

Entwicklung eines gekoppelten Neutronik-Thermohydraulik-Codes zur Untersuchung von Störfällen in schnellen Natrium gekühlten Reaktoren

Nicole Guilliard

September 2017 IKE-2-158



**Entwicklung eines gekoppelten
Neutronik-Thermohydraulik-Codes zur
Untersuchung von Störfällen in schnellen
Natrium gekühlten Reaktoren**

**Development of a coupled Neutronic
Thermalhydraulic Code System for ac-
cident analysis in sodium-cooled fast re-
actors**

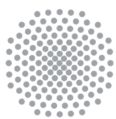
von der Fakultät Energie-, Verfahrens- und Biotechnik
der Universität Stuttgart zur Erlangung der Würde eines
Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.) genehmigte Abhandlung

vorgelegt von
Nicole Guilliard
geboren in Kirchheim/Teck

Hauptberichter: Prof. Dr.-Ing. Jörg Starflinger
Mitberichter: Prof. Dr.-Ing. Stefan Weihe
Tag der Einreichung: 12.04.2017
Tag der mündlichen Prüfung: 26.09.2017

ISSN 0173-6892

September 2017 IKE-2-158



Vorwort

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen Personen bedanken, die mich bei der Erstellung dieser Arbeit unterstützt haben.

An erster Stelle gilt mein Dank meinem Doktorvater Herr Prof. Starflinger. Ich danke ganz herzlich, dass er mich so freundlich am Institut aufgenommen hat und mir die Chance gegeben hat, diese Arbeit zu verfassen. Ich danke für die Unterstützung und die Motivation während der gesamten Arbeit und dafür, dass er stets versucht hat, mir den Rücken für die Doktorarbeit frei zu halten. An dieser Stelle möchte ich mich auch für die Freiräume bedanken, die mir geboten wurden, um an interessanten Forschungsprojekten mitarbeiten zu können.

Ausserdem gilt mein Dank meinem Mitberichter Herrn Prof. Weihe, der sich umfassend mit meiner Arbeit auseinandergesetzt hat, sowie Herrn Prof. Resch, der sich bereit erklärt hat, den Prüfungsvorsitz zu übernehmen. Beiden möchte ich ganz herzlich für ihr Engagement und ihre freundliche Art danken, mit der sie zum Gelingen der Prüfung beigetragen haben.

Herrn Bernnat und Herrn Buck danke ich für die fachliche Unterstützung und die vielen wertvollen Ratschläge. Sie gaben mir mit ihrem fundierten Fachwissen viele Anregungen und ohne ihre Ideen und Ihre Kritik wäre meine Arbeit niemals soweit gekommen. Ich danke für die Geduld und die vielen Stunden, die beide aufgebracht haben, um mir eine umfassende Einarbeitung zu ermöglichen.

Ein ganz besonderer Dank geht an alle Mitarbeiter und Mitarbeiterinnen des Instituts sowie an meine Mitdoktoranden für die außerordentlich gute Zusammenarbeit und das freundliche Miteinander. Diese Arbeit wäre ohne ihre Hilfe nicht möglich gewesen, weshalb ich mich bei allen herzlich bedanken will.

Ich möchte mich weiterhin bei allen Freunden und Verwandten bedanken, die mich neben der Arbeit unterstützt haben. Im Besonderen bedanke ich mich bei meinen Eltern, die mir das Studium ermöglichten und mir auch während der Anfertigung der Doktorarbeit immer unterstützend zur Seite standen.

Kurzfassung

Das Ziel dieser Arbeit besteht in der Entwicklung eines Code-Systems zur Analyse transienter Störfälle in schnellen Natrium gekühlten Reaktoren (SFRs). Bei SFRs handelt es sich um ein Konzept, das gegenüber Leichtwasserreaktoren (LWRs) wesentliche Vorteile bietet. Aufgrund der exzellenten Brennstoffausnutzung, der Möglichkeit langlebigen, radioaktiven Abfall zu reduzieren und der Notwendigkeit schneller Reaktoren zur Umsetzung eines geschlossenen Brennstoffkreislaufs, erweist sich die Technik als besonders geeignet, den von Experten definierten Anforderung an künftige Reaktoren bezüglich Sicherheit, Nachhaltigkeit und Wirtschaftlichkeit gerecht zu werden. Die Umsetzung erfordert ein Kerndesign, bei dem der Kern während des Betriebs nicht in der Konfiguration mit der höchsten Reaktivität vorliegt. Während bei LWRs ein Kühlmittelverlust zum nuklearen Abschalten des Reaktors führt, führt ein solcher Störfall in einem SFR aufgrund fehlender parasitärer Neutronenabsorption und verminderter Neutronenbremsung zu einem Anstieg der Reaktivität. Diese neutronenphysikalischen Besonderheiten erfordern bei Analysen zum transienten Verhalten von SFRs daher eine kollektive Betrachtung von thermohydraulischem und neutronischem Verhalten zur korrekten Beschreibung der Entwicklung des Gesamtsystems während der Transienten. Zur Entwicklung eines Codesystems, das die Abhängigkeiten von Neutronik und Thermohydraulik erfassen kann, wird auf zwei bestehende Codes zurückgegriffen. Als Thermohydraulikmodul dient der Code ASTEC-Na (GRS, IRSN), der in einem internationalen Projekt speziell als SFR-Analysetool entwickelt wurde. Mit Validierungsrechnungen zu den CABRI-Versuchen wird die Eignung des Tools zur Beschreibung von Natrium gekühlten Systemen bestätigt. Zwar enthält ASTEC-Na ein Neutronik-Modul, das jedoch auf einem Punktkinetikmodell basiert. Damit können lokale Flussänderungen sowie Verschiebungen des Neutronenspektrums nicht erfasst werden. Um eine detaillierte Beschreibung der Neutronik und der Rückwirkungseffekte zu ermöglichen, wird der Diffusionscode DYN3D (HZDR) mit ASTEC-Na gekoppelt. Die Verwendung eines nodalen Diffusionscodes bedarf der Erstellung einer problemspezifischen Querschnittsdatenbasis. Neben einer geeigneten Gruppenstruktur muss die Datenbasis alle möglichen Systemzustände während der Transienten erfassen können. Der Monte Carlo Code SERPENT2 (VTT) hat standardmäßig Routinen implementiert, womit Querschnittsdaten in beliebiger Gruppenstruktur erstellt werden können. Das gekoppelte Code-System wird auf einen generischen SFR-Kern (OECD/NEA Benchmark) angewendet. Zu diesem Zweck wurde mit SERPENT2 eine Querschnittsdatenbasis in 35 Gruppen mit Variationen der Brennstofftemperatur, der Brennstoffdichte sowie der Kühlmitteldichte erzeugt. Diese Daten werden DYN3D als Input bereitgestellt. Durch Vergleich der Ergebnisse stationärer Rechnungen mit DYN3D und Monte Carlo Simulationen mit SERPENT2 und MCNP6 (LANL) wird die Eignung der Querschnitte und des erstellten DYN3D Modells verifiziert. Die Abstimmung der gekoppelten Rechnungen erfolgt über DYN3D und ist über Modifikationen am Quellcode eingebaut. ASTEC-Na wird in jedem Zeitschritt mittels „Restart“ aufgerufen. Restriktionen bezüglich des Quellcodes von ASTEC-Na machen eine interne Kopplung nicht möglich. Zusätzlich wurden Module entwickelt, die den Datenaustausch zwischen den beiden Codes organisieren. Zur Demonstration der Berechnung gekoppelter, transientser Analysen für SFRs werden zwei transiente Störfälle berechnet (OECD/NEA Benchmark): ein unkontrollierter Kühlmitteldurchsatz-Störfall, bei dem der Durchsatz exponentiell auf 10% des nominellen Durchflusses zurückgeht, sowie eine unkontrollierte Reaktivitätszufuhr mit einem externen Reaktivitätseintrag von 1,8\$. Eine detaillierte Analyse über die Entwicklung der einzelnen Parameter zeigt, dass die gekoppelte Code-Version plausible Ergebnisse liefert und eine Vorhersage des Störfallablaufs ermöglicht.

Abstract

The aim of the doctoral thesis is the development of a coupled neutronic-thermal hydraulic tool for analysis of severe accidents in sodium-cooled fast reactors (SFRs). With the foundation of the Generation IV International Forum (GIF IV) this reactor technology gained new interest, as it fulfills the main goals defined by the experts of GIF IV for future nuclear power plants. Besides an excellent fuel utilization due to the possibility of breeding during operation, fast reactors can help to reduce long-lived radioactive waste (burner reactor design) and can be used for the realization of a closed fuel cycle management. However, one big safety issue is the fact that SFRs are not in their most reactive configuration under operation conditions. Unlike in Light Water Reactors (LWRs), a loss of coolant does not imply a nuclear shut down of the reactor. Instead the loss of sodium leads to a higher neutron flux in the system due to reduced parasitic absorption of neutrons in the sodium. Another consequence of the reduced sodium fraction is a harder neutron energy spectrum as the neutrons are no longer slowed down by scattering reactions. This effect implies a further increase of neutrons in the system, as the shifting of the neutron spectrum to higher energies is associated with a higher neutron yield in important isotopes (e.g. Pu239). Hence, the analysis of severe accidents in SFRs requires both, the consideration of the thermal hydraulic behavior of the core as well as the neutronic aspects. For the coupling a set of existing codes was chosen. The thermal hydraulic part is calculated by the ASTEC-Na Code developed by IRSN and GRS. The code is based on the well validated modular code ASTEC for LWRs. In the JASMIN project (2012–2016) the code was adapted for sodium and new models were implemented. The modern code architecture and the modular code structure enable an easy implementation of further developments. Simulations of CABRI experiments show, that the code is able to catch the main phenomena occurring during a transient perturbation of sodium-cooled fast systems. In the JASMIN project a point kinetic model was implemented to account for the neutronics. But as a point kinetic model cannot calculate changes in the flux shape, the idea was to couple the ASTEC-Na thermal hydraulics with a more detailed neutronic tool. For the neutronic part the code DYN3D from HZDR (Helmholtz-Zentrum Dresden/Rossendorf) is used. DYN3D is a nodal diffusion code with either square or hexagonal geometry options. The use of a nodal code requires preprocessing of problem specific homogenized, group-wise cross section data that covers the range of expected changes in important influence parameters during transient calculations. The cross section library is calculated with the Monte Carlo Code SERPENT2 (VTT,Finland) for variations in the fuel temperature, the fuel density (to account for axial expansion) and the sodium density in 35 energy groups. The comparison of DYN3D calculations using the generated cross section data base with results obtained from detailed Monte Carlo simulations with SERPENT2 and MCNP6 confirmed the applicability of the used method. The development of suitable exchange scripts enables the data exchange between the two codes to get a full description with feedback of the system during transient conditions. For demonstration two kinds of accident scenarios are applied to a generic SFR core (definition from OECD/NEA Benchmark): an Unprotected Loss Of Flow (ULOF) and an Unprotected Transient OverPower accident (UTOP). The test cases show that the coupled code version is appropriate to simulate the early stage of severe accidents in sodium-cooled fast reactors.

Inhaltsverzeichnis

Kurzfassung	II
Abstract	III
Abbildungsverzeichnis	VII
Tabellenverzeichnis	XVI
Abkürzungen	XVII
1 Einleitung und Ziel der Arbeit	1
1.1 Einführung	1
1.2 Der schnelle natriumgekühlte Reaktor - SFR	3
1.2.1 Prinzip eines schnellen natriumgekühlten Reaktors	3
1.2.2 Sicherheitsaspekte und Einflussfaktoren auf das Kernverhalten	7
1.2.3 Reaktivitätsänderungen als Einleitungsereignis schwerer Störfälle	11
1.3 Code-Entwicklungen zu Reaktivitätsstörfällen in SFRs	13
1.3.1 Aktuelle Referenzcodes	14
1.4 Ziel der Arbeit	17
2 Theorie und Vorstellung der verwendeten Codes	20
2.1 Neutronentransport	20
2.1.1 Transporttheorie	21
2.1.2 Lösung der Diffusionsgleichung in DYN3D	26
2.1.3 Monte Carlo Verfahren - MCNP6 and SERPENT2	27
2.1.4 Störungstheorie und Reaktivität	33
2.2 Thermohydraulik - ASTEC-Na	37
2.2.1 Beschreibung der Zwei-Phasen-Strömung von Natrium	38
2.2.2 Thermisches und thermomechanisches Brennstabverhalten	44
3 Validierung von ASTEC-Na anhand der CABRI-Experimente	55
3.1 CABRI Experimente	55
3.2 Modellierung der CABRI Teststrecke in ASTEC-Na	56
3.3 CABRI - LT2 Versuch	57
3.3.1 Beschreibung des Experiments	57
3.3.2 Ergebnisse	58
3.4 CABRI - AGS0 Versuch	62
3.4.1 Beschreibung des Experiments	62
3.4.2 Ergebnisse	62

4	Kopplung von DYN3D mit ASTEC-Na	68
4.1	Detaillierte Kopplung und Zeitschrittsteuerung	69
4.2	Module für den Datenaustausch	72
4.2.1	Übergabe der Thermohydraulik-Daten von ASTEC-Na an DYN3D	72
4.2.2	Übergabe der Leistung von DYN3D an ASTEC-Na	73
4.3	Erzeugung von Gruppenquerschnittsdaten	75
4.4	Routine zur Korrektur des Diffusionskoeffizienten	80
5	Beschreibung und Modellierung des Benchmark-Kerns	84
5.1	Definition des Benchmark-Kerns	84
5.2	Modellierung in SERPENT2, MCNP6 und DYN3D	85
5.3	Validierung des Modells und der Querschnittsdaten für DYN3D	87
5.4	Modell des Benchmarkkerns in ASTEC-Na	91
6	Anwendung des gekoppelten Systems DYN3D/ASTEC-Na auf einen SFR-Kern	93
6.1	Reaktivitätszufuhr bei Versagen der Schnellabschaltung - UTOP	94
6.1.1	Beschreibung des UTOP	94
6.1.2	Ergebnisse für den UTOP-Störfall	95
6.1.3	Wahl der Zeitschrittweite für gekoppelte Rechnungen	113
6.1.4	Variation der Gapweite	117
6.1.5	Bewertung UTOP	124
6.2	Kerndurchsatzstörfall bei Versagen der Schnellabschaltung - ULOF	125
6.2.1	Beschreibung des ULOF Störfalls	125
6.2.2	Ergebnisse für den ULOF-Störfall	125
6.2.3	Wahl der Zeitschrittweite für gekoppelte Rechnungen	137
6.2.4	Variation des Gaps	141
6.2.5	Bewertung ULOF	145
7	Zusammenfassung und Ausblick	146
	Anhang	149
	Literatur	156

Abbildungsverzeichnis

1.1	Spaltquerschnitte von Uran-235, Uran-238 und Plutonium-239 in Abhängigkeit der Energie des einfallenden Neutrons. Zusätzlich ist der Einfangquerschnitt von Uran-238 angegeben, da der Brutprozess mit einem Neutroneneinfang initialisiert wird (Daten exportiert aus [76]).	4
1.2	Neutronyield bzw. -ausbeute in Abhängigkeit der Energie des Neutrons, das die Spaltung verursacht hat. Die Ausbeute gibt die Anzahl der pro absorbiertem Neutron entstehenden prompten Neutronen an. Für einen effektiven Brutreaktor muss der Neutronenyield über einem Wert von zwei liegen. Die bei der Spaltung von Pu-239 frei werdenden Neutronen haben eine mittlere Energie von 5.9MeV.	5
1.3	Schematischer Aufbau eines Natrium gekühlten Brutreaktors in „Pool“-Bauweise. Im Primärkreislauf wird das kalte Natrium durch den Kern gepumpt und im oberen Teil des Reaktorkessels durch einen Wärmetauscher geleitet, wo die Wärme an den mechanisch separierten Sekundärnatriumkreislauf abgegeben wird. Dieser ist im Dampferzeuger an einen Wasser/Dampfkreislauf gekoppelt über den eine Turbine angetrieben wird (Darstellung nach [1]).	6
1.4	Schema zum Verlauf von Störfällen. Zu Beginn steht je ein Einleitungsergebnis, das eine Störung hervorruft und zu einer Änderung der Reaktivität führt. Ist die Reaktivitätsänderung stark positiv und kann nicht durch interne Rückwirkung abgefangen werden, kommt es zu einer Leistungsexkursion, eventl. bis zur kompletten Zerstörung des Kerns. Bei extrem starker mechanischer Einwirkung geht der Störfall direkt in Phase II über (angelehnt an [38]).	12
1.5	Schema zur Kopplung der einzelnen Komponenten im Codesystem FAST (nach [67]).	16
2.1	Skizze zum Zusammenhang von den Modellen CESAR, das das Natriumverhalten im Primär- und Sekundärkreis beschreibt, und ICARE, das das thermische und mechanische Komponentenverhalten modelliert, und den Effekten, die sich unmittelbar auf die Reaktivität auswirken. Die auftretenden Phänomene sind dabei nicht voneinander unabhängig. Vielmehr hängt die korrekte Beschreibung der Natrium-Thermohydraulik vom thermischen Verhalten der Komponenten ab, welches wiederum eine Abhängigkeit vom thermo-mechanischen Komponentenverhalten aufweist.	38
2.2	Wärmefluss in Abhängigkeit der Wandtemperatur und Arten der Wärmeübertragung (nach [11]).	42

2.3	Typischer Temperaturverlauf in einem SFR-Brennstab bei normalem Betrieb. Im Inneren des Pellets herrscht eine Temperatur von bis zu 2600°C, die nach aussen hin stark abfällt. Entsprechend der lokalen Temperatur bilden sich im Pellet Zonen mit spezifischer Struktur aus. In der heißesten Zone innen liegt der Brennstoff in sehr poröser Form vor, wobei sich schon nach kurzem Betrieb ein Loch in der Mitte ausbildet. Darauf folgt eine Zone mit großen Rissen in radialer Richtung und großen Grobkörnern. Zone drei ist gekennzeichnet durch kleinere Blasen und mit Korngrenzen und wird auch als „Grobkornbildungszone“ bezeichnet. Im äusseren Bereich liegt der Brennstoff im Herstellungszustand vor und weist kleinere Blasen und Defekte aus dem Herstellungsprozess auf (nach [45]).	45
3.1	Übersichtsschema des CABRI Reaktors. Die eigentliche Teststrecke befindet sich in einem Wasser moderierten „Driver-Core“.	56
3.2	Triggerung der TOP Experimente durch Öffnen der Ventile an den Helium-Stäben, wodurch der Absorber ausgestoßen wird und der Druck in den Stäben schlagartig absinkt. Infolge dessen kommt es zu einem scharfen Leistungspeak.	57
3.3	Nodalisierung des CABRI Experiments in ASTEC-Na am Beispiel des LT2 Experiments. Die Modellierung des äußeren Testkanals in radialer Richtung ist in den CABRI-Simulationen mit ASTEC-Na identisch. Lediglich die Zusammensetzung und Geometrie des Brennstabs ändert sich.	58
3.4	Verlauf der Leistung im Driver Core während des LT2 Experiments. Es wurden zwei Leistungspeaks erzeugt, wobei die maximale Leistungsüberhöhung bei dem 25-fachen Wert der Ausgangsleistung lag.	59
3.5	Axiales Profil der Kühlmitteltemperatur im Test LT2 vor Beginn der Transienten.	59
3.6	Axiale Brennstofftemperatur im Versuch LT2 vor Beginn der Transienten. Die Kurve zeigt die Brennstofftemperatur an der Außenseite des Pellets.	60
3.7	Kühlmitteltemperatur auf Höhe BFC (Bottom Fuel Column) über der Zeit. Die Temperatur aus SAS-SFR wurde 0.2cm über dieser Position genommen. Aus der Messung sind Daten aus drei Temperaturfühlern angegeben.	61
3.8	Kühlmitteltemperatur 85 bzw. 86cm über der Position BFC (Bottom Fuel Column) über der Zeit. Geplottet sind die Temperaturen aus den fünf Messungen sowie aus der Simulation mit ASTEC-Na und SAS-SFR.	61
3.9	Axiale Ausdehnung des Brennstoffs über der Zeit. Die experimentellen Daten sind nicht frei gegeben.	62
3.10	Verlauf der Leistung (normiert) während der Transienten im Versuch, in ASTEC-Na und in SAS-SFR. Das Maximum der Leistung liegt beim 12-fachen Ausgangswert von 32kW, was in etwa 384kW entspricht.	63
3.11	Axiales Leistungsprofil vor Beginn der Transienten.	63
3.12	Radiales Profil der Brennstofftemperatur in der heißesten Masche PPN (Peak Power Node) vor Beginn der Transienten.	64
3.13	Axiales Profil der Natriumtemperatur vor Beginn der Transienten.	64

3.14	Natriumtemperatur ca. 38cm über BFC über der Zeit.	65
3.15	Natriumtemperatur ca. 77cm über BFC über der Zeit.	65
3.16	Axiales Profil der Kühlmitteltemperatur zur Zeit $t=0.8s$ nach Beginn der Transienten. Die Höhenangaben sind relativ zur Position BFC (Bottom of Fuel Column) angegeben.	66
3.17	Spaltgasrückhaltung im Brennstoff axial entlang des Brennstabs.	66
3.18	Axiale Ausdehnung des Brennstoffs über der Zeit.	67
4.1	Übersichtsschema der Codes und ihrer Verwendung. SERPENT2 ist nicht Bestandteil der Kopplung, sondern dient dazu, in Vorabrechnungen eine problemspezifische Querschnitts-Bibliothek zu erstellen.	68
4.2	Fließdiagramm des Hauptprogramms in DYN3D.links: Hauptroutine zur Berechnung stationärer Zustände.rechts: Detailliertes Fließschema für transiente Rechnungen (nach [42]).	70
4.3	Übersichtsschema zur Thermohydraulik-Neutronik Iteration in transienten Rechnungen. Pro Makrozeitschritt erfolgt mindestens ein zweimaliger Aufruf der Thermohydraulik.	71
4.4	Axiale und radiale Unterteilung des Brennstoffgitters in ASTEC-Na und DYN3D.	72
4.5	Schema zur Erzeugung von makroskopischen Querschnitten für das feste DYN3D-Gitter aus den Thermohydraulikdaten des ausgedehnten ASTEC-Na-Gitters.	73
4.6	Verteilung der in DYN3D berechneten Leistung auf die ASTEC-Na Maschen.	74
4.7	Flussspektrum ermittelt mit MCNP6 für die fünf axialen Brennstoffzonen im inneren Kern (Tally mit 292 Gruppen). Betrachtet wird dabei ausschließlich der Fluss im Brennstoff, der auf ein Startneutron normiert ist.	77
4.8	Flussspektrum ermittelt mit SERPENT2 bei der Erstellung der Querschnittsdaten in 35 Energiegruppen für drei axiale Brennstoffzonen im inneren Kern. Der Fluss bezieht sich auf das homogenisierte Brennelement.	78
4.9	Kumulierte Spaltraten für die untere und die mittlere Brennstoffzone im inneren Kern aus SERPENT2 Brennelement-Rechnungen mit reflektierenden Randbedingungen für den Nominalfall in 35 Energiegruppen, wobei Gruppe 35 die Gruppe mit der niedrigsten Energie ist. Das Fehlerintervall gibt den 2σ -Bereich an.	79
4.10	Kumulierte Spaltraten für die untere und die mittlere Brennstoffzone im inneren Kern aus SERPENT2 Brennelement-Rechnungen mit reflektierenden Randbedingungen für den Voidfall in 35 Energiegruppen. Das Fehlerintervall gibt den 2σ -Bereich an.	80
4.11	Modell der „Superzelle“ zur Herleitung eines effektiven Diffusionskoeffizienten in Kanälen mit geringer Dichte.	81
5.1	Generischer Kern nach einem SFR-Neutronik-Benchmark der OECD/NEA [10]. Es handelt sich um einen „large oxide“ Kern mit einer Leistung von 3600 MWth.	84

5.2	Heterogene Modellierung in SERPENT2 und MCNP6 von Brennelementen (links), Regelementen des primären (mittig) und des sekundären (rechts) Abschaltsystems. Die Brennelemente enthalten 271 Brennstäben, die mit Hohlpellets gefüllt sind. Die Geometrie der Brennelemente von innerem und äußerem Kern sind identisch.	86
5.3	Modellierung in SERPENT2 und MCNP6. links: Querschnitt durch ein Brennelement. rechts: Axialer Schnitt durch ein Brennelement.	87
5.4	Ergebnisse zur Berechnung des Multiplikationsfaktors. Der grau unterlegte Bereich zeigt die Verteilung der Benchmark-Resultate [13].	89
5.5	Beträge der Reaktivitätsdifferenzen für verschiedene Fälle bezogen auf die Reaktivität im Nominalzustand. Der grau unterlegte Bereich zeigt die Verteilung der Benchmark-Resultate.	90
5.6	Relative Differenz in der radialen Leistungsverteilung über den gesamten Kern auf Höhe der mittleren Brennstoffzone. Positionen, an denen sich Steuerelemente befinden, sind mit „CR“ gekennzeichnet.	90
5.7	Modellierung des Kerns in ASTEC-Na. Brennelemente auf einem „Ring“ werden durch ein Makro beschrieben.	91
5.8	Positionen von Brennelementen im Kern, die in der Auswertung genauer betrachtet werden.	92
6.1	Verlauf der externen Reaktivitätszugabe im UTOP definiert nach Benchmark OECD/NEA. Dem Reaktor soll innerhalb von 40ms eine externe Reaktivität von 1,8\$ zugeführt werden, die 20ms aufrechterhalten wird. Im Anschluß soll die externe Reaktivität innerhalb von 40ms wieder aus dem System genommen werden.	94
6.2	Reaktivität in Abhängigkeit der Steuerstabstellung ermittelt aus stationären Neutronik-Rechnungen.	94
6.3	Lokale Abhängigkeit des Neutronenspektrums. Aufgetragen sind die Neutronen pro cm^2 und MeV in jeder der 35 Energiegruppen über der Energie. links: Neutronenspektren in axialer Richtung für Brennelement 376. rechts: Neutronenspektren in radialer Richtung für je ein BE aus Ring1 (Ass.376), Ring7 (Ass.199) und Ring13 (Ass.63).	96
6.4	Neutronenspektrum für ein exemplarisches Brennelement aus dem innersten Ring für verschiedene Zeiten. Der Neutronenfluss ergibt sich aus einer Mittelung über die obersten drei Maschen, die Brennstoff enthalten (Mittelung über Ebene 23-25).	97
6.5	Neutronenspektrum für ein exemplarisches Brennelement aus dem innersten Ring für verschiedene Zeiten. Der Neutronenfluss ergibt sich aus einer Mittelung über drei axial zentrale Maschen des aktiven Kerns. Das Spektrum ist im Zentrum deutlich „härter“, da hier der Einfluss des Reflektors am geringsten ist. Dies zeigt sich in einem Abfall des Flusses in den niederenergetischen Energiegruppen (Mittelung über Ebene 17-19).	98
6.6	Neutronenspektrum für ein exemplarisches Brennelement aus dem innersten Ring für verschiedene Zeiten. Der Neutronenfluss ergibt sich aus einer Mittelung über die drei untersten Maschen des aktiven Kerns (Mittelung über Ebene 11-13).	98

- 6.7 Flussspektrum in einer oberen Masche des inneren Rings für verschiedene Zeiten in linearer Flussauftragung. Der Einfluss des Steuerstabes der bei $t=40s$ voll ausgefahren ist, zeigt sich vor allem in den niederen Energiegruppen. Zu beachten ist die logarithmische Energieskala. Damit ist der Einfluss auf das Gesamtverhalten des Systems kaum durch die untersten Gruppen bestimmt, da diese extrem schmal sind. Den Haupteinfluss auf das Systemverhalten hat das Verfahren des Steuerstabes auf die Gruppen mit Energien von ca. $10^{-2} - 10^0 MeV$ (siehe dazu die folgende Abbildung). 99
- 6.8 Reaktionsraten für die (n,α) -Reaktion bei dem vorherrschenden Fluss im Kontrollelement auf einer oberen Ebene. Durch das Flussprofil (und den geringen thermischen Fluss) finden die meisten Reaktionen in einem Energiebereich von $10^{-2} - 10^0 MeV$ statt. 99
- 6.9 Verlauf der Leistung in einem UTOP mit einem externen Reaktivitätseintrag von 1,8 \$ (relative Leistung mit $P(t=0s)=3600MW_{th}$). Im ersten Leistungspeak nach ca. 25ms beträgt die Gesamtleistung das 390-fache der Nominalleistung. Der zweite Peak ist mit dem 117-fachen der Ausgangsleistung deutlich schwächer. Nach 100ms fällt die Leistung annähernd auf das Ausgangsniveau zurück. Zusätzlich ist die Position der Regelelemente angegeben, die bei vollem Verfahrensweg 1,8\$ an Reaktivität liefern. 100
- 6.10 Leistungsverlauf in einem Brennelement in einem UTOP (1,8 \$). Die hier dargestellte Leistung bezieht sich auf ein Brennelement im innersten Ring (Ass.376). Der axiale Verlauf zeigt, dass in zentraler Ebene das Leistungsmaximum auftritt. Einem enormen ersten Leistungsanstieg folgt ein zweiter, deutlicher kleiner Leistungspeak. 101
- 6.11 Radiale Verteilung der Leistung über den Kern pro Knoten (in einem Brennelement auf einer Ebene). *links*: radiale Leistungsverteilung im ersten Peak. *rechts*: radiale Leistungsverteilung im zweiten Peak. 102
- 6.12 Axiales Leistungsprofil für ein Brennelement aus dem innersten, heißesten Ring für verschiedene Zeiten. Nach Durchlaufen der externen Reaktivitätszufuhr geht die Leistung auf ein leicht erhöhtes Niveau zurück. . 102
- 6.13 Axiales Leistungsprofil für Brennelemente an verschiedenen Positionen im Kern zur Zeit $t=25ms$ (im ersten Leistungspeak). In allen Brennelementen liegt das Leistungsmaximum in der zentralen Zone. Von der Kernmitte hin zum Reflektor wird das Profil flacher. 103
- 6.14 Zeitlicher Verlauf der Temperaturen in Brennstoff, Hüllrohr und Natrium für je ein Brennelement aus dem inneren (Ass.376) und dem äußeren Ring (Ass.63) auf Ebene 18 (Kernmitte). Zunächst erhöht sich die Brennstofftemperatur. Hüllrohr- und Kühlmitteltemperatur folgen. Nach 100ms fängt die Brennstofftemperatur an abzufallen. 104
- 6.15 Axialer Verlauf der mittleren Brennstofftemperatur (aus vier radialen Zonen im Pellet) für verschiedene Zeiten. Nachdem die Steuerstäbe wieder Eingefahren sind (100ms) kühlt sich der Brennstoff sehr langsam wieder ab. 105

6.16	Axialer Verlauf der maximalen Brennstofftemperatur (innerste Zone im Pellet) für verschiedene Zeiten. Die axial mittleren Zonen erreichen nach ca. 65ms die Schmelztemperatur, die je nach Plutoniumgehalt bei 2500-2600K liegt.	105
6.17	Radiale Verteilung der Brennstofftemperatur in der innersten, heißesten Brennstoffzone des Pellets (vier radiale Zonen insgesamt) für die axiale Ebene 20. In der Mitte des Pellets erreicht der Brennstoff die Schmelztemperatur.	106
6.18	Gesamte axiale Ausdehnung des Brennstoffs in jedem Brennelement. Die Prozentangabe ist bezogen auf den im Benchmark definierten Zustand des Kerns. Die Iteration zum „Steady State“ ist mit einer Ausdehnung von ca. 0,8% verbunden. Im Verlauf der Transienten ergibt sich eine Ausdehnung von ca. 1,6% im inneren Teil des Kerns (entspricht ca. 1,6cm).107	107
6.19	Axiales Profil der Hüllrohrtemperatur im innersten Ring für verschiedene Zeiten. Das Hüllrohr heizt sich im oberen aktiven Kern am meisten auf (oberste Brennstoffebene: 25), da das aufgeheizte Natrium die Wärme in den oberen Ebenen nicht mehr so effektiv abführen kann.	109
6.20	Axialprofil des Hüllrohrradius für ein Brennelement aus dem innersten Ring für verschiedene Zeiten. Die radiale Ausdehnung des Hüllrohrs, durch die zusätzlich Natrium aus der Masche verdrängt wird, folgt dem Verlauf der Hüllrohrtemperatur.	109
6.21	Axialer Verlauf der Natriumtemperatur im innersten Ring für verschiedene Zeiten.	110
6.22	Entwicklung der Natriumtemperaturen an verschiedenen Positionen im Kern.	110
6.23	Axiales Profil der Gasanteile des Natriums für verschiedene Zeiten in der heißesten Masche.	111
6.24	Verlauf der Gesamtreaktivität im System während eines UTOPs mit 1,8\$ externen Reaktivität und die jeweiligen Anteile, die sich aus den einzelnen Effekten ergeben.	112
6.25	Abhängigkeit des Dopplereffekts von der Brennstofftemperatur für den generischen SFR Benchmark-Kern ermittelt aus Neutronik-Rechnungen. 112	112
6.26	Entwicklung der Leistung in einem UTOP (1,8\$) unter Verwendung verschiedener Zeitschrittweiten für die Thermohydraulik-Neutronik-Iteration.113	113
6.27	Entwicklung der Gesamtreaktivität in einem UTOP (1,8\$) unter Verwendung verschiedener Zeitschrittweiten für die Thermohydraulik-Neutronik-Iteration.	114
6.28	Reaktivitätsminderung in einem UTOP (1,8\$) aufgrund des Dopplereffekts unter Verwendung verschiedener Zeitschrittweiten für die Thermohydraulik-Neutronik-Iteration. Mit einer zu großen Zeitschrittweite wird der negative Beitrag mit -240pcm deutlich überschätzt. Im Vergleich dazu liefern die kürzeren Schrittweiten einen Beitrag von ca. -150pcm.	115

6.29	Entwicklung des Reaktivitätsbeitrags der sich durch axiale Ausdehnung des Brennstoffs verbunden mit einer Reduktion der Dichte in den einzelnen Maschen in einem UTOP (1,8\$) unter Verwendung verschiedener Zeitschrittweiten für die Thermohydraulik-Neutronik-Iteration ergibt. Wiederum führt eine zu große Schrittweite zu einer Überschätzung des Beitrags mit -340pcm. Mit geeigneter Schrittweite beläuft sich die Reaktivitätsminderung nach Durchlaufen des UTOPs auf ca. -200pcm.	115
6.30	Entwicklung des Reaktivitätsbeitrags in einem UTOP (1,8 \$) unter Verwendung verschiedener Zeitschrittweiten für die Thermohydraulik-Neutronik-Iteration, der sich aus der Änderung des Natriumanteils ergibt. Im Vergleich zum Dopplerbeitrag bzw. Expansionsbeitrag ist die Änderung in diesem Fall positiv und wesentlich kleiner (+15pcm für ausreichend kleine Zeitschrittweiten.)	116
6.31	Zeitlicher Verlauf der externen Reaktivitätszufuhr, die nach Benchmark 1,8 \$ erreichen soll, was bei einem Anteil an der Reaktivität durch verzögerte Neutronen von ca. 350pcm unter Normalbedingungen einem Wert von ca. 630pcm entspricht. Der nicht exakt lineare Anstieg bzw. Abfall ist durch den Cusping-Effekt zu erklären.	117
6.32	Zeitlicher Verlauf der mittleren Brennstofftemperatur im innersten Ring in einem UTOP (1,8 \$) unter Verwendung verschiedener Gapweiten.	118
6.33	Zeitlicher Verlauf der maximalen Brennstofftemperatur im innersten Ring in einem UTOP (1,8 \$) unter Verwendung verschiedener Gapweiten	119
6.34	Zeitlicher Verlauf der Kühlmitteltemperatur in der heißesten Zone in einem UTOP (1,8 \$) unter Verwendung verschiedener Gapweiten. Der Siedepunkt von ca. 1150K wird nicht erreicht.	119
6.35	Zeitlicher Verlauf der Hüllrohrtemperatur in der heißesten Masche in einem UTOP (1,8 \$) unter Verwendung verschiedener Gapweiten.	120
6.36	Vergleich des Leistungsverlaufs in einem UTOP (1,8 \$) bei Verwenden verschiedener Gapweiten.	121
6.37	Entwicklung des Reaktivitätsbeitrags aufgrund des Dopplereffekts in einem UTOP (1,8\$) unter Verwendung verschiedener Gapweiten.	121
6.38	Entwicklung des Reaktivitätsbeitrags aufgrund der axialen Brennstoffausdehnung in einem UTOP (1,8 \$) unter Verwendung verschiedener Gapweiten.	122
6.39	Entwicklung des Reaktivitätsbeitrags durch Änderung der Natriumdichte in einem UTOP (1,8\$) unter Verwendung verschiedener Gapweiten.	122
6.40	Verlauf der externen Reaktivität unter Verwendung verschiedener Gapweiten. Der maximale Eintrag erhöht sich leicht mit kleiner werdendem Gap.	123
6.41	Entwicklung des Reaktivitätsbeiträge resultierenden aus verschiedenen Effekten in einem UTOP (1,8\$) unter Verwendung verschiedener Gapweiten sowie die Gesamtreaktivität als Summe der Einzelbeiträge.	123
6.42	Entwicklung der Natrium-Durchflussrate bei dem hier betrachteten ULOF-Störfall. Die Exponentialfunktion hat eine Halbwertszeit von 10s und einen unteren Grenzwert von 10% des ursprünglichen, nominalen Natriumdurchflusses.	125

6.43	Axialprofil der Kühlmitteltemperatur für Brennelement 344 zu verschiedenen Zeiten.	127
6.44	Axialprofil des Gasanteils von Natrium in Brennelement 344 zu verschiedenen Zeiten.	127
6.45	Radialprofil des Gasanteils von Natrium in Brennelement 344 auf Ebene20.	128
6.46	Neutronenspektrum vor der Transienten zum Zeitpunkt $t=0,0s$ und nach 33,13s in der Mitte (axial) des Kerns in Brennelement 344.	129
6.47	links: Relative Leistung über der Zeit. Nach ca. 35s bricht die Rechnung ab. rechts: Radiale Leistungsverteilung über den Kern auf Ebene20 am Ende der Transienten.	130
6.48	Axialprofil der Leistung zu verschiedenen Zeiten für Brennelement Nr.344 auf dem zweiten Ring (heißeste Zone).	130
6.49	Entwicklung der Temperaturen von Brennstoff, Hüllrohr und Kühlmittel auf Ebene18 für Brennelement 344.	131
6.50	Axialprofil der mittleren Temperatur des Brennstoff für Brennelement 344 zu verschiedenen Zeiten.	132
6.51	Axialprofil der maximalen Temperatur des Brennstoff für Brennelement 344 zu verschiedenen Zeiten.	133
6.52	Radialprofil der maximalen Temperatur des Brennstoff über den Kern auf Ebene 20 zu verschiedenen Zeiten.	134
6.53	Axiale Ausdehnung des Brennstoffs in den einzelnen Brennelementen. . .	135
6.54	Axialprofil der Hüllrohrtemperatur für Brennelement 344 zu verschiedenen Zeiten.	136
6.55	Axialprofil des Hüllrohrhassradius Brennelement 344 zu verschiedenen Zeiten.	136
6.56	Zeitlicher Verlauf der Gesamtreaktivität und der einzelnen Reaktivitätsbeiträge in einem ULOF.	137
6.57	Zeitlicher Verlauf der Leistung in einem ULOF unter Verwendung verschiedener Zeitschrittweiten.	138
6.58	Zeitlicher Verlauf des Reaktivitätsbeitrags aufgrund des Dopplereffekts in einem ULOF unter Verwendung verschiedener Zeitschrittweiten. . . .	139
6.59	Zeitlicher Verlauf des Reaktivitätsbeitrags aufgrund der axialen Brennstoffausdehnung in einem ULOF unter Verwendung verschiedener Zeitschrittweiten.	139
6.60	Zeitlicher Verlauf des Reaktivitätsbeitrags aufgrund der Änderung der Natriumdichte in einem ULOF unter Verwendung verschiedener Zeitschrittweiten.	140
6.61	Zeitlicher Verlauf der Gesamtreaktivität in einem ULOF unter Verwendung verschiedener Zeitschrittweiten.	140
6.62	links: Zeitlicher Verlauf der Natriumtemperatur in Brennelement344 auf Ebene 20 in einem ULOF unter Verwendung verschiedener Gapweiten. rechts: Zeitlicher Verlauf des Gasanteils an Natrium in Brennelement 344 auf Ebene 20 in einem ULOF unter Verwendung verschiedener Gapweiten.	141

6.63	links: Zeitlicher Verlauf der maximalen Brennstofftemperatur in Brennelement 344 auf Ebene 20 in einem ULOF unter Verwendung verschiedener Gapweiten. rechts: Zeitlicher Verlauf der Hüllrohrtemperatur in Brennelement 344 auf Ebene 20 in einem ULOF unter Verwendung verschiedener Gapweiten.	142
6.64	Zeitlicher Verlauf der Leistung in einem ULOF unter Verwendung verschiedener Gapweiten.	142
6.65	Zeitlicher Verlauf des Reaktivitätsbeitrags aufgrund des Dopplereffekts in einem ULOF unter Verwendung verschiedener Gapweiten.	143
6.66	Zeitlicher Verlauf des Reaktivitätsbeitrags aufgrund der axialen Brennstoffausdehnung in einem ULOF unter Verwendung verschiedener Gapweiten.	143
6.67	Zeitlicher Verlauf des Reaktivitätsbeitrags aufgrund der Änderung der Natriumdichte in einem ULOF unter Verwendung verschiedener Gapweiten.	144
6.68	Zeitlicher Verlauf der Gesamtreaktivität in einem ULOF unter Verwendung verschiedener Gapweiten.	144
7.1	Ein Strom mit I Neutronen pro cm^2 trifft auf eine monoatomare Targetschicht A , die N_a Atome pro cm^2 enthält.	150
7.2	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (PDF) und die dazugehörige kumulative Verteilungsfunktion (CDF). Mit der Inversionmethode erhält man nach Ermittlung von 2000 Zufallsvariablen die als Histogramm dargestellte Häufigkeitsverteilung.	153

Tabellenverzeichnis

1.1	Überblick der vergangenen, bestehenden und im Bau bzw. in der Planung befindlichen Flüssigmetall gekühlten Anlagen.	2
2.1	Physikalische Eigenschaften von Wasser bei verschiedenen Drücken und Natrium bei 2 bar. [48]	39
3.1	Wichtige Eckdaten zum Versuch LT2 im CABRI Reaktor.	58
4.1	Variation der Parameter zur Erstellung einer Querschnittsdatenbasis mittels SERPENT2 zur Untersuchung eines UTOP und eines ULOF Störfalls in einem generischen SFR Kern.	76
5.1	Bedingungen im Nominalzustand für den SFR-Kern im Neutronik-Benchmark für Rechnungen ohne Thermohydraulik-Kopplung [10].	85

Abkürzungen

Symbol	Erklärung
ANL	Argonne National Laboratory
Ass.Nr.	Nummer des Brennelements nach Nummerierung in DYN3D
ASTEC-Na	Accident Source Term Evaluation Code (Natriumversion)
BFC	Unterkante aktiver Kern (bottom fuel column)
CDF	kumulative Verteilungsfunktion (cumulative density function)
CEA	Commissariat a l'Energie Atomique
CIEMAT	Centro de Investigaciones Energeticas, Medioambientales y Tecnologicas
EDF	Electricite de France
ENDF	Evaluated Nuclear Data File
ENEA	Agenzia nazionale per le nuove tecnologie, l'energia e lo sviluppo economico sostenibile
FAST	Fast-spectrum Advanced Systems for power production and resource management
FZK	Forschungszentrum Karlsruhe
GFR	schneller Gas gekühlter Reaktor
GIF	Generation IV International Forum
GRS	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit gGmbH
HZDR	Helmholtz-Zentrum Dresden Rossendorf
IRSN	Institute de Radioprotection et de Surete Nucleaire
JAEA	Japan Atomic Energy Agency
JASMIN	Joint severe Accident Modelling and Integration for Na-cooled fast reactors
JEFF	Joint Evaluated Fission and Fusion File
JNC	Japan Nuclear Cycle Development Insitute
JRC	Joint Research Centre
KIT	Karlsruher Institute of Technology
LFR	Blei gekühlter Reaktor
LMBWG	Liquid Metal Boiling Working Group
LWR	Leichtwasserreaktor
MC	Monte Carlo
MCNP6	Monte Carlo N-Particle Transport Code
MSR	Flüssigsalzreaktor
n	Neutron
Na	Natrium
NEA	Nuclear Energy Agency
OECD	Organisation for Economic Co-operation and Development
PDF	Verteilungsfunktion der Wahrscheinlichkeitsdichte (probability density function)
PFR	Prototype Fast Reactor
PSI	Paul-Scherrer-Institut

Symbol	Erklärung
SCK-CEN	Studiecentrum voor Kernenergie - Centre de D'Etude de L'Energie Nucleaire
SCWR	überkritischer Leichtwasserreaktor
SFR	Natrium gekühlter schneller Reaktor
ULOF	Kerndurchsatzstörfall bei Versagen der Realtorschnellabschaltung
USTUTT	Universität Stuttgart
UTOP	Reaktivitätszufuhr bei Versagen der Realtorschnellabschaltung
VHTR	Höchsttempertur-Reaktor
VTT	Technical Research Centre of Finland
XS	Wirkungsquerschnitt (cross section)
A	Fläche
a	Fläche
B	Buckling
b	Abbrand
Br	Berenson-Koeffizient
C	Funktion in Abhängigkeit vom Porenvolumen
C_x	Konzentration von Material x
C_i^n	Konzentration der Tochterkerne aus verzögerter Gruppe i in Masche n
c_P	spezifische Wärmekapazität
D_h	hydraulischer Durchmesser
D	Diffusionskoeffizient
D_g	Diffusionskoeffizient für Energiegruppe g
d	Extrapolationslänge
E	Energie
$E' \rightarrow E$	Übergang von der Energiegruppe E' nach E
$E(x)$	Erwartungswert
F	Produktionsoperator
F_{nm}	Produktionsterm an Position (nm) im Produktionsoperator (Matrix)
$F(x)$	kumulative Verteilungsfunktion
$f(x)$	Verteilungsfunktion der Wahrscheinlichkeitsdichte
G_{nm}	Impulsaustausch zwischen n und m
g	Gravitationskonstante
H	Enthalpie
h_{nm}	Wärmeübergangskoeffizient
I	Strom
\vec{J}_g	Stromdichte in Energiegruppe g
\vec{j}	winkelabhängiger Neutronenstrom
\vec{J}	winkelunabhängiger Neutronenstrom
k	Neutronenvermehrungsfaktor
k_{eff}	effektiver Multiplikationsfaktor
K_D	Doppler-Koeffizient
L	Verlustoperator
L_{nm}	Verlustterm an Position (nm) im Verlustoperator (Matrix)
L_x	Länge der Komponente x
N	Anzahl der Historien
$N(\vec{r})$	lokale Teilchendichte
n	winkelabhängige Neutronendichte

Symbol	Erklärung
N_a	Anzahl an Atomen pro cm^2
N_m	lokale Teilchendichte des Materials m
Nu	Nußelt-Zahl
O	Operator
P	Wahrscheinlichkeit
p	Druck
P_i	Leistung Zustand i
Q	externe Quelle
Q_A	Aktivierungsenergie
Q_{nm}	Energieaustausch zwischen n und m
R	Reaktionsrate / Gaskonstante (im Zusammenhang angegeben)
R_{gas}	Gaskonstante
R_V	Funktion zur Beschreibung des Gasanteils
r	Radius
$r_{in,i}$	Innenradius der Zone i
$r_{out,i}$	Außenradius der Zone i
\vec{r}	Richtungsvektor
r_i	Reaktionsrate für Reaktion i
S	Schätzwert (Standardabweichung)
s	modifizierter Anteil des Spannungstensors
T	first flight probability
t	Zeit
t_{ENDE}	Benutzer-definierte Endzeit der Rechnung
$t_{NK,j}$	Zeit in der Neutronik-Iteration beim Zeitschritt j
Δt_{NK}	Neutronikzeitschritt während der Transienten-Rechnung
$t_{TH,i}$	Zeit in der Thermohydraulik-Iteration beim Zeitschritt i
Δt_{TH}	Thermohydraulikzeitschritt während der Transienten-Rechnung
T_x	Temperatur von Material/Zustand x
u	radiale Komponente bei 1.5 dim. Modellbeschreibung
V	Volumen
V_{Ch}	Volumen des Natrium gefüllten Kanals in einer Masche
V_{CR}	Volumen des Steuerstabanteils in einer Masche
v	Geschwindigkeit
Var	Varianz
w	axiale Komponente bei 1.5 dim. Modellbeschreibung
\bar{x}	arithmetischer Mittelwert der Variablen x
\bar{Z}	mittlere zurückgelegte Strecke
z	Höhe / z-Komponente in Zylinderkoordinaten
\bar{z}_{ASTEC}	mittlere Höhe des Brennstoffs in einer ASTEC-Masche
z_{DYN}	Höhe einer DYN3D-Masche
α	Gasanteil
β	Anteil verzögerter Neutronen
β^-	Elektron aus Beta-Minus-Zerfall
Γ	Rate Massenaustausch
γ	Oberflächenspannung
ε	Dehnungstensor
ζ	gleichverteilte Zufallszahl zwischen 0 und 1
η	Neutronenausbeute

Symbol	Erklärung
κ	Anpassungskoeffizient für den Kondensationsanteil
Λ	Wärmeleitfähigkeit
λ_i	Zerfallskonstante der Gruppe i
λ	Eigenwert / plastischer Verzug (im Zusammenhang jeweils angegeben)
λ_s	freie Weglänge
$\bar{\mu}$	mittlerer Streucosinus
ν	mittlere Anzahl der pro Spaltung emittierten Neutronen
$\bar{\nu}$	Antineutrino
ξ	beliebiger Faktor > 1
ρ	Reaktivität
ρ_{ext}	externe Reaktivität
ρ_j	Dichte der Komponente j
$\Sigma_{i,g}$	makroskopischer Gruppenquerschnitt für Reaktion i
Σ_i	makroskopischer Wirkungsquerschnitt für Reaktion i
σ_i	mikroskopischer Wirkungsquerschnitt für Reaktion i
Σ_{Ch}	makroskopischer Wirkungsquerschnitt für den Natrium gefüllten Kanal
Σ_{CR}	makroskopischer Wirkungsquerschnitt für den Steuerstab
σ	Standardabweichung / Spannungstensor (im Zusammenhang jeweils angegeben)
σ_{ys}	Fließspannung
τ	flüssiger Anteil
τ_p	Generationszeit prompter Neutronen
τ_v	Generationszeit verzögerter Neutronen
ϕ	winkelunabhängiger Neutronenfluss
Φ_g	skalarer Neutronenfluss in Energiegruppe g
φ	Wärmestrom
$\bar{\Phi}_g^n$	mittlerer Neutronenfluss in Masche n und Gruppe g
χ	Spaltspektrum
Ψ	winkelabhängiger Neutronenfluss
Ψ_g	winkelabhängiger Neutronenfluss in Energiegruppe g
$\vec{\Omega}$	Raumwinkel-Vektor
$\hat{\Omega}$	normierter Raumwinkel-Vektor
Ω^n	Faktor zur Entwicklung des Neutronenflusses in DYN3D in Masche n
$\hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}$	Übergang vom Raumwinkel $\hat{\Omega}'$ nach $\hat{\Omega}$

1 Einleitung und Ziel der Arbeit

1.1 Einführung

Derzeit laufen weltweit über 440 Reaktoren [4], wobei es sich überwiegend um Leichtwasserreaktoren handelt (LWRs). Aktuelle Probleme zeichnen sich vor allem bei der Endlagersuche, aber auch vor dem Hintergrund der zunehmenden Gefahr von Missbrauch des spaltbaren Materials, ab. Im Jahre 2001 wurde die Arbeitsgemeinschaft „Generation IV International Forum“ (GIF) [36] gegründet (heute 12 Staaten und die EURATOM), mit dem Ziel, die nukleare Energiegewinnung auf die Bedürfnisse eines künftigen Energie-Gesamtkonzeptes anzupassen und neue Standards für eine vierte Generation an Reaktoren zu definieren. Dabei handelt es sich nicht um neue Reaktortypen, sondern vielmehr um eine Auswahl aus bestehenden Systemen, deren Weiterentwicklung und Optimierung im Vordergrund steht, um folgende Anforderungen zu erfüllen:

- effektive Nutzung der Brennstoffressourcen
- Nachhaltigkeit (Minimierung des nuklearen Abfalls, Rezyklierung, Konvertierung)
- Wirtschaftlichkeit (Kosten, Wirkungsgrad,...)
- Hohe Sicherheitsstandards (im Betrieb und bei Störfällen, inhärente Sicherheitseigenschaften)
- Proliferationsschutz (Weitergabe von Spaltmaterial durch Konstruktion und Konzeption erschweren)

Aus über 130 Reaktorkonzepten haben sich sechs Technologien als besonders geeignet erwiesen, den definierten Zielen gerecht zu werden. Unter den ausgewählten Konzepten finden sich der schnelle, gasgekühlte Reaktor (GFR), der Höchsttemperatur-Reaktor (VHTR), der überkritische Leichtwasserreaktor (SCWR), der schnelle, bleigekühlte Reaktor (LFR), der Flüssigsalzreaktor (MSR) und der schnelle, natriumgekühlte Reaktor (SFR) wieder. Insbesondere bei letztgenanntem Reaktortyp, dem SFR, handelt es sich um eine Technologie, die eine Umsetzung nach dem Generation IV Konzept in naher Zukunft verspricht. Mit über 400 Betriebsjahren und dementsprechenden Arbeiten in Forschung und Entwicklung, kann beim SFR-Konzept bereits auf Betriebserfahrung zurückgegriffen werden. Tabelle 1.1 gibt einen Überblick bisheriger sowie aktueller Anlagen und solcher, die noch im Stadium der Konstruktion bzw. Planung sind. Erkennbar ist der Trend zu „schnellen“ Systemen, weg vom LWR (GenIV: vier schnelle Reaktoren und zwei thermische Reaktoren). Dies liegt vor allem darin begründet, dass schnelle Reaktoren neben einer wesentlich besseren Nutzung von Ressourcen durch „Erbrütung“ von Brennstoff während dem Betrieb mit hoher Konversionsrate durch Modifikation des Kerns auch zur Transmutation von Aktiniden eingesetzt werden können.

Diese Transmutationen können in gängigen LWRs nicht realisiert werden, sondern erfordern ein schnelles Neutronenspektrum. Die Transmutation ist ein zentraler Punkt im Konzept des „geschlossenen Brennstoffkreislaufs“. Dabei werden anders als in der klassischen Wiederaufarbeitung neben Plutonium auch höhere Transurane aus dem Abfall separiert. Besonders langlebige Aktinide und Spaltprodukte können in schnellen Anlagen in weniger toxische oder teilweise sogar stabile Nuklide umgewandelt werden. Damit kann der Zeitraum, in dem der sichere Einschluss des radioaktiven Abfalls in einem Endlager gewährleistet sein muss, erheblich reduziert werden. Die Radiotoxizität von verbrauchtem Brennstoff erreicht unter Ausnutzung geeigneter „Partitioning & Transmutation“-Verfahren bereits nach weniger als 1000 Jahren das Referenzlevel von Natururan, während diese Grenze bei offenem Brennstoffkreislauf erst nach ca. 100000 Jahren erreicht wird [85].

Anlage	Land	Erste Kritikalität	Leistung/MWth	Kühlmittel
Clementine	USA	1946	0.0055	Hg
EBR-1	USA	1951	1.4	NaK
BR-2	Russland	1956	2	Hg
BR-5/BR-10	Russland	1958	8	Na
DFR	UK	1959	60	NaK
Fermi-1	USA	1963	200	Na
EBR-2	USA	1963	62.5	Na
Rapsodie	Frankreich	1967	40	Na
BOR-60	Russland	1968	55	Na
SEFOR	USA	1969	20	Na
OK-550/BM-40A	Russland	1969	155	Pb-Bi
KNK II	Deutschland	1972	58	Na
BN-350	Kasachstan	1972	750	Na
Phenix	Frankreich	1973	563	Na
PFR	UK	1974	650	Na
FFTF	USA	1980	400	Na
BN-600	Russland	1980	1470	Na
JOYO	Japan	1982	140	Na
FBTR	Indien	1985	40	Na
Super-Phenix	Frankreich	1985	2990	Na
Monju	Japan	1994/2010	714	Na
CEFR	China	2010	65	Na
BN-800	Russland	2014	2100	Na
PFBR	Indien	2016	1250	Na
SVBR-100	Russland	2017	280	PB-Bi
BREST-300	Russland	2020	700	Pb
ASTRID	Frankreich	2025	1500	Na
PGSFR	Südkorea	2028	400	Na
Bn-1200	Russland	2030		Na
FBR-I/II	Indien	2023		Na
JSFR	Japan	F&E		Na
PRISM	USA	F&E		Na

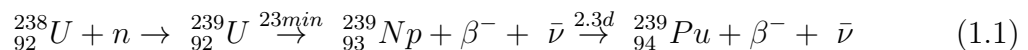
Tab. 1.1: Überblick der vergangenen, bestehenden und im Bau bzw. in der Planung befindlichen Flüssigmetall gekühlten Anlagen.

1.2 Der schnelle natriumgekühlte Reaktor - SFR

1.2.1 Prinzip eines schnellen natriumgekühlten Reaktors

1.2.1.1 Physikalische Aspekte

Das natürliche Uranvorkommen besteht zu 99,3% aus schwer spaltbarem Uran-238 (U-238) und zu lediglich 0,7% aus spaltbarem Uran-235 (U-235). Dies wird ersichtlich, wenn man die Spaltquerschnitte betrachtet, die in Abbildung 1.1 gezeigt sind. Allgemein geben Wirkungsquerschnitte die „Wahrscheinlichkeit“ für das Auftreten einer bestimmten Interaktion von Neutronen mit dem jeweiligen Nuklid wieder und hängen von der Energie des einfallenden Neutrons ab. In Abbildung 1.1 ist die Wahrscheinlichkeit für einen Spaltprozess in U-235 und U-238 in Abhängigkeit der Neutronenenergie aufgetragen. Im thermischen Bereich bei niedrigen Neutronenenergien um 10^{-9} MeV hat U-235 gegenüber U-238 eine um mehr als 1000-fache Wahrscheinlichkeit für Spaltungen. Erst für sehr hohe Neutronenenergien erreicht der Spaltquerschnitt von U-238 die Region des Spaltquerschnitts von U-235 (man beachte die logarithmische Energieskala für die Wirkungsquerschnitte). Berücksichtigt man, dass die bei Spaltungen entstehenden Neutronen größtenteils Energien im Bereich um 2 MeV aufweisen, wird deutlich, dass eine selbsterhaltende Kettenreaktion mit U-238 allein nicht möglich ist, weshalb in „gängigen“ LWRs mit U-235 angereichertes Uran verwendet werden muss. Der nicht spaltbare Anteil U-238 kann jedoch indirekt zur Energiegewinnung verwendet werden, indem man sich folgende Reaktion zu Nutze macht:



Durch Neutroneneinfang und einen doppelten Beta-Zerfall kann Plutonium-239 „erbrütet“ werden, welches selbst wiederum gut mit thermischen bzw. epithermischen Neutronen spaltbar ist, wie Abbildung 1.1 zeigt. Neben den Spaltquerschnitten findet sich in Abbildung 1.1 auch der Einfangquerschnitt von Uran-238. Im Resonanzbereich ist die Wahrscheinlichkeit eines Neutroneneinfangs besonders hoch und übersteigt die Wahrscheinlichkeit für Spaltprozesse. Bei entsprechender Kernausslegung kann in einem Brutreaktor über die Reaktionsreihe 1.1 sogar mehr Brennstoff erzeugt werden als verbrannt wird. Man spricht dann von einer Konversionsrate (erzeugter Spaltstoff/verbrauchter Spaltstoff) größer eins. Damit kann das Natururan zu fast 100% ausgenutzt werden. Zusätzlich entfällt der Prozess der Anreicherung. Vielmehr kann „abgebrannter“ Brennstoff aus LWRs durch Wiederaufbereitung in SFRs weiter genutzt werden.

Das Prinzip der Brennstoffherzeugung während des Betriebs führt unweigerlich zu einer weiteren Voraussetzung, um einen effizienten Brutreaktor mit selbsterhaltender Kettenreaktion betreiben zu können. Pro Spaltung müssen mindestens zwei freie Neutronen erzeugt werden: Eines, das zur Energieerzeugung, also zur Spaltung, gebraucht wird und ein weiteres, welches der Produktion von neuem Spaltmaterial dient. Da in realen Systemen immer ein Leckageterm berücksichtigt werden muss, sollte die Neutronenausbeute η , d.h. die Anzahl der pro absorbiertem Neutron resultierenden Neutronen, den Faktor zwei leicht überschreiten. Betrachtet man die Neutronenausbeute für verschiedene Nuklide in Abhängigkeit der Energie des einfallenden Neutrons (Abb. 1.2), so wird deutlich, dass ein Brutreaktor nur mit schnellen Neutronen, die eine Energie von über 100 keV aufweisen, betrieben werden kann, um das Kriterium $\eta \geq 2$ zu erfüllen.

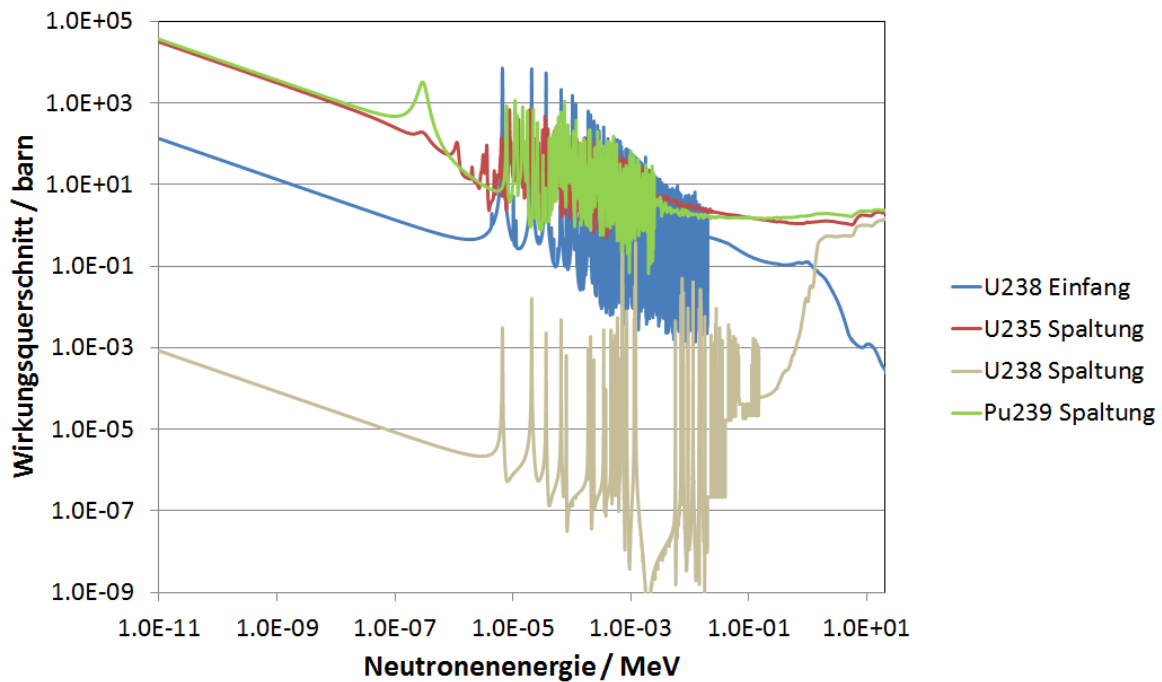


Abb. 1.1: Spaltquerschnitte von Uran-235, Uran-238 und Plutonium-239 in Abhängigkeit der Energie des einfallenden Neutrons. Zusätzlich ist der Einfangquerschnitt von Uran-238 angegeben, da der Brutprozess mit einem Neutroneneinfang initialisiert wird (Daten exportiert aus [76]).

len. Das schnelle Neutronenspektrum hat eine geringere Spaltrate zur Folge, was den Spaltquerschnitten in Abbildung 1.1 zu entnehmen ist. Dies muss durch einen höheren Anteil an spaltbarem Material und eine kompakte Bauweise des Kerns ausgeglichen werden. Dadurch ergibt sich eine höhere Leistungsdichte als bei LWRs [84]. Ein positiver Aspekt des „harten“ Energiespektrums ist die Tatsache, dass für fast alle Nuklide das Verhältnis von Spaltquerschnitt zu Einfangquerschnitt mit der Neutronenenergie ansteigt, wodurch die Produktion von minoren Aktiniden in schnellen Systemen unterdrückt wird. Bei spezieller Kernausslegung können schnelle Systeme daher auch als „Verbrenner“ konzipiert werden, die vornehmlich auf das Spalten von langlebigen minoren Aktiniden ausgelegt sind (ohne dabei Plutonium als Spaltstoff zu verlieren) und helfen können, den langlebigen radioaktiven Atommüll zu reduzieren [93].

Die hohe Leistungsdichte im Kern erfordert ein Kühlmittel mit guten Wärmeabfuhereigenschaften. Daneben muss das Kühlmittel aber auch neutronenphysikalischen Anforderungen gerecht werden: Neben einer geringen parasitären Neutronenabsorption, sollte es auch ein geringes Abbremsvermögen sowie eine geringe Aktivierbarkeit unter Neutronenbestrahlung aufweisen. Als besonders geeignet hat sich Natrium herausgestellt. Die hohe Siedetemperatur (1160K bei 1bar) sorgt für eine große Spanne zwischen Betriebstemperatur und Sieden (300-400K; im Vergleich zu LWRs: 30K Spanne bei Wasser) und ermöglicht ein Niederdruck-Wärmeübertragungssystem. Damit kommt es bei Lecks nicht zum Ausdampfen und ein schnelles Nachspeisen von Kühlmittel ist nicht erforderlich. Auch konstruktiv hat dies Vorteile, da das Containment nicht gegen hohe innere Überdrücke ausgelegt werden muss. Die hervorragenden Wärmeübertragungseigenschaften führen zu einer geringen Temperaturdifferenz zwischen Hüllrohr und Kühl-

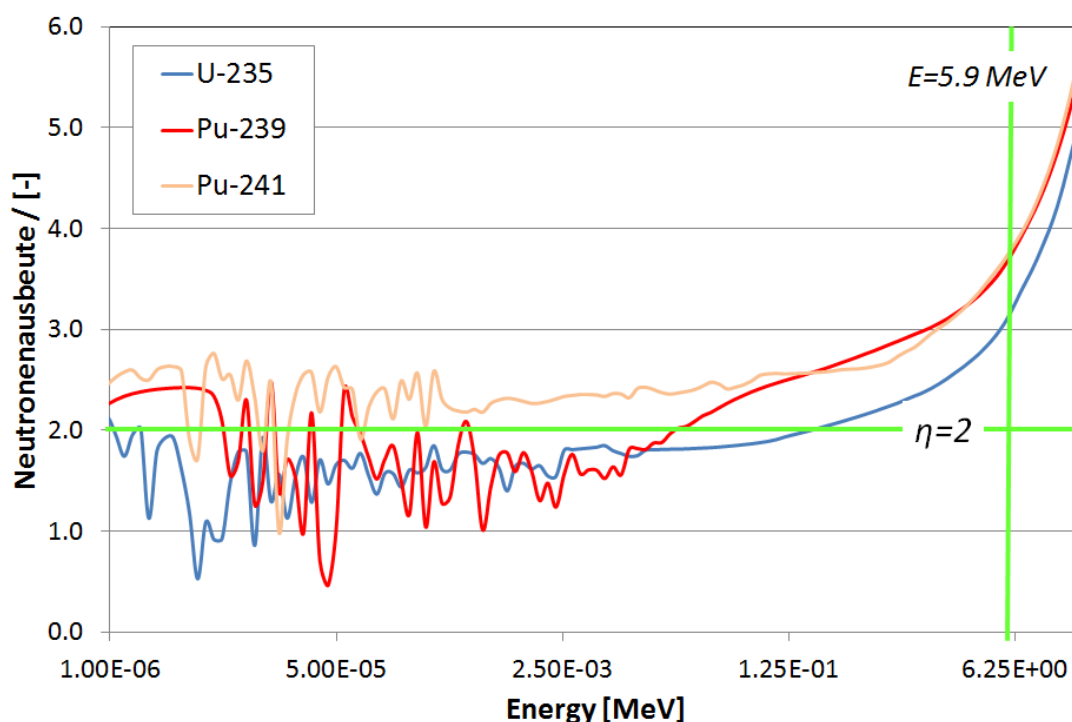


Abb. 1.2: Neutronyield bzw. -ausbeute in Abhängigkeit der Energie des Neutrons, das die Spaltung verursacht hat. Die Ausbeute gibt die Anzahl der pro absorbiertem Neutron entstehenden prompten Neutronen an. Für einen effektiven Brutreaktor muss der Neutronenyield über einem Wert von zwei liegen. Die bei der Spaltung von Pu-239 frei werdenden Neutronen haben eine mittlere Energie von 5.9 MeV.

mittel. Durch die hohe Leistungsdichte im Kern und einer damit verbundenen großen Temperaturdifferenz zwischen Eintritt und Austritt, ist eine ausgezeichnete Naturumlauffähigkeit bei Ausfall von Pumpen garantiert. Die Verwendung von Natrium bringt jedoch auch sicherheitstechnische Nachteile mit sich. Bei Anwesenheit von Sauerstoff ist Natrium leicht brennbar und bei Kontakt mit Wasser kann es zu heftigen, exothermen Reaktionen kommen. Daher müssen freie Na-Oberflächen mit einem inerten Gas abgedeckt werden und Anlagenräume, durch die Natrium geführt wird, inertisiert werden. Eine weitere Schutzmaßnahme ist die Trennung des Natrium-Primärkreislauf, der direkt durch den Kern führt und aktiviertes Kühlmittel enthält, und dem Wasser/Dampf-Kreislauf. Das Zwischenschalten eines Natrium-Sekundärkreislaufs, der nicht aktiviertes Natrium enthält, stellt zusätzlich sicher, dass das Austreten von Radioaktivität in die Umgebung verhindert wird. Konstruktive Nachteile bei Verwendung von Natrium als Kühlmittel ergeben sich aus der Schmelztemperatur von 371K, die in den Kühlkreisläufen nicht unterschritten werden darf, und aus der Tatsache, dass es sich bei Natrium um einen opaken Stoff handelt, wodurch optische Verfahren bei Wartungs- und Kontrollarbeiten nicht einsetzbar sind.

1.2.1.2 Aufbau und Komponenten

Abbildung 1.3 zeigt schematisch den Aufbau eines SFR in „Pool“-Bauweise (Darstellung nach [1]). Im Reaktortank befindet sich der kompakte Kern, der je nach Leistungsauslegung mehrere hundert Brennelemente enthalten kann und von flüssigem Natrium

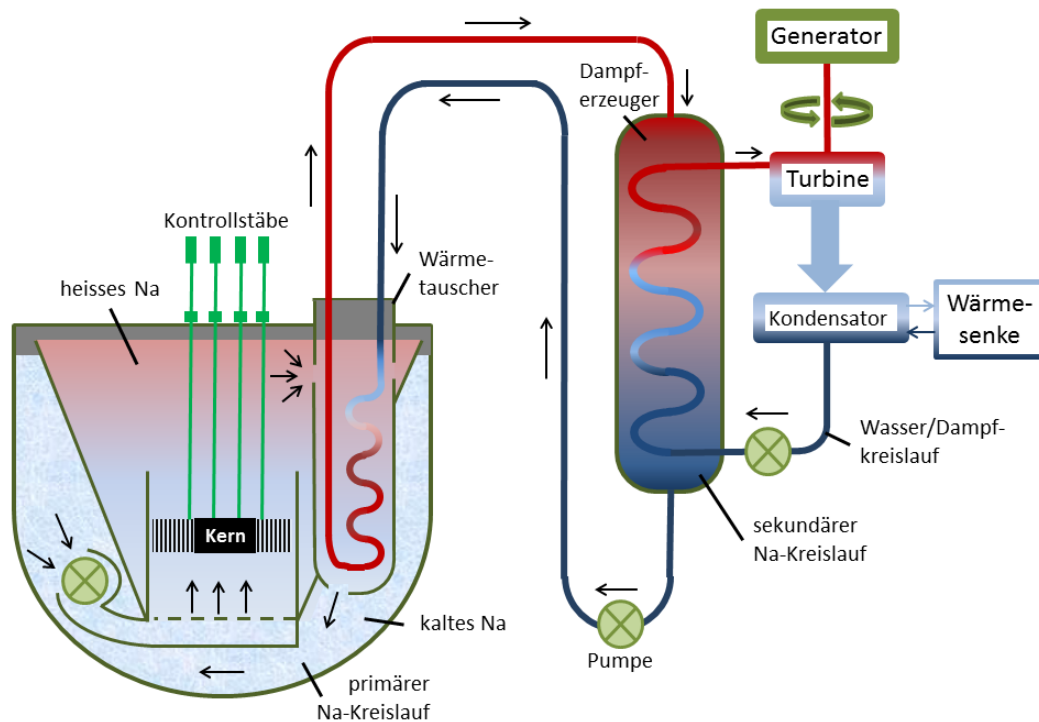


Abb. 1.3: Schematischer Aufbau eines Natrium gekühlten Brutreaktors in „Pool“-Bauweise. Im Primärkreislauf wird das kalte Natrium durch den Kern gepumpt und im oberen Teil des Reaktorkessels durch einen Wärmetauscher geleitet, wo die Wärme an den mechanisch separierten Sekundärnatriumkreislauf abgegeben wird. Dieser ist im Dampferzeuger an einen Wasser/Dampf-Kreislauf gekoppelt über den eine Turbine angetrieben wird (Darstellung nach [1]).

durchströmt wird. Um die Neutroneneffizienz hoch zu halten und das Abbremsen der Neutronen durch Stöße mit Na-Atomen zu unterbinden, werden die einzelnen Brennstäbe hexagonal, also möglichst dicht, in den Brennelementen angeordnet. Der Brennstoff, meist ein Uran-Plutonium-Mischoxid oder auch metallische oder carbidische Verbindungen, befindet sich in Form von Pellets in einem Hüllrohr aus Stahl, das den Brennstab bildet. Die Brennstäbe sind von dünnen Stahldrähten umwickelt, die als Abstandhalter dienen und eine Blockade der Kühlkanäle verhindern sollen. Ein Brennelement enthält in der Regel mehrere Hundert Brennstäbe, die in einer hexagonalen Stahlmantelung fixiert sind. Neben den Brennelementen enthält der Kern Regelelemente, die zum Steuern bzw. zur Schnellabschaltung dienen und einen starken Neutronenabsorber wie Borcarbid enthalten. Im Außenbereich des Kerns werden Stahlreflektoren eingesetzt, um großen Neutronenverlusten durch Leckage vorzubeugen. Der eigentliche Reaktortank wird von einem weiteren Tank umschlossen. Somit kann selbst bei einem Leck im inneren Tank gewährleistet werden, dass der Na-Spiegel eine Mindesthöhe, die zur Wärmeabfuhr über die Hauptkreisläufe erforderlich ist, nicht unterschreitet. Über der freien Natriumoberfläche herrscht eine Schutzgasatmosphäre, meist aus Stickstoff (oder auch Argon).

Im Betrieb befindet sich die maximale Na-Temperatur 300K unterhalb der Siedetemperatur, wodurch im Primärsystem niedrige Drücke vorherrschen. Der Zwischenwärme-

tauscher, der ebenfalls Natrium führt, befindet sich oberhalb des Reaktorkerns. Damit ist garantiert, dass sich bei Ausfall einer Kühlmittelpumpe Naturumlauf einstellt. Im Sekundär-Natrium-Kreislauf ist der Druck gegenüber dem Primärkreislauf erhöht. Bei einem Leck im Zwischenwärmetauscher kann somit kein aktiviertes Natrium austreten. Über den Sekundärkreislauf wird die Wärme an den Dampferzeuger geleitet, wo die Energie über eine Turbine und einen Generator ins Netz gespeist werden kann. Auch der Dampferzeuger wird oberhalb des Zwischenwärmetauschers positioniert, wodurch bei einem Pumpenausfall die Wärme im gesamten System allein durch Naturumlauf über die Hauptkreisläufe abgeführt werden kann. Im Allgemeinen lassen sich durch die höhere Betriebstemperatur bei SFRs im Vergleich zu LWRs bessere Wirkungsgrade erzielen.

1.2.2 Sicherheitsaspekte und Einflussfaktoren auf das Kernverhalten

In diesem Abschnitt sollen charakteristische Sicherheitseigenschaften von SFRs diskutiert werden. Dabei stehen sicherheitsrelevante physikalische Eigenschaften des Kerns und nicht der Anlage als Ganzes im Vordergrund, da diese nicht Gegenstand der Arbeit sind. Durch Vergleiche mit dem Verhalten eines LWRs sollen die grundlegenden Besonderheiten von schnellen Systemen bezüglich der Sicherheit aufgezeigt werden. Interne Rückwirkungen auf die Reaktivität bestimmen maßgeblich das Verhalten des Kerns und sind insbesondere bei Überschreitungen der Auslegungsbedingungen zu berücksichtigen. Daher wird zunächst die Definition der Reaktivität erläutert. Im Anschluss folgen Sicherheitsbetrachtungen zu einem SFR-Kern. Die wichtigsten Einflussfaktoren und ihre Wirkung auf die Reaktivität werden angegeben.

1.2.2.1 Reaktivität

Der Neutronenvermehrungsfaktor k gibt die Änderung der Anzahl der Neutronen von einer Neutronengeneration zur nächsten an. Betrachtet man die Entwicklung des Gesamtsystems, gilt für den Neutronenvermehrungsfaktor oder auch k-Wert:

$$k = \frac{\text{Zahl der erzeugten Neutronen}}{\text{Zahl der absorbierten und entweichenden Neutronen}} \quad (1.2)$$

Als integrale Größe bezieht sich der k-Wert auf den Reaktor als Ganzes. Bei einem k-Wert von $k = 1$ spricht man von einem kritischen Reaktor. In diesem Fall ist die Anzahl der erzeugten Neutronen gleich der Anzahl der Summe aus absorbierten und entweichenden Neutronen. Dieser Zustand beschreibt eine sich selbst erhaltende Kettenreaktion, bei der es zu keiner Leistungssteigerung bzw. -minderung kommt. Bei einem k-Wert $k < 1$ ist das System unterkritisch und die Kettenreaktion würde allmählich zum Erliegen kommen, da in jedem Zeitschritt die Zahl der erzeugten Neutronen kleiner als die Zahl der Verlustneutronen ist. Im Gegensatz dazu ist ein Reaktor überkritisch, wenn gilt: $k > 1$. In der Reaktorthorie wurde zur Beschreibung des Systemzustand eine weitere Größe, die Reaktivität ρ , eingeführt. Die Reaktivität beschreibt die relative Abweichung der Kritikalität von eins und ist wie folgt definiert:

$$\rho = \frac{k - 1}{k} \quad (1.3)$$

Aus Gleichung 1.3 lässt sich leicht nachvollziehen, dass für den stationären Reaktor $\rho = 0$ gilt. Entsprechend wird ein überkritischer Zustand durch $\rho > 0$ charakterisiert bzw. ein unterkritischer Zustand durch $\rho < 0$ beschrieben. Die Reaktivität gibt demnach Auskunft über den Zustand des Gesamtsystems. Da bei der Spaltung neben prompten Neutronen auch verzögerte Neutronen erzeugt werden, die aus Reaktionen der Tochterkerne stammen, muss zwischen den Zuständen „überkritisch“ und „prompt überkritisch“ unterschieden werden. Ein Reaktor ist dann „prompt überkritisch“, wenn die Reaktivität größer als der Anteil β der verzögerten Neutronen im System ist ($\rho > \beta$). Der Reaktor kann in diesem Fall nicht mehr extern reguliert werden, da die Generationszeit prompter Neutronen bei schnellen Reaktoren im Bereich von $\tau_p \approx 10^{-7} s$ liegt [79]. Per Definition wird dem Wert β die Einheit $\$$ zugeordnet ($1\$ = \rho/\beta$). D.h., wenn einem System genau eine Reaktivität von $1\$$ zugeführt wird, wird gerade der „prompt kritische“ Zustand erreicht. Der Reaktor ist nur über die verzögerten Neutronen regelbar, die eine mittlere Generationszeit τ_v im Bereich von Millisekunden aufweisen.

1.2.2.2 Sicherheitsrelevante Eigenschaften des Kerns

Der entscheidende Punkt bei einer Sicherheitsbetrachtung von SFRs ist die Tatsache, dass sich der Kern im Nominalzustand, im Gegensatz zu einem LWR, nicht in der Konfiguration mit der größten Reaktivität befindet [95]. Kommt es zu einer Verminderung der Kühlmitteldichte (Gründe im Folgekapitel), bedeutet dies im Falle des LWRs, dass mit dem Kühlmittel auch der Moderator verschwindet und die Kettenreaktion zum Erliegen kommt. Man spricht dann von einem „negativen Void-Effekt“. Hauptproblem ist in LWR-Störfällen meist die Abfuhr der Nachzerfallswärme. Für einen SFR stellt sich die Situation anders dar. Durch die verminderte Dichte des Natriums werden dem System weniger Neutronen durch parasitäre Absorption entzogen. Gleichzeitig verschiebt sich durch vermindertes Abbremsen der Neutronen an den Natriumatomen das Spektrum im Kern zu höheren Energien. Man erhält folglich ein „härteres“ Neutronenspektrum. Betrachtet man Abbildung 1.2, ist ersichtlich, dass damit einhergehend auch die Neutronenausbeute η ansteigt. Die bei der Spaltung von Pu-239 entstehenden Neutronen besitzen im Mittel Energien um 5.9MeV [83]. Bei Ausbleiben jeglicher Neutronenbremsung bedeutet dies eine Vermehrung der Neutronen um einen Faktor drei pro absorbiertem Neutron in Pu-239. Der Plutoniumgehalt ist in SFRs im Allgemeinen hoch, da permanent neuer Brennstoff erbrütet wird. Damit kann eine Dichteminderung von Natrium in kürzester Zeit zu einem rapiden Anstieg des Neutronenflusses führen. Der Kern eines SFRs weist damit einen positiven Void-Effekt auf. Wird die Reaktivität so hoch, dass der Reaktor nicht mehr kontrollierbar, also prompt überkritisch ist, spricht man von einem Reaktivitätsunfall, der bis zur kompletten Zerstörung des Kerns führen kann (Bethe-Tait-Störfall, [9]).

Das Abführen der Nachzerfallswärme in SFRs bei intaktem Kern und ordnungsgemäßer Funktion der Schnellabschaltung birgt in der Regel ein geringes Gefahrenpotential, da der Wärmeabtransport über passive Systeme unter Ausnutzung von Naturumlauf gesichert ist. Neben der aktiven Regulierung des Neutronenflusses über die Steuerstäbe, gibt es auch passive, interne Rückwirkungen, die Einfluss auf die Reaktivität haben. Unter Umständen kann mittels negativer interner Rückwirkungsmechanismen allein ein sicherheitskritischer Zustand des Reaktors bei Störungen verhindert werden. Welche Faktoren eine entscheidende Rolle für die Entwicklung der Reaktivität spielen,

wird im folgenden Abschnitt erläutert.

1.2.2.3 Reaktivitätsrückwirkungen im SFR

- **Kühlmitteldichte-Koeffizient (Void)**
Die Auswirkungen einer Verminderung der Kühlmitteldichte, auch „Void“ genannt, wurden im vorherigen Abschnitt schon diskutiert. In der Regel kommt es in einem SFR im „Void“-Fall zu einem positiven Reaktivitätseintrag. Zwar sorgt der relativ flache Kern (SFR: Höhe ca. 1m; LWR: Höhe ca. 3-4m) bei Verminderung des Natriums für eine erhöhte Leckage in axialer Richtung, was aber nicht ausreicht, einen negativen „Void“ zu erhalten. Aktuelle Arbeiten beschäftigen sich mit neuen Kern-Designs, mit dem Ziel, die positive Rückwirkung erheblich zu reduzieren [35] [44].
- **Radiale Hüllrohrexansion**
Durch Aufheizen des Hüllrohrs oder aber durch erhöhten Innendruck kann es zu einer radialen Ausdehnung des Hüllrohrs kommen. Dadurch wird Natrium innerhalb des Brennelements verdrängt. Der Effekt hat damit gleiche Auswirkungen wie der Void-Effekt und ist positiv.
- **Steuerstab-Koeffizient**
Die Steuerstäbe und das Schnellabschaltsystem enthalten einen starken Neutronenabsorber wie Borcarbid. Durch Verfahren oder auch „Einschießen“ bei Notabschaltung werden im System so viele Neutronen weggefangen, dass problemlos ein unterkritischer Zustand erreicht wird. Die Notabschaltung ist redundant und derart ausgelegt, dass selbst bei Ausfall eines Teils der Regelelemente der Reaktor abgeschaltet werden kann. Das Einfahren der Steuerstäbe liefert einen stark negativen Rückwirkungsbeitrag.
- **Doppler-Koeffizient**
Beim Dopplereffekt handelt es sich um eine Reaktivitäts-Rückwirkung aufgrund einer Erwärmung des Brennstoffs. Betrachtet man Abbildung 1.1, sind in den Spektren der Wirkungsquerschnitte scharfe Peaks, Resonanzen, zu erkennen. An diesen Stellen hat das Neutron eine Energie, die gerade so groß ist, dass Neutron und Targetkern in einen kurzlebigen „Compoundkern“ übergehen. Die Abstände der Resonanzen verringern sich mit zunehmender Energie der Neutronen, da die Energielevels für Compoundkerne für höhere Energien dichter beieinander liegen. Eine Auflösung ist im hochenergetischen Bereich nicht mehr möglich (Bereich der unaufgelösten Resonanzen), da sich die Resonanzen immer stärker annähern und im hochenergetischen Bereich sogar überlappen. Durch eine Zunahme der Temperatur im Brennstoff ändert sich die Relativgeschwindigkeit von Neutron und Atomkern. Durch thermische Bewegung des Kerns kann die relative Neutronenenergie quasi in Richtung des Resonanzmaximums „verschoben“ werden, womit die Interaktionswahrscheinlichkeit ansteigt. Beschrieben wird diese Tatsache über eine Verbreiterung der Resonanzen, wodurch die Reaktionsrate (Wirkungsquerschnitt*Fluss) entsprechend verändert wird. Im Fall des SFR bewirkt die Verbreiterung der Resonanzen einen negativen Reaktivitätseintrag, da der Effekt in den Einfangresonanzen größer als in den Spaltresonanzen ist. Insbesondere die

Einfangresonanzen des Isotops U-238 spielen im Zusammenhang mit dem Dopplereffekt eine wichtige Rolle.

- **Axiale Brennstoffexpansion**
Eine Erhöhung der Brennstofftemperatur führt neben dem Dopplereffekt zu einer axialen Ausdehnung des Brennstoffs, die einen negativen Effekt auf die Reaktivität hat. Zwar ist die Leckage durch die Verlängerung des Kerns kleiner, was mit einer positiven Rückwirkung auf die Reaktivität einhergeht, dem gegenüber stehen jedoch negative Beiträge durch einen erhöhten relativen Natriumanteil neben dem Brennstoff und eine Verminderung der Konzentration an spaltbaren Nukliden. Zudem stehen die Steuerstäbe zur Notabschaltung in aktuellen SFR Designs über dem aktiven Kern. Dadurch ergibt sich ein zusätzlicher negativer Beitrag durch verschieben von Brennstoff neben Steuerelemente mit starkem Absorber.
- **Weitere Rückwirkungseffekte durch thermische Expansion**
Eine Temperaturerhöhung der Komponenten ist stets mit einer radialen und axialen thermischen Ausdehnung verknüpft. Für sämtliche Strukturmaterialien wie Hüllrohr, Brennelementkasten, usw. kommt es dabei zu einer lokalen Verminderung der Teilchendichte des Stahls und folglich zu weniger Interaktionen der Neutronen mit den im Stahl enthaltenen Nukliden. Dieser Effekt macht sich in einer positiven Reaktivitätsänderung bemerkbar, ist jedoch im Allgemeinen wesentlich kleiner als die zuvor angeführten Effekte, da der relative Stahlanteil wesentlich kleiner ist als der Anteil an Brennstoff und Natrium und die relevanten Querschnitte der Stahlkomponenten im Allgemeinen klein sind [76]. Ebenso verhält es sich mit der radialen Brennstoffausdehnung, die zwar eine Veränderung des Neutronenflusses innerhalb des Pellets bewirkt, aber kaum Einfluss auf die Entwicklung der Gesamtreaktivität hat. Bei langsam ablaufenden Transienten kann es auch zu einer Expansion der Gitterplatten kommen, auf denen die Brennelemente befestigt sind. Dadurch dehnt sich der Kern als Ganzes aus. Der Effekt führt zu einer relativen Verminderung des Natriums an definierten Positionen im Kern, ist aber aufgrund der erhöhten Leckage insgesamt negativ. Von diesem Effekt kann nicht nur die Verankerung der Brennelemente am Boden betroffen sein, sondern auch die Fixierungen an höheren Stellen im Kern.

Die einzelnen Reaktivitätseffekte können nicht isoliert betrachtet werden. Das transiente Verhalten eines Reaktors lässt sich nur dann korrekt vorhersagen, wenn man das Zusammenspiel der einzelnen Faktoren berücksichtigt. Insbesondere muss auch die Zeitskala betrachtet werden. Während eine thermische Ausdehnung nicht instantan geschieht, greift der Dopplereffekt sofort. Die Änderung der Reaktivität $\Delta\rho$ in einem bestimmten Zeitraum Δt lässt sich damit als Summe der Einzelbeiträge beschreiben:

$$\Delta\rho = \Delta\rho_{ext} + \sum_x \frac{d\rho}{dT_x} \Delta T_x + \sum_x \frac{d\rho}{dC_x} \Delta C_x + \sum_x \frac{d\rho}{dL_x} \Delta L_x + \dots \quad (1.4)$$

x : Brennstoff, Hüllrohr, Natrium, ΔL : Längenänderung in Δt , ΔC : Konzentrationsänderung in Δt , ΔT : Temperaturänderung in Δt

1.2.3 Reaktivitätsänderungen als Einleitungsereignis schwerer Störfälle

Die probabilistische Sicherheitsanalyse oder auch Risikoanalyse ist fester Bestandteil im Genehmigungsverfahren kerntechnischer Anlagen. Untersucht werden Ereignisse, die zu einer derartigen Beschädigung führen, dass die Rückhaltung des radioaktiven Inventars nicht mehr gewährleistet ist. Dabei werden Auslösungsstörfälle betrachtet, die höchste Anforderungen an das System stellen und damit weniger schwerwiegende Ereignisse abdecken. Die Störfallanalyse ist ein entscheidender Teil der Risikoanalyse, in der es darum geht Störfall auslösende Ereignisse zu identifizieren und den Störfallaufbau zu simulieren.

1.2.3.1 Störfallanalyse

Am Anfang eines Störfalls, bei dem es zu einer Zerstörung des Kerns kommen kann, steht stets ein „Einleitungsereignis“. In Abbildung 1.4 (angelehnt an [38]) sind verschiedene Einleitungsereignisse angeführt. Das Schema zeigt die chronologische Abfolge eines Störfalls bis hin zur Zerstörung des Kerns. Dargestellt sind nur solche Ereignisse, die über eine reaktivitätsbedingte Leistungsexkursion zur Kernzerstörung führen und damit den Leistungsbetrieb voraussetzen. Eine derartige Kernzerstörung ist nur möglich, wenn dem Reaktorkern durch eine Störung in kurzer Zeit erhebliche Reaktivität zugeführt wird und gleichzeitig die Schnellabschaltung versagt. In Abbildung 1.4 wird der Störfall in zwei Phasen unterteilt. In der frühen Phase I führt ein Einleitungsereignis zu einem positiven Reaktivitätseintrag, der einen Leistungsanstieg bewirkt. Als Einleitungsereignisse kommen Natriumsieden, Gasblasen im Kern, Änderung der Kerngeometrie oder auch lokale Effekte in Frage, die unmittelbar mit den oben diskutierten Reaktivitätsrückwirkungen in Zusammenhang stehen. Kann der positive Beitrag in der ersten Unfallphase nicht durch negative Rückwirkungskoeffizienten kompensiert werden, kommt es zu einer Leistungsexkursion. In diesem Fall ist mit einer massiven Beschädigung des Kerns zu rechnen. Und der Unfall geht in Phase II über. Durch Schmelzen und Verlagerung des Brennstoffs, ist es möglich, dass die Kettenreaktion in der späten Unfallphase zum Erliegen kommt und sich eine kühlbare Konfiguration ausbildet. Ist dies nicht der Fall, ist mit einer energetischen Kernzerlegung zu rechnen.

1.2.3.2 Spezielle Störfall-Szenarien

In dieser Arbeit werden ausschließlich Störfälle bei gleichzeitigem Versagen der Notabschaltung betrachtet. Im Speziellen wird auf zwei Störungen näher eingegangen, die später als Testfälle für Demonstrationsrechnungen an einem generischen Kern herangezogen werden.

Kerndurchsatzstörfall bei gleichzeitigem Versagen der Reaktorschnellabschaltung - ULOF (Unprotected Loss Of Flow)

Bei einem ULOF nimmt der Kerndurchsatz bei konstanter Leistung ab, z.B. aufgrund eines Ausfalls der Primärkühlmittelpumpe. In der Einleitungsphase beginnt das Kühlmittel zu siedeln, wodurch es zu einer Primärexkursion der Leistung kommt. Durch

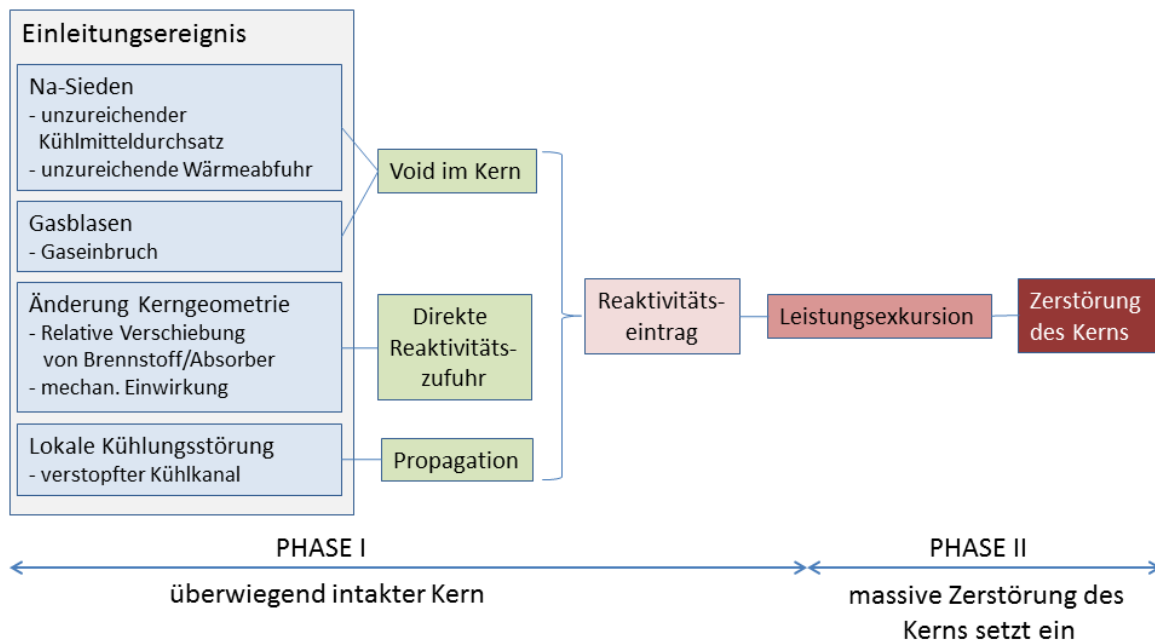


Abb. 1.4: Schema zum Verlauf von Störfällen. Zu Beginn steht je ein Einleitungsereignis, das eine Störung hervorruft und zu einer Änderung der Reaktivität führt. Ist die Reaktivitätsänderung stark positiv und kann nicht durch interne Rückwirkung abgefangen werden, kommt es zu einer Leistungsexkursion, eventl. bis zur kompletten Zerstörung des Kerns. Bei extrem starker mechanischer Einwirkung geht der Störfall direkt in Phase II über (angelehnt an [38]).

die Temperaturerhöhung im Brennstoff gibt es eine Rückwirkung über den Dopplereffizienten und den thermischen Expansionskoeffizienten. Kann dadurch die Leistung nicht ausreichend gesenkt werden, folgen Hüllrohrversagen und der Brennstoff beginnt zu schmelzen. Die Verlagerung des Brennstoffs durch Abschmelzen oder auch Brennstoffdispersion getrieben durch Druckgradienten führt in der Regel zu einer nuklearen Abschaltung des Reaktors. Wenn sich jedoch große Mengen des Brennstoffinventars an bestimmten Stellen ansammeln, besteht die Gefahr einer Rekritikalität verbunden mit einer Sekundärexkursion.

Reaktivitätszufuhr bei gleichzeitigem Versagen der Reaktorschnellabschaltung - UTOP (Unprotected Transient Over Power)

Ein UTOP ist gekennzeichnet durch eine Reaktivitätszuahme bei konstantem Kerndurchsatz, z.B. ausgelöst durch einen Gaseinbruch (Gasfreisetzung aus Toträumen, Leck in Unterdruckbereichen) oder ein plötzliches Ausschießen von Steuerelementen. In Phase I führt dies zu einer Temperaturerhöhung im Brennstoff und zum Natrium-Sieden. Danach ist der Verlauf einem ULOF ähnlich. Wird Phase II erreicht, kommt es auch hier zu Brennstabversagen mit Spaltgas- und Brennstoffaustritt in den Kühlkanal, wo die Schmelze fragmentieren kann. Das Austragen der Partikel mit der Natriumströmung kann in einer kühlbaren Konfiguration enden. Denkbar ist auch eine Blockade einzelner Kühlkanäle durch erstarrten Brennstoff, wodurch mit Fortschreiten

der Kernzerstörung zu rechnen ist. Erfolgt keine nukleare Abschaltung, kommt es zu einer energetischen Kernzerlegung.

Störfallanalysen für SFRs bedingen Codes, die das Zusammenspiel und die Rückwirkungen der einzelnen Effekte während einer Transienten erfassen können. Nur durch gekoppelte dynamische neutronenphysikalisch/thermohydraulische Analysen, die einerseits wichtige thermohydraulische Parameter wie Temperaturen berechnen und andererseits die Wirkung der Änderung dieser Parameter auf die Reaktivität berücksichtigen, ist dies möglich. Moderne Analysetools sollten derart gestaltet sein, dass sie Modelle zur Beschreibung der Thermofluiddynamik mit Modulen für das thermo-mechanische Brennstabverhalten und der Neutronik vereinen, die während der Rechnung miteinander kommunizieren und relevante Daten untereinander austauschen. Besonderes Interesse bei der Auslegung und Bewertung von Reaktoren besteht darin, die frühe Phase bei einer Störung detailliert simulieren zu können, um präzise Angaben über das Verhalten des Reaktors bei unvorhergesehenen Ereignissen zu erhalten und so einen sicheren Betrieb gewährleisten zu können. Im Folgenden wird aufgezeigt, mit welchen Codes derzeit Sicherheitsuntersuchungen zu SFRs durchgeführt werden und worin das Ziel dieser Arbeit besteht.

1.3 Code-Entwicklungen zu Reaktivitätsstörfällen in SFRs

Derzeit wird in vielen Ländern intensiv an neuen Designs und Analyse-Codes für SFRs gearbeitet. Grundlage für die heutigen Codes stellen dabei oft die Entwicklungen aus den 80er Jahren dar. Die Entwicklung der Struktur und Leistungsfähigkeit heutiger Rechenmaschinen erfordert jedoch eine Überarbeitung der früheren Codes. Zudem müssen die Tools erweitert werden, um neuen und optimierten Designs der Kerne und auch der Anlage gerecht zu werden. Zwei Codes, speziell entwickelt für schnelle Flüssigmetallgekühlte Systeme, sind SAS [25] [96] und SIMMER [7] [92], die ihren Ursprung in den 80er Jahren haben. Beide Codes werden derzeit stetig weiterentwickelt und dienen heute, nicht zuletzt aufgrund der langjährigen Erprobung für schnelle Systeme, zu den Referenzcodes für SFR-Analysen. Ein anderer Ansatz zur Entwicklung moderner SFR-Analysetools basiert auf der „Umrüstung“ von Codes, die im Bereich der Leichtwasserreaktoren eine umfassende Validierung aufweisen. Dabei muss der Code angepasst und erweitert werden, um der Verwendung anderer Materialien, SFR-Geometrien und SFR-Komponenten gerecht zu werden. Zu solchen Codes gehören das FAST Code-System [67], das derzeit am Paul-Scherrer-Institut in der Schweiz entwickelt wird sowie der Code ASTEC-Na [39], der in einer europäischen Kollaboration (JASMIN) auf Basis des ASTEC Codes für LWRs in der Entwicklung ist. Im Folgenden werden die genannten Tools, die derzeit als „State-of-the-Art“ gelten, beschrieben. Auf die Beschreibung von ASTEC-Na wird in diesem Kapitel verzichtet, da Details zum Code in einem separaten Kapitel behandelt werden.

1.3.1 Aktuelle Referenzcodes

1.3.1.1 SAS-SFR

SAS-SFR basiert auf dem Code SAS4A [25], der ursprünglich am Argonne National Laboratory (ANL, USA) für schnelle Reaktoren mit Mischoxid-Brennstoff entwickelt wurde. Ende der 80er Jahre wurde SAS4A in einer internationalen Zusammenarbeit von KIT/INR (Karlsruher Institute of Technology, Deutschland), CEA, IRSN (Frankreich) und JAEA (Japan) zum Code SAS-SFR [12] verbessert und erweitert. Die langjährige Entwicklung und Validierung an zahlreichen Experimenten (CABRI, SCARABEE,...) macht SAS-SFR zu einem zuverlässigen und gängigen Analysetool für das Störfallverhalten schneller Natrium gekühlter Reaktoren. Beispiele zur Berechnung von ULOFs und UTOPs sowie Validierungsrechnungen an Experimenten finden sich in [78], [49], [28] und [53]. Neben Modellen zum thermodynamischen Verhalten, bietet der Code auch Modelle zum mechanischen Brennstabverhalten sowie ein lokales Punkt-kinetikmodell zur Berechnung der Neutronik, das in vielen Fällen eine ausreichende Beschreibung des Neutronenverhaltens liefert, jedoch für Fälle mit starker Änderung der Flussverteilung zu falschen Ergebnissen führt. Das Verwenden lokaler Punkt-kinetik erfordert die Bestimmung sämtlicher, ortsabhängiger Reaktivitätskoeffizienten vorab. Die geometrische Beschreibung des Kerns erfolgt über ein Mehrkanalmodell (bis zu 200 Einzelkanäle), wobei Brennelemente mit vergleichbaren nuklearen und thermophysikalischen Eigenschaften durch einen Kanal simuliert werden, der wiederum durch einen repräsentativen Brennstab beschrieben wird. Um ein System adäquat simulieren zu können, muss der Anwender dafür Sorge tragen, dass die Leistungsverteilung, die Natriumströmung, etc. durch die Anzahl der Kanäle ausreichend angenähert ist.

Ein großer Nachteil liegt in der Zugänglichkeit des Codes für Organisationen außerhalb der Entwicklergruppe und in der Tatsache, dass Erweiterungen aufgrund der älteren Codestruktur umständlich implementiert werden müssen. Durch die Modellierung auf Basis repräsentativer Kanäle für Brennelemente ist SAS-SFR zur Simulation der frühen Störfallphase geeignet bis hin zum Versagen der Hüllrohre und zur Verlagerung von Brennstoff. Der Anwendungsbereich endet, wenn die Geometrie der Brennelemente nicht mehr gegeben ist, also die Brennelementkästen versagen oder verschoben werden.

1.3.1.2 SIMMER-III

SIMMER-III [92] [62] ist ein 2-dimensionaler Strömungsdynamikcode, an den ein Modul zur Beschreibung der Thermo-Mechanik des Brennstabs sowie ein orts-, zeit- und energie-abhängiges Neutronikmodul angekoppelt ist. Es handelt sich um einen „multi-velocity-field, multiphase, multicomponent, Eulerian fluid-dynamics code“. Die Mehrphasenströmung wird über mehrere Geschwindigkeitsfelder nach dem Euler-Modell berechnet. Der Code wurde am JNC (Japan Nuclear Cycle Development Institute) in einer Zusammenarbeit mit dem FZK (Forschungszentrum Karlsruhe), CEA (Commissariat à l'Énergie Atomique) und IRSN (L'Institut de Radioprotection et Sureté Nucleaire) entwickelt. Später haben sich weitere Institutionen wie das PSI (Paul Scherrer Institut), SCK-CEN (Studiecentrum voor Kernenergie - Centre de D'Étude de L'Énergie Nucleaire) und ENEA (Agenzia nazionale per le nuove tecnologie) angeschlossen. Die neueste Code-Version erlaubt auch die Beschreibung dreidimensionaler Geometrien

(SIMMER IV, [63] [64]). Nach wie vor ist jedoch die zweidimensionale Version das Referenzverfahren.

Die geometrische Beschreibung der einzelnen Komponenten erfolgt über sogenannte „Strukturfelder“, mit denen die räumliche Verteilung der einzelnen Komponenten wie Brennstoff, Stahl, Natrium, Kontrollelemente und Spaltgase beschrieben werden kann. Die Materialien könne dabei in verschiedenen Phasen auftreten (außer Spaltgas). Neben einer festen Brennstoffphase wird z.B. auch eine flüssige Phase sowie erstarrtes Material, Partikel und gasförmiger Brennstoff behandelt. Damit ergeben sich 27 sog. „Dichtekomponenten“. Die Komponenten zur Beschreibung der Energieverteilung beschränken sich auf 16, da einzelne Dichtekomponenten hier zusammengefasst werden (z.B. Gasgemisch aus verschiedenen Materialien). Die Strukturfelder für die Brennstäbe und die Brennelementkästen werden als unbeweglich betrachtet. Optional kann ein detailliertes Brennstabmodell „DPIN“ verwendet werden, welches erst ab der letzten Codeversion implementiert ist und eine radiale Temperaturverteilung des Brennstoffs sowie eine Brennstoffverlagerung im Pin ermöglicht. Mittels des DPIN-Modells können Phänomene während eines UTOPs wesentlich besser beschrieben werden als mit den Vorgängerversionen. Die beweglichen Strukturfelder (Flüssigkeiten, feste Partikel und Gase) werden über drei Geschwindigkeitsfelder beschrieben, die eine Relativbewegung unterschiedlicher Flüssigkeiten zulassen. Zur Berechnung der Dichten und Energien der Komponenten werden die Massen-, Impuls- und Energieerhaltungsgleichungen gelöst. Der intrazelluläre Austausch von Impuls, Wärme und Masse über die Kontaktflächen wird unabhängig von der interzellulären Wärmekonvektion ermittelt, die über semi-implizite Verfahren gelöst wird. Im Strukturmodell werden die Brennelementkästen über zwei Flächen beschrieben, an denen geschmolzener Brennstoff erstarren kann oder Gaskondensation stattfinden kann. Das Versagen einzelner Komponenten ist derzeit an thermische Konditionen geknüpft, wobei es bei Überschreiten von Temperatur- oder mechanischen Limits zum aufbrechen der Strukturen kommt. Desweiteren verfügt der Code über Modelle zur Beschreibung der Spaltgasplena und für das Aufschmelzen innerer Zonen im Brennstab. Die Neutronik wird über eine quasi-statische Methode einbezogen, wobei die Flussform über die Transporttheorie basierend auf dem S_n -Code TWO-DANT (bzw. THREEDANT für SIMMER IV) mit einer Diffusionsbeschleunigung für einen Makrozeitschritt ermittelt wird, während innerhalb eines Mikrozeitschritts eine einfache Punktkinetik verwendet wird. Bei großen Veränderungen der Dichte oder Temperaturen können effektive makroskopische Querschnitte über ein Querschnittsmodell bestimmt werden, die die veränderte Selbstabschirmung berücksichtigen (im Zuge der Umrüstung für LWRs erweitert worden [34]). Die Codesstruktur ermöglicht im Gegensatz zur 0-dimensionalen Modellierung in „Lumped-Parameter-Codes“ die Simulation über die Integrität der Struktur der Brennelementkästen. Damit kann auch die späte Unfallphase simuliert werden. Nachteile sind, dass bis dato chemisch-mechanische Wechselwirkungen nicht berücksichtigt werden. In zahlreichen Validierungsrechnungen und Anwendungen hat sich der SIMMER-III Code als zuverlässiges Analysetool bewährt und zählt aufgrund langjähriger Erfahrungen zu den aktuellen Analysetools für Untersuchungen bezüglich schwerer Störfälle in SFRs [90] [71] [27] [58].

Um die jeweiligen Vorteile von SAS und SIMMER-III zu vereinen wird derzeit an einer Schnittstelle zur Datenübergabe gearbeitet. So kann die frühe Unfallphase mit den detaillierten Modellen zum Brennstabverhalten von SAS (0-dim.) simuliert werden und nach Zerstörung der Brennelementstruktur des Kerns die Simulation mittels des

2-dimensionalen Codes SIMMER-III fortgesetzt werden.

1.3.1.3 FAST (Fast-spectrum Advanced Systems for power production and resource management)

Das FAST Projekt wurde im Jahre 2002 vom PSI (Paul Scherrer Institut, Schweiz) ins Leben gerufen. Das FAST-Codesystem [67] [89] besteht aus bereits vorhandenen Codes, die im Rahmen des Projekts für die Anwendung auf schnelle, natriumgekühlte Reaktoren angepasst wurden. Zudem wurden Schnittstellen zum Datenaustausch für die einzelnen Codekomponenten entwickelt. Abbildung 1.5 zeigt den Aufbau des

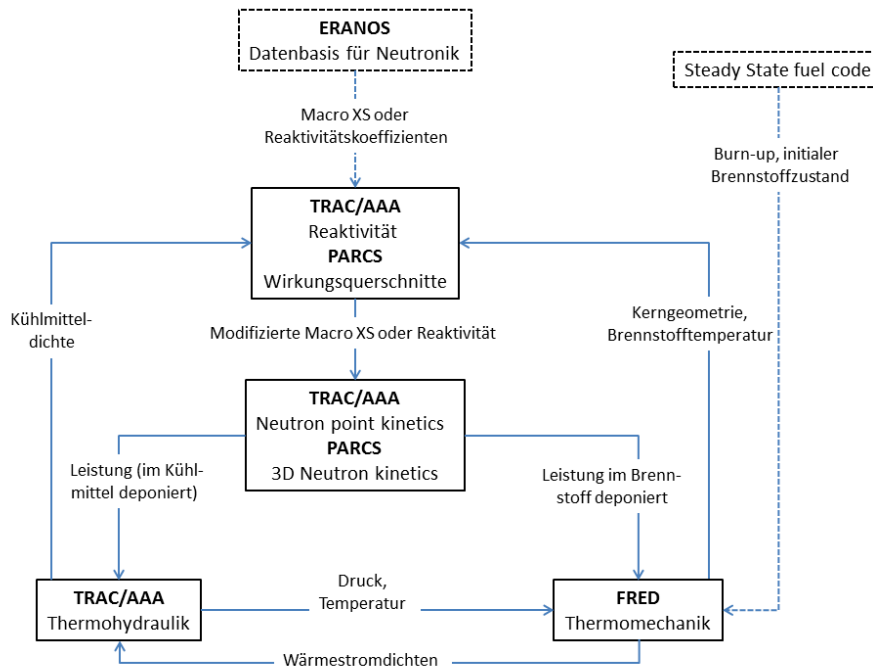


Abb. 1.5: Schema zur Kopplung der einzelnen Komponenten im Codesystem FAST (nach [67]).

Codesystems. Dabei kann grundsätzlich zwischen zwei Optionen zur Behandlung der Neutronik gewählt werden: zum einen kann ein einfaches Punktkinetikmodell, das in TRAC/AAA [88] enthalten ist, verwendet werden, zum anderen steht ein 3D-Solver in Form von PARCS [23] zur Verfügung. In jedem Fall bedarf es einer Vorbereitung einer Datenbasis für die Neutronikrechnungen, seien es Reaktivitätskoeffizienten oder makroskopische Wirkungsquerschnitte. Dazu wird in FAST der am CEA entwickelte Code ERANOS [20] verwendet, der mittels ECCO (cell/lattcie code) aus Multigruppen Daten unter Berücksichtigung von physikalischen Effekten wie Selbstabschirmung eine problemspezifische Datenbasis für die transiente Rechnung generiert. Je nach gewählter Option wird die Neutronik im gekoppelten System über ein Punktkinetikmodell (TRAC/AAA) oder einen nodalen, Diffusionscode bzw. SP_3 -Transportcode (PARCS) berechnet. Die Interpolationsroutine der makroskopischen Querschnittsdaten in PARCS war ursprünglich für LWR-Analysen ausgelegt und musste im Rahmen des FAST Projektes für schnelle Systeme erweitert werden, da hier neben dem Dopplereffekt und der Kühlmitteldichte auch thermische Expansion eine wichtige Rolle spielt und Re-

aktivitätskoeffizienten wie z.B. für Borkonzentrationen nicht gebraucht werden. Die Thermohydraulik wird mittels TRAC/AAA modelliert (Temperatur, Geschwindigkeit, Druck,... im Kern und in den anschließenden Anlagenteilen) und beinhaltet die Behandlung von Zweiphasenströmungen. TRAC/AAA arbeitet als mehrdimensionaler „multicomponent“ und „multifluid“ Code ähnlich wie SIMMER. Zusätzlich wurden dem Code TRAC/AAA Erweiterungen für Natrium (und andere Flüssigmetalle sowie Helium) als Arbeitsfluid implementiert. Thermomechanische Aspekte wie Spannungen, Deformationen und Temperaturen der Strukturmaterialien werden im Modul FRED [66] behandelt (bzw. enthält TRAC/AAA auch ein „heat structure model“).

Die drei aufgeführten Codes sind dazu geeignet, Reaktivitätsstörfälle in SFRs zu simulieren. Nachteile ergeben sich bei der Zugänglichkeit der Systeme, die oft auf einen bestimmten Anwenderkreis beschränkt sind. Zudem bietet SAS-SFR zur Behandlung der Neutronik ein Punktkinetikmodell, was bei stark heterogenen Systemen oder lokalen Störungen zu falschen Ergebnissen führt. Ein weiteres Problem bei sicherheitstechnischen Untersuchungen zu SFRs ergibt sich aus der Tatsache, dass für derartige Störungen keine experimentelle Daten vorliegen. Zwar können die Codes anhand experimenteller Daten aus Modellversuchen (im kleinen Maßstab und meist zur gezielten Untersuchung einzelner Effekte) angepasst und validiert werden, was bei der Bewertung von Simulationen zu komplexen, großskaligen Anlagen berücksichtigt werden muss. Damit sind die Ergebnisse stets mit gewissen Unsicherheiten behaftet. Diese Tatsache macht es unerlässlich in solchen Fällen Code-zu-Code-Benchmarks durchzuführen, um somit eine Abschätzung der Bandbreite der Ergebnisse zu erhalten. Dabei sollten die verwendeten Codes möglichst unabhängig voneinander sein und auf verschiedenen Ansätzen beruhen. Nur durch eine Reihe unabhängiger Rechnungen mit verschiedenen Tools ist es möglich, eine quantitative Bewertung im Rahmen gewisser Unsicherheiten vorzunehmen.

1.4 Ziel der Arbeit

Ziel der Arbeit ist es, ein geeignetes Werkzeug bereitzustellen, mit dessen Hilfe das gekoppelte neutronisch-thermohydraulische Verhalten eines schnellen, Natrium gekühlten Reaktors bei Störfällen mit Reaktivitätseintrag (insbesondere ULOF und UTOP) simuliert werden kann. Dabei soll sich die Analysefähigkeit auf die frühe Störfallphase beschränken. Das neue Tool soll neben der Vereinigung von Thermohydraulik, Thermomechanik und Neutronik auch eine moderne Codestruktur aufweisen, die es ermöglicht in einfacher Weise neue Module zu implementieren und einen möglichst großen Anwenderkreis ansprechen. Die Anforderungen an das Analyse-Tool sind folglich:

- Thermohydraulik, Thermomechanik und Neutronik zu vereinen, um damit das Gesamtsystem adäquat beschreiben zu können
- Eignung für die Simulation transienter Rechnungen bis zum Ende der frühen Störfallphase
- Aufweisen einer modernen Codestruktur, die eine einfache Implementierung von Erweiterungen erlaubt

- Zugänglichkeit für einen größeren Anwenderbereich bieten
- als ergänzendes, unabhängiges „State-of-the-Art“-Tool dienen, um durch Vergleiche bestmögliche Aussagen zu erhalten

Zur Simulation der Thermohydraulik und der Thermomechanik wird dazu auf den neu entwickelten Code ASTEC-Na zurückgegriffen. Basierend auf dem modularen Code ASTEC für LWRs [14] wurde der Code in einem vierjährigen EU-Projekt (JASMIN, 2012-2016) [39] für die Anwendung auf SFRs angepasst und soll künftig als „Europäischer Störfall-Code für SFR-Analysen“ weiter entwickelt werden. Im Rahmen des Projekts wurde zur Beschreibung der Neutronik ein Punktkinetikmodell implementiert. Um eine detaillierte Beschreibung der Neutronik zu realisieren, wird das Punktkinetikmodell in dieser Arbeit durch Ankopplung eines Diffusionscodes ersetzt. Hierzu wird auf den am HZDR entwickelten Code DYN3D [42] [80] zurückgegriffen, der sowohl die Verwendung einer beliebigen Multigruppenstruktur der Querschnitte als auch Optionen für hexagonale Geometrien erlaubt. Die Verwendung eines Multigruppencodes erfordert ein „Preprocessing“ der nuklearen Datenbasis. Es müssen problemspezifische makroskopische Gruppenquerschnitte erstellt werden. Diese Datenbasis lässt sich mit dem Monte Carlo Code SERPENT2 [56] [55] generieren. Zum Erreichen des definierten Ziels, ergeben sich als Zwischenziele damit:

- Erzeugung einer problemspezifischen makroskopischen Querschnittsdatenbasis mit SERPENT2
- Feststellung der Eignung von DYN3D unter Verwendung der erzeugten Querschnittsdaten bzw. ASTEC-Na für das vorliegende Problem
- Erstellen der Input-Datensätze
- Kopplung realisieren (Datenaustausch organisieren)
- Testen der gekoppelten Version durch Anwendung auf zwei Störfallszenarien: UTOP und ULOF

Im folgenden Kapitel erfolgt eine Einführung in die theoretischen Grundlagen, die aufzeigen soll, welchen Anforderungen das jeweilige Simulationstool genügen muss, und eine Vorstellung der verwendeten Codes DYN3D, SERPENT2 und ASTEC-Na. Nachdem eine Validierung von ASTEC-Na zur Nutzung als Analysetool für Natrium gekühlte Systeme anhand von Simulationen zu den CABRI-Versuchen durchgeführt wurde, werden die entwickelten Module zum Datenaustausch sowie der Programmablauf der gekoppelten DYN3D-ASTEC-Na-Version vorgestellt. Daneben wird auch auf die Erstellung der Querschnittsdatenbasis eingegangen, die bei Verwendung des Diffusionscodes DYN3D vor der gekoppelten Simulation erstellt werden muss. Abschließend soll das gekoppelte System auf einen generischen Benchmark-Kern angewendet werden. Dazu wird zunächst der Benchmark-Kern vorgestellt. Die Validierung durch ein Code-zu-Code-Benchmark der erstellten Querschnitte für DYN3D für den zu untersuchenden SFR-Kern kann erst an dieser Stelle erfolgen, da die Erstellung von Querschnittsdaten ein systemspezifisches Problem darstellt und somit die Kenntnis der Kerngeometrie voraussetzt. Es folgt die Analyse der Simulation zweier Anwendungsbeispiele. Dabei

handelt es sich zum Einen um ein Herunterfahren der Primärkreislaufpumpe bei gleichzeitigem Versagen der Reaktorschnellabschaltung (ULOF) und zum Anderen um eine externe Reaktivitätszufuhr, ebenfalls ohne Einsatz der Notabschaltung (UTOP). Die beiden Szenarien sind einem OECD/NEA Benchmark [81] entnommen und werden in Kapitel 6 genau definiert.

2 Theorie und Vorstellung der verwendeten Codes

2.1 Neutronentransport

Zur Beschreibung des transienten Verhaltens eines Kernreaktors muss der zeitliche Verlauf der nuklearen Leistung berechnet werden. Dieser ergibt sich aus dem räumlich und zeitlich veränderlichen Neutronenfluss, der über die Boltzmann-Gleichung (Transportgleichung) beschrieben werden kann. Die exakte Lösung stellt jedoch ein sehr zeittintensives Problem dar, weshalb man sich für praktische Anwendungen geeigneter Näherungslösungen bedient. Dazu müssen Diskretisierungen der Zeit, des Raums, der Energie und der Winkelaufösung vorgenommen werden. Bei Anwendung der Diffusionstheorie wird zusätzlich eine Homogenisierung erforderlich. Mittels dieser Näherungen können jedoch Ergebnisse mit ausreichender Genauigkeit in vertretbarer Zeit erhalten werden. Neben den deterministischen Lösungsverfahren finden häufig numerische Monte Carlo Methoden Anwendung. Großer Vorteil dabei besteht in der Möglichkeit, die Simulation mit kontinuierlichen Wirkungsquerschnittsdaten und einer exakten Geometriemodellierung, auch für komplexe Systeme, durchzuführen. Stochastische Monte Carlo Codes (MC Codes) erfordern jedoch neben einem großen Speicherplatzbedarf auch die Betrachtung einer großen Zahl unabhängiger Ereignisse, um zuverlässige Ergebnisse liefern zu können. Zwar sind die Codes hoch parallelisiert, dennoch erfordern Ganzkernrechnungen oft den Einsatz von Höchstleistungsrechnern. In den letzten Jahren wurde intensiv daran gearbeitet, MC Codes in zeitabhängigen Analysen zu verwenden, was auch für kleine Anwendungen schon realisiert wurde. 'State of the Art' sind aber nach wie vor Kopplungen mit deterministischen Codes, insbesondere bei Ganzkernbetrachtungen. Mittels MC-Analyseverfahren wie SERPENT2 und MCNP6 [60] kann jedoch in stationären Rechnungen überprüft werden, inwieweit die Näherungen der deterministischen Lösungen zulässig sind. Darüber hinaus bietet SERPENT2 die Möglichkeit, Gruppendaten für deterministische Programme zu erstellen. In den folgenden Unterkapiteln wird, ausgehend von der Transportgleichung, die in dieser Arbeit verwendete Methode der Diffusionsnäherung zur Berechnung des Neutronentransports abgeleitet und das Lösungsverfahren in DYN3D kurz erläutert. Im Anschluss wird auf das Prinzip von MC-Codes und auf die in SERPENT2 implementierte Routine zur Erzeugung von Wirkungsquerschnitten eingegangen. Für das folgende Kapitel wird die Kenntnis der Definitionen von mikroskopischem und makroskopischem Querschnitt, Neutronenfluss und -strom als winkelabhängige und winkelunabhängige Größen sowie der Ableitung der Reaktionsraten aus diesen Größen vorausgesetzt. Eine Definition dieser Größen, einschließlich der Verknüpfungen, können Anhang A entnommen werden.

2.1.1 Transporttheorie

Mit der linearen Boltzmann-Gleichung wird die zeitliche Änderung der Neutronendichte als Bilanz aus Neutronenverlusten und Gewinnen im Phasenraumelement beschrieben. Man betrachtet dazu die Anzahl der Neutronen in einem Volumenelement $d\vec{r}$ mit Energien im Intervall dE im Raumwinkelelement $d\Omega$ zu einer bestimmten Zeit t . Damit ergibt sich eine Integrodifferentialgleichung in sieben Dimensionen (drei räumliche, zwei winkelabhängige Dimensionen, Energie und Zeit), die nur mit enormem Rechenaufwand und für einfache Problemstellungen exakt lösbar ist:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t)}{\partial t} = & \underbrace{-\hat{\Omega} \cdot \nabla \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t)}_1 - \underbrace{\Sigma_t(\vec{r}, E) \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t)}_2 + \\ & \underbrace{\int_{4\pi} d\hat{\Omega}' \int_0^\infty dE' \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}) \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}', E', t)}_3 + \\ & \underbrace{\frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} d\hat{\Omega}' \int_0^\infty dE' \chi(E) \nu \Sigma_f(\vec{r}, E') \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}', E', t)}_4 + \underbrace{Q(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t)}_5 \end{aligned} \quad (2.1)$$

Die Neutronenbilanz ergibt sich aus fünf Termen. Term 1 auf der rechten Seite von Gleichung 2.1 beschreibt den Verlust von Neutronen durch Ausströmen aus dem betrachteten Volumen. Ein weiterer Verlustterm (2) ergibt sich durch Absorption und Streuung aus dem Phasenraum $d\Omega dE$ und ist damit vom totalen Wirkungsquerschnitt $\Sigma_t = \Sigma_{absorption} + \Sigma_{streuung}$ abhängig. Im Gegenzug können Neutronen mit einer Energie E' durch Abbremsung oder Neutronen mit Flugrichtung $\hat{\Omega}'$ durch Änderung der Flugrichtung in das betrachtete Phasenraumelement hinein gestreut werden, was über den Streuquerschnitt Σ_s beschrieben werden kann und in Term 3 aufgeführt ist. Zusätzlich erhöht sich die Anzahl der Neutronen im Phasenraumelement durch Spaltungen (Term 4, Spaltquerschnitt: Σ_f) oder durch externe Quellen Q , die sich in $d\vec{r}$ befinden (Term 5). Die Energieverteilung der Spaltneutronen ergibt sich aus dem Spaltspektrum $\chi(E)$, wobei $\chi(E)dE$ die Wahrscheinlichkeit angibt, dass das entstandene Neutron in das Energieintervall dE fällt. Die Produktion der Spaltneutronen $\nu \Sigma_f$ wird als Produkt des Spaltquerschnitts und einem Faktor ν beschrieben, der die pro Spaltung entstehenden Neutronen angibt. Diese Neutronenvervielfachung ν wird üblicherweise als Durchschnittswert für die pro Spaltung entstehenden Neutronen angegeben und ist daher in Gleichung 2.1 energieunabhängig. Unter Beachtung der Tatsache, dass bei der Spaltung nicht nur prompte Neutronen (Index p) entstehen, sondern ein Anteil β erst verzögert von den Tochterkernen emittiert wird (Index d), muss der Spaltterm in zwei Anteile zerlegt werden:

$$\chi_p(E)(1 - \beta) \int_0^\infty \nu \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \phi(\vec{r}, E', t) dE' + \frac{1}{4\pi} \sum_{i=1}^6 \chi_d^i(E) \lambda_i C_i(\vec{r}, t) \quad (2.2)$$

Hier wurde zusätzlich die Annahme isotroper Neutronenemission verwendet und der winkelabhängige Fluss durch den skalaren Fluss (über die Integration über den Raumwinkel) ersetzt. Es hat sich etabliert, die verzögerten Neutronen in sechs Gruppen mit einer mittleren Zerfallskonstanten λ_i für die Gruppe i und einer Konzentration C_i der

Mutterkerne einzuteilen. Die Konzentration der Mutterkerne in einer Gruppe i in einem Zeitintervall dt ergibt sich aus einem Produktionsterm abzüglich der Mutterkerne die zerfallen:

$$\frac{\partial}{\partial t} C_i(\vec{r}, t) = \beta_i \int_0^\infty \nu \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \phi(\vec{r}, E', t) dE' - \lambda_i C_i(\vec{r}, t) \quad (2.3)$$

In der folgenden Herleitung der Diffusionsnäherung wird aus Gründen der Übersichtlichkeit auf die Unterteilung in prompten und verzögerten Anteil verzichtet. Beide Terme werden durch einen allgemeinen Spaltterm wie in Gleichung 2.1 angegeben.

Stationärer Fall

Für stationäre Probleme verschwindet die Zeitableitung auf der rechten Seite der Boltzmann-Gleichung (2.1) und die Gleichung wäre nur dann lösbar, wenn sich Neutronenverluste und Produktion gerade kompensieren würden, was in Berechnungen für reale Anordnungen so nicht auftritt. Daher führt man in der Praxis für stationäre Rechnungen den „effektiven Multiplikationsfaktor“ k_{eff} ein, um das System zu skalieren. Gibt es keine externen Quellen, erhält man das Eigenwertproblem:

$$\begin{aligned} \hat{\Omega} \cdot \nabla \psi(\hat{r}, \vec{\Omega}, E) + \Sigma_t(\vec{r}, E) \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E) = \\ \int dE' \int_{4\pi} d\hat{\Omega}' \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}) \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}', E') + \\ \frac{1}{k_{eff}} \int dE' \chi(E) \nu \Sigma_f(\vec{r}, E') \phi(\vec{r}, E') + Q(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) \end{aligned} \quad (2.4)$$

Damit wird „künstlich“ ein kritischer Zustand erzeugt, um die Gleichung lösen zu können. Unter Ausnutzung von Gleichung 7.8 wurde der winkelabhängige Neutronenfluss im Spaltterm durch den skalaren Fluss ersetzt. Der Multiplikationsfaktor k_{eff} gibt den „Kritikalitätszustand“ des Systems an:

Das System ist für $k_{eff} < 1$ unterkritisch, was bedeutet, dass keine selbsterhaltende Kettenreaktion möglich ist. Für $k_{eff} > 1$ ist das System überkritisch und die Anzahl der Neutronen erhöht sich von Generation zu Generation. Bei einer Multiplikationskonstante von $k_{eff} = 1$ befindet sich das System genau im kritischen Zustand. In diesem Fall hebt sich die Änderung der Neutronenanzahl durch Verlust- und Produktionsterme gerade auf und eine stabile Kettenreaktion auf konstantem Leistungsniveau stellt sich ein.

Neutronen-Kontinuitätsgleichung

Für gekoppelte Analysen ist das Ziel der Neutronik-Berechnungen, die Bestimmung skalarer Größen wie Neutronenfluss oder -strom in definierten Volumenelementen um daraus die Leistungsverteilung ableiten zu können. Daher kann auf eine detaillierte Winkelabhängigkeit verzichtet werden. Eine Integration der Transportgleichung (Glei-

chung 2.1) über den Raumwinkel $d\Omega$ führt zur Kontinuitätsgleichung:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \phi(\vec{r}, E, t) + \underbrace{\nabla \vec{J}(\vec{r}, E)}_1 + \underbrace{\Sigma_t(\vec{r}, E) \phi(\vec{r}, E, t)}_2 = \\ \underbrace{\int dE' \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E) \phi(\vec{r}, E', t)}_3 + \underbrace{\frac{1}{4\pi} \int dE' \chi(E) \nu \Sigma_f(E') \phi(\vec{r}, E', t)}_4 \end{aligned} \quad (2.5)$$

Externe Quellen wurden dabei außer Acht gelassen. Für den Term auf der linken Seite der Boltzmanngleichung (2.1) sowie für die Terme (2) und (4), ist die Integration über den Raumwinkel unter Verwendung von Gleichung 7.8 leicht nachvollziehbar. Der winkelabhängige Fluss wird dabei zum skalaren Fluss. Bei der Integration des Streutermes (3) über den vollen Raumwinkel $d\hat{\Omega}$ ist zu beachten, dass hier der zweifach differentielle Streuquerschnitt auftritt. Dieser hängt jedoch nur vom Winkel zwischen $\hat{\Omega}$ und $\hat{\Omega}'$ ab. Damit ist es egal ob man die Streuung von ($\hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}$) oder umgekehrt von ($\hat{\Omega} \rightarrow \hat{\Omega}'$) betrachtet. Daher kann zunächst die Integration über $d\hat{\Omega}$ für den Streuquerschnitt durchgeführt werden, der dadurch winkelunabhängig wird. In einem zweiten Schritt kann die Integration des Flusses über $d\hat{\Omega}'$ ausgeführt werden:

$$\begin{aligned} \int_{4\pi} \int_0^\infty \left[\int_{4\pi} \Sigma_S(\vec{r}, \hat{\Omega} \rightarrow \hat{\Omega}', E' \rightarrow E) d\hat{\Omega} \right] \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}', E', t) d\hat{\Omega}' dE' = \\ \int_{4\pi} \int_0^\infty \Sigma_S(\vec{r}, E' \rightarrow E) \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}', E', t) d\hat{\Omega}' dE' = \\ \int_0^\infty \Sigma_S(\vec{r}, E' \rightarrow E) \left[\int_{4\pi} \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}', E', t) d\hat{\Omega}' \right] dE' = \int_0^\infty \Sigma_S(\vec{r}, E' \rightarrow E) \phi(\vec{r}, E', t) dE' \end{aligned} \quad (2.6)$$

Man erhält für den Streuterm den in Gleichung 2.5 angegebenen Ausdruck (3). Der noch fehlende Diffusionsterm (1) kann unter Ausnutzung der Beziehung 7.10 über die winkelabhängige Flussdichte ausgedrückt werden.

$$\hat{\Omega} \cdot \nabla \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E) = \nabla \cdot \hat{\Omega} \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E) = \nabla \cdot \vec{j}(\vec{r}, \hat{\Omega}, E) \quad (2.7)$$

Für die Integration des Diffusionsterms macht man sich den Gaußschen Integralsatz zu Nutze, der eine Beziehung zwischen dem Fluss durch eine geschlossene Oberfläche und der Divergenz des zugehörigen Vektorfeldes angibt.

$$\int_{4\pi} \nabla \cdot \vec{j}(\vec{r}, \hat{\Omega}, E) d\hat{\Omega} = \nabla \cdot \vec{J}(\vec{r}, E) \quad (2.8)$$

Diskretisierung der Energie

Wie bereits erwähnt, erfordern deterministische Ansätze eine Diskretisierung der Energie. Die kontinuierlichen Querschnittsdaten müssen daher in Energiegruppen g unterteilt werden und der Neutronenfluss muss diesen Gruppen entsprechend diskretisiert werden. Daraus ergeben sich neue „Energiegruppengrößen“. Für den winkelabhängigen Fluss in Gruppe g gilt in diesem Fall:

$$\Psi_g(\vec{r}, \hat{\Omega}) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E) dE \quad (2.9)$$

Die Energiegruppeneinteilung erfolgt per Konvention derart, dass mit $g = 1$ die höchste Energiegruppe beschrieben wird. Der skalare Fluss wird entsprechend zu

$$\Phi_g(\vec{r}) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} \phi(\vec{r}, E) dE \quad (2.10)$$

und die Stromdichte für die jeweilige Energiegruppe zu

$$\vec{J}_g(\vec{r}) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} \vec{J}(\vec{r}, E) dE \quad (2.11)$$

Neben Fluss und Strom müssen auch die energieabhängigen Querschnitte in die passende Gruppenstruktur gebracht werden. Um trotz Näherung richtige Resultate zu bekommen, muss die Reaktionsrate erhalten bleiben. Aus der Bedingung, dass für den diskretisierten Fall in einer Energiegruppe die gleiche Reaktionsrate erhalten werden soll wie für das Integral über den Energiebereich im kontinuierlichen Fall, ergibt sich mit Gleichung 7.7 für die Gruppenquerschnitte bei Verwenden des skalaren Flusses folgende Bedingung:

$$\begin{aligned} \int_{E_g}^{E_{g-1}} r_i(\vec{r}, E) dE &= \int_{E_g}^{E_{g-1}} \Sigma_i(\vec{r}, E) \phi(\vec{r}, E) dE \stackrel{!}{=} \Sigma_{i,g}(\vec{r}) \Phi_g(\vec{r}) \\ &= \Sigma_{i,g}(\vec{r}) \int_{E_g}^{E_{g-1}} \phi(\vec{r}, E) dE \end{aligned} \quad (2.12)$$

Der Gruppenquerschnitt ergibt sich somit aus den kontinuierlichen Daten mit einer Flusswichtung:

$$\Sigma_{i,g}(\vec{r}) = \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \Sigma_i(\vec{r}, E) \phi(\vec{r}, E) dE}{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \phi(\vec{r}, E) dE} \quad (2.13)$$

2.1.1.1 Diffusionstheorie

Als Ausgangspunkt für die Diffusionsnäherung dient die Kontinuitätsgleichung in Gruppendarstellung. Dazu werden in Gleichung 2.5 die kontinuierlichen Daten durch die eben eingeführten Gruppendaten ersetzt. Für eine Gruppe g ergibt sich dadurch:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v_g} \frac{\partial}{\partial t} \Phi_g(\vec{r}, t) + \nabla \cdot \vec{J}_g(\vec{r}, t) + \Sigma_{t,g} \Phi_g(\vec{r}, t) = \\ \sum_{g'=1}^G \Sigma_{s,g' \rightarrow g}(\vec{r}) \Phi_{g'}(\vec{r}, t) + \chi_g \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{f,g'}(\vec{r}) \Phi_{g'}(\vec{r}, t) \end{aligned} \quad (2.14)$$

In der Diffusionsnäherung wird unter Ausnutzung des ersten Fick'schen Gesetzes, das seinen Ursprung in der Gastheorie hat, die Neutronenstromdichte als proportional zum Gradienten des Flusses angenommen [3]. Formal wird dieser Zusammenhang wie folgt beschrieben:

$$\vec{J}_g(\vec{r}, t) = -D_g(\vec{r}) \nabla \Phi_g(\vec{r}, t) \quad (2.15)$$

Der Proportionalitätsfaktor wird Diffusionskoeffizient $D_g(\vec{r})$ genannt. Damit kann eine Unbekannte, nämlich die Neutronenstromdichte, aus Gleichung 2.14 eliminiert werden und das Problem auf ein inhomogenes Differentialgleichungssystem zurückgeführt werden. Zur Lösung des Neutronentransports in komplexen Systemen mittels

Diffusionsgleichung wird das System üblicherweise in kleinere Maschen unterteilt (nodaler Ansatz). Geht man davon aus, dass in diesen Maschen eine homogene Materialverteilung vorliegt, wird der Diffusionskoeffizient richtungsunabhängig. Er kann über die Masche als konstant gesetzt werden und damit wird sein Gradient null. Der Gradient der Neutronenstromdichte in Gleichung 2.14 kann unter Berücksichtigung von Gleichung 2.15 somit geschrieben werden als:

$$-\nabla(D_g \cdot \nabla \Phi_g(\vec{r}, t)) = -D_g \nabla \cdot \nabla \Phi_g(\vec{r}, t) = -D_g \nabla^2 \Phi_g(\vec{r}, t) \quad (2.16)$$

Die Diffusionsgleichung ergibt sich unter Berücksichtigung von Gleichung 2.16 aus der Kontinuitätsgleichung (2.14):

$$\begin{aligned} \frac{1}{v_g} \frac{\partial}{\partial t} \Phi_g(\vec{r}, t) - D_g \nabla^2 \Phi_g(\vec{r}, t) + \Sigma_{t,g} \Phi_g(\vec{r}, t) = \\ \sum_{g'=1}^G \Sigma_{s,g' \rightarrow g}(\vec{r}) \Phi_{g'}(\vec{r}, t) + \chi_g \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{f,g'}(\vec{r}) \Phi_{g'}(\vec{r}, t) \end{aligned} \quad (2.17)$$

Aus obigen Betrachtungen ergeben sich Beschränkungen für die Anwendbarkeit der Diffusionsnäherung. Zum einen wurde durch Einführen eines isotropen Diffusionskoeffizienten für eine Masche eine in alle Raumrichtungen gleiche Ausbreitung der Neutronen in der Masche angenommen. Weitere Näherungen ergeben sich, bei der Herleitung des Diffusionskoeffizienten. Für diesen kann über eine Entwicklung der Winkelverteilung über Kugelfunktionen ein Zusammenhang zur freien Weglänge bzw. zum Transportquerschnitt hergeleitet werden [40]. Die elementare Diffusionslösung ergibt sich, wenn man die Entwicklung nach Kugelfunktionen nach den ersten beiden Gliedern abbricht. Im Fall, dass das Medium ein schwacher Absorber ist, erhält man für den Diffusionskoeffizienten die Form:

$$D = \frac{1}{3\Sigma_S(1 - \bar{\mu})} = \frac{1}{3\Sigma_{tr}} \quad (2.18)$$

($\bar{\mu}$: mittlerer Streukosinus, Σ_{tr} : Transportquerschnitt) Eine alternative Herleitung zum Zusammenhang zwischen Diffusionskoeffizienten und Transportquerschnitt findet sich in [40]. Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass die Diffusionsnäherung für den Neutronentransport nur unter folgenden Annahmen gilt:

- Der Fluss ist schwach winkelabhängig.
- Die Spaltquelle ist isotrop.
- Die zeitliche Änderung des Neutronenflusses ist klein gegenüber dem Flussgradienten.
- Der Energieübertrag bei Streuung in eine andere Gruppe wird als isotrop angenommen.

Nicht anwendbar ist die Diffusionsnäherung in Gebieten mit einer starken Neutronenquelle oder an Grenzflächen zwischen Medien, die zu einer stark anisotropen Winkelverteilung der Neutronen führen. Erst ab einer gewissen Entfernung, im sog. asymptotischen Bereich, kann mit den eingeführten Näherung zuverlässig gearbeitet werden.

Ein weiteres Problem kann z.B. in gevoideten Steuerstabkanälen auftreten. In diesem Fall ist die freie Weglänge der Neutronen in axialer Richtung deutlich größer als in radialer Richtung, wo benachbarte Brennelemente anschließen. In diesem Fall sollte eine Korrektur des Diffusionskoeffizienten erfolgen.

Nodale Diffusionscodes

In nodalen Diffusionscodes wird die exakte Geometrie des Systems auf eine bestimmte Anzahl an Maschen reduziert. Meist werden dazu die Brennelemente axial unterteilt. Die Diffusionsgleichungen in g Gruppen werden für jede Masche gelöst, was voraussetzt, dass eine Datenbasis mit den jeweiligen makroskopischen Maschenquerschnitten vorhanden ist. Bei der Homogenisierung der Querschnitte muss die Reaktionsrate in der Masche erhalten bleiben. Für den homogenisierten Fluss gilt:

$$\Phi_g = \int_V \int_{E_g}^{E_{g-1}} \phi(\vec{r}, E) dV dE \quad (2.19)$$

Für die jeweiligen Größen muss neben der Integration über den entsprechenden Energiebereich auch eine Integration über die Masche erfolgen. Die Querschnitte ergeben sich damit analog zur Energiediskretisierung aus den kontinuierlichen Daten durch Wichtung mit dem Neutronenfluss in der gesamten Masche und im gesamten Energiebereich zu:

$$\Sigma_{i,g} = \frac{\int_V \int_{E_g}^{E_{g-1}} \Sigma_i(\vec{r}, E) \phi(\vec{r}, E) dV dE}{\int_V \int_{E_g}^{E_{g-1}} \phi(\vec{r}, E) dV dE} \quad (2.20)$$

2.1.2 Lösung der Diffusionsgleichung in DYN3D

Zur Lösung der Differentialgleichungen verwendet DYN3D ein finites Differenzenverfahren sowie die Annahme, dass die Entwicklung des Flusses in guter Näherung durch ein exponentielles Verhalten beschrieben werden kann [42]. Innerhalb eines Makrozeitschritts Δt wird für den Fluss folgender Ansatz verwendet:

$$\Phi_g^n(\vec{r}, t') = \exp[\Omega^n(t' - t + \Delta t)] \cdot \Phi_g^m(\vec{r}, t') \quad (2.21)$$

Dabei gilt, dass die Zeit t' innerhalb des Zeitintervalls $t - \Delta t$ und t liegt:

$$t - \Delta t \leq t' \leq t \quad (2.22)$$

wodurch für die innere Iteration zum Zeitpunkt $t' = t - \Delta t$ folgende Anfangsbedingung für den Fluss gilt:

$$\Phi_g^n(\vec{r}, t - \Delta t) = \Phi_g^m(\vec{r}, t - \Delta t) \quad (2.23)$$

Der Fluss wird für die zeitliche Extrapolation in zwei Teile separiert: einen exponentiellen Faktor, der von Änderungen in der Flussform unabhängig ist und einen „Quasi-Formfaktor“, der aber sehr wohl von der Zeit abhängt. Dieser Ansatz hat sich in transienten Simulationen bewährt. Bei Änderungen des Flusses mit exponentiellem Verlauf, kann durch diesen Ansatz die Konvergenz erheblich beschleunigt werden. Durch Konvergenztest wird der Zeitschritt t' im Gegenzug bei starken Änderungen der Flussform

herabgesetzt. Für die äußere Iteration wird ein implizites Differenzenverfahren angewendet:

$$\frac{d\Phi_g^n(\vec{r}, t)}{dt} \approx \frac{1}{\Delta t} \cdot \left[(1 + \Omega^n \Delta t) \cdot \Phi_g^n(\vec{r}, t) - \exp(\Omega^n \Delta t) \cdot \Phi_g^n(\vec{r}, t - \Delta t) \right] \quad (2.24)$$

Dabei gilt die Annahme, dass die Flussentwicklung exponentiell verläuft und der Fluss in einer Masche n zum Zeitpunkt t aus dem Fluss zum Zeitpunkt $t - \Delta t$ bestimmt werden kann:

$$\overline{\Phi}_g^n(t) = e^{\Omega^n \Delta t} \overline{\Phi}_g^n(t - \Delta t) \quad (2.25)$$

Der mittlere Fluss in einer Masche ist definiert als das Integral des Gruppenflusses über die Masche:

$$\overline{\Phi}_g^n(t) = \frac{1}{V^n} \int_{V^n} \Phi_g^n(\vec{r}, t) dV \quad (2.26)$$

Für den Faktor Ω^n ergibt sich aus Gleichung 2.25 für jede Masche ein eigener Koeffizient, der zu Beginn eines Iterationsschritts aus dem vorherigen Schritt übernommen wird. Während des Iterationsprozesses wird Ω^n aus dem Fluss $\overline{\Phi}_g^n(t)$ des aktuellen Iterationsschritts bestimmt.

$$\Omega^n = \frac{1}{\Delta t} \ln \frac{\sum_g \overline{\Phi}_g^n(t)}{\sum_g \overline{\Phi}_g^n(t - \Delta t)} \quad (2.27)$$

Für die verzögerten Neutronen in i Gruppen ergibt sich unter der Annahme eines exponentiellen Flussverlaufs und unter Annahme, dass $\nu \Sigma_{f,g}^n(t)$ im Zeitschritt Δt konstant ist:

$$C_i^n(\vec{r}, t) = C_i^n(\vec{r}, t - \Delta t) \cdot e^{-\lambda_j^n \Delta t} + \frac{1 - e^{-(\lambda_j^n + \Omega^n) \Delta t}}{\lambda_j^n + \Omega^n} \cdot \frac{1}{k_{eff}} \sum_{g'=1}^G \beta_{g,i}^n \nu \Sigma_{f,g}^n(t) \Phi_{g'}^n(\vec{r}, t) \quad (2.28)$$

Zur Lösung des mittleren Flusses $\overline{\Phi}_g^n(t)$ wird in DYN3D ein nodales Expansionsverfahren verwendet. Zunächst wird dabei das Problem für hexagonale Geometrie aufgesplittet in ein zweidimensionales Problem in radialer Richtung und ein eindimensionales Problem in axialer Richtung. Die Lösung erfolgt über einen Polynomialansatz bis zur Ordnung 2 zur Beschreibung der Leakage-, Spalt- und Streuterme und Exponentialfunktionen. Die Maschen sind über die mittleren Flüsse und Ströme an den Grenzflächen gekoppelt (optional auch Berücksichtigung der Ecken). Seit Beginn der Entwicklung von DYN3D in den 80-er Jahren wurde der Code an zahlreichen Benchmarks für LWRs in hexagonaler und kartesischer Geometrie [43] sowie für SFRs [73] validiert.

2.1.3 Monte Carlo Verfahren - MCNP6 and SERPENT2

Beim Monte Carlo Verfahren handelt es sich um ein stochastisches Lösungsverfahren. Die Methode hat heute in zahlreichen Bereichen der Wissenschaft Einzug gefunden, wo Probleme analytisch nicht oder nur mit großem Aufwand lösbar sind (Physik, Biologie, Mathematik, Finanzen,...). Die Grundidee der Monte Carlo Methode im Teilchen-transport ist, das Schicksal einzelner Teilchen von ihrer „Geburt“ (durch Spaltung,

Streuung,...) bis zu ihrem „Tod“ (durch Einfang, Verlassen des Systems,...) zu simulieren. Dabei werden die einzelnen Interaktionen jedes Teilchens über Gesetze aus der Teilchenphysik und den daraus resultierenden Auftrittswahrscheinlichkeit bestimmter Ereignisse „nachgespielt“. Durch das Verfolgen einer sehr großen Anzahl an Teilchen ist eine Aussage über das Verhalten des Systems möglich. Großer Vorteil ist dabei, dass weder eine räumliche noch eine energetische Diskretisierung notwendig ist. Da die Zuverlässigkeit von MC Simulationen stark von der Anzahl der simulierten Teilchen abhängt, bedarf die Methode meist langer Rechenzeiten, trotz Parallelisierung der Codes. Zudem erfordern die Datenbanken für Wirkungsquerschnitte in kontinuierlicher Energiedarstellung einen großen Speicherplatz. Derzeit beschäftigt man sich intensiv mit der Entwicklung zeitabhängiger Monte Carlo Verfahren [87]. Zum jetzigen Zeitpunkt sind jedoch thermohydraulisch gekoppelte, zeitabhängige Rechnungen auf deterministische Neutronikcodes beschränkt. Dennoch bieten die akkuraten Lösungen der Monte Carlo Codes, die auf einer exakten Geometriebeschreibung und kontinuierlichen Wechselwirkungsdaten beruhen, ein optimales Werkzeug zur Validierung deterministischer Rechenmethoden. Im Speziellen ist im MC Code SERPENT2 ein Verfahren implementiert, mit dessen Hilfe Gruppendaten für homogenisierte Geometrien zur Verwendung in deterministischen Codes erstellt werden können [32] [33].

Verteilungsfunktionen der Wahrscheinlichkeit (Probability Density Functions - PDF)

In Monte Carlo Simulationen werden Einzelschicksale von vielen Neutronen von ihrer Entstehung bis hin zu ihrer Vernichtung verfolgt. Die Bewegung besteht aus freiem Flug und Zusammenstoßen mit Kernen. Welche Reaktion beim Zusammenstoß eintritt und welche Weglänge das Neutron ohne Wechselwirkung zurücklegt, hängt dabei von der Wahrscheinlichkeit für das jeweilige Event ab. Grundsätzlich erfolgt die Beschreibung stochastischer Prozesse für ein bestimmtes Ereignis, bei dem die Variable x als Ergebnis eintritt, über eine Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung $f(x)$. Für die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion oder auch Dichteverteilungsfunktion wird oft die aus dem englischen stammende Abkürzung PDF verwendet (Probability density function). Diese Funktion gibt für die Zufallsvariable x die Wahrscheinlichkeit an einen bestimmten Wert anzunehmen. Damit ist die Wahrscheinlichkeit, dass ein Ereignis einen Wert zwischen x und dx annimmt, gegeben durch:

$$dP = f(x)dx \quad (2.29)$$

bzw. die Wahrscheinlichkeit, dass das Ereignis einen Wert zwischen a und b annimmt, gegeben durch:

$$P(a < x < b) = \int_a^b dP = \int_a^b f(x)dx \quad (2.30)$$

Das Integral der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $f(x)$ ist die kumulative Verteilungsfunktion $F(x)$ (CDF, cumulative density function). Mittels Integration kann ermittelt werden, wie groß die Wahrscheinlichkeit ist, dass ein Ereignis eintritt, bevor die Variable einen bestimmten Wert erreicht:

$$F(x) = P(x' \leq x) = \int_{-\infty}^x f(x')dx' \quad (2.31)$$

Rein formal folgt aus der Tatsache, dass die PDF eine Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion ist und damit das Integral bzw. die Summe über alle möglichen Ergebnisse auf eins normiert ist, dass die CDF für $x \rightarrow \infty$ den Wert eins annehmen muss:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} F(x) = 1$$

Dies ist auch eine logische Konsequenz, wenn man z.B. Ereignisse wie einen Stoß eines Neutrons nach einer bestimmten freien Weglänge betrachtet: nach „irgendeiner“ Weglänge x wird das Neutron stoßen. Damit kann die Funktion $F(x)$ für alle x nur Werte im Bereich von null bis eins annehmen.

Bei der Implementierung in MC-Programmen gibt es dabei verschiedene Verfahren um mittels eines Zufallszahlengenerators, der Zufallszahlen im Intervall $[0, 1]$ ausgibt, Ergebnisse zu erhalten, die der jeweiligen PDF entsprechend verteilt sind. Ein gängiges Verfahren stellt dabei die Inversionsmethode dar. Bei Verwenden der Inversionsmethode wird eine Zufallsvariable ζ eingeführt, für die gelten soll:

$$F(x) = \zeta \Rightarrow x = F^{-1}(\zeta), \quad (2.32)$$

„Zieht“ man nun mittels Randomgenerator gleichverteilte Zufallszahlen ζ zwischen eins und null, kann mittels der Umkehrfunktion ein Bezug zur Variablen x hergestellt werden. Die „zufällig“ ermittelten Werte von x sind somit entsprechend $f(x)$ verteilt und entsprechen damit der Wahrscheinlichkeitsdichte des Problems. Falls es sich bei der Verteilungsfunktion nicht um eine stetige Funktion, sondern eine diskrete Funktion (Histogramm) handelt, werden aus den Integralen Summenoperatoren. Zum besseren Verständnis der Inversionmethode findet sich in Anhang B ein Beispiel, wie mittels MC-Verfahren die freie Weglänge während einer Simulation bestimmt werden kann.

Für komplizierte Verteilungsfunktionen ist es äußerst schwierig oder gar unmöglich die kumulative Verteilungsfunktion CDF und ihre Umkehrfunktion zu bestimmen. In solchen Fällen kann nicht mehr mit der Inversionsmethode gearbeitet werden. Ein alternatives Verfahren ist die sog. „Rejection Technique“, bei der man eine zweite Verteilungsfunktion $g(x)$ mit leicht bestimmbarer CDF wählt, die der eigentlichen Funktion $f(x)$ möglichst ähnlich ist (um die Effizienz des Algorithmus zu gewährleisten). Für $g(x)$ muss gelten:

$$\xi \cdot g(x) \geq f(x) \quad \text{mit} \quad \xi > 1$$

$\xi \cdot g(x)$ muss die die Funktion $f(x)$ vollständig einschließen. Durch Bilden der CDF von $\xi \cdot g(x)$ kann durch Ziehen einer Zufallsvariablen ζ_1 ein x-Wert entsprechend der Verteilung $\xi \cdot g(x)$ bestimmt werden. Zusätzlich wird bei der Verwerfungsmethode eine zweite Zufallszahl ζ_2 bestimmt. Der Wert x wird nur dann als Ergebnis für $f(x)$ akzeptiert, wenn gilt:

$$\zeta_2 \leq \frac{f(x)}{\xi g(x)}$$

Alle anderen Werte für x werden verworfen. Die x-Werte sind dann entsprechend der Verteilungsfunktion von $f(x)$ verteilt. Eine genaue Beschreibung der Methodik findet sich beispielsweise in [37].

Verfolgung der Neutronenhistorien und Sammeln der Ergebnisse

In der Monte Carlo Simulation werden in einer Vielzahl von Generationen jeweils Startneutronen generiert (in Abhängigkeit der Verteilung der vorherigen Generation) und jedes einzelne dieser Schicksale verfolgt. Dabei werden die Einzelschicksale von Wahrscheinlichkeiten für das Auftreten einzelner Ereignisse bestimmt. Für jedes Teilchen werden Größen wie die freie Weglänge, Reaktionstyp beim Stoß, Richtung und Energie nach dem Stoß, etc. über Zufallsvariablen ermittelt. Die Simulation vieler Teilchen erlaubt es, auf das durchschnittliche Verhalten der Neutronen zu schließen. Über sogenannte „Tallies“ kann der Benutzer Größen festlegen, die im jeweiligen Problem von Interesse sind wie z.B. Reaktionsraten oder auch Flüsse in bestimmten Regionen. Im Allgemeinen lassen sich alle Größen der Form

$$C = \int_t \int_V \int_E f(\vec{r}, E) \phi(\vec{r}, E) dt dV dE \quad (2.33)$$

aus Monte Carlo Rechnungen bestimmen. Für den Fall $f(\vec{r}, E) = 1$ erhält man die Fluenz mit der Einheit *Neutronen/cm²*. Die Tallies aus MC-Codes werden standardmäßig auf ein Startneutron normiert und beziehen sich auf ein spezielles Volumen und Energieintervall. Gerechnet wird in Generationen. D.h., es gibt keine Einschränkung bezüglich der Neutronenlebenszeit. Eine Anpassung auf eine feste Leistung muss durch den Nutzer über Eingabe entsprechender Normierungsfaktoren geschehen. Die Funktion $f(\vec{r}, E)$ ist eine Input-Größe, die sich beispielsweise für Reaktionsraten aus den Querschnittsdaten ergibt oder bei Ermittlung von Strahlendosis eine Responsefunktion sein kann, die vom Benutzer festgelegt werden kann. In der Simulation kann der gesuchte Wert C durch „Abzählen“ der Anzahl des Ereignisses C erhalten werden. In diesem Fall spricht man von analogem Monte Carlo Verfahren. Im Gegenzug dazu lassen sich auch implizite, „non-analogue“ Verfahren anwenden, die im Allgemeinen effizienter, in einigen Fällen sogar unumgänglich, sind. Ein Beispiel hierfür wäre, wenn man den Neutronenfluss hinter einer guten Abschirmung bestimmen will. In dieser Region ist die zu erwartende Anzahl an Neutronen äußerst gering. Eine Varianzreduktion kann dadurch erreicht werden, dass Teilchen, die in die gewünschte Richtung fliegen, gesplittet werden und somit die Statistik deutlich verbessert wird. Gleichzeitig muss in gleichem Maße eine Abnahme des „Teilchengewichts“ (Importance) erfolgen, um das Ergebnis nicht zu verfälschen. Neben der hier vorgestellten Methode des Teilchen-Splittings zur Varianzreduktion, bieten MC Codes meist eine Palette an Möglichkeiten das gewünschte Ergebnis schnellst möglich zu erreichen [59].

Fehlerbetrachtung

Bei Ergebnissen aus MC-Rechnungen handelt es sich um Mittelwerte, die aus der Betrachtung vieler Einzelschicksale resultieren. Es handelt sich also um eine statistische Analyse. Dementsprechend gelten für die Zuverlässigkeit der Resultate die allgemeinen Regeln der Wahrscheinlichkeitsrechnung. Die Einzelergebnisse unterliegen Schwankungen. Folglich sind die Resultate stets mit einer Unsicherheit behaftet. Um die Qualität der Ergebnisse beurteilen zu können, werden verschiedene Größen wie z.B. der relative Fehler und die Standardabweichung zu Rate gezogen.

Der „wahre“ Mittelwert, oder auch Erwartungswert, der Simulation für eine Variable x ist definiert als:

$$E(x) = \int x f(x) dx \quad (2.34)$$

Die Funktion $f(x)$ ist dabei die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion, die die Verteilung der betrachteten Variablen x angibt. Da diese Funktion in MC Verfahren oft nicht explizit bekannt ist, wird der Mittelwert für N betrachtete Schicksale näherungsweise durch Bilden des arithmetischen Mittels der gezählten Ereignisse bestimmt:

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i \quad (2.35)$$

Der Mittelwert \bar{x} und der Erwartungswert $E(x)$ sind über das Gesetz der großen Zahlen miteinander verknüpft: Strebt N gegen Unendlich, so ist für die hier betrachteten Verteilungsfunktionen der Mittelwert gleich dem Erwartungswert (wenn $E(x)$ endlich ist).

Die Varianz beschreibt die Streuung um den Mittelwert und ist für eine Zufallsvariable X mit der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $f(x)$ definiert als:

$$\text{Var}(X) = \sigma^2(X) = \int (x - E(x))^2 f(x) dx = E(x^2) - (E(x))^2 \quad (2.36)$$

Die Standardabweichung σ ergibt sich aus der Quadratwurzel der Varianz. Wie bereits erwähnt, ist $f(x)$ (und damit $E(x)$) oft nicht bekannt, sondern der Mittelwert wird durch das arithmetische Mittel bestimmt. Daher wird zur Abschätzung der Varianz und der Standardabweichung eine Näherung S^2 bzw. S verwendet, die für große N gilt:

$$S^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}{N - 1} \approx (\overline{x^2}) - (\bar{x})^2 \quad (2.37)$$

mit

$$\overline{x^2} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i^2 \quad (2.38)$$

bzw.

$$S(x) = \sqrt{\frac{1}{N(N-1)} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2} \approx \sqrt{(\overline{x^2}) - (\bar{x})^2} \quad (2.39)$$

Für viele globale Systemgrößen ist man in der Auswertung der Simulation nicht so sehr an der Schwankung der Einzelergebnisse um den Mittelwert interessiert, sondern vielmehr an der Schwankung des Mittelwerts selbst (z.B. bei der Berechnung des Multiplikationsfaktors k_{eff}). Die Schwankung des Mittelwerts gibt ein Maß für die „Güte“ der globalen Größe, also eine Abschätzung wie zuverlässig das Ergebnis ist. Die Varianz des Mittelwerts \bar{x} selbst kann unter Ausnutzung der Linearität des Erwartungswerts abgeleitet (Anhang C) werden und ergibt sich aus dem Verhältnis von Standardabweichung zur Anzahl der Historien N :

$$S_{\bar{x}}^2 = \frac{S^2}{N} \quad (2.40)$$

Hier wird ersichtlich, dass die Standardabweichung des Mittelwerts proportional zum Kehrwert der Wurzel aus N ist. Um den Wert $S_{\bar{x}}$ zu halbieren, ist eine Vervierfachung der betrachteten Historien nötig, was zu einer erheblichen Erhöhung des Rechenaufwands führen kann. Methoden der Varianzreduktion zielen daher darauf ab, die Standardabweichung S kleiner zu machen (z.B. durch Abschneidekriterien oder Einführung

von „weight windows“), um die Schwankungen des Mittelwerts bei gleich bleibender Anzahl von Historien zu senken.

Der zentrale Grenzwertsatz besagt, dass für große N und gleichverteilte, unabhängige Zufallsvariablen x_i mit endlichem Wert, die Verteilung um den Mittelwert \bar{x} einer Normalverteilung mit dem Mittelwert $E(x)$ entspricht [26]. Damit können mittels σ bzw. $S_{\bar{x}}$ Konfidenzintervalle für die Ergebnisse festgelegt werden.

$$\bar{x} - S_{\bar{x}} < E(x) < \bar{x} + S_{\bar{x}} \Rightarrow 68\% - \text{Konfidenzintervall} \quad (2.41)$$

$$\bar{x} - 2S_{\bar{x}} < E(x) < \bar{x} + 2S_{\bar{x}} \Rightarrow 95\% - \text{Konfidenzintervall} \quad (2.42)$$

Das bedeutet, dass das wahre Ergebnis zu 68% im Bereich $\pm S_{\bar{x}}$ und zu 95% im Bereich zwischen $\pm 2S_{\bar{x}}$ um den Mittelwert liegt. Je größer das Intervall wird, umso größer ist die Wahrscheinlichkeit, dass der wahre Wert im Intervall liegen muss.

Zur Bewertung der Ergebnisse muss zwischen dem rechnerischen Fehler und dem systematischen Fehler unterschieden werden. Die systematischen Fehler ergeben sich durch ungeeignete Wahl physikalischer Modelle, zu grobe Vereinfachung der Geometrie, unpassenden Varianzreduktionstechniken oder auch durch Fehler und Ungenauigkeiten in der Datenbasis. Dies kann zu extremen Abweichungen der Ergebnisse vom physikalischen Wert führen, auch für kleine Standardabweichungen. Welchen immensen Einfluss solche Fehler haben können, wird in Kapitel 5 bei einem Benchmark zu den Reaktivitäten für den generischen SFR-Kern deutlich.

Erstellung homogener Gruppenquerschnittsdaten mit SERPENT2

Ein Vorteil bei der Erzeugung von Gruppenquerschnittsdaten mittels eines Monte Carlo Codes ist, dass keine Näherungen, sowohl in der Geometrie als auch in der Behandlung physikalischer Effekte, von Nöten sind. Nähere Informationen zur Erstellung einer Datenbasis mittels SERPENT finden sich in [57]. Weiterer Vorteil ist, dass sich Querschnittsdaten für spezielle Bereiche während einer Ganzkernrechnung zur Lösung der Transportgleichung generieren lassen, womit in einer Rechnung eine Referenzlösung und die Querschnitte erhalten werden können. Das Verfahren erfordert für große Probleme jedoch den Einsatz von Höchstleistungsrechnern, insbesondere bei der Erzeugung von Datenbasen mit mehreren unabhängigen Parametern. Wie oben beschrieben, ist bei der Homogenisierung und Kondensierung von Wirkungsquerschnitten in g Energiegruppen der entscheidende Punkt, die einzelnen Reaktionsraten zu erhalten, was durch eine Flusswichtung der Querschnitte realisiert wird:

$$\Sigma_{i,g}(\vec{r}) = \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \Sigma_i(\vec{r}, E) \phi(\vec{r}, E) dE}{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \phi(\vec{r}, E) dE} \quad (2.43)$$

In den neuen Gruppendaten sind selbst für komplizierte Geometrien Effekte durch räumliche Anordnung wie Selbstabschirmung automatisch berücksichtigt. Aus Gleichung 2.17 wird ersichtlich, dass homogenisierte Gruppendaten für den Absorptionsquerschnitt, den Streuquerschnitt, den Spaltquerschnitt sowie Werte für die Spaltneutronenproduktion und die pro Spaltung erzeugte Energie erzeugt werden müssen. Daneben müssen dem Diffusionscode auch die relevanten Informationen über die verzögerten

Neutronen bereitgestellt werden (aus Gründen der Übersichtlichkeit ist in 2.17 der allgemeine Spaltterm angegeben, der sich in prompten und verzögerten Anteil separieren lässt). Eine weitere wichtige Unbekannte ist der Diffusionskoeffizient. Dieser kann nicht direkt aus der Monte Carlo Rechnung mittels eines Tallys bestimmt werden, da er vom Flussgradienten abhängt. Diese Größe wird daher über den Transportquerschnitt angenähert. Der Zusammenhang zwischen Transportquerschnitt und Diffusionskoeffizient ist in Gleichung 4.7 angegeben bzw. wird in [40] abgeleitet. Um Effekte wie Selbstabschirmung bei einer Homogenisierung optimal berücksichtigen zu können, müssen die Querschnittsdaten speziell für das betrachtete System erstellt werden. Zudem muss die Datenbasis für Zustände, die während einer Transienten auftreten können (z.B. Void) und zu einer Veränderung des Systemzustands führen, ausgelegt sein. In dieser Arbeit wird eine Querschnittsdatenbasis speziell für den betrachteten Benchmark-Kern [10] zur Berechnung eines UTOPs und eines ULOFs erstellt. Details zur Gruppenstruktur sowie der Parametervariation finden sich in Kapitel 4.3.

2.1.4 Störungstheorie und Reaktivität

Bei der Analyse von Störfällen wird das System gezielt in einen „gestörten“ Zustand versetzt. Dies kann z.B. durch Änderung der Steuerstabstellung oder durch Verminderung der Pumpleistung im Primärkreislauf erfolgen. Damit einhergehend kommt es zu einer Änderung wichtiger Systemparameter wie beispielsweise Temperaturen oder Dichten. Die verschiedenen Rückwirkungsmechanismen machen sich in einem zusätzlichen positiven oder negativen Reaktivitätseintrag bemerkbar (siehe Kap.1.2.2), der sich aus den Einzelbeiträgen ergibt und als Summe auf das System wirkt. Um das Reaktorverhalten qualitativ und quantitativ beurteilen zu können, ist es hilfreich den Einfluss einer einzelnen Rückwirkung auf die Gesamtreaktivität des Systems gesondert zu bestimmen, um beurteilen zu können, welche Rückwirkung den größten Beitrag zur Reaktivitätsänderung geliefert hat. Ein gängiges Verfahren in der Neutronik basiert auf der Störungstheorie erster Ordnung. Bei Verwendung der Störungstheorie erster Ordnung muss neben dem „normalen“ Neutronenfluss, wie er zu Beginn des Kapitels definiert wurde, zusätzlich der adjungierte Fluss bestimmt werden. Formal erhält man den adjungierten Fluss durch Austausch der Abwärts- und Aufwärtsstreuterme, Austausch von Spaltquerschnitt und Spaltspektrum und Umkehr der Energiegruppen. Betrachtet man die Boltzmann-Gleichung in Matrixschreibweise, werden sämtliche Matrizen adjungiert (bzw. transponiert für ausschließlich reelle Einträge), wobei sich als Lösung dieser „Rückwärtsrechnung“ der adjungierte Fluss ergibt. Bildlich gesprochen startet man nun nicht wie üblich mit einem Neutron und verfolgt seinen Weg, sondern man startet mit einem Spaltprozess und untersucht, woher das Neutron kam, das für die Spaltung verantwortlich ist. In diesem Sinne erhält der adjungierte Fluss die Eigenschaft einer „Wichtungsfunktion“, die in Abhängigkeit des Entstehungsorts angibt, wie groß der Einfluss eines Neutrons auf das Verhalten des Systems ist. Der adjungierte Fluss kann über eine in DYN3D implementierte Routine, analog zum „Vorwärtsfluss“, über die Diffusionstheorie bestimmt werden.

Wie genau ein einzelner Reaktivitätsbeitrag mittels Störungsrechnung bestimmt werden kann und welche Rolle der adjungierte Fluss dabei spielt, wird im folgenden Abschnitt erläutert. Ausgangspunkt ist die Boltzmann-Gleichung. In Matrixschreibweise nimmt sie für n Energiegruppen die folgende Form an:

$$\begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} & L_{13} & \dots \\ L_{21} & L_{22} & L_{23} & \dots \\ \vdots & & \ddots & \\ \dots & & L_{n,n-1} & L_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_n \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} F_{11} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & F_{22} & 0 & \dots \\ \vdots & & \ddots & \\ \dots & 0 & 0 & F_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_n \end{pmatrix} \quad (2.44)$$

In L sind sämtliche Verlustterme zusammengefasst wie Absorption und Leckage, während in der Matrix F die Produktionsterme enthalten sind. λ ist der Eigenwert und entspricht damit $1/k_{eff}$. Häufig wird eine Kurzschreibweise verwendet, in der die Matrizen in die Operatoren L und F überführt werden:

$$L\phi = \lambda F\phi \quad (2.45)$$

Größen, die mit dem Index 0 versehen sind, beziehen sich im Folgenden auf den ungestörten Zustand. Die Herleitung erfolgt zunächst der Übersichtlichkeit halber für ein Problem mit einer Energiegruppe. Im Anschluss erfolgt die Überführung in eine allgemeine Lösung, die auch für Probleme mit beliebig vielen Gruppen gültig ist. Für den ungestörten Reaktor gilt nach Gleichung 2.45 folgende Beziehung:

$$L_0\phi_0 = \lambda_0 F_0\phi_0 \quad (2.46)$$

Erfährt das System eine Störung, ändern sich im Allgemeinen Fall die Elemente der Operatoren L_0 und F_0 zu $L_0 + \Delta L$ bzw. $F_0 + \Delta F$. Dementsprechend lässt sich auch für den gestörten Reaktor eine Bilanzgleichung mit verändertem Fluss und angepasstem Eigenwert aufstellen:

$$(L_0 + \Delta L)(\phi_0 + \Delta\phi) = (\lambda_0 + \Delta\lambda)(F_0 + \Delta F)(\phi_0 + \Delta\phi) \quad (2.47)$$

Ausmultiplizieren von Gleichung 2.47 liefert Terme zweiter Ordnung mit gemischten Delta-Werten. Da in diesem Fall eine Abschätzung der Reaktivitäten nach erster Ordnung erfolgen soll, werden diese Terme gestrichen und man erhält:

$$L_0\phi_0 + \Delta L\phi_0 + L_0\Delta\phi = \lambda_0 F_0\phi_0 + \Delta\lambda F_0\phi_0 + \lambda_0 \Delta F\phi_0 + \lambda_0 F_0\Delta\phi \quad (2.48)$$

Die mittels erster Näherung berechneten Reaktivitäten sind für die meisten Analysen ausreichend und ersparen das Lösen der exakten Gleichungen. Die beiden ersten Terme rechts und links in Gleichung 2.48 heben sich gegeneinander auf. Hier handelt es sich um die Bilanzgleichung des ungestörten Reaktors (vergleiche Gleichung 2.46). Damit bleibt für den Fall des gestörten Reaktors in erster Näherung der folgende Ausdruck übrig:

$$\Delta L\phi_0 + L_0\Delta\phi = \Delta\lambda F_0\phi_0 + \lambda_0 \Delta F\phi_0 + \lambda_0 F_0\Delta\phi \quad (2.49)$$

An dieser Stelle kommt nun die adjungierte Gleichung ins Spiel. Das Adjungieren bedeutet für reelle Matrizen nichts anderes als eine Transposition der Einträge in den Matrizen der stationären Boltzmann-Gleichung. Damit hat auch die adjungierte Gleichung eine Lösung, nämlich den adjungierten Fluss mit einem dazugehörigen Eigenwert λ_0^* .

$$L_0^*\phi_0^* = \lambda_0^* F_0^*\phi_0^* \quad (2.50)$$

Im Fall eines Eingruppenproblems entspricht der adjungierte Fluss dem Vorwärtsfluss und auch die Eigenwerte sind identisch. Im allgemeinen Fall ist diese Aussage für den

Fluss nicht mehr korrekt. Es gilt jedoch weiterhin, dass die beiden Eigenwerte den gleichen Wert haben: $\lambda_0 = \lambda_0^*$. Der Beweis dazu ist in Anhang D angeführt. Multipliziert man Gleichung 2.49 mit dem adjungierten Fluss und verwendet die Tatsache, dass der adjungierte Eigenwert mit dem Eigenwert der Vorwärtsrechnung übereinstimmt, gilt:

$$\phi_0^{*T}(\Delta L\Phi_0 + L_0\Delta\phi) = \phi_0^{*T}(\Delta\lambda F_0\phi_0 + \lambda_0\Delta F\phi_0 + \lambda_0 F_0\Delta\phi) \quad (2.51)$$

Unter Verwendung der Definition eines adjungierten Operators, gelten die Beziehungen $\phi_0^{*T}L_0 = L_0^*\phi_0^*$ und $\phi_0^{*T}\lambda_0 F_0 = \lambda_0 F_0^*\phi_0^*$. Somit heben sich die beiden Terme in Gleichung 2.51, in denen die Flussänderung $\Delta\phi$ auftaucht, gegeneinander auf. Damit ergibt sich:

$$\phi_0^{*T}\Delta L\Phi_0 = \phi_0^{*T}(\Delta\lambda F_0\phi_0 + \lambda_0\Delta F\phi_0) \quad (2.52)$$

Mit Hilfe des adjungierten Flusses können alle Terme, die die Flussableitung $\Delta\phi$ enthalten, eliminiert werden und die Reaktivitätsänderung kann in erster Näherung über Änderungen in den Querschnitten und Eigenwerten bestimmt werden. Der Eigenwert λ ist in der Reaktorthorie mit dem Multiplikationsfaktor k_{eff} bzw. der Reaktivität ρ über folgende Beziehung verknüpft:

$$\lambda = \frac{1}{k_{eff}} = 1 - \rho \rightarrow \rho = 1 - \lambda \quad (2.53)$$

Für die Änderung der Reaktivität $\Delta\rho$ lässt sich damit schreiben:

$$\Delta\rho = (1 - (\lambda + \Delta\lambda)) - (1 - \lambda) = -\Delta\lambda \quad (2.54)$$

Schließlich ergibt sich für die Reaktivitätsänderung nach der Störungstheorie in erster Ordnung unter Verwendung von Gleichung 2.52 und der Relation zwischen Eigenwert und Reaktivität aus Gleichung 2.54:

$$\Delta\rho = \frac{\lambda_0\phi_0^{*T}\Delta F\phi_0 - \phi_0^{*T}\Delta L\phi_0}{\phi_0^{*T}F_0\phi_0} \quad (2.55)$$

Um nun auch Probleme mit mehreren Energiegruppen zu berücksichtigen, muss Gleichung 2.55 über alle möglichen Energiegruppen integriert werden. Dabei bietet es sich an die Dirac-Schreibweise zu verwenden. In Dirac-Schreibweise entspricht $|\phi\rangle$ einem Spaltenvektor, während der dazugehörige Zeilenvektor als $\langle\phi| = (\phi_1 \cdots \phi_n)$ geschrieben wird. Geschlossene Klammern sind als Integral über sämtliche Variablen und deren vollständigen Definitionsbereich zu verstehen:

$$\langle\phi^*(\vec{r}, E, \dots)|\phi(\vec{r}, E, \dots)\rangle = \int \phi^*(\vec{r}, E, \dots)\phi(\vec{r}, E, \dots)d\vec{r}dE\dots$$

Damit kann man allgemein unter Berücksichtigung aller Energiegruppen und aller Zonen schreiben:

$$\Delta\rho = \frac{\langle\phi_0^*|(\lambda_0\Delta F - \Delta L)\phi_0\rangle}{\langle\phi_0^*|(F_0)\phi_0\rangle} \quad (2.56)$$

Es muss also zur Bestimmung des Einflusses einer Störung auf die Reaktivität zunächst der adjungierte Fluss bekannt sein. Um eine detaillierte Auskunft über die Entwicklung der Reaktivitäten in einem transienten Fall zu bekommen, werden die Deltas

in Ableitungen überführt. Über den aktuellen Fluss und die Ableitung der Querschnitte nach dem Störparameter X kann die Änderung der Reaktivität bezogen auf diesen Störparameter berechnet werden (siehe dazu auch Gleichung 1.4):

$$\frac{\partial \rho}{\partial X} = \frac{\langle \phi_0^* | (\frac{\partial L}{\partial X} - \rho \frac{\partial F}{\partial X}) \phi \rangle}{\langle \phi_0^* | F_0 \phi \rangle} \quad (2.57)$$

2.2 Thermohydraulik - ASTEC-Na

Die theoretischen Grundlagen zur Berechnung der Neutronik wurden im vorherigen Kapitel erläutert. Neben dem Lösungsansatz zur Berechnung des Neutronentransports mittels Diffusionsnäherung, wie sie in DYN3D verwendet wird, wurde aufgezeigt, wie homogenisierte Gruppendaten mittels MC-Verfahren generiert werden können. Zusätzlich wurde das Verfahren der Störungstheorie eingeführt, um im Späteren, bei der Bewertung transienter Simulationen, den Einfluss einzelner Störparameter auf die Gesamtreaktivität abschätzen zu können. Kapitel 1 hat jedoch verdeutlicht, dass es zur vollständigen Beschreibung transienter Störfälle, neben der Berücksichtigung von Neutronik, auch der Betrachtung von Thermohydraulik und Thermomechanik bedarf. Daher folgt in diesem Kapitel eine Einführung der wichtigsten thermohydraulischen/mechanischen Prozesse und deren Behandlung in ASTEC-Na, dass zur Simulation des thermohydraulischen Verhaltens im Kern für das gekoppelte Code-System verwendet wird.

Im Rahmen des „7th European R&D Framework Programme“ [24] wurde 2011 das JASMIN Projekt (Joint Advanced Severe accident Modelling and Integration for fast Neutron reactors, 2011-2016) ins Leben gerufen. Ziel des Projektes war die Entwicklung eines europäischen Störfall-Codes für schnelle Natrium gekühlte Reaktoren zur Beschreibung transienten Verhaltens in der frühen Störfall-Phase von SFRs basierend auf dem für LWRs validierten, integralen Code ASTEC (IRSN,GRS). Neben IRSN und GRS beteiligten sich Institutionen wie ENEA, USTUTT, AREVA, CIEMAT, JRC, KIT und EDF an der internationalen Kollaboration. Im Fokus stand die Implementierung von Erweiterungen, die für SFRs nötig sind (Materialdatenbasis, Neutronik,...) sowie die Anpassung und Verbesserung existierender Modelle (z.B. Spaltgasverhalten, thermomechanisches Brennstabverhalten). Zunächst beschränkte sich das Projekt auf die frühe Störfallphase, weshalb Phänomene wie komplettes Abschmelzen des Kerns, mechanische Belastung von Komponenten außerhalb des Kerns, Natriumbrände etc. außer Acht gelassen wurden und Thema von Folgeprojekten werden sollen. Langfristiges Ziel ist es, eine Simulation des Gesamtsystems in einem Code zu vereinen. Hier zeigt sich der große Vorteil gegenüber älteren Codes: Bei ASTEC-Na handelt es sich um einen integralen Code mit moderner Software-Architektur, die es erlaubt, Erweiterungen leicht zu implementieren und die einzelnen Module für spezielle Rechnungen als eigenständige Tools zu verwenden („stand-alone“). Im Wesentlichen beschränkt sich das JASMIN Projekt auf die Weiterentwicklung des CESAR Modules [11], das die Thermohydraulik im Primär- und Sekundärkreislauf beschreibt, sowie des ICARE Modules [45], das Modelle zum thermo-mechanischen Brennstabverhalten, zur Spaltgasentwicklung und für die Neutronik enthält.

Um mit dem gekoppelten Code-System eine korrekte Beschreibung der frühen Unfallphase für Natrium gekühlte, schnelle Systeme zu erreichen, muss gewährleistet werden, dass der Thermohydraulik-Code genau diejenigen Effekte, welche zu einer Änderung in der Neutronik bzw. der Reaktivität führen (siehe Kapitel 1.2.2), beschreiben kann. Abbildung 2.1 zeigt die thermohydraulischen Parametern, die sich direkt auf die Reaktivität auswirken und damit den Neutronenfluss und die Leistungsentwicklung beeinflussen. Es wird deutlich, dass nur durch eine gesamtheitliche Betrachtung von Thermohydraulik, thermischem und mechanischem Komponentenverhalten sowie unter Beachtung der gegenseitigen Rückwirkungen, die Effekte auf das Reaktivitätsverhalten

erfasst werden können.

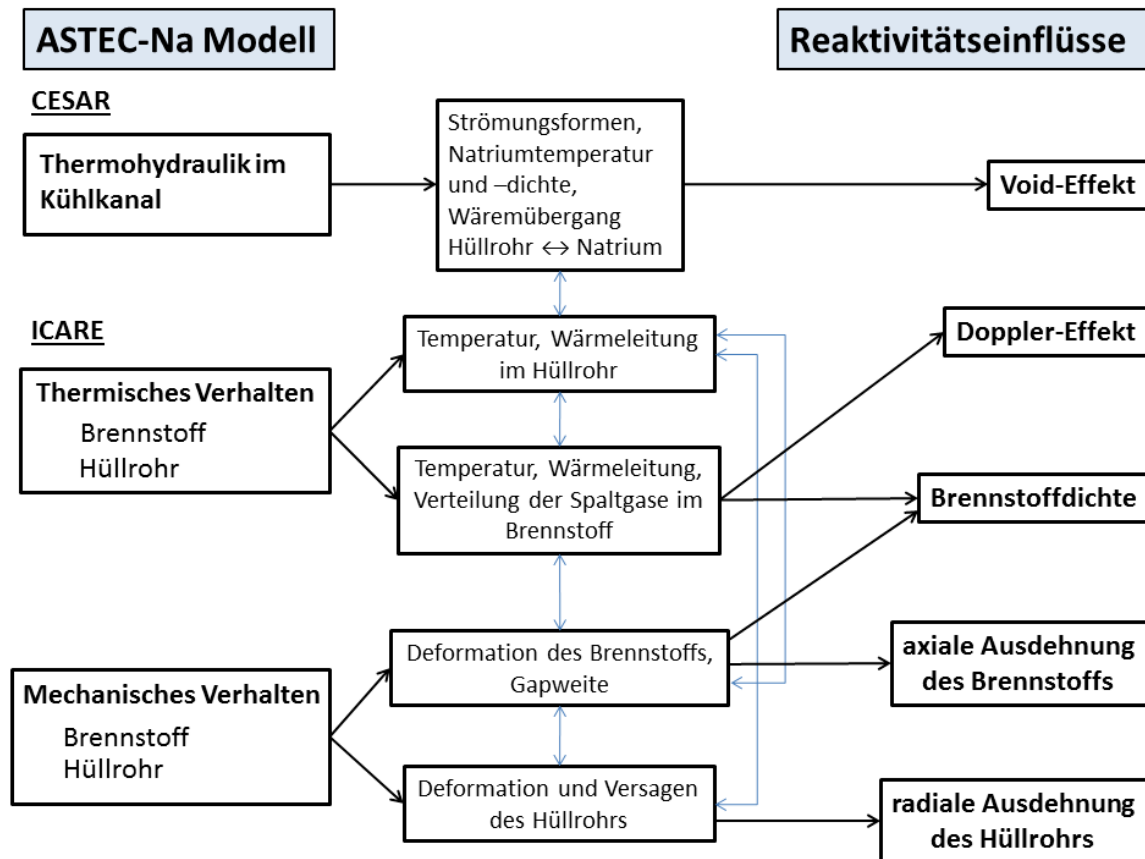


Abb. 2.1: Skizze zum Zusammenhang von den Modellen CESAR, das das Natriumverhalten im Primär- und Sekundärkreis beschreibt, und ICARE, das das thermische und mechanische Komponentenverhalten modelliert, und den Effekten, die sich unmittelbar auf die Reaktivität auswirken. Die auftretenden Phänomene sind dabei nicht voneinander unabhängig. Vielmehr hängt die korrekte Beschreibung der Natrium-Thermohydraulik vom thermischen Verhalten der Komponenten ab, welches wiederum eine Abhängigkeit vom thermo-mechanischen Komponentenverhalten aufweist.

2.2.1 Beschreibung der Zwei-Phasen-Strömung von Natrium

Die Beschreibung der Zwei-Phasen-Strömung stellt im Allgemeinen ein äußerst komplexes Problem dar, das rein theoretisch nicht beschrieben werden kann. Von der einphasigen, flüssigen Strömung bis hin zur einphasigen Dampfströmung müssen alle Zwischenzustände erfasst werden können, um daraus makroskopische Größen für das gemittelte Verhalten der Strömung in einer Masche angeben zu können. Im Fall von SFRs, wo im System niedrige Drücke herrschen, ist mit Natrium-Sieden zu rechnen, wenn der Durchfluss zu gering ist, um die Wärme in der flüssigen Phase ausreichend abführen zu können. Ausschlaggebend für das Einsetzen von Sieden und die Strömungsform sind die physikalischen Eigenschaften des Fluids. In Tabelle 2.1 sind für das Siedeverhalten relevante Stoffeigenschaften von Natrium den Werten für Wasser, als übliches Kühlmittel, gegenübergestellt.

	H ₂ O	H ₂ O	Natrium
Druck [bar]	2	80	2
Siedepunkt [°C]	119,62	294,97	965
Oberflächenspannung [N/m]	0,054	0,016	0,106
Verdampfungswärme [J/kg]	2,2x10 ⁶	1,449x10 ⁶	3,7x10 ⁶
Spezifische Wärme [J/kg°C]	4245	5673	1310
Wärmeleitung [W/m°C]	0,685	0,554	43,7
Temperaturdiffusion [m ² /s]	0,171x10 ⁻⁶	0,1346x10 ⁻⁶	47,0x10 ⁻⁶
Dichte (flüss.) [kg/m ³]	945	725,37	720
Dichteverhältnis(Flüssig./Dampf)	850	17,5	1650

Tab. 2.1: *Physikalische Eigenschaften von Wasser bei verschiedenen Drücken und Natrium bei 2 bar. [48]*

Hieraus lassen sich schon einige der Besonderheiten zum Siedeverhalten von Natrium ableiten. Die Oberflächenspannung, die sich um eine Größenordnung zwischen Natrium und Wasser unterscheidet, ist ein wichtiger Faktor bei der Bildung und Entwicklung von Siedekeimen. Die hohe Oberflächenspannung verbunden mit einer hohen Verdampfungswärme führt dazu, dass Natrium eine starke Tendenz zur Überhitzung hat und zu starken Siedeverzügen neigt. Die Strömungsform wird maßgeblich von Größen wie Wärmeleitung, spezifische Wärme, Verdampfungswärme und dem Verhältnis der Dichten von flüssiger und gasförmiger Phase bestimmt. Die entsprechenden Werte sind in Tabelle 2.1 angeführt. Durch den hohen Dichteunterschied in Natrium von Flüssigkeit und Gas stellt sich bevorzugt eine Zwei-Phasen-Strömung mit hohem volumetrischen Gasanteil ein, da schon ein geringer prozentualer Gasanteil zu einem erheblichen Void führen kann. Im Allgemeinen bildet sich zunächst eine Blase, wobei der Druck innerhalb der Blase im Vergleich zum vorherrschenden Druck in der umgebenden Flüssigkeit sehr hoch ist. Diese Druckverhältnisse machen eine weitere Nukleation in der Umgebung sehr unwahrscheinlich. Durch Anwachsen der Blase (Temperaturerhöhung) wird zunehmend flüssiges Natrium aus dem axialen Kanalabschnitt verdrängt bis schließlich nur noch ein flüssiger Film an der Oberfläche zurückbleibt. Tritt die Blase in kühleren Regionen, sinken Druck und Temperatur in der Blase, wodurch ein Rückfluss von flüssigem Natrium erfolgt und der statische Druck erniedrigt wird, was eine erneute Blasenbildung begünstigt. Solch eine Kolbenströmung ist typisch bei Verwendung von Flüssigmetallen als Kühlmittel. Die Kolbenströmung geht bei weiterer Erwärmung in eine Ringströmung über, bei der das innere des Kanals vollständig mit einer großen Blase gefüllt ist und ein Rückstrom von flüssigem Natrium nicht mehr möglich ist. Infolgedessen führt eine weitere Erwärmung zum Aufreißen des Flüssigkeitsfilms an der Oberfläche bis hin zum vollständigen Verdampfen. Nach verschwinden des Flüssigkeitsfilms steigt die Temperatur an den Oberflächen sehr schnell stark an. Aufgrund seiner physikalischen Eigenschaften siedet Natrium unter Bildung weniger großer Blasen, anders als Wasser, wo zunächst viele kleine Blasen eine homogene Mischung bilden. Durch die sehr gute Wärmeleitfähigkeit stellt sich im Kühlkanal, anders als bei Wasser, kaum ein Temperaturgradient ein. Vielmehr herrscht über den gesamten Querschnitt des Kanals nahezu die gleiche Temperatur. Diese Tatsache führt dazu, dass das Natrium nicht lokal zu Sieden beginnt, sondern unter Umständen eine schlagartige Verdampfung einsetzen kann, was, im Speziellen bei der Anwendung für Reaktoren, mit einem

plötzlichen Anstieg der Reaktivität über den Voideffekt verbunden ist. Kolbenströmung und Ringströmung sind die vorherrschende Strömungsformen bei Natriumsieden unter niedrigen Drücken.

2.2.1.1 Beschreibung in ASTEC-Na

Das CESAR Modul wurde im Rahmen des JASMIN Projekts angepasst, um die Verwendung von Natrium als Kühlmittel in der Simulation zu ermöglichen. Diese Anpassung umfasst neben der Implementierung der Stoffeigenschaften von Natrium die Ausstattung des Moduls mit Modellen zur Beschreibung von Wärmeübertragungen und Massenaustausch im Kühlmittel und mit umgebenden Strukturen.

Erhaltungsgleichungen

Für das Zweiphasenmodell muss sicher gestellt werden, dass die grundlegenden Forderungen nach Massen-, Impuls- und Energieerhaltung gegeben sind. Im CESAR-Modul werden die Massenerhaltung und die Energieerhaltung für beide Phasen, also flüssige und gasförmige Phase, separat gelöst. Im Fall der Impulserhaltung werden Gas und Flüssigkeit als eine homogene Phase betrachtet mit einer mittleren Geschwindigkeit \vec{u} . Damit geht die Information über relative Geschwindigkeit von Gas und Flüssigkeit nicht in die Erhaltungsgleichungen ein. Stattdessen wird mittels eines „Drift-Flux-Modells“ der Reibungsverlust („slip law“) zwischen den Phasen berücksichtigt. Die Gleichungen werden nicht kontinuierlich gelöst, sondern lokal gemittelt für einen geeigneten Bereich aufgestellt und als eindimensionales Gleichungssystem gelöst. Über Sprungbedingungen, die eine Verbindung zwischen den Phasen an den Grenzflächen herstellen, wird das Gleichungssystem geschlossen. Details finden sich in [51].

Austauschfläche

Zur korrekten Darstellung der Austauschvorgänge zwischen den Phasen, ist es wichtig, eine geeignete Austauschfläche A_I für den Wärme- und Massenaustausch zu definieren. Für die Fläche muss gelten, dass sie den Wert Null annimmt, wenn der Gasanteil α bei einem der Extremwerte 0 oder 1 liegt. Der theoretische Ansatz $A_I = 4\sqrt{\alpha/D_h}$ mit D_h als hydraulischem Durchmesser erfüllt diese Bedingung für $\alpha = 1$ nicht. Daher wurden in ASTEC-Na sechs Spline-Funktionen zur Beschreibung der Austauschfläche eingeführt, wobei als minimale und maximale Standardwerte für den Voidanteil $\alpha_{min} = 10^{-5}$ und $\alpha_{max} = 1 - 10^{-6}$ festgelegt sind:

- 0 für $\alpha < \alpha_{min}$
- 0. bis 10^{-3} für $\alpha_{min} < \alpha < 100\alpha_{min}$
- 10^{-3} bis $\sqrt{0.8}$ für $100\alpha_{min} < \alpha < 0.8$
- $\sqrt{0.8}$ bis 0.0001 für $0.8 < \alpha < 1 - 100(1 - \alpha_{max})$
- 0.0001 bis 0 für $1 - 100(1 - \alpha_{max}) < \alpha < \alpha_{max}$
- 0 für $\alpha > \alpha_{max}$

Massen- und Wärmeaustausch zwischen flüssigem und gasförmigem Natrium

Die Beschreibung des Wärme- und Massenaustausch zwischen flüssigem und gasförmigem Natrium in ASTEC-Na orientiert sich stark am SABENA Code [74] [75]. Der Massen- und Wärmeaustausch an der Gasoberfläche wird unter Verwendung der Gastheorie berechnet. Betrachtet werden dabei zwei entgegengesetzte Ströme an der Grenzschicht der beiden Phasen. Zum Einen kondensiert ein gewisser Anteil gasförmigen Natriums beim Auftreffen von Gasmolekülen auf die Oberfläche A_I der Flüssigkeit. Über einen „Anpassungskoeffizienten“ κ wird festgelegt, wie groß der Anteil, der kondensiert, ist. Dementsprechend wird der Anteil $1 - \kappa$ reflektiert. Als Standardwert wird $\kappa = 0.1$ gewählt. Zusätzlich führt die Verdampfung von Flüssigkeit zu einem entgegengesetzten Massenstrom zwischen den Phasen. Der Massenübertrag von gasförmiger zu flüssiger Phase $\Gamma_{G \rightarrow L}$ und der Übertrag im umgekehrten Fall $\Gamma_{L \rightarrow G}$, also Verdampfung, sind unter Sättigungsbedingungen im Gleichgewicht, sodass bei gleichen Temperaturen T_G und T_L der gasförmigen und der flüssigen Phasen und Sättigungsdruck P_{sat} die übertragenen Massenanteile gleich groß sein müssen. Zusätzlich wird ein schlagartiges Sieden großer Mengen („Flashing“) berücksichtigt, wenn der Gesamtdruck niedriger als der Flüssigkeitssättigungsdruck ist und Massenkondensation („Bulk Condensation“), wenn der Gasdruck höher als der Sättigungsdruck des Gases ist, wobei instantan große Teile von Natrium kondensieren. Neben dem Energieaustausch durch Enthalpie bei Phasenübergängen wird auch Energie in Form von Wärme durch Konvektion zwischen den Phasen ausgetauscht. Dieser zusätzliche Anteil ist zwar wesentlich geringer, ist aber insbesondere für nicht-kondensierbare Gase wichtig. Die Konvektion findet über die Austauschflächen statt, wobei in ASTEC-Na drei verschiedene Fälle unterschieden werden:

- $\alpha < 0.4$: Gasblasen in einer kontinuierlichen Flüssigkeit
- $\alpha > 0.6$: Flüssigkeitstropfen in einer kontinuierlichen Gasphase
- $0.4 < \alpha < 0.6$: Mischung der Phasen

Wärmeaustausch zwischen Wand und Fluid

Der Wärmeübergang zwischen dem Hüllrohr und dem Kühlmittel ist entscheidend für das thermodynamische Verhalten im Primärkreis sowie auch für das mechanische Brennstabverhalten. Die Wärmeübergangskoeffizienten können in ASTEC-Na über verschiedene Modelle beschrieben werden oder als konstant angenommen werden. Beim Wärmeaustausch von flüssigem Natrium mit der Wand, werden fünf Phänomene berücksichtigt: konvektiver Wärmeübertrag, Blasensieden, Filmsieden, Wärmeübertragung durch Strahlung sowie Spraykühlung. In Abbildung 2.2 sind die Bereiche, wann welche Art des Wärmetransfers auftritt, in Abhängigkeit der Wandtemperatur T_W dargestellt. Dabei wird die Temperatur von flüssigem Natrium mit T_L , die Sättigungstemperatur mit T_{sat} , die Minimaltemperatur für stabiles Filmsieden mit T_{MSF} und die Temperatur, ab der der kritische Wärmefluss erreicht wird, mit T_{CHF} bezeichnet.

Unterhalb der Sättigungstemperatur erfolgt der Wärmeübertrag ausschließlich durch Konvektion. Der Wärmestrom φ_c zwischen Fluid und Wand kann in diesem Bereich

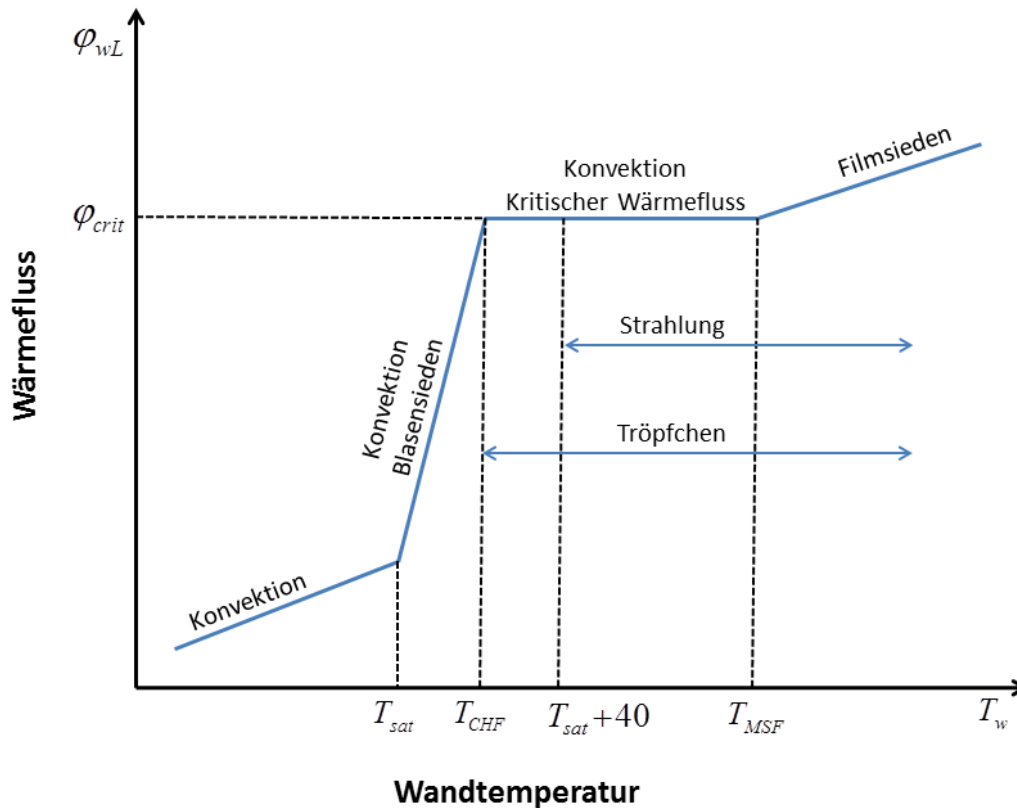


Abb. 2.2: Wärmefluss in Abhängigkeit der Wandtemperatur und Arten der Wärmeübertragung (nach [11]).

über die dimensionslose Nußelt-Zahl Nu , die Wärmeleitfähigkeit Λ , den hydraulischen Durchmesser D_h und die Temperaturdifferenz beschrieben werden:

$$\varphi_c = h_{WL}(T_W - T_L) \quad (2.58)$$

$$h_{WL} = \frac{\Lambda Nu}{D_h} \quad (2.59)$$

(h_{WL} : konvektiver Wärmeübergangskoeffizient, T_W : Wandtemperatur, T_L : Temperatur des flüssigen Natriums, Λ : Wärmeleitfähigkeit, D_h : hydraulischer Durchmesser).

Welche Korrelation zur Bestimmung der Nußelt-Zahl verwendet wird, ist dabei dem Nutzer überlassen. Standardmäßig wird die Korrelation von Mochizuki und Takano verwendet [70], optional kann aber auch auf Korrelationen von Mikityuk [68], Ushakov [94], Graber/Rieger [41] oder Lyon-Martinelli [61] zurückgegriffen werden. Je nach geometrischer Anordnung (Verhältnis von Abstand zu Durchmesser der Hüllrohre) und Kenngrößen wie der Prandtl-Zahl oder Peclet-Zahl, sollten die verschiedenen Modelle ausgewählt werden. Oberhalb der Sättigungstemperatur setzt Blasensieden ein. Zur Beschreibung des Blasensiedens wird auf ein Modell von Forster und Zuber zurückgegriffen [31], bei dem sich die Reynolds-Zahl aus Blasendurchmesser und radialer Geschwindigkeit ergibt. Die Blasen entstehen an Keimstellen wie z.B. Oberflächenunregelmäßigkeiten des Hüllrohrs. Diese Rauigkeiten der Oberfläche haben in der Regel verschiedene Abmessungen. Bei steigender Heizflächenbelastung werden auch kleinere Keime aktiv und die Anzahl der entstehenden Blasen nimmt zu. Durch den damit

verbundenen größeren Wärmeabtransport in Form von Dampf, kommt es gleichzeitig zu einer besseren Durchmischung des Kühlmittels unmittelbar an der Oberfläche. Daher steigt der Wärmefluss im Bereich des Blasensiedens verstärkt an (Abbildung 2.2). Bei weiterer Erhöhung der Wandtemperatur wachsen die Blasen an der Oberfläche allmählich zusammen und es bildet sich ein Dampffilm aus, der eine wärmeisolierende Wirkung hat. Daher verschlechtert sich der Wärmetransport, wenn die Temperatur für den kritischen Wärmefluss erreicht ist. In ASTEC-Na ist zur Berechnung der kritischen Wärmeübergangstemperatur eine Korrelation nach Thom [91] implementiert:

$$T_{CHF} = T_{sat} + \sqrt{\frac{\varphi_{crit}}{1,97 \cdot 10^3}} \exp(-0,115 \cdot 10^{-6} P) \quad (2.60)$$

(T_{CHF} : Temperatur bei Erreichen des kritischen Wärmeflusses, T_{sat} : Sättigungstemperatur, φ_{crit} : kritischer Wärmefluss, P : Druck).

Zur Bestimmung des kritischen Wärmeflusses wird die Beziehung von Zuber verwendet unter Berücksichtigung des Wärmeübergangs bei unterkühltem Sieden nach Ivey und Morris [47]:

$$\varphi_{crit} = 0,149 \cdot C_{sub} \left(\frac{g \cdot \gamma \cdot (\rho_L - \rho_G)}{(\rho_L)^2} \right)^{0,25} \cdot \rho_G \cdot H_{LG} \quad (2.61)$$

mit

$$C_{sub} = \max \left(1, 1 + 0,1 \left(\frac{\rho_L}{\rho_G} \right)^{3/4} \cdot \frac{C_{pL}(T_{sat} - T_L)}{H_{LG}} \right) \quad (2.62)$$

Die Temperatur, ab der stabiles Filmsieden einsetzt wird nach Berenson [8] berechnet zu:

$$T_{MSF} = T_{sat} + 0,127 \cdot \frac{\rho_G \cdot H_{LG}}{\Lambda_G} \left(\frac{g \cdot \Delta\rho}{\rho_L + \rho_G} \right)^{2/3} \left(\frac{\gamma}{g\Delta\rho} \right)^{1/2} \left(\frac{\mu_G}{g\Delta\rho} \right)^{1/3} \quad (2.63)$$

mit $\Delta\rho = \rho_L - \rho_G$

(g : Graviationskonstante, γ : Oberflächenspannung, ρ_G : Dichte der Gasphase, ρ_L : Dichte der flüssigen Phase, C_{pL} : Wärmekapazität der flüssigen Phase, H_{LG} : Enthalpiedifferenz zwischen Gas und Flüssigkeit, Λ_G : Wärmeleitfähigkeit der Gasphase, μ_G : Viskosität des Films).

Mit Schließen des Dampffilms ist der Bereich des Filmsiedens erreicht. Der Wärmeübergangskoeffizient ist hier erheblich kleiner als beim Blasensieden. Eine weitere Erhöhung der Wandtemperatur kann nur noch schwer kompensiert werden und eine Zerstörung des Hüllrohrs wird unvermeidlich. Der Wärmefluss φ_{FB} in diesem Bereich wird in ASTEC-Na ebenfalls nach einem Modell nach Berenson [8] bestimmt:

$$\varphi_{FB} = Br \cdot (34,55 \cdot 10^{-5} P + 854) \cdot (T_W - T_{sat})^{0,75} \quad (2.64)$$

(Br : modifizierter Berenson-Koeffizient)

Ein zusätzlicher Beitrag zum Wärmefluss ergibt sich im Bereich des kritischen Wärmeflusses und des Filmsiedens durch Spraykühlung und durch Strahlung, wobei die Wärmeübertragung durch Strahlung im CESAR-Modul erst berücksichtigt wird, wenn die Wandtemperatur 40 Kelvin über der Sättigungstemperatur liegt (siehe Abbildung 2.2). Die Spraykühlung dient dazu, den Effekt einer zusätzliche Kühlung beim Wiederfluten leer gelaufener Kanäle zu beschreiben. Beim Einströmen des Kühlmittels entstehen Tropfen, die der Kühlmittelfront vorausgehen. In ASTEC-Na wird in Bereichen,

die sich weniger als 50cm von der Kühlmittelfront entfernt befinden, ein zusätzlicher Kühleffekt über das Sparykühlungsmodell berechnet.

2.2.2 Thermisches und thermomechanisches Brennstabverhalten

Für einen sicheren Reaktorbetrieb muss gewährleistet sein, dass die Brennstäbe intakt bleiben und der Brennstoff im Hüllrohr sicher eingeschlossen ist. Ein gängiger Brennstoff, der in schnellen Natrium gekühlten Reaktoren zum Einsatz kommt, ist ein Pu-U-Mischoxid (MOX). Schnelle Reaktoren weisen im Normalbetrieb eine hohe lineare Leistung (40-50 kW/m) auf und es können Temperaturen von über 2500°C im Inneren der Pellets auftreten. Nach außen hin fällt die Temperatur des Brennstoffs stark ab. Das starke Temperaturgefälle kann zu Spannungen und Druckaufbau im Material führen. Abbildung 2.3 zeigt einen typischen Temperaturverlauf in einem SFR-Brennstab. Durch die Temperaturunterschiede bauen sich in radialer Richtung vier strukturell unterschiedliche Brennstoffzonen im Pellet aus. Im inneren, heißesten Bereich finden sich große Voidbereiche, die durch Wandern der Porositäten aus dem Herstellungsprozess resultieren. Schon nach kurzer Betriebsdauer bildet sich in der Mitte des Pellets ein zentrales Loch. Die umgebende Brennstoffregion besteht aus großen, zusammenhängenden Kristallstrukturen, die wenig innere Blaseneinschlüsse aufweisen. Die Korngrenzen bzw. linsenförmigen Voidzonen verlaufen überwiegend in radialer Richtung. Verdampfender Brennstoff kann so in den inneren Bereich gelangen oder kondensiert am kühleren Ende der Zone. Es entsteht insgesamt ein Nettostrom von Material nach außen. Umschlossen wird diese Zone von kleineren, äquiauxialen Gefügen. Hier sind die Temperaturen gerade so hoch, dass sich größere Kristallverbände durch Diffusion ausbilden können, diese jedoch nach wie vor Porositäten und Einschlüsse von Spaltgasen aufweisen. Zwischen Hüllrohr und der Zone mit erster Kristallausbildung behält der Brennstoff bei ca. 1200°C seine Mikrostruktur aus dem Herstellungsprozess.

Dieses typische Verhalten des MOX-Brennstoffs im Betrieb ist entscheidend für die Wärmeabfuhr aus dem Brennstoff. Neben Spaltgaseinschlüssen, Porositäten und Rissen spielt die Gapweite (Leerraum zwischen Brennstoff und Hüllrohr) eine wichtige Rolle bei der Temperaturentwicklung im Brennstoff. Das Gap, das mit Helium oder Spaltgasen gefüllt ist, stellt für den Wärmeabtransport die größte Barriere dar. Langfristige Bestrahlung, also ein hoher Abbrand, führt zu Veränderungen im Brennstoff und im Hüllrohr, wodurch sich die Gapweite verändert. Neutroneninduziertes „Aufquellen“ tritt nicht nur im Brennstoff auf, sondern betrifft auch das Hüllrohr. Dies und die thermische Ausdehnung der Komponenten führt zu einer Verkleinerung der Gapweite im Betrieb, bis hin zum Schließen der Lücke, wodurch Brennstoff und Hüllrohr in direkten Kontakt treten und eine verbesserte Wärmeabfuhr ermöglicht wird, was eine Absenkung der Brennstofftemperatur zur Folge hat. Die Ausbildung von Regionen mit unterschiedlicher Wärmeleitfähigkeit im Brennstoff selbst, die Entwicklung der Gapweite und die Veränderung der Nuklidzusammensetzung, vor allem des Plutoniumgehalts, nehmen Einfluss auf die thermische Entwicklung des Systems und hängen vom Abbrandzustand ab. Durch die nuklearen Reaktionen wird im Betrieb permanent neues Spaltgas produziert. Zunächst sammelt es sich in mikroskopischen Poren, die jedoch wachsen und durch das Material wandern können. Damit wird ein großer Teil des entstandenen Gases zum Gasplenum transportiert. Durch Zusammenschluss von Po-

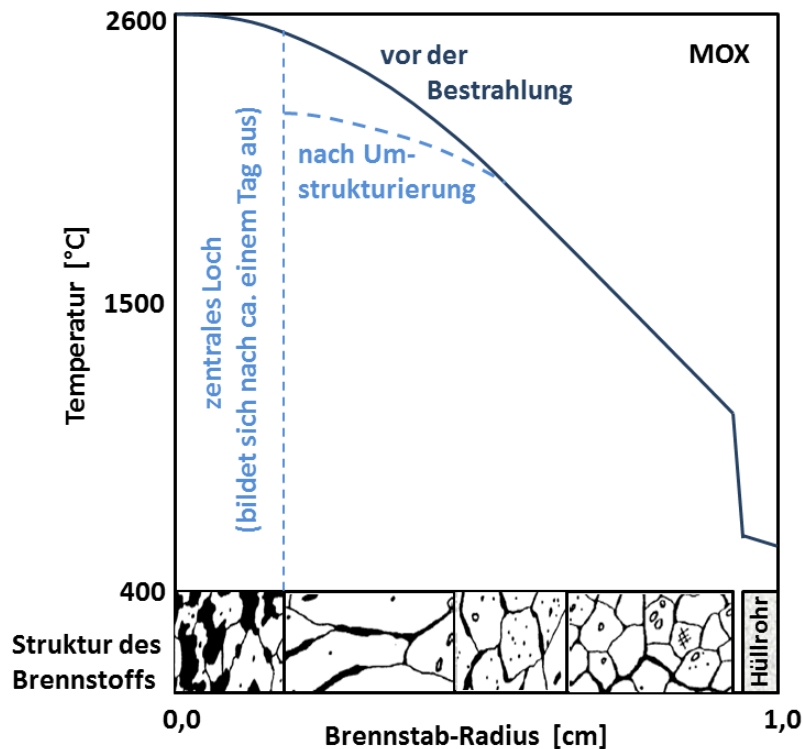


Abb. 2.3: Typischer Temperaturverlauf in einem SFR-Brennstab bei normalem Betrieb. Im Inneren des Pellets herrscht eine Temperatur von bis zu 2600°C , die nach aussen hin stark abfällt. Entsprechend der lokalen Temperatur bilden sich im Pellet Zonen mit spezifischer Struktur aus. In der heißesten Zone innen liegt der Brennstoff in sehr poröser Form vor, wobei sich schon nach kurzem Betrieb ein Loch in der Mitte ausbildet. Darauf folgt eine Zone mit großen Rissen in radialer Richtung und großen Grobkörnern. Zone drei ist gekennzeichnet durch kleinere Blasen und mit Korngrenzen und wird auch als „Grobkornbildungszone“ bezeichnet. Im äusseren Bereich liegt der Brennstoff im Herstellungszustand vor und weist kleinere Blasen und Defekte aus dem Herstellungsprozess auf (nach [45]).

ren können große Hohlräume und Risse entstehen, die bis hin zur Fragmentierung des Brennstoffs führen können. Im Allgemeinen wird zwischen intragranularen, intergranularen und geschlossenen Porositäten unterschieden. Eine nicht ausreichende Wärmeabfuhr, z.B. im Falle eines ULOFs, oder ein externer Reaktivitätseintrag und eine damit verbundenen Leistungssteigerung (UTOP), führen zu einer Erwärmung des Brennstoffs über die gängigen Betriebstemperaturen bis hin zur Schmelztemperatur und führen zu einer zusätzlichen Belastung des Hüllrohrs. Die mechanische Belastung des Hüllrohrs ist hauptsächlich auf Druck durch Spaltgasaufbau oder Brennstoffschmelzen und auf die Brennstoffausdehnung mit direktem Kontakt zurückzuführen. Bei Kontakt zwischen Hüllrohr und Brennstoff besteht auch die Möglichkeit chemischer Reaktionen und dass sich eine oxidische Zwischenschicht bildet, deren Wärmeleitfähigkeit berücksichtigt werden muss. Wird die Bruchfestigkeit des Hüllrohrs überschritten, bilden sich axiale Risse. Es muss beachtet werden, dass das Hüllrohrmaterial durch die Langzeitbestrahlung vorbelastet sein kann, die zur Bildung von mikroskopischen Leerräumen (Voids) führt und die Materialeigenschaften verändert. Auch die Art der Transiente

hat Einfluss auf das Hüllrohrverhalten. Bei schnellen Transienten kann das Hüllrohr dem rapiden Temperaturanstieg im Brennstoff nicht folgen und dehnt sich nicht entsprechend aus, weshalb es durch Überdruck zum Aufbrechen des Hüllrohrs kommen kann. Ist das Spaltgas innerhalb des Brennstoffs in einer geschlossenen Zone (cavity) angesammelt, kann es beim Schmelzen zur schlagartigen Freisetzung kommen, bei der das Hüllrohr eine sehr hohe mechanische Belastung erfährt. Durch den Temperaturunterschied zwischen innerer und äußerer Brennstoffzone wird geschmolzener Brennstoff zunächst immer in der Mitte des Pellets auftreten und ist damit noch von festem Brennstoff umgeben. In welche Richtung sich die Schmelze bewegt, hängt vom Druckgradient ab. Kommt es zu weiterem Aufschmelzen, unterscheidet man zwei Fälle: Je nachdem, ob die Cavity in axialer oder radialer Richtung durchbrochen wird. Beim axialen Durchbruch verbindet sich die geschmolzene, unter hohem Druck stehende Innenzone mit dem Gasplenum, das den Brennstoff im Brennstab oben und unten umschließt. Durch den hohen Druckunterschied kommt es zur schlagartigen Verlagerung von Brennmaterial, was meist mit einer stark negativen Reaktivitätsrückwirkung gekoppelt ist und zum „nuklearen Abschalten“ des Reaktors führt. Setzt sich der Schmelzvorgang in radialer Richtung fort, ist ein Versagen des Hüllrohrs sehr wahrscheinlich. Dabei wird in kürzester Zeit Brennstoff in den Kühlkanal ausgestoßen (Dispersion). Treibende Kraft ist auch hier der hohe Druckunterschied. Durch die große Brennstoffverlagerung ist dabei mit nuklearem Abschalten des Reaktors zu rechnen. Als Folge der Verlagerung können in den Kanälen außerhalb oder auch innerhalb des Brennstabs Blockaden entstehen, die aus wieder erstarrtem Brennmaterial bestehen. Die Bildung solcher Blockaden ist im unteren Teil des Brennstabs wahrscheinlicher, da im oberen Abschnitt meist nach wie vor sehr hohe Temperaturen herrschen, die ein Erstarren verhindern.

2.2.2.1 Allgemeine Beschreibung in ASTEC-Na

Zur Beschreibung des thermo-mechanischen Verhaltens wurden im JASMIN Projekt Modelle aus SCANAIR [69] in die ASTEC-Na-Version eingebaut, um geometrischen und strukturellen Änderungen der Komponenten in der Simulation Rechnung zu tragen. Im Folgenden wird nach einer allgemeinen Einführung zum ICARE Modul auf die wichtigsten thermischen und thermo-mechanischen Phänomene eingegangen und erläutert, welche Prozeduren in ASTEC-Na zu deren Behandlung implementiert sind (siehe dazu auch [46]).

Bestrahlung und Abbrand

ASTEC-Na ist speziell darauf ausgerichtet, das Brennstabverhalten während transienten Vorgängen zu erfassen. Effekte, die sich aus Langzeitbestrahlung ergeben, können mit ASTEC-Na nicht simuliert werden. Daher wird für vorbestrahlte Brennstäbe ein weiterer Code, GERMINAL [65], voraus geschaltet. Durch das von IRSN entwickelte Austausch-Tool TOSCAN können die GERMINAL-Daten einfach aufgearbeitet und an ASTEC-Na als Eingabedaten übergeben werden. In GERMINAL sind neben Modellen zur Beschreibung des thermischen Brennstoffverhaltens vor allem Modelle zur Beschreibung der Brennstoffstruktur enthalten. Wichtige Parameter wie die Dichte, Risse und Porositäten, Gapweite und auch stöchiometrische Daten können bestimmt werden.

Daneben wird die Spaltgasproduktion und Verteilung sowie mechanische Verformungen der Komponenten berechnet. Die Vorab-Rechnungen mit GERMINAL entfallen für frischen Brennstoff. Sollen jedoch Simulationen zu bereits bestrahltem Brennstoff durchgeführt werden, wie dies bei vielen CABRI-Experimenten (siehe nächstes Kapitel) der Fall ist, so sind die GERMINAL-Rechnungen für das Ergebnis unerlässlich. Da die CABRI-Brennstäbe nach einer Langzeitbestrahlung in Leistungsreaktoren ausgebaut wurden und anschließend in den CABRI-Reaktor eingesetzt wurden, muss in GERMINAL nicht nur die „heiße“ Phase im Betrieb simuliert werden, sondern auch das Zurückkehren in den „kalten“ Zustand. Der Aufheizvorgang im CABRI-Reaktor wird von ASTEC-Na erfasst. Der Effekt der Ausbildung einer Oxidschicht zwischen Brennstoff und Hüllrohr wird zwar in GERMINAL berücksichtigt, hat aber in der derzeitigen ASTEC-Na Version kein Pendant. ASTEC-Na wird daher lediglich der Außenradius des Brennstoffs übergeben, wodurch die Oxidschicht in ASTEC-Na fälschlicherweise als Gap behandelt wird. Dies kann zu einer Überschätzung der Brennstofftemperatur führen.

Materialeigenschaften

Die Materialeigenschaften liegen in Form einer speziellen Datenbank (MDB, [6]) vor. Hinterlegt sind Stoffwerte und weitere relevante Informationen, auch zu chemischen Reaktionen und radioaktivem Zerfall, für über 1500 Materialien. Es wird zwischen reinen Materialien und Gemischen unterschieden. Für die reinen Materialien sind sämtliche Daten wie Dichte, Wärmeleitfähigkeit, Wärmekapazität, etc. gespeichert. Die Eigenschaften für Gemische werden aus diesen Daten abgeleitet, wobei von idealen Mischungen ausgegangen wird und die Mischungsenthalpie nicht berücksichtigt wird. Durch Linearkombination der Eigenschaften von Reinmaterialien werden Durchschnittsdaten für die Gemische ermittelt. Verunreinigungen durch Gase in porösen Medien können als Eingabeparameter übergeben werden. Für die Wärmeleitfähigkeit von Oxiden mit hohem Abbrand wird ein dimensionsloser Faktor eingeführt, mit dem die Wärmeleitfähigkeit des reinen Oxids entsprechend modifiziert wird.

Geometrie und Diskretisierung in ICARE

Zur Beschreibung der Geometrie wird im ICARE-Modul von ASTEC-Na ein zweidimensionales Gitter verwendet, das eine Diskretisierung der einzelnen Komponenten in radialer und axialer Richtung erlaubt. Zusammengesetzte Komponenten wie Brennstäbe und Hüllrohre werden als sog. „Makros“ angelegt und können mittels geometrisch definierter Körper (z.B. Zylinder) beschrieben werden. So kann beispielsweise der Brennstoff als axial unterteilter Zylinder mit Innen- und Außenradius definiert werden. Relevante Parameter können den einzelnen Zonen der Komponenten zugeordnet werden, wodurch die Berücksichtigung von Axialverteilungen möglich ist. Zusätzlich erlaubt ASTEC-Na eine radiale Unterteilung in Feinmaschen. Dies ist vor allem beim Brennstoff wichtig, der ein steiles Temperaturgefälle von Innen nach Außen aufweist. Makros mit gleicher Symmetrieachse können zu „Super-Makros“ zusammengefasst werden, wodurch für die Simulation automatisch eine „physikalische“ Verbindung hergestellt wird. Ein Brennstab besteht damit aus Brennstoff und Hüllrohr, die in physikalischem Austausch miteinander stehen. Analog kann eine Gruppe aus Makros

zur Beschreibung eines Brennelements zusammengefasst werden. Für große Systeme besteht die Möglichkeit, Super-Makros mit einem Gewicht zu belegen (weighting factor), um so nicht jedes Element einzeln eingeben zu müssen. Damit werden Brennstäbe bzw. -elemente an vergleichbaren Positionen durch ein repräsentatives Super-Makro beschrieben. ASTEC-Na arbeitet mit einem variablen Gitter, das die axiale und radiale Ausdehnung der Komponenten erfasst. Mechanische Deformation wird in ASTEC-Na aufgrund der Geometriemodellierung quasi „1.5-dimensional“ behandelt. Die Strukturen werden als achsensymmetrische Körper behandelt mit einer axialen und einer radialen Koordinate. Im Gegensatz zu Zylinderkoordinaten gibt es aber keine Winkelauflösung.

2.2.2.2 Spaltgasproduktion in ASTEC-Na

Durch die nuklearen Reaktionen wird im Betrieb permanent neues Spaltgas produziert. Zunächst sammelt es sich in mikroskopischen Poren, die jedoch wachsen und durch das Material wandern können. Damit wird ein großer Teil des entstandenen Gases zum Gasplenum transportiert. Durch Zusammenschluss von Poren können große Hohlräume und Risse entstehen, die bis hin zur Fragmentierung des Brennstoffs führen können. Im Allgemeinen wird zwischen intragranularen, intergranularen und geschlossenen Porositäten unterschieden. Gelangt das Spaltgas in Kontakt mit dem Hüllrohr sind chemische Reaktionen nicht auszuschließen. Ist das Spaltgas innerhalb des Brennstoffs in einer geschlossenen Zone (Cavity) angesammelt, kann es beim Schmelzen zur schlagartigen Freisetzung kommen, bei der das Hüllrohr eine sehr hohe mechanische Belastung erfährt. Bei der Modellierung unterscheidet ASTEC-Na zwischen intragranularen Blasen, die sich innerhalb eines Kristallstücks befinden und intergranularen Blasen, die an Korngrenzen lokalisiert sind. Die Porositäten zählen nicht zu diesen Blasen, sondern werden extra behandelt. Die Korngrenzen werden in ASTEC-Na als sphärisch und die Blasen als identisch angenommen (je ein Radius für inter- und intragranulare Blasen). Die intragranularen Blasen können durch Zusammenschluss oder Anwachsen in intergranulare Blasen übergehen, nicht jedoch zum Anteil der Poren. Intergranulare Blasen dagegen können sich im Modell nicht zusammenschließen, dafür aber Anschwellen und ihren Gasanteil an die Poren abgeben. Die Blasen stehen unter Überdruck, dem der hydrostatische Druck im Brennstoff entgegensteht. Für die Poren selbst werden vier Zustände definiert:

- offen ohne Anwachsen
- geschlossen ohne Anwachsen
- geschlossen mit Anwachsen aufgrund von Druckgradienten
- geschlossen mit Anwachsen aufgrund von Platzen

Ein Strömen von Gas ist durch die offenen Poren möglich und wird entweder mit einem 1-D Standardmodell behandelt (nur für Spaltgas anwendbar) oder mit einem 2D Modell, bei dem die Strömung über Druckgradienten bestimmt wird und, das auch für andere Gase wie Argon oder Helium verwendet wird.

2.2.2.3 Thermisches Brennstabverhalten in ASTEC-Na

Die thermische Kopplung von Brennstoff und Hüllrohr wird überwiegend von den Eigenschaften des Gaps bestimmt. Neben der Gapweite spielen die Gaszusammensetzung und die Oberflächentemperaturen eine Rolle. Das Schmelzen des Brennstoffs steht in Zusammenhang mit der Stöchiometrie, dem Abbrand und auch dem Plutoniumgehalt. Um den Wärmetransport innerhalb des Brennstabs korrekt erfassen zu können, ist eine radiale Unterteilung unbedingt notwendig. So kann ASTEC-Na für jede radiale Masche eine mittlere Temperatur bestimmen. Die Temperatur ergibt sich aus nuklearer Aufheizung, Erwärmung durch chemische Reaktionen, konduktiven und konvektiven Wärmeaustausch. Für den Wärmeaustausch im Gap werden spezielle Modelle verwendet (siehe unten). Neben dem Brennstoff ist es oft auch sinnvoll das Hüllrohr radial zu unterteilen, um so den Wärmeaustausch mit dem Fluid bzw. dem Brennstoff besser beschreiben zu können.

Wärmeaustausch mit freien Volumina

Für freie Volumina, also axiale Gasplena, das zentrale Loch oder das Gap, berechnet ASTEC-Na die Temperaturen nicht direkt. Es wird lediglich aus den umgebenden Strukturen ein Temperaturmittelwert bestimmt, der benötigt wird um andere Größen wie den Druck in den leeren Volumina abzuleiten. Damit ergibt sich die Temperatur im Gap aus der Hüllrohrtemperatur und der Brennstofftemperatur in der äußeren Zone. Für das zentrale Loch wird die Brennstofftemperatur der inneren Zone angenommen. Eine Ausnahme ergibt sich für schnelle Transienten, bei denen Gas schlagartig in die Plena strömt und kein thermisches Gleichgewicht mit den Wänden erreicht werden kann. In diesem Fall wird für das Plenum die Gap-Temperatur angenommen.

Wärmeaustausch im Gap

Der Wärmeaustausch im Gap wird mittels eines Wärmeaustauschkoeffizienten h_{gap} beschrieben, der sich aus der Summe der Einzelbeiträge durch Konduktion h_{cond} , Konvektion h_{conv} , Strahlung h_{rad} und direkten Kontakt $h_{contact}$ ergibt:

$$h_{gap} = h_{cond} + h_{conv} + h_{rad} + h_{contact} \quad (2.65)$$

Die lineare Leistung P ergibt sich damit aus dem inneren Hüllrohrradius r_{cl} und der entsprechenden Hüllrohrtemperatur T_{cl} sowie aus dem äußeren Brennstoffradius r_f und der dort vorliegenden Temperatur T_f :

$$P = 2\pi \frac{r_f + r_{cl}}{2} h_{gap} (T_f - T_{cl}) \quad [W/cm] \quad (2.66)$$

Aufgrund der hohen kinematischen Viskosität kann der Term für Konvektion vernachlässigt werden. Bei Kontakt von Brennstoff und Hüllrohr ist das Gap nicht automatisch gleich Null. Durch Oberflächenrauigkeit verbleibt ein gewisser Anteil an Gas zwischen den Festkörpern. Diese Tatsache wird im Term für Konduktion berücksichtigt. Mit zunehmender Temperatur (sinkende Härte der Materialien) oder mit steigendem Kontaktdruck kann die Rauigkeit verschwinden und es kommt zu einem idealen Kontakt. Im Fall von vollständigem Kontakt (z.B. bei einem Störfall mit sehr hohem Reaktivitätseintrag) wird der Wärmeübergangskoeffizient $h_{contact}$ extrem hoch gesetzt ($h_{contact} \cong \infty$), um diese Situation in der Simulation erfassen zu können.

2.2.2.4 Thermomechanisches Brennstabverhalten in ASTEC-Na

Allgemein werden die thermo-mechanischen Veränderungen in ASTEC-Na als axial symmetrisch angenommen, womit radiale und axiale Verschiebungen (u - bzw. w -Richtung) einzelner Maschen berücksichtigt werden können. Unter Verwendung von Zylinderkoordinaten und der Annahme, dass es sich beim Brennstab um „ausreichend lange“ Strukturen handelt, für die gilt, dass das Verhältnis von Höhe zu Radius größer zwei ist, ergeben sich für eine Masche folgende Näherungen:

$$\frac{\partial u}{\partial z} \approx 0 \quad \text{und} \quad \frac{\partial w}{\partial r} = 0 \quad (2.67)$$

Damit wird angenommen, dass die radiale Ausdehnung pro Masche nahezu konstant über die Länge der Masche ist und dass die axiale Ausdehnung pro definierter Masche gleich über den Radius der Masche ist (1.5-dimensionale Modellierung). Damit verschwinden alle nicht-Diagonalelemente aus dem Spannungstensor σ_{Sp} , der damit als einfacher Vektor geschrieben werden kann und das Elastizitätsmodul vereinfacht sich zu einer 3x3-Matrix. Es werden in der thermo-mechanischen Behandlung der Strukturen in ASTEC-Na keine Scherungen, sondern nur Verlagerungen oder Spannungen in radialer, tangentialer und axialer Richtung berücksichtigt. Die Dehnung bzw. Verformung kann also über den Vektor ε beschrieben werden:

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \partial u / \partial r \\ u / r \\ \partial w / \partial z \end{pmatrix} \quad (2.68)$$

Als radiale Gleichgewichtsbedingung ergibt sich:

$$\frac{\partial \sigma_r}{\partial r} + \frac{\sigma_r - \sigma_\theta}{r} = 0 \quad (2.69)$$

mit $\sigma_r = -P$ als Randbedingung (P : Druck des jeweilig umgebenden Fluids). Bei geschlossenem Gap werden Brennstoff und Hüllrohr als ein Kontinuum betrachtet, da Scherspannungen nicht berücksichtigt werden. In axialer Richtungen werden die Randbedingungen so gesetzt, dass sich der Brennstab nach unten nicht bewegen kann (festes Ende) und nach oben freie Oberflächen hat, auf die der Innendruck und der Druck des umgebenden Mediums wirken. Für axiale Zwischenmaschen wird der komplette restliche Brennstab über der aktuellen Masche berücksichtigt.

$$\begin{aligned} \int_{R_{fi}}^{R_{fo}} \sigma_z 2\pi r dr &= -\pi(R_{fo}^2 - R_{fi}^2)P_i \\ \int_{R_{ci}}^{R_{co}} \sigma_z 2\pi r dr &= -\pi R_{ci}^2 P_i - \pi R_{co}^2 P_f \end{aligned} \quad (2.70)$$

(P_i : innerer Druck, P_f : Druck des Fluids, R_{fi} : innerer Radius Brennstoff, R_{ci} : innerer Radius Hüllrohr, R_{fo} : äußerer Radius Brennstoff, R_{co} : äußerer Radius Hüllrohr).

Falls in einer höher liegenden Masche direkter Kontakt von Hüllrohr und Brennstoff vorliegt, so ist auch in allen darunter liegenden Masche keine Relativbewegung möglich, auch falls dort kein Kontakt besteht. Dies kann formal ausgedrückt werden als:

$$\varepsilon_{f,z} - \varepsilon_{c,z} = \delta \varepsilon_0 \quad (2.71)$$

Deformation des Brennstoffs

Die Verformung des Brennstoffs resultiert nicht allein aus thermischer Ausdehnung. Weitere Ursachen für Deformationen sind Anschwellen induziert durch Spaltgase, Verformung durch Rissbildung sowie elastische, plastische und viskoplastische Verformung durch Spannungen. Zusätzlich können axiale Wölbungen durch negative Terme nach Innen beschrieben werden. Unter der Annahme, dass die thermische Ausdehnung und das Anschwellen durch Spaltgase ein isotroper Vorgang ist, lässt sich der Dehnungstensor schreiben als Summe der Einzelbeiträge (in Zylinderkoordinaten r, θ, z):

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_r \\ \varepsilon_\theta \\ \varepsilon_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{el,r} \\ \varepsilon_{el,\theta} \\ \varepsilon_{el,z} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon_{pl,r} \\ \varepsilon_{pl,\theta} \\ \varepsilon_{pl,z} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon_{vp,r} \\ \varepsilon_{vp,\theta} \\ \varepsilon_{vp,z} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon_{cr,r} \\ \varepsilon_{cr,\theta} \\ \varepsilon_{cr,z} \end{pmatrix} + \varepsilon_{th} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \varepsilon_{sw} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \varepsilon_{di} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

($\varepsilon_{el,i}$: elastische Verformung, $\varepsilon_{pl,i}$: plastische Verformung, $\varepsilon_{vp,i}$: viskoplastische Verformung, $\varepsilon_{cr,i}$: Rissbildung, ε_{th} : thermische Ausdehnung, ε_{sw} : Anschwellen, ε_{di} : Verformung durch Wölbung/Einkerbung in axialer Richtung)

Die elastische Deformation folgt dem Hookschen Gesetz. Die thermische Ausdehnung ergibt sich über eine Funktion, die das Brennstoffvolumen in Abhängigkeit der Temperatur und der Stöchiometrie beschreibt. Die Verformung durch Spaltgase resultiert aus der Verdrängung von Brennstoffmaterial und führt zu einer volumetrischen Ausdehnung des Brennstoffs. Die Blasengröße der Spaltgaseinschlüsse hängt vom hydrostatischen Druck P_h im Brennstoff ab, der beschrieben wird als:

$$P_h = \frac{1}{3} |tr(\sigma)| \quad (2.72)$$

(σ : Spannungstensor).

Die Bildung von Rissen führt zu einer Entspannung des Materials, da in ASTEC-Na über Risse hinweg keine Spannungen übertragen werden. Berücksichtigt werden nur Risse, die radial nach außen oder axial (parallel zur z-Achse) verlaufen. Für frischen Brennstoff wird angenommen, dass keine Risse vorhanden sind (und auch nicht gebildet werden), während bei vorbestrahltem Brennstoff von einer anfänglichen Rissverteilung ausgegangen wird. Die Risse können jedoch in geschlossener Form oder als offene Poren vorliegen. Das Öffnen der Risse während der Transienten führt zu einer volumetrischen Brennstoffexpansion. Details zur formalen Beschreibung der Rissbildung finden sich in [16]. Das Bilden einer Wölbung in axialer Richtung resultiert in einem Effekt auf die axiale Gesamtausdehnung des Brennstoffs, da die dabei entstehenden Void-Regionen bei Einsetzen von plastischem Verformen besetzt werden können. Dieses Phänomen kann aber nur dann sinnvoll berücksichtigt werden, wenn das Modell zur Rissbildung in der Rechnung aktiviert ist. Auch dazu sei an dieser Stelle auf [16] verwiesen. Die rein mechanische Deformation lässt sich in einen elastischen ε_{el} und einen plastischen Anteil ε_{pl} aufteilen, wobei die plastischen Spannungen standardmäßig über die Prandtl-Reuss-Gesetze [15] beschrieben werden:

$$\begin{aligned} \bar{\sigma} &= \sigma_{ys}(\lambda) \\ d\varepsilon_{pl} &= d\lambda \times \frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial \sigma} \end{aligned} \quad (2.73)$$

mit der Mises-Vergleichsspannung $\bar{\sigma}$:

$$\bar{\sigma} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[(\sigma_\theta - \sigma_r)^2 + (\sigma_z - \sigma_\theta)^2 + (\sigma_r - \sigma_z)^2 \right]^{1/2} \quad (2.74)$$

Die plastische Deformation ist nach diesem Ansatz mit keiner Volumenänderung verknüpft. Der Faktor (λ) beschreibt den kumulierten plastischen Verzug:

$$d\lambda = \sqrt{\frac{2}{3}} d\varepsilon_{pl} : d\varepsilon_{pl} \quad (2.75)$$

Die Fließspannung σ_{ys} wird über eine Korrelation in Abhängigkeit der Temperatur (und eventuell der plastischen Spannung) vorgegeben und nimmt über einem definierten Grenzwert den Wert null an.

Für sehr hohe Temperaturen wird das Kriechen des Brennstoffes durch folgende temperaturabhängige Gesetzmäßigkeit beschrieben:

$$\dot{\varepsilon}_{vp} = \frac{3}{2} C \cdot \exp\left(-\frac{Q_A}{RT}\right) \bar{\sigma}^n \frac{s}{\bar{\sigma}} \quad (2.76)$$

(n : Konstante, C : Funktion in Abhängigkeit vom Volumen der Poren, Q_A : Aktivierungsenergie, R : Gaskonstante, s : modifizierter Anteil des Spannungstensors).

Mechanisches Verhalten des Hüllrohrs

Die mechanische Belastung des Hüllrohrs ist hauptsächlich auf Druck durch Spaltgasaufbau oder Brennstoffschmelzen und auf die Brennstoffausdehnung mit direktem Kontakt zurückzuführen. Bei Kontakt zwischen Hüllrohr und Brennstoff besteht auch die Möglichkeit chemischer Reaktionen und dass sich eine oxidische Zwischenschicht bildet, deren Wärmeleitfähigkeit berücksichtigt werden muss. Die spröde Oxidschicht bricht auf, wenn Kompressionsspannungen in tangentialer oder axialer Richtung auftreten. Wird die Bruchfestigkeit des Hüllrohrs überschritten, bilden sich axiale Risse. Zusätzlich wird das Hüllrohrmaterial durch die Langzeitbestrahlung strapaziert, die zur Bildung von mikroskopischen Leerräumen (Voids) führt und die Materialeigenschaften verändert. Auch die Art der Transiente hat Einfluss auf das Hüllrohrverhalten. Bei schnellen Transienten kann das Hüllrohr dem rapiden Temperaturanstieg im Brennstoff nicht folgen und dehnt sich nicht entsprechend aus, weshalb es durch Überdruck zum Aufbrechen des Hüllrohrs kommen kann. Zur Festlegung der Grenze, ab der Hüllrohrversagen eintritt, werden in ASTEC-Na drei unterschiedliche Ansätze verfolgt: das „CLARIS“-Modell basiert auf mechanischen Gesetzen zur Bruchfestigkeit, das „DED“-Modell arbeitet mit einer kritischen Deformations-Energie-Dichte und das dritte Modell verwendet eine kumulative plastische Deformation als Grenzwert. Analog der Beschreibung der Deformation des Brennstoffs, beruht auch die Simulation der Hüllrohrverformung auf verschiedenen Beiträgen, die sich aus thermischer, elastischer, plastischer und viskoplastischer Verformung ergeben:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_r \\ \varepsilon_\theta \\ \varepsilon_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{el,r} \\ \varepsilon_{el,\theta} \\ \varepsilon_{el,z} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon_{pl,r} \\ \varepsilon_{pl,\theta} \\ \varepsilon_{pl,z} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon_{vp,r} \\ \varepsilon_{vp,\theta} \\ \varepsilon_{vp,z} \end{pmatrix} + \varepsilon_{th} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Die thermische Expansion wird über eine temperaturabhängige Funktion zur Bestimmung des Volumens ermittelt und die elastische Deformation wird über das Hooksche Gesetz beschrieben, das besagt, dass die Verformung proportional zur einwirkenden Belastung ist. Der nicht-elastische Anteil der mechanischen Verformung wird in zwei Anteile untergliedert. Dabei wird die plastische Verformung nach den Gesetzen von Prandtl und Reuss [15] behandelt, und die viskoplastische Verformung optional über ein Modell nach Norton [16] [98] oder über Formulierungen nach Lemaitre [16] [54] beschrieben. Wenn die Hüllrohrtemperatur während der Transienten nicht so stark ansteigt, dass Kriechen auftritt, kann der viskoplastische Term vernachlässigt werden und von ideal plastischem Verhalten des Hüllrohrs ausgegangen werden. Bei Transienten mit hohen Hüllrohrtemperaturen muss viskoplastische Verformung berücksichtigt werden. Verwendet man das Modell nach Lemaitre, so wird die plastische Deformation mit im viskoplastischen Anteil berücksichtigt und die mechanische Deformation lässt sich schreiben als:

$$\varepsilon_{mec} = \varepsilon_{el} + \varepsilon_{vp} \quad (2.77)$$

Für die Fließrate gilt dabei:

$$\dot{\varepsilon}_{vp} = \frac{\dot{\bar{\varepsilon}}_{vp}}{\bar{\sigma}} M \cdot \sigma \quad \text{mit} \quad \dot{\bar{\varepsilon}}_{vp} = \left(\frac{\bar{\sigma}}{K \bar{\varepsilon}_{vp}^n} \right)^{1/m} \quad (2.78)$$

Verwendet man anstelle des Lemaitre Formalismus den Ansatz nach Norton, so setzt sich der Anteil der mechanischen Verformung aus drei Anteilen zusammen: einem elastischen, einem plastischen und einem viskoplastischen Term, wodurch auch schnelle Verformungen berücksichtigt werden können, die für bestimmte Transienten mit schlagartiger Krafteinwirkung auf das Hüllrohr von großer Bedeutung sind.

$$\varepsilon_{mec} = \varepsilon_{el} + \varepsilon_{pl} + \varepsilon_{vp} \quad (2.79)$$

Der plastische Anteil wird nach dem Prandtl-Reuss-Modell berechnet. Der viskoplastische Anteil basiert auf einem Potenzgesetz für die Fließgeschwindigkeit nach Norton analog zum viskoplastischen Modell im Brennstoff:

$$\dot{\varepsilon}_{vp} = \frac{3}{2} C \cdot \exp\left(-\frac{Q_A}{RT}\right) \bar{\sigma}^n \frac{s}{\bar{\sigma}} \quad (2.80)$$

Eine alternative Formulierung für die Verformungsgeschwindigkeit erhält man, wenn experimentelle Bersttests als Grundlage verwendet:

$$\dot{\varepsilon}_{vp} = \sqrt{3} C \cdot \exp\left(-\frac{Q_A}{RT}\right) \left(\frac{2}{\sqrt{3}} \bar{\sigma}\right)^n \frac{s}{\bar{\sigma}} \quad (2.81)$$

2.2.2.5 Materialverlagerung bei Schmelzen in ASTEC-Na

Der flüssige Anteil τ eines Materials mit der Temperatur T wird in ASTEC-Na über die Schmelztemperatur T_{liq} und die Solidustemperatur T_{sol} ermittelt:

$$\tau = \frac{T - T_{sol}}{T_{liq} - T_{sol}} \quad (2.82)$$

Durch die Beziehung 2.82 ergibt sich bei Erreichen der Schmelztemperatur T_{liq} ein Flüssiganteil von eins und bei für $T = T_{sol}$ ein flüssiger Anteil von null. Besteht eine Komponente aus einer Materialmischung, ergibt sich der flüssige Anteil τ^m aus den Massenanteilen x_i und den Flüssiganteilen τ_i der einzelnen Konstituenten N :

$$\tau^m = \sum_{i=1}^N x_i \tau_i \quad (2.83)$$

Ein spezielles Modell zur Brennstoffverlagerung innerhalb des Brennstabs (FOAM, [52]) wurde in der ASTEC-Na Version implementiert. Die Bewegung des Brennstoffs hat großen Einfluss auf den Druck im Inneren des Brennstabs, der wiederum eine ausschlaggebende Größe für die weiteren mechanischen Modelle darstellt. Im FOAM-Modell werden das innere Loch, der Brennstoff mit gebundenen Gasen und das Gap als eine Komponente behandelt (axiale Diskretisierung analog zur normalen Geometriebeschreibung). Zunächst besteht die FOAM-Komponente rein aus dem schon freigesetzten Spaltgas. Die anderen Anteile werden bei der Initialisierung zu Null gesetzt. Erst durch Schmelzen während der Transienten werden diese Anteile besetzt und das Brennstoffmaterial wird allmählich an die FOAM-Komponente übergeben. Ein axialer Austausch zwischen FOAM-Komponenten ist ebenso möglich wie direkter Wärmeübertrag zwischen der FOAM-Komponente und benachbartem festem Brennmaterial. Es gelten dabei stets die Gleichungen für Massenerhaltung, Energieerhaltung und Impulserhaltung. Da geschmolzener Brennstoff sowie Gasanteile in der FOAM-Komponente zusammengefasst sind, werden sie über eine Temperatur, einen Druck und eine Geschwindigkeit beschrieben. Damit weist das Modell noch Schwächen auf, wenn es darum geht, den Prozess der Erstarrung von geschmolzenem Brennstoff zu simulieren, da in diesem Fall auch die Geschwindigkeit des Gasanteils zu Null wird.

2.2.2.6 Chemische Reaktionen in ASTEC-Na

Wie bereits in den vorherigen Punkten erwähnt, spielen auch chemische Reaktionen eine Rolle, da wichtige Materialeigenschaften wie die Wärmeleitfähigkeit beeinflusst werden. Zum einen kann es zur Oxidbildung durch Hüllrohr-Brennstoff-Kontakt kommen (meist für hohen Abbrand), der mit einer Verschlechterung der Wärmeleitung einher geht und damit zu lokalem Temperaturanstieg führt. Dieser Effekt tritt hauptsächlich an den heißesten Stellen mit der größten Deformation auf, also im oberen Bereich und in der Mitte des Brennstabs. Zum anderen kann auch Spaltgas chemisch mit dem Hüllrohr in Verbindung treten, wobei durch Änderung der mechanischen Eigenschaften Schwachstellen am Hüllrohr entstehen können. Auch dieses Phänomen lässt sich überwiegend bei stark abgebrannten Brennelementen beobachten. Der Einfluss der chemischen Reaktionen auf die Wärmeleitung im Gap wird derzeit in ASTEC-Na nicht berücksichtigt. Geplant ist, durch Einführung eines zusätzlichen Beitrags h_{jog} im Wärmeaustauschkoeffizienten h_{gap} , derartige Effekte einzubinden.

3 Validierung von ASTEC-Na anhand der CABRI-Experimente

In Kapitel 2 wurden die Grundlagen zur Neutronik und grundlegende thermohydraulische bzw. thermomechanische Effekte und deren Behandlung in ASTEC-Na betrachtet. Damit sind die einzelnen Komponenten, die bei der Entwicklung des gekoppelten Codesystems Verwendung finden, eingeführt. Bevor in Kapitel 4 Details zu den erstellten Kopplungsroutinen und zur generierten Querschnittsdatenbasis beschrieben werden, soll im Folgenden gezeigt werden, dass die Verwendung des Codes ASTEC-Na zur Beschreibung Natrium gekühlter Systeme geeignet ist. Dazu werden mit ASTEC-Na zwei CABRI-Experimente simuliert. Es wird demonstriert, dass die wesentlichen Parameter wie Natriumtemperatur und Verformungen einzelner Komponenten, die zur Simulation der frühen Unfallphase in einem ULOF und einem UTOP gebraucht werden, mittels ASTEC-Na beschrieben werden können.

3.1 CABRI Experimente

Die CABRI-Experimente zum Brennstabverhalten in Natrium gekühlten schnellen Reaktoren wurden in den 70er und 80er Jahren am CABRI Forschungsreaktor durchgeführt [50]. Der Reaktor befindet sich seit 1962 am nuklearen Forschungszentrum in Cadarache (Südfrankreich) und wird von der CEA betrieben. Es handelt sich um einen Schwimmbad-Reaktor. Der Aufbau des Kerns ist in Abbildung 3.1 schematisch dargestellt. Die eigentliche Teststrecke befindet sich zentral in einem Wasser gekühlten, 80cm hohen „Driver Core“, der 1488 Urandioxid-Brennstäbe enthält. Geregelt wird der Reaktor über sechs Hafnium-Kontrollstäbe. Die Teststrecke ist mit einem Natriumloop verbunden und für Experimente mit einem Test-Brennstab (bis zu drei) ausgelegt. Ziel des CABRI Projekts war die Untersuchung des Brennstabverhaltens während schneller Transienten, bis hin zum Brennstabversagen. Gegen 2003 ist der Reaktor für LWR-Tests umgerüstet worden und der Natriumloop durch einen Wasserloop ersetzt worden.

Um schnelle Transienten fahren zu können, befinden sich im Kern Stäbe, die mit Helium-3, einem starken Neutronenabsorber, gefüllt sind (ca. 12bar). Durch Öffnen der Ventile an den Heliumstäben entweicht der Absorber schlagartig. So kann innerhalb weniger Millisekunden ein enormer Leistungsanstieg erreicht werden, wie in Abbildung 3.2 schematisch dargestellt ist. Hauptsächlich durch den Dopplereffekt wird der Leistungsanstieg sofort wieder kompensiert. So ist es möglich, äußerst scharfe Leistungspeaks zu erhalten. Neben Versuchen zum Verhalten des Testbrennstabs unter massiver Leistungsexkursion wurden auch Versuche zu Kühlmittelverlust-Störfällen durchgeführt. Die Testbrennstäbe wurden größtenteils französischen, schnellen Reaktoren (PFR, PHENIX, SUPERPHENIX) entnommen und waren damit einer Vorbestrahlung ausgesetzt. Aber auch Experimente mit frischen Brennstäben wurden durchgeführt. Die

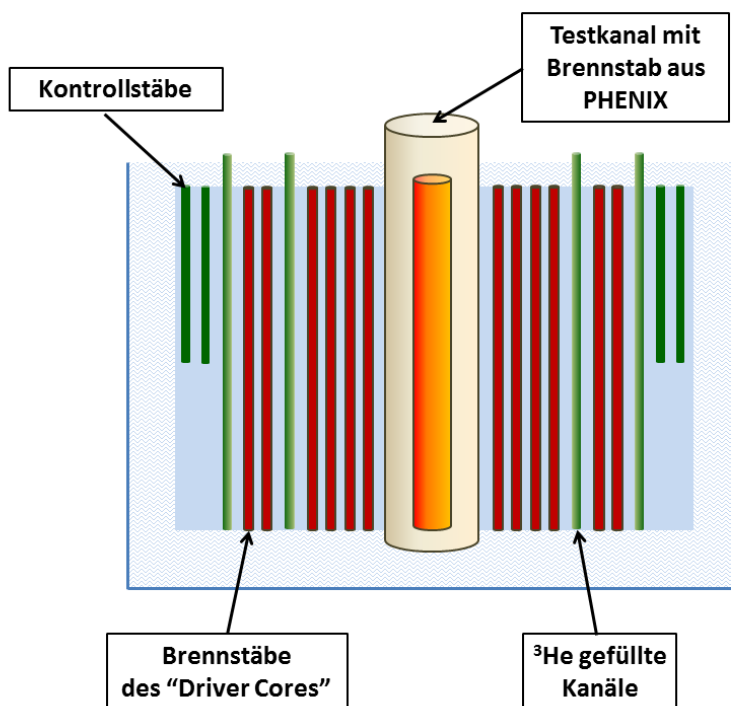


Abb. 3.1: Übersichtsschema des CABRI Reaktors. Die eigentliche Teststrecke befindet sich in einem Wasser moderierten „Driver-Core“.

hier gezeigten Validierungsexperimente LT2 [2] und AGS0 [17] sind TOP-Versuche (Reaktivitätseintrag, Transient Over Power). Da die Versuchsergebnisse strengen Restriktionen unterliegen, können nur schon veröffentlichte Ergebnisse gezeigt werden [77]. Neben LT2 und AGS0 wurden im Rahmen des JASMIN Projekts Validierungsrechnungen an weiteren Brennstäben gemacht [29] [77]. Neben dem direkten Vergleich der ASTEC-Na-Simulationen mit den Messdaten, werden die Resultate von Simulationen mit SAS-SFR gezeigt, die am KIT durchgeführt wurden.

3.2 Modellierung der CABRI Teststrecke in ASTEC-Na

Abbildung 3.3 zeigt am Beispiel des LT2 Versuchs die Nodalisierung der Teststrecke in ASTEC-Na. Axial ist der Brennstab in 28 Maschen unterteilt (rot dargestellt). Der Brennstoff ist zusätzlich radial in 20 Maschen unterteilt und weist eine axiale Verteilung des zentralen Hohlrums im Pellet sowie der Gapweite auf, die aus Vorrechnungen mit GERMINAL bestimmt wurde. Das Hüllrohr (in Abb.3.3 dunkelgrün) ist radial in 5 Zonen diskretisiert, während die axiale Aufteilung der des Brennstoffs entspricht. Der Natrium-Kühlkanal wird vom Hüllrohr und einer Röhre aus Niob (dunkelblau), die zum Testkanal gehört, umschlossen. Das Gap zwischen innerer Niobröhre und dem äußeren Teil der Teststrecke ist mit Xenon befüllt. Der Außenkanal der Teststrecke setzt sich aus einer weiteren Niobschicht, umgeben von jeweils einer sehr dünnen Schicht aus Molybdän und Niob im Inneren und einer Lage Zirkonoxid im äußeren Bereich, zusammen, und wird als Ganzes von einem Zirkaloy-Hüllrohr (grün) umschlossen. Der

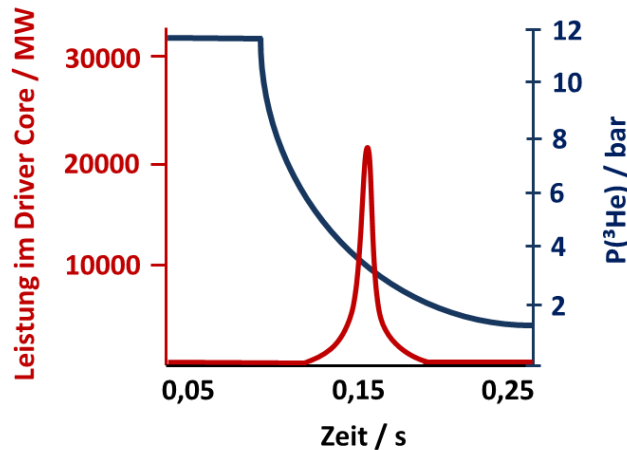


Abb. 3.2: *Triggerung der TOP Experimente durch Öffnen der Ventile an den Helium-Stäben, wodurch der Absorber ausgestoßen wird und der Druck in den Stäben schlagartig absinkt. Infolge dessen kommt es zu einem scharfen Leistungspeak.*

äußere Testkanal unterscheidet sich in den Experimenten nicht. Es wurde daher für die Simulationen zu den verschiedenen Experimenten lediglich die Geometrie des Testbrennstabs angepasst. Die aktive Zone des Kerns, die das Spaltmaterial enthält wurde für die Simulationen auf die Höhe null gesetzt. Unter dem aktiven Kern (und für einige Experimente auch über dem Kern) befindet sich der Brutmantel. An der Diskretisierung des Brennstoffs und der axialen Verteilung des zentralen Kanals im Brennstoff ist erkennbar, dass ASTEC-Na mit einem variablen Gitter arbeitet.

3.3 CABRI - LT2 Versuch

3.3.1 Beschreibung des Experiments

Für den LT2 Versuch wurde ein Brennstab mit einem Abbrand von 12,4at% aus dem Phenix-Reaktor verwendet. Der Brennstab hatte eine Länge von ca. 85cm. Bei den Brennstoffpellets handelte es sich um sog. „Hole pellets“ mit einem zentralen Loch. Für die Transiente wurden mittels Driver Core in kurzem zeitlichen Abstand zwei Leistungspeaks erzeugt. Abbildung 3.4 zeigt den zeitlichen Verlauf der Leistung. Im ersten Peak wurde die Leistung auf ca. das 10-fache der Anfangsleistung gesteigert, während der zweite Peak sein Maximum beim 25-fachen der Ausgangsleistung hat. In Tabelle 3.1 sind die Testbedingungen zusammengefasst. Die Kühlmitteltemperatur am Eintritt betrug 673K und die ursprüngliche Leistung lag bei 32,2kW. Nach 720ms erfolgte eine Schnellabschaltung. Der Brennstab war nach Versuchsende intakt. Die Vorbestrahlungsdaten, die Informationen zur Brennstabgeometrie, Plutoniumgehalt und Spaltgasverteilung in radialer und axialer Richtung vorgeben, wurden für die ASTEC-Na Rechnungen von IRSN mit GERMINAL bereit gestellt. SAS-SFR dagegen beinhaltet Routinen, mittels derer keine Code-externen Vorrechnungen nötig sind. Damit ergeben sich schon vorab kleine Unterschiede in den Anfangsbedingungen vor Start der Transienten.

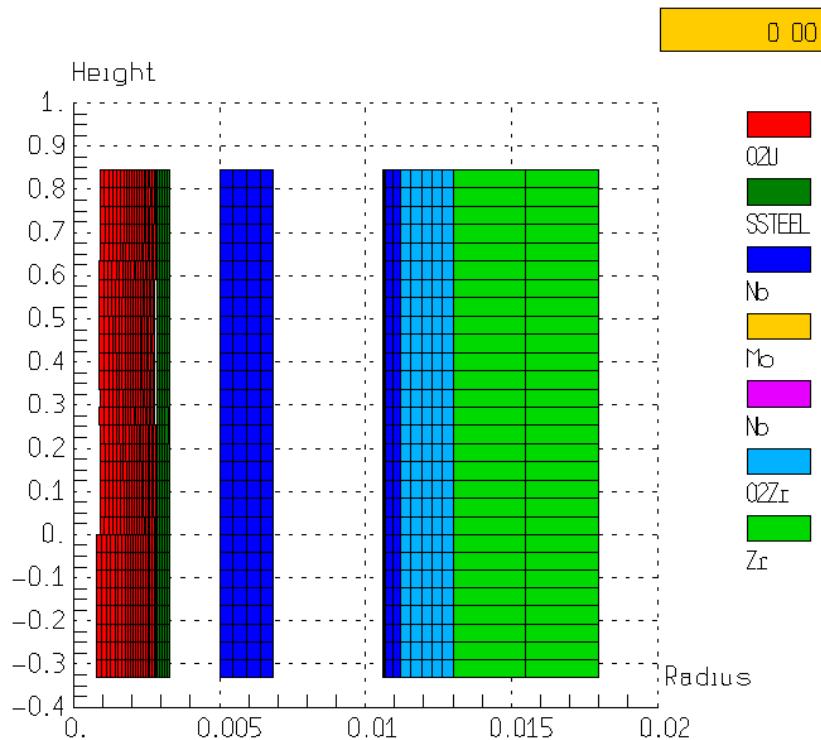


Abb. 3.3: Nodalisierung des CABRI Experiments in ASTEC-Na am Beispiel des LT2 Experiments. Die Modellierung des äußeren Testkanals in radialer Richtung ist in den CABRI-Simulationen mit ASTEC-Na identisch. Lediglich die Zusammensetzung und Geometrie des Brennstabs ändert sich.

Kühlmitteleintrittstemperatur	673K
Leistung im Kanal P_0	32,2kW
P_{max}/P_0	25,8kW
Dauer der Leistungsexkursion	560ms
Zeitpunkt der Schnellabschaltung	720ms

Tab. 3.1: Wichtige Eckdaten zum Versuch LT2 im CABRI Reaktor.

3.3.2 Ergebnisse

Zur Validierung der Ergebnisse werden die experimentellen Daten mit den aus der Simulation berechneten Daten verglichen. Zusätzlich sind Ergebnisse aus Rechnungen des KIT mit SAS-SFR dargestellt. Der Code wurde in Kapitel 3 beschrieben und gilt derzeit als gängiges Analysetool für Natrium gekühlte schnelle Reaktoren. Vor der Simulation der eigentlichen Testtransienten muss der Reaktor in den „Steady State“ gefahren werden, um die Testrechnung mit den aus dem Experiment bekannten Anfangsbedingungen starten zu können. Um die Ergebnisse der transienten Rechnung vergleichen zu können, ist es essentiell die Systemparameter nach dem Anfahrvorgang zu kennen, um so den Ursprung von Differenzen in der Transienten beurteilen zu können. Abbildung 3.5 zeigt das axiale Profil der Kühlmitteltemperatur vor Beginn der Transienten. Im

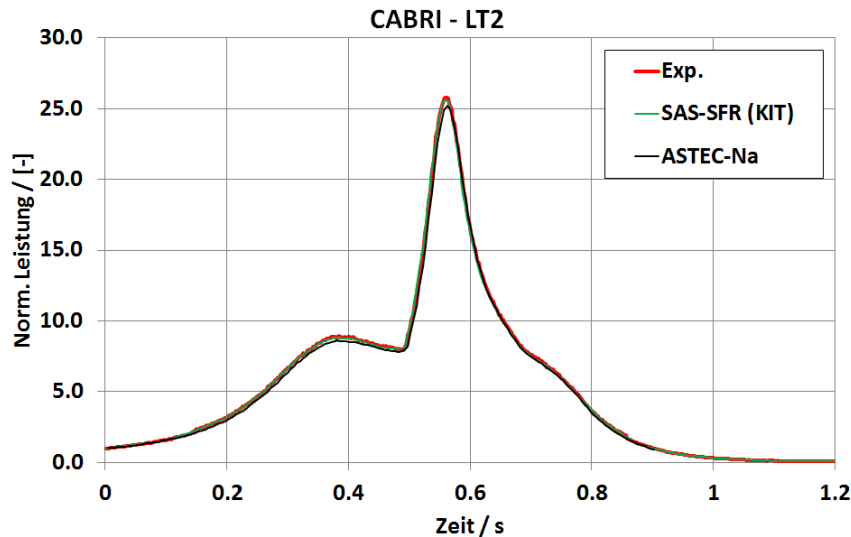


Abb. 3.4: Verlauf der Leistung im Driver Core während des LT2 Experiments. Es wurden zwei Leistungspeaks erzeugt, wobei die maximale Leistungsüberhöhung bei dem 25-fachen Wert der Ausgangsleistung lag.

Experiment wurden auf den verschiedenen Höhen jeweils mehrere Temperatursensoren angebracht. Das Ergebnis von ASTEC-Na liegt leicht über der berechneten Temperatur mit SAS-SFR. Der Kurvenverlauf, aber auch die Absolutwerte, können mit beiden Codes gut wiedergegeben werden.

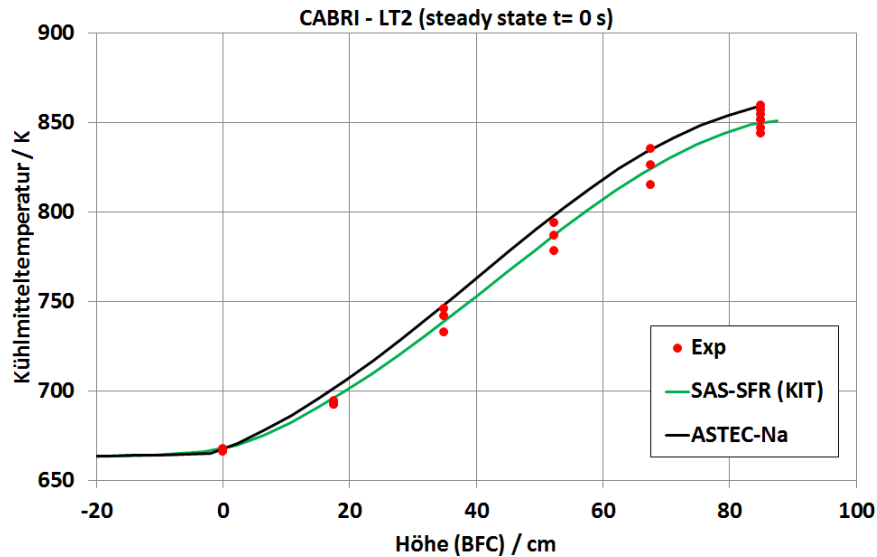


Abb. 3.5: Axiales Profil der Kühlmitteltemperatur im Test LT2 vor Beginn der Transienten.

Zur Temperatur an der Außenseite des Brennstoffs vor Beginn des Test, dargestellt in Abbildung 3.6, liegen keine experimentellen Daten vor. Der Vergleich mit SAS-SFR zeigt jedoch Unterschiede im axialen Profil. Während das Profil in SAS-SFR eher flach ist, ist in der ASTEC-Na Simulation ein Cosinus-förmiger Verlauf erkennbar mit einem Maximum, das ca. 200K über dem Wert von SAS-SFR liegt. Die Temperaturunterschie-

de sind auf Unterschiede in der Gapweite und eventl. durch leichte Differenzen in der Wärmeleitfähigkeit zu erklären, die mitunter von den Vorbestrahlungsdaten abhängt.

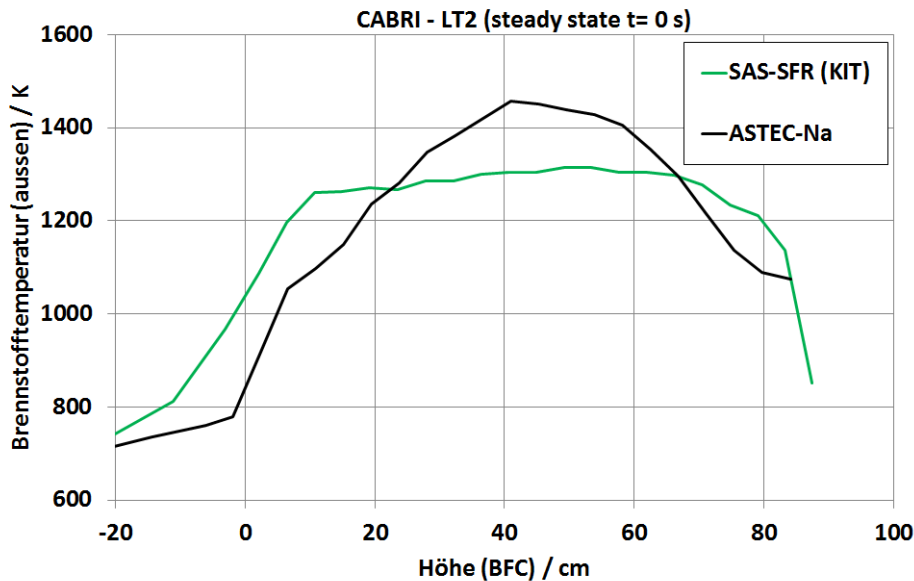


Abb. 3.6: Axiale Brennstofftemperatur im Versuch LT2 vor Beginn der Transienten. Die Kurve zeigt die Brennstofftemperatur an der Außenseite des Pellets.

Der Verlauf der Kühlmitteltemperatur am unteren Ende der Brennstoffzone (BFC, Bottom Fuel Column) ist in Abbildung 3.7 dargestellt. Während der Transienten erfährt die Kühlmitteltemperatur eine minimale Erhöhung. Dieser Trend wird von ASTEC-Na und SAS-SFR erfasst, wobei das Natrium in der ASTEC-Na Simulation eine um wenige Kelvin höhere liegende Temperatur errechnet. Hierbei muss beachtet werden, dass in beiden Simulationen auch Komponenten unterhalb der Brennstoffzone wie der Brutmantel in den Simulationen berücksichtigt wurden. Der zeitliche Verlauf der Natriumtemperaturen innerhalb der Brennstoffzone zeigt durchweg sehr gute Übereinstimmungen mit den experimentellen Daten. Exemplarisch ist dies für eine Höhe (85cm über BFC) in Abbildung 3.8 gezeigt. Durch Temperaturerhöhung und Druckaufbau erfährt der Brennstab während der Transienten eine axiale Ausdehnung. Abbildung 3.9 zeigt, dass sich der Brennstoff um 1.2cm ausdehnt. Dies ist wichtig, wenn im Späteren eine Neutronikkopplung erfolgt, da mit der axialen Ausdehnung eine wichtige Reaktivitätsrückwirkung verbunden ist und dieser Effekt unbedingt bei der Erzeugung der Querschnittsdatenbasis berücksichtigt werden muss. Die Ergebnisse zur axialen Ausdehnung helfen, die Spanne abzuschätzen, die in der Querschnittsdatenbasis hinterlegt sein sollte.

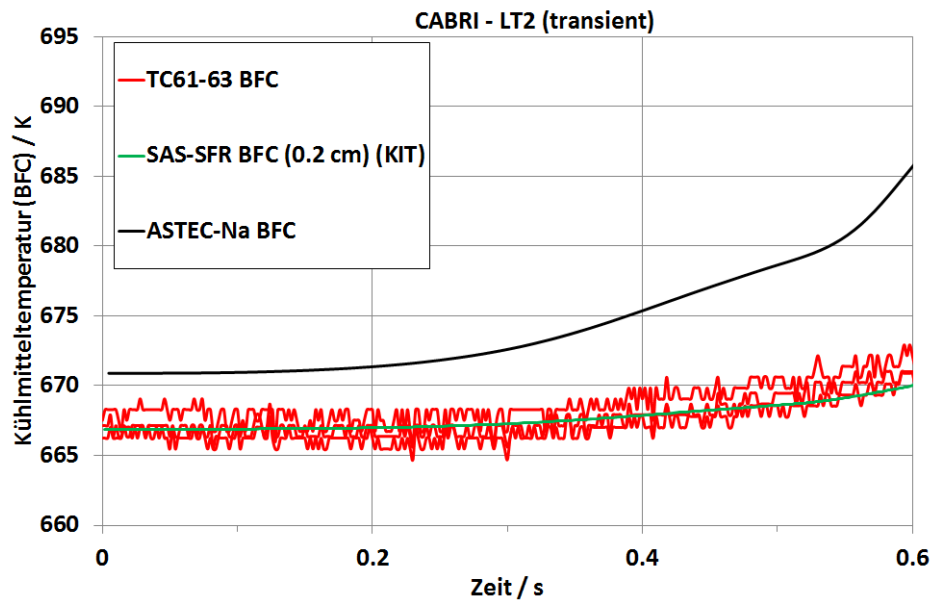


Abb. 3.7: Kühlmitteltemperatur auf Höhe BFC (Bottom Fuel Column) über der Zeit. Die Temperatur aus SAS-SFR wurde 0.2cm über dieser Position genommen. Aus der Messung sind Daten aus drei Temperaturfühlern angegeben.

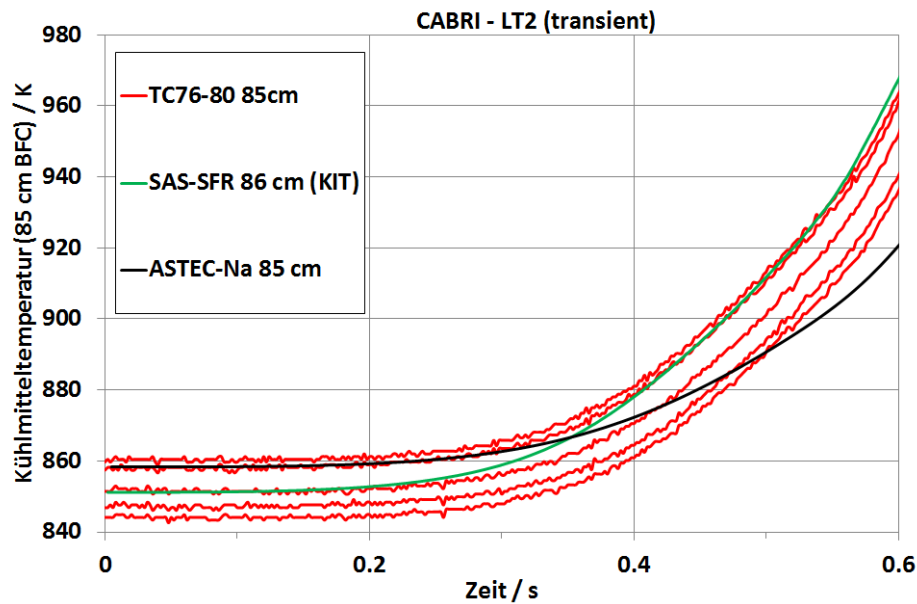


Abb. 3.8: Kühlmitteltemperatur 85 bzw. 86cm über der Position BFC (Bottom Fuel Column) über der Zeit. Geplottet sind die Temperaturen aus den fünf Messungen sowie aus der Simulation mit ASTEC-Na und SAS-SFR.

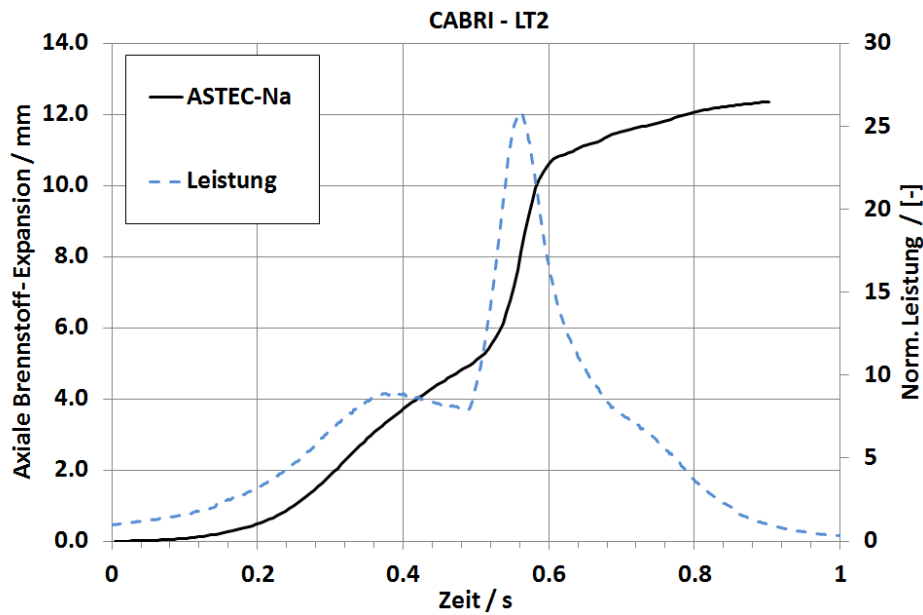


Abb. 3.9: Axiale Ausdehnung des Brennstoffs über der Zeit. Die experimentellen Daten sind nicht frei gegeben.

3.4 CABRI - AGS0 Versuch

3.4.1 Beschreibung des Experiments

Die Anfangsbedingungen wie Kühlmitteltemperatur und Startleistung sind im AGS0 Test identisch mit den Konditionen aus dem LT2 Versuch. Der Testbrennstab bestand aus massiven Pellets, die jedoch nach der erfolgten Vorbestrahlung im PFR-Reaktor (Prototype Fast Reactor) mit einem Abbrand von 2.9at% einen inneren Hohlraum von ca. 1mm aufwiesen. Während des Versuchs wurde die Leistung innerhalb von 0.4s auf das 12-fache erhöht (siehe Abbildung 3.10). Äußerlich war nach dem Versuch am Testpin keine größere Schädigung zu erkennen, allerdings zeigten die Messungen, dass es zum partiellen Schmelzen des Brennstoffs gekommen war.

3.4.2 Ergebnisse

Das axiale Leistungsprofil in Abbildung 3.11 vor Beginn der Transienten wurde aus den experimentellen Daten vorgegeben. Sowohl für die Simulation mit ASTEC-Na als auch für die Simulation mit SAS-SFR kann dieses Profil nach „Hochfahren“ in den stationären Zustand sehr gut wiedergegeben werden. Im Gegensatz dazu zeigen sich im radialen Temperaturprofil im stationären Fall Unterschiede in den beiden Simulationen, wie Abbildung 3.12 zu entnehmen ist. Zwar ist der Temperaturunterschied für alle radialen Positionen unter 200K, jedoch ist der innere Hohlraum im Fall für ASTEC-Na mit 0.6mm deutlich größer als bei SAS-SFR, wo das zentrale Loch lediglich einen Radius von unter 0.1mm aufweist. Hier wird der Einfluss der Vorbestrahlung deutlich, die in SAS-SFR direkt berechnet wird und für ASTEC-Na über Vorrechnungen mit GERMINAL erfolgt.

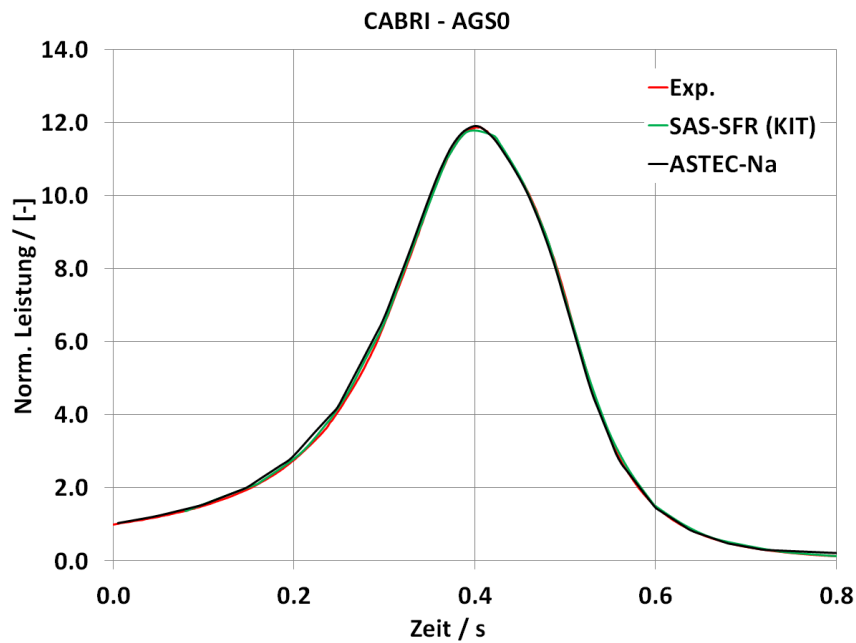


Abb. 3.10: Verlauf der Leistung (normiert) während der Transienten im Versuch, in ASTEC-Na und in SAS-SFR. Das Maximum der Leistung liegt beim 12-fachen Ausgangswert von 32kW, was in etwa 384kW entspricht.

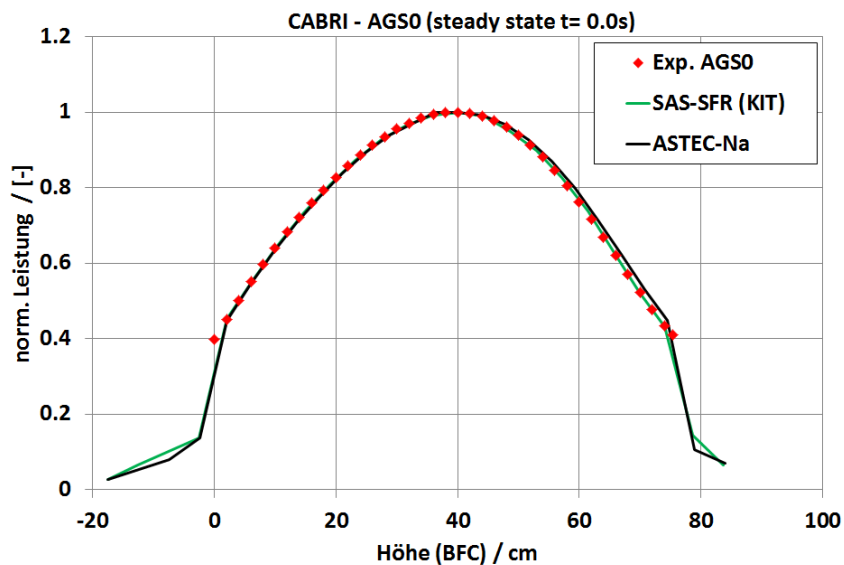


Abb. 3.11: Axiales Leistungsprofil vor Beginn der Transienten.

Für das axiale Profil der Natriumtemperaturen, dargestellt in Abbildung 3.13, zeigen sich für den stationären Fall sehr gute Übereinstimmungen. Während der Transienten heizt sich das Kühlmittel stark auf. Im Experiment wurden zur Bestimmung der Natriumtemperatur auf verschiedenen Höhen jeweils mehrere Thermoelemente angebracht. In Abbildung 3.14 ist der Temperaturverlauf auf Höhe 38cm (gemessen von der Unterkante des Brennstoffs) aufgetragen. Für die experimentellen Werte ist zu Beginn der Transienten und nach 1.2s eine Temperaturunterschied von 15K festzustellen. Für die maximalen Temperaturen, die kurz nach Durchlaufen des Leistungspeaks erreicht

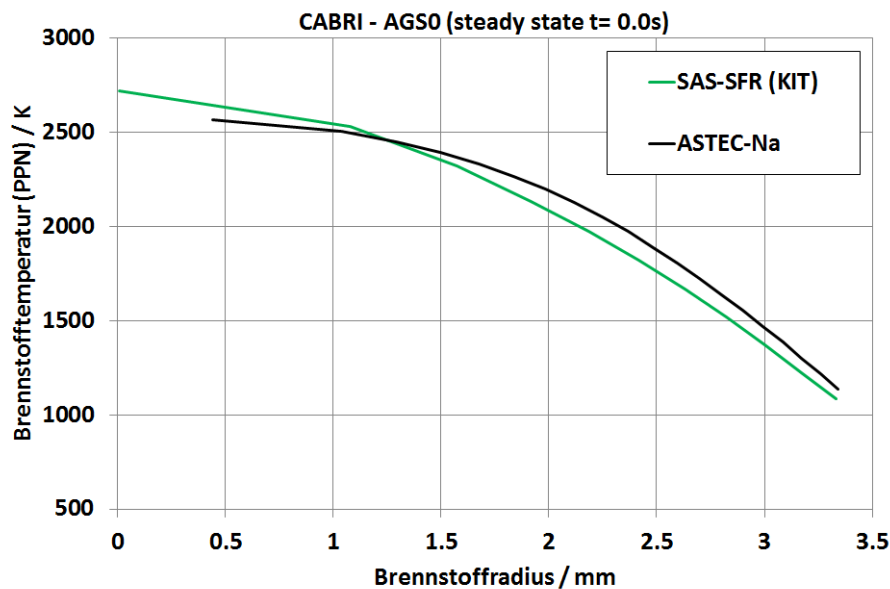


Abb. 3.12: Radiales Profil der Brennstofftemperatur in der heißesten Masche PPN (Peak Power Node) vor Beginn der Transienten.

werden, beträgt die Differenz in den Messwerten sogar bis zu 45K. Zu Beginn der Transienten liegt der mit ASTEC-Na simulierte Temperaturverlauf über den experimentellen Werten, während SAS-SFR in diesem Bereich gute Übereinstimmung zeigt. Ab 0.6s Sekunden unterschätzt SAS-SFR die Natriumtemperatur. Die mit ASTEC-Na ermittelten Werte liegen hier zwischen den experimentellen Kurven. Die Unterschätzung von SAS-SFR ist auf ein Öffnen des Gaps zurückzuführen, das zu Beginn der Transienten in beiden Simulationen geschlossen ist. Durch den schlechteren Wärmeübergang vom Brennstoff zum Hüllrohr wird das Hüllrohr nicht so stark erwärmt und somit ist auch die Aufheizung im Kühlmittel geringer.

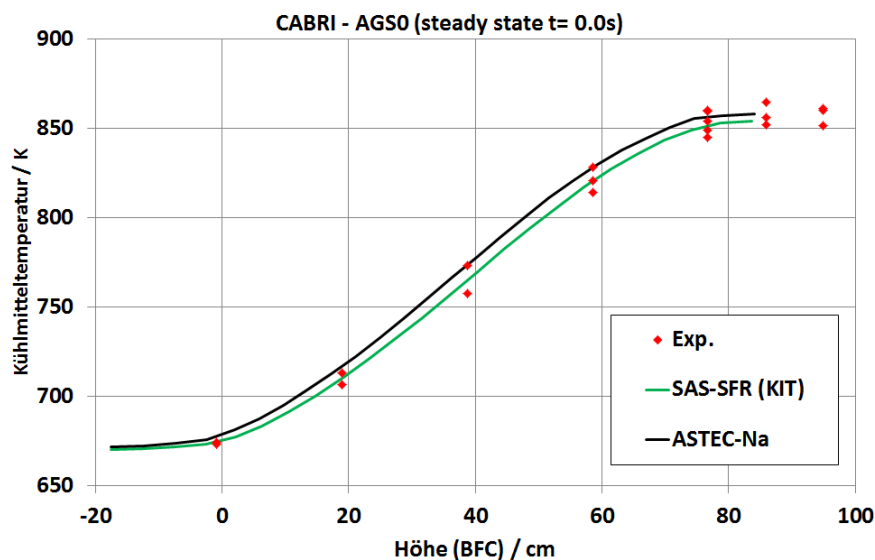


Abb. 3.13: Axiales Profil der Natriumtemperatur vor Beginn der Transienten.

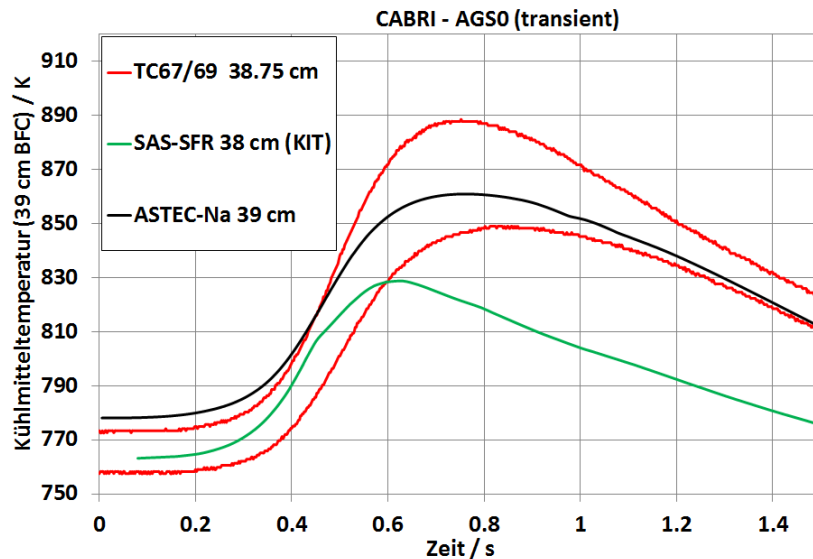


Abb. 3.14: Natriumtemperatur ca. 38cm über BFC über der Zeit.

Am oberen Ende des aktiven Kerns befanden sich im Versuch fünf Thermoelemente in jeweils unterschiedlichen azimuthalen Positionen. Ein Vergleich der Daten mit den simulierten Ergebnissen ist Abbildung 3.15 zu entnehmen. Beide Codes, sowohl SAS-SFR als auch ASTEC-Na, liefern eine niedrigere Temperatur als die gemessene. Dies wird auch aus Abbildung 3.16 ersichtlich, die das Axialprofil der Kühlmitteltemperatur zur Zeit $t=0.8s$ zeigt. Im oberen Bereich des Brennstabs wird die Temperatur von SAS-SFR unterschätzt. Die Ergebnisse von Astec-Na können die experimentellen Daten gut wiedergeben. Für beide Codes gilt, dass der Kurvenverlauf den Testergebnissen folgt. Das Maximum der Natriumtemperatur befindet sich nach 0.8s bei ca. 70cm, was mit beiden Codes gut erfasst wird.

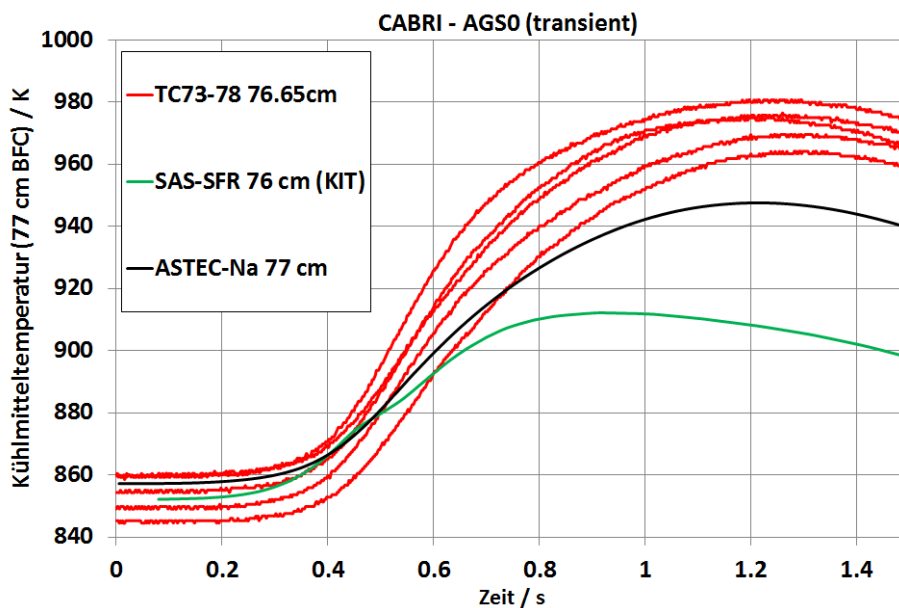


Abb. 3.15: Natriumtemperatur ca. 77cm über BFC über der Zeit.

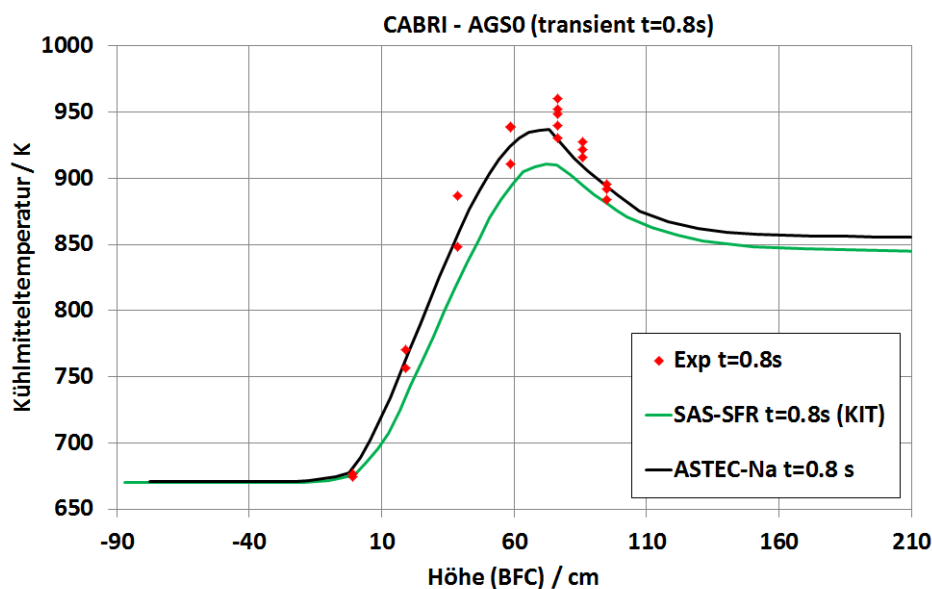


Abb. 3.16: Axiales Profil der Kühlmitteltemperatur zur Zeit $t=0.8s$ nach Beginn der Transienten. Die Höhenangaben sind relativ zur Position BFC (Bottom of Fuel Column) angegeben.

Zur Untersuchung der Spaltgasrückhaltung im Brennstoff wurde zur Bestimmung der experimentellen Daten ein Vergleichsbrennstab verwendet, der sich bei der Vorbestrahlung an einer vergleichbaren Position im Leistungsreaktor befand. So können Werte für die Spaltgase in axialer Richtung vor und nach der Transienten angegeben werden, wie sie in Abbildung 3.17 zu finden sind.

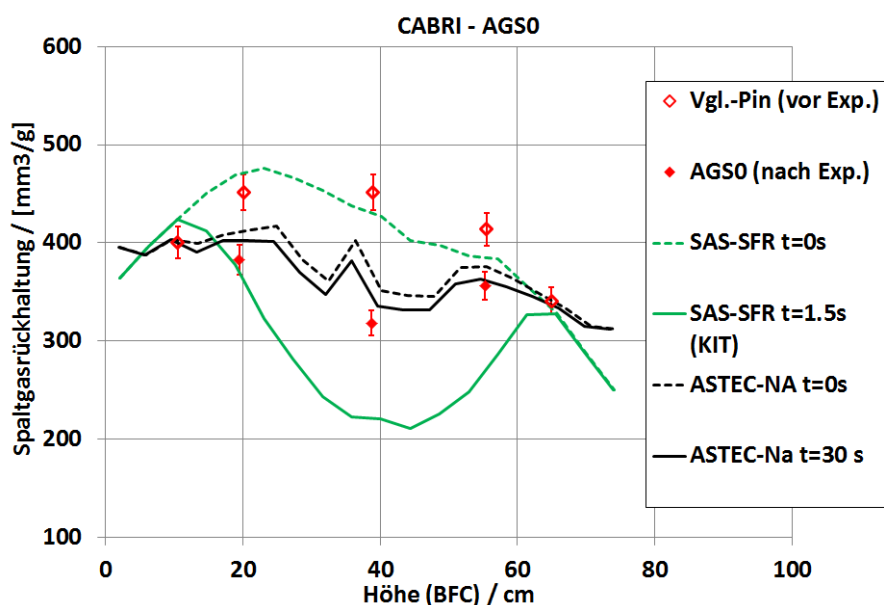


Abb. 3.17: Spaltgasrückhaltung im Brennstoff axial entlang des Brennstabs.

Vor der Transienten trifft die Simulation mit SAS-SFR die reale Verteilung des Vergleichsbrennstabs sehr gut. Die ASTEC-Na Kurve liegt unter diesen Werten, ist jedoch auch kein ASTEC-Na Ergebnis, vielmehr stammen die Werte aus den GERMINAL

Rechnungen. Auffallend ist jedoch, dass in der Transienten ASTEC-Na Rechnung kaum Spaltgase abgegeben werden. Im Gegensatz dazu überschätzt SAS-SFR die Spaltgasabgabe. Der Vergleich ist jedoch schwierig zu bewerten, da die experimentellen Daten aus zwei unterschiedlichen Brennstäben stammen und somit das Axialprofil vor der Transienten lediglich eine Abschätzung der realen Verhältnisse im Testbrennstab AGS0 zulassen. Die maximale axiale Ausdehnung für den AGS0 Versuch liegt bei 5.5mm (siehe Abbildung 3.18) und wird nach 0.5s Sekunden, also kurz nach dem Leistungspeak, erreicht.

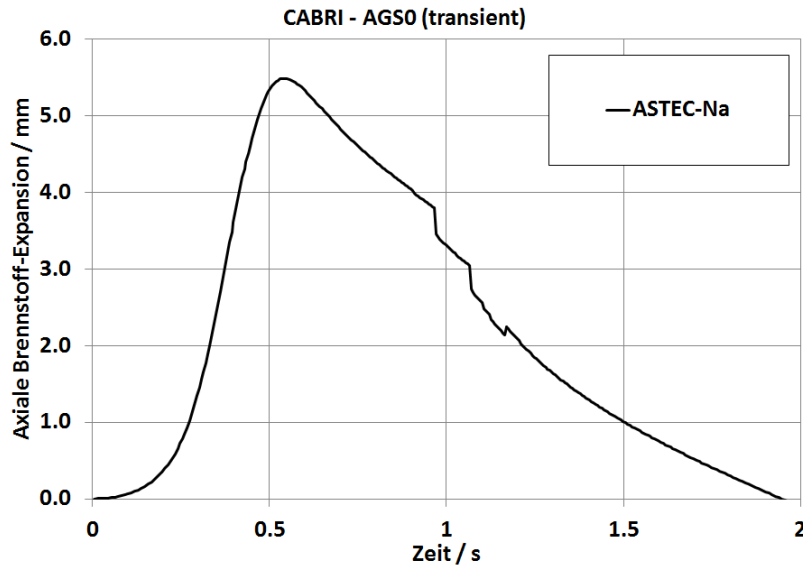


Abb. 3.18: Axiale Ausdehnung des Brennstoffs über der Zeit.

3.4.2.1 Zusammenfassung zu den CABRI Simulationen

Zum LT2 sowie AGS0 Experiment und den Simulationen erfolgte eine detaillierte Analyse über die in der Literatur veröffentlichten Messdaten, die relevant für die Simulationen zum Benchmark-Kern in der frühen Störfallphase sind. Wichtige Parameter sind dabei die Entwicklung der Temperaturen sowie thermische Ausdehnungen der Komponenten. Die Ergebnisse der Simulationen mit ASTEC-Na zeigen in beiden Fällen gute Übereinstimmungen mit den experimentellen Daten bzw. den KIT-Vergleichsrechnungen mit SAS-SFR. Im Rahmen des JASMIN Projekts wurden zur Validierung weitere CABRI Versuche sowie Benchmarks herangezogen [77] [29] [46] [30] [5]. Insgesamt ist festzustellen, dass ASTEC-Na bezüglich der Thermohydraulik zuverlässige Ergebnisse liefert und für Analysen zu Natrium gekühlten schnellen Reaktoren in der frühen Unfallphase geeignet ist. Zudem hat sich während des JASMIN Projekts die flexible Code-Struktur bewährt, sodass Erweiterungen und neue Modelle problemlos eingefügt werden konnten. Insbesondere ermöglicht der Code durch den mechanistischen Ansatz eine detaillierte Beschreibung des thermomechanischen Brennstabverhaltens.

4 Kopplung von DYN3D mit ASTEC-Na

Ziel der Arbeit ist die Entwicklung eines Tools zur numerischen Simulation von Transienten mit Neutronenrückwirkung. Dazu werden die beiden Codes DYN3D und ASTEC-Na gekoppelt. Abbildung 4.1 gibt eine Übersicht des Kopplungsschemas und zeigt, welche Daten an den jeweils anderen Code übergeben werden müssen. SERPENT2 wird in der eigentlichen Kopplung nicht mehr verwendet. Das Erzeugen der Querschnittsdaten geschieht vorab. Die fertige Bibliothek muss DYN3D als Eingabe bereit gestellt werden. Mittels dieser Daten kann DYN3D die Leistungsverteilung im Kern bestimmen, die an ASTEC-Na übergeben wird. ASTEC-Na berechnet mit der neuen Leistung die Thermohydraulik und das thermomechanische Verhalten der Strukturen. Die für die Neutronik relevanten Daten, also Dichten, Temperaturen und geometrische Veränderungen, müssen wiederum DYN3D für den nächsten Zeitschritt bereit gestellt werden.

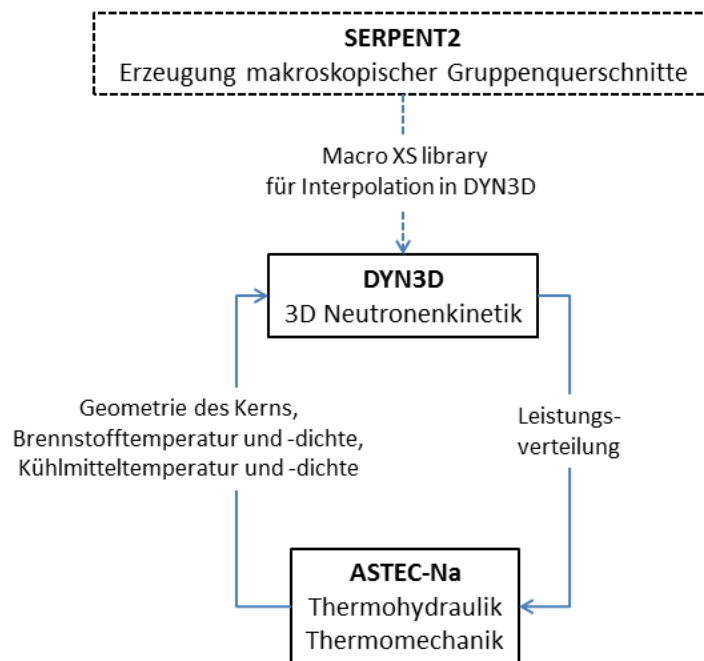


Abb. 4.1: Übersichtsschema der Codes und ihrer Verwendung. SERPENT2 ist nicht Bestandteil der Kopplung, sondern dient dazu, in Vorabrechnungen eine problemspezifische Querschnitts-Bibliothek zu erstellen.

Im konkreten Fall wird die Kühlmitteltemperatur nicht übergeben, da der direkte Effekt auf die Querschnitte (Dopplerverbreiterung) kaum eine Rolle spielt. Die Natriumtemperatur wird nur indirekt über die mit der Temperatur verbundene Änderung in

der Dichte berücksichtigt. Die Übergabe der geometrischen Änderungen im Brennstoff beschränkt sich zunächst auf die axiale Ausdehnung. In aktuellen SFR-Designs sind die Steuerelemente über dem Kern angebracht. Damit schiebt sich bei axialer Ausdehnung der obere Teil des Spaltmaterials in die Region neben den Absorberstäben, sodass mit einer negativen Rückkopplung zu rechnen ist. Daneben führt die Ausdehnung zu einer Dichteänderung in den einzelnen Brennstoffzonen, die mitberücksichtigt werden muss, um das Brennstoffinventar insgesamt konstant zu halten. Die Diskretisierung in radialer Richtung erfolgt in Diffusionscodes wie DYN3D üblicherweise auf der Skala des Brennelements. Bei radialer Brennstoffausdehnung bleibt somit das Brennstoffinventar in der Masche enthalten und wäre nur durch eine Erweiterung der Querschnittsdatenbasis zu berücksichtigen. Es ergeben sich eventuell Änderungen im Fluss innerhalb des Pellets, wobei dieser Effekt in schnellen Systemen weitaus nicht so gravierend wie in thermischen Reaktoren mit kleineren freien Weglängen der Neutronen ist. Daher kann dieser Effekt vernachlässigt werden. Umgekehrt verhält es sich bei der thermischen Ausdehnung des Hüllrohrs: hier wird nur die radiale Ausdehnung berücksichtigt. Die eigentliche Geometrieänderung wird in der Neutronik nicht explizit simuliert (spielt auch kaum eine Rolle), wohl aber der Effekt, dass bei der Ausdehnung in radialer Richtung Natrium aus der Masche verdrängt wird. Die radiale Hüllrohrexansion wird indirekt über eine Verminderung der Natriumdichte modelliert. Effekte aufgrund axialer Hüllrohrausdehnung sind äußerst gering und können ebenfalls vernachlässigt werden. Da von ASTEC-Na kein Quellcode zur Verfügung steht, ist eine interne Kopplung nicht möglich. Stattdessen muss auf eine externe Variante zurückgegriffen werden, bei der DYN3D als Hauptprogramm dient und ASTEC-Na mittels „Restart“ aufgerufen wird. Details über die Kopplung und die neu integrierten Austauschmodule werden in den nächsten Abschnitten beschrieben.

4.1 Detaillierte Kopplung und Zeitschrittsteuerung

In Abbildung 4.2 findet sich auf der linken Seite das Fließschema zum Hauptprogramm in DYN3D [42]. Nach dem Einlesen der Daten findet eine Abfrage statt, ob ein stationärer Zustand berechnet, oder ob eine transiente Rechnung durchgeführt werden soll. Falls ein transienter Fall untersucht werden soll, wird nach Ausiteration des stationären Zustandes das Unterprogramm zur transienten Thermohydraulik-Neutronik-Rechnung aufgerufen. Im Allgemeinen muss vor einer transienten Rechnung immer erst eine Iteration in den stationären Zustand erfolgen. Optional kann direkt Transient gerechnet werden, wenn ein Restart-File bereit steht.

Abbildung 4.2 zeigt auf der rechten Seite den Programmablauf für Transienten. Zunächst werden dem thermohydraulischen Zustand entsprechende Querschnitte interpoliert. Die Daten aus der vorangegangenen stationären Rechnung werden als Initialisierungswerte an die Transientenroutine übergeben. Zur Neutronik-Thermohydraulik-Iteration ist die Routine „NDDYNT“ zuständig. Sie gibt den i -ten Makrozeitschritt $t_{TH,i}$ vor und wird für jeden Schritt aufgerufen bis die vorgegebene Endzeit t_{ENDE} erreicht ist.

In der Standardversion von DYN3D ist ein einfaches Thermohydraulik-Modul implementiert. Der Aufruf wurde durch einen Restart-Aufruf von ASTEC-Na ersetzt. Details zum Programmablauf der Thermohydraulik-Neutronik-Iteration sind Abbildung 4.3 zu entnehmen. Nachdem die Leistung berechnet wurde, werden im Makrozeitschritt

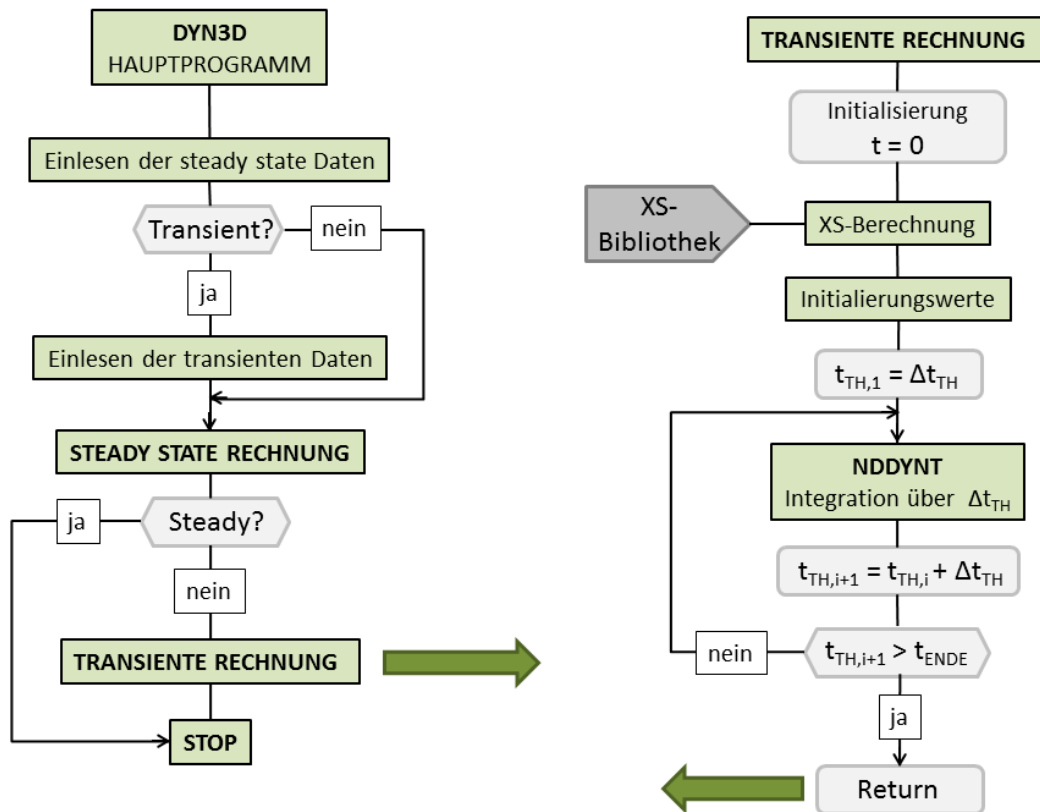


Abb. 4.2: Fließdiagramm des Hauptprogramms in DYN3D.links: Hauptroutine zur Berechnung stationärer Zustände.rechts: Detailliertes Fließschema für transiente Rechnungen (nach [42]).

zunächst durch Aufruf von ASTE-Na neue Thermohydraulikdaten ermittelt (Abbildung 4.3). Mit den neuen Querschnitten wird die Neutronik über den Makrozeitschritt iteriert. Die Schrittweite der inneren Neutronik-Iteration Δt_{NK} hängt dabei von der Änderung der Neutronenverteilung und vom Exponenten der Exponentialentwicklung des Flusses im Vergleich zum vorherigen Zeitschritt ab. Je nachdem, ob das gesetzte Kriterium erreicht ist oder nicht, wird der Iterationsschritt halbiert oder verdoppelt. Wurde das Konvergenzkriterium bezüglich der Neutronik erreicht, wird im selben Makrozeitschritt nochmals mit aktualisierter Leistung eine Thermohydraulikrechnung durchgeführt. In der Standardversion findet im Anschluss über den Parameter „ITFEED“ eine Abfrage statt, ob die Anzahl der Thermohydraulikiterationen erreicht ist oder Konvergenz der Reaktorleistung (mittels „DPOW“) gegeben ist. Dabei ist die Abfrage nach der Änderung in der Brennstofftemperatur „RMAXTF“ derzeit in der gekoppelten Version „ausgeschaltet“. Mittels des ASTEC-Na Restartfiles können Werte in der ASTEC-Datenbasis überschrieben werden. Über ein Template werden für jeden Makrozeitschritt Restartfiles generiert. Als Startzeit wird dabei t_{TH} eingesetzt und als Ende $t_{TH} + \Delta t_{TH}$ übergeben. Zusätzlich wird jeder ASTEC-Na Brennstoffmasche eine neue Leistung zugewiesen und optional im Fall des ULOFs der Durchsatz reguliert.

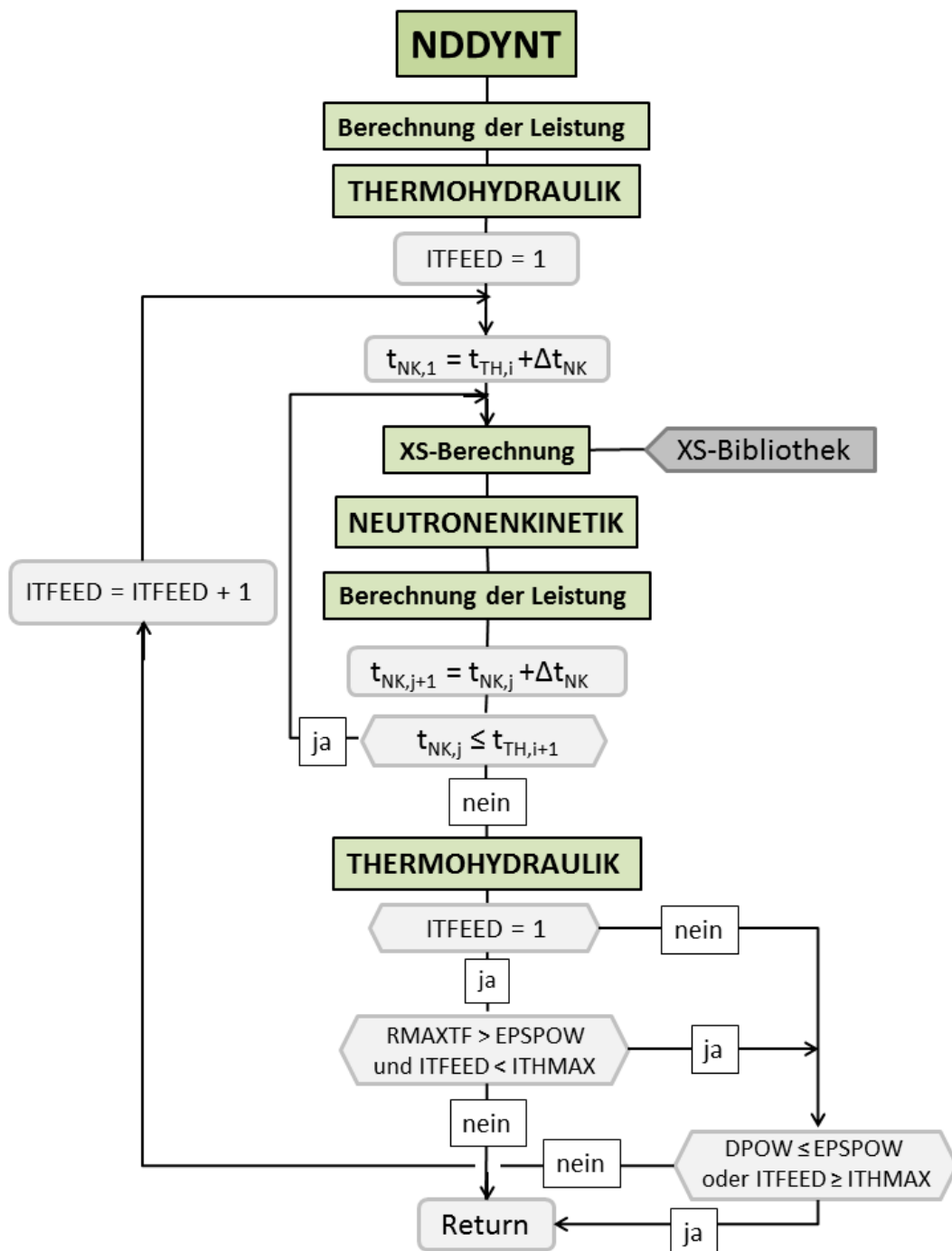


Abb. 4.3: Übersichtsschema zur Thermohydraulik-Neutronik Iteration in transienten Rechnungen. Pro Makrozeitschritt erfolgt mindestens ein zweimaliger Aufruf der Thermohydraulik.

4.2 Module für den Datenaustausch

4.2.1 Übergabe der Thermohydraulik-Daten von ASTEC-Na an DYN3D

Bei der Übergabe der Thermohydraulikdaten an DYN3D ist zu beachten, dass ASTEC-Na ein bewegliches Gitter hat, während das DYN3D-Gitter ortsfest ist. Um den axialen Abschnitten die richtigen Größen zuordnen zu können, muss eine Konvertierung auf das jeweils andere Gitter durchgeführt werden. In Abbildung 4.4 ist der Brennstoff samt Hüllrohr (grau) für einen exemplarischen Brennstab in einer Masche dargestellt. Die gesamte Masche enthält in DYN3D alle Brennstäbe in einem Brennelement sowie den Brennelementkasten selbst und das den Kasten umfließende Natrium. In diesem Beispiel sei der Brennstoff in ASTEC-Na in vier radiale Zonen unterteilt. Diese vier Zonen in ASTEC-Na heizen sich unterschiedlich stark auf. Die heißeste Zone in der Mitte erfährt damit eine stärkere axiale Ausdehnung (dargestellt in hellgrün). Zunächst wird daher eine mittlere Höhe der Zelle \bar{z}_{ASTEC} berechnet. Zu Zone i gehöre $r_{in,i}$ als Innenradius, $r_{out,i}$ als Aussenradius und die Höhe Δz_i . Betrachtet werden vier radiale Zonen. \bar{z}_{ASTEC} wird dann so bestimmt, dass gilt:

$$\pi(r_{out,4}^2 - r_{in,1}^2)\bar{z}_{ASTEC} = \sum_{i=1}^{Ringe} \pi(r_{out,i}^2 - r_{in,i}^2)\Delta z_i \quad (4.1)$$

Die radiale Ausdehnung des Brennstoffs wird dabei nicht berücksichtigt, da der Brennstoff in derselben DYN3D-Masche, die ein Brennelement umfasst, verbleibt. Damit ergibt sich eine Änderung der Teilchendichte im Brennstoff, die vom Verhältnis der ursprünglichen DYN3D Höhe z_{DYN} und der mittleren Höhe \bar{z}_{ASTEC} abhängt. Die radiale Ausdehnung des Hüllrohrs hat Einfluss auf die Menge an Natrium in der Masche. Daher wird in der Neutronikrechnung der Anteil der durch radiale Ausdehnung verdrängt wird, als Reduktion in der Natriumdichte berücksichtigt. Die neue DYN3D Dichte $\rho_{Na,DYN}$ ist über das Verhältnis der Quadrate von altem und neuem Radius gegeben (Abbildung 4.4).

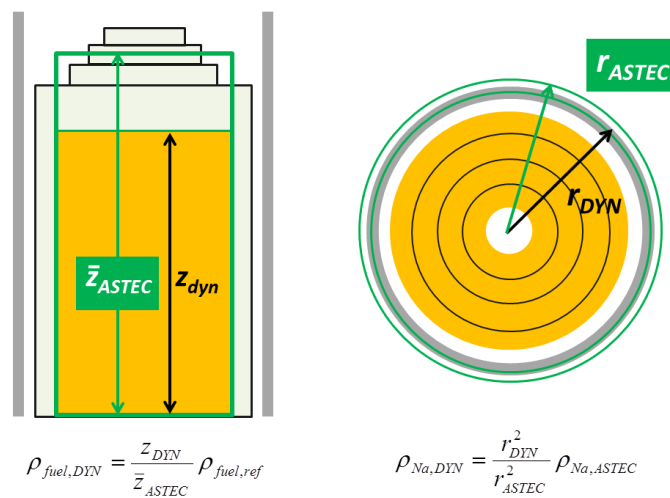


Abb. 4.4: Axiale und radiale Unterteilung des Brennstoffgitters in ASTEC-Na und DYN3D.

Mit diesen neuen Dichten und Temperaturen werden aktualisierte Querschnitte interpoliert. Da die axiale Verteilung der Materialien nicht mehr mit den festen DYN3D-Maschen übereinstimmt, werden durch Vergleich der mittleren Maschenhöhen \bar{z}_{ASTEC} in ASTEC-Na und der ortsfesten Höhen der Maschen in DYN3D z_{DYN} die Anteile der ASTEC-Maschen auf die DYN3D-Maschen verteilt. Dieser Vorgang ist schematisch in Abbildung 4.5 dargestellt. Über dem Brennstoff befindet sich im Brennstab das Gasplenum, das bei axialer Brennstoffausdehnung sukzessive mit Brennstoff aufgefüllt wird. Die makroskopischen Querschnitte werden damit neu auf die DYN3D-Maschen verteilt, gewichtet mit dem Anteil, den sie in der jeweiligen Masche einnehmen. In Abbildung 4.5 ist der formale Zusammenhang am Beispiel für Masche 4 erläutert. Durch thermische Ausdehnung hat sich die Masche in ASTEC-Na soweit verschoben, dass für die ursprüngliche Masche, wie sie in DYN3D verwendet wird, die Querschnitte anteilig aus Masche 3 und 4 ermittelt werden müssen.

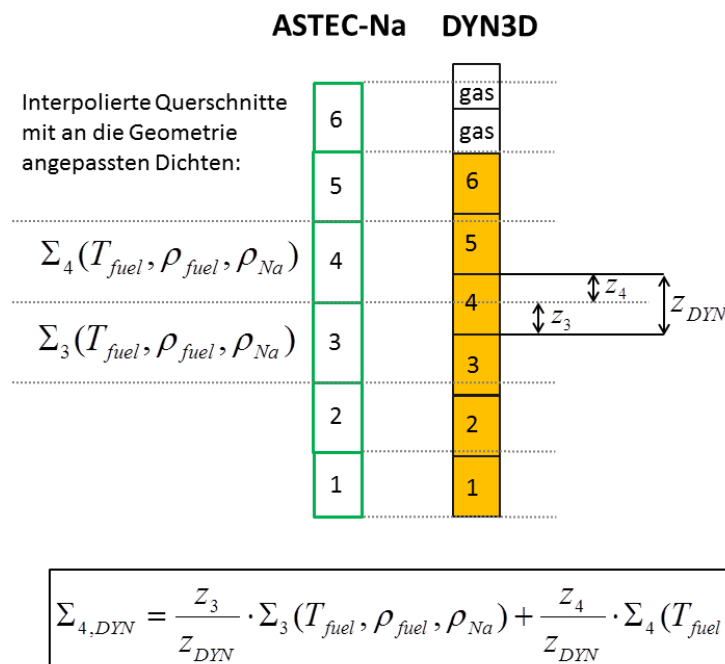
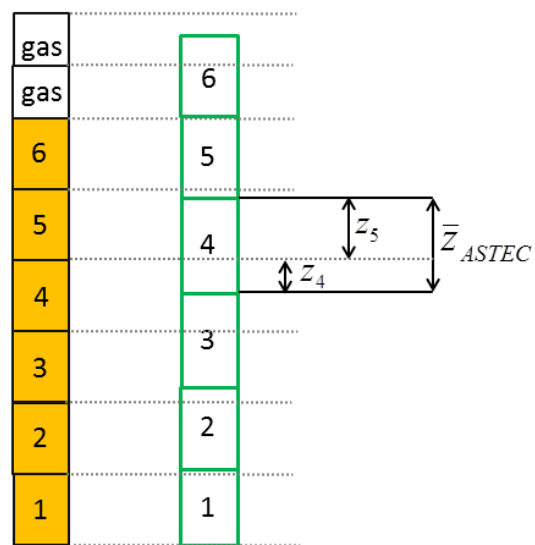


Abb. 4.5: Schema zur Erzeugung von makroskopischen Querschnitten für das feste DYN3D-Gitter aus den Thermohydraulikdaten des ausgedehnten ASTEC-Na-Gitters.

4.2.2 Übergabe der Leistung von DYN3D an ASTEC-Na

Bei der Übergabe der Leistungsverteilung an ASTEC-Na genügt eine einfache Abfrage der Maschenhöhen. Damit kann den ASTEC-Maschen die anteilige Leistung der jeweiligen DYN3D-Maschen zugeordnet werden, die sich auf der entsprechenden Höhe befinden (siehe Abbildung 4.6). Die Abfrage erfolgt ähnlich der Abfrage bei Ermittlung der makroskopischen Querschnitte und ist in Abbildung 4.6 wiederum für Masche 4 der ASTEC-Na Diskretisierung aufgeführt.

DYN3D ASTEC-Na



$$P_{4,ASTEC} = \frac{z_4}{\bar{z}_{ASTEC}} \cdot P_{4,DYN} + \frac{z_5}{\bar{z}_{ASTEC}} \cdot P_{5,DYN}$$

Abb. 4.6: Verteilung der in DYN3D berechneten Leistung auf die ASTEC-Na Maschen.

4.3 Erzeugung von Gruppenquerschnittsdaten

Für den Diffusionscode DYN3D müssen problemspezifische Gruppenquerschnittsdaten bereit gestellt werden. DYN3D fordert für jede Masche und jede Energiegruppe Streu-, Absorptions- und Spalt Daten sowie Angaben zu den verzögerten Neutronen und zum Diffusionskoeffizienten bzw. Transportquerschnitt. Als Anwendungsbeispiele für das gekoppelte System bestehend aus Neutronik- und Thermohydraulikmodul sind zwei Störfälle, ein Kühlmittelverluststörfall und ein Reaktivitätseintrag, vorgesehen. Um diese Ereignisse berechnen zu können, muss die erstellte Querschnittsdatenbasis ermöglichen, alle Systemzustände durch Kombination der variierender Parameter zu beschreiben. Zur Charakterisierung des Systems während der Transienten wurden in dieser Arbeit drei formal unabhängige Parameter ausgewählt: die Brennstofftemperatur, die Kühlmitteldichte und die Brennstoffdichte. Mittels dieser Informationen und den im vorherigen Abschnitt eingeführten Routinen können die Querschnittsdaten in der Transienten für den jeweiligen Zeitschritt aktualisiert werden. Die Querschnittsdaten müssen somit für sämtliche Variationen der drei Parameter vorab mit SERPENT2 generiert werden. Tabelle 4.1 zeigt die Bereiche der Variation der einzelnen Parameter. Die Bereiche wurden entsprechend den Erfahrungen aus den CABRI-Experimenten gewählt. Im Fall der Natriumdichte und der Brennstoffdichte entsprechen die angegebenen Werte Multiplikationsfaktoren f bezogen auf die Dichten ρ_0 im nominalen Zustand. Das bedeutet, dass bei einem Tabellenwert f die Dichte auf $f \cdot \rho_0$ gesetzt wird. Bei jedem Aufruf der Interpolationsroutine für die Querschnitte wird in DYN3D über Spline-Interpolation der einzelnen Werte in der Datenbasis ein aktueller Querschnitt Σ für jede Masche ermittelt. Es gilt dann für den makroskopischen Maschenquerschnitt:

$$\Sigma(b, \rho_{Na}, \rho_f, T_f) = \Sigma_{base}(b) + \Delta\Sigma_{\rho_{Na}}(b) + \Delta\Sigma_{\rho_f}(b) + \Delta\Sigma_{\sqrt{T_f}}(b) \quad (4.2)$$

Der Parameter b bezeichnet den Abbrandzustand, der für den in dieser Arbeit betrachteten Fall nur einen einzigen Wert hat. Im Fall der Variation der Brennstofftemperatur wird eine lineare Interpolation durchgeführt, die als Parameter nicht direkt die Brennstofftemperatur T_f verwendet, sondern über $\sqrt{T_f}$ interpoliert, da der Dopplereffekt von der Relativgeschwindigkeit von Neutron und Target bestimmt wird und für den formalen Zusammenhang von Geschwindigkeit und Brennstofftemperatur gilt: $v \propto \sqrt{kT_f}$.

Die Erstellung der Datenbasis sollte stets auf ein spezielles System angepasst sein. Die Störfälle sollen für einen generischen Benchmark-Kern simuliert werden. Eine detaillierte Beschreibung ist Kapitel 5 zu entnehmen. An dieser Stelle sei nur erwähnt, dass der Kern - wie in SFRs üblich - aus einem inneren und einem äußeren Kern besteht, die sich in der Zusammensetzung des Brennstoffs unterscheiden, und für die daher eine separate Querschnittsdatenbasis erzeugt werden muss. Die Querschnitte wurden für den inneren und den äußeren Kern für fünf axiale Brennstoffzonen, die Gasplena und die axialen Absorber generiert. Daneben bedarf es der Bereitstellung von Querschnittsdaten für Kontrollelemente und radiale Reflektoren. Aufgrund des hohen Speicherplatzbedarfs und der langen Rechenzeiten können die Querschnitte nicht für alle Zonen aus Ganzkernrechnungen generiert werden. Stattdessen wurden für den inneren und den äußeren Kern jeweils Brennelementrechnungen mit radial reflektierenden Randbedingungen durchgeführt und daraus Querschnittsdaten für die verschiedenen axialen Zonen des Brennelements erzeugt. Dies entspricht quasi einem radial unendlich ausgedehnten Kern. Für das obere und untere Ende des Brennelements wurden Vaku-

	Brennstoff- temperatur / K	Faktor für Natriumdichte	Faktor für Brennstoffdichte
nominal	1500	1.00	1.00
Variationen	600	1.00	1.00
	1500	0.99	0.99
	1600	0.97	0.97
	1700	0.95	0.95
	1800	0.93	0.93
	2000	0.90	0.90
	2200	0.85	
	2500	0.80	
	3000	0.70	
		0.50	
		0.00	

Tab. 4.1: Variation der Parameter zur Erstellung einer Querschnittsdatenbasis mittels SERPENT2 zur Untersuchung eines UTOP und eines ULOF Störfalls in einem generischen SFR Kern.

umrandbedingungen gesetzt. Allein zur Erzeugung der Querschnittsdatenbasis für den inneren und den äußeren Kern sind damit über 1000 Einzelrechnungen erforderlich. Zusätzlich wurde aus Ganzkernrechnungen die Datenbasis für die Regelemente, bestehend aus leerem Kanal und Absorberzone, sowie für den radialen Reflektor erzeugt. Allerdings wurde hier lediglich eine Variation in der Natriumdichte durchgeführt und somit die Anzahl der Einzelrechnungen reduziert. Die so erzeugte Querschnittsdatenbasis kann Effekte wie die Änderung der Kühlmitteldichte (aufgrund der Temperatur oder auch durch Kühlmittelverlust) und Änderungen in der Brennstofftemperatur und -dichte erfassen. Die Natriumtemperatur allein hat kaum Einfluss auf das neutronische Verhalten und wurde daher nicht in die Variation miteinbezogen. Auch die radiale Ausdehnung des Brennstoffs bei intakter Geometrie ist im schnellen Reaktor von zweitrangiger Ordnung, da die Selbstabschirmung im Brennstab kleiner ist als in thermischen Reaktoren. Eine radiale Ausdehnung des gesamten Kerns, d.h. eine Verschiebung der Brennelemente selbst, wird hier nicht berücksichtigt, kann aber bei transienten Rechnungen in der späten Störfallphase durchaus einen Einfluss auf die Leckage, und damit die Reaktivitätsänderung, haben. Für die Kopplung zur Berechnung der frühen Störfallphase wird auf die Berücksichtigung dieses Effekts verzichtet. Da DYN3D mit einem ortsfesten Gitter arbeitet wäre die Erstellung von Daten für eine radiale Ausdehnung des kompletten Kerns eine äußerst komplexe Herausforderung. Zur Erzeugung der homogenisierten Gruppdaten wurde der MC Code SERPENT2 verwendet. SERPENT2 bietet dem Nutzer die Möglichkeit aus kontinuierlichen Querschnittsdaten Gruppdaten mit beliebiger Energieunterteilung zu erzeugen. Als Ausgangsbibliothek wurde die ENDB/B7.1 Bibliothek verwendet [18] [19]. Die Methodik wurde an zahlreichen Beispielen validiert, wie u.a. Arbeiten von Fridman et al. zeigen, bei denen Gruppdaten für den generischen schnellen Natrium gekühlte Reaktorkern für DYN3D Rechnungen erzeugt wurden [32] [33] [73]. In Anlehnung an die ECCO 33-Gruppenstruktur, die speziell an schnelle Systeme angepasst ist, reduzierten Fridman et al. die ECCO-Struktur auf 24 Gruppen, wobei die unteren Gruppen (24-33) zu einer thermischen

Gruppe unterhalb einer Neutronenenergie von $1,4863 \cdot 10^{-4}$ MeV zusammengefasst wurden. Grund hierfür war, dass mit abnehmender Energie der statistische Fehler stark ansteigt, da der Neutronenfluss bei schnellen Reaktoren dort lokal gering ist. Abbildung 4.7 zeigt den Neutronenfluss normiert auf ein Startneutron in Abhängigkeit der Energie (doppelt logarithmisch aufgetragen) im Brennstoff für die fünf axialen Zonen des Benchmark-Kerns. Die Flussspektren wurden mittels MCNP6 Rechnungen erzeugt und als Tally mit einer feinen Energiediskretisierung in 292 Gruppen ausgegeben. Es ist deutlich zu erkennen, dass die axial inneren Zonen einen starken Flussabfall im thermischen Energiebereich erfahren, was bei der Erzeugung von Gruppendaten zu einem großen statistischen Fehler führt. Andererseits zeigt sich auch, dass die Brennstoffzonen oben und unten, die nahe an Reflektorbereichen liegen, im thermischen Bereich durchaus einen hohen Flussbeitrag aufweisen. Daher wurde in dieser Arbeit eine 35-Gruppenstruktur verwendet, wobei die unterste Gruppe $1,0 \cdot 10^{-5}$ MeV als Obergrenze hat.

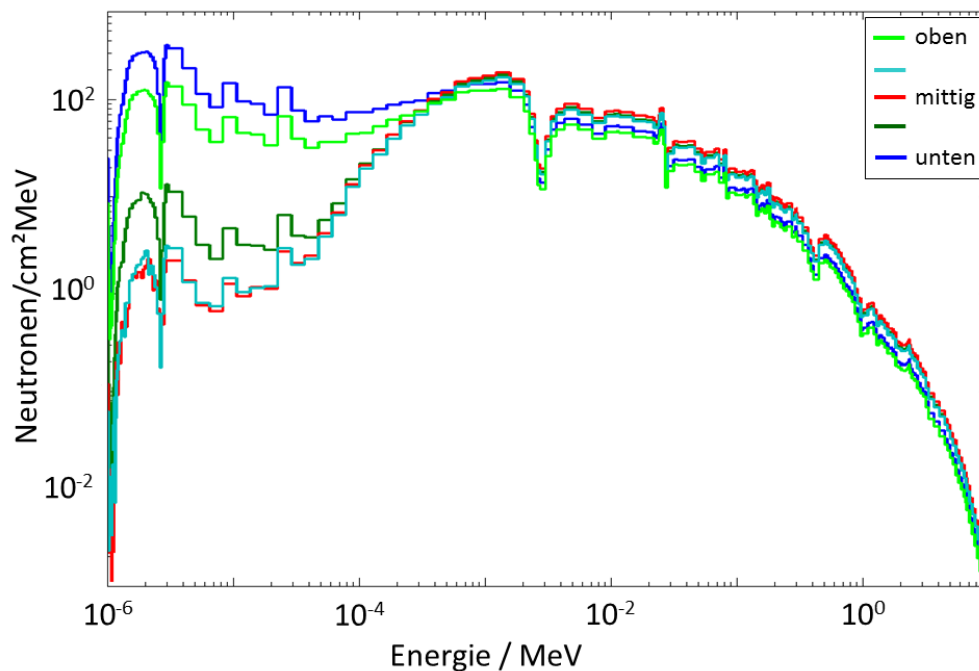


Abb. 4.7: Flussspektrum ermittelt mit MCNP6 für die fünf axialen Brennstoffzonen im inneren Kern (Tally mit 292 Gruppen). Betrachtet wird dabei ausschließlich der Fluss im Brennstoff, der auf ein Startneutron normiert ist.

Abbildung 4.8 zeigt den Neutronenfluss aus einer SERPENT2 Rechnung bei Erstellung der Gruppenquerschnitte für den inneren Kern, normiert auf eine Leistung von 3600MWth. Der Fluss bezieht sich in diesem Fall nicht allein auf den Brennstoff, sondern auf eine homogenisierte Brennelementmasche, in der sich neben dem Brennstoff auch das Kühlmittel sowie das Hüllrohr und der Brennelementkasten befinden. Daher und aufgrund der Mittelung über ein größeres Energieintervall sind die Resonanzen nicht so stark ausgeprägt wie in Abbildung 4.7. Auch hier ist der Abfall im Fluss in den thermischen Energiegruppen unter $1,0 \cdot 10^{-4}$ MeV in der axial mittleren Brennstoffzone zu erkennen, aber auch, dass für die an Reflektoren grenzenden Zonen oben und unten dieser Abfall nicht zu verzeichnen ist. Für die erzeugten Gruppenquerschnitte

ergibt sich für die niedrigste Energiegruppe 35 ein statistischer Fehler von bis zu 39% (1σ -Bereich) für die ungünstigste Zone in der axial zentralen Position.

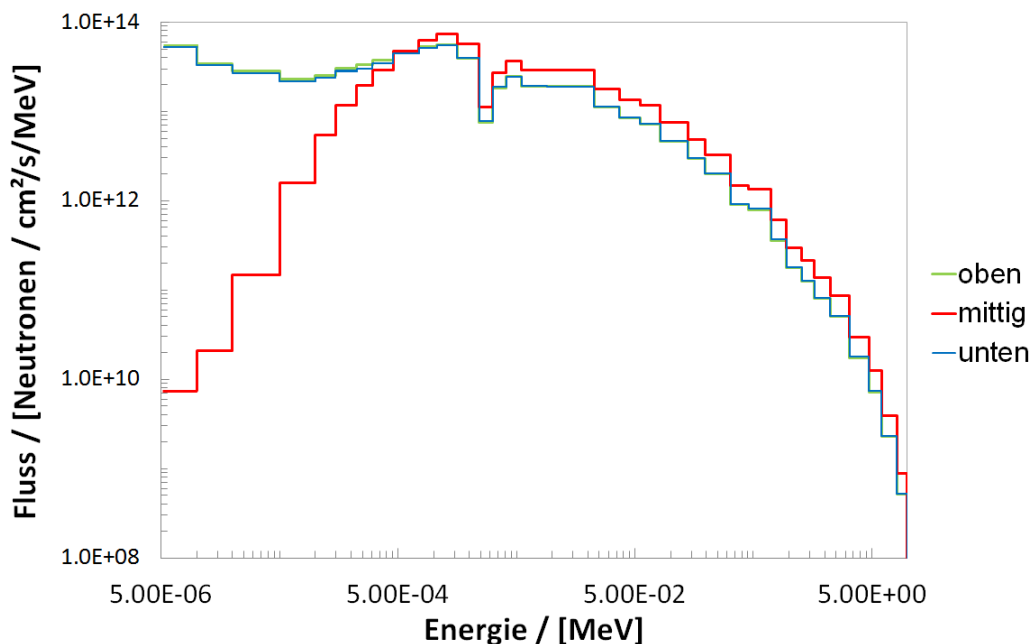


Abb. 4.8: Flussspektrum ermittelt mit SERPENT2 bei der Erstellung der Querschnittsdaten in 35 Energiegruppen für drei axiale Brennstoffzonen im inneren Kern. Der Fluss bezieht sich auf das homogenisierte Brennelement.

Als Parameterkombination mit dem größten Fehler im makroskopischen Spaltquerschnitt hat sich der Nominalfall erwiesen. Betrachtet man jedoch die kumulierten Spalttraten, die in Abbildung 4.9 für die 35 Energiegruppen für die mittlere und die untere Brennstoffmasche im inneren Kern aufgetragen sind, ist festzustellen, dass die unteren Energiegruppen mit großem statistischen Fehler weniger als 0,001% der gesamten Spaltungen in der mittleren Brennstoffzone ausmachen und damit vernachlässigt werden können. Für die untere Brennstoffmasche liegt der Beitrag zur Summe der Spaltreaktionen aus den unteren drei Energiegruppen bei ca. 1%. Die dargestellten Reaktionsraten wurden aus dem Produkt des Gruppenflusses und des makroskopischen Spaltquerschnittes bestimmt. Der eingetragene Fehlerbereich zeigt das 2σ -Intervall, wenn man von unkorrelierten Fehlern im Fluss und den Querschnitten ausgeht. Damit gibt der eingezeichnete Bereich eine Maximalabschätzung des 2σ -Bereichs an. Der Einfluss der unteren Energiegruppen mit großem statistischen Fehler in den Querschnitten für die axial zentrale Zone wurde auch für den Fall mit 100% Void betrachtet. Die kumulierten Reaktionsraten für die mittlere und die untere Brennstoffzone sind in Abbildung 4.10 aufgetragen. Für diesen Fall beträgt der statistische Fehler im Spaltquerschnitt für Gruppe 35 in der mittleren Masche ca. 28% (1σ -Bereich). In diesem Fall tragen die Spaltungen in den unteren drei Energiegruppen gerade noch mit 0,0001% zur Anzahl aller Spaltprozesse in der mittleren Zone bei.

Es werden mit der Querschnitts-Datenbank solche Störfälle untersucht, in denen die Störung zu einem härteren Spektrum führt und damit während der Transienten der Einfluss der thermischen Gruppen abnimmt. Dennoch muss beachtet werden, dass Fälle, in denen ein hoher thermischer Fluss in Bereichen mit unzuverlässigen Querschnittsdaten auftreten kann, eine genauere Analyse notwendig ist und gegebenenfalls andere

Querschnittsdaten zu verwenden sind. Da wichtige Effekte wie z.B. der Dopplereffekt, auch von Resonanzen im niedrigen Energiebereich abhängen und für die betrachteten Fälle nur in den Bereichen nahe der Reflektoren mit einem wesentlichen thermischen Beitrag im Fluss zu rechnen ist (wo der statistische Fehler klein ist), wurde die 35-Gruppenstruktur angewendet. Großer Vorteil einer feineren Gruppenaufteilung ist, dass sich während der Transienten ein detaillierteres Spektrum einstellen kann und der Übergang an Grenzen zu Gebieten mit energetisch verschobenem Spektrum, wie beispielsweise an den Reflektoren, dadurch besser erfasst wird. Gleichzeitig zeigen die Analysen der kumulierten Reaktionsraten, dass auch bei Verwenden eines Energiespektrums unter Berücksichtigung einer Energieunterteilung bis zu $1,0 \cdot 10^{-5}$ MeV nicht mit einer Verfälschung der Ergebnisse durch unzuverlässige Querschnittsdaten der zentralen Zone zu rechnen ist.

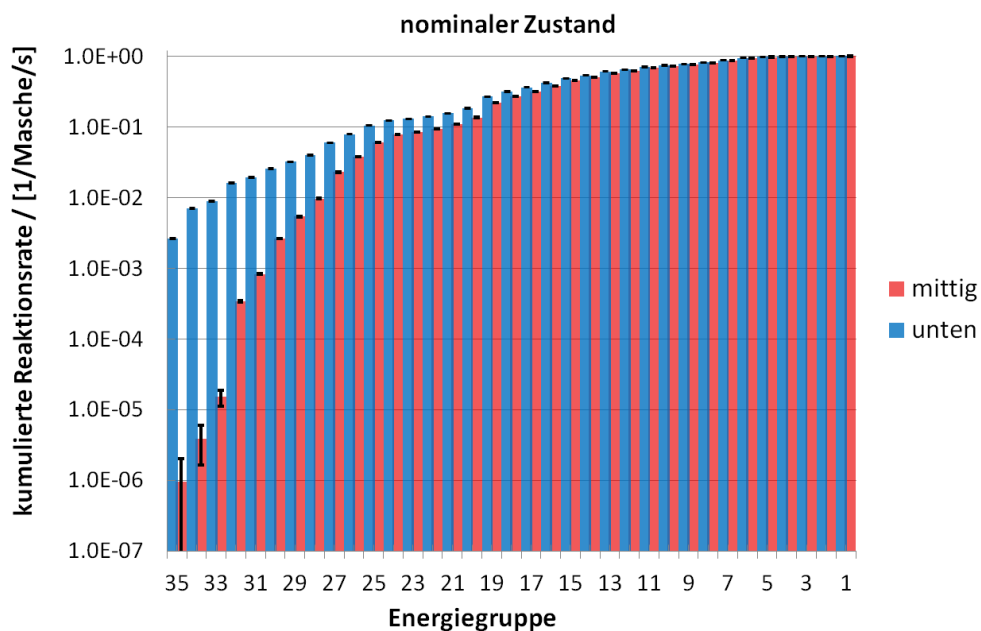


Abb. 4.9: Kumulierte Spaltraten für die untere und die mittlere Brennstoffzone im inneren Kern aus SERPENT2 Brennelement-Rechnungen mit reflektierenden Randbedingungen für den Nominalfall in 35 Energiegruppen, wobei Gruppe 35 die Gruppe mit der niedrigsten Energie ist. Das Fehlerintervall gibt den 2σ -Bereich an.

Die Behandlung der Durchgangskanäle (insbesondere im gevoideten Fall), die bei gezogenen Steuerstäben im Kern vorzufinden sind, sollten gesondert betrachtet werden. In diesem Bereich sind die Näherungen der Diffusionstheorie streng genommen nicht mehr zulässig, da der Diffusionskoeffizient stark anisotrop ist. Das Auftreten völlig entleerter Natriumkanäle unter den Absorbern ist rein physikalisch sehr unwahrscheinlich und kann für viele spezifische Probleme daher vernachlässigt werden. Aber um auch Störfälle bei Blockaden oder Gaseinbruch in den Regelelementkanälen simulieren zu können, wurde eine zusätzliche Routine in DYN3D implementiert. Die dazu verwendeten Näherungen werden im folgenden Abschnitt vorgestellt.

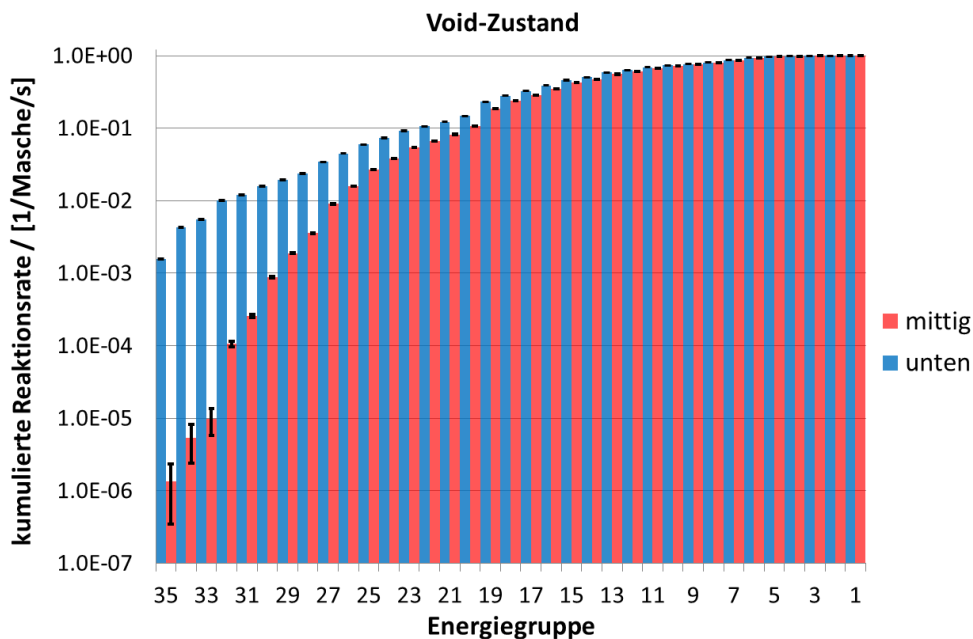


Abb. 4.10: Kumulierte Spaltraten für die untere und die mittlere Brennstoffzone im inneren Kern aus SERPENT2 Brennelement-Rechnungen mit reflektierenden Randbedingungen für den Voidfall in 35 Energiegruppen. Das Fehlerintervall gibt den 2σ -Bereich an.

4.4 Routine zur Korrektur des Diffusionskoeffizienten

Wie in Kapitel 2.1 beschrieben, werden die makroskopischen Querschnittsdaten in SERPENT2 durch eine Flusswichtung erzeugt. Damit ergibt sich für den Diffusionskoeffizienten in einer Energiegruppe g in einfacher Näherung für eine Masche:

$$\Sigma_{tr,g}(\vec{r}) = \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \Sigma_{tr}(\vec{r}, E) \phi(\vec{r}, E) dE}{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \phi(\vec{r}, E) dE} \Rightarrow D_g = \frac{1}{3\Sigma_{tr,g}} \quad (4.3)$$

Für Bereiche, in denen die Näherungen der Diffusionstheorie gelten, liefern Diffusionsrechnungen mit diesen Querschnitten gute Resultate. Es ist jedoch offensichtlich, dass ein richtungsunabhängiger Diffusionskoeffizient für eine Masche nur eine Näherung darstellen kann. Schon durch den geometrischen Aufbau der Brennelemente ist der axiale Anteil des Diffusionskoeffizienten höher als der radiale. Derzeit wird an Verbesserungen gearbeitet, um richtungsabhängige Diffusionskoeffizienten mit SERPENT2 generieren zu können [22]. Die Anwendung ist bisher nicht standardmäßig in SERPENT2 enthalten. Deutlich gravierender als im Brennelement selbst ist jedoch das Problem eines richtungsunabhängigen Diffusionskoeffizienten in einem gevoideten Kanal ohne innere Struktur, wie er z.B. in einem Störfall an den Positionen von Regelementen auftreten kann. Mit der Definition des Diffusionskoeffizienten $D = \frac{1}{3\Sigma_{tr}}$ wird der Neutronentransport in diesen Bereichen erheblich überschätzt, da in gevoideten Kanälen kein Material vorhanden ist und damit der Transportquerschnitt Σ_{tr} gegen Unendlich geht. Für solche Bereiche, in denen die Diffusionsnäherung aufgrund starker Anisotropie im Fluss nicht mehr gültig ist, muss der Diffusionskoeffizient modifiziert werden.

Daher wurde in DYN3D eine einfache Routine implementiert, die nach der internen Querschnittsinterpolation den Diffusionskoeffizienten für den „leeren“ Kanal modifiziert. Die Theorie basiert auf Arbeiten von Yoshida [97] und Rowlands/Eaton [82]. Betrachtet wird ein Modell, bei dem sich im Inneren der Kanal befindet, der ein Material mit geringer Dichte enthält und dessen Diffusionskoeffizient modifiziert werden soll. Das Material hat den Transportquerschnitt Σ_0 . Um den Kanal herum befindet sich der Kern mit dem Transportquerschnitt Σ_1 . Der zylindrische Kanal schließt axial mit der Fläche a ab. In Abbildung 4.11 ist das Modell dargestellt.

Korrektur für axiales Buckling

$$a^* = a(1 - \beta a) \quad \text{mit} \quad \beta = \frac{3\pi B_z}{8}$$

Bei symmetrischem Fluss gilt:

$$B_z = \frac{\pi}{h + 2d} = \frac{\pi}{h + 1.42 \frac{1}{\Sigma_1}}$$

Approximation aus Transporttheorie:

$$d = 0.71\lambda_{tr} = 0.71 \frac{1}{\Sigma_{tr}} = 0.71 \frac{1}{\Sigma_1}$$

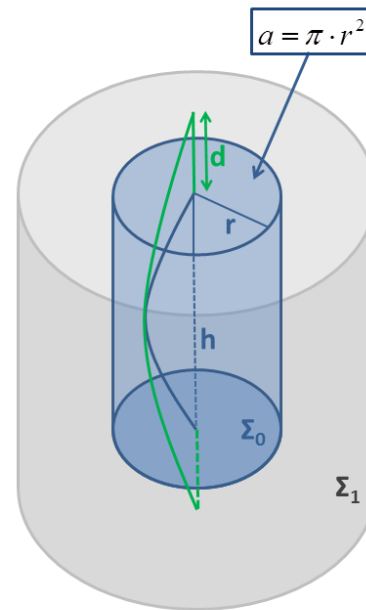


Abb. 4.11: Modell der „Superzelle“ zur Herleitung eines effektiven Diffusionskoeffizienten in Kanälen mit geringer Dichte.

Da der Fluss in axialer Richtung nicht konstant ist, sondern ein „Buckling“ auftritt, wird die Fläche a , die zum durchfließenden Neutronenstrom proportional ist, mittels eines Faktor β modifiziert, der vom Buckling B_z in axialer Richtung abhängt. Aus der Eingruppendiffusionstheorie erhält man durch einen Separationsansatz für die Ortsfunktion des Flusses die sog. Reaktorgleichung, in der das Buckling B beschrieben wird:

$$\Delta\Phi + B^2\Phi = 0 \quad (4.4)$$

Allgemein kann die Flussfunktion als Linearkombination der trigonometrischen Funktionen Kosinus und Sinus dargestellt werden. Ein einfacher Lösungsansatz ergibt sich, wenn der Fluss als symmetrisch angenommen wird. Dann kann die Flussfunktion allein durch einen Kosinusverlauf beschrieben werden, der an den Ränder verschwindet. In axialer Richtung gilt dann für den Fluss Φ_z in z -Richtung:

$$\Phi_z = A \cdot \cos(B_z x) \quad (4.5)$$

mit der Randbedingung $\Phi_z(+h/2) = \Phi_z(-h/2) = 0$, wobei h die Höhe des betrachteten Kanals beschreibt. Zu beachten ist nun, dass der Fluss an der Ober- und Unterkante des Kanals nicht instantan verschwinden kann. Daher wird eine Extrapolationslänge d eingeführt. Aus der Transporttheorie lässt sich ableiten, dass diese Extrapolationslänge mit $d = 0,71\lambda_{tr}$ angenähert werden kann [40]. Mit der Randbedingung, dass der Fluss bei Erreichen der Extrapolationslänge den Faktor Null annimmt und dem Kosinusansatz für die Flussfunktion, gilt somit für das Buckling B_z :

$$B_z \frac{h}{2} = \frac{\pi}{2} \Rightarrow B_z = \frac{\pi}{h + 2d} = \frac{\pi}{(h + 1.42/\Sigma_1)} \quad (4.6)$$

(Für λ_{tr} wird hier der Querschnitt des umgebenden Mediums verwendet, da sich die Extrapolationslänge aus diesem ergibt.) Mittels des Bucklings kann die modifizierte Fläche a^* nach Rowlands und Eaton [82] bestimmt werden (siehe Abbildung 4.11). Rowlands und Eaton zeigen [82] weiter, dass für den axialen Diffusionskoeffizienten des leeren Kanals in z -Richtung folgende Näherung verwendet werden kann:

$$D_z = \frac{1}{3\Sigma_1} \left[\left(2 - \frac{\Sigma_0}{\Sigma_1}\right) + \left(\frac{\Sigma_1}{\Sigma_0} - 2 + \frac{\Sigma_0}{\Sigma_1}\right) \cdot a^* \cdot \Sigma_0 \cdot T_z \right] \quad (4.7)$$

Die Funktion T_z ergibt sich aus Betrachtungen der Erststoßwahrscheinlichkeiten („first-flight collision probabilities“) zu

$$T_z = T_0 \left(1 + \frac{1}{2(1 + 4\eta)}\right) \quad (4.8)$$

wobei gilt:

$$\eta = a^* \Sigma_0 \quad (4.9)$$

$$T_0 = \frac{1 - \frac{1}{1+2\eta} \frac{2\mu\eta}{1+2\mu\eta}}{\eta} \quad (4.10)$$

$$\mu = \frac{4}{3} - e^{-0.3\eta} \quad (4.11)$$

Gleichung 4.7 wurde in DYN3D implementiert. Dabei wird zunächst die gängige Interpolationsroutine zur Ermittlung der neuen makroskopischen Querschnitte durchlaufen. Anschließend wird aus den den leeren Kanal umgebenden Brennelementen ein mittlerer Querschnitt Σ_1 bestimmt und damit nach 4.7 ein modifizierter Diffusionskoeffizient für den Kanal erzeugt.

Im folgenden Kapitel wird der Benchmark-Kern, für den die Querschnitte in 35 Energiegruppen mit den eben beschriebenen Variationen erzeugt wurden, im Detail vorgestellt. Neben der Modellierung des Kerns in SERPENT2, MCNP6 (für Vergleichsrechnungen) und DYN3D, wird auch die Diskretisierung in ASTEC-Na eingeführt, die bei Berechnung der Transienten verwendet wird. Um zu verifizieren, dass die erzeugte Querschnittsdatenbasis zur Beschreibung der Systemzustände des Kerns während

der Transienten geeignet ist, erfolgt ein Code-zu-Code-Benchmark, in dem auch Zustände mit gevoideten Steuerstabkanälen betrachtet werden. Die Ergebnisse zeigen, dass mittels der Korrektur des Diffusionskoeffizienten auch solche Zustände mit der Diffusionstheorie in DYN3D gut erfasst werden können.

5 Beschreibung und Modellierung des Benchmark-Kerns

5.1 Definition des Benchmark-Kerns

Die gekoppelten Neutronik-Thermohydraulik-Rechnungen werden an einem generischen Kern durchgeführt. Großer Vorteil von Benchmarks ist, dass die Randbedingungen eindeutig definiert sind. Nur so ist es möglich, durch Vergleich der Ergebnisse, Unterschiede, die aus der verwendeten Methodik resultieren, zu identifizieren. Zudem fehlen für reale Anlagen detaillierte Beschreibungen im Betrieb, insbesondere für späte Abbrandzustände. Weder die genauen Abmessungen einzelner Komponenten während des Betriebs (wie radiale Verteilung des Gaps oder axiale Ausdehnung aller Brennstäbe), noch detaillierte Angaben über Verteilungen von Spaltgasen, Porositäten in den Pellets oder eine exakte axiale Verteilung des Plutoniumgehaltes in den einzelnen Brennstäben sind zugänglich, sondern können nur abgeschätzt werden oder nach Abschalten des Reaktors ermittelt werden. Die Arbeitsgruppe für Reaktoren und Systeme der OECD/NEA (OECD/NEA Working Party on Reactor and System - WPRS) definierte in einem internationalen Neutronik-Benchmark [10] vier SFR Kerne mit unterschiedlicher Leistung sowie unterschiedlichen Brennstoffarten (carbidisch, metallisch, oxidisch).

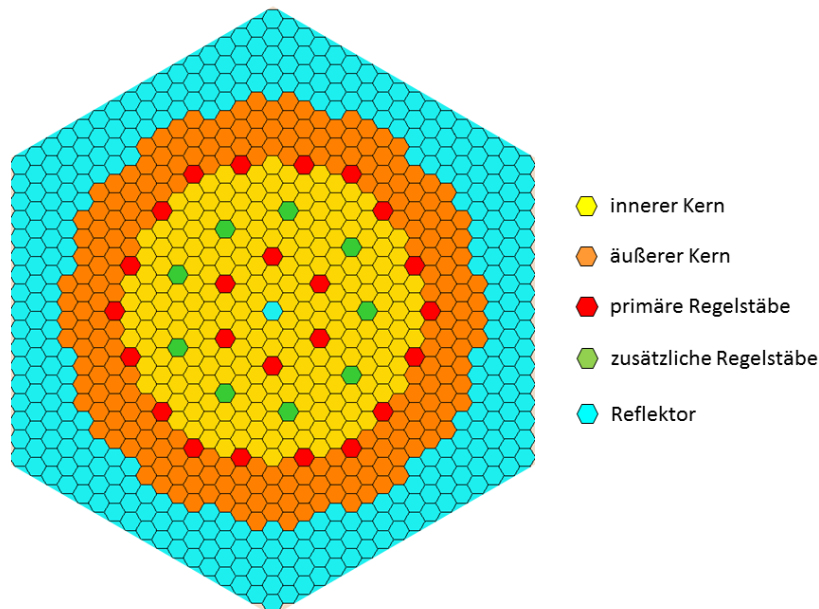


Abb. 5.1: Generischer Kern nach einem SFR-Neutronik-Benchmark der OECD/NEA [10]. Es handelt sich um einen „large oxide“ Kern mit einer Leistung von 3600 MWth.

In dieser Arbeit wird der „Large Oxide Core“, ein oxidischer Kern mit einer Leistung von 3600MWth für die gekoppelten Rechnungen verwendet. Abbildung 5.1 zeigt

einen Querschnitt durch Benchmark-Kern. Typisch für Brutreaktoren ist die Unterteilung der Brennstoffzone in einen inneren und einen äußeren Kern. Die Zonen enthalten unterschiedliche Nuklidzusammensetzungen, wodurch eine Spalt- und eine Brutzone entsteht. Der innere Kern setzt sich in diesem Fall aus 225 Brennelementen zusammen, während der äußere Kern 228 Brennelemente enthält. In den Brennelementen befinden sich jeweils 271 Brennstäbe. 330 radiale Reflektorelemente umgeben den Kern. Die Steuerung und Schnellabschaltung erfolgt über ein primäres und ein sekundäres Kontrollsystem, bestehend aus 24 bzw. 6 Elementen. Eine detaillierte Ansicht der Brenn- und Steuerelemente sowie die Beschreibung der geometrischen Abmessungen sind im nächsten Kapitel zur Modellierung des Kerns in SERPENT2 und MCNP6 aufgeführt.

Reaktorleistung (MWth)	3600
Einlasstemperatur (°C)	395
Auslasstemperatur (°C)	545
mittlere Temperatur (Strukturmaterial) (°C)	470
mittlere Brennstofftemperatur (°C)	1227

Tab. 5.1: Bedingungen im Nominalzustand für den SFR-Kern im Neutronik-Benchmark für Rechnungen ohne Thermohydraulik-Kopplung [10].

Für die folgenden Rechnungen wurde die Definition für den „EOC-Kern“ (End-of-cycle) verwendet. Dabei wird ein Abbrand von 100 GWd/tHM (410 äquivalente Volllasttage) angenommen. Die Spaltprodukte werden nicht explizit definiert, stattdessen wird dem Brennstoff Molybdän zugefügt, sodass der Absorption durch Spaltprodukte Rechnung getragen wird. Axial ist die Brennstoffzone (aktiver Kern) in fünf Teile untergliedert, wodurch eine grobe Abbrandverteilung wiedergegeben wird. Unter dem Brennstoff befindet sich ein axialer Reflektor gefolgt von einem Gasplenum. Oberhalb der aktiven Kernzone schließt sich ein Gasplenum und ebenfalls ein axialer Reflektor an. In Tabelle 5.1 sind die Bedingungen für den Nominalzustand beschrieben. Der Referenzfall bezieht sich im Folgenden auf Rechnungen, denen die Nominalbedingungen zugrunde liegen. In diesem Fall befinden sich die Steuerelemente über dem Kern und die Temperaturverteilung im Brennstoff wird zunächst als konstant angenommen. Die „leeren“ Kanäle im aktiven Teil des Kerns, die unter den ausgefahrenen Steuerstäben positioniert sind, sind im Referenzfall mit Natrium gefüllt.

5.2 Modellierung in SERPENT2, MCNP6 und DYN3D

Um zu überprüfen, ob der Diffusionscode DYN3D mit den eigens erzeugten Querschnitten zuverlässige Resultate liefert, wurden Vergleiche mit validierten MC Tools durchgeführt. Gleichzeitig diente SERPENT2 zur Querschnittserzeugung. Da Monte Carlo Codes keinerlei Einschränkungen in der geometrischen Modellierung erfordern, wurden sowohl für SERPENT2 als auch MCNP6 Eingabedatensätze mit detaillierter, heterogener Geometriedarstellung erstellt. Da sich die Input-Modelle kaum unterscheiden, werden sie nicht gesondert beschrieben. In Abbildung 5.2 ist der innere Aufbau

der Brennelemente sowie der primären und sekundären Regelemente zu sehen. Jedes dieser Elemente enthält einen Führungskasten aus Stahl (gelb), in dem die einzelnen Stäbe auf einem hexagonalen Gitter angeordnet sind. Der Abstand gegenüberliegender Seiten des Führungskastens beträgt in etwa 21cm. Zwischen benachbarten Elementen befindet sich jeweils ein schmaler Spalt, der im Referenzfall mit Natrium gefüllt ist. Die Kontrollelemente enthalten Stäbe aus Borcarbid, einem starken Neutronenabsorber. Im primären Abschaltssystem wird Bor in seiner natürlichen Zusammensetzung verwendet, während das Sekundärabschaltssystem angereichertes Bor-10 verwendet wird.

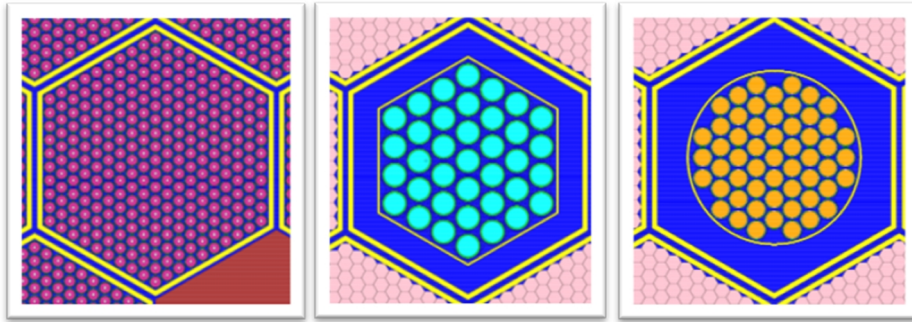


Abb. 5.2: *Heterogene Modellierung in SERPENT2 und MCNP6 von Brennelementen (links), Regelementen des primären (mittig) und des sekundären (rechts) Abschaltsystems. Die Brennelemente enthalten 271 Brennstäbe, die mit Hohlpellets gefüllt sind. Die Geometrie der Brennelemente von innerem und äußerem Kern sind identisch.*

Das Borcarbid und die Brennstäbe sind von einem Hüllrohr aus Stahl ummantelt. Die Abstandshalter, die als dünner Draht um die Brennstäbe gewickelt werden, um einen Verschluss der Kühlkanäle zu verhindern, sind nicht explizit definiert, sondern sind in der Definition über das Volumen des Hüllrohrs berücksichtigt. Axial sind die Brennelemente in 9 Zonen unterteilt: zwischen den Reflektorzonen und den Gasplena befindet sich der ca. 100cm lange aktive Kern. In Abbildung 5.3 ist ein Längsschnitt durch ein Brennelement zu sehen. Geometrisch unterscheiden sich die Brennelemente des inneren und des äußeren Kerns nicht. Auch die Reflektorzonen und die Gasplena sind, analog zur Brennstoffzone, heterogen modelliert. Anstelle der Brennstoffpellets befindet sich in diesen Zonen Stahl bzw. Helium in den Hüllrohren. Zur Berücksichtigung einer groben Abbrandverteilung ist die Brennstoffzone axial in fünf Abschnitte von jeweils 20 cm unterteilt (Abbildung 5.3, links), für die jeweils eine gesonderte Nuklidzusammensetzung gegeben ist.

Diskretisierung in DYN3D Für den Diffusionscode DYN3D erfolgt eine Homogenisierung. Dabei wird in radialer Richtung jeweils ein Element als eine Masche modelliert (Einteilung entspricht Abbildung 5.1). In axialer Richtung ist der Kern zunächst nach Benchmark-Definition in neun Zonen unterteilt. Zur Erstellung der Querschnitte werden die neun axialen Zonen berücksichtigt. Das untere Gasplenum und die Reflektoren sind entsprechend Abbildung 5.3 modelliert. Für die transienten Rechnungen werden die fünf axialen Brennstoffzonen im aktiven Kern in jeweils drei kleinere Maschen unterteilt. Damit ergeben sich insgesamt 15 Brennstoffzonen mit ca. 6,67cm Höhe für die gekoppelten Rechnungen und eine feinere axiale Temperatur-, Dichte- und Leis-

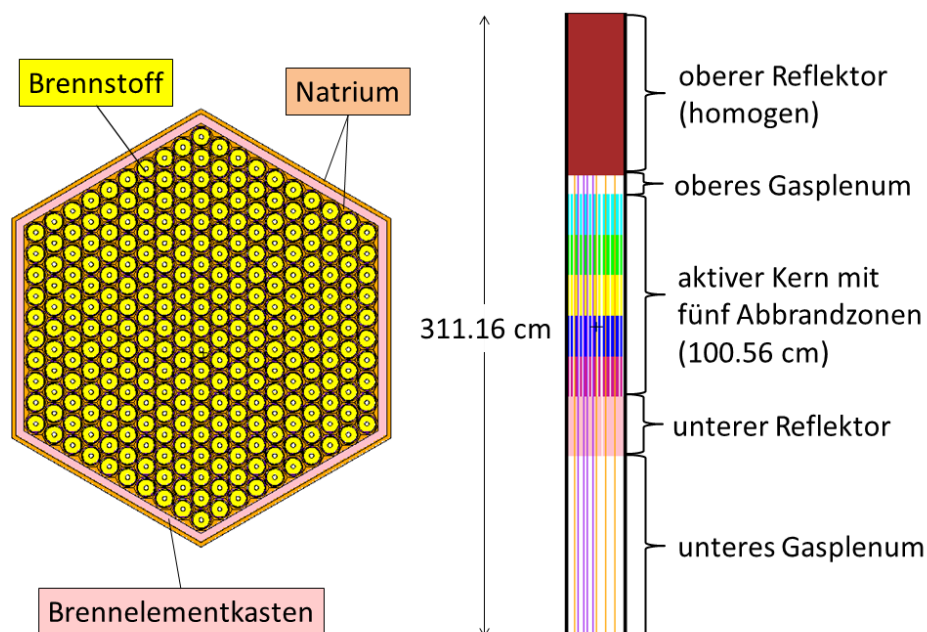


Abb. 5.3: Modellierung in SERPENT2 und MCNP6. links: Querschnitt durch ein Brennelement. rechts: Axialer Schnitt durch ein Brennelement.

tungsverteilung kann verwendet werden. Zur Interpolation des makroskopischen Maschenquerschnitts greifen demnach jeweils drei aufeinanderfolgende Brennstoffzonen auf die gleiche Datenbasis zurück. Jedoch werden bei der Interpolation individuelle Maschenparameter berücksichtigt. Das obere Gasplenum, für das ebenfalls eine einzige Querschnittsdatenbasis generiert wurde, wird für die Transiente in zwei Maschen unterteilt. So kann die thermische axiale Ausdehnung des Kerns besser berücksichtigt werden, bei der sukzessive Brennstoff nach oben wandert. Bei der Ausdehnung wird eine Volumen gewichtete Vermischung von Brennstoffmasche und Gasmasche angenommen. Somit ermöglicht eine Unterteilung des Gasplenums eine detailliertere Beschreibung dieses Phänomens. In der Neutronikrechnung wird der Kern mit sämtlichen radialen Reflektorelementen modelliert (Abbildung 5.1). In axialer Richtung endet das Modell mit dem unteren Gasplenum und dem oberen Reflektor. Sowohl axial als auch radial werden Vakuum-Randbedingungen angenommen. Überschreitet ein Neutron die äußeren Grenzen des Modells, verschwindet es aus dem System und wird nicht reflektiert.

5.3 Validierung des Modells und der Querschnittsdaten für DYN3D

Um zu überprüfen, ob die verwendeten Modelle und die erzeugten Querschnitte plausible Ergebnisse liefern, wurden Rechnungen zu verschiedenen Reaktorzuständen, d.h. Variationen in den Parametern, durchgeführt. Neben dem Multiplikationsfaktor k_{eff} (Abbildung 5.4), wurden auch Reaktivitätskoeffizienten (Abbildung 5.5) ermittelt. Die Definition der Koeffizienten wurden dem Benchmark entnommen. Der Void-Koeffizient wird definiert als Reaktivitätsdifferenz des Referenzzustandes zum Fall, wenn der aktive

Kern kein Natrium mehr enthält:

$$\Delta\rho = \rho_{void} - \rho_{nominal} \quad (5.1)$$

Als „aktiver Kern“ sind alle Zonen, die Brennstoff enthalten, zu verstehen. Zur Validierung der Beschreibung der Temperatureffekte auf die Brennstoffquerschnitte wird der Dopplerkoeffizient betrachtet, der sich aus der Differenz der Reaktivität des Kerns bei doppelter Brennstofftemperatur und der Reaktivität im Nominalfall ergibt:

$$K_D = \frac{\rho_{high} - \rho_{nominal}}{\ln 2} \quad (5.2)$$

Zusätzlich wurde im Benchmark ein „Control Rod worth“ (CR-Koeffizient) bestimmt, mit dem die berechnete Reaktivität der Steuerstäbe verglichen werden kann. Der CR-Koeffizient ist die Differenz der Reaktivität im Referenzfalls und der Reaktivität bei voll eingefahrenen Steuerstäben. Die Abbildungen 5.4 und 5.5 zeigen die Ergebnisse der k_{eff} -Werte für verschiedene Fälle. Verglichen werden die beiden MC-Resultate, erhalten mit SERPENT2 und MCNP6, mit den Werten, die aus der Diffusionslösung mit DYN3D stammen. Zusätzlich wurde mit Ergebnissen aus dem Benchmark verglichen [13], an dem mehrere Institute mit unterschiedlichen Codes teilgenommen haben. Die Spanne der Benchmark-Resultate ist durch den grau unterlegten Bereich gekennzeichnet. Dabei ist zu erwähnen, dass sich die Differenzen nicht allein durch das Anwenden unterschiedlicher Codes ergeben, sondern auch durch Verwendung unterschiedlicher Modelle (heterogene/homogene Modellierung) und unterschiedlicher nuklearer Daten (JEFF, JENDL [86], ENDF/B; kontinuierliche Daten, Gruppendaten). Der Mittelwert aus dem Benchmark ist in blau eingetragen. Der statistische Fehler der MC-Rechnungen liegt für sämtliche Simulationen zur Bestimmung des Multiplikationsfaktors bzw. der Reaktivität deutlich unter einem Promille und ist somit so klein, dass er im Schaubild nicht dargestellt werden kann.

Der Vergleich des Referenzfalls zeigt, dass die Ergebnisse der MC Codes gut mit der DYN3D Lösung übereinstimmen. Der Benchmark-Wert liegt leicht erhöht, ergibt sich aber auch aus mehreren Datensätzen und Modellansätzen. Die Werte liegen dennoch im Bereich der Benchmarkresultate. Im Benchmark konnte gezeigt werden, dass mit ENDF/B-7.1 Daten grundsätzlich niedrigere Absolutwerte erhalten werden, was hiermit nochmals bestätigt wird. Auch für die Variationen zeigt sich, dass mit DYN3D und den erzeugten Querschnitten die Multiplikationsfaktoren denen der MC-Rechnungen nahe kommen und DYN3D durchaus zur Beschreibung der einzelnen Zustände herangezogen werden kann. Neben den im Benchmark definierten Größen, wurden weitere Fälle untersucht. Unter anderem wurden verschiedene Voidzustände gerechnet, wobei sich die Prozentzahl nun nicht auf den aktiven Kern bezieht, sondern im gesamten Kern gevoidet wurde, um die implementierte Näherung für gevoidete Kanäle zu testen. Bei 20% Void befinden sich noch 80% des ursprünglichen Natriuminventars im System. Auch hier folgen die Resultate aus DYN3D den SERPENT2 Ergebnissen. Mittels der modifizierten Diffusionskoeffizienten können auch solche Zustände simuliert werden. Zusätzliche Variationen in Natriumichte (Void) und Brennstofftemperatur (T) bestätigen, dass auch sämtliche Mischzustände mit DYN3D richtig beschrieben werden. Auffällig ist, dass sich die DYN3D-Werte stets etwas unterhalb der SERPENT2 Ergebnisse befinden. Kleine Unterschiede in den Absolutwerten spielen für Transienten jedoch keine Rolle. Wichtiger ist es hier, die Reaktivitätsänderungen, also die Rückwirkung

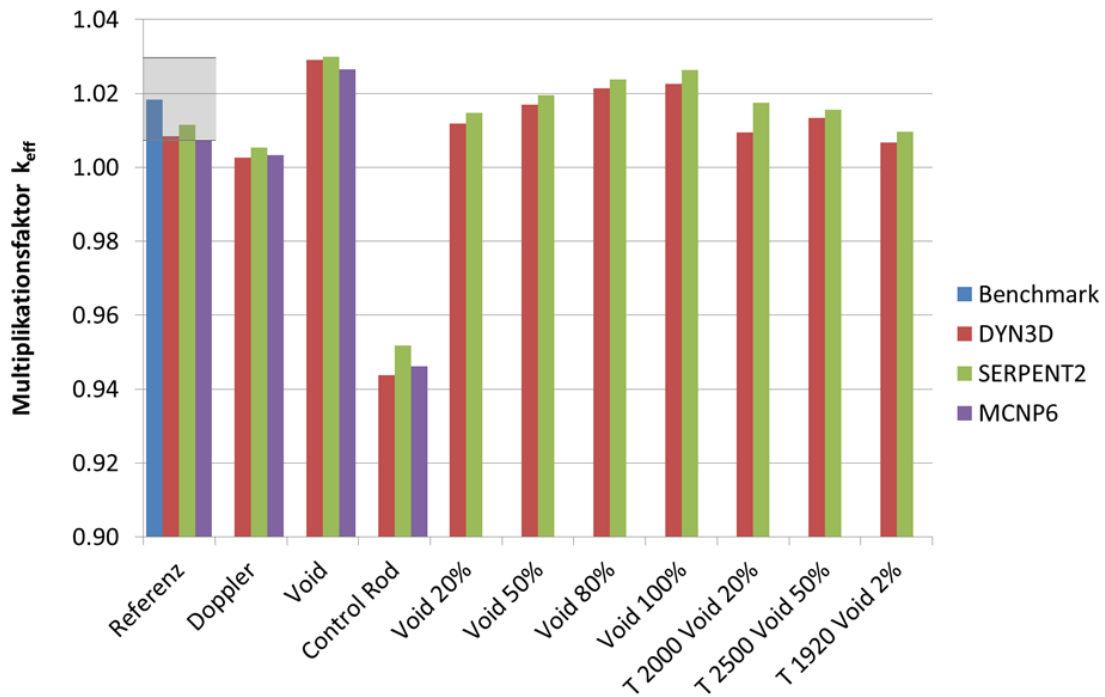


Abb. 5.4: Ergebnisse zur Berechnung des Multiplikationsfaktors. Der grau unterlegte Bereich zeigt die Verteilung der Benchmark-Resultate [13].

durch Änderungen im System, zu betrachten. Diese sind in Abbildung 5.5 dargestellt. Im Diagramm sind die Beträge $|\Delta\rho|$ aufgetragen, wodurch in der Darstellung auch negative Beiträge entlang der positiven Achse dargestellt sind. Der Dopplereffekt und das Einfahren der Steuerstäbe bewirken eine Verminderung der Reaktivität im System, während es im Voidfall zu einer positiven Rückwirkung kommt. Für den Doppler-, den CR- und den Voidwert zeigt sich bei Vergleich der drei verwendeten Codes eine gute Übereinstimmung, auch mit dem Benchmark. Die starke Streuung für den CR-Wert im Benchmark kann hauptsächlich auf die Modellierung der Steuerelemente (homogen oder heterogen) zurückgeführt werden. Es zeigt sich, dass für die Voidwerte die Reaktivitäten aus DYN3D überwiegend oberhalb der SERPENT2-Werte liegen, während für den Dopplerwert das Verhältnis umgekehrt ist. Damit sind die Rückwirkungen von DYN3D, die für die hier betrachteten Störfälle relevant sind, konservativ bezogen auf die SERPENT2 Ergebnisse.

Neben den globalen Werten für Multiplikationsfaktoren und Reaktivitäten bezogen auf den Kern als Ganzes, wurden auch lokale Werte verglichen. Dazu zeigt Abbildung 5.6 den relativen Unterschied in der Leistungsverteilung der axial mittleren Brennstoffzone. Der relative Unterschied zwischen DYN3D und SERPENT2 bewegt sich im inneren des Kerns in einem Bereich kleiner $\pm 2\%$. Im Außenbereich tritt ein größerer Fehler auf, da die Querschnitte der Brennstoffelemente aus Brennelement-Rechnungen mit reflektierenden Randbedingungen ermittelt wurden und dabei der Einfluss benachbarter Reflektorelemente nicht direkt berücksichtigt ist. Der Vergleich der DYN3D Leistungsverteilung mit MCNP6 ergibt Differenzen unter 2% im inneren Kern und bis zu 5% im Außenbereich. Auffällig ist hier die Asymmetrie, was mit einer nicht-konvergierten Quellverteilung zusammenhängen könnte. Für Ganzkernrechnungen werden konvergier-

te Quellverteilungen oft erst nach sehr langen Rechenzeiten erreicht. Dennoch sind die Ergebnisse mit einem Fehler unter 5% für den gesamten Kern beim Vergleich zwischen SERPENT und DYN3D für die hier vorgesehene Anwendung als gut zu bewerten.

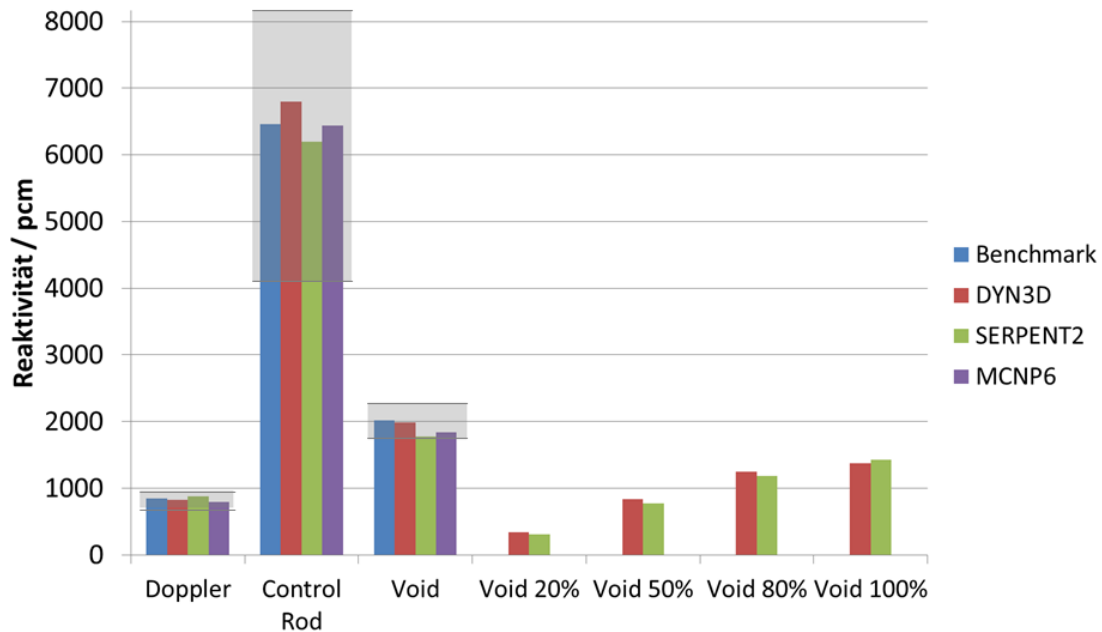


Abb. 5.5: Beträge der Reaktivitätsdifferenzen für verschiedene Fälle bezogen auf die Reaktivität im Nominalzustand. Der grau unterlegte Bereich zeigt die Verteilung der Benchmark-Resultate.

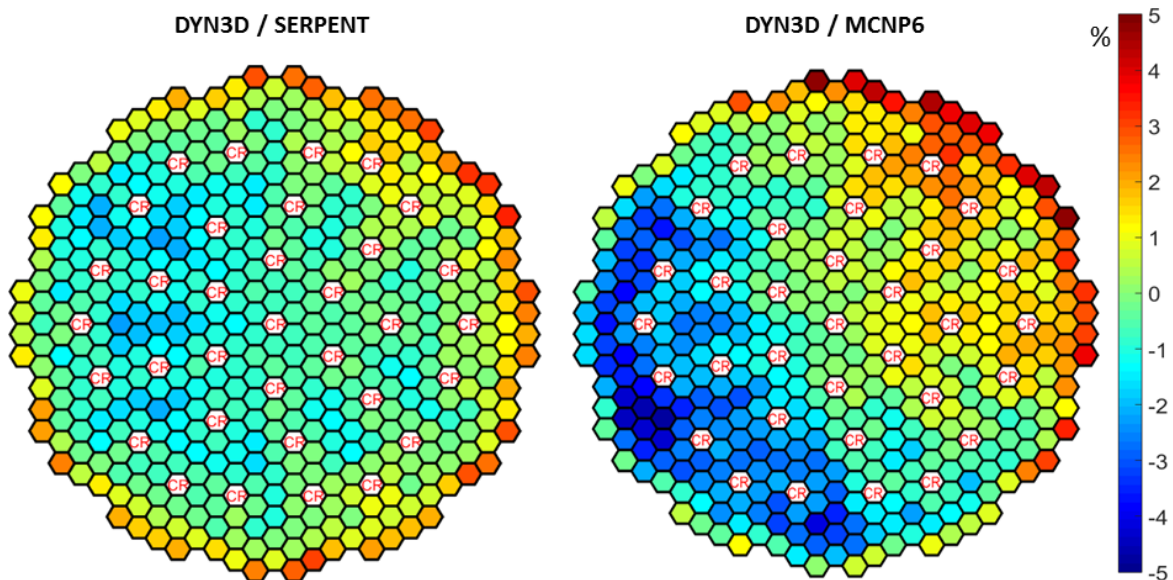


Abb. 5.6: Relative Differenz in der radialen Leistungsverteilung über den gesamten Kern auf Höhe der mittleren Brennstoffzone. Positionen, an denen sich Steuerelemente befinden, sind mit „CR“ gekennzeichnet.

5.4 Modell des Benchmarkkerns in ASTEC-Na

Um gekoppelte Rechnungen durchführen zu können, wurde in ASTEC-Na ein Modell für den ‘Large Oxide‘ Kern erstellt. In Abbildung 5.7 ist die Einteilung der Brennelemente zu sehen. Diese werden über dreizehn Makros beschrieben, wobei Brennelemente, die auf demselben Ring liegen, zusammengefasst werden und mit der Anzahl der Brennelemente pro Ring gewichtet werden. Auch die Kontrollelemente, die denselben Ring besetzen, sind über ein repräsentatives Makro modelliert und werden entsprechend gewichtet. Axial ist der aktive Kern analog zu DYN3D in 15 Zonen unterteilt. Zusätzlich wurde in ASTEC-Na eine Unterteilung der axialen Reflektoren und der Gasplena durchgeführt, so dass insgesamt 32 axiale Maschen entlang des Brennelements mit Reflektoren und Gasplena entstehen. Die feinere axiale Auflösung (im Vergleich zur Neutronik) verhindert starke Gradienten in den thermodynamischen Größen zwischen benachbarten Maschen während der Transienten. Bei der Modellierung mit 32 axialen Ebenen befindet sich der aktive Kern auf den Ebenen 11 - 26.

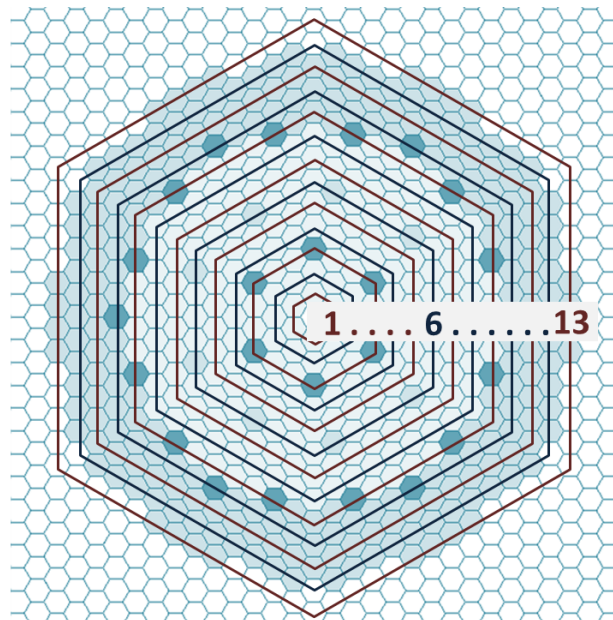


Abb. 5.7: Modellierung des Kerns in ASTEC-Na. Brennelemente auf einem „Ring“ werden durch ein Makro beschrieben.

Die Makros werden in ASTEC-Na über einen repräsentativen Brennstab beschrieben. Dieser Brennstab erhält ein Gewicht, das sich aus dem Produkt der Anzahl der Brennstäbe und der Anzahl der Brennelemente in einem Ring ergibt. Die Pellets sind radial in vier Zonen unterteilt, damit eine radiale Temperaturverteilung in den Brennstäben berücksichtigt werden kann. Mittels eines „Super-Makros“ werden dem Programm Informationen über den Brennelementkasten und die Brennstabanordnung übergeben. Damit ist der hydraulische Durchmesser der einzelnen Zonen festgelegt. Neben den Makros werden weitere Komponenten wie z.B. die Hauptkühlmittelpumpe definiert, mit der der Durchsatz geregelt wird. Die Reflektorelemente sind in ASTEC-Na nicht modelliert. Der Kern wird über sog. „Connections“ mit einem Einlass- und einem Auslassvolumen verbunden, die vom CEASR-Modul zur Berechnung der Thermohydraulik im Primärkreislauf nötig sind. Für beide Transienten, die im folgenden

Kapitel betrachtet werden, ist der Ausgangszustand identisch. Das Natrium hat dabei eine Einlasstemperatur von 668K. Zusätzlich wird der Massenstrom des Natriums mit 23000kg/s vorgegeben und der Druck im Auslassvolumen auf $4,273 \cdot 10^5$ Pa gesetzt. Der Druckgradient stellt sich entsprechend der Randbedingungen ein. Informationen über die axiale und radiale Leistungsverteilung erhält ASTEC-Na vom Neutronik-Code DYN3D.

Die in diesem Kapitel eingeführten Modellierungen, Diskretisierungen und Randbedingungen in DYN3D und ASTEC-Na werden für beide Störfälle, also UTOP und ULOF, als Startbedingungen vorgegeben. Bei der Auswertung werden jeweils Diagramme zu speziellen Brennelementen angegeben. Zur Orientierung sind die Positionen dieser Brennelemente im Kern in Abbildung 5.8 angegeben. Die Bezeichnung der axialen Ebenen entspricht im Folgenden der axialen Diskretisierung aus ASTEC-Na, bei der die Ebenen 11-26 (im kalten Zustand äquidistant) den aktiven Kern mit Brennstoff umfassen. Ebene 18 befindet sich zentral im Kern.

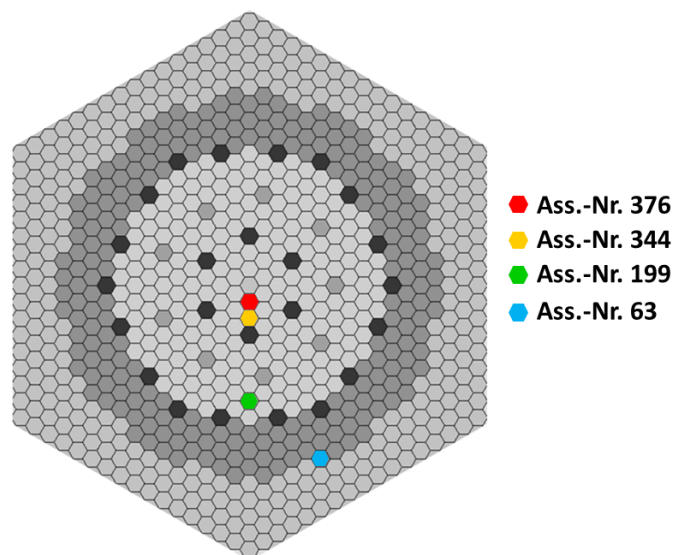


Abb. 5.8: Positionen von Brennelementen im Kern, die in der Auswertung genauer betrachtet werden.

6 Anwendung des gekoppelten Systems DYN3D/ASTEC-Na auf einen SFR-Kern

Im Folgenden werden Ergebnisse zu zwei berechneten Störfallszenarien dargestellt und diskutiert. Zunächst wird in beiden Störfallszenarien ein allgemeiner Verlauf betrachtet. Es erfolgt eine detaillierte Datenanalyse relevanter Parameter wie der Leistung, der Temperaturen, des Neutronenflusses und der Entwicklung der Reaktivität. Diese Betrachtung erlaubt eine Beurteilung, welcher Schaden am Gesamtsystem durch die erzwungene Störung zu erwarten ist. Die detaillierte Beschreibung des Störfallverlaufs wird in beiden Fällen, also UTOP und ULOF, für eine Rechnung mit definierter Zeitschrittweite und festgelegter Gapweite durchgeführt. Anschließend soll aufgezeigt werden, warum die verwendete Zeitschrittweite gewählt wurde. Für beide Störfälle wurden zusätzlich Rechnungen mit variierender Gapweite durchgeführt. Die Gapweite ist maßgeblich für den Wärmetransport vom Brennstoff über das Hüllrohr zum Natrium verantwortlich. Leider bietet der generische Benchmarkkern keinerlei Daten bezüglich Spaltgasinventar im Zwischenraum von Pellet und Hüllrohr und über die axiale Verteilung der Gapweite. Die Variation wird zeigen, wie wichtig eine detaillierte Beschreibung des Gaps für zuverlässige Analysen zu realen Systemen ist. Vor der Diskussion der Ergebnisse sei nochmals auf die Modellierung des Kerns in ASTEC-Na verwiesen, die in Kapitel 5 eingeführt wurde. Der Kern ist axial in 32 Zonen aufgeteilt. Die Ebenen 11 bis einschließlich 25 enthalten Brennstoff und bilden den aktiven Kern. Ebene 18 liegt damit in der Mitte des aktiven Kerns. Radial ist der Kern in 13 Ringe unterteilt, für die in ASTEC-Na je ein repräsentatives Brennelement simuliert wird. Ring 1 ist der innerste Ring und Ring 13 befindet sich außen am radialen Reflektor. Ebenso wurden die Brennstoffpellets in der Modellierung radial in vier Zonen unterteilt. Im Folgenden beschreibt die mittlere Brennstofftemperatur in einer Masche die Temperatur, die sich durch Bilden des Mittelwerts aus den vier Zonen ergibt. Die maximale Brennstofftemperatur berücksichtigt nur die innerste, heißeste Zone im Pellet. Bei den Schaubildern ist zu beachten, dass die Zeitschrittweite nicht konstant ist. Vielmehr wurden die Zeitschritte so gewählt, dass für starke Gradienten in den Parametern eine Reduktion des Zeitschrittes vorgenommen wurde.

6.1 Reaktivitätszufuhr bei Versagen der Schnellabschaltung - UTOP

6.1.1 Beschreibung des UTOP

Zur Untersuchung eines UTOP-Störfalls wird ebenfalls auf das OECD/NEA Benchmark zurück gegriffen. In kürzester Zeit (40ms) soll dem System eine zusätzliche Reaktivität von $1,8\ \$$ zugeführt werden. Nach 20ms soll die externe Reaktivität innerhalb von 40ms wieder auf null zurückfallen (Abbildung 6.1).

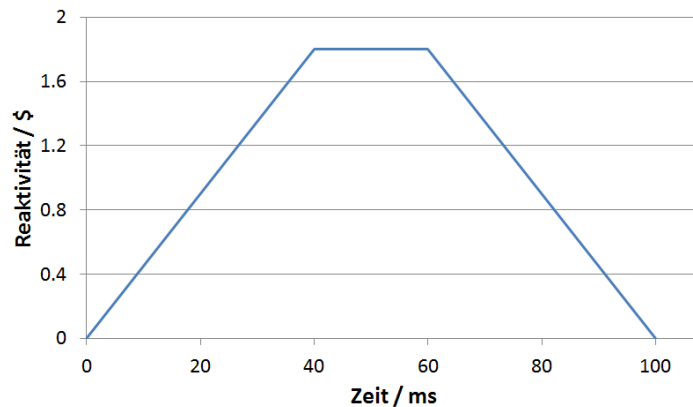


Abb. 6.1: Verlauf der externen Reaktivitätszugabe im UTOP definiert nach Benchmark OECD/NEA. Dem Reaktor soll innerhalb von 40ms eine externe Reaktivität von $1,8\ \$$ zugeführt werden, die 20ms aufrechterhalten wird. Im Anschluß soll die externe Reaktivität innerhalb von 40ms wieder aus dem System genommen werden.

Solch eine plötzliche Systemstörung könnte in Realität beispielsweise durch eine Blase verursacht werden, die den Kern durchläuft und dabei kurzzeitig lokal das Kühlmittel vollständig verdrängt. Da solch ein Szenario aufgrund numerischer Probleme durch sprungartige Änderung sensibler Parameter äußert schwer direkt simuliert werden kann, werden für Simulationen zu solch externen Reaktivitätseinträgen oft „Ersatzszenarien“ verwendet.

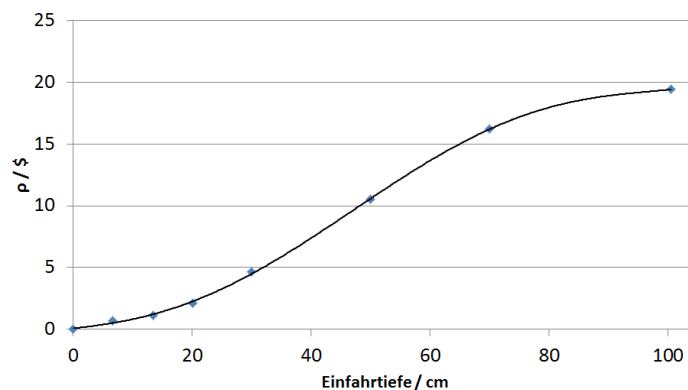


Abb. 6.2: Reaktivität in Abhängigkeit der Steuerstabstellung ermittelt aus stationären Neutronik-Rechnungen.

Im Speziellen wurden hier sämtliche Steuerstäbe im Nominalfall teilweise in den

Kern eingefahren und die Reaktivitätszufuhr in der Transienten über ein Verfahren der Steuerstäbe realisiert. Die Einfahrtiefe, die einer Reaktivität von 1,8\$ entspricht, wurde dabei in stationären Rechnungen für den generischen Benchmark-Kern vorab bestimmt. Abbildung 6.2 zeigt die Ergebnisse der stationären Rechnungen, aus denen die Reaktivitätsänderung des Systems in Abhängigkeit der Steuerstabstellung abgeleitet wurde. Bei einer Einfahrtiefe von ca. 17cm erhält man eine zusätzliche Reaktivität von 1,8\$. Die Abhängigkeit der Reaktivität von der Einfahrtiefe im Bereich bis 1,8\$ folgt näherungsweise einem linearen Zusammenhang. Durch eine entsprechende zeitabhängige Ausfahrkurve kann der Reaktivitätseintrag exakt linear modelliert werden. Darauf wurde in den späteren Rechnungen jedoch verzichtet, da es lediglich darum geht, zu zeigen, dass mittels des hier entwickelten Analysetools das Berechnen eines beachtlichen externen Reaktivitätseintrags möglich ist. Die neutronischen und thermohydraulischen Randbedingungen und Diskretisierungen, die der Simulation zugrunde liegen, sind Kapitel 5.2 bzw. Kapitel 5.4 zu entnehmen.

6.1.2 Ergebnisse für den UTOP-Störfall

6.1.2.1 Allgemeiner Verlauf

Zunächst soll der allgemeine Verlauf und die sich dabei ergebenden Änderungen in den neutronischen und thermohydraulischen Parametern während eines UTOPs mit 1,8\$ Reaktivitätseintrag für den generischen Kern gezeigt werden. Die folgenden Ergebnisse resultieren aus einer Simulation mit einer Makro-Zeitschrittweite von $dt=1ms$, auf die später eingegangen wird, und einer Gapweite von 0,1mm. Die externe Störung wird durch eine relative Verschiebung von Brennstoff und Absorber eingeleitet. Dazu befinden sich im stationären Zustand sämtliche Steuerelemente so weit im aktiven Kern, dass durch vollständiges Ziehen eine zusätzliche Reaktivität von 1,8\$ in den Reaktor gebracht werden kann. Die Analyse zum Reaktorverhalten bei Ziehen der Steuerstäbe ist in Unterabschnitte gegliedert: Zunächst erfährt das System eine Änderung im Neutronenfluss bzw. -spektrum. Daher geht der Analyse eine kurze Einführung über das vorherrschende Neutronenspektrum im SFR und die Wirkung des Steuerstabs auf das Neutronenspektrum voraus. Die Änderung im Fluss wirkt sich unmittelbar auf die Reaktionsraten und damit auf die Leistungsproduktion aus. Nach Betrachtung der Leistungsentwicklung werden die damit verbundenen Änderungen in der Brennstofftemperatur analysiert. Im gleichen Zuge wird auf die damit verknüpfte Änderung in der Hüllrohr- und der Kühlmitteltemperatur sowie thermische Ausdehnungen eingegangen. Änderungen in den thermohydraulischen Parametern sind stets mit einer Rückwirkung auf die Reaktivität verbunden. Eine Aufspaltung der Gesamtreaktivität und Zuordnung zum jeweiligen Parameter geben abschließend einen Einblick, welche Effekte maßgeblich für den Verlauf der Transienten verantwortlich sind.

6.1.2.2 Entwicklung des Neutronenflusses

Die Leistung ist direkt mit dem Neutronenfluss verknüpft, da vornehmlich Spaltreaktionen zur Energieproduktion beitragen. Damit wird in Kernregionen mit höherem Neutronenfluss und ähnlichem Brennstoffinventar auch mehr Leistung erzeugt als in Regionen mit einem niedrigerem Neutronenfluss. Das Leistungsmaximum liegt erwartungsgemäß axial und radial mittig im Kern. Demzufolge sollte an diesen Stellen auch

der Neutronenfluss am höchsten sein. In Abbildung 6.3 ist das Flussspektrum für verschiedene axiale Ebenen eines Brennelements des innersten Rings 1 dargestellt (links) sowie die Spektren dreier Brennelemente auf verschiedenen Ringen auf Höhe Kernmitte (rechts) zum Zeitpunkt $t=0,0s$ (gekoppelter, stationärer Zustand). Die Spektren sind in der zuvor diskutierten 35-Gruppen-Struktur aus DYN3D dargestellt. Zu beachten ist die doppelt logarithmische Auftragung. Niedere Energiegruppen, die am linken Rand des Spektrums liegen, sind extrem schmal und spielen daher beim Gesamtverhalten des Reaktors eine untergeordnete Rolle (Auftragung hier pro MeV). Daher wird trotzdem die Spektren im thermischen Bereich im unteren und oberen Teil des Kerns höher liegen als in der Mitte des Kerns, die größte Leistung in der Kernmitte produziert. Entscheidend ist hierfür das Spektrum im epithermischen Bereich, wo die rote Kurve (Kernmitte) über den anderen liegt. Die Erhöhung im thermischen Spektrum an den Ränder des Kerns resultiert aus der Nähe zum Reflektor, in dem die Neutronen abgebremst werden und zurück in den Kern gelangen können. Vergleicht man die Spektren in radialer Richtung des Kerns (Abbildung 6.3), so sieht man, dass im innersten Ring, auf dem Brennelement Nr.376 liegt, das epithermische Spektrum am höchsten ist und daher dort die höchste Leistung zu erwarten ist. Das Spektrum für den äußersten Ring (Brennelement Nr.63) liegt ab einer Energie von ca. $10^{-4} MeV$ deutlich unter den anderen Spektren, da am äußeren Rand besonders für schnelle Neutronen eine hohe Leckage auftritt und die Neutronen das System verlassen können. Auffällig ist der enorme Abfall des niederenergetischen Neutronenspektrums für das Brennelement 199 auf dem 7.Ring. Im Gegensatz zu den anderen beiden gezeigten Brennelementen befinden sich hier vermehrt Steuerelemente in der Umgebung. Diese Steuerelemente enthalten Bor, dessen Absorptionsverhalten einem $1/\sqrt{E}$ -Gesetz folgt. Damit werden Neutronen mit abnehmender Energie besser eingefangen. Aufgrund der vorherrschenden Neutronenverteilung kann abgeleitet werden, dass vor Beginn der Transienten die höchste Leistung sowohl axial als auch radial zentral im Kern produziert wird.

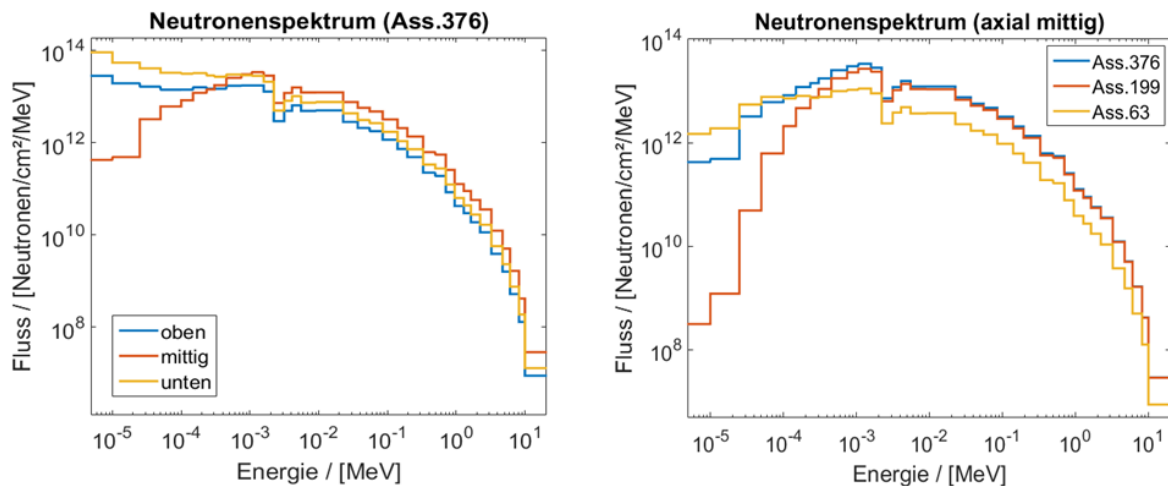


Abb. 6.3: Lokale Abhängigkeit des Neutronenspektrums. Aufgetragen sind die Neutronen pro cm^2 und MeV in jeder der 35 Energiegruppen über der Energie. links: Neutronenspektren in axialer Richtung für Brennelement 376. rechts: Neutronenspektren in radialer Richtung für je ein BE aus Ring1 (Ass.376), Ring7 (Ass.199) und Ring13 (Ass.63).

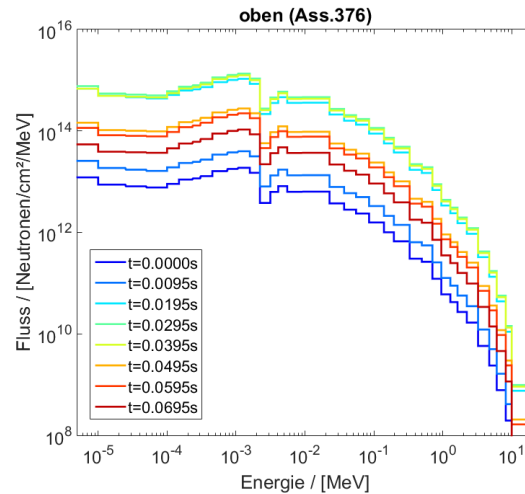


Abb. 6.4: Neutronenspektrum für ein exemplarisches Brennelement aus dem innersten Ring für verschiedene Zeiten. Der Neutronenfluss ergibt sich aus einer Mittelung über die obersten drei Maschen, die Brennstoff enthalten (Mittelung über Ebene 23-25).

Betrachtet man die zeitliche Änderung des Neutronenflusses, ergibt sich eine Erhöhung des Gesamtflusses bei nahezu konstanter Form der Kurve. Dies wird in den Abbildungen 6.4, 6.5 und 6.6 deutlich. Zu sehen sind die zeitlichen Änderungen im Fluss, exemplarisch für ein Brennelement aus dem innersten Ring. Die Kurven ergeben sich durch Mittelung des Flusses aus jeweils drei oberen Brennstoffmaschen sowie drei mittleren und drei unteren Brennstoffzonen. In allen Bereichen bleibt die Form des Spektrums scheinbar erhalten, obwohl in den obersten drei Brennstoffzonen im Fall des UTOP die Steuerelemente verfahren werden. Daher wurden die zeitlichen Spektren für die oberen Maschen nochmals in einem linearen Plot aufgetragen (Abbildung 6.7). Hier wird erst sichtbar, welchen Einfluss das Verfahren der Regelemente auf das Spektrum hat. Es ist deutlich zu erkennen, dass bei voll ausgefahrenen Regelementen um 40ms der niederenergetische Fluss ansteigt und beim Wiedereinfahren nahezu auf das Ausgangsniveau zurückfällt. Es ist wiederum zu beachten, dass die Energieskala logarithmisch ist und daher die untersten Gruppen im Vergleich zu höheren Energiegruppen extrem schmal sind. Um zu sehen, welchen Einfluss ein Regelement genau hat, ist in Abbildung 6.8 die Reaktionsrate für die (n,α) -Reaktion von Bor-10 dargestellt. Die Kurve ergibt sich durch Multiplikation des Flusses in einer Masche mit voll eingefahrenem Regelement und dem mikroskopischen Querschnitt. Damit erhält man die Reaktionsrate nach Gleichung 7.9, wobei hier der mikroskopische Querschnitt verwendet wurde und die Rate damit auf ein Atom normiert ist. Es wurde nur die (n,α) -Reaktion betrachtet, da die restlichen Reaktionen für Bor einen wesentlich kleineren Wirkungsquerschnitt aufweisen (bei $0,0253\text{ eV}$: $\sigma(n,\alpha) = 3837b$, $\sigma_{total} = 3840b$). Bei dem im schnellen Reaktor vorherrschenden Spektrum hat Bor-10 als Absorber für Energien von $10^{-2} - 10^1\text{ MeV}$ den größten Effekt als Absorber. Trotz des $1/\sqrt{E}$ -Gesetzes, dem der mikroskopische Querschnitt gehorcht, ist die Reaktionsrate aufgrund des schnellen Spektrums in den höheren Energiebereichen höher.

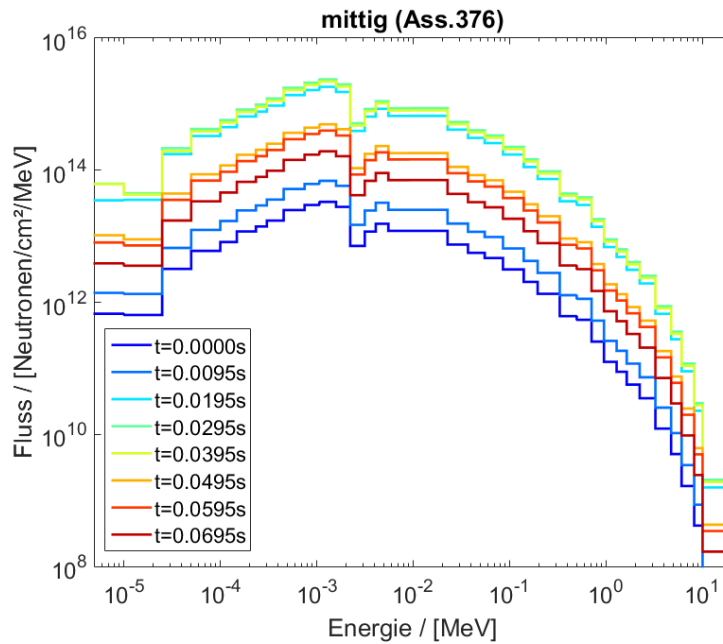


Abb. 6.5: Neutronenspektrum für ein exemplarisches Brennelement aus dem innersten Ring für verschiedene Zeiten. Der Neutronenfluss ergibt sich aus einer Mittelung über drei axial zentrale Maschen des aktiven Kerns. Das Spektrum ist im Zentrum deutlich „härter“, da hier der Einfluss des Reflektors am geringsten ist. Dies zeigt sich in einem Abfall des Flusses in den niederenergetischen Energiegruppen (Mittelung über Ebene 17-19).

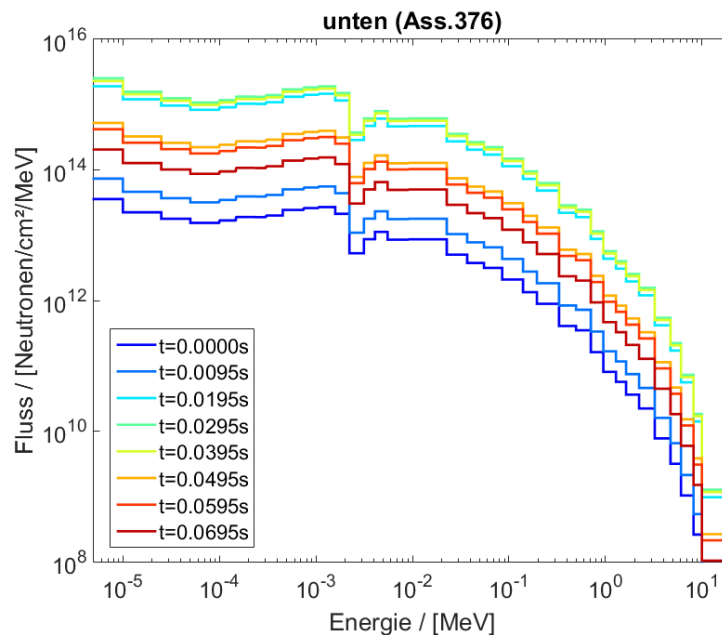


Abb. 6.6: Neutronenspektrum für ein exemplarisches Brennelement aus dem innersten Ring für verschiedene Zeiten. Der Neutronenfluss ergibt sich aus einer Mittelung über die drei untersten Maschen des aktiven Kerns (Mittelung über Ebene 11-13).

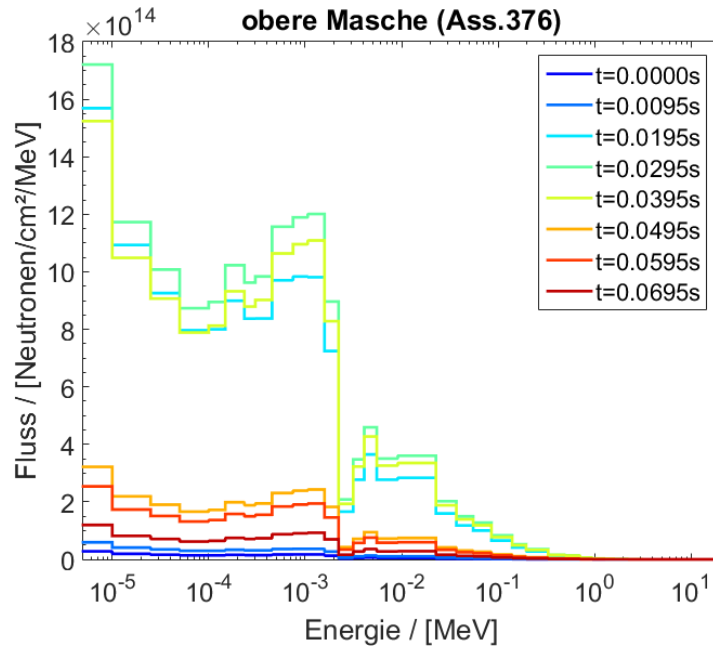


Abb. 6.7: Flusspektrum in einer oberen Masche des inneren Rings für verschiedene Zeiten in linearer Flussauftragung. Der Einfluss des Steuerstabes der bei $t=40s$ voll ausgefahren ist, zeigt sich vor allem in den niederen Energiegruppen. Zu beachten ist die logarithmische Energieskala. Damit ist der Einfluss auf das Gesamtverhalten des Systems kaum durch die untersten Gruppen bestimmt, da diese extrem schmal sind. Den Haupteinfluss auf das Systemverhalten hat das Verfahren des Steuerstabes auf die Gruppen mit Energien von ca. $10^{-2} - 10^0 MeV$ (siehe dazu die folgende Abbildung).

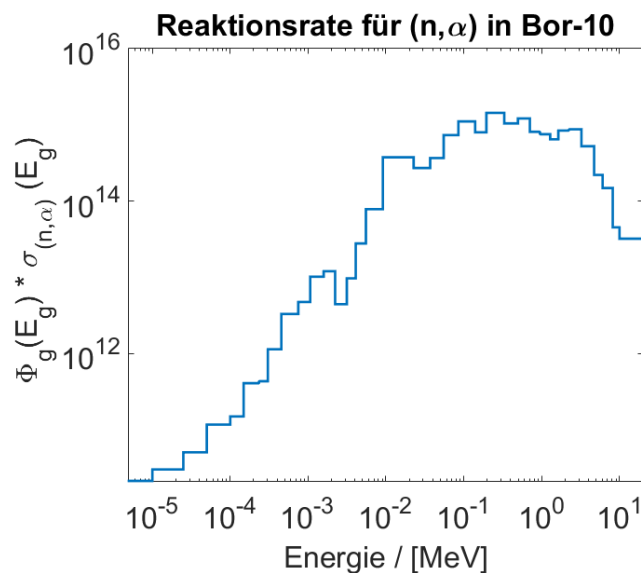


Abb. 6.8: Reaktionsraten für die (n,α) -Reaktion bei dem vorherrschenden Fluss im Kontrollelement auf einer oberen Ebene. Durch das Flussprofil (und den geringen thermischen Fluss) finden die meisten Reaktionen in einem Energiebereich von $10^{-2} - 10^0 MeV$ statt.

6.1.2.3 Entwicklung der Leistung

In Abbildung 6.9 ist die relative Leistung und die dazugehörige Stellung der Regelelemente über der Zeit aufgetragen. Während der Störung werden dem System durch Verfahren der Steuerstäbe 1,8\$ an Reaktivität in 40ms zugeführt. Anschließend bleiben die Steuerstäbe für 20ms ausgefahren. Das Einfahren geschieht in weiteren 40ms, so dass nach 100ms der Ausgangszustand wieder erreicht wird. Zunächst steigt die Leistung sehr stark an. Nach 25.5ms erreicht sie ein Maximum, das dem 390-fachen der Nominalleistung von 3600MWth entspricht (ca. 1400GW). Die Leistungsexkursion wird jedoch durch Rückwirkungseffekte gestoppt und fällt auf das 30-fache der Ausgangsleistung zurück. Darauf folgt 45ms nach Start des UTOPs ein zweiter, schwächerer Leistungspeak (ca. 117xNominalleistung). Auch dieser kann systemintern eingefangen werden. Obwohl die Regelelemente noch voll ausgefahren sind sinkt die Leistung auf das 10-fache der Ausgangsleistung. Mit dem Einfahren der Steuerelemente erfolgt eine weitere Leistungsabnahme. Nach 100ms, d.h., wenn die Steuerstäbe wieder auf ihre Ausgangsstellung zurückgekehrt sind, stabilisiert sich die Leistung annähernd auf dem Ausgangsniveau. Interessant ist die Tatsache, dass schon bevor die Steuerstäbe voll ausgefahren sind (nach 40ms), die Leistungsexkursion abgefangen wird. Welche Effekte hierfür verantwortlich sind, und ob der Reaktor durch Zugabe einer externen Reaktivität von 1,8\$ Schaden nimmt, soll im Folgenden durch eine detaillierte Betrachtung von thermohydraulischen und neutronischen Parametern geklärt werden.

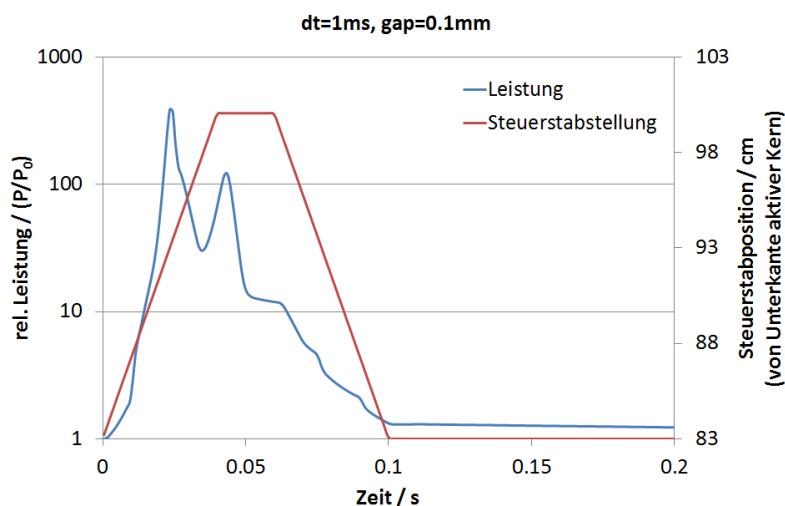


Abb. 6.9: Verlauf der Leistung in einem UTOP mit einem externen Reaktivitätseintrag von 1,8 \$ (relative Leistung mit $P(t=0s)=3600\text{MWth}$). Im ersten Leistungspeak nach ca. 25ms beträgt die Gesamtleistung das 390-fache der Nominalleistung. Der zweite Peak ist mit dem 117-fachen der Ausgangsleistung deutlich schwächer. Nach 100ms fällt die Leistung annähernd auf das Ausgangsniveau zurück. Zusätzlich ist die Position der Regelelemente angegeben, die bei vollem Verfahren 1,8\$ an Reaktivität liefern.

Zunächst stellt sich aber noch die Frage, ob der Verlauf der Leistung über den gesamten Kern symmetrisch verläuft oder ob sich die Leistungsverteilung assymetrisch entwickelt. Dazu ist in Abbildung 6.10 ein zeitabhängiges Axialprofil entlang des aktiven Kerns gegeben. Die Darstellung wurde für das Brennelement 376 erstellt, welches

auf dem inneren Ring liegt (siehe Kapitel „Modellierung in ASTEC-Na“). Das Leistungsmaximum befindet sich axial zentral im Kern. Nach ca. 25ms (nach Start der Reaktivitätszufuhr) ist analog zur relativen Gesamtleistung (Abbildung 6.9) ein hoher Peak in der Leistung zu erkennen, auf den ein rapider Leistungsabfall binnen 5ms folgt. Weitere 5ms später erscheint ein zweiter Leistungspeak, dessen Maximum jedoch deutlich unter dem des ersten Peaks liegt. Damit zeigt sich, dass die Leistung im innersten Ring dem Verlauf der Gesamtleistung entspricht. Das Radialprofil über den Kern (Abbildung 6.11) in der heißesten axialen Ebene zeigt ebenfalls keine Asymmetrien, sondern ein typisches Verhalten mit einem Maximum in der Kernmitte und einem Abfall hin zum Reflektor. Die Form der Profile, sowohl radial als auch axial, ändert sich während des Störfalls kaum. Abbildung 6.12 zeigt das Axialprofil der Leistung für ein Brennelement im innersten Ring für verschiedene Zeiten. Selbst in den oberen axialen Zonen des Kerns ist keine Änderung des Leistungsprofils über der Zeit erkennbar, obwohl in diesem Bereich die Steuerelemente verfahren werden. Hier wird nochmals deutlich, dass die maximale Leistung schon nach kurzer Zeit erreicht ist, bevor die Steuerstäbe komplett ausgezogen sind, also noch nicht die gesamte externe Reaktivität im System steckt. Beim Erreichen der maximalen externen Reaktivitätszufuhr (nach 40ms) fällt die Leistung schon wieder ab. Zur Erklärung der Leistungsentwicklung bedarf es einer detaillierten Untersuchung des Systems unter Berücksichtigung der neutronisch-thermohydraulischen Rückwirkungen. Dass das Leistungsprofil während der Transienten über den gesamten Kern symmetrisch bleibt, zeigt Abbildung 6.13. Dargestellt ist exemplarisch das axiale Leistungsprofil im Leistungsmaximum bei 25ms für verschiedene Positionen im Kern. Auch für andere Zeiten konnte kein asymmetrischer Zustand der Leistung identifiziert werden.

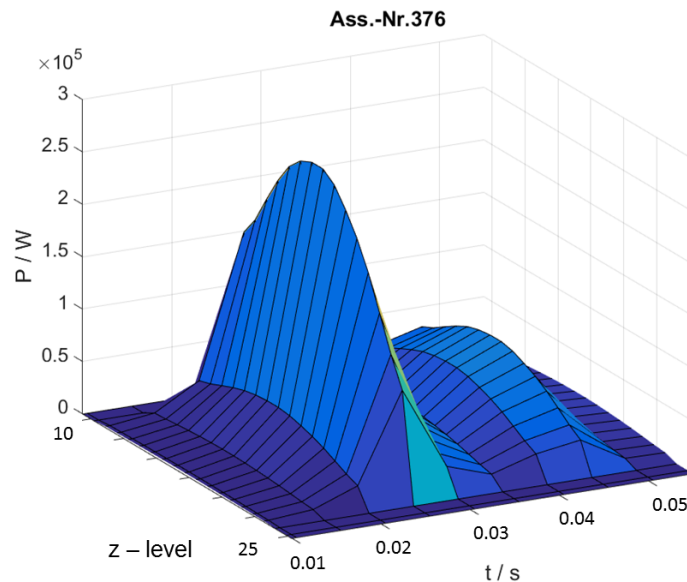


Abb. 6.10: Leistungsverlauf in einem Brennelement in einem UTOP (1,8 \$). Die hier dargestellte Leistung bezieht sich auf ein Brennelement im innersten Ring (Ass.376). Der axiale Verlauf zeigt, dass in zentraler Ebene das Leistungsmaximum auftritt. Einem enormen ersten Leistungsanstieg folgt ein zweiter, deutlich kleiner Leistungspeak.

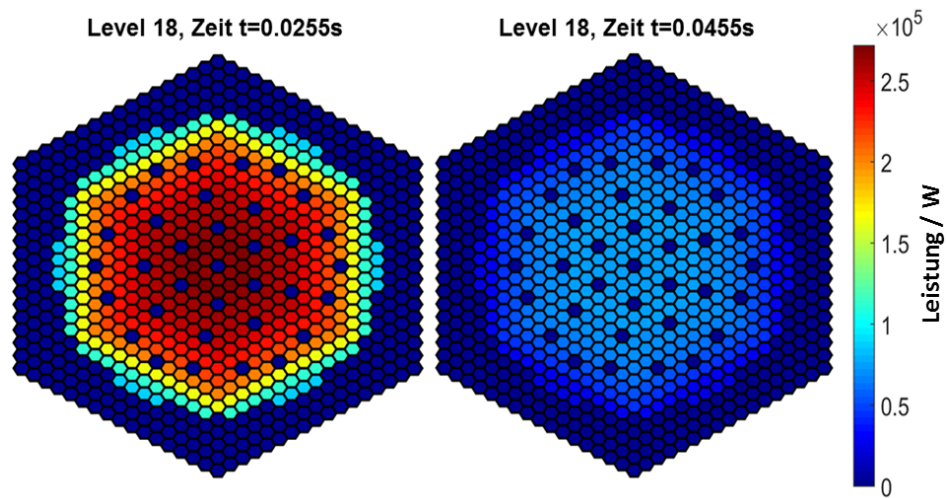


Abb. 6.11: Radiale Verteilung der Leistung über den Kern pro Knoten (in einem Brennelement auf einer Ebene). links: radiale Leistungsverteilung im ersten Peak. rechts: radiale Leistungsverteilung im zweiten Peak.

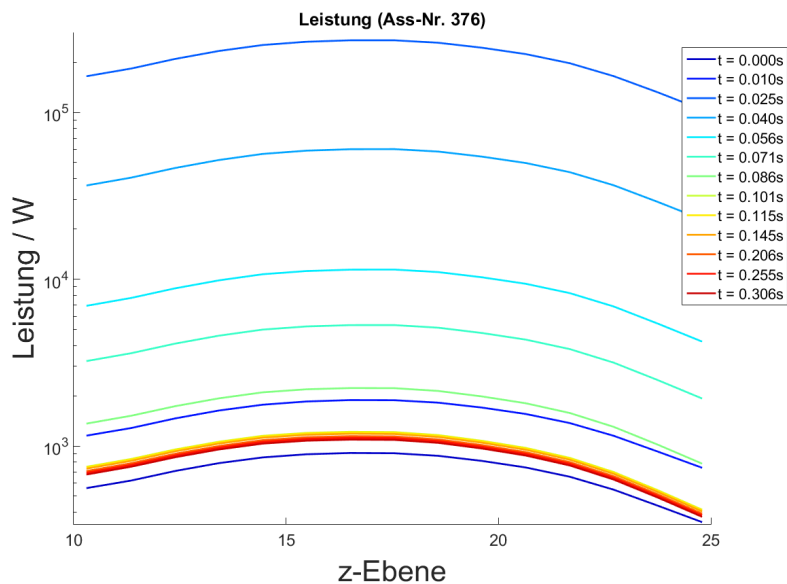


Abb. 6.12: Axiales Leistungsprofil für ein Brennelement aus dem innersten, heißesten Ring für verschiedene Zeiten. Nach Durchlaufen der externen Reaktivitätszufuhr geht die Leistung auf ein leicht erhöhtes Niveau zurück.

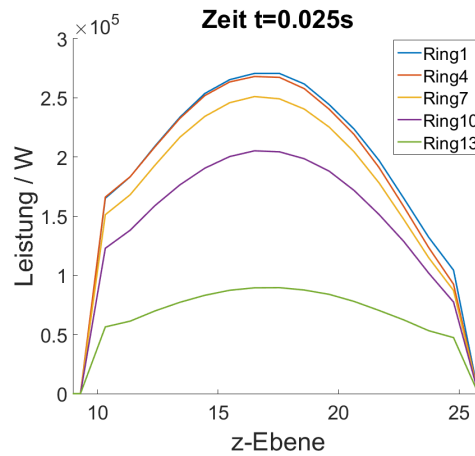


Abb. 6.13: Axiales Leistungsprofil für Brennelemente an verschiedenen Positionen im Kern zur Zeit $t=25\text{ms}$ (im ersten Leistungspeak). In allen Brennelementen liegt das Leistungsmaximum in der zentralen Zone. Von der Kernmitte hin zum Reflektor wird das Profil flacher.

Ein Verfahren der Steuerelemente führt durch verminderte Absorption im Bor zu einer Erhöhung des Neutronenflusses. Mit der Flusserrhöhung ist ein Leistungsanstieg gekoppelt. Um zu erklären, warum der Leistungsanstieg, wie in Abbildung 6.9 dargestellt, im Gesamtverlauf nicht der externen Reaktivitätszugabe folgt, sondern frühzeitig wieder abfällt, sollen im Folgenden die Entwicklungen der thermohydraulischen Parameter untersucht werden.

6.1.2.4 Entwicklung der Temperaturen und thermische Expansion

Durch das Ausfahren der Steuerelemente erhöht sich die Anzahl der Neutronen, und es treten mehr Spaltungen auf, die zur Energieproduktion beitragen. Folglich erwärmt sich der Brennstoff. Die Erwärmung der einzelnen Komponenten, also Brennstoff, Hüllrohr und Kühlmittel, ist für die Kernmitte auf Ebene 18 für je ein Element im inneren und im äußeren Ring in Abbildung 6.14 aufgetragen. Man sieht, dass sich zunächst der Brennstoff erwärmt, während die Erwärmung im Hüllrohr und im Kühlmittel leicht verzögert erfolgt und sehr gering ausfällt. Zudem zeigt Abbildung 6.14, dass sich der Brennstoff im radialen Zentrum des Kerns mit ca. 600K fast doppelt so stark erwärmt wie der Brennstoff im äußeren Ring (ca. 300K). In diesem Abschnitt wird eine detaillierte Betrachtung der Temperaturänderungen in den einzelnen Komponenten durchgeführt. Die axialen und radialen Temperaturprofile beschränken sich auf den Zeitraum von 0-300ms, da die Änderungen im weiteren Verlauf der Transienten sehr gering sind. Abbildung 6.15 zeigt die zeitliche Änderung des axialen Profils der mittleren Brennstofftemperatur in einem Brennelement des inneren, heißesten Rings. Im Ausgangszustand liegt das Temperaturmaximum mit knapp 1600K auf Ebene 18, was der Mitte des aktiven Kerns entspricht. Nach 86ms erreicht die Brennstofftemperatur ihr mit ca. 2250K zeitliches Maximum. Zu diesem Zeitpunkt sind die Regelelemente schon fast wieder eingefahren und der zweite Leistungspeak wurde schon überschritten (6.9). Der Anstieg erfolgt dabei im Gegensatz zur Leistungskurve monoton. Im Anschluss sinkt die mittlere Temperatur sehr langsam ab. Da das Erwärmen und Abkühlen des Brennstoffs ein langsamer Vorgang ist, folgt die Kurve im zeitlichen Verlauf nicht der Leistung

bzw. dem Fluss. Im Mittel bleibt die Brennstofftemperatur unter der Schmelztemperatur für Mischoxid-Brennstoff (MOX), der je nach Plutoniumgehalt bei 2500-2600K liegt. Analog ist das Axialprofil der maximalen Brennstofftemperatur für verschiedene Zeiten während der Transienten in Abbildung 6.16 aufgetragen. Nach Durchlaufen des ersten Leistungspeaks bei 25ms erreicht die innerste Zone die Schmelztemperatur. Es ist davon auszugehen, dass der UTOP zum Aufschmelzen im Inneren des Pellets führt. Da die mittlere Brennstofftemperatur jedoch unterhalb der Schmelztemperatur bleibt, ist nicht mit einer massiven Brennstoffverlagerung zu rechnen.

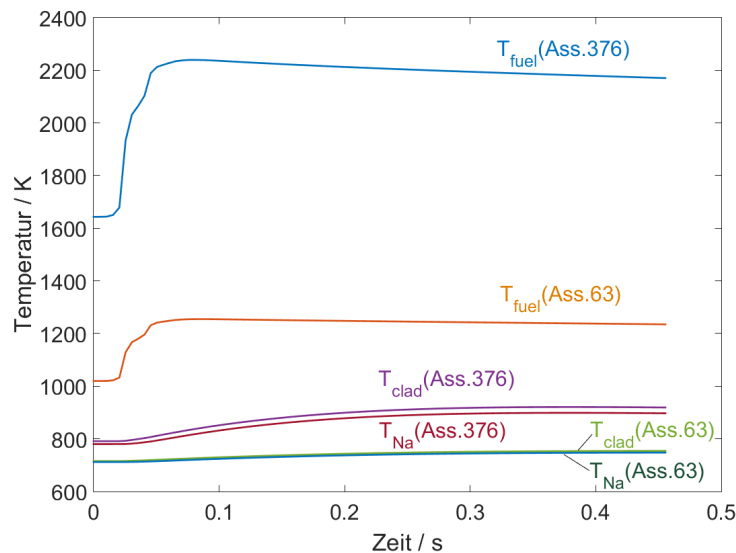


Abb. 6.14: Zeitlicher Verlauf der Temperaturen in Brennstoff, Hüllrohr und Natrium für je ein Brennelement aus dem inneren (Ass.376) und dem äußeren Ring (Ass.63) auf Ebene 18 (Kernmitte). Zunächst erhöht sich die Brennstofftemperatur. Hüllrohr- und Kühlmitteltemperatur folgen. Nach 100ms fängt die Brennstofftemperatur an abzufallen.

Der radiale Verlauf der maximalen Brennstofftemperatur in der heißesten Ebene in Abbildung 6.17 zeigt, dass das Aufschmelzen für die innersten drei bis vier Ringe zu erwarten ist. Im Außenbereich des Kerns bleibt die maximale Temperatur auch nach 100ms unter 2000K. Das Erhitzen des Brennstoffs und die damit verbundene Rückwirkung auf die Neutronik durch die Dopplerverbreiterung, die in den makroskopischen Querschnitten berücksichtigt ist, sind entscheidend für das Systemverhalten. Weiter ist mit dem Aufheizen eine thermische Expansion des Brennstoffs verbunden. Abbildung 6.18 zeigt die axiale Ausdehnung des Kerns (in Prozent bezogen auf den kalten Zustand) für alle Brennelemente. Da der kalte Kern vor Beginn der Transienten in einen stationären Zustand gebracht werden muss, ist zum Zeitpunkt $t=0$ s schon eine Ausdehnung zu erkennen. Im weiteren Verlauf der Transienten folgt die thermische Ausdehnung der Brennstofftemperatur und erreicht nach 100ms einen Wert von 1.6% im inneren Teil des Kerns. Die Ausdehnung ergibt sich aus der Mittelung über die vier radialen Brennstoffzonen im Pellet und Aufsummieren über alle axialen Zonen. Die Ausdehnung spiegelt sich, wie auch die Temperaturerhöhung des Brennstoffs, in einem negativen Feedback wieder. Neben der relativen Verschiebung von Brennstoff und Absorber zugunsten erhöhter Absorption im Kontrollelement, vermindert sich gleichzeitig

die Brennstoffdichte und zwar überproportional im heißesten Bereich. Die Wärme im Brennstoff muss nun über das Hüllrohr und weiter durch das Natrium abgeführt werden.

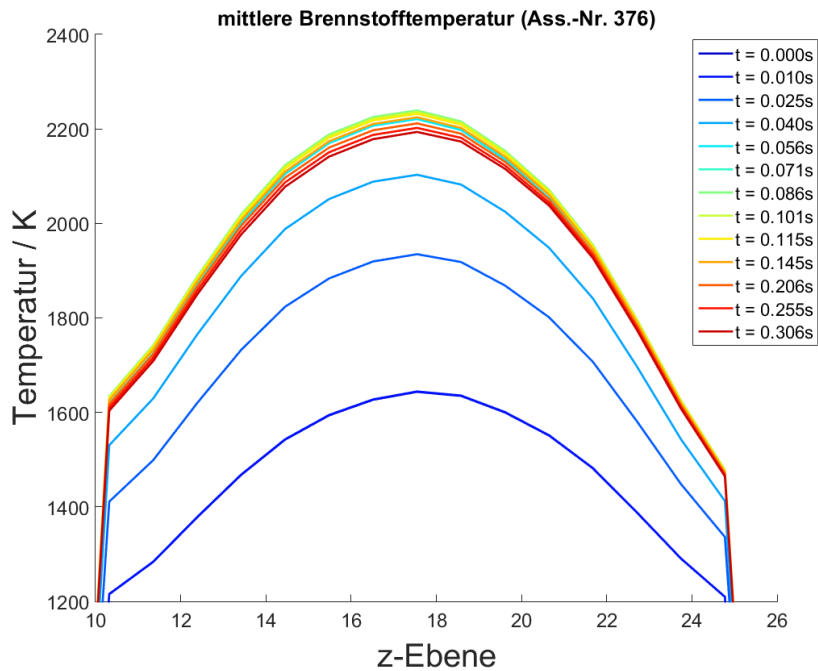


Abb. 6.15: Axialer Verlauf der mittleren Brennstofftemperatur (aus vier radialen Zonen im Pellet) für verschiedene Zeiten. Nachdem die Steuerstäbe wieder Eingefahren sind (100ms) kühlt sich der Brennstoff sehr langsam wieder ab.

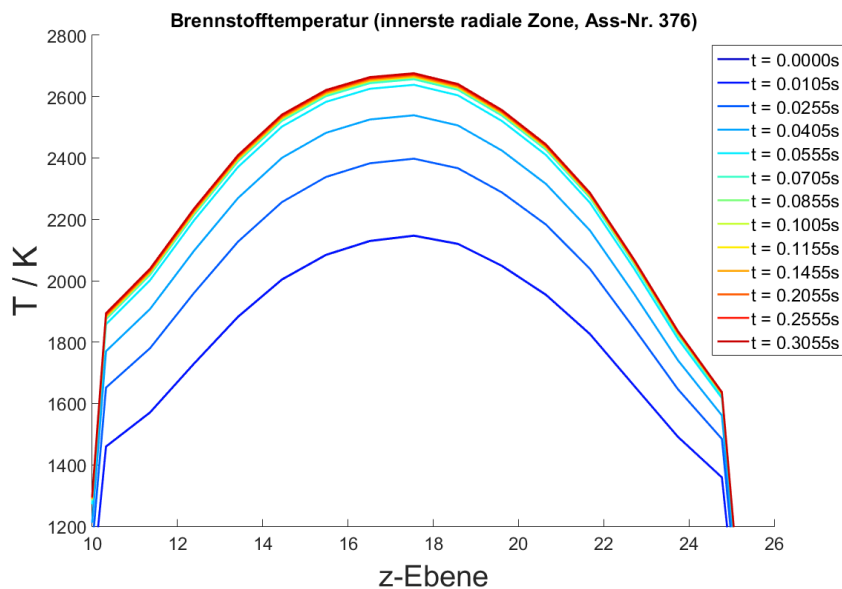


Abb. 6.16: Axialer Verlauf der maximalen Brennstofftemperatur (innerste Zone im Pellet) für verschiedene Zeiten. Die axial mittleren Zonen erreichen nach ca. 65ms die Schmelztemperatur, die je nach Plutoniumgehalt bei 2500-2600K liegt.

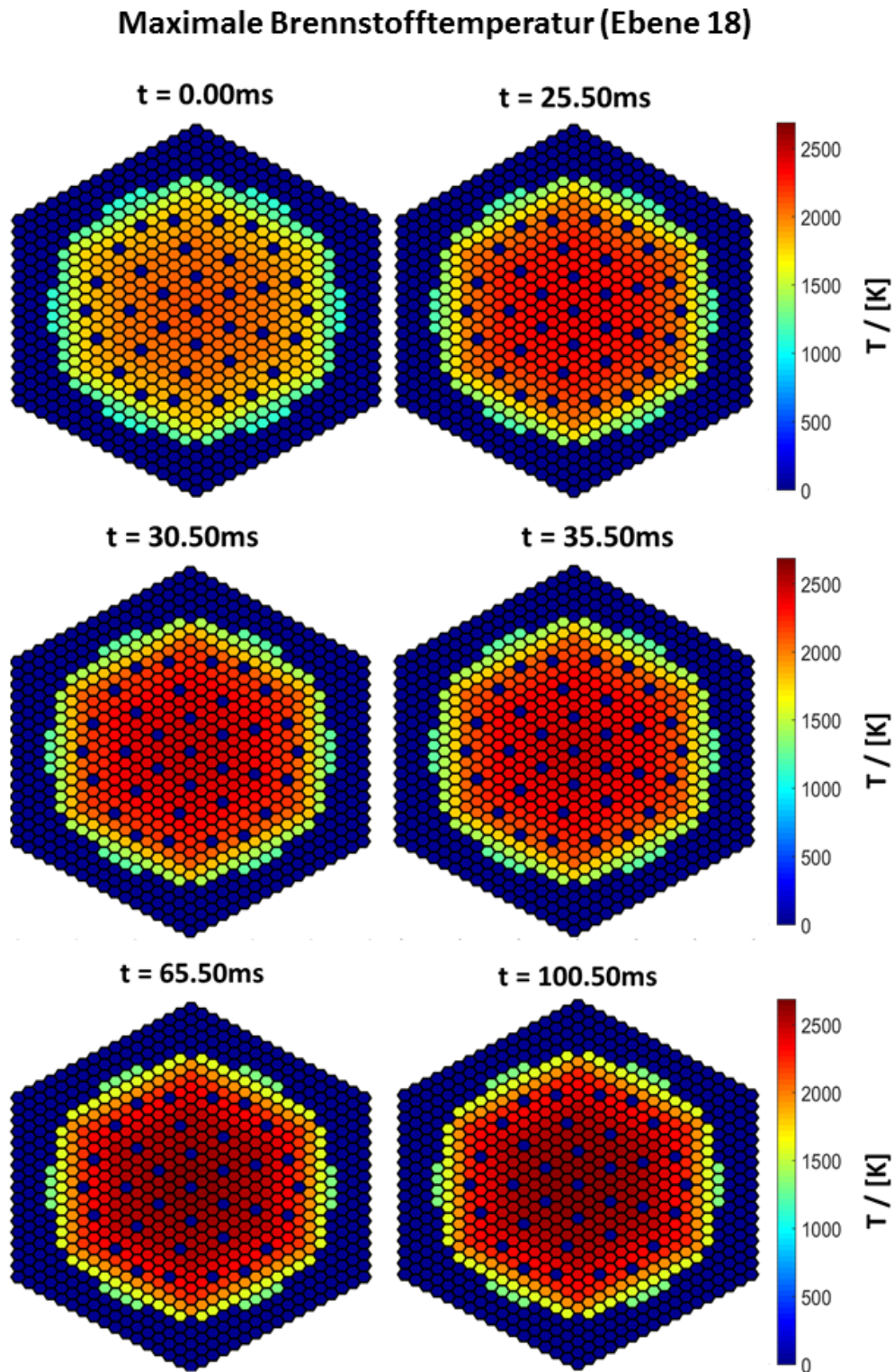


Abb. 6.17: Radiale Verteilung der Brennstofftemperatur in der innersten, heißesten Brennstoffzone des Pellets (vier radiale Zonen insgesamt) für die axiale Ebene 20. In der Mitte des Pellets erreicht der Brennstoff die Schmelztemperatur.

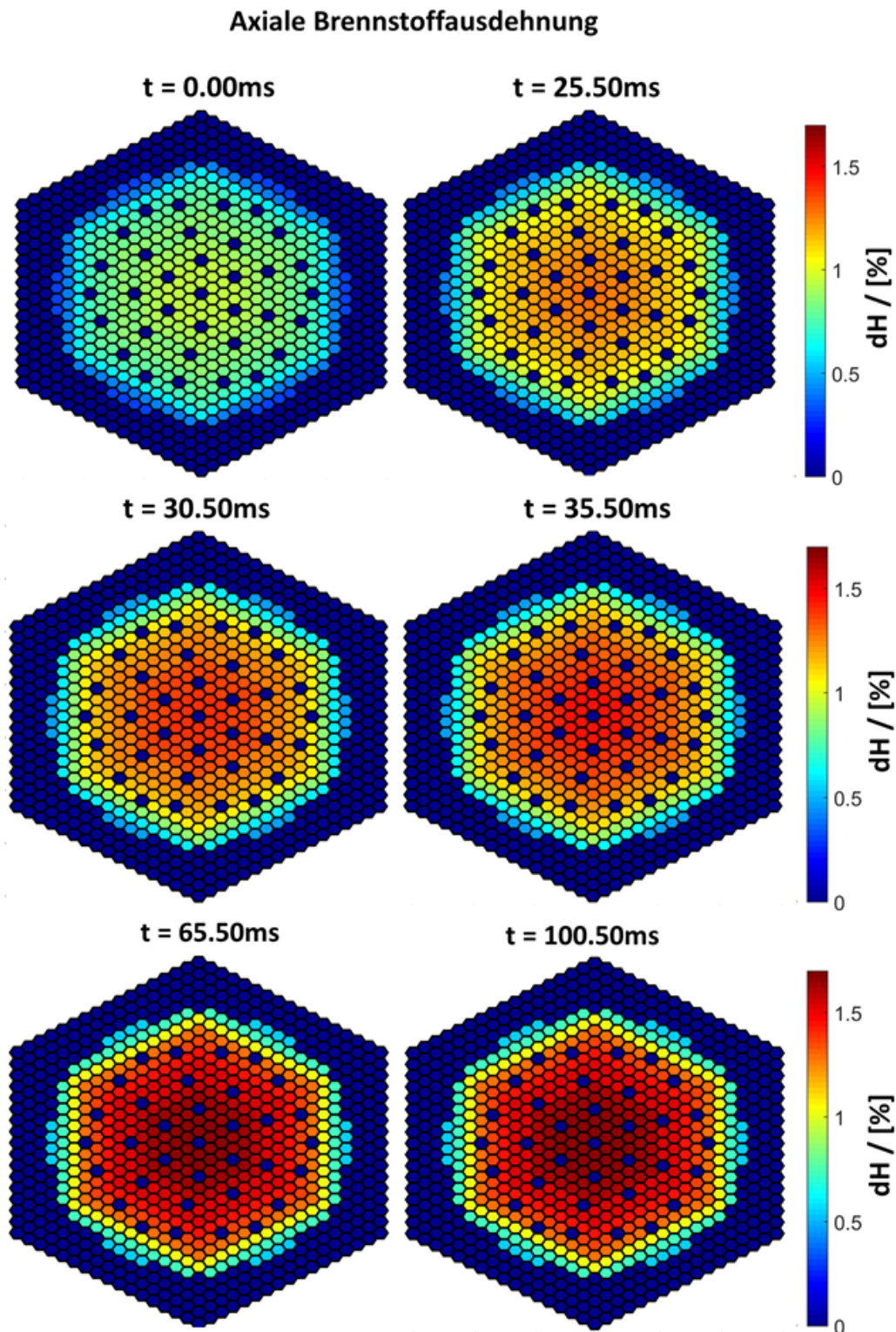


Abb. 6.18: Gesamte axiale Ausdehnung des Brennstoffs in jedem Brennelement. Die Prozentangabe ist bezogen auf den im Benchmark definierten Zustand des Kerns. Die Iteration zum „Steady State“ ist mit einer Ausdehnung von ca. 0,8% verbunden. Im Verlauf der Transienten ergibt sich eine Ausdehnung von ca. 1,6% im inneren Teil des Kerns (entspricht ca. 1,6cm).

In Abbildung 6.19 ist das axiale Temperaturprofil des Hüllrohrs im heißesten Brennelement für verschiedene Zeiten dargestellt. Das Natrium, das in direktem Kontakt mit dem Hüllrohr steht, tritt mit ca. 670K von unten in den Kern ein. Auf seinem Weg nach oben entlang des Hüllrohrs wird es zunehmend aufgeheizt, weshalb die Wärme im oberen Teil des aktiven Kerns nicht mehr so effektiv abgeführt werden kann. Zu Beginn der Transienten beträgt der Temperaturgradient im Hüllrohr vom Eintritt bis zur heißesten Ebene ca. 200K. Nach 300ms ist diese Differenz auf etwa 300K angestiegen. Der höchste Anstieg in der Hüllrohrtemperatur ist auf den Ebenen 20-24 zu verzeichnen, also knapp über der Ebene, in der das Leistungsmaximum auftritt (Ebene 18). Ein Aufschmelzen des Hüllrohres ist bei diesen Temperaturen nicht möglich (Schmelztemperatur $> 1500\text{K}$). Dennoch ist ein Hüllrohrversagen durch einen Druckanstieg im Inneren durch Spaltgasbildung oder auch durch direkten Kontakt von Hüllrohr und Brennstoff und damit verbundener mechanischer Kräfte nicht auszuschließen. Bei Erstellung der Wirkungsquerschnittsbasis wurde auch die Änderung des Natriumanteils in einer Masche als wichtige Rückwirkung betrachtet. Nicht nur durch Verdampfung, sondern auch durch das thermische, radiale Ausdehnen der Hüllrohre in einem Brennelement wird der relative Natriumanteil reduziert. Abbildung 6.20 zeigt die Entwicklung des Hüllrohräusserenradius im heißesten Element für alle axialen Maschen des aktiven Kerns. Die Form der Kurven folgt erwartungsgemäß dem Verlauf der Temperaturen im Hüllrohr. Die maximale Ausdehnung nach 300ms beträgt ca. 0,03mm im Radius. Axialprofile der Natriumtemperatur für verschiedene Zeiten finden sich in Abbildung 6.21. Die Temperatur am Eintritt zum aktiven Kern auf Ebene 11 bleibt während der Transienten nahe der Anfangstemperatur von 670K. Auf Höhe von Ebene 22 ist die maximale Natriumtemperatur zu erwarten. Aber selbst dort ist sie mit unter 1000K weit vom Siedepunkt entfernt (1150K). Dass sich der Kern im Zentrum am meisten aufheizt, zeigt sich auch bei Betrachtung der Natriumtemperatur an verschiedenen Positionen im Kern. In Abbildung 6.22 (a) ist die Kühlmitteltemperatur über der Zeit für je ein Brennelement aus Ring 1, Ring 6 und Ring 13 aufgetragen. Der Unterschied in der Aufheizung vom inneren Kern hin zum Rand des Kerns ist klar erkennbar. In Abbildung 6.22 (b) ist der Verlauf der Natriumtemperatur in der untersten und obersten Kernmasche für ein Brennelement aus dem inneren und äußeren Ring gezeigt. Diese Werte entsprechen in etwa der Natriumeintritts- bzw. Austrittstemperatur. Im Außenbereich des Kerns ist der Einfluss des Reaktivitätseintrags wesentlich geringer, wodurch es kaum zu einem Anstieg der Natriumtemperatur in diesem Bereich kommt.

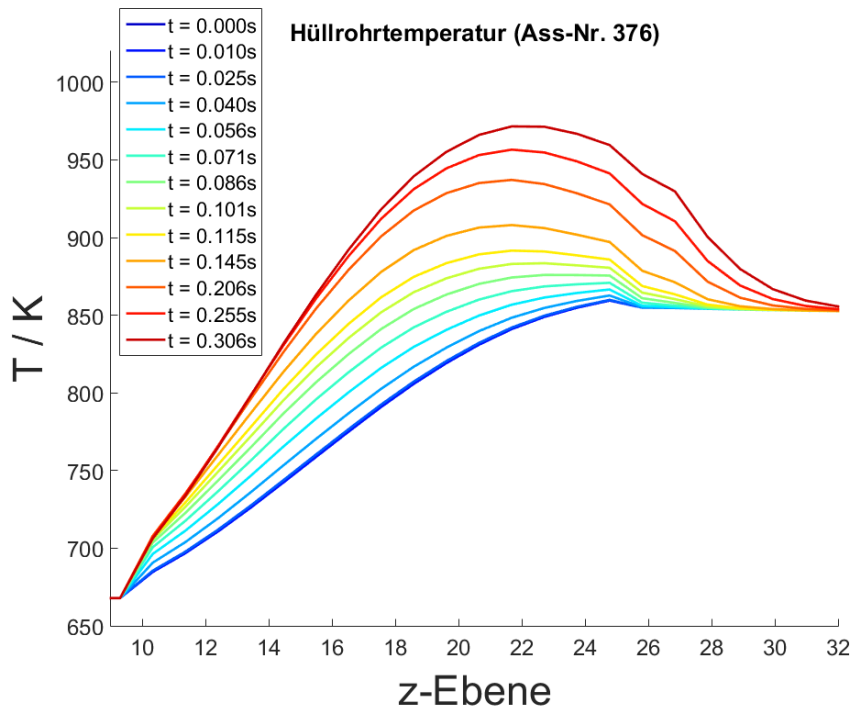


Abb. 6.19: Axiales Profil der Hüllrohrtemperatur im innersten Ring für verschiedene Zeiten. Das Hüllrohr heizt sich im oberen aktiven Kern am meisten auf (oberste Brennstoffebene: 25), da das aufgeheizte Natrium die Wärme in den oberen Ebenen nicht mehr so effektiv abführen kann.

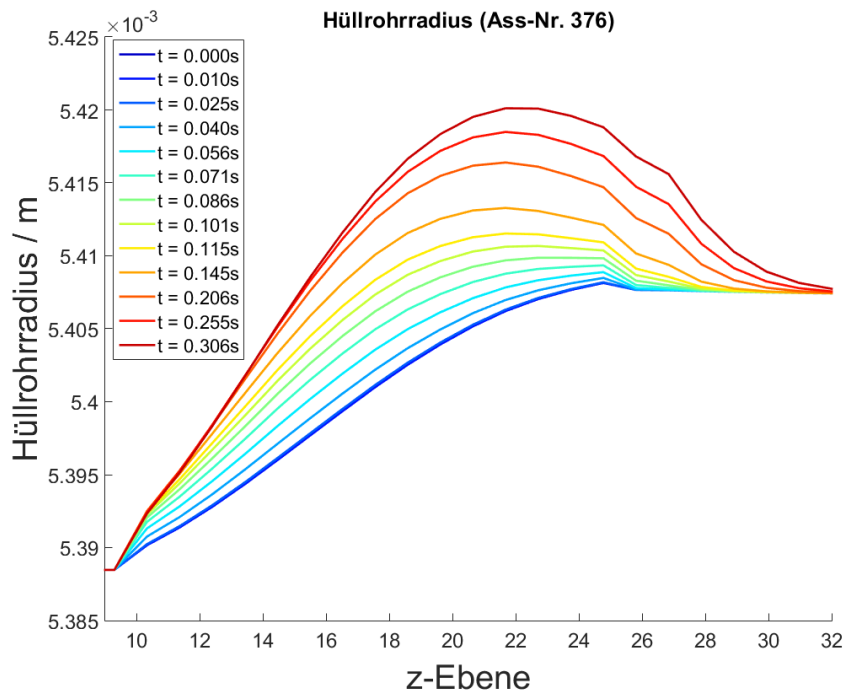


Abb. 6.20: Axialprofil des Hüllrohrradius für ein Brennelement aus dem innersten Ring für verschiedene Zeiten. Die radiale Ausdehnung des Hüllrohrs, durch die zusätzlich Natrium aus der Masche verdrängt wird, folgt dem Verlauf der Hüllrohrtemperatur.

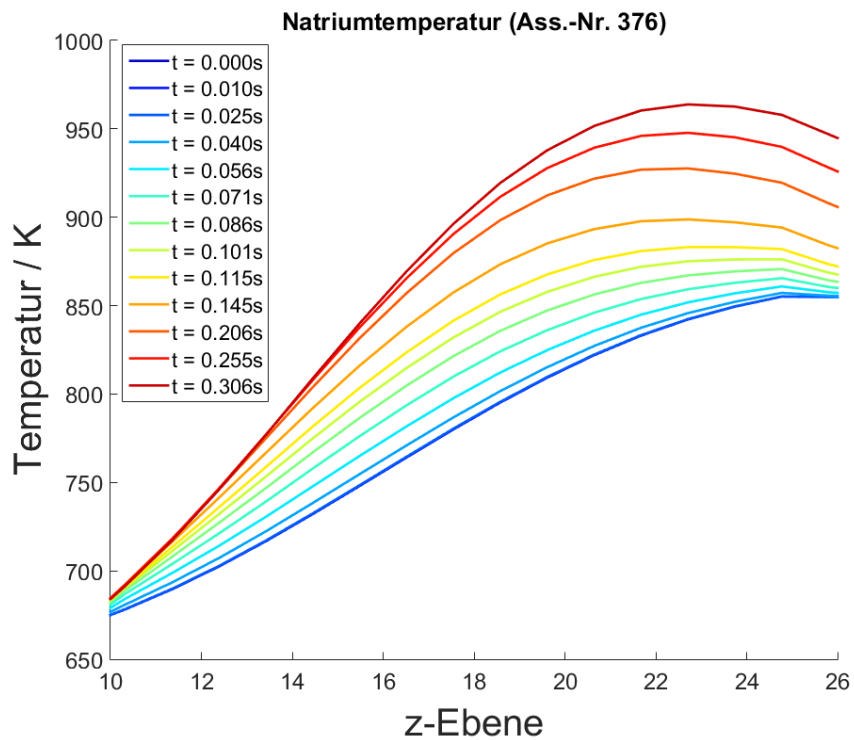
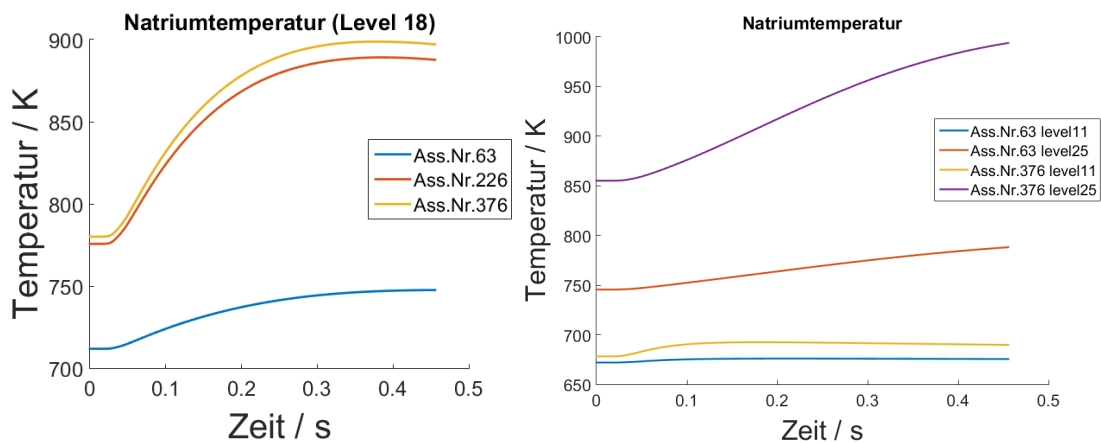


Abb. 6.21: Axialer Verlauf der Natriumtemperatur im innersten Ring für verschiedene Zeiten.



(a) Zeitlicher Verlauf der Natriumtemperatur auf Ebene 18 für je ein Brennelement aus Ring1, Ring6 und Ring13. (b) Zeitlicher Verlauf der Natriumtemperatur für den inneren und den äußeren Ring jeweils in der untersten und der obersten Masche des aktiven Kerns.

Abb. 6.22: Entwicklung der Natriumtemperaturen an verschiedenen Positionen im Kern.

Damit sind die in der Neutronik/Thermohydraulik-Kopplung berücksichtigten Parameter analysiert. Dass die Änderung der Natriumdichte aufgrund von Verdampfen keine Rolle spielt, ist schon aus den Temperaturdaten ersichtlich. Dies wird nochmals bestätigt, bei der Darstellung des Natrium-Gasanteils, der Abbildung 6.23 zu entnehmen ist. Für die Simulation in ASTEC-Na wurde für die Initialisierung ein minimaler Anteil von $1 \cdot 10^{-5}$ angenommen. Dieser Wert steigt für den inneren Ring auf Ebene18 während der gesamten Transienten nicht merklich an.

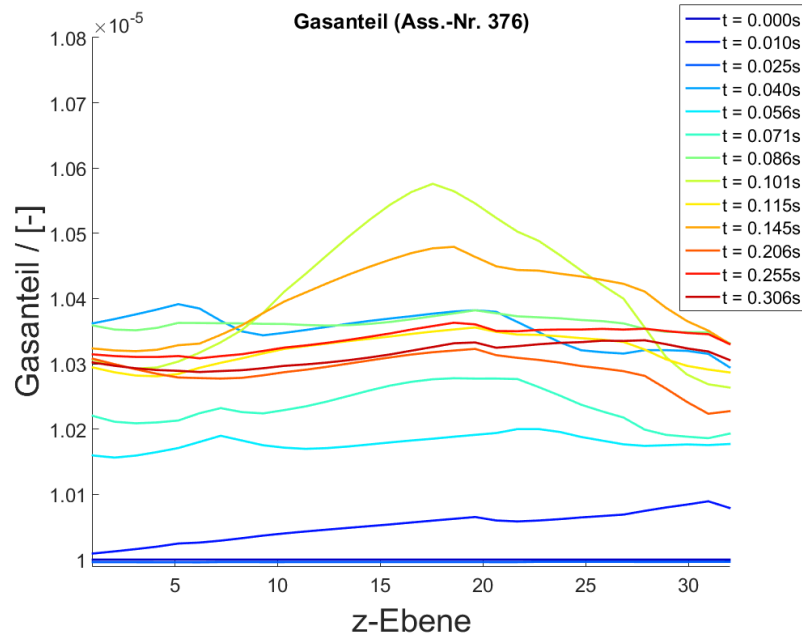


Abb. 6.23: Axiales Profil der Gasanteile des Natriums für verschiedene Zeiten in der heißesten Masche.

6.1.2.5 Entwicklung der Reaktivität und Beitrag einzelner Effekte

Mit Kenntnis der Entwicklung der thermohydraulischen Parameter lässt sich der Verlauf der Reaktivitäten wie in Abbildung 6.24 erklären. Die Abbildung zeigt neben der Gesamtreaktivität über der Zeit auch die Einzelbeiträge aufgrund unterschiedlicher Effekte. In Blau ist die externe Reaktivitätszugabe dargestellt. Der nicht-lineare Verlauf an den Flanken ist ein Resultat des Cusping-Effekts, auf den später eingegangen wird. Zunächst folgt die Gesamtreaktivität dem Verlauf der externen Reaktivitätszufuhr. Der erhöhte Neutronenfluss im Kern bewirkt die Aufheizung des Brennstoffs, wodurch unverzüglich der Dopplereffekt zum Tragen kommt. Gleichzeitig führt die Erwärmung zur axialen Ausdehnung des Brennstoffs. Diese beiden Effekte liefern einen stark negativen Reaktivitätseintrag, der die Gesamtreaktivität zu einem kurzen Absinken veranlasst. Der Dopplereffekt ist temperaturabhängig und wird mit zunehmender Brennstofftemperatur kleiner. Dies wird in Abbildung 6.25 bestätigt, in der aus stationären Neutronik-Rechnungen der Dopplerkoeffizient $d\rho/dT$ in Abhängigkeit der Brennstofftemperatur ermittelt wurde. Auch die Wirksamkeit des Steuerstabes nimmt mit zunehmendem Ausfahren ab, da der Neutronenfluss im Zentrum sein Maximum hat. Damit ist der Einfluss des Absorbers geringer, wenn er sich weiter vom Zentrum entfernt. Der steile Temperaturanstieg im Brennstoff endet nach ca. 60ms und die

Temperaturkurve verläuft im Weiteren leicht abfallend (Abbildung 6.14). Daher liefert der Dopplereffekt nach Erreichen des Temperaturmaximums keinen zusätzlichen negativen Beitrag mehr. Nach Erreichen der voll ausgefahrenen Steuerelementstellung gibt es keinen weiteren Anstieg der totalen Reaktivität. Vielmehr folgt die Kurve der Gesamtreaktivität der Form nach, wie auch beim Ausfahren, der externen Reaktivität, allerdings auf einem niedrigeren Niveau aufgrund der negativen Beiträge von Dopplereffekt und axialer Ausdehnung. Der positive Voideffekt (Natriumdichte) spielt für den UTOP keine Rolle und steigt kaum an.

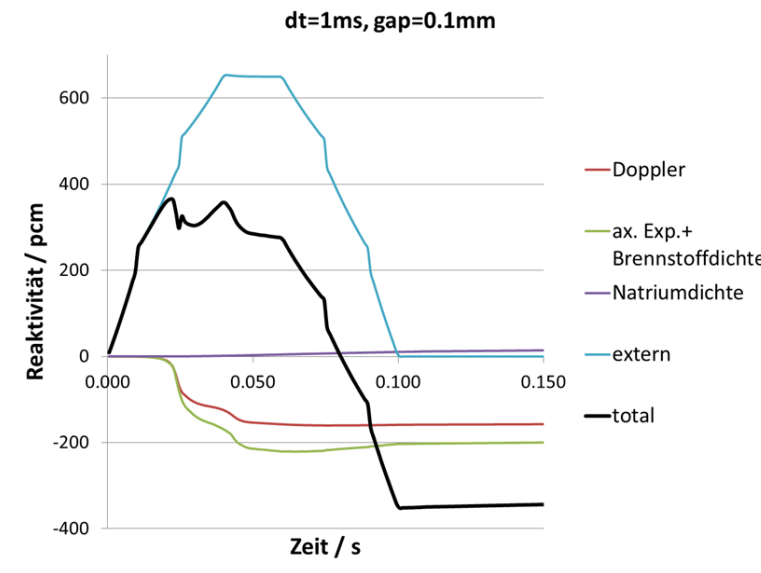


Abb. 6.24: Verlauf der Gesamtreaktivität im System während eines UTOPs mit $1,8\%$ externen Reaktivität und die jeweiligen Anteile, die sich aus den einzelnen Effekten ergeben.

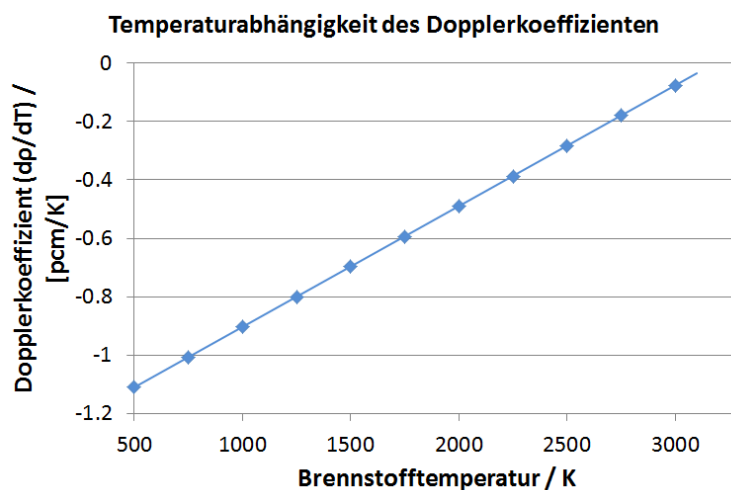


Abb. 6.25: Abhängigkeit des Dopplereffekts von der Brennstofftemperatur für den generischen SFR Benchmark-Kern ermittelt aus Neutronik-Rechnungen.

6.1.3 Wahl der Zeitschrittweite für gekoppelte Rechnungen

Die Zeitschrittweite wird in der aktuellen, gekoppelten Version allein durch DYN3D und die in der DYN3D Neutronikiteration erzeugten Ausgabedaten kontrolliert. Damit ergeben sich als Kriterien zur Beurteilung der Konvergenz für den stationären Zustand die relative Änderung des Eigenwertes k_{eff} und die relative Änderung der Spaltquelle bezogen auf eine Masche. Im transienten Fall kann der Eigenwert nicht mehr zur Feststellung der Konvergenz herangezogen werden. Stattdessen findet hier eine Prüfung der Leistungsänderung für einen Neutronik-/Thermohydraulik-Zeitschritt statt. In der Weiterentwicklung der Kopplung wäre es dringend ratsam, weitere thermohydraulische Parameter zur Bewertung der Konvergenz miteinzubeziehen. Der aktuelle Stand der Kopplungsentwicklung erfordert daher eine genaue Betrachtung, welche Zeitschrittweite zulässig ist, um alle relevanten Feedbacks erfassen zu können. Unter Verwendung zu großer Zeitschrittweiten kann das Systemverhalten nicht mehr korrekt simuliert werden, da in der Berechnung der thermohydraulischen Daten in einem Zeitschritt beliebig große Änderungen zulässig sind, die unter Umständen eine zwischenzeitliche Anpassung der Neutronikdaten erfordern würden.

Für den UTOP-Störfall wurden Rechnungen mit drei unterschiedlichen Schrittweiten betrachtet: 5ms, 1ms und 0,5ms. In Abbildung 6.26 ist der Verlauf der Leistung für die drei Rechnungen dargestellt. Etwa 25ms nach Start der Reaktivitätszufuhr ist in allen Fällen der hohe Leistungspeak zu erkennen. Die Höhe des Peaks ist für alle Schrittweiten identisch, erreicht jedoch bei einer Schrittweite von 5ms das Maximum verzögert. Der weitere Verlauf zeigt ca. 45ms nach Start der Transienten einen zweiten Leistungspeak. Dieser ist für die größte Schrittweite von 5ms zu einem flachen Plateau reduziert. Es zeigt sich deutlich, dass für solch schnelle Transienten eine kleinere Schrittweite als 5ms erforderlich ist.

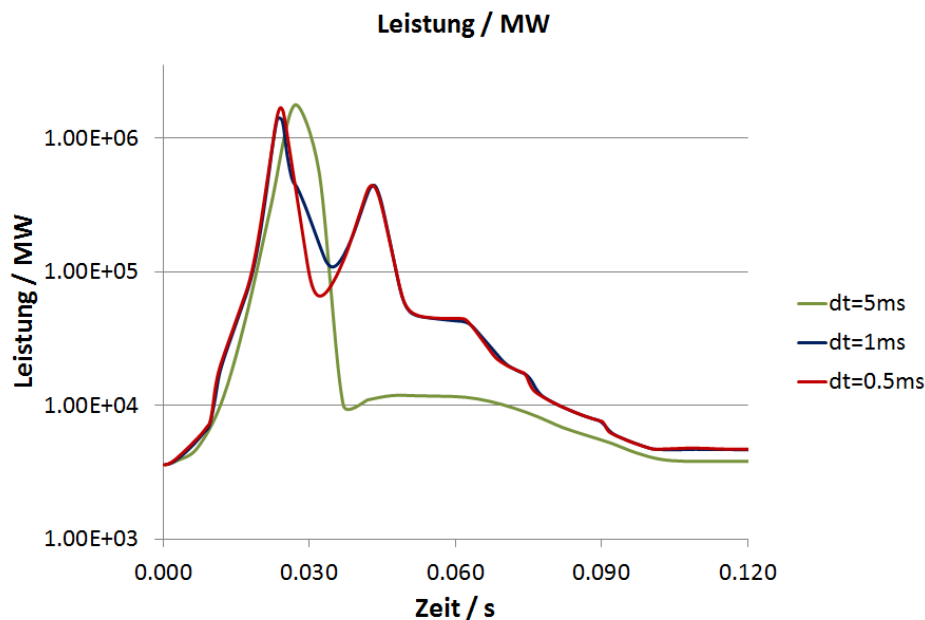


Abb. 6.26: Entwicklung der Leistung in einem UTOP (1,8\$) unter Verwendung verschiedener Zeitschrittweiten für die Thermohydraulik-Neutronik-Iteration.

Betrachtet man die Entwicklung der Reaktivitäten in den Abbildungen 6.27 - 6.31, wird deutlich, dass der Austausch der Daten zwischen Thermohydraulik und Neutronik mit Schrittweiten von 5ms zu spät erfolgt. Der Verlauf der Gesamtreaktivität im System (Abbildungen 6.27) zeigt nach 30ms für $dt=5ms$ einen scharfen Abfall hin zu stark negativen Werten, während die Kurven resultierend aus den kleineren Zeitschrittweiten keinen so schnellen und großen Rückgang der Reaktivität aufzeigen. Der Verlauf wird verständlich, wenn man die Beiträge der einzelnen neutronischen Feedbackparameter genauer betrachtet. Die Verminderung der Reaktivität durch den Dopplereffekt ist in Abbildung 6.28 dargestellt. Der deutlich höhere negative Reaktivitätseintrag für $dt=5ms$ deutet darauf hin, dass sich der Brennstoff innerhalb der Thermodynamik-Berechnung in einem Zeitschritt aufgrund fehlender Rückwirkung übermäßig erhöht. Dementsprechend wird für den Fall mit $dt=5ms$ auch die axiale, thermische Brennstoffausdehnung, die in Abbildung 6.29 zu finden ist, überschätzt und führt zu einem zweiten stark negativen Beitrag, der den zweiten Leistungspeak unterdrückt. Als weitere Folge der ungebremsten Erhöhung der Brennstofftemperatur in einem Zeitschritt, ergibt sich eine höhere Kühlmitteltemperatur sowie eine größere radiale Ausdehnung des Hüllrohrs. Dieser Sachverhalt wird in Abbildung 6.30 bestätigt. Gezeigt ist der Verlauf der Reaktivitätsänderung aufgrund der Änderung in der Natriumdichte. Durch eine zu große Schrittweite wird auch dieser Effekt überschätzt.

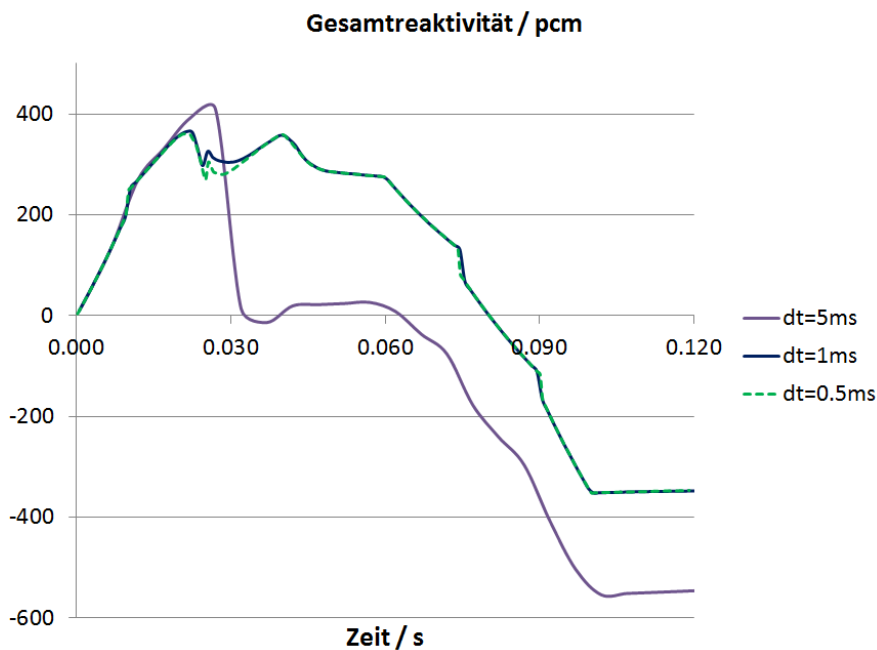


Abb. 6.27: Entwicklung der Gesamtreaktivität in einem UTOP (1,8\$) unter Verwendung verschiedener Zeitschrittweiten für die Thermohydraulik-Neutronik-Iteration.

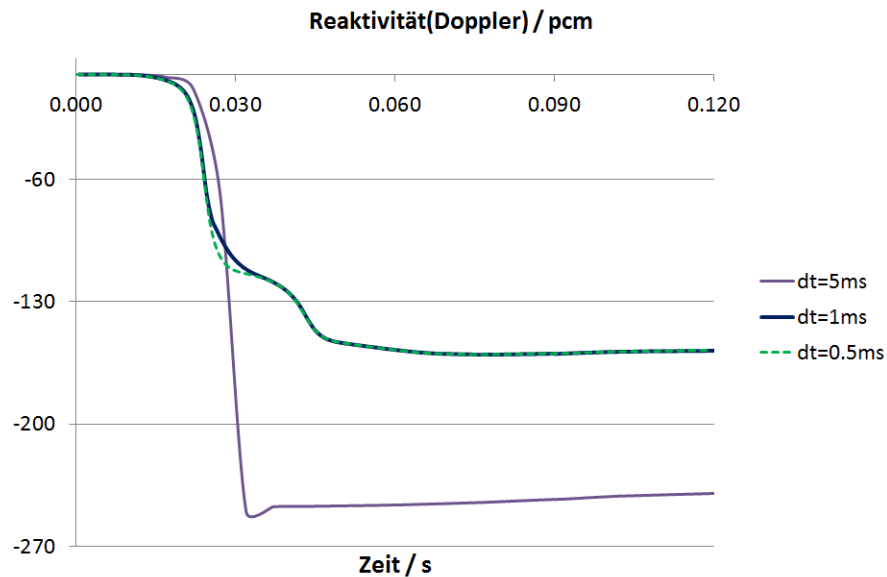


Abb. 6.28: *Reaktivitätsminderung in einem UTOP (1,8\$) aufgrund des Dopplereffekts unter Verwendung verschiedener Zeitschrittweiten für die Thermohydraulik-Neutronik-Iteration. Mit einer zu großen Zeitschrittweite wird der negative Beitrag mit -240pcm deutlich überschätzt. Im Vergleich dazu liefern die kürzeren Schrittweiten einen Beitrag von ca. -150pcm.*

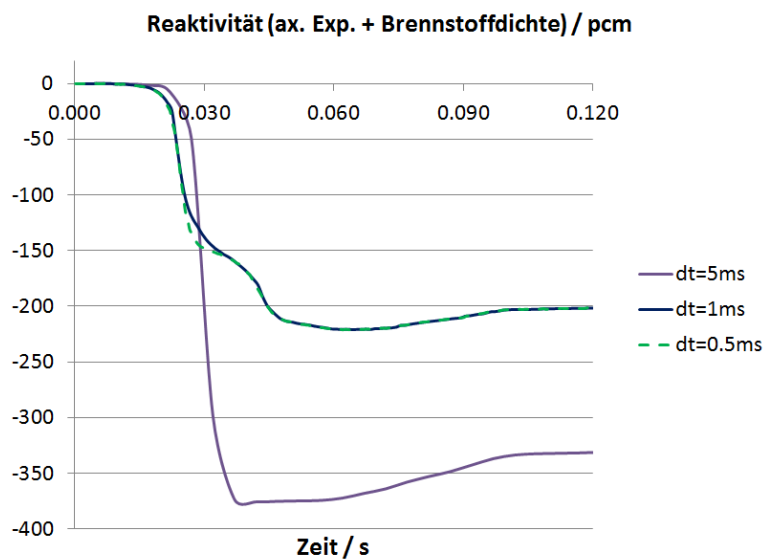


Abb. 6.29: *Entwicklung des Reaktivitätsbeitrags der sich durch axiale Ausdehnung des Brennstoffs verbunden mit einer Reduktion der Dichte in den einzelnen Maschen in einem UTOP (1,8\$) unter Verwendung verschiedener Zeitschrittweiten für die Thermohydraulik-Neutronik-Iteration ergibt. Wiederrum führt eine zu große Schrittweite zu einer Überschätzung des Beitrags mit -340pcm. Mit geeigneter Schrittweite beläuft sich die Reaktivitätsminderung nach Durchlaufen des UTOPs auf ca. -200pcm.*

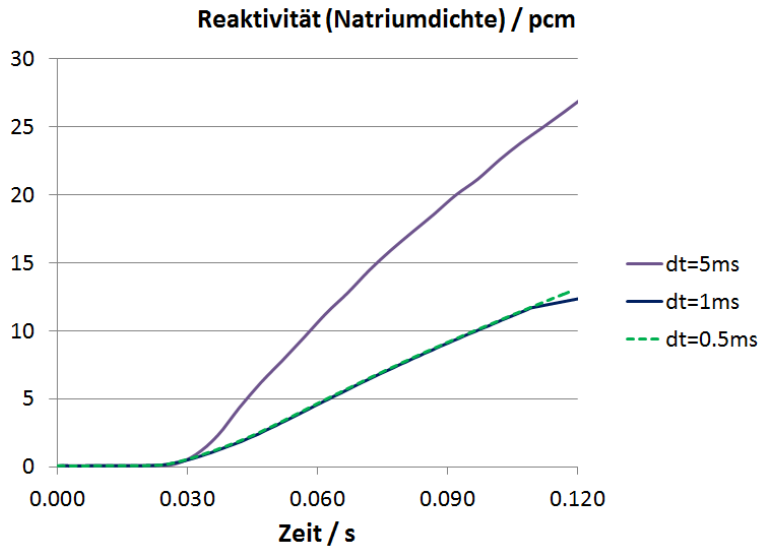


Abb. 6.30: Entwicklung des Reaktivitätsbeitrags in einem UTOP (1,8 \$) unter Verwendung verschiedener Zeitschrittweiten für die Thermohydraulik-Neutronik-Iteration, der sich aus der Änderung des Natriumanteils ergibt. Im Vergleich zum Dopplerebeitrag bzw. Expansionsbeitrag ist die Änderung in diesem Fall positiv und wesentlich kleiner (+15pcm für ausreichend kleine Zeitschrittweiten.)

Der Reaktivitätseintrag erfolgt in dieser Arbeit über das Verfahren der Steuerstäbe und ist in Abbildung 6.31 dargestellt. Für den betrachteten Kern ergibt sich ein Betawert von ca. 350pcm, was damit einem Dollar entspricht. Um eine zusätzliche Reaktivität von 1,8\$ zu erreichen, müssen dem System folglich ca. 630pcm zugeführt werden. In Abbildung 6.31 ist ein minimaler Unterschied in der absoluten Zufuhr für die Rechnung mit $dt=5ms$ zu erkennen, der auf eine sich unterschiedlich entwickelnde Neutronenflussverteilung durch oben genannte Effekte zurückzuführen ist. Schließlich führt die Überschätzung des Dopplereffekts und der Brennstoffausdehnung bei der Simulation mit $dt=5ms$ zu einer Fluss- bzw. Leistungsabsenkung, wodurch die Steuerelemente nicht mehr die volle Wirkung wie in den Fällen mit kleinerer Schrittweite zeigen. Auffällig ist, dass in allen drei Fällen sowohl die aufsteigende als auch die abfallende Flanke nicht linear verläuft. Dieses Verhalten, auch „Cusping-Effekt“ genannt, ist eine Konsequenz der nodalen Modellierung des Reaktors in DYN3D und nicht physikalisch begründet. Beim Verfahren des Steuerstabes fällt das untere Ende des Absorbers nicht permanent mit einer axialen Maschengrenze zusammen, sondern das Regelelementende befindet sich zwischenzeitlich innerhalb einer Masche. Der makroskopische Querschnitt für diese Masche mit dem Volumen V_{node} wird in DYN3D über ein volumetrisches Wichten von Steuerelmentquerschnitt Σ_{CR} und dem Querschnitt für den leeren Kanal Σ_{Ch} bestimmt:

$$\Sigma_{geom} = \frac{\Sigma_{CR} \cdot V_{CR} + \Sigma_{Ch} \cdot V_{Ch}}{V_{CR} + V_{Ch}} \quad (6.1)$$

(mit V_{CR} : Volumen des Steuerelements in der Masche, V_{Ch} : Volumen des leeren Kanals in der Masche)

Durch diese einfache Betrachtung wird die Absorption in der Masche für Zwischenstellungen der Regelelemente überschätzt, da der Absorber als homogen in der Masche verteilt betrachtet wird. Überfährt das Steuerelementende eine Maschengrenze flacht

die Flanke daher ab. Eine Verminderung des Cusping-Effekts kann durch eine zusätzliche Flusswichtung erreicht werden. In diesem Fall wurde jedoch darauf verzichtet, da der Cusping-Effekt keinen entscheidenden Einfluss auf den Störfallverlauf hat. Vielmehr geht es darum zu zeigen, dass das gekoppelte System in der Lage ist, den Störfallverlauf nach Eintrag einer hohen externen Reaktivität zu simulieren.

In den Rechnungen mit Zeitschrittweiten $dt=1\text{ms}$ und $dt=0,5\text{ms}$ sind die Unterschiede in den Reaktivitäten und dem Leistungsverlauf gering. Aufgrund der langen Rechenzeiten wurde beschlossen, die zuvor dargestellten Analysen mit einer Zeitschrittweite von $dt=1\text{ms}$ durchzuführen.

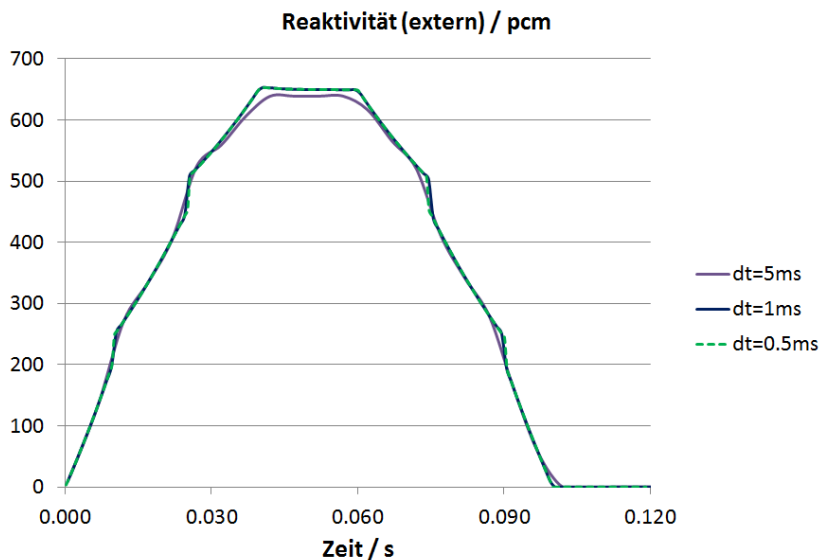


Abb. 6.31: Zeitlicher Verlauf der externen Reaktivitätszufuhr, die nach Benchmark 1,8 $\$$ erreichen soll, was bei einem Anteil an der Reaktivität durch verzögerte Neutronen von ca. 350pcm unter Normalbedingungen einem Wert von ca. 630pcm entspricht. Der nicht exakt lineare Anstieg bzw. Abfall ist durch den Cusping-Effekt zu erklären.

6.1.4 Variation der Gapweite

Die vorherigen Kapitel haben gezeigt, dass die Entwicklung der Brennstofftemperatur entscheidend für den Verlauf der Transienten ist. Die negativen Reaktivitätsbeiträge durch Doppler und axiale Ausdehnung sind allein auf die Brennstofftemperatur zurückzuführen. Daher ist für die Simulation einer Transienten die Beschreibung der Wärmeabfuhr im Brennstoff von essentieller Bedeutung. Der höchste Wärmeübergangswiderstand ist das Gap zwischen Brennstoff und Hüllrohr. In diesem Zwischenraum befindet sich Gas, welches eine schlechte Wärmeübertragung aufweist. Durch die verschiedenen temperaturbedingten Ausdehnungen von Brennstoff und Hüllrohr verändert sich die Gapweite. Sie kann als die Größe identifiziert werden, die den größten Einfluss auf die Wärmeabfuhr hat. Leider liefert das Benchmark für die Gapweite keine detaillierte Beschreibung. Es wird ein mittlerer Pelletradius vorgegeben und eine konstante Gapweite über die Länge des Brennstabs angenommen. Daher werden Variationsrechnungen mit drei verschiedenen Startgapweiten verglichen, um so den Einfluss einer veränderten Wärmeabfuhr zu verdeutlichen. Der Abstand zwischen Hüllrohr und Brennstoff betrug

im oben diskutierten Referenzfall 0,1mm. Für die Variationen wurde einmal ein größeres Gap mit 0,151mm (Wert ergibt sich aus der Benchmarkdefinition) und ein kleineres Gap mit 0,051mm simuliert. In Abbildung 6.32 ist die Entwicklung der Brennstofftemperatur über der Zeit dargestellt.

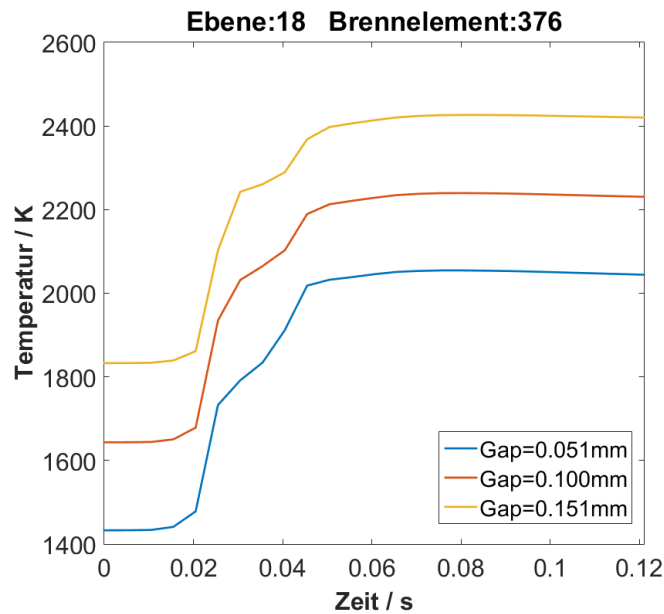


Abb. 6.32: Zeitlicher Verlauf der mittleren Brennstofftemperatur im innersten Ring in einem UTOP (1,8 \$) unter Verwendung verschiedener Gapweiten.

Schon vor Beginn der Transienten zeichnen sich deutliche Unterschiede in der mittleren Brennstofftemperatur ab. Bei Vergrößerung der Gapweite um 0,05mm erhöht sich die Temperatur um jeweils 200K. Diese Differenz zieht sich durch den kompletten Verlauf der Transienten. Damit beträgt die maximale mittlere Brennstofftemperatur nach 100ms für ein Gap mit 0,051mm 2000K, während sich für ein Gap mit 0,151mm 2400K ergeben. Der schlechtere Wärmetransport macht sich deutlich bemerkbar. Ähnlich stellt sich die Situation für die maximale Brennstofftemperatur in der heißesten Masche dar (Abbildung 6.33).

Auch hier lässt sich mit steigender Gapweite eine Erhöhung um jeweils 200K feststellen. Damit erreicht die innere Zone des Pellets für ein Gap mit 0.151mm schon nach ca.25ms die Schmelztemperatur, während bei der kleinsten Gapweite diese zu keinem Zeitpunkt erreicht wird. Eine schlechtere Wärmeabfuhr hat zur Folge, dass weniger Wärme an das Hüllrohr und das Kühlmittel abgegeben wird, da die produzierte Energie in allen drei Fällen gleich ist. Dies bestätigt sich, wenn man Abbildung 6.34 und 6.35 betrachtet.

Die Kurven zeigen jeweils den Temperaturverlauf für das Kühlmittel und das Hüllrohr in der heißesten Masche. Für die größte Gapweite liegen beide Temperaturen am niedrigsten. Die höchsten Temperaturen finden sich im Fall der kleinsten Gapweite. Aber auch hier wird weder die Siedetemperatur von Natrium, noch die Schmelztemperatur des Hüllrohrs erreicht. Betrachtet man den Verlauf der Leistung (Abbildung 6.36), so fallen die Unterschiede aufgrund der Variation des Gaps gering aus, da in allen drei Fällen am Brennstoffinventar nichts geändert wurde.

Zusätzlich wurden die Reaktivitätsbeiträge der einzelnen Rückwirkungseffekte bei

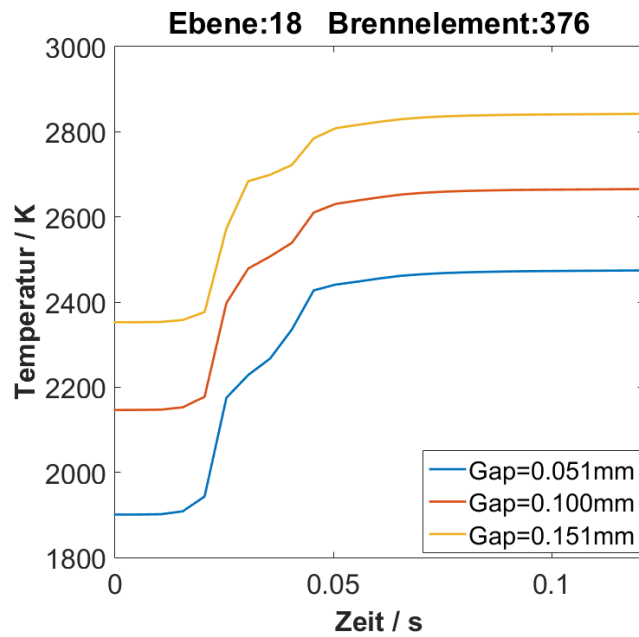


Abb. 6.33: Zeitlicher Verlauf der maximalen Brennstofftemperatur im innersten Ring in einem UTOP (1,8 \$) unter Verwendung verschiedener Gapweiten

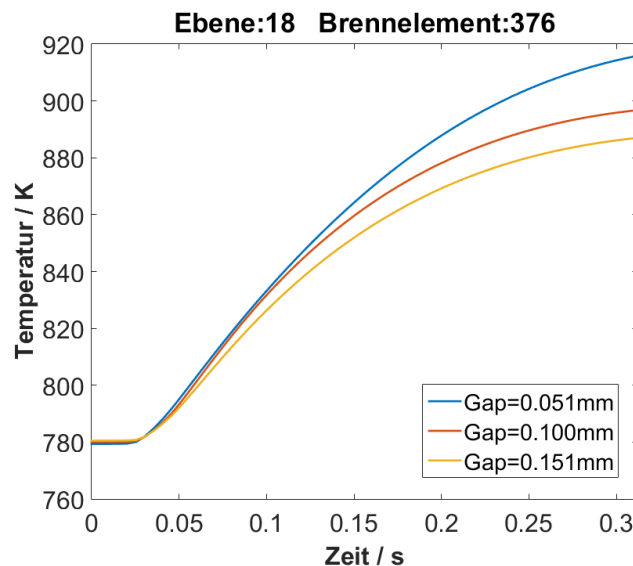


Abb. 6.34: Zeitlicher Verlauf der Kühlmitteltemperatur in der heißesten Zone in einem UTOP (1,8 \$) unter Verwendung verschiedener Gapweiten. Der Siedepunkt von ca. 1150K wird nicht erreicht.

Verwendung unterschiedlicher Gapweiten verglichen. Abbildung 6.37 zeigt, dass für den Fall mit dem heißesten Brennstoff (Gap=0,151mm) der Dopplereffekt die geringste negative Reaktivität aufweist. Betrachtet man jedoch dazu Abbildung 6.32, die den Verlauf der mittleren Brennstofftemperatur zeigt, wird deutlich, dass der Temperaturanstieg während der Transienten in etwa gleich groß ist. Der Dopplereffekt sinkt jedoch mit zunehmender Temperatur (Abbildung 6.25). Damit ist klar, dass eine Temperaturerhöhung bei insgesamt niedrigerer Temperatur zu einem größeren negativen Beitrag führen muss und damit der Dopplereffekt für das kleinste Gap während der

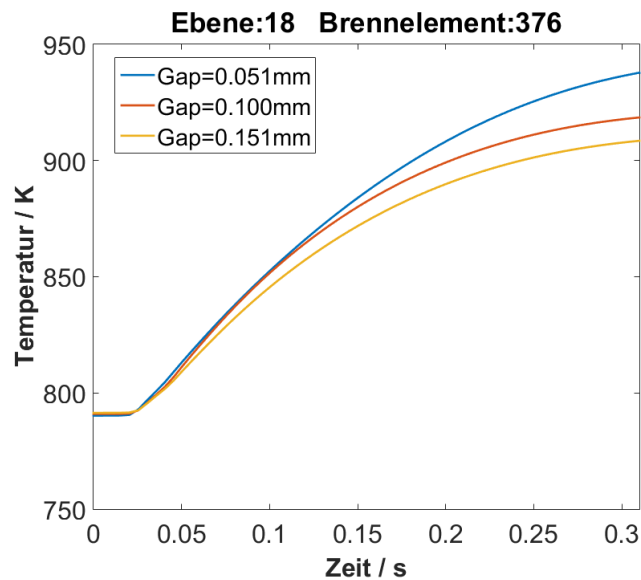


Abb. 6.35: Zeitlicher Verlauf der Hüllrohrtemperatur in der heißesten Masche in einem UTOP (1,8 \$) unter Verwendung verschiedener Gapweiten.

Transienten am meisten zum Tragen kommt. Ähnlich verhält es sich mit dem negativen Reaktivitätsbeitrag durch axiale Expansion des Brennstoffs, der in Abbildung 6.38 für die drei Gapweiten dargestellt ist. Die relative Änderung durch thermische Expansion ist für eine geringere Startlänge der Masche für den kühleren Brennstoff (Gap=0,051mm) größer und damit fällt auch der negative Beitrag zur Reaktivität höher aus. Im Fall des Kühlmitteldichteeffekts (dargestellt in Abbildung 6.39) ist der positive Reaktivitätsbeitrag für das kleinste Gap am größten. Da es im UTOP zu keiner merklichen Verdampfung kommt, resultiert die Verminderung des Kühlmittels aus der radialen Ausdehnung des Hüllrohrs, das dabei Natrium verdrängt. Wie Abbildung 6.35 wird durch das kleine Gap mehr Wärme an das Hüllrohr abgegeben, wodurch die thermische Expansion am größten ist. Zum Abschluß wird der Eintrag der externen Reaktivität betrachtet (Abbildung 6.40). Für eine Gapweite von 0,051mm ergibt sich hier der höchste Wert. Dies liegt daran, dass die Steuerstabstellung, die einen Reaktivitätsbeitrag von 1,8\$ liefert, für den kalten Zustand mit den Benchmarkangaben ermittelt wurde. Für alle drei Fälle stehen die Steuerstäbe auf derselben Höhe. Bei der Iteration in den stationären Zustand hat sich der Brennstoff aufgrund der unterschiedlichen Gapweiten und der damit verbundenen Differenz in den Brennstofftemperaturen unterschiedlich stark ausgedehnt. Damit ist der Anteil an Brennstoff für das größte Gap in der obersten Masche am höchsten. Nach vollem Ausfahren steht das untere Ende der Regelemente neben der obersten Masche, in die der Brennstoff gewandert ist. Damit ist der externe Reaktivitätseintrag für den heißeren Brennstoff leicht vermindert. In Abbildung 6.41 sind die Einzelbeiträge zur Gesamtreaktivität aufsummiert. Die Kurven unterscheiden sich vom allgemeinen Verlauf nur wenig voneinander. Die rote Kurve für eine Gapweite von 0,051mm ist leicht nach unten versetzt, was sich zwangsläufig aus den Erklärungen zu den Einzelreaktivitäten ergibt.

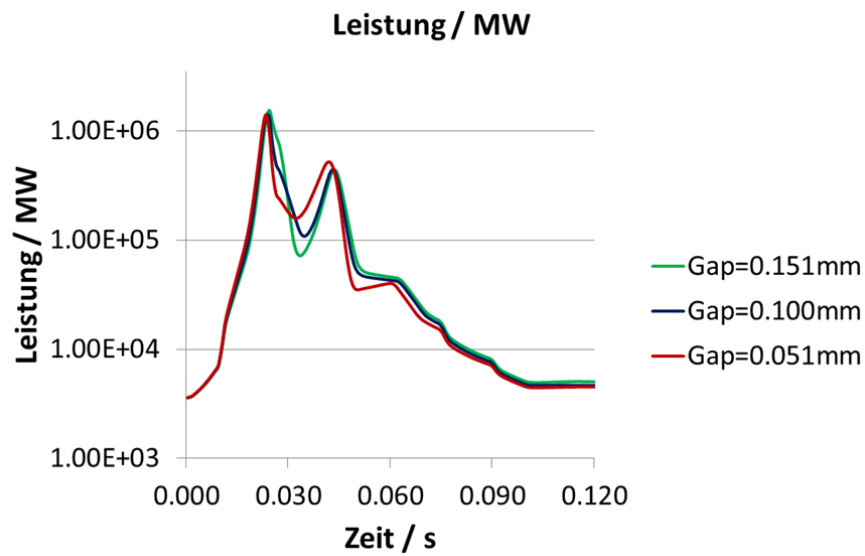


Abb. 6.36: Vergleich des Leistungsverlaufs in einem UTOP (1,8 \$) bei Verwenden verschiedener verschiedener Gapweiten.

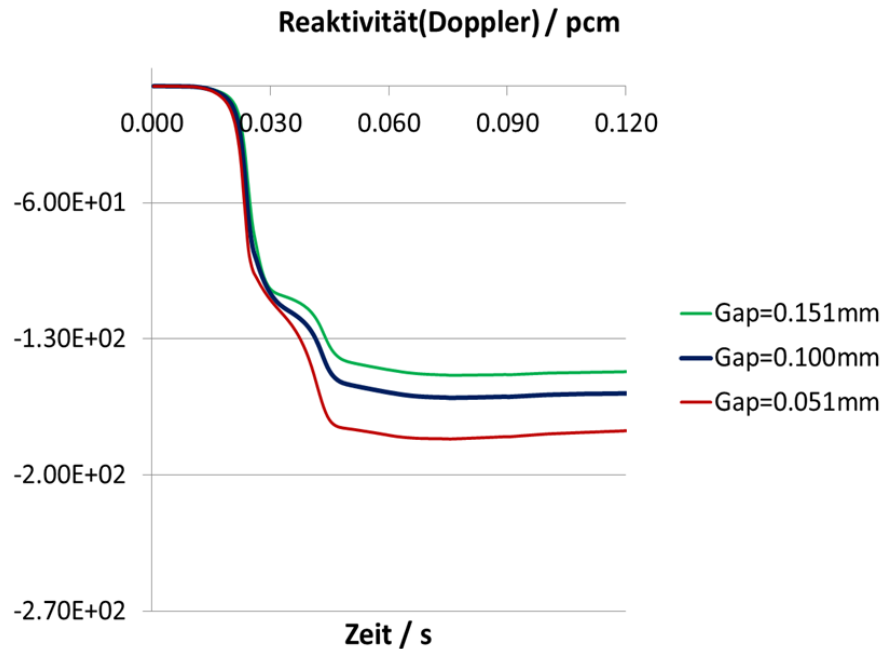


Abb. 6.37: Entwicklung des Reaktivitätsbeitrags aufgrund des Dopplereffekts in einem UTOP (1,8\$) unter Verwendung verschiedener Gapweiten.

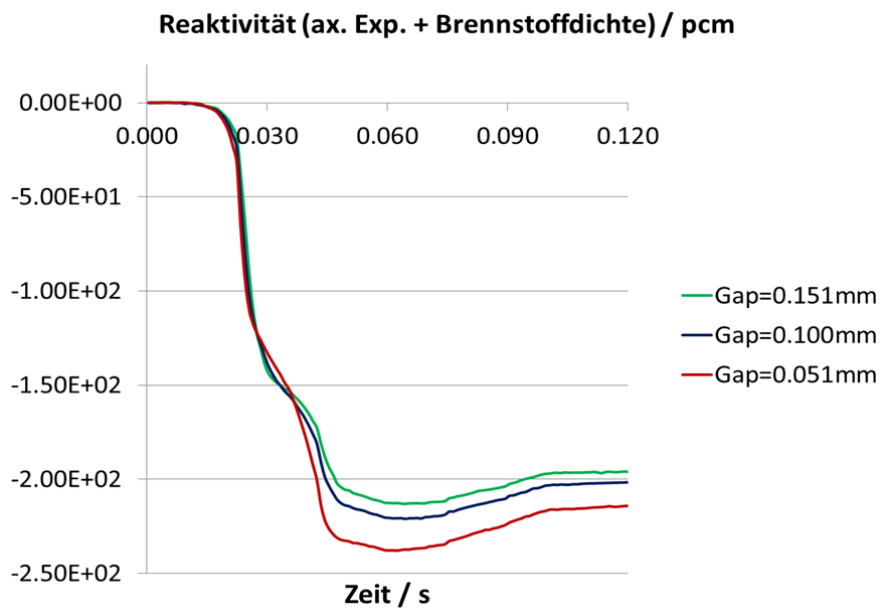


Abb. 6.38: Entwicklung des Reaktivitätsbeitrags aufgrund der axialen Brennstoffausdehnung in einem UTOP (1,8 \$) unter Verwendung verschiedener Gapweiten.

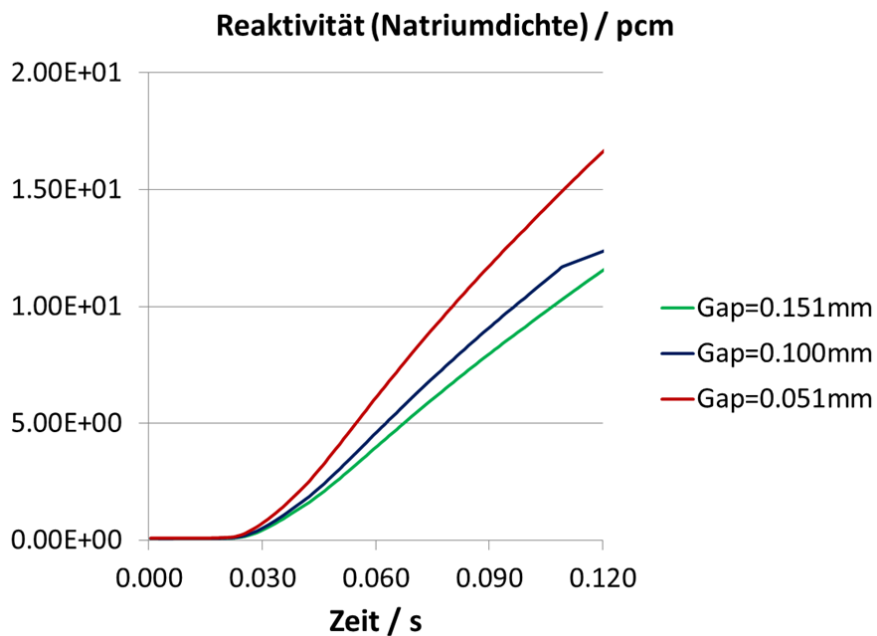


Abb. 6.39: Entwicklung des Reaktivitätsbeitrags durch Änderung der Natriumdichte in einem UTOP (1,8\$) unter Verwendung verschiedener Gapweiten.

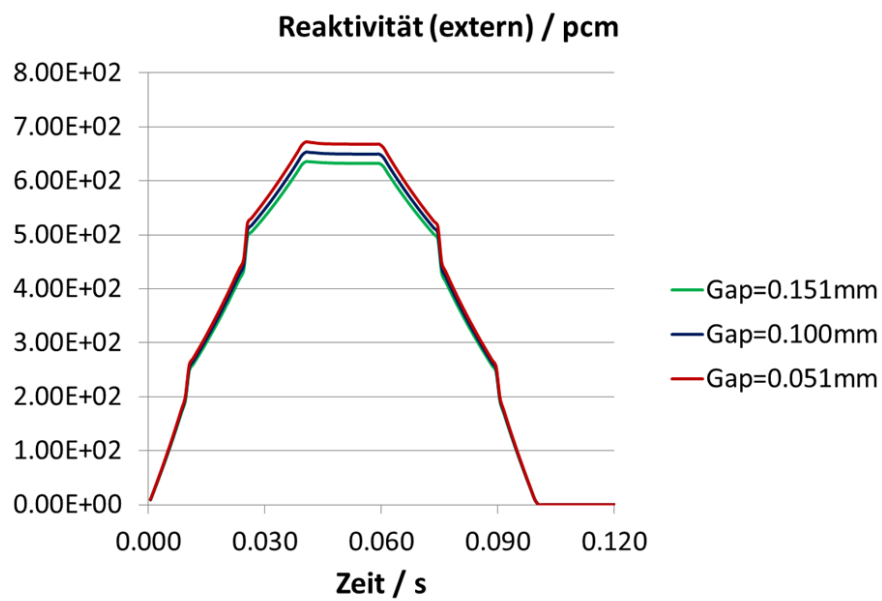


Abb. 6.40: Verlauf der externen Reaktivität unter Verwendung verschiedener Gapweiten. Der maximale Eintrag erhöht sich leicht mit kleiner werdendem Gap.

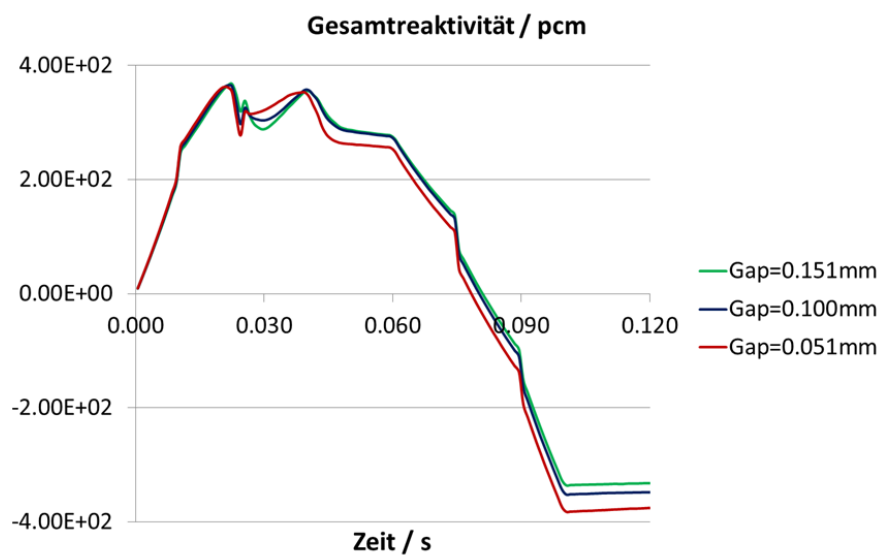


Abb. 6.41: Entwicklung des Reaktivitätsbeiträge resultierenden aus verschiedenen Effekten in einem UTOP (1,8\$) unter Verwendung verschiedener Gapweiten sowie die Gesamtreaktivität als Summe der Einzelbeiträge.

6.1.5 Bewertung UTOP

Eine externe Störung mit einem Reaktivitätseintrag von 1,8\$ kann vom Benchmark-Kern durch interne Rückwirkungen kompensiert werden. Im Leistungsprofil zeigt sich ein hoher, aber äußerst schmaler Peak. Durch den Dopplereffekt und die axiale Brennstoffausdehnung wird die Leistungsexkursion abgefangen. Nach Durchlaufen der Reaktivitätszugabe kehrt das System in einen Zustand mit leicht erhöhter Leistung zurück, und die einzelnen Komponenten kühlen sich allmählich wieder ab. Ein Aufschmelzen im Inneren der Pellets ist jedoch zu erwarten, da lokal die Schmelztemperatur des Brennstoffs (ca. 2500K) überschritten wird (siehe Abbildung 6.17). Die mittlere Brennstofftemperatur bleibt jedoch auch im heißesten Brennelement unter der Schmelztemperatur (siehe Abbildung 6.32). Die erzielten Ergebnisse bedürfen einer weiteren Überprüfung. Es muss angemerkt werden, dass die Simulationen ohne das RIA-Modell von ASTEC-Na gerechnet wurden. Das RIA-Modell berücksichtigt die Wärmeleitung im Gap mit besonderen Modellen und die Brennstoffverlagerung im Hüllrohr. Dieses Modell bedarf aber zusätzlich der Kenntnis und Vorgabe von Spaltgasverteilungen, Verteilung der Plutonium-Konzentrationen und ein Axialprofil der Gapweite im Input. Solche Daten sind im Benchmark nicht definiert, um möglichst einfache Randbedingung zu schaffen. Für eine zulässige Aussage ist eine realistische Gapweite mit axialer Auflösung wichtig, da diese maßgeblich für die Entwicklung der Brennstofftemperatur verantwortlich ist, die ihrerseits wiederum eng mit der negativen Rückkopplung über Dopplereffekt und thermische Ausdehnung verknüpft ist. Für alle betrachteten Gapweiten kann jedoch festgestellt werden, dass es weder zum Natriumsieden kommt, noch dass das Hüllrohr seine Schmelztemperatur erreicht. Ein Hüllrohrversagen durch mechanische Einwirkung kann nicht ausgeschlossen werden (beispielsweise durch Druckaufbau über frei werdende Spaltgase im Inneren des Brennstabs). Mit einer Zerstörung der Kerngeometrie ist im simulierten UTOP-Störfall dennoch nicht zu rechnen.

6.2 Kerndurchsatzstörfall bei Versagen der Schnellabschaltung - ULOF

6.2.1 Beschreibung des ULOF Störfalls

Bei einem ULOF Störfall wird ein Ausfall der Primärkreislaufpumpe unterstellt, während die Notabschaltung, also das Einschießen der Steuerstäbe, versagt. Der hier betrachtete Störfall ist dem OECD/NEA Benchmark entnommen. Dabei wird die Eintrittstemperatur des Kühlmittels während der Transienten nach der Benchmarkdefinition konstant bei $668K$ gehalten. Die Durchflussrate fällt gemäß der Vorgaben exponentiell entsprechend Abbildung 6.42 ab. Nach $t=10s$ hat sich die Durchflussrate halbiert und nähert sich danach asymptotisch einem Wert von 10% der anfänglichen Rate. Die Steuerung der Durchflussrate wird in der gekoppelten Rechnung über den „Restart-File“ für ASTEC-Na geregelt. Dazu wurde ein neuer Parameter eingeführt, mittels dem, in Abhängigkeit der transienten Zeit, die exponentielle Abnahme im Durchfluss realisiert wird.

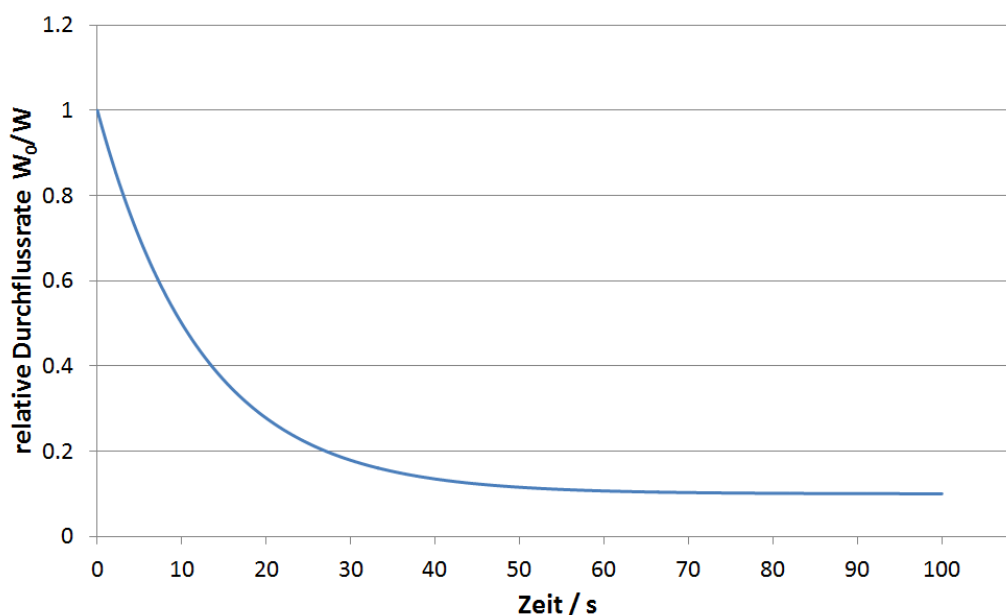


Abb. 6.42: Entwicklung der Natrium-Durchflussrate bei dem hier betrachteten ULOF-Störfall. Die Exponentialfunktion hat eine Halbwertszeit von 10s und einen unteren Grenzwert von 10% des ursprünglichen, nominalen Natriumdurchflusses.

6.2.2 Ergebnisse für den ULOF-Störfall

Zunächst soll der allgemeine Verlauf der Störung betrachtet werden. Dies geschieht an einer Simulation mit einer Gapweite von 0,1mm und einer Zeitschrittweite für die Neutronik/Thermohydraulik-Iteration von $dt=0,5s$. Die Auswahl der dabei verwendete Makro-Zeitschrittweite für die Neutronik/Thermohydraulik-Iteration wird im Anschluss begründet. Weiter soll wiederum durch Variationsrechnungen bestimmt werden, welchen Einfluss die Gapweite auf die Ergebnisse der Störfallsimulation hat. Der verminderte Kühlmitteldurchsatz in einem ULOF führt zunächst zu einem Aufheizen

des Natriums, da weniger Kühlmittel zur Verfügung steht, die im Brennstoff produzierte Wärme abzuführen. Die Aufheizung kann dabei soweit fortschreiten, dass es zu Natriumsieden, verbunden mit lokalem Void kommt. Zusätzlich führt der Verlust an Natrium zu Veränderungen im Neutronenspektrum. Der Neutronenfluss nimmt aufgrund der verminderten Fremdabsorption von Neutronen im Natrium zu. Zudem bildet sich durch das Fehlen von Stoßpartnern ein „härteres“ Neutronenspektrum aus, es verschiebt sich also zu höheren Energien. Das bedeutet aus neutronischer Sicht, dass sich auch die Neutronenausbeute erhöht (1.2). Es werden pro Spaltung im Durchschnitt mehr freie Neutronen produziert, die zu einer Erhöhung der Leistung führen. Als Folge der schlechteren Wärmeabfuhr heizen sich auch Brennstoff und Hüllrohr zunehmend auf. Dem positiven Voideffekt steht dementsprechend ein negativ wirkender Dopplereffekt sowie ein negativer Reaktivitätsbeitrag durch axiale thermische Expansion entgegen. Wie sich die Parameter im Detail entwickeln, soll im folgenden erläutert werden. Die Simulation des ULOF endet nach ca. 35-40s mit dem Einsetzen extremer, schneller Änderungen in der Transienten, möglicherweise bedingt durch den Einbruch von Natrium in zuvor gevoidete Kanäle. Solch schlagartige Änderungen führen zu numerischen Instabilitäten und oftmals zum Abbruch der Rechnung.

6.2.2.1 Allgemeiner Verlauf

6.2.2.2 Erwärmung des Kühlmittels durch verminderten Durchsatz und Natriumsieden

In Abbildung 6.43 ist das Axialprofil der Natriumtemperatur zu verschiedenen Zeitpunkten wiedergegeben. Gezeigt ist die Temperaturentwicklung im Brennelement 344, das sich auf dem zweiten Ring befindet, der sich im ULOF als heißeste Zone herausgestellt hat. Betrachtet man den Verlauf auf Ebene 25, so erkennt man, dass nach ca. 20s die Siedetemperatur von 1150K im oberen Bereich des Kerns erreicht wird. Zum Zeitpunkt $t=33,13s$ hat sich das Natriumsieden über die gesamte Länge des aktiven Kerns ausgebreitet. Entsprechend der Natriumtemperatur entwickelt sich der Gasanteil im selben Brennelement 344 über die Länge des Brennelements (Abbildung 6.44). Bis $t=30,13s$ ist der Gasanteil für alle Ebenen bei 0. Danach kommt es schlagartig zum Voiden des Kerns. Zur Zeit $t=33,13s$ sind alle Ebenen über 18 komplett gevoidet und schon kurze Zeit später der komplette aktive Kernteil in Brennelement 344. Nach 35,13s kommt es zu einer Natriumrückströmung von oben in den Kern, kurze Zeit später gelangt auch Natrium von unten in den Kern. Solch schnelle, massive Änderungen in der Kühlmittelverteilung führen zu numerischen Instabilitäten, weshalb die Simulation an dieser Stelle stoppt. Um zu sehen, welche Brennelemente von diesem extremen Verdampfen betroffen sind, wurde ein Radialprofil auf Ebene 20 erstellt, das in Abbildung 6.45 zu finden ist. Es zeigt sich, dass nicht nur der heißeste, zweite Ring gevoidet wird, sondern auch Ring 4. Im weiteren Verlauf breitet sich der Voidzustand über die Ringe 2-5 aus. Im innersten Ring kommt es nicht zu solch einer massiven Voidbildung. In der letzten Aufnahme zum Zeitpunkt $t=35,63s$ ist zu erkennen, dass sich der Void weiter radial nach außen ausbreitet, während in den inneren Zonen wieder Natrium eingeströmt ist.

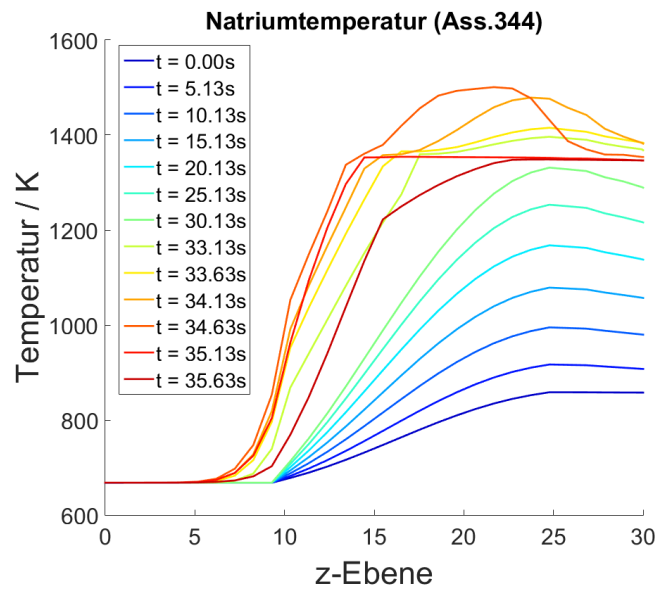


Abb. 6.43: Axialprofil der Kühlmitteltemperatur für Brennelement 344 zu verschiedenen Zeiten.

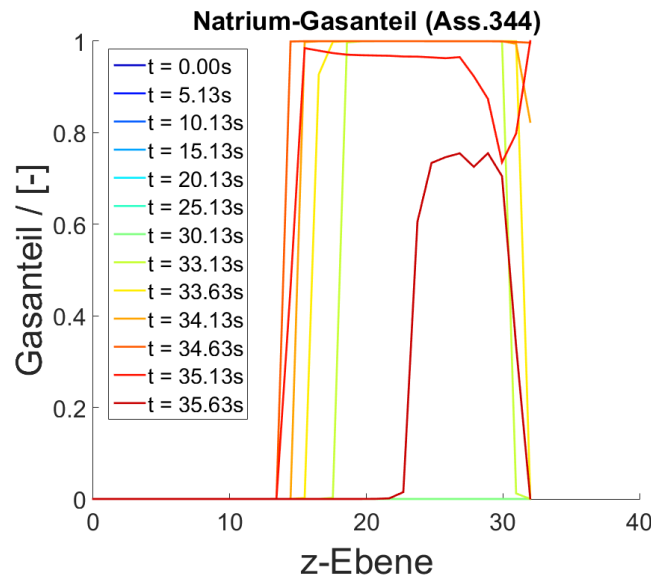


Abb. 6.44: Axialprofil des Gasanteils von Natrium in Brennelement 344 zu verschiedenen Zeiten.

6.2.2.3 Entwicklung des Neutronenspektrums aufgrund des Natriumsiedens

Der Einfluss des Natriumverlusts auf das Neutronenspektrum ist in Abbildung 6.46 dargestellt. Die blaue Kurve zeigt das Spektrum vor Beginn der Transienten im Brennelement 344 auf Höhe Kernmitte. Im Vergleich dazu ist in rot der Verlauf des Spektrums für dieselbe Masche zum Zeitpunkt $t=33.13\text{s}$ gezeigt. Zu diesem Zeitpunkt ist die Masche komplett gevodet. Der Anteil der niederen Energiegruppen bis zu einer Energie von ca. $2 \cdot 10^{-3}\text{MeV}$ ist im gevodeten Zustand niedriger. Gleichzeitig ist in den Gruppen mit größerer Energie eine Erhöhung des Spektrums festzustellen. Es findet somit

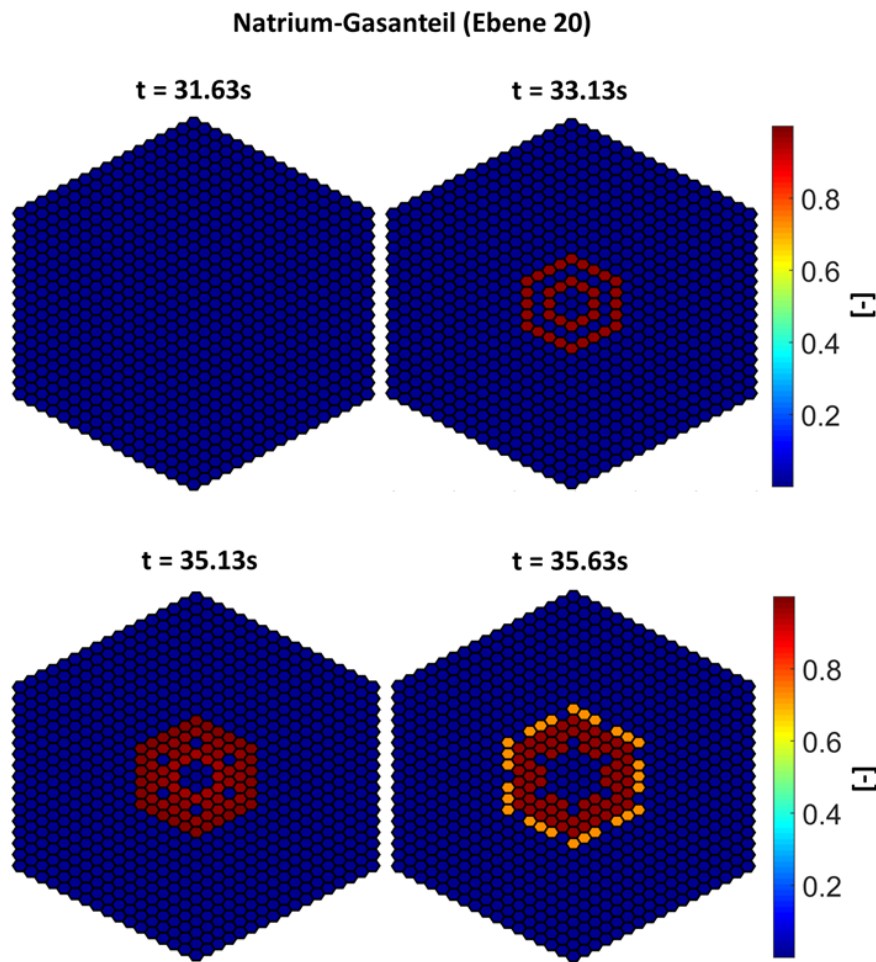


Abb. 6.45: Radialprofil des Gasanteils von Natrium in Brennelement 344 auf Ebene20.

eine Verschiebung des Spektrums zu höheren Energien statt - das Neutronenspektrum wird härter. Zu beachten ist die logarithmische Auftragung der Energie, in der die extrem schmalen unteren Energiegruppen stark aufgeweitet werden.

6.2.2.4 Entwicklung der Leistung

Betrachtet man den Verlauf der relativen Reaktorgesamtleistung in Abbildung 6.47, ist nach Einsetzen der Störung bei $t=0\text{s}$ zunächst ein minimaler Anstieg zu erkennen. Danach fällt die Leistung linear auf ein Minimum von ca. 75% der Ausgangsleistung ab, dem ein rapider Anstieg folgt. Nach 35,63s bricht die Rechnung ab. Die Leistung hat dabei einen Wert von 150% erreicht. Betrachtet man die radiale Leistungsverteilung über den Kern am Ende der Rechnung in der heißesten Ebene (Abbildung 6.47), erkennt man eine typische Leistungsverteilung mit dem Maximum im Zentrum des Kerns und einem Absinken hin zum Reflektor. Erst bei genauer Analyse ist festzustellen, dass das Leistungsmaximum in diesem Fall nicht im inneren Ring liegt, sondern im zweiten Ring. Daher sind die Axialprofile jeweils exemplarisch für das Brennelement 344, das sich auf dem zweiten Ring befindet, angegeben, so z.B. auch das axiale Leistungsprofil, das in Abbildung 6.48 dargestellt ist. Daraus ist ersichtlich, dass das Leistungsmaximum während der kompletten Transienten um Ebene 18/19, also knapp

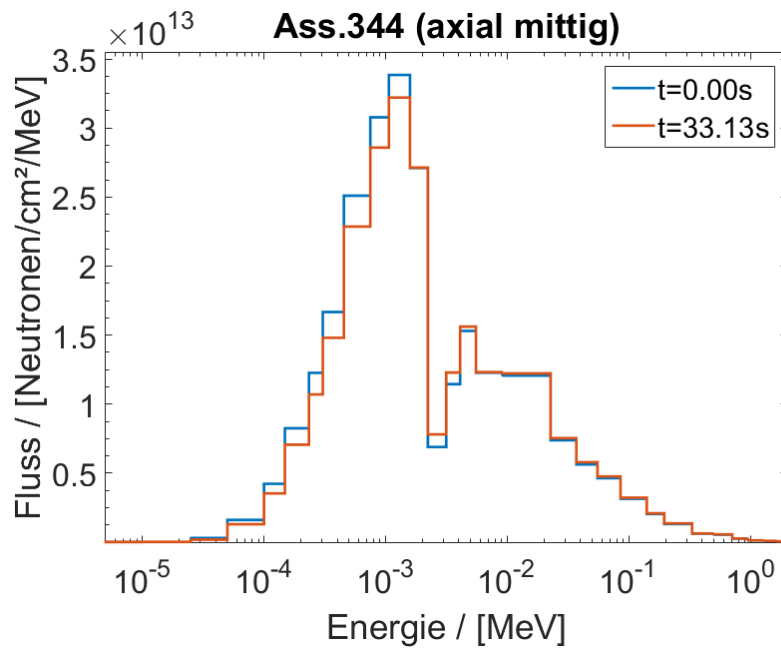


Abb. 6.46: Neutronenspektrum vor der Transienten zum Zeitpunkt $t=0,0s$ und nach $33,13s$ in der Mitte (axial) des Kerns in Brennelement 344.

über der Kernmitte, liegt. Der Abstand der dargestellten Zeitpunkte im Schaubild ist nicht konstant gewählt. Zunächst beträgt die Zeit zwischen zwei Graphen 5s. Ab 30s, also kurz vor dem steilen Gradienten in der Leistung, sind die Zeitschritte kürzer gewählt, da hier signifikante Änderungen stattfinden. Die hier gewählte Zeitskala wird in den folgenden Darstellung der Axialprofile beibehalten. Man sieht, dass die Änderungen in der Leistung bis zum Zeitpunkt $t=33,63s$ gering ausfallen. Ab $t=34s$ und einer Durchflussrate von ca. 15% der Ausgangsrate, erhöht sich die Leistung in kürzester Zeit. Der Verlauf lässt sich wie folgt erklären. Die Verminderung an Natrium führt zu der minimalen Erhöhung am Beginn der Transienten, kann aber durch die damit verbundene Erwärmung des Brennstoffs, die den Dopplereffekt und die axiale Expansion bestimmt, abgefangen werden. Für kurze Zeit dominieren die beiden Effekte sogar das Reaktorverhalten. Wenn es dann schlagartig zur Voidbildung kommt, kann eine schlagartige Erhöhung der Leistung nicht mehr vermieden werden.

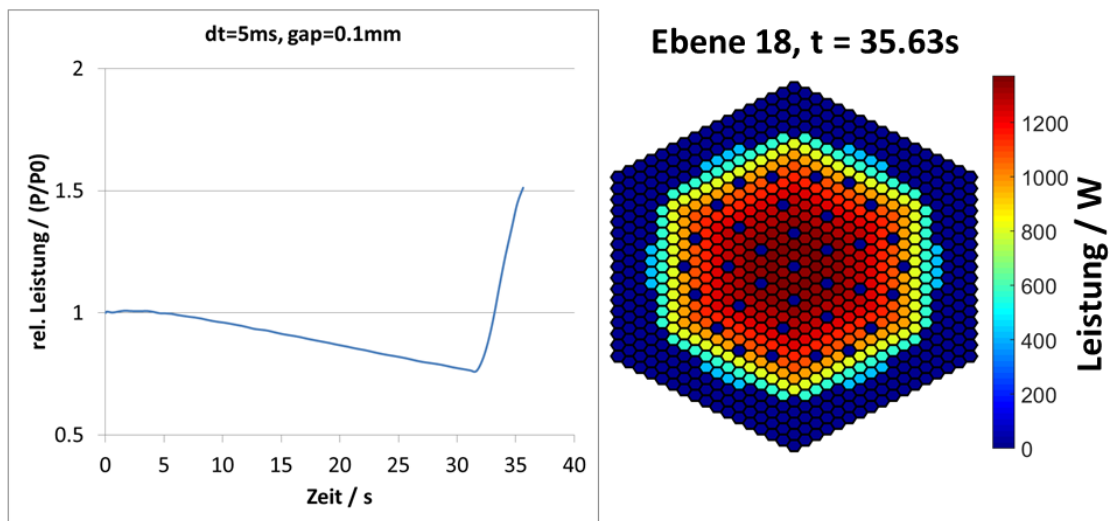


Abb. 6.47: links: Relative Leistung über der Zeit. Nach ca. 35s bricht die Rechnung ab. rechts: Radiale Leistungsverteilung über den Kern auf Ebene20 am Ende der Transienten.

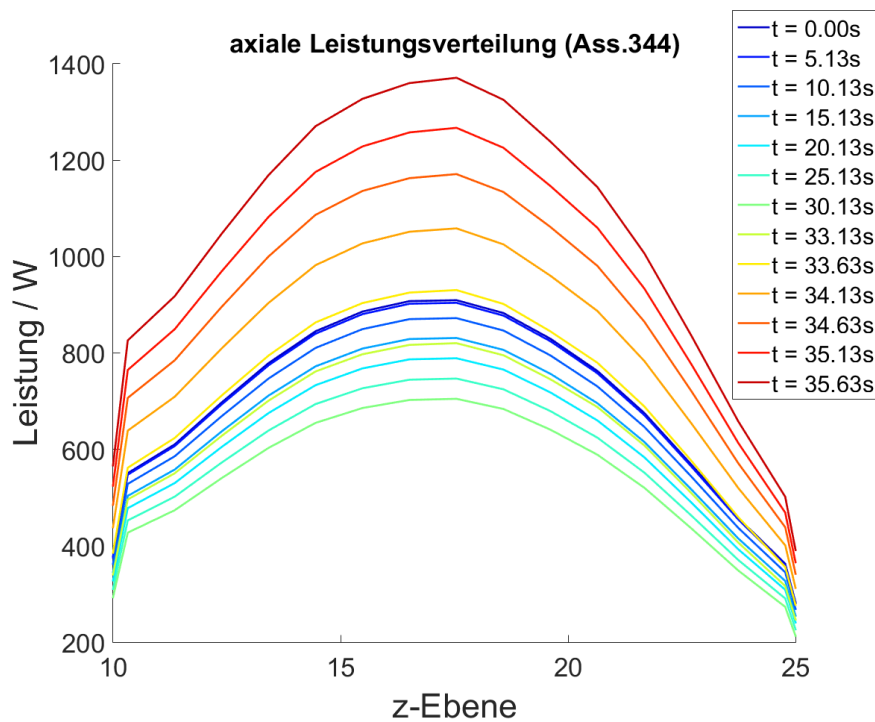


Abb. 6.48: Axialprofil der Leistung zu verschiedenen Zeiten für Brennelement Nr.344 auf dem zweiten Ring (heißeste Zone).

6.2.2.5 Entwicklung der Temperaturen und thermischen Expansion in Brennstoff und Hüllrohr

Vor der Auswertung der Temperaturprofile soll Abbildung 6.49 einen ersten Einblick in die zeitliche Entwicklung der Temperaturen der einzelnen Komponenten des Systems geben. Dargestellt sind jeweils für Brennelement 344 (zweiter Ring) und Brennelement 63 (äußerster Ring) auf mittlerer Kernebene die Temperaturen für den Brennstoff, das Hüllrohr und das Kühlmittel. Von der Kernmitte nach außen gibt es ein steiles Temperaturgefälle im Brennstoff mit einem Unterschied von 650K, der sich während der Transienten leicht erhöht. Aber selbst in der heißesten Zone des Kerns in Brennelement 344 erreicht die mittlere Brennstofftemperatur während der Transienten vor Abbruch von ASTEC-Na nicht die Schmelztemperatur. Allgemein ist zu erkennen, dass die Störung im Außenbereich des Kerns keine größeren Auswirkungen auf die Systemtemperaturen hat. Im inneren Teil des Kerns dagegen erreicht das Kühlmittel nach ca. 33s Siedetemperatur. Infolgedessen kann die Wärme im Hüllrohr nicht mehr abtransportiert werden und das Hüllrohr beginnt zu Schmelzen. Um eine Aussage über den Bereich, in dem es zum Natriumsieden und Hüllrohrschmelzen kommt, treffen zu können, werden im Folgenden axiale und radiale Profile untersucht.

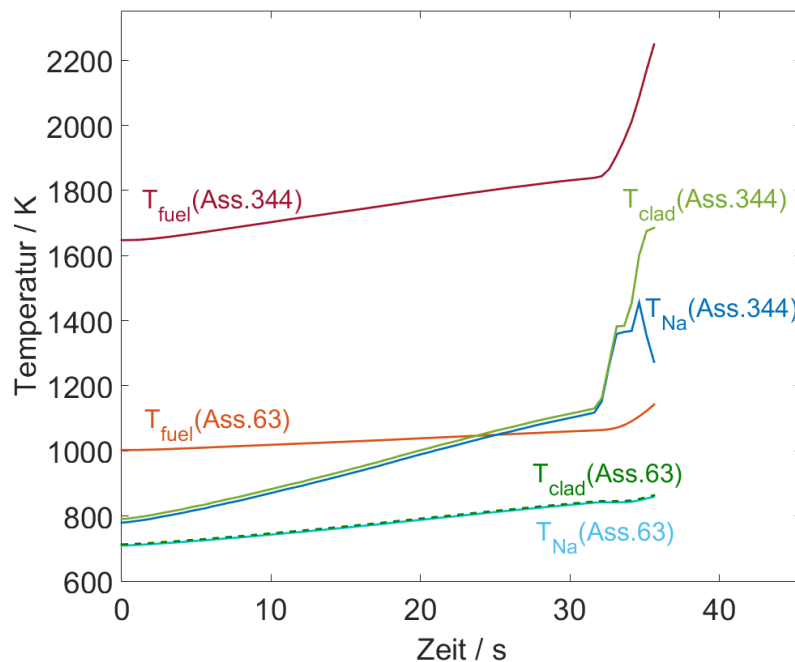


Abb. 6.49: Entwicklung der Temperaturen von Brennstoff, Hüllrohr und Kühlmittel auf Ebene 18 für Brennelement 344.

Betrachtet man das Axialprofil der mittleren Brennstofftemperatur im heißesten Ring (Abbildung 6.50), ist zu erkennen, dass zunächst die Temperatur im oberen Teil des Reaktors ansteigt, während im unteren Teil der Temperaturanstieg wenig ausgeprägt ist. Erst nach 33s, also bei Einsetzen von Sieden über den kompletten Brennstab, nimmt die mittlere Brennstofftemperatur konstant über die Länge des Brennstabs zu. Ein ähnliches Verhalten zeigt auch die maximale Brennstofftemperatur (innerste Zone im Pellet, Abbildung 6.51). Hier ist es sogar so, dass die Temperatur im unteren Be-

reich des Kerns erst abfällt. Dies ist mit der Entwicklung der Leistung konsistent. Bei abfallender Leistung wird weniger Energie produziert und der Kern heizt sich weniger stark auf. Im unteren Teil kann die Wärme durch das Natrium noch ausreichend abgeführt werden. Nach oben hin wird das Natrium immer heißer und damit auch der Wärmeabtransport erschwert.

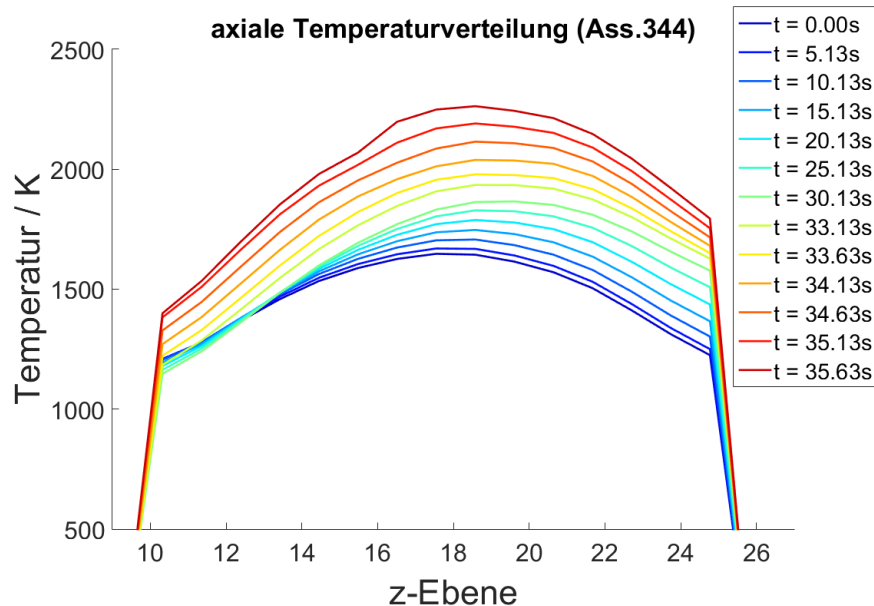


Abb. 6.50: Axialprofil der mittleren Temperatur des Brennstoff für Brennelement 344 zu verschiedenen Zeiten.

In Abbildung 6.52 ist die radiale Verteilung der Maximaltemperatur im Brennstoff über den Kern gezeigt. Nach 10s hat sich der Kern merklich erwärmt. Im inneren Teil des Kerns ist die Maximaltemperatur um ca. 500K angestiegen. Der Temperaturanstieg erfolgt nicht konstant über den Kern, vielmehr bildet sich ein Temperaturprofil mit Maximum im Zentrum aus. In den weiteren 20s erwärmt sich die innere Brennstoffzone nur leicht, bis es schließlich bei $t=35,63s$ zu einer erneuten deutlichen Temperaturerhöhung kommt. Am Ende der Simulation erreicht die innere Zone im Pellet den Bereich, in dem das Aufschmelzen des Brennstoffs beginnt. Es ist zu sehen, dass sich am Ende die heißeste Zone nicht mehr in der Kernmitte befindet (besser ersichtlich aus Abbildung 6.53), sondern sich in Ring 2 verschoben hat. Dieses Verhalten lässt sich dadurch erklären, dass sowohl alle Brennelemente im innersten Ring als auch im dritten Ring direkter Nachbar eines Steuerelements bzw. Reflektors sind, also einen entweder einen Natriumkanal oder einen Moderator neben sich haben. Dies gilt für Ring zwei nicht. Die thermohydraulischen Daten ergeben sich durch ein repräsentatives Brennelement pro Ring. Damit werden die Daten der Leistung, resultierend aus dem Fluss für die Übergabe an ASTEC-Na über einen Ring gemittelt. Vermutlich würde sich bei expliziter Simulation jedes einzelnen Brennelements ergeben, dass die Elemente in Ring zwei ohne direkten Kontakt zu Kontrollelementen aufgrund eines härteren Spektrums heißer sind. Deutlicher ist dieser Effekt in Abbildung 6.53 zu erkennen. Hier ist die thermische axiale Ausdehnung des Brennstoffs über die gesamte Länge der Brennelemente visualisiert. Da die Ausdehnung in der verwendeten Version allein von der Brennstofftemperatur bestimmt wird, muss in den Brennelementen mit der größten Ausdehnung

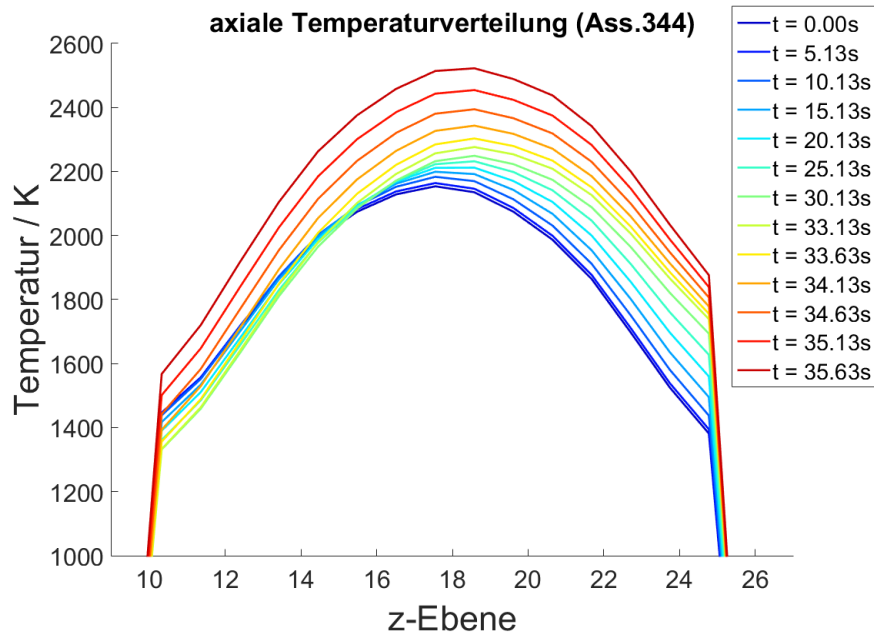


Abb. 6.51: Axialprofil der maximalen Temperatur des Brennstoff für Brennelement 344 zu verschiedenen Zeiten.

auch die größte Temperaturerhöhung in Summe über alle Maschen stattfinden. Abbildung 6.53 gibt die prozentuale Änderung im Vergleich zur Benchmarkdefinition im kalten Zustand an.

Aufgrund der unzureichenden Wärmeabfuhr erfährt auch das Hüllrohr eine hohe Temperaturerhöhung während des ULOFs. Die axiale Temperatur des Hüllrohrs ist für ein Brennelement aus dem heißesten Ring in Abbildung 6.54 für verschiedene Zeiten dargestellt. Der Temperaturverlauf ist bis zur Zeit $t=30,13\text{s}$ ähnlich der Kühlmitteltemperatur. Anschließend steigt die Temperatur insbesondere in den oberen Maschen des aktiven Kerns stark an. Nach $33,13\text{s}$ muss mit einem thermischen Versagen der Hüllrohre in den Ebenen über der Ebene 20 gerechnet werden. Im weiteren Verlauf erreichen auch die Ebenen 15-20 Schmelztemperatur. Entsprechend ergibt sich die Entwicklung der thermischen radialen Ausdehnung des Hüllrohrs, die in Abbildung 6.55 axial über Brennelement 344 aufgetragen ist. Da in der aktuell verwendeten ASTEC-Na Version die Verlagerung von Hüllrohrmaterial und Brennstoff nicht richtig berücksichtigt ist, dehnt sich das Hüllrohr an Stellen, die eigentlich geschmolzen sind, weiter aus. Für solche Szenarien muss also unbedingt die in diesen Modellen verbesserte Version eingesetzt werden bzw. eine Datenübergabe an einen Code der auch stark beschädigte Kerne rechnen kann (z.B. SIMMER) erfolgen. Der Störfall geht von der frühen Phase in die späte Störfallphase über.

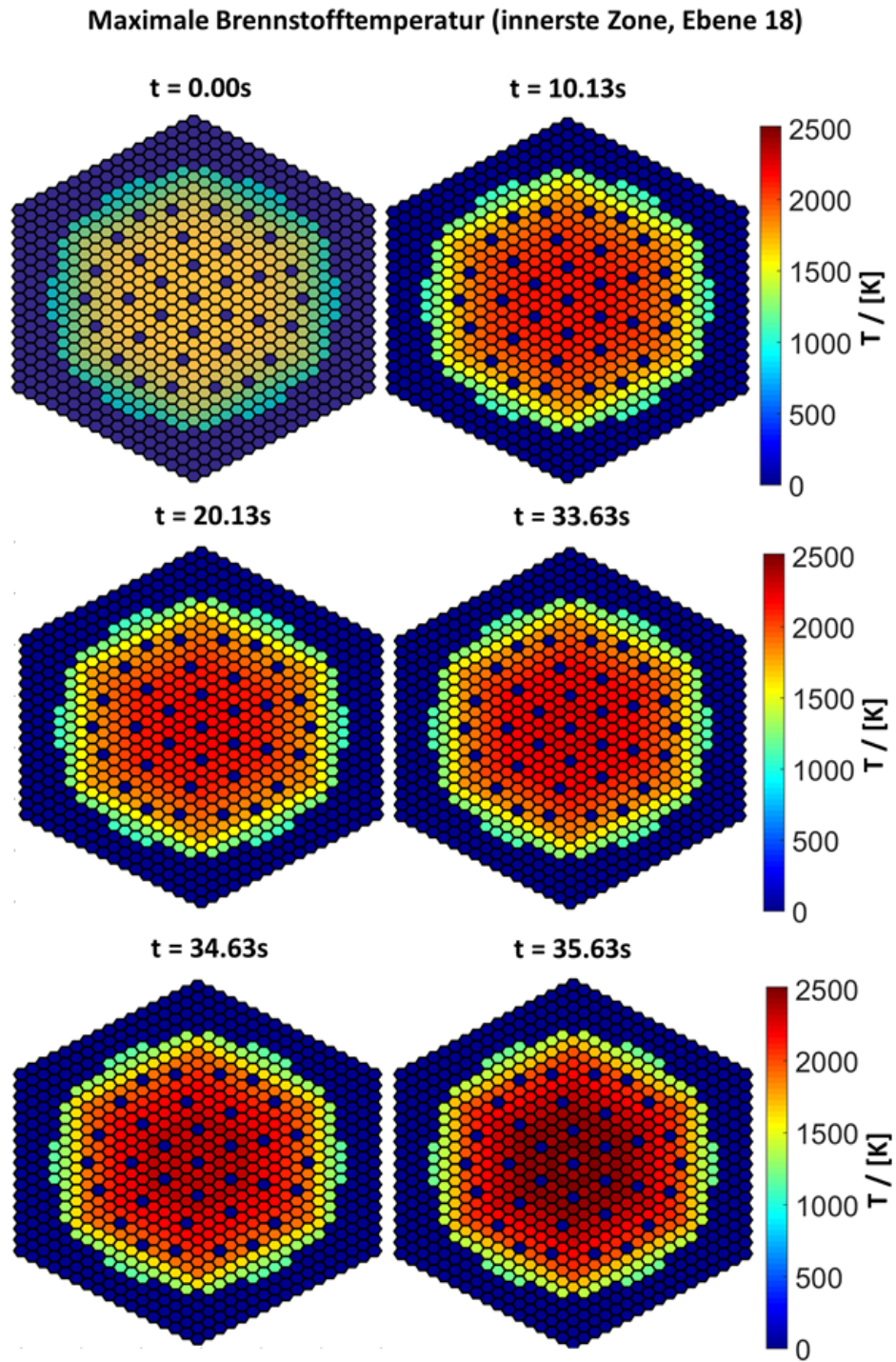


Abb. 6.52: Radialprofil der maximalen Temperatur des Brennstoff über den Kern auf Ebene 20 zu verschiedenen Zeiten.

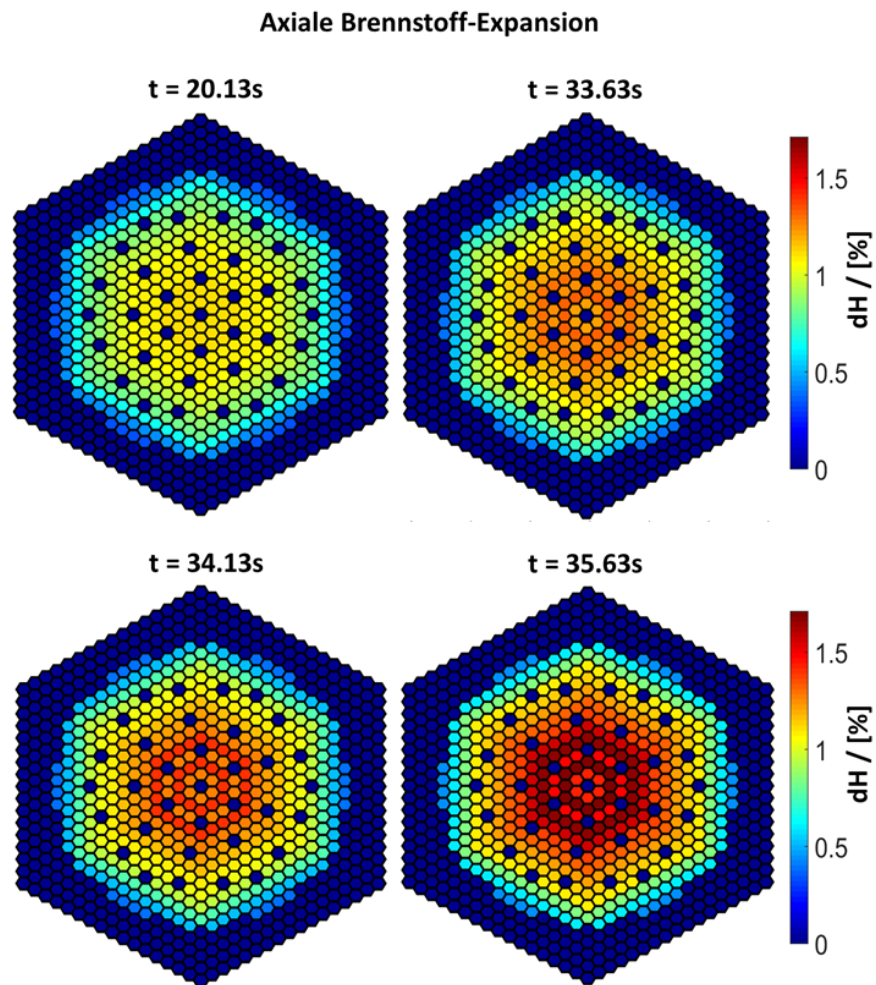


Abb. 6.53: Axiale Ausdehnung des Brennstoffs in den einzelnen Brennelementen.

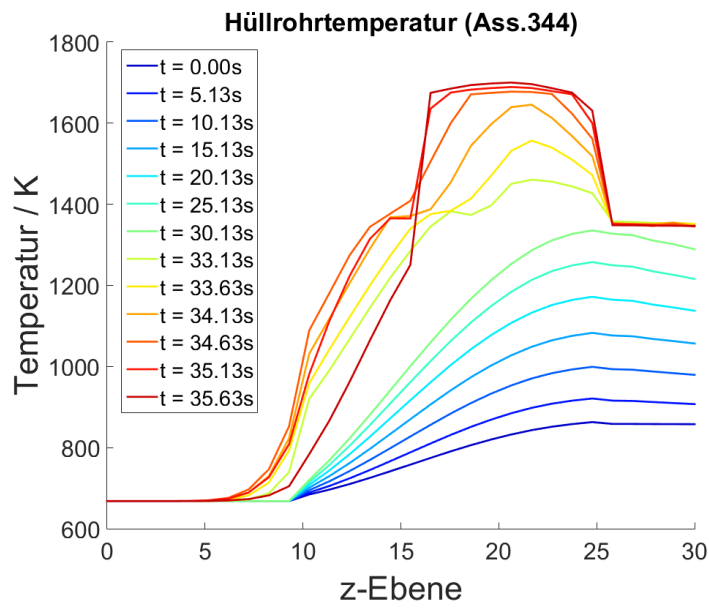


Abb. 6.54: Axialprofil der Hüllrohrtemperatur für Brennelement 344 zu verschiedenen Zeiten.

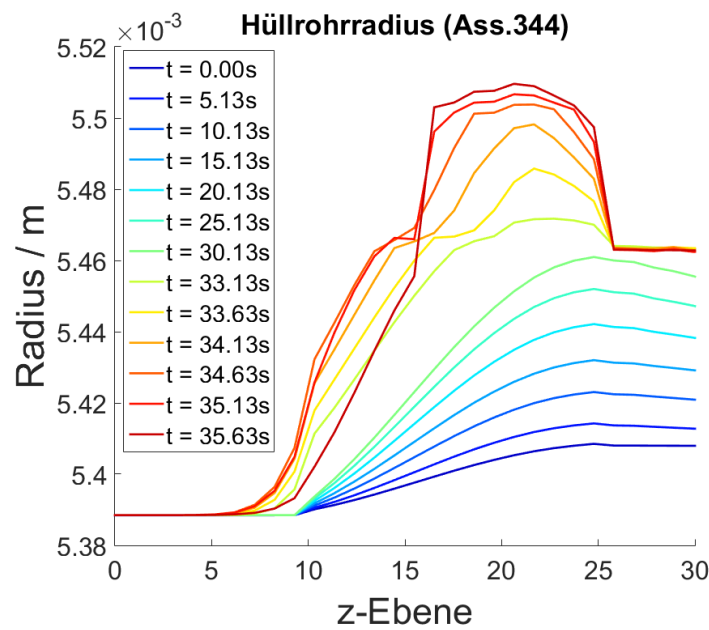


Abb. 6.55: Axialprofil des Hüllrohrausseradius Brennelement 344 zu verschiedenen Zeiten.

6.2.2.6 Entwicklung der Reaktivitäten

Der zeitliche Verlauf der Reaktivitäten, wie in Abbildung 6.56 angegeben, lässt sich an Hand der bisherigen Auswertung leicht erklären. Neben der Gesamtreaktivität zeigt Abbildung 6.56 auch die Beiträge der einzelnen Effekte. Nach einem schwachen Anstieg zu Beginn der Transienten folgt bis ca 31s ein Absinken in der Reaktivität des Systems. Bis zu diesem Zeitpunkt überwiegt der negative Beitrag zur Reaktivität, der aus Dopplereffekt und axialer Brennstoffausdehnung folgt. Nachdem es zu extremen Voidzuständen im Kern kommt, wird der Verlauf der Gesamtreaktivität vom positiven Beitrag des Voideffekts dominiert.

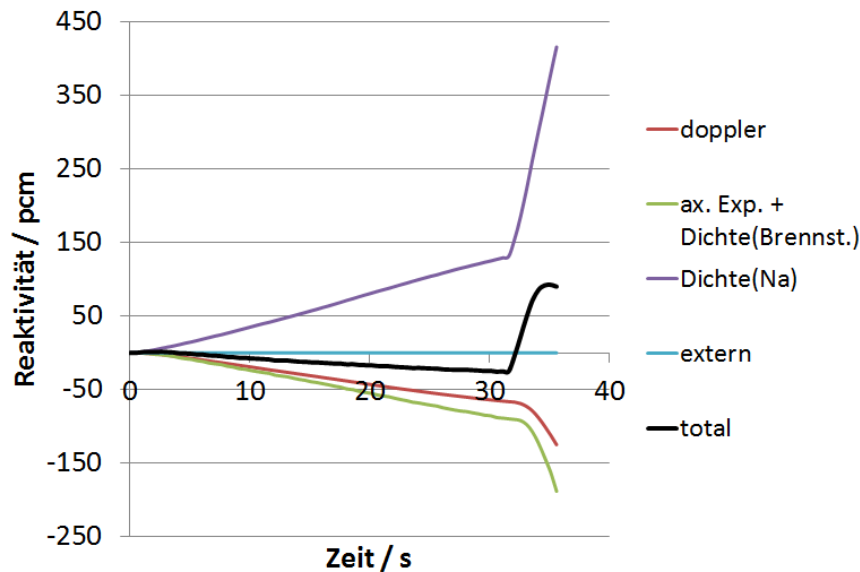


Abb. 6.56: Zeitlicher Verlauf der Gesamtreaktivität und der einzelnen Reaktivitätsbeiträge in einem ULOF.

6.2.3 Wahl der Zeitschrittweite für gekoppelte Rechnungen

Der ULOF-Störfall läuft auf einer anderen Zeitskala ab. Hier erfolgt die Beeinflussung des Systems nicht innerhalb weniger Millisekunden, vielmehr erstreckt sich die Störung über einen Zeitraum von Sekunden. Nach Einsetzen der Kühlmittelreduktion erfolgt ein exponentieller Abfall der Durchflussrate auf 10% des nominellen Durchsatzes. Dieser Wert wird nach ca. 50s nahezu erreicht. Daher wurden in diesem Fall größere Schrittweiten angesetzt. Zur Ermittlung einer geeigneten Zeitschrittweite wurden Rechnungen mit $dt = 1,0s$, $dt = 0,5s$ und $dt = 0,1s$ durchgeführt. Abbildung 6.57 zeigt den Leistungsverlauf in den drei Fällen. Für den größten Thermohydraulik/Neutronik-Iterationsschritt erfolgt der Leistungsanstieg aufgrund der verspäteten Rückwirkung leicht verzögert. Der Unterschied in den Fällen für $dt = 0,1s$ und $dt = 0,5s$ ist marginal. Der Leistungsanstieg ist primär durch eine Erhöhung des Dampfanteils des Natriums bedingt. Auch in der Kurve für die Reaktivitätsänderung aufgrund des Void-Anteils zeigt sich, dass die Reduzierung des Zeitschrittes von $0,5s$ auf $0,1s$ kaum Einfluss auf das Systemverhalten hat. Die negativen Reaktivitätseinträge durch den Dopplereffekt und durch die axiale Ausdehnung des Brennstoffs setzen für $dt = 0,5s$ minimal

verzögert im Vergleich zur Rechnung mit einer Zeitschrittweite von $dt = 0,1s$. Die detaillierte Analyse des ULOF Störfalls und die Variationsrechnungen für verschiedene Gapweiten werden daher mit einer Schrittweite von $dt = 0,5s$ durchgeführt. Die Wahl ist beeinflusst durch die langen Rechenzeiten und durch Probleme in der externen Kopplung aufgrund von Ungenauigkeiten in der Darstellung von Gleitkommazahlen in ASTEC-Na. Die externe Kopplung erfolgt in jedem Zeitschritt über den Aufruf eines ASTEC-Na-Restarts. Der Restartfile, der die nötigen thermohydraulischen Daten enthält, wurde im vorherigen Schritt von ASTEC-Na erzeugt und ist in binärer Form abgespeichert. Zusätzlich ist in diesem File die Endzeit des letzten Laufs abgespeichert. Beim Aufruf des Restarts erhält ASTEC-Na die von DYN3D errechnete Leistungsverteilung sowie die Start- und Endzeit des jeweiligen Iterationsschrittes. Durch ungenaue Darstellung der Endzeit kann es nun passieren, dass die Abspeicherung des Restartfiles minimal früher als von DYN3D vorgegeben erfolgt. In diesem Fall ist die Startzeit für den folgenden Zeitschritt größer als die im Restartfile vorhandene Endzeit und ein Restart von ASTEC-Na nicht möglich. Der Code steigt aus. Zwar wurde durch setzen gewisser „Triggerzeiten“ in ASTEC-Na, die das Abspeichern der Daten möglichst nahe an die gewünschte Zeit setzen, das Problem weitestgehend behoben, dennoch kann es für kleine Schrittweiten oder nach vielen Restarts passieren, dass der Code aussteigt. Um diese Probleme in der derzeitigen Code-Fassung zu umgehen, erweist es sich als günstiger den größeren Zeitschritt von $dt = 0,5s$ zu verwenden. Eine Behebung dieses Programmfehlers sollte problemlos im ASTEC-Na-Quellcode über die Entwickler möglich sein. Zu erwähnen sei an dieser Stelle, dass die Simulationen des zuvor dargestellten UTOPs überwiegend ohne Abbruch durchgelaufen sind und man hier mit Schrittweiten im Millisekundenbereich arbeitet. Leider ist ohne Quellcode nicht einsehbar, in welchen Situationen dieses Problem auftritt, da hier wohl nicht die Schrittweite allein entscheidend ist.

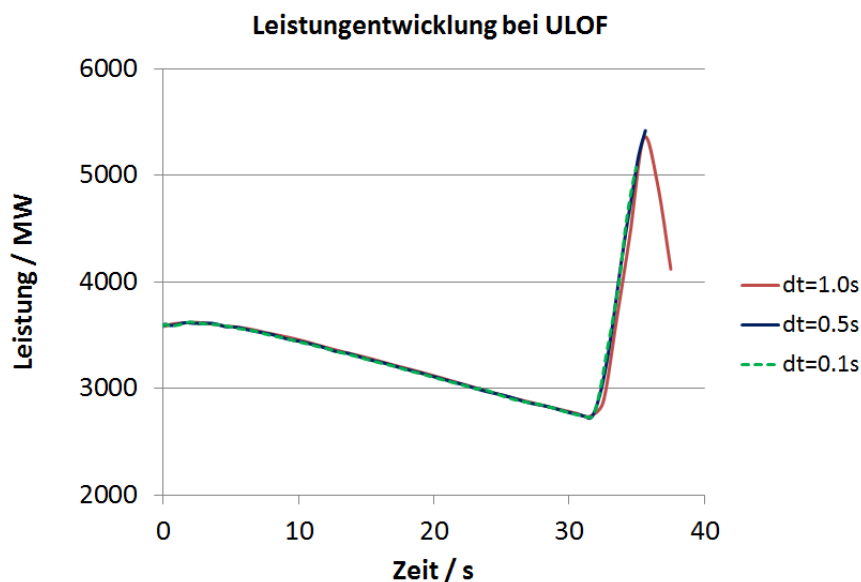


Abb. 6.57: Zeitlicher Verlauf der Leistung in einem ULOF unter Verwendung verschiedener Zeitschrittweiten.

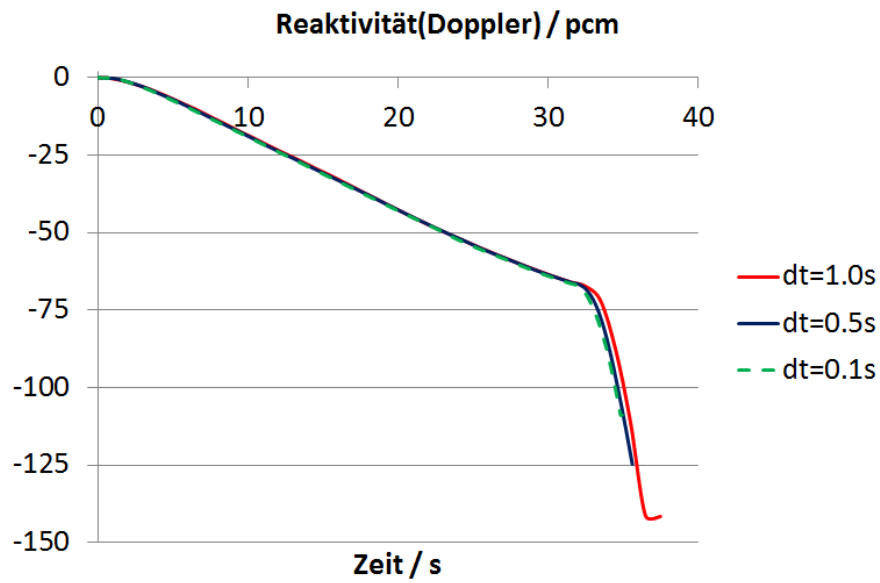


Abb. 6.58: Zeitlicher Verlauf des Reaktivitätsbeitrags aufgrund des Dopplereffekts in einem ULOF unter Verwendung verschiedener Zeitschrittweiten.

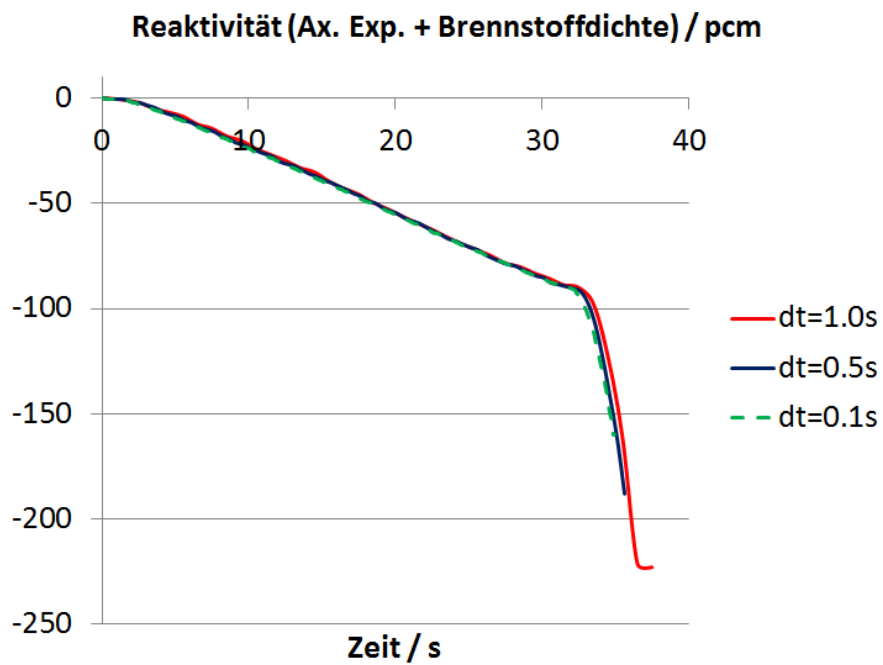


Abb. 6.59: Zeitlicher Verlauf des Reaktivitätsbeitrags aufgrund der axialen Brennstoffausdehnung in einem ULOF unter Verwendung verschiedener Zeitschrittweiten.

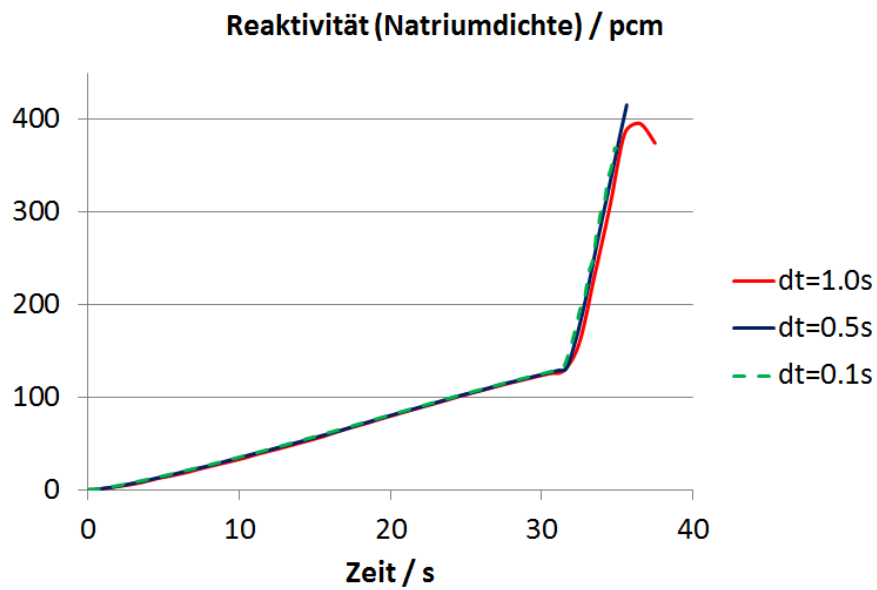


Abb. 6.60: Zeitlicher Verlauf des Reaktivitätsbeitrags aufgrund der Änderung der Natriumdichte in einem ULOF unter Verwendung verschiedener Zeitschrittweiten.

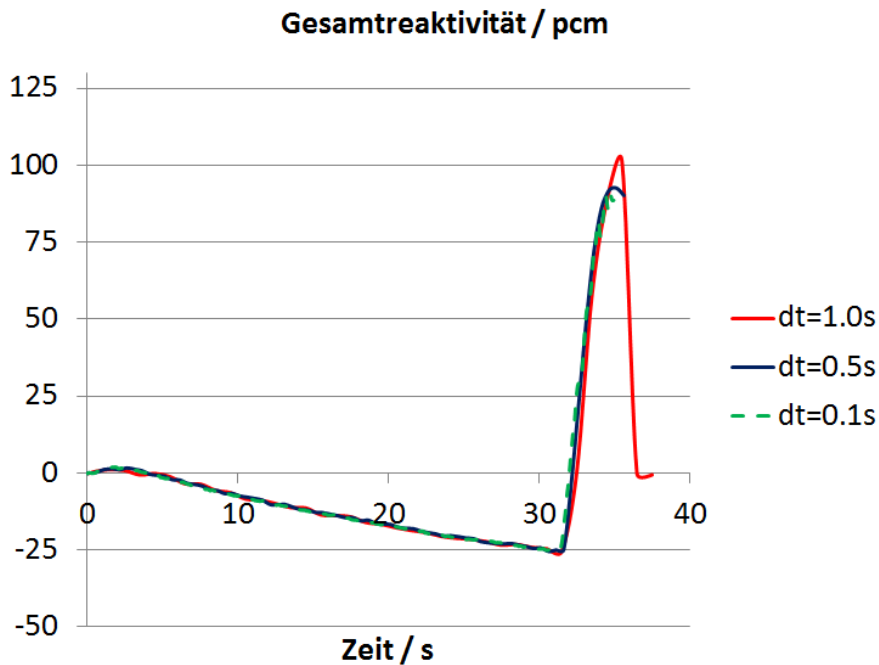


Abb. 6.61: Zeitlicher Verlauf der Gesamtreaktivität in einem ULOF unter Verwendung verschiedener Zeitschrittweiten.

6.2.4 Variation des Gaps

Für den Fall eines ULOFs wurde, wie auch im Fall des UTOPs, eine Variation der Gapweite durchgeführt. Die Wahl der Gapweiten ist mit 0,151mm, 0,1mm und 0,051mm identisch zu den UTOP-Simulationen. Für die Natriumtemperatur in der heißesten Masche in Ring zwei auf Ebene 20 ergibt sich für das kleinste Gap ein flacherer Anstieg (Abbildung 6.62, links). Dementsprechend setzt auch das schlagartige Verdampfen zum totalen Voidzustand in der Masche für kleiner werdende Gapweiten jeweils verzögert ein (Abbildung 6.62, rechts). Obwohl die Gapweite kleiner ist, also der Wärmeübergang vom Brennstoff zum Natrium günstiger, kommt es zu einer langsameren Aufheizung des Natriums. Dieses Verhalten wird klar, wenn man den Verlauf der Brennstofftemperaturen betrachtet (Abbildung 6.63, links). Analog zum UTOP zeigt sich, dass für eine kleine Gapweite eine kleinere Ausgangstemperatur im Brennstoff gegeben ist. Der Anstieg der Brennstofftemperatur erfolgt in allen drei Fällen nahezu parallel. Aber das System mit einer Gapweite von 0,151mm weist von vornherein wesentlich höhere Temperaturen auf. Der steile Temperaturanstieg, der nach Einsetzen von lokalem Void entsteht, beginnt damit für das größte Gap am frühesten. Entsprechend der Brennstofftemperatur heizt sich das Hüllrohr auf (Abbildung 6.63, rechts).

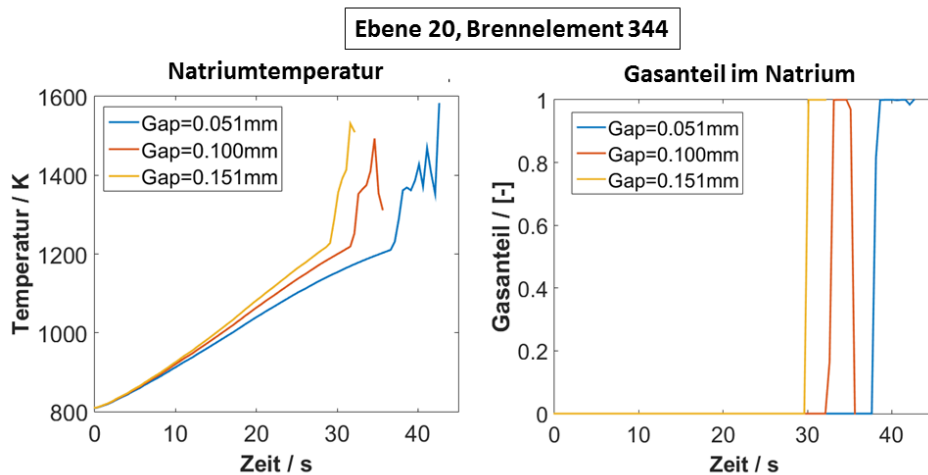


Abb. 6.62: links: Zeitlicher Verlauf der Natriumtemperatur in Brennelement344 auf Ebene 20 in einem ULOF unter Verwendung verschiedener Gapweiten. rechts: Zeitlicher Verlauf des Gasanteils an Natrium in Brennelement 344 auf Ebene 20 in einem ULOF unter Verwendung verschiedener Gapweiten.

Für den Verlauf der Gesamtreaktorleistung, die für alle drei Fälle in Abbildung 6.64 aufgetragen ist, ergibt sich ein ähnliches Bild. Wie zu erwarten, erfolgt der Leistungsanstieg, der durch den Voideffekt getrieben wird, für das kleinste Gap am spätesten. Für die negativen Reaktivitätsbeiträge aus Dopplereffekt und axialer Brennstoffausdehnung zeigen sich ähnliche Kurven für alle drei Fälle (Abbildung 6.65 und 6.66). Lediglich der steile Abfall setzt zu unterschiedlichen Zeiten ein und der Effekt ist für das kleinste Gap etwas größer. Dies liegt in der Temperaturabhängigkeit des Dopplereffekts begründet, die besagt, dass $d\rho/dT_{fuel}$ mit abnehmender Temperatur größer wird (Abbildung 6.25), wodurch der Dopplereffekt für die Gapweite mit der niedrigsten Anfangstemperatur vor der Transienten am größten ist. Der Reaktivitätsbeitrag aufgrund

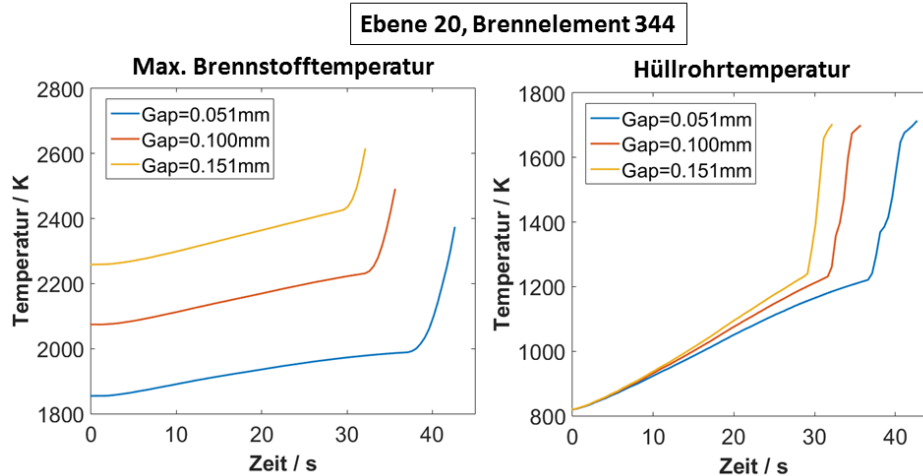


Abb. 6.63: links: Zeitlicher Verlauf der maximalen Brennstofftemperatur in Brennelement 344 auf Ebene 20 in einem ULOF unter Verwendung verschiedener Gapweiten. rechts: Zeitlicher Verlauf der Hüllrohrtemperatur in Brennelement 344 auf Ebene 20 in einem ULOF unter Verwendung verschiedener Gapweiten.

der Änderung in der Natriumdichte steigt für das kleinste Gap etwas schwächer an und schießt etwa 3s später in die Höhe als der Reaktivitätsbeitrag im Referenzfall mit einer Gapweite von 0,1mm (Abbildung 6.67). Dementsprechend resultiert für die Gesamtreaktivität für das kleinste Gap ein etwas stärkerer negativer Abfall und eine spätere Exkursion (Abbildung 6.68).

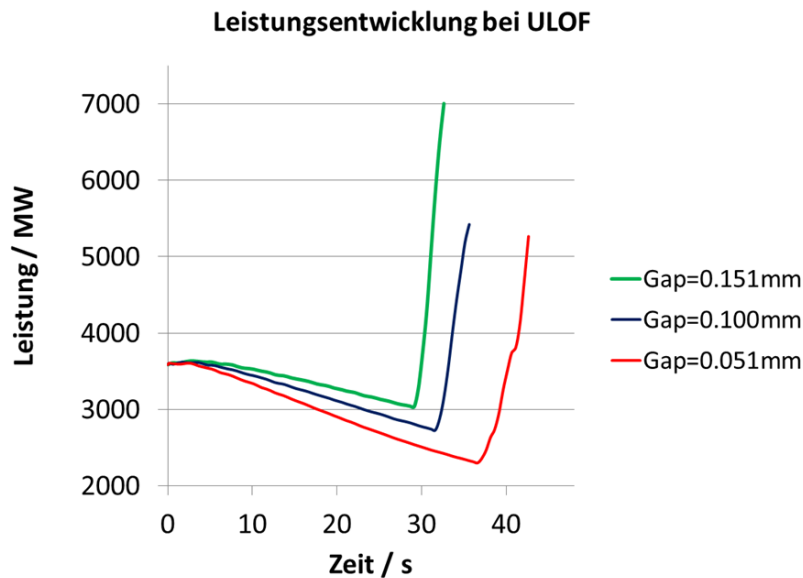


Abb. 6.64: Zeitlicher Verlauf der Leistung in einem ULOF unter Verwendung verschiedener Gapweiten.

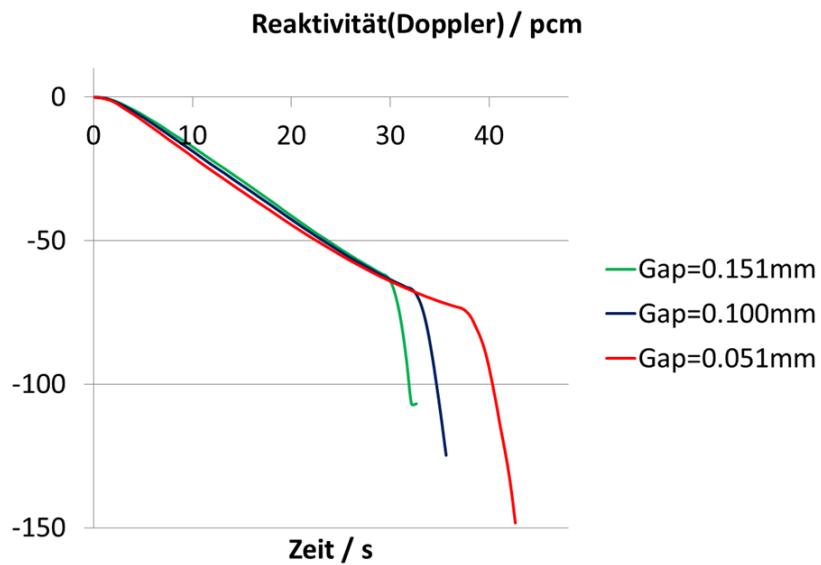


Abb. 6.65: Zeitlicher Verlauf des Reaktivitätsbeitrags aufgrund des Dopplereffekts in einem ULOF unter Verwendung verschiedener Gapweiten.

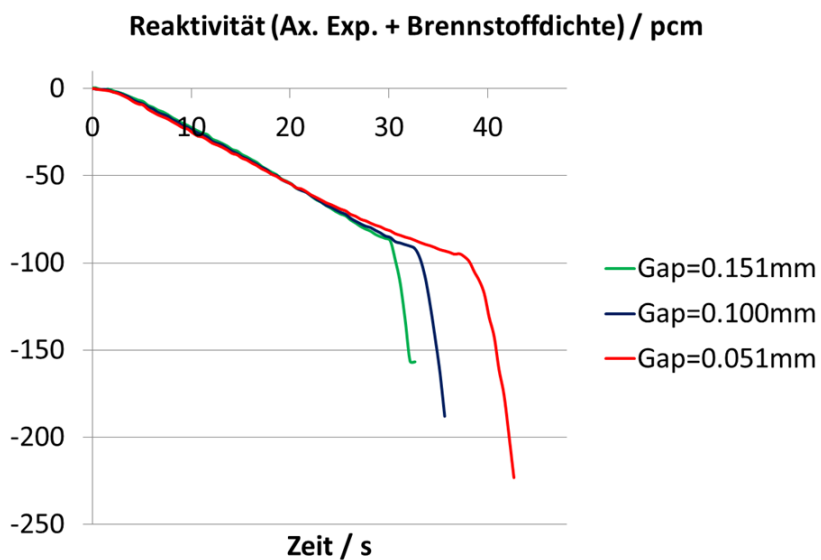


Abb. 6.66: Zeitlicher Verlauf des Reaktivitätsbeitrags aufgrund der axialen Brennstoffausdehnung in einem ULOF unter Verwendung verschiedener Gapweiten.

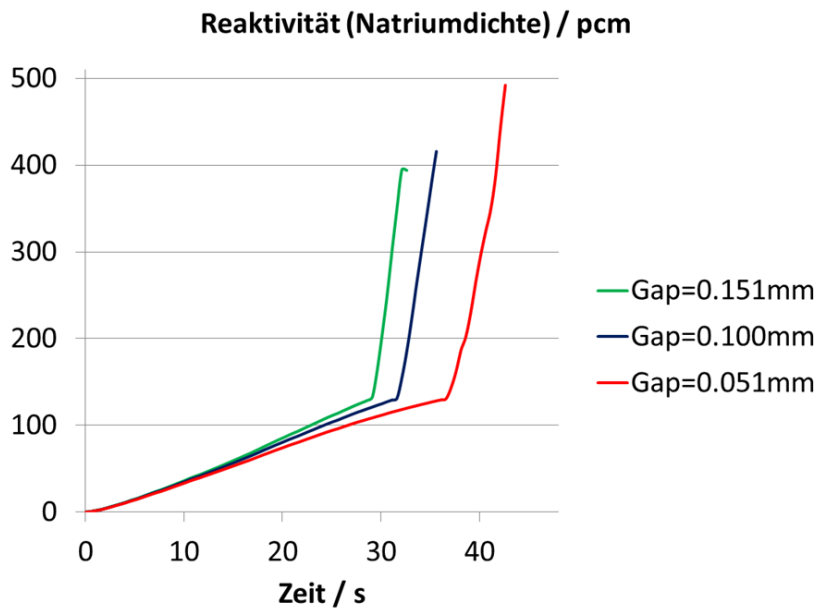


Abb. 6.67: Zeitlicher Verlauf des Reaktivitätsbeitrags aufgrund der Änderung der Natriumdichte in einem ULOF unter Verwendung verschiedener Gapweiten.

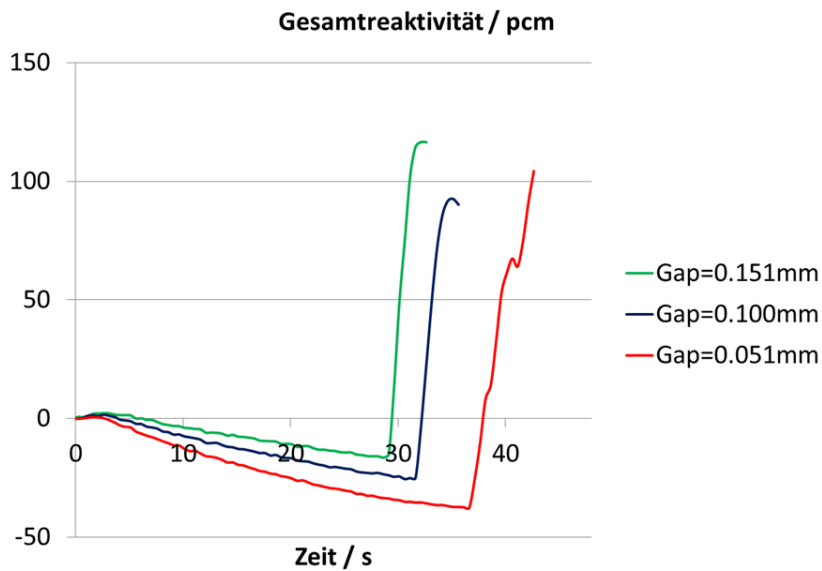


Abb. 6.68: Zeitlicher Verlauf der Gesamtreaktivität in einem ULOF unter Verwendung verschiedener Gapweiten.

6.2.5 Bewertung ULOF

Die Simulation des ULOFs für den generischen Benchmarkkern hat gezeigt, dass eine solche Störung zu massiven Schädigungen des Kerns führt. Durch den verminderten Kühlmitteldurchsatz und der damit verbundenen Temperaturerhöhung kommt es zwar kurzzeitig zu einem Rückgang in der Leistung, im weiteren Verlauf wird das Natrium jedoch so stark aufgeheizt, dass es zum Sieden und schlagartigen Verdampfen in Regionen des inneren Kerns kommt. Der massive Verlust an Natrium hat eine Leistungsexkursion zur Folge. Die Temperaturen im Hüllrohr übersteigen die Schmelztemperatur und ein Austritt von Brennmaterial ist wahrscheinlich. Der Störfall kann mit der verwendeten Programmversion von ASTEC-Na in der frühen Phase bis hin zum Voiding der inneren Kanäle beschrieben werden. Jedoch ist auch hier das RIA-Modell zur Brennstoffverlagerung und Berücksichtigung axialer Verteilungen abgeschaltet aufgrund der in der Bewertung des UTOPs angeführten Gründe. Nach dem schlagartigen Natriumverlust folgt ein Natriumeinbruch von oben in die leeren Kanäle. Diese plötzlichen Systemänderungen führen zu numerischen Problemen, wodurch ASTEC-Na die Simulation abbricht. Für die späte Unfallphase ist der Code nicht geeignet.

7 Zusammenfassung und Ausblick

Ziel der Arbeit war die Entwicklung eines Code-Systems, das transiente Untersuchungen mit Berücksichtigung von Rückwirkungen in schnellen Natrium gekühlten Systemen ermöglicht.

Die Querschnitte wurden hierfür mittels des MC Codes SERPENT2 für den nodalen Diffusioncode DYN3D erstellt. Dabei wurde eine 35-Gruppen-Struktur gewählt und eine Variationen in Brennstofftemperatur, Brennstoffdichte und Kühlmitteldichte berücksichtigt. Mit dieser Parametervariation können die wesentlichen Rückwirkungen der Thermohydraulik auf das neutronische Verhalten beschrieben werden. Bei einer Änderung der Brennstofftemperatur kommt es durch den Dopplereffekt zu einer Reaktivitätsänderung. Der Voideffekt wird von der Natriumdichte bestimmt. Um auch axiale Brennstoffausdehnung berücksichtigen zu können, wurde zusätzlich eine Variation der Brennstoffdichte durchgeführt. Damit kann kann der Brennstoff in der Neutronik-Simulation, die ein ortsfestes Gitter hat, in höher liegende Maschen verlagert werden, wobei durch Anpassung der jeweiligen Dichte pro Masche das Gesamtinventar konstant gehalten werden muss. Die Eignung zur Beschreibung schneller Systeme von DYN3D unter Verwendung der erzeugten Datenbasis wurde mittels MC Vergleichsrechnungen festgestellt. Die Validierungsrechnungen wurden für eine Vielzahl an Parametervariationen für stationäre Zustände durchgeführt. Der Vergleich der DYN3D-Ergebnisse mit den MC-Lösungen hat gezeigt, dass mittels DYN3D unter Verwendung der generierten Datenbasis nicht nur globale Größen wie Multiplikationsfaktor bzw. Reaktivität für alle Zustände zuverlässig wiedergegeben werden können, sondern auch die radiale und axiale Leistungsverteilung unter Berücksichtigung der Näherungen sehr gut erfasst wird.

Eine Validierung von ASTEC-Na als Thermohydraulik-Code für schnelle Natrium gekühlte Reaktoren wurde anhand der CABRI Experimente durchgeführt. Bei den zwei hier gezeigten Experimenten handelt es sich um Teststrecken mit vorbestrahlten Brennstab, bei denen über einen „Driver Core“ in der Teststrecke ein sehr kurzer, hoher Leistungspik erzeugt wird (TOP Experimente, Transient Over Power). Dabei hat sich gezeigt, dass mittels ASTEC-Na-Simulationen die experimentellen Ergebnisse sehr gut erfasst werden. Insbesondere wurde die Entwicklung und Verteilung der Natrium- und Brennstofftemperatur untersucht sowie Verformungen der Komponenten. Neben dem direkten Vergleich mit den experimentellen Daten erfolgte ein Vergleich mit Ergebnissen aus SAS-Rechnungen (KIT).

Um transiente Rechnungen mit entsprechender Rückwirkung durchführen zu können, wurden geeignete Kopplungsmodule erstellt, die den Datenaustausch zwischen Neutronik und Thermohydraulik ermöglichen. Dabei dient DYN3D als Hauptprogramm, über das die Zeitschrittsteuerung abläuft und das ASTEC-Na über „Restart“ in jedem Zeitschritt aufruft (externe Kopplung). Bei den Kopplungsmodulen ist zu beachten, dass DYN3D mit einem ortsfesten Gitter arbeitet, während ASTEC-Na ein variables Maschennetz verwendet. Daher muss, sowohl bei der Leistungsübergabe von DYN3D

zu ASTEC-Na, als auch bei der Übergabe der thermohydraulischen Daten, eine Adaption an das jeweilige Maschennetz erfolgen. Dazu werden die aktuellen Werte über volumetrische Wichtung gemittelt. Im Fall der thermohydraulischen Daten werden für die jeweiligen ASTEC-Na Maschen die makroskopischen Querschnitte aus dem Parametersatz interpoliert und anschließend durch volumetrische Wichtung so modifiziert, dass sie einer DYN3D-Masche zugeordnet werden können. Zusätzlich wurde in DYN3D ein Modul zur Modifikation des Diffusionskoeffizienten in gevoideten Kanälen implementiert. Hier gilt die Diffusionsnäherung nicht mehr und der Diffusionskoeffizient wird enorm überschätzt. Mittels der implementierten Routine wird der Diffusionskoeffizient in jedem Zeitschritt für jede Kanal-Masche in Abhängigkeit der umgebenden Maschen korrigiert.

Durch Simulationen konnte demonstriert werden, dass die angewendete Methodik zur Erstellung der Datenbasis, in Kombination mit der entwickelten Kopplung von DYN3D und ASTEC-Na, die relevanten Phänomene, die in der frühen Phase einer Störung auftreten, simulieren kann. Dazu wurden zwei Störfälle an einem generischen Benchmark-Kern simuliert: eine externe Reaktivitätszugabe von 1,8\$ durch Ziehen der Steuerstäbe (UTOP) sowie ein Kühlmitteldurchsatz-Störfall, bei dem der Durchsatz auf ein Zehntel des nominellen Wertes abgesenkt wurde (ULOF). In beiden Störfällen wurde ein Versagen der Reaktorschnellabschaltung unterstellt. Während der Kern den UTOP ohne zu erwartende Schäden durchläuft und der Leistungspeak aufgrund interner Rückwirkungen abgefangen werden kann, kommt es beim ULOF zu massiver Voidbildung, die durch Reaktivitätsrückwirkungen nicht kompensiert werden kann. Infolge des positiven Reaktivitätseintrags durch Void folgt eine starke Leistungsexkursion und der Störfall geht in die späte Unfall-Phase über. Die dabei auftretenden massiven, schlagartigen Dichteänderungen im Natrium (Verdampfung gefolgt von Natriumeinbruch) führen zu numerischen Schwierigkeiten, wodurch ASTEC-Na im letzten Zeitschritt die Konvergenzkriterien nicht mehr erreicht. Für die späte Unfallphase ist die aktuelle Version nicht geeignet. Insgesamt lässt sich jedoch feststellen, dass sowohl die thermohydraulischen Modelle als auch die Neutronik zu plausiblen Ergebnissen in der frühen Unfallphase führen.

Um neben einer qualitativen Beurteilung auch eine quantitative Abschätzung der Ergebnisse durchführen zu können, müssen künftig Validierungsrechnungen an realen Systemen erfolgen. Leider sind solche Daten nur schwer zugänglich, weshalb in dieser Arbeit davon abgesehen werden musste. Da der Wärmetransport im Gap ein wichtiger, sensitiver Parameter zur Beschreibung des Systems ist, sollte die Kopplung künftig unter Ausnutzung des „RIA-Modells“ in ASTEC-Na durchgeführt werden. Darin enthalten sind spezielle Modelle zum Wärmeübergang im Gap, in denen Spaltgase und auch chemische Reaktionen berücksichtigt werden. Mit dem RIA Modell können axiale Verteilungen von Plutoniumgehalt, Gapweite und ein Modell zur Brennstoffverlagerung im Brennstab einbezogen werden. Da das Benchmark jedoch keinerlei dieser Daten enthält, wurde darauf verzichtet, das in der aktuellen Version vorhandene „RIA-Modell“ zuzuschalten. Wichtig wird dies allerdings für reale Systeme. An der Kopplung generell muss bei Verwenden der RIA-Version nichts geändert werden. Lediglich der ASTEC-Na Input muss entsprechend erweitert werden. Zur Simulation der späten Phase in einem Störfall ist der Code nicht geeignet. Für die späte Störfallphase wäre eine Erweiterung

oder eine Übergabe der Daten an einen Code wie SIMMER denkbar.

Bei geeigneter Erstellung der Inputdatensätze für ASTEC-Na und DYN3D ermöglicht die Kopplung problemlos die Untersuchung asymmetrischer Störungen. Denkbar wäre das Szenario eines einzelnen Steuerstabauswurfes, bei dem lokale Flussänderungen zu erwarten sind. Dazu müsste die Ringsymmetrie im ASTEC-Na Modell durch eine Modellierung der einzelnen Brennelemente ersetzt werden. Zu beachten ist dabei, dass bei einer Erhöhung der Maschenzahl eine längere Rechenzeit zu erwarten ist. Für die Berechnungen auf einem Prozessor lag die Rechenzeit für die kleinste Schrittweite von 0.5ms bei bis zu vier Tagen. Dazu muss beachtet werden, dass die Rechnungen ohne Zuschalten des RIA-Modells in ASTEC-Na, das die Eingabe axialer Profile verlangt, durchgeführt wurden, wodurch die Thermohydraulik im Vergleich zur Neutronik einen sehr geringen Anteil der Rechenzeit beanspruchte. Eine Verbesserung der Performance wäre zum einen durch strukturelle Änderungen am Code zu erzielen, zum anderen aber auch durch Optimierung der Systemmodellierung. Eine Teilparallelisierung, die die Verwendung mehrerer Prozessoren erlaubt, könnte die Laufzeit erheblich verkürzen, sowie die Umsetzung einer internen Kopplung anstelle der hier vorgestellten externen Variante. Dazu müsste allerdings der Zugang zum ASTEC-Na Quellcode gegeben sein. Ferner ist zu beachten, dass die Rechenzeit in der Neutronikiteration erheblich von der Anzahl der Energiegruppen abhängt. Die Anzahl von 35 Energiegruppen für Ganzkernrechnungen wurde gewählt, um Änderungen im Spektrum erfassen zu können und ohne weitere Maßnahmen zur Optimierung der Querschnitte gute Ergebnisse zu erzielen. Durch Anwenden von „Assembly-Discontinuity“-Faktoren (ADF, [21]), der „Superhomogenization-Methode“ (SPH, [72]) oder Bestimmung richtungsabhängiger Diffusionskoeffizienten [22] [21], könnte unter Umständen mit einer kleineren Gruppenzahl gearbeitet werden, ohne die Qualität der Resultate zu mindern.

Durch Zuschalten schon teilweise vorhandener bzw. neuer Module, wäre es denkbar, nicht nur eine Simulation des Kerns, sondern der gesamten Anlage durchzuführen. Um künftig auch die späte Unfallphase erfassen zu können, sind Erweiterungen nötig, die dabei auftretende Phänomene beschreiben können. Damit könnte eine Störfall-Analyse von der frühen Phase bis hin zum Ende unter Beachtung der Auswirkungen auf sämtliche System-Komponenten sowie eine Abschätzung des Schadens für die Anlage selbst, aber auch die Umwelt (Austritt von Radioaktivität), ermöglicht werden.

Mit der Demonstration zweier Störfallszenarien auf einen generischen SFR-Kern wurde die Grundlage für ein modernes Analysetool für transiente Untersuchungen in SFRs der vierten Generation geschaffen. Künftige Weiterentwicklungen können durch die moderne Codearchitektur problemlos implementiert werden, um den Code für Simulationen des Reaktors als Gesamtanlage auszubauen. Durch weitere Validierungsrechnungen, insbesondere an realen Systemen, hat die gekoppelte Version DYN3D-ASTEC-Na das Potential, sich als modernes Analysetool, neben Entwicklungen wie SAS-SFR, SIMMER und FAST, für transiente Analysen in SFRs zu etablieren.

Anhang

A. Begrifflichkeiten zur Neutronik

Mikroskopischer und makroskopischer Wirkungsquerschnitt

Mittels Wirkungsquerschnitten kann ein quantitatives Maß für die Wahrscheinlichkeit einer bestimmten Wechselwirkung eines Zielmaterials mit einem einfallenden Neutron in Abhängigkeit der Neutronenenergie angegeben werden. Für Vorhersagen bzw. Simulationen von Neutronentransport müssen die Wirkungsquerschnitte der entsprechenden Reaktionen i für die betrachteten Materialien bekannt sein. Der mikroskopische Wirkungsquerschnitt σ_i ist für einen gleichförmigen Neutronenstrom I ($1/cm^2s$), der auf eine monoatomare Schicht mit Fläche A und N_a Atomen pro cm^2 trifft, definiert als:

$$\sigma_i = \frac{R}{IN_a} [cm^2] \quad (7.1)$$

Der Faktor R ist dabei die Anzahl der stattfindenden Reaktionen des Typs i pro cm^2 und Sekunde s . Anschaulich kann der Wirkungsquerschnitt abgeleitet werden, wenn man sich obige Gegebenheiten, also einen gleichförmigen Neutronenstrom I ($1/cm^2s$), der in einer Sekunde auf eine monoatomare Schicht mit Fläche A und N_a Atomen pro cm^2 trifft, in einem Gedankenexperiment betrachtet. Das Szenario ist in Abbildung 7.1 dargestellt.

Wäre die gesamte Fläche A für den Neutronenstrom wirksam würden I Reaktionen in der entsprechenden Zeit stattfinden. Da aber nicht die gesamte Fläche wirksam ist, interagiert nur der Bruchteil $\frac{R}{I}$. Durch Umstellen von Gleichung 7.1 ergibt sich

$$\frac{R}{I} = N_a \sigma_i \quad (7.2)$$

Der Term $N_a \sigma_i$ ist somit der wirksame Teil der Fläche A (grüne Punkte in Abbildung 7.1) und σ_i die wirksame Fläche eines einzelnen Kerns für Reaktion i . Im Allgemeinen beschreibt der mikroskopische Querschnitt σ_i keine geometrische Fläche, sondern eine „Interaktionsfläche“. Da die Wirkungsquerschnitte im Neutronentransport in der Größenordnung von $10^{-22} - 10^{-26} cm^2$ liegen, wurde die Einheit *barn* eingeführt, mittels derer die Querschnitte in Vielfachen von 10^{-24} angegeben werden können ($1barn = 10^{-24} cm^2$).

In den meisten Problemen treffen die Neutronen nicht auf eine einzelne Atomlage, sondern sie durchlaufen ein Material mit einer Teilchendichte $N(\vec{r})$. Damit vergrößert sich die Interaktionswahrscheinlichkeit auf $N(\vec{r}) \cdot \sigma$. In diesem Fall spricht man vom makroskopischen Querschnitt, der damit eine Materialkonstante ist und die Wechselwirkungswahrscheinlichkeit pro zurückgelegter Weglänge des Neutrons im Material angibt:

$$\Sigma_i(\vec{r}, E) = N(\vec{r}) \sigma_i(E) [1/cm] \quad (7.3)$$

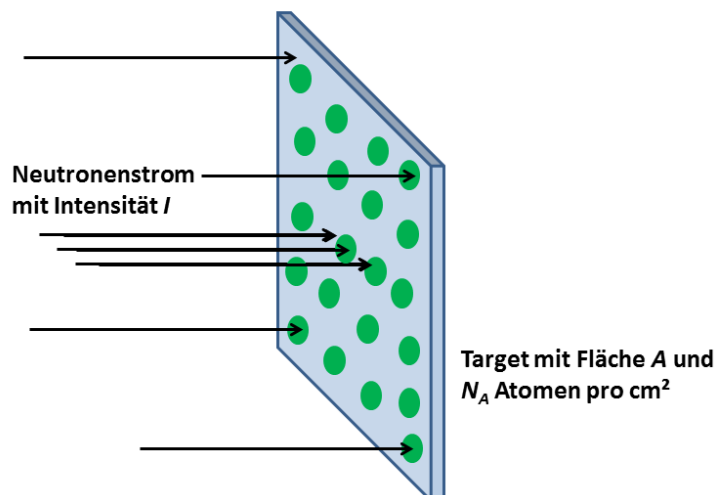


Abb. 7.1: Ein Strom mit I Neutronen pro cm^2 trifft auf eine monoatomare Targetschicht A , die N_A Atome pro cm^2 enthält.

Gleichung 7.2 lässt sich in diesem Fall schreiben als:

$$\frac{R}{I} = N(\vec{r})\sigma_i(E) = \Sigma_i(\vec{r}, E) \quad \text{bzw.} \quad R = I \cdot \Sigma_i(\vec{r}, E) \quad (7.4)$$

Besteht ein Material aus mehreren Isotopen m , so ergibt sich der makroskopische Querschnitt des gesamten Materials durch Aufsummieren der Beiträge der einzelnen Bestandteile:

$$\Sigma_i(\vec{r}, E) = \sum_m N_m(\vec{r})\sigma_{m,i}(E) \quad (7.5)$$

Die Querschnitte sind damit eine nuklid- bzw. materialspezifische Eigenschaft. Ob das auftreffende Neutron vom Target eingefangen oder gestreut wird oder ob es zu einer Spaltung führt, ist maßgeblich von den quantenmechanischen Eigenschaften des Targetkerns abhängig. Ebenso spielt die Energie des einfallenden Neutrons, oder besser die Relativgeschwindigkeit zwischen Neutron und Targetkern, eine große Rolle für die Art der Wechselwirkung.

Neutronendichte und Neutronenfluss

Zur Beschreibung der Neutronenverteilung im 6-dimensionalen Phasenraum wird die winkelabhängige Neutronendichte $n(\vec{r}, \vec{\Omega}, E)$ (hier zeitunabhängig) verwendet. Multipliziert man diese Dichte mit dem Betrag der mittleren Neutronengeschwindigkeit v , erhält man den Neutronenfluss:

$$\psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E) = vn(\vec{r}, \hat{\Omega}, E) \quad (7.6)$$

Der Neutronenfluss (bzw. die Neutronenflussdichte) ist kein Fluss im physikalischen Sinn. Vielmehr handelt es sich um eine skalare Größe, die die Anzahl der Neutronen

am Ort \vec{r} angibt, die mit der Energie E nach $\hat{\Omega}$ strömen (übliche Normierung: pro Quadratcentimeter und Sekunde). Unter Verwendung von Gleichungen 7.4 kann die Reaktionsratendichte r_i für eine bestimmte Reaktion i beschrieben werden als Produkt von makroskopischem Querschnitt und Neutronenfluss:

$$r_i(\vec{r}, \hat{\Omega}, E) = \Sigma_i(\vec{r}, E)\psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E) \quad (7.7)$$

Hier wird die wichtige Rolle des winkelabhängigen Neutronenflusses deutlich, da über den Fluss eine Verbindung zwischen Interaktionsrate der Neutronen und der materialspezifischen Größe Σ_i hergestellt werden kann. Die Interaktion eines Neutrons mit dem Targetmaterial hängt also von der Dichte und der Geschwindigkeit der Neutronen (enthalten in ψ) sowie von der Dichte der Targetatome und der Interaktionswahrscheinlichkeit zwischen einem Neutron und einem Targetkern (in Σ_i) ab. Die Reaktionsratendichte r_i bezieht sich auf eine Einheitszeit und Reaktionen im Phasenraumelement $(\vec{r}, \hat{\Omega}, E)$. Eine Vereinfachung der Beziehung 7.7 ergibt sich für Reaktionen wie Spaltung oder Einfang, die als unabhängig vom Raumwinkel betrachtet werden können. Dabei wird die Verteilung der Sekundärneutronen, die bei Spaltungen entstehen, als isotrop angenommen. In diesem Fall kann man den winkelabhängigen Neutronenfluss durch Integration über den gesamten Raumwinkel auf den skalaren Neutronenfluss reduzieren:

$$\int_{4\pi} \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E)d\hat{\Omega} = v \int_{4\pi} n(\vec{r}, \hat{\Omega}, E)d\hat{\Omega} = vn(\vec{r}, E) = \phi(\vec{r}, E) \quad (7.8)$$

Winkelunabhängige Wechselwirkungen erlauben somit eine Beschreibung der Reaktionsratendichte über den skalaren Fluss:

$$r_i(\vec{r}, E) = \Sigma_i(\vec{r}, E)\phi(\vec{r}, E) \quad (7.9)$$

Neutronenstrom

Als letztes soll in diesem Abschnitt die winkelabhängige Neutronenstromdichte \vec{j} eingeführt werden, die sich aus dem Produkt von Neutronendichte und Geschwindigkeitsvektor ergibt. Die Größe beschreibt damit nicht nur die Verteilung der Neutronenpopulation, sondern beinhaltet auch die Flugrichtung:

$$\vec{j}(\vec{r}, \hat{\Omega}, E) = \vec{v}n(\vec{r}, \hat{\Omega}, E) = \hat{\Omega}\psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E) \quad (7.10)$$

Integration über den Raumwinkel liefert den Strom über alle Raumwinkelelemente und wird als Neutronenstromdichte bezeichnet:

$$\vec{J}(\vec{r}, E) = \int_{4\pi} \vec{j}(\vec{r}, \hat{\Omega}, E)d\hat{\Omega} \quad (7.11)$$

B. MC-Verfahren am Beispiel der freien Weglänge

Das MC-Verfahren soll am Beispiel der freien Weglänge erläutert werden. Im Fall der freien Weglänge kann die Inversionsmethode verwendet werden. Die PDF zur Beschreibung der freien Weglänge eines Neutrons für ein unendlich ausgedehntes, homogenes Medium ist gegeben durch:

$$f(x) = \Sigma_T \cdot e^{-\Sigma_T x} \quad (7.12)$$

Die kumulative Verteilung ergibt sich durch Integration zu:

$$F(x) = P(x' < x) = \int_{-\infty}^x f(x') dx' \quad (7.13)$$

Zwangsläufig ergibt sich für die kumulative Verteilung die Bedingung, dass sie im Fall $x \rightarrow \infty$ gleich eins wird, da „irgendwann“ die Reaktion eintritt:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} F(x) = 1$$

In Abbildung 7.2 sind für das Beispiel zur freien Weglänge in blau die PDF $f(x)$ und in rot die CDF $F(x)$ über x dargestellt.

Dabei gilt für einen Neutronenstrom I der in x -Richtung durch Materie wandert:

$$I(x) = I_0 e^{-\Sigma x} \quad \text{bzw.} \quad \frac{I(x)}{I_0} = e^{-\Sigma x} \quad (7.14)$$

Der Anteil $I(x)/I_0$ an Neutronen durchdringt das Material bis zur Stelle x ohne Wechselwirkung und gibt daher die Wahrscheinlichkeit für die freie Weglänge x an. Folglich ist die Wahrscheinlichkeit, dass ein Neutron eine Weglänge x zurücklegt, ohne dabei eine Wechselwirkung mit einem Kern einzugehen und dann im Intervall dx stößt, gegeben durch :

$$f(x) dx = \Sigma_T \cdot e^{-\Sigma_T x} dx \quad (7.15)$$

Die Wahrscheinlichkeit für einen Stoß zwischen den Punkten a und b lässt sich dann beschreiben als:

$$P(a < x < b) = \int_a^b dP = \int_a^b f(x) dx \quad (7.16)$$

Bildlich gesprochen, entspricht diese Wahrscheinlichkeit der Fläche zwischen a und b unter der Verteilungsfunktion (bzw. PDF) $f(x)$. Über die kumulative Verteilung $F(x)$, die man durch Integration aus der PDF erhält, lässt sich dann sagen, wie groß die Wahrscheinlichkeit ist, dass ein Neutron die Distanz x durchläuft und dann stößt:

$$F(x) = P(x' < x) = \int_{-\infty}^x f(x') dx' \quad (7.17)$$

Zwangsläufig ergibt sich für die kumulative Verteilung die Bedingung, dass sie im Fall $x \rightarrow \infty$ gleich eins wird, da „irgendwann“ die Reaktion eintritt:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} F(x) = 1$$

Damit kann die Funktion $F(x)$ für alle x nur Werte im Bereich von null bis eins annehmen. In Abbildung 7.2 sind für das Beispiel zur freien Weglänge in blau die PDF $f(x)$ und in rot die CDF $F(x)$ über x geplottet.

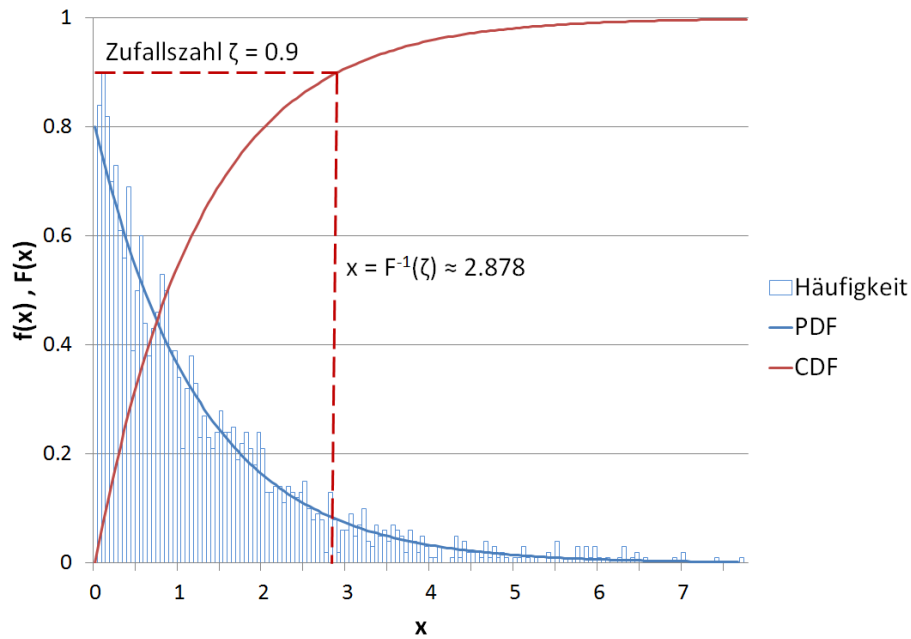


Abb. 7.2: Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (PDF) und die dazugehörige kumulative Verteilungsfunktion (CDF). Mit der Inversionmethode erhält man nach Ermittlung von 2000 Zufallsvariablen die als Histogramm dargestellte Häufigkeitsverteilung.

Bei Verwenden der Inversionsmethode wird eine Zufallsvariable ζ eingeführt, für die gelten soll:

$$F(x) = \zeta \Rightarrow x = F^{-1}(\zeta), \quad (7.18)$$

„Zieht“ man nun mittels Randomgenerator gleichverteilte Zufallszahlen ζ zwischen eins und null, kann mittels der Umkehrfunktion ein Bezug zur Variablen x hergestellt werden:

$$\zeta = 1 - e^{-\Sigma_T x} \Rightarrow x = -\frac{1}{\Sigma_T} \cdot \ln(1 - \zeta) \quad (0 \leq x \leq 1; \zeta \leq 1).$$

Die „zufällig“ ermittelten Werte von x sind somit entsprechend $f(x)$ verteilt und entsprechen damit der Wahrscheinlichkeitsdichte des Problems. Falls es sich bei der Verteilungsfunktion um keine stetige Funktion, sondern eine diskrete Funktion (Histogramm) handelt, werden aus den Integralen Summenoperatoren. Wird zufällig $\zeta = 0.9$ gezogen, hat x in diesem Fall einen Wert von 2.878. Bei einer großen Zahl an Wiederholungen ergibt sich eine Häufigkeitsverteilung für die x -Werte. Das Histogramm in Abbildung 7.2 zeigt die Häufigkeitsverteilung für das „Ziehen“ von 2000 Zufallszahlen. Es ist deutlich erkennbar, dass diese Verteilung der eigentlichen Verteilungsfunktion $f(x)$ folgt. Je mehr Zufallszahlen betrachtet werden, desto näher kommt die Verteilung der Häufigkeiten $f(x)$.

C. Varianz des Mittelwerts

Für die Varianz, also die Streuung um den Mittelwert, gilt die Definition:

$$\text{Var}(X) = \sigma^2 = E(X) - (E(X))^2 \quad (7.19)$$

Der Erwartungswert einer Zufallsvariablen X , deren Verteilung über die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $f(x)$ bestimmt ist, ist definiert als:

$$E(X) = \int_{-\text{inf}}^{\text{inf}} xf(x)dx. \quad (7.20)$$

Eine elementare Eigenschaft des Erwartungswerts ist seine Linearität, weshalb gilt:

$$E(aY + b) = aE(Y) + b \quad (7.21)$$

Damit gilt für die Varianz Var einer linear zusammengesetzten Zufallsvariablen $X = aY + b$:

$$\text{Var}(X) = \text{Var}(aY+b) = E[(aY-aE(Y))^2] = a^2 \cdot E[(Y-E(Y))^2] = a^2 \cdot \text{Var}(Y) \quad (7.22)$$

Die Varianz des Mittelwerts schreibt sich wie folgt:

$$\begin{aligned} \text{Var}\left(\frac{x_1 + x_2 + \dots + x_N}{N}\right) &= \frac{1}{N^2} \cdot \text{Var}(x_1 + x_2 + \dots + x_N) \\ &= \frac{1}{N^2} (\text{Var}(x_1) + \text{Var}(x_2) + \dots + \text{Var}(x_N)) = \frac{1}{N^2} (\text{Var}(X) + \text{Var}(X) + \dots + \text{Var}(X)) \\ &= \frac{1}{N^2} \cdot N(X) = \frac{\text{Var}(X)}{N} \end{aligned} \quad (7.23)$$

D. Beweis zur Gleichheit der Eigenwerte des adjungierten Operators und des Operators selbst

In Matrixschreibweise gilt für den stationären Reaktor:

$$\left(\frac{1}{k}F - L\right)\phi = 0 \quad (7.24)$$

bzw. unter Verwendung der Beziehung $k = \frac{1}{1-\rho} \Rightarrow \frac{1}{k} = 1 - \rho$:

$$(F - L)\phi = \rho F\phi \quad (7.25)$$

Für den adjungierten Fluss gilt analog unter Verwendung der adjungierten Operatoren die Gleichung :

$$(F^* - L^*)\phi^* = \rho^* F^*\phi^* \quad (7.26)$$

Multipliziert man Gleichung 7.25 von links mit dem adjungierten Fluss ϕ^* , Gleichung 7.26 von rechts mit dem direkten Fluss und führt im Anschluss eine Subtraktion der beiden Gleichungen durch, ist es leicht nachvollziehbar, dass folgende Beziehung gilt:

$$\langle \phi^* | (F - L)\phi \rangle - \langle \phi | (F^* - L^*)\phi^* \rangle = \rho \langle \phi^* | F\phi \rangle - \rho^* \langle \phi | F^*\phi^* \rangle \quad (7.27)$$

Per Definition erfüllt ein adjungierter Operator O die folgende Eigenschaft (falls die Funktionen ϕ und ϕ^* Elemente eines Banachraums sind):

$$\langle \phi | O^*\phi^* \rangle = \langle \phi^* | O\phi \rangle \quad (7.28)$$

Angewendet auf Gleichung 7.27 heben sich die Terme auf der linken Seite gegeneinander auf und damit muss gelten, dass auch die Terme auf der rechten Seite den gleichen Wert annehmen. Die Gleichung kann folglich nur erfüllt werden, wenn die Eigenwerte den gleichen Wert annehmen:

$$\rho = \rho^* \quad (7.29)$$

bzw.

$$k = k^* \quad (7.30)$$

Literatur

- [1] ABRAM, T. UND ION, S.: Generation-IV nuclear power: A review of the state of the science. In: Energy Policy 36 (2008), Nr. 12, S. 4323 – 4330. – ISSN 0301–4215
- [2] ARREGHINI, F. ; ANSELMET, M. ; HEE, C. : CABRI NOTE C 1149/94 Analysis Report of the LT2 Experiment. 1994. – Rapport no IPSN/DRS/SEA/LERES/94/912. Techn. Report. IPSN. Cadarache
- [3] ATKINS, P. W. ; TRAPP, A. : Physikalische Chemie. Weinheim : Wiley-VCH, 2001. – ISBN 3–527–30236–0. – 3. korrigierte Auflage
- [4] ATW (ATOMWIRTSCHAFT, HRSG.) : Nuclear Power Plants: 2015 atw Compact Statistics. In: atw - International Journal for Nuclear Power 61, S. 271 – 275. – Issue 4 - April 2016
- [5] BANDINI, G. ; EDERLI, S. : Assessment of ASTEC-Na Thermal-Hydraulic Models on Experiments and Benchmarking with Other Codes. 2016. – Rapporto SICNUC-PA11-002 Rev.0. ENEA
- [6] BARRACHIN, M. ; COUSIN, F.: MDB: A databank of material properties for water cooled reactors. 2007. – Technical Note IRSN/DPAM/SEMIC/LETR 2007-311. IRSN
- [7] BELL, C.R. ; BLEIWEIS, P.B. ; BOUDREAU, J.E. ; PARKER, F.R. ; SMITH, L.L.: SIMMER-I: an Sn, Implicit, Multifield, Multicomponent, Eulerian, Recriticality code for LMFBR disrupted core analysis. 1977. – Los Alamos National Laboratory Report. LA-4848-M, LA NUREG-6447-MS). USA
- [8] BERENSON, P.J.: Film-Boiling Heat Transfer from a Horizontal Surface. In: Journal of Heat Transfer 83 (1961), S. 351 – 358
- [9] BETHE, H.A. ; TAIT, J.H.: An Estimate of the Order of Magnitude of the Explosion when the Core of a Fast Reactor Collapses. In: UKAEA-RHM (56)113 (1956). – Report prepared for an International Discussion in April 1956
- [10] BLANCHET, D. ; BUIRON, L. ; STAUFF, N. : Sodium Fast Reactor Core Definition. 2009. – AEN - WPRS Benchmark Definition. Version 1.2
- [11] BRILLANT, G. ; LABORDE, L. : Sodium thermalhydraulics in ASTEC/CESAR. 2014. – Rapport no PSN-RES/SAG/2014-00008. IRSN
- [12] BUBELIS E. (2015): <http://www.inr.kit.edu/english/268.php>. Stand: 13.01.2017. – Analyses of Complex Sequences, Severe Accidents, and Limiting Events in Critical Systems for Transmutation

- [13] BUIRON, L. u. a.: Evaluation of Large 3600 MWth Sodium-cooled Fast Reactor Neutronic OECD Benchmarks. 28.Sept. - 3.Okt. 2014. – PHYSOR (Conference). Westin Miyako, Kyoto, Japan
- [14] CHATELARD, P. ; REINKE, N. : Overview of the integral code ASTEC V2.0. 2009. – Rapport Technique DPAM/SEMCA-2009-149. GRS, IRSN
- [15] CHMELKA, F. ; PRAGER, W. ; HODGE, P. : Theorie ideal plastischer Körper. Wien : Springer-Verlag, 2013. – ISBN 9783709178355
- [16] CLOAREC, L. ; MOAL, A. : Documentation for ASTEC-Na RIA Model. 2012. – Technical Report, PSN-RES/SAG/2012-00331. IRSN
- [17] CODRON, L. ; JOHNSON, F. ; SABATHIER, F. ; GARNIER, Y. : CABRI NOTE C 540/87 Analysis Report for the CABRI Transient Overpower Experiment AGS0. 1987. – Techn. Report. IPSN. Cadarache
- [18] CONLIN, J. u. a.: Continuous Energy Neutron Cross Section Data Tables Based upon ENDF/B-VII.1. 2013. – Report LA-UR-13-20137. Los Alamos National Laboratory
- [19] CONLIN, J. u. a.: Listing of Available ACE Data Tables. 2014. – Report LA-UR-13-21822 rev-4. Los Alamos National Laboratory
- [20] DORIATH , J.Y. ET AL.: ERANOS1: the Advanced European System of Codes for Reactor Physics. 1993. – Proc. Int. Conf. on Mathematical Methods and Supercomputing in Nuclear Applications , Karlsruhe, Germany
- [21] DORVAL, E. : Directional diffusion coefficients and leakage-corrected discontinuity factors: Implementation in Serpent and tests. In: Annals of Nuclear Energy 87, Part 2 (2016), S. 101 – 112. – ISSN 0306–4549
- [22] DORVAL, E. ; LEPPÄNEN, J. : Monte Carlo current-based diffusion coefficients: Application to few-group constant generation in SERPENT. In: Annals of Nuclear Energy 78 (2015), S. 104 – 116. – ISSN 0306–4549
- [23] DOWNAR, T. ; LEE, D. ; XU, Y. ; KOZLOWSKI, T. ; STAUDENMIER, J. : PARCS v2.6 U.S. NRC Core Neutronics Simulator - THEORY MANUAL. Draft, 11/06/2004. – School of Nuclear Engineering, Purdue University, Indiana / RES U.S. NRC, Rockville,Md
- [24] EUROPEAN COMMISSION - RESEARCH AND INNOVATION - FP7.: <https://ec.europa.eu/research/fp7>. (Stand: 13.01.2017)
- [25] FERGUSON, D. ; BOHL, W. ; BOWERS, C. ; CAHALAN, J. ; DUNN, F. ; HEAMES, T. ; KYSER, J. ; WANG, W. ; WIDER, H. : SAS4A LMFBR accident analysis code system: a progress report. In: CONF-761001, Volume II Proceedings of the International meeting on fast reactor safety and related physics (5.Oktober - 8.Oktober 1976). – Chicago (Illinois, USA)
- [26] FISCHER, H. : A History of the Central Limit Theorem: From Classical to Modern Probability Theory. Springer New York, 2010. – ISBN 9780387878577

- [27] FLAD, ZHANG, BOCCACCINI, MATZERATH, GABRIELLI, VEZZONI, MASCHEK, BRILLANT, BONNEVILLE, MONTI: ESFR Severe Accident Analyses with SIMMER-III. In: INIS Volume 46, INIS Issue 33 (2015). – International Nuclear Information System(INIS) - International Atomic Energy Agency (Hrsg.)
- [28] FLORES, A. F. ; MATUZAS, V. ; PEREZ-MARTIN, S. ; BANDINI, G. ; EDERLI, S. ; AMMIRABILE, L. ; PFRANG, W. : Analysis of ASTEC-Na capabilities for simulating a loss of flow (CABRI) experiment. In: Annals of Nuclear Energy 94 (2016), S. 175 – 188. – ISSN 0306–4549
- [29] FLORES, A. F. ; MATUZAS, V. ; PEREZ-MARTIN, S. ; BANDINI, G. ; EDERLI, S. ; AMMIRABILE, L. ; PFRANG, W. : Analysis of ASTEC-Na capabilities for simulating a loss of flow CABRI experiment. In: Annals of Nuclear Energy 94 (2016), S. 175 – 188. – ISSN 0306–4549
- [30] FLORES, A. ; MATUZAS, V. ; AMMIRABILE, L. : Analysis of CABRI-BI1 Loss of Flow Experiment. In: 23rd International Conference Nuclear Energy for New Europe - NENE2014 p. (2014). – Nuclear Society of Slovenia
- [31] FORSTER, H. ; ZUBER, N. : Dynamics of vapor bubbles and boiling heat transfer. In: A.I.Ch.E. Journal 1 (1955), Nr. 4, S. 531–535
- [32] FRIDMAN, E. ; LEPPÄNEN, J. : On the use of the Serpent Monte Carlo code for few-group cross section generation. In: Annals of Nuclear Energy 38 (2011), S. 1399 – 1405. – ISSN 0306–4549
- [33] FRIDMAN, E. ; SHWAGERAU, E. : Modeling of SFR cores with Serpent–DYN3D codes sequence. In: Annals of Nuclear Energy 53 (2013), S. 354 – 363. – ISSN 0306–4549
- [34] GABRIELLI, F. ; RINEISKI, A. ; MASCHEK, W. : Extension of the SIMMER cross-section processing scheme for core degradation analyses of thermal systems. In: Progress in Nuclear Energy 53 (2011), Nr. 7, S. 867 – 873. – ISSN 0149–1970. – The Third International Symposium on Innovative Nuclear Energy Systems, INES-3- Innovative Nuclear Technologies for Low-Carbon SocietyThe Third International Symposium on Innovative Nuclear Energy Systems, INES-3- Innovative Nuclear Technologies for Low-Carbon Society
- [35] GARCIA-CERVANTES, E.-Y. ; FRANCOIS, J. : A comparison between oxide and metallic fueled ASTRID-like reactors. In: Annals of Nuclear Energy 94 (2016), S. 350 – 358
- [36] GENERATION IV INTERNATIONAL FORUM (2017): <https://www.gen-4.org/>. Stand: 13.01.2017. – GIF Portal-Home-Public. Website
- [37] GERLACH, S. : Computerphysik: Einführung, Beispiele und Anwendungen. Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 2016. – ISBN 978–3–662–49429–5
- [38] GESELLSCHAFT FÜR REAKTORSICHERHEIT (GRS) MBH (HRSG.): Risikoorientierte Analyse zum SNR-300. 1982. – Techn. Report. GRS-51

- [39] GIRAULT, N. ; DORSSELAERE, J. V. ; JACQ, F. ; BRILLANT, G. ; KISSANE, M. ; BANDINI, G. ; BUCK, M. ; CHAMPIGNY, J. ; HERING, W. ; PEREZ-MARTIN, S. ; HERRANZ, L. ; RAISON, P. ; REINKE, N. ; TUCEK, K. ; VERWAERDE, D. : The European JASMIN project for the development of a new safety simulation code, ASTEC-Na, for Na-cooled Fast Neutron Reactors. In: International Congress on Advances in Nuclear Power Plants (ICAPP 2013) Nuclear Power – A Safe and Sustainable Choice for Green Future p. 314-325 (2013). – Jeju Island, Korea
- [40] GLASSTONE AND EDLUND: Kernreaktortheorie. Wien : Springer Verlag, 1961
- [41] GRABER, V. ; RIEGER, M. : Experimentelle Untersuchungen des Wärmeübergangs an Flüssigmetalle (NaK) in parallel durchströmten Rohrbündeln bei konstanter und exponentieller Wärmeflussdichteverteilung. 1972. – Technical Report 19, S.23 - 40. Atomkernenergie (ATKE)
- [42] GRUNDMANN, U. ; RHODE, U. ; MITTAG, S. ; KLIEM, S. : DYN3D Version 3.2 - Code for Calculation of Transients in Light Water Reactors with Hexagonal or Quadratic Fuel Elements. 2005. – Manual: Description of Models and Methods. Forschungszentrum Rossendorf - Institute of Safety Research
- [43] GRUNDMANN, U. ; RHODE, U. ; S. KLIEM, S. M.: DYN3D Version 3.2 - Code for Calculation of Transients in Light Water Reactors (LWR) with Hexagonal or Quadratic Fuel Elements. August 2005. – Wiss.-Techn. Bericht, FZR-434, Forschungszentrum Rossendorf
- [44] HYUN, H. ; HONG, S. G.: A sodium-cooled ultra-long-life reactor core having improved inherent safety with new driver-blanket burning strategy. In: International Journal of Hydrogen Energy 41 (2016), Nr. 17, S. 7082 – 7093. – Special Issue on 17th International Conference on Emerging Nuclear Energy Systems (ICES-NES'2015), 4-8 October 2015, Istanbul, Turkey
- [45] IRSN (HRSG.): Detailed specifications of models for pin behaviour. 2013. – Deliverable 2.2. JASMIN Project
- [46] IRSN (HRSG.): Status of validation of ASTEC-Na V1.1p1 pin behaviour models. 2016. – Deliverable 2.7. (Modelling-D2.7). JASMIN Project
- [47] IVEY, H. ; MORRIS, D. : On the relevance of the vapour-liquid exchange mechanism for subcooled boiling heat transfer at high pressure. 1962. – AEEW-R Report 137 (AEE-R137). UK Atomic Energy Authority
- [48] KOTTOWSKI, H. : Grundlagen des Siedens von Flüssigmetallen. In: Kernforschung und -technologie EUR7672 DE (1982). – Kommission der Europäischen Gemeinschaften
- [49] KRUESSMANN, R. ; PONOMAREV, A. ; PFRANG, W. ; STRUWE, D. ; CHAMPIGNY, J. ; CARLUEC, B. ; SCHMITT, D. ; VERWAERDE, D. : Assessment of SFR reactor safety issues: Part II: Analysis results of ULOF transients imposed on a variety of different innovative core designs with SAS-SFR. In: Nuclear Engineering and Design 285 (2015), S. 263 – 283. – ISSN 0029-5493

- [50] KUSSMAUL, G. u. a.: The CABRI project - overall status and achievements. 12-16 May 1986
- [51] LABORDE, L. : Adaption of the thermal-hydraulic code CESAR in order to use sodium and its vapour as a coolant instead of water and steam. 2009. – Technical Report, CSSI/311-1/AB08E045/NT/09-082. IRSN
- [52] LABORDE, L. : In pin fuel motion model in ASTEC-Na. 2015. – Rapport no PSN-RES/SAG/2015-00375. IRSN
- [53] LAZARO, A. ; SCHIKORR, M. ; MIKITYUK, K. ; AMMIRABILE, L. ; BANDINI, G. ; DARMET, G. ; SCHMITT, D. ; DUFOUR, P. ; TOSELLO, A. ; GALLEGO, E. ; JIMENEZ, G. ; BUBELIS, E. ; PONOMAREV, A. ; KRUESSMANN, R. ; STRUWE, D. ; STEMPNIEWICZ, M. : Code assessment and modelling for Design Basis Accident analysis of the European Sodium Fast Reactor design. Part II: Optimised core and representative transients analysis. In: Nuclear Engineering and Design 277 (2014), S. 265 – 276. – ISSN 0029–5493
- [54] LEMAITRE, J. ; CHABOCHE, J. : Mechanics of Solid Materials. Cambridge : Cambridge University Press, 1990 (1. Edition). – ISBN 978–0521328531
- [55] LEPPÄNEN, J. : Development of a new Monte Carlo reactor physics code, Helsinki University of Technology, Finland, Diss., 2007
- [56] LEPPÄNEN, J. : montecarlo.vtt.fi. Stand: 13.01.2017. – Serpent User Manual. Serpent – a Continuous-energy Monte Carlo Reactor Physics Burnup Calculation Code (June 18, 2015)
- [57] LEPPÄNEN, J. ; PUSA, M. ; FRIDMAN, E. : Overview of methodology for spatial homogenization in the Serpent 2 Monte Carlo code. In: Annals of Nuclear Energy 96 (2016), S. 126 – 136. – ISSN 0306–4549
- [58] LIU, P. ; CHEN, X. ; RINEISKI, A. ; MASCHEK, W. : Transient analyses of the 400MWth-class (EFIT) accelerator driven transmuter with the multi-physics code: SIMMER-III. In: Nuclear Engineering and Design 240 (2010), Nr. 10, S. 3481 – 3494. – ISSN 0029–5493
- [59] LOS ALAMOS NATIONAL LABORATORY - X-5 MONTE CARLO TEAM: MCNP-A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5, Volume I: Overview and Theory. Los Alamos, USA, 2003. – Manual. LA-UR-03-1987
- [60] LOS ALAMOS NATIONAL LABORATORY (HRSG.): Initial MCNP6 Release Overview - MCNP6 version 1.0. 2013. – Report LA-UR-13-22934
- [61] LYON, R. : Liquid metal heat transfer coefficients. In: Chem.Eng.Prog. (1951), S. 47–75
- [62] MASCHEK, W. : SIMMER-III Code-Verification Phase I. 1996. – Wissenschaftlicher Bericht FZKA-5690. Forschungszentrum Karlsruhe GmbH Technik und Umwelt, Deutschland

- [63] MASCHEK, W.; RINEISKI, A.; SUZUKI, T.; WANG, S.; MORI, MG.; WIEGNER, E.; WILHELM, D.; KRETZSCHMAR, F.; TOBITA, Y.; YAMANO, H.; FUJITA, S.; COSTE, P.; PIGNY, S.; HENRIQUES, A.; CADIOU, T.; MORITA, K.; BANDINI, G.: SIMMER-III and SIMMER-IV Safety Code Development for Reactors with Transmutation Capability / Avignon, Frankreich. 12.-15. September 2005. – Forschungsbericht. – (on CD-ROM)
- [64] MASCHEK, W. ; RINEISKI, A. ; SUZUKI, T. ; CHEN, X. ; MORI, MG. ; WANG, S. ; FORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE, CADIOU, T. ; COSTE, P.: The SIMMER-III and SIMMER-IV Code Family: 2-D and 3-D Mechanistic Simulation Tools for Reactor Transients and Accidents. In: <http://citeseerx.ist.psu.edu> (2003). <http://dx.doi.org/10.1.1.595.5035>. – DOI 10.1.1.595.5035
- [65] MELIS, J. ; ROCHE, L. ; PIRON, J. ; TRUFFERT, J. : GERMINAL — A computer code for predicting fuel pin behaviour. In: Journal of Nuclear Materials 188 (1992), S. 303 – 307. – ISSN 0022–3115
- [66] MIKITYUK, K. : FRED: Computational Model of Fuel Rod Behavior under Accident Conditions Coupled with RELAP5/MOD3. April 2-6, 2000. – Proc. 8th Conference on Nuclear Engineering (ICONE-8), Baltimore MD, USA
- [67] MIKITYUK, K. ; PELLONI, S. ; CODDINGTON, P. ; BUBELIS, E. ; CHAWLA, R. : FAST: An advanced code system for fast reactor transient analysis. In: Annals of Nuclear Energy 32 (2005), S. 1613 – 1631. – ISSN 0306–4549
- [68] MIKITYUK, K. : Heat transfer to liquid metal: Review of data and correlations for tube bundles. In: Nuclear Engineering and Design 239 (2009), Nr. 4, S. 680 – 687. – ISSN 0029–5493
- [69] MOAL, A. ; GEORGENTHUM, V. ; MARCHAND, O. : SCANAIR: A transient fuel performance code: Part One: General modelling description. In: Nuclear Engineering and Design 280 (2014), S. 150 – 171. – ISSN 0029–5493
- [70] MOCHIZUKI, H. ; TAKANO, M. : Heat transfer in heat exchangers of sodium cooled fast reactor systems. In: Nuclear Engineering and Design 239 (2009), Nr. 2, S. 295 – 307. – ISSN 0029–5493
- [71] MORITA, K. ; KONDO, S. ; TOBITA, Y. ; BREAR, D. : SIMMER-III applications to fuel-coolant interactions. In: Nuclear Engineering and Design 189 (1999), Nr. 1–3, S. 337 – 357. – ISSN 0029–5493
- [72] NIKITIN, E. ; FRIDMAN, E. ; MIKITYUK, K. : On the use of SPH method in nodal diffusion analyses of SFR cores. In: Annals of Nuclear Energy 85 (2015), S. 544 – 551. – ISSN 0306–4549
- [73] NIKITIN, E. ; FRIDMAN, E. ; MIKITYUK, K. : Solution of the OECD/NEA neutronic SFR benchmark with Serpent-DYN3D and Serpent-PARCS code systems. In: Annals of Nuclear Energy 75 (2015), S. 492 – 497. – ISSN 0306–4549
- [74] NINOKATA, H. : Analysis of low-heat-flux sodium boiling test in a 37-pin bundle by the two-fluid model computer code SABENA. In: Nuclear Engineering and Design 97 (1986), S. 233 – 246. – ISSN 0029–5493

- [75] NINOKATA, H. ; OKANO, T. : SABENA: Subassembly boiling evolution numerical analysis. In: Nuclear Engineering nad Design 120 (1990), S. 349 – 367. – ISSN 0029–5493
- [76] NUCLEAR DATA CENTER AT KAERI: <http://atom.kaeri.re.kr:8080/cgi-bin/endlplot.pl>. Stand: 13.01.2017. – Online Plotter for MCNP and ENDF cross section data. Website
- [77] PEREZ-MARTIN, S. ; BANDINI, G. ; MATUZAS, V. ; BUCK, M. ; GIRAULT, N. : First Analysis of AGS0, LT2 and E9 CABRI Tests with the new SFR safety Code ASTEC-Na. In: Proceedings of ICONE-23 (2015). – May 17-21, Chiba (Japan)
- [78] PEREZ-MARTIN, S. ; BANDINI, G. ; MATUZAS, V. ; BUCK, M. ; GIRAULT, N. : First Analysis of AGS0, LT2 and E9 CABRI Tests with the new SFR safety Code ASTEC-Na. In: Proceedings of ICONE-23 ICONE23-2041 (2015). – Chiba, Japan
- [79] REUSS, P. : Neutron Physics. Cedex, Frankreich : EDP Science, 2008. – ISBN 978–2–7598–0041–4
- [80] RHODE, U. u. a.: The reactor dynamics code DYN3D - models, validation and applications. In: Progress in Nuclear Energy 89 (2016), S. 170 – 190. – ISSN 0149–1970
- [81] RIMPAULT, G. ; BURION, L. ; P. SCIORA, N. S. ; KIM, T. ; TAIWO, T. : AEN-WPRS Benchmark for uncertainty analysis in modelling (UAM) for design, operation and safety analysis of SFRs. 2015. – Cover Note. Version 1.0
- [82] ROWLANDS, J. ; EATON, C. : Effective Diffusion Coefficients for Low Density Cylindrical Channels. In: Nuclear Science and Engineering 76 (1980), S. 263 – 281
- [83] ROWLANDS, J.L.: Nuclear Data For Fission Reactor Core Design and Safety Analysis: Requirements and Status of Accuracy of Nuclear Data. In: PROCEEDINGS OF THE COURSE ON ADVANCES IN NUCLEAR THEORY AND NUCLEAR DATA FOR REACTOR APPLICATIONS IAEA-SMR-93 (25. Januar - 19. Februar 1982), S. 119–171. – Triest (Italien)
- [84] SAHA, P. ; AKSAN, N. ; ANDERSEN, J. ; YAN, J. ; SIMONEAU, J. ; LEUNG, L. ; BERTRAND, F. ; AOTO, K. ; KAMIDE, H. : Issues and future direction of thermal-hydraulics research and development in nuclear power reactors. In: Nuclear Engineering and Design 264 (2013), S. 3 – 23. – ISSN 0029–5493. – SI:NURETH-14
- [85] SALVATORES, M. ; PALMIOTTI, G. : Radioactive waste partitioning and transmutation within advanced fuel cycles: Achievements and challenges. In: Progress in Particle and Nuclear Physics 66 (2011), Nr. 1, S. 144 – 166. – ISSN 0146–6410
- [86] SHIBATA, K. u. a.: JENDL-4.0: A New Library for Nuclear Science and Engineering. In: Journal of Nuclear Science and Technology 48(1) (2011), S. 1 – 30
- [87] SJENITZER, BART L. ; HOOGENBOOM, J. EDUARD: A Monte Carlo method for calculation on the dynamic behaviour of nuclear reactors. In: Progress in Nuclear Science and Technology 2 (2011), S. 716 – 721

- [88] SPORE, J. ; SADASIVAN, P. ; LIL, D. : Accelerator Transmutation of Waste Updates for TRAC-M. Juni 2001. – Report, LA-UR-01-3660
- [89] SUN, K. : Analysis of Advanced Sodium-cooled Fast Reactor Core Designs with Improved Safety Characteristics, Ecole Polytechnique Federale de Lusanne, Schweiz, Diss., 2012
- [90] SUZUKI, T. ; TOBITA, Y. ; KONDO, S. ; SAITO, Y. ; MISHIMA, K. : Analysis of gas–liquid metal two-phase flows using a reactor safety analysis code SIMMER-III. In: Nuclear Engineering and Design 220 (2003), Nr. 3, S. 207 – 223. – ISSN 0029–5493
- [91] THOM, J.R.S ; WALKER, W.M. ; FALLON, T.A. ; REISING, G.F.S: Boiling in subcooled water during flow up heated tubes or annuli. In: Symposium on Boiling Heat Transfer in Steam Generation Units and Heat Exchangers (1965). – Paper 6. ImechE (London)
- [92] TOBITA, Y. ; KONDO, S. ; YAMANO, H. ; MORITA, K. ; MASCHEK, W. ; COSTE, P. ; CADIOU, T. : The development of SIMMER-III, an advanced computer program for LMFR safety analysis, and its application to sodium experiments. In: Nuclear Technology 153 (2006), Nr. 3, S. 245–255
- [93] TUCEK, K. ; CARLSSON, J. ; VIDOVIĆ, D. ; WIDER, H. : Comparative study of minor actinide transmutation in sodium and lead-cooled fast reactor cores. In: Progress in Nuclear Energy 50 (2008), Nr. 2–6, S. 382 – 388. – ISSN 0149–1970. – Innovative Nuclear Energy Systems for Sustainable Development of the World. Proceedings of the Second COE-INES International Symposium, INES-2, November 26-30, 2006, Yokohama, Japan
- [94] USHAKOV, P. A. ; ZHUKOV, A. ; MATYUKHIN, N. : Heat transfer to liquid metals in regular arrays of fuel elements. In: High Temp. (USSR) (Engl. Transl.); (United States) 15 (1978), Nr. 5, S. 868 – 873
- [95] VEZZONI, B. ; GABRIELLI, F. ; RINEISKI, A. ; MARCHETTI, M. ; CHEN, X.-N. ; FLAD, M. ; MASCHEK, W. ; BOCCACCINI, C. M. ; ; ZHANG, D. : Safety-Related Optimization and Analyses of an Innovative Fast Reactor Concept. In: Sustainability 4 (2012), S. 1274 – 1291. – ISSN 2071–1050
- [96] WEBER, D.P. ; BIRGERSSON, G. ; BORDNER, G.L.; BRIGGS, L.L. ; CAHALAN J.E. ; DUNN F.E. ; KALIMULLAH ; MILES K.J. ; PROHAMMER F.G. ; TENTNER, A.M. ; VERKLAN J.A. : The SAS4A LMFBR whole Core Accident Analysis Code. In: CONF-850410–23 (1985). – Report, Reactor Analysis and Safety Divison, Argonne National Laboratory, USA
- [97] YOSHIDA, T. : Improved Treatment of the Neutron Streaming Through Control Rod Followers in a Sodium-Cooled Fast Reactor. In: Nuclear Science and Engineering 72 (1979), Nr. 3, S. 361 – 365
- [98] ZAKINE, C. ; PRIOUL, C. ; FRANÇOIS, D. : Creep behaviour of ODS steels. In: Materials Science and Engineering: A 219 (1996), Nr. 1, S. 102 – 108. – ISSN 0921–5093

Institut für Kernenergetik und
Energiesysteme

Universität Stuttgart

Pfaffenwaldring 31

D-70569 Stuttgart