = \frac{1}{V_T} \int_{A_f} \tau_{ij} n_i \, dA \tag{2.51}$$

Fasst man die einzelnen Komponenten in Gl. 2.44 zusammen, ergibt sich die integrale Form der volumengemittelten Impulsgleichung für Unterkanalprogramme.

$$\underbrace{\frac{\partial \langle \rho u_i \rangle}{\partial t}}_{\text{zeitl. Änderung}} + \underbrace{\frac{1}{V_T} \int_{A_f} \rho u_j (u_i n_i) \, dA}_{\text{Konvektionsterm}} = - \underbrace{\frac{1}{V_T} \int_{A_f} p n_i \, dA}_{\text{Druckkraft}} + \underbrace{\frac{1}{V_T} \int_{A_f} \tau_{ij} n_i \, dA}_{\text{Scherkraft}} + \underbrace{\frac{1}{V_T} \int_{V_f} R_i \, dV}_{\text{Druck- und Beibungswiderstand}} + \underbrace{\langle \rho \rangle g_i}_{\text{Druck- und Beibungswiderstand}} + \underbrace{\langle \rho \rangle g$$

Die Terme für die Druck- und Spannungsverteilung auf der Flüssigkeits - Feststoff - Grenzfläche aus Gl. 2.48 und 2.47 wurden dabei zu einem volumetrischen Widerstandsvektor  $R_i$  zusammengefasst. Somit werden in diesem Term alle Kraft- und Widerstandskomponenten berücksichtigt, die durch Effekte innerhalb des Mittelungsvolumens entstehen.

$$\frac{1}{V_T} \int_{V_f} R_i \, dV = \frac{1}{V_T} \int_{A_{fs}} pn_i \, dA + \frac{1}{V_T} \int_{A_{fs}} \tau_{ij} n_i \, dA \tag{2.53}$$

Im nächsten Schritt wird nun Gl. 2.52 auf die spezielle Unterkanalgeometrie (Abb. 2.7) angewandt. Es ergibt sich dadurch für jede Raumrichtung der kartesischen Koordinaten eine Erhaltungsgleichung. Wie schon erwähnt werden im Unterkanalansatz die Querrichtungen  $x_1$  und  $x_2$  in der Regel zusammengefasst, so dass am Ende je eine Erhaltungsgleichung in Axialrichtung  $(x_3)$  und in Querrichtung  $(x_2, x_1)$  übrig bleiben. Darüber hinaus bedeutet dieses Vorgehen, dass ein quer zur Hauptströmung gerichteter Impuls nicht transportiert sondern vernachlässigt wird, weshalb lediglich axial gerichteter Impuls von einem Kanal in den nächsten transportiert werden kann.

Die stationäre **Impulsgleichung in Axialrichtung** ( $x_3$ -Richtung) lautet demnach für einphasige Medien

$${}_{x_{1}}\Delta\left(\left\{\rho u_{1}\right\}\left\{u_{3}\right\}s_{jk}^{x_{1}}\Delta x_{3}\right) + {}_{x_{2}}\Delta\left(\left\{\rho u_{2}\right\}\left\{u_{3}\right\}s_{jk}^{x_{2}}\Delta x_{3}\right) + {}_{x_{3}}\Delta\left(\left\{\rho u_{3}\right\}\left\{u_{3}\right\}A_{f,3}\right) = -A_{f,3} {}_{x_{3}}\Delta\left(\left\{p\right\}\right) - \sum_{k=1}^{K} \left[G_{jk}^{*}u_{3,j} - G_{kj}^{*}u_{3,k}\right]s_{jk}\Delta x_{3} - A_{f,3}\left\langle\rho\right\rangle g\Delta x_{3} + F_{j,x_{3}}, (2.54)$$

wobei die Gravitation in negative  $x_3$ -Richtung wirkt. Der turbulente Austausch mit benachbarten Unterkanälen k wird als Differenz der Produkte der Schwankungsmassenströme  $G^*$  und der axial Geschwindigkeit  $u_3$  im jeweiligen Unterkanal berücksichtigt. Dabei ist zu beachten, dass zwar wie in Kap. 8.4 erläutert, sich die Schwankungsmassenströme aufheben, aber die Differenz der Produkte liefert nur dann keinen Beitrag, wenn die benachbarten Kanäle den gleichen Axialmpuls haben (d.h. gleiche Axialgeschwindigkeit). Der Impulsübertrag durch die Scherspannungen auf der Grenzfläche  $A_f$  wird bei dieser Betrachtung vernachlässigt, weil deren Beitrag im Vergleich zur turbulenten Übertragung



Abbildung 2.7: Impulserhaltung in  $x_3$ -Richtung im Unterkanal.

gering ist. Zusammenfassen der konvektiven  $x_1$ - und  $x_2$ -Komponenten zu einer allgemeinen Querkomponente sowie umgruppieren von Gl. 2.54 ergibt die Impulsgleichung

$$\underbrace{\sum_{x_3 \Delta (\dot{m}_j u_3)}_{\text{ax. Transport}} + \sum_{k=1}^{K} \left[ (G_{jk} u_3^*) s_{jk} \Delta x_3 \right]}_{\text{gerichteter Queraustausch}} + \underbrace{\sum_{k=1}^{K} \left[ \left( G'_{jk} u_{3,j} - G'_{kj} u_{3,k} \right) s_{jk} \Delta x_3 \right]}_{\text{turb. Queraustausch}} = \underbrace{-x_3 \Delta (\{p\}A_{f,3}) - \langle \rho \rangle g A_{f,3} \Delta x_3 + F_{j,x_3}}_{\text{ax. Druckdifferenz}} \underbrace{-x_3 \Delta (\{p\}A_{f,3}) - \langle \rho \rangle g A_{f,3} \Delta x_3 + F_{j,x_3}}_{\text{Gravitation}} \underbrace{-x_3 \Delta (\{p\}A_{f,3}) - \langle \rho \rangle g A_{f,3} \Delta x_3 + F_{j,x_3}}_{\text{ax. Widerstandskraft}} \underbrace{-x_3 \Delta (\{p\}A_{f,3}) - \langle \rho \rangle g A_{f,3} \Delta x_3 + F_{j,x_3}}_{\text{Gravitation}} \underbrace{-x_3 \Delta (\{p\}A_{f,3}) - \langle \rho \rangle g A_{f,3} \Delta x_3 + F_{j,x_3}}_{\text{ax. Widerstandskraft}} \underbrace{-x_3 \Delta (\{p\}A_{f,3}) - \langle \rho \rangle g A_{f,3} \Delta x_3 + F_{j,x_3}}_{\text{Gravitation}} \underbrace{-x_3 \Delta (\{p\}A_{f,3}) - \langle \rho \rangle g A_{f,3} \Delta x_3 + F_{j,x_3}}_{\text{ax. Widerstandskraft}} \underbrace{-x_3 \Delta (\{p\}A_{f,3}) - \langle \rho \rangle g A_{f,3} \Delta x_3 + F_{j,x_3}}_{\text{Gravitation}} \underbrace{-x_3 \Delta (\{p\}A_{f,3}) - \langle \rho \rangle g A_{f,3} \Delta x_3 + F_{j,x_3}}_{\text{ax. Widerstandskraft}} \underbrace{-x_3 \Delta (\{p\}A_{f,3}) - \langle \rho \rangle g A_{f,3} \Delta x_3 + F_{j,x_3}}_{\text{Gravitation}} \underbrace{-x_3 \Delta (\{p\}A_{f,3}) - \langle \rho \rangle g A_{f,3} \Delta x_3 + F_{j,x_3}}_{\text{gravitation}} \underbrace{-x_3 \Delta (\{p\}A_{f,3}) - \langle \rho \rangle g A_{f,3} \Delta x_3 + F_{j,x_3}}_{\text{gravitation}} \underbrace{-x_3 \Delta (\{p\}A_{f,3}) - \langle \rho \rangle g A_{f,3} \Delta x_3 + F_{j,x_3}}_{\text{gravitation}} \underbrace{-x_3 \Delta (\{p\}A_{f,3}) - \langle \rho \rangle g A_{f,3} \Delta x_3 + F_{j,x_3}}_{\text{gravitation}} \underbrace{-x_3 \Delta (\{p\}A_{f,3}) - \langle \rho \rangle g A_{f,3} \Delta x_3 + F_{j,x_3}}_{\text{gravitation}} \underbrace{-x_3 \Delta (\{p\}A_{f,3}) - \langle \rho \rangle g A_{f,3} \Delta x_3 + F_{j,x_3}}_{\text{gravitation}} \underbrace{-x_3 \Delta (\{p\}A_{f,3}) - \langle \rho \rangle g A_{f,3} \Delta x_3 + F_{j,x_3}}_{\text{gravitation}} \underbrace{-x_3 \Delta (\{p\}A_{f,3}) - \langle \rho \rangle g A_{f,3} \Delta x_3 + F_{j,x_3}}_{\text{gravitation}} \underbrace{-x_3 \Delta (\{p\}A_{f,3}) - \langle \rho \rangle g A_{f,3} \Delta x_3 + F_{j,x_3}}_{\text{gravitation}} \underbrace{-x_3 \Delta (\{p\}A_{f,3}) - \langle \rho \rangle g A_{f,3} \Delta x_3 + F_{j,x_3}}_{\text{gravitation}} \underbrace{-x_3 \Delta (\{p\}A_{f,3}) - \langle \rho \rangle g A_{f,3} \Delta x_3 + F_{j,x_3}}_{\text{gravitation}} \underbrace{-x_3 \Delta (\{p\}A_{f,3}) - \langle \rho \rangle g A_{f,3} \Delta x_3 + F_{j,x_3}}_{\text{gravitation}} \underbrace{-x_3 \Delta (\{p\}A_{f,3}) - \langle \rho \rangle g A_{f,3} \Delta x_3 + F_{j,x_3}}_{\text{gravitation}} \underbrace{-x_3 \Delta (\{p\}A_{f,3}) - \langle$$

Gleichung 2.55 beschreibt die Impulserhaltung in die axiale Hauptströmungsrichtung wie sie im Unterkanalprogramm STAFAS gelöst wird. Die Komponente  $F_{j,x_3}$  ist, die Widerstandskraft die innerhalb des Kontrollvolumens entgegen der axialen Strömungsrichtung  $x_3$  wirkt. Zur Berücksichtigung dieser Kraft wird ein quadratischer Ansatz verwendet. Es gilt

$$F_{j,x_3} = \left(\begin{array}{c} C_f \frac{\Delta x_3}{d_h} + C_s + C_g \\ \underbrace{C_g}_{\text{Reibung}} + \underbrace{C_s}_{\text{Abstandshalter}} + \underbrace{C_g}_{\text{Ein- und Auslassverluste}} \end{array}\right) \left(\frac{\rho}{2} |u_3| |u_3\right) A_{f,3} \quad . \tag{2.56}$$

Dabei berücksichtigen die Koeffizienten  $C_f$  den Reibungswiderstand an der Brennstabwand,  $C_s$  den hydraulischen Widerstand des Abstandshalters und  $C_g$  den Ein- und Auslassdruckverlust aus dem Stabgitter des BE. Letztere treten nur auf, wenn sich im betrachtete Kontrollvolumen ein Abstandshalter befindet bzw. falls es sich um die Zellen handelt, die den Ein- oder Austritt der Strömung in oder aus dem Stabbündelgitter beinhalten. Korrelationen zur Bestimmung dieser Koeffizienten sind in Kapitel 2.2.3 gegeben. Der Term zur Berücksichtung der turbulenten Austauschgrößen enthält die beiden unbekannten turbulenten Austauschmassenströme  $G'_{jk}$  und  $G'_{kj}$ . Diese sind, wie schon bei der Herleitung der Kontinuitätsgleichung erläutert, für einphasige Fluide betragsmäßig gleich und werden durch ein Modell in Abhängigkeit der Axialströmung bestimmt (siehe Kap. 2.2.3). Der gerichtete Queraustausch  $G_{jk}u_3^*$  wird mit der sogenannten "Donor Cell"-Methode realisiert ([109]). Die mit dem Superskript \* gekennzeichnete Axialgeschwindigkeit  $u_3^*$  wird dabei als Transportgröße der Massenstromdichte  $G_{jk}$  betrachtet und nimmt Werte entsprechend der Transportrichtung ein. Wenn die Transportrichtung in den Unterkanal j hineingeht dann bedeutet das

$$G_{jk} \ge 0$$
 und deshalb  $u_3^* = u_{3,k}$  . (2.57)

D.h also, dass  $u_3^*$  den Wert der Axialgeschwindigkeit in Unterkanal k annimmt. Bei umgekehrter Querströmungsrichtung folgt demnach

$$G_{ik} \le 0$$
 und deshalb  $u_3^* = u_{3,i}$  (2.58)

Der Quermassenstrom  $G_{jk}$  muss mit einer zusätzlichen **Impulsbilanz in Querrich**tung bestimmt werden. Durch Anwendung von Gl. 2.52 auf den Kontrollraum in der Unterkanalgeometrie in Abb. 2.8 ergibt sich die Impulsbilanz in die Querrichtung (z.B.  $x_2$ -Richtung) unter Vernachlässigung der turbulenten Transportterme



Abbildung 2.8: Kontrollvolumen für die Querimpulsbilanz in  $x_2$ -Richtung.

Wie schon erwähnt, wird beim Unterkanalansatz der Transport des Querimpulses vernachlässigt. Dies bedeutet, dass die konvektiven Transportterme in Gl. 2.59 ebenfalls wegfallen. Zusätzlich fällt auch der Schwerkraftterm weg, da die Gravitation in negative  $x_3$ -Richtung wirkt. Somit ergibt sich die vereinfachte Querimpulsbilanz aus Gl. 2.59 zu

$$_{x_2}\Delta(\{p\}) s_{jk}\Delta x_3 = F_{j,x_2}$$
 . (2.60)

Der Druckverlust ist also direkt gekoppelt mit der Widerstandskraft  $F_{j,x_2}$  in  $x_2$ -Richtung bzw. mit einer lateralen Widerstandskraft  $F_{j,k}$  die zwischen Unterkanälen j und k wirkt. Für den lateralen Widerstand wird ein quadratischer Ansatz gemäß

$$_{jk}\Delta\left(\{p\}\right)s_{jk}\Delta x_{3} = F_{j,k} = C_{jk}\left(\frac{|G_{jk}|G_{jk}}{\rho_{jk}^{*}}\right)s_{jk}\Delta x_{3}$$

$$(2.61)$$

verwendet. Für die Dichte  $\rho_{jk}^*$  gilt analog zu den Bedingungen für die Geschwindigkeit  $u_3^*$  in Gl. 2.57 bzw. Gl. 2.58 für eintretende Massenströme

$$G_{jk} \ge 0$$
 und deshalb  $\rho_{jk}^* = \rho_k$ , (2.62)

und für austretende Massenströme

$$G_{jk} \le 0$$
 und deshalb  $\rho_{jk}^* = \rho_j$ . (2.63)

Die Variable  $C_{jk}$  in Gl. 2.61 ist dabei der so genannte Druckverlustkoeffizient in Querrichtung. Dessen Bestimmung durch Korrelationen ist in Kap. 2.2.3 zu finden.

# Energieerhaltung

z

Um die Aufheizung des Kühlmittels berechnen zu können, muss zusätzlich zur Kontinuitätsund Impulsgleichung die Energieerhaltungsgleichung im Unterkanal gelöst werden. Dabei handelt es sich auch in diesem Fall um eine volumengemittelte Gleichung, die speziell für die Anwendung in Unterkanalprogrammen hergeleitet werden muss. Da dieser Prozess sehr ähnlich zu den bereits beschriebenen Herleitungen ist, wird eine stark verkürzte Form wiedergegeben. Die inkompressible Energiegleichung lautet für ein Kontrollvolumen  $dV = dx_1 dx_2 dx_3$ 

$$\frac{\partial \left(\rho h\right)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho u_i h\right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(q_i''\right) = q''' + \phi \quad . \tag{2.64}$$

Dabei ist h die Enthalpie des Fluids,  $q''_i$  der Vektor der Wärmeströme im Kontrollraum und q''' eine volumetrische Wärmequelle. Formale volumetrische Mittelung und Anwendung von Gl. 2.27 bis Gl. 2.31 auf Gl. 2.64 ergibt die integrale Form der Energieerhaltung unter Vernachlässigung der Dissipation  $\phi$  und sonstiger volumetrischer Wärmequellen q'''.

$$\underbrace{\frac{\partial \langle \rho h \rangle}{\partial t}}_{\text{eitl. Änderung}} + \underbrace{\frac{1}{V_T} \int_{A_f} \rho(u_i n_i) h \, dA}_{\text{Konvektionsterm}} + \underbrace{\frac{1}{V_T} \int_{A_f} k_e \left( n_i \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) \, dA}_{\text{Wärmeleitung}} + \underbrace{\frac{1}{V_T} \int_{A_{fs}} q'' n_i \, dA}_{\text{Wärmelebertragung}} = 0(2.65)$$

Der Wärmeleitungsterm beschreibt die Wärmeleitung innerhalb des Fluids. Dabei ist  $k_e$  eine effektive Wärmeleitfähigkeit, die sowohl die molekulare als auch die turbulente



Abbildung 2.9: Energieerhaltung im Unterkanal.

Wärmeleitung berücksichtigt. Der Wärmeübertragungsterm beschreibt die Wärmeflüsse über die Flüssigkeits-Feststoff-Grenzfläche  $A_{fs}$ . Durch Spezialisierung von Gleichung 2.65 auf die Unterkanalgeometrie in Abb. 2.9 entspricht dieser Term der Wärmeübertragung aus den Brennstäben und wird als volumetrische Heizleistung  $q_{br}^{\prime\prime\prime}$  berücksichtigt.

$$\frac{1}{V_T} \int_{A_{fs}} q'' n_i \, dA = q_{br}''' A_{f,x_3} \Delta x_3 = q_{br} \tag{2.66}$$

Die restlichen Terme in Gleichung 2.65 werden ebenfalls durch Spezialisierung auf die Unterkanalgeometrie und unter Vernachlässigung der zeitliche Änderung der Enthalpie zu

$$\underbrace{{}_{z}\Delta\left[\dot{m}_{j}h_{j}\right]}_{\text{ax. Transport}} + \underbrace{\sum_{k=1}^{K}\left[\left(G_{jk}h^{*}\right)s_{jk}\Delta x_{3}\right]}_{\text{gerichteter Queraustausch}} + \underbrace{\sum_{k=1}^{K}\left[\left(G'_{jk}h_{j} - G'_{kj}h_{k}\right)s_{jk}\Delta x_{3}\right]}_{\text{turb. Queraustausch}} = \underbrace{\left\langle q_{br,j}\right\rangle}_{\text{Brennstableistung}} (2.67)$$

Die molekulare Wärmeleitung innerhalb des Fluids wird vernachlässigt, da ihr Beitrag im Vergleich zum konvektiven und turbulenten Austausch gering ist. Ebenso wird der turbulente Austausch in axial Richtung vernachlässigt, weil dieser klein im Vergleich zu den konvektiven Flüssen ist. Für den konvektiven Austauschterm wird analog zum konvektiven Impulsqueraustausch die "Donor Cell" Methode benutzt, so dass für  $h^*$  gilt:

$$G_{jk} \ge 0$$
 und deshalb  $h^* = h_k$  (2.68)

und für austretende Massenströme

$$G_{jk} \le 0$$
 und deshalb  $h^* = h_j$ . (2.69)

Der Gleichungssatz für das Unterkanalprogramm STAFAS ist nun komplett. Es besteht aus der Kontinuitätsgleichung, den Impulsgleichungen in Axial und Querrichtung und der Energieerhaltungsgleichung. Durch die Anwendung der Volumenmittelung können Strömungsphänomene die innerhalb des Mittelungsvolumens geschehen nicht mehr direkt aufgelöst werden. Da deren Auswirkungen auf die globale Strömung oft nicht zu vernachlässigen ist, müssen diese durch Schließungsterme berücksichtigt werden. Das bedeutet zum Beispiel für den axial auftretenden Strömungswiderstand, der hauptsächlich durch Reibung in der Grenzschicht verursacht wird, dass dessen Wirkung durch einen integralen Druckverlustterm berücksichtigt werden muss. In der folgenden Übersicht werden noch einmal die vier Gleichungen des Unterkanalmodells zusammengefasst, wobei die unbekannten Größen, die mit Hilfe der Schließungsterme berücksichtigt werden müssen, farblich markiert sind.

Kontinuitätsgleichung:

$$\sum_{k=1}^{K} \left[ G_{jk} s_{jk} \Delta x_3 \right] + {}_{x_3} \Delta \dot{m}_j = 0 \quad .$$
(2.70)

Impulsgleichung in Axialrichtung:

$${}_{x_{3}}\Delta(\dot{m}_{j}u_{3}) + \sum_{k=1}^{K} \left[ (G_{jk}u_{3}^{*}) s_{jk}\Delta x_{3} \right] + \sum_{k=1}^{K} \left[ \left( G_{jk}^{\prime}u_{3,j} - G_{kj}^{\prime}u_{3,k} \right) s_{jk}\Delta x_{3} \right] = -{}_{x_{3}}\Delta\left( \{p\}A_{f,3} \right) - \langle \rho \rangle g A_{f,3}\Delta x_{3} + F_{j,x_{3}} \quad .$$
(2.71)

Impulsgleichung in Querrichtung:

$$_{jk}\Delta\left(\{p\}\right)s_{ij}\Delta x_{3} = F_{j,k} = C_{jk}\left(\frac{|G_{jk}|G_{jk}}{\rho_{jk}^{*}}\right)s_{ij}\Delta x_{3} \quad .$$

$$(2.72)$$

Energiegleichung:

$${}_{z}\Delta[\dot{m}_{j}h_{j}] + \sum_{k=1}^{K} \left[ (G_{jk}h^{*}) s_{jk}\Delta x_{3} \right] + \sum_{k=1}^{K} \left[ \left( G_{jk}^{\prime}h_{j} - G_{kj}^{\prime}h_{k} \right) s_{jk}\Delta x_{3} \right] = \langle q_{br,j} \rangle \quad . \quad (2.73)$$

Um das thermohydraulische Gleichungssystem zu schließen müssen also Modelle für insgesamt 3 Größen gefunden werden.

- 1. Der turbulente Quermassenstrom  $G'_{ik}$  zwischen Unterkanal j und k
- 2. Die axiale Widerstandskraft  $F_{j,x_3}$ . Dazu zählen alle in axiale Strömungsrichtung auftretenden Verluste, wie Reibung, Ein- und Auslassverluste aus dem Stabbündel, Abstandshalterverluste und Blendenverluste am Einlass der BE.
- 3. Die laterale Widerstandskraft  $F_{j,k}$  bzw. der laterale Druckverlustkoeffizient  $C_{jk}$  der Querströmung zwischen Unterkanal j und k

# 2.2.2 Brennstabmodell

Die im vorangegangenen Kapitel 2.2.1 beschriebenen thermohydraulischen Gleichungen erlauben die Berechnung der Fluideigenschaften wie Temperatur und Dichte im gemittelten Strömungskanal. Für die technische Beurteilung eines Kernkonzepts sind aber auch speziell die Vorgänge innerhalb des Brennstabs und seiner Hülle relevant. Die Kopplung zwischen der Thermohydraulik des Kühlmittel und dem thermischen Zustand des Brennstoffs und der Hülle ergibt sich über die Brennstableistung  $\langle q_{br,j} \rangle$  in Gl. 2.67 und über die lokale Temperatur des Kühlmittels. Durch Spezialisierung des Wärmeleitgesetzes auf die radiale Koordinate des Brennstabs, ergibt sich mit der volumetrischen Heizleistung der Brennstoffs q''' und der Wärmeleitfähigkeit des Brennstoffs  $\lambda_P$ 

$$\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(\lambda_P r\frac{dT}{dr}\right) + q^{\prime\prime\prime} = 0 \quad . \tag{2.74}$$

Dabei wurde die axiale Wärmeleitung vernachlässigt und eine gleichmässige Temperaturverteilung über den Umfang des Brennstabes angenommen. Letztere Annahme gilt allerdings nur für ein Teilungsverhältnis p/d > 1,2 ([90]) und sollte für detailliertere Analysen in nachfolgenden Arbeiten verifiziert werden. Durch Integrieren der Gleichung über die Zylindergeometrie des Pellets (vgl. Abb. 2.2.2) kann die Bestimmungsgleichung für den Temperaturverlauf im Pellet hergeleitet werden (Nachzulesen in [85], [94] oder [90]). Ziel



Abbildung 2.10: Querschnitt durch den Brennstab (links) und schematisches Temperaturprofil im Brennstab.

der Berechnung ist die Bestimmung der sicherheitsrelevanten maximalen Temperatur im Brennstoffpellet. Wie Abb. 2.2.2 zu entnehmen ist, befindet sich der Bereich der maximalen Brennstofftemperatur in der Mitte des Pellets. Für die maximale Temperatur in der Mitte des Pellets  $T_{P,i}$  gilt

$$T_{P,i} = T_{P,a} + \frac{q''' d_{P,a}^2}{16\lambda_P} \quad . \tag{2.75}$$

Dabei ist  $\lambda_P$  die Wärmeleitfähigkeit des Brennstoffs Uran-Oxid  $UO_2$ . Die Temperaturabhängigkeit von  $\lambda_P$  wurde vernachlässigt und Werte für typische Brennstofftemperaturen von ca. 1000 °C nach Harding und Martin [30] verwendet. Ebenfalls von großer sicherheitstechnischer Relevanz ist die maximale Hüllrohrtemperatur  $T_{H,i}$ . Die Bestimmungsgleichung dieser Größe leitet sich ebenfalls aus Gl. 2.74 her. Sie lautet

$$T_{H,i} = T_{H,a} + \frac{q''' d_{P,a}^2}{8\lambda_H} \ln\left(\frac{d_{H,a}}{d_{H,i}}\right) \quad . \tag{2.76}$$

Wobei  $\lambda_H$  die Wärmeleitfähigkeit des Hüllrohrmaterials ist und die Hüllrohroberflächentemperatur auf der Fluidseite sich mit

$$T_{H,a} = T_F + \frac{q'''d_{P,a}^2}{4\alpha d_{H,a}}$$
(2.77)

berechnet. Dabei ist  $\alpha$  der Wärmeübergangskoeffizient vom Fluid zum Hüllrohr. Genaueres über die Wärmeleitfähigkeit  $\lambda_H$  und den Wärmeübertragungskoeffizient  $\alpha$  ist im nachfolgenden Kapitel 2.2.3 zu finden.

# 2.2.3 Schließungsterme und Korrelationen

Im vorangehenden Kapitel wurden die Unterkanalgleichungen und das Brennstabmodell zur Verwendung im Thermohydraulikprogramm STAFAS hergeleitet und dabei die Stellen herausgearbeitet, an denen zusätzliche Modelle zur Schließung des Gleichungssystems verwendet werden müssen. In den folgenden Absätzen soll eine kurze Übersicht über die in Frage kommenden Modelle und Arbeiten gegeben werden.

# Axialer Druckverlustkoeffizient

Wie schon bei der Herleitung der Impulsgleichung beschrieben wird die Widerstandskraft, die eine Strömung beim Durchströmen der Unterkanalgeometrie in axiale Richtung erfährt, mit einem Ansatz gemäß Gleichung 2.56 modelliert. Dies ist ein gängiger Ansatz, wie er bei der eindimensionalen Strömungsanalyse oft verwendet wird, um Druckverluste in Kanälen unterschiedlicher Geometrie zu berechnen. Der Faktor  $C_f$  heißt axialer Druckverlustkoeffizient und wird in der Regel durch experimentelle Korrelationen bestimmt. Die meisten Korrelationen für den Widerstandsbeiwert  $C_f$  haben die generelle Form:

$$C_f = \frac{C_1}{\text{Re}^{C2}}$$
, (2.78)

wobei Re der Reynoldszahl (Def. A.3) auf Basis des hydraulischen Durchmessers  $d_v$  des Strömungskanals gebildet wird. Verschiedene Autoren haben durch Auswertung ihrer experimentellen Druckverlustmessungen jeweils unterschiedliche Werte für die Faktoren  $C_1$ und  $C_2$  erhalten. Einen kleinen Überblick über die in Frage kommenden Arbeiten gibt Tabelle 2.2. Um die Korrelationen für Rohre auf die Geometrieverhältnisse im Bündel anzupassen, haben Marek und Rehme [54] durch Analyse der vorhandenen experimentellen Daten einen Korrekturterm für Stabbündel in quadratischer Anordnung entwickelt:

$$\frac{C_f}{C_{f,r}} = 1.04 + 0.06 \left(\frac{p}{d} - 1\right) \quad . \tag{2.79}$$

Referenz	$C_1$	$C_2$	Geometrie	$\mathbf{p}/\mathbf{d}$
Blasius	0,3164	0.25	Rohr	-
McAdams [55]	0,1840	0,20	Rohr	-
Presser [70]	0,1868	0,20	Bündel	1,05 u. 1,67
Wantland [108]	1,76	$0,\!39$	Bündel	1,106
Tong [94]	0,140	0,18	Zentralkanal / Bündel	1-2

Tabelle 2.2: Verschiedene Koeffizienten für Gl. 2.78

In einer Literaturstudie empfehlen Cheng und Schulenberg [17] die Korrelation von Filonenko [21] bzw. Petukhov et al. [67]:

$$C_{f,0} = \left(1,82\log\left(\frac{\operatorname{Re}}{8}\right)\right)^{-2,0} \quad . \tag{2.80}$$

Alle Korrelationen wurden für unbeheizte Stabbündel bestimmt. Um den Widerstand in beheizten Stabbündel berechnen zu können wird häufig ein Korrekturfaktor nach Popov [69] verwendet.

$$C_f = C_{f,0} \left(\frac{\mu_W}{\mu_B}\right)^a \left(\frac{\rho_W}{\rho_B}\right)^b \tag{2.81}$$

Die Formel berücksichtigt, dass bei erhöhter Wandtemperatur die Viskosität und die Dichte des Fluids an der Wand verringert wird und damit zu geringerer Reibung führt. Gl. 2.81 wurde für ein unterkritisches Fluid bestimmt. Durch theoretische Überlegungen hat [69] festgestellt, dass für überkritisches Fluid (am Beispiel CO<sub>2</sub>) das Viskositätsverhältnis vernachlässigbar ist (d.h. a = 0) und für das Dichteverhältnis den Exponent b = 0, 4ermittelt. Es folgt als Korrektur des Druckverlustkoeffizienten:

$$C_f = C_{f,0} \left(\frac{\rho_W}{\rho_B}\right)^{0.4} \quad . \tag{2.82}$$

Dieser Korrekturterm wird auch später von Grabezhnaya und Kirillov [26] empfohlen. In der nachfolgenden Abb. 2.11 sind die aufgeführten sowie einige zusätzliche Korrelation zum Vergleich aufgetragen. Man sieht, dass die Hauptunterschiede im Bereich relativ kleiner Reynoldszahlen zu finden sind. Im typischen Reynoldszahl-Bereich 50000 < Re <130000 des BE-Bündels des SDWR sind die Unterschiede eher gering. Im Rahmen dieser Arbeit wird die die Korrelation von McAdams mit der Korrektur für Bündelströmungen von Marek und Rehme [54] verwendet.



Abbildung 2.11: Vergleich verschiedener Druckverlustkoeffizienten für axial durchströmte Rohre und Rohrbündel.

# Lateraler Druckverlustkoeffizient

Der laterale Druckverlustkoeffizient tritt in der lateralen Impulsgleichung 2.61 auf und bestimmt den Quermassenstrom, der aufgrund von Druckunterschieden zwischen benachbarten Unterkanälen entsteht. Von Bedeutung ist dieser Austauschterm in Bereichen des BE, an denen entweder eine größere Druckdifferenz oder eine Fehlverteilung des Massenstroms herrscht. Letzteres ist am Einlass des BE der Fall, an dem eine Umverteilung des Kühlmittelmassenstroms zwischen den Unterkanäle stattfindet. Druckdifferenzen entstehen im Wesentlichen durch Versperrungen im Strömungskanal wie sie z.B. durch Abstandhalter, Stabverbiegungen etc. hervorgerufen werden. Außerdem können sie durch die inhomogene Aufheizung benachbarter Unterkanäle hervorgerufen werden, da die temperaturabhängigen Stoffwerte des Fluids den Druckverlust in Hauptströmungsrichtung entscheidend beeinflussen. Eine Übersicht der Arbeiten zu diesem Thema wurde bereits in Kap. 1.2 gegeben.

Eine gebräuchliche Korrelation für den Querdruckverlust ist die Formel von Gunter und Shaw [28]. Diese wird unter anderem von [89] empfohlen. Hierbei handelt es sich um einen Korrelation, die für den Fall von reiner Querströmung ermittelt wurde. Der Faktor  $C_{jk}$ ist nach Gl. 2.61 der laterale Austauschkoeffizient. Zur Berechnung dieses Koeffizienten lautet die Korrelation:

$$\frac{C_{jk}}{2} = \frac{\Delta p_{lat} d_v \rho}{G_{jk}^2 L} \left(\frac{\mu}{\mu_W}\right)^{0.14} \left(\frac{d_v}{p_q}\right)^{-0.4} \left(\frac{p_l}{p_q}\right)^{-0.6} \\
= \frac{90}{\text{Re}_{d_v}} \quad \text{für laminare Strömungen } (Re_{d_v} < 200) \\
= \frac{0,96}{\text{Re}_{d_v}^{0.145}} \quad \text{für turbulente Strömungen } (Re_{d_v} > 200)$$
(2.83)

Dabei bedeutet  $\Delta p_{lat}$  die laterale Druckdifferenz über die Lauflänge des Fluids L,  $G_{jk}$  die Massenstromdichte die vom Unterkanal j in den Unterkanal k strömt und  $d_v$  den hydraulischen Durchmesser mit

$$d_v = \frac{4 \cdot V_{fl}}{A_{be}} \quad . \tag{2.84}$$

Das Verhältnis aus der Längsteilung  $p_l$  zur Querteilung  $p_q$  nimmt den Wert 1 an, da es sich um ein Stabbündel in quadratischer Anordnung handelt. Der Faktor

$$\left(\frac{\mu}{\mu_W}\right)^{0,14} \tag{2.85}$$

ist ein Korrekturfaktor, der für beheizte Strömungen verwendet werden kann [94]. Weitere Korrelationen wurden schon in Kap. 1.2 erwähnt und stammen z.B. von Gaddis und Gnielinski [24] oder Jakob [40]. In manchen Unterkanalprogrammen (z.B. COBRA) wird statt einer Korrelation lediglich ein konstanter Wert  $C_{jk} = 0, 5$  verwendet.

# Turbulenter Mischungskoeffizient

Wie bereits in der Einleitung und in vorangegangen Kapitel beschrieben, ist der turbulente Austausch von großer Bedeutung für die Bündelströmung. Er sorgt für einen Ausgleich von Impuls- und Enthalpieunterschieden zwischen den Unterkanälen und reduziert somit die Heißkanalfaktoren innerhalb eines BE. Dieser Austausch ist deshalb so effektiv und wichtig, weil er im Gegensatz zum gerichteten Austausch durch Druckausgleichsströmungen über die gesamte Höhe des BE stattfindet. In den Unterkanalgleichungen wird durch die turbulente Massenstromdichte  $G'_{jk}$  in Gl. 2.55 Impuls und Energie zwischen den Unterkanälen j und k transportiert. Im Unterkanalansatz wird zur Modellierung dieser unbekannten Größe der Ansatz von Wheeler et al. [109] für einphasige Strömung benutzt. Dieses Modell ist allgemein akzeptiert, verifiziert und wird auch in anderen Unterkanalprogrammen wie COBRA oder MATRA benutzt. Dabei wird die Quermassenstromdichte

$$G'_{jk} = \beta \left( \frac{u_{3,k} \cdot \rho_k + u_{3,j} \cdot \rho_j}{2} \right)$$
(2.86)

mit der mittleren Massenstromdichte in Hauptströmungsrichtung korreliert. Dabei ist  $\beta$ der sogenannte turbulente Mischungskoeffizient und muss für die Berechnung einer bestimmten Geometrie vorgegeben werden. In der Regel werden Werte für  $\beta$  durch die Verwendung von passenden Korrelationen bestimmt. Verfügbar sind experimentelle Korrelationen von Ingesson und Hedberg [38], Cheng und Todreas [16], Rogers und Tahir [76]. In [72] werden diese verglichen und für Bündel in quadratischer Anordnung eine gute Übereinstimmung festgestellt. In dieser Arbeit wird die Korrelation von Rogers und Tahir [76] als Referenz verwendet. Diese lautet für Rohrbündel in quadratischer Anordnung:

$$\frac{w'_{jk}}{\mu} = 0,005 \cdot \operatorname{Re}_{ax}^{0,9} \cdot \left(\frac{s_{jk}}{d}\right)^{0,106} , \qquad (2.87)$$

wobei  $s_{jk}$  die Breite des Spaltes zwischen den Unterkanälen ist, d der Durchmesser der Stäbe und  $\mu$  die Viskosität des Fluids. Die Größe  $w'_{jk}$  ist definiert als der Mischungsmassenstrom pro Länge des Unterkanals und wird als Mischrate bezeichnet. Sie hängt mit der Quermassenstromdichte  $G'_{jk}$  über  $w'_{jk} = G'_{jk} \cdot s_{jk}$  zusammen.

#### Wärmeübergangskoeffizient

Der Wärmeübergangskoeffizient  $\alpha$  bestimmt die Wärmeübertragung von den Brennstäben an das Fluid. In den Unterkanalgleichungen taucht er nicht direkt auf, da angenommen wird, dass im stationären Zustand die gesamte Wärme, die in den Brennstäben erzeugt wird, auch auf das Kühlmittel übergeht. Diese Betrachtungsweise ist sinnvoll, weil die Leistung der Stäbe und damit die zur Verfügung stehende Wärme von der nuklearen Reaktion vorgegeben ist. Allerdings taucht  $\alpha$  im Brennstabmodell Gl. 2.77 auf und bestimmt maßgeblich die sicherheitstechnisch wichtige Hüllrohrtemperatur. Der Wärmeübergang von einer Wand auf ein unmittelbar darüber fließendes Fluid ist kompliziert und insbesondere für überkritisches Wasser nach wie vor Gegenstand der Forschung. Dabei spielen viele Einflüsse wie Beschaffenheit der Brennstaboberfläche, Temperatur- und Geschwindigkeitsgrenzschicht, Variation der Stoffeigenschaften, Heizflächenlast u.a. eine Rolle. Besonders der Effekt der "Heat Transfer Deterioration", also der Verschlechterung des Wärmeübergangs unter bestimmten Bedingungen, ist noch nicht ausreichend geklärt. Experimente zum Wärmeübergang mit überkritischem Wasser in Stabbündel sind nicht verfügbar, so dass alle verfügbaren experimentellen Daten und Korrelationen sich auf von außen beheizte Rohre beziehen. Einen guten Überblick über die verfügbaren Arbeiten geben Löwenberg [51] sowie Pioro und Duffey [68].

# **Bishop-Korrelation**

Im dieser Arbeit wird hauptsächlich die Wärmeübergangskorrelation von Bishop [9] verwendet, die auf Basis von Experimenten an von außen beheizten und mit überkritischem Wasser durchströmten Rohren erstellt wurde.

$$Nu = 0,0069 \cdot Re_b^{0,90} \cdot Pr_b^{0,66} \cdot \left(\frac{\overline{c_p}}{c_p}\right)^{0,66} \cdot \left(\frac{\rho_w}{\rho_b}\right)^{0,43} \cdot \left(1 + \frac{2,4D_{char}}{L}\right)$$
(2.88)

Dabei steht der Index  $_b$  für den Bezug der jeweiligen Größe auf die Kernströmung und  $_w$  für die Wand. Die Definition von Reynolds-Zahl und Prandtl-Zahl findet sich in Kap. A.2. Der letzte Term von Gl. 2.88 berücksichtigt Einlaufeffekte und wird mit zunehmender Lauflänge L der Strömung zu null, wobei  $D_{char}$  in diesem Falle eine charakteristische Bezugslänge (z.B. Durchmesser des Rohres) ist. Die in der Gleichung enthaltenen Verhältnisse der Stoffeigenschaften  $\rho$  und  $c_p$  berücksichtigen die unterschiedlichen Fluideigenschaften an der Wand und im Kern der Strömung durch die Temperaturgrenzschicht. Die mittlere Wärmekapazität  $\overline{c_p}$  ist dabei definiert als

$$\overline{c_p} = \frac{h_w - h_b}{T_w - T_b} \quad . \tag{2.89}$$

Dabei ist h die Enthalpie und T die Temperatur des Fluids im Kern der Strömung bzw. an der Wand. Für eine konkrete Geometrie mit der charakteristischen Länge D und für ein Fluid mit der Wärmeleitfähigkeit  $\lambda$  angewendet, ergibt sich der Wärmeübergangskoeffizient  $\alpha$  aus

$$Nu = \frac{\alpha \cdot D}{\lambda} \quad . \tag{2.90}$$

# **Dittus-Boelter-Korrelation**

Bei der thermohydraulischen Berechnungen der Spaltströmung in Kap. 2.3 wurde die

Korrelation von Dittus-Boelter verwendet:

$$Nu = 0,023 \cdot Re^{0,80} \cdot Pr^{0,33} \quad . \tag{2.91}$$

Im Gegensatz zur Korrelation von Bishop existiert keine Unterscheidung zwischen Fluideigenschaften im Kern der Strömung und an der Wand. Dadurch sollte die Anwendung der Dittus-Boelter Korrelation auf Berechnungen fern des pseudokritischen Punktes und für relativ niedrige Wärmestromdichten beschränkt bleiben. Zusätzlich werden keine Einlaufeffekte berücksichtigt. Die Gründe zur Verwendung dieser Korrelation sind im wesentlichen praktischer Natur, da sich aufgrund der fehlenden Stoffverhältnisse die Notwendigkeit einer iterative Lösungsmethode erübrigt.

# Ein- und Auslassverluste am Stabgitter

Unter Ein- und Auslassverlust versteht man den Druckverlust, der entsteht, wenn die Kühlmittelströmung vom unteren Plenum in die Unterkanalgeometrie eintritt bzw. wenn die Kühlmittelströmung am oberen Ende des BE die Unterkanäle verlässt. Um diesen Beitrag in den Unterkanalberechnngen berücksichtigen zu können, wurde in Gl. 2.56 der Druckverlustkoeffizient  $C_g$  eingeführt. Für den Einlassverlust liegt eine Querschnittsverengung vor und  $C_g$  berechnet sich ([37])

$$C_g = 0.5 \cdot \left(1 - \frac{A_{out}}{A_{in}}\right) \quad . \tag{2.92}$$

 $A_{in}$  entspricht dabei der durchströmten Fläche vor der Querschnittsänderung und  $A_{out}$  der Fläche nach der Änderung. Im umgekehrten Fall der Querschnittserweiterung am Auslass des Stabgitters bestimmt sich  $C_g$  mit ([37])

$$C_g = \left(1 - \frac{A_{in}}{A_{out}}\right)^2 \quad . \tag{2.93}$$

#### Druckverlust durch Abstandhalter

Abstandshalter dienen zur Verhinderung bzw. Begrenzung von Brennstabauslenkungen und Brennstabschwingungen. Dafür werden die Stäbe in regelmäßigen Abständen durch die Abstandhalter in ihrer Lage zueinander fixiert. In der Unterkanalanalyse werden die Abstandhalterdruckverluste gemäß Gl. 2.56 mit dem Verlustkoeffizienten  $C_s$  berücksichtigt. Im vorliegenden BE-Konzept sind Gitterabstandhalter ohne spezielle Formgebung zur Beeinflussung oder Lenkung der Strömung (z.B. Schaufeln, Fähnchen etc.) vorgesehen. Der erzeugte Druckverlust hängt somit von dem Versperrungverhältnis  $\epsilon = (\frac{A_f,3}{A_{sp}})$ und einem allgemeinen Verlustkoeffizienten  $C_v$  ab.

$$C_s = C_v \ \epsilon^2 \tag{2.94}$$

Rehme [71] hat die verfügbaren experimentellen Daten zusammengefasst und fand heraus das  $C_v$  mit guter Genauigkeit unabhängig von der speziellen Abstandhaltergeometrie ist und typische Werte zwischen  $C_v = 6 - 7$  annimmt. Für dies Arbeit wurde ein Mittelwert von  $C_v = 6,5$  und eine Versperrung  $\epsilon$  analog zum EFR (European Fast Reactor) von 23 % angenommen. Damit ergibt sich der Druckverlustkoeffizient für den Abstandhalter  $C_s = 11$ 

#### Druckverlust an Blenden

Zusätzliche Druckverluste müssen am Eintritt jedes BE für die Stabilisierung der Strömung und zur Einstellung eines bestimmten Durchflusses eingebracht werden. In der Praxis macht man dies durch den Einbau von Drosselblenden im Zufluss des BE. Der dadurch verursachte Druckverlust im Strömungskanal berechnet sich mit:

$$\Delta p = C_{bl} \cdot \left(\frac{\rho}{2} \left| u_3 \right| \left| u_3 \right| \right) \quad . \tag{2.95}$$

Der Blendenkoeffizient  $C_{bl}$  ist stark von der geometrischen Form und konstruktiven Ausführung der Blende abhängig. Im Verlauf der Kernberechnungen in Kap. 5 werden geeignete Werte für die Blendenkoeffizienten definiert und damit der Kühlmittelmassenstrom in jedes BE-Bündel kontrolliert (vgl. Kap. 5.4)

# Temperaturabhängige Wärmeleitfähigkeit von Stahl

Als Erweiterung des bestehenden Wärmeleitmodells wurde in STAFAS eine Routine implementiert, welche sowohl die Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit  $\lambda$  des Werkstoff berücksichtigt, als auch die Verwendung von Kastenwänden unterschiedlicher Dicke möglich macht. Für die Wärmeleitfähigkeit wurde dabei ein linearer Verlauf mit der Temperatur T gemäß Abb. 2.12 angenähert. Die Punkte entsprechen empirische Daten wie sie z.B. von den Herstellern der betreffenden Stahlsorte verfügbar sind.



Abbildung 2.12: Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit von SS3161.

# 2.2.4 Lösungsalgorithmus in STAFAS

Die im vorangehenden Kap. 2.2 eingeführten Unterkanalgleichungen für Masse, Impuls und Energie (Gl. 2.70 - Gl. 2.73) wurden von Cheng et al. [18] in den Unterkanal-Code STAFAS implementiert und werden dort sequentiell gelöst. Der detaillierte numerische Ablauf des Lösungsprozesses ist in Abb. 2.13 dargestellt und wird anhand eines Beispiels mit mehren parallelen Unterkanälen erklärt werden (z.B BE oder Kern).

Nach der Bestimmung von Startwerten für das Fluid (Temperatur und Geschwindigkeit) werden zunächst die Erhaltungsgleichungen für die Unterkanäle gelöst (Subroutine SUBCHN). Hierfür wird die erste Zellschicht am Eintritt der Unterkanäle ausgewählt und zunächst für alle Unterkanäle unter Verwendung des Eintrittsmassenstrom der Druckverlust in die axiale Richtung berechnet. Anschließend wird je nach Berechnungsmodus unterschiedlich verfahren. Für den Fall, dass geschlossen Kanäle berechnet werden (Modus "Kanal" bei der Kernberechnung oder bei Druckröhrenreaktoren) ist die Berechnung der Impulserhaltung beendet, da der Druck die einzige Variable ist und die Masse im Kanal per Definition erhalten wird. Im Falle von verbundenen Kanäle (Modus "Unterkanal" für BE-Rechnung) muss zusätzlich der Massen- und Impulsaustausch in Querrichtung berechnet werden. Dabei wird so lange iteriert, bis die Quermassenströme und die Austrittsmassenströme aus der Zellschicht zu den Eintrittsmassenströmen passt (Iteration 1). Dies wird unter der Randbedingung berechnet, dass sich die Querdruckdifferenzen zwischen den Unterkanälen komplett ausgleichen. Ergebnis dieser ersten Schleife sind Druckund Massenstromverteilung für eine bestimmte axiale Zellschicht und für eine gegebene Fluidtemperatur.

Mit den Werten für Druck und Massenstrom wird in der nachgeschalteten Berechnung der Energieerhaltung (Subroutine SUBENE) die Aufheizung der Unterkanäle in dieser Zellschicht in Abhängigkeit von der zugeführten Wärme aus den Brennstäben berechnet. Analog zur Impulserhaltung wird erst die Aufheizung in Axialrichtung berechnet und dann gegebenenfalls je nach Berechnungsmodus (Kanal oder Unterkanal) der Energietransport in Querrichtung iteriert bis die Temperatur des Fluids in den Zellen mit dem vorgegebenen Massenstrom und der Wärmezufuhr aus den Stäben zusammenpasst (Iteration 2).

Mit den neu berechneten Fluidtemperaturen ändern sich die temperaturabhängigen Stoffwerte wie Dichte, Viskosität etc., so dass eine Wiederholung der Impulserhaltungsrechnung für diese Zellschicht durchgeführt werden muss (Iteration 3). Am Ende der gekoppelten Berechnung von Impuls und Energie sind die Werte von Druck, Massenströme und Enthalpie konvergiert, und werden als Eintrittsparameter für die nächste Zellschicht verwendet. Diese Prozedere wird nun für alle Zellschichten durchgeführt (Iteration 3). Nach Berechnung der letzten Zellschicht wird die Konvergenz der Druckrandbedingung überprüft. Darunter wird verstanden, dass alle Kanäle bzw. Unterkanäle mit dem gleichen Plenum verbunden sind, so dass sich der gleiche Druckabfall von Eintritt zum Austritt des Kanals einstellen muss (Plenumsrandbedingung). Bei Verwendung des Unterkanal-Modus ist diese Randbedingung aufgrund des Berechnungsverfahrens stets erfüllt, wohingegen beim Kanal-Modus aufgrund der fehlenden Durchmischung über die Kanalhöhe eine Umverteilung der Massenströme am Eintritt vorgenommen werden muss. Nach der Umverteilung muss nochmals die Impuls- und Energiegleichung für alle Zellschichten für die neuen Eintrittsmassenströme gelöst werden, bis die Druckrandbedingung erfüllt ist (Iteration 3).

Mit Beendigung der Subroutine SUBCHN liegt eine konvergente Lösung für Druck, Tem-

peratur und Massenstrom in den Unterkanälen bzw. Kanälen unter Berücksichtigung der Plenumsrandbedingung für den Druck vor. Aufgrund der thermischen Kopplung der Moderatorwasserströmung in Kasten und Spalt an die Unterkanäle muss dessen Aufheizung durch das Kühlwasser berechnet werden. Die neue Temperatur- und Dichteverteilung in Spalt und Kasten beeinflusst ihrerseits wieder die Berechnung der Eintrittsrandbedingungen der Unterkanäle, da sich Spalt und Kastenwasser mit dem Wasser aus dem Ringspalt vermischt. Konvergenz der Thermohydraulik im berechneten Bündel oder Kern liegt vor, wenn auch die Aufheizung des Moderatorwassers in Kasten und Spalt konvergiert ist (Iteration 4).



Abbildung 2.13: Numerischer Lösungsalgorithmus in STAFAS - Subroutine SOLVE.

# 2.3 Poröses Medien Modell für die Berechnung der Spaltströmung

Die Geometrie des in diesem Reaktorkonzept verwendeten BE wurde bereits in der Einleitung dieser Arbeit kurz vorgestellt (Abb. 1.4). Dabei wurde ebenfalls erwähnt, dass durch die Positionierung der BE mit einem Abstand von 10 mm zueinander ein Spalt entsteht, der mit Moderatorwasser von oben nach unten durchströmt wird. Dieser Spaltraum zieht sich wie ein Netz durch das gesamte Kernvolumen (vgl. Abb. 7.1. Durch Wärmeleitung über die BE-Kästen ist das Spaltwasser thermisch an das heiße Kühlmittel gekoppelt und wird durch dieses erhitzt. Das Strömungsverhalten innerhalb des Spaltraums ist dabei sowohl von neutronischer als auch von thermohydraulischer Seite von Interesse und soll simuliert werden. Ziel ist die Berechnung der Aufheizung und die Überprüfung der bei der Kernberechnung getroffenen Annahmen (vgl. Kap. 7). Aufgrund der komplizierten Geometrie und dem hohen Anteil an Grenzflächen, die einer feinen räumlichen Diskretisierung bedürfen, ist eine Simulation dieser Spaltströmung mit CFD nicht möglich. Alternativ wurde ein Ansatz gewählt, der das Netz der Spalte zwischen den BE als poröses Medium behandelt.

Das Poröse Medien Modell (PMM) basiert wie die schon in Kap. 2.2.1 vorgestellten Unterkanalmodelle auf einem Satz volumetrisch gemittelter Gleichungen. Die Herleitung dieser Gleichungen ist deshalb analog zu den Unterkanalgleichungen. Allerdings werden die volumengemittelten Gleichungen für Masse (2.37), Impuls (2.52) und Energie (2.65) in der integralen Form nicht auf eine spezielle Geometrie angewandt, sondern werden hier in der differentiellen Form wiedergegeben. Unterschiede zu den Unterkanalgleichungen ergeben sich im wesentlichen bei der Modellierung der durch die Volumenmittelung vernachlässigten Strömungseffekte innerhalb der Strömung (z.B. integrale Widerstandskraft R in Gl. 2.52). Die ausführliche Herleitung der Gleichungen und die verwendeten Modellierungsansätze zur Berücksichtigung der internen Effekte wurden ausführlich von Kunik und Vogt [45] erläutert und dokumentiert. Deshalb werden im Folgenden nur kurz die Gleichungen des PMM aufgeführt und auf die wichtigsten Punkte hingewiesen.

# Massenerhaltung

Die Massenerhaltung ergibt sich in kartesischen Koordinaten  $x_i$  durch Anwendung von Gl. 2.37 auf ein Volumenelement  $dV = dx_1 dx_2 dx_3$ , welches sowohl Feststoffe als auch Flüssigkeit enthält:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \varphi_i \overline{u_{i,f}} \right) = 0 \quad , \tag{2.96}$$

wobei  $\overline{u_{i,f}}$  die mittlere Spaltgeschwindigkeit ist, die durch Mittelung über den Fluidraum gebildet wird.  $\varphi_i$  ist die sogenannte Flächenporosität in die Koordinatenrichtung  $x_i$ . Mittels der Definition der Darcy-Geschwindigkeit  $\overline{u_i} = \varphi_i \overline{u_{i,f}}$  folgt

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \overline{u_i} \right) = 0 \quad . \tag{2.97}$$

Die Darcy-Geschwindigkeit  $\overline{u_i}$  stellt eine über Feststoff **und** Flüssigkeit volumetrisch gemittelte Geschwindigkeit dar.

# Impulserhaltung

Durch Verwendung der Darcygeschwindigkeit wird die Impulsgleichung zu

$$\frac{1}{\varphi_i}\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\rho\overline{u_i}\right) + \frac{1}{\varphi_i}\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{1}{\varphi_i}\rho\overline{u_i}\overline{u_j}\right) = -\frac{1}{\varphi_i}\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\mu}{\varphi_i}\frac{\partial^2\overline{u_i}}{\partial x_i^2} - \frac{\mu}{C_{1,i}}\overline{u_i} - C_{2,i}\rho\overline{u_i}\left|\overline{u_i}\right| + \rho g \quad (2.98)$$

Der Auftrieb in der Strömung wird mit der Boussinesq-Approximation modelliert:

$$\rho = \rho_0 \left( 1 - \beta_{exp} \left( T - T_0 \right) \right) \quad . \tag{2.99}$$

dabei ist  $\beta_{exp}$  ist der Wärmeexpansionskoeffizient des Moderatorwassers. Wie beim PMM üblich, wurde der laminare Anteil des integralen Widerstandsterms  $R_i$  durch einen linearen Ansatz  $\frac{\mu}{C_{1,i}}\overline{u_i}$  und der turbulente Anteil von  $R_i$  durch einen quadratischen Widerstandsterm  $C_{2,i}\rho\overline{u_i} |\overline{u_i}|$  ersetzt (siehe z.B. Nield [59] oder Vafai und Tien [98]). Die wichtigen Koeffizienten  $C_{1,i}$  und  $C_{2,i}$  werden in [45] sowohl durch Korrelationen als auch durch eine Detailanalyse der Spaltströmung mit CFD bestimmt.

# Energieerhaltung

Die Energiegleichung orientiert sich an der Herleitung von Hsu und Cheng [36] und lautet mit der Volumenporosität  $\varphi_v$  und einer volumetrischen Wärmequelle q''':

$$\frac{\partial}{\partial T} \left(\varphi_v \rho C_p\right) \overline{T} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho C_p \overline{u_i} \overline{T}\right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\lambda_{mol} \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_i} + \lambda_{turb}' \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_i}\right] + q''' \quad , \qquad (2.100)$$

mit dem Term der effektiven molekularen Wärmeleitfähigkeit  $\lambda_{mol}$  und der effektiven turbulenten Wärmeleitfähigkeit  $\lambda'_{turb}$ . Im konkreten Fall der Spaltströmung wird  $\lambda_{mol}$  so berechnet, dass nur molekulare Wärmeleitung im Fluid stattfindet, d.h. die Wärme die durch die BE geleitet werden könnte, wird vernachlässigt. Für die turbulente Wärmeleitfähigkeit wird aufgrund der geometrischen Ähnlichkeit der Spalte zur Unterkanalgeometrie ein modifiziertes Modell gemäß Kap. 2.2.3 verwendet. Die Verifikation dieser Annahme steht noch aus. Die Wärmezufuhr aus den BE wurde als volumetrische Wärmequelle q'''implementiert:

$$q''' = \frac{1}{V_t} k A_{fs} \left( T_c - T \right) \quad . \tag{2.101}$$

Die zugeführte Wärme aus den BE wird also in Abhängigkeit der Differenz zwischen der Temperatur im Kühlmittel  $T_c$  und der Moderatorwassertemperatur T im Spalt berechnet. Zur Bestimmung des Wärmeübergangskoeffizienten wurde die in Kap. 2.2.3 vorgestellte Dittus-Boelter Korrelation verwendet. Das Modell aus [45] wurde um die Abhängigkeit des Wärmeübergangskoeffizienten von der Strömungsgeschwindigkeit des Kühlmittels im BE erweitert, so dass nun eine realistische, inhomogene Aufheizung des Spaltwassers simuliert werden kann. Die durch die Aufheizung variablen Stoffwerte wurden über Funktionen nach dem Vorbild von Laurien und Wintterle [47] vorgegeben.

Die drei Erhaltungsgleichungen wurden in das Softwarepaket Comsol 3.2 programmiert, welches eine Vielzahl an unterschiedlichen Lösern für derartige nichtlineare Gleichungssysteme bietet. Dabei wird im Gegensatz zum bereits beschriebenen CFD-Code eine Finite Element Methode (FEM) angewendet. Dies umfasst auch einen Löser für transiente Rechnungen.

# 3 Grundlagen der Neutronik

In den vorangegangenen Kapiteln wurden die Grundlagen zum Verständnis der Thermohydraulik in einem Reaktorkern bzw. BE geschaffen. Dabei wurde stets die Kenntnis der stationären Verteilung der Wärmequellen in der Geometrie vorausgesetzt. Diese Wärmeerzeugung im Kern ist das direkte Ergebnis der nuklearen Prozesse im Brennstoff des Reaktors. Unter den nuklearen Prozessen versteht man die möglichen Kernumwandlungsprozesse (d.h. Spaltung, Neutroneneinfang,  $\beta$ -Zerfall etc.), die aufgrund von Strahlung oder durch Instabilität der Atomkerne entstehen. Für die Freisetzung von Energie ist im vorliegenden thermischen Reaktorkonzept vor allem die Spaltung der Kerne des Uran-Isotops U-235 durch den thermischen Anteils der Neutronenstrahlung relevant. Eine Übersicht der dabei erzeugten Reaktionsprodukte und deren Energie gibt Tab. 3.1

Reaktionsprodukt	Energie $[MeV]$	Reichweite
Spaltprodukte	$167\pm5$	$<1 \mathrm{mm}$
Neutronen	5	einige 10 cm
$\beta$ -Teilchen	$8\pm1,5$	einige mm - cm
prompte $\gamma$ -Strahlung	$6 \pm 1$	einige cm - m
verzögerte $\gamma$ -Strahlung	$6 \pm 1$	einige cm - m
Neutrinos	$12\pm2,5$	$\infty$
	204	

Tabelle 3.1: Reaktionsprodukte bei der Spaltung von U-235, deren Energie und deren Reichweite im Reaktormaterial [85].

Bei der Spaltung eines U-235-Kerns mit einem thermischen Neutron wird Energie aus der Bindung der Atome frei. Der Massendefekt und damit die Gesamtmenge der frei werdenden Energie ist abhängig von den bei der Spaltung entstandenen Spaltprodukte. Welche Isotope genau entstehen unterliegt dabei einer statistischen Verteilung. Zusätzlich werden bei der Spaltung eine statistische Anzahl von prompten Neutronen (ca. 2 - 3 Neutronen/Spaltung), sowie prompte  $\gamma$ -Strahlung und Neutrinos freigesetzt. Da es sich bei den Spaltprodukten oftmals um Isotope mit kurzer Halbwertszeit oder in einem angeregten Energiezustand handelt, emitieren diese mit zeitlicher Verzögerung zur Spaltung ebenfalls Neutronen, einige  $\beta$ -Teilchen (Elektronen aus der Umwandlung von Neutronen in Protonen) und  $\gamma$ -Strahlung. Die im Mittel bei der Spaltung eines U-235 Kerns frei werdende Energie beträgt 204 MeV. Diese Energie steckt zunächst in der kinetischen Energie der Teilchen und in den  $\gamma$ -Quanten. Aufgrund der Größe der Spaltprodukte (Massenzahl zwischen 72 und 158 Nukleonen) haben diese eine so geringe Reichweite, dass deren kinetische Energie noch im Brennstoff durch Stöße an der Brennstoffmatrix in Wärme

umgewandelt wird. Die Neutronen haben dagegen eine Reichweite in der Größenordnung von einigen 10 cm, geben ihre Energie durch Stöße an die Umgebung ab oder werden absorbiert. Bei der  $\gamma$  - Strahlung handelt es sich nicht um eine Teilchenstrahlung sondern, um eine hochfrequente elektromagnetische Welle. Aus diesem Grund hat sie eine relativ große Reichweite von mehreren Metern im Reaktormaterial und schwächt sich oft erst im biologischen Schirm des Reaktors ab. Neutrinos werden aufgrund ihrer sehr geringen Wechselwirkung eine fast unendliche Reichweite. Für die Wärmeerzeugung im Kernreaktor ist demnach hauptsächlich die Energie, die in den Teilchen steckt, maßgebend (Spaltprodukte und Neutronen). Diese wird als Heizrate  $\chi$  bezeichnet und beträgt ca.  $\chi = 192$  MeV/Spaltung [85].



Abbildung 3.1: Mögliche Interaktionen eines Neutrons mit der Umgebung (links) und die Bezeichnung der Wirkungsquerschnitte (rechts).

Wie schon Eingangs erwähnt findet die Spaltung von U-235 vorzugsweise mit thermischen Neutronen statt. Unter thermischen Neutronen versteht man Neutronen, die mit ihrer Umgebung im thermischen Gleichgewicht sind und deshalb bei Stößen mit anderen Molekülen weder Energie abgeben noch Energie aufnehmen. Die Energie der thermischen Neutronen liegt im Bereich unterhalb von 1 eV. Die bei der Spaltung von U-235 entstehenden prompten Neutronen liegen allerdings im so genannten schnellen Bereich mit mittlere Energie bei 2 MeV [97]. Aus diesem Grund müssen bei thermischen Reaktoren die Neutronen abgebremst werden, bevor sie zu einer neuen Spaltung führen können. Dieser Prozess wird **Moderation** genannt und geschieht durch elastische Streuung an Atomen eines Moderatormaterials. Aufgrund des hohen Streuquerschnitts, des relativ niedrigen Absorptionsquerschnitts und der geringen Kosten wird hierfür häufig Wasser benutzt. Ein weiterer Grund ist, dass Wasser bzw. der darin gebundene Wasserstoff dem Gewicht des Neutrons am nächsten kommt und deshalb die pro Stoß abgegebenen Energie maximal ist. Die erzeugten thermischen Neutronen können nun ein weiteres U-235 Atom spalten und damit die **Kettenreaktion** fortzusetzen.

Für die Leistungserzeugung im Reaktor sind also hauptsächlich die Neutronen verantwortlich. Die möglichen Interaktionen, die ein Neutron im Reaktor mit den Atomen des Reaktormaterials haben kann, ergeben sich auf der linken Seite von Abb. 3.1. Mit Streuung bezeichnet man die Stöße, die ein Neutron mit anderen Atomen ausführt. Es wird zwischen der elastischen und der inelastischen Streuung von Neutronen unterschieden. Letzteres bedeutet, dass Teile der kinetischen Energie der am Stoß beteiligten Partikel in andere Energieformen umgewandelt werden (z.B angeregter Energiezustand des Kerns). Unter dem Begriff Absorption versteht man allgemein die Aufnahme eines Neutrons in einen Atomkern. Im Anschluß an diesen Prozess kann entweder ein stabiler Kernzustand
gehalten werden und man spricht vom Neutroneneinfang oder der Kern wird dadurch instabil und es kommt zur Spaltung. Die Wahrscheinlichkeit dafür, dass ein Neutron an einem bestimmten Isotop eine der möglichen Interaktionen durchführt, wird in der Kerntechnik mit sogenannten Wirkungsquerschnitten quantifiziert. Dabei beschreibt der mikroskopische Wirkungsquerschnitt  $\sigma$  die Wahrscheinlichkeit der Interaktion in Abhängigkeit der kinetischen Energie E des beteiligten Neutrons.  $\sigma(E)$  ist eine Stoffeigenschaft des betreffenden Isotops und vom Zustand des Materials abhängig (z.B. Temperatur). Wird zusätzlich noch die Teilchendichte N [Teilchen/cm<sup>3</sup>] des Isotops in einem betrachteten Volumen berücksichtigt (z.B. U-235 Anreicherung im Brennstoffvolumen), dann spricht man vom makroskopischen Wirkungsquerschnitt  $\Sigma(E)$  mit

$$\Sigma(E) = N\sigma(E) \quad . \tag{3.1}$$

Demzufolge ist der makroskopische Wirkungsquerschnitt für eine Interaktion von der Teilchendichte, dem Zustand des Materials und von der Energie der Neutronen abhängig. Die Wahrscheinlichkeit für jede der beschriebenen Interaktionen wird dabei mit einem eigenen Wirkungsquerschnitt beschrieben. Eine Übersicht über die Querschnitte und Bezeichnungen gibt die Tabelle auf der rechten Seite von Abb. 3.1

Zur Kontrolle eines Kernreaktors ist wichtig, dass nicht zu viele Spaltneutronen zu einer erneuten Spaltung führen, da dies zu einer ansteigender Neutronenpopulation und Energieerzeugung im Kern führen würde. Im stationären Leistungsbetrieb eines Reaktors, soll idealerweise nur eines der Neutronen aus der vorhergehenden Neutronengeneration eine neue Spaltung auslösen. Als Maß für die Entwicklung der Neutronenpopulation über die Neutronengeneration wurde der Multiplikationsfaktor  $k_{eff}$  (oft auch als Kritikalität bezeichnet) eingeführt [5]

$$k_{eff} = \frac{\text{Neutronenerzeugung}}{\text{Neutronenverluste durch Leckage und Absorption}}$$
(3.2)

Es bedeutet:

- $k_{eff} = 1$  der Reaktor ist "kritisch", die Neutronenpopulation und damit die Leistung sind konstant
- $k_{eff} < 1$ der Reaktor ist "unterkritisch", Neutronenpopulation und Leistung gehen zurück
- $k_{eff} > 1$  der Reaktor ist "überkritisch", Neutronenpopulation und Leistung steigen an

Unter Leckage wird das Entweichen von Neutronen aus der Reaktorgeometrie verstanden. Somit stehen diese nicht zur Erzeugung weiterer Spaltungen zur Verfügung. Die Absorption bezeichnet wie schon erwähnt die Summe aus Neutroneneinfang und Spaltung. Zur Bestimmung von  $k_{eff}$  für einen homogenen, thermischen Reaktorkern kann die so genannte Vierfaktorenformel mit einem zusätzliche Faktor zur Berücksichtigung der Leckage verwendet werden.

$$k_{eff} = f \cdot \eta \cdot \varepsilon_S \cdot p \cdot P_{NL} \tag{3.3}$$

Dabei ist

- f die thermische Ausnutzung und beschreibt mit f < 1, dass ein Neutron im Brennstoff und nicht im Reaktormaterial absorbiert wird.  $f = \frac{\Sigma_{a,B}}{\Sigma_{a,B} + \Sigma_{a,M}}$
- $\eta$  der Regenerationsfaktor und beschreibt die Menge Spaltungen die aus in Brennstoff absorbierten Neutronen entstehen.
- $\varepsilon_S$  der Schnellspaltfaktor mit  $\varepsilon > 1$  und beziffert die schnellen Neutronen die durch Spaltung mit schnellen Neutronen hinzukommen
- p<br/> die Resonanzentkommwahrscheinlichkeit p < 1 und beziffert welcher Bruchteil der Neutron<br/>en der Resonanzabsorption entkommen
- $P_{NL}$  der Leckagefaktor und berücksichtigt die Neutronen die den Kern verlassen

Nachdem einige fundamentalen Zusammenhängen in Bereich der Neutronik erklärt wurden, soll nun ein genauerer Blick auf die eigentliche Kernberechung geworfen werden. Ziel der Kernberechnung ist, wie schon erwähnt die Bestimmung der räumlichen Verteilung der Wärmequellen im Reaktorkern. Diese Wärmequellen- bzw. Leistungsverteilung hängt dabei von vielen verschiedenen Faktoren wie Zusammensetzung, Dichte und Temperatur der Materialien im Kern ab.

Zur Beschreibung der Anzahl an Interaktionen (vgl. Abb. 3.1), die an der Stelle  $\vec{r} = (x_1, x_2, x_3)^T$  in einem Volumen pro Sekunde und cm<sup>3</sup> passieren, wird die Reaktionsrate  $R(\vec{r}, E, t)$  benutzt. Sie ist definiert als:

$$R(\vec{r}, E, t) = N \cdot \sigma(E) \cdot v \cdot \int_{\Omega} n(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) d\Omega = \Sigma(E) \cdot \Phi(\vec{r}, E, t) \quad . \tag{3.4}$$

Die Variable  $\Phi(\vec{r}, E, t)$  entspricht definitionsgemäß dem Weg den alle Neutronen im Volumenelement gemeinsam zurücklegen und hat die Einheit [Neutronen/scm<sup>2</sup>]. Verwendet man die Definitionen der Wirkungsquerschnitte aus Abb. 3.1, ergibt sich für die Wärmeentwicklung durch Spaltung:

$$q_f'''(\vec{r}, E, t) = \chi \cdot \Sigma_f(E) \cdot \Phi(\vec{r}, E, t) \quad . \tag{3.5}$$

### 3.1 Monte-Carlo Methode

Die Monte Carlo Methode wurde 1947 im Kontext des US amerikanischen Kernwaffenprogramms von verschiedenen Wissenschaftlern (S. Ulam, J. von Neumann, E. Fermi ua.) entwickelt. Ziel war schon damals die Berechnung von analytisch nicht lösbaren Neutronentransportproblemen. Der vorgeschlagene probabilistische Ansatz der Monte Carlo Methode grenzt sich dabei klar von den herkömmlichen Methoden ab, die meist auf der Lösung einer Neutronentransportgleichung basieren. Diese Klasse von deterministischen Codes stellen zur Zeit das Standardwerkzeug der neutronischen Kernberechnung dar und sind für die heutigen Reaktorkonzept weit entwickelt. Für zukünftige Reaktoren mit neuartige bzw. komplexeren BE-Konzepte sind deren Kapazität z.B. bezüglich der Geometriemodellierung nicht immer ausreichend und bedürfen zusätzliche Entwicklungsschritte. Gerade auch angesichts stark steigender Rechenkapazitäten stellt sich die Frage, ob alternative Techniken wie die Monte Carlo Methode mittlerweile zu bevorzugen sind. Entscheidender Parameter bei dieser Fragestellung ist der Zeitaufwand, der benötigt wird, um eine Kernberechnung durchzuführen. Dabei zählt nicht nur die Zeit, die für die reine Berechnung benötigt wird, sondern auch die notwendige Vorbereitungszeit. Um Für und Wider beider Lösungsmethoden gegeneinander abzuwägen müssen die Ansätze kurz erläutert werden.

### Deterministische Methoden

Die deterministischen Methoden basieren auf der Lösung der Neutronentransportgleichung (z.B. Diffusionscodes). Dabei muss diese Gleichung ähnlich wie bei der Strömungsmechanik diskretisiert werden. Während das bei der Strömungsmechanik im Raum  $x_i$ und die Zeit t geschieht, kommt bei der Neutronentransportgleichung mit dem Energieniveau E der Neutronen noch eine weitere Diskretisierung in  $n_q$  Energiegruppen hinzu. Bei der räumlichen Diskretisierung werden oft unterschiedliche Strukturen (z.B. Brennstäbe, Kühlmittel und Strukturelemente) innerhalb einer homogenisierten Berechnungszelle zusammengefasst. Damit soll eine zu feine Diskretisierung und übermäßiger numerischer Aufwand vermieden werden. Die Materialzusammensetzung innerhalb einer solchen Zelle wird also "verschmiert" und als homogen Mischung modelliert. Dadurch ergibt sich für diese Zelle ein gemeinsamer makroskopischer Wirkungsquerschnitt, welcher die neutronische Wirkung der gesamten Struktur und aller Materialien in der Zelle wiedergeben muss. Diese müssen für die eigentliche Kernberechnung als Datensatz zu Verfügung gestellt werden. In dieser vorbereitenden Tätigkeit, bestehend aus der Modellierung der homogenen Zellen und die Aufarbeitung der Wirkungsquerschnitte, steckt meist der Hauptzeitaufwand bei der Verwendung von deterministischen Codes. Dies wird am Beispiel des in Kap. 5.4 beschriebenen SDWR-BE deutlich. Für diese Geometrie würde eine sinnvolle räumliche Diskretisierung für eine Kernberechnung den gesamten Querschnitt eines BE inklusive Moderatorspalt umfassen. Dabei ergeben sich insgesamt 7 Variablen die relevanten Einfluss auf die homogenisierten Wirkungsquerschnitte nehmen. Dies sind Dichte und Temperatur des Wassers im Kasten, dem Spalt und den Kühlmittel sowie zusätzlich die Brennstofftemperatur. Will man die physikalischen Eigenschaften der homogenisierten Zelle richtig wiedergeben, muss jeder der Parameter in einer Anzahl von n Stützpunkten variiert und jeweils der Wirkungsquerschnitt bestimmt werden. Somit ergeben sich  $n^7$  Wirkungsquerschnitt-Berechnungen mit einer Rechenzeit von je 2-3 Minuten. Dies ist ein nicht zu unterschätzender Zeitaufwand. Großer Vorteil der Methode ist der geringe numerische Aufwand bei der Durchführung der eigentlichen Kernberechnung (einige 10 Minuten).

#### Monte-Carlo-Methode

Bei der Monte-Carlo-Methode wird nicht wie bei den deterministischen Methoden eine Transportgleichung für Neutronen gelöst, sondern es wird das Verhalten einzelner Neutronen in der Geometrie verfolgt. In dieser Arbeit wird dafür das Programm MCNP5 (Monte-Carlo N-Particle) [111] verwendet. Dabei wird die Lösung (z.B.  $k_{eff}$  für einen Reaktor) durch direkte Simulation der Vorgänge (Neutronenbewegung und -interaktionen) ermittelt. MCNP5 simuliert immer nur ein einzelnes Neutronen gleichzeitig und bestimmt dessen Interaktion mit der Materie (Spaltung, Streuung, Absorption etc.) durch Zufallsexperimente. Die Interaktionen, Zustände und Wege, die das Teilchen innerhalb der definierte Geometrie während seiner Lebenszeit geht, werden in einer so genannten "History" gespeichert. Durch Simulation einer repräsentativen Menge von Teilchen werden entsprechend viele Histories erzeugt, die dann als Datenbasis für verschieden statistische Auswertungen zur Bestimmung der gewünschten Werte (z.B.  $k_{eff}$ ) benutzt werden können. Die Genauigkeit der Aussagen hängt dadurch direkt von der Anzahl der gerechnet Teilchen ab. Im Vergleich zu deterministischen Codes benötigt MCNP keine extern aufbereitete, homogenisierte Wirkungsquerschnitte, da die Geometrie im vollen Detail abgebildet werden kann. Zusätzlich ist die Verwendung von Energiegruppen unnötig, da nur einzelnen Partikel berechnet werden deren kinetische Energie stets bekannt ist. Für jede der definierten Zellen muss neben den geometrischen Maßen auch Zusammensetzung, Temperatur und Dichte des Füllmaterials vorgegeben werden. Daraus kann in Kombination mit den gegebenen mikrosk. Wirkungsquerschnitten (JEF-2.2 [61]) bei Bedarf der makrosk. Wirkungsquerschnitte berechnet. Aufgrund der detaillierten Simulation benötigt MCNP5 ein relativ lange Rechenzeit um eine ausreichende Konvergenz der Statistik zu erzielen. Dem gegenüber steht die hohe Verlässlichkeit der Methode, da auf die Homogenisierung von Zellen verzichtet wird und zusätzlich keine Definition von Energiegruppen notwendig ist. Dadurch entfällt auch die lange Vorbereitungszeit zur Aufbereitung der homogenisierten Wirkungsquerschnitte. Die Geometrieerzeugung in MCNP5 kann durch Pre-Processing Programme vorgenommen werden, die mit einfachen CAD Programmen vergleichbar sind (z.B. Visual Editor - "VISED"). Zusätzlich befinden sich auch Programme in der Entwicklung, die gängige CAD Formate (z.B. von CATIA) interpretieren und in MCNP-konforme Eingabedatensätze umwandeln können (z.B. [96]). Angesichts der Vorteile der Monte Carlo Methode wird im Rahmen dieser Arbeit das Programm MCNP5 für die neutronischen Anaylsen des Kerns und der BE benutzt.

### 3.1.1 Lösungsalgorithmus

Zu Beginn jeder Monte Carlo Simulation muss zunächst die Startverteilung der Neutronen definiert werden. Dies kann entweder durch die Definition einer oder mehrerer Punkte im Brennstoff geschehen oder durch Verwendung einer Startlösung aus vorhergehenden Simulationen. Im verwendeten Kritikalitäts-Modus muss zusätzlich die Anzahl an Zyklen und die Menge an Neutronen pro Zyklus festgelegt werden. Die Gesamtanzahl an Zyklen ist in aktive und inaktive Zyklen unterteilt. Zu Beginn jeder Rechnung wird eine bestimmte Anzahl an inaktiven Zyklen gerechnet, um eine konvergente räumliche Verteilung der Spaltungen im Kern zu erreichen. Erst danach kommen die aktiven Zyklen, deren Ereignisse in die Statistik der Lösung mit einbezogen werden. Ist die Spaltung nicht konvergiert bevor die aktiven Zyklen beginnen, dann kann die statistische Ungenauigkeit der Ergebnisse weit größer sein als diese vom Programm angegeben werden. Die genaue Menge an inaktiven Zyklen die gerechnet werden muss, ist in erster Linie abhängig von der Qualität der angenommenen Startverteilung. Zur Kontrolle der Konvergenz der räumlichen Verteilung der Spaltungen existiert in neueren Versionen von MCNP5 (ab Version 1.4) eine Methode, welche die räumliche Umverteilung der Spaltungen innerhalb eines zuvor definierten und die gesamte Geometrie abdeckenden Netzes quantifiziert und bewertet [111].

Zu Beginn eines Zyklus wird das erste Neutron mit einer zufälligen Neutronenenergie in eine zufällige Richtung gestartet. Zu jedem Zeitpunkt t befindet sich das Neutron in einer bestimmten Zelle der Geometrie, für welche durch Kenntnis der mikroskopischen Wirkungsquerschnitte und der Teilchendichte die Wahrscheinlichkeit für die eine oder Interaktion des Neutrons mit dem Medium bekannt ist. Basierend auf im Programm erzeugte Zufallszahlen werden nun Wahrscheinlichkeitsexperimente durchgeführt, die ein bestimmtes Ereignis (z.B. Kernreaktion) an einer bestimmten Stelle in Flugrichtung des Partikels

Zufallszahlen werden nun Wahrscheinlichkeitsexperimente durchgeführt, die ein bestimmtes Ereignis (z.B. Kernreaktion) an einer bestimmten Stelle in Flugrichtung des Partikels zum Ergebnis haben können. Beispielsweise könnte das Neutron gestreut werden. Durch Stichproben innerhalb der physikalischen Streuquerschnitte werden dann Streuwinkel und Energieverlust des Neutrons ermittelt, und somit Flugrichtung und Zustand des Neutrons nach dem Stoß bestimmt. Anschließend kommt es z.B. zu einer Spaltung und der Weg des Neutrons ist beendet. Der Ort der Spaltung wird gespeichert und dient im nächsten Zyklus als Startpunkt für neue Neutronen. Durch die Spaltung wird eine stochastische Menge neuer Neutronen frei. Im verwendeten Kritikalitäts-Berechnungsmodus werden diese Neutronen nicht tatsächlich erzeugt und weiterverfolgt sondern nur die Anzahl an neuen Neutronen gespeichert. Alle Ereignisse die durch das Neutron verursacht werden, werden in einer so genannten "History" gespeichert. Im Folgenden werden nacheinander alle Neutronen eines Zyklus simuliert und für jedes eine History gespeichert. Alle Histories eines Zyklus bilden dann die Datengrundlage zur Bestimmung der Ergebnisse. Welche Werte durch das Programm bestimmt werden sollen, muss vor der Berechnung durch so genannten "Tallies" definiert werden. Ein Tally ist eine Art Zähler, der relevante Ereignisse innerhalb einer zuvor definierten Zelle oder auf einer Fläche registriert und speichert. Die in diese Arbeit verwendeten Tallies werden in den folgenden Kapiteln genauer beschrieben.

### 3.1.2 Ergebnisbestimmung in MCNP5

### Berechnung der Kritikalität $k_{eff}$

Die Kritikalität des berechneten Systems wird für jeden einzelnen Zyklus durch Auswertung des Ausdrucks

$$k_{eff} = \frac{\text{Spaltneutronen in Generation } i + 1}{\text{Spaltneutronen in Generation } i}$$
(3.6)

bestimmt. Das Endergebnis beruht auf einer statistischen Auswertung über aller ermittelten Histories. Die Ausgabe besteht aus dem Mittelwert von  $k_{eff}$  mit zugehöriger Standardabweichung sowie der 99%, 95% und 68 %-Vertrauensintervalle.

#### Berechnung des Neutronenflusses $\Phi$

Der Neutronenfluss  $\Phi(\vec{r}, E, t)$  entspricht definitionsgemäß dem von allen Neutronen im Volumenelement zurückgelegten Weg. In der MCNP-Rechnung wird zur Bestimmung dieses Wertes ein so genanntes "F4-Tally" verwendet. Es handelt sich dabei um einen Zähler, der die Weglänge  $T_l$  der gerechneten Neutronen innerhalb der Zelle addiert und mit dem Volumen V der Zelle normiert.

$$\Phi(\vec{r}, E) = \int_t \Phi(\vec{r}, E, t) = W \cdot \frac{T_l}{V}$$
(3.7)

Der Parameter W stellt eine Wichtungsfunktion dar, die im berechnet Fall bei allen Neutronen den Wert 1 hat. Nach Beendigung der Rechnung werden die Werte mit der Gesamtanzahl an gerechneten Histories normiert. Ergebnis des F4-Tallies ist also der volumengemittelte Fluss  $\Phi(\vec{r}, E)$  in [Neutronen/cm<sup>2</sup>] pro gestartetem Neutron.

### Berechnung der nuklearen volumetrischen Heizleistung $q_f'''$

Die Energie, die innerhalb einer Zelle durch die nukleare Reaktion entsteht, ist von primären Interesse bei der Kernberechnung. In MCNP wird die Heizleistung  $q_f$  in einer bestimmten Zelle in MeV/g ausgegeben:

$$q_f = W \cdot T_l \cdot \sigma_f \cdot H \cdot \frac{\rho_a}{m} \quad . \tag{3.8}$$

Dabei entsprechen  $T_l$  und W der Definition in Gl. 3.7,  $\sigma_f$  dem mikroskopischen Spaltquerschnitt, H der Energie pro Spaltung,  $\rho_a$  der Atomdichte in  $Teilchen/cm^3$  und m der Masse aller Zellen im Tally. Durch Division mit der Dichte  $\rho$  des Materials in der Zelle folgt:

$$q_f^{\prime\prime\prime} = \frac{q_f}{\rho} \quad . \tag{3.9}$$

Auch diese Werte werden mit der Gesamtanzahl an gerechneten Histories normiert.

### 3.1.3 Erweiterte Modelle in MCNP5

Obwohl mit dem Code MCNP5 ein weit entwickeltes Programm zur Berechnung von Neutronentransportproblemen zur Verfügung steht, sind noch nicht alle physikalischen Aspekte adäquat implementiert. Ein Beispiel ist, dass die mikroskopischen Wirkungsquerschnitte für ein bestimmtes Isotop zwar für eine kontinuierliche Neutronenenergie definiert sind, aber nur für eine einzige Materialtemperatur des Isotops gelten. Da es sich bei der gekoppelten Kernberechnung nicht um isothermes Problem handelt, treten alle Isotope in den unterschiedlichsten Temperaturen auf. Ein implementiertes Verfahren zur Berücksichtigung von Temperaturabhängigkeiten ist das so genannte "Free-Gas-Model". Es handelt sich dabei um ein Interpolationsverfahren was die Wirkungsquerschnitte in einer bestimmten Zelle entsprechen der Temperaturangabe im Eingabedatensatz extrapoliert. Diese Methode hat sich für viele Probleme als ausreichend genau erwiesen. Gerade aber bei der Berechnung von gekoppelten Reaktorsystemen ist die richtige Definition von temperaturabhängigen Wirkungsquerschnitte von großer Wichtigkeit, um die wichtigen physikalischen Eigenschaften des Systems richtig abzubilden [104]. Darunter fällt z.B. die Implementierung von temperaturabhängigen Absorptionsquerschnitte von U-238 sowie die Streuquerschnitte von thermischen Neutronen an molekular gebundenen Wasserstoff.

### Temperaturabhängige Absorptionsquerschnitte

Der Absorptionsquerschnitt von U-238 hat für sehr hohe und für relativ niedrige Neutronenenergie einen linearen Verlauf. Dazwischen liegt der Bereich der Resonanzabsorption in dem der Wirkungsquerschnitt großen Schwankungen unterliegt. Der Grund für dieses Verhalten liegt in der thermischen Eigenbewegung der U-238 Atome und wird Dopplereffekt genannt. Erhöht sich die Temperatur des Brennstoffs, verbreitern sich die Resonanzspitzen in diesem Bereich und führen zu einem Anstieg der Wahrscheinlichkeit von Resonanzabsorption. Die durch diesen Effekt eingefangenen Neutronen stehen natürlich nicht für die Spaltung zur Verfügung, weshalb die Kritikalität und die Leistungserzeugung im Reaktor zurück geht. Dies ist einer der Selbstregelungseffekte des Reaktors und muss in die neutronische Kernberechung durch Verwendung von temperaturabhängigen Wirkungsquerschnitten für das Brennstoffmaterial Uran-Oxid  $UO_2$  mit einbezogen werden. In der verwendeten JEF-2.2 Querschnittsbibliothek sind schon verschiedene Temperaturniveaus von 300 K, 500 K, 560 K, 760 K, 800 K, 1000 K, 1500 K, 2200 K enthalten. Durch gekoppelte Kernberechnungen ohne Temperatureffekt [102] wurde ermittelt, dass die zu erwartenden mittleren Brennstofftemperaturen in einem Bereich zwischen 500 K und 1500 K liegen. Unter Verwendung der von Bernnat et al. [7] vorgeschlagenen und validierten Mischungsmethode werden Wirkungsquerschnitte für Zwischentemperaturen erzeugt. Dabei wird das Material der Temperatur  $T_m$  entsprechend dem Hebelgesetz aus den verfügbaren Materialien der nächst höheren Temperatur  $T_h$  bzw. der nächst tieferen Temperatur  $T_t$  gemischt. Dies entspricht einer linearen Interpolation der Querschnittsdaten. Der Mischungsbruch X ist definiert als:

$$X = \frac{T_m - T_t}{T_h - T_t} \quad . \tag{3.10}$$

Es folgt für Konzentration des Materials mit der niedrigeren Temperatur  $C_t$  bzw. für die Konzentration des Materials mit der höheren Temperatur  $C_h$ :

$$C_h = X \cdot C_m \qquad \qquad C_t = (1 - X) \cdot C_m \quad . \tag{3.11}$$

Wobei  $C_m$  die Gesamtkonzentration des zu extrapolierenden Materials in der Materialkarte von MCNP5 ist. Unter Verwendung von Gl. 3.10, Gl. 3.11 und mit den vorhanden Daten aus der JEF-2.2 Bibliothek wurden Querschnitte zwischen 500 K und 1500 K in Schritten von 100 K für jede der verwendeten Anreicherungen definiert. Es ergeben sich bei 8 unterschiedlichen Anreicherungen insgesamt 80 unterschiedliche Brennstoffmaterialien. Dieses Vorgehen wurde entwickelt, um die Arbeitsspeicherbelastung, die durch die Extrapolation der Querschnitte auf die exakte Temperatur in jeder Brennstoffzelle entstanden wäre (4405 Brennstoffmaterialien) zu begrenzen. In der gekoppelten Version von STAFAS wird bei der Erstellung des Eingabedatensatzes von MCNP5 durch eine Abfrage die der tatsächlichen Brennstofftemperatur in der Zelle am nächsten liegende Materialzusammensetzung gewählt.

#### Streuung von thermischen Neutronen in Wasser

Die Neutronenstreuquerschnitte beschreiben den Streuvorgang von Neutronen verschiedener Energien mit den Atomen eines bestimmten Stoffes. Dieser Vorgang ist im Reaktor hauptsächlich bei der Moderation der Neutronen wichtig, bei dem schnelle Neutronen durch Stöße an Wasserstoff-Atomen Energie abgeben. Im Allgemeinen wird zur Berücksichtigung der Temperaturabhängigkeit der Streuung das so genannte "Free-Gas-Model" verwendet. Es handelt sich dabei um ein Interpolationsverfahren, was den Streuquerschnitte in einer bestimmten Zelle entsprechend der Temperaturangabe im Eingabedatensatz extrapoliert. Dabei wird angenommen, dass sich das Wasserstoffatom als freies Gas, d.h. ohne chemische Bindung und unbeeinflusst von Nachbaratomen in der Zelle befindet. Diese Methode hat sich für viele Bereiche, insbesondere bei hoher Neutronenenergie als ausreichend genau erwiesen [111]. Gerade aber im Fall der Streuung von thermischen Neutronen an Wasserstoffatomen ergibt sich durch die niedrige kinetische Energie der thermischen Neutronen eine Beeinflußung des Streuvorgangs durch die chemische Bindung der Wasserstoffatome an das Sauerstoffatom und die chemische Bindung der H<sub>2</sub>O-Moleküle untereinander. Diese Effekte werden durch die Verwendung spezieller  $S(\alpha, \beta)$ -Wirkungsquerschnitte berücksichtigt und bei Streuungen mit Neutronenenergie E < 4 eV angewendet. In MCNP sind relativ wenige  $S(\alpha, \beta)$ -Tabellen für wenige Temperaturen standardmäßig vorhanden. Die in dieser Arbeit verwendeten  $S(\alpha, \beta)$ -Wirkungsquerschnitte wurden von Bernnat und Conti [6] erstellt und berücksichtigen die unterschiedlichen Zustände von Wasser oberhalb (gasförmig) und unterhalb (flüssig) der pseudo-kritischen Temperatur (384°C bei 25 MPa). Um die Temperaturabhängigkeit korrekt zu berücksichtigen, wurden entsprechend den verfügbaren Temperaturen der  $S(\alpha, \beta)$ -Wirkungsquerschnitte (273 K - 648 K in 25 K Schritten sowie bei 653 K, 663 K, 683 K und 800 K) unterschiedliche Wassermaterialien nach Gl. 3.10 und Gl. 3.11 gemischt.

# 4 Konzept eines Druckwasserreaktors mit überkritischem Wasser

Zu den festgelegten Randbedingungen des Primärkreislaufs (Kernaustrittstemperatur (KAT) 380 °C und Druck 25 MPa) muss zunächst ein passendes Anlagenlayout entworfen werden. Aufgrund der relativ niedrigen KAT von 380 °C wird der SDWR analog zum DWR in einem Primär- und einem Sekundärkreislauf betrieben. Basierend auf dieser Vorgabe ergibt sich ein Kreisprozess gemäß des T-s-Diagramms in Abb. 4.1.



Abbildung 4.1: Vergleich des SDWR mit einem Referenz-DWR im T-s-Diagramm.

Darin ist zum einen der Primär- und Sekundärkreislauf des SDWR eingetragen und zusätzlich der Sekundärkreislauf einer Referenzanlage zu sehen. Die Referenz entspricht in den verfügbaren Daten einem "European Pressurized Water Reactor" EPR und damit dem zur Zeit modernsten Druckwasserreaktor. Die Aufheizung des Primärkühlmittels im Kern und ebenso die Abgabe der Wärme im Dampferzeuger des Primärkreislaufs in Abb. 4.1 ist aufgrund seines vergleichsweise isobaren Verlaufs vereinfacht als einzelne Linie auf einem Druckniveau von 25 MPa dargestellt.

Das Speisewasser im Sekundärkreislauf wird im Dampferzeuger durch das Primärkühlmittel bei einem Druck von 7,5 MPa von 230 °C auf eine Frischdampftemperatur von 370 °C aufgeheizt. Aufgrund des relativ hohen Temperaturniveaus des Primärkühlmittels ist also im Vergleich zur Referenz die Überhitzung des Dampfes im Dampferzeuger möglich. In der angeschlossenen Hochdruckturbine folgt eine Entspannung des Dampfs auf 20 bar. Im Gegensatz zur Referenzanlage ist aus thermodynamischer Sicht eine Entspannung in den 2-Phasenbereich nicht notwendig. Damit ergibt sich für das Layout der Anlage die Einsparung von Wasserabscheidern und Dampftrocknern nach der Hochdruckturbine (HD). Zudem sind Erosionsschäden an der Beschaufelung der HD-Turbine durch Tropfenschlag bei Betrieb im Naßdampfgebiet ausgeschlossen. Nach einer Zwischenüberhitzung auf 360 °C folgt dann die Entspannung in der Niederdruckturbine (ND) von 2,0 MPa auf das Kondensatorniveau von 0,005 MPa, einem Feuchtegehalt von 0,85 und einer verbleibenden Temperatur von 33 °C. Nach der Kondensation erfolgt der Rücklauf in den Dampferzeuger.

Der Wirkungsgrad des SDWR-Konzepts und der Referenzanlage kann aufgrund der gleichen Kondensatorbedingungen über die eingeschlossen Flächen im T-s-Diagramm verglichen werden. Dabei zeigt sich, dass besonders die Erhöhung der Frischdampftemperatur zu einer Steigerung des Wirkungsgrads geführt hat. Um diesen quantifizieren zu können, muss die Gesamtkonfiguration des Anlagenkonzepts definiert werden. Dies ist ein iterativer Prozess bei dem eine Kreislaufsimulations-Software (z.B. IPSEpro, [39]) benutzt wird und der hinsichtlich der Optimierung des Wirkungsgrades durchgeführt wird. Eine solche Analyse wurde für das SDWR Konzept durch Vogt et al. [103] durchgeführt und dokumentiert. Das dabei festgelegte Layout ist in Abb. 4.2 zu sehen.



Abbildung 4.2: Anlagenlayout des SDWR.

Der Primärkreislauf (links) besteht aus dem Reaktordruckbehälter (RDB) mit dem Kern, der Primärseite des Dampferzeugers (DE) und der Hauptkühlmittelpumpe (HKP). Die thermische Leistung des Kerns wurde ausgehend von einer spezifische Leistung pro Kernvolumen von ca. 100 MW/m<sup>3</sup> auf 2000 MWth festgelegt. Bei einer geplanten Aufheizung des Kühlmittels von 280 °C auf 380 °C resultiert das in einem Kühlmittelmassenstrom  $\dot{m}_{pri} = 2800$  kg/s. Unter der Abschätzung des Druckverlustes im Kern ( $\Delta p = 0, 30$ MPa) sowie im Dampferzeuger und den restlichen Komponenten des Primärkreislaufs  $(\Delta p = 0.35 \text{ MPa})$  ergibt sich die erforderlich Leistung der Hauptkühlmittelpumpen zu 3.8 MW. Im Sekundärkreislauf tritt das Kühlmittel mit einem Massenstrom von 966 kg/s, einer Temperatur von 230 °C und einem Druck von 7,5 MPa in den Dampferzeuger ein und mit einem Druck von 7,2 MPa und 370 °C wieder aus. Dabei findet im Dampferzeuger sowohl die Verdampfung als auch die Überhitzung statt. Aufgrund der Tatsache, dass Dampferzeuger in konventionellen DWR nur zur Erzeugung gesättigten Dampfes konzipiert sind, wird sich diese Komponente vom gängigen Design unterscheiden und eine nachgeschaltete Überhitzerstufe beinhalten. Im weiteren Verlauf wird der Dampfmassenstrom aufgeteilt und der größere Teil (87 %) in eine HD-Turbine geleitet und dort auf einen Druck von 2,0 MPa und 214 °C entspannt. Dabei wird auf drei Temperaturniveaus (280 °C, 253 °C und 214 °C) Dampf für die Vorwärmung des rückfließenden Speisewassers entnommen. Anschließend wird der Dampf in einen Zwischenüberhitzer (ZWU) geführt und dort von dem zuvor abgezweigten Frischdampf auf 360 °C überhitzt. Anschließend folgt eine Entspannung in der ND-Turbine auf einen Druck von 0,005 MPa und 33 °C. Dabei wird Dampf für vier weitere Vorwärmer abgezapft (290 °C, 209 °C, 116°C und 85 °C). Der Kondensator (K) seinerseits wird von 15 °C kaltem Wasser rückgekühlt, welches sich dadurch auf ca. 25°C aufheizt. Das wieder verflüssige Kühlwasser wird durch eine Kondensatpumpe (KP) über die zwei ersten Vorwärmer zur Hauptspeisewasserpumpe (HSP) transportiert. Dort erfolgt eine Erhöhung des Drucks von 0,16 MPa auf 78,5 MPa, wofür eine Pumpenleistung von ca. 13 MW benötigt wird. Anschließend wird das Speisewasser durch die restlichen Vorwärmerstufen zurück in den Dampferzeuger gefördert. Die Turbinen erzeugen am Generator (G) eine Leistung von 766 MWe

Bei der Simulation des Kreislaufs werden unterschiedliche Parameter wie Turbinenwirkungsgrade, Druckverluste etc. benötigt und können in dieser ersten Systemanalyse nur grob abgeschätzt werden. Zur Verifikation der eingestellten Werte wurden Vergleichsrechnungen durchgeführt und die Ergebnisse mit den Kreislaufdaten des EPR verglichen. Ausgehend von dem so eingeeichten System, wurden die notwendigen thermodynamischen Modifikationen auf der Primär- und Sekundärseite zur Simulation des SDWR durchgeführt. Einige Ergebnisse der Rechnung (Wirkungsgrad, Verhältnis von Generatorleistung zu Wassermassenstrom) sind in Abb. 4.3 zusammengefasst.

Im Vergleich zur Referenzanlage ergibt sich beim SDWR eine Steigerung des Wirkungsgrades um 2 Prozentpunkte von 35,5 % auf 37,5 %. Darüber hinaus ist eine Verbesserung des Verhältnisses aus elektrischer Generatorleistung  $P_G$  und Wassermassenstrom  $\dot{m}_{pri}$ bzw.  $\dot{m}_{sek}$  auf der Primär- bzw. Sekundärseite feststellbar. Insbesondere auf der Primärseite ergibt sich eine starke Erhöhung des Verhältnisses um den Faktor 4. Das bedeutet eine Verkleinerung aller Strömungsquerschnitte und Anlagenkomponenten und damit allein schon aufgrund der eingesparten Materialmenge (z.B. Stahl) einen positiven Effekt auf die Investitionskosten. Aufgrund der Druckerhöhung im Primärkreislauf von 15,5 MPa auf überkritische 25 MPa ergibt sich im Gegenzug allerdings ein Verteuerung der Anlage, dadurch dass alle Komponenten des Primärkreislaufes größeren Belastungen standhalten müssen. Eine Gegenüberstellung der beiden Effekte am Beispiel eines beliebigen Rohres im Primärkreislauf ergibt bei der erwähnte Verringerung des Massenstroms um den Faktor 4 und einer Druckerhöhung von 15,5 auf 25 MPa eine effektive Materialeinsparung von ca 58 %. Ausgenommen von dieser Entwicklung ist der RDB, da dessen Größe sich nicht aus der Durchflussmenge des Kühlmittels, sondern aus der thermischen Leistungsdichte des Reaktorkerns ergibt. Weil der SDWR mit einer ähnlichen Leistungsdichte wie konventionelle DWR konzipiert wurde, ist aufgrund des höheren Drucks von einer Vergrößerung des RDB auszugehen.



Abbildung 4.3: Vergleich charakteristischer Daten zwischen SDWR und dem Referenz-DWR.

Die durchgeführte Systemanalyse offenbart unterschiedliche Vorteile des SDWR-Konzepts im Vergleich zu konventionellen Anlagen. Diese lauten zusammengefasst:

- Einsparung von Anlagenkomponenten zur Dampftrocknung durch Ausnutzung des hohen Temperaturniveaus des Frischdampfes im Sekundärkreislauf.
- Verringerung der Betriebskosten durch die Erhöhung des thermischen Wirkungsgrades. Dies spart Brennstoff und reduziert die Menge des radioaktiven Abfalls, der teuer gelagert werden muss.
- Die Verringerung des primärseitigen Massenstroms bringt trotz Druckerhöhung eine Materialeinsparung von 58% bei den primärseitigen Komponeneten (exkl. RDB).

• Zusätzlich bietet die Reduzierung des Massenstroms auf der Sekundärseite weitere Möglichkeiten zur Kostensenkung durch Verkleinerung der dortigen Anlagenkomponenten.

Eine Zusammenfassung der festgelegten thermodynamischen Daten, die als Randbedingung für weiter Analysen dienen, sind in Tabelle 4.1 zu finden.

SDWR Allgemein		
Leistung thermisch	2000	MWth
Leistung elektrisch	766	MWe
Leistung Eigenbedarf	17	MWe
Leistung netto	749	MWe
Wirkungsgrad	$37,\!5$	%
Leistung/Massenstrom (pri)	$0,\!2762$	$\mathrm{MWe}/(\mathrm{kg/s})$
Leistung/Massenstrom (sek)	0,7924	$\mathrm{MWe}/(\mathrm{kg/s})$
SDWR Primärseite		
Druck	$25,\! 0$	MPa
Massenstrom	2800	$\rm kg/s$
Temperatur RDB-Eintritt	280,0	°C
Temperatur Kernaustritt	$380,\!0$	°C
Druckverlust	$0,\!65$	MPa
Leistung 4 Kühlmittelpumpen	$^{3,8}$	MWe
SDWR Sekundärseite		
Druck Dampferzeuger	$^{7,5}$	MPa
Druck Turbineneintritt	7,2	MPa
Druck Zwischenüberhitzer	$^{2,0}$	MPa
Druck Kondensator	$0,\!005$	MPa
Massenstrom	966,7	m kg/S
Temperatur Turbineneintritt	$370,\!0$	°C
Temperatur Kondensatoreintritt	$32,\!9$	°C
Leistung der Pumpen	$13,\!2$	MWe
Anzahl der Vorwärmer	7	-
Feuchtegrad Austritt HD	$1,\!00$	-
Feuchtegrad Austritt ND	$0,\!85$	-

Tabelle 4.1: Übersicht wichtiger Eckdaten des SDWR-Konzepts.

# 5 Gekoppelte Kernberechnung

# 5.1 Kerndesign und RDB-Konzept

Nach Festlegung des grundlegenden Anlagenkonzepts in Kap. 4 sind die Randbedingungen für eine genauere Analyse des SDWR-Reaktorkerns definiert. Dazu muss zunächst einmal die Geometrie des Kerns und dessen Einbau in den RDB vorgestellt werden. Das hierfür von Fischer et al. [22] konzipierte RDB-Konzept ist in Abb. 5.1 zu sehen.



Abbildung 5.1: RDB-Konzept mit Kerneinbauten nach Fischer et al. [22].

Das Kühlmittel strömt im oberen Bereich des RDB ein und spaltet sich zunächst in zwei Teilströmungen auf. Der größere Anteil von 75% wird durch den Ringspalt an der Innenseite des RDB in das untere Mischplenum geleitet. Der restliche Teil von 25% wird als Moderatorwasser in Moderatorkästen (8,3%) und -spalten (16,7%) verwendet und muss dem Kern von oben zugeführt werden. Dafür fließt es zunächst durch das obere Plenum und durchströmt anschließend das Dampfplenum durch By-Pass Rohre. Aufgeteilt auf Moderatorkästen und -spalt strömt das Wasser abwärts durch den Kern und trifft im unteren Mischplenum auf das Ringspaltwasser. Nachdem sich dort alle Massenströme vermischt haben, strömen sie als Kühlmittel durch die BE und erhitzen sich dabei. Im sogenannten Dampfplenum wird das austretende heiße Kühlwasser gesammelt und einem der 4 Dampferzeuger zugeführt.



Abbildung 5.2: Skizzen des Brennelements, des Brennelement-Bündels und der Kernkonfiguration.

Der Aufbau des Kerns ist in Abb. 5.2 skizziert. Wie schon in Kap 1.2 erwähnt wird das im Querschnitt abgebildete BE-Design von [32] verwendet (Abb.5.2 links bzw. Abb. 1.4). Es besteht aus 40 Brennstäben mit einem Durchmesser von d = 8,0 mm, die im Abstand von p = 9,2 mm um den Moderatorkasten angeordnet sind und von einem BE-Kasten umschlossen werden. Die genauen geometrischen Abmaße sind im Anhang dieser Arbeit in Abb. A.2 zu finden. Aus Gründen der verbesserten Handhabung wurden die relativ kleinen BE (Kantenlänge inkl. Spalt 77,2 mm) zu BE-Bündeln verbunden (Abb. 5.2 Mitte). Dabei umfasst jedes BE-Bündel  $3 \times 3$  BE die im Abstand von 10 mm quadratisch angeordnet sind. Wie schon eingangs erwähnt, strömt im Spalt zwischen den BE genau wie im Moderatorkasten Wasser abwärts durch den Kern. Der gesamte Kern ist auf der rechten Seite von Abb. 5.2 zu sehen und besteht aus insgesamt 88 BE-Bündeln (792 BE) die in einem nahezu zylindrischen Kern angeordnet sind. Um den Kern herum befindet sich ein Stahlreflektor, der den Spaltraum in radialer Richtung begrenzt und zur Reduzierung der Neutronenleckage beiträgt, sowie der sogenannte Kernbehälter, der zur Fixierung des Reaktorkerns im RDB dient (vgl. Abb. 5.1). Das BE-Design ober- bzw. unterhalb der aktiven Zone ist in Abb. 5.3 links und rechts zu sehen und wurde ebenfalls von [32] konzipiert. Die BE-Bündel haben unten ein gemeinsames trichterförmiges Fußstück auf dem die BE des Bündels fixiert sind und welches in die Kerntrageplatte eingesetzt wird. Am kreisförmigen Eintritt des Fußstücks befinden sich Einlassblenden, die zur Einstellung des Kühlmittelmassenstroms für das BE-Bündel dient. Somit haben alle 9 BE eines Bündels jeweils eine gemeinsame Einlassblende. Der Bereich oberhalb der aktiven Zone ist in Abb. 5.3 links zu sehen. Das sogenannte Kopfstück sorgt einerseits für die Zuführung des Moderatorwassers auf die Moderatorkästen, sammelt zusätzlich das aus den 9 BE austretende Kühlmittel und gibt es durch die seitlich gerichteten Auslassfenster in das Dampfplenum ab. Der obere Teil des Kopfstücks reicht zu diesem Zweck durch das Dampfplenum hindurch und dichtet mit dessen oberer und unterer Platte ab.



Abbildung 5.3: Design des oberen und unteren Bereichs des BE [33].

## 5.2 MCNP5 Modell des Kerns

Zweck der MCNP5 Rechnungen ist die Bestimmung der Leistungsverteilung im Kern aufgrund der nuklearen Spaltung im Brennstoff. Dabei wird wie in Kap. 3 beschrieben das "Leben" einzelner Neutronen im Kern simuliert, weshalb im Wesentlichen der aktive Teil des Kerns mit den UO<sub>2</sub> Brennstoff modelliert werden muss. Zusätzlich sollte zur richtigen Berücksichtigung der Leckage von Neutronen die Peripherie des Kerns ebenfalls mit abgebildet werden. Der relevante Teil umfasst in radiale Richtung den Stahlreflektor, den Kernbehälter und den Ringspalt bis zur Innenwand des RDB (vgl. Abb. 5.4). Oberhalb der aktiven Zone wurde der untere Bereich des Kopfstücks (oberer Reflektor) und das Dampfplenum berücksichtigt. Dabei wird aufgrund der komplizierten Struktur kein geometrisch detailliertes Modell erzeugt, sondern stattdessen eine homogen Materialmischung entsprechend der Massenanteile der Materialien (Metall, Kühlmittel, Moderatorwasser) in diesem Bereich gebildet. Analog dazu wird mit dem Bereich unterhalb der aktiven Zone verfahren. Dort umfasst der homogenisierte Teil das Fußstück und die Kerntrageplatte. Um Rechenzeit zu sparen, wird die Symmetrie der Kernanordnung ausgenutzt und 1/8-Ausschnitt berechnet. Ein axialer und radialer Schnitt durch das Modell ist in Abb. 5.4 zu sehen. Die im Kern erzeugte Leistungsverteilung wird maßgeblich von der Brennstoffanreicherung (U-235) der einzelnen BE-Bündel bestimmt. Damit eine möglichst homogene Aufheizung des Kühlmittels erreicht werden kann, muss diese Leistungsverteilung ebenfalls möglichst gleichmäßig sein. In heutigen DWR wird das erreicht, indem BE unterschiedlichen Abbrands (d.h. unterschiedlicher Anreicherung) entsprechend im Kern angeordnet werden. Im Rahmen der vorliegenden Untersuchung ist dieses Vorgehen nicht möglich, so dass die Anreicherung in verschiedenen Zonen vorgegeben werden muss. Die vorgegebenen Verteilung ist ebenfalls in Abb. 5.4 zu sehen und umfasst 4 Zonen mit ansteigender Anreicherung (U-235 in Massen-% 3,75 - 4,0 - 4,25 - 5,5) vom Kernmittelpunkt nach aussen. Diese Werte wurde durch Vergleich der resultierenden Leistungsprofile aus verschiedenen Anreicherungsverteilungen mit dem eines heutigen DWR optimiert.



Abbildung 5.4: Querschnitt (oben links) und Axialschnitt (rechts) des Kerns. Skalierte Rechenzelle der gekoppelten Rechnung (unten links).

Zur Ermittlung der lokalen Leistung im Kern, muss der aktive Bereich des Kerns in Zellen unterteilt werden. Im vorliegenden Kernmodell umfasst jede Zelle den Querschnitt eines einzelnen BE (7,72 cm x 7,72 cm) auf einer Höhe von 20 cm (Abb. 5.4 unten links). Somit besteht das Modell des 1/8-Kern aus insgesamt 2205 Zellen, die sich auf 21 axiale Schichten verteilen. Die BE werden in vollem geometrischen Detail (inkl. Wandstärken, Verrundungen, Heliumspalt etc.) abgebildet. Innerhalb jeder Berechnungszelle befinden sich 40 Brennstabstücke von je 20 cm Länge. Basierend auf den Untersuchungen von Waata et al. [106] haben die Eckbrennstäbe eine um 1% reduzierte Anreicherung. Dies dient der Vergleichmäßigung der Kühlmittelaufheizung im BE. Die Leistung aller 40 Stäbe wird während der MCNP5 Rechnung kumulativ erfasst. Das bedeutet, dass die Leistungserzeugung innerhalb dieser Zelle als homogen angenommen. Darunter fallen die Dichte und Temperatur des Moderators im Kasten, Dichte und Temperatur des Kühlmittels zwischen den Stäben und die Temperatur des Brennstoffs. Der Zustand des Wassers im Spalt wird innerhalb der gesamten axialen Zellschicht als homogen angenommen.

Eine detailliertere räumliche Auflösung der Leistung ist mit MCNP5 aufgrund der dazu benötigten großen Rechenleistung nicht möglich. Der Grund liegt in der Funktionsweise des Programms (vgl. Kap. 3.1) und kann an einem Beispiel verdeutlicht werden. Würde eine Tally (d.h. Zähler) beispielsweise auf alle Brennstäbe im Kern gemeinsam gelegt werden, wäre die Wahrscheinlichkeit hoch, dass ein Neutron ein zählbares Ereignis (z.B. Spaltung) innerhalb dieses Volumens auslöst. Dementsprechend finden pro (mit einer festen Anzahl an Partikeln) simuliertem Zyklus viele Ereignisse statt, und es folgt eine schnelle statistische Konvergenz des Tallys. Wenn nun das Tally nur auf ein kleines Stück eines einzelnen Brennstabs in der Kerngeometrie gelegt werden würde, dann wäre die Wahrscheinlichkeit für ein zählbares Ereignis viel kleiner und es müsste für eine vergleichbare statistische Sicherheit des Ergebnisses eine viel größere Anzahl von Zyklen gerechnet werden. Man spricht in diesem Zusammenhang auch häufig von schwieriger lokaler Konvergenz des Problems.

Zur Ermittlung der Leistungsverteilung wird das in Kap. 3.1 beschriebene F6-Tally verwendet. Das Ergebnis wird als lokaler Skalierungsfaktor  $F_i$  für die festgelegte thermische Leistung des Kerns von  $P_{tot} = 2000$  MW verwendet. Damit berechnet sich die lokale Leistung  $P_i$  der Zelle *i* durch:

$$P_i = \frac{F_i}{\sum F_i} \cdot P_{tot} \quad . \tag{5.1}$$

### 5.3 STAFAS Modell des Kerns

Die mit MCNP5 berechnete Leistung dient zur Bestimmung der Aufheizung des Wasserinventars im Kern. Das Modell, das zur Berechnung dieser Daten entwickelt wurde, soll anhand der Skizze in Abb. 5.5 erläutert werden.

Die BE werden entsprechend des in Kap. 2.2.1 gezeigten Unterkanalansatzes zu 105 eindimensionalen Strömungskanälen vereinfacht und analog zum MCNP5-Modell in 21 axiale Schichten unterteilt. Da die Kühlmittelkanäle durch die BE-Kästen voneinander getrennt sind, haben sie keinen gerichteten oder turbulenten Stoffaustausch untereinander. Erreicht wird dies in STAFAS, indem der Querdruckverlustkoeffizient  $C_{jk}$  in der Unterkanalgleichung Gl. 2.72 sehr hoch ( $C_{jk} = 10^{15}$ ) und der turbulente Austauschkoeffizient in Gl. 2.86 auf  $\beta = 0,0$  gesetzt wird.

Aufgrund der gleichen räumlichen Diskretisierung der Modelle in MCNP5 und STAFAS, kann die Leistung aus der Kernberechnung den einzelnen BE in der richtigen axialen Koordinate direkt zugeordnet werden. Zusätzlich umfasst das thermohydraulische Modell jeweils eine Zellschicht ober- und unterhalb des aktiven Teils. Hier werden die Einund Auslassverluste der Strömung berechnet. Am Eintritt der BE-Kanäle fällt zudem ein Druckverlust an der Einlassblende ab, der zur Regelung der Massenstromverteilung benutzt wird (vgl. Kap. 5.4).



Abbildung 5.5: Schematische Darstellung des entwickelten thermohydraulischen Kernmodells in STAFAS für eine beliebige Anzahl von i BE.

Die Kühlmittelströmung in den Kanälen ist thermisch mit den Moderatorkästen bzw. dem Spalt verbunden und tauscht mit diesen in beide Richtungen Wärme aus. Das Kernmodell beinhaltet insgesamt 105 Moderatorkästen, die je mit einem BE thermisch verbunden sind. Das gesamte Strömungsgebiet im Spalt wird wie bereits erwähnt als ideal durchmischt betrachtet und deshalb durch einen einzigen Kanal berücksichtigt, der mit allen BE gekoppelt ist. Eine Verifikation dieser Annahme wird in Kap. 7 durchgeführt. Für die Berechnung des Wärmeübergangs wird die in Kap. 2.2.3 beschriebene Bishop-Korrelation verwendet. Die Wärme die von den BE-Kanälen in den Spalt bzw. Kasten transportiert wird, beeinflusst über die Vermischung von Moderatorwasser und Ringspaltwasser im unteren Mischplenum die Eintrittsbedingungen des Kühlwassers in die BE-Kanäle. Dies führt zu einem gekoppelten System, dessen Lösung iterativ ermittelt werden muss. Der dazu in STAFAS implementierte Lösungsalgorithmus wurde bereits in Kap. 2.2.4 erläutert.

# 5.4 Kopplung

Bis jetzt wurden jeweils das Modell zur getrennten Berechnung der thermohydraulischen und neutronischen Größen im Kern beschrieben. In diesem Kapitel soll die Kopplung dieser beiden bisher als unabhängig behandelten Bereiche erläutert werden. Die starke Kopplung der Thermohydraulik mit der Neutronik im Kern des Reaktor resultiert aus verschiedenen physikalischen Zusammenhängen:

- 1. Die **Brennstofftemperatur** und damit der Dopplereffekt ist abhängig von der lokal erzeugten Leistung und der Kühlung der Brennstäbe.
- 2. Die **Moderation** der Neutronen und damit die Produktion der thermischen Neutronen, die zu weiteren Spaltungen führen können, ist von Dichte und Temperatur des Wassers im Kern abhängig.

Aus diesen Abhängigkeiten ergibt sich ein Kopplungsschema, wie es in Abb. 5.6 zu sehen ist. Als Startbedingung für die gekoppelten Rechnungen wird eine sinusförmige axiale Leistungsverteilung innerhalb der BE vorgegeben. Durch Verwendung von STAFAS im



Abbildung 5.6: Schema für gekoppelte MCNP5/STAFAS Rechnungen des SDWR Reaktorkerns.

Kanalmodus wird damit die Aufheizung des Kühlmittels und des Moderators in Spalt und Kasten sowie die Temperatur des Brennstoffs berechnet. Als Randbedingung dient dabei unter anderem die Verteilung der Einlassblenden an den BE-Bündeln. Diese beeinflussen über den verursachten Druckverlust die Verteilung des Kühlmittelmassenstroms auf die einzelnen BE. Das Hauptkriterium zur Auslegung dieser Blenden ist die Forderung nach einer möglichst homogenen Verteilung der Kühlmitteltemperatur am Austritt aus den BE zur optimalen Ausnutzung der verfügbaren Sicherheitsmargen des Reaktors (d.h. möglichst geringe Heißkanalfaktoren). Der Zielwert der Austrittstemperatur  $T_a$  soll laut den Auslegungskriterien im Mittel 380°C betragen. Es gilt für  $T_a$  bzw. für die Enthalpieerhöhung  $\Delta h$  im BE

$$\Delta h = h_a - h_e = \frac{Q_{zu}}{\dot{m}} = konstant \quad . \tag{5.2}$$

Da angenommen wird, dass alle BE die gleiche Eintrittstemperatur  $T_e$  bzw. Enthalpie  $h_e$ haben, muss als Auslegungskriterium  $\Delta h$  für alle BE möglichst gleich sein. Aus Gl. 5.2 ist ersichtlich, dass dies erreicht werden kann, indem der Kühlmittelmassenstrom  $\dot{m}$  an die im BE effektiv zugeführte Wärme  $Q_{zu}$  angepasst wird. Aufgrund der Kopplung der beiden Effekte kann auch dies nur iterativ gelöst werden. Zu Bestimmung einer Startverteilung der Blendenkoeffizienten  $C_{bl}$  (vgl. Gl. 2.95) kann jedoch eine Abschätzung hergeleitet werden. Diese basiert auf der Tatsache, dass in allen BE der gleiche Druckabfall  $\Delta p_{tot}$  zwischen Mischplenum und Dampfplenum stattfinden muss.  $\Delta p_{tot}$  ergibt sich durch Aufschlüsselung in Einzeldruckverluste

$$\Delta p_{tot} = \Delta p_e + \Delta p_a + \Delta p_{int} + \Delta p_{bl} \quad . \tag{5.3}$$

Dabei ist  $\Delta p_e$  bzw.  $\Delta p_a$  (vgl. Gl. 2.92 bzw. Gl. 2.93) der Druckverlust der sich durch den Eintritt bzw. durch den Austritt der Strömung aus dem Stabgitter ergibt, und  $\Delta p_{int}$ der Druckverlust innerhalb des BE (Reibung Gl. 2.2.3 und Abstandshalter Gl. 2.94). Der Druckverlust  $\Delta p_{bl}$  ergibt sich an der Einlassblende. Drückt man die Einzeldruckverluste durch einen quadratischen Ansatz mit Verlustkoeffizienten aus ergibt sich:

$$\Delta p_{tot} = (C_e + C_a + C_{int} + C_{bl}) \frac{\dot{m}^2}{2\rho A^2} .$$
 (5.4)

Unter der Annahme, dass der durch die Blende erzeugte Druckverlust dominant ist, können die anderen Komponenten vernachlässigt werden. Unter Verwendung der Bedingung  $\Delta p_{tot} =$  konstant folgt für das Verhältnis der Blendenkoeffizienten von BE *i* und *k*:

$$\frac{C_{k,bl}}{C_{i,bl}} = \frac{\dot{m}_i^2}{\dot{m}_k^2} = \frac{Q_{i,zu}^2}{\dot{Q}_{k,zu}^2} .$$
(5.5)

Mit Beziehung 5.5 kann unter Definition einer Referenzblende eine Startverteilung für die Blendenkoeffizienten  $C_{bl}$  gefunden werden. Normalerweise ist dieser Wert das Ergebnis einer ausführlichen Stabilitätsanalyse des Systems, die für das SDWR-Konzept noch nicht durchgeführt wurde. Generell ist diese Thematik für Reaktorsysteme mit überkritischem Wasser noch Gegenstand der Forschung. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde eine Referenzblende mit einem Blendenkoeffizienten von  $C_{bl} = 50$  für das BE-Bündel in der Mitte des Kern angenommen.

Nach erfolgreicher Berechnung der Thermohydraulik im Kern, wird im nächsten Schritt des Kopplungsschemas in Abb. 5.6 zur Stabilisierung der Lösung ein Dämpfungsfaktor RF eingeführt [106]. Dabei wird die Lösung einer beliebigen Variablen B berechnet aus

$$B = RF \cdot B_{neu} + (1 - RF) \cdot B_{alt} \quad . \tag{5.6}$$

 $B_{neu}$  ist die im aktuellen Programmdurchlauf *i* berechnete Lösung,  $B_{alt}$  die alte Lösung aus dem vorherigen Kopplungsschritt *i* – 1 und *RF* der Relaxationsfaktor bzw. Dämpfungsfaktor. Mit zunehmender Konvergenz der gekoppelten Lösung nähert sich *B* an  $B_{neu}$ und  $B_{alt}$  an, so dass der Faktor keine Relevanz mehr hat. In dieser Untersuchung wurde ein Faktor RF = 0, 2 auf folgende Variablen des gekoppelten Systems angewendet:

- Dichte und Temperatur des Kühlmittels
- Dichte und Temperatur des Moderators im Spalt und in den Kästen
- Temperatur des Brennstoffs.

Mit den neuen Werten für die Kopplungsvariablen wird im folgenden Kopplungsschritt i + 1 erneut die Leistungsverteilung mit MCNP5 berechnet. Dazu wird neben den Daten für Geometrie und Material unter anderem die Gesamtleistung aller Brennstoffzonen benötigt, um mit Gl. 5.1 die lokale Zonenleistung bestimmen zu können.

# 5.5 Ergebnisse der gekoppelten Rechnung

### Untersuchung der Konvergenz

Die Konvergenz der Kopplung wird über die Analyse der axialen Leistungsverteilung bewertet, da sich so zum einen die statistische Genauigkeit der MCNP5-Lösung gut bewerten lässt und diese zum anderen auch sensibel auf Schwankungen in der Kopplung reagiert. Die axiale Leistungsverteilung des mittleren BE-Bündels im Kern ist in Abb. 5.7 für die gerechneten 13 Iteration abgebildet. Dazu passend ist in Abb. 5.8 die Kühlmitteltemperatur sowie in Abb. 5.9 die mittlere Brennstofftemperatur in der Mitte der Pellets im Bündel aufgetragen. Der Ubersichtlichkeit halber wurden die Leistungsprofile, die Kühlmitteltemperatur und die Brennstofftemperatur auf zwei Diagramme verteilt. Das erste Diagramm auf der linken Seite von Abb. 5.7 zeigt die Leistungsverteilung für die ersten Schritte der Kopplung und man sieht im Wesentlichen das Einschwingen von der Startlösung auf das stationäre Leistungsprofil des Bündels. Als Startlösung für die Kopplung wird ein kalter Reaktor mit 280 °C Wassertemperatur und 560 K Brennstofftemperatur gerechnet. Dabei wird in MCNP5 allen Kopplungsschritten eine Gesamtanzahl von 10000 Neutronen pro Zyklus und eine Gesamtzahl von 7000 Zyklen gerechnet. Zur Konvergenz der Neutronenstartverteilung in der gerechneten Geometrie, werden jeweils die ersten 1000 Zyklen verworfen und nur die letzten 6000 Zyklen zur statistischen Auswertung verwendet. Dadurch ergibt sich für die statistische Auswertung eine Anzahl von 60 Mio. Histories.

Die sich aus der Rechnung ergebende erste Leistungsverteilung "Iteration 0" beschreibt eine Sinusfunktion und wird zu Berechnung der Thermohydraulik "Iteration 0" verwendet. Nach Durchführung des nächsten MCNP5 Rechnung, ergibt sich die neue Leistungsverteilung "Iteration 1". Diese zeigt einen ausgeprägten Überschwinger der Leistung im unteren Bereich des Kerns, der sich aus dem Zusammenspiel von Brennstofftemperatur, Dichteverteilung und Leistung erklären lässt. Ein Grund liegt in der Aufheizung des Kühlmittels und der damit geringeren Dichte und Moderationsfähigkeit im oberen Bereich des Kerns ("Iteration 0" in Abb. 5.8). Somit findet eine Umverteilung der Leistung vom oberen in den unteren Kernbereich statt. Zusätzlich wird durch die Anwendung der Normierung Gl.5.1 die Leistung des Kerns konstant gehalten und dadurch die natürlich Reaktion des Kerns (Leistungsverminderung im oberen Kernbereich und annähernd gleich bleibende Leistung im unteren Kernbereich) verhindert. Ein weiterer Effekt resultiert aus der Tatsache, dass die Temperaturverteilung des Brennstoffs (vgl. "Iteration 0", Abb. ) noch aus der vorhergehenden STAFAS-Rechnung (mit sinusförmigen Leistungsprofil) stammt und dementsprechend die Brennstofftemperatur im unteren Kernbereich relativ niedrig ist. Dadurch dämpft der Brennstofftemperatureffekt (Doppler-Effekt bzw. Resonanzverbreiterung des Absorptionsquerschnitts von U-238) bei der Berechnung der Leistungsverteilung von "Iteration 1" das Leistungsprofil an dieser Stelle nicht. Somit ist das berechnete Leistungsprofil in "Iteration 1" zwar streng genommen physikalisch korrekt, würde sich in einem realen Reaktor aber so niemals einstellen, da der Doppler-Effekt unmittelbar an die Brennstofftemperatur bzw. die Leistung gekoppelt ist. Umgekehrtes spielt sich bei der Berechnung von "Iteration 2" ab. Hier zeigt die Leistung einen Unterschwinger unter das erwartete stationäre Profil, weil die Brennstofftemperatur sehr hohe Werte angenommen hat und somit der Brennstofftemperatureffekt übermäßig



Abbildung 5.7: Normierte Bündelleistung - Iterationen 0-5 (links) und Iterationen 6-12; (rechts).



Abbildung 5.8: Kühlmitteltemperatur - Iterationen 0-5 (links); Iterationen 6-12; (rechts).



Abbildung 5.9: Brennstofftemperatur (Pelletachse). Iterationen 0-5 (links); Iterationen 6-12; (rechts).

zum Tragen kommt. Dies bewirkt trotz der niedrigen Dichte im oberen und mittleren Kernbereich eine Umverteilung der Leistung nach oben im Kern. In den nachfolgenden Iterationen schwingt sich diese Zusammenspiel weiter ein, bis nach ca. 6 Iterationen (It. 0 - It. 5) ein annähernd stationärer Zustand erreicht ist.

Die weitere Entwicklung der Leistungsverteilung ist in Abb. 5.7 rechts zu sehen. Es wird deutlich, dass die Leistung keinen eindeutigen Zustand erreicht, sondern um einen Mittelwert schwankt. Der Grund für diese Verhalten ist die lokale statistische Ungenauigkeit in MCNP5 die trotz globaler Konvergenz des axialen Leistungsprofils in einzelnen Kernbereichen größere Abweichungen zeigt. Dieser Effekt tritt auf, obwohl die von MCNP5 berechneten statistischen Fehler im Mittel bei 0,76% liegen und im ungünstigsten Fall einen Wert von 2,5% aufweist. Diese Fehler sind sehr viel kleiner als die tatsächlichen Unterschiede in den Leistungsverteilungen auf der rechten Seite von Abb. 5.7. Der Grund hierfür ist, dass MCNP5 jeden der gerechneten Zyklen als statistisch unabhängig betrachtet, obwohl diese über die Benutzung der Spaltorte des vorhergehenden Zyklus als Startpunkte für Partikel des nächsten Zyklus voneinander abhängig sind. Dadurch findet eine Überschätzung der statistischen Unabhängigkeit und damit eine Unterschätzung des statistischen Fehlers statt.



Abbildung 5.10: Vergleich der statistisch berechneten Leistungsverteilung aus den Iterationen 7-9 und den Iterationen 10-12.

Verdeutlicht wird dies anhand des Diagramms in Abb. 5.10, in dem der Mittelwert aus den Leistungsverteilungen der Iterationen 7-9 bzw. der Iterationen 10-12 aufgetragen ist. Man sieht, dass die Leistungsverteilungen sich kaum unterscheiden. Die maximale Abweichung liegt bei einem Wert von 1,01% wobei die mittlere Abweichung bei 0,42% liegt. Die Auswertung der Leistungsverteilung als statistisches Mittel ist zulässig, wenn es sich bei der Berechnung der Verteilungen um stochastisch unabhängige Lösungen des gleichen Problems handelt. Aufgrund des probabilistischen Funktionsweise von MCNP5 ist diese Bedingung erfüllt, da eine gute Konvergenz auf Seiten der Thermohydraulik gegeben ist (vgl. Abb. 5.8). Diese liegt im Falle der Kühlmitteltemperatur bei einer mittleren Abweichung von 0,04 % zwischen Iteration 11 und Iteration 12. Alternativ zur vorgeschlagenen statistischen Auswertung, kann auf eine Verbesserung der Konvergenz innerhalb von MCNP5 hingearbeitet werden, indem die Anzahl der gerechneten Teilchen vervielfacht wird. Damit steigt allerdings auch die Rechenzeit proportional an, so dass die Rechnungen nicht weiter auf einem einzelnen Büro-PC durchgeführt werden können, sondern der Einsatz von Parallelrechnern notwendig ist, welche im Rahmen dieser Arbeit nicht zur Verfügung standen.

### Ergebnisse für Leistung und Thermohydraulik des Kerns

Nachdem die Konvergenz der Kopplung untersucht wurde, folgen nun einige Einzelergebnisse der Berechnungen. Dabei wird entsprechend den Erläuterungen im vorherigen Kapitel die lokale Zellleistung durch Mittelung der letzten vier Iterationen der gekoppelten Rechnung bestimmt. Durch Aufsummieren der 21 Zellleistungen für jedes BE ergibt sich die BE-Leistung. Diese ist in Abb. 5.11 über den Kernradius an zwei repräsentative Schnitte aufgetragen. Dabei handelt es sich um die Schnitte entlang der horizontalen bzw. diagonalen Symmetrieebenen des modellierten 1/8-Kerns (vgl. Abb. 5.4). Durch die optimierte Verteilung der U-235 Anreicherung (vgl. Abb. 5.4) ergibt sich für die Leistung ein relativ flacher Verlauf. In den Außenbereichen des Kerns kommt dann immer stärker der Einfluss der Neutronenleckage zum tragen, so dass hier eine immer stärkeres Abfallen der Leistung zu beobachten ist. Dabei ist der größte Leistungsgradient jeweils innerhalb des äußersten BE-Bündels zu finden. Aufgrund seiner exponierten Position im Kern, ist der Gradient für das äußerste BE-Bündel des diagonalen Schnitts gravierender. Die axiale Leistungsverteilung einiger BE entlang des horizontalen bzw. diagonalen Schnitts ist in Abb. 5.12 zu sehen. Dabei wurden der Übersichtlichkeit halber nicht alle BE entlang der Schnittlinien aufgeführt, sondern jeweils nur das mittleren BE jedes Bündels. Analog zur radialen Verteilung der BE-Gesamtleistung liegt auch die lokale Leistung der BE im zentralen Kernbereich nahe beieinander. Mit zunehmendem Kernradius r erfolgt dann über die gesamte Kernhöhe ein gleichmäßiger Rückgang der Leistung. Das Maximum des Leistungsprofils liegt bei allen BE auf der selben Kernhöhe von 110 cm. Aufgrund der Neutronenleckage am oberen und unteren Ende fällt die Leistung in Richtung Kühlmitteleintritt (Kernhöhe = 0) bzw. Kühlmittelaustritt ebenfalls stark ab. Der axiale Formfaktor der Leistung ist ein gängiger Parameter zur Beschreibung der lokalen Überhöhung des axialen Leistungsprofils. Er ist definiert als die lokale Zonenleistung geteilt durch den Mittelwert der Zonenleistungen im BE. Die Auswertung dieser Größen ergab ein Maximum des axialen Formfaktors von 1,54. Vergleichswerte aus der Literatur berücksichtigten in der Regel einen Wert von ca. 1,55 [48]. Die in Abb. 5.11 gezeigte radiale Leistungsverteilung erfordert wie schon eingangs erwähnt eine passende Dimensionierung der Einlassblenden, damit das Kühlmittel mit einer möglichst homogenen Temperatur aus dem Kern austritt. Die während der gekoppelten Rechnung optimierten Blendenkoeffizienten sind in Abb. 5.13 eingetragen. Da das BE-Bündeldesign ein gemeinsames Fußstück vorsieht, wird für jedes Bündel eine gemeinsame Blende definiert. Die aus der gekoppelten Rechnung resultierende Massenstromverteilung in den BE ist ebenfalls in Abb. 5.13 zu sehen. Aufgrund der Dominanz des Blendendruckverlusts im Vergleich zum



Abbildung 5.11: BE-Leistung über den Kernradius im horizontalen und diagonalen Kernschnitt.



Abbildung 5.12: Axiale Leistungsverteilung an verschiedenen radialen Positionen im Kern (r = entdimensionierter Kernradius). Links: horizontaler Schnitt; Rechts: diagonaler Schnitt).

Druckverlust innerhalb der BE wird die Verteilung des Kühlmittels ein fast ausschließlich durch die Blenden kontrolliert. Somit ergibt sich für alle BE innerhalb eines Bündels ein fast konstanter Kühlmittelmassenstrom. Wie sich aus der Analyse der Leistungsverteilung ergab, existieren besonders im äußeren Kernbereich starke Leistungsgradienten innerhalb der BE-Bündel. Dies hat zur Folge, dass selbst bei optimaler Anpassung der Blenden an die mittlere BE-Leistung der Bündel eine Abweichung in der Aufheizung auftritt. Um diese zu quantifizieren, wurde die relative Aufheizung  $F_r$  (vgl. Anhang A.1) in den BE des Kerns mit

$$F_r = \frac{\Delta h_{BE}}{\Delta h_{av}} \tag{5.7}$$

bestimmt. Dabei ist  $\Delta h_{BE}$  die lokale Aufheizung bzw. Enthalpiedifferenz im BE und  $\Delta h_{av}$  die mittlere Aufheizung des Kühlmittels im Kern. Durch Anwendung des Ausdrucks auf die Ergebnisse der gekoppelten Berechnung ergibt sich die in Abb. 5.14 gezeigte Verteilung. In der Mitte des Kerns ergibt sich  $F_r \approx 1,0$  aufgrund der geringen Leistungsgradienten innerhalb der BE-Bündel. Anders verhält sich  $F_r$  im äußeren Kernbereich. Hier ergibt sich der maximale bzw. minimale Wert des Heißkanalfaktors zu  $F_{r,max} = 1,35$  und  $F_{r,min} = 0,66$  an den in Abb. 5.14 markierten Stellen.



Abbildung 5.13: Verteilung der Massenstromdichte und der Blendenkoeffizienten im Kern.

Die resultierende Verteilung der Kernaustrittstemperatur (KAT) ist in Abb. 5.15 zu sehen. Die beschriebene Inhomogenität in der Aufheizung führt aufgrund der gleichen Eintrittsbedingungen des Kühlmittels in den Kern zu einer entsprechenden Verteilung der KAT. Dabei sind die Extremstellen die gleichen wie bei der Aufheizung und es ergibt sich eine maximale KAT von 385,5 °C und eine minimale KAT von 355,0 °C.

Bei der im Anhang A.1 dokumentierten Heißkanalfaktoranalyse wurde für  $F_r$  ein Faktor von 1,25 angenommen, welcher sich für das gerechnete Kerndesign als zu optimistisch herausgestellt hat. Durch die gekoppelte Kernberechnung wurde der Formfaktor der Leistung im Kern zu  $F_r = 1,35$  bestimmt. Dies erlaubt die Durchführung einer realistischeren Heißkanalfaktoranalyse zur Bewertung des vorliegenden Konzepts und ergibt einen totalen Heißkanalfaktor  $F_{tot}$  inklusive aller Toleranzen und Unsicherheiten von 2,14. Die damit zu erwartende maximale Kernaustrittstemperatur liegt bei moderaten 416 °C.



Abbildung 5.14: Verteilung des Formfaktors der Leistung  $F_r$  im Kern.

Der Temperaturverlauf des Moderatorwassers im homogenisierten Spaltkanal und in den Moderatorkästen ist in Abb. 5.16 zu sehen. Es sind insgesamt 5 Temperaturverläufe in den Moderatorkästen zu sehen. Dabei handelt es sich um die Moderatorkästen in der Mitte von BE-Bündel im horizontalen Kernschnitt (vgl. Abb. 5.4). Das Moderatorwasser tritt mit 280 °C bei einer axialen Kernhöhe von 4,5 m in die Kanäle ein und wird durch das heiße Kühlwasser in den BE aufgeheizt. Der eigentliche Eintritt in den aktiven Kern erfolgt bei einer Höhe von 4,20 m. Die zugeführte Wärme im oberen Kernbereich ist durch die hohe Temperaturdifferenz zwischen Moderator und Kühlmittel am höchsten. Durch zunehmende Aufheizung des Moderatorwassers im weiteren Verlauf wird die Temperaturdifferenz und damit die übertragen Wärme zunächst kleiner und kehrt sich schließlich unterhalb einer Kernhöhe von 130 cm um. Das Maximum der Temperatur in den betrachteten Kanälen liegt dabei bei ca. 335°C. Ab hier nimmt die Temperatur des



Abbildung 5.15: Verteilung der Kernaustrittstemperatur im Kern.

Moderators wieder ab, weil nun Wärme aus dem Moderatorwasser in das Kühlmittel geleitet wird. Für die Moderatorkästen zeigt sich, dass die radiale Position für den Verlauf der Temperatur keine große Rolle spielt.

Aus den gezeigten Ergebnissen der Kernberechnung lassen sich folgende Schlussfolgerungen ziehen:

• Eine Berechnung des stationären Kernzustands mit der vorgestellten Kopplung von MCNP5 und der modifizierten Version von STAFAS wurde erfolgreich durchgeführt. Während die thermohydraulische Seite durch Verwendung einer numerischen Dämpfung relativ schnell konvergiert und dabei unempfindlich auf statistische Schwankungen der MCNP5 Ergebnisse ist, weist die neutronische Seite durch den probabilistischen Lösungsansatz von MCNP5 eine statistische Streuung der Ergebnisse auf. Die vom Programm ausgegebenen Fehler unterschätzen die tatsächlich beobachtete Schwankung erheblich. Durch Verwendung einer statistische Mittelung ist die Berechnung der stationären Leistungsverteilung bis zu einer mittleren Abweichung von ca. 1% möglich. Die Rechenzeit pro Kopplungsschritt beträgt ca. 70 h auf einem einzelnen Prozessor, wobei nur einige Minuten auf die thermohydraulische Berechnung fallen. Durch die hohe Rechenzeit eignet sich die verwendete Methode mit MCNP5 nicht zur Kopplung mit Abbrand-Berechnungsprogrammen, da in diesem Fall für jeden Abbrandschritt die stationäre Leistungsverteilung gerechnet werden muss und darüber hinaus noch eine Vielzahl unterschiedlicher Materialien (Spaltprodukte) die Speichernutzung von MCNP5 stark in die Höhe treiben. Vorteil der verwendeten Methode ist die Möglichkeit zur genauen und schnellen Geometriemodellierung in MCNP5 gegenüber den konkuriereneden deterministischen Me-



Abbildung 5.16: Temperaturverlauf im Spaltkanal und in den Moderatorkästen an verschieden radialen Positionen im Kern ( $\mathbf{r} =$  entdimensionierter Kernradius).

thoden (vgl. Kap. 3.1). Dadurch können in vergleichbar kurzer Zeit unterschiedliche BE-Designs auf ihr Verhalten im Kern hin untersucht werden. Die langwierige Aufbereitung von Wirkungsquerschnitt-Tabellen für die deterministischen Programme entfällt. Die gezeigte Kopplungsmethode kann somit insbesondere zur Berechnung von Referenzlösungen und zur Validierung deterministischer Programmsysteme benutzt werden. Die modifizierte Version von STAFAS kann jederzeit für gekoppelte Kernberechnungen mit überkritischem Wasser mit einem anderen Neutronikprogramm als MCNP5 verwendet werden. Hierfür sind nur wenige programmspezifische Änderungen bezüglich der Input-Datei des neuen Programms erforderlich.

- Das BE-Design von Hofmeister et al. [33] führt zu einem relativ hohen Formfaktor der Leistung  $F_r = 1,35$  im Kern. Hauptgrund ist die konstruktive Zusammenlegung der BE zu einem 3x3 BE-Bündel mit gemeinsamen Fußstück und Blende. Dadurch ergibt sich der relativ hohe Formfaktor trotz optimaler Dimensionierung der Blendenkoeffizienten bezüglich homogener Aufheizung für jedes BE-Bündel. Für den axiale Formfaktor der Leistung wurde ein Wert von 1,54 ermittelt. Verglichen mit Werten aus der Literatur, ist dies im normalen Bereich. Allerdings ist die vorgestellte gezeigte Rechnung in diesem Zusammenhang noch keine konservative Abschätzung dar, da Abbrandeffekte, die zu einer zusätzlichen Inhomogenisierung der Leistung führen, nicht berücksichtigt wurden. Eine Änderung des aktuellen Fußstücks zu einem Design mit individueller Blende würde den Formfaktor erheblich reduzieren.
- Durch eine Heißkanalfaktorenanalyse mit dem berechneten Kerndesign Formfak-

toren der Leistung von Fr = 1,35 ergibt sich eine totaler Heißkanalfaktor von  $F_{tot} = 2, 14$ . Die daraus resultierende Abschätzung der höchstmöglichen KAT ergab mit 416 °C nur eine moderaten Anstieg der Kühlmitteltemperatur. Diese relativ niedrige Temperatur garantiert selbst bei extremen Fällen eine gute Kühlwirkung im Kern und bestätigt die erwartete unkritische Charakteristik des SDWR-Konzepts gegenüber Abweichungen der Leistung vom Nennwert.

# 6 Detaillierte Unterkanalanalyse des heißesten Brennelements

# 6.1 Flussverteilung und Interpolationsverfahren für die lokale Stableistung

Wie schon in Kap. 1.2 erwähnt, muss zur Bewertung des SDWR-Konzepts unter anderem eine detaillierte Analyse des heißesten BE vorgenommen werden, um lokale Parameter wie z.B. die Hüllrohrtemperatur ermitteln zu können. Grundvoraussetzung zur Durchführung dieser Analyse ist die Kenntnis der detaillierten Leistungsverteilung im BE. Das bedeutet, dass die Leistung von jedem der 40 Brennstäbe in Abhängigkeit der axialen Koordinate bekannt sein muss. Da die gekoppelte Kernberechnung diesen Detaillierungsgrad aufgrund des erforderlichen numerischen Aufwands nicht leisten kann, muss eine Interpolationsmethode zu Bestimmung der lokalen Stableistung P(i,z) aus den Ergebnissen der Kernberechnung verwendet werden. Dabei wird der schon in Kap. 3 beschriebene Ansatz Gl. 3.5 verfolgt:

$$q_f^{\prime\prime\prime}(i,z) = \chi \cdot \Phi(i,z) \cdot \Sigma_f(i) \quad \left[\frac{W}{cm^3}\right] \quad . \tag{6.1}$$

Dabei bedeutet  $\Phi(i,z)$  der lokale Neutronenfluss in  $[1/cm^2s]$  im Brennstab  $i, \Sigma_f(i)$  der makroskopische Wirkungsquerschnitt in [1/cm] und  $\chi$  die pro Spaltung freigesetzte Energie in [J/Spaltung].  $\Sigma_f(i)$  ist nicht von der axialen Koordinate abhängig, da die Anreicherung und die Position der Stabes in diese Richtung immer gleich ist.

Zunächst muss für den in Kap. 5 ermittelten stationären Kernzustand die Neutronenflussverteilung bestimmt werden. Diese wird durch eine einzelne MCNP5 Rechnung mit dem ebenfalls in Kap. 5 beschriebenen Modell berechnet. Dabei wird ein F4-Tally zur Bestimmung des Neutronenflusses verwendet (vgl. Kap. 3.1). Aufgrund der beschriebenen problematischen Konvergenz von MCNP5 wurden zwei verschiedene Rechnungen mit unterschiedlich vielen Histories (60 Mio und 180 Mio.) gerechnet, um die Genauigkeit der Flussberechnung zu ermitteln. Die Ergebnisse beider Rechnungen werden in Abb. 6.1 gegenüber gestellt. Dabei ist jeweils der Neutronenfluss über den Kernradius an verschiedenen axialen Positionen im Kern aufgetragen (oben, mitte, unten). Die Werte stammen von den BE, die entlang der horizontalen Symmetrieebene des Kerns (Abb. 5.4 oben links) angeordnet sind. Man sieht, dass beide Rechnungen trotz der Verdreifachung der gerechneten Histories nahezu gleich sind. Die Auswertung ergibt bei einer maximalen Abweichung von 0.86% eine mittlere Abweichung von 0.27% zwischen den berechneten Einzelwerten. Somit zeigt sich, dass die Flussverteilung im Vergleich zur Leistungsverteilung ein besseres statistisches Konvergenzverhalten aufweist. Das lässt sich damit erklären, dass  $\Sigma_f(i) \ll 1$  und somit viel weniger Neutronen in einem Brennstoffvolumen eine



Abbildung 6.1: Vergleich der Neutronenflussverteilung im oberen, mittleren und unteren Kernbereich bei der Verwendung von 60 Mio. bzw. 180 Mio. Histories in MCNP5.

Spaltung auslösen, als sich Neutronen hindurch bewegen. Somit steht für die Auswertung des Neutronenflusses eine viel höhere Anzahl an "Ereignissen" zur Verfügung. Zur späteren Interpolation des Flusses in den Brennstäben, wird das Ergebnisse der Rechnung mit 180 Mio. Histories verwendet. Dieses beschreibt die Flussverteilung im 1/8 Kern in Abhängikeit kartesischer Koordinaten in den Mittelpunkten der 2205 Zellen des Kernmodells.

Die grob aufgelösten Daten der kernweiten Flussverteilung werden durch Verwendung eines in MATLAB geschrieben Programms auf die Brennstäbe interpoliert. Dazu müssen die Daten im Blockformat (15 x 15 x 21) vorliegen. Dies wird durch Spiegelung der Ergebnisse auf 1/4-Kern und durch füllen der Fehlstellen (Bereiche außerhalb der aktiven Zone wie z.B. Stahlreflektor) mit Nullen erreicht. Da die Nodalisierung in Axialrichtung bei Kern- und Unterkanalanalyse gleich bleibt, wird die Interpolation für jede der 21 axialen Zellschichten des Kern einzeln durchgeführt. Dazu wird eine MATLAB Routine verwendet, die nach der Delaunay-Triangulierung funktioniert und eine kubisches Interpolationsverfahren benutzt. Es handelt sich dabei um ein weitläufig verwendetes Verfahren deren Details u.a. im MATLAB-Handbuch nachgelesen werden können. Vereinfacht gesagt werden zunächst die Flussdaten aus einer der 21 Zellschichten der Kernberechnung eingelesen. Darin ist die Flussverteilung in der betreffenden Ebene des 1/4-Kerns in der groben Auflösung von 15 x 15 Punkten gegeben. Dann wird durch kubische Interpolation ein feines Netz von Zwischengitterpunkten berechnet und darauf basierend quasi eine Oberfläche definiert. Durch Angabe von Zielkoordinaten x und y (d.h. Koordinaten der Brennstabmittelpunkte eines bestimmten BE) können die lokalen Werte des Flusses bestimmt werden. Die interpolierte Flussverteilung in den Stäben des heißesten BE (vgl. Abb. 5.14) im Kern ist in Abb. 6.2 zu sehen.



Abbildung 6.2: Verteilung des interpolierten Neutronenflusses im heißesten BE. Maximalwert:  $4370 \text{ Neutronen/cm}^2$ .

Nachdem der lokale Neutronenfluss  $\Phi(i, z)$  bekannt ist, fehlt für die Berechnung der lokalen Stableistung noch der Spaltquerschnitt  $\Sigma_f(i)$ . Dieser kann durch eine weitere MCNP5 Rechnung bestimmt werden. Dabei wird ein einzelnes BE inkl. des Spaltbereichs als 2dimensionales Modell gerechnet. Durch gleichzeitige Auswertung des lokalen Flusses  $\Phi(i)$ (F4-Tally, Gl. 3.7) und der durch Spaltung erzeugten Leistung  $q_f(i)$  (F6-Tally, Gl. 3.8) in den verschieden Brennstäben *i* kann der Spaltquerschnitt  $\Sigma_f(i)$  durch Auswertung des Ausdrucks

$$\Sigma_f(i) = \frac{q_f(i) \cdot \rho_{Br}}{\Phi(i) \cdot \chi} \tag{6.2}$$

ermittelt werden. Dabei bedeutet  $\rho_{Br}$  die Dichte des Brennstoffs in [g/cm<sup>3</sup>] und  $\chi$  die pro Spaltung freiwerdende Energie [MeV/Spaltung]. Die ermittelten Werte für den makroskopischen Wirkungsquerschnitt sind in Abb. 6.3 zu sehen. Dabei entspricht jede der dargestellten Zellen einem Brennstab im BE. Das Minimum von  $\Sigma_f$  ist in den 4 Eckbrennstäben des BE zu finden, da hier die Brennstoffanreicherung von U-235 um 1% reduziert ist. Unmittelbar benachbart finden sich die Stäbe mit dem höchsten Spaltquerschnitt. Dies liegt an der großen Menge Moderatorwasser in deren unmittelbarer Umgebung und der damit verbundenen guten Moderation der Neutronen. Gleiches gilt für die drei jeweils dazwischen liegenden Stäbe. Auch diese sind unmittelbar am Moderatorspalt gelegen. Die Brennstäbe an den Ecken des inneren Kastens haben einen relativ niedrigen Spaltquerschnitt, da jeder durch 4 benachbarten Stäbe stark vom Moderatorwasser abgeschirmt wird. Einen relativ hohen Querschnitt haben die vier Stäbe die in der Mitte der Moderatorkastenseiten liegen.



Abbildung 6.3: Makroskopischer Spaltquerschnitt  $\Sigma_f$  für die Brennstäbe eines BE.

Durch die beschriebenen MCNP5 Rechnungen wurde nun zum einen die Verteilung des Neutronenflusses im Kern bzw. durch Interpolation dieser Ergebnisse auch die Verteilung  $\Phi(i)$  in den Stäbe des heißesten BE ermittelt. Zum anderen ergab die 2dimensionale BE-Simulation den lokalen Spaltquerschnitt im Material der Stäbe. Da MCNP5 nicht die absolute Werte des Neutronenflusses berechnet, müssen die ermittelten Werte  $\Phi(i, z)$ zur Berechnung der lokalen effektiven Leistung P(i, z) des Brennstabes *i* an der axialen Position *z* skaliert werden. Dazu wird folgende Vorschrift angewendet

$$P(i,z) = \frac{\Phi(i,z) \cdot \Sigma_f(i)}{\sum\limits_{m=1}^{n} \Phi(i,z) \cdot \Sigma_f(i)} \cdot P_{tot}(z) \quad .$$
(6.3)

Dabei entspricht  $P_{tot}(z)$  der Gesamtleistung des BE-Abschnitts auf der axialen Höhe z und ist aus der gekoppelten Kernberechnung bekannt.

### 6.2 Ergebnisse der Unterkanalanalyse

Die durch Anwendung dieser Vorschrift resultierende absolute Leistung in den Brennstababschnitten ist in Abb. 6.4 zu sehen. In der Abbildung wurde die axiale Koordinate des BE um den Faktor 1/20 skaliert, damit eine übersichtliche Darstellung der Ergebnisse möglich ist. Man kann deutlich die Überlagerung der Flussverteilung und des lokalen Wirkungsquerschnitts erkennen. Die Flussverteilung erzeugt einen Leistungsgradienten von der vorderen Kante (x = y = -27,6 cm) abfallend in Richtung der hinteren Kante (x = y = 27,6 cm). Während die Funktion des Flusses stetig abfallend ist, werden die
sprunghaften Änderungen in der Leistungsverteilung durch die lokal unterschiedlichen Spaltquerschnitte erzeugt. Am deutlichsten ist dies in den Ecken zu sehen, wo der Eckbrennstab mit der 1% reduzierten Anreicherung eine wesentlich kleinere Leistung als die Nachbarbrennstäbe erzeugt. Die maximale absolute Leistung beträgt in einem Brennstabstück beträgt ca. 4300 W.

Durch Normierung der Leistungsdaten mit der Länge der Brennstabstücke l = 0,20m erhält man die sogenannte lineare Stableistung. Diese stellt ein Maß für die thermische Belastung der Brennstäbe dar und ist in Abb. 6.5 dargestellt. Genau wie bei der absoluten Leistung ergibt sich eine Spreizung der Werte um einen Faktor von ungefähr 10. Der maximale Wert der linearen Stableistung beträgt q' = 21,5 kW/m und befindet sich im Brennstab mit der Koordinate x = -18,4 mm und y = -27,6 mm auf eine axialen Höhe von z = 1100 mm.



Abbildung 6.4: Absolute Leistung der Brennstabstücke mit 20 cm Länge. Maximalwert: 4,40 kW.

Unter Berücksichtigung einer Leistungsexkursion um den Faktor  $F_U \cdot F_A = 1.38$  (vgl. Heißkanalfaktoren in Kap. A.1) ergibt sich ein maximaler Wert von ca.  $q'_{max} = 29,7$  kW/m. Werte aus der Literatur empfehlen eine Begrenzung der maximalen linearen Stableistung auf  $q'_{krit} = 38$  kW/m [42] (SCLWR-Reaktorkonzept). Alternativ errechnen Tong und Weisman [94] eine Grenze für die maximale lineare Stableistung von ca.  $q'_{krit} = 50$  kW/m, um eine Schädigung der Brennstoffpelletstruktur noch sicher ausschließen zu können. Demzufolge liegt  $q'_{max}$  beim SDWR Konzept deutlich unter den bekannten Grenzwerten  $q'_{krit}$ . Dies gilt im besonderen Maße, da noch keinerlei Optimierung des axialen Leistungsprofil durchgeführt wurde und damit erhebliches Verbesserungspotential vorhanden ist. Die Techniken zur Glättung des Leistungsprofils sind zum Teil schon aus der Siedwasserreaktortechnik bekannt und umfassen Maßnahmen wie reduzierte Anreicherung im unteren Kernbereich, abbrennbare Neutronengifte wie Gadolinium, Steuerstäbe zur lokalen Beein-



Abbildung 6.5: Lineare Stableistung der Brennstäbe im heißesten BE. Maximalwert: 21,50 kW/m.

flussung des Leistungsprofils und zum Abbrandausgleich, Dummy-Brennstäbe zur lokalen Reduzierung der Kritikalität. Darüber hinaus sind Daten für die typische mittlere lineare Stableistungen q' [94] (Auslegung bei normalen Reaktorbedingungen) von konventionellen Anlagen bekannt: DWR (altes Design) 23,1 kW/m; DWR (neueres Design) 17,3 kW/m; CANDU 25,7 - 26,5 kW/m. Unter Voraussetzung eines ideal glatten Leistungsprofils errechnet sich für die zugrunde gelegten Kerndaten eine lineare Stableistung von  $q'_{opt} =$ 15 kW/m. Im Vergleich zu den aufgeführten Designs liegt der SDWR damit deutlich unter den Auslegungswerten von vergleichbaren Reaktorkonzepten. Dies bedeutet, dass die Brennstäbe des SDWR einer vergleichsweise niedrigen thermischen Beanspruchung ausgesetzt sind und dadurch über große Sicherheitsreserven im Falle eine Überhitzung verfügen. Alternativ kann bei zukünftigen Designstufen über eine Erhöhung der thermischen Belastung zugunsten einer Verkleinerung des Kerns nachgedacht werden. Dies würde schließlich auch zu einer Verkleinerung des RDB führen und damit zu weiteren Vorteilen bezüglich der Anlagenkosten.

### Kühlmittelmassenstrom und -temperatur

Aus der gekoppelten Kernberechnung wurde für das heißeste BE ein Kühlmittelmassenstrom von 1,934 kg/s ermittelt. Dieser teilt sich beim Eintritt in das Stabgitter auf die Unterkanäle des BE auf, wobei diese Aufteilung von STAFAS unter der Bedingung von gleichem Druckverlust in Axialrichtung iterativ für jede axiale Zellschicht neu berechnet wird. Die resultierenden Massenströme sind in Form der axialen Massenstromdichte (Massenstrom pro Querschnittsfläche) in Abb. 6.6 dargestellt. Bei der gewählten Darstellung ist zu beachten, dass es in jeder axialen Zellschicht 60 Zellen gibt, wobei jede der dargestellten Zellen einem Unterkanal des BE entspricht. Auf die reale geometrische Form der Unterkanäle wurde bei der Ergebnisdarstellung keine Rücksicht genommen, so dass die Unterkanäle alle gleich groß sind. Analog zum realen Modell sind die Unterkanäle in drei Schichten um den zentralen Moderatorkasten angeordnet. Man sieht, dass der Massenstrom stark vom Querschnitt des Unterkanals abhängig ist. So ist das Minimum der Massenstromdichte in den Eckbrennstäben des BE zu finden. Dies liegt größtenteils am höheren Druckverlustkoeffizienten durch den geringeren hydraulischen Durchmesser (vgl. Kap. 2.2.3). Eine zweite Abhängigkeit des axialen Druckverlustes und damit der lokalen Massenstromverteilung ergibt sich aus der Temperaturabhängigkeit der Stoffeigenschaften. So führt eine höhere Temperatur zu einer geringeren Dichte und damit zu einer höheren Axialgeschwindigkeit. Dies resultiert wiederum in einem höheren Druckverlust und bewirkt dadurch das Umverteilen des Kühlmittels von wärmere in kältere Kanälen. Analoge Beobachtungen wurden auch von Yamaji et al. [115] gemacht. Die Temperaturverteilung, welche dieses Verhalten verursacht ist in Abb. 6.7 zu sehen.



Abbildung 6.6: Massenstromverteilung des Kühlmittels im Brennelement. Maximalwert:  $1437 \text{ kg/sm}^2$ .



Abbildung 6.7: Temperaturverteilung des Kühlmittels im Brennelement. Maximalwert: 394,6 °C.

Man sieht, dass im Vergleich zur Kernberechnung die Maximalwerte der Kühlmitteltemperatur höher liegen. In besonderem Masse trifft das auf die zentralen Unterkanäle in der mittleren Reihe zu, weil diese keine Wärme mit dem Spalt oder dem Moderatorkasten austauschen können. Die maximale Kühlmitteltemperatur ergibt sich zu  $T_{max} = 394,6$ °C in der mittleren Unterkanalreihe (Abb. 6.7 mitte). Darüber hinaus zeigt sich dass der Anstieg der Temperatur im unteren BE-Bereich sehr stark ist und sich dann ab einer Höhe von 1100 °C stark verlangsamt. Dieser Effekt ist darauf zurückzuführen, dass schon durch die starken Leistungsspitze in diesem Bereich das Kühlmittel bis in die Nähe des pseudo-kritischen Punktes (384 °C) erhitzt wird. Ein weiterer starker Temperaturanstieg des Kühlmittels wird dann durch das Maximum der spezifischen Wärmekapazität verhindert (vgl. Abb. 1.3).

#### Brennstoff- und Hüllrohrtemperaturen

Aus der beschriebenen Leistungsverteilung berechnet STAFAS die maximale Brennstofftemperatur im Zentrum der Brennstoffpellets (vgl. Kap.2.2.2). Die Ergebnisse dieser Berechnung sind in Abb. 6.8 zu erkennen. Es ist deutlich zu sehen, dass die Temperaturverteilung annähernd proportional zur linearen Stableistung ist und kaum von der Temperatur des Kühlmittels abhängt. Begrenzt wird die Temperatur über die maximal ertragbare Temperatur des Brennstoffs. Im SDWR wird der keramische Brennstoff Uranoxid mit eine Schmelztemperatur von ca. 2720 °C eingesetzt. Noch vor erreichen des Schmelzpunktes in der Mitte des Brennstoffs neigt der Brennstoff zu Rissbildung ab einer Temperatur von ca. 2000 °C. Beide Zustände müssen möglichst verhindert werden. Die maximale Temperatur des Brennstoffs im stationären Betriebszustand beträgt 1200 °C und bewegt sich damit im Rahmen von herkömmlichen Druckwassereaktoren [89].



Abbildung 6.8: Temperatur in der Mitte des Brennstoffpellets. Maximalwert: 1195 °C.

peratur der Brennstäbe. Die Hüllrohre haben im Wesentlichen die Aufgabe, den direkten Kontakt zwischen dem Kühlmittel und dem Brennstoff zu verhindern und stellen somit eine der wichtigsten Barrieren gegen die Austragung von radioaktiven Materialien aus dem Reaktordruckbehälter dar. Die Integrität und Dichtheit der Hüllrohre muss also in jedem Fall gewährleistet sein. Dabei sind die Hüllrohre starken Beanspruchungen durch Hitze, Korrosion und mechanische Belastung ausgesetzt. Als Hüllrohrmaterial wurde im SDWR der Edelstahl SS316L verwendet [33]. Dieses Material zeichnet sich durch gute Korrosionsbeständigkeit und eine hohe Warmfestigkeit bis zu Temperaturen von 600°C aus. Die Temperaturen, die im SDWR erwartet werden, sind in Abb. 6.9 zu sehen. Es wird deutlich, dass die Hüllrohrtemperatur durch zwei Effekte kontrolliert werden. Zum einen spielt die im Brennstab erzeugte Wärme und damit die Wärmestromdichte auf der Oberfläche eine Rolle. Zum anderen ist die Hüllrohrtemperatur stark von der Temperatur des Kühlmittels abhängig. Im unteren Bereich des Kerns wo die Stableistung ihr Maximum hat, ist auch die höchste Hüllrohrtemperatur  $T_{H,a}^{max} = 404,3$  °C zu finden. Somit ist hier der Effekt der hohen Leistung dominant. Im oberen Bereich nimmt die Leistung dagegen ab, und die Hüllrohrtemperatur nähert sich stark der Kühlmitteltemperatur an. Über die ganze BE Höhe sind die Hüllrohrtemperaturen fern der kritischen Temperatur die zum Versagen des Hüllrohrwerkstoffs führt. Dies liegt hauptsächlich an den vergleichsweise niedrigen Temperaturen des Kühlmittels welches dadurch eine hohe Kühleffektivität hat.



Abbildung 6.9: Oberflächentemperatur des Hüllrohrs. Maximalwert: 404,3 °C.

Bei Überschreitung einer bestimmten kritischen Heizflächenbelastung kann das Phänomen der "Heat Transfer Deterioration" (HTD), d.h. des lokal verschlechterten Wärmeübergangs beobachtet werden [51]. Das bedeutet, dass es aufgrund einer schlechteren Wärmeleitung unter Umständen zu höheren als den Normalbedingungen vorhergesagten Hüllrohrtemperaturen kommt. Zur Überprüfung ob dieses Phänomen auftritt, kann die Korrelation von Yamagata et al. [112] für die kritische Heizflächenbelastung  $q''_{krit}$  verwendet werden:

$$q_{krit}'' = 0, 2 \cdot G^{1,2} \quad . \tag{6.4}$$

Dabei bedeutet G die Massenstromdichte im Kanal. Damit die Formel Gültigkeit hat, müssen  $q''_{krit}$  und G in den Einheiten kW/m<sup>2</sup> bzw. kg/sm<sup>2</sup> eingesetzt werden. Tab. 6.1 enthält die Auswertung für bestimmte kritische Kanäle und Brennstäbe im untersuchten BE. Es zeigt sich, dass im untersuchten BE die tatsächliche Heizflächenlast im Mittel

Fall	kritische Heizflächenlast $kW/m^2$	tatsächliche Heizflächenlast $kW/m^2$	Abweichung %
1	1141,0	596,8	+ 91,2
2	701,6	802,24	- 12,5
3	952,4	855,45	+ 11,3

Tabelle 6.1: Auswertung der Heizflächenbelastung für verschieden Positionen im BE nach dem Kriterium von Yamagata [112].

(d.h. mittlere Massenstromdichte und mittlere Heizflächenlast im BE) weit von den berechneten Grenzwerten entfernt liegt (Fall 1 in Tab. 6.1). Die einzige Stelle, an denen das Verhältnis kritische Werte annimmt, befindet auf der selben Höhe im BE wo sich auch das Maximums der linearen Stableistung befindet. Dabei entspricht Fall 2 der Berechnung von  $q''_{krit}$  für den Unterkanal mit der geringsten Massenstromdichte (Eckkanal vorne links in Abb. 6.6) und Fall 3 der Berechnung mit der maximalen linearen Stableistung (vgl. Abb. 6.5) in dieser Ebene. Man sieht in Fall 2, dass die kritische Heizflächenbelastung im Eckkanal/Eckbrennstab um 12% überschritten wird, da sich hier ein relativ kleine Massenstromdichte einstellt. Aufgrund der niedrigen thermischen Belastung des Hüllrohrwerkstoffs SS316l ist diese Überschreitung allerdings relativ unkritisch. Zur Verbesserung der Werte kann analog zu [106] die Leistung des Eckstabes weiter verringert werden oder der hydraulische Durchmesser des Eckkanals vergrößert werden, so dass die Massenstromdichte im Kanal ansteigt.

Die Ergebnisse der durchgeführten Detailanalyse des heißesten BE lassen sich wie folgt zusammenfassen:

• Die maximale lineare Stableistung  $q'_{max}$  liegt mit Werten von 29,7 kW/m deutlich unter den in der Literatur empfohlenen Grenzwerten  $q'_{krit}$ . Zusätzlich ist die mittlere Stableistung mit 15 kW/m im Vergleich zu anderen Druckwasserreaktoren relativ niedrig. Daraus folgt, dass der Brennstoff in den Brennstäben des SDWR einer relativ geringen thermischen Beanspruchung unterliegt und somit große Sicherheitsreserven gegenüber einer Schädigung der Brennstoffmatrix vorhanden sind. Alternativ kann über eine Erhöhung der Leistungsdichte der Kern und damit der RDB mit Einbauten verkleinert werden und so die Kosten dieser Komponenten verringert werden.

- Die in der Mitte des Pellets maximal auftretende Brennstofftemperatur beträgt 1195 °C. Damit liegt sie weit unter den Materialgrenzwerten von 2720 °C für keramische Brennstoffe.
- Die maximale Kühlmitteltemperatur wurde mit 394,3 °C berechnet und ist trotz der Leistungsüberhöhung im BE von  $F_r = 1,35$  moderat.
- Die maximale Hüllrohrtemperatur liegt mit 404,3 °C im unkritischen Bereich des Hüllrohrwerkstoffs SS3161.
- Im Eckkanal des BE ergibt sich eine leichte Überschreitung der kritischen Heizflächenbelastung von 12 %. Somit kann das Auftreten der HTD nicht vollständig ausgeschlossen werden. Durch hydraulische Anpassung des Eckkanals oder durch Reduzierung der Stableistung kann dies verbessert werden.

# 7 Analyse der Spaltströmung mittels eines Ansatzes für poröse Medien

Wie in Abbildung 7.1 zu sehen, stehen die BE im Kern mit einem Abstand von 10 mm nebeneinander. Dadurch ergibt sich ein weit verzweigtes Netz von Spalten (in roter Farbe dargestellt), welches den Kern in radialer Richtung und axialer Richtung durch alle Bereiche durchzieht. Die geometrischen Details der Spalte sind in Abb. A.2 dokumentiert.



Abbildung 7.1: Strömungsquerschnitt der abwärtsgerichteten Moderatorströmung im Spalt zwischen den BE.

In diesen Spalten strömt Wasser welches zur Moderation der Neutronen benötigt wird vom oberen Teil des Kern nach unten. Dabei wird das Wasser durch Wärmeübertragung vom heißeren Kühlmittel in den BE erhitzt. Bei der in Kap. 5 beschriebenen Kernberechnung wurde eine homogene Dichte- und Temperaturverteilung über die jeweilige axial Höhe angenommen. Dadurch konnte bei der Berechnung der Thermohydraulik im Kern die Strömung des Moderators in den Spalten zu einem einzigen thermohydraulischen Strömungskanal vereinfacht werden, welcher thermisch an die BE gekoppelt ist. Zur Verifizierung dieser Annahme wurde in der Arbeit von Kunik und Vogt [45] ein Simulationscode für poröse Medien entwickelt. Um damit die Korrektheit der getroffenen Annahme nachweisen zu können, müssen im Wesentlichen zwei Bedingungen erfüllt werden:

1. Die Aufheizung des Spaltwassers durch das heiße Kühlmittel in den BE muss ausreichend homogen sein, damit keine großen Gradienten in der radialen Temperaturund Dichteverteilung auftreten. ( $\Delta \rho < 1\%$ ) 2. Die Aufheizung des Spaltwassers und die damit verbundene Verringerung der Dichte muss ausreichend gering sein, damit Auftrieb und Naturkonvektion gegenüber der zwangskonvektiven Abwärtsströmung vernachlässigt werden können. Strömungsumkehr und die dadurch auftretende Rayleigh-Bernard Konvektion muss verhindert werden, um sowohl für die Simulation als auch für die Leistungsregelung eines derartigen Reaktors stabile und verlässliche Randbedingungen sicher zu stellen.

## 7.1 Numerisches Modell

Im Gegensatz zu der in [45] veröffentlichten Version des Codes wurde in dieser Untersuchung die bei der Kernauslegung in Kap. 5 berechnete Massenstromverteilung in den BE vorgegebenen. Dies hat hauptsächlich Auswirkungen auf den Quellterm der Wärme (Gl. 2.101) und führt dementsprechend zu einer realistischeren Verteilung der Wärmequellen im Spaltwasser. In Gl. 2.101 ist der Wärmedurchgangskoeffizient k

$$k = \frac{1}{\frac{1}{\alpha_k} + \frac{S_{mk}}{\lambda_s} + \frac{1}{\alpha_m}}$$
(7.1)

mit der Wandstärke des BE-Kastens  $S_{mk}$  und der Wärmeleitfähigkeit des Stahls  $\lambda_s$  (vgl. Kap. 2.2.3) enthalten.  $\alpha_k$  bzw.  $\alpha_m$  bezeichnet den Wärmeübergangskoeffizienten des Kühlmittel auf die Kastenwand bzw. von der Kastenwand auf das Spaltwasser. Aufgrund der Wärmeübertragung mit relativ geringen Wärmestromdichten und aufgrund der Tatsache, dass der Zustand der Fluide sich deutlich im unterkritischen Bereich befinden, wird für die Berechnung der Wärmeübergangskoeffizienten die Dittus-Boelter Korrelation (Gl. 2.91) verwendet. Über die darin enthaltene Reynoldszahl bestimmt die Massenstromverteilung des Kühlmittels in den BE die Wärmequellenverteilung für das Moderatorwasser im Spalt und muss in den Simulationen berücksichtigt werden. Die Massenstromverteilung des Kühlmittels in den BE ist für zwei repräsentative radiale Schnitte in Abb. 7.1 als Punkte abgebildet.



Abbildung 7.2: Massenstromverteilung des Kühlmittels in den BE entlang der radialen Schnitte  $x_2 = x_1$  (links) und  $x_2 = 0$  (rechts) (vgl. Abb. 7.1).

Aufgrund der unterschiedlichen Blenden am Einlass eines jeden BE-Bündels variiert der Massenstrom vom Bündel zu Bündel stark. Dabei umfasst ein Bündel jeweils drei BE. Für die Simulation der Spaltströmung wurden aus numerischen Gründen statt der genauen Werte die ebenfalls dargestellten Näherungsfunktionen benutzt. Neben der Massenstromverteilung des Kühlmittels ist auch dessen Temperaturprofil über die Kernhöhe für die Wärmeübertragung von Bedeutung. Das verwendete axiale Temperaturprofil entspricht dem Ergebnis der gekoppelten Kernberechnung (Abb. 5.8) und wird über den Kernradius als konstant angenommen. Darüber hinaus ist es auch unabhängig von der zu- oder abgeführten Wärmemenge. Zur Reduzierung des numerischen Aufwands wurde auf eine volle dreidimensionale Modellierung des Kerns verzichtet und stattdessen der Kern als rotationsymmetrisch vereinfacht. Dadurch kann ein zweidimensionales Gitter zur Berechnung der Spaltströmung verwendet werden. Die Geometrie, das Gitter und die verwendeten Randbedingungen sind in Abb. 7.3 zu sehen. Das Gitter besteht aus ca. 3200 Dreieckselementen. Da der Rand des Kerns nicht auf einem konstanten Radius liegt (vgl. Abb. 7.1)



Abbildung 7.3: Zweidimensionales Netz mit Randbedingungen für a) Impuls- und b) Energiegleichung.

wurde ein mittlerer Radius von 1,25 m angenommen. In der Höhe erfasst das Modell den Bereich des aktiven Kerns mit einer Gesamthöhe von 4,20 m. Die Einströmung des Moderatorwassers findet von oben an der Stelle  $x_3 = 4,2$  m statt. Die Eintrittsgeschwindigkeit  $u_{in}$  des Spaltwassers wurde entsprechend 16,7 % des gesamten Kühlmittelmassenstroms bestimmt, wobei auf jedes BE ein Massenstrom von 0,5925 kg/S kommt. Da der Anteil an Spaltfläche pro BE 0,001402 m<sup>2</sup> beträgt, ergibt sich ein Geschwindigkeit im Spalt von 0,544 m/s. Mit der Porosität in  $x_3$ -Richtung von  $\varphi_3 = 0,2689$  [45] entspricht dies einer volumetrischen Eintrittsgeschwindigkeit von  $u_3 = u_{in} = 0,1463$  m/s. Der eintretende Massenstrom hat eine konstante Temperatur von  $T_{in} = 280$  °C. Um die Entwicklung der Strömung über die Zeit untersuchen zu können, wurden instationäre Rechnungen mit einem variablen Zeitschritt durchgeführt. Dies bedeutet, dass der Zeitschritt je nach Stärke der Instationarität durch den Code angepasst wird. Ausgangspunkt der Lösung ist eine stationäre, mit der Geschwindigkeit  $u_{in}$  abwärts fließende, isotherme Strömung der Temperatur  $T_{in} = 280$  °C. Der Massenstrom in den BE wurde durch die linke der beiden in Abb. 7.1 gezeigten Verteilungen vorgegeben, da diese die größte Inhomogenität aufweist und somit eine "worst case"-Abschätzung bezüglich der Inhomogenität der Spaltströmung vorgenommen werden kann.

# 7.2 Ergebnis der Analyse

Wie schon Eingangs erwähnt muss einerseits eine stationäre, stabile Abwärtsströmung in den Spalten sichergestellt werden und andererseits darf die Inhomogenität der radialen Temperatur und Dichteverteilung aus neutronischen Gesichtspunkten nur gering sein, da sonst die Moderation der Neutronen und damit auch die Leistungsverteilung im Kern falsch berücksichtigt wird. Für die Beurteilung der Stationarität der Lösung wird die Temperaturverteilung des Moderatorwassers im Spalt betrachtet (Abb. 7.4). Dabei stellte sich nach einer Zeit t = 50 s ein stationärer Zustand in der Temperaturverteilung ein. Um sicher zu sein, dass keine instationären Phänomene zu späteren Zeitpunkten auftreten, wurde insgesamt eine Zeitspanne von 200 s berechnet. Die im folgenden gezeigten Ergebnisse entsprechen der Lösung zum Zeitpunkt t = 200 s.

Nach dem Eintritt des Wassers mit 280°C in den Spaltraum am oberen Ende des Kerns fließt es abwärts und wird durch die aus den BE übertragene Wärme zunächst aufgeheizt. Die sich einstellende stationäre Temperaturverteilung ist auf der linken Seite von Abb. 7.4 zu sehen. Das Maximum der Spaltwassertemperatur von T = 320 °C ist bei einer Kernhöhe von  $x_3 \approx 950$  mm zu finden. Oberhalb dieser Koordinate ist die Temperatur des Kühlmittels größer als die des Spaltwassers, so dass ein positiver Wärmeeintrag stattfindet. Unterhalb des Maximums kehrt sich die Temperaturdifferenz um und es wird Wärme aus dem Spalt in die BE transportiert. Die größte Inhomogenität der Temperaturverteilung in radiale  $x_1$ -Richtung ist ebenfalls im Bereich  $x_3 \approx 950$  mm zu finden. Die maximale radiale Temperaturdifferenz zwischen der Mitte und dem Rand des Kerns beträgt  $\Delta T$ = 1,2 °C und entspricht einer Abweichung von 0,375%. Aufgrund dieser Temperaturdifferenz stellt sich ein maximaler Dichteunterschied von  $\Delta \rho$ =2,7 kg/m<sup>3</sup> bzw. 0,391% ein. Somit sind die Unterschiede ausreichend klein (< 1%), um einen signifikanten Einfluss auf die Moderation der Neutronen ausschließen zu können. Die Vereinfachung der Spaltströmung zu einem homogenen Strömungskanals in der Kernberechnung ist demnach zulässig.

Auf der rechten Seite von Abb.7.4 ist die volumetrisch gemittelte Geschwindigkeit der Moderatorströmung zu sehen. Dabei geben die Vektoren die Strömungsrichtung an und die farbige Hinterlegung zeigt den Betrag der volumetrischen Geschwindigkeit. Nach dem Eintritt der Strömung im oberen Kernbereich findet eine kontinuierlich Umverteilung der Masse von der Mitte des Kerns zum Rand hin statt. Dadurch ist entlang einer Stromlinie in der Mitte des Kerns eine Verzögerung der Strömung zu beobachten, während an der Außenseite des Kerns die Strömung beschleunigt wird. Dieser Effekt ist auf die festgestellte Inhomogenität der Aufheizung und dem damit verbundenen Auftrieb durch die Dichtedifferenzen zurückzuführen. Die nach oben gerichtete Auftriebskraft hat ihr



Abbildung 7.4: Stationäre Temperaturverteilung (links) und Geschwindigkeitsverteilung (rechts) des Moderatorwassers im Spalt zur Zeit t = 200 s und einer mittleren Eintrittsgeschwindigkeit von 0,1463 m/s.

Maximum im Bereich der niedrigsten Dichte in der Kernmitte und führt dadurch zu der beobachteten Verdrängung von Masse. Aufgrund der relativ geringen Aufheizung und der damit verbundenen geringen Dichteänderung, hat dieser Effekt jedoch abgesehen von der Verdrängung von Masse in den äußeren Kernbereich keine Auswirkungen.

Es ist allerdings aus der Literatur bekannt, dass es sich bei der abwärtsgerichteten, beheizten Strömung um einen potentiell instabilen Strömungsfall handelt, der ab einer bestimmten Aufheizung des Mediums bzw. ab einer bestimmten Auftriebskraft zur Strömungsumkehr bzw. zur Ausbildung instabiler thermischer Konvektionszellen (Rayleigh-Bénard-Konvektion) neigt (Oertel und Delfs [62]). Analog zu [45] wurde zur groben Abschätzung der Stabilitätsgrenze diese Strömungfalls der Massenstrom der Spaltströmung und dadurch die volumetrische Eintrittsgeschwindigkeit variiert. Für niedrige Eintrittsgeschwindigkeiten (Beispiel  $u_{in} = 0.04 \text{ m/s}$ ; Abb. 7.5) stellte sich nach einer Berechnungszeit von 150 s eine stabile Naturkonvektionswalze ein. Die dadurch entstehende Temperaturverteilung ist auf der linken Seite von Abb. 7.5 zu sehen und zeigt große Inhomogenitäten unter denen eine verlässliche Kernauslegung nicht möglich ist. Die Entstehung solcher Phänomene ist also in jedem Fall zu verhindern. Die Grenze zwischen stabiler Abwärtsströmung und dem auftreten von Naturkonvektion liegt bei einem Massenstrom von 0,09 m/s. Bei der in [45] durchgeführten Rechnung ohne Berücksichtigung der Massenstromverteilung des Kühlmittels in den BE wurde hingegen die Stabilitätsgrenze mit 0,07 m/s bestimmt.



Abbildung 7.5: Temperaturverteilung (links) und Geschwindigkeitsverteilung (rechts) des Moderatorwassers im Spalt zur Zeit t = 200 s und einer mittleren Eintrittsgeschwindigkeit von 0.04 m/s.

Daraus lassen sich im Wesentlichen zwei Dinge folgern. Zum einen liegt der beim SDWR gewählte Spaltwassermassenstrom von 16,7% des Kühlmittelmassenstroms um ca. 60% über der ermittelten Stabilitätsgrenze und ist für den angenommenen stationären Kernzustand im stabilen Bereich. Zum anderen hat die Wärmequellenverteilung und damit die Massenstromverteilung in den BE einen starken Einfluss auf die Stabilitätsgrenze und auf die Struktur der sich einstellenenden Naturkonvektion.

# 8 Berechnung der Strömung im Unterkanal mit CFD

In der vorliegenden Arbeit wurde der Fall zweier benachbarter, zentraler Unterkanäle des BE-Designs von [33] mit CFD untersucht. Ziel ist einerseits die Ermittlung von Modellkoeffizienten und Schließungstermen für die Unterkanalmodelle bzw. die Überprüfung der Tauglichkeit aktuell verfügbarer CFD Programme (Star-CD) und deren Modelle (Turbulenzmodelle u. a.) zur richtigen Bestimmung solcher empirischer Korrelationen. Drei verschiedene Schließungsmodelle werden im Folgenden untersucht und die Ergebnisse mit verfügbaren empirischen Korrelationen verifiziert und verglichen.

# 8.1 Axialer Druckverlustkoeffizient $C_f$

## Numerisches Modell

Der axiale Druckverlustterm kommt in Unterkanalgleichungen in der axialen Impulsbilanz vor und bestimmt den Druckverlust der Strömung in Hauptströmungsrichtung. Generell setzt sich dieser Impulsverlust aus einem Formwiderstand und einem Reibungswiderstand zusammen. Da die Strömung stets parallel zu den Rohrbündeln verläuft, ist der Formwiderstand in diesem Fall allerdings relativ klein. Für den Druckverlust in Strömungsrichtung in einem Bündel ohne Abstandshalter ist also in erster Linie der Reibungswiderstand verantwortlich. Dieser entsteht in erster Linie auf Grund der Haftbedingung an den festen Strukturen des Bündels (Brennstab, Kastenwand etc.).

Wichtigste Aufgabe in diesem Zusammenhang ist also die richtige Berechnung und Wiedergabe der Vorgänge und Gradienten in den Wandgrenzschichten. Aus diesem Grund wurde für die Berechnungen das schon beschriebene quadratische Low-Reynolds-k- $\varepsilon$ -Turbulenzmodell mit direkter Auflösung der Grenzschicht an der Wand verwendet. Wie schon in Kap. 2.1.2 diskutiert, muss ein nichtlineares Modell benutzt werden, um die Sekundärströmungen im Kanal berücksichtigen zu können [100]. Die Verifikation des Netzes und die numerische Auflösung der Grenzschicht wurde in Kap. 2.1.5 besprochen und soll hier nicht weiter ausgeführt werden. Es wurde ein blockstrukturiertes Hexaedernetz mit 5000 Zellen pro axiale Schicht verwendet. In axiale Richtung umfasst das Netz 10 Schichten, so dass sich insgesamt 50000 Zellen ergeben. Die gerechnete Geometrie ist in Abb. 8.1 zu sehen und umfasst zwei benachbarte Zentralkanäle mit einer axialen Höhe von 2 mm. Die geringe Ausdehnung in axiale Richtung wird möglich, da auf dem oberen und unteren Rand des Strömungsgebiets teilweise-zyklische Randbedingungen mit einem festen integralen Durchtrittsmassenstrom  $\dot{m}$  definiert wurden. Aufgrund der dadurch auftretenden Periodizität des Geschwindigkeitsfeldes resultiert dieses Vorgehen in einer eingelaufenen Strömung ohne den Einlaufbereich explizit mitrechnen zu müssen. Dadurch reduziert sich die Rechenzeit enorm und ermöglicht die schnelle Durchführung von Parameterstudien mit hochauflösenden numerischen Gittern.



Abbildung 8.1: Rechennetz mit Randbedingungen zur Berechnung des axialen Druckverlustkoeffizienten.

Wie schon in Kap. 2.2.3 ausgeführt wurde, ist der axiale Druckverlustkoeffizient von der Reynoldszahl der Strömung abhängig. Bei konstanten Stoffwerten ist diese linear vom axialen Massenstrom abhängig. Aus diesem Grund werden 20 verschieden Rechnungen mit Durchgangsmassenströmen  $\dot{m}$  zwischen 0,01 kg/s und 0,20 kg/s durchgeführt. Dadurch ergibt sich eine Variation der mittleren Geschwindigkeit von 0,19 - 3,75 m/s und der Reynoldszahl von ca. 8000 – 160000. Der gewählte Variationsbereich ist damit sehr breit und deckt den tatsächlich im Reaktor auftretende Bereich von 70000 < Re < 145000 gut ab. Alle Rechnungen wurden isotherm mit konstanten Stoffwerten durchgeführt (vgl. Tab. 8.1).

## Auswertung des axialen Druckverlustkoeffizienten $C_f$

Die CFD-Rechnungen liefern die Verteilung des Drucks p und den drei Geschwindigkeitskomponenten  $u_i$  im Fluidraum. Für den eindimensionalen Druckverlust im Bündel gilt

Temperatur $T$	Druck p	Dichte $\rho$	Viskosität $\mu$
° $C$	MPa	$ka/m^3$	
280,0	25,0	776,993	99,11E-6

Tabelle 8.1: Stoffwerte für die CFD Untersuchungen nach Wagner und Kruse [107]

nach Gl. 2.56

$$\Delta p = C_f \frac{\Delta x_3}{d_h} \frac{\rho}{2} |u_3| u_3 \quad . \tag{8.1}$$

Ziel der Auswertung ist die Bestimmung von  $C_f$  mit

$$C_f = \frac{2d_h}{\rho} \frac{\Delta p}{\Delta x_3 u_3^2} \quad , \tag{8.2}$$

wobei  $d_h$  der hydraulische Durchmesser und  $\rho$  die Dichte des Wassers ist. Die Lauflänge des Fluids entspricht dem Abstand der Querschnitte in denen der Druck bestimmt wird. In diesem Beispiel entspricht das dem Abstand der Zellschwerpunkte der obersten und der untersten Zellschicht. Die mittlere Axialgeschwindigkeit  $u_3$  kann aus dem in der Randbedingung vorgegebenen Massenstrom, der Querschnittsfläche und der Dichte des Fluids bestimmt werden. Die Druckdifferenz  $\Delta p$  zwischen dem Ein- und Austritt des Kanals wird aus den CFD-Rechnungen ermittelt. Dabei ist zu beachten, dass es sich entsprechend Gl. 2.71 um gemittelte Drücke über den Unterkanalquerschnitt handelt. Die Mittelungsvorschrift für den Druck  $\{p\}$  in einen Querschnitt mit *i* Zellen in denen der lokale Druck  $p_i$  herrscht lautet

$$\{p\} = \frac{1}{\sum_{i} A_{i}} \sum_{i} (p_{i} \cdot A_{i}) \quad .$$
(8.3)

Dabei ist  $A_i$  die Einzelfläche der Zelle *i*. Durch Anwendung von Gl. 8.2 und 8.3 auf die CFD-Ergebnisse kann das in Abb. 8.2 gezeigte Diagramm erzeugt werden. Es zeigt den Verlauf des Druckverlustkoeffizient  $C_f$  über der Reynoldszahl Re (Definition Gl. A.3) in doppel-logarithmischer Darstellung. Zum Vergleich wurden die Verläufe von mehreren experimentellen Korrelation (vgl. Kap. 2.2.3) ebenfalls aufgetragen.

Die Korrelationen zeigen eine Streuung von ca. 5% um den Mittelwert. Es ist zu sehen, dass die mit CFD ermittelten Daten für kleine Reynoldszahlen innerhalb des Streubands liegen. Für höhere Reynolds-Zahlen über 30000 laufen die Ergebnisse der CFD-Rechnungen nach unten aus dem Streuband heraus und folgen damit gleichzeitig der Korrelation von Filonenko. Während der Verlauf der Korrelationen mit der Form  $C_f = \frac{C_1}{\text{Re}^{C_2}}$  im Diagram per Definition immer linear ist, haben die CFD-Ergebnisse und die Korrelation von Filonenko einen leicht gekrümmten Verlauf. Generell ist der lineare Velauf immer eine Annahme die nicht der Realität entspricht aber im definierten Reynoldszahlenbereich hinreichend genau ist. Filonenkos Formel Gl. 2.80 hingegen gibt aufgrund seiner logarithmischen Definition den realistischeren Verlauf des Druckverlustkoeffizienten wieder und wird nicht zuletzt deswegen in [17] empfohlen.



Abbildung 8.2: Vergleich ausgewählter Druckverlustkorrelation mit den Ergebnissen aus der CFD Rechnung.

Bemerkenswert ist auch der Verlauf der Korrelation von Presser, welche als einzige aus Stabbündelexperimenten gewonnen wurde aber trotzdem nicht von den anderen Daten abweicht.

Aus den Ergebnissen lassen sich folgende Schlussfolgerungen ziehen:

- Die CFD Ergebnisse liegen innerhalb der Streuung der Korrelationen und zeigen einen realistischen Verlauf. Dies spricht für die korrekte Simulation der relevanten Phänomene. Die maximale Abweichung der CFD-Ergebnisse vom Mittelwert aller Korrelation wurde mit 6,5% berechnet und liegt bei einer Reynoldszahl von 160000.
- 2. Die Unterschiede zwischen den Korrelationen für Rohrströmung und für Bündelströmung sind gering. Die Korrekturformel von Marek et al. [54] kann dennoch angewendet werden.

# 8.2 Sekundärströmungen

Eine Besonderheit der Bündelströmung ist das Auftreten von so genannten Sekundärströmungen, welche wie in allen Kanälen mit nichtkreisförmigen Querschnitt aufgrund der Anisotropie der Turbulenz in Wandnähe entstehen. Durch Verwendung des quadratischen Turbulenzmodells von [1] kann dieses Strömungsphänomen auch in den CFD Simulation wiedergegeben und dessen Intensität untersucht werden. Die Auswertung basiert dabei auf den schon in Kap. 8.1 vorgestellten Rechnungen. Ziel ist dabei die Abschätzung des Einflusses der Sekundärströmung auf das Verhalten der Hauptströmung. Die Struktur der Sekundärströmung ist in Abb. 8.3 zu sehen.



Abbildung 8.3: Vektordarstellung der  $u_1$ - $u_2$ - Geschwindigkeiten in einem Unterkanal bei Re = 160000.

Der Unterkanal ist in 8 periodische Stücke unterteilt wobei sich in jedem eine Sekundärströmungszelle befindet. Jeweils zwei Zellen befinden sich innerhalb des Spaltes zwischen zwei Brennstäben und bilden eine zirkulierende Strömung, die in der Mitte des Spaltes Masse aus dem Kernbereich des Unterkanals in den Spalt hinein transportiert und entlang der Wand wieder hinaus strömt. Die höchste Geschwindigkeit erreichen die Sekundärströmungen unmittelbar in Wandnähe. Die Begrenzung zu benachbarten Unterkanälen wird dabei nicht überschritten. Die Existenz und die Struktur der Sekundärströmungen wurde erstmals von Seale [81] nachgewiesen und in den folgenden Jahren sowohl experimentell [105] als auch numerisch [1], [47] bestätigt. Erzeugt werden die Sekundärströmungen auf die Anisotropie der Reynoldsspannungen. Der Einfluss, den die Sekundärströmungen auf die Hauptströmung haben, hängt stark von deren Intensität ab. Wie in Abb. 8.4 zu sehen, hängt die Intensität bzw. die maximale Zirkulationsgeschwindigkeit in den Sekundärströmungszellen linear von der axialen Geschwindigkeit bzw. der Reynoldszahl ab. Der Betrag der maximalen Zirkulationsgeschwindigkeit entspricht dabei relativ konstant 1,1 % der mittleren axialen Hauptströmungsgeschwindigkeit.

Durch die geringe Intensität der Strömung, werden die Auswirkungen auf die Hauptströmung im BE im Allgemeinen als eher klein eingeschätzt [72]. Aufgrund der Tatsache, dass die Sekundärströmungen nicht über die Unterkanalgrenzen hinaus gehen, ist eine Verbesserung der Durchmischung zwischen benachbarten Kanälen nicht zu erwarten. Darüber hinaus ist zu beachten, dass die Wirkungsrichtung der Strömung orthogonal zur Hauptströmung ist und somit eine relevante Beeinflussung der axialen Strömung kaum möglich ist ist. Lediglich eine Umverteilung der Strömungsgrößen innerhalb eines Unterkanals (Turbulenz, Enthalpie, Temperatur etc.) ist denkbar. So haben [1] nachgewiesen, das die Verteilung der Wandschubspannung auf der Brennstabwand nur dann richtig berechnet wird, wenn die Sekundärströmungen richtig berücksichtigt werden. Gleiches gilt für andere Phänomene, die in der Querschnittsebene des Unterkanals wirken und von ähnlicher Stärke und Intensität wie die Sekundärströmungen sind. Ein Beispiel ist der Fall von dominanter axialer Strömung mit hoher Geschwindigkeit und überlagerter, schwächerer Querströmung und soll im nachfolgenden Kapitel betrachtet werden.



Abbildung 8.4: Abhängigkeit der maximalen Zirkulationsgeschwindigkeit der Sekundärströmung von der axialen Reynoldszahl bei konstanten Stoffwerten.

# 8.3 Lateraler Druckverlustkoeffizient $C_{jk}$

Der laterale Druckverlustkoeffizient wirkt in der Querimpulsbilanz der Unterkanalgleichungen (Gl. 2.72) und bestimmt maßgeblich die Querströmung zwischen benachbarten Unterkanälen auf Grund von Druckdifferenzen. Weitere Details zur dieser Querströmung wie Ursache und Entstehung wurden schon in Kap. 1.2 bzw. 2.2.3 dieser Arbeit erläutert. Unabhängig davon wie er entsteht, bewirkt der Druckunterschied zwischen benachbarten Unterkanälen eine Druckausgleichsströmung und damit einen Massen-, Energie- und Impulstransport. Dieser muss für akkurate Unterkanalsimulationen berücksichtigt werden muss. Wie in der Einleitung zu dieser Arbeit bereits erwähnt, betrachten die experimentell ermittelten und heute gebräuchlichen Druckverlustkorrelationen stets den Fall der reinen Querströmung (z.B. aus [94] oder [89]). Lediglich St. Pierre [86] etablierte eine Korrelation die den Druckverlustkoeffizient mit dem Geschwindigkeitsverhältnis  $u_i/u_{ij}^2$  in Verbindung bringt. Die Dokumentation dieser Ergebnisse ist allerdings aufgrund des hohen Alters nicht mehr verfügbar. Es ergibt sich also Klärungsbedarf bezüglich des Einflusses der in Reaktoranwendungen meist dominanten Axialströmung auf den quer dazu stattfindenden Massenaustausch.

### Numerisches Modell

Das Netz umfasst wie in Kap. 8.1 beschrieben zwei benachbarte zentrale Unterkanäle des BE. Es handelt sich dabei um ein blockstrukturiertes Netz aus Hexaederzellen dessen Grenzschichtauflösung und Diskretisierungsfehler schon in Kap. 2.1.5 untersucht und bestimmt wurde. Wie in Kap. 8.1 wurden die benachbarten Kanäle für eine Höhe von 2 mm gerechnet und dabei 10 Zellschichten verwendet. In axiale Richtung wurden wieder teilweise zyklische Randbedingungen mit einem definierbaren integralen Durchtrittsmassenstrom  $\dot{m}_{ax}$  verwendet (Abb. 8.5). Die Querverbindung zu benachbarten Unterkanälen in  $x_2$ -Richtung wurde mit symmetrischen Randbedingungen belegt. In  $x_1$ -Richtung soll die Querströmung stattfinden, so dass hier wiederum teilweise zyklische Randbedingungen verwendet werden. In diesem Fall wird anstatt eines integralen Massenstroms allerdings eine fixe Druckdifferenz  $\Delta p_{lat}$  zwischen den zyklischen Flächenpaaren vorgegeben (Kap. 2.1.4). Zur Bestimmung des Einflusses der Axialströmung auf den Querdruckverlust werden der Axialmassenstrom  $\dot{m}_{ax}$  und die Querdruckdifferenz  $\Delta p_{lat}$  variiert.  $\dot{m}_{ax}$ nimmt dabei wie in Kap. 8.1 Werte zwischen 0,01 kg/s und 0,20 kg/s an. Für jeden dieser Axialmassenströme werden 15 verschieden laterale Druckdifferenzen  $\Delta p_{lat}$  zwischen 0 Pa und 80 Pa gerechnet und jeweils der resultierende Quermassenstrom zwischen den Unterkanälen bestimmt. Durch eine Sensibilitätsanalyse hat sich gezeigt, dass die durch die Druckdifferenz erzeugte Querströmung sehr sensibel auf die Etablierung und volle Entwicklung der Sekundärströmung ist. Da diese allerdings im Vergleich zur Hauptströmung in axiale Richtung eine geringe Geschwindigkeit hat und sich relativ langsam entwickelt, wird ein sehr kleines Konvergenzkriterium von ca.  $10^{-6}$  angewendet (Standard  $10^{-4}$ ). Die Definition eines gröberen Kriteriums hat zu Abweichungen im Ergebnis geführt, die auf nicht voll entwickelte Sekundärströmungen zurückzuführen waren.



Abbildung 8.5: Geometrie und Randbedingungen zur Berechnung des Druckverlustkoeffizienten in Querrichtung des überlagerten Strömungsfalls.

### Auswertung des lateralen Druckverlustkoeffizienten

### Strömungsstruktur bei verschiedenen Querdruckdifferenzen

In den Abbildungen 8.6 bis 8.21 ist jeweils die Strömung im Querschnitt des linken Unterkanals abgebildet, da beide Unterkanäle symmetrische Strömungen aufweisen. Die Hauptströmung in axiale Richtung hat im dargestellten Fall einen Massenstrom von 0,20 kg/s, was einer mittleren Geschwindigkeit von ca. 3,7m/s entspricht. Zur Sichtbarmachung der Strömungsstruktur wurden in regelmäßigen Abständen und an interessanten Stellen Teilchenbahnen erzeugt. Diese markieren die Strömungspfade im Unterkanal und die lokale Fließrichtung. Der Betrag der lokalen Geschwindigkeit ist dabei farbig hinterlegt. Zur genaueren Darstellung der Geschwindigkeiten wurde für jeden Plot ein individuelle Farbskala definiert. Dadurch sind die lokalen Abstufungen der Geschwindigkeit besser zu erkennen.

In Abb. 8.6 ist die Strömungsstruktur für die reine Axialströmung zu sehen. Wie schon in Kap. 8.2 gezeigt, bilden sich Sekundärströmungszellen in den das Fluid mit einer maximalen Geschwindigkeit von 1,1% der Axialgeschwindigkeit zirkuliert. Die Sekundärströmungswirbel sind zweck einfacherer Beschreibung mit Zahlen von (1) bis (8) nummeriert.

Durch Aufprägen einer geringen Druckdifferenz zwischen den Kanälen beginnt sich eine leichte Querströmung entgegen der X-Richtung einzustellen, deren Weg allerdings nicht direkt durch den Kanal, sondern um die Sekundärströmungszellen herum führt. Die beiden Sekundärströmungszellen (1) und (8), die sich im Einlassbereich der Querströmung befinden, werden durch diese leicht aus dem Spalt heraus gedrückt und spalten sie in zwei Teilströmungen auf. Begünstigt durch die Zirkulationsrichtungen der Sekundärströmung fließen diese ober- und unterhalb der Zellen an der Wand entlang. Im weiteren Verlauf treffen die Teilströme auf die Gegenströmung der Sekundärströmungszellen (2) bzw. (7) und werden um diese herum in den oberen bzw. den unteren Spalt gelenkt. Dort erfolgt eine Umkehrung der Strömung und der Weitertransport um die Wirbel (3) bzw. (6) herum, zurück in die Kanalmitte. Zwischen Zellen (4) und (5) hindurch verlässt das Fluid den Unterkanal. Der beschriebene Strömungspfad ist so kompliziert, weil die Sekundärströmungszellen den direkten Weg durch den Kanal versperren. Dies liegt daran, dass die Querströmung aufgrund der geringen Druckdifferenz nur relativ schwach ausgeprägt ist und die Zellen nicht durchdringen oder zerstören kann. Aus diesem Grund folgt die Querströmung stets der Vorzugsrichtung der Sekundärströmungszellen.

Durch weitere Erhöhung der Querdruckdifferenz (Abb. 8.8 und 8.9) auf 2,5 Pa bzw. 5,0 Pa nimmt auch die Intensität der Querströmung zu. Dies bewirkt, dass die Zellen (1) und (8) aus dem Spalt heraus in Richtung der Mitte des Unterkanals gedrückt werden, sich verkleinern und dadurch zunehmend breiter werdende Strömungskanäle in Wandnähe freigeben. Stromab nimmt die Strömung nach wie vor den Weg durch den oberen bzw. unteren Spaltbereich des Unterkanals, wobei sie zu einer starken Zersetzung der Wirbel (3) und (6) führt und diese in zunehmendem Maße in die Mitte des Unterkanals verdrängt. Die Wirbel (2) und (7) werden durch die stärker werdende Querströmung weiter in den oberen und unteren Spaltbereich hinein gedrängt und verkleinern sich ebenfalls. In noch stärkerem Masse geschieht dies mit den Zellen (4) und (5), welche durch die in der Mitte des Spaltes verlaufende Querströmung an die Brennstabwand gedrückt werden.

Bei Querdruckdifferenzen von 7,5 Pa und 10,0 Pa (Abb. 8.10 und 8.11) verstärken sich die beschriebenen Effekte, was nach und nach zur Zerstörung der Sekundärströmungszellen (3) - (6) führt. Dadurch verringert sich der Einfluss der Sekundärströmung auf die Querströmung und der Strömungsverlauf begradigt sich erheblich. Die Zellen (1) und (8) sind noch immer vorhanden und wirken wie eine künstliches Strömungshindernis in der Mitte des Unterkanals, welches von der Querströmung umflossen werden muss. Die Sekundärströmungszellen (2) und (7) sind ebenfalls noch vorhanden und verlieren aufgrund ihrer Lage im Totwassergebiet der Querströmung hinter dem Brennstab kaum an Größe.

Durch sukzessive Erhöhung der Querdruckdifferenz von 15 Pa auf 80 Pa (Abb. 8.12 bis 8.21) verschwinden zunächst die Sekundärströmungszellen (1) und (8) sowie im Folgenden auch die Strömungsbehinderung in der Mitte des Unterkanals. Die Zellen (2) und (7) wandeln sich zunehmend zu stationären Rückstromgebieten hinter dem Brennstab und vergrößern sich naturgemäß mit steigender Quergeschwindigkeit. Die Ausbildung eines typischerweise instationären Nachlaufs wird durch die starke axiale Strömung verhindert, konnte allerdings bei Testrechnungen ohne Axialströmung beobachtet werden. Darüber hinaus ergeben sich zunächst kaum noch Änderungen in der Strömungsstruktur.

Erst ab einer Querdruckdifferenz von 35Pa entsteht im oberen und unteren Spalt je ein zweites, dem Rückstromwirbel entgegengesetzt drehendes Zirkulationsgebiet, welches sich mit zunehmender Intensität der Querströmung vergrößert. Durch das Anwachsen der Wirbelsysteme im Todwassergebiet des oberen und unteren Spaltbereichs bei hohen Querströmungsgeschwindigkeiten, engt sich der effektive Strömungskanal der Querströmung ein, so dass die tatsächlich verwendete Kanalbreite wenig größer als die Spaltbreite am engsten Querschnitt zwischen den Brennstäbe ist. Dadurch ist die Strömung für hohe Quergeschwindigkeiten dem Fall einer Strömung in einem geraden Kanal nicht unähnlich. Diese Beobachtung entspricht auch den Schlussfolgerungen von [41] und [24].



Petrag der Geschwindigkeit 0,044 0,042 0,032 0,036 0,0

Abbildung 8.6: Druckdifferenz  $\Delta p = 0Pa$ .

Betrag der Geschwindigkeit

Abbildung 8.8: Druckdifferenz  $\Delta p = 2,5Pa$ .

Abbildung 8.7: Druckdifferenz $\Delta p = 1.0 Pa.$ 



Abbildung 8.9: Druckdifferenz  $\Delta p = 5,0Pa$ .



Abbildung 8.10: Druckdifferen<br/>z $\Delta p=7,5Pa.~$ Abbildung 8.11: Druckdifferen<br/>z $\Delta p=10,0Pa.~$ 



Abbildung 8.12: Druckdifferenz  $\Delta p = 15 Pa0$ .

Abbildung 8.13: Druckdifferenz  $\Delta p = 20Pa$ .





Abbildung 8.14: Druckdifferenz  $\Delta p = 25Pa$ .

Abbildung 8.15: Druckdifferenz $\Delta p=30 Pa.$ 

Betrag der Geschwindigkeit



Abbildung 8.16: Druckdifferenz $\Delta p=35Pa.$ 



Abbildung 8.17: Druckdifferen<br/>z $\Delta p=40 Pa.$ 



Abbildung 8.18: Druckdifferenz  $\Delta p = 50 Pa$ .

Abbildung 8.19: Druckdifferenz  $\Delta p = 60Pa$ .



Abbildung 8.20: Druckdifferenz  $\Delta p = 70 Pa$ .

Abbildung 8.21: Druckdifferenz  $\Delta p = 80Pa$ .

### Korrelation

Aus den beschriebenen Beobachtungen der Strömungsstruktur senkrecht zur dominanten Axialströmung im Unterkanal ist ersichtlich, dass die Sekundärströmung die Querströmung und den damit verbundenen Druckverlust stark beeinflusst. Wie schon in 8.2 gezeigt sind die Sekundärströmungen ihrerseits stark von der Axialgeschwindigkeit im Unterkanal abhängig, wodurch sich automatisch eine Verknüpfung von Axialströmung, Sekundärströmung und Querdruckverlust ergibt. Zur Evaluierung dieser Abhängigkeit wird für die Rechnungen jeweils der Druckverlustkoeffizient nach Gl. 2.61 bestimmt. Dadurch ergeben sich für jeden der 20 eingestellten Massenströme zwischen m = 0,01 kg/s und m =0,20 kg/s jeweils 15 Werte für den Druckverlustkoeffizienten  $C_{jk}$ . Aufgrund von Gl. 2.61 ist für die Druckdifferenz  $\Delta p$  jeweils der mittlere Druck in den Unterkanälen maßgeblich. Zur Mittelung des Drucks über den Querschnitt des linken bzw. des rechten Unterkanals kann die im vorangehenden Kapitel schon benutzte Gl. 8.3 verwendet werden. Aufgrund der axialen Symmetrie der Rechnung entspricht dies gleichzeitig dem volumengemittelten Druck, wie er im Unterkanalansatz verwendet wird. Der Quermassenstrom wird auf der Grenzfläche zwischen den beiden Unterkanälen im engsten Querschnitt des Spalts bestimmt. Die so ermittelten Druckverlustkoeffizienten sind in Abb. 8.22 über die **laterale** Reynoldszahl  $Re_{lat}$  doppellogarithmisch aufgetragen. Der Übersichtlichkeit halber wur-



Abbildung 8.22: Verlauf des Druckverlustkoeffizienten für verschieden Axialmassenströme m im Vergleich zur Korrelation von [28]

den die für einen bestimmten Axialmassenstrom berechneten Werte durch Kurven verbunden. Jede der Kurven ist also das Ergebnis von 15 Rechnungen mit unterschiedlichen Querdruckdifferenzen bei einem konstanten axialen Massenstrom. Zum Vergleich ist die von Gunter und Shaw [28] ermittelte Korrelation ebenfalls eingetragen, welche aufgrund ihrer mathematischen Form gemäß Gl. 8.4 einen ideal linearen Verlauf in der doppellogarithmischen Auftragung aufweist. Vergleiche mit experimentellen Daten von [24] für reine Querströmung zeigen jedoch gerade im Reynoldsbereich zwischen  $10^4 < Re_{lat} < 10^5$ einen nichtlinearen Übergangsbereich, der dem Verlauf des Druckverlustkoeffizienten für den geringsten axialen Massenstrom m = 0,01 kg/s ähnelt (vgl. 1.6)

Für höhere axiale Massenströme verschiebt sich dieser Übergangsbereich zunehmend in Richtung hoher lateraler Reynoldszahlen. Dadurch bekommt der Druckverlustkoeffizient im interessierenden reaktortypischen Bereich (hohe Axialmassenströme und geringe Quergeschwindigkeiten) mit guter Näherung einen linearen Verlauf, der in der Form

$$C_f = \frac{C_1}{\operatorname{Re}^{C_2}} \tag{8.4}$$

beschrieben werden kann. Dies ist die am häufigsten verwendete Form der Näherung des Druckverlustkoeffizienten und wird als Basisfunktion zur Beschreibung der CFD Ergebnisse genutzt. Durch lineare Näherung der Kurven im doppellogarithmischen Diagramm (Abb. 8.22) können die Koeffizienten  $C_1$  (y-Achsenabschnitt) und  $C_2$  (Steigung der Geraden) bestimmt werden.

$$\log C_f = \log \left(\frac{C_1}{\operatorname{Re}^{C_2}}\right) = -C_2 \cdot \log Re + \log C_1 \tag{8.5}$$

Werden die Ergebnisse über die axiale Definition der Reynoldszahl, welche im Falle konstanter Stoffwerte proportional zur axiale Geschwindigkeit ist, aufgetragen, dann ergeben sich die in Abb. 8.23 und Abb. 8.24 gezeigten Verläufe. Die Kurven zeigen eine klare Ab-



Abbildung 8.23: Koeffizient  $C_1$  aus Gl. 8.4 für unterschiedliche Axialmassenströme.

hängigkeit der Koeffizienten  $C_1$  und  $C_2$  von der axialen Strömungsgeschwindigkeit. Die Näherungsfunktionen, die diese Abhängigkeit der Faktoren von der axialen Reynoldszahl beschreiben sind ebenfalls in den Diagrammen 8.23 bzw. 8.24 abgebildet. Im Falle des Faktors  $C_1$  ist einen quadratische Näherung mit:

$$C_1 = 1,612 \cdot 10^{-7} \cdot \operatorname{Re}_{ax}^2 + 1,060 \cdot 10^{-3} \cdot \operatorname{Re}_{ax} + 1,920$$
(8.6)

zweckmäßig. Der Verlauf von  $C_2$  kann durch Überlagerung einer Exponentialfunktion mit einer Geradenfunktion an genähert werden.

$$C_2 = -0,616 \cdot e^{(-9,0\cdot10^{-5} \cdot \operatorname{Re}_{ax})} + 1,378 \cdot 10^{-6} \cdot \operatorname{Re}_{ax} + 0,748$$
(8.7)

Aufgrund des Mangels an experimentellen Daten für diesen Strömungsfall, ist eine Validierung der Ergebnisse derzeit nicht möglich. Allerdings liegen die Ergebnisse der CFD Berechnung im Bereich niedriger Axialgeschwindigkeiten nahe an der Korrelation von Gunter und Shaw (vgl. Abb. 8.22) bzw. zeigen den für reine Querströmung typischen Verlauf [24]. Dies spricht für die Vertrauenswürdigkeit der Ergebnisse.



Abbildung 8.24: Koeffizient  $C_2$  aus Gl. 8.4 für unterschiedliche Axialmassenströme.

# 8.4 Turbulenter Austauschkoeffizient $\beta$

Der turbulenten Austauschkoeffizient  $\beta$  taucht im Unterkanalansatz in Gl. 2.86 auf und modelliert den turbulenten Austausch von Impuls und Enthalpie zwischen benachbarten Unterkanälen eines Bündels. Dabei ist der Begriff "turbulent" streng genommen falsch, da der Austausch nicht nur über turbulente Fluktuation der Strömungsgrößen passiert, sondern zusätzlich makroskopische Wirbelsysteme im Unterkanal beteiligt sind. Diese befördern in großem Maße Fluid von der Mitte des Unterkanals durch den Spalt in die benachbarten Unterkanäle. Der Begriff des "turbulenten" Austauschs wird dennoch weiter benutzt, weil beide Beiträge ohne Vorzugsrichtung wirken. D.h. der netto Stoffaustausch durch beide Effekte ergibt null (vgl. Gl. 2.41).

### Numerisches Modell

Im Vergleich zu den vorigen CFD Rechnungen müssen also in diesem Fall instationäre Rechnungen durchgeführt werden. Ein weiterer Unterschied ist, dass die Wirbel wie schon erwähnt durch Geschwindigkeitsgradienten in der Strömung erzeugt und mit ihr transportiert werden. Damit die Wirbel sich entwickeln können, muss ein wesentlich längeres Stück des Unterkanals in Hauptströmungsrichtung vernetzt und gerechnet werden. Beim vorliegenden Fall beträgt diese Länge 110 mm, was ca. 32 hydraulischen Unterkanaldurchmessern entspricht.



Abbildung 8.25: Geometrie und Randbedingungen zur Berechnung des turbulenten Austauschkoeffizienten.  $x_3$ -Richtung skaliert M 1:55.

Um den numerischen Aufwand in akzeptablen Grenzen zu halten wurde auf eine direkte Auflösung der Geschwindigkeitsgrenzschicht an der Brennstabwand verzichtet und stattdessen ein logarithmisches Wandgesetz verwendet (vgl. Kap. 2.1.4). Die Dicke der Zellschicht auf der Wand wurde dementsprechend auf Werte des dimensionslosen Wandabstands von  $30 < y^+ < 100$  angepasst. An der Blockstruktur des Netzes wurde festgehalten und der Querschnitt des Fluidbereichs umfasst wie bei den anderen Rechnungen zwei mittlere Unterkanäle des BE. In Hauptströmungsrichtung wurden teilweise zyklische Randbedingungen mit einem integralen Massenstrom über die Querschnittsfläche von  $\dot{m}$ = 0,160 kg/s verwendet, was einer mittleren Axialgeschwindigkeit von  $u_3 = 3,0$  m/s und einer Reynoldszahl von ca.  $1, 3 \cdot 10^5$  entspricht. Die Grenzflächen zu den nicht modellierten benachbarten Unterkanälen wurden als zyklische Randbedingung modelliert. Um eine korrekte zeitliche Diskretisierung der Strömung zu gewährleisten, wurde unter Beachtung des Stabilitätskriteriums von Courant-Friedrich-Levy Gl. A.8 ein Zeitschritt von  $\Delta t =$ 0,0001 s definiert. Dabei wurden die Untersuchungen von Baglietto [2] berücksichtigt, die ergaben, dass bei dem vorliegenden Strömungsfall kleine CFL < 1 empfehlenswert sind. Das verwendete Crank-Nicolson-Verfahren zur zeitlichen Diskretisierung wurde in Kap. 2.1.3.1 kurz beschrieben. Insgesamt wird eine Zeit von t = 2 s gerechnet. Für die räumliche Diskretisierung wurde analog zu den anderen CFD-Rechnungen das QUICK-Verfahren verwendet.

### Auswertung der instationären Rechnung

### Frequenz und Struktur der Strömung

In Abb. 8.26 ist die Geschwindigkeit der Querströmung im Mittelpunkt des Spaltes über die Zeit t aufgetragen. Zu Beginn des Berechnungszeitraumes ist die Strömung zunächst stationär und benötigt einige hundert Zeitschritte bis eine Destabilisierung dieses Zustands eintritt. Das ist darauf zurückzuführen, dass von einer stark auskonvergierten, stationär berechneten Startlösung (Residuum ca.  $10^{-5}$ ) ausgegangen wurde. Es folgt eine Einlaufphase mit zunehmend stärker werdender, oszillierender Querströmung, die ungefähr bis zur Zeit t = 0.5 s reicht. Danach kann die Oszillation als eingelaufen betrachtet werden, da zwar die Amplitude einer Veränderung von Schwingung zu Schwingung unterliegt, aber keine kontinuierlicher Anstieg oder Abnahme über einen längeren Zeitraum mehr stattfindet. Der Mittelwert der maximalen Amplitude wurde im eingelaufenen Bereich zwischen 0.5 s < t < 2.0 s zu  $\overline{u_1} = 0.25$  m/s ermittelt. Dies entspricht ca. 8,3 % der mittleren Axialströmung von 3 m/s.



Abbildung 8.26: Verlauf der Quergeschwindigkeit in der Mitte des Spaltes zwischen den Unterkanälen.

In Abb. 8.27 ist das Vektorfeld der Geschwindigkeit in einem Längsschnitt durch den Verbindungsspalt zwischen den Unterkanälen zu sehen. Dieses Strömungsbild wird sichtbar, wenn die axiale Fortbewegungsgeschwindigkeit der Wirbelzentren vom Geschwindigkeitsfeld in der Schnittebene subtrahiert wird und entspricht damit der Ansicht eines sich mit der axialen Hauptströmung mit bewegenden Betrachters. Es sind zwei sich gegenläufig drehende Wirbel zu sehen, deren Zentren sich in der Nähe der Spaltmitte befinden. Da die Wirbel durch den Gradienten der Axialgeschwindigkeit zwischen der Hauptströmung und der Spaltströmung angetrieben bzw. erzeugt werden, kann darauf geschlossene werden, dass im Uhrzeigersinn drehende Wirbel aus dem rechten Unterkanal stammen und umgekehrt gegen den Uhrzeigersinn drehende Wirbel aus dem linken Unterkanal [57]. Durch ihre Lage im Spalt erzeugen sie einen starken Stoffaustausch zwischen den beiden Unterkanälen und bewirken so den Hauptanteil des turbulenten Austausches. Dadurch, dass es



Abbildung 8.27: Wirbelstruktur im Spalt zwischen den Unterkanälen.

sich nicht nur um ein reines Querströmungsphänomen handelt, ist analog zur Schwingung in Querrichtung auch in der Axialkomponente eine Oszillation zu beobachten. Die Signale der Quer- bzw. der Axialgeschwindigkeit im Spalt sind nochmals in Abb. 8.28 zu sehen, wobei zwecks Übersichtlichkeit nur der Zeitraum 2,4 s < t < 2,5 s aufgetragen ist. Bei beiden Signalen ist deutlich zu sehen, dass es sich nicht um eine homogene Oszillation mit einer bestimmten Frequenz handelt, sondern um eine Überlagerung unterschiedliche Frequenzen und Amplituden. Diese Beobachtung deckt sich gut mit den Ergebnissen von [34]. Die dominierende Frequenz ist dabei ein charakteristisches Merkmal der pulsierenden Querströmung und kann zur Validierung der Rechnung benutzt werden. Als Referenz dient eine Korrelation von Möller [57] die durch Experimente an quadratisch angeordne-



Abbildung 8.28: Oszillation der Quergeschwindigkeit (links) und der Axialgeschwindigkeit (rechts) im Spalt.

ten Stabbündeln mit verschiedenen p/d-Verhältnissen und Reynoldszahlen erstellt wurde.

$$Sr^{-1} = \left(\frac{d \cdot f_d}{u_3}\right)^{-1} = 19.5 \cdot \frac{s_{ij}}{d} + 0.57$$
(8.8)

Die Strouhal-Zahl Sr wird normalerweise zur Beschreibung der instationären Wirbelablösung bei der Umströmung von Körpern benutzt (z.B. Kármánsche Wirbelstraße). In diesem Fall beschreibt sie jedoch die charakteristische Wirbelbildung im Spalt und ist deshalb mit der dominanten Frequenz der Wirbel  $f_d$ , dem Durchmesser der Brennstäbe d und der mittleren Axialgeschwindigkeit in den Unterkanälen des Stabbündels  $u_3$  definiert. Auf der rechten Seite von Gl. 8.8 stehen das Verhältnis aus Spaltweite  $s_{ij}$  und dem Brennstabdurchmesser d. Anwendung der Gleichung auf die gerechnete BE-Geometrie ergibt eine dominante Wirbelfrequenz von

$$f_d = 107, 3 \ Hz \quad . \tag{8.9}$$

Um einen Vergleich zu ermöglichen, muss die dominante Wirbelfrequenz aus dem zeitlichen Signal der CFD Rechnung bestimmt werden. Dafür kommt eine "Fast Fourier Transformation" (FFT) zur Anwendung. Ergebnis der FFT für die Querströmung im Spalt ist das in Abb. 8.29 gezeigte Diagramm, welches die Signalstärke (Leistung) der Schwankungsbewegung in den einzelnen Frequenzbereichen beschreibt. Der Verlauf der Kurve zeigt in der doppellogarithmischen Auftragung einen leichten Anstieg der Signalstärke schon ab einer Frequenz von ca. 60 Hz. Dieser Anstieg resultiert in einem ausgeprägten absoluten Maximum bei 107 Hz. Anschließend ist eine Abnahme der Stärke bis zu eine Frequenz von ca. 150 Hz zu beobachten. Die dominante Frequenz der Wirbel liegt bei  $f_d = 107$  Hz wobei aufgrund des quasi-chaotischen Charakters der Wirbel im Kanal eine Streuung der Frequenz feststellbar ist.

Zusätzlich zur Frequenz der Wirbel ist auch noch Größe und Fortbewegungsgeschwindigkeit der Wirbel interessant. Um diese zu Analysieren muss zusätzlich zum zeitlichen Signal das räumlich Signal der Quergeschwindigkeit im Spalt untersucht werden. Dieses



Abbildung 8.29: Leistung bzw. Stärke des Signals in den relevanten Frequenzbereichen aus der FFT-Analyse.

ist in Abb. 8.30 zu sehen, wo die Quergeschwindigkeit in der Spaltmitte für den Zeitschritt t = 2,250 s über die gesamte berechnete axiale Höhe von  $x_3 = 110$  mm aufgetragen ist. Aus der Struktur der Strömung in Abb. 8.27 ist bekannt, dass jeder Nulldurchgang des Signals dem Mittelpunkt eines Wirbels entspricht, d.h. jede Schwingungsperiode umfasst zwei Wirbeln. Durch Kenntnis der mittleren Wellenlänge  $\lambda_w$  des Signals kann dementsprechend die mittlere Größe der Wirbel bestimmt werden. Dies geschieht analog zur Frequenzbestimmung durch Verwendung einer FFT. Da das Geschwindigkeitssignal in Abb. 8.30 nicht über die Zeitachse, sondern über die axiale Koordinate  $x_3$  in [mm] aufgetragen ist, erhält man auf der Abszisse des Diagramms in Abb. 8.31 den Kehrwert der Wellenlänge  $1/\lambda_w$ . Auf der Ordinate ist die Amplitude der Schwingung in der jeweiligen Wellenlänge aufgetragen.

Das Maximum des gezeigten Wellenlängenspektrums liegt bei einem Wert von  $1/\lambda_w = 0,0354$ . Dies entspricht einer Wellenlänge von  $\lambda_w = 28,27$  mm und somit einem mittleren Wirbeldurchmesser von  $d_w = 14,14$  mm. Analog zur zeitlichen FFT ist eine Streuung der Werte zu beobachten. Diese bedeutet, dass erwartungsgemäß Wirbel verschiedener Größe und geometrischer Position im Spaltmittelpunkt vorkommen. Die mittleren Fortbewegungsgeschwindigkeit der Wirbelzentren  $u_w$  in Hauptströmungsrichtung berechnet sich zu

$$u_w = f_d \cdot \lambda_w = 3,03m/s$$
 . (8.10)

Dies liegt in guter Übereinstimmung mit der durch die Randbedingung festgelegten mittleren Axialgeschwindigkeit von 3,0 m/s. Aufgrund fehlender Experimente und Korrelationen ist eine Validierung der berechneten Daten für Wirbelgröße und Transportgeschwindigkeit zur Zeit nicht möglich.



Abbildung 8.30: Verlauf der Quergeschwindigkeit über die Kanalhöhe in der Mitte des Spaltes.



Abbildung 8.31: Bestimmung der Wellenlänge durch eine FFT des ortsabhängigen Signals.

Die Ergebnisse der FFT Analysen des zeitabhängigen Signals zeigen eine gute Ubereinstimmung mit der Frequenzvorhersage der Korrelation Gl. 8.8. Zusätzlich entspricht auch der generelle Verlauf der Kurve in Abb. 8.27 den aus der Literatur bekannten Verläufen (Abb. 1.8) und experimentellen Ergebnissen. Problematisch bei der Bewertung des gezeigten Frequenzspektrums ist der Bereich hoher Frequenzen. Hier ist eine Aussagekraft des Diagramms nicht gegeben, da die Basis des gezeigten Spektrums eine CFD Berechnung mit zeitlich gemittelten Gleichung (Reynoldsgleichungen) ist. Durch die zeitliche Mittelung bei der Herleitung der Reynoldsgleichungen (Kap. 2.1.1) findet eine Filterung der Gleichungen statt, wobei kleinskalige Schwankungen der Geschwindigkeit modelliert (Turbulenzmodell) und großskalige Schwankungen der Geschwindigkeiten durch den instationären URANS-Ansatz berechnet werden können. Anders als bei der Berechnung mit anderen numerischen Methoden wie der Large Eddy Simulation (LES) wo die Trennung zwischen grobskaligen und kleinskaligen Schwankungen durch Filterung der Gleichungen genau bestimmt ist, findet der Übergang bei der URANS ab einer nicht genau definierten Frequenz bzw. Größe statt. Somit kann keine genau Aussage darüber getroffen werden bis zu welcher Frequenz die gezeigten Spektren physikalisch richtig sind. Genauere Aussagen darüber wären z.B. durch eine LES-Rechnung möglich, wobei diese aufgrund der hohen Komplexität - insbesondere bezüglich der instationären Randbedingungen - und der großen Rechenzeit im Rahmen dieser Arbeit nicht durchgeführt werden konnte.

### Bestimmung des turbulenten Austauschkoeffizienten

Zur Auswertung der effektiven Durchmischung wird ein zusätzliches passives Skalar (Marker) definiert und dessen Ausbreitung im Fluidraum durch die Berechnung einer zusätzlichen Transportgleichung (Gl. 2.10) simuliert. Passiv bedeutet, dass die Konzentration des Skalars keine Auswirkungen auf die Hauptströmung hat und zusätzlich als masselos definiert wird, so dass es keinerlei Trägheit aufweist und der Strömung ohne Schlupf folgt. Um ausschließlich den Stofftransport durch turbulente und konvektive Effekte zu bestimmen, wurde der molekulare Diffusionsterm von Gl. 2.10 deaktiviert indem der Diffusionskoeffizient D = 0,0 gesetzt wurde. Der turbulente Stofftransport wurde gemäß Gl. 2.18 als proportional zur Wirbelviskosität  $\mu_t$  gesetzt. Dabei wurde eine turbulente Schmidt-Zahl von  $Sc_t = 0,9$  verwendet. Wie schon in Kap. 2.1.2 erwähnte ist aus Experimenten jedoch bekannt, dass die Annahme einer konstanten turbulenten Schmidt-Zahl eine Vereinfachung darstellt. Darüber hinaus ist dieses Stofftransportmodell isotrop, während die turbulenten Geschwindigkeitsschwankungen in der Bündelströmung stark anisotrop sind und durch das gewählte Turbulenzmodell auch entsprechend berücksichtigt werden.

Zur Ermittlung des turbulenten Austauschkoeffizienten wird die Konzentration des Markers C im Querschnitt des Unterkanals k bei einer axialen Höhe von  $x_3 = 10$  mm auf  $C_k = 1,0$  gesetzt (grüne Fläche in Abb. 8.32). Auf gleicher Höhe wird im Querschnitt des Unterkanal j die Konzentration  $C_j = 0,0$  definiert (rote Fläche). Durch die Strömung wird der Marker nun sowohl in axiale Richtung, als auch durch turbulente Effekte und die pulsierende Querströmung in den benachbarten Unterkanal j transportiert. Damit zyklische Randbedingungen in axiale Richtung verwendet werden können, muss der Marker am Ende des berechneten Kanals zu null gesetzt werden.

Durch Auswertung der Konzentrationsverteilung  $C_j(x_3)$  und  $C_k(x_3)$  an einem Austrittsund einem Eintrittsquerschnitt eines axialen Ausschnitts der Geometrie kann der Trans-


Abbildung 8.32: Quelle und Senke der Markerkonzentration C, Einheiten [mm] [101].

port in Querrichtung durch eine Bilanz bestimmt werden. Dabei wir jeweils die mittlere Konzentration über die Querschnittsfläche des Unterkanals durch Anwendung von Gl. 8.3 ermittelt. Die Bilanz lässt sich für den Unterkanal j der zwei benachbarten Unterkanäle schreiben als

$$\underbrace{\frac{\partial \left(\dot{m}_{j} \cdot C_{j}(x_{3})\right)}{\partial x_{3}}}_{axial} + \underbrace{w_{kj}'(x_{3}) \cdot C_{j}(x_{3})}_{k \text{ nach } j} - \underbrace{w_{jk}'(x_{3}) \cdot C_{k}(x_{3})}_{j \text{ nach } k} = 0 \quad . \tag{8.11}$$

Für die mittleren Axialmassenströme und den turbulenten Austausch gilt für einphasige Fluide

$$\dot{m}_j = \dot{m}_k = \dot{m}$$
  $w'_{kj} = w'_{jk} = w'$ . (8.12)

Dadurch wird Gl. 8.11 zu

$$\frac{\partial \left(C_j(x_3)\right)}{\partial x_3} + \frac{w'}{\dot{m}} \cdot \left(C_j(x_3) - C_k(x_3)\right) = 0 \quad . \tag{8.13}$$

Für den Fall eines Kontrollraums mit zwei Unterkanälen muss die Gesamtmasse des Markers konstant bleiben. Dadurch können die Konzentrationen nach eine bestimmten Lauflänge  $x_3$  in Abhängigkeit ihrer Anfangswerten ausgedrückt werden.

$$C_{j}(x_{3}) - C_{j,0} = -(C_{k}(x_{3}) - C_{k,0})$$

$$C_{j}(x_{3}) = -C_{k}(x_{3}) + C_{k,0} + C_{j,0}$$

$$(8.14)$$

Der Index <sub>0</sub> bedeutet, dass es sich um Größen am Eintritt eines Kontrollvolumens handelt. Einsetzen in Gl. 8.13 liefert nach Trennung der Variablen und Integration:

$$w' = -\frac{\dot{m}}{2\Delta x_3} \ln\left(\frac{2C_j(x_3) - C_{j,0} - C_{k,0}}{C_{j,0} - C_{k,0}}\right) \quad . \tag{8.15}$$

Die Konzentration  $C_j(x_3)$  ist dabei als Konzentration am Austritt eines Kontrollvolumens zu verstehen. Durch Bestimmung der Konzentrationen an den Stellen  $x_3 = (10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90, 100)$  in den Unterkanälen j und k entstehen 9 Kontrollvolumen an den jeweils durch Anwendung von Gl. 8.15 die lokale Mischrate w' bestimmt wird. Unter Verwendung der Tatsache, dass die Mischrate  $w' = G'_{jk} \cdot s_{jk}$  mit der Mischungsmassenstromdichte über die Spaltweite  $s_{jk}$  verknüpft ist, kann aus Gl. 2.86 der turbulente Austauschkoeffizient  $\beta$  berechnet werden.

Der Verlauf von  $\beta$  ist in Abb. 8.33 zu sehen. Zu Beginn der Auswertestrecke im Bereich  $x_3 < 35 \ mm$  ist ein deutlicher Einlaufeffekt zu erkennen. Dies ist darauf zurückzuführen, dass an der Grenzfläche zwischen den Unterkanälen Fluid mit der Markerkonzentration C = 1,0 unmittelbar neben Fluid mit der Markerkonzentration C = 0,0 zu finden ist. Dies bedeuten einen unphysikalisch hohen Konzentrationsgradienten und führt selbst bei kleinen Transportbewegungen zu sehr hohen Mischraten. Nach einiger Zeit klingt die-



Abbildung 8.33: Turbulenter Austauschkoeffizient  $\beta$  über die Lauflänge  $x_3$ .

ser Effekt allerdings ab und die ermittelten Werte für  $\beta$  nähern sich einem berechneten Mittelwert von  $\beta = 0,01834$ . Wendet man die in Kap. 2.2.3 beschrieben Korrelation zur

Bestimmung der Mischrate w' und berechnet daraus den turbulenten Austauschkoeffizienten dann ergibt sich  $\beta = 0,00575$ . Dies bedeutet für den aus der CFD berechneten Wert von  $\beta$  eine Überhöhung um den Faktor 3,14.

Aus den durchgeführten instationären CFD-Berechungen zur Ermittlung des turbulenten Austauschkoeffizient lassen sich folgende Schlussfolgerungen ziehen:

- Die Oszillationsfrequenz der berechneten Querströmung wird im Vergleich zur gültigen Korrelation von [57] gut wiedergegeben. Analog zu den Experimenten zeigt auch die CFD eine Streuung um diesen Wert.
- Zur weiteren Analyse der turbulenten Quervermischung wurde die Transportgleichung eines zusätzlichen Markers gelöst. Aus der Verteilung des Markers nach einer bestimmten Lauflänge, gelang die Bestimmung des turbulenten Austauschkoeffizienten, der eine Abweichung um den Faktor 3,14 von der gültigen Korrelation zeigt.
- Die starke Überschätzung des turbulenten Austauschs durch die CFD Rechnung kann durch mehrere Faktoren hervorgerufen werden. Zum einen kann die bereits erwähnte Modellierungsschwäche des URANS-Ansatzes im Vergleich zu LES eine Rolle spielen (d.h unbekannte Trennung zwischen instationärem Phänomen und turbulenter Fluktuation). Weiterhin wird der turbulente Stofftransport in heutigen CFD-Codes mit einem stark vereinfachten Modell proportional zum turbulenten Impulsaustausch gesetzt (Proportionalitätskonstante Sc<sub>t</sub>=0,9). Aus Experimenten ist allerdings bekannt, dass in der realen Stabbündelströmung der turbulente Wärme-und Stofftransport nicht proportional zum turbulenten Impulstransport ist [44]. Als weiterer Grund für die hohe Abweichung könnte zudem die Darstellung der beiden Unterkanäle als ein in alle Richtungen zyklisches Modell sein. Dadurch werden eventuell Symmetrien und Periodizitäten erzwungen, welche in der realen Stabbündelströmung nicht vorhanden sind. Zur Überprüfung dieser Vermutung sind zusätzliche Rechnungen mit einer stark vergrößerten Geometrie notwendig die im Rahmen dieser Arbeit leider nicht mehr durchgeführt werden konnten.

## 9 Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wurde erstmals ein mit überkritischem Wasser gekühlter Druckwasserreaktor (SDWR) konzipiert und untersucht. Dies umfasst nach einer ersten thermodynamischen Analyse und Optimierung des Konzepts unter den Randbedingungen 380 °C Kernaustrittstemperatur und 25 MPa Systemdruck hauptsächlich eine Analyse der sicherheitsrelevanten Vorgängen im Reaktorkern. Zu dessen gekoppelter thermohydraulischneutronischer Auslegung wurde der Unterkanalcode STAFAS modifiziert, erweitert und mit dem Neutronikcode MCNP5 gekoppelte. Durch erstmalige Anwendung dieser Methode auf den Kern des SDWR, konnten die positiven Eigenschaften des SDWR-Konzepts nachgewiesen werden und eine erste Bewertung des BE-Design und des Reaktorkonzepts vorgenommen werden. Darüber hinaus wurde durch Anwendung einer neuen Interpolationsmethode die lokale Stableistung aus der grob auflösenden Kernberechnung bestimmt werden. Dies erlaubte erstmals die detaillierte thermohydraulische Analyse kritischer BE im Kern auf Unterkanalebene sowie die Berechnung sicherheitsrelevanter Parameter wie Hüllrohr-, Brennstoff- und Kühlmitteltemperatur unter realistischen Reaktorbedingungen. Tiefer gehende thermohydraulische Analysen beschäftigten sich mit der Anwendung von CFD (RANS und URANS) zur Simulation der Kühlmittelströmung im BE. Anhand bekannter und dokumentierter Strömungsfälle konnte gezeigt werden, dass die CFD gute Ergebnisse bei der Vorhersage von stationären Strömungsphänomenen im Stabbündel erzielt. Bei der Untersuchung instationärer Effekte zeigte die CFD trotz genereller Berücksichtigung der maßgeblichen Strömungsphänomene relativ große Abweichungen zum Verifikationsfall. Obwohl die Ursachen dafür noch nicht abschließend geklärt werden konnten, steht fest, dass die CFD das Potential hat, bei der Entwicklung neuer Reaktorkonzepte eine tragende Rolle zu spielen.

Als erster Schritt wurde in dieser Arbeit ein passendes Anlagenlayout zu den Randbedingungen Kühlmitteltemperatur 380 °C und Systemdruck 25 MPa erdacht. Dabei erwies sich zur Realisierung des Konzepts ein Druckwasserreaktorprinzip mit getrenntem Primär- und Sekundärkreislauf als am besten geeignet. Eine erste thermodynamische Analyse des Systems, bei der die wesentlichen Eckdaten des SDWR definiert und hinsichtlich eines guten Wirkungsgrades optimiert wurden, zeigte Verbesserungsmöglichkeiten im Vergleich zu konventionellen Anlagen auf. Ermittelt wurden diese durch Vergleich des SDWR-Konzepts mit einem Referenzsystem, welches im Wesentlichen dem eines modernen Druckwasserreaktors wie dem EPR entsprach. Aufgrund der höheren Kernaustrittstemperatur (KAT) von 380 °C ergab sich eine Verbesserung des Wirkungsgrades um 2 Prozentpunkte und damit Vorteile bezüglich Brennstoffkosten und Betrieb der Anlage. Zudem führt die hohe Aufheizung von ca. 100 °C im Kern zu einer starken Reduzierung des primär- und sekundärseitigen Massenstroms und damit zur Verkleinerung der Komponenten in den Kreisläufen (Pumpen, Turbinen, Rohre etc.). Dieser Effekt zeigt sich besonders auf der Primärseite, wo eine Materialeinsparung von ca. 58% bei den Primärkreiskomponenten abgeschätzt werden konnte (ohne RDB). Auf der Sekundärseite resultiert die hohe KAT in einer Erhöhung der Frischdampftemperaturen im Dampferzeuger, der statt gesättigten Dampfes nun überhitzten Dampf auf einem Temperaturniveau von ca. 370 °C produziert. Daraus ergibt sich der Vorteil, dass durch die hohen Frischdampftemperaturen ein Betrieb der Hochdruckturbine (HD) im Nassdampfgebiet nicht notwendig ist. Dies schont einerseits die HD und spart zusätzlich Anlagenkomponenten wie Wasserabscheider und Dampftrockner vor der nachgeschalteten Zwischenüberhiztung ein.

Nach Darstellung das wirtschaftliche Potential des SDWR-Konzept in Kap. 4, beschäftigt sich der Großteil dieser Arbeit mit detaillierteren Analysen des Reaktorkerns. Dazu wurde basierend auf den Konzepten von 33 ein Kernmodell für gekoppelte thermohydraulische und neutronische Analysen entwickelt. Der Schwerpunkt lag dabei in der thermohydraulischen Modellierung des Kerns durch Modifikation des vorhandenen Unterkanalprogramms STAFAS. Im Detail wurde unter anderem die Möglichkeit zur Berechnung mehrerer unabhängiger Moderatorkästen sowie zur Kontrolle der Massenstromverteilung durch Blenden vorgesehen. Durch Erweiterung des Programms konnten darüber hinaus alle benötigten Funktionen für die automatische Kopplung mit dem kommerziellen Neutronikprogramm MCNP5 implementiert werden. Dies umfasst hauptsächlich die automatischen Generierung des MCNP5-Kernmodells mit korrekter Zuordnung der in STAFAS berechneten Kopplungsvariablen (Temperatur- und Dichteverteilung von Wasser und Brennstoff). Eine Analyse des Konvergenzverhaltens der gekoppelten Rechnungen (Kap. 5.5) zeigte trotz guter Konvergenz der thermohydraulischen Lösungsseite eine andauernde Schwankung in der dazugehörenden Leistungsverteilung. Dieses Verhalten ließ sich auf die statistische Ungenauigkeit der MCNP5 Lösung zurückführen. Durch Mittelung der Ergebnisse aus mehreren MCNP5-Rechnung konnte dennoch eine konvergente Lösung mit ausreichender Genauigkeit ermittelt werden. Die Anwendung der gekoppelten Methode auf den SDWR-Kern zeigt die Vorteile von MCNP5 bei der schnellen und genauen Modellierung von komplexen Geometrien wie dem SDWR - BE. Zum Vorteil dieser Berechnungsmethode konnte im Gegensatz zu deterministischen Neutronikprogrammen auf die Erzeugung von spezifischen, makroskopischen Wirkungsquerschnittstabellen verzichtet werden. Als Nachteil zeigte sich die relative hohe Rechenzeit zur Ermittelung der Leistungverteilung im Kern. Dies gilt besonders angesichts der gefundene Uberschätzung der statistischen Konvergenz von MCNP5.

Als Ergebnis lieferte die gekoppelte Kernberechnung Daten über die stationäre dreidimensionale Leistungs-, Massenstrom- und Temperaturverteilung für eine zuvor definierte Kernkonfiguration (Kap. 5.5). Die Analyse der Daten offenbart eine relativ homogene radiale Leistungsverteilung im Kern. Größere Schwankungen treten nur im Außenbereich des Kerns auf, wo aufgrund der Leckage größere Gradienten zu finden sind. Dies führt dort zu einer starken Schwankung der Aufheizung der BE im äußersten BE-Bündel, wobei der ermittelte Formfaktor der radialen Leistungsverteilung bei einem relativ hohen Wert von 1,35 lag. Der Grund für die Schwankung liegt in der gemeinsamen Blende im Fußstück jedes BE-Bündels und kann durch entsprechende Modifikation des BE-Designs beseitigt werden. Der ermittelte Formfaktor wurde zu einer genaueren Abschätzung der maximalen Kernaustrittstemperatur bei Abweichung vom Normbetrieb durch eine Heißkanalfaktoranalyse verwendet. Die Ergebnisse zeigen, dass selbst bei einem Heißkanalfaktor von 2,14 (d.h. mehr als Verdopplung der zugeführten Wärme im Strömungskanal) die maximale KAT nur um knapp 10 % auf 416 °C steigt. Dies zeigt die Vorteile des gewählten SDWR-Betriebspunkts und unterstreicht die dämpfende Wirkung des Maximums der Wärmekapazität am pseudo-kritischen Punkt. In axiale Richtung wies das Leistungprofil ein ausgeprägtes Maximum im unteren Kernbereich auf. Die Auswertung des axialen Heißkanalfaktors lag dabei bei 1,54. In nachfolgenden Arbeiten kann zur Verbesserung dieses Werts eine Optimierung bzw. Glättung des Leistungprofils durch Definition einer axialen Anreicherungsverteilung, durch Abbrandgifte, Dummy-Stäbe etc. erzielt werden.

Ein weiteres Ergebnis der Kernberechnung war die dreidimensionale Verteilung des Neutronenflusses im Kern. Durch kubische Interpolation konnte daraus der lokale Neutronenfluss bzw. die lokale Brennstableistung im heißesten BE bestimmt werden. Diese wurde anschließend für detaillierte thermohydraulische Analysen unter realen Reaktorbedingungen mit dem Unterkanalprogramm verwendet (Kap. 6). Die ermittelte maximale lineare Stableistungen lag mit einem Wert von 29,7 kW/m deutlich unter dem für moderne Konzepte definierten Grenzwert von 38 kW/m. Zusammen mit der ebenfalls vergleichsweise niedrigen mittleren linearen Stableistung von 15 kW/m zeigt dies die relativ niedrige thermische Belastung des Brennstoffmaterials und die hohen Sicherheitsmargen gegen thermische Schädigung der Brennstoffmatrix. Alternativ ist eine gezielte Erhöhung der Leistungsdichte um Kern denkbar, um über eine Verkleinerung des Kerns und damit des RDBs mit Einbauten Kosten einzusparen. Die ebenfalls wichtige Verteilung der Hüllrohrtemperaturen im BE zeigte Werte von maximal 404°C und liegt damit weit im unkritischen Bereich des dafür verwendeten Edelstahls SS3161. Durch die Analyse der Heizflächenbelastung an kritischen Stellen im BE wurde eine lokale Überschreitung des Grenzwertes gegenüber dem Auftreten von HTD um 12% festgestellt. Dies kann unter Umständen zu erhöhten Hüllrohrtemperaturen führen, die jedoch angesichts der geringen thermischen Belastung des Hüllrohrwerkstoff relativ unkritisch sind. Alternativ würde sich die Überschreitung der kritische Heizleistung durch thermohydraulische Anpassung des Eckkanals oder durch Leistungsreduzierung im Eckbrennstab verhindern lassen.

Während der Kernberechnung wurde der gesamte Spaltbereich zwischen den BE als homogener, eindimensionaler Strömungskanal modelliert und somit eine homogene Verteilung von Dichte und Temperatur der Moderatorströmung im Spalt auf einer bestimmten Kernhöhe vorausgesetzt. Diese Annahme bestätigte sich mittels Simulation der Spaltströmung als ein poröses Medium und Implementierung eines entsprechenden Modells in das kommerzielle Softwarepaket COMSOL. Die Simulation mit reaktortypischen Randbedingungen (Spaltwassermassenstrom = 16,7% des gesamten Kühlmittelmassenstroms) aus der Kernberechnung ergab für den gewählten Moderatormassenstrom im Spalt ein hinreichend homogen Temperatur- und Dichteverteilung (Kap. 7). Darüber hinaus zeigten sich keine Naturkonvektionsphänomene wie sie bei Fällen mit geringerem Moderatormassenstrom auftraten. Erst ab einem um ca. 60% reduzierten Spaltwassermassenstrom traten die ersten Instabilitätsphänomene mit Strömungsumkehr und Naturkonvektionszellen in den Spalten auf.

Ein weiterer Schwerpunkt dieser Arbeit war die Analyse der Unterkanalströmung mit CFD Methoden (Kap. 8). Dabei stand die Berechnung von Unterkanalmodellen und ihre anschließende Verifikation durch passende experimentelle Korrelation im Mittelpunkt. Zusätzlich sollte herausgefunden werden, ob CFD generell in der Lage ist alle relevanten Phänomen der Bündelströmung abzubilden. Hierzu wurde das Beispiel zweier benachbarter zentraler Unterkanäle aus dem zuvor zur Kernberechnung verwendeten BE gerechnet. Für die erste Untersuchung wurde diese Geometrie auf eine Länge von 2 mm modelliert und dafür unter Verwendung zyklischer Randbedingungen das Druckverlustverhalten in axiale und laterale Richtung bestimmt. Die Ergebnisse für den Druckverlustkoeffizienten in Axialrichtung zeigten gute Übereinstimmung mit den experimentellen Korrelationen für diesen Strömungsfall und demonstrieren die Tauglichkeit der CFD-Methode (Kap. 8.1). Weiterführende Rechnungen mit dem gleichen numerischen Modell aber geänderten Randbedingungen hatten die Untersuchung des Querdruckverlusts zum Ziel (Kap. 8.3). Der Fokus lag dabei auf dem überlagerten Strömungsfall von dominanter axiale Strömung mit schwächerer Querströmung. Die Abhängigkeit des Querdruckverlustes wurde in einer Parameterstudie mit unterschiedlichen axialen Massenströmen und überlagerten Querdruckdifferenzen untersucht. Es zeigte sich, dass mit zunehmender axialer Strömungsgeschwindigkeit die Druckverlustkoeffizienten einen starken Anstieg aufweisen und die Sekundärströmung eine immer stärker werdende Rolle für den Querdruckverlust spielt. Dies begründet sich damit, dass die in sich geschlossenen Sekundärströmungszellen ein Hindernis für die sich etablierende Querströmung darstellen. Die starken Einflüsse der axialen Strömungsgeschwindigkeit konnte durch Modifikation vorhandener Korrelationen berücksichtigt werden.

Eine weitere Untersuchung mit CFD wurde zur Bestimmung des turbulenten Austauschkoeffizienten durchgeführt (Kap. 8.4). Eine zuvor durchgeführte Literaturstudie zeigte, dass dieser Austausch nicht allein durch Turbulenz sondern vor allem durch makroskopische Wirbel verursacht wird, die eine pulsierende Querströmung im Spalt zwischen den Unterkanäle erzeugen. Aufgrund der Instationarität des Effekts wurden zeitabhängige Rechnungen durchgeführt. Die Ergebnisse zeigen die charakteristische Pulsation der Querströmung im Spalt. Durch Vergleich des Frequenzspektrums der berechneten Schwankung mit einer gültigen experimentellen Korrelation zeigte sich, dass dessen dominante Oszillationsfrequenz gut getroffen wurde. Durch Lösung einer zusätzlichen Transportgleichung für einen passiven Marker, konnte darüber hinaus der turbulente Mischungskoeffizient ermittelt werden. Auch diese Werte wurden mit einer Korrelation verglichen und zeigten eine Abweichung der CFD-Ergebnisse von der Korrelation um den Faktor 3,14. Die Gründe hierfür können sowohl am verwendeten Modell (URANS) als auch an anderen Dinge liegen, wie beispielsweise den verwendeten zyklischen Randbedingungen.

Trotz der zwiespältigen Ergebnisse stellt die CFD eine aussichtsreiche Methode zur akkuraten Berechnung von Rohrbündelströmungen dar. Durch weitere Verifikationsarbeit und Untersuchungen, besonders für Rohrbündel mit kleinen p/d-Verhältnissen, kann das Vertrauen in die implementierten Modelle weiter gesteigert werden. Darüber hinaus kann durch die Anwendung von CFD die Anzahl von teuren Experimenten bei der Entwicklung neuer Reaktorsysteme verringert werden und zudem in den meisten Fällen ein tieferes Verständnis für die betrachteten Strömungsvorgänge gewonnen werden. Als nächster Schritt in dieser Richtung steht dabei der direkte Vergleich der instationären CFD mit einem verfügbaren Rohrbündelexperiment. Es konnte im Rahmen dieser Arbeit gezeigt werden, dass das SDWR-Konzept im Vergleich zu konventionellen Anlagen wirtschaftliche Vorteile durch ein kostengünstigeres Anlagenlayout und durch einen höheren Wirkungsgrad hat. Darüber hinaus ergab die Analyse des Reaktorkerns und der Brennelemente eine vergleichsweise niedrige thermische Beanspruchung des Systems und bestätigte so die erwarteten hohen Sicherheitsreserven. Diese sind eine direkte Folge des gewählten Betriebspunkts und der Eigenschaften des überkritischen Wassers an dieser Stelle. Somit kann der in dieser Arbeit untersuchte SDWR als ein aussichtsreiches Konzept bei der evolutionären Weiterentwicklung der konventionellen Reaktortechnik angesehen und für weitere, detailliertere Analyse empfohlen werden.

## Nomenklatur

### Lateinische Zeichen

A	$\mathrm{m}^2$	Fläche
$A_{fs}$	$\mathrm{m}^2$	Grenzfläche zwischen Feststoff und Fluid
$A_f$	$\mathrm{m}^2$	Grenzfläche des Fluid welches sich auf der
5		Kontrollraumgrenzfläche befindet
C	_	Konzentration eines Skalars im Fluid
C'	_	Schwankungskomponente der Markerkon-
		zentration
$C_{\mu}$	_	Anisotropieparameter des $k - \varepsilon$ - Turbulenz-
Γ.		modells
$C_{bl}$	_	Druckverlustkoeffizient der Blende
$C_{f,o}$	_	Druckverlustkoeffizient ohne Korrektur für
J 3-		Bündel oder Beheizung
$C_{f,r}$	_	Druckverlustkoeffizient für die Rohrströ-
<i>J</i> 7		mung
$C'_{ii}$	$ m kg/sm^2$	Vektor des turbulenten Skalartransports in
55		die Koordinatenrichtungen $i = 1, 2, 3$
$C_{jk}$	_	Druckverlustkoeffizient für Querströmung
U C		im Bündels
$C_1, C_2, C_3$	-	Koeffizienten des $k-arepsilon$ - Turbulenzmodells
$C_f$	_	Druckverlustkoeffizient für die axial gerich-
v		tete Bündelströmung
$C_q$	_	Druckverlustkoeffizient für Ein- und Auslass-
U		verluste aus dem Stabgitter
$c_p$	${ m kJ/kgK}$	Wärmespeicherkapazität des Fluids
$\overline{c_p}$	${ m kJ/kgK}$	Mittlere Wärmespeicherkapazität zwischen
		Wand und Bulk
$C_s$	-	Druckverlustkoeffizient für Abstandshalter
d	m	Stabdurchmesser
D	$\mathrm{m^2/s}$	Molekularer Diffusionskoeffizient
$d_{H,a}$	m	Außendurchmesser des Hüllrohrs
$d_{H,i}$	m	Innendurchmesser des Hüllrohrs
$d_{P,a}$	m	Durchmesser des Pellets
$d_v$	m	hydraulischer Durchmesser mit $d_v = \frac{4A}{V}$
$f_{\mu}$	-	Dämpfungsfunktion des $k-\varepsilon$ - Turbulenz-
		modells
$F_{j,i}$	$ m N/m^3$	Widerstandskraft der Strömung im Unterka-
		nal $j$ in Koordinatenrichtung $i = 1, 2, 3$
$F_{tot}$	-	Heißkanalfaktor gesamt

$F_A$	-	Heißkanalfaktor für Unsicherheiten
$f_d$	$1/\mathrm{s}$	Dominante Wirbelfrequenz
$F_L$	-	Formfaktor der Leistung im BE
$F_R$	-	Formfaktor der Leistung im Kern
$F_U$	-	Heißkanalfaktor für Toleranzen
g	N/kg	Gravitationskonstante
$G'_{j\leftrightarrow k}$	$\rm kg/sm^2$	Effektive Massenstromdichte des turbulen-
		ten Austauschs zwischen den Unterkanälen
a	1 / 2	j  und  k
$G_{jk}$	kg/sm²	Massenstromdichte der Stromung in der
		Spaltgrenznache vom Unterkanal $j$ nach in
C'	$k \sigma / s m^2$	den Unterkanal <i>k</i> Massanstromdichte der Strömung in der
$G_{jk}$	kg/sm	Spaltgronzfläche vom Unterkanal <i>i</i> nach in
		den Unterkanal $k$ durch turbulenten Aus-
		tausch
h	.I/kø	Enthalpie
k	$m^2/s^2$	Turbulente kinetische Energie
k <sub>e</sub>	W/mK	Effektive Wärmeleitfähigkeit aus molekula-
	7	ren und turbulenten Effekten
$\dot{m}$	m kg/s	Massenstrom
N	$1/m^3$	Teilchendichte
$n_c$	-	Anzahl an Zellen im Netz
p	m	Abstand/Teilung der Stäbe in einem Rohr-
		bündel von Mittelachse zu Mittelachse
p	$ m N/m^2$	Druck im Fluid
$P_{tot}$	W	Gesamtleistung der betrachteten Geometrie
$P_i$	W	Leistung in der Rechenzelle <i>i</i>
$p_l$	m	Abstand/Teilung der Stäbe in einem Rohr-
		bundel in Langsrichtung
$p_q$	m	Abstand/ Iellung der Stabe in einem Ronr-
	W/m	Lineare Stableistung
q $q''$	$W/m^2$	Wärmestromdichte
q a'''	$W/m^3$	Volumetrische Wärmequelle / Heizleistung
9 Ahar	W	Brennstableistung
$d_{lorit}$	W/m	Grenzwert der maximalen linearen Stableis-
1KTIL	,	tung
$R(\vec{r}, E, t)$	$1/\mathrm{m}^3$	Reaktionsrate
$R_i$	$ m N/m^3$	Volumengemittelte Widerstandskraft in
		Richtung $i = 1, 2, 3 \text{ (PMM)}$
RF	-	Dämpfungsfaktor
S	$\rm kJ/kgK$	Entropie
$S_{ij}$	$1/\mathrm{s}$	"Gemittelte Verzerrung des Fluids (engl.
		mean strain)"
$s_{jk}$	m	Breite des Spalts zwischen den Unterkanälen
		j  und  k

$S_{mk}$	m	Wandstärke des Moderatorkastens
$S_C$	$ m kg/sm^3$	Massenquellterm des Skalars
$S_I$	$ m N/m^3$	Impulsquelle im Kontrollvolumen
$S_M$	$ m kg/sm^3$	Massenquellterm in der Kontinuitätsglei-
		chung
$Sc_t$	-	Turbulente Schmidt-Zahl
Т	S	Mittelungsintervall bei der zeitlichen Mitte-
		lung der Reynoldsgleichung
$T_F$	$^{\circ}\mathrm{C}$	Mittlere Temperatur des Fluids
$T_{H,a}$	$^{\circ}\mathrm{C}$	Hüllrohrtemperatur Außenseite
$T_{H,i}$	$^{\circ}\mathrm{C}$	Hüllrohrtemperatur Innenseite
$T_{P,a}$	$^{\circ}\mathrm{C}$	Temperatur an der Oberfläche des Pellets
$T_{P,i}$	$^{\circ}\mathrm{C}$	Temperatur in der Mittelachse des Pellets
$T_{pc}$	$^{\circ}\mathrm{C}$	Pseudo-kritische Temperatur
$u^+$	-	Dimensionsloses Geschwindigkeitsprofil
$u_{ au}$	$ m N/m^2$	${ m Schubspannungsgeschwindigkeit}$
$\overline{u_{i,f}}$	${ m m/s}$	Mittlere Geschwindigkeit im Spalt (PMM)
$u_i$	${ m m/s}$	Geschwindigkeit in die Koordinatenrichtung
		i = 1,2,3
$u'_i$	${ m m/s}$	Schwankungskomponente der Geschwindig-
		keit $u_i$
$\overline{u_i}$	${ m m/s}$	Zeitlich gemittelte Geschwindigkeit
$\overline{u_i}$	${ m m/s}$	Volumengemittelte Geschwindigkeit bzw.
		Darcy-Geschwindigkeit (PMM)
V	$\mathrm{m}^3$	Volumen
$V_f$	$\mathrm{m}^3$	Volumen des Fluidraums
$V_s$	$\mathrm{m}^3$	Volumen des Feststoffraums
$V_t$	$\mathrm{m}^3$	Volumen des Raums der von Fluid und Fest-
		stoff eingenommen wird
$w'_{jk}$	m kg/sm	Turbulente Mischrate zwischen den Unter-
·		kanälen j und k
$x_i$	m	Koordinate in die Richtungen $i = 1, 2, 3$
$_{xi}\Delta$	-	Operator der die Bilanz in die Koordinaten-
		richtung $i = 1, 2, 3$ über den Kontrollraum
		darstellt
$y^+$	-	Dimensionsloser Wandabstand

### Griechische Zeichen

lpha lpha lpha lpha k	${ m W/m^2K} \ { m W/m^2K}$	Wärmeübergangskoeffizient Wärmeübergangskoeffizient Kühlmittelseite
$\alpha_m$	$ m W/m^2K$	Wärmeübergangskoeffizient Moderatorwas-
β	-	serseite Turbulenter Austauschkoeffizzient im Unter- kanalmodell
$eta_{exp}$	$1/^{\circ}\mathrm{C}$	Wärmeexpansionskoeffizient (PMM)
$\chi$	$\rm J/Spaltung$	Erzeugte Wärmeenergie pro Spaltung

$\Delta p_{lat}$	$ m N/m^2$	Druckdifferenz in laterale Richtung (Quer- richtung)
$\Delta x$	m	Mittler Gitterweite des Rechennetzes
δί	_	Kroneckersymbol
$\lambda'_{t,n}$	W/mK	Effektive turbulente Wärmeleitfähigkeit des
turo		Fluids (PMM)
$\lambda_H$	W/mK	Wärmeleitfähigkeit des Hüllrohrmaterials
		SS316l
$\lambda_P$	W/mK	Wärmeleitfähigkeit des Pellet-Materials
		$(UO_2)$
$\lambda_s$	W/mK	Wärmeleitfähigkeit des Moderatorkastenma-
		terials SS316l
$\lambda_w$	m	Wellenlänge der oszillierenden Querströ-
		mung
$\mu$	m kg/ms	Molekulare dynamische Viskosität
$\mu_B$	kg/ms	Viskosität des Fluids bei Bulktemperatur
$\mu_W$	kg/ms	Viskosität des Fluids bei Wandtemperatur
$\mu_t$	kg/ms	Turbulente Vikosität / Wirbelviskosität
ν	$m^2/s$	Kinematische Viskosität
$\Omega_{ij}$	1/s	Gemittelte Wirbelstärke im Fluid (engl.
$\phi_{\vec{r},E,t}$	$Neutronen/sm^2$	Richtungsloser Neutronenstrom
$\rho_B$	$\mathrm{kg/m}^{3}$	Dichte des Fluids bei Bulktemperatur
$\rho_W$	$kg/m^3$	Dichte des Fluids bei Wandtemperatur
ρ	$kg/m^3$	Dichte des Fluids
$ au_{ij}$	$N/m^2$	Normal- und Schubspannungstensor im
U Contraction of the second se		Fluid
$ au'_{ii}$	$ m N/m^2$	Turbulenter Normal- und Schubspannungs-
-5		tensor bzw. "Reynoldsche Scheinbare Schub-
		und Normalspannungen"
$ au_w$	$ m N/m^2$	Mittlere Wandschubspannung
ε	$m^3/s^3$	Dissipationsrate der turbulenten kinetischen
	·	Energie
$arphi_i$	-	Porosität in Richtung $i = 1, 2, 3 \text{ (PMM)}$
$arphi_v$	-	Volumenporosität

# Abkürzungsverzeichnis

BE	Brennelement
CAD	Computer Aided Design
CANDU	Canada Deuterium Uranium
CATIA	Computer Aided Three-Dimensional Interactive Application
CFD	Computational Fluid Dynamics
CFL	Courant-Friedrich-Lewy-Zahl
COBRA	Coolant Boiling in Bod Arrays
DE	Dampfarzeuger
DNR	Departure of Nucleate Boiling
DNS	Direct Numerical Simulation
DOE	US-Department of Energy
DV	Diskratisiarungsvorfahran
DWB	Druckwassorroaktor
DWR	Druckwasserreaktor
EFR	European Fast Beactor
FDR	European Pressurized Water Beactor
EI N FFM	European Tressurized Water Reactor
r DM FFT	Fast Fourier Transformation
FFICA	Französischer Thermehydraulik Code
FUICA	Finite Volumen Methode
	Finite volumen Methode
Γ Δ K C F	Coporal Electric
GE CEN IV	Concention IV Forschungsprogramm
GEN-IV	Head drught under the second s
	Hochdruckturbine
	Hauptkummittelpumpe
	High Performance Light Water Reactor
HSP	Hauptspelsewasserpumpe
HID	Heat Transfer Deterioration
IKET	Institut für Kern- und Energietechnik
INL	Idaho National Laboratory
JAERI	Japan Atomic Energy Research Institute
JEF2.2	Joint Evaluated File Version 2.2
KAPROS	Karlsruhe Nuclear Program System
KARBUS	Karlsruhe Cell-Burnup Code System
KAT	Kernaustrittstemperatur
KFKI	Ungarisches Kernforschungszentrum
LDA	Laser Doppler Anemometrie
LES	Large Eddy Simulation
MARS	Monotone Advection and Reconstruction Scheme
MATRA	Multichannel Analyzer for Steady States and Transients in Rod Arrays

MCNP	Monte Carlo N-Particle Transport Code
ND	Niederdruckturbine
ORIGEN	Oak Ridge Isotope Generation Code
PISO	Pressure Implicite with Spilitting of Operators
PMM	Poröses Medien Modell
QUICK	Quadratic Upstream Interpolation of Convective Kinematics
RANS	Reynolds-Averaged Navier Stokes
RB	Randbedingung
RDB	Reaktordruckbehälter
RDB	Reaktordruckbehälter
RELAP5	Eindimensionales Thermohydraulikprogramm des INL
RSM	Reynolds-Spannungs-Modell
SC-PWR	Supercritical Closed-Cycle Pressurized Water Reactor
SCFR	Supercritical Water Fast Reactor
SCLWR	Supercritical Light Water Reactor
SCOTT-R	Supercritical Once-Thru Tube Reactor
SCR	Supercritical pressure water cooled Reactors
SCWR	Supercritical Water Cooled Reactor
SDWR	Super-Druckwasserreaktor
SIMPLE	Semi-Implicite Method for Pressure Linked Equations
SPROD	Single Channel Thermal-Hydraulic Analysis Code
SRAC	Standard Thermal Reactor Nuclear Design Code System
STAFAS	Sub-channel Thermal-hydraulic Analysis in Fuel Assemblies under Su-
	percritical conditions
UD	Upwind Differencing Scheme
URANS	Unsteady Reynolds-Averaged Navier Stokes
VIPRE-W	Sub Channel Code - Westinghouse Company
VISED	Visual Editor
VZ	Volumenzelle
ZWÜ	Zwischenüberhitzer

## Literaturverzeichnis

- [1] BAGLIETTO, E.: Anisotropic Turbulence Modeling for Accurate Rod Bundle Simulations. *Proceedings of ICONE14*. Miami, Florida, USA, 2006. Paper 8966
- BAGLIETTO, E.: RANS and URANS Simulations for Accurate Flow Predictions Inside Fuel Rod Bundles. *Proceedings of ICAPP '07*. Nice, France, 2007. – Paper 7310
- BAGLIETTO, E. ; NINOKATA, H.: A Turbulence Model Study for Simulating Flow Inside Tight Lattice Rod Bundles. *Nuclear Engineering and Design* Vol. 235 (2004), S. 773
- [4] BAGLIETTO, E. ; NINOKATA, H.: Anisotropic Eddy Viscosity Modeling for Application to Industrial Engineering and Internal Flows. International Journal of Transport Phenomena Vol. 8 (2006), S. 109
- [5] BELL, G.I.; GLASSTONE, S.: *Nuclear Reactor Theory.* Huntington, NY, USA. Robert E. Krieger Publishing Company, 1979
- [6] BERNNAT, W.; CONTI, A.: *Privat Communication*. Institut für Kernenergetik und Energiesystem, Universität Stuttgart, 2006
- [7] BERNNAT, W. ; MATTES, M. ; KEINERT, J. ; CONTI, A.: Application of the Monte Carlo Method for the Calculation of Safety Related Reaktor Physics Parameter for Power Reactor with Consideration of Detailed Burn-up Distributions. University of Stuttgart, 2000 (IKE-6-2000). – Forschungsbericht
- [8] BERRINGER, R.; PREVITI, G.; TONG, L. S.: Lateral Flow Simulation in an Open Lattice Core. Transactions of the American Nuclear Society (ANS) Vol. 4 (1961), S. 45
- [9] BISHOP, A. A.; SANDBERG, R. O.; TONG, L. S.: Forced Convection Heat Transfer to Water at Near-Critical Temperatures and Supercritical Pressures. Westinghouse Commercial Atomic Power, 1964 (WCAP-2056). – Forschungsbericht
- [10] BLASIUS, H.: Das Reibungsgesetz bei Reibungsvorgängen in Flüssigkeiten. Forschungsarbeiten auf dem Gebiete des Ingenieurwesens Heft 131 (1913)
- [11] BRANDT, H.: Über Druckverlust und Wärmeübertragung in Röhren-Wärmetauschern. (1934)
- [12] BROEDERS, C. H. M.; SANCHEZ, V.; STEIN, E.; TRAVLEEV, A.: Validation of Coupled Neutron Physics and Thermal-Hydraulic Analysis for HPLWR. Proceedings of ICAPP '03. Cordoba, Spain, 2003. – Paper 7013

- [13] CD-ADAPCO: Methodology STAR-CD Version 3.26. 2005
- [14] CHANG, D. ; TAVOULARIS, S.: Unsteady Numerical Simulations of Turbulence and Coherent Structures in Axial Flow Near a Narrow Gap. Journal of Fluids Engineering Vol. 127 (2005), S. 458
- [15] ŽUKAUSKAS, A. A.; MAKAREVIČIUS, V. I.; ŠLANČIAUSKAS, A. A.: Heat Transfer in Banks of Tubes in Cross Flow of Fluid - Thermophysics 1. International Journal of Heat and Mass Transfer (1968), S. 192
- [16] CHENG, S.-K. ; TODREAS, N. E.: Constitutive Correlations for Wire Wrapped Subchannel Analysis Under Forced and Mixed Convection Conditions. Massachusetts Institute of Technology (MIT), 1984 (Report No. DOE/ET/37240-108 TR).
   – Forschungsbericht
- [17] CHENG, X.; SCHULENBERG, T.: Heat Transfer at Supercritical Pressures Literature Review and Application to an HPLWR. Forschungszentrum Karlsruhe, 2001 (FZKA 6609). – Forschungsbericht
- [18] CHENG, X.; SCHULENBERG, T.; BITTERMANN, D.; RAU, P.: Design Analysis of Core Assemblies for Supercritical Conditions. *Nuclear Engineering and Design* Vol. 223 (2003), S. 279
- [19] DOBASHI, K.; KIMURA, A.; OKA, Y.; KOSHIZUKA, S.: Conceptual Design of a High Temperature Power Reactor Cooled and Moderated by Supercritical Water. Annals of Nuclear Energy Vol. 25 (1998), S. 487
- [20] FERZIGER, J. H.; PERIĆ, M.: Computational Methods for Fluid Dynamics. 3. Auflage. Berlin. Springer-Verlag, 2002
- [21] FILONENKO, G. K.: Hydraulic Resistance in Pipes. Teploenergetica 1 4 Vol. 1 (4) (1954), S. 40
- [22] FISCHER, K. S. P.; E., Guelton; SCHULENBERG, T.: Festigkeitsanalyse des Reaktordruckbehälters für einen Leichtwasserreaktor mit überkritischen Dampfzuständen. Jahrestagung Kerntechnik 2006. Aachen, Germany, 2006
- [23] FISCHER, K. S. P. ; STARFLINGER, J. ; SCHULENBERG, T.: Conceptual Design of a Reactor Pressure Vessel and its Internals for a HPLWR. *Proceedings of ICAPP* '06. Reno, NV, USA, 2006. – Paper 6098
- [24] GADDIS, E. S.; GNIELINSKI, V.: Pressure Drop in Cross Flow Across Tube Bundles. International Chemical Engineer Vol. 25 (1985), S. 1
- [25] GENERAL ELECTRIC: Supercritical Pressure Power Reactor. A Conceptual Design. Hanford Laboratories and General Electric, 1959 (HW-59689). – Forschungsbericht
- [26] GRABEZHNAYA, V. A.; KIRILLOW, P. L.: Heat Transfer in Pipes and Rod Bundles During Flow of Supercritical-Pressure Water. Atomic Energy Vol. 96 (2004), S. 358

- [27] GRIMISON, E. D.: Correlation and Utilization of New Data on Flow Resistance and Heat Transfer in Cross FLow of Gases Over Tube Banks. *Transactions of the American Society of Mechanical Engineering (ASME)* Vol. 59 (1937), S. 582
- [28] GUNTER, A. Y.; SHAW, W. A.: A GeneralCorrelation of Friction Factors for Various Types of Surfaces in Cross Flow. Transactions of the American Institute of Chemical Engineers (AIChE) Vol. 67 (1945), S. 643
- [29] HAMMEKE, K. ; HEINECKE, E. ; SCHOLZ, F.: Wärmeübergangs- und Druckverlustmessungen an querangeströmten Glattrohrbündeln, insbesondere bei hohen Reynoldszahlen. International Journal of Heat and Mass Transfer Vol. 10 (1966), S. 427
- [30] HARDING, J. H.; MARTIN, D. H.: A Recommendation for the Thermal Conductivity of UO<sub>2</sub>. Journal of Nuclear Materials Vol. 166 (1989), S. 223
- [31] HIMMEL, S.; HOFMEISTER, J.; STARFLINGER, J.; SCHULENBERG, T.: Mechanical Analysis of the Fuel Assembly Box of a HPLWR Fuel Assembly. *Proceedings of ICAPP '06.* Reno, NV, USA, 2006. – Paper 6229
- [32] HOFMEISTER, J. F. ; SCHULENBERG, T. ; STRAFLINGER, J.: Optimization of a Fuel Assembly for a HPLWR. *Proceedings of ICAPP '05.* Seoul, Korea, 2005. – Paper 5077
- [33] HOFMEISTER, J. F.; WAATA, C.; STARFLINGER, J.; SCHULENBERG, T.; LAURI-EN, E.: Fuel assembly design study for a reactor with supercritical water. *Nuclear Engineering and Design Vol.* 237 (2007), S. 1513
- [34] HOOPER, J. D.; REHME, K.: Large-Scale Structural Effects in Developed Turbulent FlowThroug Closely-Spaced Rod Arrays. *International Journal of Fluid Mechanics* Vol. 145 (1983), S. 305
- [35] HOOPER, J. D.; WOOD, D. H.: Fully Developed Rod Bundle Flow Over a Large Range of Reynolds Number. *Nuclear Engineering and Design* Vol 83 (1984), S. 31
- [36] HSU, C.T.; CHENG, P.: Thermal dispersion in a porous medium. International Journal of Heat and Mass Transfer 33 (1990), S. 1587–1597
- [37] INGENIEURE, Verein D.: VDI-Wärmeatlas. 9. Auflage. Berlin Heidelberg. Springer Verlag, 2002
- [38] INGESSON, L.; HEDBERG, S.: Heat Transfer Between Subchannels in a Rod Bundle. Heat Transfer 1970, Paris Vol. 3 (1970)
- [39] IPSEPRO http://www.simtechnology.com
- [40] JAKOB, M.: Discussion Heat Transfer and Flow Resistance in Cross Flow of Gases Over Tube Banks. Transactions of the American Institute of Chemical Engineers (AIChe) Vol. 60 (1938), S. 381
- [41] KAKA,C, S.; SHAH, R. K.; AUNG, W.: Handbook of Single-Phase Convective Heat Transfer. New York. John Wiley & Sons, Inc., 1987

- [42] KAMEI, K. ; YAMAJI, A. ; ISHIWATARI, Y. ; JIE, L. ; OKA, Y.: Fuel and Core Design of Super LWR with Stainless Steel Cladding. *Proceedings of ICAPP '05*. Seoul, Korea, 2005. – Paper 5527
- [43] KLEEMANN, M.; REBHAN, E. (Hrsg.): Windenergie, Wasserkraft, Gezeitenenergie und Erdwärme. In: Energiehandbuch. Berlin. Springer-Verlag, 2002. – 365 S.
- [44] KRAUSS, T. ; MEYER, L.: Experimental Investigation of Turbulent Transport of Momentum and Energy in a Heated Rod Bundle. Nuclear Engineering and Design Vol 180 (1998), S. 185
- [45] KUNIK, C. ; VOGT, B.: Berechnung der Mischkonvektion im Moderatorspalt eines Kernreaktors mit einem Ansatz für poröse Medien. Forschungszentrum Karlsruhe, 2007 (FZKA 7273). – Forschungsbericht
- [46] LAUNDER, B. E. ; SPALDING, D. B.: The Numerical Computation of Turbulent Flows. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering Vol. 3 (1974), S. 269
- [47] LAURIEN, E.; WINTTERLE, T.: Secondary Flows in the Cooling Channels of the High-Performance Light-Water Reactor. *Proceedings of ICAPP '07*. Nice, France, 2007. – Paper 7089
- [48] LEADING AUTHOR: MACDONALD, P. E.: Feasibility Study of Supercritical Light Water Cooled Reactors for Electric Power Production, Nuclear Energy Research Initiative Project 2001-001, Final Report. 2005 (DE-FG07-02SF22533). – Forschungsbericht
- [49] LEONARD, B. P.: A Stable and Accurate Convective Modelling Procedure Based on Quadratic Upstream Interpolation. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering Vol. 19 (1979), S. 59
- [50] LEONARD, B. P.: Order of Accuracy of QUICK and Related Convection-Diffusion Schemes. *Applied Mathematical Modelling* Vol. 19 (1995), S. 640
- [51] LÖWENBERG, M. F.: Wärmeübergang von Wasser in vertikalen Rohrströmungen bei überkritischem Druck. Forschungszentrum Karlsruhe, 2007 (FZKA 7320). – Forschungsbericht
- [52] MANTLIK, F.; HEINA, J.; CHERVENKA, J.: Results of Local Measurements fo Hydraulic Characteristics in Triangular Pin Bundle. Tschechien. Nuclear Research Institute Rez, 1976 (UJV-3778-R). – Forschungsbericht
- [53] MARÁCZY, C.; HEGYI, G.; BROLLY, Á.; VÉRTES, P; HORDÓSY, G.: Application of the KARATE Code System to the High Performance Light Water Reactor. *Proceedings of PHYTRA1*. Marrakech, Marokko, 2007
- [54] MAREK, J.; MAUBACH, K; REHME, K.: Heat Transfer and Pressure Drop Performance of Rod Bundles Arranged in Square Arrays. International Journal of Heat and Mass Transfer Vol. 6 (1973), S. 495

- [55] MCADAMS, W. H.: Heat Transmission. 3. Edition. New York. McGraw-Hill, 1954
- [56] MEYER, L.; REHME, K.: Periodic Vortices in Flow through Channels with Longitudinal Slots or Fins. 10th. Symposioum on Turbulent Shear Flows. The Pensylvania State University, PA, USA, 1995
- [57] MÖLLER, S. V.: Experimental Study of the Phenomena of Turbulent Flow in Narrow Gaps Between Subchannels of Rod Bundles. Kernforschungszentrum Karlsruhe, 1989 (KFK 4501). – Forschungsbericht
- [58] MORI, M.: Core Design Analysis of the Supercritical Water Fast Reactor. Forschungszentrum Karlsruhe, 2005 (FZKA 7160). – Forschungsbericht
- [59] NIELD, D.A.; BEJAN, A.: Convection in Porous Media 2nd ed. New York, N.Y.. Springer-Verlag, 1998
- [60] NOLL, B.: Numerische Strömungsmechanik: Grundlagen. Berlin. Springer-Verlag, 1993
- [61] NUCLEAR ENERGY ANGENCY (NEA): The JEF-2.2 Nuclear Data Library. Issyles-Moulineaux, France. OECD - Nuclear Energy Angency, 2000
- [62] OERTEL JR, H.; DELFS, J.: Strömungsmechanische Instabilitäten. Berlin, Heidelberg. Springer Verlag, 1996
- [63] OERTEL JR., H. ; LAURIEN, E.: Numerische Strömungsmechanik. 2. Auflage. Braunschweig. VIEWEG, 2003
- [64] OKA, Y.: Review of High Temperature Water and Steam Cooled Reactor Concepts. Proceedings of the First International Symposium on Supercritical Water-Cooled Reactor Design and Technology (SCR-2000). Tokyo, Japan, 2000. – Paper 103
- [65] OKA, Y.; KOSHIZUKA, S.: Concept and Design of a Supercritical-Pressure Direct-Cycle Light Water Reactor. *Nuclear Technology* Vol. 103 (1993), S. 295
- [66] PETROV, N. E.; POPOV, V. N.: Heat Transfer and Resistance of Carbon Dioxide Being Cooled in the Supercritical Region. *Teploenergetica* Vol. 32 (3) (1985), S. 16
- [67] PETUKOV, B. S.; KURGANOV, V.A.; ANKUDINOV, V.B.: Heat Transfer and Flow Resistance in the Turbulent Pipe Flow of a fluid with Near Critical State Parameters. *Teplofizika Vysokikh Temperatur* Vol. 21 (1) (1982), S. 92
- [68] PIORO, I. L.; B., Duffey R.: Heat Transfer and Hydraulic Resistance at Supercritcal Pressures in Power-Engineering Applications. Three Park Avenue, New York, NY, USA. ASME, 2007
- [69] POPOV, N. V.: Theoretical Calculation of Heat Transfer and Friction for Carbon Dioxide in the Supercritical range. Proceedings of the All-Union Conference on Heat and Mass Transfer Vol. 1 (4) (1964), S. 1
- [70] PRESSER, K. H.: Wärmeübergang und Druckverlust an parallel angeströmten Stabbündeln in einem großen Bereich von Reynoldszahlen und Teilungsverhältnissen. International Journal of Heat and Mass Transfer Vol. 14 (1971), S. 1235

- [71] REHME, K.: Pressure Drop Correlations for Fuel Element Spacers. Nuclear Technology Vol. 17 (1973), S. 15
- [72] REHME, K.: The Structure of Turbulence in Rod Bundles and the Implications on Natural Mixing Between the Subchannels. International Journal of Heat and Mass Transfer Vol. 35 (1992), S. 567
- [73] RIMPAULT, G.; MARACY, C.; KYRKI-RAJAMÄKI, R.; OKA, Y.; SCHULENBERG,
   T.: Core Design Feature Studies and Research Needs for High Performance Light
   Water Reactors. Proceedings of ICAPP '03. Cordoba, Spain, 2003. Paper 3194
- [74] ROACHE, P. J.: Verification and Validation in Computational Science and Engineering. Albuquerque. Hermosa Publishers, 1998
- [75] ROCK, R. C. K.; LIGHTSTONE, M. F.: A Numerical Investigation of Turbulent Interchange Mixing of Axial Coolant Flow in Rod Bundle Geometries. *Numerical Heat Transfer* Vol. 40 (2001), S. 221
- [76] ROGERS, J. T.; TAHIR, A. E. E.: Turbulent Interchange Mixing in Rod Bundles and the Role of Secondary Flows. ASME Paper 75-HT-31 (1975)
- [77] ROGERS, J. T.; TARASUK, W. R.: Inter-Subchannel Coolant Mixing in Close-Packed Reactor Fuel Bundles. Part I - Natural Mixing. Canadian General Electric, 1967 (R64CAP29-1). – Forschungsbericht
- [78] ROWE, D. S.; JOHNSON, B. M.; KNUDSEN, J. G.: Implications Concerning Rod Bundle Crossflow Mixing Based on Measurements of Turbulent Flow Structure. International Journal of Heat and Mass Transfer Vol. 14 (1974), S. 407
- [79] SCHULENBERG, T.; STARFLINGER, J.: Core Design Concepts for High Performance Light Water Reactors. *Nuclear Engineering and Technology* Vol. 39 (2007), S. 249
- [80] SEALE, W. J.: Turbulent Diffusion of Heat Between Connected Passages Part 1 & 2. Nuclear Engineering and Design Vol. 54 (1979), S. 183
- [81] SEALE, W. J.: Measurements and Predictions of Fully Developed Turbulent Flow in a Simulated Rod Bundle. *Journal of Fluid Mechanics* Vol. 123 (1982), S. 399
- [82] SINGH, K.; ST. PIERRE, C. C.: Single Phase Turbulent Mixing in Simulated Rod Bundle Geometries. Transactions of Canadian Society for Mechanical Engineering (CSME) Vol. 1 (1972), S. 73
- [83] SKINNER, V. R.; FREEMAN, A. R.; LYALL, H. G.: Gas Mixing in Rod Clusters. International Journal of Heat and Mass Transfer Vol. 12 (1969), S. 265
- [84] SLATTERY, J. C.: Momentum, Energy and Mass Transfer in Continua. New York. McGraw-Hill, 1972
- [85] SMIDT, D.: Reaktortechnik Band 1 und 2. Karlsruhe. G. Braun, 1971
- [86] ST. PIERRE, C. C.: SASS Code I Subchannel Analysis for the Steady State. Atomic Energy of Canada Limited (AECL), 1966 (APPE-41). – Forschungsbericht

- [87] STEWART, C. W. ; WHEELER, C. L. ; CENA, R. J. ; MCMONAGLE, C. A. ; CUTA, J. M. ; TRENT, D. S.: COBRA-IV: The Model and the Method. Battelle Pacific Northwest Laboratories, 1977 (BNWL-2214). – Forschungsbericht
- [88] SUH, Y. K.; LIGHTSTONE, M. F.: Numerical Simulation of Turbulent Flow and Mixing in a Rod Bundle Geometry. *Nuclear Energy* Vol. 43 (2004), S. 153
- [89] TODREAS, N. E.; KAZIMI, M. S.: Nuclear Systems I Thermal Hydraulic Fundamentals. second printing. Levittown, PA, USA. Taylor and Francis, 1993
- [90] TODREAS, N. E.; KAZIMI, M. S.: Nuclear Systems II Elements of Thermal Hydraulic Design. second printing. Levittown, PA, USA. Taylor and Francis, 1993
- [91] TODREAS, N. E.; ROGERS, J. T.: Coolant Mixing in Rod Bundles. Heat Transfer in Rod Bundles. New York, NY, US. Winter Anual Meeting Amerc. Society of Mech. Engineers, 1968, S. 1
- [92] TONG, L. S.: Pressure Drop Performance of a Rod Bundle. Heat Transfer in Rod Bundles. New York, NY, US. Winter Anual Meeting Amerc. Society of Mech. Engineers, 1968, S. 57
- [93] TONG, L. S. ; CHELEMER, H. ; MCCABE, E. A. J.: Hot Channel Factors for Flow Distribution and Mixing in Core Thermal Design. Westinghouse Electric Corporation, 1963 (WCAP-2211). – Forschungsbericht
- [94] TONG, L.S.; WEISMAN, J.: Thermal Analysis of Pressurized Water Reactors. 3. Edition. La Grange Park, IL, USA. American Nuclear Society, 1996
- [95] TOWER, S. N.: 1000MWe Supercritical Pressure Nuclear Reactors Plants Study. Westinghouse Electric Corporation, 1962 (WCAP-2042). – Forschungsbericht
- [96] TSIGE-TAMIRAT, H.; U., Fischer: CAD Based Geometry Generation for Monte Carlo Particle Transport Codes. Transactions of the American Nuclear Society (ANS) Vol. 91 (2004), S. 179
- [97] U.S. DEPARTMENT OF ENERGY: DOE Fundamentals Handbook on Nuclear Physics and Reactor Theory Volume 1 and 2. U.S. Department of Commerce, 1993.
   Forschungsbericht
- [98] VAFAI, K.; TIEN, C.L.: Boundary and inertia effects on flow and heat transfer in porous media. International Journal of Heat and Mass Transfer 24 (1981), S. 195 - 203
- [99] VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W.: An Introduction to Computational Fluid Dynamics - The Finite Volume Method. Harlow, Essex, England. Pearson Education Ltd., 1995
- [100] VOGT, B.; LAURIEN, E; CLASS, A. G.; SCHULENBERG, T.: Mixing Coefficients for Subchannel Analyses with Supercritical Water. *Proceedings of Global 2007*. Boise, ID, USA, 2007. - S. 951

- [101] VOGT, B. ; LAURIEN, E ; CLASS, A. G. ; SCHULENBERG, T.: CFD Analysis of Turbulent Mixing in Sub Channels of a Supercritical Water Reactor Fuel Assembly. *Jahrestagung Kerntechnik 2008.* Hamburg, Germany, 2008
- [102] VOGT, B. ; STARFLINGER, J. ; SCHULENBERG, T.: Gekoppelte Neutronik und Thermohydraulik-Rechnungen zur Auslegung eines Kerns mit überkritischen Dampfzuständen. Jahrestagung Kerntechnik 2006. Aachen, Germany, 2006
- [103] VOGT, B. ; STARFLINGER, J. ; SCHULENBERG, T.: Near Term Application of Supercritical Water Technologies. *Proceedings of ICONE 14*. Miami, FL, USA, 2006. – Paper 89732
- [104] VOGT, B.; STARFLINGER, J.; SCHULENBERG, T.: Auslegungsrechnungen für einen Druckwasserreaktor mit überkritischen Dampfzuständen. Jahrestagung Kerntechnik 2007. Karlsruhe, Germany, 2007
- [105] VONKA, V.: Measurements of Secondary Flow Vortices in a Rod Bundle. Nuclear Engineering and Design Vol. 106 (1988), S. 191
- [106] WAATA, C. ; SCHULENBERG, T. ; CHENG, X. ; STARFLINGER, J.: Results of a Coupled Neutronics and Thermal-hydraulics Analysis of a HPLWR Fuel Assembly. *Proceedings of ICAPP '05.* Seoul, Korea, 2005. – Paper 5064
- [107] WAGNER, W.; KRUSE, A.: The Industrial Standard IAWPS-IF97 for the Thermodynamic Properties and Supplementary Equations for other Properties: Properties of Water and Steam. Heidelberg. Springer, 1997
- [108] WANTLAND, J. L.: Compact Tubular Heat Exchangers. Reactor Heat Transfer Conference. New York, USA, 1956. - S. 525
- [109] WHEELER, C. L.; STEWART, C. W.; CENA, R. J.; ROWE, D. S.; SUTEY, A. M.: Thermal Analysis of Pressurized Water Reactors. BNWL-1962. Battelle Pacific Northwest Laboratories, 1976. – Forschungsbericht
- [110] WRIGHT, J. H.; PATTERSON, J. F.: Status and Application of Supercritical Water Reactor Coolant. Proceedings of the American Power Conference Vol. 28 (1966), S. 139
- [111] X-5 MONTE CARLO TEAM: MCNP A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5 - Volume I-III. Los Alamos, CA, USA. Los Alamos National Laboratory, 2004
- [112] YAMAGATA, K.; NISHIKAWA, K.; HASEGAWA, S.; FUJI, T.; YOSHIDA, S.: Forced Convective Heat Transfer to Supercritical Water Flowing in Pipes. International Journal of Heat Transfer Vol. 15 (1972), S. 2575
- [113] YAMAJI, A.; OKA, Y.; KOSHIZUKA, S.: Conceptual Core Design of a 1000 MWe Supercritical-Pressure Light Water Cooled and Moderated Reactor. *Paper presen*ted at the ANS and HPS meeting, 2001

- [114] YAMAJI, A.; OKA, Y.; KOSHIZUKA, S.: Core Design of a High Temperature Reactor Cooled and Moderated by Supercritical Light Water. *Proceedings of 2003* GENES4/ANP. Kyoto, Japan, 2003
- [115] YAMAJI, A. ; TANABE, T. ; OKA, Y. ; YANG, J. ; LIU, J. ; ISHIWATARI, Y. ; KOSHIZUKA, S.: Evaluation of the Nominal Peak Cladding Surface Temperature of the Super LWR with Subchannel Analyses. *Proceedings of Global 2005.* Tsukuba, Japan, 2005. – S. 557

## A Anhang

### A.1 Heißkanalfaktoranalyse

Die Heißkanalfaktoranalyse ist einen einfache Methode um den Zustand des Reaktors unter schlimmstmöglichen Bedingungen abzuschätzen. Sie wird an dieser Stelle angewendet, um die Forderung nach einem möglichst hohen Wirkungsgrad (d.h. möglichst hohe Kernaustrittstemperaturen) mit der nach bestmöglichen Sicherheitseigenschaften abzuwägen. Der bestimmenden Parameter ist dabei die Kühlmitteltemperatur deren Verhalten mittels der Heißkanalfaktoranalyse abgeschätzt werden kann. Die so genannten Heißkanalfaktoren sind Multiplikatoren auf die mittlere Aufheizung  $\Delta h_{av}$  in einem typischen Strömungskanal in einem Brennelement des Reaktors (Unterkanal) gemäß Gleichung

$$\Delta h_{max} = \Delta h_{av} \cdot F_{tot} \tag{A.1}$$

wobei

$$F_{tot} = F_U \cdot F_A \cdot F_R \cdot F_L \tag{A.2}$$

Dabei ist

- $F_{tot} = 1.98$  der gesamte Heißkanalfaktor
- $F_U = 1.20$  der Heißkanalfaktor für die Toleranzen (Werkstoffen, Fertigung, Modellierung, Auslegung etc)
- $F_A = 1.15$  der Anteil der die Unsicherheiten im Betrieb kennzeichnet (z.B. Leistungs-, Druck-, Kühlmittelkontrolle etc)
- $F_R = 1.25$  der radiale Formfaktor zur Berücksichtigung der Inhomogenität der Brennelementleistung im Kern
- $F_L = 1.15$  der Formfaktor zur Berücksichtigung der Inhomogenität Stableistung innerhalb eines Brennelements

Die Faktoren  $F_U$  und  $F_A$  lassen sich erst nach vollständiger Auslegung und Inbetriebnahme eines Reaktor mit absoluter Genauigkeit bestimmen und müssen daher basierend auf Angaben der Hersteller von sich aktuell im Betrieb befindlichen Anlagen abgeschätzt werden. Die Formfaktoren der Leistung im Kern  $F_R$  und  $F_L$  sind ebenfalls erst nach einer detaillierten Auslegung des Kerns verfügbar und wurden hier zunächst mit typischen Werten für Druckwasserreaktoren belegt. Basierend auf den eingeführten Werten für die Heißkanalfaktoren kann nun ausgehend von einer konstanten Einlasstemperatur  $T_{K,e} = 280^{\circ}$ C und verschiedenen mittleren Kernaustrittstemperaturen  $T_{K,a} = 280-500^{\circ}$ C die maximal mögliche Austrittstemperatur bestimmt werden. Die Ergebnisse sind für den



Abbildung A.1: Maximale Kernaustrittstemperaturen berechnet durch Heißkanalfaktoranalyse bei einem Druck von 25 MPa und einer Kerneintrittstemperatur von 280 °C

Systemdruck im Primärkreislauf von  $p_{prim} = 25MPa$  in Schaubild A.1 zu sehen. Deutlich zu erkennen ist der starke Anstieg der maximalen Kernaustrittstemperatur bei mittleren Kernaustrittstemperaturen oberhalb der pseudo-kritischen Temperatur bei 384°C. Dieser Verlauf begründet sich durch das Maximum der spezifischen Wärmekapazität am pseudo-kritischen Punkt. Bei mittleren Kernaustrittstemperaturen unterhalb der Pseudokritischen Temperatur steht dieses Maximum so zusagen als Wärmepuffer zur Verfügung und selbst eine starke Überhöhung der zugeführten Leistung führt nur zu einem relativ geringen Anstieg der Kühlmitteltemperatur.

### A.2 Dimensionslose Kennzahlen

Zur Beschreibung von Strömungen in unterschiedlichen Geometrien werden häufig dimensionslose Kennzahlen definiert um bestimmte Eigenschaften einer Strömung zu beschreiben. Darüber hinaus lassen sich so Ähnlichkeiten von Strömungen ausdrücken. Die im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Kennzahlen werden im Folgenden definiert.

#### **Reynolds-Zahl Re**

Die Reynoldszahl Re ist mit der Geschwindigkeit des Fluids u definiert als:

$$Re = \frac{u \cdot \rho \cdot d_v}{\mu} \quad , \tag{A.3}$$

und beschreibt das Verhältnis aus Trägheitskräften zu Reibungskräften. Die Variable  $d_v$ ist ein hydraulischer Durchmesser und wird mit dem Fluidvolumen V und der benetzten

Fläche  $A_b$  gebildet

$$d_v = \frac{4V}{A_b} \quad . \tag{A.4}$$

Abhängig von der gewählten Bezugsgeschwindigkeit wird zwischen der axialen Reynoldszahl Re<sub>ax</sub> (Axialgeschwindigkeit) und der lateralen Reynoldszahl in Querrichtung Re<sub>lat</sub> (Quergeschwindigkeit im Spalt) unterschieden.

#### Nusselt-Zahl Nu

Die Nusselt-Zahl beschreibt das Verhältnis aus konvektivem zu diffusivem Wärmetransport und ist definiert als

$$Nu = \frac{\alpha \cdot D_{char}}{\lambda} \quad . \tag{A.5}$$

Dabei ist  $\alpha$  der Wärmeübergangskoeffizient,  $D_{char}$  eine charakteristische Länge (z.B.  $d_v$ ) im Stabbündel und  $\lambda$  die Wärmeleitfähigkeit des Fluids.

#### Prandtl-Zahl Pr

Die Prandtl-Zahl beschreibt das Verhältnis aus diffusivem Impulstransport und diffusivem Wärmetransport in der Strömung. Sie ist definiert als

$$\Pr = \frac{\nu}{a} = \frac{\mu \cdot c_p}{\rho \cdot \lambda} \quad . \tag{A.6}$$

Mit der kinematischen Viskosität  $\nu$ , der Temperaturleitfähigkeit a, der Dichte  $\rho$ , der Wärmeleitfähigkeit  $\lambda$  und der Wärmespeicherkapazität  $c_p$ .

#### Strouhal-Zahl Sr

Die Strouhal-Zahl beschreibt in dieser Arbeit die Frequenz f der pulsierenden Querströmung im Stabbündel mit

$$Sr = \frac{f \cdot d_v}{u} \quad . \tag{A.7}$$

Dabei bezeichnet  $d_v$  den hydraulischen Durchmesser (Gl. A.4) und u die mittlere Axialgeschwindigkeit in den Unterkanälen des Stabbündels.

#### Courant-Zahl CFL

Die Courant-Zahl bzw. die Courant-Friedrich-Lewy-Zahl CFL beschreibt die Anzahl an Zellen, um das sich ein Fluidpaket während eines Zeitschritts in der CFD Rechnung fortbewegt. Sie ist definiert als:

$$CFL = \frac{u \cdot \Delta t}{\Delta x} \quad . \tag{A.8}$$

Dabei entspricht u der lokalen Geschwindigkeit in der Berechnungszelle und  $\Delta x$  der lokalen Gitterweite. Um übermäßige numerische Diffusion in der zeitlichen Diskretisierung zu verhindern, sollte der Zeitschritt  $\Delta t$  angepasst werden. Beim in dieser Arbeit verwendeten Verfahren gilt generell CFL < 100 [13]. In manchen (wie dem in dieser Arbeit vorliegenden) Strömungsfällen kann jedoch zur Auflösung bestimmter zeitabhängiger Phänomene ein deutlich kleiner Wert für CFL notwendig sein.



## A.3 Brennelementgeometrie

Abbildung A.2: Geometriedaten für BE-Bündel, BE und Brennstab nach Hofmeister [33]