

INNOSYS-2

**Entwicklung
moderner High-fidelity
Multiscale-Multiphysik-
Rechenmethoden zur
Sicherheitsbewertung
innovativer
Reaktorkonzepte**

INNOSYS-2

Entwicklung moderner High-fidelity Multiscale-Multiphysik- Rechenmethoden zur Sicherheitsbewertung innovativer Reaktorkonzepte

Armin Seubert
Jérémy Bousquet
Ekaterina Elts
Liancheng Guo
Joachim Herb
Thorsten Hollands
Silvia Io Muzio

Juni 2023

Anmerkung:

Das diesem Bericht zugrunde liegende Forschungsvorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz, nukleare Sicherheit und Verbraucherschutz (BMUV) unter dem Förderkennzeichen RS1589 durchgeführt.

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt bei der GRS.

Der Bericht gibt die Auffassung und Meinung der GRS wieder und muss nicht mit der Meinung des BMUV übereinstimmen.

Deskriptoren

3D-Neutronenphysik, ATHLET, CFD, Codeentwicklung, FENNECS, Flüssigmetall, gekoppelter Code, hochauflösend, Natrium, natriumgekühlter schneller Reaktor, Multiphysik, Multiskalen, OpenFOAM, Reaktorphysik, schneller Reaktor, Serpent, stabweise, Sicherheitsbewertung, Thermohydraulik

Kurzfassung

Dieser Bericht dokumentiert die im Rahmen des im GRS-Eigeninteresse durchgeführten Arbeiten zur Weiterentwicklung moderner Multiscale-Multiphysik-Rechenmethoden zur Sicherheitsbewertung innovativer Reaktorkonzepte. Hintergrund ist die Tatsache, dass wesentliche Akzeptanzkriterien für den sicheren Reaktorbetrieb nicht nodale, sondern lokale, d.h. stabweise aufgelöste (Pin-by-pin-)Größen wie maximale lokale Stablängenleistung, maximale Brennstofftemperatur, maximale Hüllrohrtemperatur etc. sind. Zur besseren Bestimmung lokaler Parameter sind daher hochaufgelöste (sog. *high fidelity*) gekoppelte Multiphysik-Simulationen in Stab- bzw. Unterkanal-Darstellung erforderlich, um lokale neutronenphysikalische und thermohydraulische Phänomene möglichst realitätsgetreu modellieren und – in künftiger Verbindung mit Unsicherheitsanalysen – Aussagen zu Sicherheitsmargen erhalten zu können. Zur Erreichung dieser Ziele wurden in diesem Vorhaben (Entwicklungs-)Arbeiten auf folgenden Gebieten durchgeführt

- Entwicklung gekoppelter Pin-by-pin-Rechenmethoden schneller Systeme,
- Reaktorphysik zur Sicherheitsbewertung schneller Systeme,
- Thermohydraulik zur Sicherheitsbewertung schneller Systeme.

Im Rahmen dieses Vorhabens wurde ein Nachwuchswissenschaftler, der an diesem Projekt maßgeblich mitgewirkt hat, im November 2021 an der Technischen Universität Dresden mit einer Dissertation zum Thema *Development of Advanced Methods for Safety Assessment of Sodium Cooled Fast Reactors* zum Dr.-Ing. promoviert. Dies stellt einen konkreten Beitrag nicht nur zur Kompetenzerhaltung, sondern auch zur Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses auf dem Gebiet der nuklearen Sicherheitsforschung dar.

Ergänzend dazu werden internationale Aktivitäten zu neuen Reaktorkonzepten verfolgt und dokumentiert, sofern diese für das vorliegende oder künftige Eigenforschungsvorhaben relevant sind bzw. sein könnten. Außerdem wird an internationalen Aktivitäten, beispielsweise der Internationalen Atomenergiebehörde (IAEA) oder der *Sustainable Nuclear Energy Technology Platform* (SNETP) teilgenommen, um an Benchmarks teilzunehmen oder für dieses oder künftige Eigenforschungsvorhaben relevante Informationen und Daten zu erhalten. Wesentliche Arbeiten und Ergebnisse des vorliegenden Vorhabens wurden in verschiedenen Veröffentlichungen publiziert und auf Konferenzen

und anderen Veranstaltungen präsentiert. Eine Übersicht hierzu findet sich am Ende dieses Berichts.

Abstract

This report documents the work carried out in GRS's own interest to further develop modern multiscale multiphysics simulation methods for the safety assessment of innovative reactor concepts. This is driven by the fact that important acceptance criteria for safe reactor operation are not nodal, but local, i.e., pin-by-pin quantities such as maximum local linear heat generation rate, maximum fuel temperature or maximum cladding temperature. For an improved determination of such local parameters, high-resolution (also called high fidelity) coupled multi-physics simulations at pin and sub-channel level are therefore required in order to model local neutron-physical and thermal-hydraulic phenomena as realistically as possible and – in future connection with uncertainty analyzes – to derive estimates on safety margins. To achieve these goals, research and development work was carried out in this project in the following areas:

- Development of coupled pin-by-pin calculation methods of fast spectrum systems.
- Reactor physics for safety assessment of fast spectrum systems
- Thermal hydraulics for safety assessment of fast spectrum systems

As part of this project, a young scientist who significantly contributed to this project received his doctorate in nuclear engineering (Dr.-Ing.) in November 2021 at the Technical University of Dresden with a thesis entitled *Development of Advanced Methods for Safety Assessment of Sodium Cooled Fast Reactors*. This represents a substantial contribution not only to maintaining competence, but also to promoting young scientists in the field of nuclear safety research.

In addition, international activities relating to new reactor concepts are pursued and documented, provided these were or will be considered relevant to the current or future GRS research projects in this field. In addition, GRS took part in international activities, such as the International Atomic Energy Agency (IAEA) or the *Sustainable Nuclear Energy Technology Platform* (SNETP), in order to participate in benchmarks or to obtain information and data relevant to this or future research projects. Essential work and results of the present project were published in various publications and presented at conferences and other events. An overview of this can be found at the end of this report.

Inhaltsverzeichnis

	Inhaltsverzeichnis.....	V
1	Einleitung	1
2	Zielsetzung und Arbeitsprogramm.....	3
2.1	Zielsetzung	3
2.2	Arbeitsprogramm	4
2.2.1	AP 1: Entwicklung gekoppelter Pin-by-pin-Rechenmethoden schneller Systeme	4
2.2.2	AP 2: Reaktorphysik zur Sicherheitsbewertung schneller Systeme.....	4
2.2.3	AP 3: Thermohydraulik zur Sicherheitsbewertung schneller Systeme.....	4
2.2.4	AP 4: Verfolgung internationaler Aktivitäten zu neuen Reaktorkonzepten.....	5
2.2.5	AP 5: Mitwirkung an der Fast Reactor Knowledge Preservation (FRKP) Initiative der IAEA	6
3	Wissenschaftlicher und technischer Stand, an den angeknüpft wurde.....	7
3.1	Internationale Stand von Wissenschaft und Technik.....	7
3.1.1	Reaktorphysik innovativer Reaktorsysteme	7
3.1.2	Thermohydraulik innovativer Reaktorsysteme	8
3.2	Arbeiten und Ergebnisse aus dem Vorgängervorhaben.....	9
3.3	Reaktorphysik zur Sicherheitsbewertung schneller Systeme	9
3.4	Entwicklung thermostruktureller Rückwirkungsmodelle.....	10
3.5	Thermohydraulik zur Sicherheitsbewertung schneller Systeme	11
3.6	Fast Reactor Knowledge Preservation (FRKP) Portal.....	12
4	AP 1: Entwicklung gekoppelter Pin-by-pin-Rechenmethoden schneller Systeme	13
4.1	Der China Experimental Fast Reactor (CEFR) – CRP der IAEA	14
4.2	Generierung stabzellhomogenisierter Wirkungsquerschnittsdaten des CEFR-Brennelements.....	15

4.2.1	Modellierung des CEFR-Brennelements in Serpent.....	15
4.2.2	Berechnung stabzellhomogenisierter parametrisierter Wirkungsquerschnittsbibliotheken.....	16
4.3	FENNECS-Modell des CEFR-Brennelements in Pin-by-Pin-Auflösung....	17
4.3.1	Stabzellaufgelöste Stand-alone-Simulation des CEFR-Brennelements....	18
4.4	CEFR-Minikernmodelle in Pin-by-Pin-Auflösung	18
4.4.1	Minikernmodell mit sieben Brennelementen.....	18
4.4.2	Minikernmodell mit 19 Brennelementen	19
4.5	Überprüfung der stabaufgelösten FENNECS-Simulationen durch Vergleich mit Monte-Carlo-Referenzrechnungen	20
4.5.1	Allseits Vakuum-Randbedingungen	24
4.5.2	Axial Vakuum- und radial reflektierende Randbedingungen.....	24
4.5.3	Allseits reflektierende Randbedingungen.....	24
4.6	Gekoppelte stab-/unterkanal aufgelöste Simulationen mit FENNECS/ATHLET	30
4.6.1	Einzelnes Brennelement.....	30
4.6.2	Simulationen des Minikerns aus sieben Brennelementen	31
4.6.3	Simulationen des Minikerns aus 19 Brennelementen.....	33
4.7	Bereitstellung des CTF-Entwicklungszweigs für natriumgekühlte Systeme für künftige Simulationen mit FENNECS/CTF	34
4.8	Zusammenfassung und Ausblick	35
5	AP 2: Reaktorphysik zur Sicherheitsbewertung schneller Systeme..	37
5.1	Simulation von CEFR Neutronic Start-up Tests mit FENNECS.....	37
5.1.1	Modelle für den Monte-Carlo-Code Serpent.....	37
5.1.2	Deterministische Kernmodelle des CEFR in FENNECS.....	40
5.1.3	Simulation verschiedener CEFR-Experimente mit FENNECS.....	41
5.2	Modellierung und Simulation des ESFR-Kerns	51
5.2.1	Spezifikation des ESFR-Kerns.....	51
5.2.2	Generierung nuklearer Daten und Referenzmodell in Serpent.....	53
5.2.3	Modell des ESFR-Kerns in FENNECS.....	56
5.2.4	Simulationen des ESFR-Kerns mit FENNECS.....	57

5.2.5	Gekoppelte Simulationen des ESFR-Kerns mit FENNECS/ATHLET	60
5.2.6	Anpassungen der Kopplungsschnittstelle zwischen FENNECS und ATHLET	63
6	AP 3: Thermohydraulik zur Sicherheitsbewertung schneller Systeme.....	65
6.1	Modellierung thermischer Strukturausdehnungen in der Thermohydraulik.....	65
6.1.1	Theoretische Beschreibung	66
6.1.2	Numerische Simulation	69
6.2	Unterkanalmodellierung des CEFR-Brennelements in ATHLET.....	74
6.2.1	ATHLET-Modell eines CEFR-Brennelements in Unterkanal- darstellung ...	75
6.2.2	ATHLET-Modell von CEFR-Minikernen in Unterkanal- darstellung	77
6.3	CFD-Modellierung des CEFR-Brennelements in OpenFOAM.....	77
6.4	Thermohydraulisches Modell des ESFR-Kerns in ATHLET	80
6.5	Arbeiten zur Validierung von ATHLET für innovative Reaktor- konzepte....	84
6.6	3D-Simulationen mit ATHLET/OpenFOAM – Beteiligung am EU- Projekt ESFR-SMART	86
7	AP 4: Verfolgung internationaler Aktivitäten zu neuen Reaktorkonzepten.....	89
8	AP 5: Mitwirkung an der Fast Reactor Knowledge Preservation (FRKP) Initiative der IAEA	91
9	Zusammenfassung und Ausblick.....	93
10	Ausgewählte Veröffentlichungen und Präsentationen	97
	Glossar	99
	Abbildungsverzeichnis.....	101
	Tabellenverzeichnis.....	105

Literaturverzeichnis..... 107

1 Einleitung

Im Rahmen der Reaktorsicherheitsforschung werden kontinuierlich spezifische Methoden und Rechenprogramme zur Simulation des Ablaufs von betrieblichen Transienten sowie von Stör- und Unfällen entwickelt. Ziel ist eine möglichst realitätsnahe und aussagegenaue Beschreibung der zu erwartenden Abläufe und des Anlagenverhaltens als Grundlage für sicherheitstechnische Analysen und Bewertungen /BUN 21/. Das vorliegende Eigenforschungsvorhaben befasst sich mit der Weiterentwicklung Simulationsmethoden und -codes zur Sicherheitsbewertung innovativer Reaktorkonzepte. Dazu zählen die Konzepte der Generation IV, die durch physikalisch-inhärente Sicherheitsmechanismen und passive Systeme einen wesentlich höheren Sicherheitsstandard bieten bei gleichzeitig besserer Brennstoffausnutzung (Schließung des Brennstoffkreislaufs) und der Option der Reduzierung hochradioaktiver Abfälle. Von den vier Konzepten der Generation IV sind die flüssigmetallgekühlten Systeme entwicklungstechnisch am weitesten fortgeschritten, insbesondere der natriumgekühlte Reaktor (Sodium-cooled Fast Reactor, SFR), der in verschiedenen Ländern betrieben wurde bzw. wird, beispielsweise in Russland (BN-800, ab 2035: BN-1200), USA (EBR-1, EBR-2, TerraPower), Indien (Prototype Fast Breeder Reactor, PFBR) oder China (China Experimental Fast Reactor, CEFR). Hervorzuheben ist aber auch die in Bau befindliche Vielzweck-Forschungseinrichtung MYRRHA (Multi-purpose hYbrid Research Reactor for High-tech Applications), die in Belgien und damit in unmittelbarer Nachbarschaft betrieben werden wird.

Die bis in die 50er Jahre zurückreichende Entwicklung flüssigmetallgekühlter, insbesondere natriumgekühlter Reaktorkonzepte war und ist stets begleitet durch fortschreitende Weiterentwicklung des für sichere Auslegung und Betrieb notwendigen Standes von Wissenschaft und Technik /RUG 17/. Fortschreitender Erkenntnisgewinn in Verbindung mit Zuwächsen in der Rechenleistung machen es möglich, ursprünglich erforderliche Konservativitäten für sicherheitsrelevante Kenngrößen wie maximale lokale Stablängenleistung, maximale Brennstoff- und Hüllrohrtemperatur schrittweise abzubauen bzw. überhaupt Informationen darüber zu erhalten, wie groß die jeweiligen Sicherheitsmargen sind. Dies gelingt durch die Entwicklung und den Einsatz von kontinuierlich verfeinerten Simulationsmethoden und -codes, die die relevanten neutronenphysikalischen und thermohydraulischen Phänomene (Multiphysik) und deren Wechselwirkungen untereinander durch miteinander gekoppelte, hochauflösende Rechenprogramme (sog. Best-Estimate-Ansatz) simulieren. Aussagen über die Sicherheitsmargen gewinnt man mittels Unsicherheitsanalysen (engl. Uncertainty Quantification, UC), die besonders für

Reaktorkonzepte mit – verglichen mit LWR – relativ wenig Betriebserfahrung wie SFR von Bedeutung sind. Die Kombination aus Best-Estimate-Ansatz und Unsicherheitsanalysen ist international unter dem Stichwort BEPU (Best Estimate Plus Uncertainty) etabliert. Das vorliegende Eigenforschungsvorhaben realisiert den hochauflösenden Multiphysik-Best-Estimate-Ansatz mit neutronenphysikalischen Codes (Monte-Carlo-Code Serpent, deterministischer Code FENNECS) und thermohydraulischen Codes (Systemcode ATHLET, Computational-Fluid-Dynamik-(CFD-)Code OpenFOAM), die teils miteinander gekoppelt sind (FENNECS/ATHLET, OpenFOAM/ATHLET).

Das übergeordnete Ziel dieses Eigenforschungsvorhabens ist die Weiterentwicklung der Rechencodes und -methoden der GRS-Rechenkette, um hiermit innovative Reaktorkonzepte nach neuestem Stand von Wissenschaft und Technik sicherheitstechnisch bewerten zu können. Dies betrifft betriebliche Zustände ebenso Störfall-Transienten, beispielsweise Reaktivitätsstörfälle durch unmittelbare Reaktivitätszufuhr (Änderung der Kerengeometrie, Ausfahren von Steuerstäben) oder durch Verdrängung von Natrium aus dem Kern (positiver Reaktivitätseffekt bei SFR) /GRS 84/, /SCH 11/, /DEN 12/. Ein wichtiger Aspekt betrifft die Verifizierung und Validierung der Simulationswerkzeuge, die auch Gegenstand dieses Vorhabens sind. Dies erfolgt beispielsweise durch Teilnahme an internationalen Benchmarks und Projekten wie dem EU-Projekt ESFR-SMART.

2 Zielsetzung und Arbeitsprogramm

2.1 Zielsetzung

Die Zielsetzung dieses im GRS-Eigeninteresse bearbeiteten Forschungsvorhabens bestand in der Weiterentwicklung moderner Multiscale-Multiphysik-Rechenmethoden zur Sicherheitsbewertung innovativer Reaktorkonzepte. Multi-Physik-Simulationsmethoden und -Codes ermöglichen genauere und realistischere Vorhersagen des lokalen Verhaltens von Reaktorkernen. Nodale 3D-Neutronenkinetik in Kopplung mit System-Thermohydraulik auf Brennelementebene repräsentieren in der Forschung eine etablierte Vorgehensweise. Wesentliche Akzeptanzkriterien für den sicheren Reaktorbetrieb sind jedoch nicht nodale, sondern lokale, d.h. stabweise aufgelöste (Pin-by-pin-)Größen wie maximale lokale Stablängenleistung, maximale Brennstofftemperatur, maximale Hüllrohrtemperatur etc. Zur besseren Bestimmung lokaler Parameter sind daher hochaufgelöste (sog. *high fidelity*) gekoppelte Multiphysik-Simulationen in Stab- bzw. Unterkanal-Darstellung erforderlich, um lokale Phänomene möglichst realitätsgetreu zu modellieren und – in Verbindung mit Unsicherheitsanalysen – Aussagen zu Sicherheitsmargen zu erhalten. Zur Erreichung dieser Ziele wurden in diesem Vorhaben (Entwicklungs-)Arbeiten auf folgenden Gebieten durchgeführt:

- Weiterentwicklung und Überprüfung fortgeschrittener reaktorphysikalischer und thermohydraulischer Rechenverfahren zur hochaufgelösten (Pin-by-pin-)Sicherheitsbewertung schneller flüssigmetallgekühlter Generation IV-Systeme einschließlich SMR,
- Beteiligung an internationalen Aktivitäten, hier am Beispiel des *Coordinated Research Project (CRP)* der IAEA zu den *Neutronic Start-Up-Tests* des China Experimental Fast Reactor (CEFR).

Im Ergebnis stehen Rechenverfahren und -werkzeuge zur Verfügung, um die Kompetenz der GRS auf dem Gebiet der hochaufgelösten gekoppelten Multiscale-Multiphysik-Reaktorsicherheitsforschung und -bewertung innovativer Reaktorsysteme und -konzepte auszubauen und sicherzustellen. Die Arbeiten sind auch ein konkreter Beitrag zum Kompetenzerhalt. So wurde im Rahmen dieses Vorhabens ein Nachwuchswissenschaftler der GRS mit einer Dissertation zum Thema *Development of Advanced Methods for Safety Assessment of Sodium Cooled Fast Reactors* im November 2021 an der Technischen Universität Dresden zum Dr.-Ing. promoviert.

2.2 Arbeitsprogramm

2.2.1 AP 1: Entwicklung gekoppelter Pin-by-pin-Rechenmethoden schneller Systeme

Da bestimmte sicherheitsrelevante Parameter lokale Größen sind, ist die genaue Kenntnis der stabweisen Verteilungen von z. B. Brennstoff- und Hüllrohrtemperatur bzw. der Kühlmitteltemperaturverteilung im Unterkanal unter stationären und Störfallbedingungen notwendig. Deren verlässliche Bestimmung erfordern Entwicklung und Einsatz lokal auflösender Best-Estimate-Simulationsmethoden sowie Unsicherheitsanalysen zur Quantifizierung der Sicherheitsmargen. Die Rechenmethoden der GRS wurden systematisch auf hochaufgelöste Modellierungsfähigkeiten lokaler Phänomene überprüft und erweitert.

2.2.2 AP 2: Reaktorphysik zur Sicherheitsbewertung schneller Systeme

Hier werden die für schnelle Reaktorsysteme spezifischen Entwicklungsarbeiten, u. a. Weiterentwicklung von Modellen und Methodik zur 3D-Simulation sicherheitsrelevanter thermostruktureller Ausdehnungseffekte im Reaktorkern, weitergeführt. Ferner werden Kernmodelle ausgewählter Reaktorsystemen mit schnellen Neutronenspektren erstellt und überprüft (z. B. Beteiligung am CRP der IAEA zu den CEFR-Startup-Tests) und die erforderlichen nuklearen Daten erstellt.

2.2.3 AP 3: Thermohydraulik zur Sicherheitsbewertung schneller Systeme

ATHLET-Analysen mit einer pin-by-pin Auflösung liegen derzeit außerhalb des empfohlenen Anwendungsbereiches. In diesem Vorhaben wurden thermohydraulische Modelle in unterkanalartiger Auflösung in ATHLET entwickelt und anhand gezielter Analysen für flüssigmetallgekühlte Reaktoren und Vergleiche mit CFD oder Unterkanal-Rechnungen überprüft. Ziel ist es, gekoppelte stab-/unterkanalartige gekoppelte stationäre und transiente Simulationen durchzuführen, um die Grundlage dafür zu schaffen, die für LWR-Sicherheitsanalysen von der GRS entwickelten Rechenmethode auf innovative Reaktor-konzepte, insbesondere der Generation IV, übertragen zu können. ATHLET bietet hierbei insbesondere den Vorteil, das integrale Verhalten der Anlage bei Störfallanalysen abbilden zu können.

Eine weitere zentrale Aufgabe dieses Arbeitspakets betrifft die Frage, inwieweit die Berücksichtigung thermisch bedingter Strukturausdehnungseffekte auch seitens der Thermohydraulik für die Sicherheitsbewertung relevant sind. Bisher wurden diese Phänomene in der Neutronenphysik berücksichtigt und eingehend studiert, denn mit ihnen sind signifikante Reaktivitätsrückwirkungen verbunden. Für nähere Untersuchungen wurden Erweiterungen in ATHLET entwickelt, die temperaturbedingte Ausdehnungseffekte zusätzlich seitens der Thermohydraulik berücksichtigen, um deren Einfluss zu quantifizieren.

Unabhängig von der räumlichen Auflösung muss die Validierungsbasis von ATHLET für flüssigmetallgekühlte Systeme wie SFR/LFR (für verlässliche künftige Anwendungen, z. B. MYRRHA) erweitert sowie bisher fehlender spezifischer Modelle und Korrelationen für Fluide mit niedrigen Prandtl-Zahlen erweitert werden. Generell ist ein möglichst genaues Verständnis des Strömungsverhaltens in Pool und Unterkanälen mit wendelförmigen Abstandshaltern entscheidend, um die Aussagegenauigkeit von Thermohydraulik-Codes z. B. hinsichtlich der Hüllrohrintegrität als lokalem Sicherheitsparameter beurteilen zu können.

2.2.4 AP 4: Verfolgung internationaler Aktivitäten zu neuen Reaktorkonzepten

Neben den flüssigmetallgekühlten Systemen wurden hier zusätzlich relevante internationale Aktivitäten zu weiteren innovativen Reaktorkonzepten verfolgt. Dazu zählen weitere Generation IV-Konzepte – z. B. gasgekühlte Hochtemperaturreaktoren (V/HTR) mit den Perspektiven SMR (*Small Modular Reactor*) und nuklearer Kogeneration oder Salzschnmelzereaktorkonzepte. Es ist zu erwarten, dass neue Forschungsergebnisse Anpassungen und Erweiterungen der Neutronenkinetik- und Thermohydraulikcodes zur Sicherheitsbewertung erforderlich machen. Daher ist es notwendig, die internationale Entwicklung von Generation IV- und weiteren innovativen Reaktorkonzepten zu verfolgen und ggf. erforderlichen Handlungsbedarf für die Ertüchtigung der GRS-Rechenprogramme zu identifizieren.

2.2.5 AP 5: Mitwirkung an der Fast Reactor Knowledge Preservation (FRKP) Initiative der IAEA

Die GRS beteiligt sich an der FRKP-Initiative der IAEA in Zusammenarbeit mit dem KIT (Karlsruher Institut für Technologie) als stellvertretende Kontaktinstitution. Dabei sind Mitwirkungen in Arbeitsgruppen, bei der Erstellung von Dokumentationen und Publikationen und Beteiligungen in EU-Calls (Vorbereitung, Akquisition) zu erwarten. Die Hauptzielsetzungen der FRKP-Initiative sind es, einerseits dem drohenden Informations- und Kompetenzverlust zu schnellen Reaktorsystemen (FR) entgegenzutreten und andererseits existierendes Daten- und Informationsmaterial zu FR zusammenzutragen, zu sichten und verfügbar zu machen. Dies erfolgt über ein webbasiertes Portal.

3 Wissenschaftlicher und technischer Stand, an den angeknüpft wurde

3.1 Internationale Stand von Wissenschaft und Technik

Zur Sicherheitsbewertung innovativer, v. a. flüssigmetallgekühlter Reaktoren und Reaktorkonzepte werden international eine Reihe von Methoden und Codes entwickelt und eingesetzt, die die 3D-Neutronenphysik und -kinetik im Reaktorkern sowie die Fluidynamik und Wärmetransportprozesse im Reaktorkern und Kühlkreislauf simulieren. Im Folgenden wird eine knappe Übersicht über den Stand von Wissenschaft und Technik gegeben, wie er sich anhand von in Europa verfügbaren Simulationscodes manifestiert.

3.1.1 Reaktorphysik innovativer Reaktorsysteme

3.1.1.1 Deterministische Kernberechnung

Für die Simulation der 3D-Neutronenkinetik in innovativen Reaktorsystemen werden im In- und Ausland etablierte Rechencodes ertüchtigt und weiterentwickelt. Zu den deterministischen Codes zählen u. a. DYN3D, ERANOS /NIK 19/, PARCS, KANEXT /BEC 10/ und SIMMER-III/-VI /BUC 99/. In der GRS werden zwei Codes angewendet. DYN3D /ROH 16/, /NIK 19/ ist ein am Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR) entwickelter 3D-Neutronenkinetikcode zur Berechnung in LWR und flüssigmetallgekühlten Reaktoren mit quadratischen und hexagonalen Brennelementen. Neben einem integrierten Thermohydraulikmodul existieren Kopplungen von DYN3D mit den Systemcodes ATHLET und RELAP5 /LIA 18/ sowie mit CFD-Werkzeugen. Der Purdue Advanced Reactor Core Simulator (PARCS) ist ein nodaler Code, der die zeitabhängige Neutronendiffusionsgleichung in zwei oder mehreren Energiegruppen für cartesische, zylindrische und hexagonale Geometrien löst /DOW 02/. PARCS kann im Stand-Alone-Modus ausgeführt werden, und es existieren Kopplungen mit RELAP5, TRACE sowie ATHLET /PÉR 13/. Für hochauflösende gekoppelte Multiphysik-Simulationen ist ein am KIT angesiedelter Entwicklungstrend das gekoppelte Codesystem Serpent/SUBCHANFLOW /FER 20/, welches u. a. im Rahmen des EU-Projekts McSAFE entwickelt wurde /HOO 20/. Serpent/SUBCHANFLOW zielt auf die hochauflösende Gekoppelte Simulation von LWR der Generation II und III, wobei die Neutronenkinetik mit dem Monte-Carlo-Code Serpent /LEP 15/ und die Thermohydraulik mit dem Unterkanalcode SUBCHANFLOW /IMK 12/ simuliert wird. In den USA wird die MOOSE-Umgebung

(Multiphysics Object-Oriented Simulation Environment), die in den USA federführend am Idaho National Laboratory (INL) entwickelt /MAR 21/. Dabei handelt es sich um eine objektorientierte C++-Finite-Elemente-Umgebung für die Entwicklung miteinander gekoppelter Multiphysik-Simulationscodes.

3.1.1.2 Stochastische Kernberechnung

Monte-Carlo-Codes sind auch für Sicherheitsanalysen innovativer Reaktoren ein Standardwerkzeug, u. a. MCNP6 /PEL 13/ und Serpent /LEP 15/. Monte-Carlo-Codes führen stochastische Neutronentransport- und Kritikalitätsberechnungen in einer detailliert aufgelösten heterogenen dreidimensionalen Gesamtkerngeometrie durch, wobei nukleare Basisdaten verwendet werden, um die Wechselwirkungen zwischen Neutronen und den Materialien im Reaktorkern zu beschreiben. Die Geometriemodellierung ermöglicht einen flexiblen Aufbau der Geometrie, insbesondere für innovativen Reaktoren.

3.1.2 Thermohydraulik innovativer Reaktorsysteme

Analog zu den 3D-Neutronenkinetikcodes werden für die Simulation innovativer Reaktorsysteme im In- und Ausland etablierte Systemcodes wie ATHLET oder CATHARE2 bzw. CFD-Codes wie OpenFOAM ertüchtigt und weiterentwickelt.

3.1.2.1 System-Thermohydraulik

ATHLET (Analyse der Thermohydraulik von Leckagen und Transienten) aus dem Programmpaket AC² /WIE 19a/ wird von der GRS für die Analyse des gesamten Spektrums von Betriebstransienten, Auslegungsstörfällen und Unfällen ohne Kernzerstörung für nukleare Anlagen entwickelt und eingesetzt. Der Code enthält spezifische Modelle und Methoden für die Simulation von Leichtwasserreaktoren westlicher und russischer Bauart (WWER, RBMK), fortschrittlicher Reaktoren der Generationen III und III+ und innovativer Reaktoren der Generation IV sowie kleiner modularer Reaktoren (SMR).

CATHARE /EMO 11/ ist das Ergebnis von mehr als 30 Jahren gemeinsamer Entwicklungsarbeit von CEA, EdF, AREVA-NP und IRSN. CATHARE war ursprünglich für DWR-Systemen konzipiert und wurde auf andere Reaktortypen, insbesondere auf natriumgekühlte Schnellreaktoren (SFR), ausgeweitet.

3.1.2.2 3D-Thermofluiddynamik und Multiphysik-Methoden

Ein aktueller Ansatz für 3D-Thermofluiddynamik und Multiphysik-Simulationen ist GeN-Foam /FIO 15/. Es handelt sich um einen am PSI bzw. der EPFL entwickelten Open-FOAM-basierten Multiphysik-Solver für die Analyse von Kernreaktoren, die Diskretisierung und die parallele Lösung partieller Differentialgleichungen erfolgen hier auf unregelmäßigen Gittern mit Finite-Volumen-Verfahren. Strömungsdynamik und thermomechanische Solver werden an den Neutronendiffusionssublöser unter Verwendung von mit Serpent generierten Mehrgruppenwirkungsquerschnitte gekoppelt.

3.2 Arbeiten und Ergebnisse aus dem Vorgängervorhaben

Das vorliegende Eigenforschungsvorhaben knüpft an Arbeiten und Ergebnisse an, die im Vorgängervorhaben RS1547 (INNOSYS) erzielt wurden /SEU 19a/. Diese werden im Folgenden kurz zusammengefasst.

3.3 Reaktorphysik zur Sicherheitsbewertung schneller Systeme

Neutronenphysik der Void-Rückwirkung natriumgekühlter Systeme

Natriumgekühlte schnelle Systeme sind hochsensitiv gegenüber der neutronenphysikalischen Rückwirkung der Kühlmittelverdrängung (Voideffekt) aufgrund von Kühlmittelsieden, etwa infolge des Ausfalls der aktiven Kernkühlung (z. B. Unprotected Loss Of Flow, ULOF). Anhand des Modellsystems ASTRID wurde durch Vergleich deterministischer Kernberechnungen (PARCS /DOW 02/, FEM-Diff-3d¹) mit Monte-Carlo-Referenzrechnungen (Serpent /LEP 15/) für verschiedene Störfallszenarien-Szenarien mit Void-Bildung insgesamt gute Übereinstimmungen mit den Referenzergebnissen festgestellt werden, wobei für Voiding im oberen Plenum größere Abweichungen festzustellen sind.

Entwicklung und Erprobung von Kernmodellen mit stabweiser Auflösung

Zu Beginn dieses Vorhabens stand das gekoppelte Codesystem PARCS/ATHLET /PÉR 13/ für stab- bzw. unterkanalweise Modellierung eines einzelnen Brennelements eines natriumgekühlten Reaktors zur Verfügung. Die Ergebnisse stationärer gekoppelter

¹ Arbeitstitel des Codes zu Beginn dieses Vorhabens, jetzt: FENNECS.

Simulationen zeigten die erwarteten radialen Variationen von Parametern wie Leistungsdichte und Kühlmitteltemperatur. Die Beschränkung von PARCS auf regelmäßige Gitterstrukturen (hier: hexagonale Anordnungen) bringt jedoch Nachteile bei der Modellierung des Brennelementkastens und der mit Kühlmittel gefüllten Zwischenräume zwischen benachbarten Brennelementen mit sich. Im vorliegenden Vorhaben konnten diese Beschränkungen durch den Einsatz von FENNECS/ATHLET /SEU 21/ ausgeräumt werden.

Erstellung von Kernmodellen ausgewählter Systeme

Für den Kern von Superphénix wurde für PARCS im Rahmen der Beteiligung am EU-Projekt ESFR-SMART ein Modell entwickelt und als *In-kind-Contribution* Leistungsverteilung und Reaktivitätskoeffizienten berechnet, die in guter Übereinstimmung mit Messungen und Monte-Carlo-Referenzrechnungen stehen /HEN 19/. Ferner stand ein gekoppeltes PARCS/ATHLET-Modell für ASTRID zur Verfügung, welches Reaktorkern, Pool und Primärkreis inkl. Zwischenwärmetauscher umfasst, und jedes Brennelement durch einen eigenen thermohydraulischen Kanal darstellt /BOU 19/, /SEU 19a/. Mit Hilfe dieses Modells wurden transiente Testrechnungen durchgeführt.

3.4 Entwicklung thermostruktureller Rückwirkungsmodelle

Entwicklung einer Methodik zur Darstellung der Wirkungsquerschnitte schneller Systeme inklusive Strukturrückwirkungen: Wirkungsquerschnitte von Reaktoren mit schnellem Neutronenspektrum („schnelle Reaktorsysteme“) müssen neben Doppler- und Kühlmitteltemperatur auch nach Temperaturen von Strukturmaterialien parametrisiert werden, die deren thermische Ausdehnungseffekte maßgeblich steuern. Dazu steht eine möglichst allgemein gültige Methodik bereit, die die Wirkungsquerschnitte zusätzlich nach Hüllrohrtemperatur und Temperatur der Kerngitterplatte parametrisieren.

Erweiterung der Modelle zu thermo-strukturellen Ausdehnungseffekten: Das im Vorhaben RS1515 /SEU 16a/ beschriebene und in PARCS bereits erfolgreich implementierte radiale Kernausdehnungsmodell stand zu Beginn des vorliegenden Vorhabens dahingehend zur Verfügung, dass es für lokal variierende Kern-Gitterweiten erweitert werden konnte. Das ebenfalls in Rahmen von RS1515 entwickelte und in PARCS implementierte Modell zur axialen Brennstab-/Hüllrohr-Ausdehnung wurde im Vorgängervorhaben (RS1547) modernisiert. Die Temperaturen, die die Ausdehnungseffekte treiben, wurden

aus den dazugehörigen ATHLET-Wärmestrukturen entnommen (z. B. mittels GCSM). Überprüfungen der Modellerweiterungen wurden anhand des Reaktorkonzepts ASTRID durchgeführt.

3.5 Thermohydraulik zur Sicherheitsbewertung schneller Systeme

Die Arbeiten zur Weiterentwicklung der thermohydraulischen Rechenmethoden betreffen sowohl AC²/ATHLET und Computational Fluid Dynamics bzw. CFD (OpenFOAM) sowie die Kopplung von ATHLET mit CFD.

Sieden von Natrium: Zur Simulation des Siedens von Natrium in Kühlkreisläufen wurden in ATHLET druckabhängige Sättigungswerte für Natrium implementiert sowie Stoffwerte für Natriumdampf. Die Modellierung des unterkühltes bzw. gesättigtes Blasensiedens basiert in ATHLET auf der (modifizierten) Chen-Korrelation /AUS 21/. Zur Überprüfung der ATHLET-Modelle zur Beschreibung der Verdampfung von Natrium wurden Experimente (Testreihe KNS-3) der Versuchsanlage Kompakter Natriumsiede-Kreislauf (KNS) in ATHLET modelliert und erfolgreich nachgerechnet.

Erweiterungen von ATHLET zur Simulation von Salzschnmelzen in Kühlkreisläufen: Um ATHLET für sicherheitsrelevante Fragestellungen von Salzschnmelzesystemen einsetzen zu können, wurde das Programm erweitert. Es kann die Salzschnmelzen FLiNaK (LiF-NaF-KF) und FLiBe (LiF-BeF₂) als nicht-siedende Arbeitsmedien simulieren. Dazu wurden für die beiden Salzschnmelzen Stoffwerte implementiert. Die einphasigen Wärmeübergangmodelle sind die gleichen wie für Wasser /AUS 21/. Die Ablauffähigkeit der Programmerweiterungen und die Plausibilität der Ergebnisse wurden anhand von Testrechnungen überprüft.

Schnittstelle für Wärmestrukturparameter: Für die weiterentwickelten 3D-Neutronenkinetikmodelle in PARCS zur Simulation thermisch bedingter Strukturausdehnungseffekte werden die benötigten Temperaturverteilungen aus ATHLET ausgelesen und nach PARCS übertragen. Dazu wurden Erweiterungen an der Kopplungsschnittstelle zwischen ATHLET und PARCS vorgenommen, die jetzt die Übertragung der Hüllrohrtemperaturverteilungen als auch die Temperatur der Kerngitterplatte (berechnet durch geeignete ATHLET-Wärmestruktur) ermöglichen.

Erstellung thermohydraulischer Modelle schneller Systeme: Für den Reaktor Phénix wurde ein ATHLET-Anlagenmodell entwickelt, das u.a. auch die thermohydraulischen Randbedingungen für gekoppelte ATHLET-OpenFOAM-Simulationen liefern kann. Mit diesem Modell wurde der sog. Dissymmetric-Test in Phénix erfolgreich nachgerechnet. Dabei wurde die Kopplungsmethode zwischen OpenFOAM und ATHLET weiterentwickelt /HER 14/, /HER 19/. Dabei wurde die Kopplung von mehr als zwei Schnittstellen für einphasige Fluide zwischen ATHLET und OpenFOAM erfolgreich verifiziert.

3.6 Fast Reactor Knowledge Preservation (FRKP) Portal

Im Rahmen des Vorgängervorhabens RS1547 beteiligte sich die GRS an der FRKP-Initiative u. a. mit Informationen über ihre laufenden Aktivitäten auf dem Gebiet der Weiterentwicklung von Methoden zur Sicherheitsbewertung von schnellen Reaktorsystemen. Insbesondere wurde akzeptiert, das FRKP-Portal weiterzuentwickeln, so dass es nicht nur dem Wissenserhalt dient. Dies trägt der Tatsache Rechnung, dass in jüngerer Zeit in den Fast-Reactor-Themenkomplex neue Bewegung gekommen ist, nicht zuletzt durch Bau oder Inbetriebnahme von Reaktoren mit schnellem Neutronenspektrum im Ausland, etwa die Vielzweck-Forschungseinrichtung MYRRHA (Multi-purpose hybrid Research Reactor for High-tech Applications) des SCK-CEN in Belgien /DEB 18/, /SCK 20/. Laut Information des BASE (Bundesamt für die Sicherheit der nuklearen Entsorgung)² laufen in Russland und China derzeit drei schnelle natriumgekühlte Reaktoren im kommerziellen Betrieb, weitere befinden sich dort sowie in Indien im Bau. Forschung und Entwicklung von Reaktorkonzepten der Technologielinie finden weltweit in einer Vielzahl von Ländern statt.

² <https://www.base.bund.de/DE/themen/kt/kta-deutschland/neuartige-reaktorkonzepte/sogenannte-neuartige-reaktorkonzepte.html>

4 AP 1: Entwicklung gekoppelter Pin-by-pin-Rechenmethoden schneller Systeme

Die Bewertung von Reaktivitätsstörfällen erfordert eine genaue Kenntnis der stabweisen (*pin-by-pin*) Leistungsverteilung, um verlässliche Aussagen zu Sicherheitsmargen, Brennstabintegrität und Kernkühlbarkeit treffen zu können. Aus der genauen Kenntnis der stab- bzw. unterkanalweisen Verteilungen von Brennstoff- und Hüllrohrtemperatur bzw. der Kühlmitteltemperaturverteilung lassen sich Informationen über sicherheitsrelevante lokale Größen wie die maximale lokale Stablängenleistung, die maximale Brennstoff- oder Hüllrohrtemperatur ableiten. Dies erfordert die Entwicklung und Erprobung hochaufgelöster (sog. *high fidelity*) gekoppelter Multiphysik-Simulationen in Stab- bzw. Unterkanal-Darstellung, um lokale neutronenphysikalische und thermohydraulische Phänomene möglichst realitätsgetreu zu modellieren und – auch in Verbindung mit Unsicherheitsanalysen – Aussagen zu Sicherheitsmargen gewinnen zu können. Für LWR besteht in der GRS in Form des gekoppelten Neutronen-transport-/Thermohydraulik-Unterkanal-Codesystems TORT-TD/CTF bereits langjähriges Know-how und Erfahrung /CHR 10/, /SEU 20a/, /PÉR 22/. Mit FENNECS/ATHLET wurde in diesem Eigenforschungsvorhaben die Grundlage für den Einsatz für innovative Reaktorkonzepte gelegt. Dies wird im Folgenden anhand des China Experimental Fast Reactors (CEFR) demonstriert.

Der China Experimental Fast Reactor (CEFR) wurde als Modellsystem zur Entwicklung gekoppelter Pin-by-pin-Rechenmethoden schneller Systeme ausgewählt. Ziel ist es, ein gekoppeltes FENNECS/ATHLET-Modell mit parameterisierten, stabzellhomogenisierten Wirkungsquerschnittsbibliotheken zu entwickeln und gekoppelte stationäre wie auch transiente Simulationen mit FENNECS/ATHLET durchzuführen. Dieses Ziel wurde in mehreren Teilschritten erreicht. Zuvor wird im folgenden Abschnitt die Spezifikation des CEFR-Kerns, wie sie über die Teilnahme der GRS am Coordinated Research Project der IAEA zu den Neutronic Start-Up Tests des CEFR³ erhalten wurde /IAE 18/, knapp skizziert.

³ H. Huo, Technical Specifications for Neutronics Benchmark of CEFR Start-up Tests, Presentation at 2nd RCM of the IAEA CRP I31032 on Neutronics Benchmark of CEFR Start-up Tests, October 2019, Beijing, China (2019)

4.1 Der China Experimental Fast Reactor (CEFR) – CRP der IAEA

Der China Experimental Fast Reactor (CEFR) ist ein natriumgekühlter schneller Reaktor vom Pool-Typ mit einer thermischen Leistung von 65 MW und $(\text{Pu,U})\text{O}_2$ als Brennstoff, wobei der Erstkern nur mit UO_2 -Brennstoff beladen war. Dieser Erstkern ist in Abb. 4.1 zusammen mit den axialen Schnittbildern der verschiedenen Brenn- und Steuerelementtypen dargestellt und besteht aus bis zu 79 Brennelementen (engl. Subassembly, SA), acht Kontroll-SAs, einem Neutronenquellen-SA, 394 Edelstahl-SAs (SS für engl. Stainless Steel) und 230 borhaltigen Abschirm-SAs. Die acht Steuer-SAs bestehen aus zwei Regelstäben (RE-1 und RE-2), drei Ausgleichsstäben (engl. Shim Rods, SH-1, SH-2, SH-3) und drei Sicherheits-Abschaltstäben (engl. Safety Rods, SA-1, SA-2, SA-3), siehe Abb. 4.1 rechts. Die drei Shim-Rods und die beiden Regelstäbe bilden zusammen das erste Abschaltssystem, während die anderen drei Sicherheitsstäbe das zweite Abschaltssystem darstellen. Die Ausgleichs- und Sicherheitsstäbe enthalten als Absorbermaterial zu 90 % angereichertes B_4C , während die Anreicherung von ^{10}B der Regelstäbe 20 % beträgt. Die 2 SS-SAs in der Brennstoffregion des Kerns, die verwendet werden, um die Überschussreaktivität des frischen Brennstoffs in der Erstkernbeladung zu kompensieren, werden in der Gleichgewichtskernkonfiguration durch zwei Brennstoff-SAs ersetzt. Außerhalb der Borabschirmungs-SAs befindet sich ein Lagerbereich für bis zu 56 abgebrannte Brennelemente. Bei der Erstbeladung gibt es jedoch keine abgebrannten Brennelemente, der Lagerbereich ist stattdessen mit 56 SS-SA beladen. Der Reaktorkern hat keine Vollkreisform; der fehlende Teil auf der rechten Seite wird für die Übertragung von SAs während des Beladungsvorgangs verwendet.

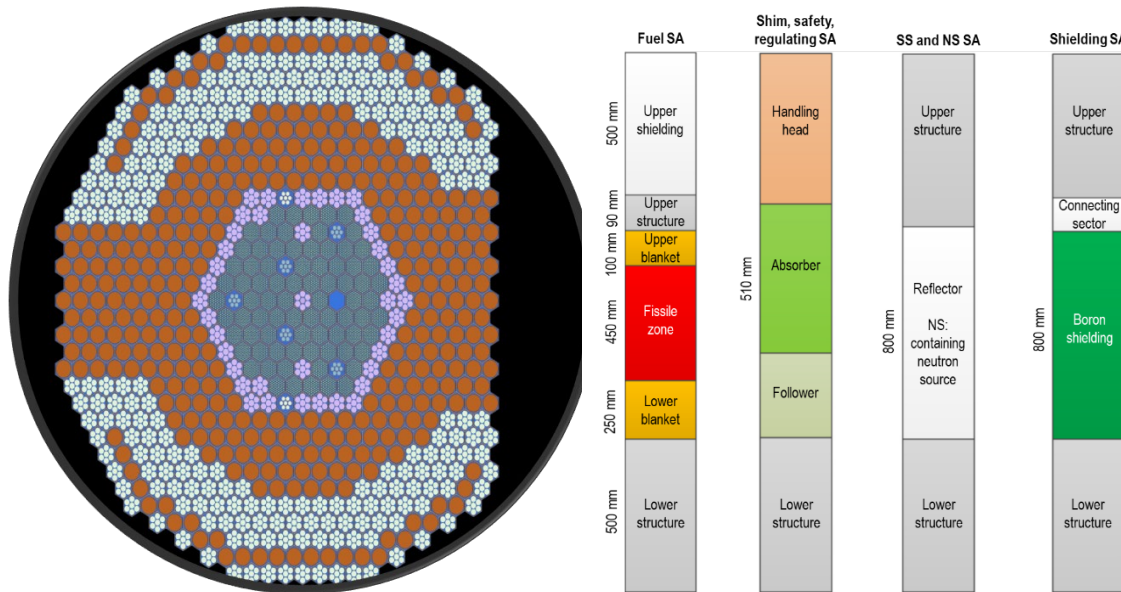


Abb. 4.1 Links: Kernanordnung des CEFR. Rechts: Axiale Abschnitte der verschiedenen Brenn- und Steuerelementtypen. Die Längenangaben gelten für 20 °C /IAE 18/

4.2 Generierung stabzellhomogenisierter Wirkungsquerschnittsdaten des CEFR-Brennelements

Die hochaufgelöste Modellierung mit dem 3D-Neutronenkinetikcode FENNECS erfordert die Generierung stabzellhomogenisierter Wirkungsquerschnittsdaten. Zu diesem Zweck wurde der Monte-Carlo-Code Serpent /LEP 15/ eingesetzt, welcher auch für die Erstellung von Referenz-Modellen eines CEFR-Brennelements und von Minikernen herangezogen wurde.

4.2.1 Modellierung des CEFR-Brennelements in Serpent

Im ersten Schritt wurde ein einzelnes Brennelement des CEFR in Serpent in voller axialer Darstellung mit periodischen Randbedingungen in radialer Richtung, d. h. in unendlicher Gitteranordnung, modelliert. In diesem Modell gibt es drei Typen von Stabzellen: 37 innere (mit hexagonalem Rand) Zellen, 6*3 = 18 Kantenzellen und sechs Eckzellen. Abb. 4.2 zeigt die drei Stabzelltypen. Alle Zellen, die zum jeweiligen Typ gehören, werden im Serpent-Modell zu einem Universum zusammengefasst. Dieses Vorgehen führt zu niedrigeren statistischen Unsicherheiten in den verschiedenen makroskopischen Wirkungsquerschnitten. Da für die Kanten- und Eckzellen aufgrund ihrer Form in Serpent

keine vordefinierten Zelltypen existieren, mussten die Zellgrenzen durch geeignete Ebenendefinitionen beschrieben werden. Durch Rotationen und Translationen der Ebenen und Universen werden die einzelnen Stabzellen an ihre jeweiligen Positionen im Brennelement verbracht. Dies führt zu einem umfangreichen und komplizierten Eingabedatensatz für Serpent. Die Modellerstellung konnte durch die spezielle Serpent-Erweiterung der GRS zur Definition von Variablen und Berechnung arithmetischer Ausdrücke erheblich übersichtlicher und fehlerärmer durchgeführt werden. Die Verwendung von Variablen und arithmetischen Ausdrücken erlaubt auch eine automatische Berechnung der tatsächlichen Geometrie in Folge thermischer Ausdehnung von Brennstoff und Strukturmaterialien in Abhängigkeit von deren Temperaturen, die im Eingabedatensatz angegeben werden können.

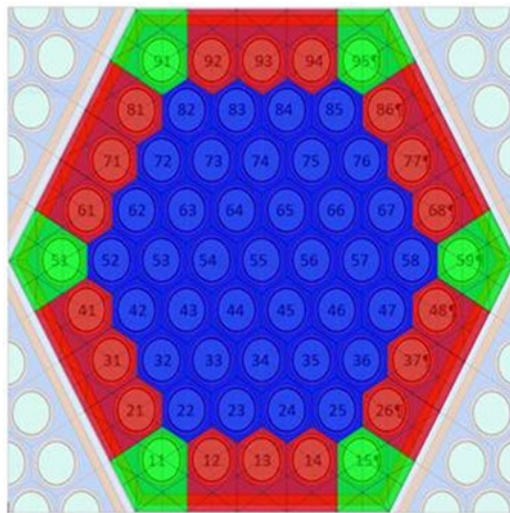


Abb. 4.2 CEFR-Brennelement in Serpent mit Kennzeichnung der drei Stabzelltypen. Rot: Kantenzellen, grün: Eckzellen, blau: innenliegende Zellen

4.2.2 Berechnung stabzellhomogenisierter parametrisierter Wirkungsquerschnittsbibliotheken

Mit dem im vorigen Abschnitt beschriebenen hochaufgelösten Serpent-Modell des CEFR-Brennelements wurden stabzellhomogenisierte Wirkungsquerschnittsbibliotheken in zehn Energiegruppen generiert, wobei bezüglich der Gruppenstruktur auf umfangreiche Erfahrungen zurückgegriffen wurde /BOU 21/. Die Wirkungsquerschnitte wurden zunächst nach Brennstofftemperatur (sechs Stützstellen) und Kühlmitteldichte innerhalb des Brennelementkastens (drei Stützstellen) parametrisiert. Um das für die Simulation natriumgekühlter Reaktorkonzepte wichtige Kernausdehnungsmodell in FENNECS anwenden zu können, wurden im zweiten Schritt die Hüllrohrtemperatur und die

Stabgitterweite als weitere Parameter in die Wirkungsquerschnittsbibliotheken aufgenommen. Tab. 4.1 zeigt die Parameter und ihre Stützstellen.

Tab. 4.1 Parameter und ihre Stützstellen der stabzellhomogenisierten Wirkungsquerschnittsbibliothek

Stützstellenindex	Brennstofftemperatur (K)	Kühlmitteldichte (g/cm ³)	Hüllrohrtemperatur (K)	Stabgitterweite (cm)
1	518	0,729	518	6,1247
2	900	0,856	900	6,1666
3	1200	0,927	1200	6,1996
4	1500	–	–	–
5	1800	–	–	–
6	2100	–	–	–

4.3 FENNECS-Modell des CEFR-Brennelements in Pin-by-Pin-Auflösung

Im zweiten Schritt wurde für den GRS-Neutronenkinetikcode FENNECS, welcher im Vorhaben RS1576 weiterentwickelt wurde /SEU 21/, /MUZ 23/, ein deterministisches Simulationsmodell des CEFR-Brennelements mit stabzellweiser Auflösung entwickelt. Der eigentlich für komplexere, unregelmäßige Geometrien vorgesehene Code FENNECS eignet sich für die Darstellung hexagonaler Stabanordnungen in einem hexagonalen Brennelementkasten wesentlich besser als klassische Neutronenkinetikcodes wie PARCS oder DYN3D /ROH 16/ mit ihren auf regelmäßige Gitteranordnungen beschränkten Geometrieoptionen, da die geometrischen Verhältnisse – u. a. die hexagonale Begrenzung des Brennelements – exakt, also ohne Näherung, abgebildet werden können. Abb. 4.3 zeigt Diskretisierung und Materialverteilung des FENNECS-Modells.

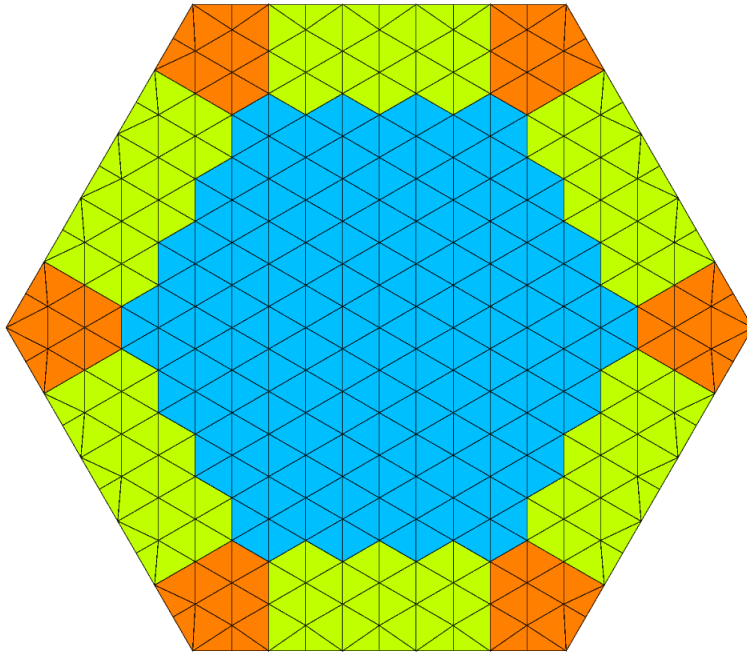


Abb. 4.3 Modell eines CEFR-Brennelements in FENNECS. Verschiedene Wirkungsquerschnittsbibliotheken sind in verschiedenen Farben dargestellt

4.3.1 Stabzell aufgelöste Stand-alone-Simulation des CEFR-Brennelements

Mit diesem FENNECS-Modell wurden unter Verwendung der mit Serpent generierten stabzellhomogenisierten Wirkungsquerschnittsbibliotheken zunächst stationäre Stand-alone-Simulationen durchgeführt. Anhand des Multiplikationsfaktors konnte sehr gute Übereinstimmung mit Serpent erzielt werden.

4.4 CEFR-Minikernmodelle in Pin-by-Pin-Auflösung

4.4.1 Minikernmodell mit sieben Brennelementen

Nach erfolgreicher Modellierung eines einzelnen CEFR-Brennelements und durchgeführten gekoppelten stationären und transienten Simulationen wurde durch Hinzufügung eines Rings von sechs weiteren Brennelementen das Einzelbrennelementmodell zu einem Minikernmodell aus sieben Brennelementen erweitert. Bei einem solchen Modell ist es bereits sinnvoll, radial Vakuum-Randbedingungen anzusetzen, um hierdurch radiale Neutronenflussgradienten und in der Folge ebensolche Gradienten der Leistungsdichte und der thermohydraulischen Verteilungen, z. B. der Kühlmitteldichte, zu erhalten. Abb. 4.4 zeigt das Minikernmodell in FENNECS; die Wirkungsquerschnittsbibliotheken

sind darin in verschiedenen Farben dargestellt. Das Modell besteht 30107 Knoten und 53760 finiten Elementen; axial ist es in 16 Zonen diskretisiert. Analog zum FENNECS-Modell wurde auch das ATHLET-Unterkanalmodell so erweitert, dass es die thermohydraulischen Prozesse in diesem Minikern simuliert.

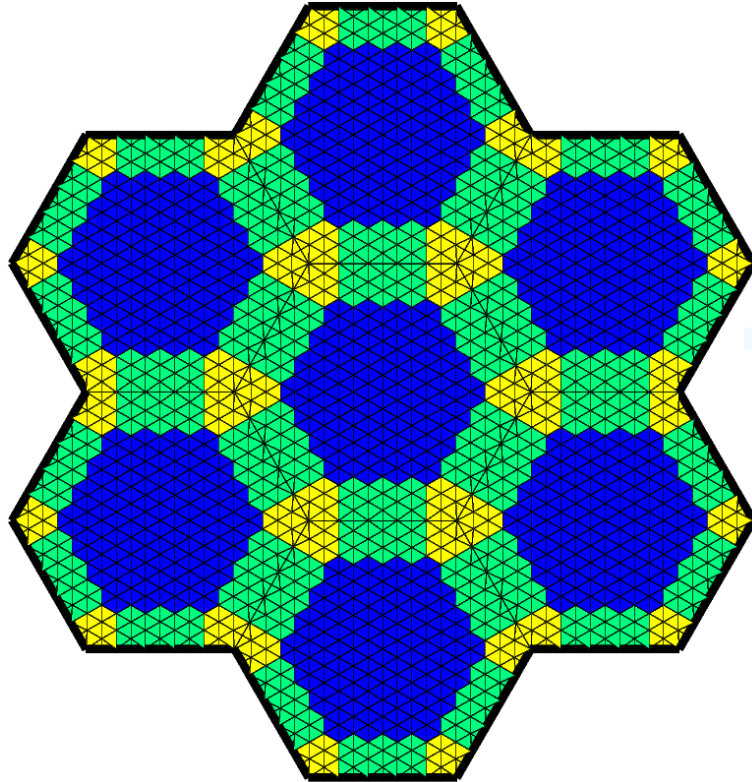


Abb. 4.4 FENNECS-Modell eines CEFR-Minikerns mit sieben Brennelementen

4.4.2 Minikernmodell mit 19 Brennelementen

Durch Hinzufügung eines weiteren Rings von zwölf Brennelementen entsteht ein Minikernmodell mit 19 Brennelementen. Ein radialer Schnitt durch das FENNECS-Modell, das die Diskretisierung und Materialverteilung zeigt, ist in Abb. 4.5 wiedergegeben. Auch dieses hat eine axiale Diskretisierung in 16 Zonen, die Anzahl der Knoten und finiten Elemente beträgt jetzt jedoch 80087 bzw. 145920.

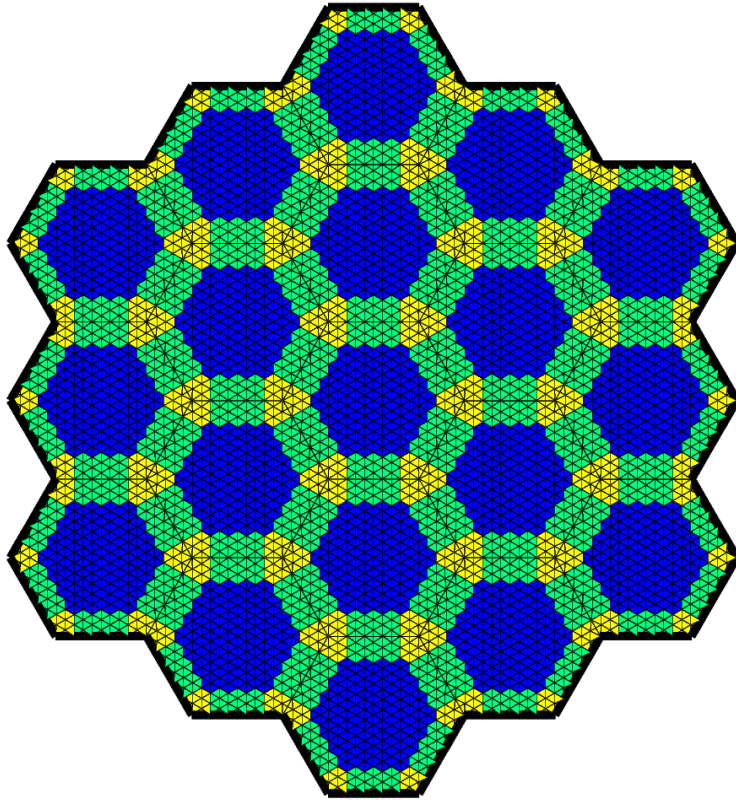


Abb. 4.5 FENNECS-Modell eines CEFR-Minikerns mit 19 Brennelementen

4.5 Überprüfung der stabaufgelösten FENNECS-Simulationen durch Vergleich mit Monte-Carlo-Referenzrechnungen

Zusätzlich zur Generierung stabzellhomogenisierter Wirkungsquerschnittsbibliotheken wurde der Monte-Carlo-Code Serpent zur Bestimmung stabaufgelöster Leistungsverteilungen eingesetzt, um hiermit die FENNECS-Simulationen zu überprüfen. Dazu wurde die Serpent-Modelle eines einzelnen Brennelements und des Minikerns mit sieben Brennelementen so erweitert, dass Stableistungsverteilungen berechnet werden. Hiermit wurden dann Vergleiche mit FENNECS durchgeführt, wobei neben der Diffusionsnäherung auch die im Eigenforschungsvorhaben RS1576 /SEU 22a/, /MUZ 23/ entwickelte SP_3 -Transportnäherung (Simplified P_3 method, vereinfachte P_3 -Methode, /BRA 00/) eingesetzt wurde. Bei der SP_3 -Methode wurde außerdem unterschieden, ob die Transport-Wirkungsquerschnitte jeweils unverändert der Serpent-Ausgabe entnommen oder (im Folgenden als SP3T bezeichnet) oder aus dem totalen $\Sigma_{t,g}(x)$ und dem Streu-Wirkungsquerschnitt der ersten Legendre-Entwicklungsordnung $\Sigma_{s,1,gg}(x)$ gemäß

$$D_{0,g}(x) = \frac{1}{3[\Sigma_{t,g}(x) - \Sigma_{s,1,gg}(x)]} \quad (4.1)$$

berechnet werden (im Folgenden als SP3F bezeichnet). In allen FENNECS-Rechnungen beträgt die axiale Maschengröße einheitlich 5,0 cm.

Die Serpent-Simulationen wurden mit 700 Zyklen zu je 5 Millionen Neutronenschicksalen, von denen die ersten 200 verworfen wurden, durchgeführt. Die Rechnungen erfolgten zudem unter der Annahme folgender verschiedener Randbedingungen:

- allseits Vakuum-Randbedingung,
- axial reflektierende und radial Vakuum-Randbedingung,
- allseits reflektierende Randbedingung.

In der angegebenen Reihenfolge bedeutet dies schrittweise abnehmende Neutronenleckage. Dies hat zur Folge, dass für allseits Vakuum-Randbedingung die radiale Leistungsverteilung wesentlich stärker profiliert ist (siehe Abb. 4.6) als im Fall allseits reflektierender Randbedingung (siehe Abb. 4.7). In diesen beiden Abbildungen sind jeweils auch die räumlichen Verteilungen der statistischen Unsicherheiten der stabweisen Leistungsverteilungen dargestellt. Wie zu erwarten, sind die Unsicherheiten im Fall allseits reflektierender Randbedingungen invers zur Leistungsverteilung profiliert, d. h. niedrige Leistungswerte (am Kernrand) sind mit höheren, hohe Leistungswerte (in der Kernmitte) mit niedrigeren Unsicherheiten behaftet. Im Vergleich dazu sind bei allseits Vakuum-Randbedingungen die entsprechenden Verteilungen weitgehend flach.

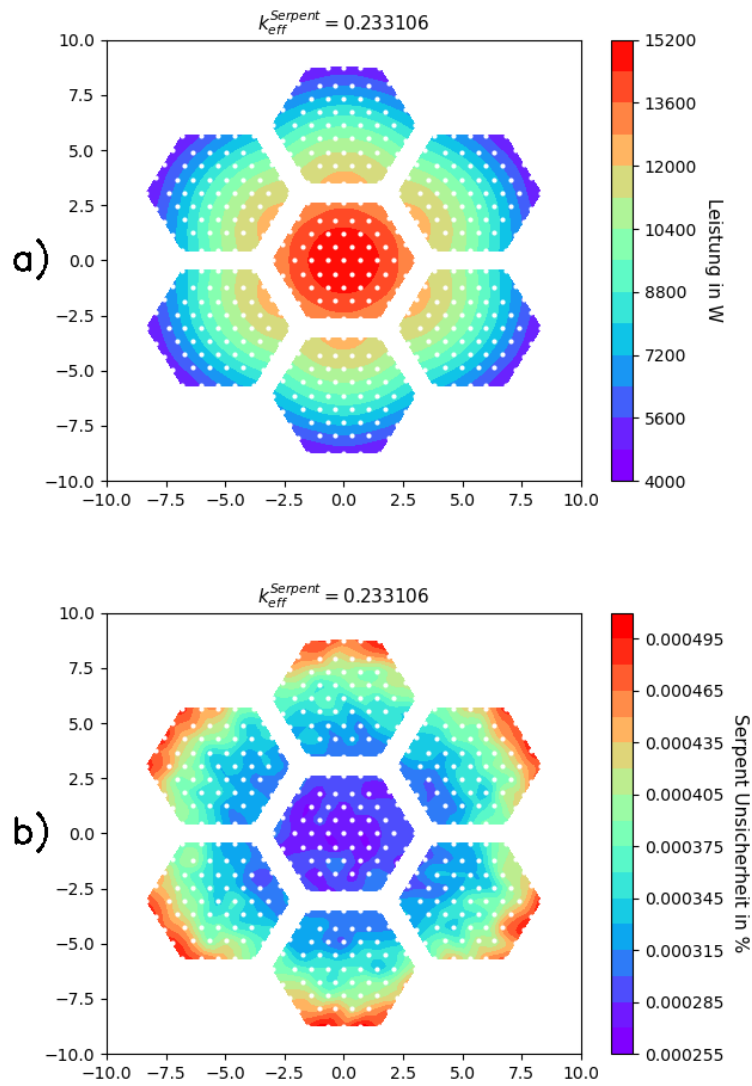


Abb. 4.6 Von Serpent berechnete radiale stabweise Leistungsverteilung (a) und zugehörige Verteilung der statistischen Unsicherheiten (b) für allseits Vakuum-Randbedingungen

Die weißen Punkte geben die Schwerpunkte der einzelnen Stabzellen an.

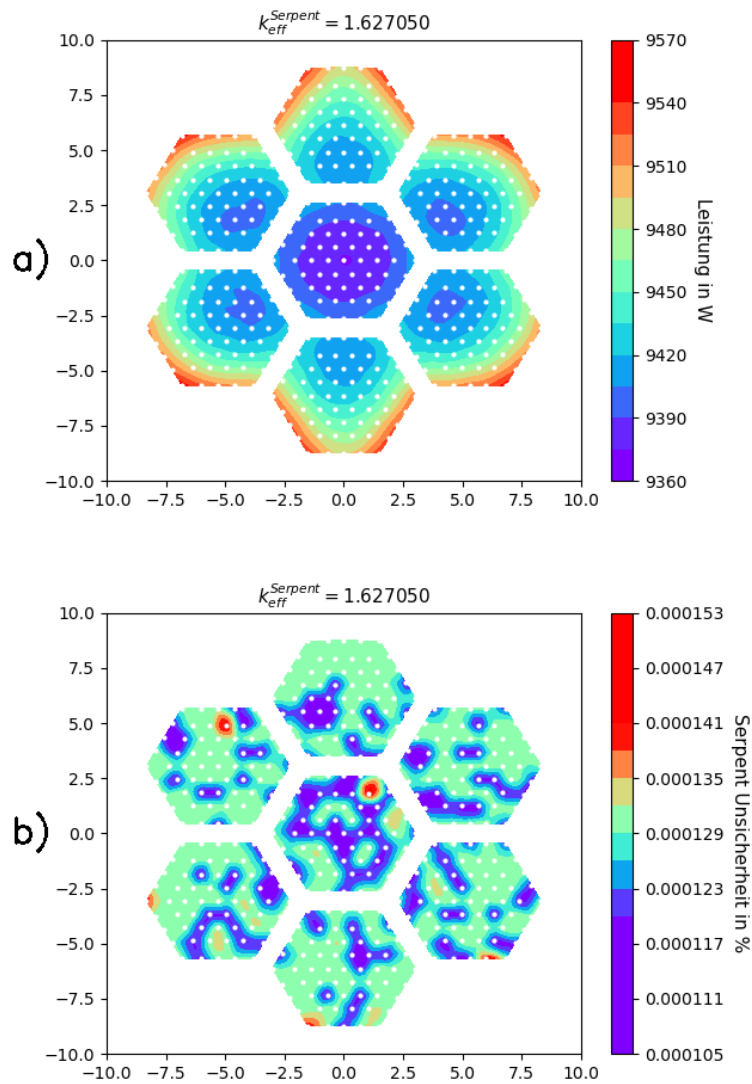


Abb. 4.7 Wie Abb. 4.6, jedoch für allseits reflektierende Randbedingungen

Die relativen Abweichungen der von FENNECS berechneten Stableistungsverteilungen bezogen auf die jeweiligen Serpent-Referenzverteilungen wurden wie folgt berechnet:

$$f = \frac{x_{FENNECS} - x_{Serpent}}{x_{Serpent}} \times 100\% \quad (4.2)$$

Darin sind x die entsprechenden lokalen normierten Leistungswerte. Diese Vergleiche werden im Folgenden zusammen mit den jeweiligen Informationen über die effektiven Multiplikationsfaktoren und mittleren quadratischen Abweichungen (RMS) der Stableistungsverteilungen dargestellt.

4.5.1 Allseits Vakuum-Randbedingungen

Abb. 4.8 zeigt die relativen Abweichungen zwischen FENNECS und der Serpent-Referenz für allseits Vakuum-Randbedingungen. Dabei wird unterschieden zwischen (a) der Diffusionsnäherung und der SP₃-Methode von FENNECS, wobei bei letzterer die eingangs erläuterten Fälle SP3F (b) und SP3T (c) gesondert betrachtet werden.

Insgesamt sind zufriedenstellende Übereinstimmungen zwischen FENNECS- und Serpent-Rechnungen festzustellen. Die mittlere quadratische Abweichung beträgt 6.2 % im Fall der Diffusionsnäherung, siehe Abb. 4.8 (a). Mit der SP₃-Methode gelingt eine deutliche Reduzierung dieser Abweichung auf ca. 1,6 %, wie aus Abb. 4.8 (b) und Abb. 4.8 (c) hervorgeht. In diesem Zusammenhang ist es wichtig darauf hinzuweisen, dass die FENNECS- und Serpent-Modelle nicht exakt vergleichbar sind. Während in FENNECS die radialen Randbedingungen tatsächlich am Kernrand des Minikernmodells angreifen, ist dies bei Serpent nicht der Fall. Stattdessen sind die Serpent-Modelle in einem umschreibenden regelmäßigen Sechseck eingefasst, an dessen Rändern die Randbedingungen gelten. Minikernränder, die nicht mit dem Rand dieses Sechsecks identisch sind, liegen im Serpent-Modell außerhalb des eigentlichen Problemgebiets. Am Ende dieses Abschnitts wird darauf noch einmal eingegangen.

4.5.2 Axial Vakuum- und radial reflektierende Randbedingungen

Ein ähnliches Bild ergibt sich für den Fall axial reflektierender und radialen Vakuum-Randbedingungen. Wie aus Abb. 4.9 (a) hervorgeht, weist die nach der Diffusionsnäherung berechnete Stableistungsverteilung gegenüber der Serpent-Referenz nur geringfügig niedrigere mittlere quadratische Abweichungen auf. Auch hier liefert die SP₃-Methode deutlich reduzierte Fehler, wenngleich diese mit jenen für allseits Vakuum-Randbedingungen praktisch gleich sind.

4.5.3 Allseits reflektierende Randbedingungen

Im dritten und letzten Fall, dem Minikernmodell mit allseits reflektierenden Randbedingungen, sind die Abweichungen, wie Abb. 4.10 zeigt, gegenüber der Serpent-Referenz mit etwa 0,4 % für die mittlere quadratische Abweichung – unabhängig davon, ob die Diffusionsnäherung oder die SP₃-Methode eingesetzt wird – deutlich niedriger als für die ersten beiden Fälle. Dies liegt hauptsächlich daran, dass die Leistungsverteilung in diesem Fall radial nur sehr wenig profiliert ist (siehe Abb. 4.7) – im Gegensatz zu den ersten

beiden Fällen mit Vakuum-Randbedingungen in radialer Richtung (siehe Abb. 4.6). In diesen zeigt sich der Gewinn der rechenaufwendigeren SP₃-Methode dadurch, dass sie erwartungsgemäß wesentlich bessere Ergebnisse für radial stark profilierte Leistungsverteilungen liefert als es die Diffusionsnäherung vermag.

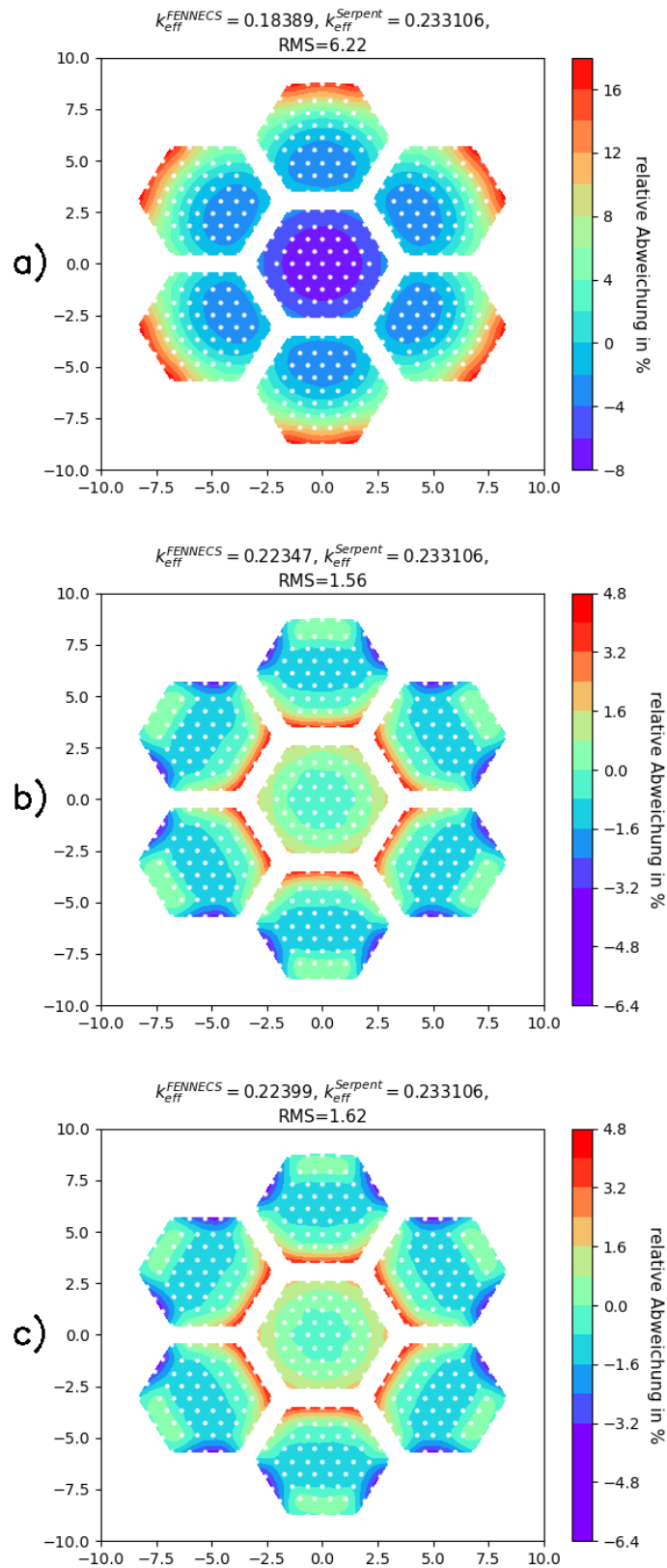


Abb. 4.8 Relative Abweichung der Stabileistungsverteilung des Minikernmodelle bei allseits Vakuum-Randbedingungen: a) Diffusionsnäherung, b) SP₃-Methode, Fall SP3F⁴, c) SP₃-Methode, Fall SP3T⁴

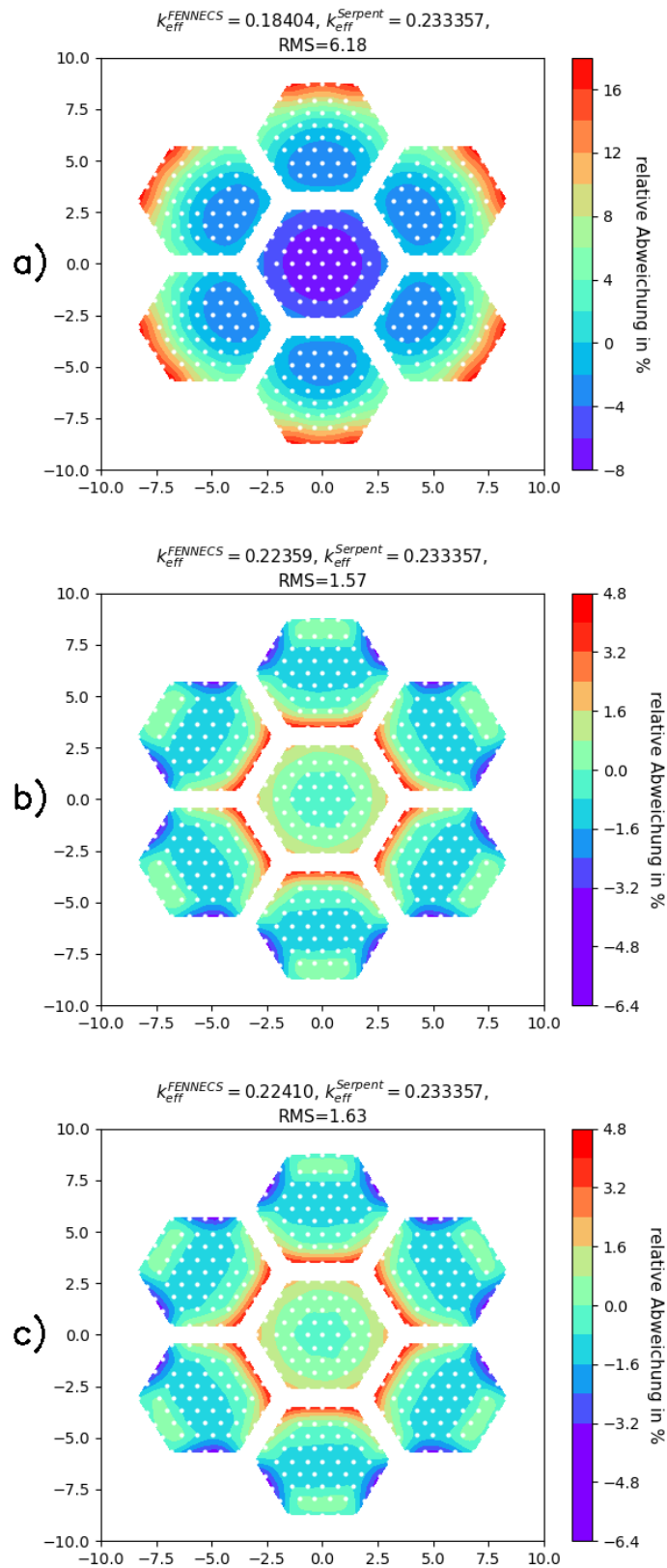


Abb. 4.9 Wie Abb. 4.8, jedoch für axial reflektierende und radial Vakuum-Randbedingung: a) Diffusionsnäherung, b) SP₃-Methode, Fall SP3F⁴, c) SP₃-Methode, Fall SP3T⁴

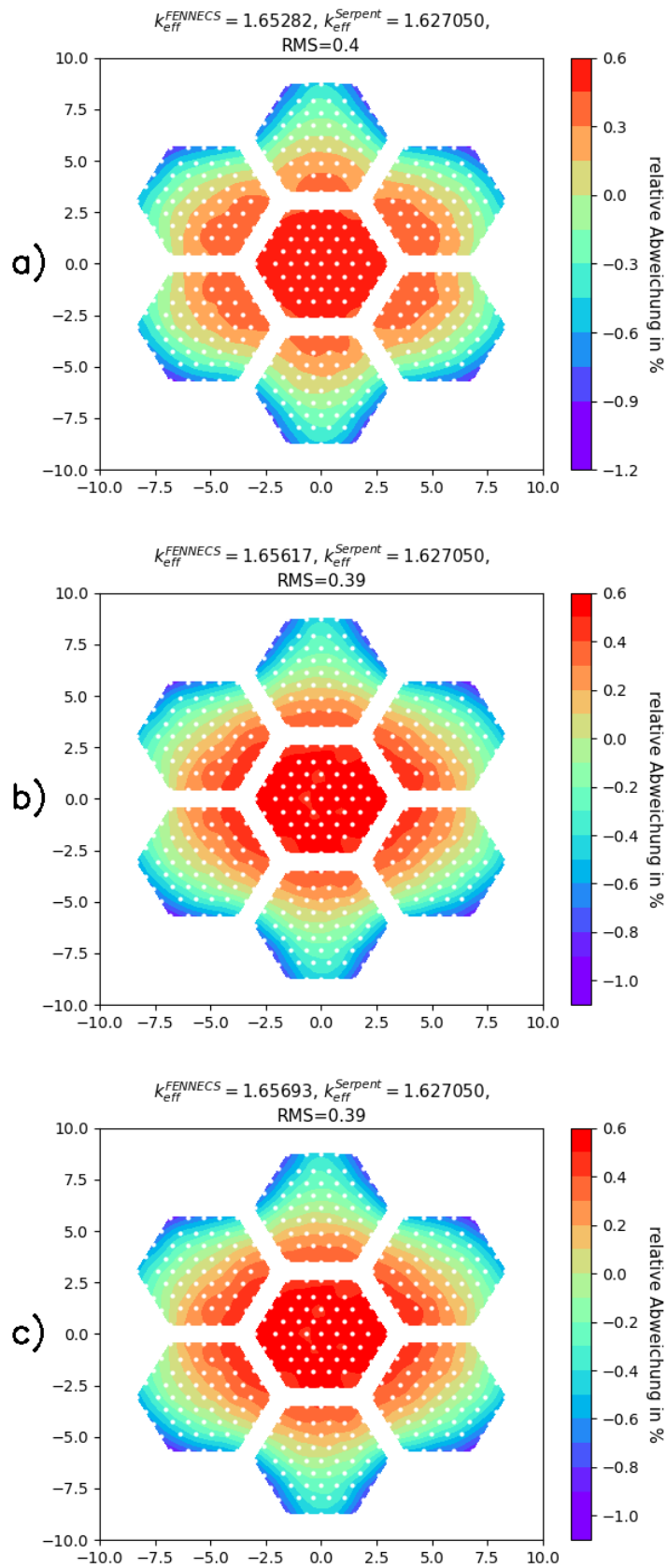


Abb. 4.10 Wie Abb. 3.6, jedoch für allseits reflektierende Randbedingungen: a) Diffusionsnäherung, b) SP₃-Methode, Fall SP3F3, c) SP₃-Methode, Fall SP3T3

Abschließend wird im Folgenden nochmals auf das oben bereits erwähnte Problem eingegangen, dass in den Serpent-Minikernsimulationen die Randbedingungen nicht überall an der Stelle angreifen, an der sie im FENNECS-Modell wirken. Dazu wurde ein einzelnes Brennelement in radial unendlicher Gitteranordnung betrachtet, denn damit können in Serpent die radiale Randbedingung genauso wie in FENNECS implementiert werden.

Wie aus Tab. 4.2 hervorgeht, sind die Reaktivitätsabweichungen zwischen FENNECS und Serpent relativ gering, wenn die Diffusionsnäherung verwendet wird. Auch hier zeigt sich, dass die SP₃-Methode eine weitere, deutliche Verbesserung bringt.

Tab. 4.2 Abweichung von der Serpent-Referenzreaktivität ($k_{eff}^{exact} = 1.65639$) für den Fall der allseits reflektierender Randbedingungen für Diffusionsnäherung und SP₃-Methode von FENNECS

Diskretisierung (cm)	Diffusionsnäherung	SP3T	SP3F
	$\Delta\rho$ (pcm)	$\Delta\rho$ (pcm)	$\Delta\rho$ (pcm)
0.7	-146	4	-25
1	-145	4	-24
2	-144	7	-22
3	-141	9	-19
5	-130	20	-8

Zusammenfassend ist festzustellen, dass FENNECS die Voraussetzungen für hochauflösende Pin-by-Pin-Simulationen für kleine Kerne natriumgekühlter Brennelemente mitbringt. Der nachfolgende Abschnitt zeigt Ergebnisse erster gekoppelter stationärer und transienter Simulationen eines einzelnen CEFR-Brennelements in unterkanalartiger Auflösung und von Minikernen unterschiedlicher Größe.

4.6 Gekoppelte stab-/unterkanal aufgelöste Simulationen mit FENNECS/ATHLET

4.6.1 Einzelnes Brennelement

Mit FENNECS/ATHLET wurden gekoppelte Simulationen unter Verwendung des in AP 3 entwickelten ATHLET-Modells mit unterkanalartiger Darstellung durchgeführt. FENNECS/ATHLET konvergiert in wenigen (in diesem Fall nach vier) Iterationen zwischen FENNECS und ATHLET zum gekoppelten neutronenphysikalisch-thermohydraulischen stationären Zustand, der zugleich den Ausgangszustand der anschließend berechneten Transiente darstellt. Die Transiente wird durch vorübergehende Absenkung der Kühlmitteltemperatur am Brennelement-Eintritt von 360 °C um 200 °C auf 160 °C ausgelöst. Die Temperaturänderungen erfolgen jeweils linear innerhalb von 5 Sekunden. Abb. 4.11 zeigt die Temperaturrampen.

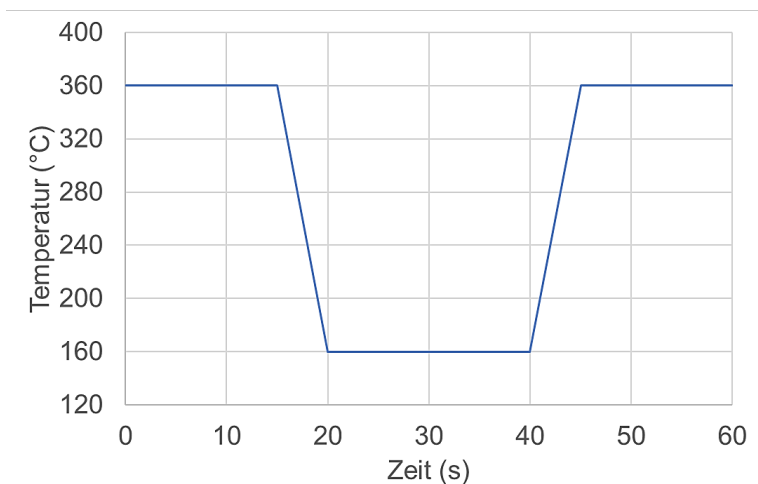


Abb. 4.11 Temperaturrampen als ATHLET-Randbedingung

Die mit FENNECS/ATHLET berechneten Zeitverläufe der Brennelementleistung zusammen mit jenen der mittleren und maximalen Brennstofftemperaturen sowie der mittleren Hüllrohrtemperatur sind in Abb. 4.12 dargestellt. Die Absenkung der Eintrittstemperatur spiegelt sich in einem ähnlichen Verlauf der Hüllrohrtemperatur wider. Die Kühlmitteltemperaturabsenkung bewirkt im unteren Bereich der Brennstäbe niedrigere Brennstofftemperaturen und durch den damit einhergehenden positiven Doppler-Effekt eine positive Reaktivitätszufuhr und somit einen Leistungsanstieg. Verbliebe die Eintrittstemperatur auf dem niedrigeren Niveau, würde sich die Brennelementleistung asymptotisch auf einen höheren Wert einstellen. Die Wiederanhebung der Eintrittstemperatur auf

ihren Ursprungswert bewirkt jedoch einen Leistungsabfall mit anschließender Annäherung der Brennelementleistung an ihren Ausgangswert zu Beginn der Transiente.

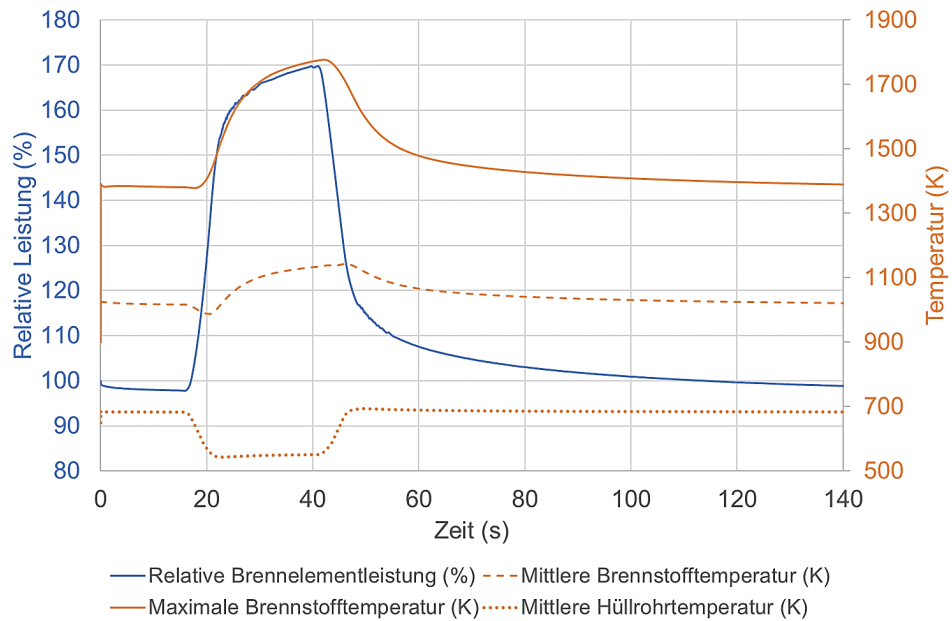


Abb. 4.12 Zeitverläufe von Leistung und ausgewählter Temperaturen während der Transiente in einem CEFR-Brennelement infolge Absenkung der Eintrittstemperatur mit FENNECS/ATHLET

4.6.2 Simulationen des Minikerns aus sieben Brennelementen

Das Minikernmodell aus sieben Brennelementen enthält insgesamt $7 \times 61 = 427$ Brennstäbe. Bei diesem Modell benötigt FENNECS/ATHLET acht Iterationen, den gekoppelten neutronenphysikalisch-thermohydraulischen stationären Zustand zu erreichen. Tab. 4.3 zeigt das Konvergenzverhalten, indem die Anzahl bzw. der Anteil der Brennstäbe mit konvergierter Leistungsverteilung mit fortschreitender Iteration wächst; zum Vergleich ist auch das Konvergenzverhalten für das einzelne Brennelement angegeben.

Tab. 4.3 Konvergenzverhalten von FENNECS/ATHLET für das Minikernmodell aus 7 Brennelementen und das einzelne Brennelement

Iteration	Minikern aus 7 Brennelementen		Einzelnes Brennelement	
	Anzahl der Brennstäbe mit konvergierter Leistungsverteilung	Anteil der Brennstäbe mit konvergierter Leistungsverteilung	Anzahl der Brennstäbe mit konvergierter Leistungsverteilung	Anteil der Brennstäbe mit konvergierter Leistungsverteilung
1	0	0 %	0	0 %
2	42	9,8 %	18	29,5 %
3	37	8,7 %	36	59,0 %
4	103	24,1 %	61	100 %
5	181	42,4 %	–	–
6	295	69,1 %	–	–
7	415	97,2 %	–	–
8	427	100 %	–	–

Abb. 4.13 zeigt die radiale Verteilung der Kühlmitteldichte am Brennelementaustritt im stationären Zustand, Abb. 4.14 die radiale Verteilung der Brennstofftemperatur am axialen Ort ihres Maximums.

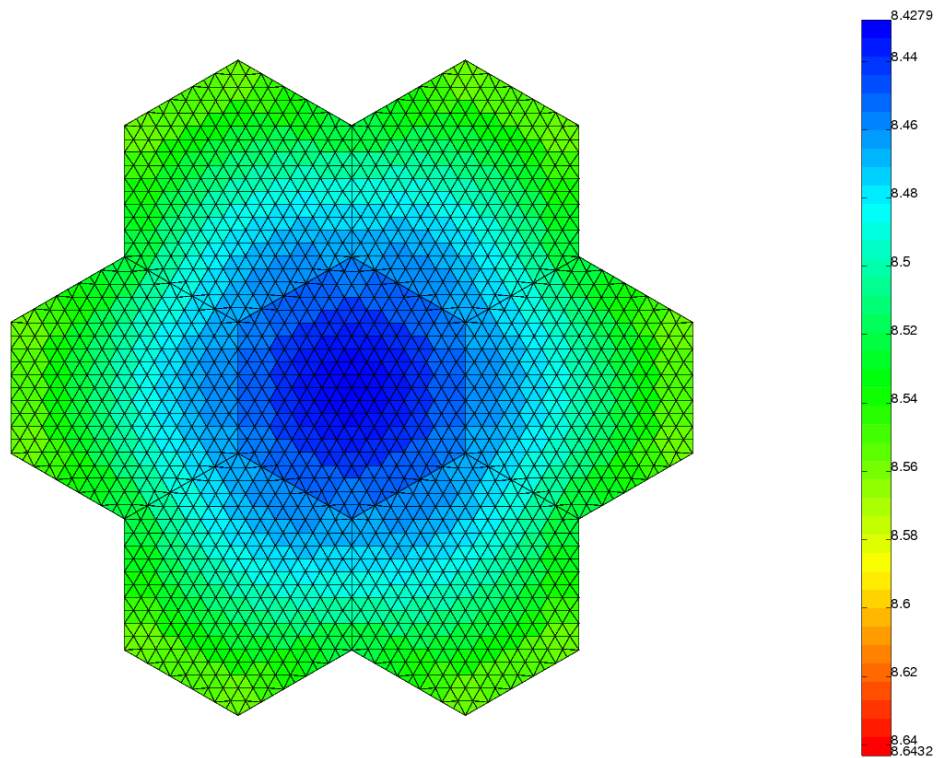


Abb. 4.13 Kühlmitteldichte am Brennelementaustritt im stationären Zustand

Die durch 10 zu dividieren Werte in der Farbskala sind Dichten in g/cm^3 .

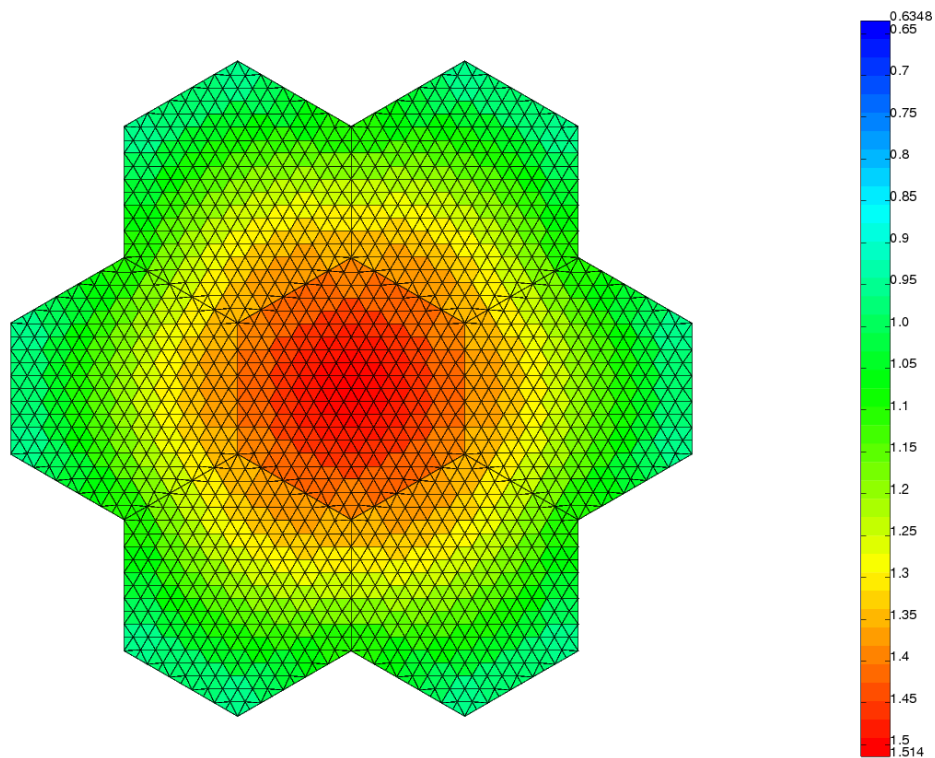


Abb. 4.14 Brennstofftemperatur am Brennelementaustritt am Ort ihres Maximums im stationären Zustand

Die mit 1000 zu multiplizierenden Werte in der Farbskala sind Temperaturen in K.

4.6.3 Simulationen des Minikerns aus 19 Brennelementen

Im letzten Schritt wurde eine transiente Simulation des Minikernmodells aus 19 Brennelementen, bestehend aus insgesamt 1159 Brennstäben, durchgeführt. Die Leistung im stationären Ausgangszustand, der von FENNECS/ATHLET nach neun Iterationen erreicht wird, beträgt 3 MW. Die Transiente wird durch vorübergehende Absenkung der Kühlmiteleintrittstemperatur um 100 °C von 360 °C auf 260 °C initiiert. Wie in den vorigen Simulationen erfolgen die Temperaturänderungen jeweils linear innerhalb von 5 Sekunden.

Die mit FENNECS/ATHLET berechneten Zeitverläufe der Minikernleistung zusammen mit jenen der mittleren und maximalen Brennstofftemperaturen sowie der mittleren Hüllrohrtemperatur sind in Abb. 4.15 dargestellt. Erwartungsgemäß zeigen sie qualitativ die bereits für das einzelne Brennelement berechneten Zeitverläufe.

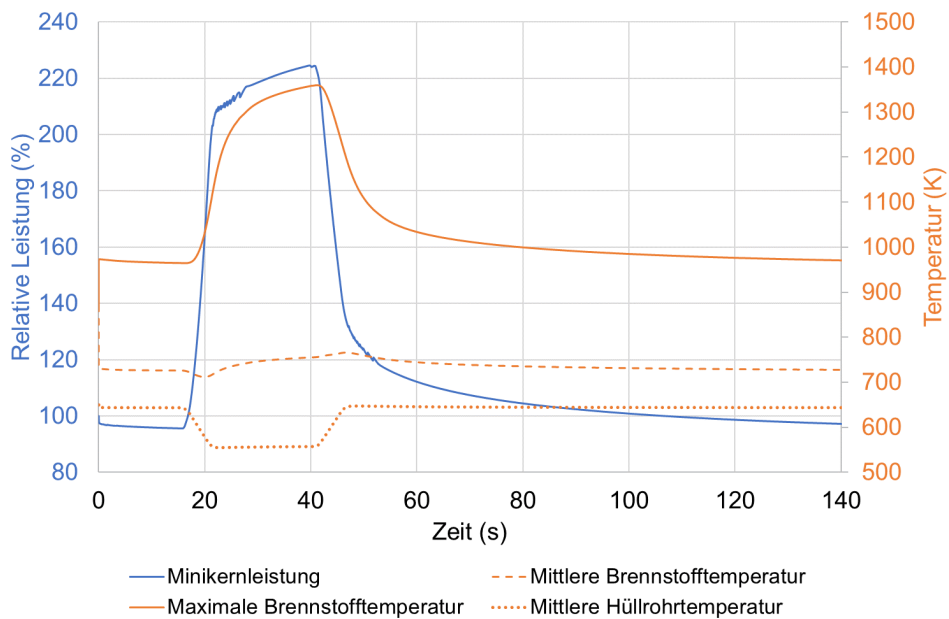


Abb. 4.15 Zeitverläufe von Leistung und ausgewählter Temperaturen während der Transiente im Minikern aus 19 CEFR-Brennelementen infolge Absenkung der Eintrittstemperatur mit FENNECS/ATHLET

4.7 Bereitstellung des CTF-Entwicklungszweigs für natriumgekühlte Systeme für künftige Simulationen mit FENNECS/CTF

Um die Beschränkungen von ATHLET bei der Unterkanalmodellierung zu umgehen, bietet sich ein Einsatz des Thermohydraulik-Unterkanal-Codes CTF /SAL 19/an. CTF ist die von der North Carolina State University in den USA weiterentwickelte Version des Unterkanalcodes COBRA-TF /SAL 15/. CTF ist für die thermohydraulische Simulation von LWR ausgelegt und wird in der GRS bereits seit vielen Jahren für DWR und SWR eingesetzt, insbesondere in Kopplung mit dem Neutronentransportcode TORT-TD, siehe /PÉR 22/, /SEU 20a/.

In einem ersten Schritt wurde daher der Entwicklungszweig des Thermohydraulik-Unterkanal-Codes CTF-Na /ABA 23/ für natriumgekühlte Systeme in der GRS verfügbar gemacht. Basierend darauf wurde damit begonnen, mittels CTF-Na ein echtes Unterkanalmodell eines CEFR-Brennelements zu entwickeln. Erste Tests mit CTF-Na liefern plausible Ergebnisse. Diese Arbeiten bilden die Grundlage für künftige hochauflösende gekoppelte Simulationen mit FENNECS/CTF, sobald diese Kopplung wie geplant im LWR-Multiphysikvorhaben UMRS1613 realisiert sein wird. Für den Einsatz für

natriumgekühlte Reaktorkonzepte würde es dann genügen, CTF durch CTF-Na zu ersetzen, mithin also FENNECS/CTF-Na zu verwenden.

4.8 Zusammenfassung und Ausblick

Im Ergebnis gelang es durch die in diesem Kapitel dokumentierten Arbeiten, die in LWR bereits praktizierte hochauflösende Simulationsmethodik mittels FENNECS/ATHLET erfolgreich für schnelle Reaktorsysteme einzuführen. Es ist allerdings zu berücksichtigen, dass ATHLET als eindimensionaler Thermohydraulik-Systemcode hierzu nur begrenzt geeignet ist (Näheres dazu siehe Kapitel 6.2) und FENNECS/ATHLET eine Art Machbarkeitsstudie (proof of concept) darstellt. Anstelle von ATHLET bietet sich in Zukunft der Einsatz von CTF-Na, der in Entwicklung befindlichen Version von CTF für Natrium als Kühlmittel, in Kopplung mit FENNECS an.

5 AP 2: Reaktorphysik zur Sicherheitsbewertung schneller Systeme

In den vergangenen Jahren wurden im Rahmen umfangreiche Arbeiten zur Entwicklung und Validierung der reaktorphysikalischen Rechenkette der GRS zur Sicherheitsbewertung von Reaktorkonzepten mit schnellem Neutronenspektrum durchgeführt. Dies betrifft in erster Linie natriumgekühlte Reaktoren, aber auch quellgetriebene unterkritische Systeme (Accelerator-Driven Systems, ADS), wie sie in Form der Vielzweck-Forschungseinrichtung MYRRHA in Belgien derzeit in Bau ist. Als Beispiele sei hier die Entwicklung von Kernaussdehnungsmodellen und deren Implementierung in PARCS und FENNECS /SEU 16b/ und die Dissertation eines Nachwuchswissenschaftlers der GRS /BOU 21/ genannt. Diese Verfahren erfordern Weiterentwicklungen und insbesondere Validierungen. Dazu sind Kernmodelle von Reaktoren und Reaktorkonzepten mit schnellem Neutronenspektrum zu entwickeln und zu überprüfen. Hierfür hat sich die GRS beispielsweise am Coordinated Research Project (CRP) der IAEA mit dem Titel *Neutronics Benchmark of CEFR Start-Up Tests (I31032) /IAE 18/* beteiligt, in dessen Rahmen Messdaten verfügbar gemacht wurden. Auch die gekoppelten Rechenverfahren der GRS, speziell in Form von FENNECS/ATHLET, wurden weiterentwickelt und eingesetzt, um beispielsweise große natriumgekühlte Reaktorkonzepte sicherheitstechnisch bewerten zu können. Im Folgenden wird dies im Detail beschrieben. Arbeiten und Ergebnisse hierzu wurden auch im Rahmen des CAMP-Agreements der US NRC präsentiert /SEU 22b/.

5.1 Simulation von CEFR Neutronic Start-up Tests mit FENNECS

5.1.1 Modelle für den Monte-Carlo-Code Serpent

Simulationsmodelle für den Monte-Carlo-Code Serpent /LEP 15/ Version 2.1.31 wurden entwickelt, um einerseits Ganzkern-Referenzmodelle für die Qualifizierung der FENNECS-Berechnungen zu erstellen und um andererseits makroskopische Wirkungsquerschnittsbibliotheken in 10 Energiegruppen für FENNECS zu generieren. Beide werden im Folgenden beschrieben. Alle Simulationen wurden unter Verwendung von ENDF/B-VII.0-Nuklearbasisdaten /CHA 06/ durchgeführt.

5.1.1.1 Ganzkern-Referenzmodelle in Serpent

Für die Qualifizierung der deterministischen FENNECS-Modelle und der verwendeten Wirkungsquerschnittsbibliotheken, insbesondere während der Blindphase des IAEA CRP, wurden in Serpent Monte-Carlo-Ganzkernmodelle entwickelt. Die Geometrie ist detailliert modelliert, d. h. es wurden keine Vereinfachungen (etwa Materialmischungen) angewendet. Zur Berücksichtigung von Wärmeausdehnungseffekten wurden die in der Spezifikation /IAE 18/ angegebenen linearen Wärmeausdehnungskorrelationen der verschiedenen Materialien in Excel-Tabellen implementiert, die in Abhängigkeit der jeweiligen Temperaturen die geometrischen Abmessungen der Brennstäbe und aller relevanten Strukturen sowie die Massendichten aller Materialien und deren Nuklidzahldichten berechnen. Für alle Monte-Carlo-Simulationen wurde eine erweiterte Serpent-Version /SEU 20b/ auf Basis der Version 2.1.31 verwendet, die es erlaubt, den Eingabedatensatz zu parametrisieren, indem neben Zahlen auch Variablen und arithmetische Ausdrücke definiert werden. Diese Funktion erleichtert die Entwicklung und Wartung des Serpent- Eingabedatensatzes, da die Änderung einer Zahl an verschiedenen Stellen durch die Änderung einer Parameterdefinition an einer einzigen Stelle gehandhabt wird. Anstelle von Zahlen können auch arithmetische Ausdrücke mit Parametern und mathematische Funktionen verwendet werden.

Mit diesen Vorbereitungen wurden in Serpent Ganzkernmodelle des CEFR für die folgenden, in der Spezifikation /IAE 18/ (siehe auch /HUO 17/) beschriebenen Experimente entwickelt: Netto-Kritikalität, schrittweise Annäherung an den kritischen Kernzustand, radial normierte Leistungsverteilung, Steuerstabwirksamkeiten, integrale und differentielle Steuerstabwirksamkeiten, Natriumvoid-Reaktivität und Subassembly-Swap-Reaktivität.

5.1.1.2 Einzel-Brennelementmodelle in Serpent zur Generierung makroskopischer Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsdaten

Für die Generierung makroskopischer Weniggruppen-Wirkungsquerschnittsdaten wurden in Serpent axial vollständig dargestellte Einzel-Brennelementmodelle in radial unendlichen Gitteranordnungen für Brennelemente entwickelt. Für die übrigen Bündel aus nicht spaltbaren Materialien, z. B. Steuerstäbe, Reflektor- und Abschirmanordnungen etc., werden stattdessen Superzellmodelle (nach dem in /FRI 11/ beschriebenen Ansatz) verwendet, bei denen das betrachtete Bündel von sechs Hälften eines Brennelements umgeben ist, wie in Abb. 5.1 gezeigt. Wie bei den Ganzkernmodellen werden auch hier ENDF/B-VII.0 Nuklearbasisdaten verwendet. Die makroskopischen Wirkungsquer-

schnitte wurden in einer 10-Energie-Gruppenstruktur erzeugt, deren Grenzen in Tab. 5.1 angegeben sind /SEU 22c/.

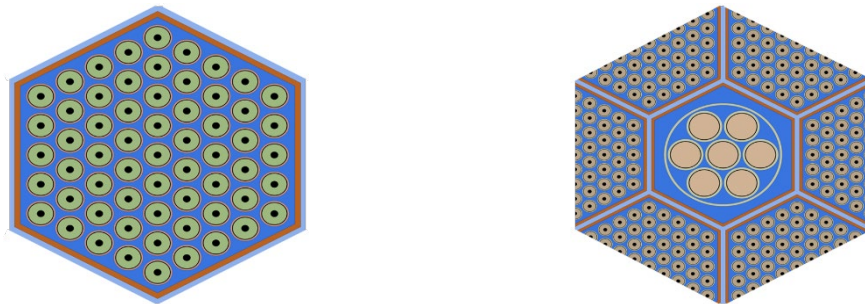


Abb. 5.1 Radiale Ansicht der Serpent-Modelle zur Wirkungsquerschnittsgenerierung

Links: Brennelement, rechts: Superzellenmodell für das RE1-Bündel (ähnlich für alle übrigen Steuer-, Reflektor-, Abschirmbündel usw.).

Tab. 5.1 Für die makroskopischen Wirkungsquerschnittsdaten verwendete Energiegruppenstruktur

Gruppenindex	Untere Energiegrenze		Gruppenindex	Untere Energiegrenze	
1	6.065307	MeV	6	40.86771	keV
2	2.231302	MeV	7	15.03439	keV
3	820.85	keV	8	5.530844	keV
4	301.9738	keV	9	2.034684	keV
5	111.09	keV	10	0	eV

Die von Serpent erhaltenen Querschnittsdaten wurden unverändert in FENNECS verwendet, mit Ausnahme des hochangereicherten B_4C -Absorbermaterials, dass in den Shim-Rods und den Safety-Rods (Sicherheitsstäben) verwendet wird. Denn ohne geeignete Korrektur der Wirkungsquerschnitt starker Neutronenabsorber, etwa durch die die Superhomogenisierungsmethode (SPH) /HÉB 93/, wird die Reaktivität von Steuerstäben überschätzt. Hier wurde eine einfache Korrektur des Absorptionsquerschnitts des Absorbercluster-Axialschnitts des Sicherheitsstabs vorgenommen, indem der Absorptionsquerschnitt jeder Energiegruppe mit einem Faktor a multipliziert wurde. Dieser Faktor wurde so ermittelt, dass FENNECS für ein CEFR-Modell mit teilweise eingeführten Steuerstäben den Multiplikationsfaktor eines entsprechenden Serpent-Referenzmodells reproduziert, für den $k_{eff} = 1,01427$ ermittelt wurde. Zu diesem Zweck wurden zunächst zwei FENNECS-Berechnungen, eine mit $a = 1$ und eine mit $a = 0,8$, durchgeführt, die die in Tab. 5.2 gezeigten Multiplikationsfaktoren ergeben.

Tab. 5.2 FENNECS-Multiplikationsfaktoren für unveränderten ($a = 1$) und um den Faktor $a = 0,8$ reduzierte Absorberwirkungsquerschnitte des Absorberclusters

Faktor a	k_{eff}	Reaktivitätsdifferenz zu Serpent (pcm)
1	1,01225	-196,7
0.8	1,01705	

Ohne Korrektur, d. h. $a = 1$, ergibt sich erwartungsgemäß eine Unterschätzung der Reaktivität um etwa 200 pcm. Andererseits ergibt $a = 0,8$ eine Überschätzung des Serpent-Ergebnisses. Somit lässt sich durch lineare Interpolation ein Faktor von $a = 0,9158333$ ableiten, und FENNECS gibt – unter Verwendung der mit diesem Faktor multiplizierten Absorberquerschnitten aller Energiegruppen – den Serpent-Multiplikationsfaktor sehr genau wieder. Insgesamt wurden mit Serpent entsprechend der Gesamtzahl der vorkommenden Materialzusammensetzungen 58 Wirkungsquerschnittsbibliotheken erstellt /SEU 22c/.

5.1.2 Deterministische Kernmodelle des CEFR in FENNECS

Ein axialer Schnitt des FENNECS-Modells des CEFR in Höhe der spaltbaren Zone ist im linken Bereich von Abb. 5.2 dargestellt. Da FENNECS dreieckige prismatische finite Elemente verwendet, besteht eine hexagonale Anordnung aus mindestens sechs finiten Elementen in radialer Richtung. Die Geometrie ist in 58 axiale Maschen mit Maschenweiten im Bereich von 0,006 cm (um den gemessenen Steuerstabpositionen gerecht zu werden) bis zu etwa 7 cm diskretisiert. Dies erfordert insgesamt 247776 finite Elemente, dargestellt durch 131924 Knoten. Um Konvergenz von Eigenwert- und Neutronenflussverteilungen zu erhalten, sind 23 äußere Iterationen notwendig. Die typische Rechenzeit für eine stationäre FENNECS-Simulation beträgt etwa 80 s.

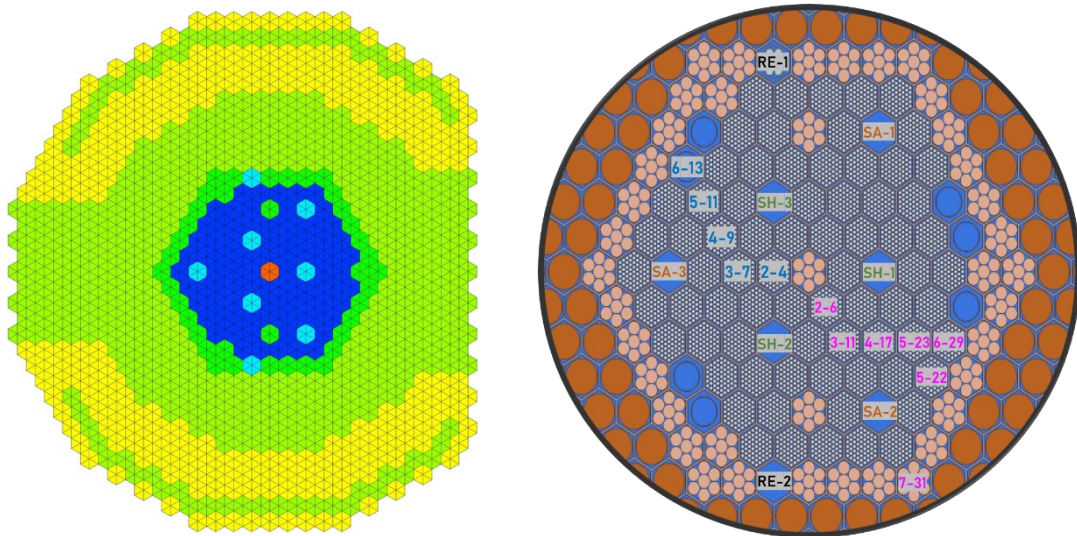


Abb. 5.2 Links: Materialverteilung und radiale Diskretisierung des deterministischen FENNECS-Modells des CEFR-Kerns in axialer Höhe von 61 cm.
Rechts: Aktiver Kern mit Bezeichnung einzelner Kernpositionen

5.1.3 Simulation verschiedener CEFR-Experimente mit FENNECS

5.1.3.1 Annäherung an die Kritikalität

Vor Inbetriebnahme des CEFR wurde der Kern zunächst mit Brennelement-Attrappen (Mock-up) beladen. Der Reaktor erreichte die erste Kritikalität, indem die Brennelement-Attrappen Schritt für Schritt durch tatsächliche Brennelemente ersetzt wurden. Nach dem zehnten Schritt waren 71 Brennelemente geladen. Ein weiteres Brennelement würde den Kern in den überkritischen Zustand bringen, was durch die FENNECS-Berechnung bestätigt werden konnte. Am Ende des Beladevorgangs war der Kern mit 72 Brennelementen beladen, wobei der RE2-Stab sich an der Position von 70mm befand und für die Natriumtemperatur 245 °C gemessen wurde. Tab. 5.3 dokumentiert die verschiedenen Kernbeladungszustände und die zugehörigen Multiplikationsfaktoren, die von FENNECS und Serpent berechnet wurden. Darüber hinaus wurden auch Kernbeladungen mit 24, 40, 46, 55, 61, 65, 68 und 69 Brennelementen mit FENNECS analysiert; die entsprechenden Ergebnisse – einschließlich der in Tab. 5.3 angegebenen – sind in Abb. 5.3 dargestellt.

Tab. 5.3 Kernbeladungszustände und die jeweiligen Multiplikationsfaktoren. Die anderen sieben Steuerstäbe außer RE2 sind alle im Out-of-Core-Zustand

Anzahl Brennelemente im Kern	Position von RE2	Kernzustand	Multiplikationsfaktor	Reaktivitätsdifferenz zu Serpent (pcm)	Multiplikationsfaktor
			FENNECS	Serpent	
70	Out-of-core	Unterkritisch	0.99296	0.99533	-240
71	Out-of-core	End of unterkritisch process	0.99751	0.99936	-186
72	190	Überkritisch	1.00146	1.00301	-154
72	170	Überkritisch	1.00137	1.00278	-140
72	151	Überkritisch	1.00118	1.00294	-175
72	70	Kritisch (lt. Experiment)	1.00100	1.00260	-159

Darüber hinaus wurde das normierte radiale Brennelement-Leistungsprofil entlang des in Abb. 5.4 gezeigten Pfads von FENNECS berechnet und mit Monte-Carlo-Simulationsergebnissen von Teilnehmern des IAEA CRP verglichen (siehe Abb. 5.5). Wie aus dem rechten Feld von 43 ersichtlich ist, wird eine zufriedenstellende Übereinstimmung zwischen FENNECS- und Monte-Carlo-Berechnungen erzielt, wobei FENNECS den Multiplikationsfaktor, wenn auch geringfügig, systematisch unterschätzt.

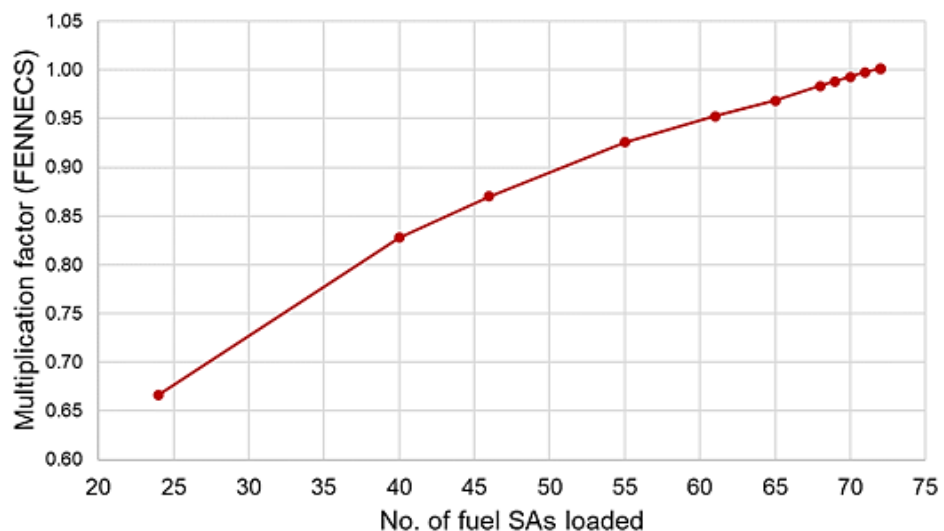


Abb. 5.3 FENNECS-Ergebnisse für das CEFR-Experiment *Fuel Loading and Criticality*

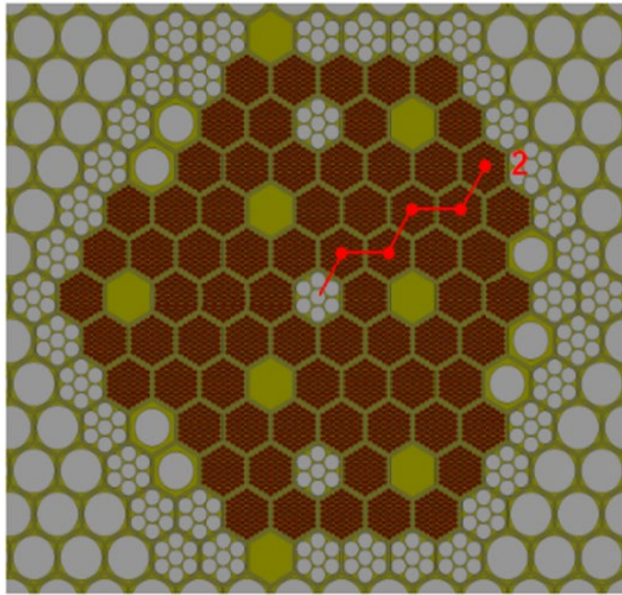


Abb. 5.4 Pfad, entlang dem das radiale Leistungsprofil von Abb. 5.5 berechnet werden soll

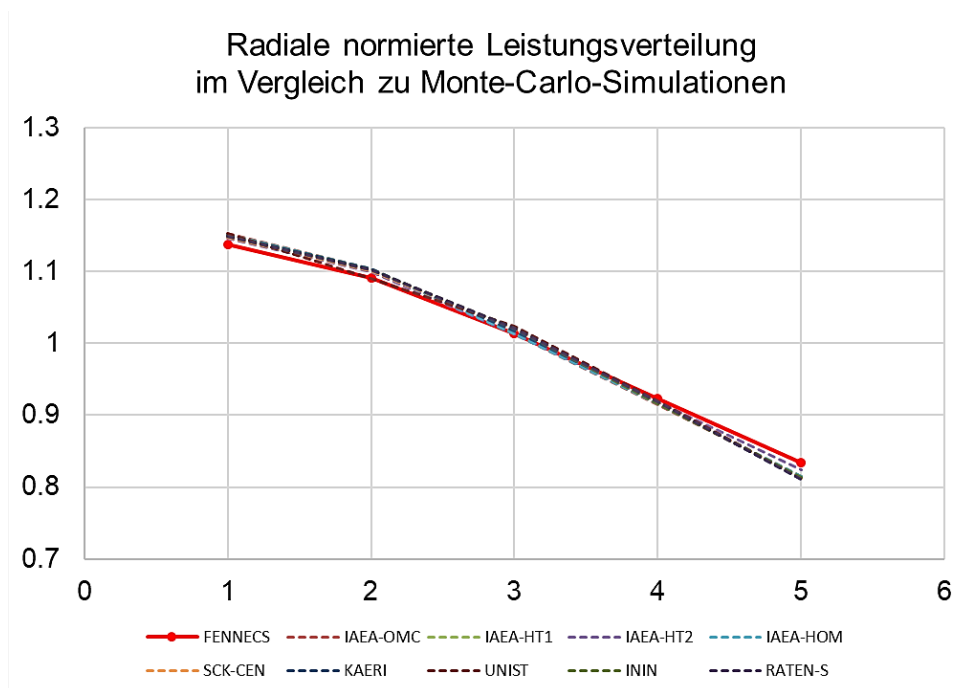


Abb. 5.5 Von FENNECS berechnetes radiales Brennelement-Leistungsprofil (durchgezogene rote Linie)

Normiertes Leistungsprofil entlang dem Pfad in Abb. 5.4 im Vergleich mit Monte-Carlo-Simulationen von Teilnehmern am IAEA CRP.

5.1.3.2 Steuerstabwirksamkeiten

Die Experimente zu Steuerstabwirksamkeiten wurden bei einer Kernkonfiguration mit 79 Brennelementen und zwei Edelstahl-elementen sowie einer einheitlichen Temperatur von 250 °C durchgeführt. Die Steuerstabwirksamkeit wird basierend auf der Reaktivitätsänderung vor und nach dem Einfahren eines einzelnen Steuerelements oder einer Gruppe von Steuerelementen, z. B. des ersten oder zweiten Abschalt-systems, bestimmt. Im Experiment wurden sowohl Steuerstabwirksamkeitswerte der acht einzelnen Steuerstäbe gemessen als auch für das erste (auch unter der Annahme, dass SH1⁵ blockiert ist) und das zweite (auch unter der Annahme, dass SA3 blockiert ist) Abschalt-system, ferner für alle Steuerstäbe, auch unter der Annahme, dass SH1 blockiert ist. Die Ergebnisse für die insgesamt 14 Szenarien sind in Abb. 5.6 dargestellt, wobei FENNECS-Ergebnisse in Blau und Messungen in Orange dargestellt sind. Absolute Unterschiede sind grau dargestellt. Es ist ersichtlich, dass FENNECS in den meisten Fällen die Steuerstabwirksamkeiten überschätzt. In den meisten Fällen weichen die FENNECS-Ergebnisse von den Messungen um weniger als 4,2% ab. Für RE2 und SA3 werden Abweichungen von 8,1% und 8,5% beobachtet. Die größte Abweichung (14%) findet sich für das erste Abschalt-system mit blockiertem SH1 und die kleinste Abweichung (-0,3%) für das zweite Abschalt-system mit blockiertem SA3. Unter Berücksichtigung der Messunsicherheiten stimmen die FENNECS-Ergebnisse jedoch größtenteils mit den Experimenten überein, mit Ausnahme von RE1 und RE2, für die FENNECS die Messungen leicht unterschätzt.

⁵ Abkürzungen siehe Kapitel 3.1.

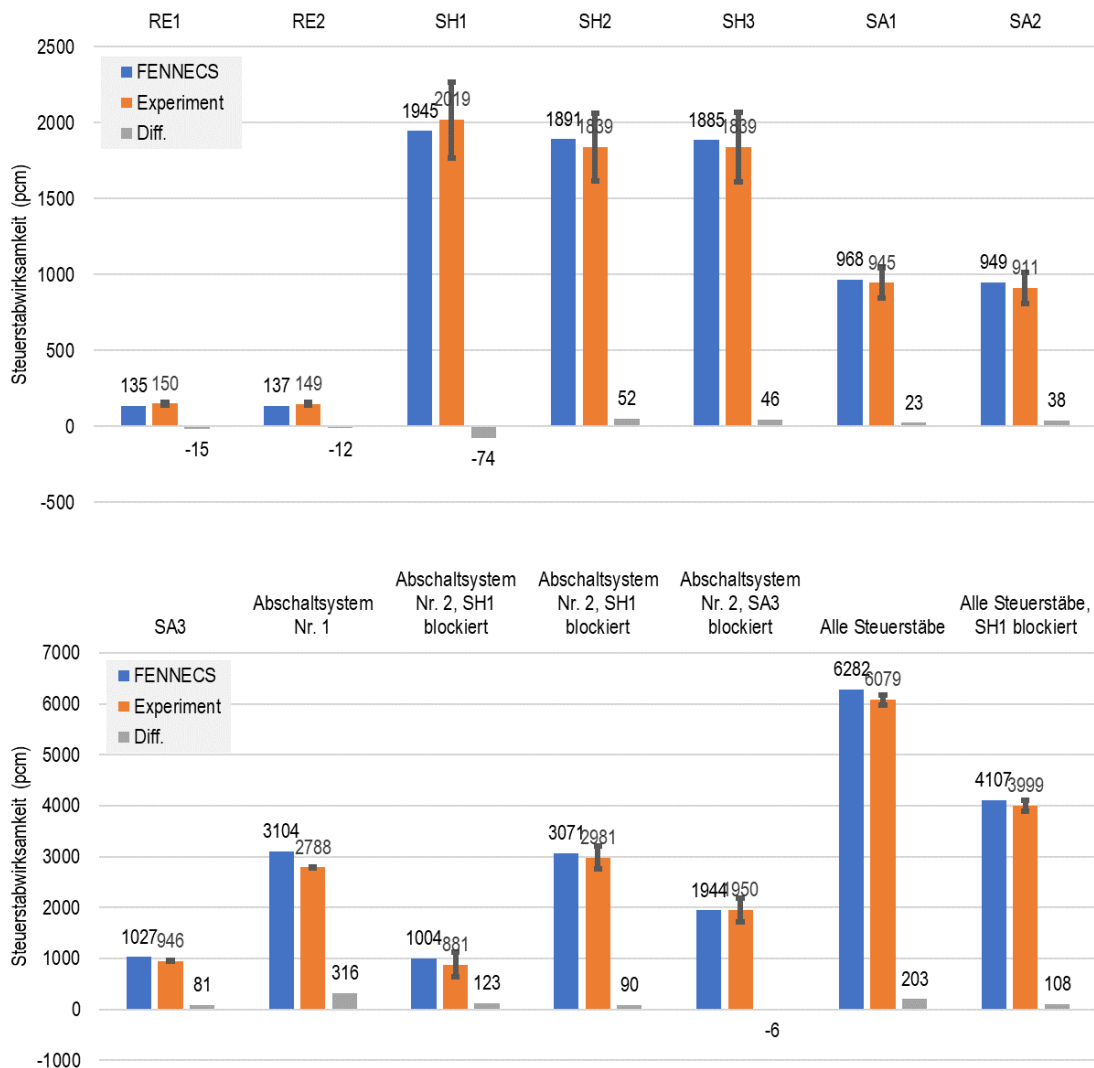


Abb. 5.6 Von FENNECS berechnete Steuerstabwert-Wirksamkeiten (blau) im Vergleich mit Messungen (orange)

Unterschiede sind in grauen Balken dargestellt. Fehlerbalken zeigen Messfehler an.

Neben absoluten Steuerstabwirksamkeiten wurden von FENNECS auch integrale und differentielle Steuerstabwirksamkeiten für die acht verschiedenen Steuerstabtypen und -positionen ermittelt und mit entsprechenden Monte-Carlo-Simulationen mit Serpent verglichen. Zu diesem Zweck wurden stationäre Simulationen für neun verschiedene Einfahrtiefen zusätzlich zum vollständig eingeführten und vollständig herausgezogenen Zustand für jeden Steuerstabtyp und seine radiale Position im Kern durchgeführt. Die differentielle Steuerstabwirksamkeiten wurden aus den jeweiligen Integralkurven abgeleitet. Die Ergebnisse für die integralen Wirksamkeiten sind in Abb. 5.7 dargestellt, in der die durchgezogenen Linien, die FENNECS- und die gestrichelten Linien die Serpent-Ergebnisse bezeichnen. Die Unterschiede zwischen Regulier-(RE-), Ausgleichs-(SH-)

und Sicherheitsstäben (SA) sind klar zu erkennen. Da die Regulierstäbe B₄C-Absorber mit natürlicher ¹⁰B-Häufigkeit enthalten, die Ausgleichs- und Sicherheitsstäbe dagegen B₄C mit angereichertem ¹⁰B enthalten, sind die integralen Wirksamkeiten von RE1 und RE2 relativ flach im Vergleich zu denen von SH1..3 und SA1..3. Die FENNECS-Ergebnisse stimmen zufriedenstellend mit den jeweiligen Serpent-Simulationen überein. Dies gilt auch für die differentiellen Steuerstabwirksamkeiten (Abb. 5.8), bei denen die Oszillationen in erster Linie auf numerische Differentiation und die stochastische Natur der Monte-Carlo-Simulationen zurückzuführen sind.

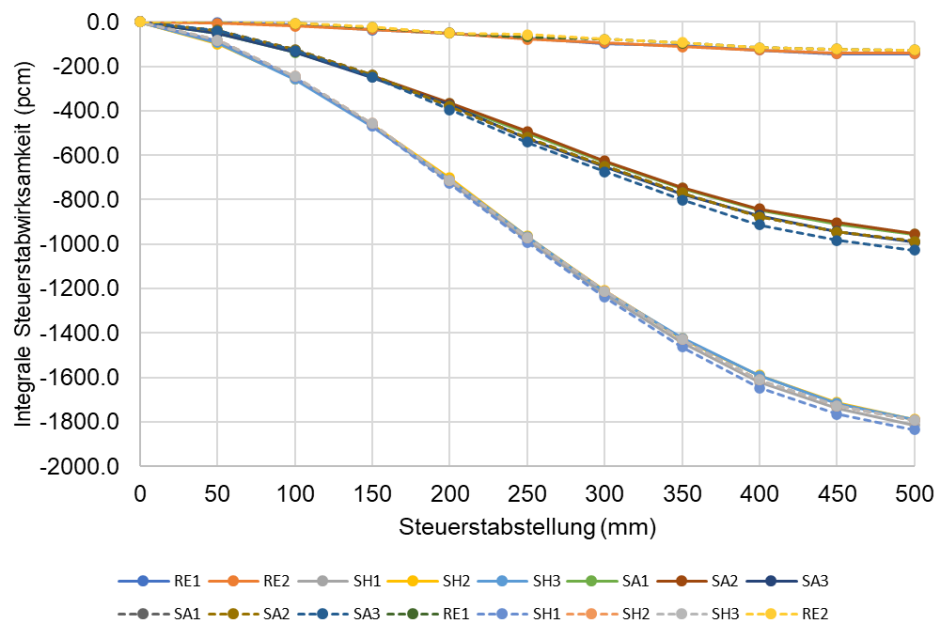


Abb. 5.7 Integrale Steuerstabwirksamkeiten für die acht verschiedenen Regulierungs- (RE), Shim- (SH) und Sicherheitsstäbe (SA)

Berechnungen von FENNECS (durchgezogene Linien) im Vergleich mit Serpent-Simulationen (gestrichelte Linien)

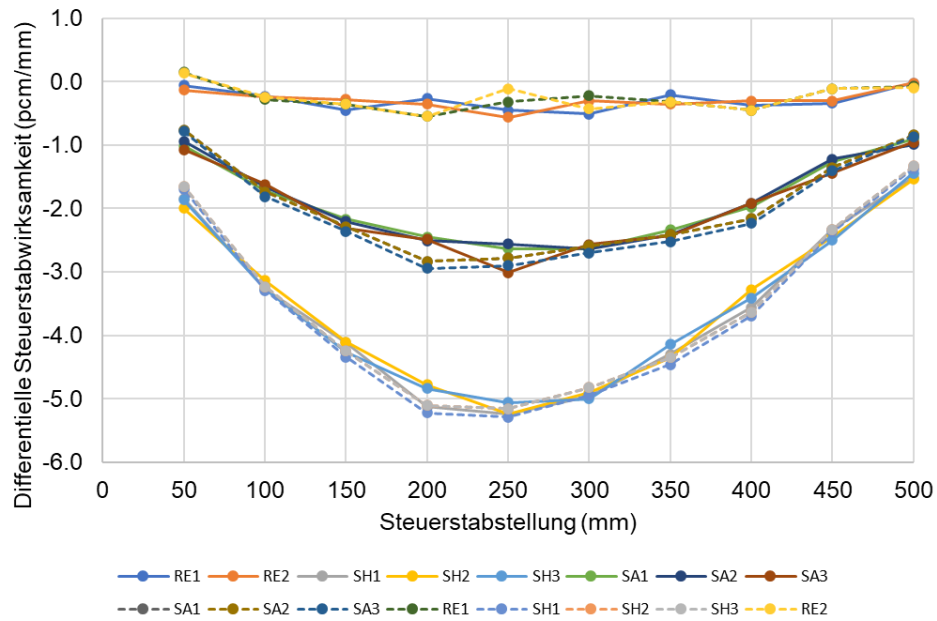


Abb. 5.8 Differentielle Steuerstabwirksamkeiten für die acht verschiedenen Regulierungs- (RE), Shim- (SH) und Sicherheitsstäbe (SA)

Berechnungen von FENNECS (durchgezogene Linien) im Vergleich mit Serpent-Simulationen (gestrichelte Linien).

5.1.3.3 Natrium-Void-Reaktivität

In natriumgekühlten schnellen Reaktoren ist die Natriumvoidreaktivität eine der wichtigsten Reaktivitätsrückwirkungen, da sie in Unfallsituationen zu großen positiven Reaktivitätseinträgen führen kann. Im Rahmen der CEFR Neutronic Start-Up-Tests wurde die Voidreaktivität gemessen, indem ein Brennelement durch einen solchen mit gegenüber Natriumeintritt versiegeltes, ansonsten aber baugleiches Brennelement ersetzt wurde. Die damit verbundene Reaktivitätsänderung wurde durch Änderungen der Steuerstabstellungen kompensiert, sodass der Kernzustand stets kritisch bleibt. Mit Hilfe der Steuerstabwirksamkeiten kann dann die Voidreaktivität rückgerechnet werden. Im Experiment wurde die Voidreaktivität insgesamt fünfmal gemessen, und zwar anhand von Brennelementen an fünf verschiedenen Kernpositionen. Die Positionen der Brennelemente ohne Natrium (Brennelemente im Void-Zustand) ist durch blaue Markierungen in Abb. 5.2 rechts angezeigt. Die Geometrie der gevoideten Brennelemente entspricht den ursprünglichen Brennelementen, jedoch sind sie durch Schweißen vakuumversiegelt, um den Voidzustand herzustellen. Während der Experimente wurden die Positionen der Ausgleichs- und Sicherheitsstäbe fixiert; die Reaktivitätsänderung wurde durch Bewegen der Regulierstäbe in Richtung des kritischen Reaktorzustands erhalten.

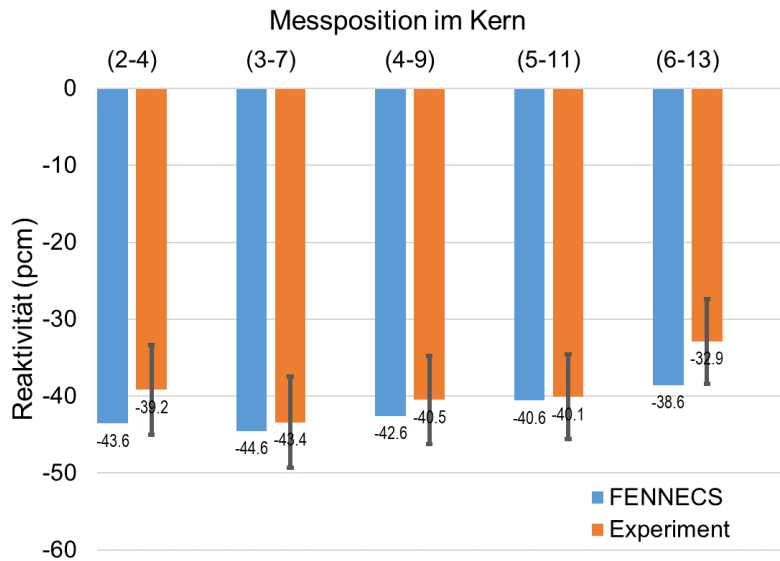


Abb. 5.9 Mit FENNECS berechnete Natriumvoidreaktivitäten (blau) im Vergleich zu Messungen (orange). Fehlerbalken zeigen Messfehler an

Die mit FENNECS erhaltenen Voidreaktivitätswerte sind in Abb. 5.9 dargestellt und mit den entsprechenden Messungen verglichen. Für alle Messpositionen ist die Voidreaktivität negativ. Dies kann der Tatsache zugeschrieben werden, dass der CEFR-Kern relativ klein ist und daher der (negative) Neutronenleckagebeitrag den (positiven) Spektrummhärtungseffekt aufgrund des Voiding überwiegt. Offensichtlich neigt FENNECS dazu, die experimentellen Werte zu überschätzen, insbesondere für die Positionen (2-4) und (6-13). Allerdings liegen die Ergebnisse innerhalb der Messfehler. Im Vorgänger-Eigenforschungsvorhaben RS1547 /SEU 19a/ wurden mit einer früheren Version von FENNECS verschiedene Void-Szenarien des verglichen mit dem CEFR wesentlich größeren Kerns des ASTRID-Konzepts, bei dem auch positive Voideffekte auftreten können, erfolgreich simuliert.

5.1.3.4 Reaktivitätsmessungen beim Brennelementaustausch

Der Zweck der Reaktivitätsmessungen beim Austausch von Brennelementen (engl. *sub-assembly swap reactivity measurements*) besteht darin, die Folgen von Brennelement-Beladefehlern zu simulieren. Die Austauschreaktivitäten wurden für acht Brennelemente gemessen, davon Brennelemente und zwei Edelstahl-Elemente vom Typ I. Die Positionen der ausgetauschten Elemente sind durch die violetten Markierungen in Abb. 5.2 angegeben. Tab. 5.1 gibt die Kernpositionen an, deren Elemente jeweils ausgetauscht werden.

Tab. 5.4 Kernpositionen und Beladeinformationen für die Austausch-Reaktivitätsmessungen. „Fuel“ steht für Brennelement, „SS“ für Edlestahlelement

Zu messende Kernposition		Beladung vor und nach dem Austausch							
		(2-6)	(3-11)	(4-17)	(5-23)	(6-29)	(5-22)	(7-31)	(5-19)
(2-6)	vorher	Fuel	Fuel	Fuel	Fuel	Fuel	Fuel	SS	SS
	nachher	SS	Fuel	Fuel	Fuel	Fuel	Fuel	SS	SS
(3-11)	vorher	Fuel	Fuel	Fuel	Fuel	Fuel	Fuel	SS	SS
	nachher	Fuel	SS	Fuel	Fuel	Fuel	Fuel	SS	SS
(4-17)	vorher	Fuel	Fuel	Fuel	Fuel	Fuel	Fuel	SS	SS
	nachher	Fuel	Fuel	SS	Fuel	Fuel	Fuel	SS	SS
(5-23)	vorher	Fuel	Fuel	Fuel	Fuel	Fuel	Fuel	SS	SS
	nachher	Fuel	Fuel	Fuel	SS	Fuel	Fuel	SS	SS
(6-29)	vorher	Fuel	Fuel	Fuel	Fuel	Fuel	Fuel	SS	SS
	nachher	Fuel	Fuel	Fuel	Fuel	SS	Fuel	SS	SS
(5-22)	vorher	Fuel	Fuel	Fuel	Fuel	Fuel	Fuel	SS	SS
	nachher	Fuel	Fuel	Fuel	Fuel	Fuel	SS	SS	SS
(7-31)	vorher	Fuel	Fuel	Fuel	Fuel	SS	Fuel	SS	SS
	nachher	Fuel	Fuel	Fuel	Fuel	SS	Fuel	Fuel	SS
(5-19)	vorher	Fuel	Fuel	Fuel	SS	Fuel	Fuel	SS	SS
	nachher	Fuel	Fuel	Fuel	SS	Fuel	Fuel	SS	Fuel

Die Messung wurde mit Hilfe von Steuerstabbewegungen durchgeführt. Jede Austauschreaktivität wurde mit zwei verschiedenen Experimenten gemessen, im ersten durch Verschiebung nur eines Steuerstabs, im zweiten durch Verschiebung mehrerer Steuerstäbe. Die entsprechenden FENNECS-Ergebnisse sind zusammen mit den jeweiligen Messungen in Abb. 5.10 und Abb. 5.11 dargestellt. Es ist ersichtlich, dass FENNECS die Swap-Reaktivitäten leicht unterschätzt, wobei die Abweichungen zwischen 27 pcm und 118 pcm liegen. Alle Resultate liegen jedoch noch innerhalb der Messunsicherheiten.

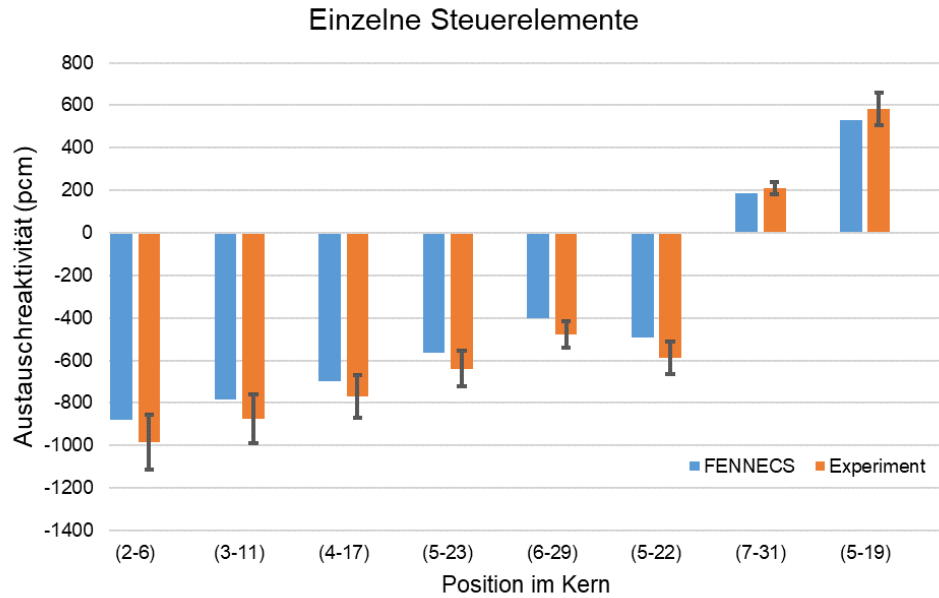


Abb. 5.10 FENNECS-Ergebnisse (blau) für die Steuerstab-Austauschreaktivitäten bei Verschiebung eines einzelnen Steuerstabs

Vergleich mit Messungen (orange). Fehlerbalken zeigen Messfehler an.

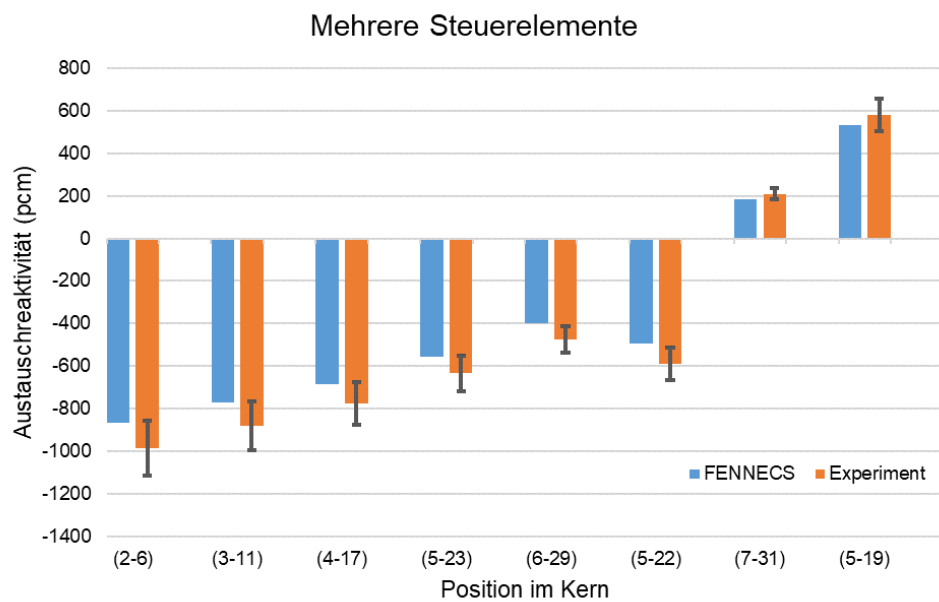


Abb. 5.11 FENNECS-Ergebnisse (blau) für die Steuerstab-Austauschreaktivitäten bei Verschiebung mehrerer Steuerstäbe

Vergleich mit Messungen (orange). Fehlerbalken zeigen Messfehler an.

5.2 Modellierung und Simulation des ESFR-Kerns

Der *European Sodium-cooled Fast Reactor* (ESFR) ist ein Beispiel für ein natriumgekühltes Reaktorkonzept mit großem Reaktorkern. Es ist eine Weiterentwicklung des im EU-Projekt CP-ESFR entworfenen Konzept, welches im Rahmen des EU-Projekts ESFR-SMART /MIK 17/, /FRI 22/ erarbeitet wurde.

5.2.1 Spezifikation des ESFR-Kerns

Wichtige Kenngrößen des ESFR sind in Tab. 5.5 angegeben.

Tab. 5.5 Kenngrößen des ESFR unter Nominalbedingungen

Parameter	Wert
Thermische Nennleistung	3600 MW
Kerneintrittstemperatur	395 °C
Kernaustrittstemperatur	545 °C
Mittlere Kühlmitteltemperatur	470 °C
Mittlere Temperatur der Kernstrukturen	470 °C
Mittlere Brennstofftemperatur	1227 °C
Mittlere Brutstofftemperatur	627 °C

Abb. 5.12 zeigt das ESFR-Kernlayout in der Ebene. Der Kern besteht aus inneren Brennstoffregionen (Inner Fuel, IF) und äußeren Brennstoffregionen (Outer Fuel, OF), die mit 216 bzw. 288 Brennelementen (Subassemblies, SA) beladen sind. Im Ausgangskern ist der Pu-Gehalt in beiden Zonen gleich und beträgt 17,99 Gew.-%. Der Kern wird von 24 Kontroll- und Abschaltetelementen (Control Shutdown Devices, CSDs) und 12 diversen Abschaltetelementen (Diverse Shutdown Devices, DSDs) gesteuert. Im Vergleich zum SFR-Kern aus dem CP-ESFR-Projekt wurden an mehreren Stellen (insgesamt 31) neue Entladungsröhren für Kernschmelze eingeführt, darunter an der zentralen Position, an der Grenze zwischen IF- und OF-Regionen sowie an der Kernperipherie. Der aktive Kern ist von drei Ringen aus Reflektorelementen, zwei Ringen aus internen Lagerpositionen für abgebrannte Brennelemente und vier Ringen aus Abschirmelementen umgeben. Eine vorläufige Analyse, die am CIEMAT durchgeführt wurde, zeigte einen vernachlässigbaren Einfluss der Lagerung und Abschirmung abgebrannter Brennelemente auf die Neutronik /FRI 22/. Daher wurden diese Regionen in den neutronenphysikalischen Modellen des ESFR-Kerns nicht berücksichtigt.

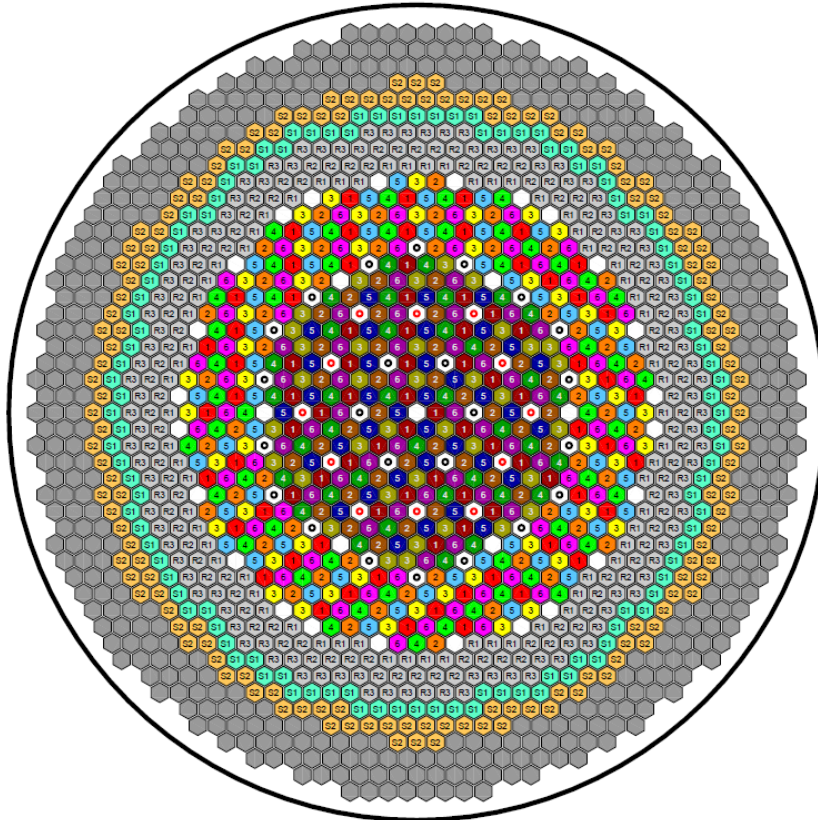


Abb. 5.12 Radiale Brennelementanordnung des ESRF-Kerns /RIN 18/

Abb. 5.13 zeigt die axialen Strukturen der Brennelemente der inneren (IF) und äußeren (OF) radialen Kernzone. Eine Besonderheit des ESRF-Kerns ist das über dem aktiven Kern befindliche große Natriumplenium, über dem wiederum eine Neutronenabsorberzone liegt. Die aktiven Zonen bestehen aus Spalt- und Brutzonen. Bei Raumtemperatur beträgt die aktive Kernhöhe 1 m. Die Höhe der Brutzonen in IF und OF betragen 5 cm bzw. 25 cm, sodass sich die Höhen der Spaltzonen jeweils auf 75 cm bzw. 95 cm belaufen. Die Höhe des Natriumplenums beträgt 60 cm. Das Brennstoff-Pellet weist ein Innenloch auf. Das Brutstoff-Pellet hat den gleichen Radius, aber kein Innenloch und eine andere Isotopenzusammensetzung.

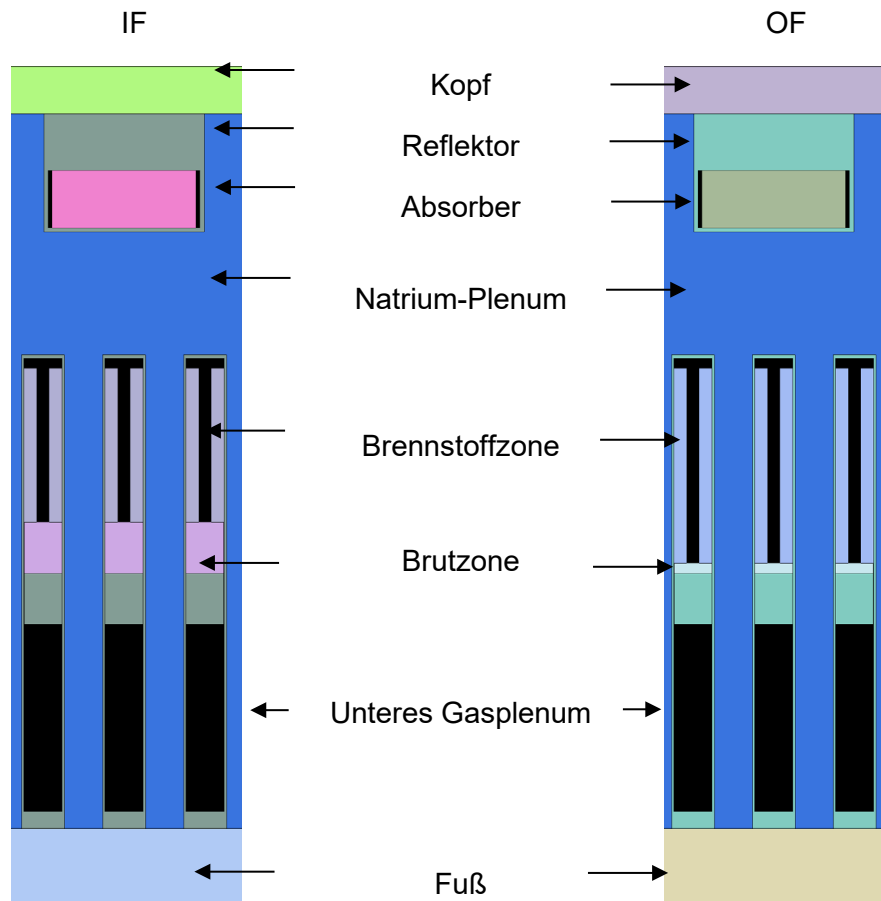


Abb. 5.13 Axiale Strukturen der Brennelemente der inneren (IF) und äußeren (OF) radialen Kernzone (graphische Darstellung von Serpent)

5.2.2 Generierung nuklearer Daten und Referenzmodell in Serpent

Zur Generierung nuklearer Daten in Form von makroskopischen Wirkungsquerschnitten in wenigen Energiegruppen für den deterministischen Code FENNECS wurden mit dem Monte-Carlo-Code Serpent detaillierte Modelle der verschiedenen Brennelementtypen des ESFR in radial unendlichen Gitteranordnungen entwickelt /MUZ 23/. Als Beispiele zeigt Abb. 5.14 Schnitte durch ein Brennelement (links) und ein Steuerelement (rechts). Beim Steuerelementmodell handelt es sich um ein Superzellmodell. Die angefügten sechs halben Brennelemente liefern den benötigten Neutronenfluss, da das Steuerelement selbst kein spaltbares Material enthält. Um temperaturbedingte Wärmeausdehnungseffekte der geometrischen Abmessungen und der Materialdichten in der Neutronenkinetik zu berücksichtigen, wurden die linearen Wärmeausdehnungskorrelationen des ESFR in Excel-Tabellen implementiert, die die Geometrie im kalten Zustand annimmt und daraus je nach den Temperaturen von Brenn- und Brutstoffen, von Brennelementkästen, Hüllrohr, Kerngitterplatte, Absorber sowie des Kühlmittels die tatsächlichen

Abmessungen, Materialdichten und schließlich das Nuklidinventar berechnen. Mit diesen Modellen wurden Wirkungsquerschnittsdaten in der in Tab. 5.6 angegebenen 10-Energiegruppen-Struktur für jede axiale Zone jedes Brennelementtyps berechnet.

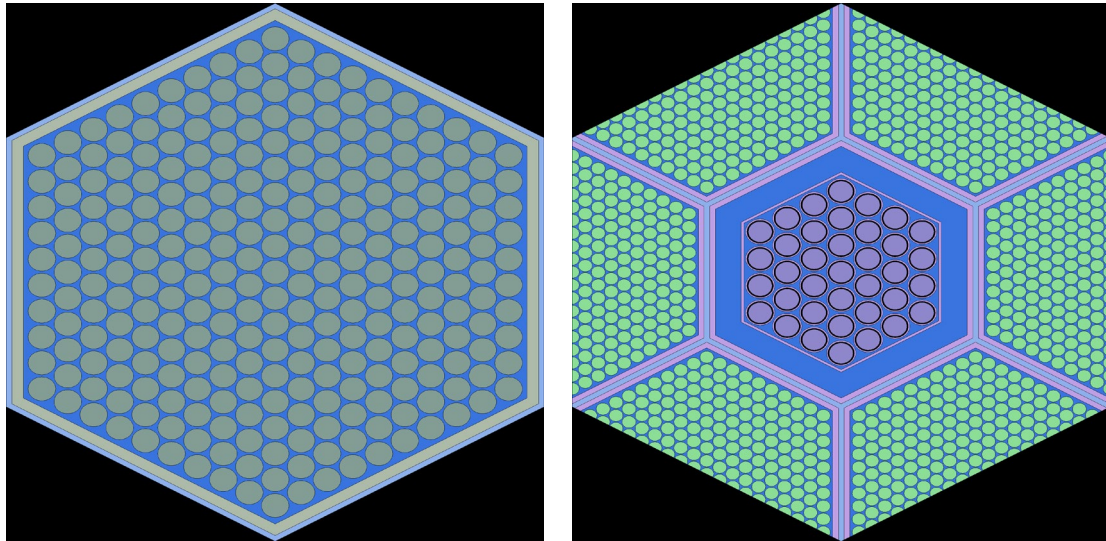


Abb. 5.14 Serpent-Modell für ein Brennelement (links) und ein Steuerelement (rechts)

Des Weiteren wurde mit dem Monte-Carlo-Code Serpent ein Ganzkernmodell des ESFR ohne geometrische Approximationen entwickelt, welches als Referenz zum Vergleich mit Simulationsergebnissen des deterministischen 3-D-Kernmodells in FENNECS dient. Relevante Vergleichsgrößen sind der Multiplikationsfaktor und die Leistungsverteilung im Kern. Abb. 5.15 zeigt einen Schnitt durch die aktive Zone des Serpent-Modells des ESFR-Kerns.

Tab. 5.6 Für den ESFR-Kern verwendete Energiegruppenstruktur

Gruppen-Index	Untere Energiegrenze	Einheit
1	6.0653	MeV
2	2.2313	MeV
3	820.85	keV
4	301.974	keV
5	111.09	keV
6	40.8677	keV
7	15.034	keV
8	5.5309	keV
9	2.0347	keV
10	0	keV

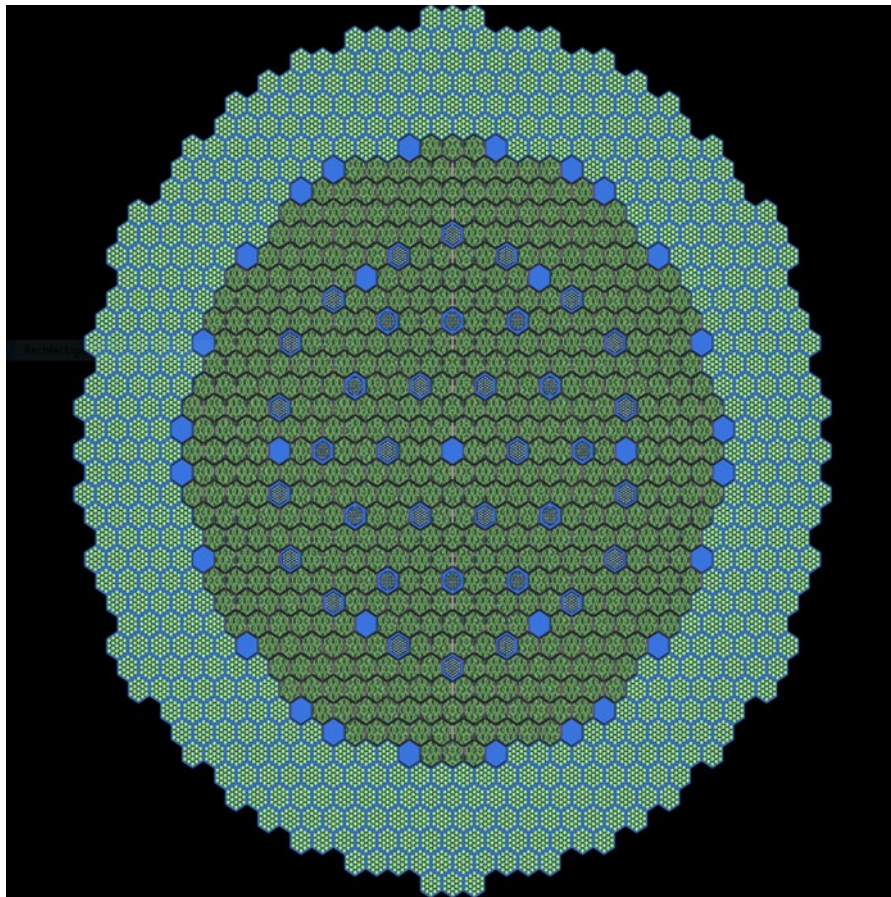


Abb. 5.15 Serpent-Modell des ESFR-Kerns

5.2.2.1 Generierung parametrisierter Wirkungsquerschnittsbibliotheken

Für gekoppelte Simulationen mit FENNECS/ATHLET wurden die Wirkungsquerschnittsbibliotheken erweitert, indem sie nach Brennstoff- und Hüllrohrtemperatur, Kühlmitteldichte und Brennelement-Gitterweite parametrisiert wurden. Die Abhängigkeit von der Brennelement-Gitterweite ermöglicht den Einsatz der radialen Kernausdehnungsmodelle in FENNECS und PARCS, die Parametrisierung nach der Hüllrohrtemperatur zusätzlich die Anwendung des axialen Kernausdehnungsmodells in PARCS /SEU 16b/. Die sechs Stützstellen für die Brennstofftemperatur sowie die jeweils drei Stützstellen für die Hüllrohrtemperatur, die Kühlmitteldichte und die Brennelement-Gitterweite sind in Tab. 5.7 angegeben. Die Stützstellen sind in etwa äquidistant und so gewählt, dass hiermit der Betriebszustand dargestellt werden kann.

Tab. 5.7 Parameter und ihre Stützstellen der parametrisierten Wirkungsquerschnittsbibliotheken für den ESFR-Kern

Stützstellenindex	Brennstofftemperatur (K)	Kühlmitteldichte (g/cm ³)	Hüllrohrtemperatur (K)	Brennelement-Gitterweite (cm)
1	300	0,743	600	20,9868
2	600	0,854	743	21,0794
3	900	0,927	900	21,1378
4	1200	–	–	–
5	1500	–	–	–
6	1800	–	–	–

5.2.3 Modell des ESFR-Kerns in FENNECS

Abb. 5.16 zeigt einen Schnitt durch das FENNECS-Modell des ESFR-Kerns. Es besteht aus 547848 finiten Elementen, verteilt auf 84 axiale Ebenen, d. h. jede Ebene enthält 6522 finite Elemente. Die 547848 finiten Elemente werden durch 287725 Knoten definiert. Die axiale Diskretisierung variiert zwischen 0,0036 cm und 6,84 cm, um den Steuerabstellungen gerecht zu werden. Radial werden jedes Brennelement und alle übrigen Elemente in sechs finite Elemente diskretisiert.

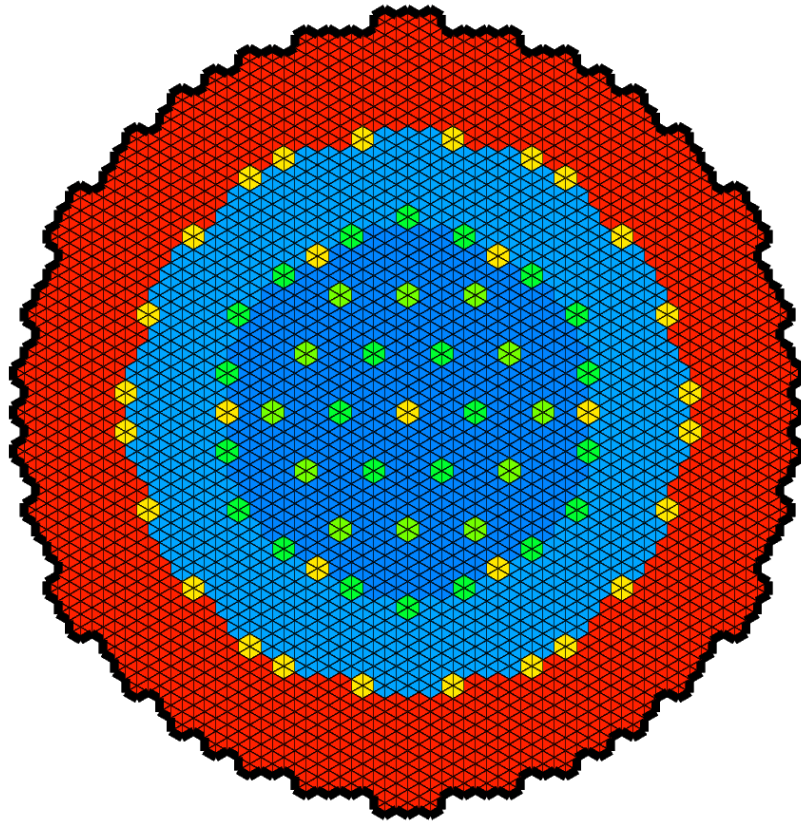


Abb. 5.16 Schnitt durch das ESFR-Modell in FENNECS

Die verschiedenen Farben stehen für unterschiedliche Materialzusammensetzungen und deren Wirkungsquerschnittsbibliotheken.

5.2.4 Simulationen des ESFR-Kerns mit FENNECS

Mit dem oben beschriebenen FENNECS-Modell und den zugehörigen Wirkungsquerschnittsbibliotheken wurden umfangreiche Rechnungen durchgeführt. Es wurde nicht nur der Nominalzustand berechnet, sondern auch verschiedene Steuerabstellungen bis hin zum vollständig kontrollierten Zustand. Dabei wurde neben der Diffusionsapproximation auch die in FENNECS neu implementierte vereinfachte SP_3 -Transportmethode eingesetzt, um deren Potential gegenüber der Diffusionsnäherung bei großen Reaktorkernen auszuloten. Die Arbeiten liefern dabei einen wichtigen Beitrag zur Validierung von FENNECS, insbesondere der SP_3 -Methode. Alle Details sind einem Beitrag zur Konferenz M&C 2023 zu entnehmen /MUZ 23/; nachfolgend wird eine Zusammenfassung der wichtigsten Ergebnisse gegeben.

Die Serpent-Simulation des ESFR im Nominalzustand liefert einen Multiplikationsfaktor von $k = 1,03341$. Das entsprechende FENNECS-Ergebnis ist $k = 1,03247$, es liegt somit nur geringfügig (88 pcm) unter der Monte-Carlo-Referenz. Ein Vergleich der axial integrierten Kernleistungsverteilung (Abb. 5.17) ergibt, dass die Abweichungen von FENNECS gegenüber Serpent höchstens 2,5 % betragen.

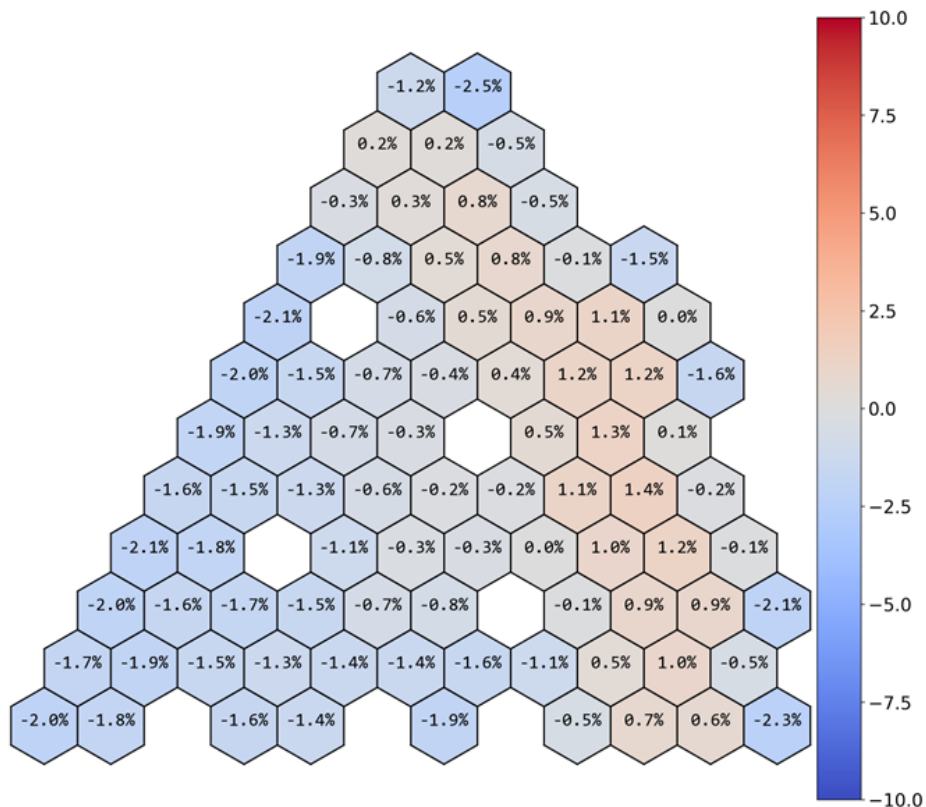


Abb. 5.17 Abweichung der von FENNECS berechneten Kernleistungsverteilung von Serpent

Mit zunehmender Einfahrtiefe der Steuerstäbe vergrößert sich Diskrepanz zwischen den Multiplikationsfaktoren von FENNECS (Diffusionsnäherung) gegenüber jenen von Serpent auf bis zu -664 pcm bei voll kontrolliertem Kern. Dies geht aus der blauen Kurve von Abb. 5.18 hervor. Die Neutronenabsorptionwirkung der Steuerstäbe wird erwartungsgemäß überschätzt. Wird statt der Diffusionsnäherung die SP_3 -Methode von FENNECS verwendet, so reduziert sich diese Überschätzung auf -355 pcm (siehe grüne Kurve in Abb. 5.18). Auch die Übereinstimmung von FENNECS mit Serpent für den Zustand ARO verbessert sich hiermit auf 73 pcm. Eine nochmals verbesserte Übereinstimmung mit Serpent lässt sich über SPH-korrigierte Wirkungsquerschnittsdaten in Verbindung mit der Diffusionsnäherung von FENNECS erzielen. Dazu wurde das Superhomogenisierungsverfahren /HÉB 93/ eingesetzt, welches in PEMTY

implementiert wurde /SEU 22a/. Für den voll kontrollierten ESFR-Kern ergibt sich eine Abweichung gegenüber Serpent von weniger als 100 pcm (siehe rote Kurve in Abb. 5.18).

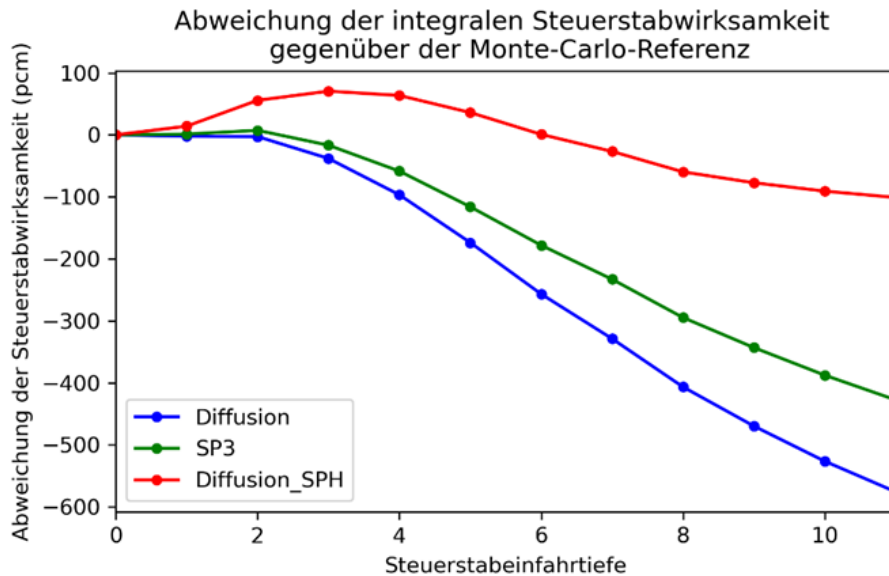


Abb. 5.18 Abweichung der integralen Steuerstabwirksamkeit des ESFR-Kerns gegenüber der Monte-Carlo-Referenz

Diffusionsnäherung (blau), SP₃-Methode (grün) und Diffusionsnäherung in Verbindung mit SPH-korrigierten Wirkungsquerschnitten (rot).

Vergleichbare Befunde zeigen sich auch beim Vergleich der Brennelement-Leistungsverteilung zwischen FENNECS und Serpent. Wie Abb. 5.19 zeigt, liefert auch hier die SP₃-Methode Ergebnisse (grüne Kurve), die näher an der Monte-Carlo-Referenz liegen als es bei der Diffusionsnäherung (blaue Kurve) der Fall ist. Eine signifikante Verbesserung liefert auch hier die Verwendung von SPH-korrigierten in Verbindung mit der Diffusionsnäherung (rote Kurve). Diese Befunde legen nahe, die SPH-Methode so zu erweitern, dass sie auch anisotrope Streuwirkungsquerschnitte, d. h. höherer Legendre-Entwicklungsordnung, verarbeiten kann.

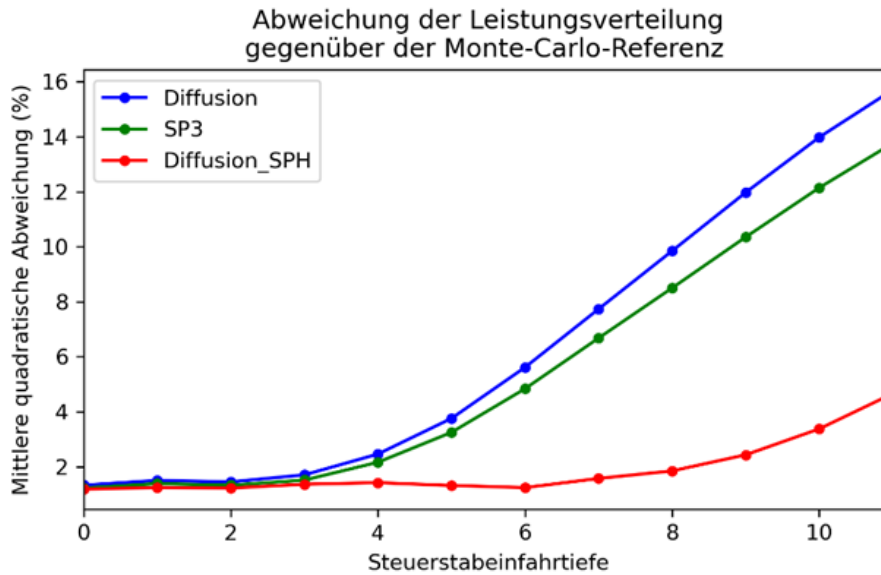


Abb. 5.19 Mittlere quadratische Abweichung der Brennelement-Leistungsverteilung des ESFR-Kerns gegenüber der Monte-Carlo-Referenz

Diffusionsnäherung (blau), SP₃-Methode (grün) und Diffusionsnäherung in Verbindung mit SPH-korrigierten Wirkungsquerschnitten (rot).

5.2.5 Gekoppelte Simulationen des ESFR-Kerns mit FENNECS/ATHLET

Unter Verwendung des in Kapitel 6.4 beschriebenen Parallelkanalmodells des ESFR-Kerns in ATHLET und der oben beschriebenen parametrisierten Wirkungsquerschnittsbibliotheken wurden gekoppelte Simulationen des ESFR-Kerns mit FENNECS/ATHLET bei einer thermischen Leistung von 1800 MW durchgeführt. Dazu wurde der Geometrie-Eingabedatensatz für FENNECS um das Feedback-Mapping-Schema ergänzt. Dieses Abbildungs-Schema – es handelt sich um eine 1:1-Abbildung – ordnet jedem der 504 Brennelemente in FENNECS den betreffenden thermohydraulischen Kanal des ATHLET-Modells zu, um einerseits ATHLET mit der von FENNECS berechneten Leistungsverteilung zu versorgen und andererseits in FENNECS die thermohydraulischen Rückwirkungen zu berücksichtigen. Der Datenaustausch erfolgt über die Kopplungsschnittstelle zwischen FENNECS und ATHLET.

Tab. 5.8 Konvergenzverhalten von FENNECS/ATHLET für die Berechnung des gekoppelten stationären Zustands des ESFR-Kerns

Iteration	Anzahl der Brennelemente mit konvergierter Leistungsverteilung	Anteil der Brennelemente mit konvergierter Leistungsverteilung
1	0	0 %
2	108	21,4 %
3	222	44,0 %
4	288	57,1 %
5	408	81,0 %
6	444	88,1 %
7	486	96,4 %
8	486	96,4 %
9	504	100 %

FENNECS/ATHLET benötigt 9 Iterationen für die Berechnung des gekoppelten stationären Zustands des ESFR-Kerns. Das Konvergenzverhalten ist in Tab. 5.8 wiedergegeben. Abb. 5.20 zeigt die Leistungsdichteverteilung des gekoppelten stationären Zustands auf axialer Höhe ihres Maximums. In Abb. 5.21 ist die entsprechende Brennstofftemperaturverteilung und in Abb. 5.22 die zugehörige Kühlmitteldichteverteilung dargestellt.

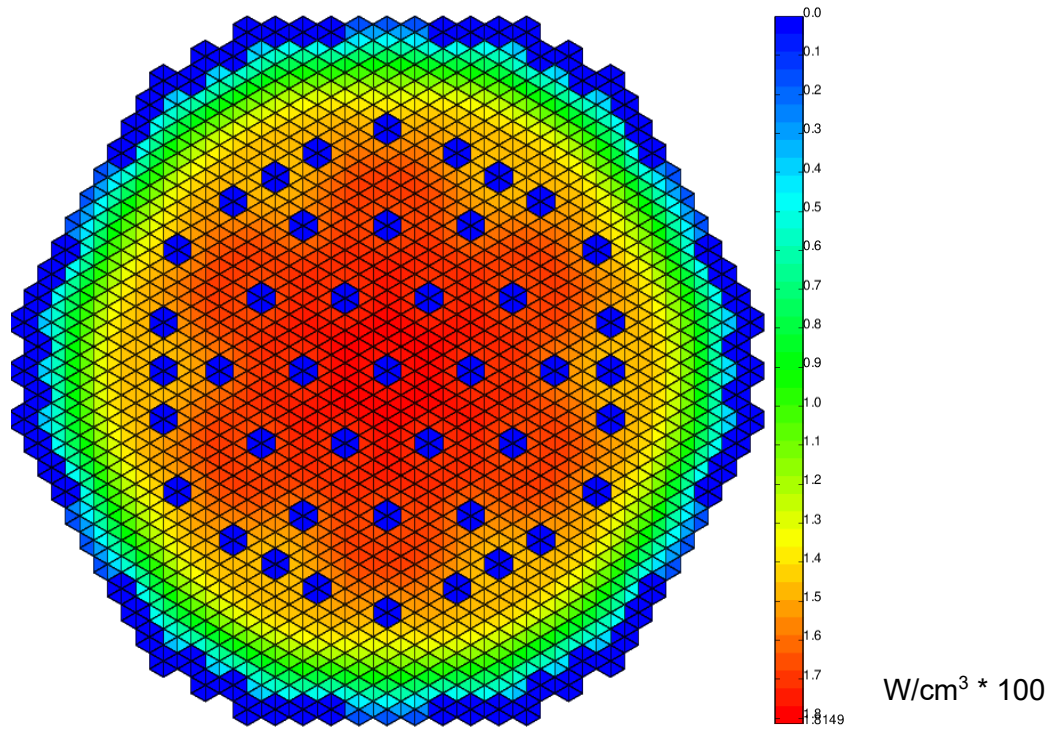


Abb. 5.20 Leistungsdichteverteilung des gekoppelten stationären Zustands auf axialer Höhe ihres Maximums ($z = 221,5$ cm über der Kernunterkante)

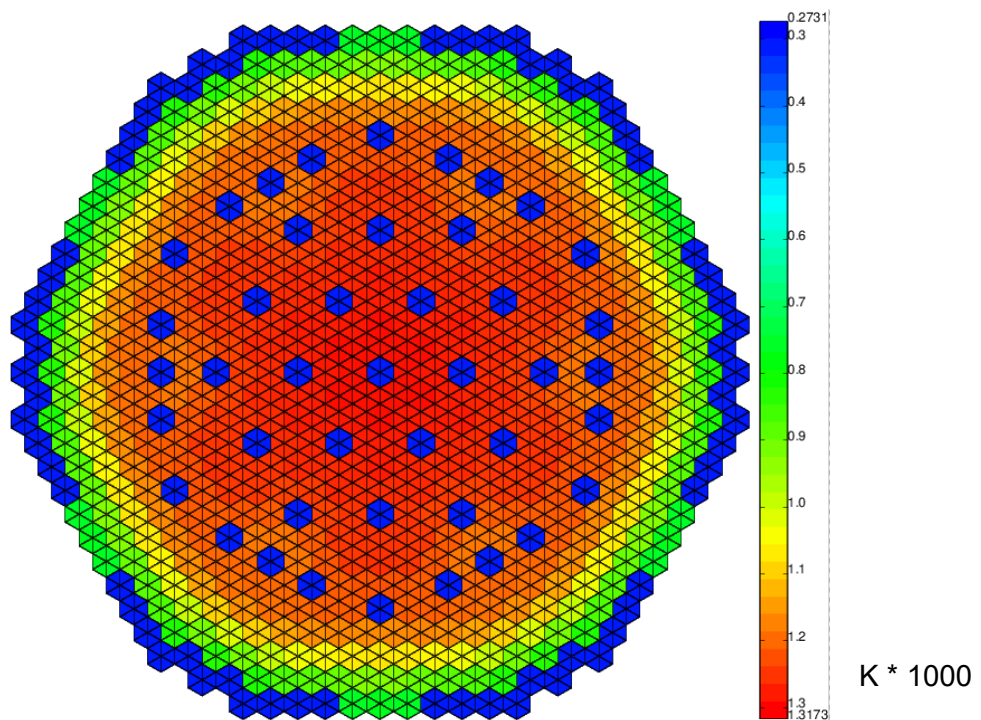


Abb. 5.21 Brennstofftemperaturverteilung des gekoppelten stationären Zustands auf axialer Höhe ihres Maximums ($z = 221,5$ cm über der Kernunterkante)

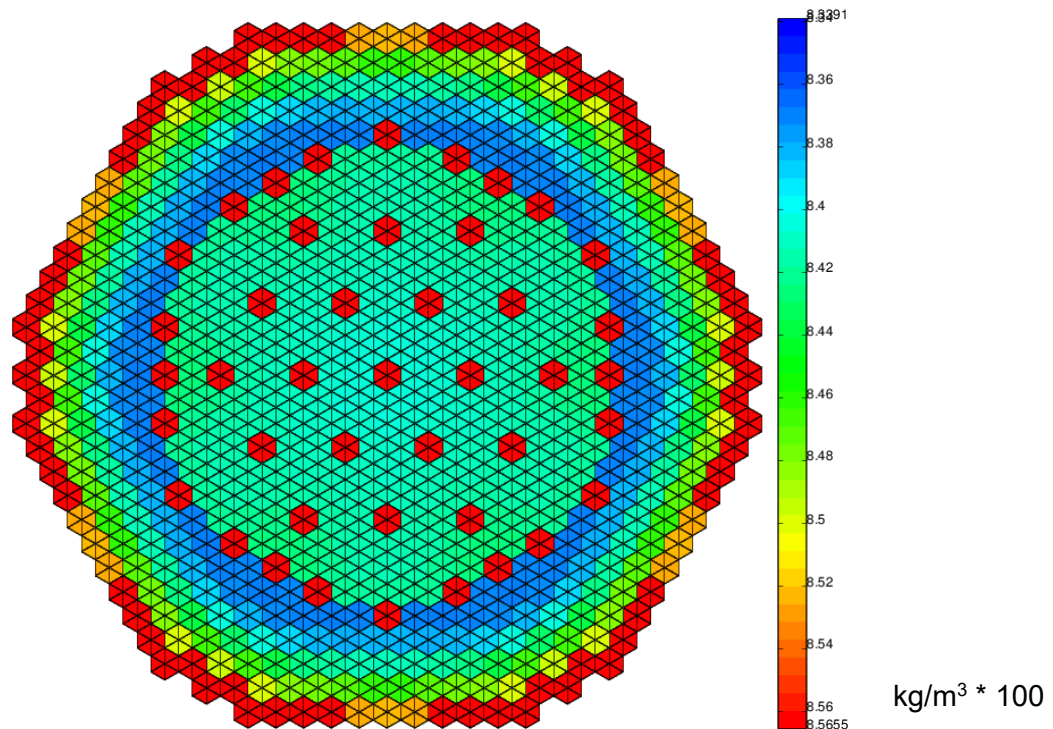


Abb. 5.22 Kühlmitteldichteverteilung des gekoppelten stationären Zustands in Höhe $z = 241,5$ cm über der Kernunterkante

5.2.6 Anpassungen der Kopplungsschnittstelle zwischen FENNECS und ATHLET

Im Rahmen dieses Vorhabens wurden auch Anpassungen der Kopplungsschnittstelle zwischen FENNECS und ATHLET vorgenommen. So wurden Vorkehrungen für die Übertragung der Brennelement- oder Stabgitterweite getroffen. Ferner wurde die Möglichkeit geschaffen, die von ATHLET gelieferten thermohydraulischen Verteilungen in andere physikalische Einheiten umzurechnen, etwa von $^{\circ}\text{C}$ oder $^{\circ}\text{F}$ in K für Temperaturen, von kg/m^3 in g/cm^3 für Massendichten oder m in cm für Abmessungen. Diese Notwendigkeit ergibt sich daraus, wenn in den Wirkungsquerschnittsbibliotheken sich die Einheit der Rückwirkungsparameter von der von ATHLET gelieferten zugehörigen thermohydraulischen Verteilung unterscheidet. So liefert ATHLET Temperaturen von Brennstoff oder Hüllrohr in $^{\circ}\text{C}$ und die Kühlmitteldichte in kg/m^3 . Wenn die entsprechenden Rückwirkungsparameter der Wirkungsquerschnittsbibliotheken nicht in derselben Einheit angegeben sind, sondern z. B. in K (Temperaturen) oder g/cm^3 (Massendichten), führt dies zu falschen Simulationsergebnissen, deren Ursache u. U. schwer zu lokalisieren ist. Daher kann im Eingabedatensatz von FENNECS optional für jeden Rückwirkungsparameter die Einheit angegeben werden, in die die zugehörige thermohydraulische Verteilung von ATHLET umgerechnet werden soll. Fehlen diese optionalen

Angaben, erfolgt keine Umrechnung. Damit ist dieser Prozess nachvollziehbar ist, wird in jedem Fall in der Ausgabedatei von FENNECS protokolliert, ob eine Einheitenumrechnung erfolgt und, wenn ja, in welcher Weise sie erfolgt. Die Einheitenumrechnung erleichtert die Anpassung an die Parametrisierung vorhandener Wirkungsquerschnittsbibliotheken und verhindert fehlerhafte Simulationen infolge unentdeckter Einheiteninkompatibilität.

6 AP 3: Thermohydraulik zur Sicherheitsbewertung schneller Systeme

Parallel zu den Arbeiten der GRS zu ihren reaktorphysikalischen Rechenmethoden wurde in den vergangenen Jahren ebenso umfangreiche Arbeiten zur Entwicklung und Validierung der thermohydraulischen Rechenkette der GRS zur Sicherheitsbewertung von Reaktorkonzepten mit schnellem Neutronenspektrum durchgeführt. Dies betrifft in erster Linie natriumgekühlte Reaktoren, aber auch quellgetriebene unterkritische Systeme (Accelerator-Driven Systems, ADS), wie sie in Form der Vielzweck-Forschungseinrichtung MYRRHA in Belgien derzeit in Bau ist. Dazu wurde das Modul ATHLET des Codesystems AC² beispielsweise um die Arbeitsmedien Natrium und eutektische Blei-Wismut-Legierung (Lead Bismut Eutectic, LBE) erweitert /SEU 19b/ und, etwa im Rahmen der EU-Projekte ESNII+ /WAH 17/ und ESFR-SMART /MIK 17/, im Vergleich mit anderen Codes eingesetzt. Während temperaturbedingte Ausdehnungseffekte in natriumgekühlten Reaktoren zunächst nur seitens der Neutronenkinetik – sie bewirken große negative Reaktivitätsrückwirkungen – berücksichtigt wurde, blieben sie – da ihr Einfluss mutmaßlich geringer ist – auf thermohydraulischer Seite unberücksichtigt. Teil dieses Arbeitspaketes war es daher, dieser Frage nachzugehen. Dies wird im Folgenden ebenso beschrieben wie die Erweiterung der thermohydraulischen Simulationsmethoden zur Sicherheitsbewertung schneller Reaktorkonzepte in Form von hochauflösenden Unterkanalmodellen oder die Weiterentwicklung und Überprüfung der Rechenmodelle der GRS einschließlich CFD-Simulationen mit OpenFOAM bis hin zur gekoppelten Simulation großer Reaktorkonzepte mit beispielsweise FENNECS/ATHLET. Dies wird im Folgenden im Detail dokumentiert. Arbeiten und Ergebnisse hierzu wurden auch im Rahmen des CAMP-Agreements der US NRC präsentiert /SEU 22b/.

6.1 Modellierung thermischer Strukturausdehnungen in der Thermohydraulik

Das Wärmeausdehnungsverhalten eines natriumgekühlten Reaktors ist sowohl unter Betriebs- als auch unter Unfallbedingungen sicherheitstechnisch relevant. Es beeinflusst nicht nur maßgeblich den Reaktivitätszustand, sondern kann auf thermohydraulischer Seite auch die Kühlmittelströmung, die Temperaturverteilung und die Wärmeübertragung beeinflussen. Letztere Effekte wurden zunächst nicht betrachtet, da ihre Einflüsse geringer sind als jene der neutronenphysikalischen Seite. Mit dem Code GeN-FOAM /FIO 15/ wurde einer der ersten Versuche unternommen, Ausdehnungseffekte sowohl

seitens der Neutronenphysik als auch seitens der Thermohydraulik zu betrachten, indem Ausdehnungseffekte der Fast Flux Test Facility (FFTF), einem natriumgekühlten Reaktor mit einer thermischen Leistung von 400 MW, simuliert wurden /FIO 19/.

In diesem Vorhaben soll ATHLET dafür vorbereitet werden, thermische Ausdehnungseffekte simulieren zu können. Im Rahmen dieses Vorhabens wird zunächst untersucht werden, wie groß der Einfluss thermischer Strukturausdehnungen auf die Thermohydraulik ist. Zu diesem Zweck wurde eine ATHLET-Modellerweiterung entwickelt, die radiale Strukturausdehnungen simuliert, indem es die geometrischen Abmessungen und die thermisch-hydraulischen Parameter aufgrund der jeweils vorherrschenden Temperaturverhältnisse dynamisch verändert. Dieses Modell und stationäre sowie transiente Testrechnungen werden nachfolgend beschrieben.

6.1.1 Theoretische Beschreibung

Das Wärmeausdehnungs-Modell (WA) basiert auf einem porösen Medium-Ansatz. Durch die Bestimmung der Radialverschiebung werden die Ausdehnungen des Brennstoffpellets und des Hüllrohrs in radialer Richtung berechnet.

Das durchschnittliche volumetrische Wärmeausdehnungsverhältnis in jedem ATHLET-Kontrollvolumen wird basierend auf zylindrischer Geometrie folgendermaßen bestimmt:

$$\overline{\Delta L/L_f} = \frac{\int \Delta L/L_f r dr}{\int r dr} = \frac{\int_{R_{i,f}}^{R_{o,f}} \alpha_f \Delta T_{r,f} r dr}{\int_{R_{i,f}}^{R_{o,f}} r dr} = \frac{\int_{R_{i,f}}^{R_{o,f}} \alpha_f \Delta T_{r,f} r dr}{0.5(R_{o,f}^2 - R_{i,f}^2)} \quad (6.1)$$

$$\overline{\Delta L/L_c} = \frac{\int \Delta L/L_c r dr}{\int r dr} = \frac{\int_{R_{i,c}}^{R_{o,c}} \alpha_c \Delta T_{r,c} r dr}{\int_{R_{i,c}}^{R_{o,c}} r dr} = \frac{\int_{R_{i,c}}^{R_{o,c}} \alpha_c \Delta T_{r,c} r dr}{0.5(R_{o,c}^2 - R_{i,c}^2)} \quad (6.2)$$

Dabei ist r die radiale Koordinate im Brennstoff und Hüllrohr, ΔL und L sind die ausgehende und ursprüngliche (bei Fertigungstemperatur von 20 °C) Längen, ΔT_r ist die Änderung der radialen Temperaturverteilung am Ort r , α ist der Wärmeausdehnungskoeffizient, R_i und R_o geben den Innen- und Außenradius an. Die Indizes f und c bezeichnen den Brennstoff (fuel) bzw. das Hüllrohr (cladding).

Die thermischen Ausdehnungskoeffizienten des Brennstoffs (hier: UO_2) und des Hüllrohrs (spezielle Edelstahllegierung) werden als Funktion der Temperatur mit dimensionslosen Konstanten a , b und c beschrieben:

$$\alpha_{\text{UO}_2} = a + bT + cT^2 + dT^3 \quad (6.3)$$

Die Koeffizienten a , b , c und d sind wie folgt definiert:

$$\begin{cases} a = 9.828 \cdot 10^{-6}, b = -6.39 \cdot 10^{-10}, c = 1.33 \cdot 10^{-12}, d = -1.757 \cdot 10^{-17}, & 273\text{K} < T < 923\text{K} \\ a = 1.1833 \cdot 10^{-5}, b = -5.013 \cdot 10^{-9}, c = 3.756 \cdot 10^{-12}, d = -6.125 \cdot 10^{-17}, & T \geq 923\text{K} \end{cases}$$

$$\alpha_{\text{Steel}} = 15.046 \cdot 10^{-6} + 5.082 \cdot 10^{-9}T + 1.014 \cdot 10^{-12}T^2 \quad (6.4)$$

Unter Berücksichtigung der zylindrischen Geometrie kann die neue Porosität des Kontrollvolumens aufgrund der Verformung der Brennelemente in jedem Zeitschritt wie folgt bestimmt werden:

$$p' = p \cdot \left(1 - \frac{R'_{o,c}{}^2 - R_{o,c}{}^2}{R_{o,c}{}^2} \right) \quad (6.5)$$

Dabei p ist die Porosität des Kontrollvolumens.

Die Parameter im TFD-(Thermo-Fluid-Dynamik)-Modul, wie hydraulischer Durchmesser, Querschnittsfläche und Durchflussvolumen im Kontrollvolumen und in der Verbindungsstelle, werden dann entsprechend den aktuellen Flüssigkeits- und Feststofftemperaturen in jedem Kontrollvolumen aktualisiert.

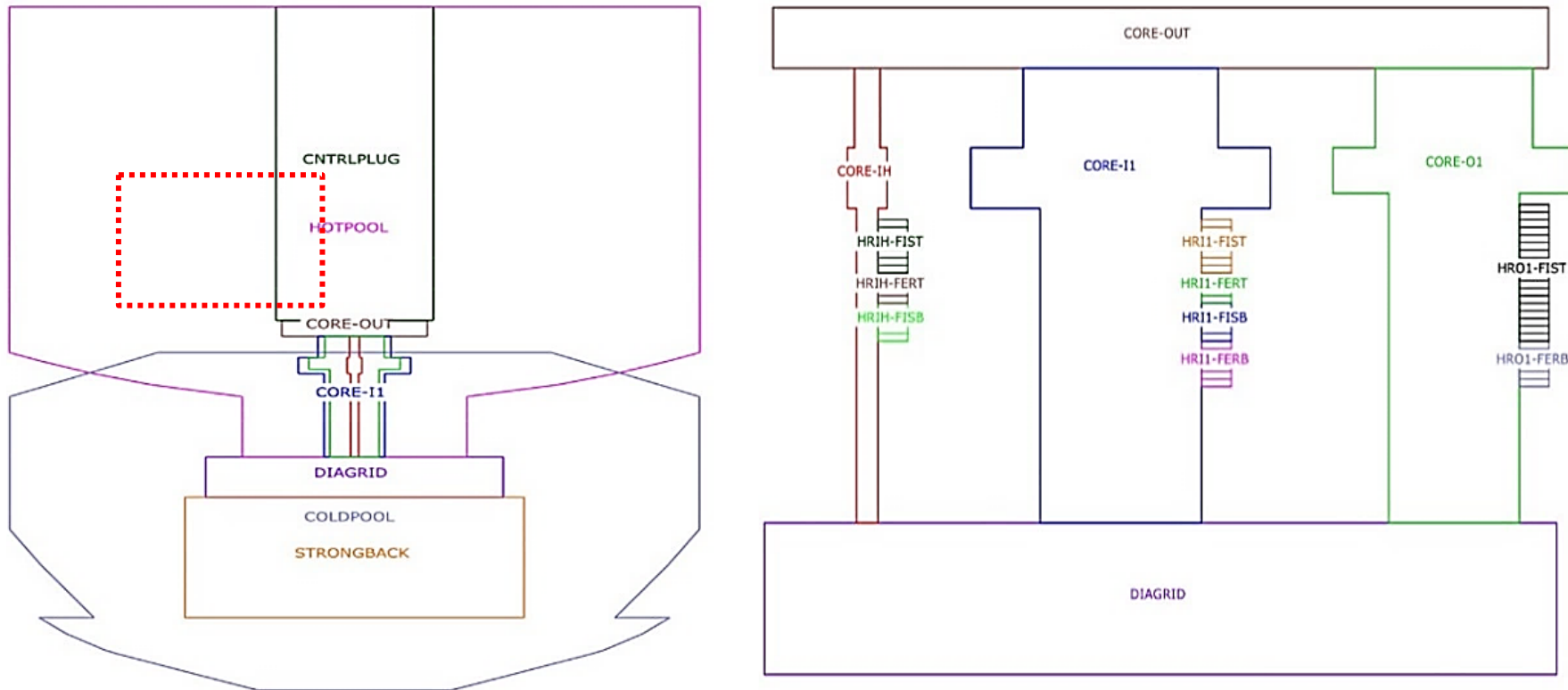


Abb. 6.1 Die TFO⁶- und HCO⁶-Nodalisierung des Systems für ATHLET

⁶ TFO: Thermo Fluid Object; HCO: Heat Conduction Object

6.1.2 Numerische Simulation

Die nachfolgend beschriebenen numerischen Simulationen werden anhand des ATHLET-Modells eines ASTRID-ähnlichen Reaktorkerns durchgeführt, das auf der vorherigen Arbeit des EU-Projekts ESNII+ basiert und von der GRS im Rahmen des Vorhabens RS1547 (INNOSYS) /SEU 19b/ entwickelt wurde.

Der Kern des ASTRID-Konzepts besitzt im Nominalzustand eine thermische Leistung von 1500 MW. Abb. 6.1 zeigt die Thermo-Fluiddynamic-Objects (TFO) Nodalisierung zur Darstellung des Kühlmittelsystems sowie die Heat-Conduction-Objects (HCO) im Kernbereich zur Berücksichtigung der Wärmeerzeugung, -leitung und -übertragung zwischen Brennstoff und Natrium-Kühlmittel. Der Rechenbereich umfasst hauptsächlich die inneren und äußeren Kernkanäle, Strongback, Diagrid und Steuerelemente sowie Wärmetauscher und Pumpe /BOU 18/. Drei Brennelemente mit der höchsten Leistungsdichte (Heißkanäle) im inneren Bereich werden einzeln ausgewählt und berechnet, die in den folgenden Abbildungen als „IH-Kanäle“ (IH = Inner Hot) abgekürzt werden.

Das verwendete Berechnungsmodell basiert auf dem bisherigen ATHLET-Modell, das im Rahmen des EU-Projekts ESNII+ von der GRS entwickelt und eingesetzt wurde /SEU 19a/. Die Kernspezifikation entspricht dem Nuklidinventar des Zustands am Zyklusende (End of Cycle, EOC). Bei den Simulationen sind zwei Ziele zu berücksichtigen. In der ersten Phase geht es darum, einen stationären Zustand zu erreichen. In der zweiten Phase wird eine Strömungsverlusttransiente aufgrund eines Pumpenausfalls ähnlich dem ULOF-Szenario (*Unprotected Loss Of Flow*) simuliert. Die Auswirkungen des neu entwickelten Wärmeausdehnungs-Modells auf die thermohydraulischen Parameter werden unter diesen beiden Bedingungen untersucht.

6.1.2.1 Stationäre Berechnungen

Vor der transienten Berechnung wird die Wirkung des Wärmeausdehnungs-Modells anhand von drei ausgewählten Fällen im stationären Zustand numerisch verifiziert. Im ersten Fall (Fall 1) werden die geometrischen Parameter des Kerns, wie die Durchmesser des Brennstoffpellets und des Hüllrohrs, im jeweiligen Fertigungszustand (kalter Zustand, 20 °C) beibehalten und das Wärmeausdehnungs-Modell deaktiviert. Der zweite Fall (Fall 2) entspricht Fall 1, jedoch mit aktiviertem Wärmeausdehnungs-Modell. Im dritten Fall (Fall 3) wird die geometrische Dimension bei deaktiviertem Wärmeausdehnungs-Modell im ATHLET-Modell explizit entsprechend der aktuellen Temperatur

verändert. Andere Vorgaben wie axiale Leistungsverteilung, Druckdifferenz und Einlassmassenstrom des Natriums, die in diesen Fällen angewendet werden, sind identisch. Die Kerneintrittstemperatur beträgt 400 °C. Die Berechnungszeit ist auf 86400 s (1 Tag) eingestellt, um den thermohydraulischen Effekt für die Berechnung im stationären Zustand zu bewerten. Es ist zu beachten, dass die nicht-erweiterte Berechnung ohne Wärmeausdehnungs-Modell im Fall 1 als Vergleichsreferenz dient und kein realistischer Fall ist.

Wie in Tab. 6.1 dargestellt, werden die Temperaturen in der Brennstabmitte, an der Hüllrohroberfläche und die Fluidtemperatur für Natrium am Auslass der Kanäle sowie die Massenströme für die drei Fälle verglichen. Die Abweichung der Simulationsergebnisse für die drei Fälle ist gering und beträgt weniger als 1 %. Dies ist ein Hinweis darauf, dass das Wärmeausdehnungs-Modell für stationäre Bedingungen konsistente Ergebnisse liefert.

Tab. 6.1 Die thermisch-hydraulischen Parameter der drei im Text beschriebenen Fälle im stationären Zustand

Parameterergebnisse verschiedener Positionen im Kern	Nicht erweiterte Geometrie ohne Wärmeausdehnungs-Modell (Fall 1)	Nicht erweiterte Geometrie mit Wärmeausdehnungs-Modell (Fall 2)	Explizit erweiterte Geometrie ohne Wärmeausdehnungs-Modell (Fall 3)
Temperatur in der Brennstabmitte in den IH-Kanälen (°C)	1301,4	1296,8	1305,5
Temperatur an der Hüllrohroberfläche in den IH-Kanälen (°C)	473,9	473,8	477,1
Temperatur des Na-triums am Auslass der IH-Kanäle (°C)	549,2	548,9	550,0
Massenstrom am Auslass der IH-Kanäle (kg/s)	89,7	89,9	89,8
Temperatur in der Brennstabmitte in den äußeren Kanälen (°C)	594,9	594,9	595,3
Temperatur an der Hüllrohroberfläche in den äußeren Kanälen (°C)	404,8	404,8	405,0
Temperatur des Na-triums am Auslass der äußeren Kanäle (°C)	550,7	550,9	550,1
Massenstrom am Auslass der äußeren Kanäle (kg/s)	2752,3	2748,2	2780,6

6.1.2.2 Transiente Berechnung: Strömungsverlustszenario

In diesem Fall beginnt der Auslauf der Primärpumpe bei 0,0 s, dem Zeitpunkt des Beginns der Transiente. Danach verschlechtert sich die Kernkühlung drastisch und das Natrium erhitzt sich, bis es zum Sieden kommt. Außerdem steigen die Brennstoff- und Hüllrohrtemperaturen deutlich an, was aufgrund der Doppler-Rückkopplung zu einer abnehmenden Kernleistung führt. Die Berechnungszeit beträgt 300 s.

Abb. 6.2 zeigt als Beispiel die Temperaturentwicklung in der Brennstabmitte an der obersten Position der Brutzone im IH-Kanal, Abb. 6.3 die entsprechenden Temperaturentwicklungen in den äußeren Kernkanälen. Der Temperaturanstieg tritt nur im IH-Kanal auf. Im äußeren Kanalbereich sinkt die Brennstofftemperatur am Ende der Berechnung auf 430 °C, einhergehend mit abnehmender Leistung. Im IH-Kanal führt das Wärmeausdehnungs-Modell zu einem langsameren Temperaturanstieg nach dem Natriumsieden bei 120 s und etwa 600 °C niedriger als im Fall 1 und schließlich 200 °C niedriger als im Fall 3. Die sinkende Brennstofftemperatur gegen Ende der Analyse ist eine Folge der geringeren Kernleistung aufgrund von Strukturrückkopplungen. Es ist zu beachten, dass Fall 3 diesen Effekt behandelt, indem die temperaturbedingte geometrische Ausdehnung explizit als konstante Randbedingung berücksichtigt wird. Andererseits hat die transiente Geometrieausdehnung einen erheblichen Einfluss auf die Ergebnisse und kann nur mit dem Wärmeausdehnungs-Modell sinnvoll erfasst werden. Ein Vergleich von Fall 2 und Fall 3 ist nur bedingt möglich, da im Fall 3 die geometrischen Verhältnisse während der Transienten festgelegt waren, im Fall 2 diese jedoch aufgrund des Wärmeausdehnungs-Modells in jedem Zeitschritt berechnet und angepasst werden. Insgesamt entsprechen die mit ATHLET erzielten Ergebnisse den Erwartungen für ein solches Szenario und der damit verbundenen Physik und unterscheiden sich qualitativ nicht von Ergebnissen mit anderen Codes für ein vergleichbares Szenario /BUB 22/. Vor dem Natriumsieden stimmen die Brennstofftemperaturen in unserer Berechnung mit denen in der vorherigen Arbeit überein /BUB 22/. Danach sind die hohen Temperaturwerte auf den Verlust der Wärmeabfuhr zurückzuführen.

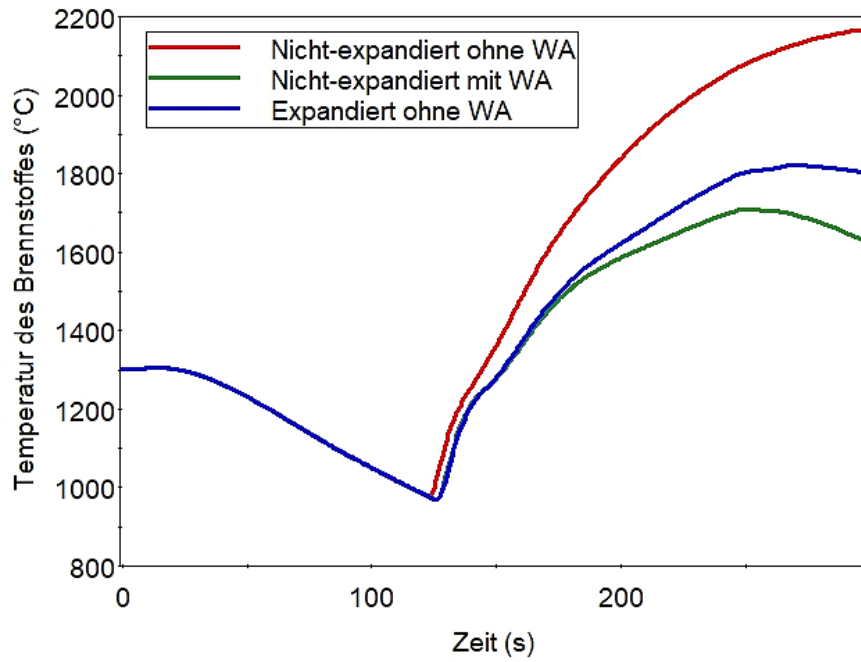


Abb. 6.2 Die lokalen Temperaturen des Brennstoffs an der Spitze im IH-Kanal

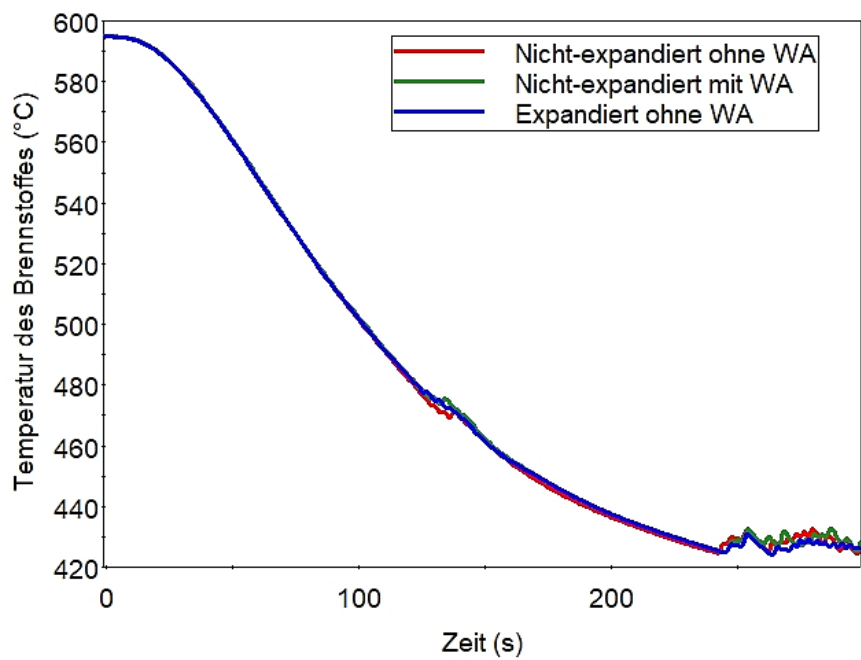


Abb. 6.3 Die lokalen Temperaturen des Brennstoffs an der Spitze in den äußeren Kernkanälen

6.2 Unterkanalmodellierung des CEFR-Brennelements in ATHLET

Nodale 3D-Neutronenkinetik in Kopplung mit System-Thermohydraulik auf Brennelementebene repräsentieren in der Forschung eine etablierte Vorgehensweise. Wesentliche Akzeptanzkriterien für den sicheren Reaktorbetrieb sind jedoch nicht nodale, sondern lokale, d. h. stabweise aufgelöste (Pin-by-pin-)Größen wie maximale lokale Stablängenleistung, maximale Brennstofftemperatur, maximale Hüllrohrtemperatur etc. Zur besseren Bestimmung lokaler Parameter sind daher hochaufgelöste (sog. *high fidelity*) gekoppelte Multiphysik-Simulationen in Stab- bzw. Unterkanal-Darstellung erforderlich, um lokale Phänomene möglichst realitätsgetreu zu modellieren und – in Verbindung mit Unsicherheitsanalysen – Aussagen zu Sicherheitsmargen zu erhalten.

International gibt es intensive Aktivitäten zur Entwicklung gekoppelter hochauflösender Multiphysik-Rechenmethoden, insbesondere zur Simulation von LWR, aber auch von Konzepten der Generation IV und anderen innovativen Systemen. Ein Beispiel ist die MOOSE-Umgebung (Multiphysics Object-Oriented Simulation Environment), die in den USA federführend am Idaho National Laboratory (INL) entwickelt wird /MAR 21/. Bei MOOSE handelt es sich um eine objektorientierte C++-Finite-Elemente-Umgebung für die Entwicklung miteinander gekoppelter Multiphysik-Simulationscodes. Ein anderer relevanter, am KIT angesiedelter Entwicklungstrend ist das gekoppelte Codesystem Serpent/SUBCHANFLOW /FER 20/, welches u.a. im Rahmen des EU-Projekts McSAFE entwickelt wurde /HOO 20/. Serpent/SUBCHANFLOW zielt auf die hochauflösende gekoppelte Simulation von LWR der Generation II und III, wobei die Neutronenkinetik mit dem Monte-Carlo-Code Serpent /LEP 15/ und die Thermohydraulik mit dem Unterkanalcode SUBCHANFLOW /IMK 12/ simuliert wird.

In der GRS wurde in den vergangenen Jahren umfangreiches Know-how für die hochauflösende Simulation von Kernausschnitten (sog. Minikernen) von Leichtwasserreaktoren erarbeitet, und zwar in Form des gekoppelten 3D-Neutronentransport-Unterkanal-Codesystems TORT-TD/CTF /SEU 20a/, /PÉR 22/. Bei CTF handelt es sich um die weiterentwickelte Version CTF des Thermohydraulik-Unterkanal-Codes COBRA-TF zur Sicherheitsbewertung von DWR und SWR /AVR 20/. Ziel ist es, dieses Know-how auf die hochauflösende Simulation von Kernausschnitten von innovativen flüssigmetallgekühlten Konzepten, insbesondere SFR, zu übertragen. Auf neutronenkinetischer Seite wird hierfür die GRS-Entwicklung FENNECS eingesetzt, da TORT-TD für die Modellierung hexagonaler Strukturen nicht geeignet ist. Da von CTF bislang jedoch keine freigegebene Version für Natrium als Kühlmedium existiert, wurde zunächst ATHLET eingesetzt.

Zwar liegt der Einsatz von ATHLET für Pin-by-pin-Auflösung derzeit außerhalb des empfohlenen Anwendungsbereiches, doch erlaubt die unterkanalähnliche Modellierung von SFR-Brennelementen und Minikernen zumindest ein *Proof of Concept* für derartige hochauflösende Multiphysik-Modellierungsansätze. In Zukunft kann, sobald CTF für Natrium als Kühlmedium freigegeben und in der GRS verfügbar sein wird, die Kopplung FENNECS/ATHLET durch FENNECS/CTF ersetzt werden. Die zur Kopplung notwendigen programmtechnischen Arbeiten werden in einem jüngst angelaufenen Eigenforschungsvorhaben anhand der LWR-Version von CTF umgesetzt. Im Folgenden wird zunächst die ATHLET-Modellierung der aktiven Zone eines einzelnen CEFR-Brennelements im Detail beschrieben. Zur Überprüfung des ATHLET-Modells – insbesondere die Ermittlung der Grenzen der Anwendbarkeit von ATHLET – wurde parallel dazu ein detailliertes CFD-Modell für OpenFOAM entwickelt, welches als Referenz gilt, mit der die ATHLET-Ergebnisse verglichen werden. Im Anschluss wird das ATHLET-Einzelbrennelementmodell zur Simulation von CEFR-Kernausschnitten (Minikernen) mit sieben und 19 Brennelementen skizziert.

6.2.1 ATHLET-Modell eines CEFR-Brennelements in Unterkanaldarstellung

Die axial aktive Zone des CEFR-Brennelements mit dem hexagonalen Gitter aus 61 Brennstäben und dem entsprechenden Netzaufbau ist in Abb. 6.4 dargestellt, die die im hexagonalen Gitter angeordneten Brennstäbe und die Kanalwand zeigt. Um die Netzgenerierung zu vereinfachen, wurden der wendelförmige Drahtabstandshalter sowie weitere geometrische Faktoren vereinfacht durch geeignete Formverluste approximiert und in einer Sensitivitätsanalyse untersucht. Der axial aktive Brennstoffbereich hat eine Höhe von 0,450 m und darüberliegende Brutzone eine Höhe von 0,350 m. Die Kanalwand ist sechseckig mit einer Innenseitenlänge von 0,032678 m. Der Stabdurchmesser beträgt 0,006 m und die Stabgitterweite 0,00695 m.

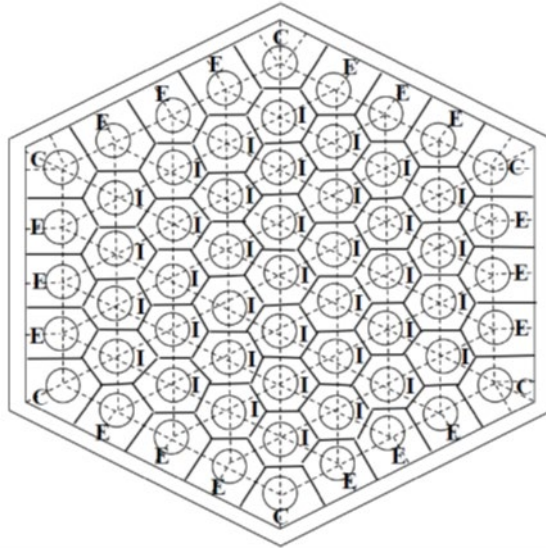


Abb. 6.4 Schematische Unterkanaldarstellung und ATHLET-Netzaufbau des 61-Pin-Gitters des CEFR-Brennelements

C steht für Eckkanal, E für Kantenkanal und I für innenliegenden Kanal.

Das ATHLET-Unterkanalmodell dieses Brennelements basiert auf einer früheren Arbeit /SEU 19a/, deren thermohydraulische und strömungsdynamische Modellierung auf ATHLET 3.2.1 beruht. Die parallelen Unterkanäle der Natriumströmung um die Brennstäbe, darunter 37 innere, 18 Rand- und sechs Eckkanäle, wurden durch einzelne thermofluidynamische Objekte (TFO) simuliert. Die Wärmeübertragung zwischen Brennstab und umgebendem Natrium-Kühlmedium wurde durch Wärmeleitungsobjekte (HCO) behandelt. Jedes TFO besteht aus 30 Kontrollvolumina über der axialen Höhe, um die Spalt- und Brut-Regionen darzustellen. Das vorliegende Modell übernahm alle Standardoptionsparameter von ATHLET. Es ist zu beachten, dass das für das 61-Pin-Modell verwendete Nodalisierungsschema vom Standardschema in anderen von Todreas & Kazimi /TOD 90/ diskutierten Unterkanalcodes abweicht. Der Grund liegt im aktuellen Stabmodell in ATHLET, bei dem ein HCO mit nur einem TFO gekoppelt werden kann. Es ist daher nicht möglich, einen Stab mit mehreren Unterkanälen wie bei reinen Unterkanalcodes zu koppeln. Dies stellt bereits eine wichtige Limitierung von ATHLET für Unterkanalsimulationen dar. Im ersten Schritt wurde für alle beheizten Strukturen, deren Geometrien aus Brennstoff- und Hüllrohrschichten bestehen, eine axial flache Leistungsdichte vorgegeben. Ein Auslasszweig legte eine geeignete Randbedingung fest, um die nominellen Auslegungsdurchsatzwerte des stationären Zustands im Normalbetrieb zu erreichen. Die Berechnungszeit von ATHLET beträgt etwa 150 s, um einen stationären Zustand zu erreichen.

6.2.2 ATHLET-Modell von CEFR-Minikernen in Unterkanaldarstellung

6.3 CFD-Modellierung des CEFR-Brennelements in OpenFOAM

Um das in Kapitel 6.2.1 beschriebene ATHLET-Modell zu überprüfen, wurde ein detailliertes Modell des Brennelements für den CFD-Code OpenFOAM /OPE 19/ entwickelt und hiermit numerische Simulationen durchgeführt, mit denen die ATHLET-Rechnungen verglichen werden.

Die Geometrievernetzung ist in Querschnitts- und Seitenansicht in Abb. 6.5 dargestellt. Das Netz wurde schrittweise verfeinert, bis Netzunabhängigkeit festgestellt wurde, d. h. die CFD-Ergebnisse ändern sich nicht mehr signifikant mit weiteren Verfeinerungen der Geometrievernetzung. Das so erhaltene Netz besteht aus insgesamt 483328 Maschen. Unter Berücksichtigung der stationären Situation wurden eine konstante Kühlmittel-Eintrittsgeschwindigkeit und eine konstante Druckdifferenz zwischen Brennelement-Einlass- und Auslass erreicht. Durch die Hüllrohr- und die Bypasswand wurden Wärmeströme von $892,8 \text{ kW/m}^2$ bzw. $31,7 \text{ kW/m}^2$ vorgegeben. Die turbulente Strömung wurde mit dem Standard- k - ε -SST-Modell simuliert. Analog zum ATHLET-Modell wurde der Effekt der wendelförmigen Draht-Abstandshalter auch im OpenFOAM-Modell vernachlässigt.

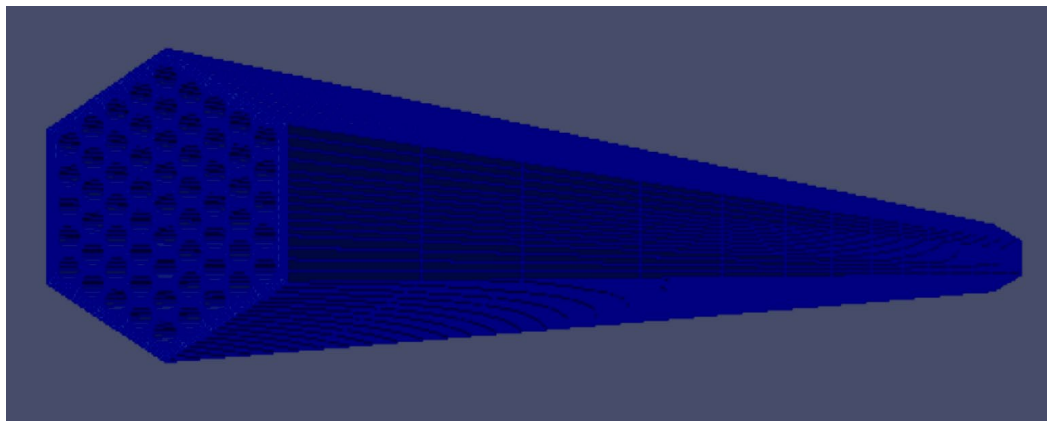
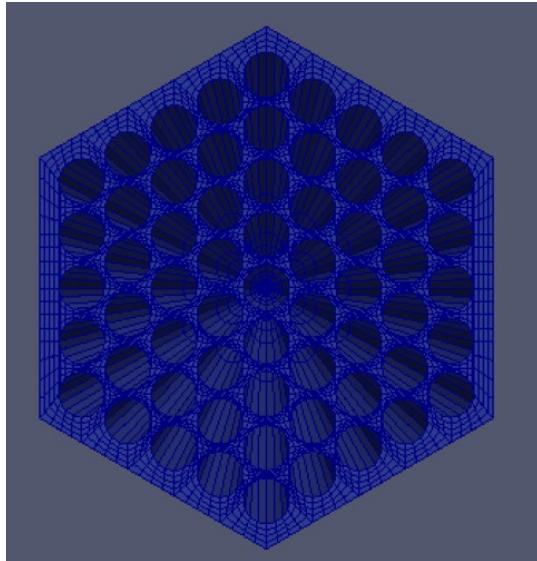


Abb. 6.5 Vernetzung des 61-Pin-CEFR-Brennelements in Querschnitts- und Seitenansicht

Die lokalen Strömungsparameter wie Kühlmitteltemperatur und Geschwindigkeitsverteilung in der Auslassebene sind in Abb. 6.6 und Abb. 6.7 dargestellt. Hieraus kann man symmetrische Verteilungen von Kühlmitteltemperatur und -geschwindigkeit erkennen, da der Effekt der Drahtwicklungen vernachlässigt wurde. Die maximalen Temperatur- und Geschwindigkeitsgrößen im gesamten Pin-Bereich erreichen 5,82 m/s und 900 K.

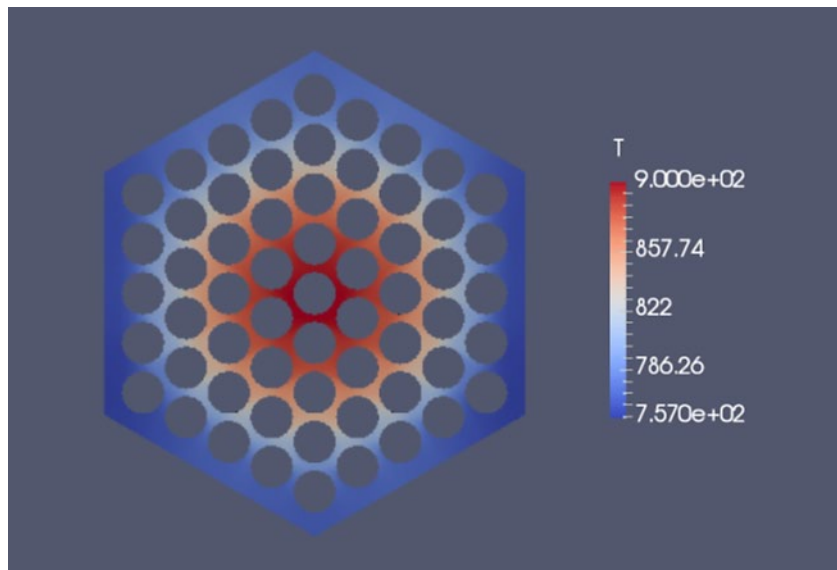


Abb. 6.6 Mit OpenFOAM berechnete Kühlmitteltemperaturverteilung in der Ebene des Kühlmittelaustritts.

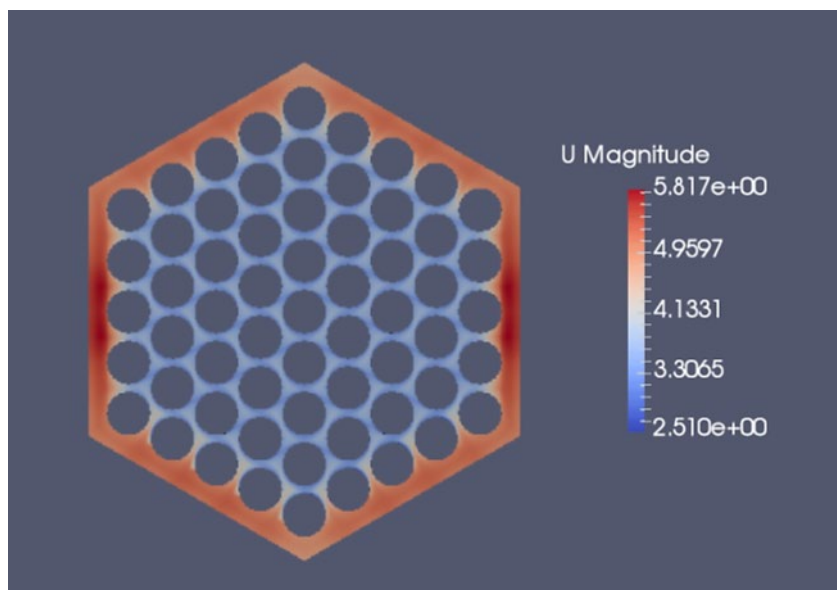


Abb. 6.7 Mit OpenFOAM berechnete Kühlmittelgeschwindigkeitsverteilung in der Ebene des Kühlmittelaustritts

Um die OpenFOAM-Ergebnisse mit jenen von ATHLET zu vergleichen, wurden die Temperatur- und die Axialgeschwindigkeitsverteilung des Kühlmittels gemäß den (gröberen) Unterkanalnetzen des ATHLET-Eingabemodells gemittelt. Die Amplituden in verschiedenen Unterkanälen an der Auslassposition unter stationären Bedingungen sind in Tab. 6.2 aufgeführt. Die von ATHLET erhaltenen Ergebnisse zeigen sehr ähnliche Temperaturverteilungen im inneren Unterkanalbereich, und die von OpenFOAM erhaltenen

Ergebnisse weisen auf einen großen Temperaturbereich von 899,1 K bis 811,6 K hin, was möglicherweise auf eine realistischere Mischströmungsvorhersage zwischen Stiften in radialer Richtung zurückzuführen ist. Für die Rand- und Eckkanäle wurden durch beide Codes ein ähnliches Strömungsverhalten ermittelt.

Tab. 6.2 Vergleich ausgewählter Parameter der ATHLET-Simulation mit dem OpenFOAM-CFD-Modell

Unterkanaltyp	ATHLET-Simulation		OpenFOAM-Simulation		
	Kühlmittel-Temperatur (K)	Axiale Kühlmittel-Geschwindigkeit (m/s)	Maximale Kühlmittel-Temperatur (K)	Minimale Kühlmittel-Temperatur (K)	Axiale Kühlmittel-Geschwindigkeit (m/s)
Innenkanal (I)	809,1	5,4	899,1	811,6	3,5
Kantenkanal (E)	777,4	4,0	771,0	762,4	4,8
Eckkanal (C)	762,3	4,1	771,4	765,7	4,5

6.4 Thermohydraulisches Modell des EFSR-Kerns in ATHLET

Zur Durchführung gekoppelter Simulationen des EFSR-Kerns mit FENNECS/ATHLET wurde ein thermohydraulisches Modell des Kerns in ATHLET /WIE 19b/ entwickelt, welches jedes Brennelement durch einen eigenen individuellen thermohydraulischen Kanal darstellt. Das Modell basiert auf den Spezifikationen, die im Rahmen des EU-Projekts EFSR-SMART erstellt wurden /RIN 18/. Eine Beschreibung der Kernanordnung ist in Kapitel 5.2 zu finden.

Abb. 6.9 zeigt die TFO- und HCO-Nodalisierung zur Modellierung der Wärmeleitung und -übertragung zwischen dem Brennstoff und Natrium-Kühlmittel. Der Rechenbereich umfasst die verschiedenen Brennelemente sowie deren Einlässe und Auslässe, beispielsweise das innere Brennelement Plc1x1, das äußere Brennelement POC9x1 sowie CDT PCDc0x0, CSD PCSc3x1, DSD PDS6x1, R1 PCRc13x1 und den Bypass PC_BY1. Für reine ATHLET-Simulationen, also nicht mit 3D-Neutronenkinetik gekoppelte Rechnungen, basiert die Leistungsdichteverteilung auf konstanten Vorgabewerten, die über Steuersignale im stationären Zustand angegeben sind. Die HIFEc1x1 und HIFlc1x1 sind die HCOs von Brut- und Spaltzonen der inneren Brennelemente. Die darin freigesetzte Wärme wird auf die inneren Kanäle übertragen. Die Wärmeübertragung erfolgt auch im

Bypass zwischen Plc1x1 und PC_BY1. In ähnlicher Weise repräsentieren die HCOs HOFec9x1 und HOFIc9x1 Brut- und Spaltzonen der äußeren Brennelemente sowie die Bypass Wärmeübertragung zwischen POc9x1 und PC_BY217.

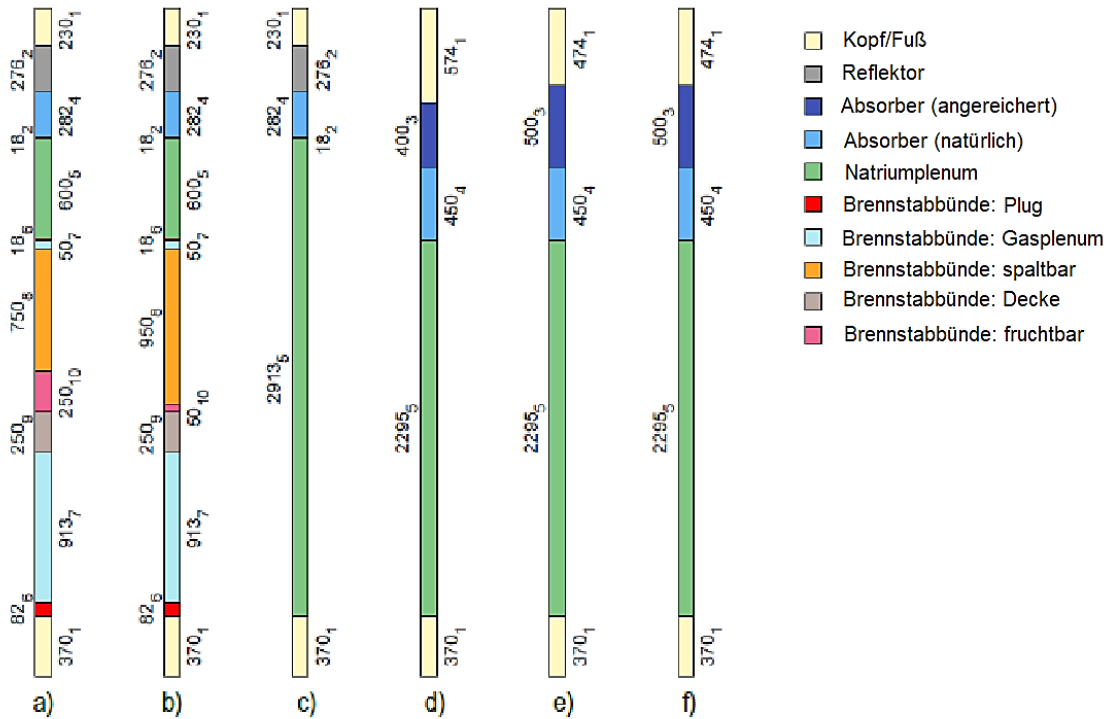


Abb. 6.8 Axiale Struktur der verschiedenen Elemente des ESFR -Kerns

a) Inneres Brennelement; b) äußeres Brennelement; c) CDT (Corium Discharge Tube); d) CSD (Control Shutdown Device); e) DSD (Diverse Shutdown Device); f) hydraulisch aktiviertes DSD-Element.

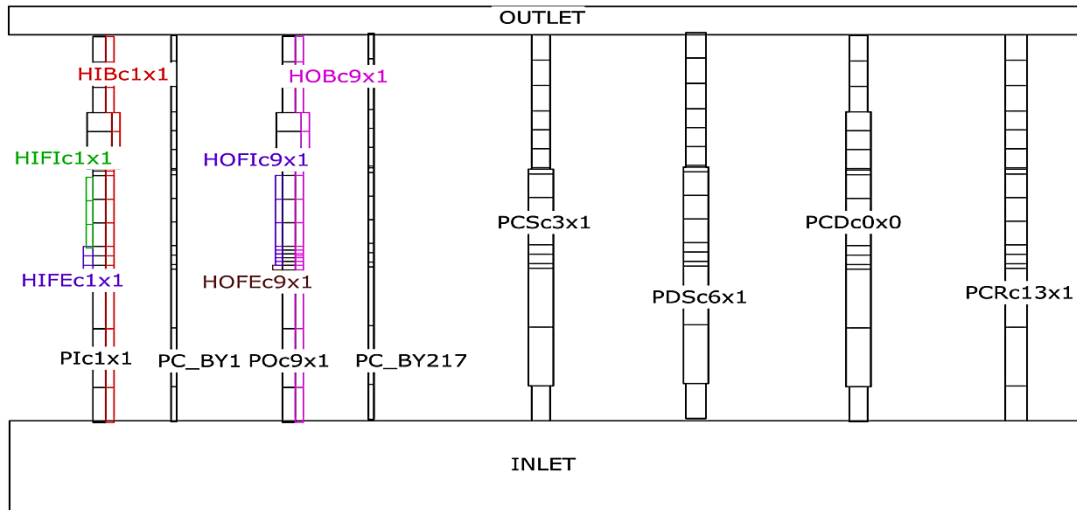


Abb. 6.9 Die TFO- und HCO-Nodalisierung des Kerns

Als Referenz wird der stationäre Zustand simuliert. Wie in Tab. 6.3 dargestellt, stimmen die generellen, bei der ATHLET-Simulation erhaltenen thermohydraulischen Parameter mit denen im ESRF-Kernauslegung überein.

Tab. 6.3 Die generellen thermohydraulischen Parameter im stationären Zustand

	Auslegung	Berechnung
Wärmeleistung (MWth)	3600	3600
Kerneinlasstemperatur (°C)	395	395
Kernauslasstemperatur (°C)	545	543,4
Kerndruckverlust (bar)	3,8	3,5
Massenstrom in inneren SA-Kanälen (kg/s)	40,8	40,9
Massenstrom in Außen SA-Kanälen (kg/s)	35,1	34,9
Massenstrom im CSD (kg/s)	5,9	6,0
Massenstrom im DSD (kg/s)	5,9	6,0
Massenstrom im R1 (kg/s)	0,1	0,3
Massenstrom im CDT (kg/s)	5,9	6,0

Um die Anwendbarkeit des Modells zu bewerten, werden die wichtigsten Parameter in der Berechnung als Natriumtemperaturen sowie Druckverlust durch die inneren und äußeren Brennelement-Kanäle quantitativ ausgewertet, wie in den Abb. 6.10 und Abb. 6.10 dargestellt. Abb. 6.10 zeigt die Temperaturanstiege durch die aktiven Zonen des Brennstoffs. Aufgrund des geringeren Massenstroms und des größeren Anteils an spaltbarem Brennstoff steigt die Natriumtemperatur im äußeren Bereich etwas schneller an als im

Inneren. Die Temperaturen am Auslass erreichen 544 °C im äußeren und 543 °C im inneren Bereich. Wie in Abb. 6.11 dargestellt, nehmen die Druckverluste über die Brennelement-Kanäle linear ab, wobei der Abfall in den aktiven Zonen etwas größer ist. Die ATHLET-Resultate sind physikalisch plausibel und ermöglichen den Einsatz dieses ATHLET-Modells in gekoppelten Simulationen mit FENNECS/ATHLET (siehe Kapitel 4.6).

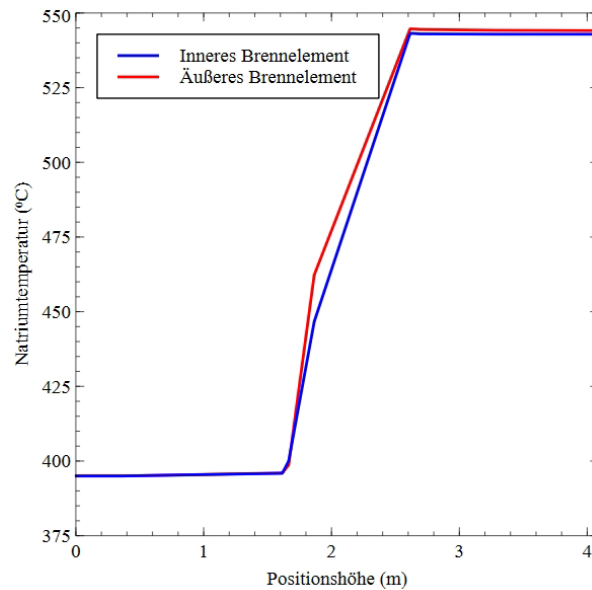


Abb. 6.10 Natriumtemperatur durch das innere Brennelement Plc1x1 und das äußere Brennelement POc9x1

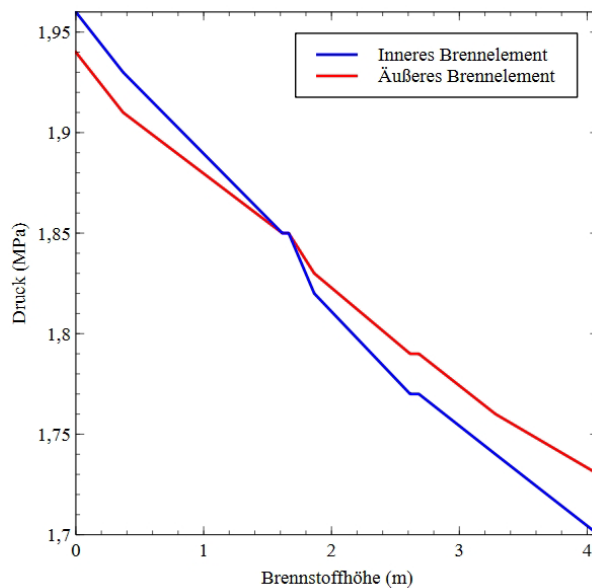


Abb. 6.11 Druckverlust über dem inneren Brennelement Plc1x1 und dem äußeren Brennelement POc9x1

6.5 Arbeiten zur Validierung von ATHLET für innovative Reaktorkonzepte

Zur Überprüfung neu implementierter oder überarbeiteter Modelle in ATHLET für innovative Reaktorkonzepte mit bspw. Flüssigmetallen ist eine breite Validierung notwendig, die in Form einer Validierungsmatrix sowohl zu berücksichtigende Phänomene wie auch Versuchsanlagen beinhaltet. Hierzu wurden die Phänomene identifiziert, die untersucht werden sollen, da sie für Flüssigmetalle eine wesentliche Rolle spielen und sich teilweise deutlich von denen in Leichtwasserreaktoren unterscheiden. Des Weiteren wurden Versuchsanlagen identifiziert, die sich mit der Untersuchung von Flüssigmetallen und Gasen befassen und die relevanten Phänomene abbilden. Hierbei war eine wesentliche Aufgabenstellung zu prüfen, ob die entsprechenden Anlagen in Betrieb waren, sind oder zukünftig eingesetzt werden, so dass auch die experimentellen Ergebnisse für die Bewertung von Simulationsergebnissen verfügbar sind bzw. gemacht werden können. Basierend auf den identifizierten Phänomenen und den Versuchsanlagen, die diese abbilden, wurden vertiefte Analysen bzw. Aufarbeitungen durchgeführt, um eine breite Validierungsmatrix für innovative Reaktorkonzepte mit Flüssigmetallen zu etablieren.

Folgende Phänomene wurden für flüssigmetallgekühlte Reaktorkonzepte als wesentlich identifiziert, die in experimentellen Anlagen bzw. Versuchsreihen direkt oder indirekt abgebildet wurden und werden (vgl. /GUO 20/).

- Druckverlust
- Naturkonvektion
- Wärmeübergang zwischen Brennstabhüllrohr und Kühlmedium
- Pumpenauslaufen
- Naturumlauf
- Sieden des Kühlmediums
- Temperaturabhängigkeit der mechanischen und thermischen Materialeigenschaften des Kühlmediums
- Strömungsblockade
- Wärmeübergang zwischen Kühlmedium und umgebenden Strukturen

Zur Erstellung einer Validierungsmatrix wurden grundsätzlich folgende Experimente mit Schwerpunkt Natrium als geeignet identifiziert, da in diesen Anlagen bzw. Versuchsreihen in den Anlagen die oben beschriebenen Phänomene direkt oder indirekt abgebildet wurden oder werden. Die Datenverfügbarkeit ist allerdings noch fortlaufend überprüfen. Eine detailliertere Beschreibung der Anlagen und der darin untersuchten Phänomene wird in /GUO 20/ und /FOR 19/ gegeben.

- ALINA (KIT-FZK)
- KASOLA (KIT-FZK)
- Liquid sodium facility NATAN (FZD)
- NADYNE (CEA)
- TTS (JAEA)
- Large Scale Sodium Loop Complex -ATENA (JAEA)
- PLANDTL(JAEA)
- CYBL (SNL)
- JOYO (JAEA)
- JHR (CEA)
- CABRI (IRSN, betrieben von CEA)
- TREAT (INL)
- ACRR (SNL)
- MELT (JAEA)
- IGR (Kasachstan)
- CAFÉ (ANL)
- PLINIUS-KROTOS (CEA)
- MCCI (ANL)
- SURTSEY (SNL)
- PLINIUS-VULCANO (CEA)

- VERDON (CEA)
- MERARG (CEA)
- NACIE-UP (ENEA)

Zwei Versuchsanlagen NACIE-UP (LBE) und KASOLA (Natrium) bzw. ausgewählte Versuche oder Szenarien hieraus wurden für Validierungsrechnungen im Rahmen des Freigabeprozesses von AC² (u. a. AC² 2021) wiederholt simuliert. Die Experimente basieren auf zuvor durchgeführten Arbeiten zu KASOLA /HRI 15/ und NACIE-UP /FOR 19/ und fanden teilweise bereits Einzug in die Generation IV-Validierungsmatrix von ATHLET /HOL 21/, /HOL 22/. Die Ergebnisse mit ATHLET 3.3 als Teil von AC² 2021 zeigen eine ähnliche Qualität wie die vorigen Versionen /FOR 19/, /HRI 15/, an einzelnen Stellen traten aber insbesondere für NACIE-UP Verbesserungen auf. Da bei KASOLA aufgrund fehlender Messdaten lediglich ein Vergleich mit vorherigen ATHLET-Versionen bzw. dem Benchmark zu ASTEC aus 2015 zugrunde gelegt werden kann, erfolgte hier nur ein qualitativer Vergleich.

Die Analyse vorhandener Versuchsanlagen, die sich mit relevanten Phänomenen von flüssigmetallgekühlten (vornehmlich mit Natrium) Reaktoren zeigt, dass es eine Vielzahl von Anlagen gibt, die Datenverfügbarkeit und die Anwendungsbereiche aber weitergehend vertieft untersucht werden müssen, um eine verlässliche Validierungsmatrix für ATHLET im Programmsystem AC² aufstellen zu können. Hierbei sind auch Aktivitäten der OECD und IAEA zu berücksichtigen sowie dezidierte Projekte innerhalb der EU. Aufgrund der Teilnahme der GRS an EU-Vorhaben sowie der Kooperation mit KIT in Deutschland konnten erste Experimente bzw. Szenarien für den Freigabeprozess von ATHLET bzw. AC² zugrunde gelegt werden.

6.6 3D-Simulationen mit ATHLET/OpenFOAM – Beteiligung am EU-Projekt ESFR-SMART

Parallel zum vorliegenden Eigenforschungsvorhaben erfolgte die Teilnahme am EU-Projekt ESFR-SMART (European Sodium Fast Reactor Safety Measures Assessment and Research Tools). Als Folgeprojekt zum FP7 CP-ESFR-Projekt konzentriert sich ESFR-SMART auf die Ziele des GIF (Generation IV International Forum), die sich auf die Sicherheit beziehen, und steht im Einklang mit der ESNII-Roadmap. Das Projekt vereint ein Konsortium aus Forschungszentren, Industrien, Universitäten und TOSs und

zielt darauf ab, die Sicherheit von schnellen Natriumreaktoren (SFR) der Generation IV zu verbessern, insbesondere des europäischen schnellen Natriumreaktors (ESFR) in kommerzieller Größe. Das Projekt startete im September 2017, wurde Ende 2022 beendet und wurde vom Paul-Scherrer-Institut (PSI) koordiniert. Die GRS beteiligte sich als Koordinator von Task 1.3.4 (Assessment of core passive shutdown systems) und lieferte fachliche Beiträge in Task 1.2.2 (Safety and performance parameters at EOC) und Task 1.3.1. (Assessment of transition from forced to natural circulation). Im Rahmen von Task 1.3.1 wurde mit dem Code OpenFOAM /OPE 19/ ein dreidimensionales CFD-Modell des ESFR-Kerns inklusive Primärkreis entwickelt, um in Kopplung mit einem vom HZDR erstellten ATHLET-Primärkreismodells des ESFR eine PBSO-Transiente (Protected Station Blackout, Ausfall der Stromversorgung mit Reaktorschnellabschaltung) zu simulieren. In der gekoppelten OpenFOAM/ATHLET-Simulation wird OpenFOAM verwendet, um das obere und das untere Plenum des Primärkreislaufs zu simulieren /HER 21/. Die übrigen Teile des Primärkreises, d. h. der Kern, die IHXs, die Pumpen und das Kernbehälterkühlsystem werden von ATHLET simuliert. Außerdem werden die Sekundär- und Tertiärkreise von ATHLET simuliert. Ein weiteres wichtiges Ziel dieser Art von gekoppelter Modellierung und Simulation bestand darin, die Fähigkeit der für die Sicherheitsanalyse verwendeten Systemcodes, die komplexen Strömungsmuster während der betrachteten Transienten vorherzusagen, zu bewerten, indem ihre Vorhersagen mit genaueren CFD-Codes verglichen wurden. Tatsächlich macht die Pool-Konfiguration des ESFR-Primärsystems das 3D-Strömungsmuster und die Temperaturschichtung während des Übergangs von der erzwungenen Konvektion mit voller Leistung zu den Verhältnissen bei Naturumlauf getrieben durch die Zerfallswärme wichtig und stellt daher entsprechende Anforderungen an die für die numerischen Berechnungen verwendeten Rechenverfahren und -codes. So zeigte der Vergleich zwischen den Ergebnissen von Systemcodes und OpenFOAM/ATHLET, dass zwar Grundkenngrößen wie die primäre Kernmassenstromdurchsatzrate und die Natriumtemperatur am Kernein- und -austritt konsistent sind. Es wurden aber Diskrepanzen zwischen Systemcodes und CFD-Codes erkennbar. Diese könnten durch die vereinfachten Modelle und Diskretisierungen erklärt werden, die in den Systemcodes verwendet werden, und das Ausmaß dieser Unterschiede stimmt mit den Abweichungen überein, die im Phenix End-of-Life Natural Convection Test beobachtet und analysiert wurden /MIK 21/.

7 AP 4: Verfolgung internationaler Aktivitäten zu neuen Reaktorkonzepten

Neben den in diesem Vorhaben schwerpunktmäßig betrachteten flüssigmetallgekühlten, insbesondere natriumgekühlten Systemen sollen hier zusätzlich relevante internationale Aktivitäten zu weiteren innovativen Reaktorkonzepten verfolgt werden. Dazu zählen die anderen Generation IV-Konzepte, z. B. gasgekühlte Hochtemperaturreaktoren (V/HTR) mit den Perspektiven SMR und nuklearer Kogeneration oder Salzschmelzreaktorkonzepte. Es ist zu erwarten, dass neue Forschungsergebnisse Anpassung und Erweiterungen der Neutronenkinetik- und Thermohydraulikcodes zur Sicherheitsbewertung erforderlich machen. Daher ist es notwendig, die internationale Entwicklung von Generation IV- und weiteren innovativen Reaktorkonzepten zu verfolgen und ggf. erforderlichen Handlungsbedarf für die Ertüchtigung der Rechenprogramme der GRS zur Sicherheitsbewertung – analog zur GRS SMR-Studie – zu identifizieren, um in Zukunft die Rechenprogramme der GRS zur Sicherheitsbewertung stets auf dem aktuellen Stand von Wissenschaft und Technik halten zu können.

Zu Beginn dieses Eigenforschungsvorhabens wurden einige öffentlich zugängliche Publikationen zu Mikroreaktoren recherchiert und analysiert. Dabei wurde der Schwerpunkt auf aktuelle internationale Trends zum Entwicklungsstand und F&E-Bedarf für neutronenphysikalische und thermohydraulische Rechenmethoden zur Simulation von Mikroreaktoren gelegt, um hieraus künftigen Weiterentwicklungsbedarf für die Rechenkette der GRS abzuleiten. Beispielhaft genannt sei hier ein Bericht von Los Alamos (LA-UR-19-22263) von Ch. Matthews et al. mit dem Titel "Evaluation of M&S tools for micro-reactor concepts" /MAT 19/ und der Journal-Artikel von Ch. Wang et al. mit dem Titel "Thermal-hydraulic analysis of a new conceptual heat pipe cooled small nuclear reactor system", welches in der Zeitschrift *Nuclear Engineering and Technology* erschienen ist (Band 52 (2020), Seiten 19-26, /WAN 20/).

Im Oktober 2021 fand die internationale Konferenz *International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering (M&C 2021)* statt. Für das vorliegende Vorhaben interessant waren Sitzungen zu den Themen *Modeling and Analysis of Multi-Physics Simulations* und *Multi-Physics Simulations of Reactor Systems*. Der Beitrag *Simplified Thermal Expansion Modeling for Liquid Metal-Cooled Fast Reactors* von der Universität von North Carolina beschreibt Modellsätze zur hochaufgelösten Simulation thermischer Ausdehnungseffekte in flüssigmetallgekühlten Reaktoren. Der Beitrag *First Approach to Analyze Control Rod Withdrawal*

Transient in SFR With a Multi-Physics Methodology der CEA beschreibt die gekoppelte Simulation des Steuerstabausfahrens im ASTRID-Konzept. Die Methoden ähneln denen, die im vorliegenden Vorhaben weiterentwickelt und angewandt werden, behandeln die Reaktordynamik jedoch nur mittels eines erweiterten Punktkinetikmodells. Der Beitrag *Multiphysics Simulation of the Molten Salt Fast Reactor Using Griffin and Pronghorn* des Idaho National Laboratory befasst sich mit der Multiphysik-Modellierung von Salzschnmelzereaktorkonzepten innerhalb der MOOSE-Umgebung (Multiphysics Object-Oriented Simulation Environment).

Im Mai 2022 fand die internationale Konferenz *Physics Of Reactors (PHYSOR 2022)* statt. Für das vorliegende Vorhaben interessant waren u. a. folgende Sitzungen:

- Multi-Physics Reactor Simulations and Validation (with OECD)
- Advanced Reactors Design and Analysis
- Neutronics Benchmark of CEFR Start-Up Tests

Beispielhaft seien folgende Beiträge genannt:

- T. M. Kiefer et al., Control Rod Modeling in Liquid Metal-Cooled Fast Reactors
- M. Massone et al., Genetic Algorithm-Based Optimisation of the Few-Group Structure for Lead Fast Reactors Analysis
- D. Holler et al., Phase I Specifications and Preliminary Sensitivity Analyses of the OECD-NRC Liquid Metal Fast Reactor Core Thermal-Hydraulics Benchmark

Im März 2022 fand die internationale Konferenz *19TH INTERNATIONAL TOPICAL MEETING ON NUCLEAR REACTOR THERMAL HYDRAULICS (NURETH 19)* statt. Für das vorliegende Vorhaben waren u.a. folgende Sitzungen von Interesse:

- LIQUID METAL THERMAL HYDRAULICS
- MULTI-SCALE ANALYSIS
- SPECIAL TOPICS, darin MICROREACTOR THERMAL HYDRAULICS

8 AP 5: Mitwirkung an der Fast Reactor Knowledge Preservation (FRKP) Initiative der IAEA

Die GRS beteiligte sich im Rahmen des Vorgänger-Eigenforschungsvorhabens RS1547 (INNOSYS) an der FRKP-Initiative der IAEA in Zusammenarbeit mit dem KIT als stellvertretende Kontaktinstitution. Die Hauptzielsetzungen der FRKP-Initiative sind es, einerseits dem drohenden Informations- und Kompetenzverlust zu schnellen Reaktorsystemen (FR) entgegenzutreten und andererseits existierendes Daten- und Informationsmaterial zu FR zusammenzutragen, zu sichten und verfügbar zu machen. Dies erfolgt über ein webbasiertes Portal.

Im Rahmen des vorliegenden Eigenforschungsvorhabens beteiligte sich die GRS an verschiedenen Aktivitäten der IAEA und auch europäischen Initiativen und konnte dadurch Zugang zu Informationen und Daten erhalten, die für RS1589 (INNOSYS-2) von Bedeutung waren und konkret genutzt werden konnten. Dazu zählt beispielsweise die Teilnahme am Coordinated Research Project (CRP) der IAEA zu den *Neutronic Start-Up Tests des China Experimental Fast Reactors* (siehe Kapitel 4 und 5.1), in dessen Rahmen die GRS nicht nur Experimentdaten zur Validierung ihrer neutronenphysikalischen Rechenwerkzeuge nutzen konnte (siehe Kapitel 4.5 und 5.2.4), sondern auf dessen Basis auch Weiterentwicklungen der Simulationscodes des GRS, insbesondere des Thermohydraulikcodes ATHLET, durchgeführt werden konnten (siehe Kapitel 6.1 und 6.2).

9 Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieses im GRS-Eigeninteresse durchgeführten Vorhabens wurden substantielle Arbeiten zur Weiterentwicklung der modernen Multiscale-Multiphysik-Rechenmethoden zur Sicherheitsbewertung innovativer Reaktorkonzepte durchgeführt. Diese hochaufgelösten (sog. *high fidelity*) gekoppelten Multiphysik-Simulationen in Stab- bzw. Unterkanal-Darstellung sind Voraussetzung für die besseren Bestimmung lokaler sicherheitstechnisch relevanter Parameter wie maximale lokale Stablängenleistung, maximale Brennstofftemperatur oder maximale Hüllrohrtemperatur. Die Rechenmethodik wurde durch Weiterentwicklungen des gekoppelten Neutronenkinetik-Rechencodes FENNECS/ATHLET sowohl auf reaktorphysikalischer als auch thermohydraulischer Seite realisiert. Die Entwicklungen und Rechenmodelle wurden durch Referenzrechnungen im Detail überprüft. Auf reaktorphysikalischer Seite wurde hierfür der Monte-Carlo-Code Serpent verwendet, auf thermohydraulischer Seite der CFD-Code OpenFOAM. Im Rahmen der thermohydraulischen Arbeiten konnte die begrenzte Einsatzfähigkeit von ATHLET zur unterkanalaufgelösten Simulation gezeigt werden. Für künftige thermohydraulische Berechnungen in Unterkanalauflösung ist daher die Flüssigmetall-Version des Unterkanalcodes CTF (CTF-Na) empfehlenswert, dessen Entwicklungszweig in diesem Vorhaben für die GRS in Verbindung mit ersten Testrechnungen verfügbar gemacht werden konnte. Mit diesen Arbeiten wurde die Grundlage dafür gelegt, dass in der GRS für LWR bereits vorhandene Know-how für hochauflösende gekoppelte Simulationen von Kernausschnitten auf innovative Reaktorkonzepte zu übertragen. Die Kopplung von FENNECS mit CTF wird im derzeit laufenden Eigenforschungsvorhaben UMRS1613 realisiert.

Eine weitere zentrale Aufgabe bestand in der Berücksichtigung temperaturbedingter Ausdehnungseffekte auf thermohydraulischer Seite. Diese wurden bislang nicht betrachtet, da sie im Gegensatz zur Neutronenphysik, bei der Ausdehnungseffekte eine große Rolle spielen, von geringerer Bedeutung sind. Im Rahmen dieses Vorhabens wurde ATHLET um ein Rechenmodell erweitert, das temperaturbedingte Ausdehnungseffekte zur Laufzeit von ATHLET berechnen kann. Es konnte mittels ATHLET- und gekoppelten FENNECS/ATHLET-Simulationen der Nachweis erbracht werden, dass die Berücksichtigung temperaturbedingter Ausdehnungseffekte auf thermohydraulischer Seite einen Einfluss auf die Simulationen haben und sie im Einzelfall einbezogen werden sollten.

Zur Verifikation und Validierung erfolgte unter anderem die Teilnahme am *Coordinated Research Project* der IAEA zu den *Neutronic Start-up-Tests des China Experimental Fast Reactors (CEFR)*. Darüber hinaus wurden reaktorphysikalische und thermohydraulische Modelle und zugehörige Simulationen des ESFR-Kerns durchgeführt, dessen Spezifikation im Rahmen des EU-Projekts ESFR-SMART erarbeitet wurde. Dieser Kern sowie die Minikernmodelle des CEFR wurden in Verbindung mit entsprechenden Monte-Carlo-Referenzmodellen außerdem dazu verwendet, die im GRS-Eigenforschungsvorhaben RS1576 entwickelte vereinfachte Transportmethode SP₃ im Detail zu überprüfen. Es konnte der erwartete Genauigkeitsgewinn durch die SP₃-Methode aufgezeigt werden.

Im Rahmen dieses Vorhabens wurde zudem ein Nachwuchswissenschaftler, der an diesem Projekt maßgeblich mitgewirkt hat, im November 2021 an der Technischen Universität Dresden mit einer Dissertation zum Thema *Development of Advanced Methods for Safety Assessment of Sodium Cooled Fast Reactors* zum Dr.-Ing. promoviert. Dies stellt einen konkreten Beitrag nicht nur zur Kompetenzerhaltung, sondern auch zur Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses auf dem Gebiet der nuklearen Sicherheitsforschung dar.

Ergänzend dazu wurden internationale Aktivitäten zu neuen Reaktorkonzepten verfolgt und dokumentiert, sofern diese für das vorliegende oder künftige Eigenforschungsvorhaben relevant waren. Außerdem wurde an internationalen Aktivitäten, beispielsweise der Internationalen Atomenergiebehörde (IAEA) oder der Sustainable Nuclear Energy Technology Platform (SNETP) teilgenommen, um an Benchmarks teilzunehmen oder für dieses oder künftige Eigenforschungsvorhaben relevante Informationen und Daten zu erhalten. Wesentliche Arbeiten und Ergebnisse des vorliegenden Vorhabens wurden in verschiedenen Veröffentlichungen publiziert und auf Konferenzen und anderen Veranstaltungen präsentiert.

Für künftige Weiterentwicklungen wurden folgende Aspekte identifiziert:

- Hochauflösende gekoppelte transiente Simulationsverfahren mit echter Unterkanal-Thermohydraulik durch Einsatz von FENNECS/CTF-Na zur Simulation sicherheitsrelevanter lokaler Phänomene.
- Kopplung FENNECS/OpenFOAM für künftige Simulationen mit Referenz-Fluid-dynamik.
- Simulation temperaturbedingter Ausdehnungseffekte auch in der Thermohydraulik.
- Fortführung der Validierung und Weiterentwicklung der ATHLET-Modelle für innovative Konzepte.

Diese Aspekte wurden in einer Vorhabensskizze /SEU 22d/ beschrieben, die im vergangenen Herbst vom Projektkomitee *Transienten und Unfallabläufe* positiv bewertet wurde. Die zugehörigen Arbeiten sind weitere wichtige Beiträge zu Kompetenzerhalt und -ausbau. Sie bilden zudem die Grundlage für die Simulationswerkzeuge der GRS zur Sicherheitsbewertung innovativer Reaktorkonzepte, die nach neuestem Stand von Wissenschaft und Technik entwickelt und regelwerkskonform validiert werden.

10 **Ausgewählte Veröffentlichungen und Präsentationen**

J. Bousquet, R. Henry, A. Seubert, *3-D Transient Coupled Simulation of Superphénix with PARCS/ATHLET*, European Physical Journal Conferences 247:06034, January 2021, DOI:10.1051/epjconf/202124706034.

A. Seubert, R. Henry in: A. Ponomarev et al., *SPX Benchmark Part I: Results of Static neutronics*, Journal of Nuclear Engineering and Radiation Science, 2021.

A. Seubert, *Simulation of CEFR Neutronic Start-up Tests with FENNECS*, PHYSOR 2022: Making Virtual a Reality: Advancements in Reactor Physics to Leap Forward Reactor Operation and Deployment, Pittsburgh, USA, May 15–20, 2022.

A. Seubert, J. Bousquet, S. lo Muzio, G. Lerchl, L. Guo, *Recent developments and applications of PARCS, FENNECS and ATHLET to SFR safety assessment*, Spring 2022 CAMP Meeting, 18 May 2022.

A. Schaffrath, A. Wielenberg, R. Kilger, A. Seubert, *SMRs – overview, international developments, safety features and the GRS simulation chain*, Nuclear Energy Technology, <https://doi.org/10.1007/s11708-021-0751-2>

Dissertation J. Bousquet, Technische Universität Dresden, November 2021:
Development of advanced methods for safety assessment of sodium cooled fast reactors.

A. Seubert, S. lo Muzio, J. Bousquet, R. Henry, *AC²/FENNECS – a Finite Element Diffusion and SP₃-based Coupled Code System for the Safety Assessment of SMRs, AMRs and Advanced Nuclear Systems*, SNETP Forum 2023, Göteborg, Schweden, May 15-17, 2023.

S. lo Muzio, A. Seubert, *Validation of the FENNECS SP₃ solver with control Rod Insertion Simulations of the ESFR using Serpent cross sections*, M&C 2023 - The International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering, Niagara Falls, Ontario, Canada, August 13 – 17, 2023.

L. Guo, A. Seubert, P. Schöffel, *Numerical Evaluation of the Thermal-hydraulic Effect due to the Thermal Expansion Behavior of Fuel Subassembly*, 20th International Topical

Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-20), Washington, D.C. (USA), August 20–25, 2023.

Glossar

ADS	Accelerator-Driven System
ASTRID	Advanced Sodium Technological Reactor for Industrial Demonstration
ATHLET	Analyse der THERmohydraulik von LEcks und Transienten
BEPU	Best Estimate Plus Uncertainty
CEFR	China Experimental Fast Reactor
CFD	Computational Fluid Dynamics
COBRA-TF	COlant Boiling in Rod Arrays – Two Fluid
CRP	Coordinated Research Project
CTF	Weiterentwickelte Version von COBRA-TF
EOC	End Of Cycle
ESFR	European Sodium-cooled Fast Reactor
ESFR-SMART	European Sodium Fast Reactor Safety Measures Assessment and Research Tools
ESNII	European Sustainable Nuclear Industrial Initiative
EU	European Union
FENNECS	Finite ElemeNt NEutronicS
FRKP	Fast Reactor Knowledge Preservation
GCSM	General Control Simulation Module
GRS	Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit
HCO	Heat Conduction Object
IAEA	International Atomic Energy Agency
ICH	Inner Hot (innerer Heißkanal)
INL	Idaho National Laboratory
INNOSYS	INNOvative SYSteme
KIT	Karlsruher Institut für Technologie
LBE	Lead Bismut Eutectic
LFR	Liquid-metal cooled Fast Reactor
LWR	LeichtWassermoderierter Reaktor
MOOSE	Multiphysics Object-Oriented Simulation Environment
MYRRHA	Multi-purpose hYbrid Research Reactor for High-tech Applications

OpenFOAM	Open source Field Operation And Manipulation
PARCS	Purdue Advanced Reactor Core Simulator
pcm	per centi milli (10^{-5})
PEMTY	Python External Meshing Tool with Yaml input
SA	Subassembly
SFR	Sodium-cooled Fast Reactor
SMR	Small Modular Reactor
SNETP	<i>Sustainable Nuclear Energy Technology Platform</i>
TFD	Thermo-Fluid-Dynamik
TFO	Thermo Fluid Object
TORT-TD	Three-dimensional Oak Ridge Transport - Time-Dependent
ULOF	Unprotected Loss Of Flow
USA	United States of America
V/HTR	Very High Temperature gas-cooled Reactor
Voideffekt	Reaktivitätseffekt infolge Kühlmittelverdrängung
WA	Wärmeausdehnungs-Modell

Abbildungsverzeichnis

Abb. 4.1	Links: Kernanordnung des CEFR. Rechts: Axiale Abschnitte der verschiedenen Brenn- und Steuerelementtypen. Die Längenangaben gelten für 20 °C /IAE 18/	15
Abb. 4.2	CEFR-Brennelement in Serpent mit Kennzeichnung der drei Stabzelltypen. Rot: Kantenzellen, grün: Eckzellen, blau: innenliegende Zellen.....	16
Abb. 4.3	Modell eines CEFR-Brennelements in FENNECS. Verschiedene Wirkungsquerschnittsbibliotheken sind in verschiedenen Farben dargestellt.....	18
Abb. 4.4	FENNECS-Modell eines CEFR-Minikerns mit sieben Brennelementen	19
Abb. 4.5	FENNECS-Modell eines CEFR-Minikerns mit 19 Brennelementen	20
Abb. 4.6	Von Serpent berechnete radiale stabweise Leistungsverteilung (a) und zugehörige Verteilung der statistischen Unsicherheiten (b) für allseits Vakuum-Randbedingungen	22
Abb. 4.7	Wie Abb. 4.6, jedoch für allseits reflektierende Randbedingungen.....	23
Abb. 4.8	Relative Abweichung der Stableistungsverteilung des Minikernmodelle bei allseits Vakuum-Randbedingungen: a) Diffusionsnäherung, b) SP ₃ -Methode, Fall SP3F, c) SP ₃ -Methode, Fall SP3T ⁴	26
Abb. 4.9	Wie Abb. 4.8, jedoch für axial reflektierende und radial Vakuum-Randbedingung: a) Diffusionsnäherung, b) SP ₃ -Methode, Fall SP3F ⁴ , c) SP ₃ -Methode, Fall SP3T ⁴	27
Abb. 4.10	Wie Abb. 3.6, jedoch für allseits reflektierende Randbedingungen: a) Diffusionsnäherung, b) SP ₃ -Methode, Fall SP3F3, c) SP ₃ -Methode, Fall SP3T3.....	28
Abb. 4.11	Temperaturrampen als ATHLET-Randbedingung	30
Abb. 4.12	Zeitverläufe von Leistung und ausgewählter Temperaturen während der Transiente in einem CEFR-Brennelement infolge Absenkung der Eintrittstemperatur mit FENNECS/ATHLET	31
Abb. 4.13	Kühlmitteldichte am Brennelementaustritt im stationären Zustand	32
Abb. 4.14	Brennstofftemperatur am Brennelementaustritt am Ort ihres Maximums im stationären Zustand	33

Abb. 4.15	Zeitverläufe von Leistung und ausgewählter Temperaturen während der Transiente im Minikern aus 19 CEFR-Brennelementen infolge Absenkung der Eintrittstemperatur mit FENNECS/ATHLET.....	34
Abb. 5.1	Radiale Ansicht der Serpent-Modelle zur Wirkungsquerschnittsgenerierung.....	39
Abb. 5.2	Links: Materialverteilung und radiale Diskretisierung des deterministischen FENNECS-Modells des CEFR-Kerns in axialer Höhe von 61 cm. Rechts: Aktiver Kern mit Bezeichnung einzelner Kernpositionen.....	41
Abb. 5.3	FENNECS-Ergebnisse für das CEFR-Experiment <i>Fuel Loading and Criticality</i>	42
Abb. 5.4	Pfad, entlang dem das radiale Leistungsprofil von Abb. 5.5 berechnet werden soll	43
Abb. 5.5	Von FENNECS berechnetes radiales Brennelement-Leistungsprofil (durchgezogene rote Linie).....	43
Abb. 5.6	Von FENNECS berechnete Steuerstabwert-Wirksamkeiten (blau) im Vergleich mit Messungen (orange)	45
Abb. 5.7	Integrale Steuerstabwirksamkeiten für die acht verschiedenen Regulierungs- (RE), Shim- (SH) und Sicherheitsstäbe (SA).....	46
Abb. 5.8	Differentielle Steuerstabwirksamkeiten für die acht verschiedenen Regulierungs- (RE), Shim- (SH) und Sicherheitsstäbe (SA).....	47
Abb. 5.9	Mit FENNECS berechnete Natriumvoidreaktivitäten (blau) im Vergleich zu Messungen (orange). Fehlerbalken zeigen Messfehler an	48
Abb. 5.10	FENNECS-Ergebnisse (blau) für die Steuerstab-Austauschreaktivitäten bei Verschiebung eines einzelnen Steuerstabs	50
Abb. 5.11	FENNECS-Ergebnisse (blau) für die Steuerstab-Austauschreaktivitäten bei Verschiebung mehrerer Steuerstäbe	50
Abb. 5.12	Radiale Brennelementanordnung des ESFR-Kerns /RIN 18/	52
Abb. 5.13	Axiale Strukturen der Brennelemente der inneren (IF) und äußeren (OF) radialen Kernzone (graphische Darstellung von Serpent).....	53
Abb. 5.14	Serpent-Modell für ein Brennelement (links) und ein Steuerelement (rechts)	54

Abb. 5.15	Serpent-Modell des ESFR-Kerns.....	55
Abb. 5.16	Schnitt durch das ESFR-Modell in FENNECS	57
Abb. 5.17	Abweichung der von FENNECS berechneten Kernleistungsverteilung von Serpent	58
Abb. 5.18	Abweichung der integralen Steuerstabwirksamkeit des ESFR-Kerns gegenüber der Monte-Carlo-Referenz	59
Abb. 5.19	Mittlere quadratische Abweichung der Brennelement- Leistungsverteilung des ESFR-Kerns gegenüber der Monte-Carlo- Referenz.....	60
Abb. 5.20	Leistungsdichteverteilung des gekoppelten stationären Zustands auf axialer Höhe ihres Maximums ($z = 221,5$ cm über der Kernunterkante).....	62
Abb. 5.21	Brennstofftemperaturverteilung des gekoppelten stationären Zustands auf axialer Höhe ihres Maximums ($z = 221,5$ cm über der Kernunterkante).....	62
Abb. 5.22	Kühlmitteldichteverteilung des gekoppelten stationären Zustands in Höhe $z = 241,5$ cm über der Kernunterkante	63
Abb. 6.1	Die TFO- und HCO ⁶ -Nodalisierung des Systems für ATHLET	68
Abb. 6.2	Die lokalen Temperaturen des Brennstoffs an der Spitze im IH-Kanal.....	73
Abb. 6.3	Die lokalen Temperaturen des Brennstoffs an der Spitze in den äußeren Kernkanälen	73
Abb. 6.4	Schematische Unterkanaldarstellung und ATHLET-Netzaufbau des 61-Pin-Gitters des CEFR-Brennelements	76
Abb. 6.5	Vernetzung des 61-Pin-CEFR-Brennelements in Querschnitts- und Seitenansicht	78
Abb. 6.6	Mit OpenFOAM berechnete Kühlmitteltemperaturverteilung in der Ebene des Kühlmittelaustritts.....	79
Abb. 6.7	Mit OpenFOAM berechnete Kühlmittelgeschwindigkeitsverteilung in der Ebene des Kühlmittelaustritts	79
Abb. 6.8	Axiale Struktur der verschiedenen Elemente des ESFR -Kerns.....	81
Abb. 6.9	Die TFO- und HCO-Nodalisierung des Kerns	82
Abb. 6.10	Natriumtemperatur durch das innere Brennelement Plc1x1 und das äußere Brennelement POc9x1.....	83

Abb. 6.11 Druckverlust über dem inneren Brennelement Plc1x1 und dem
äußeren Brennelement POc9x1..... 83

Tabellenverzeichnis

Tab. 4.1	Parameter und ihre Stützstellen der stabzellhomogenisierten Wirkungsquerschnittsbibliothek.....	17
Tab. 4.2	Abweichung von der Serpent-Referenzreaktivität ($k_{\text{effexact}}=1.65639$) für den Fall der allseits reflektierender Randbedingungen für Diffusionsnäherung und SP ₃ -Methode von FENNECS.....	29
Tab. 4.3	Konvergenzverhalten von FENNECS/ATHLET für das Minikernmodell aus 7 Brennelementen und das einzelne Brennelement	32
Tab. 5.1	Für die makroskopischen Wirkungsquerschnittsdaten verwendete Energiegruppenstruktur	39
Tab. 5.2	FENNECS-Multiplikationsfaktoren für unveränderten ($a = 1$) und um den Faktor $a = 0,8$ reduzierte Absorberwirkungsquerschnitte des Absorberclusters.....	40
Tab. 5.3	Kernbeladungszustände und die jeweiligen Multiplikationsfaktoren. Die anderen sieben Steuerstäbe außer RE2 sind alle im Out-of-Core-Zustand	42
Tab. 5.4	Kernpositionen und Beladeinformationen für die Austausch-Reaktivitätsmessungen. „Fuel“ steht für Brennelement, „SS“ für Edelstahllement	49
Tab. 5.5	Kenngößen des ESFR unter Nominalbedingungen	51
Tab. 5.6	Für den ESFR-Kern verwendete Energiegruppenstruktur	55
Tab. 5.7	Parameter und ihre Stützstellen der parametrisierten Wirkungsquerschnittsbibliotheken für den ESFR-Kern.....	56
Tab. 5.8	Konvergenzverhalten von FENNECS/ATHLET für die Berechnung des gekoppelten stationären Zustands des ESFR-Kerns.....	61
Tab. 6.1	Die thermisch-hydraulischen Parameter der drei im Text beschriebenen Fälle im stationären Zustand.....	71
Tab. 6.2	Vergleich ausgewählter Parameter der ATHLET-Simulation mit dem OpenFOAM-CFD-Modell	80
Tab. 6.3	Die generellen thermohydraulischen Parameter im stationären Zustand	82

Literaturverzeichnis

- /ABA 23/ Abarca, A., Avramova, M.: Summary of CTF's Developments and Applications at NCSU, 9th CTF User's Group Meeting. Präsentation: Bologna (Italy), 2023, May 22-23.
- /AUS 21/ Austregesilo, H., Lee, J., Schöffel, P. J., Skorek, T., Cron, D. von der, Weyermann, F., Wong, K. W.: ATHLET 3.3 Models and Methods. GRS-P-1/Vol. 4 Rev. 6, November 2021.
- /AVR 20/ Avramova, M.: Developments in thermal-hydraulic sub-channel modeling for whole core multi-physics simulations. Nuclear Engineering and Design, Bd. 358, S. 110387, DOI 10.1016/j.nucengdes.2019.110387, 2020.
- /BEC 10/ Becker, M., van Crieelingen, S., Broeders, C.: KANEXT, a tool for nuclear reactor calculations. KIT, 40 S., 2. November 2010.
- /BOU 18/ Bousquet, J., Seubert, A., Sarkadi, P.: 3-D coupled PARCS/ATHLET simulation of SFR using an explicit radial expansion model. In: Sociedad Nuclear Mexicana: PHYSOR 2018: reactor physics paving the way towards more efficient systems, 22-26 April 2018, Cancun, Mexico. 2018.
- /BOU 19/ Bousquet, J., Seubert, A., Henry, R.: 3-D COUPLED PARCS/ATHLET TRANSIENT SIMULATION 3-D COUPLED PARCS/ATHLET TRANSIENT SIMULATION OF SFR USING DETAILED EXPANSION MODELING. In: Proceedings of M&C 2019. International Conference on Mathematics Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering (M&C 2019), Portland, OR, USA, 25. - 29. August 2019, 2019.
- /BOU 21/ Bousquet, J.: Development of advanced methods for safety assessment of sodium cooled fast reactors, Dissertation, Technische Universität Dresden, Fakultät für Maschinenwesen Institut für Energietechnik, Professur für Wasserstoff- und Kernenergietechnik. 161 S., 2021.
- /BRA 00/ Brantley, P. S., Larsen, E. W.: The Simplified P3 Approximation. Nuclear Science and Engineering, Bd. 134, Nr. 1, S. 1–21, DOI 10.13182/NSE134-01, 2000.

- /BUB 22/ Bubelis, E., Schikorr, M., Mikityuk, K.: Evaluation of the Passive Reactor Shutdown System Performance in European Sodium Fast Reactor. *Journal of Nuclear Engineering and Radiation Science*, Bd. 8, Nr. 1, DOI 10.1115/1.4050563, 2022.
- /BUC 99/ Buckel, G., Hesselschwerdt, E., Kiefhaber, E., Kleinheins, S., Maschek, W.: A new SIMMER-III Version with improved Neutronics Solution Algorithms, FZKA6290. *Forschungszentrum Karlsruhe (FZK)*, 112 S., June, 1999.
- /BUN 21/ Bundesministerium für Wirtschaft und Energie (BMWi): BMWi-Forschungsförderung zur nuklearen Sicherheit, Projektförderprogramm des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie zur Sicherheitsforschung für kerntechnische Anlagen, 2021-2025. 2021.
- /CHA 06/ Chadwick, M. B., Oblozinsky, P., et al.: ENDF/B-VII.0: Next Generation Evaluated Nuclear Data Library for Nuclear Science and Technology. *Lawrence Livermore National Laboratory, Nuclear Data Sheets, UCRL-JRNL-225066*, 125 S., 6. Oktober 2006.
- /CHR 10/ Christienne, M., Avramova, M., Périn, Y., Seubert, A.: Coupled TORT-TD/COBRA-TF Capability for High-Fidelity LWR Core Calculations. In: *PHYSOR 2010, Advances in Reactor Physics to Power the Nuclear Renaissance*. Pittsburgh, Pennsylvania, USA, 9. - 14. Mai 2010, 2010.
- /DEB 18/ De Bruyn, D., Abderrahim, H. A., Baeten, P., Angulo Carmen: The Belgian MYRRHA ADS Programme. Part 1: The new phased Implementation Plan. In: *American Nuclear Society (ANS) (Hrsg.): ICAPP 2018, International Congress on Advances in Nuclear Power Plants*. Charlotte, NC, 8. - 11. April 2018, S. 1066–1073, ISBN 978-0-89448-755-2, 2018.
- /DEN 12/ Denman, M., LaChance, J., Sofu, T., Flanagan, G., Wigeland, R., Bari, R.: *Sodium Fast Reactor Safety and Licensing Research Plan – Volume I*. Sandia National Laboratories (SNL), 133 S., 2012.
- /DOW 02/ Downar, T., Barber, D., Miller, M., Lee, C.-H., Kozlowski, T., Lee, D., Xu, Y., Gan, J., Joo, H. G., Cho, J. Y., Lee, K., Ulses, A.: PARCS: Purdue advanced reactor simulator. In: *Proceedings of the PHYSOR 2002*.

- /EMO 11/ Emonot, P., Souyri, A., Gandrille, J. L., Barré, F.: CATHARE-3: A new system code for thermal-hydraulics in the context of the NEPTUNE project. Nuclear Engineering and Design, DOI 10.1016/j.nucengdes.2011.04.049, 2011.
- /FER 20/ Ferraro, D., García, M., Valtavirta, V., Imke, U., Tuominen, R., Leppänen, J., Sánchez Espinoza, V. H.: Serpent/SUBCHANFLOW pin-by-pin coupled transient calculations for the SPERT-III hot full power tests. Annals of Nuclear Energy, Bd. 142, S. 107387, DOI 10.1016/j.anucene.2020.107387, 2020.
- /FIO 15/ Fiorina, C., Clifford, I., Aufiero, M., Mikityuk, K.: GeN-Foam: a novel OpenFOAM® based multi-physics solver for 2D/3D transient analysis of nuclear reactors. Nuclear Engineering and Design, Bd. 294, S. 24–37, DOI 10.1016/j.nucengdes.2015.05.035, 2015.
- /FIO 19/ Fiorina, C., Radman, S., Pautz, A.: Preliminary Application of the GeN-FOAM Multiphysics Tool to the Analysis of the FFTF Sodium Fast Reactor: Coupling Thermal-Hydraulics and Core Deformations. In: NURETH 18. 2019.
- /FOR 19/ Forgione, N., Martelli, D., Barone, G., Giannetti, F., Lorusso, P., Hollands, T., Papukchiev, A., Polidori, M., Cervone, A., Di Piazza, I.: Post-test simulations for the NACIE-UP benchmark by STH codes. Nuclear Engineering and Design, Bd. 353, S. 110279, DOI 10.1016/j.nucengdes.2019.110279, 2019.
- /FRI 11/ Fridman, E., Leppänen, J.: On the use of the Serpent Monte Carlo code for few-group cross section generation. Annals of Nuclear Energy, Bd. 38, Nr. 6, S. 1399–1405, DOI 10.1016/j.anucene.2011.01.032, 2011.
- /FRI 22/ Fridman, E., Álvarez Velarde, F., Romojaro Otero, P., Tsige-Tamirat, H., Jiménez Carrascosa, A., García Herranz, N., Bernard, F., Gregg, R., Davies, U., Krepel, J., Massara, S., Pומרouly, S., Girardi, E., Mikityuk, K.: Neutronic Analysis of the European Sodium Fast Reactor: Part I—Fresh Core Results. Journal of Nuclear Engineering and Radiation Science, Bd. 8, Nr. 1, DOI 10.1115/1.4048905, 2022.

- /GRS 84/ GRS: Risikoorientierte Analyse zum SNR-300, Kurzfassung. 93 S., 1984.
- /GUO 20/ Guo, L.: Validation Matrix for the Assessment of ATHLET code for sodium fast reactor. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), 2020.
- /HÉB 93/ Hébert, A., Mathonnière, G.: Development of a Third-Generation Super-homogénéisation Method for the Homogenization of a Pressurized Water Reactor Assembly. Nuclear Science and Engineering, S. 129–141, 1993.
- /HEN 19/ Henry, R., Seubert, A.: MC2019_proceedings.pdf. In: M&C 2019. International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering, Portland, Oregon, USA, 25. - 29. August 2019, 2019.
- /HER 14/ Herb, J.: Coupling of OpenFOAM with Thermo-Hydraulic Simulation Code ATHLET. 9th OpenFOAM® Workshop, Zagreb, CROATIA, 2014.
- /HER 19/ Herb, J.: Coupled OpenFOAM-ATHLET simulations of the primary circuit of a liquid sodium cooled reactor. In: Universität Duisburg Essen (UDE): 14th OpenFOAM® Workshop. Duisburg, Germany, 2019.
- /HER 21/ Herb, J.: Coupled ATHLET-OpenFOAM simulation of a Station Blackout for the ESFR-SMART reactor concept. Präsentation, German CFD Network of Competence, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Online, 16. März 2021.
- /HOL 21/ Hollands, T., Austregesilo, H., Buchholz, S., Dünne, N., Junk, M., Lee, J., Lerchl, G., Schöffel, P. J., Cron, D. von der, Wielenberg, A.: ATHLET 3.3 Validation. GRS-P-1/Vol. 3 Rev. 6, November 2021.
- /HOL 22/ Hollands, T., Austregesilo, H., Buchholz, S., Di Nora, V. A., Dünne, N., Eckert, D., Junk, M., Schöffel, P. J., Wack, J., Wielenberg, A.: ATHLET 3.3.1 Validation. GRS-P1/Vol.3 Rev. 7, November 2022.

- /HOO 20/ Hoogenboom, J. E.: McSAFE -High-Performance Monte Carlo Methods for SAFETy Demonstration-From Proof of Concept to realistic Safety Analysis and Industry Applications, Research and Innovation actions Topic: NFRP-2016-2017-01: Continually improving safety and reliability of Generation II and III reactors, Deliverable D6.3. 29 S., 2020.
- /HRI 15/ Hristov, H. V. Et al.: Numerical Analyses on the Safety Aspects of KASOLA test facility. Proc. of the NURETH-16 conference: Chicago, USA, 2015.
- /HUO 17/ HUO, X., YU, H., HU, Y., YANG, X., YANG, Y., Chen, Y., ZHOU, K., FAN, Z., CHEN, X., XU, L., ZHANG, J.: IAEA CRP Proposal for Benchmark Analysis on Physical Start-Up Experiments of China Experimental Fast Reactor. In: International Conference on Fast Reactors and Related Fuel Cycles: Next Generation Nuclear Systems for Sustainable Development (FR17). Yekaterinburg, Russian Federation, 26. - 29. Juni 2017, 2017.
- /IAE 18/ IAEA: IAEA CRP: Neutronics Benchmark of CEFR Start-Up Tests (I31032)., Available online: https://iaea.org/projects/crp/i3_1032. 2018.
- /IMK 12/ Imke, U., Sanchez, V. H.: Validation of the Subchannel Code SUBCHANFLOW Using the NUPEC PWR Tests (PSBT). Science and Technology of Nuclear Installations, Bd. 2012, S. 1–12, DOI 10.1155/2012/465059, 2012.
- /LEP 15/ Leppänen, J., Pusa, M., Viitanen, T., Valtavirta, V., Kaltiaisenaho, T.: The Serpent Monte Carlo Code, Status, Development and Applications in 2013. Annals of Nuclear Energy, Bd. 82, S. 142–150, DOI 10.1016/j.anucene.2014.08.024, 2015.
- /LIA 18/ Lian, Q., Tian, W., Qiu, S., Su, G.: Improvement of RELAP5 code for density wave instability analysis in parallel narrow rectangular channels. Annals of Nuclear Energy, Bd. 122, S. 241–255, DOI 10.1016/j.anucene.2018.08.049, 2018.

- /MAR 21/ Martineau, R. C.: The MOOSE Multiphysics Computational Framework for Nuclear Power Applications: A Special Issue of Nuclear Technology. Nuclear Technology, Bd. 207, Nr. 7, S. 3–8, DOI 10.1080/00295450.2021.1915487, 2021.
- /MAT 19/ Matthews, C., Wilkerson, R., Johns, R., Trelle, H., Martineau, R. C.: Evaluation of M&S tools for micro-reactor concepts, ARPA-E MEITNER eVinci Resource Team. LA-UR-19-22263, 34 S., März 2019.
- /MIK 17/ Mikityuk, K.: ESFR-SMART: new Horizon-2020 project on SFR safety, International conference on fast reactors (FR17). 2017.
- /MIK 21/ Mikityuk, K., Bodi, J., Bubelis, E., Cervone, A., Cheng, X.-N., Di Nora, V. A.: Assessment of the transition from forced to natural circulation during selected accidents, ESFR-SMART Deliverable D3.1. 2021.
- /MUZ 23/ Muzio, S., Seubert, A.: Validation of the FENNECS SP3 solver with control Rod Insertion Simulations of the ESFR using Serpent cross sections. In: M&C 2023 - The International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering. Niagara Falls, Ontario, Canada, 2023.
- /NIK 19/ Nikitin, E.: Extension of the nodal code DYN3D to SFR applications. Dissertation, DOI 10.5075/epfl-thesis-7264, École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL), 2019.
- /OPE 19/ OpenFOAM Foundation: Release Notes of OpenFOAM 7. Erreichbar unter <https://openfoam.org/release/7/>, Stand von 2019.
- /PEL 13/ Pelowitz, D. B.: MCNP6 User's Manual, Version 1.0, Manual Rev. 0. Los Alamos National Laboratory (LANL), LA-CP-13-00634, Rev. 0, 765 S., Mai 2013.
- /PÉR 13/ Périn, Y., Velkov, K., Ward, A., Downar, T.: Coupling of PARCS with the TH system code ATHLET. Präsentation, Spring 2013 CAMP Meeting: ABITALIA Hotel & Resort, Pisa, Italy, 8. Mai 2013.

- /PÉR 22/ Périn, Y., Seubert, A.: High-Fidelity Multi-physics Critical Heat Flux Assessment and Stability Simulations of a SVEA-96 Optima2 BWR assembly with TORT-TD/CTF. In: American Nuclear Society (ANS), SCK-CEN (Hrsg.): 19th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics. NURETH 19, virtual, 6. - 11. März 2022, 2022.
- /RIN 18/ Rineiski A., Meriot C., Coquelet C., Krepel J., Fridman E., Mikityuk K.: ESFR-SMART: Specification of the new core safety measures, WP01. 2018.
- /ROH 16/ Rohde, U., Kliem, S., Grundmann, U., Baier, S., Bilodid, Y., Duerigen, S., Fridman, E., Gommlich, A., Grahn, A., Holt, L., Kozmenkov, Y., Mittag, S.: The reactor dynamics code DYN3D – models, validation and applications. Progress in Nuclear Energy, Bd. 89, S. 170–190, DOI 10.1016/j.pnucene.2016.02.013, 2016.
- /RUG 17/ Ruggieri, J. M., Ren, L., Glatz, J.-P., Ashurko, I., Hayafune, H., Kim, Y., Hill, R.: Sodium-Cooled Fast Reactor (SFR) System Safety Assessment. 18 S., 2017.
- /SAL 15/ Salko, R. K., Avramova, M.: COBRA-TF Subchannel Thermal-Hydraulics Code (CTF) Theory Manual), Revision 0. Hrsg.: Pennsylvania State University (PSU), CASL-U-2015_0054-000, 10. März 2015.
- /SAL 19/ Salko Jr, R., Avramova, M., Wysocki, A., Toptan, A., Hu, J., Porter, N., Blyth, T. S., Dances, C. A., Gomez, A., Jernigan, C., Kelly, J.: CTF 4.0 Theory Manual. Oak Ridge National Lab. (ORNL), Oak Ridge, TN (United States), DOI 10.2172/1550750: 2019-04-01, 2019.
- /SCH 11/ Schmidt, R. C., Sofu, T., Wei, T., Thomas, J., Wigeland, R., Carbajo, J., Ludwig, H., Corradini, M., Jeong, H.-Y., Serre, F., Tobita, Y., Ohshima, H.: Sodium Fast Reactor Gap Analysis of Computer Codes and Models for Accident Analysis and Reactor Safety. Sandia National Laboratories (SNL), SAND2011-4145, 54 S., 2011.
- /SCK 20/ SCK-CEN: MYRRHA Webseite. Erreichbar unter <https://myrrha.be/>, abgerufen am 22. Januar 2020.

- /SEU 16a/ Seubert, A., Bousquet, J., Herb, J., Hristov, H., Lerchl, G., Pasichnyk, I., von der Cron, D.: Rechenmethodenentwicklung zur Sicherheitsbewertung schneller Systeme und V/HTR, GRS-417. 299 S., 2016.
- /SEU 16b/ Seubert, A., Velkov, K.: Fast Reactor Diagrid and Axial Expansion Models for the Diffusion Equation, PHYSOR 2016, Sun Valley, ID, May 1–5, 2016. 2016.
- /SEU 19a/ Seubert, A., Behler, M., Bousquet, J., Henry, R., Herb, J., Lerchl, G., Sarkadi, P.: Weiterentwicklung der Rechenmethoden zur Sicherheitsbewertung innovativer Reaktorkonzepte mit Perspektive P&T. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), GRS-, Bd. 553, ISBN 978-3-947685-38-7, 2019.
- /SEU 19b/ Seubert, A., Behler, M., Bousquet, J., Henry, R., Herb, J., Lerchl, G., Sarkadi, P.: Weiterentwicklung der Rechenmethoden zur Sicherheitsbewertung innovativer Reaktorkonzepte mit Perspektive P&T. Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit, GRS, Bd. 553, 223 S., ISBN 9783947685387, DOI RS1547, Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH: Köln, Garching b. München, Berlin, Braunschweig, Oktober 2019.
- /SEU 20a/ Seubert, A., Périn, Y., Henry, R.: High-Fidelity Multi-Physics Pin-by-Pin Model of a SVEA-96 OPTIMA2 Assembly with TORT-TD/CTF. In: PHYSOR 2020. Nr. 247, S. 6035, DOI 10.1051/epjconf/202124706035, 2020.
- /SEU 20b/ Seubert, A.: Parameterized Input Decks in Serpent using Variables and Arithmetic Expressions. Präsentation, TUM, Zentrum für Energie und Information, 10th Serpent User Group Meeting: Garching b. München, 27. Oktober 2020.
- /SEU 21/ Seubert, A., Bousquet, J., Henry, R.: Recent Advances of the FENNECS NEutroniCS Code for Safety Assessment of (v)SMR, Generation IV and other Innovative Concepts. In: ANS M&C 2021, The International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering. 3. - 7. Oktober 2021, 2021.

- /SEU 22a/ Seubert, A., Bousquet, J., Henry, R., Lo Muzio, S.: Entwicklung eines modernen Neutronenkinetikcodes für unregelmäßige Geometrien für (v)SMRs und fortschrittliche sowie innovative Reaktorsysteme. GRS-683, 115 S., 2022.
- /SEU 22b/ Seubert, A., Bousquet, J., Lo Muzio, S., Lerchl, G., Guo, L.: Recent developments and applications of PARCS, FENNECS and ATHLET to SFR safety assessment, Spring 2022 CAMP Meeting. Präsentation, 18. Mai 2022.
- /SEU 22c/ Seubert, A.: Simulation of CEFR Neutronic Start-up Tests with FENNECS. In: Proceedings of PHYSOR 2022. International Conference on Physics of Reactors 2022 (PHYSOR 2022), Pittsburgh, PA (USA), 15. - 20. Mai 2022, Mai 2022.
- /SEU 22d/ Seubert, A.: INNOSYS-3: Weiterentwicklung moderner Multiphysik-Rechenmethoden zur Sicherheitsbewertung innovativer Reaktorkonzepte, Skizze für das Vorhaben. 26 S., Oktober 2022.
- /TOD 90/ Todreas, N. E., Kazimi, M. S.: Nuclear systems II Elements of Thermal Hydraulic Design. 2 v, Hemisphere Pub. Corp: New York, 1990.
- /WAH 17/ Wahide, C.: Preparing ESNII for HORIZON 2020 (ESNII+), Project proposal. 2017.
- /WAN 20/ Wang, C., Sun, H., Tang, S., Tian, W., Qiu, S., Su, G.: Thermal-hydraulic analysis of a new conceptual heat pipe cooled small nuclear reactor system. Nuclear Engineering and Technology, Bd. 52, Nr. 1, S. 19–26, DOI 10.1016/j.net.2019.06.021, 2020.
- /WIE 19a/ Wielenberg, A., Lovasz, L., Pandazis, P., Papukchiev, A., Tiborcz, L., Schöffel, P. J., Spengler, C., Sonnenkalb, M., Schaffrath, A.: Recent improvements in the system code package AC2 2019 for the safety analysis of nuclear reactors. Nuclear Engineering and Design, Nr. 354, DOI 10.1016/j.nucengdes.2019.110211, 2019.

/WIE 19b/ Wielenberg, A., Weyermann, F., Sonnenkalb, M., Schaffrath, A. (Hrsg.):
The new release AC² 2019 -Improvements and Challenges. Gesellschaft
für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gGmbH (GRS), 13th FONESYS
Workshop, Lappeenranta, 11. - 12. Juni 2019, DOI
10.13140/RG.2.2.23524.83847, Unpublished, 2019.

**Gesellschaft für Anlagen-
und Reaktorsicherheit
(GRS) gGmbH**

Schwertnergasse 1
50667 Köln

Telefon +49 221 2068-0

Telefax +49 221 2068-888

Boltzmannstraße 14

85748 Garching b. München

Telefon +49 89 32004-0

Telefax +49 89 32004-300

Kurfürstendamm 200

10719 Berlin

Telefon +49 30 88589-0

Telefax +49 30 88589-111

Theodor-Heuss-Straße 4

38122 Braunschweig

Telefon +49 531 8012-0

Telefax +49 531 8012-200

www.grs.de